



[www.emse.fr](http://www.emse.fr)

# ART nouveau : Mécanismes de diffusion



**Patrick GANSTER**

Ecole nationale supérieure des mines de Saint-Etienne



## MECANIQUE PHYSIQUE ET INTERFACES

### PERSONNEL

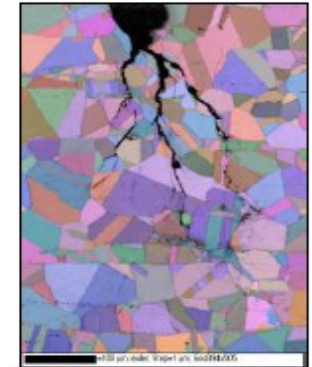
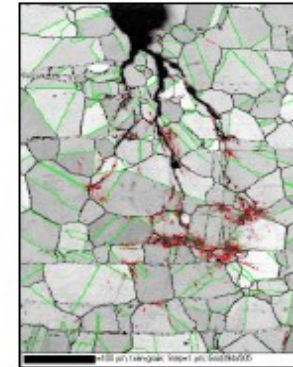
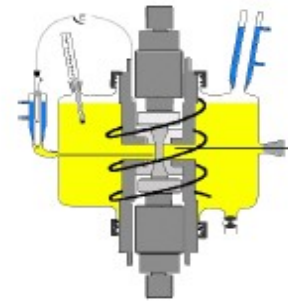
- 7 enseignants-chercheurs
- 2 ingénieurs
- 6 techniciens
- 12 doctorants

### DOMAINES DE COMPETENCE

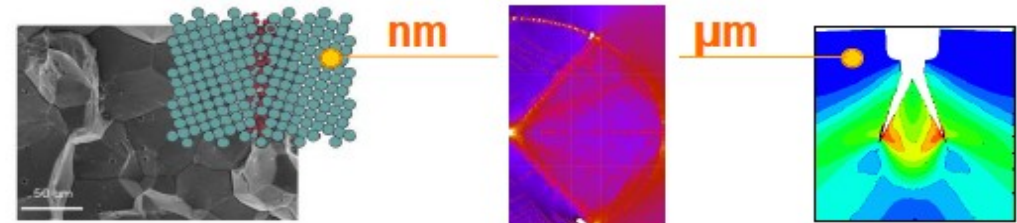
- Effet de l'environnement
  - Mécanique et corrosion
  - Oxydation à haute température
- Propriétés sensorielles
  - l'ingénierie de perception
  - physico-chimie des surfaces

### PARTENAIRES

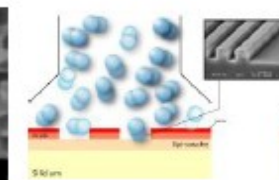
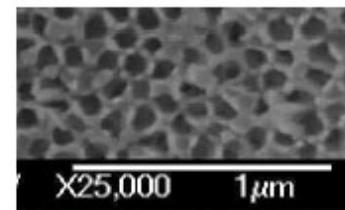
- EDF, CEA, AREVA, DGA, Air Liquide,...
- Univ. Grenoble, Poitiers, ...
- SINTEF, LANL,



Fissuration en corrosion sous contrainte de l'acier inoxydable 316



Simulations multi-échelle de l'endommagement



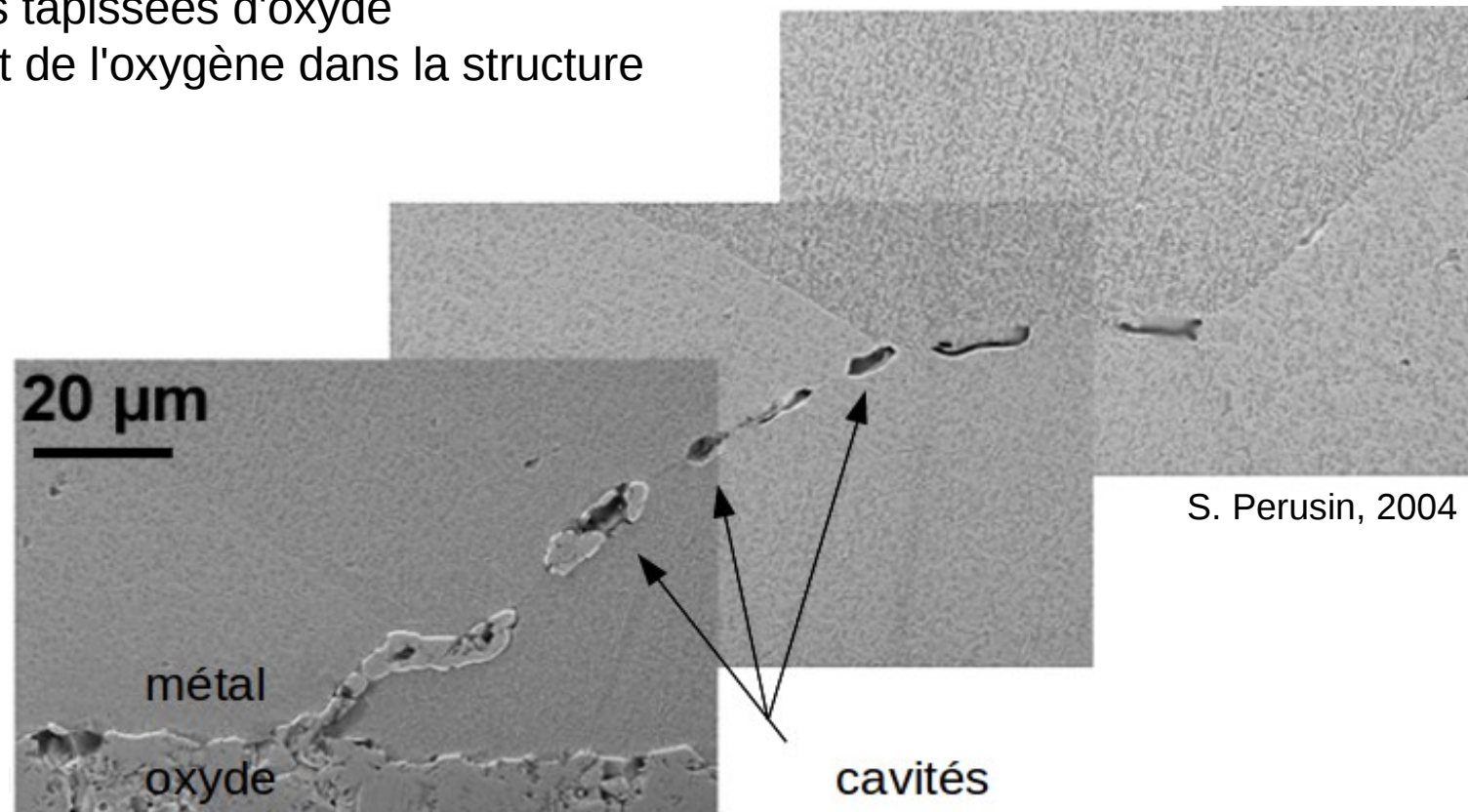
Surface nanoporeuse d'Al anodisé



# Oxydation à haute température

Nickel pur, 48h à 1000°C

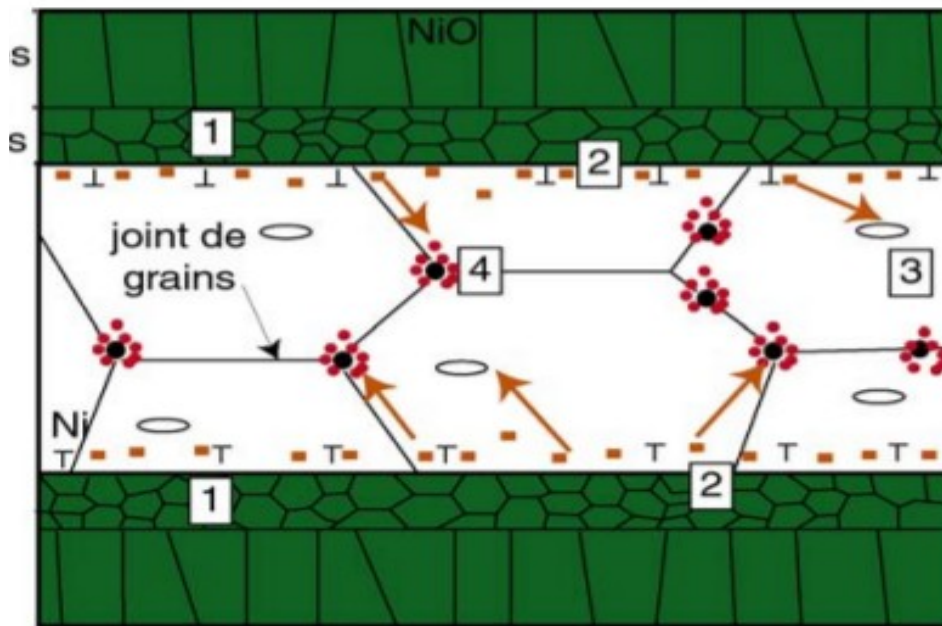
Des cavités tapissées d'oxyde  
→ transport de l'oxygène dans la structure





# Oxydation à haute température

Nickel Pur ..



## Formation de cavités (ANR CAVOX)

Défauts ponctuels :

Injection de lacunes dans le substrat (oxydation cationique) et condensation

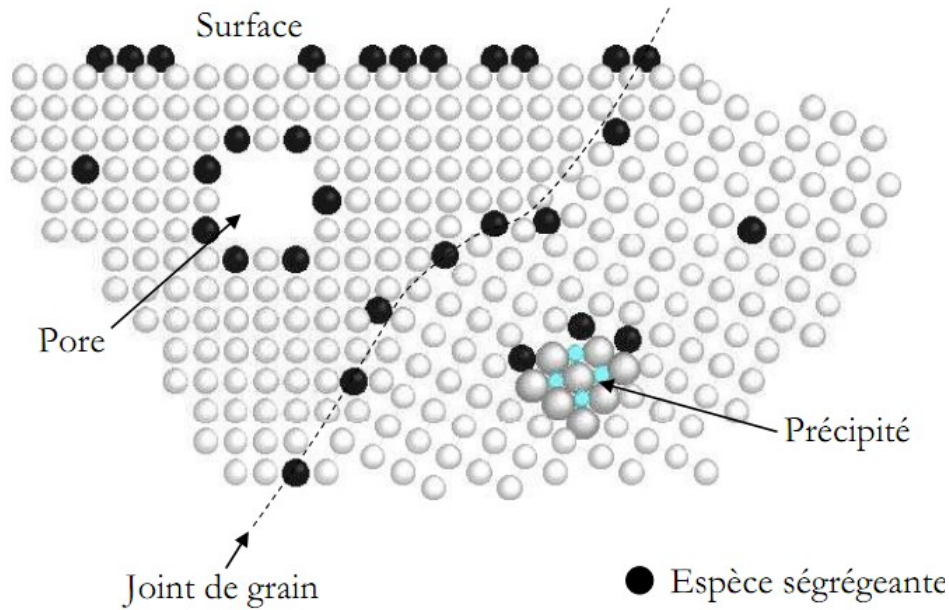
Impuretés :

Solubilité et transport de O (cavités tapissées d'oxyde)

Carbone ( $C + 2 O \rightarrow CO_2 ?$ )



# Phénomènes de ségrégation



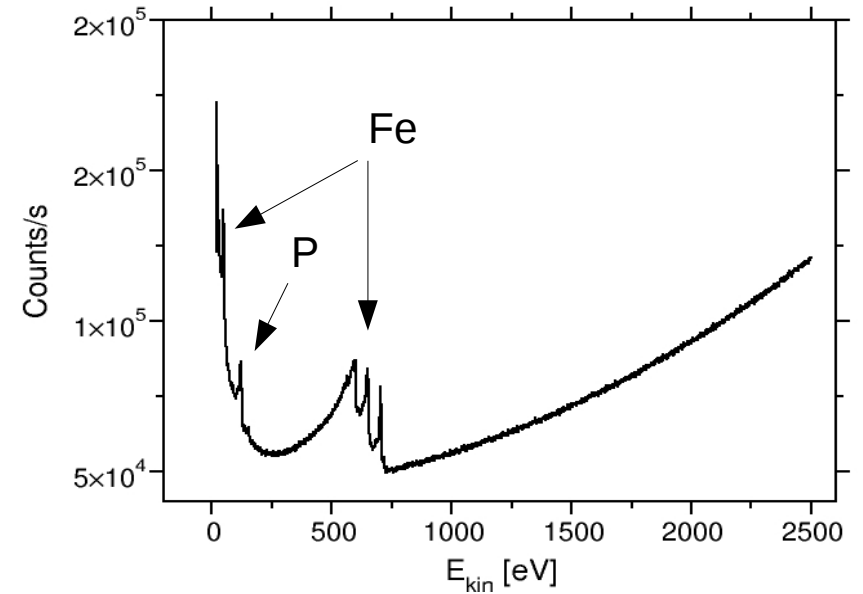
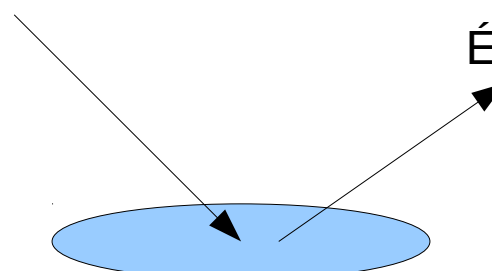
- Ségrégation des impuretés aux interfaces
- Fragilisation du matériau

Spectroscopie Auger

→ *Quantification des éléments en surface*

Faisceau d'électrons

Électrons Auger

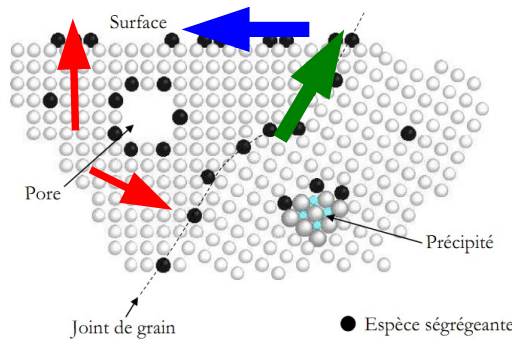
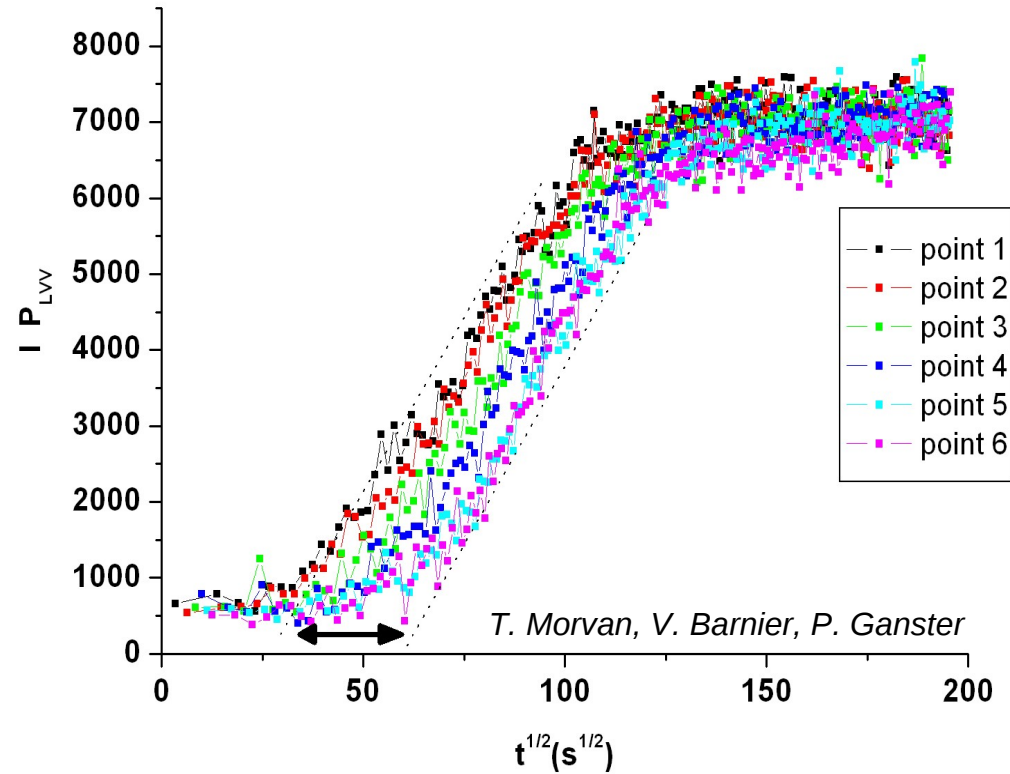
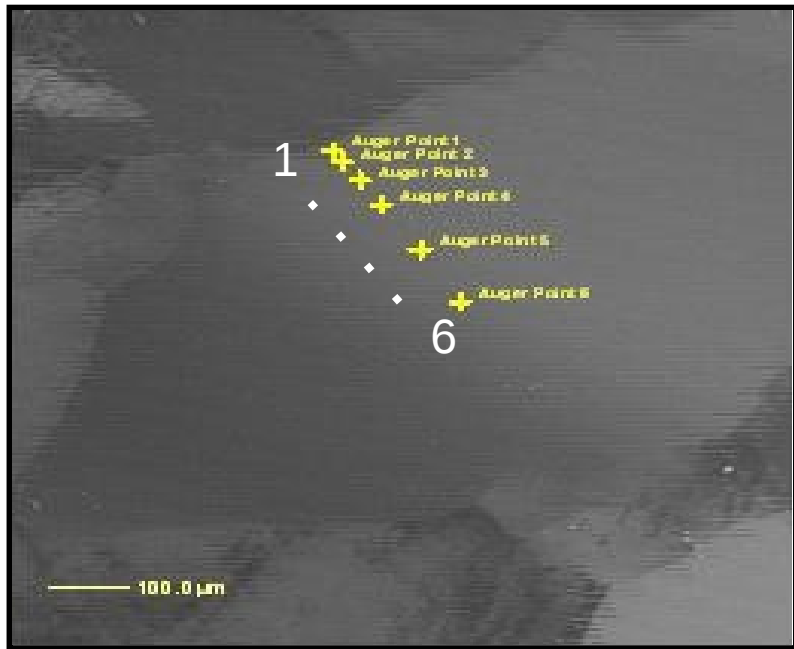




# Cinétique de ségrégation

Matériaux: Fe pur (gros grains) + 100ppm de P

Mesure AES: (FEG spot 150nm, 10 kV, 5nA), mesures sur le même grain en cours de recuit à 500 °C



$D_{\text{volume}}$  ,  $D_{\text{surface}}$  ,  $D_{\text{jdG}}$  ?



---

## Utilisation de la méthode ART pour l'étude de la diffusion

- Défauts ponctuels dans le silicium
- Oxydation du silicium : premiers instants de formation de  $\text{SiO}_2$
- Couplage LAMMPS / ART



## ART *nouveau* : **Activation**, Relaxation **Technique**

**N. Mousseau** et G. T. Barkema,

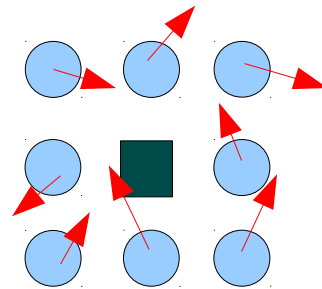
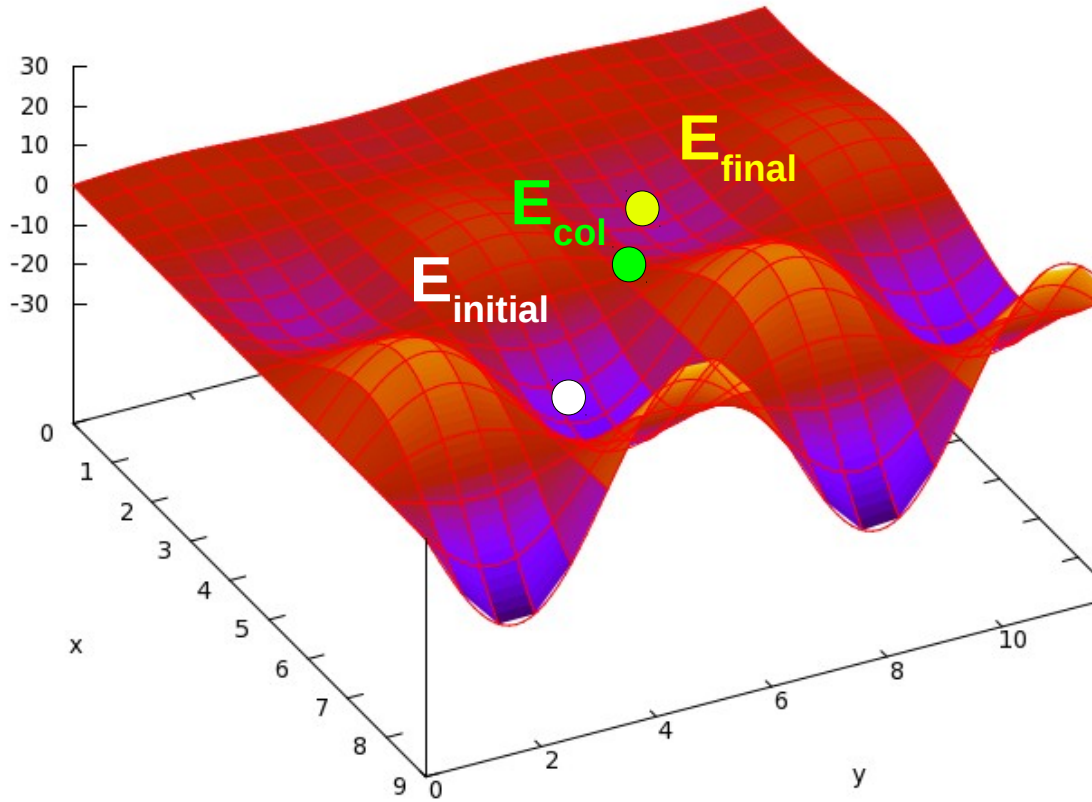
Traveling through potential energy landscapes of disordered materials:  
The activation-relaxation technique, Phys. Rev. E 57, 2419 (1998).

- **Explorer le « paysage énergétique » d'un système atomique**
- **déterminer des chemins de réaction, de diffusion et les barrières énergétiques associées**

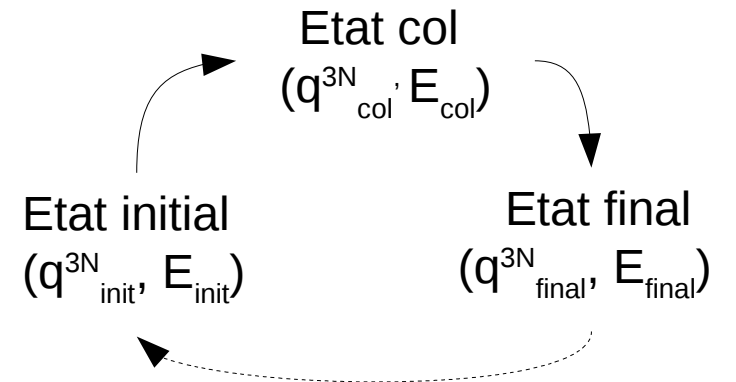




# Un événement ART



Un événement :





# Diffusion de défauts ponctuels dans Si

Système : Silicium

Potentiel : F. H. Stillinger and T. A. Weber, *Phys. Rev. B* 31, 5262 (1985).

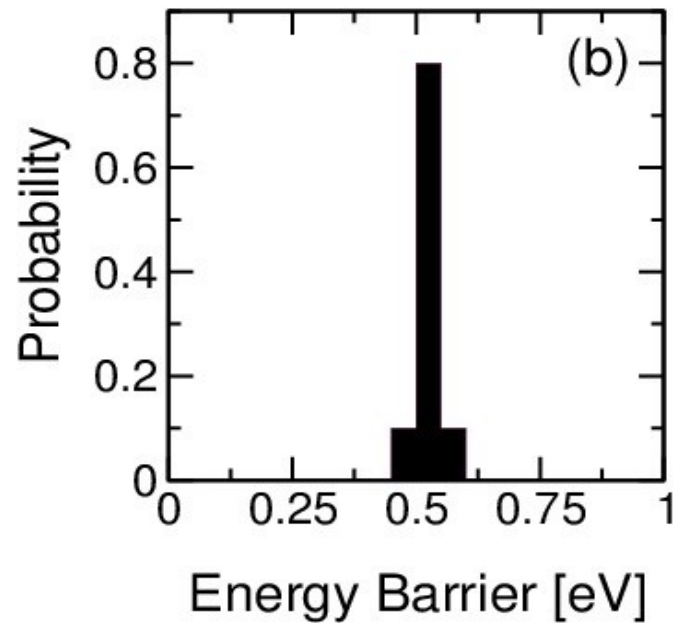
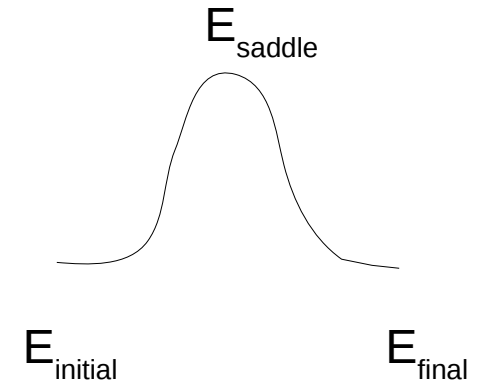
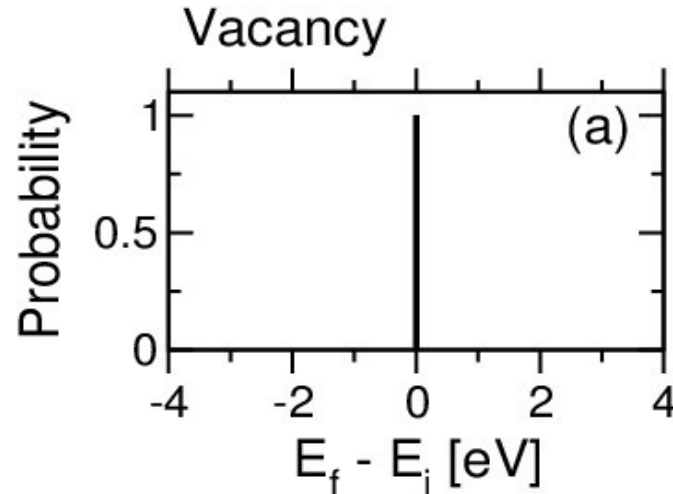
511 atomes de Si

Un événement :

Atome premier voisin de la lacune et ses voisins

$R_c < 6$  Ang.

300 événements



Paysage énergétique simple

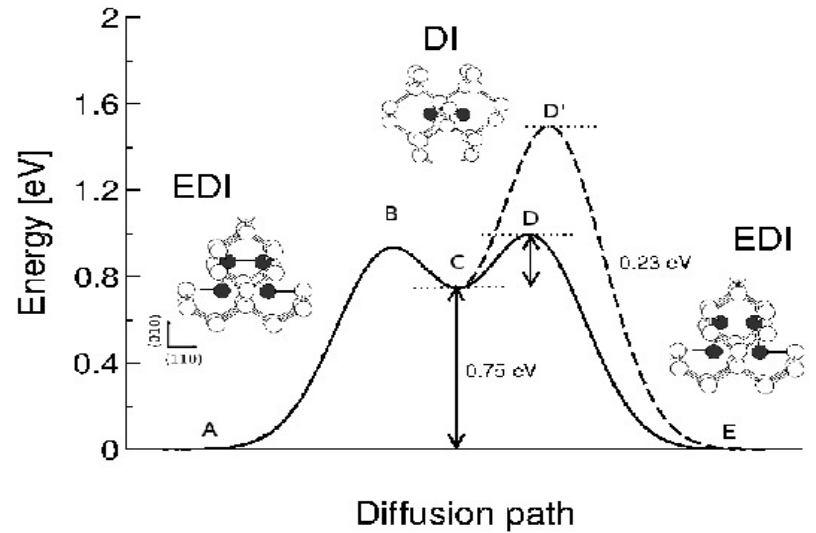
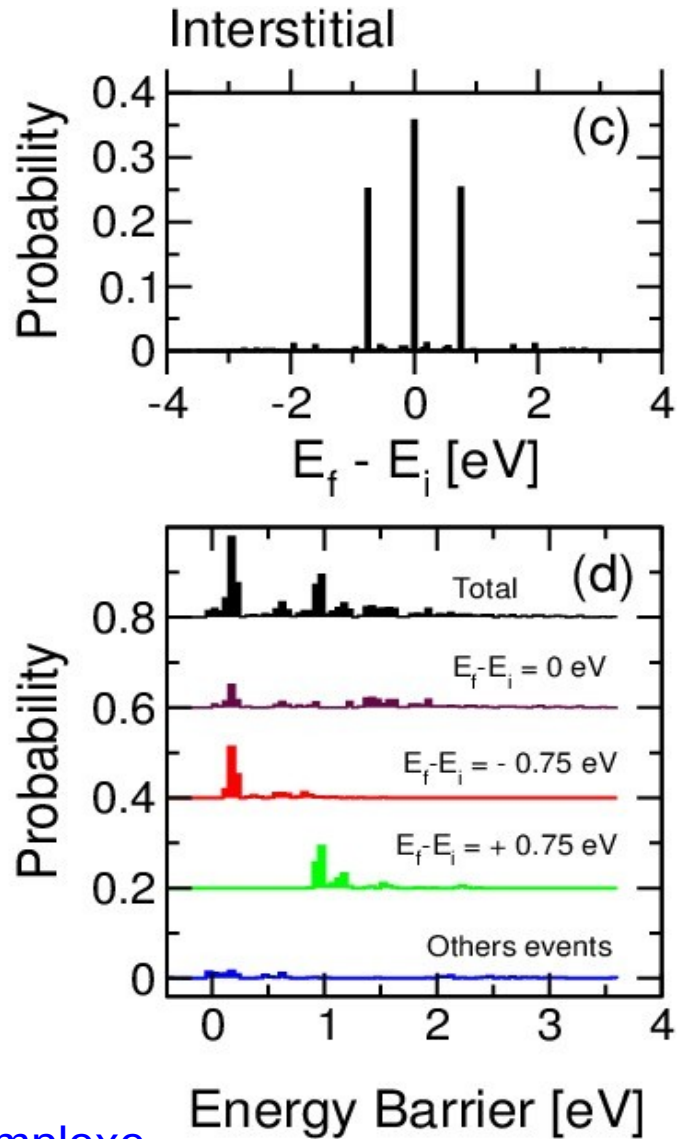


# Diffusion de défauts ponctuels dans Si

Système : Silicium

Potentiel : F. H. Stillinger and T. A. Weber, Phys. Rev. B 31, 5262 (1985).

513 atomes de Si  
Un événement :  
atome interstitiel  
et ses voisins  
 $R_c < 6 \text{ \AA}$ .

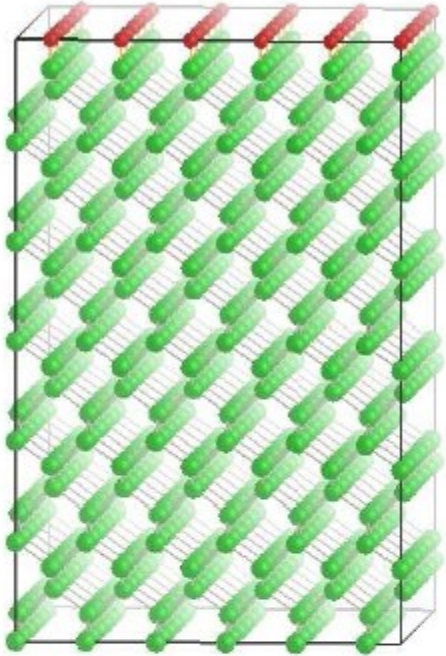


Paysage énergétique plus complexe



# Réaction de O sur une substrat de Si

P. Ganster, L.K. Béland and N. Mousseau, Phys. Rev. B 86, 075408 (2012)

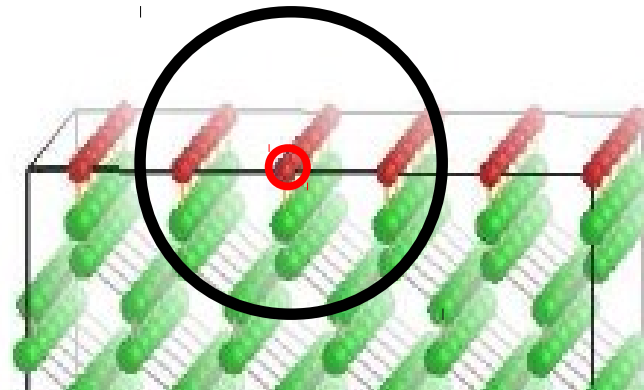


**Modèle énergétique** : potentiel de Watanabe (Stillinger-Weber)

**Système** : 36 atomes d'oxygène + substrat de 864 atomes

**Pour produire un événement**, la méthode est appliquée de façon locale :

Choix d'un atome d'oxygène au hasard + atomes voisins ( $R < R_c$ )



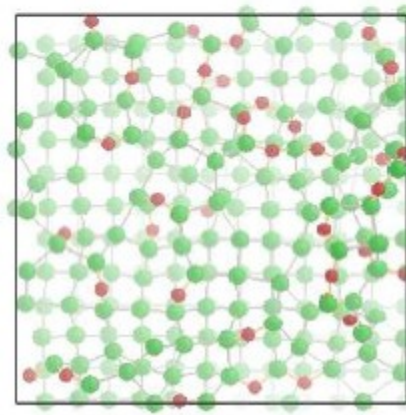
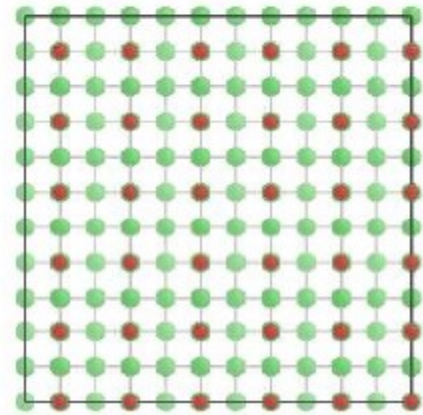
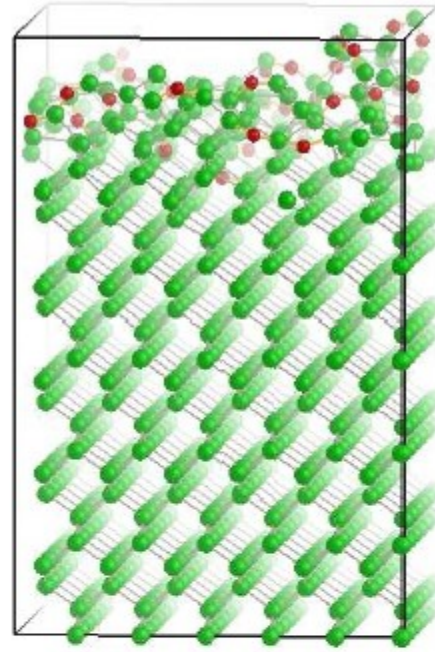
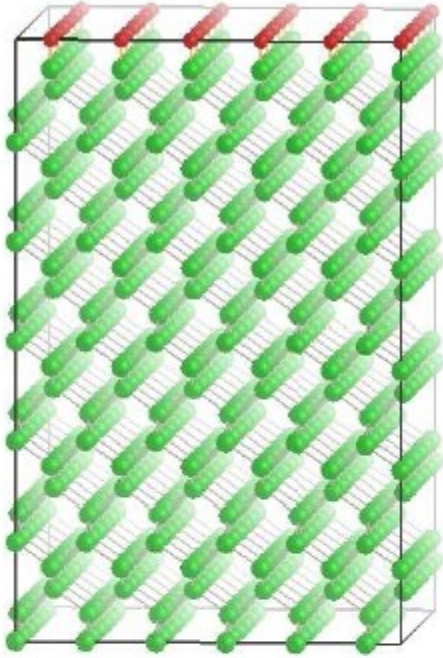
→ Événements impliquant la migration de l'oxygène



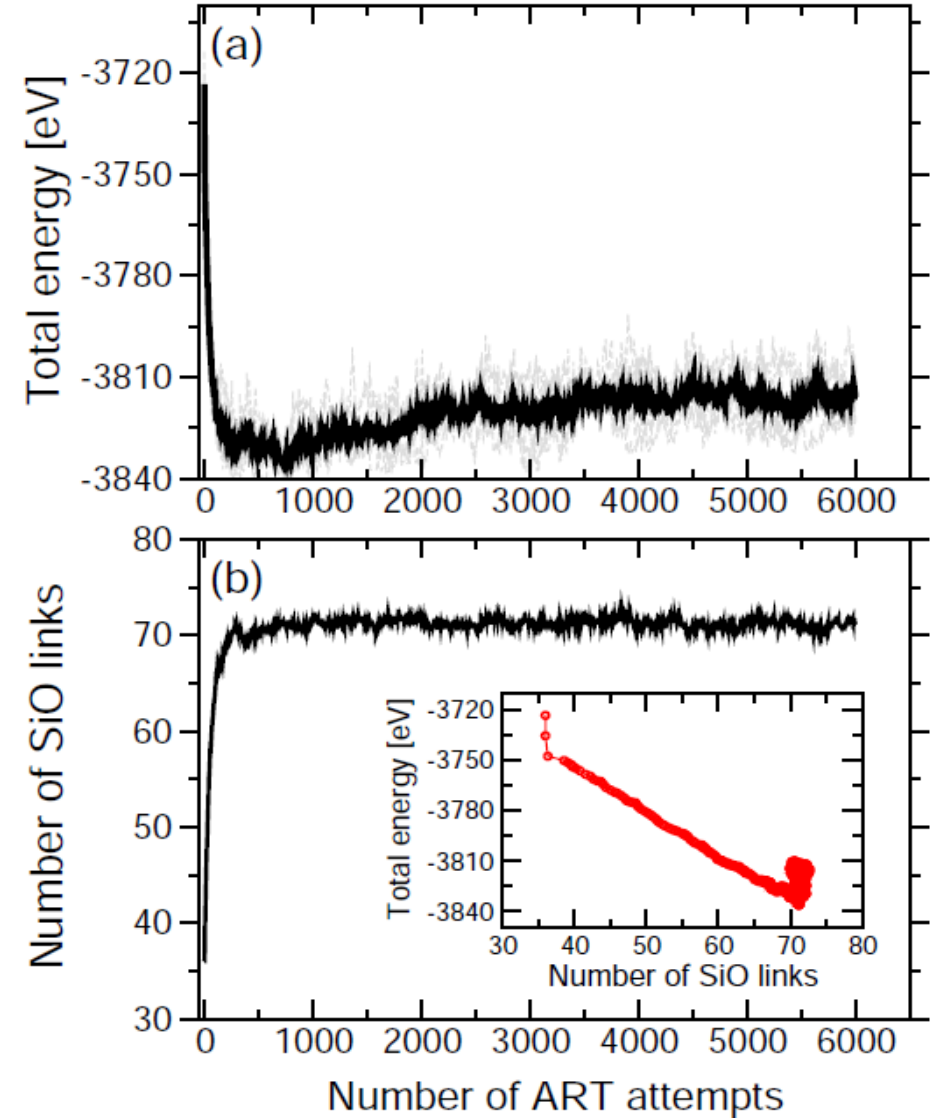
# Evolution du système : 6000 événements ART

Etat initial

Etat final

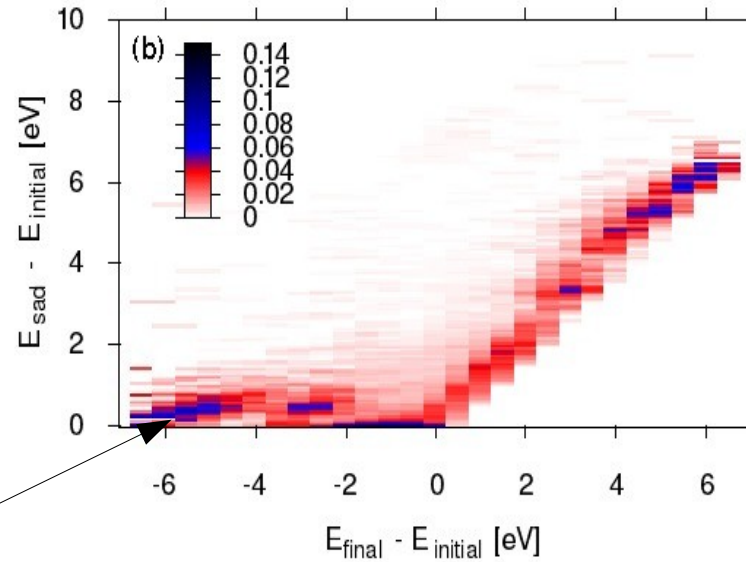
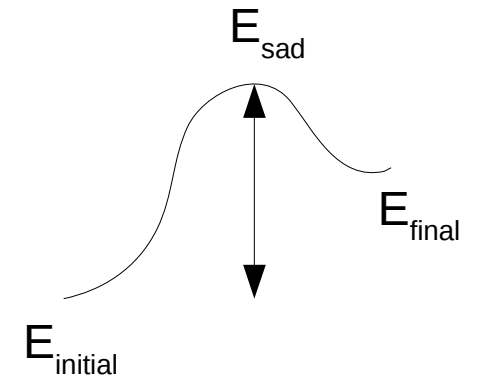
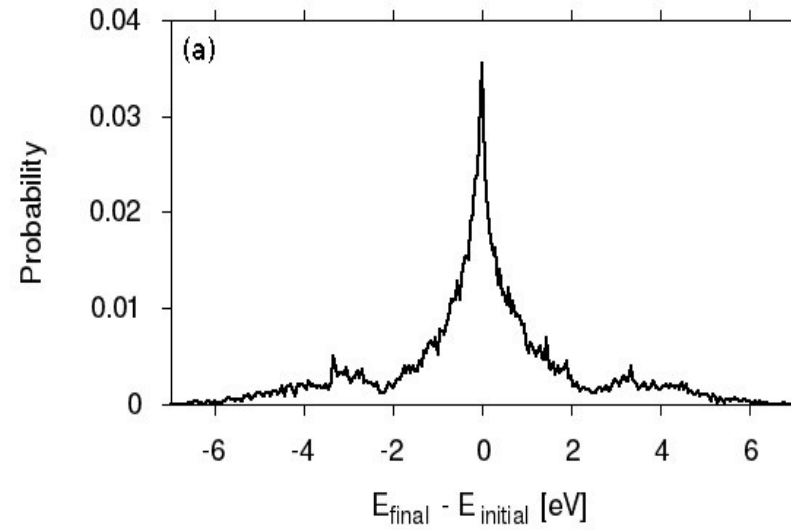
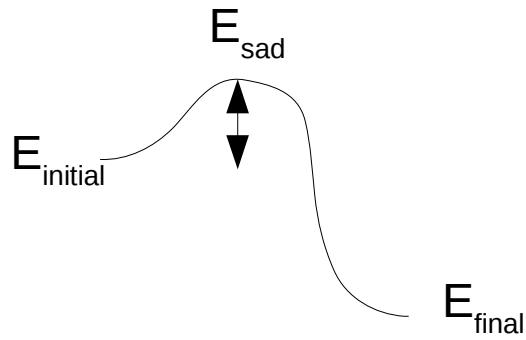


Moyenne sur 6 runs indépendants





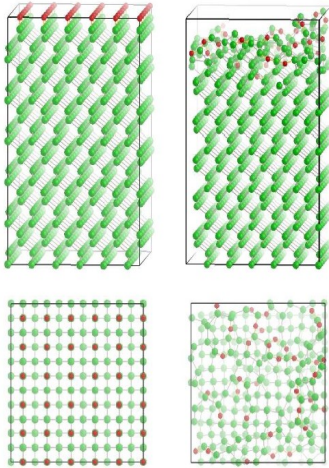
# Evolution du système : 6000 événements ART



Evénements spécifiques



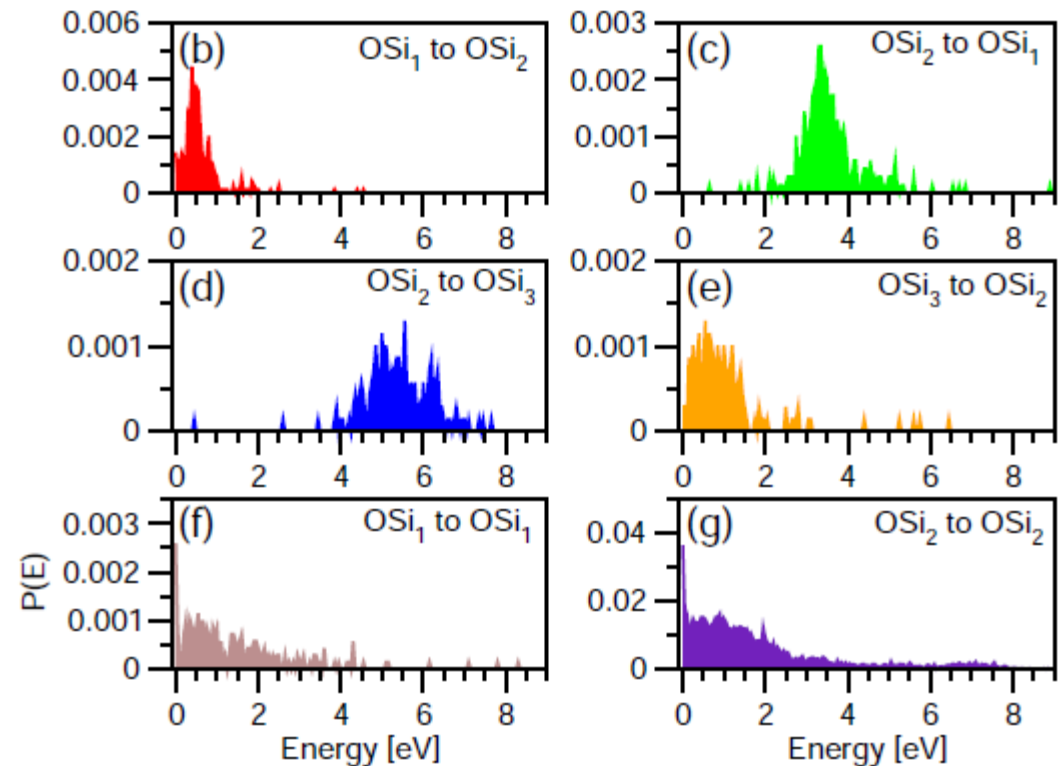
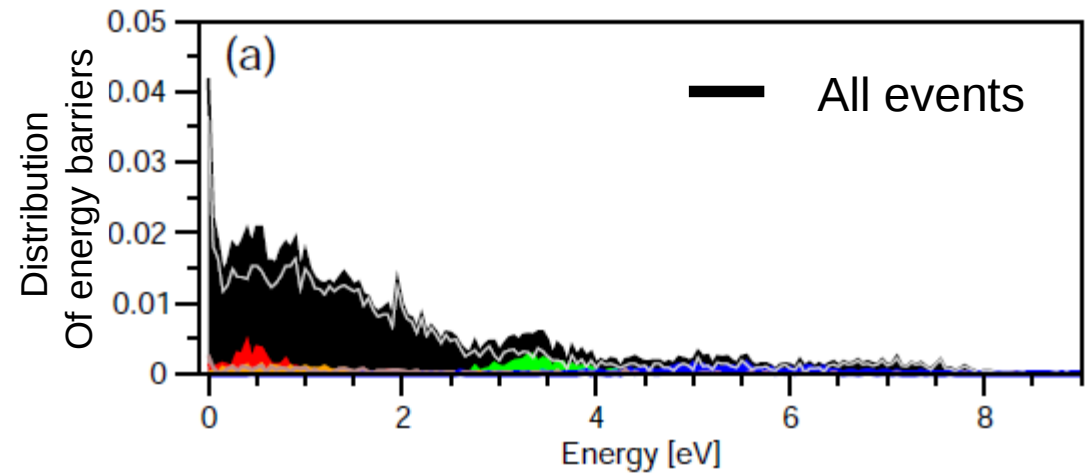
# Barrière énergétique



Event	Energy barrier [eV]
$OSi_1$ to $OSi_2$	<b>0.62</b>
$OSi_2$ to $OSi_1$	<b>3.57</b>
$OSi_2$ to $OSi_3$	<b>5.38</b>
$OSi_3$ to $OSi_2$	<b>1.07</b>

Identification des barrières énergétiques  
Associées

→ Formation préférentielle de liens O-Si-O





# Etat de ARTn et évolution

---

ARTn .. en téléchargement libre sur <http://physique.umontreal.ca/~mousseau/>

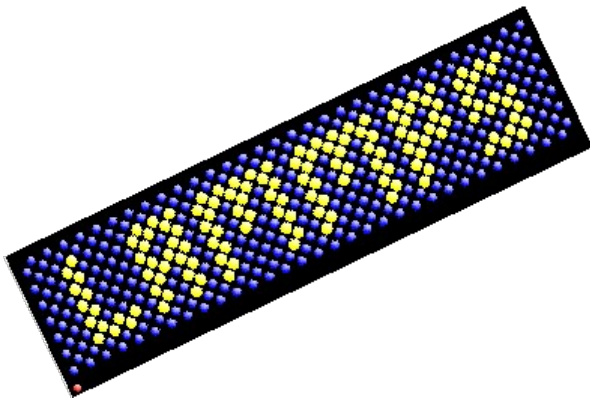
## Couplage du code LAMMPS à la méthode ART *nouveau*

LAMMPS : <http://lammps.sandia.gov/>

**Large-scale Atomic/molecular Massively parallel Simulator**

Code de Dynamique Moléculaire, (CPU et GPU)

→ nombreux potentiels d'interactions intégrés

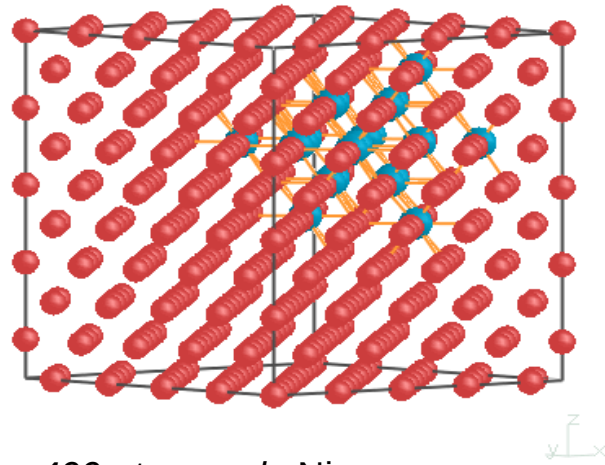




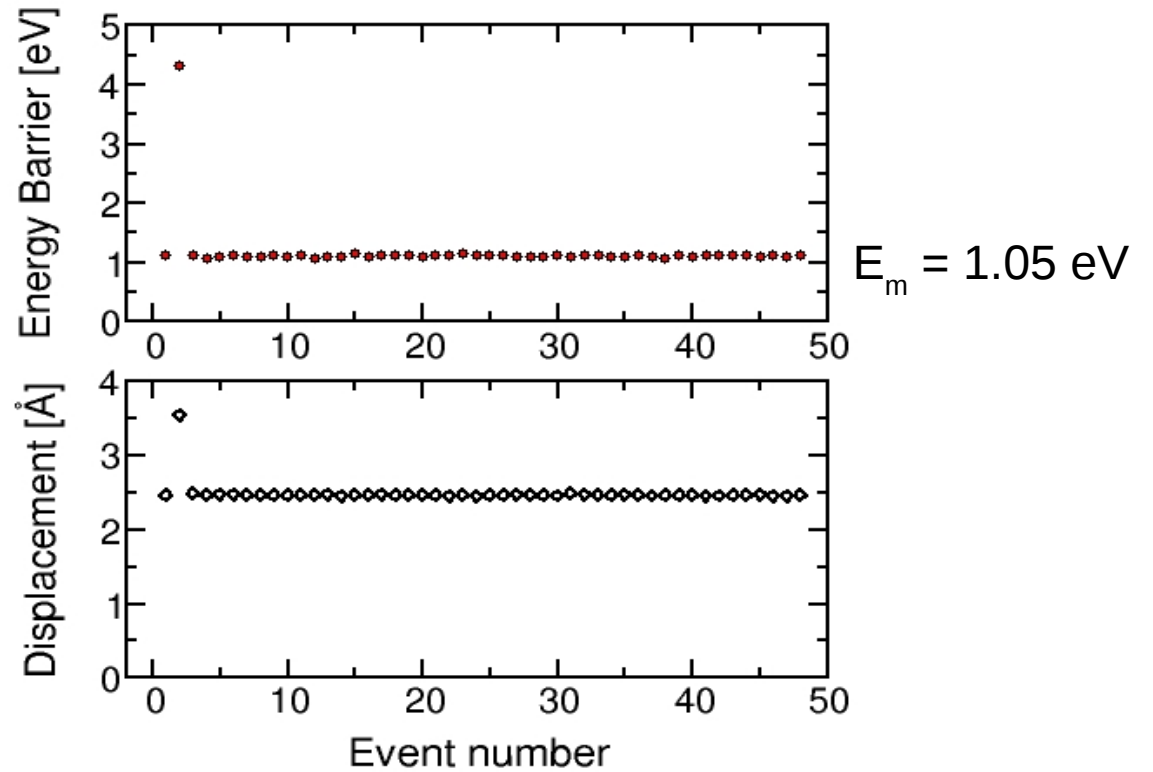


# Diffusion d'une lacune dans Ni

Méthode ARTn couplée à LAMMPS – Diffusion d'une lacune dans Ni  
*Potentiel EAM, SM Foiles et al, Phys. Rev. B, 33, 7983 (1986)*



499 atomes de Ni



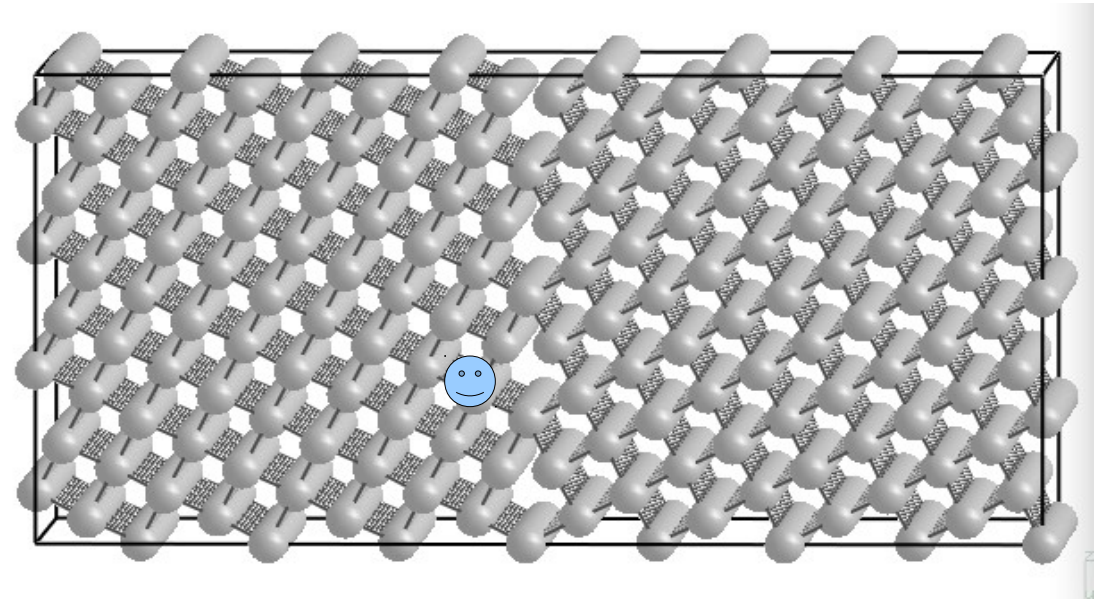


## Diffusion de P dans Fe

- relaxer la géométrie du joint de grain avec ART
- diffusion d'une impureté (P)

## Couplage *ab initio*

- tester la stabilité des configurations générées par les potentiels empiriques



Appliquer la méthode à l'étude des court-circuits de diffusion et de la migration de défauts ponctuels et d'impuretés



---

Merci pour votre attention