

Simulations numériques de la corrosion d'un métal au niveau d'un défaut ponctuel d'une couche organique de protection

Christine Vautrin-UI¹, Janusz Stafiej², Jean-Pierre Badiali³, Annie Chaussé¹

¹Laboratoire Analyses et Environnement, UMR 8587-CEA-CNRS-Université d'Evry, Bd F. Mitterrand, 91025 Evry, France, 01 69 47 77 09 christine.vautrin-ul@chimie.univ-evry.fr

²Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, ul Kasprzaka 44/52, 01-224, Varsovie, Pologne

³LECA-ERI, UMR 7573ENSCP-Université P et M Curie, 4 place Jussieu, 75230 Paris Cedex 05, France

La corrosion d'un matériau au contact d'un environnement agressif a des impacts pratiques et économiques considérables dus à l'utilisation massive des métaux dans des applications très variées et dans des milieux parfois extrêmes. C'est le cas notamment des containers de déchets radioactifs pour lesquels il est particulièrement important de connaître leur évolution à long terme. Or la corrosion est un phénomène compliqué qui implique plusieurs processus liés à la chimie et à la physique du système et qui nécessite une analyse multi-échelle. Une description mathématique de ces processus consiste à poser et à résoudre un système complexe d'équations différentielles non linéaires qui ne saurait prédire l'évolution du matériau à long terme. Notre approche consiste à proposer, à partir d'un petit nombre de processus simples, des simulations numériques qui vont mettre en évidence ces phénomènes complexes¹.

Le modèle qui sera présenté, est un modèle à 2 dimensions, à l'échelle mésoscopique et basé sur les automates cellulaires. Il permet de simuler l'évolution d'un métal protégé par une couche de type polymère et mis en contact ponctuellement avec un milieu agressif au niveau d'un défaut de la couche. Le système est composé de 4 sites différents : le métal du bulk, la solution, le métal en contact avec la solution (site métallique réactif) et enfin les sites résultant de la passivation du métal appelés sites oxydes. Deux types de processus peuvent se produire : la passivation du métal et la dissolution des oxydes. On affecte à chacun de ces processus une probabilité, respectivement P_{pas} et P_{dis} . Ce modèle simple, reposant sur 2 paramètres, permet de simuler l'évolution du front de corrosion et donne accès à des résultats particulièrement intéressants comme la rugosité du front ou encore le nombre d'îlots dans la solution. Les simulations ainsi réalisées montrent que la corrosion du matériau, même si elle est initiée par la «chimie» du système métal-environnement, peut être grandement influencée par la « physique » (morphologie de l'interface, formation d'un front rugueux, arrachement d'îlots, ...) : les aspects physiques peuvent ainsi multiplier par quatre les effets de corrosion prévisibles à partir des données chimiques.

Ce travail présentera une analyse de l'influence des deux probabilités P_{pas} et P_{dis} sur la corrosion. On mettra, entre autre, en évidence l'existence de plusieurs régimes de corrosion : pour les fortes probabilités, la corrosion dépend directement de ces probabilités, pour les probabilités plus faibles (<0.1) l'évolution du front de corrosion dépend fortement de la rugosité et de la production d'îlots.

Référence

[1] C. Vautrin-UI, A. Chaussé, J. Stafiej, J.P. Badiali, accepté dans Condensed Matter Physics