Diffusion des atomes en insertion dans les systèmes cubiques à faces centrées : cas du nickel

Matthieu David*†[1], Daniel Daniel‡ , and Damien Connétable§[1]

[1]Centre interuniversitaire de recherche et d'ingenierie des matériaux (CIRIMAT) – Université Paul Sabatier (UPS) - Toulouse III, CNRS : UMR5085, Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT – CIRIMAT, CNRS, INPT, UPS, 4, allée Emile Monso, BP 44362, 31030 Toulouse Cedex 4, France, France

Résumé

Résumé :
De nombreux mécanismes physico-chimiques tels que la ségrégation aux interfaces, les transformations de phases, les processus de fragilisation des alliages métalliques ou encore les cinétiques de dissolution d'éléments se basent sur la connaissance des mécanismes de diffusion des différentes espèces en solution dans le réseau. La connaissance des processus de diffusion des différentes espèces impliquées dans l'oxydation à haute température peut être importante pour comprendre et prédire l'évolution des propriétés mécaniques des super-alliages à base de nickel dans des atmosphères oxydantes. Par exemple, plusieurs observations expérimentales suggèrent que la présence de carbone, d'hydrogène ou encore de lacunes, même en très faible quantité, pourraient modifier de manière significative la perméabilité de l'oxygène dans les systèmes métalliques [1]. Plusieurs études expérimentales ont permis de déterminer les coefficients de diffusion des espèces O [2–5] et H [6, et voir les références citées] au sein de systèmes métalliques à base de nickel. Mais cette connaissance globale de la diffusion ne permet pas de découpler les différents mécanismes physiques pouvant intervenir à l'échelle atomique. Par ailleurs, en dehors de O et H, les coefficients de diffusion d'autres interstitiels tels que C et de N dans le nickel sont beaucoup plus rare.
Nous nous proposons ici de présenter une étude des mécanismes de diffusion des différents atomes en insertion dans les cfc au moyen d'une approche multi-physique. À l'échelle atomique, la DFT est utilisée pour calculer les grandeurs caractéristiques des processus élémentaires (énergies de migration et fréquences de saut), et un modèle analytique du coefficient de diffusion sera proposé en fonction des différentes configurations obtenues. Les résultats seront comparés avec des résultats de simulations KMC. Enfin nous aborderons la stabilité des amas constitués d'une lacune et d'un élément interstitiel, et de l'influence de la présence de la lacune sur les mécanismes de diffusions des éléments interstitiels.
Bibliographie

S. Pérusin. Experimental Study of the Interactions Between Oxidation and Structural Defects. Materials Science Forum, 461 :123–130, 2004.

Jong-Wan Park and Carl J Altstetter. The diffusion and solubility of oxygen in solid nickel. Metallurgical Transactions A, 18(1) :43–50, 1987.

*Intervenant
†Auteur correspondant: matthieu.david@ensiacet.fr
‡Auteur correspondant: daniel.monso@ensiacet.fr
§Auteur correspondant: damien.connetable@ensiacet.fr

G. J. Lloyd and J W Martin. The Diffusivity of Oxygen in Nickel Determined by Internal Oxidation of Dilute Ni-Be Alloys. Metal Science Journal, 6 :7–11, 1972.

Shoji Goto, Koji Nomaki, and Sigeyasu Koda. Internal oxidation of nickel alloys containing a small amount of chromium. JAP INST METALS J, 31(4) :600–606, 1967.

R Barlow and P. J. Grundy. The Determination of the Diffusion Constants of Oxygen in Nickel and alpha-ironby an Internal Oxidation Method. Journal of Materials Science, 4 :797–801, 1969.

H Vehoff. Diffusion of hydrogen in metals. Hydrogen in Metals III, 73 :51–91, 1997.