



**HAL**  
open science

## **Influence du dopage (Ti, Zr, Hf) sur les propriétés structurales et électromécaniques de KNN**

Hicham Kacimi-Naciri, Mohamed Rguiti, Ahmed Bachar, Assia Mabrouk, Mohamed Aymen Ben Achour, Christian Courtois, Yannick Lorgouilloux

### ► To cite this version:

Hicham Kacimi-Naciri, Mohamed Rguiti, Ahmed Bachar, Assia Mabrouk, Mohamed Aymen Ben Achour, et al.. Influence du dopage (Ti, Zr, Hf) sur les propriétés structurales et électromécaniques de KNN. Mardi des chercheurs, Mar 2026, MONS, Belgium. <hal-05583561>

**HAL Id: hal-05583561**

**<https://hal.science/hal-05583561v1>**

Submitted on 7 Apr 2026

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire HAL, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Copyright - All rights reserved

# Influence du dopage (Ti, Zr, Hf) sur les propriétés structurales et électromécaniques de KNN

**Hicham Kacimi-Naciri<sup>1,2</sup>, Mohamed Rguiti<sup>1</sup>, Ahmed Bachar<sup>2</sup>, Assia Mabrouk<sup>2</sup>, Mohamed Aymen Ben Achour<sup>1</sup>, Christian Courtois<sup>1</sup>, Yannick Lorgouilloux<sup>1</sup>,**

(1) Univ, Polytechnique Hauts-de-France, INSA Hauts-de-France, CERAMATHS – Laboratoire de Matériaux Céramiques et de Mathématiques, F-59600 valenciennes, France,

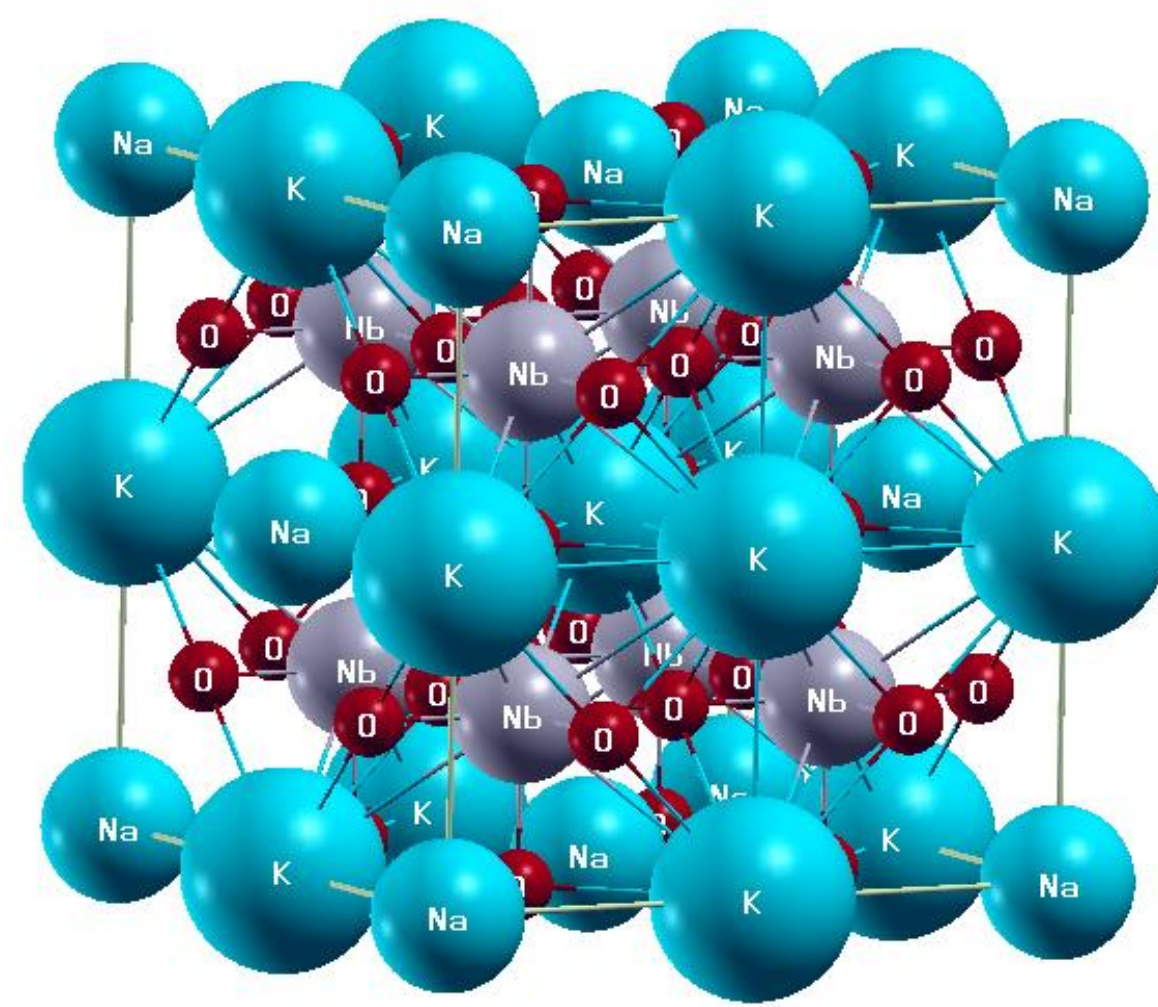
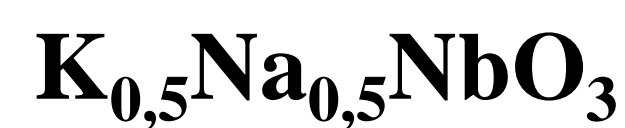
(2) Faculté des Sciences Appliquées - Ait Melloul, Université Ibn Zohr – Laboratoire Génie de Procédés (LGP), BP 32/S, CP 80000 Agadir, Maroc,

## Introduction

Les céramiques piézoélectriques sans plomb, notamment  $K_{0,5}Na_{0,5}NbO_3$  (KNN), représentent des candidats attractifs pour remplacer les matériaux contenant du plomb, Grâce à des calculs DFT, cette étude analyse l'influence du dopage par Ti, Zr et Hf sur ses propriétés structurales, électroniques et piézoélectriques, Le but est de déterminer le dopant le plus efficace pour concevoir des dispositifs électromécaniques à haute performance et longue durée de vie,

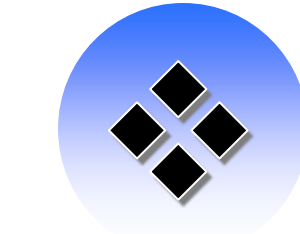
## Méthodologie

- Modélisation de la structure de KNN pur et dopé



- ❖ P4mm (99)
- ❖  $a$  (Å) =  $b$  (Å):3,9810,  $c$  (Å):4,010
- ❖  $\alpha = \beta = \gamma$  (°) = 90°
- ❖ 2\*2\*2 supercell
- ❖  $K_{1-x}Na_xNb_{1-y}M_yO_3$  (M= Ti, Zr, Hf) avec  $y=0,125$

## Propriétés piézoélectriques



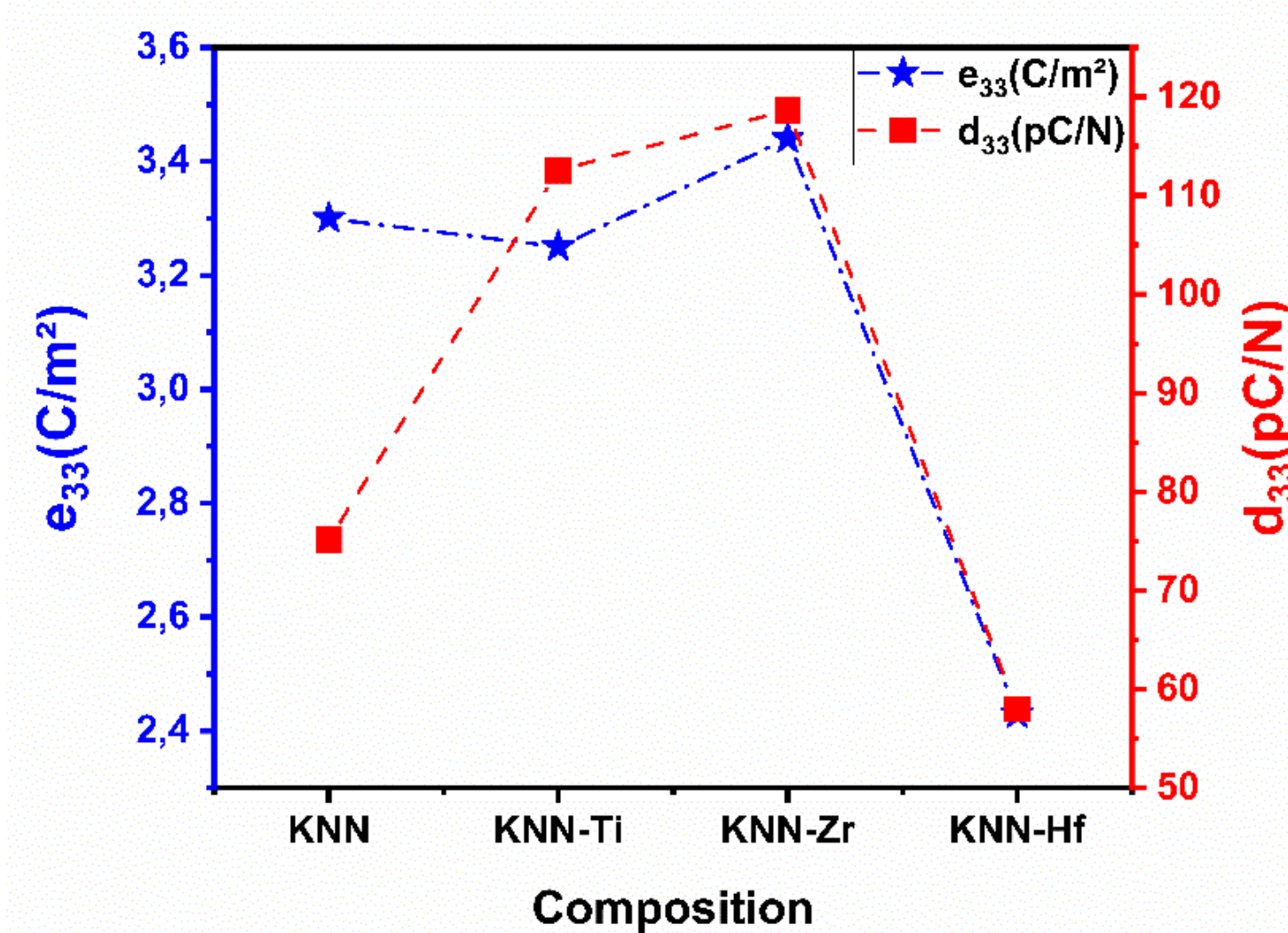
Compositions	$K_{0,5}Na_{0,5}NbO_3$ (KNN) $x=0,5$	KNN-Zr $y=0,125$	KNN-Ti $y=0,125$	KNN-Hf $y=0,125$
Coefficient piézoélectrique $e_{33}$ (C/m <sup>2</sup> )				
$e_{33}$ (C/m <sup>2</sup> )	3,30	3,44	3,25	2,43
Constante piézoélectrique $d_{33}$ (pC/N)				
$d_{33}$ (pC/N)	75 80 [4] 80 [5] 89 [6]	118	112	57

\*Constante piézoélectrique  $d_{33}$  (pC/N),  
\*Coefficient piézoélectrique  $e_{33}$  (C/m<sup>2</sup>),

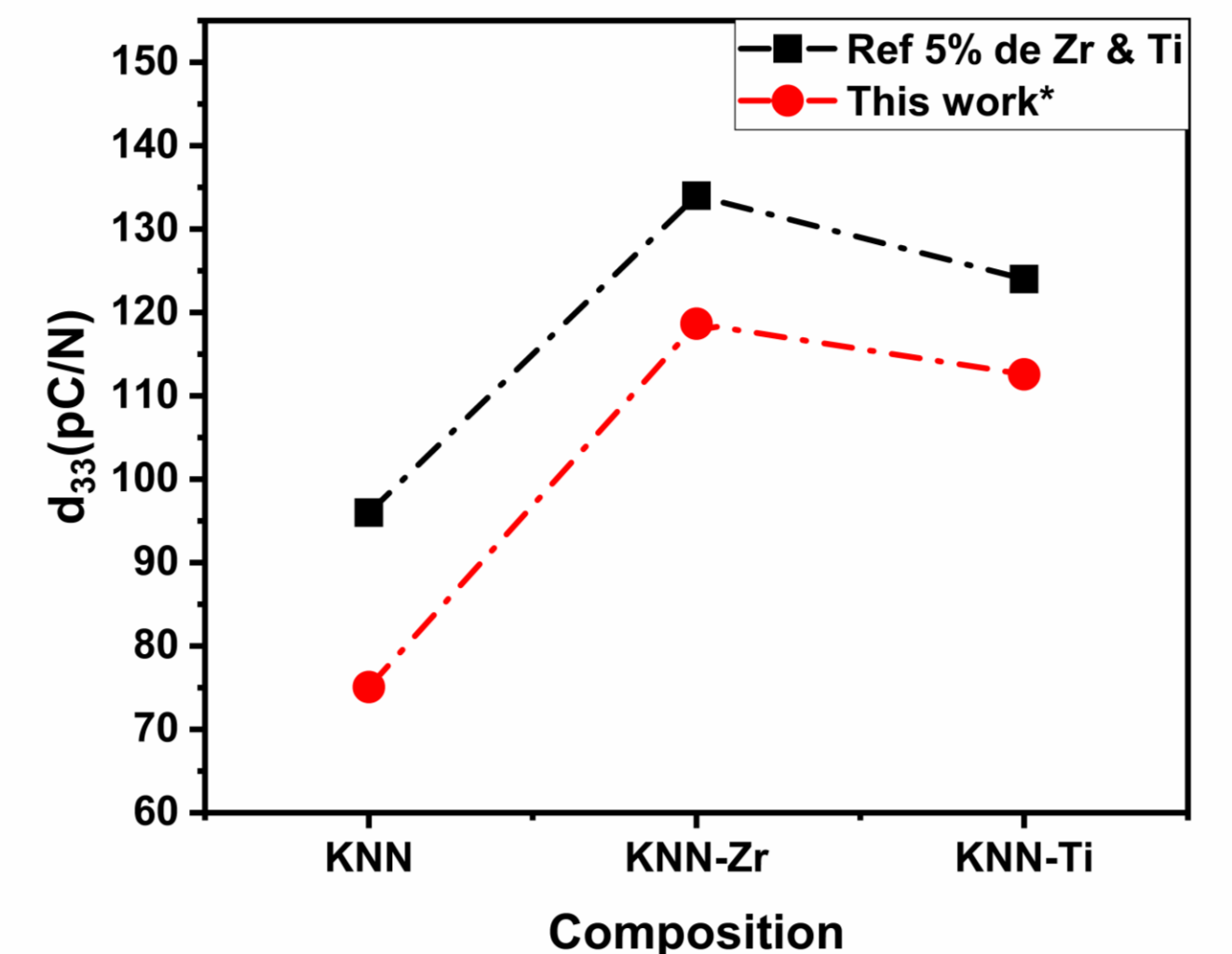
## Propriétés structurales

Composition	$K_{0,5}Na_{0,5}NbO_3$	$K_{0,5}Na_{0,5}NbO_3$ -Ti	$K_{0,5}Na_{0,5}NbO_3$ -Zr	$K_{0,5}Na_{0,5}NbO_3$ -Hf
$a$ (Å)	4,1095	3,92	3,98	3,90
$c$ (Å)	4,1394	3,95	4,08	3,92
Tétragonalité (c/a)	1,0072	1,007	1,025	1,005
	4,585			
Densité (g/cm <sup>3</sup> )	4,498 [1]	4,221	4,301	4,721
	4,280 [2]			
E gap (eV)	1,673	1,82	1,75	1,25
	1,552 [3]			

- Résultats Théoriques obtenus dans cette recherche.

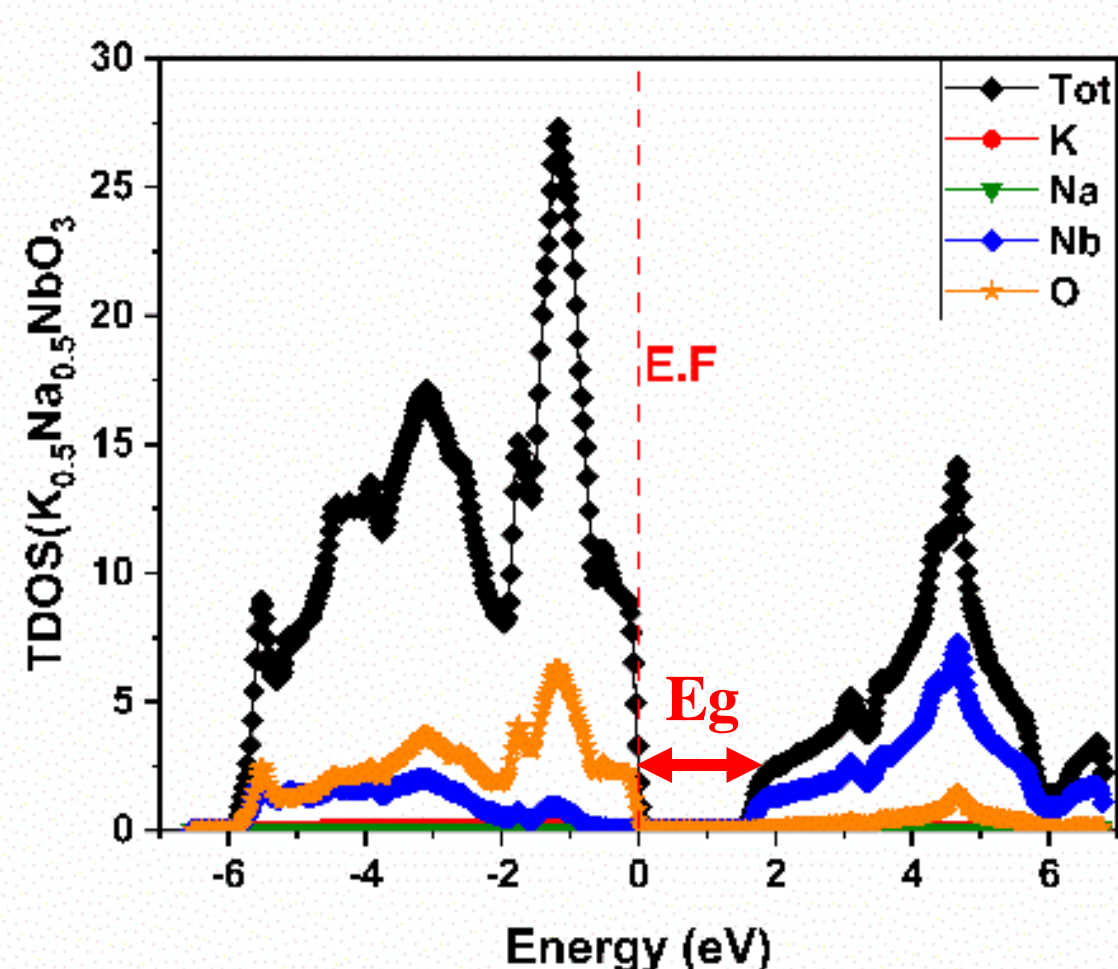


- Comparaison avec une étude bibliographique sur le dopage avec un pourcentage de 5 % de Zr ou Ti [7].

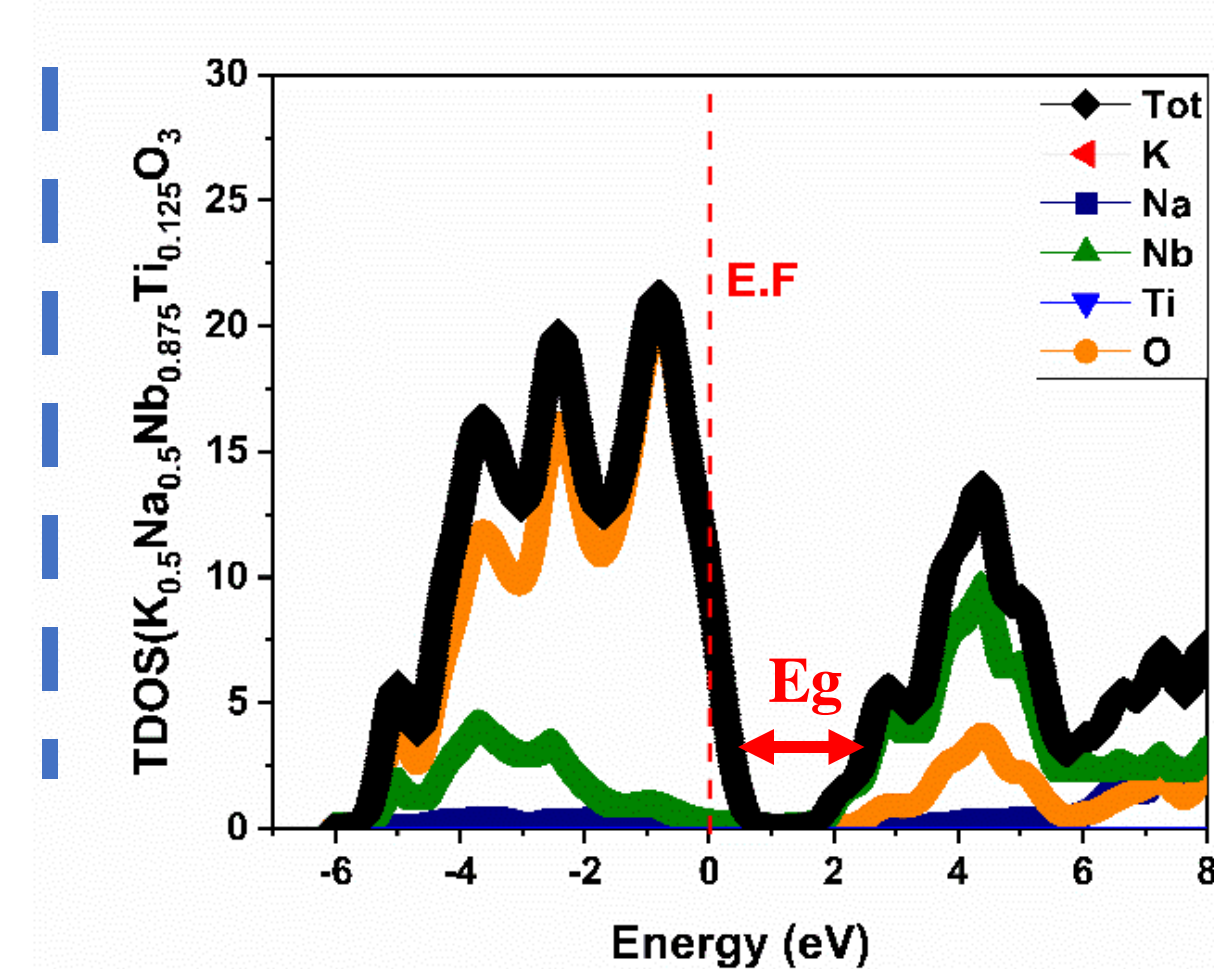


Constante piézoélectrique théorique  $d_{33}$  (pC/N) en fonction de la composition dans KNN-M avec M= Ti, Zr, Hf,

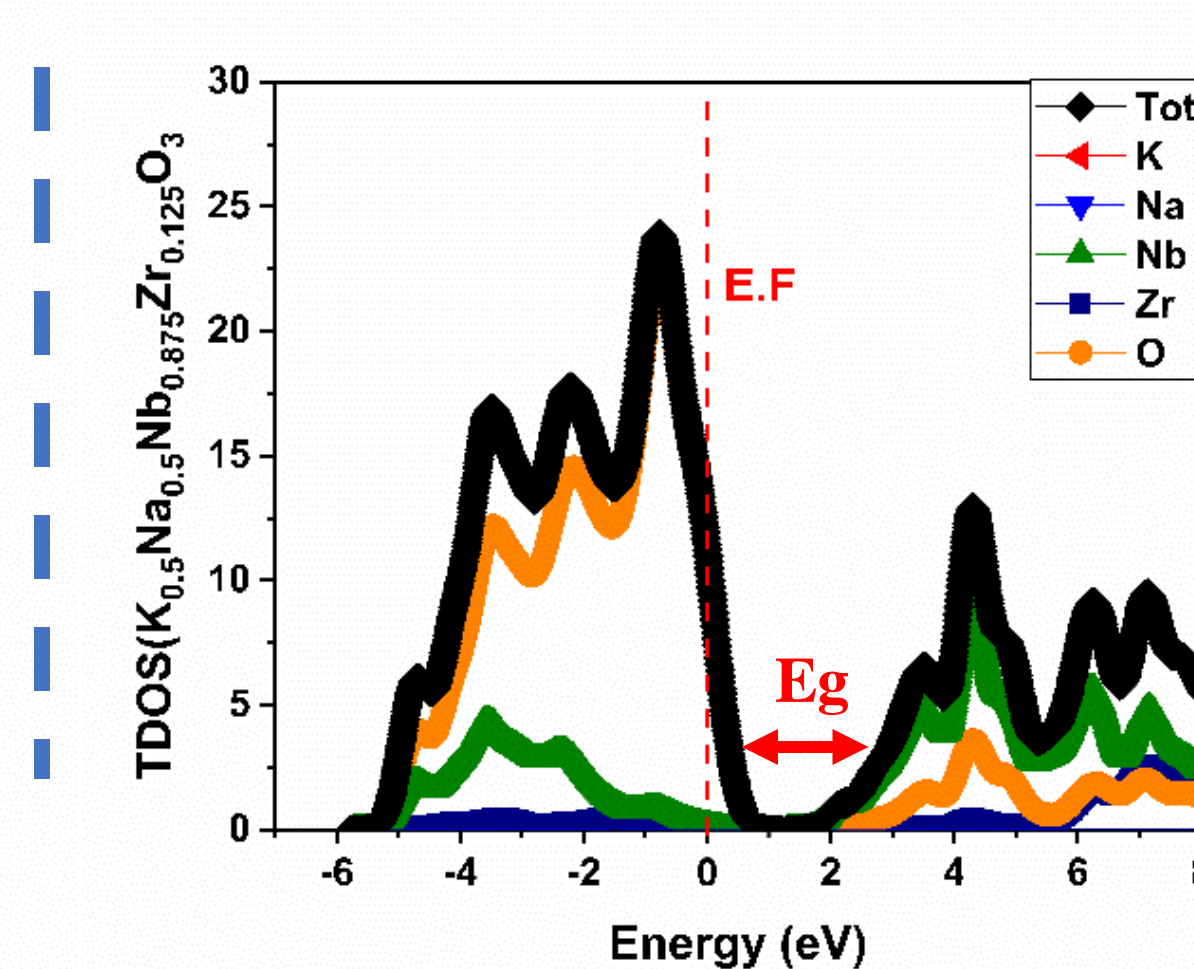
## Propriétés électroniques



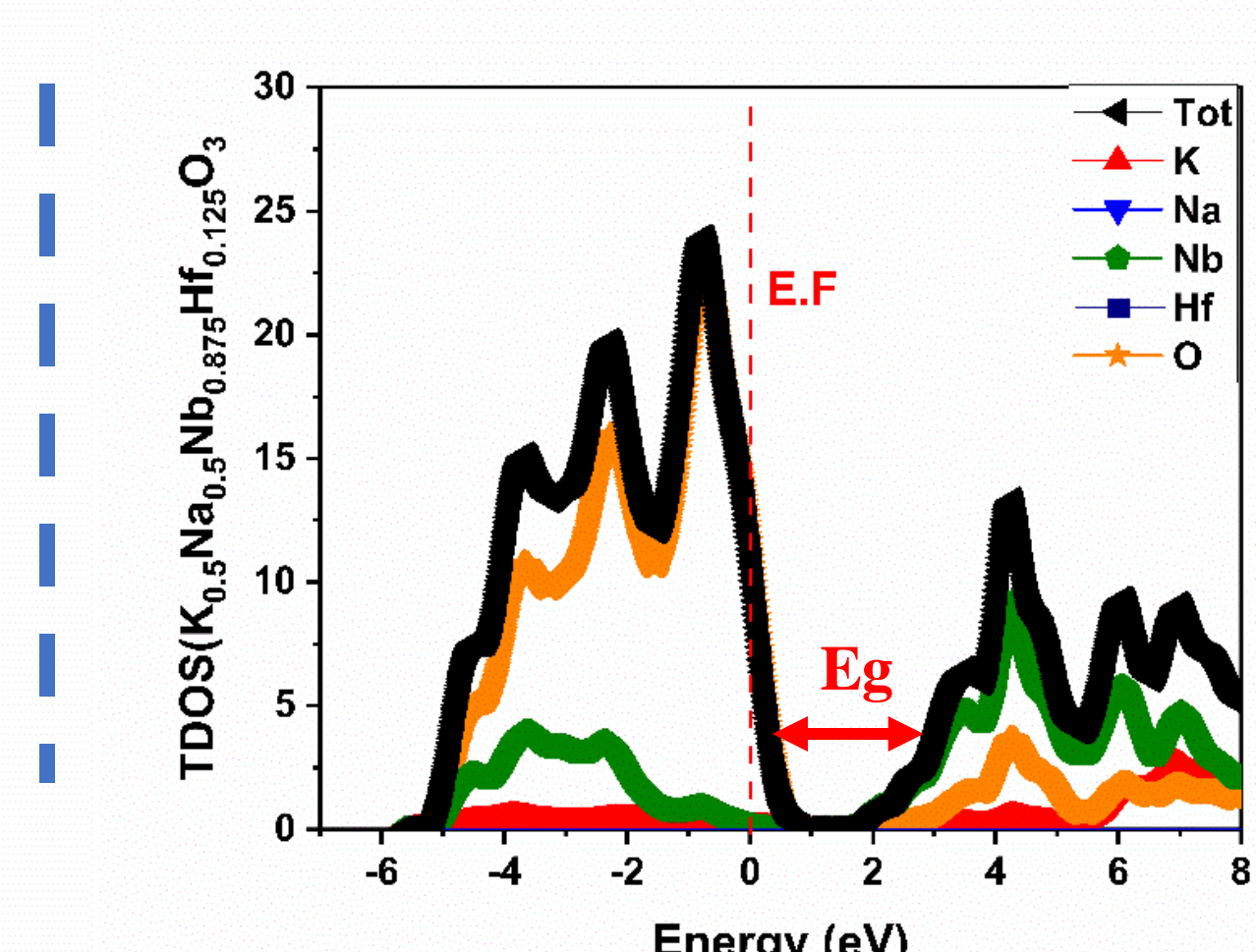
$K_{0,5}Na_{0,5}NbO_3$



$K_{0,5}Na_{0,5}NbO_3$ -Ti



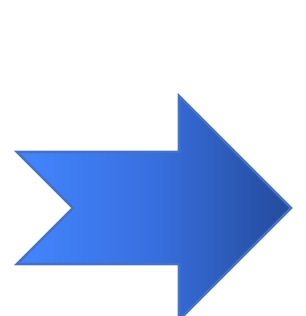
$K_{0,5}Na_{0,5}NbO_3$ -Zr



$K_{0,5}Na_{0,5}NbO_3$ -Hf

Densité totale d'état (TDOS) de  $K_{0,5}Na_{0,5}NbO_3$  pur et dopé Ti, Zr et Hf

## Références



Pour la version intégrale.

Scan Me

## Conclusion & Perspectives

- Le dopage (Ti, Zr, Hf) améliore la réponse piézoélectrique du KNN par modification de la structure électronique et cristalline,
- Zr est le dopant optimal avec  $d_{33} \approx 118$  pC/N, nettement supérieur au KNN pur ( $\sim 75$  pC/N),
- Ti montre une amélioration notable, tandis que Hf induit une forte anisotropie mais une réponse piézoélectrique plus faible,
- ✓ Validation expérimentale : confirmer les performances piézoélectriques prédites des structures dopées,
- ✓ Optimisation future : explorer le co-dopage pour maximiser la réponse électromécanique,



ED PHF  
635

Contact

Hicham.kacimi-naciri@uphf.fr

