

Etude des Propriétés Mécaniques des Oxydes Métalliques

XO (X= Ba, Ca et Sr) Sous Pression

S. Douafer^{1,2}, A. Doghmane² & Z. Hadjoub²

1. Département de Physique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaïa. Algérie

2. Laboratoire des semi-conducteurs, département de physique, Faculté des Sciences Exactes, UBMA, Algérie.

E-mail : souaad.douafer@gmail.com

Résumé

L'effet des hautes pressions est devenu la recherche la plus active soit théorique ou bien pratique, dans cette étude, nous nous sommes intéressés à l'investigation théorique via SAM (Scanning Acoustic Microscopy) des oxydes métalliques : BaO, CaO, SrO, ayant la structure NaCl et qui peut se transformer en CsCl sous l'application des hautes pressions. Ainsi, nous avons mené une investigation détaillée afin de quantifier l'effet pression – élasticité.

Mots Clés : SAM, Pression, Propriétés Mécaniques. Oxydes Métalliques.

1. Introduction:

Les oxydes métalliques sont des matériaux très importants vue leurs importances dans différents domaines d'application, par exemple on trouve que le CaO test très utile car il a un très grand gap[1]. Oxydes: XO (e.g. Ba, Ca, Sr, Mg...) et les dioxydes: XO₂ (e.g. Ti, Nb, Cr, Mo, Ge, Pb & Sn) ayant la même structure cristalline.

Les oxydes de structure NaCl se transforment à une structure CsCl sous l'application de pressions élevée. Par exemple pour BaO et SrO, les transitions de phase sont respectivement atteintes à $P_{\tau}= 27.28$ et 39.72 GPa [1]. Cependant pour CaO, la transition de phase apparait à partir de 63 GPa [2].

2. Résultats et discussions:

2.1 Méthode de calcul:

Initialement, Nous avons déterminé les paramètres acoustiques des matériaux considérés, le module de compressibilité B, la densité des matériaux ρ , les vitesses longitudinales V_l , et transversales V_t , par les relations (1) [1], (2), (3) et (4) [3], qui sont regroupées sur le tableau (1).

$$B = (C_{11} + 2C_{12})/3 \quad (1), \quad \rho = \rho_0(v_0/v) \quad (2),$$

$$V_l = (3B + 4G)^{1/2} / (3\rho)^{1/2} \quad (3), \quad V_t = (G/\rho)^{1/2} \quad (4)$$

Ensuite, nous avons utilisé un programme de simulation théorique développé au Laboratoire dont les conditions de simulations utilisées sont celle adoptées expérimentalement dans le cas d'un microscope acoustique à balayage en mode de réflexion ayant un demi-angle d'ouverture de la lentille de 50°, une fréquence de travail de 142 MHz et l'eau comme liquide de couplage. Ce logiciel peut être appliqué pour n'importe quelle combinaison liquide/solide.

La méthode de calcul est constituée de plusieurs étapes [4]:

- ✓ Calcul du coefficient de réflexion $R_{\square}(\theta_{\square})$;
- ✓ Calcul de la signature acoustique, $V(z)$;
- ✓ Traitement du $V(z)$ par transformée de Fourier rapide, FFT ;
- ✓ Détermination de la vitesse de propagation du mode de propagation.
- ✓ Toutes les étapes précédentes sont répétées pour chaque valeur de la pression.

Tab.1 : Propriétés élastiques de CaO, BaO et SrO pour différentes pressions.

P (GPa)	BaO			CaO		
	ρ (g/cm ³)	V_l (m/s)	V_t (m/s)	ρ (g/cm ³)	V_l (m/s)	V_t (m/s)
0	5903	4629.5	2655.6	3321.3	7482.4	4390.1
10	6602,0	5673.0	3184.7	3610.0	8801.3	5263.4
20	7129,2	6274.7	3485.5	3830.7	9651.7	5790.4
30	7567,1	6587.9	3667.3	4020.9	10347.2	6191.1
40	8009,5	6676.1	3762.6	4341.5	10691.0	6419.1

P (GPa)	SrO		
	ρ (g/cm ³)	V_l (m/s)	V_t (m/s)
0	4948.8	5693.3	3364.8
10	5438.2	6635.7	3953.9
20	5822.1	7342.1	4368.5
30	6139.9	7947.5	4743.6
40	6427.0	8456.6	5025.5

2.2 Effet de la pression sur les vitesses de Rayleigh

A partir des spectres trouvés de FFT correspondantes aux différentes pressions et matériaux, nous avons déterminé la vitesse de Rayleigh, V_R , à partir de la relation suivante [5] :

$$V_R = \frac{V_{liq}}{\sqrt{1 - \left(1 - \frac{V_{liq}}{2f\Delta z}\right)^2}} \quad (5)$$

Avec V_{liq} c'est la vitesse de l'eau, f c'est la fréquence du travail et Δz c'est la période spatiale (la période séparant deux maxima ou deux minima successifs dans la signature acoustique).

Pour chaque combinaison. Le décalage des raies principales dans les spectres FFT entraîne une variation de V_R . Les résultats obtenus sont regroupés dans le tableau (2).

A partir de ce dernier, On remarque qu'il y'a une augmentation rapide de la vitesse de Rayleigh, V_R en fonction de la pression. Cette variation peut se justifier par les structures cristallines de ces matériaux qui sont devenues plus compactes en les comprimant.

Tab.2 : Périodes spatiales et vitesses de Rayleigh en fonction de la pression pour BaO, CaO et SrO

P (GPa)	0	10	20	30	40
Δz_{BaO} (μm)	26.4	37.8	46	51.2	53.8
Δz_{CaO} (μm)	73.7	107.8	128.6	147.4	165.1
Δz_{SrO} (μm)	42	58.9	79	85.8	97.9
$V_{R,BaO}$ (m/s)	2500	2945	3225	3393	3473
$V_{R,CaO}$ (m/s)	4036	4853	5290	5654	5978
$V_{R,SrO}$ (m/s)	3092	3625	4174	4343	4629

2.3 Effet de la pression sur les constantes élastiques :

Afin de boucler cette étude, nous avons calculé les modules élastiques : de Young (E) ainsi que celui de Cisaillement (G) (exprimant les propriétés mécaniques de ces matériaux) pour chaque valeur de la pression, en utilisant les formules (6) et (7) [6].

$$E = \rho V_T^2 (3V_L^2 - 4V_T^2) / (V_L^2 - V_T^2) \quad (6)$$

$$G = \rho V_T^2 \quad (7)$$

Ensuite, nous avons comparé ces valeurs avec d'autres résultats trouvés qui sont calculés déjà de la même méthode pour les oxydes MgO et CdO [7,8].

Les résultats obtenus sont représentés par les figures (1) et (2). On remarque que la pression fait augmenter les constantes élastiques. En effet, ces courbes présentent une:

- ✓ Zone presque linéaire, qui présente une augmentation des valeurs de E plus rapide dans l'intervalle de pression allant de 0 jusqu'à 40 GPa pour les matériaux MgO et CdO.
- ✓ Zone de saturation pour le reste d'intervalle des pressions, dans laquelle l'évolution se stabilise à des valeurs plus proches pour le CdO.
- ✓ Evolution plus grande pour les trois oxydes: BaO, CaO et SrO en augmentant la pression appliquée.

En deuxième vue, la figure (2); montre l'évolution du module de cisaillement, G en fonction de la pression. Nous trouvons aussi, que les variations apparentes du module d'Young, E avec les variations de pressions pour les mêmes matériaux sont pratiquement les mêmes évolutions que celles des modules de cisaillement.

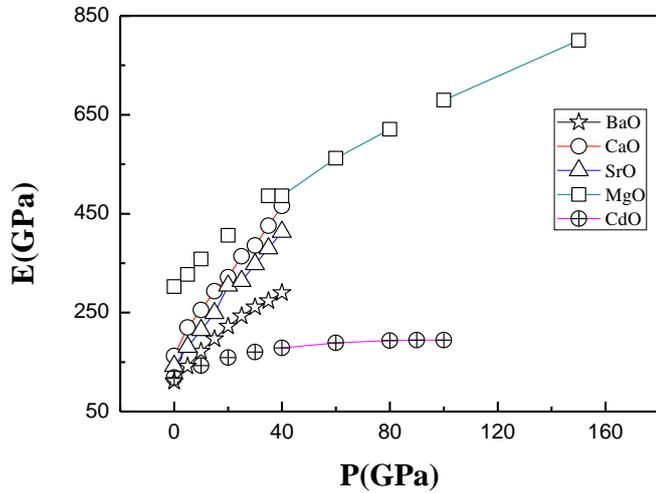


Fig.1 : Variations de module de Young, E en fonction de la pression

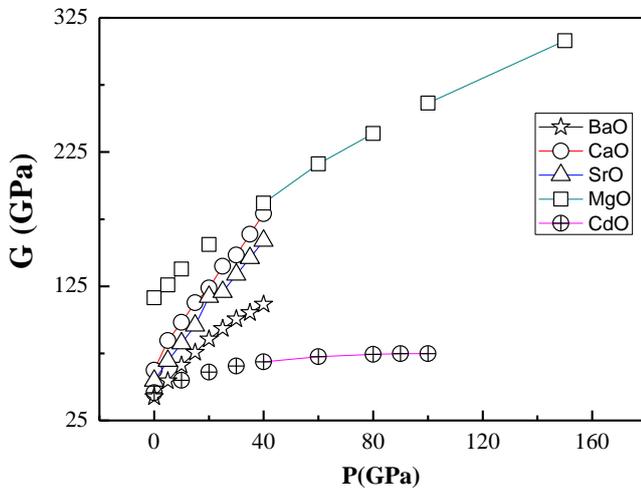


Fig.2 : Variations de module de cisaillement G, en fonction de la pression

Faisons le fitting de ces courbes, nous avons déduit une variation de la forme suivante :

$$C = C_0 + A_i P + A_j P^2 \quad (8)$$

Avec : C= E ou G, $C_0 = E_0$ ou G_0 et A_i A_j sont des constantes caractéristiques des matériaux

3. Conclusion

Dans ce travail, Nous avons étudié certains paramètres mécaniques des oxydes métalliques BaO, CaO et SrO sous l'intervalle de pression [0-40]GPa. Nous avons trouvé que l'application de grandes pressions provoque l'évolution de ces paramètres sous la forme générale suivante :

$$M = M_0 + A_k P + A_l P^2$$

$M = E$ ou G , M_0 c'est le module élastique à pression nulle et P signifie la pression.

References

- [1] B. Ghebouli, M.A.Ghebouli, M.Fatmi, M.Benkerri, *First-principles calculations of structural, elastic, electronic and optical properties of XO (X=Ca, Sr and Ba) compounds under pressure effect*, Materials Science in Semiconductor Processing **13**, 92–101, (2010)
- [2] L. Louail, O. Krachni, A. Bouguerra, F. Ali Sahraoui *Effect of pressure on structural and elastic properties of alkaline-earth oxide CaO*
- [3] A. Briggs, *Acoustic Microscopy*, **90** (Clarendon Press, Oxford, 1992).
- [4] C.J.R. Sheppard And T. Wilson, " *Effects of high angles of Convergence on V(z) in the scanning acoustic microscope*", J. Appl. Phys. Lett. **38**, 858, (1981).
- [5] J. Kushibiki And N. Chubachi, " *Material Characterization By Line Focus Beam Acoustic Microscope*", IEEE Sonics Ultrasound, SU-**32**, 189, (1985).
- [6] E. Dieulesaint And D. Royer, « *Ondes Élastiques dans les Solides : Application au Traitement du Signal* », Masson et Cie (1974).
- [7] S ;Douafer, *Investigation des effets de la pression sur les propriétés élastiques des structures cristallines et amorphes*, Thèse, UBMA, 2015.
- [8] A. Doghmane, S.Douafer and Z. Hadjoub, ' *Investigation of pressure effects on elastic parameters of isotropic and anisotropic MgO*', journal of optoelectronics and advanced materials, **16**, No. 11-12, November - December 2014, 1339 – 1343.