

# THESE DE DOCTORAT

NANTES UNIVERSITE

ECOLE DOCTORALE N° 596  
*Matière, Molécules, Matériaux et Géosciences*  
Spécialité : Science des matériaux

Par

**Aman PRASAD**

## **Contribution à la conception d'alliages de nickel résistants à la fragilisation par l'hydrogène**

Contribution to the design of nickel alloys resistant to hydrogen embrittlement

**Thèse présentée et soutenue à Saint-Étienne le 7 Avril 2025**

**Unité de recherche : IMN UMR6502**

### **Rapporteurs avant soutenance :**

Christine BLANC Professeure des Universités, Institut National Polytechnique de Toulouse  
Dôme TANGUY Maître de conférences HDR, Université Claude Bernard Lyon 1

### **Composition du Jury :**

Examineurs : Xavier FEUGAS Professeur des Universités, La Rochelle Université  
Christine BLANC Professeure des Universités, Institut National Polytechnique de Toulouse  
Dôme TANGUY Maître de conférences HDR, Université Claude Bernard Lyon 1  
Isabelle BRAEMS-ABBASPOUR Chargée de recherche, CNRS, IMN  
Dir. de thèse : Franck TANCRET Professeur des Universités, Nantes Université  
Co-dir. de thèse : Frédéric CHRISTIEN Professeur de l'École des Mines - IMT, Mines Saint-Étienne

---

**Titre :** Contribution à la conception d'alliages de nickel résistants à la fragilisation par l'hydrogène

**Mots clés :** Fragilisation par l'hydrogène, Optimisation multi-objectifs, Interactions hydrogène-métal, Calculs de premiers principes, Effets de la structure électronique, Conception d'alliages

**Résumé :** Des stratégies d'atténuation de la fragilisation par l'hydrogène (FPH) sont étudiées. Une première approche s'appuie sur la conception d'alliages modèles combinée à des investigations expérimentales pour examiner le rôle des précipités  $\gamma'$  dans le piégeage de l'hydrogène, ainsi que leur impact sur la FPH. Deux alliages avec des désaccords de paramètres de mailles  $\gamma/\gamma'$  distincts ont été conçus à l'aide de calculs thermodynamiques, de modèles de régression et d'un algorithme génétique. Les essais ont révélé un retard significatif de la diffusion de l'hydrogène dans les deux alliages en raison de la présence de pièges à hydrogène. L'alliage à faible désaccord paramétrique présente un piégeage moindre mais un ralentissement plus efficace de la diffusion.

L'autre approche utilise des calculs *ab initio* pour comprendre l'influence des éléments d'alliage sur la FPH. Ces calculs portent sur l'énergie de surface, l'énergie des fautes d'empilement instables et la densité d'états électroniques. L'hydrogène fragilise tous les alliages étudiés en diminuant l'énergie de surface et en augmentant l'énergie de faute d'empilement. Une corrélation entre le nombre d'électrons d des éléments d'alliage, la densité d'états au niveau de Fermi et la susceptibilité à la FPH a été observée, apportant des pistes essentielles pour la conception d'alliages plus résistants à l'hydrogène.

---

**Title :** Contribution to the design of nickel alloys resistant to hydrogen embrittlement

**Keywords :** Hydrogen embrittlement, multi-objective optimization, hydrogen-metal interactions, first-principles calculations, Electronic structure effects, alloy design

**Abstract :** Strategies for mitigating hydrogen embrittlement HE are investigated. A first approach relies on the design of model alloys combined with experimental investigations to examine the role of  $\gamma'$  precipitates in hydrogen trapping, as well as their impact on HE. Two alloys with distinct  $\gamma/\gamma'$  misfits were designed using a combination of thermodynamic calculations, regression models and a genetic algorithm. Experimental results revealed a significant delay in hydrogen diffusion in both alloys due to the presence of hydrogen traps. The alloy with low misfit showed less trapping but a more effective diffusion retardation.

The second approach uses *ab initio* calculations to understand the influence of alloying elements on HE. These calculations focus on surface energy, the energy of unstable stacking faults and the density of electronic states. Hydrogen embrittles all the alloys studied, decreasing surface energy and increasing stacking fault energy. Furthermore, a correlation between the number of d-electrons in the alloying elements, the density of states at the Fermi level and susceptibility to HE was observed, providing essential leads for the design of more hydrogen-resistant alloys.