
Etude multi-niveaux des premières étapes de l'oxydation de l'aluminium : DFT et Monte Carlo cinétique

Anne Hemeryck^{*1,2}, Mathilde Guiltat^{3,1}, Alain Esteve^{1,2}, and Mehdi Djafari-Rouhani^{1,3}

¹LAAS – CNRS : UPR8001 – 7 avenue du Colonel Roche, F-31400 Toulouse, France, France

²LAAS – PRES Université de Toulouse – F-31400 Toulouse, France, France

³LAAS – Université de Toulouse Paul Sabatier – F-31400 Toulouse, France, France

Résumé

Collaboration expérimentale : C.ROSSI^{1,2}

L'aluminium est devenu un matériau incontournable dans notre vie quotidienne, mais aussi pour des applications importantes dans le domaine industriel ou en microélectronique, en raison de son abondance naturelle, ses coûts de production réduits, sa faible densité ainsi que sa résistance à la corrosion due à un phénomène de passivation. Bien que de nombreuses recherches ont été effectuées sur l'aluminium et ses alliages, les mécanismes régissant son oxydation restent toujours non élucidés.

Dans ce travail, nous présentons une approche multi-niveaux dédiée à la compréhension des premières étapes de l'oxydation de l'aluminium. Au delà de la stratégie multi-niveaux appliquée, le but ici est d'identifier les mécanismes fondamentaux se produisant à l'échelle atomique, d'évaluer leur impact sur la croissance de l'oxyde et de les confronter aux données expérimentales connues [1,2]. Plus précisément, pour identifier et caractériser thermodynamiquement et cinétiquement les réactions chimiques telles que l'adsorption d'oxygène et sa diffusion sur une surface d'aluminium, des calculs de type DFT sont réalisés. Dans un second temps, dans l'idée d'établir un lien concret entre le procédé d'oxydation tel qu'il peut se produire en réalité et la structure de l'oxyde en résultant, les données DFT sont introduites dans un simulateur que nous développons fondé sur une méthodologie de type Monte Carlo cinétique.

L'adsorption d'O sur une surface d'Al(111) et les diffusions de surface de l'oxygène menant à la formation d'ilots ainsi que les barrières d'activation associées, seront présentées. Nous expliciterons aussi un mécanisme nommé extraction [3] identifié comme le mécanisme initiateur de l'oxydation. Ces résultats des simulations seront comparés aux résultats expérimentaux de référence dans le domaine (travaux STM de Brune).

Brune et al. *J. Chem. Phys.* **99** (1993) 2128.

Trost et al. *J. Chem. Phys.* **108** (1998) 1740.

Lanthon et al. *J. Chem. Phys.* **137** (2012) 094707.

*Intervenant

Mots-Clés: Oxydation, Aluminium, Stratégie multi, niveaux, DFT, Monte Carlo cinétique