

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

^{a,b}K.Boubendira

^awelding and NDT research centre (CSC). BP 64
CHERAGA – ALGERIA

^bDépartement de physique, laboratoire de physique des rayonnements, université BADJI Mokhtar Annaba, BP 12
Annaba, 23000 Algérie.

k.boubendira@csc.dz, khaled.boub@yahoo.fr

^aS.Benayache, ^aH.Meradi, ^aF.Aouadja, ^aK.Labiod

^awelding and NDT research centre (CSC). BP 64
CHERAGA - ALGERIA

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'échangeur 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 λect 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.

Index Terms— DFT, la Diatomite, les propriétés thermiques des alliages

I. INTRODUCTION

La diatomite encore appelée kieselguhr est une roche formée par l'accumulation dans d'anciens lacs, de carapaces de diatomées qui sont des algues fossiles à squelette siliceux amorphes. L'importance industrielle et scientifique de la diatomite, matériau naturel assez abondant en Algérie

La diatomite est un produit naturel bien connu, il porte plusieurs appellations à savoir: kieselguhr, diatomée, farine fossile, terre d'infusoire, tripoli et farine de diatomée.

C'est une roche de couleur claire constituée principalement de silice et d'impuretés (composés organiques, sable, argile, carbonate de calcium et magnésium, sels,...). Ces algues unicellulaires sont entourées d'une carapace en silice [1].

II. CALCULE DES PROPRIETES THERMIQUE DE SiO₂ DANS LA DIATOMITE

D'après les données disponibles sur ce produit « diatomite » ; et selon la caractérisation qui a été faite, et spécialement l'analyse chimique de l'échantillon de diatomite récupéré de l'unité DIATAL (Filiale du groupe ENOF, Algérie) et qui a été analysé par Spectrométrie à Fluorescence X [1,2], notre produit est constitué des éléments suivants.

TABLE 1. ANALYSE CHIMIQUE DE LA DIATOMITE

MgO	Fe ₂ O ₃	TiO ₂	CaO	K ₂ O	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Na ₂ O
2.15	1.29	0.027	13.4	0.79	60.4	3.156	1.2

Le calcul des propriétés thermiques de chaque élément a été fait à l'aide du code WIEN2K, pour ce faire nous avons utilisé trois valeurs de température 1400, 1450 et 1500°C respectivement, ainsi qu'une valeur de pression 1 GPa

A. DEFINITION

Le WIEN2k est un programme informatique permettant d'effectuer des calculs quantiques sur les solides périodiques. WIEN2k utilise la méthode full-potential (linearized) augmented plane-wave and local-orbitals [FP-(L)APW+lo] pour résoudre les équations de Kohn-Sham de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

À l'origine, WIEN2k a été développé par Peter Blaha et Karlheinz Schwarz de l'Institut de Chimie des Matériaux de l'Université Technique de Vienne (Autriche). Le code a été distribué pour la première fois en 1990 [3]. Les versions suivantes ont été WIEN93, WIEN97, et WIEN2k [4].

III. RESULTATS

Les résultats obtenus (de SiO₂ dans la diatomite) sont présentés dans les tableaux suivants :

TABLE 2. TEMPERATURE 1400.00°C, PRESSION P = 1 GPA

NUMERICAL EQUILIBRIUM, VIBRATIONAL, PROPERTIES AND THERMAL EOS DERIVATIVES				
G (kJ/mo)	V (bohr3)	U (kJ/mol)	A (kJ/mol)	S (J/mol.K)
-65.49	112.81	55.16	-99.19	107.06

NUMERICAL EQUILIBRIUM, VIBRATIONAL, PROPERTIES AND THERMAL EOS DERIVATIVES			
Theta (K)	Alpha (10 ⁵ /K)	C (J/Kg.°C)	λ (W/m.K)
401.86	9.008	3248.621	0.077

TABLE 3. TEMPERATURE 1450.00°C, PRESSION P = 1 GPA

NUMERICAL EQUILIBRIUM, VIBRATIONAL, PROPERTIES AND THERMAL EOS DERIVATIVES				
G (kJ/mo)	V (bohr3)	U (kJ/mol)	A (kJ/mol)	S (J/mol.K)
-71.82	114.56	58.63	-105.63	112.61

NUMERICAL EQUILIBRIUM, VIBRATIONAL, PROPERTIES AND THERMAL EOS DERIVATIVES			
Theta (K)	Alpha (10 ⁵ /K)	C (J/Kg.°C)	λ (W/m.K)
398.54	9.876	3251.699	0.080

TABLE 4. TEMPERATURE 1500.00°C, PRESSION P = 1 GPA

NUMERICAL EQUILIBRIUM, VIBRATIONAL, PROPERTIES AND THERMAL EOS DERIVATIVES				
G (kJ/mo)	V (bohr3)	U (kJ/mol)	A (kJ/mol)	S (J/mol.K)
-80.49	118.41	63.17	-112.95	119.097

NUMERICAL EQUILIBRIUM, VIBRATIONAL, PROPERTIES AND THERMAL EOS DERIVATIVES			
Theta (K)	Alpha (10 ⁵ /K)	C (J/Kg.°C)	λ (W/m.K)
394.05	10.562	3252.71	0.085

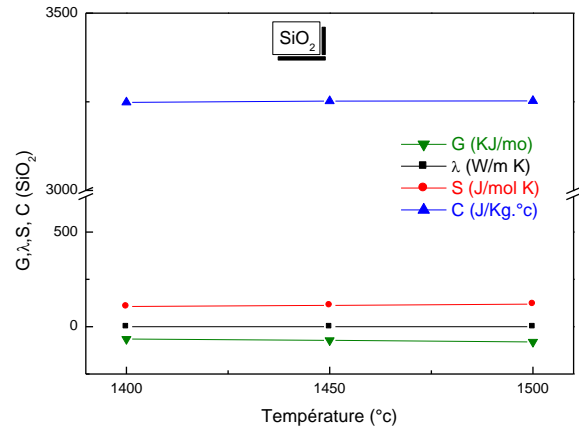


Fig. 1. Variation des valeurs G, λ, S, C de SiO₂ dans la Diatomite en fonction.

IV. CONCLUSION

Le présent travail entre dans le cadre des projets de recherche de l'URTI/CSC « valorisation des céramiques ».

Des efforts ont été faits afin de calculer les propriétés thermiques du produit SiO₂ dans la diatomite; tell-que G, S, C, λect.

Les résultats de simulation de SiO₂ dans la diatomite sont indiqués dans les tableaux ci-dessus, avec les différents graphes en fonction de la température.

Selon quelques données expérimentales disponibles en particulier celles liées à la conductivité thermique « λ » ainsi que la chaleur Spécifique « C » (référence [1] et [2]) ; on peut constater que nos résultats de simulation sont très proches à ceux de l'expérience.

Enfin, on peut conclure que les résultats obtenus peuvent être considérés comme encourageants, néanmoins il reste leur validation par une comparaison avec l'expérience afin qu'ils auront plus de crédibilité.

REFERENCES

[1] Hazem MERADI, L. ATOUI, A. Balaska, S. BOUHOUCHE, « Contribution à la caractérisation d'une diatomite naturelle ». 9^{ième} Congrès de Mécanique, FS Semlalia, Marrakech du 21 au 24 Avril 2009..

[2] Redouan NAKKAD, Hassan EZBAKHE, Abdelkhalak BENMOUSSA, Taïb AJZOUl et Abderrahman EL BAKKOURI, « contribution à l'étude morphologique et thermique des diatomites utilisées dans l'isolation », 12^{èmes} Journées Internationales de Thermique, Tanger, Maroc du 15 au 17 Novembre 2005.



- [3] K. Schawrz and P. Blaha, comput. Mater. Sci. 28, 259 (2003).
- [4] Hervé Oudin. « Méthode des éléments finis ». Centrale Nantes, cel-00341772, version 1-26 Novembre 2008.