



<b>Laboratoire : LaSIE</b>
<b>La demande concerne une :</b> <input type="checkbox"/> Allocation pleine <input checked="" type="checkbox"/> Demi- allocation
<b>Titre de la thèse : J2Endo</b> Caractérisation de la nature des Joints de Grains et Jonctions Triple et leur impact sur les mécanismes d'endommagement assisté par l'hydrogène.
<b>Direction de la thèse</b> <i>directeur-trice-s (grade, HDR) et éventuels co-directeur-trice-s</i> Jamaa Bouhattate MCF HDR, Antoine Falaize,
<b>Co-encadrant</b> Abdelali Oudriss, Xavier Feaugas
<b>Adéquation scientifique avec les priorités de l'établissement</b> <p>Ce projet s'inscrit pleinement dans les priorités scientifiques du LUDI. En effet l'environnement littoral génère de sérieuses contraintes sur les structures métalliques. Celles-ci subissent fortement les phénomènes d'oxydo-réduction (corrosion). Lors de ce couplage, une quantité non négligeable d'hydrogène pénètre dans les matériaux. Cet hydrogène est délétère pour le métal qui subit une perte de propriétés fonctionnelles. Pour mieux comprendre ces phénomènes, nous proposons une approche pluridisciplinaire alliant l'utilisation de technologies innovantes d'intelligence artificielle couplées à une étude numérique type calcul par élément finis et à l'échelle atomique ainsi qu'expérimentale pour la prédiction de l'impact de l'hydrogène sur la durabilité des métaux. Les structures mono-, bi-, tri- et poly-cristallines seront au centre des travaux avec pour objet la recherche d'une structure optimum afin de maîtriser la diffusion de l'hydrogène.</p>
<b>Descriptif du sujet</b> <i>(enjeux scientifiques, applicatifs, sociétaux...)</i> <p>Durabilité des matériaux, Fragilisation par l'hydrogène, joints de grains, joints triples, connectivités, Distribution statistique.</p> <p>Les matériaux de structures présentant de hautes performances sont nécessaires dans des stratégies de conception légères, de réduction de coût et d'énergie. Dans ce cadre, la question de <b>l'impact de l'hydrogène sur la durabilité des métaux</b> et alliages est apparue d'importance notable dans de nombreux secteurs d'application. Elle conduit l'ingénierie à développer une démarche systématique permettant de déterminer les paramètres intrinsèques à un éventuel endommagement et les conditions pour lesquels ils interviennent.</p> <p>Dans ce cadre le laboratoire LaSIE mène des études de pointes (3 projets de l'Agence Nationale de la Recherche, deux projets régions et un projet avec les armées américaine et française) sur la diffusion et le piégeage de l'hydrogène en interaction avec les défauts cristallins (lacune, dislocation, précipité, joints de grains, surface, interfaces, inter-phases, etc.).</p>

Le présent projet se concentrera sur la croissance cristalline et sur l'étude de différents types de joints de grains et de triples jonctions pour ensuite caractériser les architectures de connectivité des joints de grains des microstructures expérimentalement et numériquement afin d'accéder aux propriétés de diffusion de l'hydrogène et de cataloguer les Interactions H-hétérogénéités métallurgiques à l'échelle des mono- bi et tri-et poly-cristaux.

Notre équipe a développé dans ce contexte des outils numériques de synthèse de microstructures identiques à celle observées dans des échantillons de structure polycristalline. De plus l'acquisition récente d'un Four Czochralski va nous permettre de faire croître un très grand nombre de configuration et donc de joint de grain et de triple jonction pour ensuite les caractériser.

L'influence des joints de grains et de la triple jonction sur le transport de l'hydrogène dans le nickel est indiquée par la différence de solubilité de l'hydrogène.

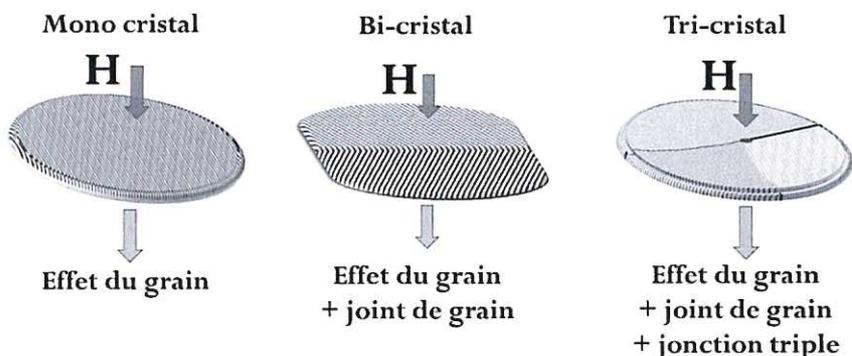


Figure 1 : Schéma de la charge en hydrogène des mono- bi et tri-cristaux

Des modèles numériques à l'échelle atomique seront également développés pour questionner les interactions de l'hydrogène avec plusieurs hétérogénéités métallurgiques

L'utilisation du numérique au service de l'expérimentale devrait ouvrir de nouvelles voies dans la description et la conception de structures complexes afin d'envisager des démarches en rupture dans la conception de nouveaux alliages.

En prévision, nous déposons un projet région pour venir abonder sur une demi bourse de thèse pour compléter cette demande. Et travailler en parallèle de celle obtenue dans le projet ADMIRHE sur la croissance cristalline de bi et tri-cristaux.

- **Ambitions**

- Développement d'un projet **transdisciplinaire et international** associant plusieurs laboratoires de la région LaSIE, I2M et Pprime et un laboratoire Américain Keck Center for 3D innovation à l'université UTEP, El Paso, Texas.
- Un pas de plus vers la compréhension de la fragilisation par l'hydrogène, un des verrous majeurs à une **économie hydrogène** et à la **durabilité** des matériaux en service dans un environnement riche en hydrogène.
- Renforcer les interactions entre axes de recherche du LaSIE (M2N, DMPR) et stimuler de nouvelles orientations.
- 3 articles dans des revues importantes telles que l'international journal of hydrogen energy ou encore l'international journal computational material sciences....
- 3 conférences internationales

**Contexte partenarial** (cotutelle internationale, EU-CONEXUS, partenariat avec un autre laboratoire, une entreprise...)

En partenariat entre le LaSIE, l'I2M, Pprime et l'université de UTEP, El Paso, Texas

**Impacts** (scientifiques, technologiques, socio-économiques, environnementaux, sociétaux...)

- **Retombées scientifiques :**

D'un point de vue scientifique, ce projet permettra d'étudier l'impact des différents joints de grains et jonctions triple sur la diffusion et le piégeage de l'hydrogène dans les matériaux et ainsi développer une meilleure compréhension du phénomène de fragilisation par l'hydrogène.

- **Retombées technologiques :**

D'un point de vue technologique, la mise en place de modèle associant l'intelligence artificielle et la fabrication des matériaux via deux techniques : croissance cristalline et fabrication additive pour optimiser les microstructures et concevoir de nouveaux matériaux est une première et servira de base pour le développement de nouveaux matériaux.

• **Retombées économiques :**

D'un point de vue économique, le projet permettra d'apporter des éléments de réponse aux problématiques de corrosion sous contrainte et plus particulièrement de fragilisation par l'hydrogène. En particulier il offrira l'opportunité de débiter le développement de nouveaux états métallurgiques tolérants aux effets de l'environnement. Cette problématique est majeure dans de nombreuses activités industrielles, telles que l'industrie nucléaire, aéronautique ou encore dans la production et le transport de l'énergie (transition énergétique) car elle représente de nos jours un poids financier non négligeable. De plus cette thématique émerge sur deux axes prioritaires sur cinq du réseau R3 TESNA (un réseau régional de recherches, dispositif de la Région Nouvelle-Aquitaine) qui soutient ce projet et qui sont les suivants :

- Axe 1 : Les Nouvelles Technologies de l'Energie (NTE), productions et conversions multiples, délocalisées, et leurs couplages
- Axe 2 : Le transport et le stockage

• **Retombées sociétales et environnementales :**

D'un point de vue sociétal, les nouvelles découvertes associées à ce projet liées à la fragilisation par l'hydrogène vont nous conduire au développement d'états métallurgiques dits "intelligents" et plus "résistants" en tenant compte des éléments microstructuraux, ce qui augmentera la durabilité et la sécurité des structures métalliques et réduira ainsi les coûts liés à la maintenance de certains systèmes et structures. De plus, l'utilisation de l'hydrogène comme vecteur énergétique « propre » constitue un défi sociétal d'importance capitale pour une transition énergétique et environnementale. Par conséquent, les résultats de ce projet apporteront des éléments de réponses dans le choix des alliages nécessaires au transport et au stockage de l'hydrogène avec une meilleure gestion du risque de fragilisation par l'hydrogène. Le succès de ce projet permettra d'ouvrir la voie vers une méthodologie d'élaboration par fabrication additive de nouveaux alliages présentant de meilleures propriétés fonctionnelles pour une application donnée.

**Programme de travail du doctorant (tâches confiées au doctorant)**

Ce projet vise à caractériser à différentes échelles les interactions entre l'hydrogène, la nature des joints et la plasticité en vue d'identifier les paramètres de premier ordre susceptibles de favoriser un mode de rupture fragile assistée par l'hydrogène, et de transposer ces approches sur des alliages industriels tout en questionner l'intérêt de la fabrication additive. Dans cet objectif, nous proposons une organisation basée sur **cinq Tâches** qui traiteront des différentes échelles de la microstructure avec des approches expérimentales et numériques :

- Tâche 1 : Croissance des mono, bi et tri-cristaux et caractérisation microstructurale et mécanique.
- Tâche 2 : Interactions H-hétérogénéités métallurgiques à l'échelle des mono- bi et tri-cristaux. Expérimentales et numériques
- Tâche 3 : Implication des interactions H-hétérogénéités dans la plasticité et l'endommagement (échelles des mono- bi et tri-cristaux) expérimentales et numériques.
- Tâche 4 : Compréhension des mécanismes d'endommagement assisté par l'hydrogène (échelle macroscopique : polycristal) et mise en place d'un modèle de transition d'échelle
- Tâche 5 : Gestion et Communication

**Calendrier de réalisation**

Mois	0-6	6-12	12-18	18-24	24-30	30-36
T1						
T2						
T3						
T4						
T5						
Rapport		X	X	X	X	X
Articles		X		X		X

**Pertinence et évaluation des risques :** Comme pour tout projet de recherche ambitieux et novateur, divers risques sont impliqués. Les principaux risques et leurs stratégies d'atténuation sont résumés dans le tableau 1.

Tableau 1 : Liste des risques

T#	Risque	Niveau	Stratégie de contingence
T1	La fabrication des bi- and tri-cristaux est une étape critique et peut entraîner des orientations indésirables.	Moyen	Itérations pour obtenir les orientations souhaitées. Le four Czochralski est entièrement dédié à ce projet.
T2	La vitesse de diffusion dans les alliages de nickel est très lente et va ralentir le temps de caractérisation.	Élevé	3 bancs d'essais seront affectés au projet. L'équipe connaît très bien les alliages de nickel et saura organiser et planifier les essais.
T3	Les potentiels interatomiques initialement sélectionnés pour la simulation peuvent ne pas être appropriés, il est nécessaire de rechercher d'autres potentiels disponibles	Faible	Il existe plusieurs façons de valider les potentiels interatomiques, comme le calcul du défaut d'empilement, les constantes élastiques, etc. Il existe plusieurs potentiels EAM développés pour les interactions hydrogène-nickel à partir de différentes sources.
T4	Le temps nécessaire pour développer les relations constitutives et l'implémentation numérique des modèles peut être élevé.	Élevé	Une base de code est déjà existante, comme plusieurs membres de l'équipe sont experts dans ce domaine et travailleront en étroite collaboration.

**Accompagnement du doctorant / Fonctionnement de la thèse** (*accompagnement humain, matériel, financier, en particulier pour la prise en charge du fonctionnement de la thèse et des dépenses associées*)

Le ou la doctorant.e sera accompagné par plusieurs encadrant.e.s. Le budget de fonctionnement est prévu par le projet ADMIRHE pour toutes les dépenses associées à la thèse. Si nécessaire l'équipe DMRS a la possibilité de compléter en utilisant une des autres lignes issues de prestation.

**Pour les demi allocations cofinancement sollicité ou acquis**

Demi-allocation de thèse sollicitée à La Région Projet DHyFeNi