

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Intitulé : Modélisation par une approche champ de phase de la fragilisation par l'hydrogène dans les superalliages base Nickel

Référence : **MAS-DMAS-2025-25**
(à rappeler dans toute correspondance)

Début de la thèse : automne 2025

Date limite de candidature : Juillet 2025

Mots clés

Superalliage, élasticité, plasticité, mécanique de la rupture, fragilisation par l'hydrogène

Profil et compétences recherchées

Master recherche ou ingénieur en science des matériaux.

Solides connaissances en physique des solides, physique des transitions de phases, mécanique de la rupture, mécanique des milieux continus, méthodes numériques pour la physique.

Présentation du projet doctoral, contexte et objectif

L'ONERA est un acteur majeur dans l'atteinte de l'objectif ambitieux « zéro émission nette de CO2 en 2050 » pour le transport aérien. Des programmes de recherche ont été mis en place pour trouver des solutions alternatives aux sources de carburant actuelles. La combustion de l'hydrogène est considérée aujourd'hui comme la voie la plus prometteuse pour la décarbonation et des industriels tels que Airbus et Safran travaillent sur le développement d'un démonstrateur d'avion à hydrogène prévu pour 2035. Cependant, les interactions hydrogène-matériaux sont bien connues pour avoir des effets dégradants sur les propriétés mécaniques, pouvant conduire à une fracture inattendue. La fragilisation par l'hydrogène est un phénomène complexe, mettant en jeu plusieurs mécanismes, ce qui représente un challenge pour les industriels. De nombreuses études expérimentales ont déjà été consacrées à ce sujet mais ne permettent pas une compréhension complète du phénomène car les mécanismes identifiés y opèrent de manière synergétique. Les méthodes de simulations représentent alors une excellente alternative car elles permettent, en particulier, d'étudier séparément chacun des mécanismes intervenant dans le processus de fragilisation.

Modéliser la fragilisation par l'hydrogène de manière réaliste nécessite l'utilisation d'une méthode numérique capable de simuler la fracture et ses modes de propagation fragile ou ductile en présence d'hydrogène, ce qui en retour nécessite de simuler la diffusion volumique de l'hydrogène en prenant en compte ses interactions chimiques et élastiques avec la fissure et les dislocations, tout en intégrant la microstructure constitutive du matériau considéré, qui est elle-même souvent hors d'équilibre. Dans ce contexte, l'outil de prédilection est la méthode continue dite des « champs de phase » qui, d'une part, permet d'aborder aisément l'échelle micronique à laquelle s'expriment les processus cités ci-dessus et d'autre part, offre un cadre général et versatile pour formuler correctement les couplages entre ces différents processus.

Dans le cas présent, on s'intéressera plus particulièrement aux superalliages base Nickel. Ces alliages sont connus pour leurs remarquables propriétés mécaniques à hautes températures et se caractérisent principalement à l'échelle de la microstructure par la précipitation d'une phase intermétallique ordonnée γ' -Ni₃Al de structure L1₂ dans une matrice FCC désordonnée γ -Ni. La présence de précipités γ' et des interfaces γ/γ' gênent le mouvement des dislocations, ce qui constitue la principale cause de la forte résistance de ces superalliages au fluage. Cependant la présence d'hydrogène détériore les propriétés mécaniques du matériau, en particulier la ductilité, et peut entraîner une rupture prématurée en service.

Le but de la thèse est donc de développer et utiliser une méthode de champ de phase pour modéliser la propagation d'une fissure dans une microstructure $\gamma - \gamma'$ en prenant en compte les mécanismes énumérés ci-dessus (diffusion volumique de l'hydrogène, interaction avec fissures et dislocations, évolution en service de la microstructure).

Les objectifs du travail doctoral seront donc les suivants :

I/ Nous développerons un couplage champ de phase entre endommagement et plasticité. La déformation plastique sera considérée à l'échelle discrète des dislocations en introduisant des champs qui permettent de les résoudre individuellement. Nous obtiendrons ainsi une méthode qui permettra d'étudier l'influence de la relaxation plastique sur la propagation des fissures dans une microstructure γ/γ' .

II/ La présence d'hydrogène sera prise en compte en intégrant successivement les trois mécanismes majeurs par lesquels il fragilise le matériau :

a/ L'hydrogène en solution est responsable de la réduction de la barrière d'énergie nécessaire au mouvement des dislocations, ce qui peut diminuer la ductilité en renforçant la localisation de la déformation plastique (mécanisme HELP pour « hydrogen enhanced localized plasticity (HELP) »); l'objectif sera donc de réaliser un couplage thermoélastique et cinétique entre dislocations et champ de concentration de l'hydrogène pour rendre compte de ce mécanisme ;

b/ La surface des fissures et les interfaces γ/γ' servent de sites de piégeage pour les atomes d'hydrogène. Cette ségrégation chimique induit une diminution de l'énergie nécessaire à la création de nouvelles surfaces libres en front de fissures et le long des interfaces γ/γ' (mécanisme HEDE pour « hydrogen enhanced decohesion ») ; il faudra donc ici coupler chimiquement le champ de diffusion de l'hydrogène aux différentes interfaces présentes dans le matériau ;

c/ L'énergie de liaison entre un atome d'hydrogène et une lacune étant faible, la formation de complexes lacune-hydrogène est favorisée (mécanisme HESIV pour « hydrogen enhanced strain-induced vacancy formation »). La ségrégation chimique et élastique de l'hydrogène induit par conséquent un clustering de lacunes dans les régions de ségrégation d'hydrogène, qui en grossissant forment des microcavités et éventuellement des microfissures. Le challenge ici sera de proposer un formalisme dans lequel les fissures peuvent nucléer et coalescer à partir de microcavités, lesquelles résultent de la croissance de clusters de lacunes. Au préalable il faudra écrire un couplage thermocinétique entre les champs de concentrations de l'hydrogène et des lacunes.

Ces différents mécanismes de fragilisation par l'hydrogène seront étudiés de façon individuelle et concurrentielle dans le but de quantifier leurs contributions et leur effet synergétique.

Les résultats obtenus permettront une avancée significative dans la modélisation de microstructures dans le contexte de fragilisation par l'hydrogène, et pourront être valorisés lors de conférences scientifiques nationales et internationales, et par la publication d'articles dans des revues à fort impact.

Collaborations envisagées

Laboratoire d'accueil à l'ONERA

Département : Matériaux et Structures

Lieu (centre ONERA) : Châtillon

Contact : Gabriel Bouobda Moladje, Alphonse Finel

Tél. : 01.46.73.45.74 / 01.46.73.44.52

Email : gabriel.frank.bouobda_moladje@onera.fr ,
alphonse.finel@onera.fr

Directeur de thèse

Nom : Yann Le Bouar

Laboratoire : DMAS/DLEM

Tél. : 01.46.73.45.92

Email : yann.lebouar@onera.fr

Pour plus d'informations : <https://www.onera.fr/rejoindre-onera/la-formation-par-la-recherche>