



## AVIS DE PRESENTATION DE THESE EN SOUTENANCE POUR L'OBTENTION DU DIPLOME NATIONAL DE DOCTEUR

**Madame Caroline TRAISNEL**

Présentera ses travaux intitulés :

**« Étude de la diffusion et de la solubilité de l'hydrogène en surface et subsurface du nickel monocristallin : approches numériques et expérimentales »**

Spécialité : Génie des matériaux

**Le 18 juillet 2002 à 14h00**

Lieu :

**La Rochelle Université  
Pôle Communication, Multimédia et Réseaux  
Amphithéâtre Michel Crépeau  
44 Av. Albert Einstein  
17000 LA ROCHELLE**

Composition du jury :

**Mme BOUHATTATE Jamaa  
Mme BROCHARD Sandrine  
M. DEVOS Olivier  
M. FEUGAS Xavier  
Mme LANDEIRO DOS REIS Marie (*Invitée*)  
M. MAURICE Vincent  
M. OUDRISS Abdelali (*Invité*)  
M. POULUMI Dey  
Mme TODOROVA Mira  
Mme VARVENNE Céline**

**Maîtresse de conférences, HDR, La Rochelle Université  
Professeure, Université de Poitiers  
Professeur, Université de Bordeaux  
Professeur, La Rochelle Université  
Maîtresse de conférences, La Rochelle Université  
Directeur de recherche CNRS, PSL Université  
Maître de conférences, La Rochelle Université  
Assistant Professor, Delft University of Technology  
Head of research group, Mark Planck Institut Düsseldorf  
Chargée de recherche CNRS, Aix Marseille Université**

### Résumé :

Les surfaces métalliques, lieu d'initiation de l'endommagement des métaux, sont au cœur des mécanismes de fatigue-corrosion. « Portes d'entrée » pour les solutés, elles jouent un rôle clé dans les processus de fragilisation par l'hydrogène (FPH). Afin d'identifier des états métallurgiques tolérants à la FPH, une meilleure compréhension des interactions H-surfaces sous contraintes demeure nécessaire. Ainsi, ces travaux visent à évaluer l'impact des défauts en proche surface du nickel sollicité cycliquement sur la diffusivité et la solubilité de l'hydrogène. La première étape de cette étude requiert au préalable d'identifier le seul effet de l'orientation cristallographique des surfaces sur ces propriétés. L'étendue spatiale de leur évolution définit alors la notion subsurface, peu étudiée dans la littérature. Pour cela nous avons travaillé sur les surfaces monocristallines  $\{100\}$ ,  $\{110\}$  et  $\{111\}$  du nickel non déformé de prime abord. Approches numériques (DFT) et expérimentales (électrochimiques) ont été couplées et confrontées, chacune correspondant à une échelle d'analyse. Les outils numériques donnant accès à des échelles difficilement questionnables expérimentalement, la solubilité locale de l'hydrogène a pu être corrélée à la distorsion du réseau cristallin induite par la relaxation différenciée des surfaces orientées. Un gradient de diffusion d'hydrogène, propre à chaque orientation, a également été observé. La confrontation de nos deux approches nous a montré les limites d'une description trop réductrice des surfaces et l'importance de considérer la dynamique d'évolution soluté/défauts intrinsèques dans de futures études. L'impact des défauts émergeant en fatigue en surface et subsurface a ensuite été étudié pour l'orientation  $\{110\}$ . Expérimentalement, une évolution de la dynamique de piégeage et de la diffusivité de l'hydrogène a été identifiée et son imputation aux différents défauts créés amorcée numériquement par potentiels empiriques.