

ETUDE DES PROPRIÉTÉS, STRUCTURALES, THERMIQUES DE CAO ET SiO₂
DANS LA DIATOMITE

**KHALED.BOUBENDIRA^{1,2}, KOTBIA.LABIOD¹, SIHEM.BENAYACHE¹,
HAZEM.MERADI¹, FAYCEL.AOUADJA¹**

¹ RESEARCH CENTER IN INDUSTRIAL TECHNOLOGIES CRTI P.O.BOX 64
CHERAGA 16014 ALGIERS, ALGERIA

² DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE, LABORATOIRE DE PHYSIQUE DES
RAYONNEMENTS, UNIVERSITÉ BADJI MOKHTAR ANNABA, BP 12
ANNABA, 23000 ALGÉRIE

ABSTRACT. La diatomite est une roche de couleur claire formée entièrement ou presque de "squelettes" de diatomées. Ces algues unicellulaires sont entourées d'une « carapace » en silice, le frustule, dont l'accumulation sur le fond peut conduire à la formation d'une roche.

Dans ce travail nous déterminons les propriétés structurales et thermiques de CaO et 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 λect de CaO et SiO₂ dans la Diatomite. Les températures utilisées dans ce travail sont 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

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. On peut noter 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 constitué 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].

CALCULE DES PROPRIETES THERMIQUE DE CaO et SiO₂

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, résumés dans le tableau 1..

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 thermique de chaque élément a été fait à l'aide de code WIEN2K. Pour ce faire nous avons utilisé deux valeurs de température 1450 et 1500°C respectivement, pour une valeur de pression 1 Gpa.

Définition

Le code 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).

RESULTATS

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

Pour CaO

Temperature: T = 1450.00 °C

Pression : P = 1 GPa

numerical equilibrium, vibrational, properties and thermal eos derivatives								
G (kJ/mo)	V (bohr ³)	U (kJ/mol)	A (kJ/mol)	S (J/mol*K)	Theta (K)	Alpha (10 ⁵ /K)	C (J/Kg.°C)	λ (W/m.K)
-10.12	241.00	41.76	-30.88	88.59	532.28	3.666	3239.96	0.063

Temperature: T = 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)	Theta (K)	Alpha (10 ^{^5} /K)	C (J/Kg.°C)	λ (W/m.K)
-12.81	241.27	43.23	-33.64	90.42	531.44	3.633	3241.08	0.066

Pour SiO₂

Temperature: T = 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)	Theta (K)	Alpha (10 ^{^5} /K)	C (J/Kg.°C)	λ (W/m.K)
-71.82	114.56	58.63	-105.63	112.61	398.54	9.876	3251.699	0.080

Temperature: T = 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)	Theta (K)	Alpha (10 ^{^5} /K)	C (J/Kg.°C)	λ (W/m.K)
-80.49	118.41	63.17	-112.95	119.097	394.05	10.562	3252.71	0.085

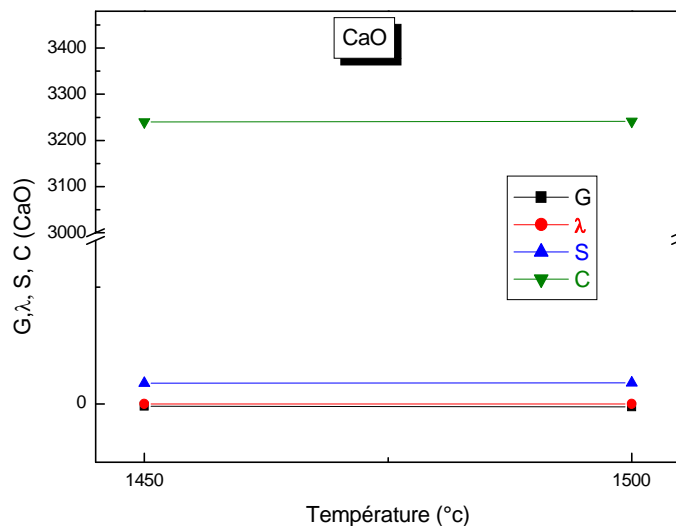


Figure 1. Variation des valeurs G, λ , S, C de CaO dans la Diatomite en fonction des deux températures, 1450 et 1500°C.

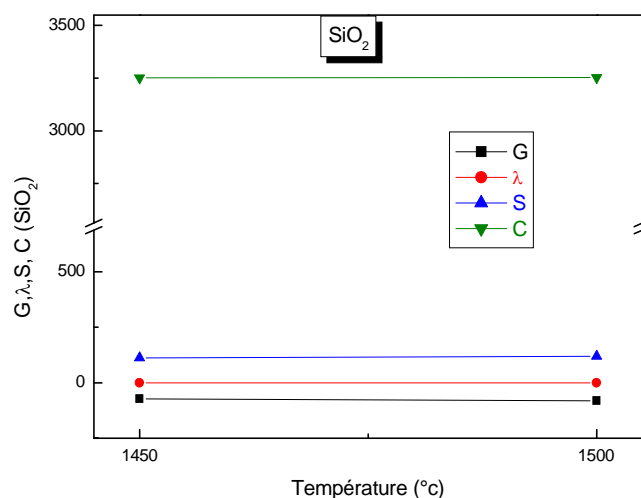


Figure 1. Variation des valeurs G, λ , S, C de SiO₂ dans la Diatomite en fonction des deux températures, 1450 et 1500°C.

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 CaO et SiO₂ dans la diatomite; telles que G, S, C, λ etc.

Les résultats de simulation de CaO et 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.

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}