

2014

Etude des propriétés, structurales, thermiques de SiO₂ dans la Diatomite

Khaled BOUBENDIRA, S.BENAYACHE, H.Meradi, F.AOUADJA, K.LABIOD

Abstract : dans ce travail nous déterminons les propriétés structurales et thermiques de SiO₂ dans la diatomite en utilisant la méthode des ondes planes augmentée et linéarisée (LAPW) dans la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Le potentiel d'échange et de corrélation est calculé par l'approximation de gradient généralisée (GGA). Concernant les propriétés thermiques, nous avons calculé l'enthalpie libre G, l'entropie S, la chaleur spécifique C, la conductivité thermique κect de SiO₂. Les températures utilisées dans ce travail sont 1400, 1450 et 1500 respectivement ; Les résultats obtenus sont en bon accord avec quelques données expérimentales.

Keywords : DFT, la Diatomite, les propriétés thermiques des alliages