

Projet de thèse 2019-2022 au LSPM

Analyse expérimentale et numérique des interactions hydrogène-plasticité à l'échelle cristalline

Direction de thèse : Monique Gaspérini, Yann Charles

Contexte :

La fragilisation par l'hydrogène (FPH) des matériaux métalliques, risque sévère de rupture prématurée des structures, notamment dans le domaine du transport et stockage de l'hydrogène, résulte de phénomènes couplés diffusion-plasticité-microfissuration à différentes échelles, de l'échelle atomique à l'échelle macroscopique. L'analyse et la modélisation des mécanismes précurseurs de la dégradation liée à l'hydrogène est donc une étape clé pour la compréhension, et surtout la prévention, de la FPH, afin de maîtriser la durabilité des structures en environnement sévère. Si les interactions hydrogène-matériaux ont donné lieu à de nombreuses études à une échelle très locale (par exemple autour des dislocations [1-3], ou des lacunes [4-6]), les relations entre la FPH dans les polycristaux et les hétérogénéités intra ou intergranulaire induites par l'élastoviscoplasticité cristalline n'ont été abordées que très récemment [7-10], et suscitent de nouveaux questionnements sur la FPH et sur les modèles à ces échelles [11,12]. Ces travaux concernent surtout des matériaux de structure cfc (Ni, alliages d'Al, 316L) sous sollicitations uniaxiales (traction...), et les simulations Eléments Finis sont utilisées soit pour prévoir les hétérogénéités locales sans tenir compte des interactions hydrogène-matériau [13], soit pour extraire des coefficients de diffusion moyens [14,15] sans tenir compte de la plasticité et du piégeage induit.

Au LSPM, après des travaux précurseurs [16], les thèses de T.H. Nguyen (2014) et S. Benannoune (2016-19) ont permis de développer des outils numériques performants et modulaires dans Abaqus, notamment par l'implantation :

- de l'équation de diffusion-piégeage de l'hydrogène prenant en compte l'effet des champs de contrainte sur la diffusion et du piégeage par les dislocations (de manière phénoménologique) [17,18]
- de lois de comportement en plasticité isotrope et d'élastoviscoplasticité cristalline
- plus récemment, de cinétique de piégeage, de multi-piégeage, et de multi diffusion (en particulier thermique), ce qui permet d'ouvrir grandement les perspectives des simulations effectuées.

L'application de ces outils numériques à des essais mécaniques non-standard (U-bend test, essai de disque, cisaillement simple...) et les simulations utilisant des approches en plasticité cristalline (CPFEM) 3D en chargement complexe ont permis de publier des travaux originaux [19-21] et d'être reconnus dans la communauté nationale et internationale concernée. Ces travaux ont également permis d'initier des interactions originales transdisciplinaires avec les communautés plasma [22,23], et de stimuler le dialogue entre les échelles [24-26], renforçant le besoin d'analyse à l'échelle du cristal.

Cependant, les possibilités de confrontation calcul-expériences sont restées limitées à des aspects macroscopiques [27] alors que la validation plus précise des champs mécaniques en présence ou non d'hydrogène est indispensable pour la fiabilité des modèles et/ou leur amélioration. Des investigations expérimentales à l'échelle polycristalline dans le fer ont été initiées dans la thèse de S. Ayadi, mais restreintes à des conditions de chargement séquentielles ne permettant pas de valider les simulations de couplage simultané entre chargement mécanique et hydrogène, tandis que les mesures de quantité d'hydrogène restaient à développer.

Objectifs de la thèse

La thèse vise à exploiter les potentialités de « l'essai de disque » sous pression d'hydrogène gazeux disponible au laboratoire. En particulier, l'objectif est de permettre une analyse expérimentale des interactions hydrogène-plasticité-fissuration à l'échelle cristalline, en s'appuyant sur des comparaisons pertinentes avec les approches numériques développées récemment (permettant notamment de prendre en compte les caractéristiques réelles des agrégats poly ou multi-cristallins). A l'aide d'investigations sur polycristaux à gros grains, multicristaux voire monocristaux, il s'agira :

- d'analyser l'effet de l'hydrogène sur les hétérogénéités de déformation plastique et sur l'initiation de la fissuration induite par l'hydrogène (lien avec systèmes de glissement, orientation cristalline,..)
- d'accéder aux quantités d'hydrogène absorbées après déformation plastique sous hydrogène (TDS,...)
- de confronter les champs mécaniques et de concentration d'hydrogène aux simulations 3D CPEF couplées, en vue de valider et/ou améliorer les modèles utilisés (en particulier, le couplage hydrogène-écrouissage...).

Les essais de disque sous haute pression d'hydrogène, au-delà de leur utilisation comme essai normalisé, constituent en effet un cas sévère et original de couplage simultané entre viscoplasticité et transport d'hydrogène, sous chargement complexe. Des adaptations des conditions d'essai seront réalisées pour tenir compte de la taille des multicristaux disponibles. En particulier, des géométries originales d'éprouvettes permettant d'isoler la réponse de cristaux particuliers seront testées, en s'appuyant sur des calculs numériques préalables (conception par éléments finis).

L'analyse des modes de déformation et d'initiation de la fissuration dans ces cristaux sera effectuée à l'aide de différentes techniques, dont le MEB-EBSD et la DRX. De plus, les mesures de concentration d'hydrogène seront développées, en particulier grâce au dispositif de TDS récemment acquis au laboratoire. La mesure de la localisation d'hydrogène par KPFM sera également envisagée, localement et/ou en collaboration extérieure.

L'étude portera essentiellement sur des polycristaux ou multicristaux de fer. Dans un premier temps, des polycristaux commerciaux de fer α et/ou de Fe-Si à gros grains seront testés, afin de conforter les simulations EF effectuées précédemment sur le fer, et des multicristaux seront envisagés selon les possibilités de cristallogenèse. L'étude permettra ainsi de valoriser le savoir-faire du laboratoire et d'élargir le champ expérimental de plasticité cristalline à la prise en compte du couplage avec le transport d'hydrogène, et à rebours, d'évaluer les évolutions des lois de comportement en fonction de la concentration locale en hydrogène (en s'appuyant, en particulier, sur les approches de dynamique des dislocations).

Moyens mis en œuvre : essais de disques sous pression d'hydrogène, MEB-EBSD, traitements thermiques, mesures de quantités d'hydrogène, simulations éléments finis

Profil recherché : *mécanique et matériaux, dominante expérimentale*

Références

- [1] Lecoester F, Chêne J, Noel D. Hydrogen embrittlement of the Ni-base Alloy 600 correlated with hydrogen transport by dislocations. *Mater Sci Eng A* 1999;262:173–83. doi:10.1016/S0921-5093(98)01006-5.
- [2] Ferreira PJ, Robertson IM, Birnbaum HK. Hydrogen effects on the character of dislocations in high-purity aluminum. *Acta Mater* 1999;47:2991–8. doi:10.1016/S1359-6454(99)00156-1.
- [3] Chateau JP, Delafosse D, Magnin T. Numerical simulations of hydrogen–dislocation interactions in fcc stainless steels. *Acta Mater* 2002;50:1507–22. doi:10.1016/S1359-6454(02)00008-3.
- [4] Tehranchi A, Zhang X, Lu G, Curtin WA. Hydrogen–vacancy–dislocation interactions in α -Fe. *Model Simul Mater Sci Eng* 2016;25:025001. doi:10.1088/1361-651X/aa52cb.
- [5] Momida H, Asari Y, Nakamura Y, Tateyama Y, Ohno T. Hydrogen-enhanced vacancy embrittlement of grain boundaries in iron. *Physical Review B* 2013;88:144107. doi:10.1103/PhysRevB.88.144107.
- [6] Benediktsson MP, Mýrdal KKG, Maurya P, Pedersen A. Stability and mobility of vacancy–H complexes in Al 2013;25:375401. doi:10.1088/0953-8984/25/37/375401.
- [7] Birnbaum HK, Sofronis P. Hydrogen-enhanced localized plasticity - a mechanism for hydrogen-related fracture. *Mater Sci Eng A* 1994;176:191–202.
- [8] Takai K, Takai K, Shoda H, Suzuki H, Nagumo M. Lattice defects dominating hydrogen-related

- failure of metals. *Acta Mater* 2008;56:5158–67. doi:10.1016/j.actamat.2008.06.031.
- [9] Taha A, Sofronis P. A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement. *Eng Frac Mech* 2001;68:803–37. doi:http://dx.doi.org/10.1016/S0013-7944(00)00126-0.
- [10] Novak PM, Yuan R, Somerday BP, Sofronis P, Ritchie RO. A statistical, physical-based, micro-mechanical model of hydrogen-induced intergranular fracture in steel. *J Mech Phys Solids* 2010;58:206–26. doi:10.1016/j.jmps.2009.10.005.
- [11] Aubert I, Saintier N, Olive J-M, Plessier F. A methodology to obtain data at the slip-band scale from atomic force microscopy observations and crystal plasticity simulations. Application to hydrogen-induced slip localization on AISI 316L stainless steel. *Acta Mater* 2016;104:9–17. doi:10.1016/j.actamat.2015.11.042.
- [12] Li J-X, Oudriss A, Metsue A, Bouhattate J, Feaugas X. Anisotropy of hydrogen diffusion in nickel single crystals: the effects of self-stress and hydrogen concentration on diffusion. *Sci Rep* 2017;7:45041. doi:10.1038/srep45041.
- [13] Pouillier E, Gourgues AF, Tanguy D, Busso EP. A study of intergranular fracture in an aluminium alloy due to hydrogen embrittlement. *Int J Plast* 2012;34:139–53. doi:10.1016/j.ijplas.2012.01.004.
- [14] Legrand E, Bouhattate J, Feaugas X, Touzain S, Garmestani H, Khaleel M, et al. Numerical analysis of the influence of scale effects and microstructure on hydrogen diffusion in polycrystalline aggregates. *Comput Mater Sci* 2013;71:1–9. doi:10.1016/j.commatsci.2013.01.018.
- [15] Jothi S, Croft TN, Brown SGR. Modelling the influence of microstructural morphology and triple junctions on hydrogen transport in nanopolycrystalline nickel. *Composites Part B: Engineering* 2015;75:104–18. doi:10.1016/j.compositesb.2014.09.042.
- [16] Charles Y, Gaspérini M, Disashi J, Jouinot P. Numerical modeling of the Disk Pressure Test up to failure under gaseous hydrogen. *J Mater Process Technol* 2012;212:1761–70. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2012.03.022.
- [17] Sofronis P, McMeeking RM. Numerical analysis of hydrogen transport near a blunting crack tip. *J Mech Phys Solids* 1989;37:317–50. doi:http://dx.doi.org/10.1016/0022-5096(89)90002-1.
- [18] Krom AHM, Koers RWJ, Bakker AD. Hydrogen transport near a blunting crack tip. *J Mech Phys Solids* 1999;47:971–92. doi:http://dx.doi.org/10.1016/S0022-5096(98)00064-7.
- [19] Charles Y, Nguyen TH, Gaspérini M. FE simulation of the influence of plastic strain on hydrogen distribution during an U-bend test. *Int J Mech Sci* 2017;120:214–24. doi:10.1016/j.ijmecsci.2016.11.017.
- [20] Ayadi S, Charles Y, Gaspérini M, Caron Lemaire I, Da Silva Botelho T. Effect of loading mode on blistering in iron submitted to plastic prestrain before hydrogen cathodic charging. *Int J Hydrog Energy* 2017;42:10555–67. doi:10.1016/j.ijhydene.2017.02.048.
- [21] Charles Y, Nguyen TH, Gaspérini M. Comparison of hydrogen transport through pre-deformed synthetic polycrystals and homogeneous samples by finite element analysis. *Int J Hydrog Energy* 2017;42:20336–50. doi:10.1016/j.ijhydene.2017.06.016.
- [22] Quirós C, Mougnot J, Lombardi G, Redolfi M, Brinza O, Charles Y, et al. Blister formation and hydrogen retention in aluminium and beryllium: A modeling and experimental approach. *Nuclear Materials and Energy* 2017;12:1178–83. doi:10.1016/j.nme.2016.12.036.
- [23] Benannoune S, Charles Y, Mougnot J, Gaspérini M. Numerical simulation of the transient hydrogen trapping process using an analytical approximation of the McNabb and Foster equation. *Int J Hydrog Energy* 2018. doi:10.1016/j.ijhydene.2018.03.179.
- [24] Ehlers FJH, Seydou M, Tingaud D, Maurel F, Charles Y, Queyreau S. Supercell size convergence testing in uniaxial tensile test studies of an Al grain boundary: A proposed path to a robust analysis. *Comput Mater Sci* 2017;139:39–47. doi:10.1016/j.commatsci.2017.07.028.
- [25] Ehlers FJH, Seydou M, Tingaud D, Maurel F, Queyreau S, Charles Y. Ab initio studies of two Al grain boundaries subjected to mixed tension/shear mode loading: how shear may promote breakage. *Model Simul Mater Sci Eng* 2017;25:064001. doi:10.1088/1361-651x/aa7496.
- [26] Ehlers FJH, Seydou M, Tingaud D, Maurel F, Charles Y, Queyreau S. Ab initio determination of the traction–separation curve for a metal grain boundary: a critical assessment of strategies. *Model Simul Mater Sci Eng* 2016;24:085014. doi:10.1088/0965-0393/24/8/085014.
- [27] Ardon K, Charles Y, Gaspérini M, Furtado J. A Numerical and Experimental Study of the Disk Pressure Test, doi:10.1115/PVP2013-97433, *Asme* 2013