

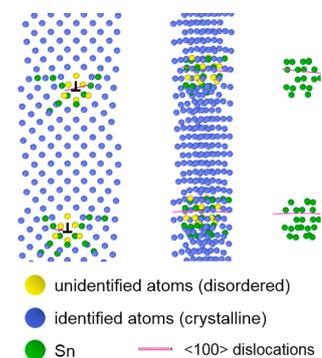
## Offre de thèse « Modélisation à l'échelle atomique de l'interaction hydrogène-défauts cristallins dans les alliages ferritiques »

**Mots clef :** Hydrogène, Modélisation numérique, Champ de phase cristallin, Aciers ferritiques, Fragilisation par hydrogène, Machine-learning, Transition écologique.

**Sujet de la thèse :** La fragilisation par l'hydrogène, qui se traduit par une dégradation des propriétés mécaniques ou une défaillance prématurée des matériaux, a été largement étudiée au cours des dernières décennies. En particulier, elle est considérée comme l'un des mécanismes les plus dévastateurs dans les aciers et alliages ferreux à ultra-haute résistance. En général, à mesure que la résistance de l'acier augmente, sa susceptibilité à la fragilisation par l'hydrogène augmente également. Les aciers à haute résistance, tels que les aciers trempés et revenus ou durcis par précipitation, y sont particulièrement vulnérables. De nombreux mécanismes ont été proposés pour décrire les différents processus de fragilisation par l'hydrogène, qui demeure malgré cela l'un des défis majeurs non résolus en métallurgie physique.

À l'échelle atomique, la fragilisation par l'hydrogène peut être attribuée à l'interaction de l'hydrogène avec les défauts structuraux du matériau et les autres espèces en solution, selon des processus dynamiques complexes. D'une part, la présence d'hydrogène en solution diminue les énergies de formation et de migration de certains défauts structuraux. Entre autres conséquences, on peut citer l'accroissement de la mobilité des dislocations qui modifie la plasticité du matériau, ainsi que l'augmentation de la concentration en lacunes qui accélère la diffusion de certaines espèces en solution. Au contraire, la présence d'interstitiels d'hydrogène sur les chemins de diffusion d'autres espèces en solution peut diminuer leur mobilité et ainsi ralentir la formation d'agrégats et la croissance de précipités. D'autre part, la ségrégation de l'hydrogène aux joints de grains réduit leur énergie de cohésion, ce qui favorise un mode de rupture intergranulaire, et contribue à fragiliser le matériau.

Dans ce contexte, ce projet a pour objectif de développer un modèle numérique à l'échelle atomique, pour comprendre les mécanismes de l'interaction des atomes d'hydrogène avec les défauts cristallins dans les aciers ferritiques, avec en ligne de mire la simulation des mécanismes couplés à l'origine de la fragilisation par l'hydrogène des aciers. Dans cette optique, une approche alternative aux modèles numériques atomistiques traditionnels (calculs *ab-initio*, dynamique moléculaire, etc.) du nom d'approche des Quasi-particules (QA) [1, 2] sera utilisée. Cette méthode de champ permet en effet de décrire l'évolution du système sur une échelle de temps de la diffusion et dans l'espace continu, tout en préservant la description du système à l'échelle atomique. Ce faisant, elle est particulièrement adaptée pour rendre compte des phénomènes liés aux défauts structuraux où la périodicité du réseau est rompue (figure 1), ainsi qu'à la diffusion atomique. Un enjeu de ce projet de thèse sera d'une part d'améliorer le modèle QA pour tenir compte des spécificités de l'hydrogène en solution, comme sa grande mobilité au sein des sites tétraédriques du fer, et d'autre part de décrire l'interaction de l'hydrogène avec d'autres espèces en solution. Ce développement passera notamment par la mise au point de nouveaux potentiels d'interaction qui sous-tendent l'approche QA. Par ailleurs, l'approche QA pourra être complétée par des outils d'intelligence artificielle, pour la dérivation de nouvelles fonctionnelles du potentiel, l'analyse de structures et de défauts, et la mise à l'échelle des simulations de QA. Ce travail de recherche aura



**Figure 1** – Simulation QA de l'adsorption d'atomes d'étain en solution dans le fer  $\alpha$ .

pour point de départ le modèle QA existant, ainsi que sur les différentes approches de machine-learning disponibles au laboratoire. Le doctorant ou la doctorante effectuera son doctorat au sein de l'équipe MMTP du laboratoire GPM, dans un environnement scientifique international. Il ou elle aura accès au supercalculateur de Normandie (CRIANN).

[1] M. Lavrskyi *et al.*, Npj Computational Materials **2**, 1 (2016).

[2] G. Demange *et al.*, Acta Materialia **226**, 117599 (2022).

**Compétences souhaitées :**

1. Le candidat ou la candidate disposera d'un profil modélisation numérique-physique de la matière condensée ou des matériaux.
2. Des connaissances solides dans au moins un des domaines suivants sont indispensables : physique de la matière condensée, science des matériaux, thermodynamique.
3. Le candidat ou la candidate devra disposer de bases solides en physique numérique.
4. Des compétences dans au moins un des langages informatiques suivants sont indispensables : Fortran, Python, C, C++.

**Informations pratiques :** la thèse sera effectuée au Groupe de Physique des Matériaux (GPM, UMR 6634, Université de Rouen-Normandie), sous la direction de Helena Zapolsky (Professeur) et l'encadrement de Gilles Demange (Maître de Conférences), à compter du 01/09/2025.

**Contacts :** [gilles.demange@univ-rouen.fr](mailto:gilles.demange@univ-rouen.fr), [helena.zapolsky@univ-rouen.fr](mailto:helena.zapolsky@univ-rouen.fr)

---