

Научная статья

УДК 539.3

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15306>

ВЛИЯНИЕ ВЫБОРА ЛОВУШЕЧНОЙ МОДЕЛИ НА АДЕКВАТНОСТЬ ОПИСАНИЯ ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА В МЕТАЛЛЫ ИЗ ВНЕШНЕЙ СРЕДЫ

П. М. Григорьева [✉]

Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

[✉] gpm@ipme.ru

Аннотация. В работе рассматривается явление диффузии водорода в металлы из внешней среды. Для того чтобы наиболее корректно описать возникновение стабильного во времени пограничного слоя (наблюдается экспериментально), обладающего концентрацией водорода, в десятки раз превышающей его концентрацию внутри тела, модифицируется ранее полученное уравнение диффузии водорода. В это уравнение, учитывающее из первых принципов взаимовлияние между напряженно-деформированным состоянием твердого тела и процессом транспорта газового компонента, вводится стоковый член, который описывает диффузию по ловушечным модам. Указанная модификация выполняется двумя способами: с помощью классической модели МакНабба и с использованием тензора поврежденности. Для обоих подходов решается краевая задача, результаты решения сравниваются с опубликованными экспериментальными данными.

Ключевые слова: диффузия водорода, ловушечная модель, твердое тело, пограничный слой, напряженно-деформированное состояние

Финансирование: исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 18-19-00160 «Разработка фундаментальных основ для расчетно-экспериментальной водородной диагностики деградации свойств конструкционных материалов в агрессивных коррозионных средах».

Для цитирования: Григорьева П. М. Влияние выбора ловушечной модели на адекватность описания диффузии водорода в металлы из внешней среды // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С71–82. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15306>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15306>

THE INFLUENCE OF THE TRAPPING MODEL CHOICE ON THE ADEQUATE DESCRIPTION OF HYDROGEN DIFFUSION INTO METALS FROM EXTERNAL ENVIRONMENT

P. M. Grigoreva [✉]

Institute for Problems of Mechanical Engineering RAS, St. Petersburg, Russia

[✉] gpm@ipme.ru

Abstract. The paper considers the hydrogen diffusion into metals from their external environment. In order to properly describe a time-stable boundary layer (experimentally observed)

with a hydrogen concentration being tens of times higher than that inside the body, the previously obtained hydrogen diffusion equation has been modified. This equation obtained from the first principles and taking into account the influence of the stress-strain state of solid on the transport process of the gas component, was supplemented with a stock term describing the diffusion with trapping modes. This modification was carried out in two ways: using the classical McNabb model and using the tensor of damageability. The boundary-value problem was solved for both approaches. The solution results were compared with published experimental data.

Keywords: hydrogen diffusion, trap model, solid, boundary layer, stress-strain state

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (grant No. 18-19-00160). The grant is entitled “Development of fundamental principles for computational and experimental hydrogen diagnostics of the properties of structural materials in aggressive corrosive environments”.

For citation: Grigoreva P. M., The influence of the trapping model choice on the adequate description of hydrogen diffusion into metals from external environment, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) ...—... . DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15306>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Влияние эффекта водородной деградации на прочностные свойства металлов остается одной из наиболее актуальных проблем механики уже более ста лет [1]. Известно, что металлы могут поглощать водород из внешней среды, снижая собственную вязкость разрушения и прочность [2], что особенно критично в нынешней индустрии, где предъявляются повышенные требования к прочности сталей. Экспериментальные оценки и измерения профиля концентрации водорода в металлах [3 – 6] показывают, что концентрация водорода в пограничном слое в десятки и даже сотни раз превышает таковую во всем объеме металла. Недавние экспериментальные работы [7 – 9] позволяют говорить о наиболее сильном влиянии этого тонкого слоя (его толщина составляет около одного микрометра) на упругие свойства, хрупкость и вязкость металла. Таким образом, моделирование тонкого приграничного слоя, возникающего в результате диффузии водорода из окружающей среды в металл, и описание взаимного влияния между процессом диффузии и механическими свойствами металла представляет значительный теоретический и практический интерес.

В научной литературе нет установившегося мнения, как учитывать влияние механических напряжений на диффузию. Одна из первых моделей, которая широко используется до сих пор, основана на интуитивной оценке экспериментальных данных [10]. В дальнейшем широкое распространение получили модели, основанные на термодинамике необратимых процессов и представляющие собой обобщение уравнений типа Фурье, согласно которым необратимые процессы можно описывать линейными дифференциальными уравнениями с постоянными коэффициентами. В рамках этого подхода скорость диффузии пропорциональна термодинамическим силам, которые могут быть выражены через градиенты соответствующих потенциалов, зависящих, в частности, от напряженно-деформированного состояния (см., например, статьи [11 – 13]). Эти дополнительные термодинамические силы обычно связаны с изменением объема или жесткости твердого материала или с изменением концентрации газа. В ряде работ термодинамическую силу, учитывающую влияние напряжений, записывают через химические потенциалы материалов, используя в качестве химического потенциала деформируемого твердого тела тензор Эшелби [14 – 17]. Однако такие модели применяют редко, ввиду некоторых сложностей, связанных с определением модельных констант. Кроме того, эксперименты показывают, что водород не только диффундирует через кристаллическое вещество металла, но и перераспределяется в ловушечных модах [4, 18 – 20].

Следовательно, диффузию водорода в металлах не следует считать обычной диффузией по границам зерен. Многие работы, посвященные диффузии водорода в металлах, рассматривают протекание этой диффузии по ловушечному механизму (см. основополагающие работы [21, 22] и многие другие, например [17, 23 – 26]). Такие модели специфичны и неадекватно описывают весь комплекс разнообразных экспериментальных данных. Это приводит к тому, что коэффициенты диффузии водорода в справочниках указываются с точностью до порядка величины (см., например, справочник [27]). Следует также отметить, что большинство моделей ловушек и объемной диффузии были верифицированы для малых градиентов концентрации водорода в материале. Это не позволяет учитывать наблюдаемый пограничный слой и требует существенной модификации этих моделей.

Для более точного описания экспериментально наблюдаемого приповерхностного слоя с высокой концентрацией водорода, который относительно стабилен во времени и не расширяется в глубь металла вследствие диффузии, в настоящей работе вводится стоковый член в уравнение транспорта водорода внутрь металла, находящегося в напряженно-деформированном состоянии (уравнение было получено ранее в ряде работ, см., например, книгу [28] и ссылки в ней).

В данной работе рассмотрены две возможности введения стокового члена. Первая – это классическая модель МакНабба [21]. Вторая возможность – это альтернативная модель двухканальной диффузии, которая отдельно учитывает поток через неоднородности внутри металла.

Диффузия водорода по ловушечным модам с учетом влияния напряженно-деформированного состояния металла

В предыдущих наших работах (см., например, книгу [28] и ссылки в ней) были исследованы возможности применения подхода линейной неравновесной термодинамики. На основе предположения о зависимости химического потенциала диффундирующего газа от тензора энергии-импульса Эшелби было получено модифицированное уравнение диффузии, которое учитывало зависимость процесса транспорта газа внутрь твердого тела от его напряженно-деформированного состояния. Указанное уравнение было записано для случая идеального газа и линейно-упругого тела следующим образом:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D_{eff} \nabla c + \mathbf{V}c), \quad (1)$$

При этом эффективный коэффициент диффузии D_{eff} определялся как

$$D_{eff} = D_0 \left(1 + \frac{cM}{RT\rho} \frac{E}{1-2\nu} [-\alpha \text{tr}\boldsymbol{\varepsilon} + 3\alpha^2 c] \right). \quad (2)$$

Предлагаемое дополнительное слагаемое вида $\mathbf{V}c$ выражает тормозящую силу, пропорциональную концентрации, причем коэффициент пропорциональности следует выражению

$$\mathbf{V} = \frac{D_0 M E}{RT\rho} \left(\frac{\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \text{tr}\boldsymbol{\varepsilon} \nabla(\text{tr}\boldsymbol{\varepsilon}) - \frac{1}{1-2\nu} \alpha c \nabla(\text{tr}\boldsymbol{\varepsilon}) + \frac{1}{2(1+\nu)} \nabla(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) \right). \quad (3)$$

В формулах (2) и (3) используются следующие обозначения: c – концентрация диффузионно-подвижного водорода; T – температура; R – универсальная газовая постоянная; M, ρ – молярная масса и плотность твердого тела; D_0 – коэффициент диффузии, зависящий от температуры; E, ν – модуль Юнга и коэффициент Пуассона твердого тела; $\boldsymbol{\varepsilon}$ – тензор линейно-упругих деформаций, $\text{tr}\boldsymbol{\varepsilon}$ – сумма его главных значений.

Кроме того, в этой записи уравнения диффузии учитывается, что диффундирующий газ индуцирует внутренние деформации $\boldsymbol{\varepsilon}_{diff}$, пропорциональные концентрации и имеющие изотропный характер: $\boldsymbol{\varepsilon}_{diff} = \alpha c \mathbf{E}$ (\mathbf{E} – единичный тензор).

Очевидно, что в случае линейной теории последнее слагаемое выражений (2) и (3) может быть отброшено за порядком малости, ввиду рассмотрения тензора линейных деформаций, однако и в этом случае уравнение диффузии будет иметь неклассический вид, и,

кроме того, содержать в себе дополнительные слагаемые, помимо широко используемых моделей диффузии, учитывающие напряженно-деформированное состояние с помощью градиента давления (в случае предложенной модели это множитель $\nabla(\text{tr}\boldsymbol{\varepsilon})$).

Полученное уравнение диффузии при решении конкретных краевых задач действительно дает высокие градиенты концентрации газа внутри твердого тела и замедляет выравнивание профиля его концентрации по мере насыщения рассматриваемого образца газовым компонентом. Эти результаты говорят о том, что предложенное уравнение диффузии можно использовать для описания процессов транспорта водорода внутрь металла из внешней среды. Однако никакие внутренние напряжения в рамках этого подхода не способны вызвать почти стократную разницу концентраций газа на границе и в объеме твердого тела, что говорит о необходимости учета дополнительного канала диффузии.

Как упоминалось выше, многие исследователи процессов, связанных с водородной деградацией металлов, считают диффузию водорода в металле диффузией, проходящей по ловушечным модам. Эти моды могут иметь различную природу и зависеть как от механических, так и термодинамических характеристик системы металл-водород. Классические модели учета диффузии по ловушечным модам – это модель перераспределения водорода МакНабба [21] или ее упрощенный вариант, исключаящий зависимость скорости перераспределения от времени, предложенный Р. А. Ориани [22].

В нашей работе модель МакНабба будет использоваться наряду с модифицированным уравнением диффузии (1) для более точного описания наблюдаемого экспериментально приповерхностного слоя с высокой концентрацией водорода, который будет относительно стабилен во времени и не будет размываться в глубь металла со временем. Несмотря на то, что эта ловушечная модель наиболее часто используется для решения проблем, связанных с диффузией водорода, ее еще ни разу не применяли для решения краевых задач, т.е. решения, которое бы учитывало влияние напряженно-деформированного состояния металла на процесс диффузии из первых принципов.

Считается, что процессы диффузии в объеме и диффузии по ловушечным модам протекают независимо друг от друга. Следовательно, мы можем разложить полную концентрацию водорода на сумму из двух концентраций:

$$c = c_{vd} + c_{trap}, \quad (4)$$

где c_{vd} – концентрация водорода, продиффундировавшего вследствие объемной диффузии; c_{trap} – концентрация водорода, диффундирующего по ловушкам.

Для того чтобы рассчитать концентрацию водорода в ловушках, вводятся две дополнительные величины: θ_{trap} – степень заполненности ловушек и N_{trap} – плотность распределения ловушек.

Соответственно, концентрация водорода в ловушках в таком случае будет выражаться как

$$c_{trap} = \theta_{trap} N_{trap}. \quad (5)$$

Плотность распределения ловушек N_{trap} считается известной (из эксперимента или дополнительных определяющих соотношений). Чтобы ориентироваться на данные, опубликованные в литературе, в этой работе предположим, что величина N_{trap} не зависит от времени.

Для нахождения степени заполненности ловушек, введем дополнительное определяющее соотношение, которое оперирует еще двумя дополнительными величинами, аналогично тому, как это сделано для c_{trap} в формуле (5): θ_{vd} – степень заполненности межзеренных промежутков; N_{vd} – плотность распределения межзеренных промежутков, в которые может продиффундировать диффузионно-подвижный водород.

Согласно сведениям, представленным в статье [21], определяющее соотношение для θ_{trap} имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \theta_{trap}}{\partial t} = p \theta_{vd} (1 - \theta_{trap}) - k \theta_{trap}, \quad (6)$$

где p, k – параметры материала (металла), определяемые экспериментально.

Для учета зависимостей процесса диффузии и величины концентрации c_{vd} от напряженно-деформированного состояния твердого тела используем уравнение (1). В выражениях (2) и (3) возьмем слагаемые только первого порядка малости. Тогда система уравнений для нахождения профиля концентрации газового компонента в твердом теле, учитывающая диффузию по ловушечным модам, выглядит следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c_{vd}}{\partial t} + N_{trap} \frac{\partial \theta_{trap}}{\partial t} = \nabla \cdot (D_{eff} \nabla c_{vd} + \mathbf{V} c_{vd}), \\ \frac{\partial \theta_{vd}}{\partial t} = p \theta_{vd} (1 - \theta_{trap}) - k \theta_{trap}, \\ D_{eff} = D_0 \left(1 - \frac{cM}{RT\rho} \frac{E}{1-2\nu} \alpha \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon} \right), \\ \mathbf{V} = \frac{D_0 M E}{RT\rho} \left(\frac{\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{1-2\nu} \alpha c \right) \nabla (\text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}), \\ c = c_{vd} + N_{trap} \theta_{trap}, \\ \nabla \cdot \left[\frac{\nu}{1-2\nu} (\text{tr} \boldsymbol{\varepsilon} - 3\alpha c) \mathbf{E} + (\boldsymbol{\varepsilon} - \alpha c \mathbf{E}) \right] = 0. \end{array} \right. \quad (7)$$

Последнее уравнение системы (7) – это уравнение упругости, которое учитывает деформации, индуцированные продиффундировавшим водородом.

В опубликованных литературных источниках (см., например, статьи [29 – 31]) считается, что ловушечные моды связаны с неоднородностями внутри металла (нанопоры, дислокации, микротрещины и т. п.), в которых накапливается диффундирующий водород. Недавние экспериментальные работы [32, 33] представляют результаты исследования поврежденности металлов и, таким образом, могут служить источником сведений о поврежденности и ее распределении по объему металла. В частности, в работе [33], где расширена идея скалярной величины поврежденности, предложен тензор поврежденности \mathbf{D} , который определен как

$$(\mathbf{E} - \mathbf{D}) \cdot \mathbf{n} \delta S = \bar{\mathbf{n}} (\delta S - \delta S_T), \quad (8)$$

где δS – площадь некоторой элементарной площадки; δS_T – площадь повреждений на этой площадке; \mathbf{n} – нормаль, задающая исследуемый поток; $\bar{\mathbf{n}}$ – нормаль к этой элементарной площадке.

Поскольку диффузия по ловушечным модам фактически является дополнительным потоком через повреждения твердого тела (микротрещины, поры, дислокации и т. п.), в качестве альтернативы подходу МакНабба можно предложить рассмотрение многоканальной диффузии, полагая, что в дополнение к обычному диффузионному потоку в системе имеет место поток водорода через повреждения металла; при этом газовый компонент оседает на этих повреждениях. Поскольку диффузионный поток газа \mathbf{j} выражается как

$$\mathbf{j} = \rho \mathbf{V} S,$$

где \mathbf{V} – вектор скорости потока диффундирующего газа; ρ – плотность газа; S – площадь площадки, через которую течет этот поток, то получим, что дополнительный поток по ловушечным модам \mathbf{j}_{trap} равен

$$\mathbf{j}_{trap} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{j}, \quad (9)$$

и, таким образом, уравнение диффузии в этом случае принимает вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot [(\mathbf{E} - \mathbf{D}) \cdot (D_{eff} \nabla c + \mathbf{V}c)]. \quad (10)$$

Здесь фактически аналогом стокового члена является слагаемое

$$-\nabla \cdot [\mathbf{D} \cdot (D_{eff} \nabla c + \mathbf{V}c)]. \quad (11)$$

Система уравнений для нахождения профиля концентрации газового компонента в твердом теле, учитывающая диффузию по ловушечным модам, выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot [(\mathbf{E} - \mathbf{D}) \cdot (D_{eff} \nabla c + \mathbf{V}c)], \\ D_{eff} = D_0 \left(1 - \frac{cM}{RT\rho} \frac{E}{1-2\nu} \text{tr}\boldsymbol{\varepsilon} \right), \\ \mathbf{V} = \frac{D_0 M E}{RT\rho} \left(\frac{\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \text{tr}\boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{1-2\nu} \alpha c \right) \nabla(\text{tr}\boldsymbol{\varepsilon}), \\ \nabla \cdot \left[\frac{\nu}{1-2\nu} (\text{tr}\boldsymbol{\varepsilon} - 3\alpha c) \mathbf{E} + (\boldsymbol{\varepsilon} - \alpha c \mathbf{E}) \right] = 0. \end{cases} \quad (12)$$

Поскольку основная часть экспериментов проводится на цилиндрических образцах, растягивающие напряжения на которые приложены вдоль их осей симметрии, для верификации модели рассмотрим в качестве краевой задачи цилиндр, подвергающийся одноосному растяжению (рис. 1). Полагаем, что длина цилиндра вдоль оси z превышает его



Рис. 1. Схема к постановке краевой задачи: цилиндрический образец радиусом r_{out} подвергается действию аксиальных растягивающих напряжений σ_0 и газового потока с боковой поверхности

радиус r_{out} значительным образом, а водород проникает только с боковой поверхности. Поэтому деформации, возникающие в цилиндре, и концентрация водорода внутри него зависят только от координаты r , в силу симметрии.

Граничные условия для нахождения напряженно-деформированного состояния задаются растягивающими одноосными напряжениями σ_0 и свободной от напряжений боковой поверхностью, а для задачи диффузии – концентрацией газового компонента, заданной на боковой поверхности.

Следует отметить, что в уравнении упругости присутствуют слагаемые, зависящие от концентрации, а в уравнении диффузии – коэффициенты, зависящие от деформаций (как в r -, так и в z - направлениях). Таким образом, мы имеем связанную задачу, и эти два уравнения не могут быть решены по отдельности. Краевая задача (как задача упругости, так и уравнение диффузии) решается численно с использованием явной конечно-разностной схемы, которая соот-



ветствует методу конечных объемов. Для того чтобы более детально исследовать поверхностные эффекты, нами была построена сетка со сгущением к поверхности образца (т. е. при координате r , близкой к r_{out}). В схеме вместо дифференциальных уравнений локальных балансов мы рассматривали дискретные варианты соответствующих интегральных уравнений баланса. В узлах сетки задавали смещения и концентрацию, в ячейках сетки – деформации, напряжения и коэффициенты диффузии. Сама схема верифицирована и исследована на сходимость на примере задачи одномерной диффузии в цилиндрической системе координат с постоянным коэффициентом диффузии, в отсутствие напряженно-деформированного состояния.

Экспериментальные данные для расчетов взяты из работы [34] для стали Т24. Параметр α , соответствующий расширению за счет диффузии водорода, выбран так, чтобы все деформации твердого тела оставались в диапазоне линейно-упругой области. Выбранные параметры представлены в таблице. Распределение ловушек и вакансий для диффузионно-подвижного водорода и параметры p и k для модели МакНабба взяты из работ [35, 36]; значения поврежденности, зависящей от координаты и необходимой для вычисления радиальной компоненты тензора, взяты из работы [32].

Таблица

Параметры моделируемого твердого тела и газового компонента

Параметр	Обозначение	Единица измерения	Значение параметра
Коэффициент диффузии	D_0	мм/с ²	$3,5 \cdot 10^{-9}$
Температура	T	К	293
Модуль Юнга	E	ГПа	182
Коэффициент Пуассона	ν	–	0,295
Отношение плотности стали к ее молярной массе	ρ/M	моль/м ³	$1,45 \cdot 10^4$
Внешний радиус цилиндра	r_{out}	мм	1,1
Коэффициент линейного расширения	α	–	0,03

На рис. 2 представлены решения задачи диффузии с учетом диффузии водорода по ловушечным модам. Профиль концентрации, полученный с учетом модели МакНабба (рис. 2, *a*), практически не продвигается в глубь металла со временем, демонстрируя тот самый запирающий эффект и образование приповерхностного слоя, который наблюдался экспериментально. Стоит отметить, однако, что этот результат был получен с использованием феноменологической зависимости N_{trap} от координаты [35], которая была построена исходя из предположений о сильно неравномерном распределении водорода по образцу в результате его транспорта из внешней среды. Варьирование параметра N_{vd} не приводит к существенному изменению профилей концентрации и перераспределению водорода в ходе диффузии.

Учет же диффузии водорода по ловушкам с помощью тензора поврежденности (рис. 2, *b*) приводит к тому, что явный запирающий эффект не создается и со временем градиент концентрации имеет тенденцию к сглаживанию, а сам водород – к продвижению в глубь металлического образца. Видимо, полученный результат связан с независимостью компонент тензора поврежденности от времени и, как следствие, учесть степень заполненности этих ловушек, а также перераспределение водорода из них в межзеренные промежутки (и наоборот) оказывается невозможным. Однако и этот подход остается привлекательным для дальнейших исследований, поскольку значения компонент тензора поврежденности и их зависимость от координаты можно вычислять независимым способом.

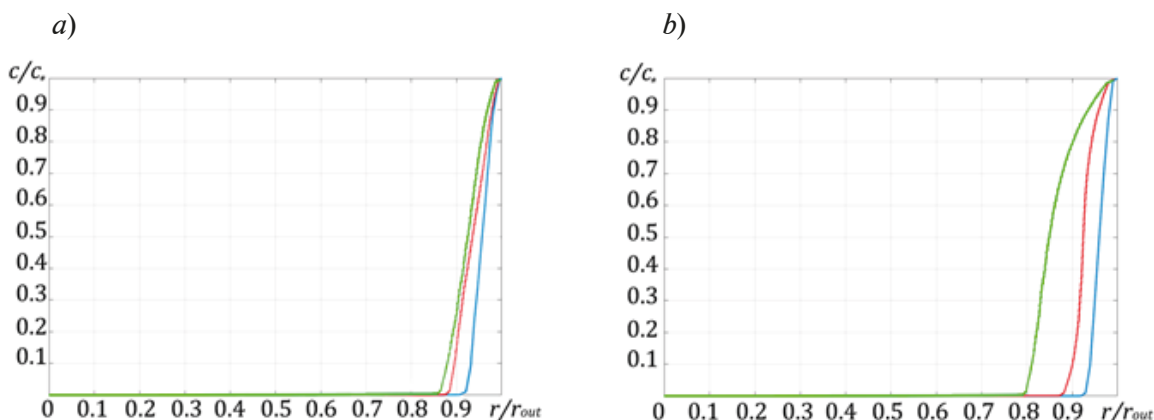


Рис. 2. Зависимости нормализованной концентрации водорода в твердом теле от нормализованного радиуса в различные моменты времени (с шагом 600 мин); расчетные данные получены с использованием ловушечной модели МакНабба, при условии неравномерного распределения ловушек N_{trap} (a), и модифицированной модели, где поток по ловушечным модам учтен с помощью тензора поврежденности (b)

Заключение

В работе теоретически исследована диффузия водорода в твердое тело, находящееся в напряженно-деформированном состоянии, и взаимовлияние между деформациями внутри тела и транспортом водорода из внешней среды, окружающей твердое тело. Для более точного описания экспериментально наблюдаемого приповерхностного слоя с высокой концентрацией водорода, который относительно стабилен во времени и не расширяется в глубь металла вследствие диффузии, предложена модификация ранее используемой модели. В полученное тогда уравнение диффузии, учитывающее влияние напряженно-деформированного состояния на диффузионный процесс, был введен стоковый член, отражающий поток водорода через ловушечные моды, в качестве второго канала диффузии. Эта модификация была проведена двумя способами: с помощью классической модели МакНабба и в рамках концепции поврежденности.

Для модифицированного уравнения диффузии с новым стоковым членом была решена краевая задача, проанализированы результаты и проведено их сравнение. Было установлено, что результаты различаются незначительно, но при использовании модели МакНабба продвижение диффузионного фронта и «размазывание» приповерхностного водородного слоя происходит медленнее, что больше соответствует экспериментальным данным.

Следует отметить, что использование концепции поврежденности позволяет избежать некоторых физических противоречий, которые неизбежно возникают в рамках модели МакНабба. При учете потока водорода по ловушечным модам в рамках концепции поврежденности, эти противоречия снимаются. Но ввиду того, что эта модель не может учитывать заполненность ловушек и не включает механизма перераспределения водорода внутри твердого тела (из ловушечных мод в межзеренные промежутки и наоборот), расчетные результаты менее точно соотносятся с экспериментальными данными. Следовательно, модификация модели не достаточна и нуждается в дальнейшем расширении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cailletet M. L. First report of H embrittlement of metals // Comptes Rendus Chemie. 1864. Vol. 58. No. 23. Pp. 327–328.
2. Хрусталеv Ю. А., Симаков Ю. С., Глазунов М. П., Губин В. В. Образование водорода при сухом трении металлов // Журнал физической химии. 1989. Т. 63. № 5. С. 1355–1357.

3. **Frolova K., Vilchevskaya E., Polyanskiy V., Alekseeva E.** Modelling of a hydrogen saturated layer within the micropolar approach // *New Achievements in Continuum Mechanics and Thermodynamics*. Edited by Abali B., et al. Book Series: *Advanced Structured Materials*. Vol. 108. Springer, Cham, 2019. Pp. 117–128.
4. **Lopez-Suárez A., Valencia C. E., López-Patico J., Vargas M. C., Fuentes B. E.** Improvement of titanium hydrogenation by low energy ion irradiation // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2015. Vol. 40. No. 11. Pp. 4194–4199.
5. **Wu T.-I., Wu J.-Ch.** Effects of cathodic charging and subsequent solution treating parameters on the hydrogen redistribution and surface hardening of Ti–6Al–4V alloy // *Journal of Alloys and Compounds*. 2008. Vol. 466. No. 1–2. Pp. 153–159.
6. **Martinsson Å., Sandström R.** Hydrogen depth profile in phosphorus-doped, oxygen-free copper after cathodic charging // *Journal of Materials Science*. 2012. Vol. 47. No. 19. Pp. 6768–6776.
7. **Arseniev D. G., Belyaev A. K., Polyanskiy A. M., Polyanskiy V. A., Yakovlev Yu. A.** Benchmark study of measurements of hydrogen diffusion in metals // *Dynamical Processes in Generalized Continua and Structures*. Ed. by Altenbach H., et al. Book Series “*Advanced Structured Materials*” Switzerland: Springer, Cham, 2019. Pp. 37–61.
8. **Polyanskiy V. A., Belyaev A. K., Alekseeva E. L., Polyanskiy A. M., Tretyakov D. A., Yakovlev Yu. A.** Phenomenon of skin effect in metals due to hydrogen absorption // *Continuum Mechanics and Thermodynamics*. 2019. Vol. 31. No. 6. Pp. 1961–1975.
9. **Andronov D. Y., Arseniev D. G., Polyanskiy A. M., Polyanskiy V. A., Yakovlev Y. A.** Application of multichannel diffusion model to analysis of hydrogen measurements in solid // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2017. Vol. 42. No. 1. Pp. 699–710.
10. **Sutardja P., Oldham W. G.** Modeling of stress effects in silicon oxidation // *IEEE Transactions on Electron Devices*. 1989. Vol. 36. No. 11. Pp. 2415–2421.
11. **Birnbaum H. K., Sofronis P.** Hydrogen-enhanced localized plasticity – a mechanism for hydrogen-related fracture // *Materials Science and Engineering A*. 1994. Vol. 176. No. 1–2. Pp. 191–202.
12. **Stashchuk M., Dorosh M.** Analytical evaluation of hydrogen induced stress in metal // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2017. Vol. 42. No. 9. Pp. 6394–6400.
13. **Drexler A., Bergmann C., Manke G., Kokotin V., Mraczek K., Pohl M., Ecker W.** On the local evaluation of the hydrogen susceptibility of cold-formed and heat treated advanced high strength steel (AHSS) sheets // *Materials Science & Engineering. A*. 2021. Vol. 800. 7 January. P. 140276.
14. **Larcht'e F. C., Cahn J. L.** The effect of self-stress on diffusion in solids // *Acta Metallurgica*. 1982. Vol. 30. No. 10. Pp. 1835–1845.
15. **Wu Ch. H.** The role of Eshelby stress in composition-generated and stress-assisted diffusion // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2001. Vol. 49. No. 8. Pp. 1771–1794.
16. **Knyazeva A. G.** Cross effects in solid media with diffusion // *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. 2003. Vol. 44. No. 3. Pp. 373–384.
17. **Toribio J., Kharin V., Lorenzo M., Vergara D.** Role of drawing-induced residual stresses and strains in the hydrogen embrittlement susceptibility of prestressing steels // *Corrosion Science*. 2011. Vol. 53. Vol. 10. Pp. 3346–3355.
18. **Hadam U., Zakroczymski T.** Absorption of hydrogen in tensile strained iron and high-carbon steel studied by electrochemical permeation and desorption techniques // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2009. Vol. 34. No. 5. Pp. 2449–2459.
19. **Turnbull A.** Perspectives on hydrogen uptake, diffusion and trapping // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2015. Vol. 40. No. 47. Pp. 16961–16970.
20. **Liu Q., Venezuela J., Zhang M., Zhou Q., Atrens A.** Hydrogen trapping in some advanced high strength steels // *Corrosion Science*. 2016. Vol. 111. October. Pp. 770–785.
21. **McNabb A., Foster P. K.** A new analysis of diffusion of hydrogen in iron and ferritic steels // *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*. 1963. Vol. 227. No. 3. Pp. 618–627.
22. **Oriani R. A.** The diffusion and trapping of hydrogen in steel // *Acta Metallurgica*. 1970. Vol. 18. No. 1. Pp. 147–157.
23. **Oudriss A., Creus J., Bouhattate J., Conforto E., Berziou C., Savall C., Feugas X.** Grain size and grain-boundary effects on diffusion and trapping of hydrogen in pure nickel // *Acta Materialia*. 2012. Vol. 60. No. 19. Pp. 6814–6828.
24. **Takahashi J., Kawakami K., Kobayashi Y.** Origin of hydrogen trapping site in vanadium carbide

precipitation strengthening steel // *Acta Materialia*. 2018. Vol. 153. July. Pp. 193–204.

25. **Depover T., Van den Eeckhout E., Verbeken K.** Hydrogen induced mechanical degradation in tungsten alloyed steels // *Materials Characterization*. 2018. Vol. 136. February. Pp. 84–93.

26. **Zhang Zh., Moore K. L., McMahon G., Morana R., Preuss M.** On the role of precipitates in hydrogen trapping and hydrogen embrittlement of a nickel-based superalloy // *Corrosion Science*. 2019. Vol. 146. January. Pp. 58–69.

27. Физические величины. Справочник. Ред. И. С. Григорьев, Е. З. Мейлихов. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.

28. **Grigoreva P. M., Vilchevskaya E. N., Polyanskiy V. A.** Influence of linear elastic stresses on hydrogen diffusion into metals // *Advances in Hydrogen Embrittlement Study*. Ed. by V. A. Polyanskiy and A. K. Belyaev. Switzerland: Springer, Cham, 2021. Pp. 143–157.

29. **Hu J., Liu J., Lozano-Perez S., Grovenor C. R. M., Christensen M., Wolf W., Wimmer E., Mader E. V.** Hydrogen pickup during oxidation in aqueous environments: The role of nano-pores and nano-pipes in zirconium oxide films // *Acta Materialia*. 2019. Vol. 180. November. Pp. 105–115.

30. **Pressouyre G. M., Bernstein I. M.** An example of the effect of hydrogen trapping on hydrogen embrittlement // *Metallurgical Transactions A*. 1981. Vol. 12. No. 5. Pp. 835–844.

31. **Chen L., Xiong X., Tao X., Su Y., Qiao L.** Effect of dislocation cell walls on hydrogen adsorption, hydrogen trapping and hydrogen embrittlement resistance. // *Corrosion Science*. 2020. Vol. 166. 15 April. P. 108428.

32. **Семенов А. С., Полянский В. А., Штукин Л. В., Третьяков Д. А.** Влияние поврежденности поверхностного слоя на акустическую анизотропию // *Прикладная механика и техническая физика*. 2018. Т. 59. № 6. С. 201–210.

33. **Беляев А. К., Полянский В. А., Третьяков Д. А.** Оценка механических напряжений, пластических деформаций и поврежденности посредством акустической анизотропии // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. 2020. № 4. С. 130–151.

34. **Rhode M., Mente T., Steppan E., Steger J., Kannengiesser T.** Hydrogen trapping in T24 Cr-Mo-V steel weld joints – microstructure effect vs. experimental influence on activation energy for diffusion // *Welding in the World*. 2018. Vol. 62. No. 2. Pp. 277–287.

35. **Taha A., Sofronis P.** A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement // *Engineering Fracture Mechanics*. 2001. Vol. 68. No. 6. Pp. 803–837.

36. **Sofronis P., Lufrano J.** Interaction of local elastoplasticity with hydrogen: embrittlement effects // *Materials Science & Engineering. A*. 1999. Vol. 260. No. 1–2. Pp. 41–47.

REFERENCES

1. **Cailletet M. L.**, First report of H embrittlement of metals, *Compt. Rend.* 58 (23) (1864) 327–328.

2. **Khrustalev Yu. A., Simakov Yu. S., Glazunov M. P., Gubin V. V.**, Obrazovaniye vodoroda pri sukhom trenii metallov [Hydrogen formation at dry friction of the metals] *Zhurnal Fizicheskoy Khimii* [Russian Journal of Physical Chemistry] 63 (5) (1989) 1355–1357 (in Russian).

3. **Frolova K., Vilchevskaya E., Polyanskiy V., Alekseeva E.**, Modelling of a hydrogen saturated layer within the micropolar approach, In Book: “New Achievements in Continuum Mechanics and Thermodynamics”, Edited by Abali B., et al., Book Series: Advanced Structured Materials. Vol. 108. Springer, Cham (2019) 117–128.

4. **Lopez-Suárez A., Valencia C. E., Lyppez-Patico J., et al.**, Improvement of titanium hydrogenation by low energy ion irradiation, *Int. J. Hydrog. Energy*. 40 (11) (2015) 4194–4199.

5. **Wu T.-I., Wu J.-Ch.**, Effects of cathodic charging and subsequent solution treating parameters on the hydrogen redistribution and surface hardening of Ti–6Al–4V alloy, *J. Alloys Compd.* 466 (1–2) (2008) 153–159.

6. **Martinsson Å., Sandström R.**, Hydrogen depth profile in phosphorus-doped, oxygen-free copper after cathodic charging, *J. Mater. Sci.* 47 (19) (2012) 6768–6776.

7. **Arseniev D. G., Belyaev A. K., Polyanskiy A. M., et al.**, Benchmark study of measurements of hydrogen diffusion in metals, In book: “Dynamical Processes in Generalized Continua and Structures”, Ed. by Altenbach H., et al., Book Ser. “Advanced Structured Materials” Springer Cham, Switzerland (2019) 37–61.

8. **Polyanskiy V. A., Belyaev A. K., Alekseeva E. L., et al.**, Phenomenon of skin effect in metals due to hydrogen absorption, *Contin. Mech. Thermodyn.* 31 (6) (2019) 1961–1975.
9. **Andronov D. Y., Arseniev D. G., Polyanskiy A. M., et al.**, Application of multichannel diffusion model to analysis of hydrogen measurements in solid, *Int. J. Hydrog. Energy.* 42 (1) (2017) 699–710.
10. **Sutardja P., Oldham W. G.**, Modeling of stress effects in silicon oxidation, *IEEE Trans. Electron Devices.* 36 (11) (1989) 2415–2421.
11. **Birnbaum H. K., Sofronis P.**, Hydrogen-enhanced localized plasticity – a mechanism for hydrogen-related fracture, *Mater. Sci. Eng. A.* 176 (1–2) (1994) 191–202.
12. **Stashchuk M., Dorosh M.**, Analytical evaluation of hydrogen induced stress in metal, *Int. J. Hydrog. Energy.* 42 (9) (2017) 6394–6400.
13. **Drexler A., Bergmann C., Manke G., et al.**, On the local evaluation of the hydrogen susceptibility of cold-formed and heat treated advanced high strength steel (AHSS) sheets, *Mater. Sci. Eng. A.* 800 (7 January) (2021) 140276.
14. **Larcht'e F. C., Cahn J. L.**, The effect of self-stress on diffusion in solids, *Acta Metallurg.* 30 (10) (1982) 1835–1845.
15. **Wu Ch. H.**, The role of Eshelby stress in composition-generated and stress-assisted diffusion, *J. Mech. Phys. Solids.* 49 (8) (2001) 1771–1794.
16. **Knyazeva A. G.**, Cross effects in solid media with diffusion, *J. Appl. Mech. Techn. Phys.* 44 (3) (2003) 373–384.
17. **Toribio J., Kharin V., Lorenzo M., Vergara D.**, Role of drawing-induced residual stresses and strains in the hydrogen embrittlement susceptibility of prestressing steels, *Corr. Sci.* 53 (10) (2011) 3346–3355.
18. **Hadam U., Zakroczymski T.**, Absorption of hydrogen in tensile strained iron and high-carbon steel studied by electrochemical permeation and desorption techniques, *Int. J. Hydrog. Energy.* 34 (5) (2009) 2449–2459.
19. **Turnbull A.** Perspectives on hydrogen uptake, diffusion and trapping, *Int. J. Hydrog. Energy.* 40 (47) (2015) 16961–16970.
20. **Liu Q., Venezuela J., Zhang M., et al.**, Hydrogen trapping in some advanced high strength steels, *Corr. Sci.* 111 (October) (2016) 770–785.
21. **McNabb A., Foster P. K.**, A new analysis of diffusion of hydrogen in iron and ferritic steels, *Trans. Metallurg. Soc. AIME.* 227 (3) (1963) 618–627.
22. **Oriani R. A.**, The diffusion and trapping of hydrogen in steel, *Acta Metallurg.* 18 (1) (1970) 147–157.
23. **Oudriss A., Creus J., Bouhattate J., et al.**, Grain size and grain-boundary effects on diffusion and trapping of hydrogen in pure nickel, *Acta Mater.* 60 (19) (2012) 6814–6828.
24. **Takahashi J., Kawakami K., Kobayashi Y.**, Origin of hydrogen trapping site in vanadium carbide precipitation strengthening steel, *Acta Mater.* 153 (July) (2018) 193–204.
25. **Depover T., Van den Eeckhout E., Verbeken K.**, Hydrogen induced mechanical degradation in tungsten alloyed steels, *Mater. Charact.* 136 (February) (2018) 84–93.
26. **Zhang Zh., Moore K. L., McMahon G., et al.**, On the role of precipitates in hydrogen trapping and hydrogen embrittlement of a nickel-based superalloy, *Corr. Sci.* 146 (January) (2019) 58–69.
27. *Handbook of physical quantities*, 1st edition, Ed. by Grigoriev I. S., Meilikhov E. Z., CRC Press, Florida, USA, 1997.
28. **Grigoreva P. M., Vilchevskaya E. N., Polyanskiy V. A.**, Influence of linear elastic stresses on hydrogen diffusion into metals, In book: *Advances in Hydrogen Embrittlement Study.*, Ed. by V. A. Polyanskiy and A. K. Belyaev. Springer, Cham, Switzerland (2021) 143–157.
29. **Hu J., Liu J., Lozano-Perez S., et al.**, Hydrogen pickup during oxidation in aqueous environments: The role of nano-pores and nano-pipes in zirconium oxide films, *Acta Mater.* 180 (November) (2019) 105–115.
30. **Pressouyre G. M., Bernstein I. M.**, An example of the effect of hydrogen trapping on hydrogen embrittlement, *Metallurg. Trans. A.* 12 (5) (1981) 835–844.
31. **Chen L., Xiong X., Tao X., et al.**, Effect of dislocation cell walls on hydrogen adsorption, hydrogen trapping and hydrogen embrittlement resistance, *Corr. Sci.* 166 (15 April) (2020) 108428.
32. **Semenov A. S., Polyanskiy V. A., Shtukin L. V., Tretyakov D. A.**, Effect of surface layer damage on acoustic anisotropy, *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* 59 (6) (2018) 1136–1134.
33. **Belyayev A. K., Polyanskiy V. A., Tretyakov D. A.**, Estimating of mechanical stresses, plastic

deformations and damage by means of acoustic anisotropy, PNRPU Mechanics Bulletin. (4) (2020) 130–151 (in Russian).

34. **Rhode M., Mente T., Steppan E., et al.**, Hydrogen trapping in T24 Cr-Mo-V steel weld joints – microstructure effect vs. experimental influence on activation energy for diffusion, Weld. World. 62 (2) (2018) 277–287.

35. **Taha A., Sofronis P.**, A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement, Eng. Fract. Mech. 68 (6) (2001) 803–837.

36. **Sofronis P., Lufrano J.**, Interaction of local elastoplasticity with hydrogen: embrittlement effects, Mater. Sci. Eng. A. 260 (1–2) (1999) 41–47.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ГРИГОРЬЕВА Полина Михайловна – стажер-исследователь Института проблем машиностроения РАН, Санкт-Петербург, Россия.

199178, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В.О., 61.

gpm@ipme.ru

ORCID: 0000-0001-9846-7888

THE AUTHOR

GRIGOREVA Polina M.

Institute for Problems of Mechanical Engineering RAS

61 Bolshoi Ave., V. Isl., St. Petersburg, 199178, Russia

gpm@ipme.ru

ORCID: 0000-0001-9846-7888

Статья поступила в редакцию 01.04.2022. Одобрена после рецензирования 24.05.2022. Принята 24.05.2022.

Received 01.04.2022. Approved after reviewing 24.05.2022. Accepted 24.05.2022.