

Avis de Soutenance

Madame Margot LUCAS

Spécialité : Génie des matériaux

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés :

« Étude de l'influence de l'hydrogène sur la dislocation vis dans le Fer-alpha par statique moléculaire »

Travaux dirigés par Monsieur Xavier FEAUGAS

Soutenance prévue le **lundi 29 juin 2026** à 14h30

Lieu : Pôle communication –

Amphitheatre Michel Crepeau

La Rochelle Université

44 Avenue Albert Einstein

17000 La Rochelle

Composition du jury proposé

M. Xavier FEAUGAS	Professeur des universités	Université de La Rochelle	Directeur de thèse
Mme Marie LANDEIRO DOS REIS	Maîtresse de conférences	Université de La Rochelle	Co-encadrante de thèse
M. Sylvain QUEYREAU	Maître de conférences	LSPM-CNRS	Co-encadrant de thèse
M. Laurent PIZZAGALLI	Directeur de recherche	Université de Poitiers - CNRS	Examineur
Mme Sandrine BROCHARD	Professeure des universités	Université de Poitiers - CNRS	Rapporteure
M. Philippe CARREZ	Professeur des universités	Université de Lille	Rapporteur
Mme Lisa VENDELON	Ingénieure de recherche	CEA Saclay	Examinatrice

Résumé :

L'hydrogène (H), omniprésent dans notre environnement, est reconnu pour être à l'origine de phénomènes de fragilisation dans de nombreux matériaux métalliques. Dans le fer de structure cubique centrée (bcc), les atomes d'hydrogènes diffusent rapidement au sein du réseau cristallin [1], leur solubilité étant par ailleurs relativement faible. Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'interaction entre l'hydrogène et la mobilité de la dislocation vis, dont la dynamique contrôle la plasticité du fer bcc à basse température jusqu'à température ambiante. Toutefois, l'effet de l'hydrogène sur la mobilité des dislocations reste encore mal compris et dépend de nombreux facteurs (température, état métallurgique, pureté...). Des effets antagonistes ont en effet été rapportés : un durcissement induit par l'hydrogène piégé dans le cœur de la dislocation [2], ainsi qu'un effet d'adoucissement associé à une réduction de l'enthalpie de formation des paires de décrochements [3,4]. Ce travail de thèse constitue un effort de compréhension de l'interaction H-dislocations aux basses échelles avec pour but final de proposer une modélisation mesoscopique. Pour cela, nous avons conduit une étude systématique par statique moléculaire, en s'appuyant sur un potentiel interatomique récent de type NNIP [5], afin de caractériser le paysage énergétique de l'hydrogène au voisinage du cœur de la dislocation. L'espace paramétrique considéré est particulièrement étendu, englobant la complexité du cœur (facile ou difficile), la variété des sites accessibles et la concentration en hydrogène. Nous avons par ailleurs montré que la théorie élastique fournit une description satisfaisante des interactions à longue portée, nous garantissant une description complète de l'interaction. Un modèle thermodynamique nous permet de définir les configurations les plus probables statistiquement, réduisant ainsi la complexité du problème paramétrique à intégrer. Nous avons aussi montré que dans des conditions usuelles de chargement en hydrogène, certains sites de cœur ont une plus grande probabilité d'être occupés, cependant ceux-ci ne sont pas suffisamment nombreux pour affecter la structure de cœur de la dislocation, contrairement à ce qui a été étudié dans d'autres bcc [6]. Finalement, nous avons déterminé les chemins préférentiels de diffusion au voisinage du cœur de la dislocation. Nous avons ensuite quantifié l'impact de l'hydrogène sur le glissement des dislocations, s'effectuant par mécanisme de nucléation et propagation de paires de décrochements et sous contrainte. Notre étude se restreint ici aux sites les plus probables pour l'H, mais la position relative des doubles décrochements induit des effets différents. Nous avons montré que l'enthalpie d'activation est directement proportionnelle à l'énergie d'interaction entre la dislocation et l'H. Ce résultat phare, couplé à notre étude exhaustive des énergies d'interaction nous fournit une base de données pouvant être exploitée aux échelles supérieures telle que la dynamique des dislocations et la mécanique des milieux continus. [1] P. Ferrin et al., Surface science 606.7-8, 679-689 (2012) [2] D. N. Blaschke, and D. J. Luscher. International Journal of Plasticity 144, 103030 (2021) [3] M. Itakura, et al., Acta Materialia 61.18, 6857-6867 (2013) [4] M. Wen, et al., Acta materialia 51.6, 1767-1773 (2003) [5] F-S. Meng, et al., Physical Review Materials 5.11, 113606 (2021) [6] T. Leveau et al., Acta Materialia, 275, 120062 (2026)