

# SEMINAIRE



**Service de Recherches de Métallurgie Physique**  
DEN/DANS/DMN

Bibliothèque du SRMP – Bâtiment 520 – Pièce 109

## ***Etude théorique du couplage défaut ponctuel – multilacunes sur le processus de migration de l'oxygène dans le nickel***

**Claude MIJOULE**

**Laboratoire CIRIMAT, Institut National Polytechnique de Toulouse**

La croissance des couches d'oxydes sur les matériaux solides s'accompagne de processus de diffusion, de transfert et également de réactions d'interfaces. Les conséquences des réactions d'interfaces sur la morphologie des oxydes formés et sur les évolutions chimiques et microstructurales du substrat métalliques ont été abondamment étudiées tant au niveau théorique qu'expérimental. Cependant, à ce jour, un grand nombre de faits expérimentaux demeurent inexpliqués. En particulier, la profondeur de pénétration de l'oxygène atomique dans le substrat métallique suite au développement d'une couche d'oxyde à basse température est de plusieurs ordres de grandeur supérieure à ce qui est prévisible en appliquant une approche classique de diffusion. Certaines interprétations expérimentales supposent que la diffusion d'oxygène atomique peut être favorisée par les lacunes du métal. Il demeure que le support théorique de ces mécanismes complexes restait peu fourni et méritait d'être enrichi et développé.

Au delà de l'aspect théorique, les conséquences pratiques de ces phénomènes affectent la durabilité des structures mécaniques dans le domaine du transport ou de la production d'énergie. A ce titre, des réponses en terme de modification de la chimie des matériaux peuvent être proposées pour améliorer la durée de vie des structures à condition toutefois que les mécanismes de dégradation en objet dans ce projet soient compris et avérés.

Nous présentons nos résultats obtenus pour interpréter les différents processus d'interaction entre les différents défauts à savoir les monolacunes, les dilacunes, (et plus généralement les multilacunes), l'oxygène atomique ou moléculaire interstitiel ou en substitution. Les effets de dilatation thermique sont également pris en compte.

L'approche utilisant la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité nous semble à l'heure actuelle la plus efficace pour représenter correctement la contribution de la corrélation électronique, importante en général dans les atomes métalliques. Le processus d'absorption de l'oxygène atomique et moléculaire dans différents sites interstitiels ou en substitution est présenté. De plus, les effets thermiques sur le processus de formation de clusters de lacunes et celui de la diffusion d'oxygène atomique dans le nickel sont introduits tenant compte des interactions cluster-oxygène. Les premiers résultats obtenus concernant ces clusters montrent que contrairement aux bilacunes, les trilacunes sont très stables. Par ailleurs elles ont une faible énergie de migration. Le processus de couplage entre oxygène atomique et ces embryons de cavité peut permettre à celui-là de diffuser plus facilement dans le métal. C'est ce type de mécanisme que nous proposons.

**Vendredi 23 janvier 2009 à 10h30**

***N.B :*** ***Les visiteurs de nationalité étrangère hors Union Européenne sont priés de bien vouloir avertir impérativement 3 semaines à l'avance – les visiteurs de l'Union Européenne 1 ou 2 jours avant le séminaire – le Secrétariat du Service de leur entrée sur le Centre :***  
***Tel : 01 69 08 66 64 – Fax : 01 69 08 68 67***