



جامعة غليزان
RELIZANE UNIVERSITY



جامعة غليزان
RELIZANE UNIVERSITY

University of RELIZANE.
FACULTY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY.

**Revue
Des Matériaux
&
Energies Renouvelable
Vol 6, N°1, 2022.**

Published on: March, 2022.

ISSN: 2507-7554

E- ISSN: 2661-7595



Recherche Review of Scences and Technologies

Editorial

Our journal is a leading international journal on topics concerning materials and renewable energy and their developments in the industrial world. Published since 2016, the journal focused on two axes of materials and their evolution according to their potential applications and renewable energy.

Revue des Matériaux et énergies renouvelables is a top-rated international journal on topics concerning materials and renewable energy and their developments in the industrial world. Published since 2016, the journal has always focused on the materials and renewable energy and their evolution regarding to their potential applications.

In this sense, this issue presents original work in this field either from chemistry for the definition or design of new materials to structural mechanics to assess the lifespan of structures made from these materials or to give ideas for the development of renewable energy.

The editorial board

Summary

N°	Title	Authors	Page from - to
01	Etude de l'inhibition de la corrosion de l'acier au carbone en milieu sulfurique par polyéthylène glycol	Tarik Attar, Amal Benkhaled, Abbes Benchadli et Esmâ Choukchou-braham.	1 - 7
02	Etude numérique d'un échangeur de chaleur tubulaire muni de promoteurs de turbulence	BENAMARA Nabil, LAHMER Djelloul, MERZOUG Mohamed, LAHCENE Abdelkader, BOULENOUAR Abdelkader et AMINALLAH Miloud.	8 -21
03	Validation of experimental tests of NANOINDENTATION with DIGITAL simulation	Djidel Salah Eddine, Mahmoudi Nouredine et Abel Hurtado-Macías.	22 - 28
04	Optimisation d'un chauffe- eau solaire	BOUALAMALLAHDjamal, Merdji Ali, GHAZI Abdelkader et Miloudi Abdelkader.	29 - 39
05	Incorporation des métaux lourds dans les mortiers à long terme	Bennacer Lyacine, Balegh Benamar et Sellaf Hamid.	40 - 46
06	Contribution à l'étude de ternaire HgCdTe destiné aux applications optoélectroniques	BELARBIA Fatiha, CHERCHEB Youcef, BELOUFA Nabil, Bekheira Samir et BENADJMIA Mhamed benali.	47 - 55



Revue des Matériaux & Energies Renouvelable

Journal home : <https://www.univ-relizane.dz>

ISSN : 2507-7554

E- ISSN : 2661-7595



Etude de l'inhibition de la corrosion de l'acier au carbone en milieu sulfurique par polyéthylène glycol

Open
Access

Tarik Attar^{1,2*}, Amal Benkhaled¹, Abbes Benchadli¹, Esma Choukchou-braham¹

¹ Laboratoire de ToxicMed, Université d'Abou Bekr Belkaid, B.P.119, Tlemcen, 13000, Algérie

² Ecole Supérieure en Sciences Appliquées de Tlemcen, P.O. Boîte 165 RP, Tlemcen, 13000, Algérie

RESUME

L'effet inhibiteur de polyéthylène glycol (PEG) sur la corrosion de l'acier au carbone en milieu H_2SO_4 0,5M a été réalisé par la méthode gravimétrique. L'influence de la concentration, la température, le temps d'immersion et le milieu corrosif sur l'efficacité d'inhibition de l'inhibiteur a été étudiée. L'efficacité inhibitrice du PEG atteint une valeur maximale de 71,38 % à 1×10^{-3} mol/L. L'adsorption de PEG à la surface de l'acier au carbone suit l'isotherme du modèle de Langmuir, et la valeur obtenue de l'énergie libre de Gibbs confirme la nature mixte de l'adsorption (chimique et physique). L'adsorption de cette molécule conduit à la formation d'une couche protectrice sur la surface de l'acier, ces résultats ont été confirmés par la microscopie électronique à balayage (MEB).

Article history:

Received 11 November 2021

Received in revised form 12 November 2021

Accepted 18 October 2021

Keys word: Corrosion ; Inhibition ; Acier au carbone ; Polyéthylène glycol ; Isotherme d'adsorption

Copyright © 2022 - All rights reserved

1. Introduction

L'acier est constitué d'au moins deux éléments, majoritairement le fer puis le carbone. C'est essentiellement la teneur en carbone qui confère à l'alliage les propriétés du métal qu'on appelle « acier ». En raison de la viabilité de l'acier, son coût élevé de production et d'installations, la plupart des industries ont adopté plusieurs mesures visant à prolonger la durée de vie de ce matériau précieux [1].

La corrosion des alliages et métaux est un phénomène universellement connu qui entraîne chaque année des pertes matérielles considérables pour l'industrie et la collectivité. La corrosion peut provoquer des dommages irréversibles à l'environnement et sur l'industrie pétrolière (les coûts de remplacement et l'arrêt d'installation pendant la réparation des structures et machines corrodées) et même des pertes en vie humaine puisqu'elle est susceptible d'entraîner des problèmes de santé (pollution, contamination,...). L'ampleur de la corrosion du métal dépend de la concentration et la nature de l'environnement agressif, la charge du métal et de sa nature, température du milieu, temps de contact et la présence ou l'absence d'inhibiteurs [2, 3]. L'utilisation des acides trouve une large application dans le domaine industriel, les principaux domaines d'applications étant le décapage ou le nettoyage et l'élimination de dépôts localisés (rouille, dépôts bactériens, tartre non uniformément réparti, etc...). Or, les solutions aqueuses acides constituent généralement des milieux corrosifs pour les matériaux métalliques [4]. Pour pallier ce phénomène indésirable, les inhibiteurs organiques dont le mode d'action résulte généralement de leur adsorption sur la surface du métal sont les plus fréquemment employés dont son action inhibitrice est liée à la formation d'une barrière plus ou moins continue, mais d'épaisseur finie, qui empêche l'accès de la solution au métal [5]. Les inhibiteurs présentent l'originalité d'être le seul moyen d'intervention à partir de l'environnement agressif, ce qui en fait une méthode de contrôle de la corrosion facile à mettre en œuvre et peu onéreuse, pour peu que le ou les produits utilisés soient d'un coût modéré [6]. De plus, il est important de connaître le mode d'action des molécules inhibitrices, leurs cout, leurs limites d'application, leur toxicité, afin de pouvoir les utiliser avec une marge suffisante de

sécurité [7]. Un inhibiteur de corrosion est un composé chimique qui, ajouté à faible concentration au milieu corrosif, ralentit ou stoppe le processus de corrosion d'un métal placé au contact de ce milieu [8, 9].

Dans le présent travail, nous nous sommes intéressés à l'étude d'inhibition du polyéthylène glycol sur la corrosion de l'acier au carbone dans H_2SO_4 0,5 mol/L. Les effets de la concentration de l'inhibiteur, la nature du milieu agressif, de la température et du temps d'immersion sur la performance de l'inhibiteur ont été étudiés. Les paramètres thermodynamiques d'activation et d'adsorption ont été aussi calculés et discutés.

2. Partie expérimentale

2.1. Matériaux utilisés

Le matériau utilisé est un acier au carbone de composition: 0,37% C; 0,1261% Si; 0,023% Al; 0,016% S; 0,68% Mn; 0,16% Cu; 0,077% Cr; 0,059% Ni; 0,009% Co; 0,011% Ti et Fe le reste de la balance. La solution corrosive est une solution de l'acide sulfurique (H_2SO_4) 1 N, obtenue par dilution de l'acide concentré à 98 %, de marque Sigma-Aldrich, avec de l'eau bi-distillée. Le polyéthylène glycol 20000 testé comme inhibiteur est de marque Sigma-Aldrich.

2.2. Conditions expérimentales

Les essais gravimétriques ont été réalisés dans un bécher de 50 mL. Avant les mesures, les échantillons subissent un polissage au papier abrasif de granulométrie décroissante allant jusqu'au grade 1200 (une succession de papiers abrasif au carbure de silicium de granulométries 300, 400, 600, 800, 1000 et 1200 permettra d'obtenir de bons résultats). Ces échantillons sont ensuite rincés à l'eau bi-distillée, dégraissés par l'acétone et séchés à l'air ambiant avant utilisation. Chaque essai a été répété au moins trois fois afin de vérifier la reproductibilité des résultats.

2.3. Etude gravimétrique

Les mesures de perte en masse sont une première approche de l'étude de l'inhibition de la corrosion d'un métal dans une solution électrolytique. C'est une méthode simple, elle donne des informations très utiles à des prix relativement bas, elle ne nécessite pas un appareillage important et sans perturbation des systèmes. Les échantillons sont immergés dans H_2SO_4 0,5 mol/L, sans et avec addition de PEG à différentes concentrations. La valeur de l'efficacité inhibitrice (EI) trouvée est la moyenne de trois essais effectués dans les mêmes conditions pour chaque concentration. Elle est donnée par la relation (1) [9]:

$$EI (\%) = 100 \times (W_{Cor} - W_{Inh}) / W_{Cor} \quad (1)$$

Où W_{Cor} et W_{inh} représentent respectivement les valeurs de la vitesse de corrosion de l'acier après immersion en absence et en présence de l'inhibiteur.

Le taux de recouvrement (θ) de la surface par les molécules de l'inhibiteur, peut être déterminé par la relation (2) :

$$\theta = EI (\%) / 100 \quad (2)$$

3. Résultat et discussions

3.1. Effet de la nature de l'acide sur la corrosion de l'acier au carbone

Les solutions acides sont largement utilisées en raison de leur nature fortement corrosive pour la plupart des métaux et des alliages, même à de faibles concentrations. Dans le but d'étudier l'effet de la nature de l'acide sur l'efficacité de l'inhibition de la corrosion, nous avons testé différents acides comme milieu corrosif: l'acide nitrique, l'acide sulfurique, l'acide chlorhydrique et l'acide perchlorique.

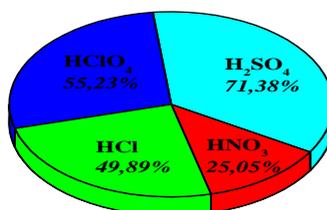


Figure 1. Variation de l'efficacité d'inhibition en fonction des différents milieux acides (1 N) pour l'acier au carbone (PEG 10^{-3} M pendant 2 h et à 293 K).

Les résultats expérimentaux de l'efficacité d'inhibition de la corrosion par rapport des milieux corrosifs ont été représentés graphiquement sur la figure 1. D'après ces résultats, la valeur obtenue montre clairement que l'efficacité inhibitrice de

l'acier au carbone en milieu d'acide sulfurique est plus importante par rapport aux autres acides. Les molécules inhibitrices interagissent fortement avec la surface du métal en présence d'ions sulfates en raison de sa faible capacité de coordination. Cependant, les ions chlorure, perchlorate et nitrate, se coordonnent avec la surface du métal, ce qui le rend plus faible pour adsorber les molécules inhibitrices. L'acide sulfurique qui a donné la meilleure efficacité sera utilisé comme un milieu agressif pour cette étude.

3.2. Effet de la température et la concentration du PEG

La température constitue en effet l'un des facteurs qui peuvent modifier simultanément le comportement des inhibiteurs et des substrats dans un milieu agressif donné [5]. L'augmentation de la température favoriserait ainsi la désorption de l'inhibiteur ainsi qu'une rapide dissolution des composés organiques ou des complexes formés, provoquant ainsi un affaiblissement de la résistance à la corrosion de l'acier [10]. Compte tenu de l'importance de ce facteur, nous avons effectué des tests de perte de masse de l'acier dans H_2SO_4 0,5M sans et avec addition de différente concentration de PEG allant de 1×10^{-5} à 5×10^{-3} mol/L, à différentes températures comprises entre 293 et 333 K. Les valeurs de l'efficacité inhibitrice du PEG, sont données dans le tableau 1.

Tableau 1. Efficacité inhibitrice de la corrosion de l'acier en milieu H_2SO_4 0,5 M avec addition de PEG à différentes températures.

C (mol/L)	Température (K)				
	293	303	313	323	333
1×10^{-5}	45,64	36,91	29,45	21,07	15,97
5×10^{-5}	51,87	47,77	36,12	29,57	24,07
5×10^{-4}	64,17	53,26	44,31	35,78	33,41
1×10^{-3}	71,38	65,44	57,79	48,61	40,11
5×10^{-3}	71,97	66,03	58,05	48,99	40,53

L'analyse des résultats trouvés, nous montre clairement que le polyéthylène glycol possède d'excellente propriété inhibitrice de la corrosion de l'acier en milieu H_2SO_4 . Nous remarquons aussi, que l'efficacité de la protection croît avec la concentration de l'inhibiteur et elle diminue avec l'augmentation de la température du milieu, et atteint une valeur maximale de 71,97 % à une concentration de 5×10^{-3} mol/L et à 293 K.

3.3. Effet de temps d'immersion

Le temps d'immersion est un autre paramètre important qui permet de vérifier l'effet inhibiteur sur les surfaces métalliques. Le suivi de l'évolution de l'efficacité inhibitrice de l'acier à différents temps d'immersion dans le milieu agressif sans et avec addition de l'inhibiteur permet d'avoir des notions importantes sur la stabilité du film ainsi formé lors du phénomène d'inhibition [11]. Le tableau 2 regroupe les valeurs de la vitesse de corrosion (W) et du pourcentage de l'efficacité inhibitrice calculées par gravimétrie pour différents temps d'immersion et à une concentration de 1×10^{-3} mol/L en PEG.

Tableau 2. Effet du temps d'immersion sur la vitesse de corrosion de l'acier au carbone dans H_2SO_4 0,5 M sans et avec addition du PEG à 1×10^{-3} M et à 303 K

t (heures)	W_{corr} (mg/h.cm ²)	W_{inh} (mg/h.cm ²)	EI (%)
1	0,01010	0,00893	11,59
2	0,01858	0,00642	65,44
3	0,03574	0,01429	60,03
4	0,06659	0,02972	55,37
6	0,08741	0,04359	50,13
24	0,10057	0,05239	47,91

D'après le tableau 2, on peut conclure que l'efficacité d'inhibition augmente avec l'augmentation du temps d'immersion en raison de la stabilité de la couche adsorbée sur la surface de l'acier au carbone jusqu'à 2 heures. Cette augmentation est due à l'augmentation de la couverture de surface avec le temps jusqu'à deux heures d'immersion puis elle diminue après ce temps. La diminution de l'inhibition peut être attribuée à l'épuisement des molécules inhibitrices disponibles dans la solution en raison de la formation de la couche entre le métal et l'inhibiteur.

3.4. Paramètre thermodynamique d'activation

Nous avons procédé au tracé de la variation du logarithme de la vitesse de corrosion de l'acier dans H₂SO₄ sans et avec addition du PEG à différentes concentrations, en fonction de l'inverse de la température (fig. 2). Ceci nous a permis de calculer la valeur de l'énergie d'activation du processus de corrosion (E_a), à différentes températures, en l'absence et en présence de l'inhibiteur, selon la relation (3) d'Arrhenius [12, 13] :

$$W = k \times \exp(-E_a/RT) \tag{3}$$

où W est la vitesse de corrosion (mg/cm².h) ; k une constante (facteur préexponentiel) ; E_a l'énergie d'activation (kJ/mol) ; R la constante des gaz parfaits (J/mol.K) et T la température absolue (K).

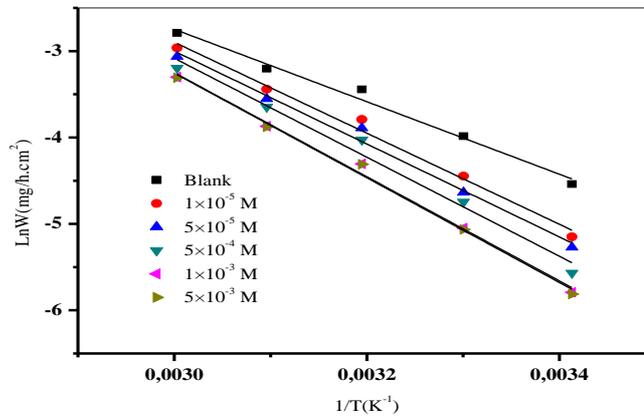


Figure 2. Variation de Ln (W) en fonction de l'inverse de la température pour l'acier au carbone dans H₂SO₄ en l'absence et en présence de différentes concentrations du PEG.

Cette courbe montre que la variation Ln(W) = f(1/T) est sensiblement linéaire et suit la loi d'Arrhénius aussi bien en l'absence qu'en présence de l'inhibiteur (les coefficients de corrélation sont supérieurs de 0,978). Les enthalpies d'activation ΔH_a et les entropies d'activation ΔS_a ont été obtenues en se servant de l'équation (4) [14] :

$$\ln(W/T) = [\ln(R/Nh) + \Delta S_a/R] - (\Delta H_a/RT) \tag{4}$$

où W est la vitesse de corrosion (mg/cm².h) ; T la température absolue (K) ; h la constante de Planck ; N le nombre d'avogadro ; ΔS_a l'entropie d'activation ; ΔH_a l'enthalpie d'activation (kJ/mol) et R la constante des gaz parfaits (J/mol.K).

La figure 3 illustre la variation de Ln(W/T) en fonction de l'inverse de la température absolue, pour l'acier au carbone sans et avec addition du PEG à différente concentration. Les valeurs de l'enthalpie d'activation obtenues à partir de la pente des droites (ΔH_a/R) sont reportées dans le tableau 3.

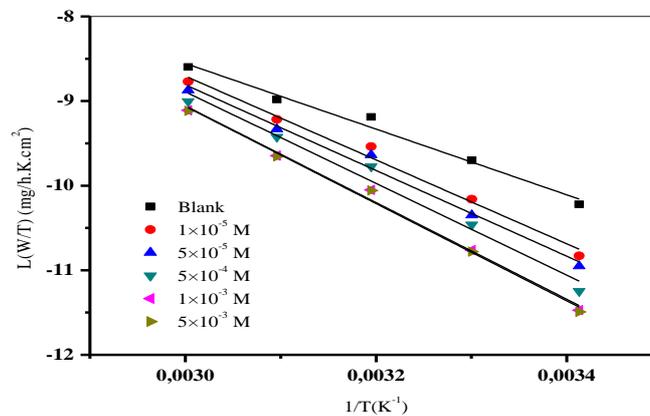


Figure 3. Variation de Ln (W/T) en fonction de l'inverse de la température pour l'acier au carbone dans H₂SO₄ 0,5M en l'absence et en présence du PEG à 1x10⁻³ mol/L.

De plus, les énergies libres d'activation peuvent également être calculées à partir de la relation (5) [15] :

$$\Delta G_a = \Delta H_a - T \Delta S_a \tag{5}$$

Le tableau 3 a révélé que les valeurs de E_a et ΔH_a augmentent en présence du PEG, ce qui indique une plus grande efficacité de protection. La différence entre la valeur moyenne de l'énergie et l'enthalpie d'activation (E_a-ΔH_a= RT) était de 2,60 kJ/mol pour toutes les concentrations, ce qui était la valeur exacte du produit de la constante des gaz et de la température moyenne de l'expérience (313 K) [16]. Ce résultat a indiqué que le processus de corrosion était une réaction unimoléculaire avec l'évolution de l'hydrogène gazeux [16]. La plus faible valeur de l'énergie d'activation apparente du processus de corrosion en présence de l'inhibiteur par rapport à celle en absence d'inhibiteur est attribuée à son adsorption par chimisorption, sa physisorption est prononcée dans le cas contraire [5].

Tableau 3. Valeurs de E_a , ΔH_a , ΔS_a et ΔG_a de l'acier dans H_2SO_4 en l'absence et en présence du PEG à différentes concentrations.

C(mol/L)	R ²	E _a (kJ/mol)	R ²	ΔH _a (kJ/mol)	ΔS (J/K.mol)	ΔG _a (313K) (kJ/mol)
-	0,983	34,88	0,980	32,28	-171,79	86,05
1×10 ⁻⁵	0,987	43,80	0,985	41,20	-146,27	86,98
5×10 ⁻⁵	0,986	44,71	0,984	42,11	-144,40	87,31
5×10 ⁻⁴	0,978	47,65	0,975	45,05	-136,27	87,70
1×10 ⁻³	0,993	50,11	0,992	47,51	-130,29	88,29
5×10 ⁻³	0,992	50,41	0,991	47,81	-129,45	88,33

Dans cette étude, E_a des solutions inhibées est supérieure à celle de la solution non inhibée indiquant un mode d'adsorption physique. Les valeurs positives de ΔH_a indiquent que la formation du complexe activé est un processus endothermique. L'entropie d'activation en l'absence et en présence du PEG était importante et négative. ΔS_a < 0 implique que le complexe activé est l'étape déterminant de la vitesse, plutôt que l'étape de dissociation. Alors qu'en présence de l'inhibiteur, la valeur de l'entropie augmente, cela s'explique généralement par une augmentation du désordre lorsque les réactifs sont convertis en complexes activés. La valeur positive de l'énergie libre d'activation, signifie une réaction de corrosion non spontanée qui augmente avec la concentration croissante de l'inhibiteur.

3.5. Isotherme d'adsorption

Les isothermes d'adsorption permettent d'obtenir des informations sur l'interaction de l'inhibiteur avec la surface de l'électrode. D'autre part, l'adsorption des inhibiteurs sur l'interface métal/solution dépend de la charge du métal, de sa nature, de la structure chimique de l'inhibiteur et du type d'électrolyte [2, 17].

Deux types d'interaction sont principalement responsables de la liaison inhibiteur/surface métallique, il s'agit de la physisorption (formation de liaisons faibles) et la chimisorption. Le processus d'adsorption chimique met en jeu un transfert ou un partage d'électrons entre les molécules de l'inhibiteur et les orbitales "d" insaturées de la surface du métal permettant de former, respectivement, des liaisons datives et des liaisons covalentes. L'adsorption physique exige la présence d'une surface métallique électriquement chargée et des espèces chargées dans la solution. Généralement, les valeurs de ΔG_{ads} jusqu'à -20 kJ/mol sont cohérentes avec l'adsorption physique tandis que celles inférieures à -40 kJ/mol sont corrélées avec la chimisorption [18]. L'exploitation des résultats obtenus précédemment nous permet de déterminer, l'isotherme d'adsorption qui décrit le mieux les phénomènes d'adsorption impliqués dans le processus d'inhibition de la corrosion par le PEG.

Les valeurs obtenues du taux de recouvrement θ ont été utilisées pour tester différentes isothermes telles que l'isotherme d'adsorption de Langmuir, Frumkin ou Temkin. Les valeurs des paramètres thermodynamiques ont été calculées à partir du modèle de Langmuir [19] :

$$C/\theta = 1/K_{ads} + C \quad (6)$$

Les valeurs des constantes d'adsorption (K_{ads}) sont déterminées par extrapolation des droites obtenues à l'axe C/θ (figure 4).

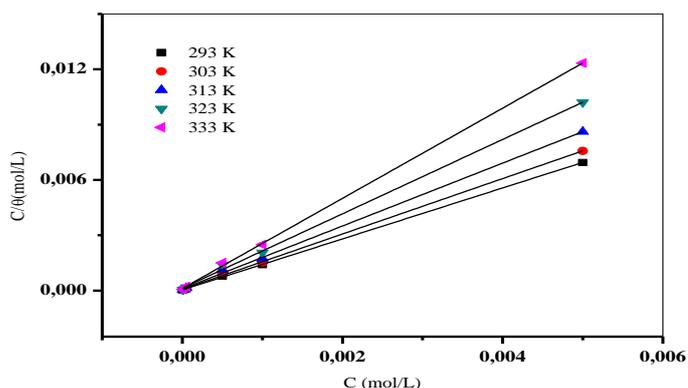


Figure 4. Modèles de l'isotherme d'adsorption de Langmuir

Les résultats obtenus montrent que seules les variations de C/θ en fonction de la concentration de l'inhibiteur C, sont linéaires (figure 4). Ces valeurs nous ont ensuite permis d'accéder aux valeurs de l'énergie libre standard d'adsorption (ΔG_{ads}) à partir de la relation (7) [20]:

$$\Delta G_{ads} = -RT \ln(55.5 K_{ads}) \quad (7)$$

où R est la constante des gaz parfaits en J/mol.K et T la température en K. la valeur 55,5 est la concentration de l'eau en solution (mol.L⁻¹).

Le tableau 4 regroupe les valeurs des paramètres thermodynamiques d'adsorption, obtenues pour le PEG en utilisant les différentes isothermes d'adsorption. L'adsorption du PEG sur la surface de l'acier au carbone obéit donc à l'isotherme

d'adsorption de Langmuir. Les coefficients de corrélation (R^2) sont tous proches de 1 ($>0,998$), confirmant la validité du modèle choisi (Tableau 4). La valeur élevée de la constante d'équilibre à basse température reflète la grande capacité d'adsorption du PEG sur la surface de l'acier au carbone [17].

Tableau 4. Coefficients d'adsorption et paramètres thermodynamiques d'adsorption du PEG sur l'acier au carbone

T (K)	R^2	$K_{ads}(m^3/mol)$	$\Delta G_{ads}(kJ/mol)$
293	0,999	28,71	-34,78
303	0,999	16,03	-34,50
313	0,999	10,91	-34,64
323	0,998	7,73	-34,82
333	0,999	9,07	-36,34

Les valeurs négatives de l'énergie libre du PEG sont comprises entre -34,78 et -36,34 kJ/mol, ces signes négatifs indiquent la stabilité de la couche adsorbée sur la surface de l'acier au carbone et la spontanéité du processus d'adsorption. Les résultats obtenus de l'énergie libre se trouve entre -20 et -40 kJ/mol ce qui indique que le processus d'adsorption de cet inhibiteur implique à la fois des mécanismes de physisorption et de chimisorption.

3.6. Microscopie électronique à balayage (MEB)

La microscopie électronique à balayage a été utilisée pour étudier la morphologie de la surface des échantillons d'acier au carbone. La surface polie de l'électrode en acier au carbone avant immersion était uniforme (Figure 5.a). L'image de la surface de l'acier après 24 h d'immersion dans le H_2SO_4 seul est fortement endommagée par l'apparition de quelques piqûres et crevasses, ceci montre clairement que l'acier a subi une corrosion en absence des inhibiteurs (Figure 5.b). Cependant, les micrographies de l'échantillon d'acier au carbone inhibé (Figure 5.c) pour la même période d'intervalle de temps étaient relativement recouvertes d'un produit traduisant la présence d'une couche protectrice adsorbée sur la surface de l'acier au carbone qui est responsable de l'inhibition de la corrosion. On peut conclure que la morphologie de la surface de l'acier carbone est remarquablement améliorée en présence du PEG.

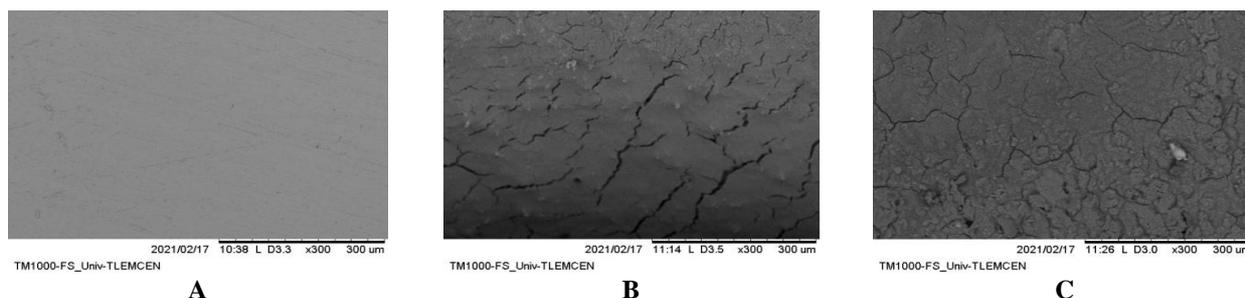


Figure 5. Images MEB des échantillons d'acier au carbone. (a) : avant l'immersion, (b) : après l'immersion dans H_2SO_4 0,5 mol/L, (c) : (b) avec l'ajout de 1×10^{-3} mol/L du PEG.

4. Conclusion

L'efficacité inhibitrice augmente avec la concentration du PEG et elle diminue avec l'augmentation de la température de l'électrolyte de 293 à 333 K. L'énergie d'activation apparente, déterminée à partir de la relation d'Arrhenius, est plus grande en présence du PEG. Cette augmentation peut être attribuée à une physisorption du PEG à la surface de l'acier et à un changement du mécanisme de dissolution de l'acier en présence d'inhibiteur. L'étude thermodynamique a montré que l'adsorption d'inhibiteur à la surface de l'acier est spontanée et suit le modèle de l'isotherme d'adsorption de Langmuir. Cet inhibiteur présente un caractère d'inhibition mixte et agit par simple adsorption en bloquant les sites actifs de la surface de l'acier. Les analyses de surface effectuées par microscopie électronique à balayage montrent la présence d'une couche protectrice qui conduit à la diminution de la vitesse de corrosion.

REFERENCES

- [1]- Abeng F E, Ikpi M E, Anadebe V C and Emori W, 2020, Metolazone compound as corrosion inhibitor for api 5l52 steel in hydrochloric acid solution, Bull. Chem. Soc. Ethiop, 34, 407
- [2]- Bouraoui M.M, Chettouh S, Chouchane T, Khellaf N, 2019, Inhibition Efficiency of cinnamon oil as a green corrosion inhibitor, Journal of Bio and Tribo-Corrosion, 5, 1–9
- [3]- Attar T, Larabi, 2014, The Inhibition effect of potassium iodide on the corrosion of pure iron in sulfuric acid, Adv. Chem, 2014, 1–5
- [4]- Rasheeda K, Vijaya D.P.A, Krishnaprasad P.A, Samshuddin S, 2018, Pyrimidine derivatives as potential corrosion

inhibitors for steel in acid medium—An overview, *Int. J. Corros. Scale Inhib*, 7, 48–61

- [5]- Attar T, Benchadli A, Messaoudi B, Benhadria N, Choukchou-Braham E, 2020, Experimental and Theoretical Studies of Eosin Y Dye as Corrosion Inhibitors for Carbon Steel in Perchloric Acid Solution, *Bulletin of Chemical Reaction Engineering & Catalysis*, 15, 454-464
- [6]- Rahal HT, Abdel-Gaber AM, Younes G O, 2016, Inhibition of steel corrosion in nitric acid by sulfur containing compounds, *Chem. Eng. Commun*, 203, 435–445.
- [7]- Benchadli A, Attar T, Messaoudi B, Choukchou-Braham E, 2021, Polyvinylpyrrolidone as a corrosion inhibitor for carbon steel in a perchloric acid solution: effect of structural size, *Hung. J. Ind. Chem*, 49, 1-11
- [8]- Attar T, Larabi L, Harek Y, 2014, Inhibition effect of potassium iodide on the corrosion of carbon steel (XC 38) in acidic medium. *International Journal of Advanced Chemistry*, 2, 139-142
- [9]- Attar T, Benchadli A, Choukchou-Braham E, 2019, Corrosion inhibition of carbon steel in perchloric acid by potassium iodide, *Inter. J. Adv. Chem*, 7, 35-41
- [10]- Noor EA, Al-Moubaraki AH, 2008, Thermodynamic study of metal corrosion and inhibitor adsorption processes in mild steel/1-methyl-4[4'(-X)-styryl pyridinium iodides/hydrochloric acid systems. *Chem. Phys*, 110,145-154
- [11]- Attar T, Larabi L, Harek Y, 2014, Corrosion inhibition of cold rolled steel in 0.5M H₂SO₄ by potassium iodide, *Der Pharma Chemica*, 6, 181-186
- [12]- Singh A, Ahamad I, Yadav D K, Singh V K, Quraishi M A, 2012, The effect of environmentally benign fruit extract of shahjan (*moringa oleifera*) on the corrosion of mild steel in hydrochloric acid solution, *Chemical Engineering Communications*, 199, 63-77
- [13]- Benchadli A, Attar T, Choukchou-Braham E, 2018, Corrosion inhibition of carbon steel (XC 38) in hydrochloric acid by potassium iodide, *Journal of Advanced Research in Science and Technology*, 5, 834-844
- [14]- Chakravarthy MP, Mohana KN, Pradeep Kumar CB, 2014, Corrosion inhibition effect and adsorption behaviour of nicotinamide derivatives on mild steel in hydrochloric acid solution, *Int. J. Ind. Chem*, 5, 1–21
- [15]- Khouri SJ, 2015, Titrimetric study of the solubility and dissociation of benzoic acid in water: effect of ionic strength and temperature, *Am. J. Analyt. Chem*, 6, 429–436
- [16]- Attar T, Benchadli A, Mellal T, Dali Youcef B and Choukchou-Braham E, 2021, Use of Experimental Designs to Evaluate the Influence of Methyl Green Dye as a Corrosion Inhibitor for Carbon Steel in Perchloric Acid. *M J Chem*, 23, 60-69.
- [17]- Benchadli A, Attar T, Choukchou-Braham E, 2019, Inhibition of Carbon Steel Corrosion in Perchloric Acid Solution by Povidone Iodine, *Journal of Physical Chemistry Research*, 7, 837-848.
- [18]- Doner A, Solmaz R, Ozcan M, Kardas G, 2011, Experimental and Theoretical Studies of Thiazoles as Corrosion Inhibitors for Mild Steel in Sulphuric Acid Solution, *Corros. Sci*, 5 3, 2902–2913
- [19]- Dagdag O, Safi Z, Hsissou R, Erramli H, ElBouchti M, Wazzan N, Guo L, Verma C, Ebenso E E and El Harfi A, 2019, Epoxy pre-polymers as new and effective materials for corrosion inhibition of carbon steel in acidic medium: computational and experimental studies, *Sci. Rep*, 9, 1-14
- [20]- Anyiam CK, Ogbobe O, Oguzie EE, 2020, Corrosion inhibition of galvanized steel in hydrochloric acid medium by a physically modified starch, *Sn. Appl. Sci*, 2, 520- 527.



Revue des Matériaux & Energies Renouvelable

Journal home : <https://www.univ-relizane.dz>

ISSN : 2507-7554

E- ISSN : 2661-7595



جامعة غليزان
RELIZANE UNIVERSITY

Etude numérique d'un échangeur de chaleur tubulaire muni de promoteurs de turbulence

Open
Access

BENAMARA Nabil*, **LAHMER Djelloul**, **MERZOUG Mohamed**, **LAHCENE Abdelkader**, **BOULENOUAR Abdelkader** et **AMINALLAH Miloud**

¹ Laboratoire de matériaux et systèmes réactifs, Département de génie mécanique, Université de Sidi Bel Abbes, (22000), BP. 89, City Larbi Ben Mhidi, Algerie.

RESUME

Dans le présent travail nous étudions numériquement l'effet de la présence des promoteurs de forme triangulaires sur l'efficacité d'un échangeur de chaleur tubulaire. Lorsqu'on parle d'efficacité, généralement, on se trouve confronté à des problèmes de comportements dynamique et thermique au sein de ce dernier. L'objectif principal, est d'optimiser les paramètres géométriques des promoteurs en forme triangulaire afin de collecter le maximum d'énergie à un coût minimum. En effet, Dans le cas d'une géométrie simplifiée bidimensionnelle, nous avons considéré l'écoulement d'un fluide incompressible (air) dans un tube d'échangeur de chaleur cylindrique équipé de chicanes placées perpendiculairement au sens de l'écoulement. Plusieurs dispositions de chicanes sont considérée selon l'angle d'inclinaison β , l'espace entre les deux chicanes successives (rapport d'espace PR: P/Dh) et la longueur de la chicane (rapport de blocage BR: e/Dh). Les calculs sont effectués au moyen du code de calcul fluent en utilisant le modèle de turbulence k- ϵ , RNG, avec un nombre de Reynolds Re variant de 3000 jusqu'à 13000. Les résultats trouvés ont indiqué que la meilleure performance thermique obtenue correspond à $\beta = 30^\circ$; **BR**=0,2 ; **PR**=1 et **Re**=4000.

Article history:

Received 18 August 2021.

Received in revised form 19 August 2021.

Accepted 02 September 2021

Mot clé: *Promoteurs de Turbulence; Nusselt; frottement; modèle de turbulence K- ϵ RNG; facteur thermohydraulique; transfert convectif*

Copyright © 2022 - All rights reserved

1. Introduction

L'échangeur de chaleur est l'un des équipements les plus importants dans l'industrie car il permet la récupération d'énergie, par transfert convectif, entre deux ou plusieurs fluides. Afin d'améliorer le taux de transfert de chaleur avec une perte de charge minimale, les chercheurs ont essayé de développer plusieurs techniques. Deux grandes classes des techniques d'amélioration du transfert de chaleur sont utilisées dans les échangeurs de chaleur : les techniques dites actives et passives [1]. Dans notre étude, nous nous concentrons sur les méthodes passives [2], car elles ne nécessitent pas d'alimentation externe et utilisent généralement des surfaces modifiées par insertion des générateurs de vortex dans l'écoulement principal. D'après les travaux publiés dans ce domaine, la méthode qui a réussi, avec succès, à améliorer l'échange thermique avec un coût et un encombrement réduit avec une faible chute de pression du fluide est les promoteurs de turbulence longitudinale [3]. En effet, plusieurs études sont réalisées sur cette technique afin de donner une meilleure conception du générateur de turbulence inséré sur l'échangeur de chaleur qui peut améliorer le transfert de chaleur par la destruction de la sous couche limite thermique [4-8].

Dans certaines études expérimentales, Han et al. [9] ont utilisé des nervures sur deux parois d'un canal carré avec des angles d'attaque différents pour un rapport de pas ($P/e = 10$) et un rapport de blocage ($e/D = 0,0625$). Ils ont constaté que les

* Corresponding author. E-mail address: benamara96@yahoo.fr

nervures en forme de "V" coudées ont un effet important sur les performances de l'échangeur de chaleur. Selon Promvong et al [10] les baffles avec un angle d'attaque de 45° augmentent le coefficient de transfert thermique de 150% à 850%. Torii et al [11] ont conclu que l'installation de déflecteurs de type delta "winglet" sur un échangeur de chaleur à tubes à ailettes améliore considérablement le transfert de chaleur et réduit le facteur de friction. L'effet de l'angle d'attaque du déflecteur sur le transfert de chaleur et l'écoulement du fluide est étudié numériquement par Kwankaomeng et al. [12] pour lesquels ils ont utilisé des baffles inclinés à 30° avec différentes valeurs du rapport de blocage (BR). Ils ont constaté que les chicanes inclinées à 30° augmentaient considérablement le coefficient de transfert de chaleur dans le canal car elles génèrent des tourbillons dans l'écoulement du fluide. Mais cette augmentation du transfert de chaleur associée à une chute de pression importante allant de 1 à 17 fois sur le canal sans chicanes. Zhang et al [13] ont étudié l'effet de la ceinture à arc insérée dans l'échangeur de chaleur à tube. Ils ont constaté que la ceinture à arc peut faire tourbillonner le tuyau fluide et joue le rôle d'un transfert de chaleur amélioré, mais augmente également de manière significative la résistance du fluide, où le PEC est tout au-dessus de 1,5. Une analyse numérique des générateurs de vortex (VG), placés sur les tubes d'un échangeur, a été réalisée par J. Jang et al. Les résultats obtenus montrent que les valeurs optimales de l'angle d'inclinaison (θ) et l'emplacement transversal (L_y), sont respectivement compris entre : $30^\circ < \theta < 60^\circ$ et $2 \text{ mm} < L_y < 20 \text{ mm}$. M. Omid et al [20] ont étudié numériquement l'effet du nanofluide d'alumine à l'intérieur d'un tube à ruban torsadé à trois lobes sur les performances de l'échangeur de chaleur pour diverses fractions volumiques de nanofluide de 0,01, 0,02 et 0,03 avec un nombre de Reynolds compris entre 5000 et 20 000 ; ils ont remarqué que l'augmentation de la concentration de nanoparticules améliore les taux de transfert de chaleur pour ces cas, alors qu'elle n'augmente pas le nombre relatif de Nusselt à l'intérieur du tube torsadé avec un insert en Y à un nombre de Reynolds et une concentration de nanoparticules élevés. Shobahana et al [21] ont conclu que les performances globales de l'échangeur de chaleur à double ailettes et tubes peuvent être améliorées de 27 à 91 % en utilisant des RWVG à 20° pour la plage de nombres de Reynolds étudiée.

Dans le cadre de la compréhension et de l'amélioration du phénomène de transfert convectif dans les échangeurs tubulaires avec présence de chicanes inclinées, l'objectif de ce travail vise à étudier numériquement la géométrie optimale, de l'angle d'attaque, du rapport de pas (PR) et du rapport de blocage (BR), qui offre le meilleur rendement d'un échangeur de chaleur.

2. Géométrie étudiée

La configuration du conduit circulaire rugueux proposée pour la veine d'air dynamique est un simple canal rectangulaire bidimensionnel (2D) de dimensions : $H \times L_2 = 0.05 \times 1.3 \text{ m}^2$ et un diamètre hydraulique $D_h = 50 \text{ mm}$, Les dimensions de l'échangeur de chaleur tubulaire sont données dans le tableau suivant :

Tableau 1- Les dimensions de la géométrie de l'échangeur étudiée.

Paramètres	Range
Nombre de Reynolds (Re)	3000-13000 (7 valeurs)
Diamètre hydraulique (Dh)	50 mm
Angle d'inclinaison (β)	$20^\circ, 30^\circ, 40^\circ, 60^\circ$
Hauteur de la rugosité (e)	5 et 10 mm
Rapport de blocage (BR: e/Dh)	0.1 et 0.2
Pas de rugosité (P)	50, 100, 150 et 200 mm
Rapport d'espace (PR:P/Dh)	1, 2, 3 et 4

Dans notre échangeur de chaleur tubulaire étudié deux autres rectangles sont placés, l'un avant la zone de test de dimensions $H \times L_1 = 0.05 \times 0.150 \text{ m}^2$ et l'autre après la zone de test de dimensions $H \times L_3 = 0.02 \times 0.150 \text{ m}^2$. L'objectif d'ajouter ces deux rectangles est d'obtenir un régime établi avant que l'air entre dans la zone de test, et d'autre part, d'assurer un bon mélange d'air sortant de cette dernière. Les nervures de forme géométrique triangulaire sont disposées à un rapport fixe d'espacement, sur la paroi interne de l'échangeur.

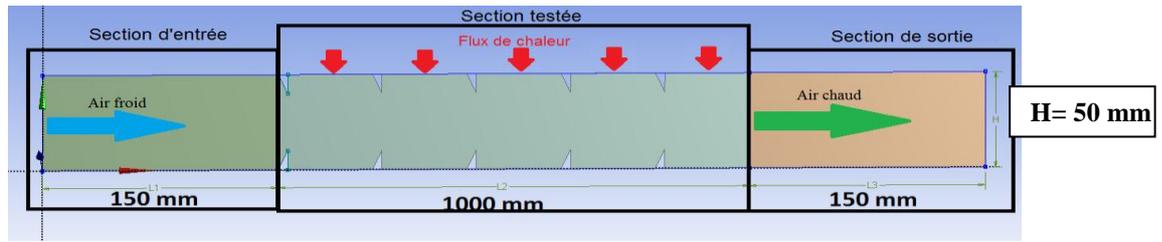


Figure 1- Géométrie d'un échangeur muni de rugosité artificielle

3. Conditions aux limites

Dans notre étude numérique, nous prenons une vitesse uniforme du flux d'air à la section d'entrée U_{inlet} avec une température fixée à 300K correspondant au nombre de Prandtl (Pr) égal à 0,7. La température de la paroi de tube de la section d'essai est fixée à 350K tandis que les parois des chicanes et la paroi du tube d'extension d'entrée et de sortie sont considérées adiabatiques. La pression de l'écoulement du fluide à la sortie est atmosphérique (fig.1). Les propriétés physiques de l'air sont données dans le tableau ci-après (tableau 2).

Tableau 2- Propriétés Thermo-physique

Propriétés	Tube (al)	Fluide (air)
C_p (J/kg k)	871	1006.43
ρ (kg/ m3)	2719	1.225
λ (w/m k)	202.4	0.0242
μ (N.s/ m2)	-	1.7894e-05

4. Equations gouvernantes

Afin d'étudier le problème du transfert de chaleur d'un fluide incompressible dans un régime turbulent bidimensionnel de notre conception d'échangeur de chaleur, il faut résoudre les équations bidimensionnelles de continuité, de quantité de mouvement et d'énergie.

- Équation de continuité :

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \tag{1}$$

- Equation de conservation de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \overline{\rho u'_i \rho u'_j} \right) \right] \tag{2}$$

- Equation de conservation de l'énergie

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i T) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\gamma + \gamma_t) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] \tag{3}$$

Sachant que (γ) est la diffusion thermique donnée par :

$$\gamma = \frac{\mu}{Pr} \tag{4}$$

Dans cette étude, le modèle de turbulence k-ε standard est adopté par rapport aux autres modèles de turbulence disponible dans le code de calcul ANSYS Fluent, car il est robuste et donne des résultats précis dans le cas de transfert convectif d'un écoulement pleinement turbulent dans la veine d'essai d'un échangeur de chaleur muni de promoteurs de turbulence.

$-\overline{\rho u'_i u'_j}$: est appelée contraintes de Reynolds définies par le modèle de turbulence ε.

μ_t : est la viscosité de turbulence définie par :

$$\mu_t = \rho c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{5}$$

Pour logiciel ANSYS-Fluent le coefficient $c_\mu = 0.9$ et pour les autres constantes empiriques sont définis comme indiqué ci-dessous :

$$c_{1\varepsilon} = 1.44 ; c_{2\varepsilon} = 1.92 ; \sigma_k = 1.0 ; \sigma_\varepsilon = 1.3 .$$

Pour évaluer le transfert de chaleur dans chaque configuration géométrique de notre échangeur, nous calculons le nombre moyen de Nusselt donné par :

$$Nu = \frac{hD_h}{\lambda} \quad (6)$$

h : est le coefficient de transfert de chaleur de la paroi chauffée obtenu à partir d'ANSYS fluent.

Où D_h : est le diamètre hydraulique défini comme suite :

$$D_h = \frac{4 \times \text{section}}{\text{perimeter}} = D_{\text{tube}} \quad (7)$$

Nombre de Reynolds

$$Re = \frac{u_{in} D}{\mu} \quad (8)$$

Le facteur de frottement est calculé par l'équation suivante :

$$f_r = \frac{2 \Delta P}{\rho u_{in}^2 \left(\frac{L}{D_h}\right)} \quad (9)$$

Où ΔP : est la chute de pression le long du tube.

Le meilleur arrangement de déflecteur dans l'échangeur de chaleur est celui qui a la plus grande valeur de facteur d'amélioration thermique donné par (Webb et Eckert) (1972) [22] :

$$\eta = \frac{Nu/Nu_0}{\left(\frac{Fr}{Fr_0}\right)^{\frac{1}{3}}} \quad (10)$$

5. Maillage de la géométrie

Dans ce travail numérique un maillage, structuré par bloc, de type quadratique est utilisé afin de contrôler la taille et l'espacement de la première ligne du maillage proche de la paroi chauffée et de minimiser l'erreur de calcul itératif.

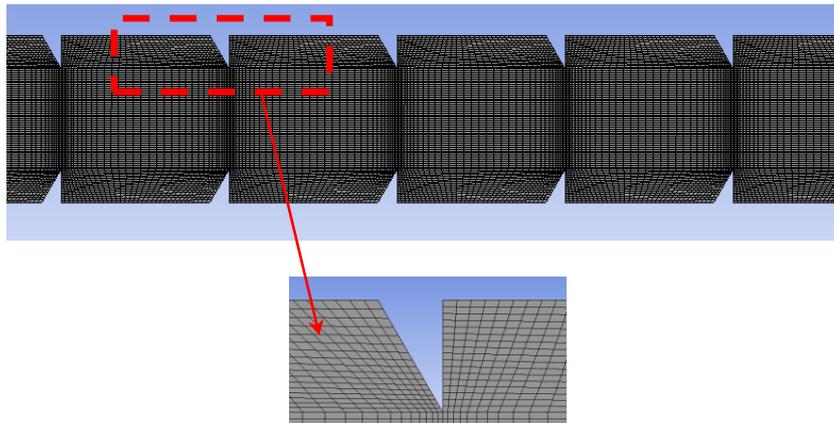


Figure 2- Maillage du domaine de calcul

La stratégie d'utiliser un maillage structuré par bloc plus raffinés proche des parois tient à minimiser les erreurs et la stabilité de calcul notamment dans les régions où les gradients de température et de vitesse sont les plus importants, comme dans le cas des couches limites thermique et hydraulique. La sensibilité de la taille du maillage sur les variations du nombre de Nusselt et du coefficient de frottement est représentée dans le tableau III.3. IL a été constaté qu'à des nombres de grille plus importants l'erreur relative de Nusselt et du coefficient de frottement est quasi-nulle.

Tableau 2 - Sensibilité de Maillage

<i>N° d'éléments</i>	<i>Taille de l'élément</i>	<i>Nu</i>	<i>Fr</i>	<i>% diff Nu</i>	<i>%diff Fr</i>
46350	1	30,84557	0,278849	--	--
53766	0,9	30,35513	0,276743	0,49044	0,002106
59328	0,8	29,96112	0,274552	0,39401	0,002191
67671	0,7	29,73213	0,272688	0,22899	0,001864
77868	0,6	29,719913	0,271979	0,012217	0,000709

6. Résultats et discussions

6.1. Validation des résultats

Afin de valider les résultats de notre étude numérique obtenus, nous avons comparé les valeurs du nombre de Nusselt et de coefficient de frottement dans le cas d'un tube lisse avec les corrélations de Dittus-Boelter (1930) [17] et Gnielinski (1976) (voir figures III.4 et III.5) [18].

➤ **Corrélation de Dittus-Boelter [17]:**

$$Nu = 0.023 Re^{0.8} Pr^{0.4}$$

➤ **Corrélation de Gnielinski [18]:**

$$Nu = \frac{(f_r/8) Re Pr}{1 + 12.7 (f_r/8)^{1/2} (Pr^{2/3} - 1)} \text{ For } 2300 \leq Re \leq 5.10^6$$

Avec:

$$Fr = (0.76 \ln Re - 1.64)^{-2} \text{ For } 2300 \leq Re \leq 5.10^6$$

➤ **Corrélation de Moody (1944) [19]:**

$$Fr = 0.316 Re^{0.25} \text{ For } Re \leq 2.10^4$$

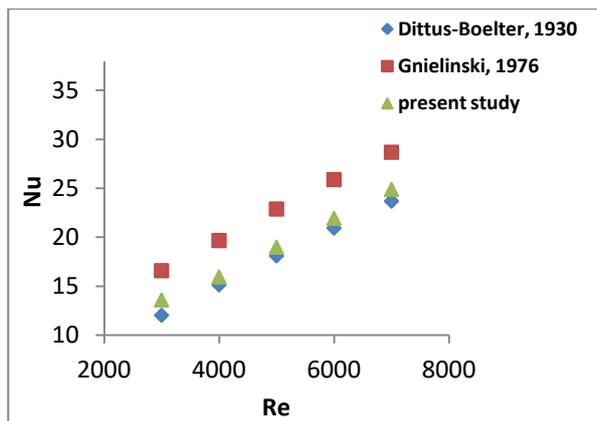


Figure 3 - Comparaison entre le nombre de Nusselt Nu de la présente étude et Gnielinski, Dittus-Boelter .

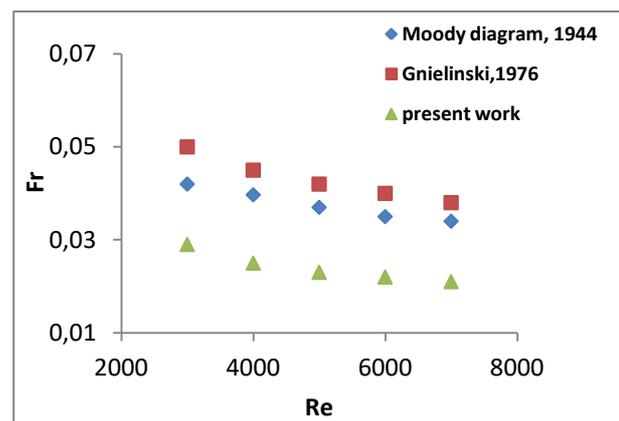


Figure 4- Comparaison entre le facteur de frottement Fr de la présente étude et Gnielinski, diagramme de Moody.

D'après les figures III.4 et III.5, il est clair qu'il y a un grand rapprochement entre les résultats de la présente étude et les deux corrélations de Dittus-Boelter (1930) et Gnielinski (1976). On outre, l'erreur entre nos résultats et celle de la corrélation de Dittus-Boelter et de Gnielinski est inférieure à 5% et 10% respectivement.

6.2. Effet du nombre de Reynolds sur le nombre de Nusselt

Les figures 6 et 7, montrent l'évolution des nombres de Nusselt en fonction des nombres de Reynolds, pour différents paramètres d'arrangements et d'inclinaisons de déflecteur : β (20° , 30° , 40° et 60°), PR (1, 2, 3 et 4) et pour deux valeurs fixes de BR (0.1 et 0.2).

Les résultats obtenus indiquent que le nombre de Nusselt augmente avec l'accroissement du nombre de Reynolds pour les différents angles d'inclinaison β . Le meilleur transfert de chaleur enregistré correspond aux paramètres géométriques suivants (β , PR et BR) = (30° , 1 et 0,2) à un nombre de Re égal 13000. Cette amélioration de transfert convectif est d'environ 97% par rapport au tube lisse en raison de la présence des nervures qui perturbe l'écoulement principal en créant des zones de décollement et de recollement de la couche limite turbulente. Favorisant ainsi le transfert de chaleur par le biais d'apparition d'écoulements secondaires.

Nous remarquons aussi que les augmentations de l'épaisseur des nervures (BR=0.1 et 0.2), pour des valeurs fixes de β , PR et Re, ont une grande influence sur l'amélioration du coefficient d'échange d'environ 32% à des valeurs fixes de (β , PR et Re) = (30° , 1 et 13000) respectivement.

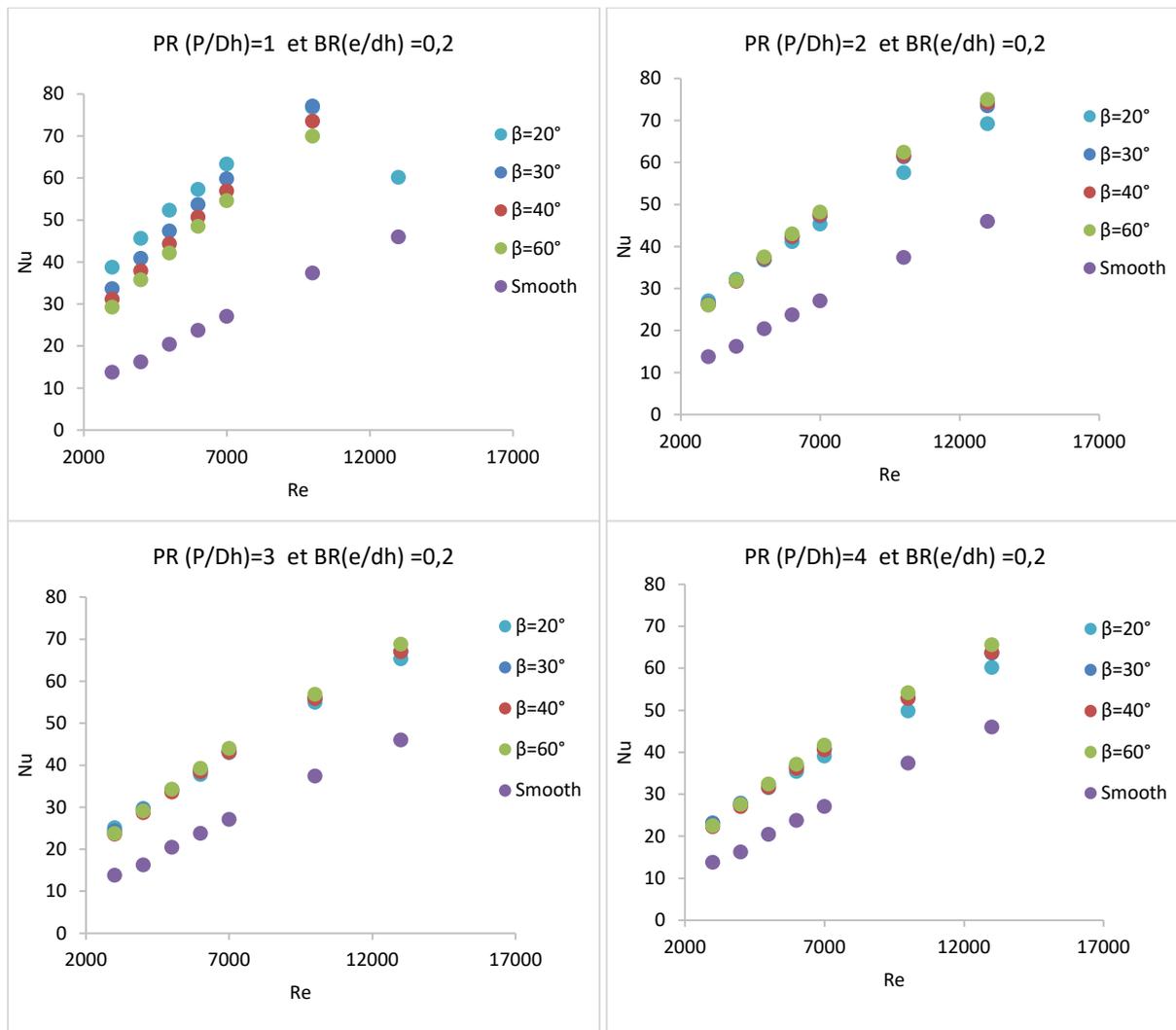
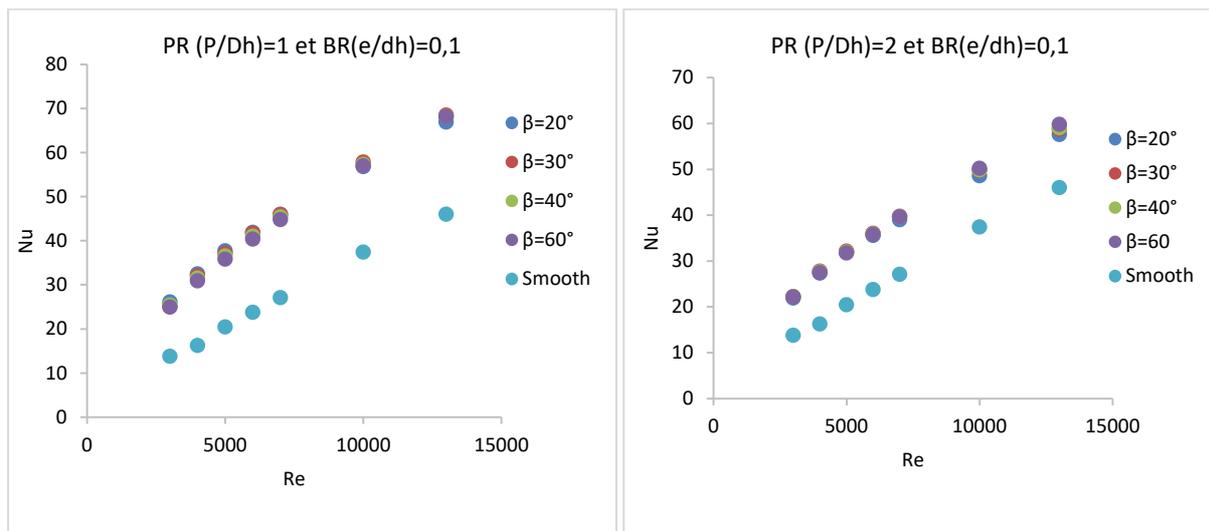


Figure 5- Effet du nombre de Re sur le nombre Nu moyen pour différents angles d'inclinaison β (PR =1, 2, 3,4 et BR=0.2).



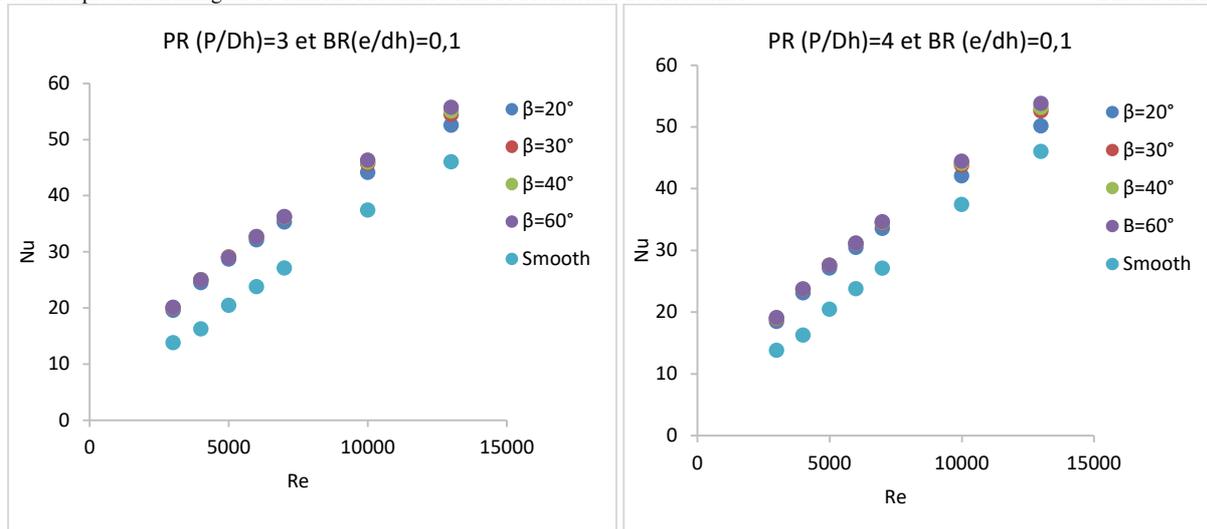
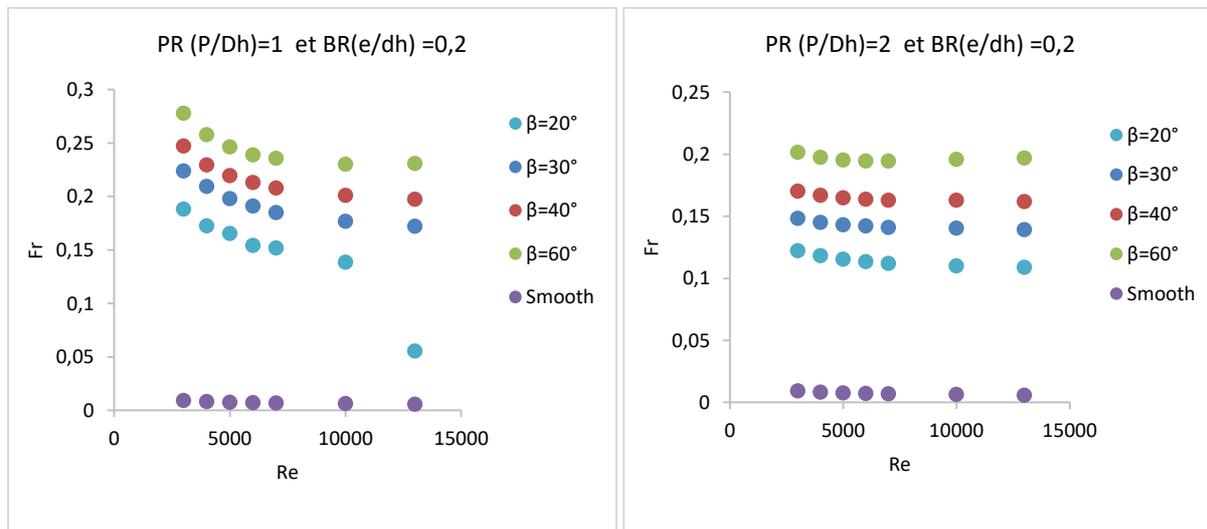


Figure 6 - Effet du nombre de Re sur le nombre Nu moyen pour différents angles d'inclinaison β (PR =1, 2, 3,4 et BR=0.1).

6.3. Effet du nombre de Reynolds sur le coefficient de frottement Fr

L'écoulement turbulent généré par les chicane augmente à la fois le coefficient d'échange thermique et le facteur de frottement, à cause du développement et d'augmentation de l'épaisseur de la couche limite dynamique turbulente.

Les figures 8 et 9 montrent que toutes les dispositions des chicane examinées à différentes valeurs de (β , PR et BR) augmentent le facteur de frottement en comparaison avec le cas d'un tube lisse. Une grande valeur de facteur de frottement d'environ 0.27 est obtenue à $Re = 3000$ et des valeurs géométriques égales à ($\beta = 60^\circ$; PR = 1 ; BR = 0,2). Il y a une grande influence de l'angle d'inclinaison (β) sur l'augmentation du facteur de frottement qui peut atteindre les 12% à $\beta = 60^\circ$ par rapport à une inclinaison de 40° . Une augmentation significative du coefficient de frottement est enregistrée avec l'augmentation du rapport de blocage BR en comparaison avec les autres paramètres examinés, ce qui est tout à fait logique du fait que le conduit devient de plus en plus obstrué.



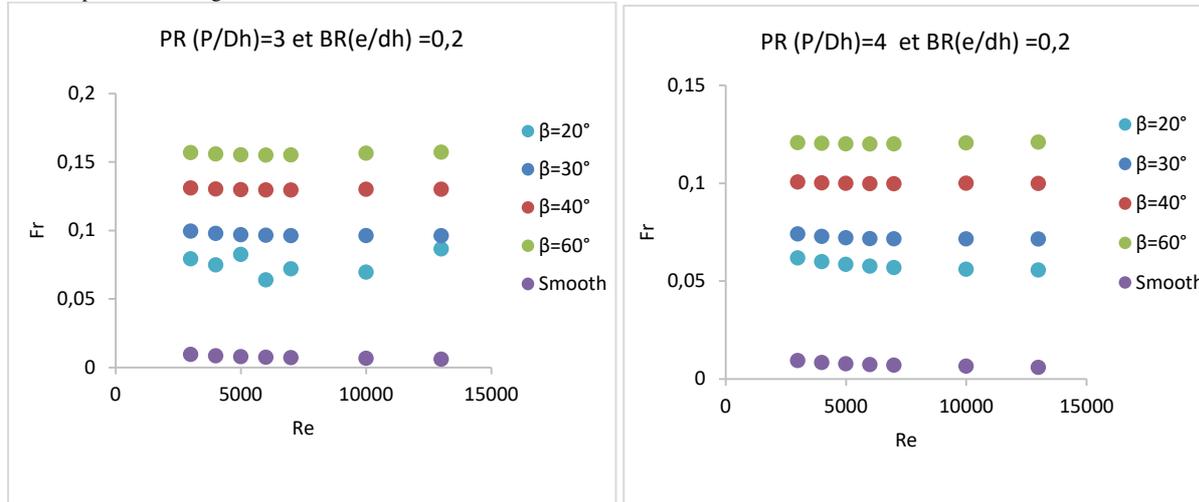


Figure 7- Effet du nombre de Re sur le nombre friction f_r pour différents angles d'inclinaison β ($PR = 1, 2, 3, 4$ et $BR=0.2$)

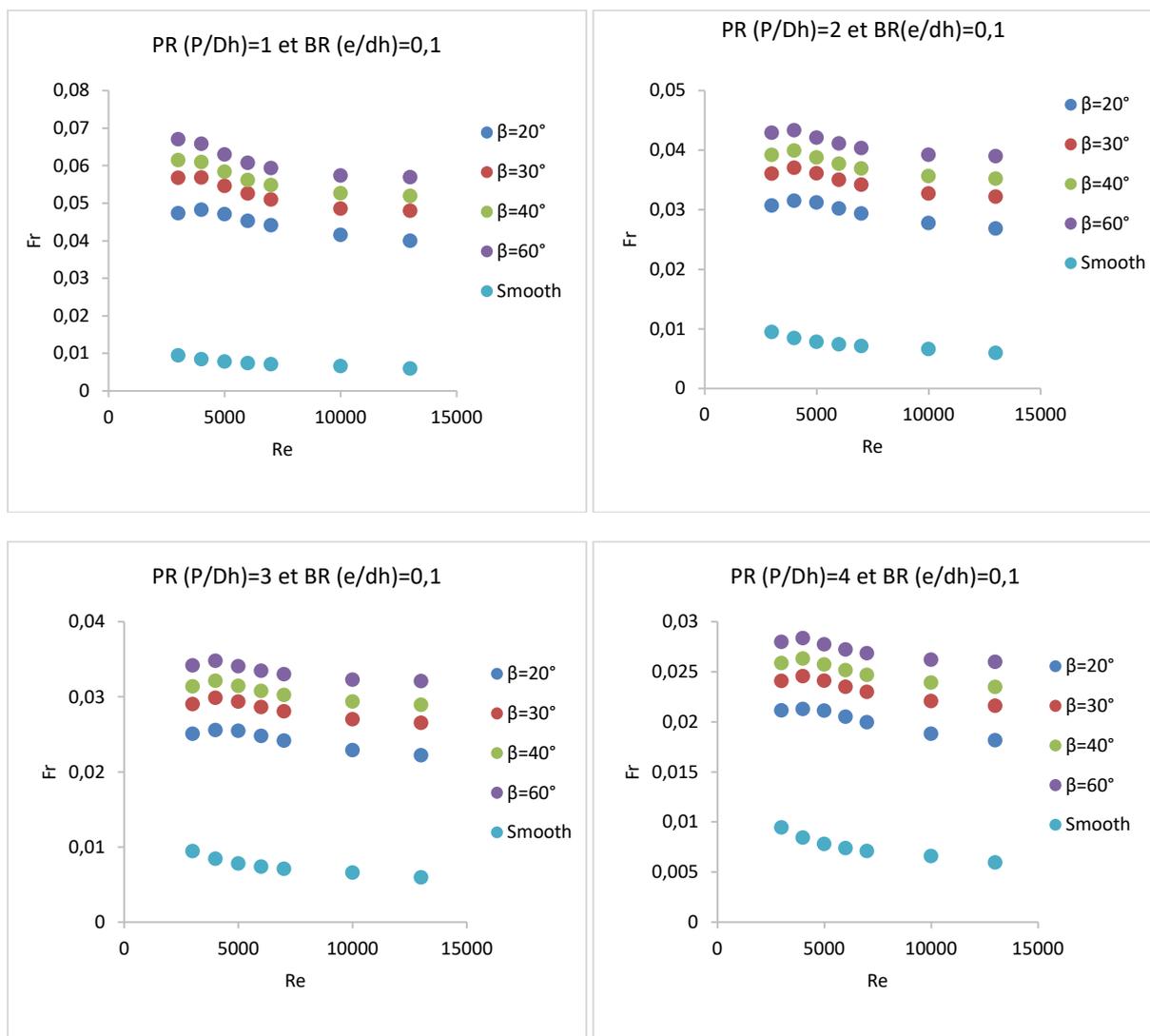


Figure 8- Effet du nombre de Re sur le nombre friction f_r pour différents angles d'inclinaison β ($PR = 1, 2, 3, 4$ et $BR=0.1$).

6.4. Rendement η en fonction de Reynolds

Dans cette partie, on va analyser un autre paramètre important appelé facteur de performance thermohydraulique (η) souvent utilisé comme paramètre d'optimisation. Ce coefficient de performance nous permet donc de trouver un compromis

Les figures 10 et 11 représentent la variation **du facteur de performance pour** différentes valeurs du rapport de pas (PR), du rapport de blocage (BR) et d'angle d'inclinaison (β) en fonction du nombre de Reynolds. Il est clair que le facteur de performance diminue avec l'augmentation de β et BR. On constate que le meilleur rendement de 2.48 est obtenu pour $\beta = 30^\circ$; PR = 1 ; BR = 0,2 et un nombre de Reynolds égale 4000. En outre, l'effet d'obstruction disparaît à de grands nombres de Reynolds.

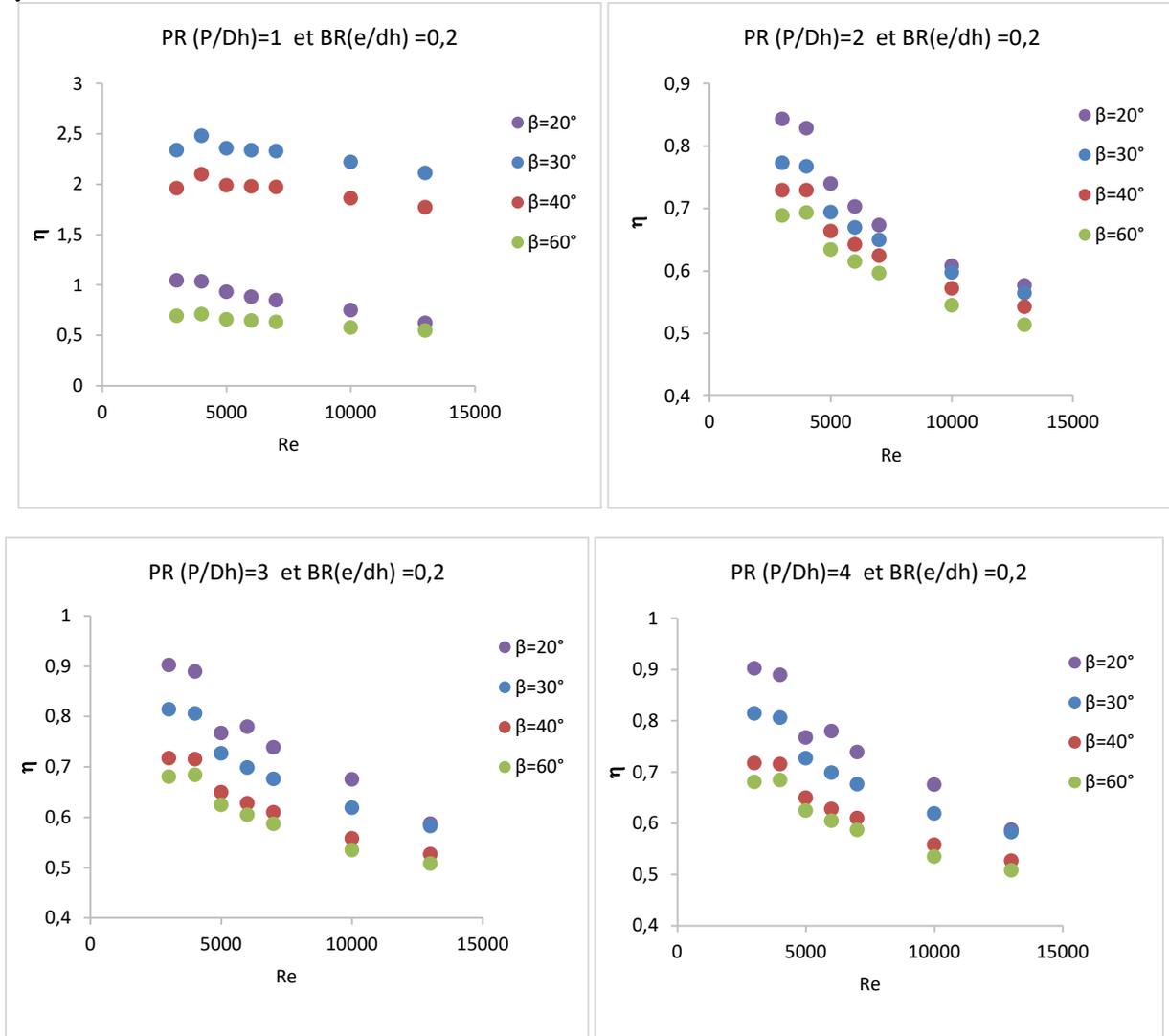


Figure 9 - Effet du nombre de Re sur le rendement η pour différents angles d'inclinaison β (PR =1, 2, 3,4 et BR=0.2).

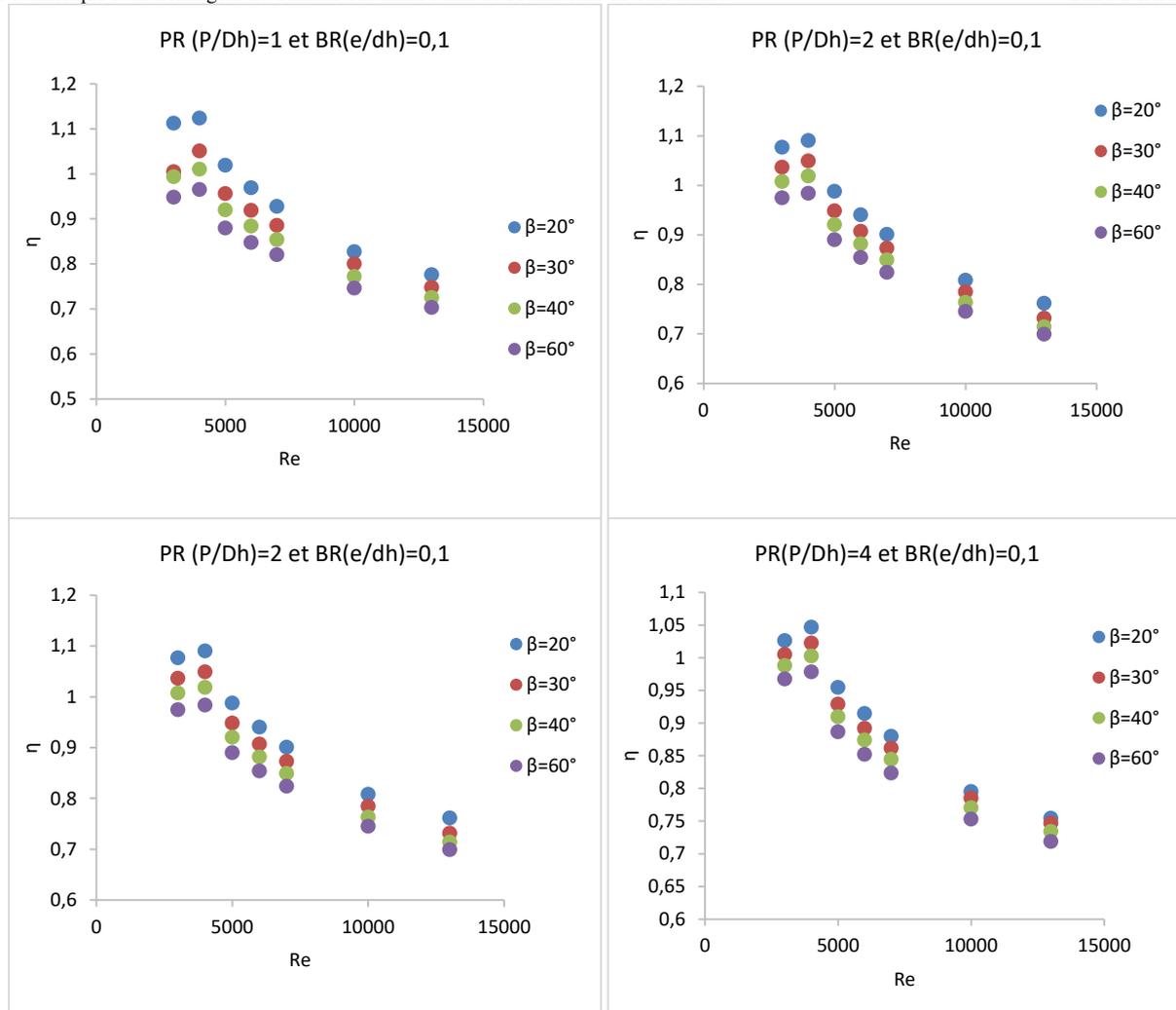


Figure 10 - Effet du nombre de Re sur η pour différents angles d'inclinaison β ($PR = 1, 2, 3, 4$ et $BR = 0.1$).

6.5. Le cas où on inverse l'écoulement principal

Dans cette partie, afin d'améliorer au maximum le facteur de performance thermohydraulique, nous avons essayé de voir l'impact d'inverser les conditions d'entrée et de sortie de notre échangeur. Le fait d'inverser le sens de l'écoulement la forme géométrique des chicane change complètement. Pour ce faire et d'après nos résultats ultérieurs, nous avons pris le cas qui nous a fournis le meilleur facteur de performance correspondant aux paramètres géométriques suivantes : $\beta = 30^\circ$, $BR = 0,2$ et $PR = 1$ à $4000 Re$ (voir Figure 10 : η en fonction de Re cas $P=50$)

Dans l'ensemble l'inversement des conditions d'entrée et de sortie (cas AA) a donné une amélioration acceptable, des performances de l'échangeur, mais elle reste peu significative en comparaison avec le premier cas examiné (cas A) (voir histogramme figure 12).

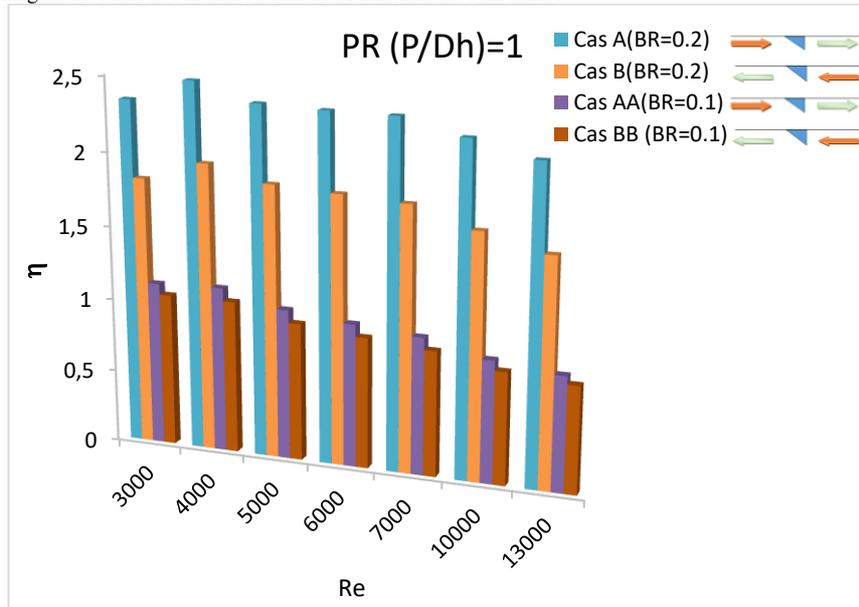


Figure 11 - Comparaison du rendement entre le cas d'un écoulement de gauche à droite et le cas d'un écoulement inversé des valeurs optimales obtenues aux conditions : ($\beta=30$, $BR=0,2$ et $PR=1$) et ($\beta=20$, $BR=0,1$ et $PR=1$).

7. Aspects dynamique et thermique

7.1. Contours de température [K]

D'après la figure 13, on peut facilement constater que l'amélioration du transfert thermique procuré, par l'utilisation de déflecteurs (promoteurs de turbulences), est plus importante par rapport au cas d'un tube lisse. On observe que le gradient de la température statique proche de la partie nervurée diminue avec l'augmentation du nombre de Reynolds en raison de l'augmentation du courant d'air frais provenant de la section d'entrée. Cela permet de réduire l'écart entre la température de la masse d'air et celle de la paroi et, par conséquent, d'augmenter le nombre de Nusselt.

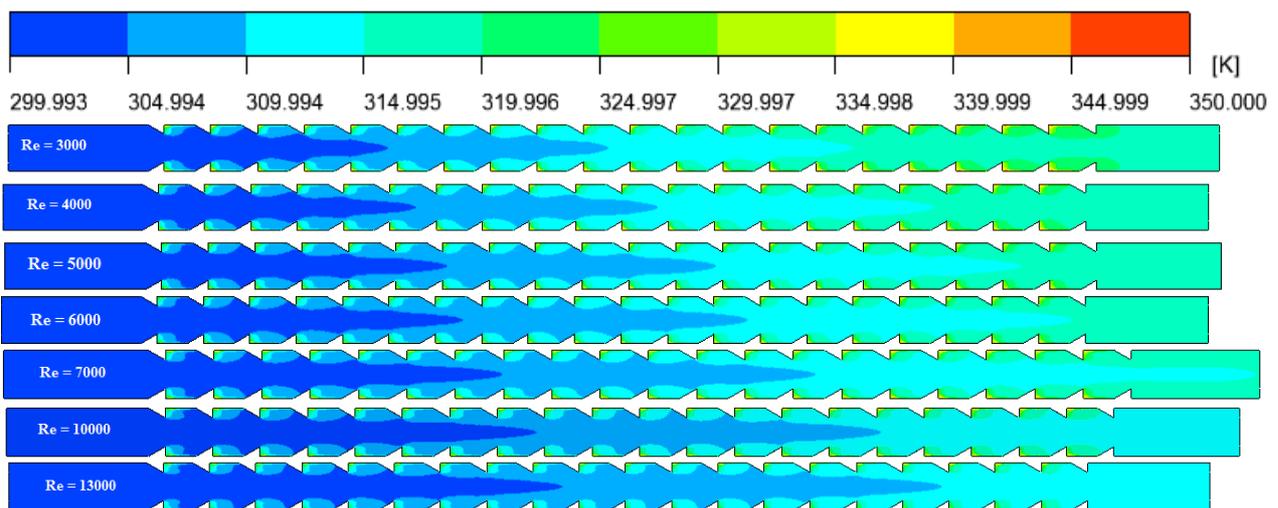


Figure 12- Courbes de température pour $BR=0.2$ et $\beta=30^\circ$ à différents Re

7.2. Contours de pression [Pa]

Comme mentionné dans les parties précédentes, le coefficient de frottement, exposé, est calculé par la différence de pression le long du capteur. Il est nécessaire de présenter la répartition du champ de pression statique afin d'analyser sa variation sous l'effet des paramètres géométriques des nervures et du débit.

A partir des contours de pression présentés dans la **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**, on observe que la distribution de pression diminue progressivement de l'entrée jusqu'à la sortie et elle est influencée par les rapports du pas et de la hauteur relatifs. En résumant, on peut dire que la chute de pression est intensifiée à la fois par l'augmentation du

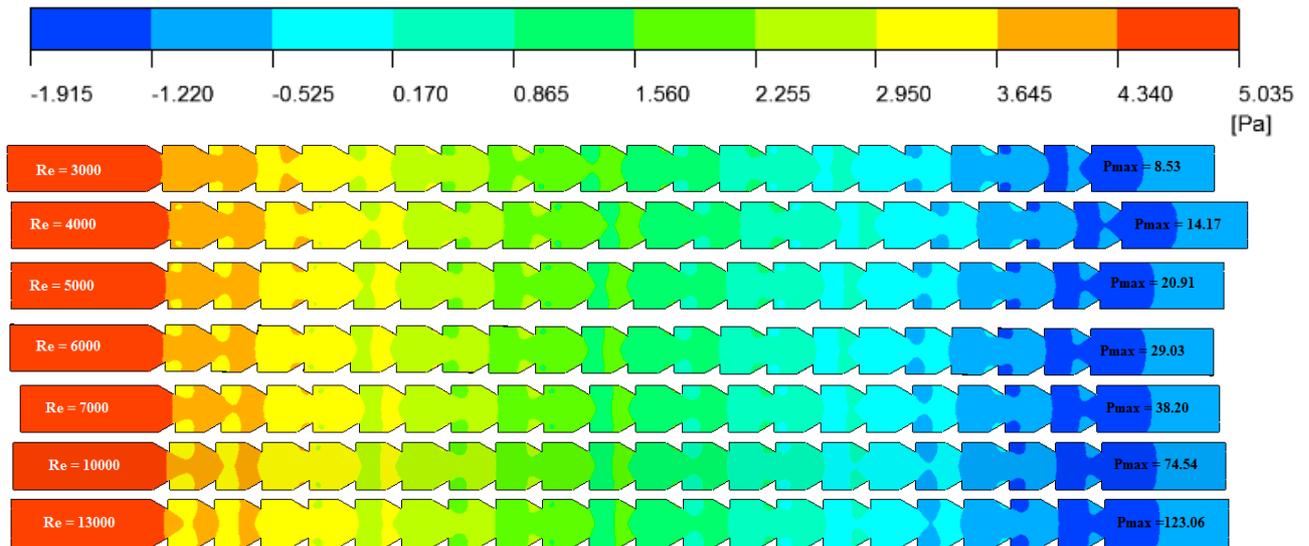


Figure 13-Courbes de pression pour BR=0.2 et $\beta=30^\circ$ à différents Re

7.3. Contours d'énergie cinétique [$m^2 s^{-2}$]

Comme nous l'avons vu plus haut, l'amélioration du transfert de chaleur dépend fortement de la présence des promoteurs de turbulences (chicanes) dans l'échangeur de chaleur. Cette dernière perturbe le développement de la couche limite turbulente dynamique et augmente par conséquent l'intensité de la turbulence, se traduisant par l'augmentation de l'énergie cinétique turbulente. La figure (Fig. 15) présente les distributions de l'énergie cinétique turbulente k, pour $\beta = 30^\circ$; BR=0,1 ; PR=1 et nombre de Reynolds différent. A partir des contours de l'énergie cinétique k, on peut voir que la distribution de l'énergie cinétique n'est pas uniforme et elle est plus élevée près des chicanes. Cette énergie cinétique turbulente k augmente avec l'augmentation du nombre de Reynolds.

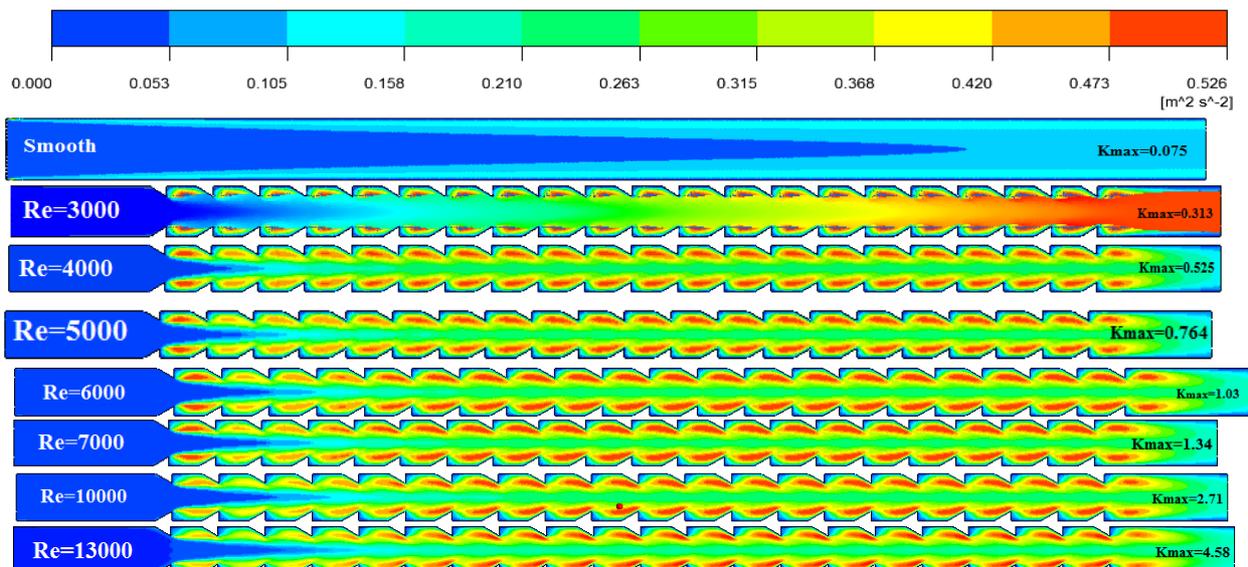


Figure 14 - Energie cinétique de turbulence pour $\beta = 30^\circ$; BR=0,2 ; PR=2 et différents Re.

8. Conclusion

Dans ce travail on a étudié numériquement l'effet de la variation des paramètres géométriques des chicanes (β ; PR; BR) sur le champ dynamique de l'écoulement du fluide et l'amélioration du transfert convectif dans un échangeur tubulaire. Les résultats obtenus ont montré que tous les agencements de chicanes examinés augmentent à la fois le transfert de chaleur en raison de la génération de vortex (Tourbillon) dans l'écoulement et le facteur de friction. Cette étude nous a permis également de montrer l'effet de la disposition des chicanes et leurs formes sur les performances thermo- hydrauliques par rapport à une paroi lisse :

- En comparaison avec le cas lisse, la présence de rugosités perturbe l'écoulement est augmenté à la fois le transfert convectif et les pertes de pression.
- Le nombre de Nusselt augmente avec l'accroissement du nombre de Reynolds et le décroissement de l'angle d'inclinaison β en raison de la modification de la sous-couche laminaire de l'écoulement turbulent pleinement développé dans la région proche paroi.
- Parmi tous les paramètres examinés le rapport de blocage est le plus influençant sur le facteur de performance thermohydraulique.
- Les constatations, des résultats obtenus, ont exhibées qu'il y a deux valeurs d'efficacité optimales que on peut les atteindre à un nombre de $Re = 4000$. La première correspond à $\beta=30^\circ$; $PR = 1$; $BR = 0,2$ et la seconde à $\beta =20^\circ$; $PR = 1$ et $BR = 0,1$. Entre c'est deux valeurs de disposition des chicanes le premier cas est plus intéressant.

Les résultats de cette contribution constituent un apport important pour l'enrichissement de la bibliographie relative à l'amélioration des performances des échangeurs de chaleur .En perspective, nous recommandons pour les travaux de futur en ce domaine les points suivants :

- On recommande d'approfondir l'étude par l'utilisation de d'autre forme (carré, rectangle, quadrilatère... etc.) pour déterminer la meilleure forme des chicanes ainsi que les paramètres optimums (la largeur, la hauteur, l'épaisseur, le nombre, ... etc.)
- Etudier le couplage entre deux formes ou plus de chicanes (transversale, aile et pliée par exemple) dans le même échangeur
- On recommande de compléter le présent travail par une étude technico-économique détaillée afin de déterminer le gain économique pour une entreprise industrielle par exemple.
- Fournir des renseignements sur l'importance et sur l'homogénéité d'implantation de d'autres types des chicanes, ainsi que leurs dispositions dans le tube sera un axe très important en futur.

REFERENCES

- [1]- Alam T., Kim M.-H., 2018, "A comprehensive review on single phase heat transfer enhancement techniques in heat exchanger applications", *Renew. Sustain. Energy Rev.* 81, 813–839.
- [2]- Sheikholeslami M., Gorji-Bandpy M., Ganji D. D., 2015, "review of heat transfer enhancement methods: Focus on passive methods using swirl flow devices", *Renew. Sustain. Energy Rev.* 49, 444–469.
- [3]- Kumar B., Srivastava G.P., Kumar M., Patil A.K., 2018, "A review of heat transfer and fluid flow mechanism in heat exchanger tube with inserts", *Chem. Eng. Process. – Process intensif.* 123, 126–137.
- [4]- Nakhchi M., Esfahani J., 2019, "Numerical investigation of rectangular-cut twisted tape insert on performance improvement of heat exchangers", *International-Journal-of-Thermal-Sciences-1290-0729*
- [5]- Sun Z., Zhang K., Li W., 2020, "Investigations of the turbulent thermal-hydraulic performance in circular heat exchanger tubes with multiple rectangular winglet vortex generators", *Applied Thermal Engineering* 168, 114-838.
- [6]- Karima A., 2018, "CFD investigations of thermal and dynamic behaviors in a tubular heat exchanger with butterfly baffles", *Frontiers in Heat and Mass Transfer (FHMT)*, 10, 27
- [7]- Boucif Z., Benamara N., 2019, "Numerical Investigation of a Solar Air Heater (SAH) with Triangular Artificial Roughness Having a Curved Top Corner", *Journal of Applied Fluid Mechanics*, Vol. 12, No. 6, pp. 1919-1928.
- [8]- Targui N., Kahalerras H., 2008, "Analyse du transfert de chaleur et de la chute de pression dans un échangeur de chaleur muni de chicanes poreuses", *Congres*
- [9]- Han, J.C., Zhang, Y.M., Lee, C.P., 1991, "Augmented Heat Transfer in Square Channels with Parallel, Crossed and V-Shaped angled Ribs", *ASME Journal of Heat Transfer*, 113, 590-596.
- [10]- Promvong, P., Sripattanapipat, S., Kwankaomeng, S., 2010, "Laminar Periodic Flow and Heat Transfer in Square

Channel with 45° Inline Baffles on Two Opposite Walls," *Int. J. Therm. Sci*, 49, 963–975.

- [11]- Torii, K., Kwak, K.M., Nishino, K., 2002," Heat Transfer Enhancement Accompanying Pressure-Loss Reduction with Winglet Type Vortex Generators for Fin Tube Heat Exchangers, "*Int. J. Heat Mas Transfer*,45, 3795–3801.
- [12]- Kwankaomeng, S., Jedsadaratanachai, W., Promvong, P., 2010,"Laminar Periodic Flow and Heat Transfer in Square Channel with 30°Inclined Baffles," *PEA-AIT Int. Conf. Energy Sus, Dev. Issues and Strategies*, Thailand.
- [13]- Donghui Zhang, 2013, "Numerical Study of Circular Tube inserted Arc Belt on Fluid Flow and Heat Transfer under Laminar Flow", *Key Engineering Materials*, vol 561, pp460-465 .
- [14]- Jiin-Yuh Jang, 2013, "Optimization of the span angle and location of vortex generators in a plate-fin and tube heat exchanger", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol 67, pp 432-444.
- [15]- FLUENT user's guide, Fluent Inc., 2003.
- [16]- Webb, G.Eckert, 1972, "Applications of rough surfaces to heat exchanger design, Int. 1". *Heat Mass Transfer*. Vol. 15. pp. 1647-1658. Pergamon Press 1972.
- [17]- Dittus, F.W., Boelter, L.M.K., 1930, *Heat Transfer in Automobile Radiators of the Tubular Type*, University of California Publications on Engineering, 2 443, Berkley.
- [18]- Gilinsky, V., 1976,"New Equations for Heat and Mass Transfer in Turbulent Pipe Flow and Channel Flow," *Int. Chem. Eng*, 16, 359–368.
- [19]- Moody, L.F., 1944, "Friction Factors for Pipe Flow," *Trans. ASME*, 66, 671–684.
- [20]- Mohamad Omid 2019 "Turbulent heat transfer and fluid flow of alumina nanofluid inside thrène-lobe twisted tube". *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*.
- [21]- Singh, S., Sørensen, K., & Condra, T, (2018), "Investigation of Vortex Generator Enhanced Double-Fin and Tube Heat Exchanger", *Journal of Heat Transfer*, 141(2), 021802. doi:10.1115/1.4042050.



Revue des Matériaux & Energies Renouvelable

Journal home : <https://www.univ-relizane.dz>

ISSN : 2507-7554

E- ISSN : 2661-7595



Validation of experimental tests of NANOINDENTATION with DIGITAL simulation

Open
Access

Djidel Salah Eddine¹ , Mahmoudi Noureddine² , Abel Hurtado-Macías³

¹Industrial engineering and sustainable development laboratory, Relizane university center, 48000 Relizane, Algeria

²Département de Génie Civil & Hydraulique, Université Tahar Moulay Saïda, 20000

³Metallurgy and structural design, Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C., and National Nanotechnology Laboratory, Miguel de Cervantes 120, Complejo Industrial Chihuahua, Chihuahua, C.P. 31109, Mexico

RESUME

Article history:

Received 30 December 2020

Received in revised form 31 December 2020

Accepted 03 July 2021

Keys word: mechanical characterization, nano indentation, finite element method, numerical simulation

In many fields of engineering, Copper and bronze and brass are used. In order to improve the improvement of their uses, it is important to have a reliable technique to determine their mechanical characteristics. The nano indentation technique is a versatile non-destructive test which is recently applied. This document presents a numerical simulation model of the nano indentation test using the commercial finite element code ABAQUS with a BERKOVITCH indenter. For extracting the mechanical characteristics of its materials, such as hardness, and modulus of elasticity, in order to understand the principle and operation of this new method.

Copyright© 2022 - All rights reserved

1. Introduction

In the field of mechanics, the nano indentation technique is rapidly gaining attention over the past twenty years as a useful experimental tool [1-3]. For the characterization of mechanical properties Nano indentation is mainly used in small local areas of the sample. This technique is applied to small parts without disturbing their structure, is because it requires samples of small volume that can be taken without destroying the constructive element studied, it is considered a non-destructive (NDT) and in allowing indentation depths of less than 200 nm (ISO 14577-1 [5]). Elastic mechanical parameters of materials can be determined. In the use of this technique especially in the part of unloading force-displacement data. However, for copper and bronze and brass, the elastic response is influenced by the elastic characteristics. Even at shallow depths, the results of the Nano indentation test on coated specimens. In most cases, it is accepted that to minimize the effect of stiffness on the measured load displacement curve, the thickness should be at least ten times greater than the penetration depth of the entry [4] , during the indentation program. The resulting indentation curve will continuously record the indentation load versus displacement, Usually representing the penetration depth of the indentation, the indentation program consists of the following steps: up to a certain load level prescribed loading, and the holding period at maximum load and unloading. By different experimental method The young's modulus and the indentation hardness can be estimated using the unloading part of the indentation curve from which the mechanical properties are obtained. To evaluate the nanoindentation data has its restriction to linear elastic housing The theory behind commonly applied methods and does not take into account the condition of the initial structure and residual stresses. To solve the corresponding mathematical problem recent

numerical simulations of the nano indentation experiment, which use the finite element method (FEM) to evaluate the mechanical properties have been used in elastic and plastic stress regions [7, 8] .

This numerical and experimental simulation gives the opportunity to obtain not only the hardness and the elastic modulus of the material studied, but also the distribution of the stress and strain fields under the tip of the input and to calculate the mechanical parameter of the model. .

2. Theoretical aspects

In the nanoindentation test, the indenter is pushed into the surface of the sample producing deformation of the material (Fig.1). the displacement *h* and the load *P* are monitored with great precision, in the nanoindentation machines shown schematically in (Fig 2).During the nanoindentation process, the indenter enters the sample up to the maximum load *P* max, where the corresponding penetration depth is *h* max. When the penetrator is removed from the sample, unloading displacement is also continuously monitored until the load reaches zero and a final or residual penetration depth *h_f* is measured.

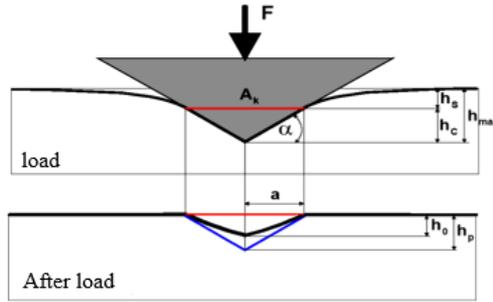


Fig 1 Elasto-plastic deformation at the maximum applied load *P* max and plastic deformation after releasing the load.

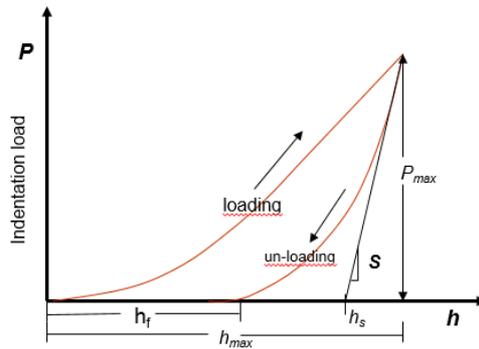


Fig 2 Force-displacement curve indentation test

to accurately calculate *H* and *E* from the indentation charge displacement data, Oliver and Pharr developed a method in the 1990s without the need to measure deformed area under the microscope .

the contact stiffness *S* by differentiating the unloading curve adjustment, and evaluate the result at the maximum depth of penetration:

$$S = \left(\frac{dP}{dh} \right)_{h_{max}}$$

As mentioned above, depth-sensing indentation measurements are used to determine the hardness and the Young’s modulus. The hardness, *H_{IT}*, is evaluated by (e.g., Oliver and Pharr, 1992)

$$H_{IT} = \frac{P}{A_{cp}}$$

where *P* is the maximum applied load and *A_{cp}* is the contact area of the indentation, at the maximum load. The reduced Young’s modulus, *E_r*, is determined from (e.g., Sneddon, 1965; Oliver and Pharr, 1992)

The contact depth is estimated according to:

The method of Oliver and Pharr [sink-in] (Eq. (1)), and the method of Loubet et al. (pil-up) (Eq. (2))

$$h_c = h_{max} - \varepsilon \frac{P}{S}$$

$$h_c = 1,2 \left(h_{max} - \varepsilon \frac{P}{S} \right)$$

where ε is a constant which depends on the geometry of the penetrator . the value $\varepsilon = 0.75$ become the value used for the analysis According to an empirical observation with Berkovich and cube corner indenters. h_{max} is the maximum depth P is the maximum applied load and S is stiffness.

an ideal Berkovich indenter, the projected area can be calculated as:

$$A_{cp} = \frac{P}{24,5h_c^2}$$

The reduced Young's modulus, E_r , is determined from (e.g., Sneddon, 1965; Oliver and Pharr, 1992)

$$S = \frac{2}{\beta\sqrt{\pi}} E_r \sqrt{A_{cp}}$$

where β is a geometrical factor depending on the indenter (berkovitch 1,034) . E_r is the reduced elastic modulus of the contact defined as:

$$\frac{1}{E_r} = \frac{1 - \nu^2}{E} + \frac{1 - \nu_i^2}{E_i}$$

with E and ν are the elastic modulus and the Poisson ratio of the sample and E_i and ν_i the elastic and Poisson's modulus report of the indenter. during nanoindentation For penetrators such as the Berkovich pyramid, for considering that the sample and the indenter have an elastic deformation The module reduced to Eq. (17) is used. To indent it in diamond, the values are frequently used $E_i = 1140\text{GPa}$ and $\nu = 0.07$. Equation (18) requires knowing the sample report which is generally unknown. One possibility is to use a value $\nu = 0.33$ which produces in most materials on an uncertainty of 5% in the calculated value of E.

3. numerical simulation

The commercial finite element code ABAQUS is used for these digital examples. the contact pair model is first defined, In ABAQUS. The body of the master (indenter) and the slave (deformable sample) is identified; the neglect of friction between the body of the master and the slave. It is also assumed that the tip of the input is initially in contact (point contact) with the sample (slave body). The simulations are carried out in a state of great tension.

3.1. Indenter and specimen contact

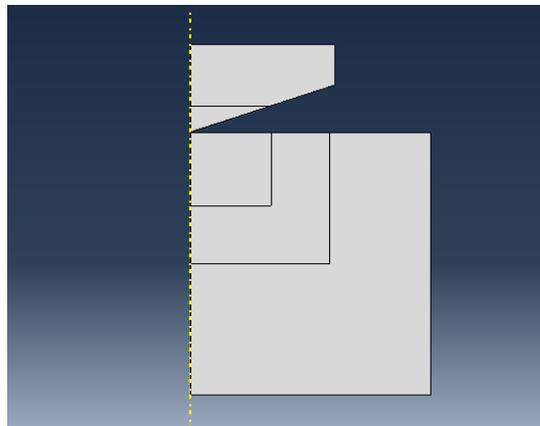


Fig. 3. Indenter et un modèle de contact de spécimen dans Abaqus

3.2. Abaqus

In this model, an indenter is pushed through three deformable tests by applying a load to the focal point of to examine the elastic plastic deformation of the materials. The indenter material is harder than the test material. Young's modulus penetration size = 1000 GPa, poisson coefficient = 0.07, angle of $\nu 70.3^\circ$. Copper Modulus of elasticity 100 GPa, Poisson ratio 0.33.

3.3. Limit conditions

The 2D axisymmetric problem in the Oxy coordinate system is considered with the axis of symmetry along the y direction in our study. The contact between the indenter and the sample is frictionless.

Along the axis of symmetry, no lateral displacement is allowed to preserve the axisymmetric formulation

So the displacement in the x direction is set to zero. in both directions in fixed Displacements on the bottom of the model. The load applied to the indentation can be defined by the displacement or by the force following the classic indentation program the load is applied, During the simulation, which means that we have active loading and unloading steps which are mounted according to the particular loading program used in the nano indentation tests.

Résulte and discussion

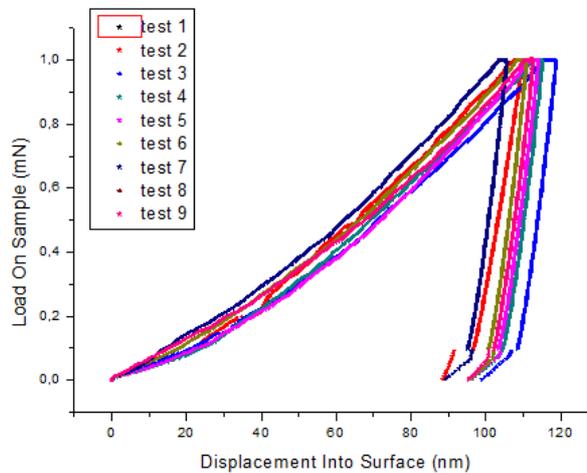


Fig .4

Table a presents the experimental results obtained from copper

Test	E GPa	H Gpa	Displacement nm	Load mN	Stiffness N/m
1	116,7	2,64	109,8	0,998	81610
2	193,4	2,36	113	0,994	133654
3	145,8	2,21	118,8	0,995	108442
4	150,6	2,34	115,1	0,998	108543
5	149	2,38	114,1	0,995	106563
6	174,1	2,47	110,9	0,995	119635
7	175,7	2,7	105,5	0,995	115270
8	165	2,41	112,7	0,998	115649
9	161,4	2,52	110,1	0,998	111015
Mean	159,1	2,45	112,2	0,996	111154
Std. Dev.	22	0,15	3,7	0,002	13800
% COV	13,82	6,25	3,33	0,16	12,41
Minimum	116,7	2,21	105,5	0,994	81610
Maximum	193,4	2,7	118,8	0,998	133654

Hardness of copper

The hardness is varying between 2,71GPa <math> < H_{op} < 2,52 < /math> GPa

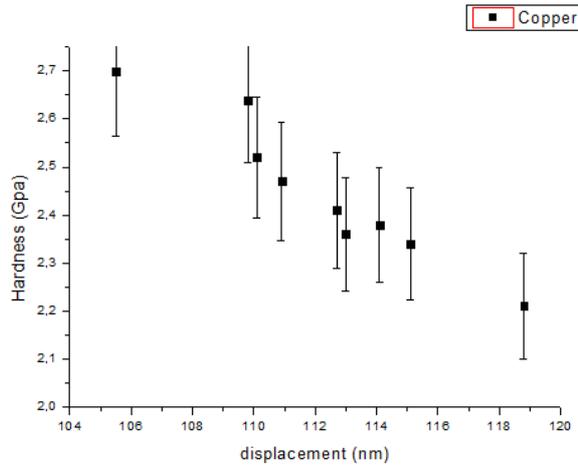


Fig.5. shows hardness vs maximum displacement

we note that the small displacement h [105,5475] nm with the maximum load 0.9950 mn has the greatest hardness [175.7] GPa.is then we note that the greatest displacement h [118.7633] nm with the maximum load 0,995 mn has the smallest hardness obtained [2,21] GPa. This study presents that the hardness has a relation with the displacement.

Young’s modulus

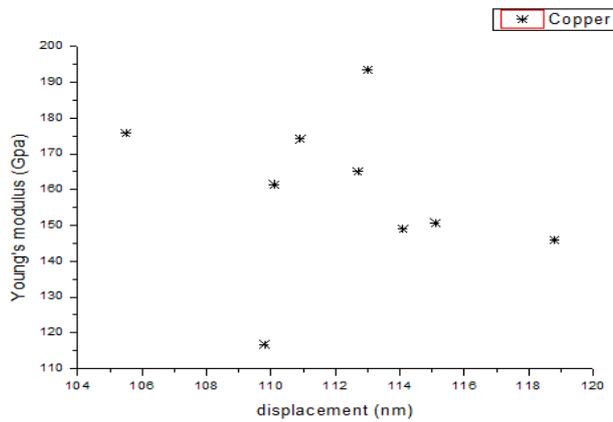


Fig.6. Young’s modulus vs maximum displacement

we note that the small displacement h [105,5475] nm with the maximum load 0.9950 mn has the greatest hardness [2,71] GPa.is then we note that the greatest displacement h [118.7633] nm with the maximum load 0.9949 mn has the smallest hardness obtained [145.8] GPa. This study presents that the hardness has a relation with the displacement.

In the calculation, the elastic deformation occurs in the beginning of the process. The Mises yield criterion is applied in the occurrence of the plastic deformation. The Mises stress equation is given by the expression

$$\sigma_{Mises} = \sqrt{\frac{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2}{2}}$$

where σ_1 , σ_2 and σ_3 are the three principle stresses. When the σ_{Mises} reaches the yield strength (σ_0), the specimen starts to deform plastically. There is no strain hardening behavior of the specimen considered in the model.

Discussion

the copper nanoindentation loading-unloading process was simulated, with the performance of finite element analysis (FE),

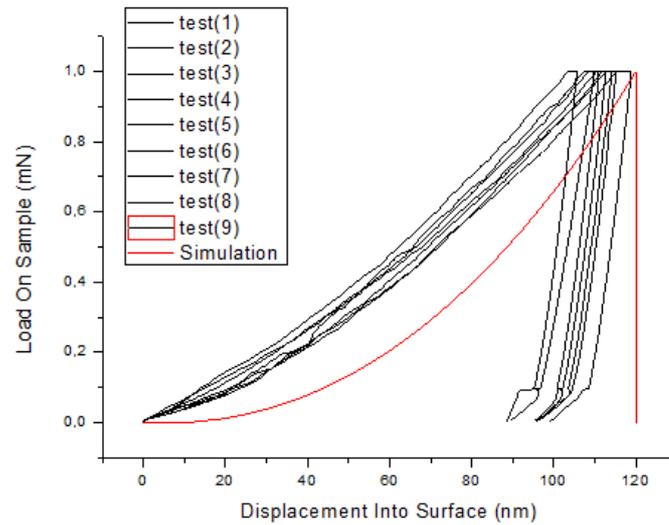


Figure.7.the load displacement curves

Figure 7 shows the load displacement curves resulting from with the prediction of the simulation modeling, and the input data from Table 1. Since the experimental data was used as the basis of the simulation, such as the limit of elasticity and Poisson's ratio, it is not surprising that there is good agreement between the simulation and the experimental results.

Another study was carried out in order to extract the mechanical properties such as hardness using the developed FE model. From the load displacement curves, the unloading curves were used to derive the hardness values by the analytical technique developed by Oliver and Pharr. (11) the comparison of hardness FEM is 91,83% between experiment. The calculated hardness is approximately 2.25 GPa, which is in good agreement with experience. It should be noted that FEM is able to extract the mechanical properties of the material such as hardness. In order to better understand the deformation behavior of the material when the indentation depth is increased. The simulation of the development of plastic deformation in copper has been studied

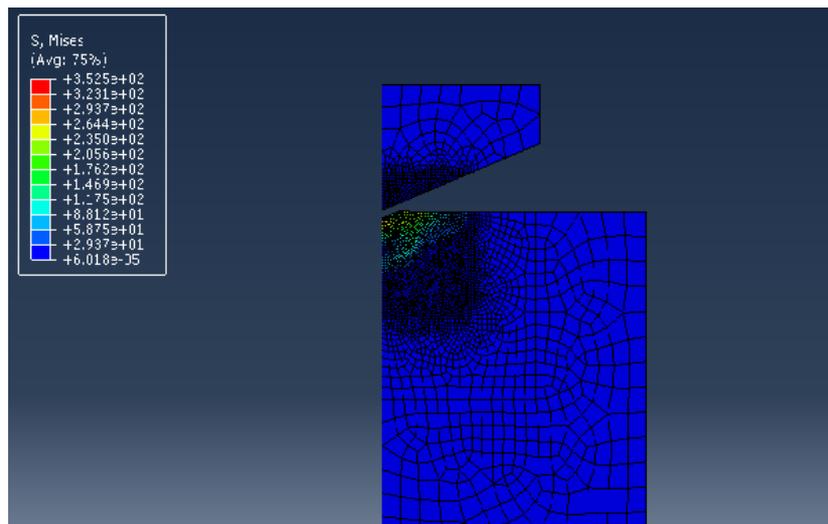


Figure.8. the propagation of the plastic deformation zone in the copper

Figure 8 shows the propagation of the plastic deformation zone in the copper. At the start, the plastic deformation of the sample at the interface (between the indenter and the sample) is initiated and then propagated. At small indentation depths, plastic deformation takes place around the tip region of the indenter and propagates both vertically and laterally as a round

shape At greater indentation depths, plastic deformation also propagates vertically and laterally. Further increase in depth results in further lateral propagation of the plastic zone in the material, as shown in Figure 8. In order to better understand the developed plastic deformation, figure 9 shows the propagation of the plastic deformation zone in the three-dimensional (2-D) model.

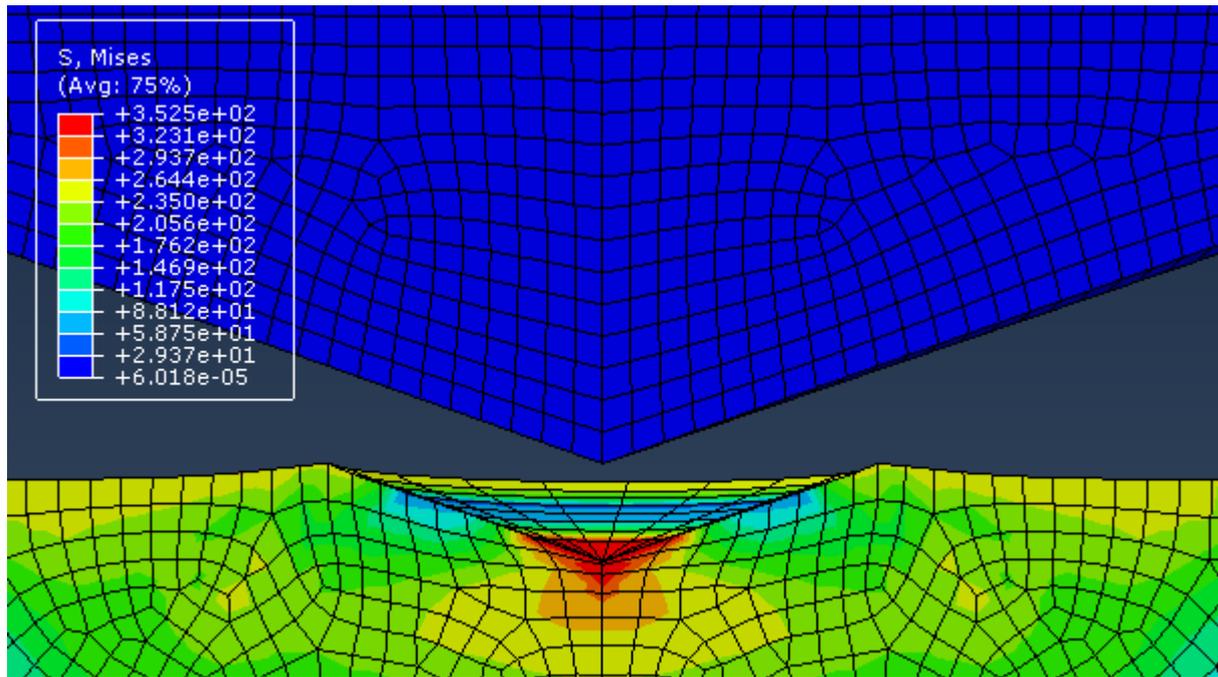


figure .9.the plastic deformation zone in the three-dimensional (2-D) model

CONCLUSIONS

The instrumented indentation test is a technique used to estimate the mechanical properties of materials such as hardness and Young's modulus. This indentation study was performed on a solid metallic material which is copper. The FE model was developed to simulate the nanoindentation response of copper. The model is able to simulate the loading and unloading stages of plastic deformation behavior during the indentation process. The applicability of the model was investigated by copper nanoindentation. The results of the simulation are in good agreement with the experimental results.

Références

1. Nix, W. D. Propriétés mécaniques de couches minces. Metallurgical and Materials Transactions A 20 (11), 2217-2245, 1989.
2. Pharr, G. M. D. L. Callahan, S. D. McAdams, T. Y. Tsui, S. Anders, A. Anders, I. J. W. Ager, I. G. Brown, C. S. Bhatia et S. R. P. Silva. La dureté, le module élastique et la structure des films de carbone très durs produits par le dépôt cathodique-arc avec biais d'impulsion de substrat. Lettres de physique appliquée 68(6), 779-781, 1996.
3. Nix, W. D. Propriétés élastiques et plastiques des couches minces sur les substrats : techniques de nanoindentation. Science et génie des matériaux A 234-236, 37-44, 1997.
4. Bunshah, R. F. Manuel de revêtements durs : Technologies de dépôt, propriétés et Applications. Noyes Publications, 2001
5. BS EN ISO 14577 Parties 1, 2 et 3 : Matériaux métalliques - Test d'indentation instrumentée pour la dureté et les paramètres des matériaux, 2002.
6. Oliver, W.C. et G. M. Pharr. Une technique améliorée pour déterminer la dureté et le module élastique à l'aide d'expériences d'indentation de détection de charge et de déplacement. J. Mater. Rés. 7(6), 1564-1583, 1992.
7. Datcheva, M., Cherneva, S., Stoycheva, M., Iankov, R., et Stoychev, D. (2011). Détermination des caractéristiques des matériaux d'aluminium anodisés au moyen de mesures de nano indentation. Sciences et applications des matériaux, 2(10), 1452.
8. Iankov, R., Cherneva, S., et Stoychev, D. (2008). Recherche des propriétés matérielles des films de cuivre minces par la modélisation finie d'élément du test de micro-indentation. Applied Surface Science, 254(17), 5460-5469.



Revue des Matériaux & Energies Renouvelable

Journal home : <https://www.univ-relizane.dz>

ISSN : 2507-7554

E- ISSN : 2661-7595A



Optimisation d'un chauffe- eau solaire.

Open
Access

BOUALAMALLAHDjamal^{1*}, Merdji Ali², GHAZI Abdelkader¹⁻², Miloudi. Abdelkader¹

¹Laboratory of Materials and Reactive Systems LMSR, Mechanical Department of Engineering
University of SidiBel Abbas, BP 89, Ben M'hidiCity, 22000 SidiBel Abbas, Algeria. e-
mail: Djamal.boualamallah@yahoo.com.

²Univrsity of Mascara Bp 305 road of Mamounia, 29000 Mascara, Algeria. e-mail:

RESUME

Article history:

Received 24 January 2021 .

Received in revised form. 25 January 2021

Accepted 27 June 2021

Keys word: Energie solaire – rendement
énergétique– capteurs solaires – trnsys – chauffe
eau solaire .

Le Capteur solaire thermique est constitué principalement d'une couverture transparente d'un absorbeur, d'une conduite permettant à l'eau de collecter l'énergie cédée par l'absorbeur et d'un isolant. Le principe est le suivant : le rayonnement solaire, dont le spectre se situe essentiellement dans les longueurs d'onde du visible (courte longueur d'onde), passe à travers la couverture transparente (constituée ici d'un vitrage), et arrive sur l'absorbeur, celui-ci s'échauffe, et transmet de l'énergie thermique par convection à l'eau qui circule dans les conduits, et réémet du rayonnement thermique vers l'extérieure (grande longueur d'onde). L'isolant permet de réduire les pertes thermique du capteurs, et bien les chercheurs veulent comparer l'efficacité en termes de rendement énergétique entre deux capteurs solaires différent et d'atteindre un résultat à travers une simulation par le logiciel trnsys qui est plus connu au niveau du domaine des énergies renouvelables notamment l'énergie solaire.

Copyright © 2022 - All rights reserved

1. Introduction

L'énergie a toujours constitué un enjeu vital pour l'homme et la société humaine, Les comportements humaines sont fortement induits par sa disponibilité ou sa non-disponibilité, son abondance ou sa punir. De ces comportements vont découler de nouveau enjeu, en particulier pour l'environnement et les équilibres socio-économiques. La prise de conscience de l'importance de ces enjeux (réchauffement climatique, épuisement de ressources augmentation de couts de la santé, ...)devrait, nous l'espérant, permettre de tendre vers une utilisation plus rationnelle de l'énergie, une optimisation des processus énergétiques que nous mettons en ouvre tous les jours [1]. Les énergies renouvelables ont connu une première phase de développement à l'occasion des chocs pétroliers de 1973 et 1978, puis une période de repli après le contre chocs de 1986, avant de retrouver un second souffle en 1998 à la suite de la signature de protocole de Kyoto, protocole qui prévoit notamment de 5.2% des émissions de gaz à effet de serre des pays riche sur la période 2002-2003 à 1990[2].

La branche des composants solaires et un secteur actuellement en plein développement. Ce contexte a amené plusieurs pays à développer l'intégration des énergies renouvelables dans les bâtiments, notamment par le biais de composants solaire, ces technologies sont en effet bien placé par rapport aux autres filières énergétiques vis-à-vis de la plupart des critères de développement durable :ressources renouvelables, réduction des émissions et des déchets générer sur le cycle de la vie du bâtiments. Les dispositifs solaires ayant le plus d'impact sur l'environnement puisqu'ils produisent à partir de sources renouvelable et non polluante, En d'autre termes, l'intensité du soleil ne diminue pas quand on pose des capteurs solaires, le vent ne s'arrête pas de souffler si on installe des éoliens. En revanche les réserves de pétrole, de charbon, de gaz naturel, et d'uranium diminuent irrémédiablement lorsqu'on les exploite [1].

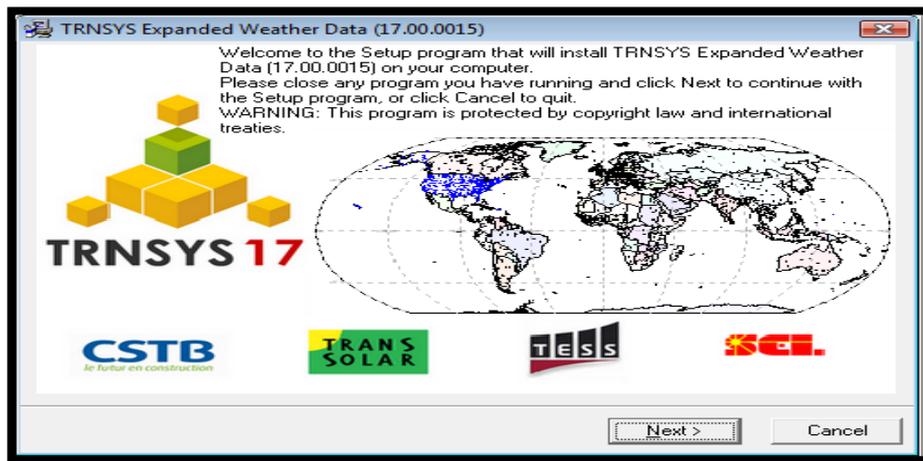
Il est admis que les composants solaires intégrés améliorent le bilan environnemental. Cependant, les concepteurs désirant intégrer de tels composants ont besoin d'outils d'aide à la conception qui permette d'argumenter des

projets, de comparer des variantes, ou encore, si tel était le cas, de valider la conformité du projet par apport à une existante. A la fin des années 80, deux types d'outil existaient pour étudier la performance thermique des dispositifs solaires : les méthodes simplifiées, et les outils détaillés (TYRNSYS, COMFIE, DOE2 , ESP...), très peu utilisés car trop couteux en temps de saisie et d'apprentissage[3], [4].

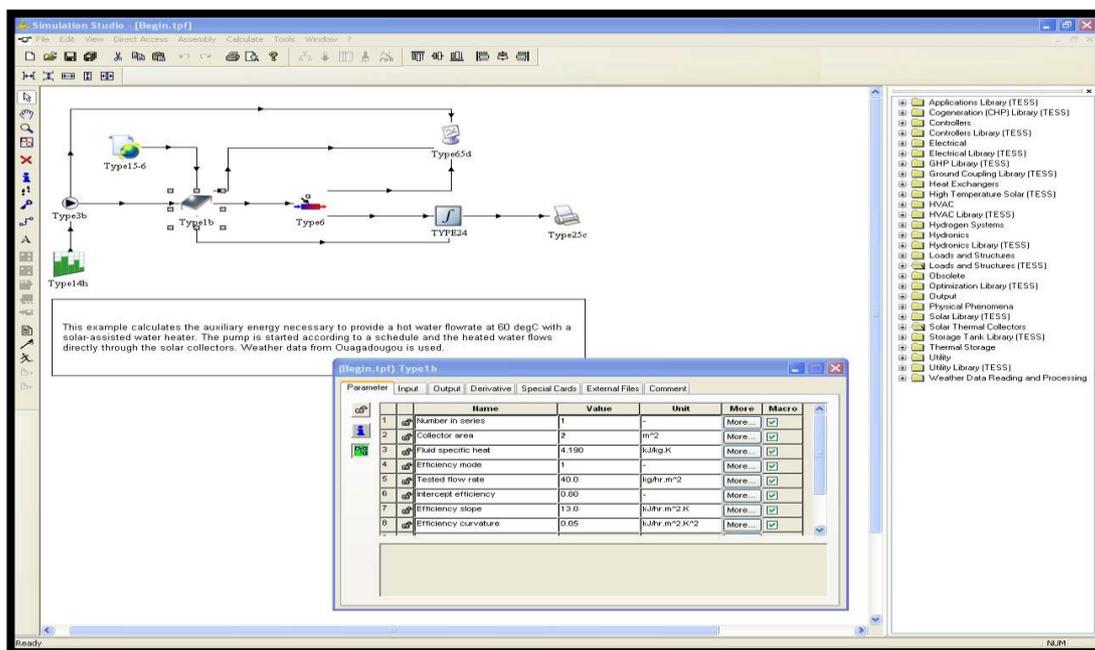
Le travail effectué dans cet article a pour but de comparer en termes de rendement et d'efficacité entre deux types de capteurs solaire, de plus on prévoit l'angle d'inclinaison optimal pour avoir l'effet de l'inclinaison sur la température de sortie pour une installation d'un chauffe eau solaire.

La simulation thermique dynamique permet de faire « vivre virtuellement » la situation sur une longue période, afin d'étudier le comportement prévisionnel pour des résultats proches de la réalité. Pour valider Les solutions retenues, on a choisi pour la simulation le logiciel TRNSYS pour les divers avantages qu'il présente[5].

2. Interface de TYRNSYS:



La figure1:-interface de l'installation du logiciel (TYRNSYS). [6].



La figure2:-interface du plan du travail (TYRNSYS). [7].

3. Présentation du logiciel TRNSYS:

TRNSYS est un environnement de simulation dynamique permettant de simuler de manière fine le comportement d'un système thermique complexe. TRNSYS est disponible depuis 1975. Il a inspiré de très nombreux développements d'autres Logiciels de simulation, qui utilisent soit son solveur générique, soit certains de ses modèles, Soit les deux (Energy 10, Energy+, CA-SIS, HVACSIM+,...).

TRNSYS est basé sur une approche par schéma-bloc. Cette approche modulaire permet à la fois de décomposer des problèmes complexes en plusieurs problèmes moins complexes et de travailler dans un environnement « ouvert », permettant de rajouter de nouveaux composants et concepts. Un projet de simulation TRNSYS consiste donc à choisir un ensemble de modèles mathématiques de composants physiques (en s'appuyant soit sur des modèles existants dans les bibliothèques de modèles de TRNSYS, soit en les créant) et à décrire les interactions entre ces modèles. L'environnement graphique IISiBat 3 assiste l'utilisateur dans ces deux étapes avec un éditeur de modèles et un éditeur de projets. Chaque icône d'une fenêtre de projet IISiBat représente en effet un sous-programme (traditionnellement écrit en FORTRAN, sachant que la version 17 de TRNSYS permet l'utilisation de n'importe quel langage de programmation capable de générer une DLL Windows - C, C++, ...). Chacune de ces boîtes noires possède un jeu de variables d'entrées et un jeu de variables de sortie. Connecter les icônes revient à créer des connexions entre ces variables. L'utilisateur a la possibilité de rajouter des « boîte », définir de nouveaux algorithmes, pour simuler le comportement de nouveaux types d'objets qui n'existent pas dans la version standard de TRNSYS. Ceci est possible en spécifiant des équations directement (sans passer par un langage de programmation), en assemblant des modèles existants dans des « macro modèles », en dérivant des nouveaux modèles à partir de modèles existants par extension ou en créant des modèles entièrement nouveaux, en utilisant un langage de programmation tel que FORTRAN, C ou C++, voire même des applications externe comme le solveur d'équations générique EES. [8].

Et ensuite TRNSYS 17 contient un grand nombre de modèles standards (Utilitaires, Stockage Et Thermique, Équipement, Charges et Structures, Échangeurs de Chaleur, Hydraulique, Régulateurs, Composants électriques/Photovoltaïque, Capteurs solaires, ...). Il suffit de les Interconnecter dans un éditeur de projet pour définir un projet de simulation. TRNSYS profite Également d'une active communauté d'utilisateurs, qui mettent au point des modèles «freeware », accessibles gratuitement à tout utilisateur.

Plusieurs bibliothèques de modèles TRNSYS existent également en tant que produits commerciaux supplémentaires, développés par des bureaux d'études spécialisés. Il existe plusieurs modèles de bâtiments. Le modèle le plus complet permet de simuler de façon très détaillée les installations des chauffe eau solaire et le comportement thermique d'un bâtiment multi-zones (température ambiante, besoins d'énergie, humidité de l'air pour chaque zone et chaque surface ; gains par infiltration / ventilation, couplage convectif avec d'autres zones ; variation de l'énergie sensible ; besoins d'énergie latente ; énergie solaire rentrant par les fenêtres ; confort ; ...). [9].

4. Avantages du logiciel TRNSYS :

Les avantages qu'offre le logiciel TRNSYS sont très nombreux :

En effet, en utilisant l'utilitaire simulation studio permet de simuler une installation solaire en plus facile et permet de faire changer les différents paramètres très facilement. D'autre part, TRNSYS se trouve à être un logiciel modulaire auquel on peut y ajouter des modules écrits soit en fortran ou sous Matlab ou EES ce qui laisse la possibilité d'amélioration du modèle en y incluant différents phénomènes thermo-aérauliques et en y incluant aussi un modèle simulant les systèmes de chauffage, climatisation, ventilation et réfrigération. Enfin, et en comparaison avec le CFD, TRNSYS est plus rapide dans les simulations. Certes, ce n'est pas le même concept ni les mêmes équations à résoudre mais dans notre cas on a besoin de trouver les charges thermiques d'un aréna ce que TRNSYS peut à première vue déterminer[10].

5. les outils de l'environnement TRNSYS :

Toute étude ou application de l'énergie solaire en un site donne nécessite une connaissance complète et la plus détaillée possible de l'ensoleillement du site. Ceci s'effectue par la présence d'une station de mesure météorologique fonctionnant régulièrement depuis plusieurs années et dans le cas ou il n'existe pas une station on aura alors recours a certaines méthodes approchées permettant de prédire les caractéristiques du rayonnement solaire[11].

6. Métronome :

Le logiciel Métronome permet de disposer pour TRNSYS, des données climatiques fiables Chaque heure et durant une année. Si on ne dispose pas d'une station météorologique, METENORM peut calculer par interpolation entre différentes station les conditions climatique d'un lieu[12].

7. Données:

Un fichier de données a été choisi dans la base de données de notre code numérique. Les Données proviennent de mesures météorologiques quotidiennes effectuées permet d'obtenir un fichier annuel au pas de temps horaire.

Ce fichier est relatif a un lieu donne: il est constitue des informations suivantes:

Le numéro du jour dans chaque mois ou on fait le calcul.

Le pas de calcul.

La latitude du milieu.

L'orientation du capteur par rapport au sud.

Le flux solaire.

Le coefficient d'albédo

Le coefficient de transmission, d'absorption du vitrage.

La capacité calorifique du fluide chauffant.

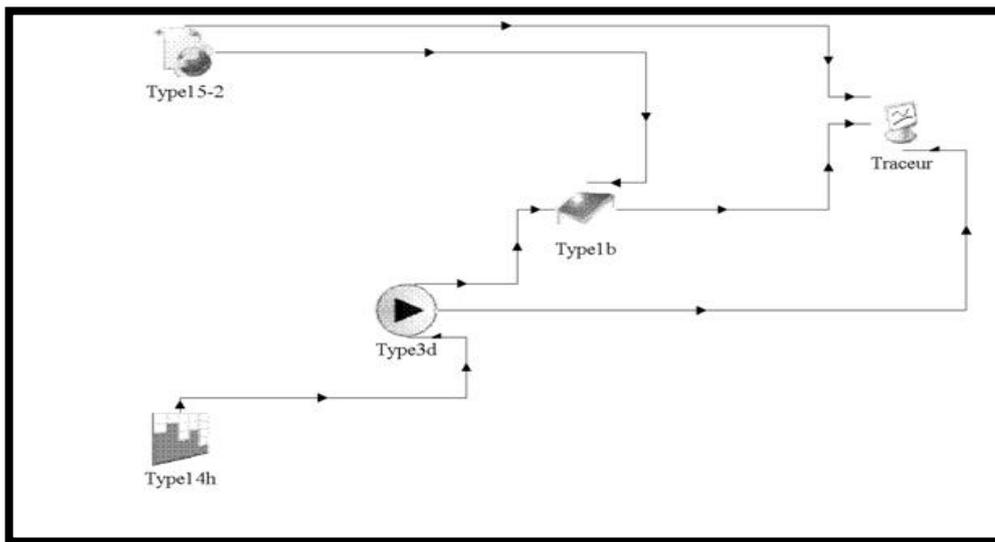
La puissance de la pompe.

Le débit du fluide chauffant dans le capteur.

Le débit d'eau d'utilisation.

La température entourant le stockage, la température ambiante et la température du réseau.

8. Schéma de l'installation d'un chauffe eau solaire:



La figure3- :schéma de l'installation d'un chauffe eau solaire (TYRNSYS).

9. Les différentes composantes de l'installation:

- Les données météorologiques.
- Pompe.
- Capteur solaire plan (à eau +à air).
- Traceur (l'affichage des résultats).
- Une Source d'eau maîtrise le fonctionnement de la pompe (période du travail, 08:00 à 18: 00).

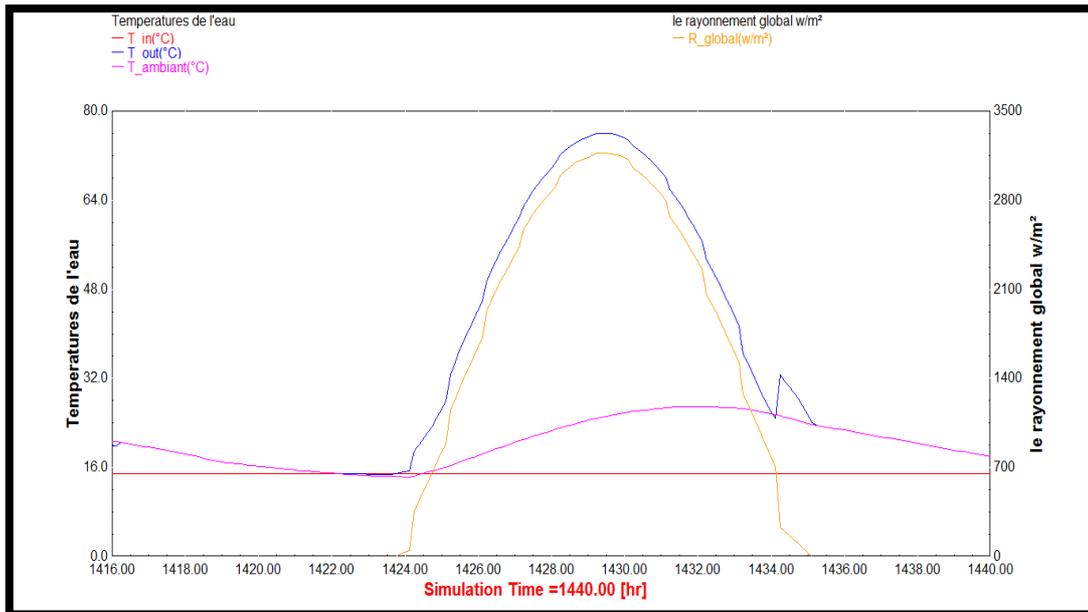
10. l'angle de l'inclinaison optimale au mois du mars(le printemps):

1er cas: l'effet de l'inclinaison sur la température de sortie et on commence de rechercher l'inclinaison optimale pour les deux stations (adrar et Saida): (nous choisissons le capteur à air uniquement).

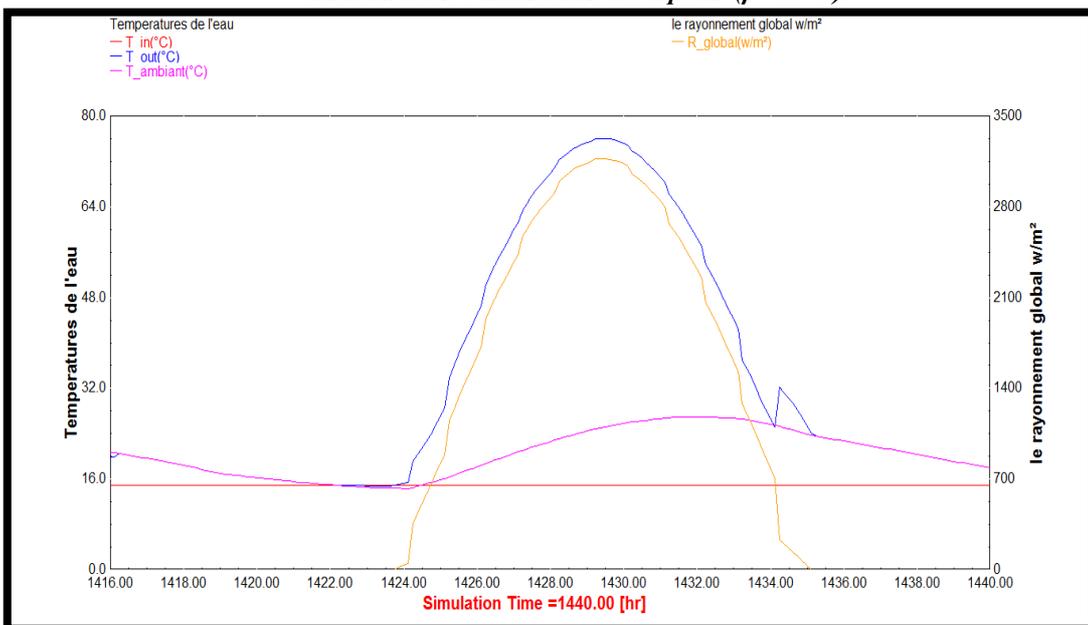
On suppose que tout les facteurs sont constants que la température de sortie elle serait variée en fonction de l'inclinaison, et on suppose que l'orientation en plein sud .l'azimuth($\alpha=0^\circ$). (pour les angle normaliser $\beta=(30^\circ,45^\circ,60^\circ)$).

La première station: adrar.

La figure 4-nous montre que la température maximale pour une inclinaison de 30° est 74.86°C à 14:00h.

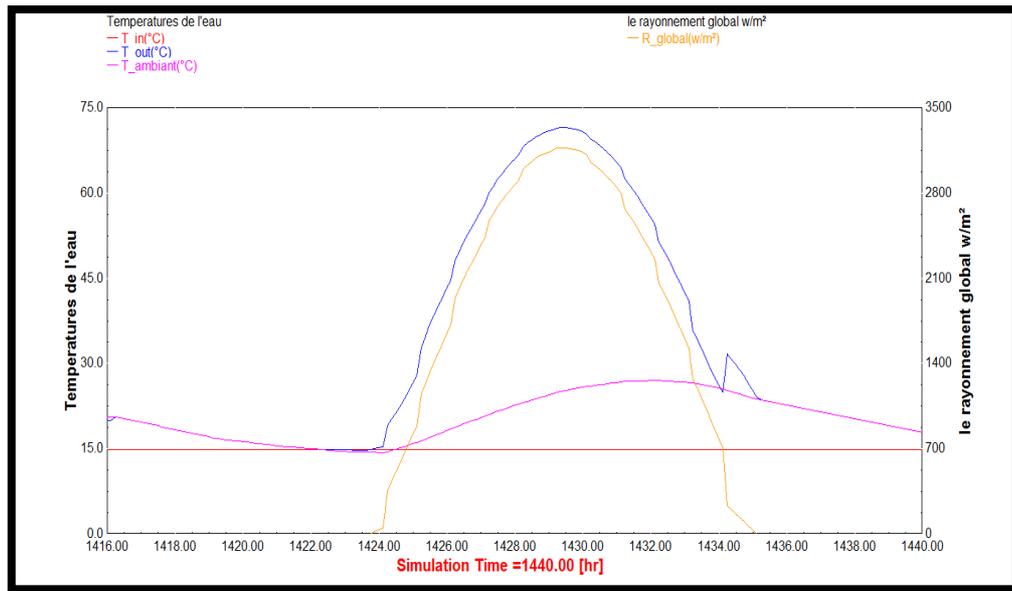


La figure 4- : représente l'évolution de températures de sortie en fonction de du temps avec prendre en considération l'inclinaison du capteur ($\beta =30^\circ$).



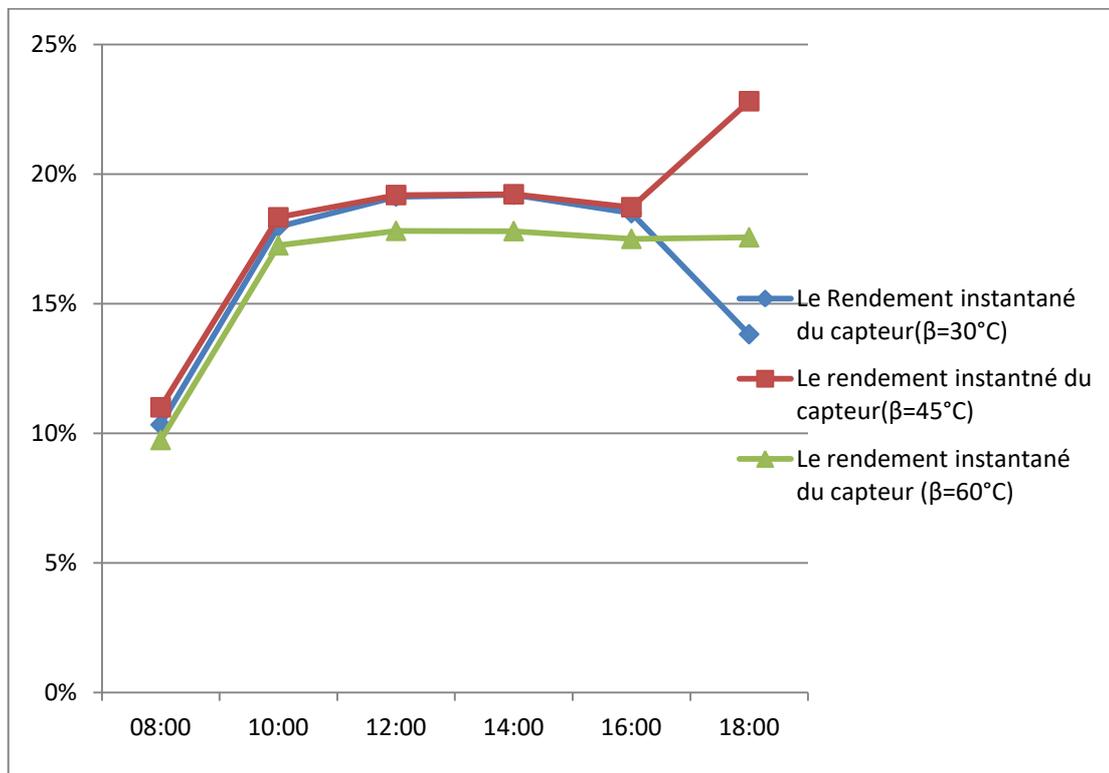
La figure 5- :représente l'évolution de températures de sortie en fonction de du temps avec prendre en considération l'inclinaison du capteur($\beta =45^\circ$).

- La figure 5:-nous constatons l'augmentation au niveau de température de sortie son maximum est 74.53°C près de 14:00.



La figure 6-:représente l'évolution de températures de sortie en fonction de du temps avec prendre en considération l'inclinaison du capteur ($\beta=60^\circ\text{C}$).

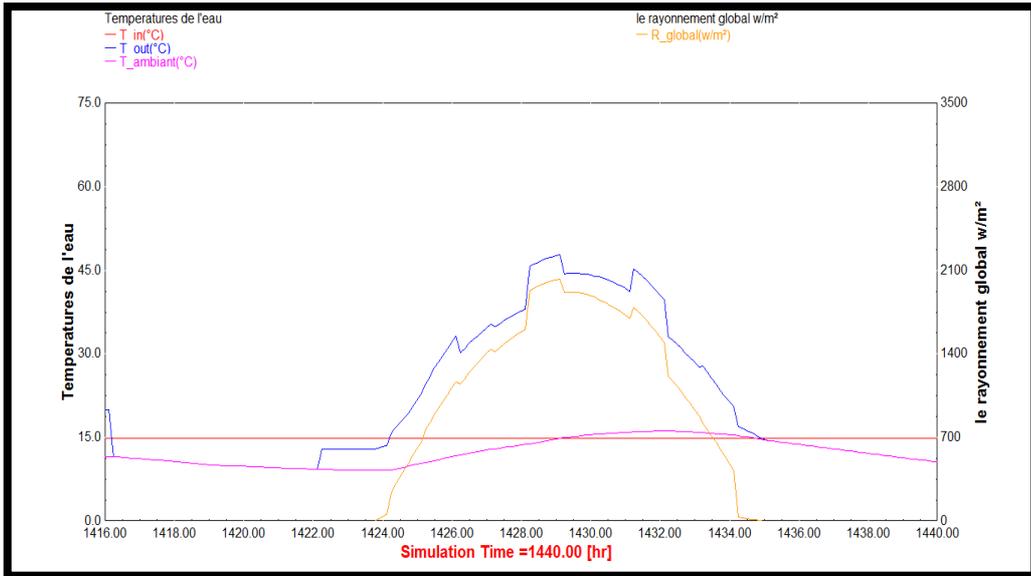
- La figure 6-:montre que la température élevée encore en fonction de l'inclinaison nouvelle son maximum est de 70.49°C près de 14:00.
- Pour avoir l'inclinaison optimale nous devons calculer le rendement instantané du capteur pour nous atteindrons l'angle optimal de l'inclinaison du capteur.



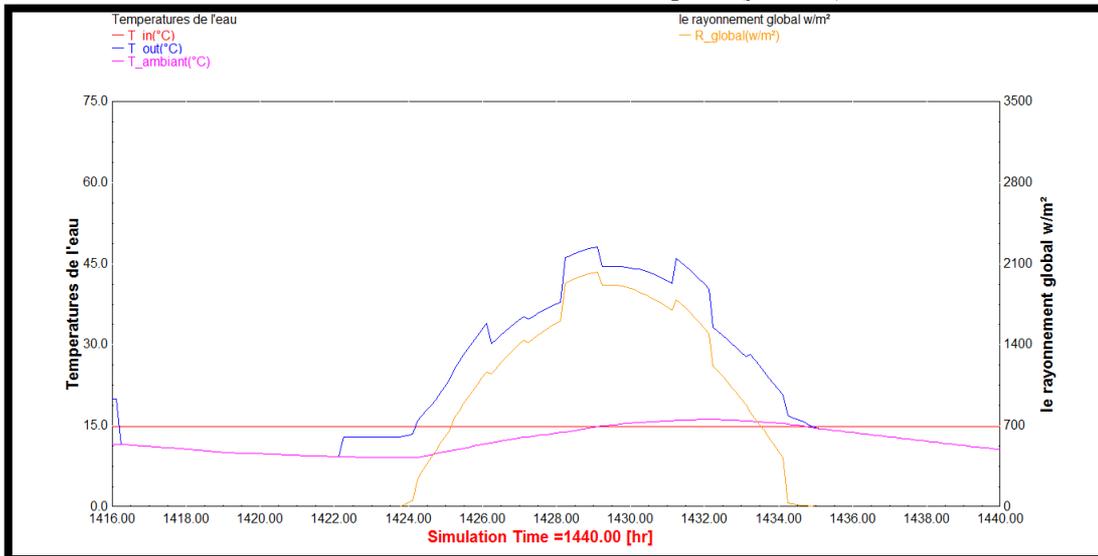
La figure 7-:les courbes du rendement instantané du capteur solaire plan en fonction de l'inclinaison pour la station d'adrar.

- Alors la valeur optimale de l'inclinaison $\beta =45^\circ\text{C}$ pour avoir le meilleur rendement instantané du capteur concernant la zone d'adrar pendant une journée du mois de mars(printemps).

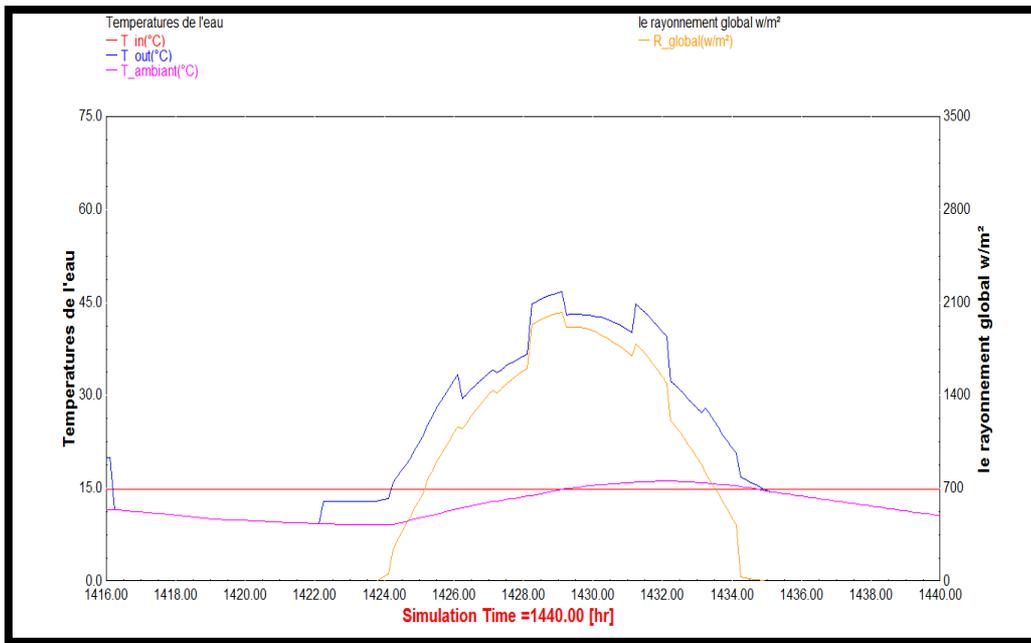
➤ **La deuxième station: Saida.**



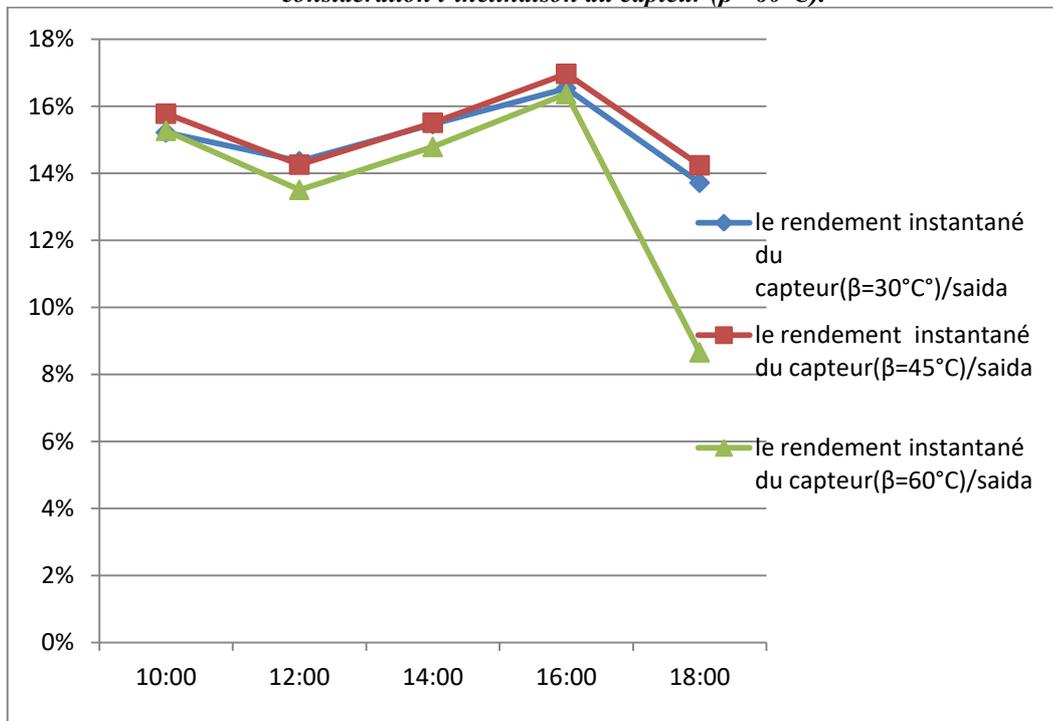
La figure 8- :représente l'évolution de températures de sortie en fonction de du temps avec prendre en considération l'inclinaison du capteur ($\beta = 30^\circ\text{C}$).



La figure 9- :représente l'évolution de températures de sortie en fonction de du temps avec prendre en considération l'inclinaison du capteur ($\beta = 45^\circ\text{C}$).



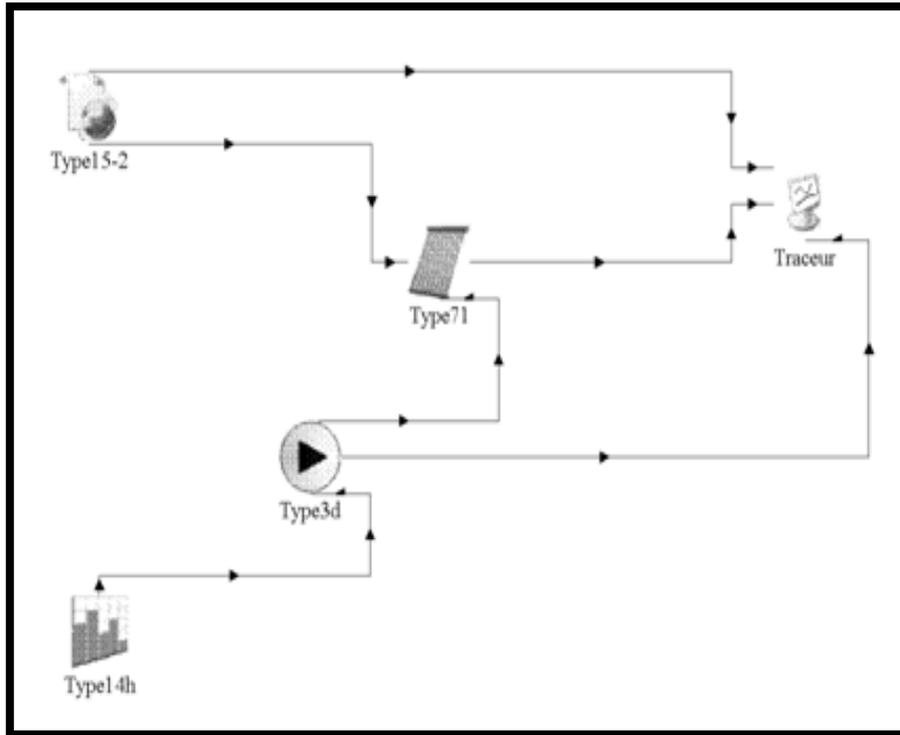
La figure 9- :représente l'évolution de températures de sortie en fonction de du temps avec prendre en considération l'inclinaison du capteur ($\beta = 60^\circ\text{C}$).



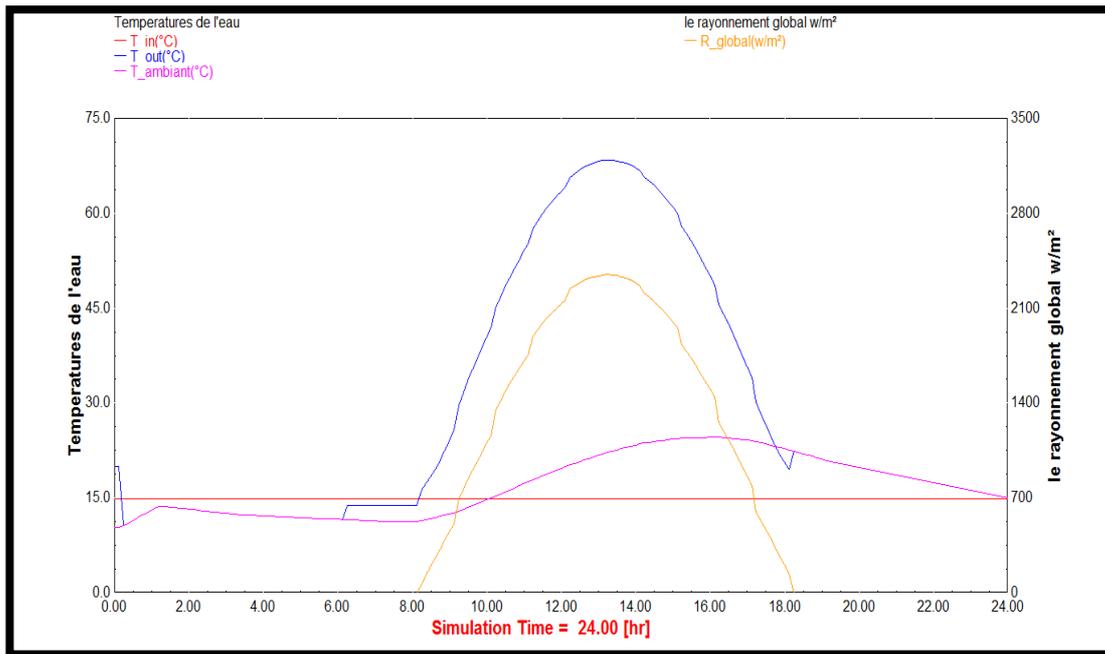
La figure 10-:les courbes du rendement instantané du capteur solaire plan en fonction de l'inclinaison pour la station de saida

- Alors la valeur optimale de l'inclinaison $\beta = 45^\circ\text{C}$ pour avoir le maximum de rendement instantané concernant la zone de saida pendant une journée du mois de mars.

11. Comparaison entre un capteur solaire plan et un capteur solaire a tube sous vide.

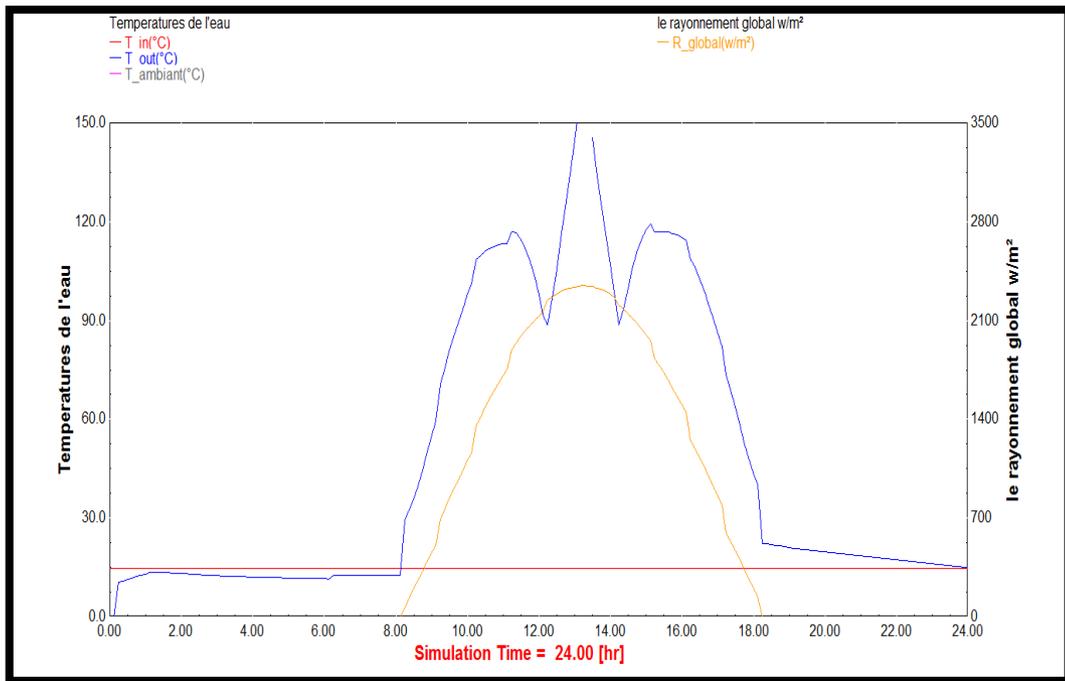


La figure11- :schéma de l'installation d'un chauffe eau solaire capteur sous vide (TYRNSYS). *1 janvier*



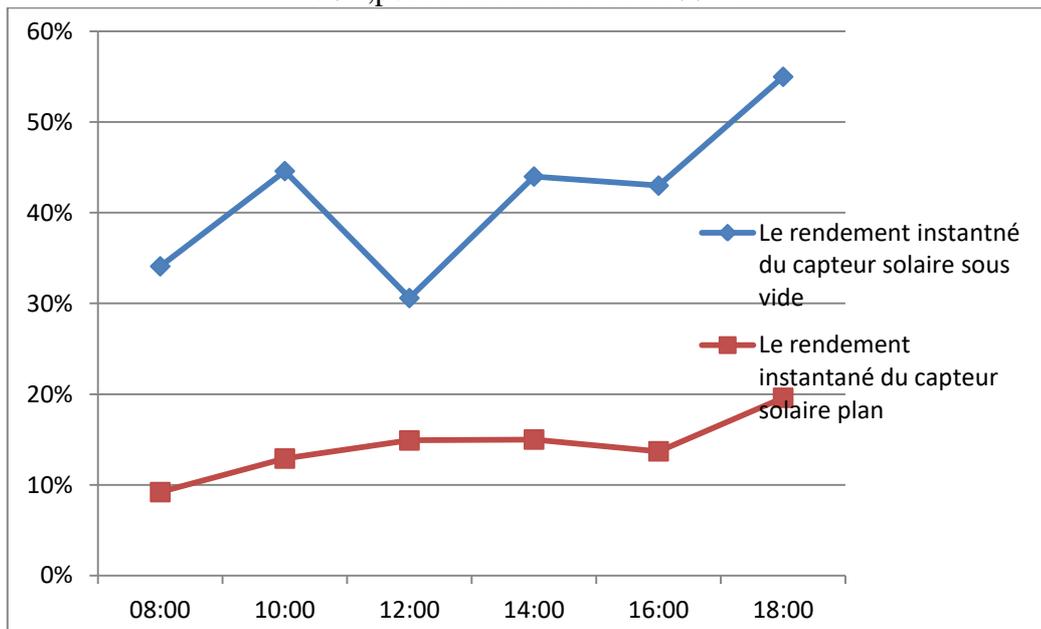
La figure12- :évolution de température de sortie et d'entrée et ambiante avec le rayonnement global pour un capteur plan*adrar*

- Pour la figure12- :lors de l'utilisation un capteur plan vitré nous atteindrons une température de 70°,pour l'irradiation de plus de2100w/m². *1janvier*



La figure13- :évolution de température de sortie et d'entrée et ambiante avec le rayonnement global pour un capteur plan a tube sous vide*adrar* .

Pour la figure13- : lors de l'utilisation un capteur a tubes sous vide nous atteindrons une température de 70° ,pour l'irradiation de 2100w/m².



La figure14- :comparaison en terme d'optimisation les deux rendements instantané du capteur plan vitré et sous vide en fonction du temps.

12. Conclusion:

Nous remarquons dans l'ensemble que le rendement d'un capteur plan vitré est très faible mais surtout se dégrade avec la montée de température, Pour améliorer le rendement du capteur, il faudrait diminuer le pouvoir réfléchissant des surfaces vitrées par l'emploi de verre sélectif, diminuer la convection autour de l'absorbeur par l'emploi de capteur sous vide d'air dans le cas de hautes températures et diminuer la température du fluide caloporteur par un bon calcul de l'installation, et ensuite Nous remarquons que le rendement du capteur sous vide est nettement supérieur au capteur plan vitré, De plus, le rendement ne chute pas aussi vite lors de la montée en température. C'est l'une des raisons pour laquelle le capteur sous vide est utilisé pour des hautes températures. et puis les capteurs tubes ont leurs surfaces d'entrées

(les absorbeurs à l'intérieur des tubes) très petites mais très protégées, très isolées par les tubes sous vide, tandis que les capteurs plans ont une grande surface d'entrée d'absorbeurs , mais l'isolement se fait juste au fond et aux cotés .

REFERENCES.

- [1]- ARCHAD. P, 1986, Etude European Passive Solar Handbook Basic principales and Concepts for Passive Solar Architecture, Commission of European communities.
- [2]- Centre Scientifique et technique du bâtiment,29/11/2000M Réglementation Thermique 2000 :Décrit N 2000 1153.
- [3]- Balcomb.D ,Jones .R.W ,Kosiewicz .C.E, Lazarus,G,S, Farland .R.D , Wray.W.O,1986, Passive solar hand book, Volume 3, American Solar Energy Society.
- [4]- BLAIR N.,Mitchell,W,A ,Beckman .W.A,Deonstration of trnsys use in building simulations, solar energy laboratory ,university on Wisconsin .
- [5]- Bekkerouche .S.M.A, 2008,Modélisation du comportement thermique de quelques dispositifs solaires, thèse de doctorat, Université de tlemcen.
- [6]- WWW.aes-tunisie.com/fr/services/logiciels/trnsys/.
- [7]- <http://sel.me.wisc.edu/trnsys/>.
- [8]- <http://boutique.cstb.fr/energies-environne :ent /272-trnsys.html>.
- [9]- Amoés ,Tutoriel pour la simulation thermique dynamique sous trnsys.Formation Trnsys .
- [10]- Sidi Mohamed Karim EL hassar ,1992 ,Conception d'un environnement de simulation intelligent .A application à la thermique du bâtiment .Science de la terre , Ecole Nationale des ponts et chaussées .Français .
- [11]- Solar Energy Laboratory, univ, of Wisconsin-Madison, 2018,<http://sel.me.wisc.edu/trnsys> .
- [12]- <http://m.actu-environnement.com/maématerials-services/logiciel-meteororm-cstb-prevision—simulation-meteorologiques-energie-solaire-2471.php>.



Revue des Matériaux & Energies Renouvelable

Journal home : <https://www.univ-relizane.dz>

ISSN : 2507-7554

E- ISSN : 2661-7595



Open
Access

Incorporation des métaux lourds dans les mortiers à long terme

Bennacer Lyacine^{1}, Balegh Benamar¹, Sellaf Hamid¹*

¹ Department of technology science, University of Adrar, 01000, Algeria

² Civil Engineering and Environmental Laboratory, Department of technology science, University of Adrar, 01000, Algeria

³ Civil Engineering and Environmental Laboratory, Department of civil engineering and hydraulic, University of Saida, 20000, Algeria

RESUME

Les déchets industriels liquides, renferment des métaux lourds toxiques pouvant causer des dégâts environnementaux qui mettent en danger la santé humaine s'ils sont déversés directement dans les réseaux d'assainissement. L'utilisation de ces déchets comme eau de gâchage des liants hydrauliques constitue la méthode la plus utilisée pour réduire l'impact catastrophique de ces déchets. Ce procédé est appelé Stabilisation/Solidification par liants hydrauliques, son faible coût et la résistance mécanique relativement élevée du matériau durci justifient son utilisation parmi les différents procédés de stabilisation existants (chaulage, fixation physique, fixation chimique et vitrification) dans le monde pour le confinement des métaux lourds. L'objectif de ce travail est l'étude de l'immobilisation des métaux lourds par le procédé de Stabilisation/Solidification à base de liants hydrauliques afin de prédire la pérennité du confinement de ces déchets. Pour ce faire, une eau polluée chargée d'un métal lourd (Cu+2, Pb+2, Zn+2) a été utilisée comme eau de gâchage. Des pâtes cimentaires ont été utilisées avec des rapports Eau/ciment égal à 0.5. Les résistances en flexion et en compression des formulations étudiées ont été évaluées à 28 jours de cure. A travers les résultats des essais mécaniques, un bon piégeage des métaux lourds dans le mortier a été remarqué à 28 jours pour le plomb et le zinc. Le type de métal utilisé a une influence significative sur les propriétés mécaniques des mortiers testés. De ce fait, la formulation adoptée permet de fixer les métaux lourds dans la matrice cimentaire des mortiers tout en assurant de bonnes résistances mécaniques.

Article history:

Received 06 July 2021

Received in revised form 07 July 2021

Accepted 28 July 2021

Keys word: Mortier, Métaux lourds, Stabilisation, Solidification, Mécanique

Copyright © 2022 - All rights reserved

1. Introduction

Les unités de fabrication métallurgique et de BCR engendrent une pollution minérale toxique aux cours des opérations de dégraissage et de décharge des pièces métalliques avant le traitement chimique et l'usinage et [1-3]. Le potentiel de toxicité de ces déchets liquides composés de l'eau de lixiviat et les métaux lourds dépend en grande partie de la façon dont ils seront éliminés et traités [4]. Depuis le début des années 1990, la protection de l'environnement par un traitement et recyclage devenue une préoccupation collective pour [5,6]. Différentes lois, notamment celles du 15 juillet 1975 et 3 juillet 1992, regroupées et inscrites dans le code de l'environnement, fixent les objectifs à respecter pour gérer correctement les déchets : (i) Limiter le stockage définitif aux seuls déchets résiduels ultime ; (ii) Valoriser les déchets par réemploi, recyclage ou toute action visant à obtenir des matériaux réutilisables. C'est dans ce contexte que s'ouvre la réflexion sur la recherche de nouveau matériau cimentaire capable de résoudre les problèmes techniques et écologiques (protection de l'environnement), rencontrés dans le domaine de la construction. Parmi ces matériaux, on trouve le béton. La loi Algérienne sur l'élimination et le traitement des déchets ne prévoit aucun procédé de stockage des déchets liquides de manière définitive [7]. La sévérité des nombreuses normes d'acceptation des déchets liquides en centre de stockage ou en décharge a

* Corresponding author. balegh.benamar@yahoo.com

permis l'essor des procédés physico-chimiques, notamment par l'utilisation de la technique de Stabilisation/Solidification par les liants hydrauliques (notamment le ciment) [8,9]. La facilité de mise en œuvre du procédé de Stabilisation/Solidification (mortier ou béton) par liants hydrauliques [10], son faible coût et la résistance mécanique relativement élevée du matériau durci justifient le fait qu'il soit actuellement le plus utilisé parmi les différents procédés de stabilisation existants (chaulage, fixation physique, fixation chimique et vitrification) dans le monde pour le confinement des métaux lourds dans différentes matrices de ciment [11]. Dans le présent travail, nous étudions la possibilité de confinement par le procédé de stabilisation/solidification par les liants hydrauliques (ciment Portland) de quatre types de métaux lourds (Pb, Cu, Zn, Fe). Le liant le plus communément utilisé pour contenir ces métaux lourds est le ciment Portland [12]. La contenance de ces métaux lourds varie entre la fixation chimique et le piégeage physique pour produire une matrice ciment/déchet stable. Les objectifs visés dans cette recherche est l'étude de l'immobilisation et de piégeage des métaux lourds par le procédé de Stabilisation/Solidification à base de liants hydrauliques afin de prédire la pérennité du confinement de ces déchets à long terme.

2. Matériels et méthodes

2.1. Matériaux utilisés

Les formulations étudiées dans cette étude sont à base de ciment CEM I 42,5 N (tableau 1) et de l'eau polluée chargée de métaux lourds. Le piégeage des métaux lourds a été effectué par le ciment avec un rapport eau/ciment égal à 0.5 [13]. Les déchets liquides utilisés sont des métaux lourds. Les solutions de cuivre, de plomb, de fer et de Zinc ont été obtenues à partir de réactifs analytiquement purs, ajoutés dans l'eau de gâchage pour avoir de différentes concentrations en métaux lourds allant de 0 à 3 mg/l. Le sable utilisé est un sable de dune quartzueux, lavé, criblé et traité dont le diamètre des grains varie entre 0 microns à 2 mm. Les deux types d'eau de gâchage sont : l'eau potable du robinet du réseau AEP de la ville d'Adrar en sud d'Algerie.

Tableau 1. Composition du ciment de base.

composant	CaO	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	MgO	SO ₃	Perte au feu
Poids (%)	66	23	4.7	2.4	1.2	1.2	0.1

2.2. Matériels utilisés

Les mélanges à base de ciment ont été moulés pour préparer des éprouvettes avec des dimensions normalisées de 4×4×16 cm³ pour les essais mécaniques à 28 jours. Les valeurs de résistances mécanique à la compression ont été prises sur une presse de type 65-L11M2 selon la norme EN196-1 [14].



Figure 1- Dispositif de l'essai de flexion

On calcule la résistance à la flexion R_f en N/mm² au moyen de la formule :

$$R_f = \frac{1,5 \cdot P_r \cdot L}{B^3} \quad (1)$$

Où :

R_f : la résistance à la flexion, en newtons par mm^2 .

B : le coté de la section carrée du prisme, en mm.

P_r : la charge appliquée au milieu du prisme à la rupture, en N.

L : la distance entre les appuis, en mm.



Figure 2- Dispositif de l'essai de compression

les demi-prismes humides conservés sont soumis à la compression sur les faces latérales de moulage sous une section de 40 mm x 40 mm. Cette essai consiste à Augmenter la charge sans à coups a la vitesse de 2400 N/s \pm 200 N/s durant toute la durée d'application de la charge jusqu'à la rupture.

Calculer la résistance à la compression R_C en N/mm² au moyen de la formule :

$$R_C = \frac{P_c}{1600} \quad (2)$$

Où :

R_C : la résistance à la compression, en newtons par millimètre carré.

P_c : la charge maximale à la rupture, en newtons.

1600 = 40 mm x 40 mm est l'aire des plateaux ou des plaques auxiliaires, en millimètres carrés.

3. Résultats et discussions

3.1. Résistance à la compression

La résistance à la compression, des formulations confectionnées, a été suivie à 28 jours de cure. La figure 3 représente l'évolution des résistances à la compression des formulations confectionnées en fonction de la concentration en métaux lourds. Il a été observé que les matériaux témoins présentent des résistances plus au moins élevées à 28 jours de cure; elles sont de l'ordre de 56 MPa. Nous constatons qu'à partir de la concentration 2,5 mg/l en ions de cuivre et de fer, la résistance à la compression diminue pour prendre respectivement la valeur de 42,5 MPa pour le cuivre et 50 MPa pour le fer lorsque l'ajout en polluant est de 5 mg/l. Cette tendance est similaire pour les deux métaux.

Aussi, nous remarquons que l'ajout du plomb augmente la résistance à long terme (28 jours). En effet lorsque nous augmentons la concentration des ions du plomb, la résistance devient très élevée pour atteindre 65 MPa dépassant ainsi celle

de l'échantillon témoin. cependant, la résistance à la compression augmente lorsque nous introduisons le Zinc dans l'eau d'hydratation. Cette résistance connaît une baisse, lorsque la concentration est faible; 2.5 mg/l.

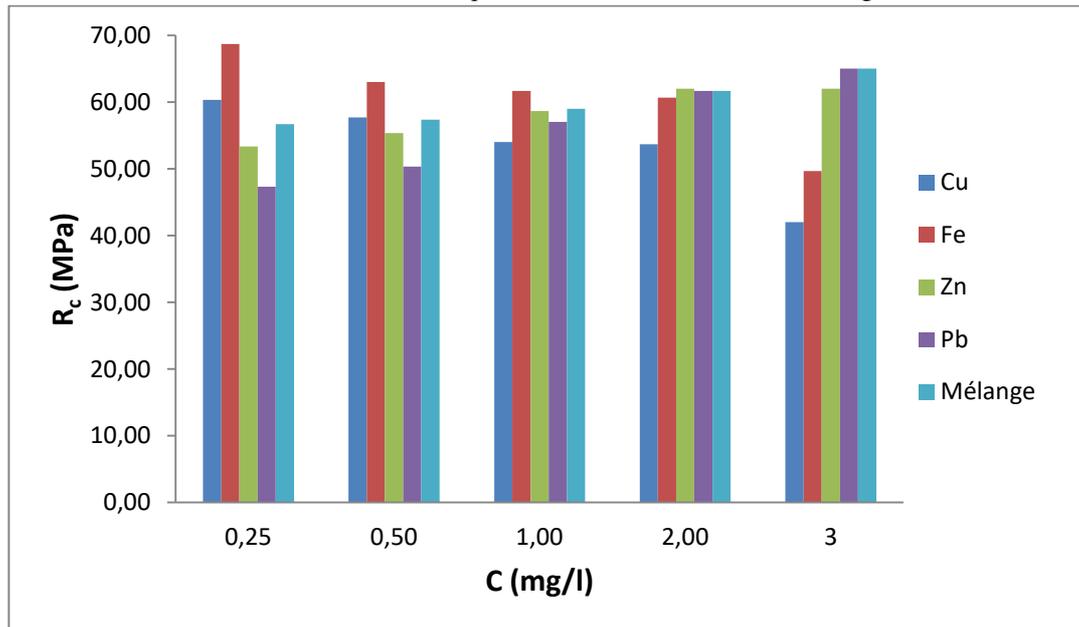


Figure 3 - Influence du taux des métaux lourds sur la résistance à la compression du mortier à 28 jours

Les résultats obtenus montrent que le mélange des métaux lourds dans l'eau de gâchage donne des résistances meilleures que celles présentées pour chaque métal seul. Aussi le mortier contenant tous les métaux lourds, présente une remarquable augmentation de la résistance par rapport à la formulation contenant un métal seul (figure 4). Ce résultat est expliqué par la compétition entre les métaux lourds pour se fixer dans la matrice cimentaire du matériau.

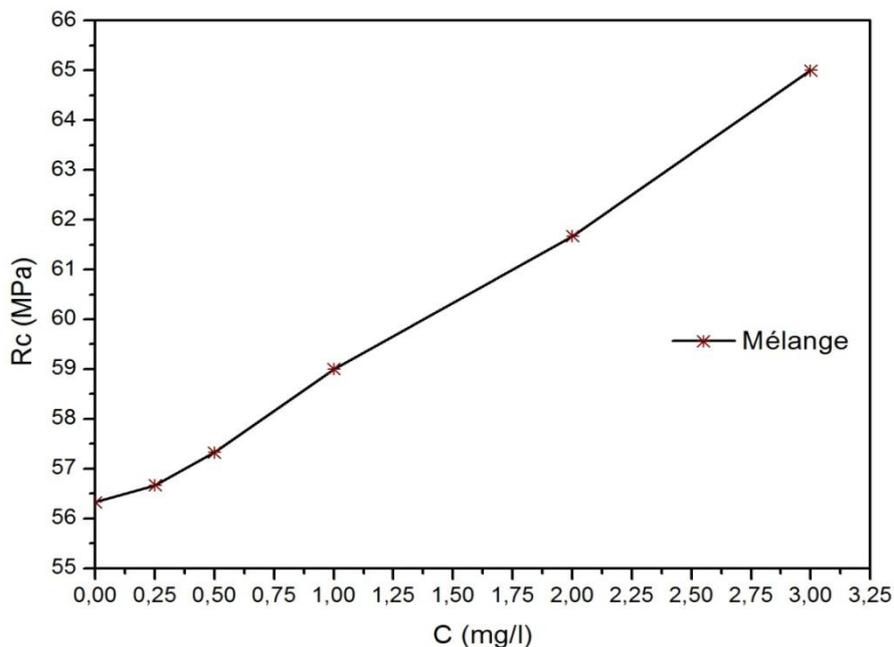


Figure 4 - Influence du taux du mélange des métaux lourds (Pb^{+2} , Cu^{+2} , Zn^{+2} , Fe^{+2}) sur la résistance à la compression du mortier à 28 jours

3.2. Résistance à la flexion

La résistance à la flexion, des formulations confectionnées, a été suivie à 28 jours de cure. La figure 5 représente l'évolution des résistances mécaniques des formulations confectionnées. En fonction du taux des métaux lourds incorporés dans la matrice cimentaire.

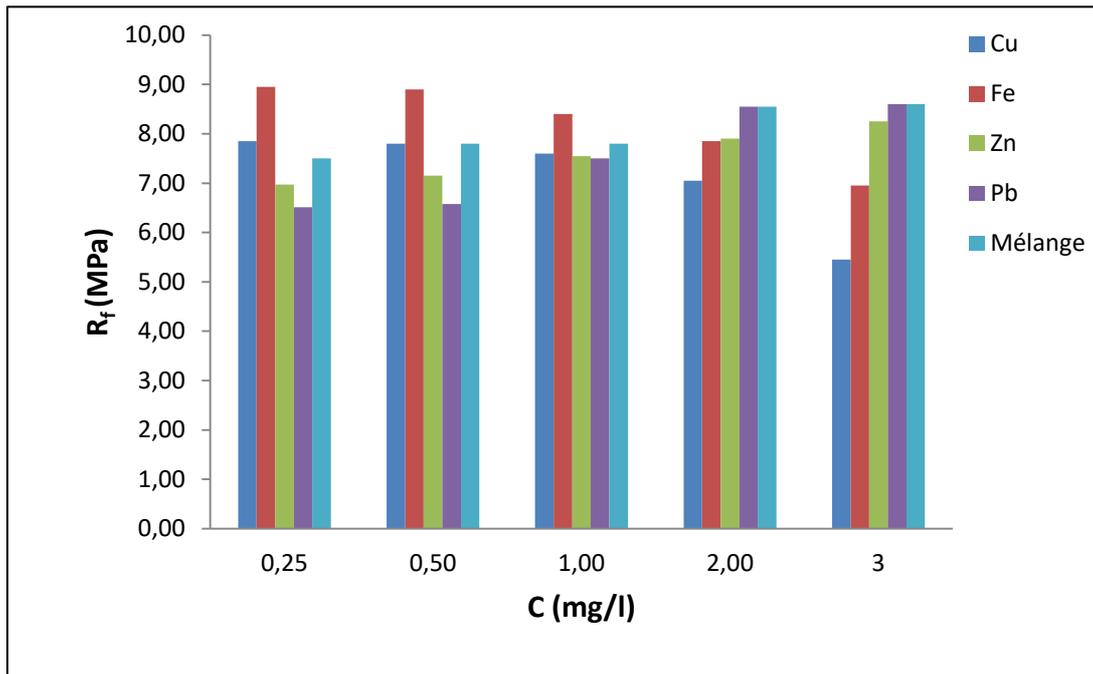


Figure 5- Influence du taux des métaux lourds sur la résistance à la flexion du mortier à 28 jours

L'histogramme démontre que la résistance à la flexion à long terme (28 jours de cure) augmente lorsque nous hydratons avec de l'eau polluée chargée de métaux lourds. Cette résistance est très élevée pour des concentrations du plomb élevées. Pour une faible concentration du plomb, la résistance à la flexion reste constante autour d'une valeur de 6,625 MPa, mais à partir de la concentration 0,5 mg/l la résistance à la flexion augmente pour se stabiliser autour de 8,5 MPa au-delà de 2 mg/l d'ajout.

La résistance à la flexion évolue de manière différente que la résistance à la compression. Nous constatons à partir de cette courbe que la résistance à la flexion augmente lorsque nous introduisons le Zinc dans l'eau d'hydratation. Cette résistance connaît une augmentation, lorsque nous augmentons la concentration du Zinc. De ce résultat, nous constatons que l'ajout de polluant dans l'eau d'hydratation a une forte influence à 28 jours de cure (figure 6).

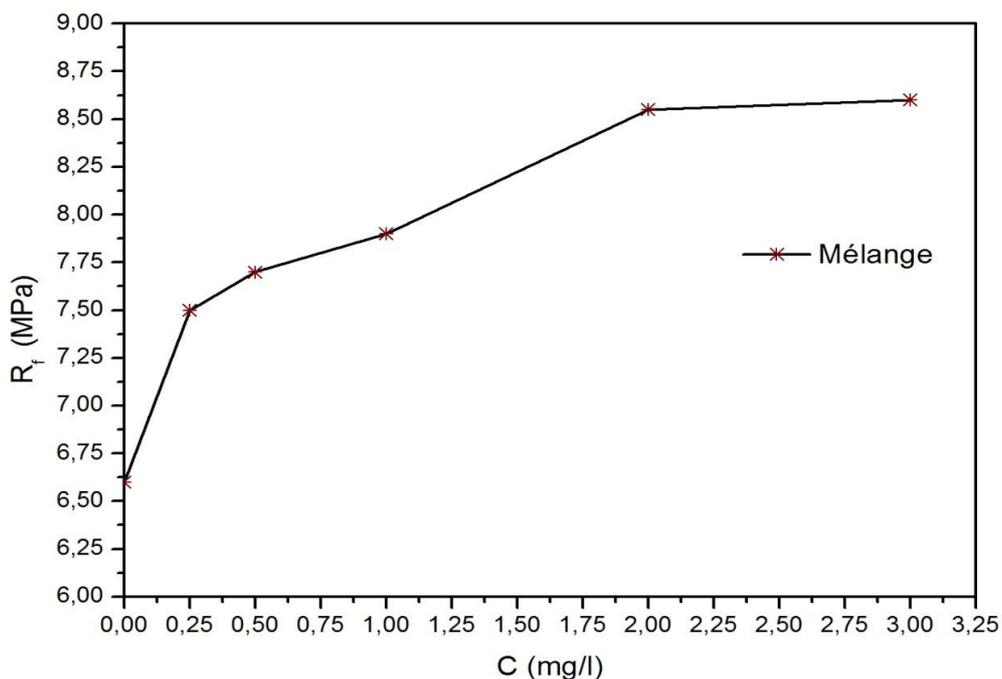


Figure 6- Influence du taux du mélange des métaux lourds (Pb^{+2} , Cu^{+2} , Zn^{+2} , Fe^{+2}) sur la résistance à la flexion du mortier à 28 jours

3.3. Comportement mécanique global du matériau

Nous constatons qu'à faible teneur (<0.5 mg/l) le plomb et le zinc apportent une légère augmentation de résistance. Le fer et le cuivre entraînent plutôt une baisse de la résistance à partir de la concentration 2,5 mg/l d'ajout. Cette diminution est attribuée soit, au fait que le fer et le cuivre perturbe l'hydratation de C₂S et C₃S en empêchant la formation des CSH ou bien ces deux métaux lourds perturbe la structure de CSH juste après sa formation.

L'incorporation des métaux lourds à forte concentration (>0.5 mg/l) augmente de façon considérable la résistance. Cette augmentation est le résultat du renforcement au niveau de la structure des CSH. La présence du plomb et du zinc permet ainsi au béton de travailler d'avantage en traction. La capacité portante croît avec l'augmentation de la concentration.

Les résistances mécaniques obtenues par l'essai de flexion pour le mortier confectionner avec de l'eau polluée est nettement supérieure à celle du mortier témoin. cela est dû probablement à l'ajout du sable normalisé qui participe pleinement à la réduction de la porosité, augmentant ainsi la résistance des mortiers.

4. Conclusion

L'ensemble des expériences réalisées sur les matériaux témoin et sur d'autres matériaux obtenus par stabilisation/solidification contenant différentes quantités de métaux lourds a été présenté dans ce chapitre. Ces tests visent à démontrer l'impact de l'ajout de déchets industriels toxiques (métaux lourds) sur les propriétés physiques et mécaniques. L'exploitation des résultats des tests appliqués sur les matériaux obtenus par le procédé de stabilisation/solidification, nous a permis de tirer les conclusions suivantes :

- Les métaux lourds ont été stabilisés/solidifiés par un liant hydraulique. Il a été constaté que l'ajout des métaux lourds dans les matrices cimentaires améliore dans certains cas le comportement mécanique des mortiers, ceci est considéré comme un avantage.
- Les matériaux témoins (sans ajout de métaux lourds) ont présenté des résistances mécaniques supérieures à celles des matériaux contenant du cuivre et du fer à 28 jours de cure. Cependant, les résistances des matériaux S/S restent supérieures à celle recommandée par la norme XP X 31-212 ;
- La structure CSH capable de piéger les ions métalliques.
- Le CSH participe le plus au développement de la résistance du matériau et assure l'essentiel de la cohésion de ce dernier.

Références

- [1]- Koller, E, 2009, " Traitement des pollutions industrielles Eau", *Air. Déchets. Sols. Boues, 2ème édition, Dunod.*
- [2]- Hartley, W., Edwards, R., Lepp, N.W, 2004, " Arsenic and heavy metal mobility in iron oxide-amended contaminated soils as evaluated by short- and long-term leaching tests", *Environmental pollution*; Vol 131, p 495-504. DOI : [10.1016/j.envpol.2004.02.017](https://doi.org/10.1016/j.envpol.2004.02.017)
- [3]- Thomas, D, Mostafa, B, Bruno, B, Tikou, B., Mamert, M, 2006, "Mécanismes de rétention des métaux lourds en phase solide : cas de la stabilisation des sols contaminés et des déchets industriels", *La revue électronique en sciences de l'environnement*; Vol 7 (2) , <https://doi.org/10.4000/vertigo.2171>
- [4]- Duffus, J.H, 2002, "Heavy metals -A meaningless term? ", *Pure and applied chemistry*; Vol 74, p 793-807.
- [5]- Serpaud, B., Al-Shukry, M., Casteigneau, M., Matejka, G, 1994, " Adsorption des métaux lourds (Cu, Zn, Cd et Pb) par les sédiments superficiels d'un cours d'eau: rôle du pH, de la température et de la composition du sédiment", *Revue des sciences de l'eau*; Vol 7, p 343-365. DOI : [10.7202/705205ar](https://doi.org/10.7202/705205ar)
- [6]- Morel, J.L., Guckert A., Claude , A.M., Jeanbille, A, 1984, " Evolution en plein champ de la solubilité dans DTPA des métaux lourds du sol introduits par des épandages de boues urbaines chaulées", *Agronomie, EDP Sciences*; Vol 4 (4), p 377-386. hal-00884648
- [7]- Ministère de l'aménagement du territoire et de l'environnement-Algérie, 2014, " Principaux textes législatifs et réglementaires".

- [8]- Barna, R. and Blanc, D, 2011, “ Stabilisation-solidification des déchets”, *Les techniques de l'ingénieur, Doc. G 2 080*.
- [9]- Cocke, D.L., Mollah, M.Y.A, 1993, “ The chemistry and leaching mechanisms of hazardous substances in cementious solidification/stabilization systems”, *In: R.D. Spence (Ed.), Chemistry and microstructure of solidified waste forms (Ed. by R.D. Spence)*, p 187-242. Lewis.
- [10]- Trezza, M.A. and Scian ,A.N, 2007, “ Waste with chrome in the Portland cement clinker production”, *Journal of Hazardous Materials*; Vol 147, p 188-96.
- [11]- Heimann, R.B., Conrad, D., Florence, L.Z., Neuwirth, M., Ivey, D.G., Mikula, R.J and. Lam, W.W, 1992, “ Leaching of simulated heavy metal waste stabilized/solidified in different cement matrices”, *Journal of hazardous materials*; Vol 31, p 39-57.
- [12]- Alexander, M., Bertron, A., and De-Belie, N, 2013, “ Performance of cement-based materials in aggressive aqueous environments”, *RILEM TC 211-PAE Springer*.
- [13]- Malviya, R., Chaudhary, R, 2006, “Factors affecting hazardous waste solidification/stabilization: a review”, *Journal of Hazardous Materials*; Vol 137, p 267-76.
- [14]- NF EN196-1, 2006, “ Méthodes d'essais des ciments: Partie 1: détermination des résistances mécaniques”, AFNOR.
- [15]- NEN 7375:2004, Leaching characteristics of moulded or monolithic building and waste materials: determination of leaching of inorganic components with the diffusion test 'the tank test' based on a translation of the Netherlands Normalisation Institute Standard, Environment Agency, 2005.



Revue des Matériaux & Energies Renouvelable

Journal home : <https://www.univ-relizane.dz>

ISSN : 2507-7554

E- ISSN : 2661-7595



جامعة غليزان
RELIZANE UNIVERSITY

Contribution à l'étude de ternaire HgCdTe destiné aux applications optoélectroniques.

Open
Access

BELARBA Fatiha¹, CHERCHEB Youcef², BELOUFA Nabil^{2*}, Bekheira Samir³, BENADJMIA Mhamed benali¹.

¹ GIDD Laboratory, Electrical Engineering Department, Ahmed Zabana University, Relizane, Algria.

² Laboratory of Micro and Nanophysics (LaMiN), National Polytechnic School Oran, ENPO-MA, BP 1523, El M'Naouer, 31000, Oran, Algeria.

³ Laboratory of Materials (LabMat), National Polytechnic School Oran, ENPO-MA, BP 1523, El M'Naouer, 31000, Oran, Algeria. Electronics Engineering Department, Mohamed Boudiaf University, Oran, Algeria

RESUME

En dépit des ses limitations (cout élevé, fragilité, etc.), le ternaire HgCdTe présente des qualités pour les applications infrarouges souvent supérieures à celles de ses concurrents. Il s'agit dans ce travail de prendre connaissance de toutes les données importantes de ce matériau, de faire le bilan de ses avantages mais de ces inconvénient. Les propriétés électroniques et optiques sont aussi calculées. en utilisant la méthode des ondes planes linéairement augmentées (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) implémentée dans le code WIEN2k. Nous avons utilisé l'approximation gradient généralisé GGA, et pour performer le calcul des gaps nous avons utilisé l'approximation mBj.

Article history:

Received 08 May 2021

Received in revised form 09 May 2021

Accepted 28 May 2021

Keys word: HgCdTe; propriétés électroniques; GGA.

Copyright © 2022 - All rights reserved

1. Introduction

Les éléments du groupe V sont préférés aux lacunes du mercure et aux éléments du groupe I pour le dopage d'accepteur extrinsèque en raison de leur faible diffusivité dans le HgCdTe. L'arsenic est un élément du groupe V qui a fait l'objet d'une grande attention ces dernières années [1,2]. Bien que l'arsenic ait permis d'obtenir un dopage de type p du HgCdTe.

en utilisant de l'arsenic a été rapporté par plusieurs groupes [3-7], la nature chimique de l'impureté arsenicale n'a pas encore été mise en évidence nature chimique de l'impureté arsenic.

L'incorporation in situ d'arsenic [8] est routinière par MBE, mais le comportement de type n hautement compensé observé dans les échantillons bruts n'a jamais été expliqué de manière satisfaisante, à l'exception du modèle développé par Berding et al. le modèle développé par Berding et al. avec la suggestion que le rapport que la paire (AsHg-VHg) est le coupable [9].

* beloufa.nabil@gmail.com

De plus, l'activation complète de l'arsenic est limitée à une concentration d'arsenic supérieure 10^{16} cm^{-3} comme adopté par de nombreuses approches. Sinon, l'activation de l'arsenic semble être masquée par certains défauts de type n non identifiés [10].

D'autre part, La compréhension des propriétés électroniques, optiques et structurales des matériaux se fonde sur une représentation correcte de la structure électronique de ces matériaux, grâce aux techniques fournies par la théorie des bandes. Les plus puissantes de ces techniques sont incontestablement celles utilisées par les méthodes ab-initio qui sont utilisées pour des besoins de prédiction de nouveaux matériaux, et pour éviter d'effectuer des expériences très coûteuses ou même irréalisables en laboratoire.

Parmi ces méthodes ab-initio, la méthode linéaire des ondes planes augmentées (FP-LAPW) est l'une des plus précises actuellement pour le calcul de la structure électronique des solides dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Le ternaire HgCdTe est transparent pour les photons à l'énergie inférieures à son gap (domaine de l'infrarouge). Son indice de réfraction est élevé. Les propriétés optiques de HgCdTe ont été principalement étudiées à des énergies du gap [11,12] Le tellure de mercure et de cadmium (HgCdTe) constitue aujourd'hui le matériau de référence pour l'élaboration des captures quantiques utilisés pour la détection du rayonnement infrarouge entre $1.7 \mu\text{m}$ et $18 \mu\text{m}$. Cette technologie permet de répondre aux besoins d'un nombre croissant d'applications spatiales touchant aussi bien les domaines de l'imagerie (e.g. observation de terre, astronomie), de la spectroscopie (e.g. cartographie de gaz à effet de serre) ou des télécommunications optiques (e.g. matrices de détection pour les systèmes de pointage, d'acquisition et de suivi).

2. Détail de calcul

Nous avons utilisé la méthode FP-LAPW, implémentée dans le code. Wien2k [13]. Ce code permet de calculer les propriétés physiques comme la structure de bande électronique, la densité d'états électroniques et l'énergie totale d'un cristal périodique en se basant sur la connaissance du groupe spatial et le numéro atomique (Z) du matériau considéré. Pour le calcul du potentiel d'échange et de corrélation nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisé GGA (PBE96) [14] et le potentiel modifié de Becke-Johnson (mBJ) [15]. En ce qui concerne la région des sphères muffin-tin nous avons utilisé pour assurer la Convergence des harmoniques sphériques $l_{\text{max}}=10$, les fonctions d'ondes dans la région interstitielle sont étendue en ondes planes avec une énergie de coupure $k_{\text{max}}= 10\text{RMT}$ (où RMT est le petit rayon des sphères muffin –tin. Le critère de convergence des cycles auto cohérents (self-consistent) n'est atteinte que lorsque l'énergie totale est stable à 0.1 mRy [16].donc On a effectué des calculs semi - relativistes (l'effet de spin-orbit est négligé). Les fonctions d'onde, les densités électroniques et le potentiel sont développées en combinaison harmoniques sphériques autour des sites atomiques.

La première étape dans ce genre de calculs consiste à préciser les valeurs des paramètres importants, qui influent sur le temps et la précision du calcul.

- Les rayons de Muffin-tin (R_{mt}), donnés en unités atomiques (u.a). Les valeurs de R_{mtmin} que nous avons utilisées pour Cd (2.5), Hg (2.5), Te(2.4), représentent un bon choix pour notre calcul. Ce choix est basé sur deux critères :

- 1- S'assurer de l'intégration de la majorité des électrons du coeur dans la sphère (Muffin-tin).
- 2- Eviter le chevauchement des sphères (Muffin-tin).

G_{max} est la norme du plus grand vecteur d'onde utilisé pour le développement en ondes planes de la densité de charges. Le nombre de points k considéré dans la zone irréductible de Brillouin, donc tous les résultats représentés sont obtenus avec une convergence de l'ordre de 0.5mRyd . Le calcul des structures de bandes pour nos matériaux est calculé suivant différents points de haute symétrie : pour (111) points dans la zone de Brillouin.

Donc la liaison II-VI résulte de l'hybridation sp^3 des orbitales atomiques, cette liaison est iono-covalente avec un caractère d'ionicté qui fournit aux semi-conducteurs II-VI une propriété remarquable : fortes interactions coulombiennes, alors que le caractère covalent leur impose la structure suivante : chaque élément II (respectivement élément VI) se retrouve dans un environnement tétraédrique d'élément VI (respectivement élément II).

II : Un cation, appelé aussi métal de transition, possédant deux électrons de valence sur une orbitale " s ", ainsi qu'une couche " d " qui peut être soit complète soit incomplète.

Dans nos calculs, nous avons traité les états Cd : ($4d^{10} 4s^2$), Hg : ($5d^6 6s^2$), Te ($5s^2 5p^4$) comme étant des états de valence. On note que les critères de convergences sont vérifiées (Rmt*kmax, Kpoint et lmax).

3. Résultats et discussions

3.1 Propriétés structures

Nous avons pris une cellule conventionnelle cubique de HgCdTe contenant huit atomes, dont quatre atomes de Cd et quatre autres atomes de Te. Dans ce modèle, l'alliage possède une symétrie cubique simple. Dans le modèle à huit atomes, l'alliage $Hg_{0,25}Cd_{0,75}Te$ est obtenu en remplaçant un atome de Hg par atome de Cd. Le $Hg_{0,5}Cd_{0,5}Te$ est quant à lui obtenu en remplaçant deux atomes de Hg par deux atomes de Cd et enfin pour le $Hg_{0,25}Cd_{0,75}Te$, il suffit de remplacer trois atomes de Hg par trois autres atomes de Cd.

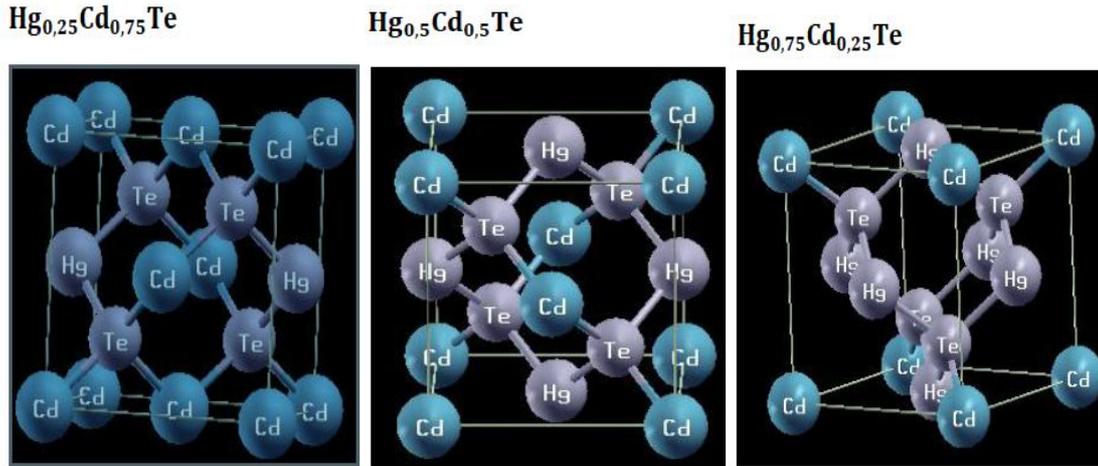


Figure 1– Les différentes structures cristallines utilisées correspondantes à différentes concentrations en Cd%.

La figure (1) montre la variation de l'énergie totale de HgCdTe en phase cubique simple avec le volume, et ceci dans les trois cas d'alliage. Après avoir fitté à l'aide de l'équation d'états de Murnaghan [3], nous remarquons que pour l'énergie totale à l'équilibre, le volume à l'équilibre correspondant est $V_0 = 1986.1081$ (u.a)³, 1978.8674 (u.a)³, et 1973.362 (u.a)³ pour $x = 0.25, 0.5$ et 0.75 , respectivement. Ceci implique que les constantes du réseau sont respectivement; 12.57 u.a, 12.55 u.a et 12.54 u.a. Le coefficient de compressibilité (bulk modulus) trouvé est $B = 34.75$ GPa, 35.44 GPa et 34.52 GPa.

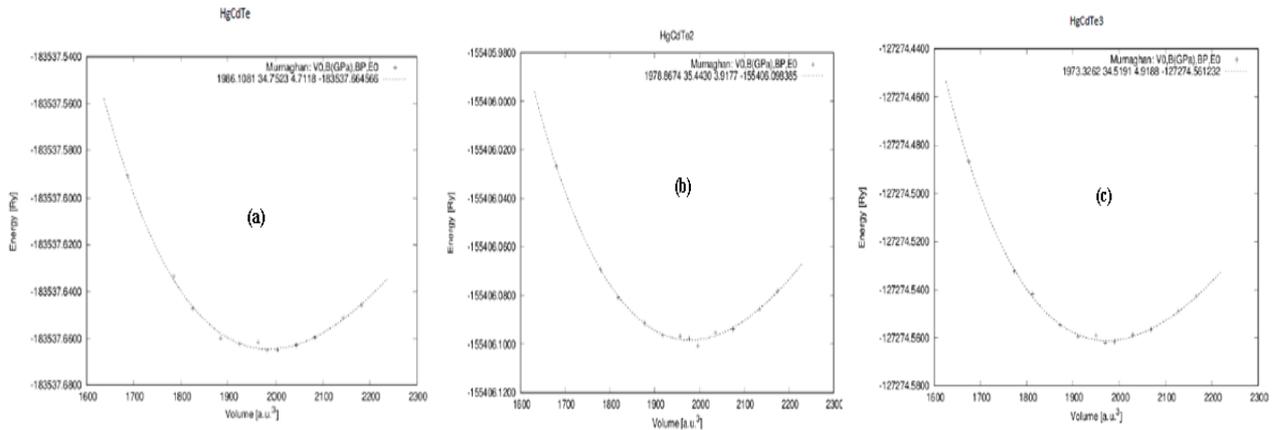


Figure 2– Minimisation de (a) $Hg_{0,25}Cd_{0,75}Te$, (b) $Hg_{0,5}Cd_{0,5}Te$ et (c) $Hg_{0,75}Cd_{0,25}Te$

Table 1. Comparaison des différents résultats pour les alliages $Hg_xCd_{1-x}Te$.

	Notre travail			Autre travail
	$Hg_{0.25}Cd_{0.75}Te$	$Hg_{0.5}Cd_{0.5}Te$	$Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$	
Volume	1973.3262	1978.8674	1986.1081	1843.24 ^a ; 1867.68 ^a ; 1867.68 ^a
$a_0(\text{\AA})$	6.635	6.64	6.65	6.49 ^a ; 6.52 ^a ; 6.51 ^a
B(GPa)	34.52	35.44	34.75	44.574 ^a ; 42.367 ^a ; 43.250 ^a
$E_0(\text{eV})$	-127274.561	-155406.09	-183537.664	/

^aRéférence : [17]

Les variations du paramètre de réseau de l'alliage en fonction de la concentration x , comparées avec celles obtenues avec l'application de loi de Vegard [18] sont présentées par la figure (3), où on voit une décroissance de paramètre de réseau en fonction de la variation de la concentration. La loi de Vegard qui s'écrit de la façon suivante :

$$a_{(HgxCd_{1-x}Te)} = x a_{HgTe} + (1-x) a_{CdTe} \quad \text{Eq1}$$

$a_{(HgxCd_{1-x}Te)}$, a_{HgTe} et a_{CdTe} les paramètres de réseaux de l'alliage.

On voit un décalage remarquable entre la courbe de paramètre de réseau calculé et suivant la loi de Vegard, ceci implique l'existence d'un paramètre de Bowing (d'ajustement) important du essentiellement du aux : la relaxation de la structure, déformation du cristal et la différence d'ionicté entre les massifs (CdTe et HgTe) qui traduit par un transfert de charge.

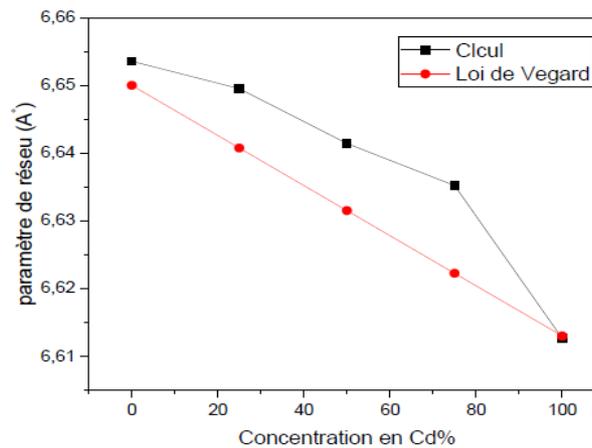


Figure 3– Variation du paramètre de réseau en fonction de Cd%.

3.2 Propriétés électroniques

3.2.1 Structure de Bande

Les structures des bandes de $Hg_{0.25}Cd_{0.75}Te$, $Hg_{0.5}Cd_{0.5}Te$ et $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ sont représentées sur la figure (4). Le choix des points de haute symétrie correspond à la symétrie cubique simple .

Dans les trois cas d'alliage, on voit bien que le minimum de la bande de conduction (BC) et le maximum de la bande de valence (BV) sont situés au point Γ , ce gap direct vaut : 0.21 eV pour $x = 0.25$, et 0.62 eV pour $x=0.5$ et 1.05 pout $x=0.75$. Ces valeurs sont calculées avec mbj.

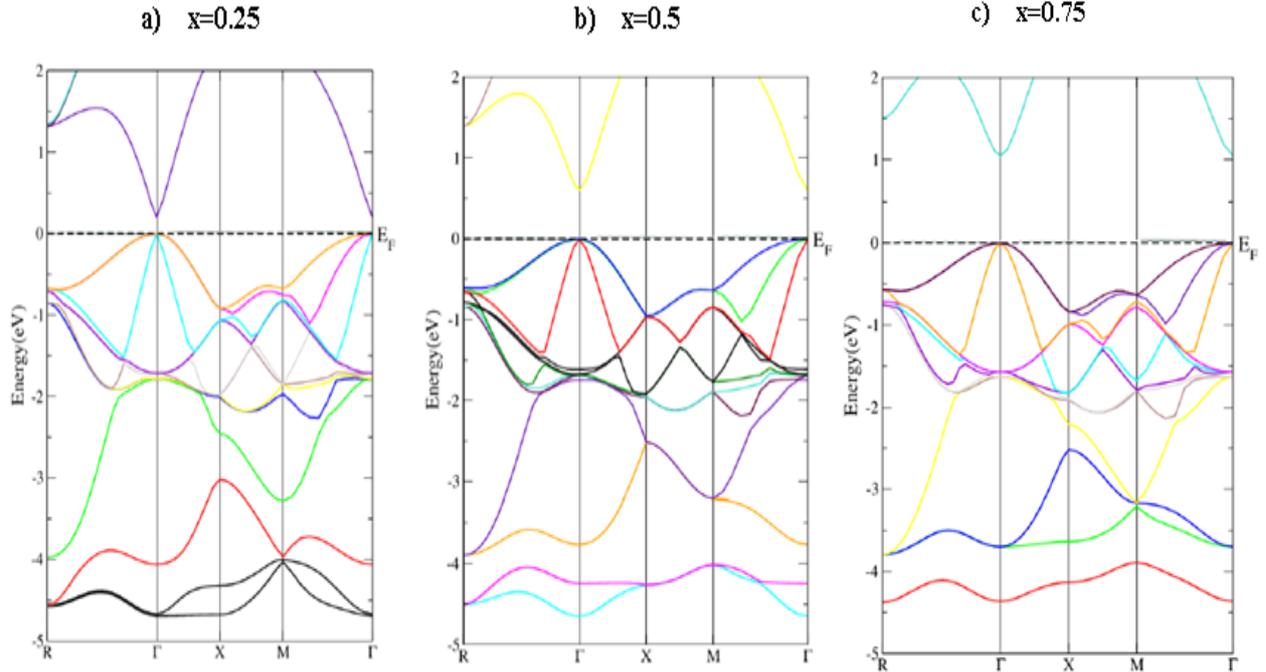


Figure 4– Structure de Bande d’alliage $Hg_xCd_{1-x}Te$

Table 2–Les valeurs des gaps de $Hg_xCd_{1-x}Te$

Gap d'énergie (eV)	Nos résultats (mBJ)		
	$Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$	$Hg_{0.5}Cd_{0.5}Te$	$Hg_{0.25}Cd_{0.75}Te$
$(\Gamma \rightarrow \Gamma)$	0.21	0.62	1.05
$(\Gamma \rightarrow R)$	1.31	1.39	1.51

Sur la figure (4), nous montrons la dépendance de la structure de bande d’alliage $Hg_xCd_{1-x}Te$ en fonction de la composition x au point Γ . En effet, dans l’approximation du cristal virtuel VCA, la bande interdite négative pour la structure HgTe, augmente linéairement avec la composition x , jusqu’à ce qu’elle atteigne la structure de CdTe. d’après [18] :

- ❖ Hg Cd Te présente un gap nul quand $(E_{\Gamma_8}) - (E_{\Gamma_6}) = 0$ pour $x \approx 16\%$.
- ❖ Pour $x < x$, l’alliage a la même structure semi-métallique que HgTe.
- ❖ Pour $x > x$, l’état Γ_6 est au dessus de l’état Γ_8 , et au même moment la bande Γ_6 et Γ_8 changent de signe au fur et à mesure que le gap s’ouvre.

Dans notre travail, la variation du gap $Hg_xCd_{1-x}Te$ en fonction de la composition x est rapportée dans la figure(4). Nous avons appliqué La VCA (l’approximation du cristal virtuel) [19] qui donne le gap de l’alliage en fonction de la concentration x .

3.3 Propriétés optiques

3.3.1 Constante diélectrique statique

Nous présentons la variation de la constante diélectrique statique ϵ_s à la fréquence nulle en fonction de la composition en concentration en Cadmium (Cd) sur la figure (5). Pour la comparaison, nous avons utilisé la formule empirique suivante [20] :

$$\epsilon_s = 20.6 - 15.6x + 5.7x^2 \quad \text{Eq2}$$

On remarque que la constante diélectrique statique diminue quand la concentration en cadmium augmente.

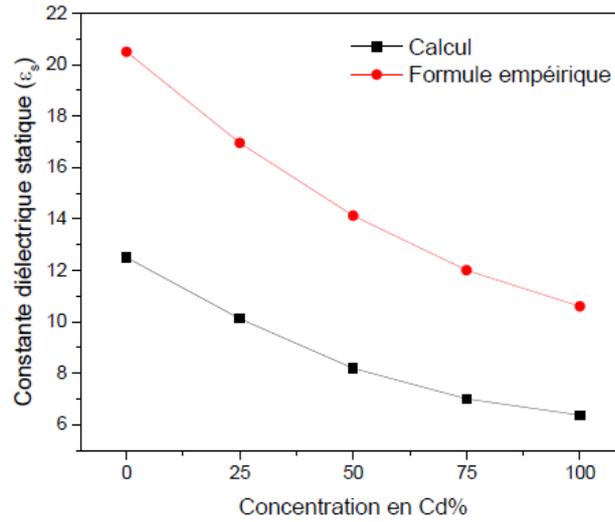


Figure 5– Variation de la constante diélectrique statique de l’alliage $Hg_x Cd_{1-x}Te$ en fonction de la composition de l’alliage x .

3.3.2 Coefficient d’absorption

Le coefficient d’absorption $\alpha(\omega)$ caractérise la partie d’énergie absorbée par le solide, il peut être défini en fonction du coefficient d’extinction par la relation :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi}{\lambda} k(\omega) \quad \text{Eq 3}$$

Où λ représente la longueur d’onde de la lumière dans le vide.

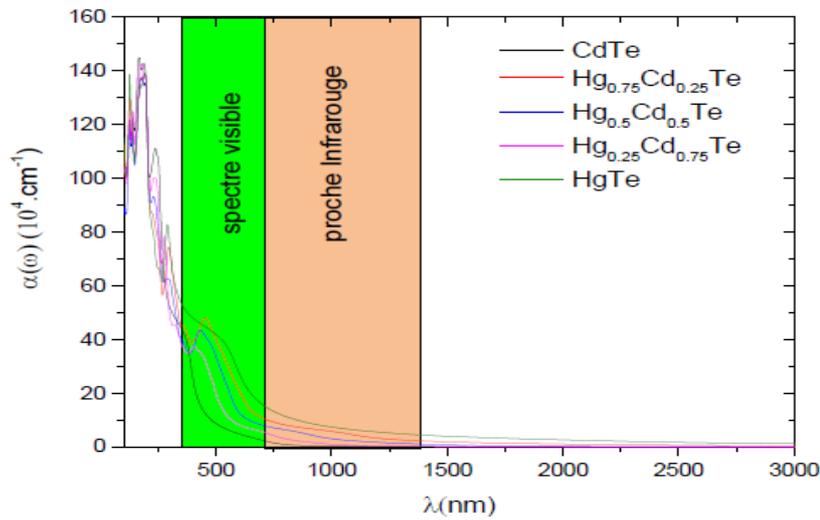


Figure 6– La variation du coefficient d’absorption en fonction de la longueur d’onde.

Pour nos matériaux le coefficient d’absorption augmente en fonction de l’énergie de l’onde incidente. L’intensité de l’onde incidente est reliée au coefficient d’absorption en négligeant la perte d’énergie due à la réflexion par l’expression suivante :

$$I(x) = I_0 e^{-\alpha(\omega) x} \quad \text{Eq4}$$

$I(x)$: l’épaisseur du solide.

I_0 : l’intensité de l’onde dans le vide.

En examinant les courbes du coefficient d'absorption, on observe que le coefficient d'absorption commence à croître jusqu'à certain valeur de l'énergie au delà de la longueur d'onde (correspondante à l'énergie d'excitation), l'énergie n'est plus suffisante pour extraire des électrons, d'où la chute brutale de l'absorption. On confirme que le $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ est caractérisé par faible absorption dans la région proche infrarouge vis-à-vis la région visible ou la région ultraviolet.

On note que pour $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$, où nous avons gap fondamental à une transition directe. La figure (7) montre la variation du coefficient d'absorption optique α dans l'alliage $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$, ce coefficient commence à augmenter très rapidement dès que l'énergie de gap $E_g > 0$

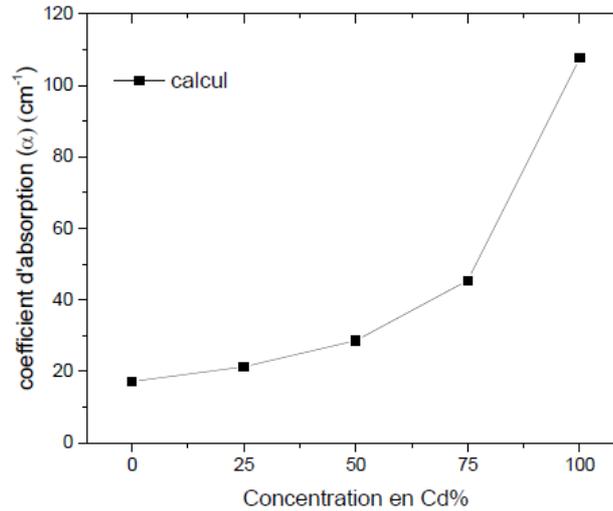


Figure 7– La variation du coefficient d'absorption optique dans l'alliage $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$

3.3.3 La réflectivité optique

La réflectivité de la lumière est importante dans le calcul des propriétés optiques, effectivement, la réflectivité est sensible à la combinaison compliquée de la fonction diélectrique. Nous illustrons sur la figure(8), la réflectivité pour différents concentrations 0%, 25%, 50%, 75% et 100% , nous présentons une comparaison entre les courbes de réflectivités en fonction de la longueur d'onde. Toutes les concentrations présentent des réflectivités d'environ 30%.

On constate que le $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ présente des oscillations de la réflectivité qui augmente jusqu'à la région visible puis elles diminuent dans la région proche infrarouge (NIR région). Le CdTe est nettement inférieur à la réflectivité du HgTe. On note aussi que la réflectivité pour les trois concentrations continue à diminuer dans la région infrarouge.

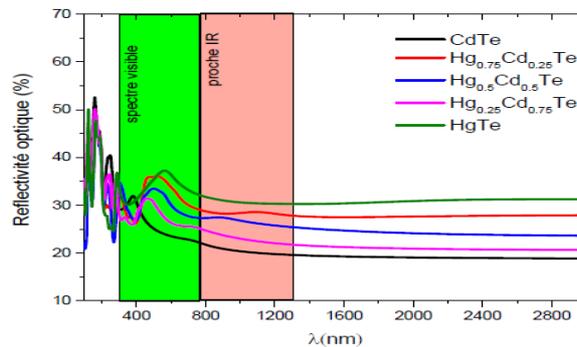


Figure 8– Comparaison entre les courbes de réflectivités en fonction de la longueur d'onde (λ) du $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$.

3.3.4 La transmittance optique

La figure (9), illustre la courbe de la transmittance optique de différentes concentrations en Cadmium. On constate que les courbes sont caractérisées par une transmittance élevée dans les régions proche et moyen infrarouge (NIR et MIR) et des valeurs faibles dans la région Ultraviolette (UV) et la région visible. La transmittance est obtenue en combine les formules théoriques [21]

$$T = (1 - R)^2 \cdot e^{-ad} \quad \text{Eq5}$$

Où

$$T + A + R = 1 \quad \text{Eq6}$$

Telle que :

T : représente la transmittance optique.

R : représente la réflectivité optique.

et

A : représente l'absorbance où elle est liée à l'absorption par la relation suivante :

$$A = e^{-ad} \quad \text{Eq7}$$

La transmittance du CdTe pur est d'environ 66% dans le MIR., en effet, la réflectivité fait réduire la valeur idéal (100%) d'environ 30% dans la région NIR. On voit aussi que l'alliage $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ présente des faibles valeurs de transmittance dans la région ultraviolette (UV) et visible.

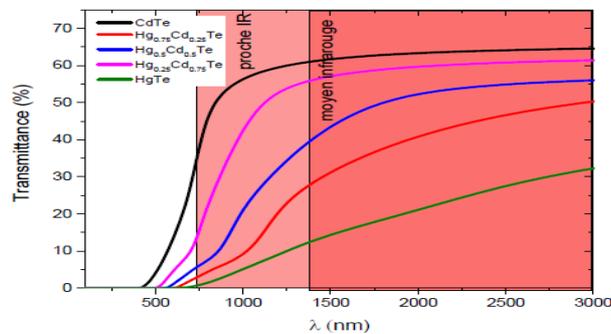


Figure 9– Comparaison entre les courbes du Transmittance optique en fonction de la longueur d'onde en (nm) du $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$.

4. Conclusion

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude des propriétés structurales, électroniques et optiques de ternaire de HgCdTe. Cet alliage occupe une place majeure dans le domaine de l'infrarouge en général et de l'imagerie et de la vision nocturne en particulier, en utilisant la méthode des ondes planes linéairement augmentées (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) implémentée dans le code WIEN2k. Nous avons utilisé l'approximation gradient généralisé GGA, et pour performer le calcul des gaps nous avons utilisé l'approximation mBj.

Les résultats obtenus peuvent être résumés comme suit :

On voit une décroissance de paramètre de réseau en fonction de la variation de la concentration Cd%. Il y a un décalage remarquable entre la courbe de paramètre de réseau calculé et suivant la loi de Vegard, ceci implique l'existence d'un paramètre de Bowing (d'ajustement) important du essentiellement du aux : la relaxation de la structure, déformation du cristal et la différence d'ionicté entre les massifs (CdTe et HgTe) qui traduit par un transfert de charge.

la structure de Bande : Dans les 3 cas d'alliage, on voit bien que le minimum de la bande de conduction (BC) et le maximum de la bande de valence (BV) sont situés au point Γ , ce gap direct vaut : 0.21 eV pour $x=0.25$, et 0.62 eV pour $x=0.5$ et 1.05 eV pour $x=0.75$. Ces valeurs sont calculées avec mBj, cette variation du gap de $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ est croissante en concentration de Cadmium "Cd" à la température ambiante et va de -0.03 dans HgTe) à +1.53eV dans CdTe. $x=4\%$ est la valeur critique de la concentration pour la quelle se produit la transition semi-métal - semiconducteur avec $E_g = 0$.

REFERENCES

- [1]- Harman, T.C, 1989, "Optically pumped LPE-grown $Hg_{1-x}Cd_xTe$ lasers ", J. Electron. Mater. 8, 191.
- [2]- Wijewarnasuriya P.S and Sivananthan S,1998 , "Arsenic incorporation in HgCdTe grown by molecular beam epitaxy" , Appl. Phys. Lett. 72,1694.
- [3]- Bevan M.J, Chen M.C and Shih H.D,1995, "The effect of wet etching on surface properties of HgCdTe" , Appl. Phys. Lett. 67,3450.
- [4]- Aqariden F, Wijewarnasuriya PS , Sivananthan S,Vac,1995, "Electrical properties of in situ As doped epilayers grown by molecular beam epitaxy " , J. Sci. Technol. B 16 , 1309.
- [5]- Bubulac L.O, Edwall D.D and Wiswanathan C.R,1991 , "Dynamics of arsenic diffusion in metalorganic chemical deposited HgCdTe on GaAs/Si substrates " , J. Vac. Sci. Technol. B 9, 1695.
- [6]- Aqariden F, Shih H D, Kinch M A, Schaake H F,2001 , "Electrical properties of low-arsenic-doped HgCdTe grown by molecular beam epitaxy " , Appl. Phys. Lett. 78 ,3481.
- [7]- Selamet Y, Badano G, Grein C H, Boieriu P, Nathan V, Sivananthan S, 2001, "Electrical activation and electrical properties of arsenic-doped $Hg_{1-x}Cd_xTe$ epilayers grown by MBE " , Proceedings of SPIE 4454 , 71.
- [8]- Lee T S, Garland J, Grein C H, Sumstine M, Jandeska A, Selamet Y, Sivananthan S, 2000, "Correlation of arsenic incorporation and its electrical activation in MBE HgCdTe " , J. Electron. Mater. 29 , 869.
- [9]- Berdinbg M A, Sher A, Vanschilfgaarde M, Chen A C, J. Arias J, 1998, "Modeling of arsenic activation in HgCdTe " , J. Electron. Mater. 27 ,605.
- [10]- Boieriu P, Grein C H, Jung H S, Garland J, 2005, "Arsenic activation in molecular beam epitaxy grown, in situ doped HgCdTe(211) " , Appl. Phys. Lett. 86 , 212106.
- [11]- Norton P, 2002, "HgCdTe infrared detectors" Opto-Electron. Rev. 10, 159-174 .
- [12]- Lei W, Chen Y, Xu B, Jin P, Zhao C, Yu K, and Z .G, 2005, ". One-Dimensional Nanostructures" , Wang Nanotechnology; vol16, p2785 .
- [13]- Blaha P, Schwaerz K, Madsen H, Kvasnicka D, and Luitz J, 2001. "WIEN2K", An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties ,Karlheinz Schwarz, Techn. University at Wien, Austria, ISBN 3 - 9501031-1-2 .
- [14]- Langreth D. C. and Perdew J. P. 1980, "Generalized Gradient Approximations for Exchange", Phys. Rev. B 21,5469.
- [15]- Bakhtiar U, Ahmed A, Shaari F, El Haj H, Mohammed B, 2014, " Study of wurtzite and zinblende GaN/InN based solar cells alloys: First-principles investigation within the improved modified Becke–Johnson potential", Solar Energy ; Vol. 107, p543-552.
- [16]- Schleife A, Fuchs F, Furthmüller J, and Bechstedt F, 2006, "First-principles study of ground- and excited-state properties of polymorphs",Phy. Rev. ; 73, 245212 .
- [17]- Benson, J. D. et Martinka, 2008 , "M. Modeling of the Structural Properties of $Hg_{1-x}Cd_xTe$ ", Journal of Electronic Materials, 2008, 37,1166-1170.
- [18]- Lalitha, S, Karazhanov, S. Z., Ravindran, P., Senthilarasu, S., Sathyamoorthy, R., & Janabergenov, J,2007, "Electronic structure, structural and optical properties of thermally evaporated CdTe thin films" , Physica B: Condensed Matter, 387(1-2), 227-238.
- [19]- Vegard L, Vegard, Z,1921, "Die konstitution der mischkristalle und die raumfüllung der atome " ,Phys. 5 (1921) 17.
- [20]- Rogalski, 2005, "HgCdTe infrared detector material: history, status and outlook" ,Prog.Phys.68. 2267-2336, (2005).