

УДК 539.3:620.191.22

ВПЛИВ ЗОВНІШНІХ НАВАНТАЖЕНЬ НА ПЕРЕРОЗПОДІЛ ВОДНЮ У МЕТАЛІ БІЛЯ КОНЦЕНТРАТОРІВ НАПРУЖЕНЬ

М. Г. СТАЦУК

Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка НАН України, Львів

Для вивчення впливу пружних деформацій від дії зовнішніх зусиль та внутрішніх водневих напружень у металі на перерозподіл водню біля концентраторів напружень записано систему диференціальних рівнянь градієнтного типу. На основі розв'язків цієї системи запропоновано загальний алгоритм та аналітичні співвідношення розрахунку накопичення водню біля технологічних та конструктивних дефектів. Встановлено перерозподіл водню навколо колового концентратора напружень, тріщини та жорсткого включення за дії зовнішніх навантажень у наводнених пружних тілах.

Ключові слова: напружено-деформований стан, водень, перерозподіл водню, концентрація, концентраційне рівняння дифузії, гідростатичні напруження, коловий отвір, тріщина, жорстке включення.

Наводнені матеріали, зокрема метали, мають специфічну поведінку під впливом зовнішніх силових навантажень. Підтверджують це нещодавні дослідження [1–4]. Накопичуючись у таких матеріалах, водень призводить до цілком нових, часто мало обґрунтованих, ефектів. Водночас будь-які найдосконаліші матеріали містять різноманітні дефекти типу включень, порожнин, раковин, щілин, тріщин тощо, які під дією зовнішніх навантажень зумовлюють значний перерозподіл концентрації водню, наприклад, рівномірно розподіленого у матеріалі або деталі, виготовленій із нього. Отже, аналізуючи вплив водню на поведінку металу під час дії зовнішніх навантажень, необхідно оцінити перерозподіл його концентрації в полі механічних напружень, особливо біля концентраторів напружень типу включень, тріщин, раковин, отворів тощо. Для цього потрібні відповідні математичні моделі.

Формулювання задачі та основні рівняння. Проаналізуємо напружено-деформований стан та залежну від нього концентрацію водню біля таких концентраторів напружень (рис. 1) як круговий виріз у пружному тілі, тріщина Гріффітса і, врешті-решт, жорстке включення. Встановимо перерозподіл водню навколо цих дефектів за дії зовнішніх зусиль.

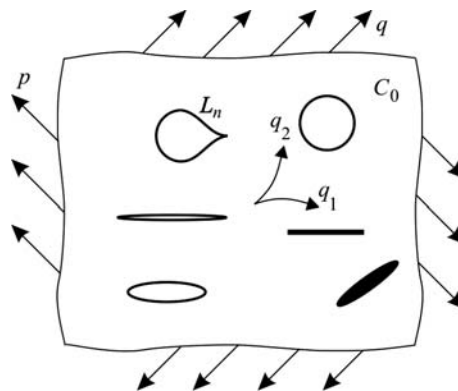


Рис. 1. Концентратори напружень у наводненому пружному тілі.

Fig. 1. Stress concentrators in the hydrogenated elastic body.

Розглянемо пружно-деформівне металеве тіло, наводнене до деякої концентрації водню C_0 та послаблене концентраторами напружень за дії зовнішніх зусиль p, q . Вважаємо, що у тілі присутні внутрішні напруження, зініційовані воднем, і взаємодія між атомами водню незначна. Слід встановити перерозподіл вмісту водню навколо концентраторів напружень під дією зовнішніх зусиль з урахуванням обумовлених ним напружень у металі.

Вихідні рівняння та їх аналіз. Для оцінки впливу зовнішніх навантажень та внутрішніх водневих напружень на перерозподіл концентрації водню використаємо такі рівняння [5–7]:

$$\begin{cases} \rho \ddot{u} - \frac{E}{2(1+\nu)} \Delta \bar{u} - \frac{E}{2(1+\nu)(1-2\nu)} \text{grad div } \bar{u} = -\frac{\alpha_c E}{3(1-2\nu)} \text{grad}(C - C_0), \\ \frac{\partial C}{\partial t} = \text{div} \left(D \text{grad } C - \frac{DV_H}{RT} C \text{grad } \sigma^p - \frac{DV_H}{RT} C \text{grad } \sigma^H \right), \end{cases} \quad (1)$$

де ρ – густина; E – модуль Юнга; ν – коефіцієнт Пуассона матеріалу; \bar{u} – вектор переміщень; α_c – коефіцієнт водневого концентраційного розширення металу [4, 5]; C_0 та C – відповідно початкова та розподілена концентрації атомів водню у тілі; D – коефіцієнт дифузії; V_H – парціальний молярний об'єм атома водню в металі [8]; R – універсальна газова стала; T – абсолютна температура; Δ – оператор Лапласа. Права частина першого рівняння задає об'ємну силу $\vec{F}_V(\rho X, \rho Y, \rho Z) = -(\alpha_c E / 3(1-2\nu)) \text{grad}(C - C_0)$, яка викликає внутрішні напруження, обумовлені воднем, причому коефіцієнт α_c [4, 5, 9] виражає прямо пропорційну залежність гідростатичного напруження від концентрації водню у металі; σ^p, σ^H – гідростатичні напруження від зовнішніх навантажень і спричинені воднем. За умови $\partial^2 \bar{u} / \partial t^2 \equiv 0$ та з урахуванням того, що повороти елементарних об'ємів металу під час його наводнювання незначні, з першого рівняння одержуємо:

$$\sigma^H = -\frac{2E\alpha_c}{9(1-\nu)}(C - C_0). \quad (2)$$

Підставивши останній вираз у друге рівняння системи (1), отримаємо концентраційне рівняння

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div} \left(D \text{grad } C - \frac{DV_H}{RT} C \text{grad } \sigma^p + \frac{2\alpha_c V_H E D}{9(1-\nu)RT} C \text{grad } C \right). \quad (3)$$

Потік водню в матеріалі

$$\vec{J}_C = -D \text{grad } C + \frac{DV_H}{RT} C \text{grad } \sigma^p - \frac{2\alpha_c V_H E D}{9(1-\nu)RT} C \text{grad } C. \quad (4)$$

Щоб врахувати вплив зовнішніх навантажень на перерозподіл водню у металі, побудуємо розв'язок рівняння (3) для стаціонарного випадку:

$$\partial C / \partial t = 0. \quad (5)$$

Задаємо такі крайові умови. Вважаємо, що концентрація водню для безмежно віддалених точок (q_1, q_2) стала

$$C(q_1, q_2) = C_0, \quad (6)$$

а на контурах дефектів L_n його потік відсутній, тобто нормальна компонента

$$J_C^n(\xi_1, \xi_2) = 0, \quad \xi_1, \xi_2 \in L_n. \quad (7)$$

Виходячи зі співвідношень (3) та (4), з рівності (7) та з умови (5), отримаємо:

$$\bar{J}_C(q_1, q_2) = 0. \quad (8)$$

Тепер зі співвідношення (4) маємо рівняння

$$\text{grad } C - \frac{V_H}{RT} C \text{ grad } \sigma^p - \frac{2\alpha_c V_H E}{9(1-\nu)RT} C \text{ grad } C = 0, \quad (9)$$

яке у криволінійній системі координат перепишемо так:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{H_1} \frac{\partial C}{\partial q_1} \bar{e}_1 + \frac{1}{H_2} \frac{\partial C}{\partial q_2} \bar{e}_2 - \frac{V_H}{RT} C \left(\frac{1}{H_1} \frac{\partial \sigma^p}{\partial q_1} \bar{e}_1 + \frac{1}{H_2} \frac{\partial \sigma^p}{\partial q_2} \bar{e}_2 \right) + \\ & + \frac{2\alpha_c V_H E}{9(1-\nu)RT} C \left(\frac{1}{H_1} \frac{\partial C}{\partial q_1} \bar{e}_1 + \frac{1}{H_2} \frac{\partial C}{\partial q_2} \bar{e}_2 \right) = \bar{0}, \end{aligned}$$

де H_1, H_2 – коефіцієнти Ляме [10]; \bar{e}_1, \bar{e}_2 – базисні орти. Відповідно до базису \bar{e}_i записане вище векторне рівняння для $i = 1, 2$ набуває вигляду двох скалярних рівнянь

$$\frac{1}{H_i} \left(\frac{\partial C(q_1, q_2)}{\partial q_i} - \frac{V_H}{RT} C(q_1, q_2) \frac{\partial \sigma^p(q_1, q_2)}{\partial q_i} + \frac{2\alpha_c V_H E}{9(1-\nu)RT} C(q_1, q_2) \frac{\partial C(q_1, q_2)}{\partial q_i} \right) = 0,$$

які суттєво різняться для конкретних систем координат. Останні два рівняння запишемо у вигляді

$$\frac{\partial}{\partial q_i} \left(\ln C(q_1, q_2) + \frac{2\alpha_c V_H E}{9(1-\nu)RT} C(q_1, q_2) - \frac{V_H}{RT} \sigma^p(q_1, q_2) \right) = 0 \quad (i = 1, 2).$$

Отже, перерозподілена концентрація водню повинна задовольняти рівняння

$$\ln C(q_1, q_2) + \frac{2\alpha_c V_H E}{9(1-\nu)RT} C(q_1, q_2) - \frac{V_H}{RT} \sigma^p(q_1, q_2) = \text{const}. \quad (10)$$

Значення const у співвідношенні (10) знаходимо з умови (6). Для цього точку площини (q_1, q_2) спрямовуємо до безмежності, звідки

$$\text{const} = \ln C_0 + C_0 \frac{2\alpha_c V_H E}{9(1-\nu)RT} - \frac{V_H}{RT} \sigma_0^p, \quad (11)$$

де σ_0^p – гідростатичні напруження в нескінченно віддалених точках тіла.

Далі, підставляючи значення константи (11) у вираз (10), одержимо трансцендентне рівняння для відшукування перерозподіленої концентрації $C(q_1, q_2)$:

$$\ln \frac{C(q_1, q_2)}{C_0} + C_0 \frac{2\alpha_c V_H E}{9(1-\nu)RT} \left(\frac{C(q_1, q_2)}{C_0} - 1 \right) - \frac{V_H}{RT} (\sigma^p(q_1, q_2) - \sigma_0^p) = 0. \quad (12)$$

Розв'язок трансцендентного рівняння такий:

$$\begin{aligned} C(q_1, q_2) &= C_0 \exp \left[k(\sigma^p(q_1, q_2) - \sigma_0^p) + C_0 b \right] \times \\ &\times \exp \left[-\text{Lambert } W \left\{ C_0 b \exp \left(k(\sigma^p(q_1, q_2) - \sigma_0^p) + C_0 b \right) \right\} \right], \end{aligned} \quad (13)$$

де $k = \frac{V_H}{RT}$; $b = \frac{2\alpha_c V_H E}{9(1-\nu)RT}$. Тут Lambert $W(x)$ – функція Ламберта, яку визначають з розв'язку рівняння [11]

$$x = \text{Lambert } W(x) \times e^{\text{Lambert } W(x)},$$

і, наближено, – за рекурентним співвідношенням

$$w_{j+1} = w_j - \frac{w_j e^{w_j} - x}{e^{w_j} (w_j + 1) - \frac{(w_j + 2)(w_j e^{w_j} - x)}{2w_j + 2}}. \quad (14)$$

Такий розв'язок придатний для оцінки перерозподілу концентрації водню навколо кругового, а також тріщиноподібних дефектів.

Приклади розрахунку перерозподілів вмісту водню навколо типових концентраторів напружень. Розглянемо конкретні варіанти розрахунку накопичення водню навколо концентраторів напружень та в околі тріщиноподібних дефектів. Обчислювали при $T = 300$ К, $E = 2 \cdot 10^5$ МПа, $\nu = 0,3$, $\alpha_c = 5,01 \cdot 10^{-6}$ м³/mol, $V_H = 1,96 \cdot 10^{-6}$ м³/mol.

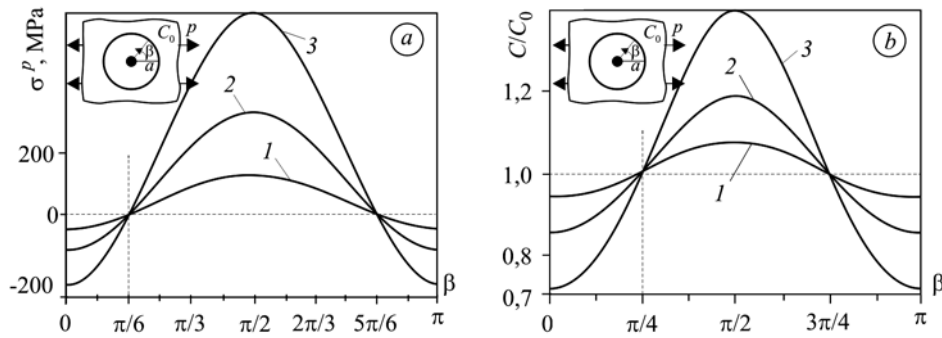


Рис. 2. Розподіл гідростатичних напружень (а) та перерозподіл відносної концентрації водню C/C_0 (b) на контурі колового вирізу: 1 – $p = 100$ МПа; 2 – 250; 3 – 500.

Fig. 2. Distribution of hydrostatic stresses (a) and redistribution of relative hydrogen concentration, C/C_0 , (b) on the contour of a circular cut: 1 – $p = 100$ МПа; 2 – 250; 3 – 500.

1. Коловий отвір. Для колового отвору радіуса a у безмежному плоскодеформованому тілі, підданому розтягальним зусиллям p , гідростатичні напруження [12] в полярних координатах (r, β)

$$\sigma^p = -\frac{(1+\nu)p}{3} \left(\frac{2a^2}{r^2} \cos 2\beta - 1 \right).$$

Тоді згідно з формулою (13)

$$C(r, \beta) = C_0 \exp \left(-k \frac{2(1+\nu)a^2 p}{3r^2} \cos 2\beta + C_0 b \right) \times \\ \times \exp \left[-\text{Lambert W} \left\{ C_0 b \exp \left(-k \frac{2(1+\nu)a^2 p}{3r^2} \cos 2\beta + C_0 b \right) \right\} \right].$$

Отже, найбільша концентрація водню буде у зоні розтягальних напружень (рис. 2), стискальні ж витискають його з металу. Концентрація водню незмінна, якщо кут $\beta = \pi/4 + k\pi/2$, де k набуває цілі значення, чого не зафіксовано для гідростатичних напружень.

Встановлено (рис. 3), що розтягальні напруження збільшують відносний перерозподіл вмісту водню, а стискальні, навпаки, зменшують.

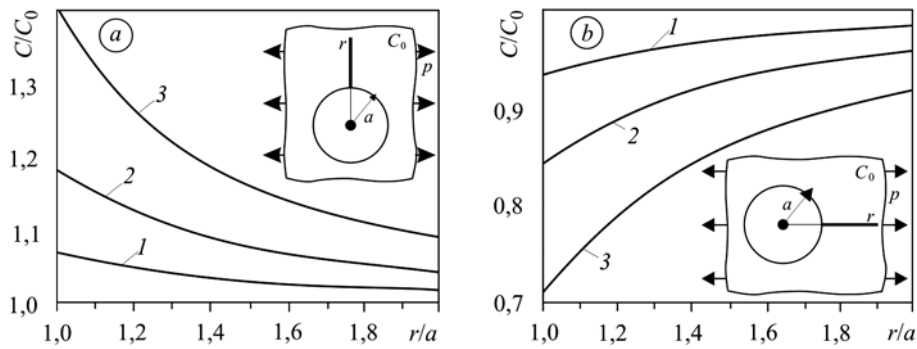


Рис. 3. Перерозподіл відносної концентрації водню C/C_0 у радіальному напрямку, якщо кут $\beta = \pi/2$ (а) та 0 (б): 1 – $p = 100$ МПа; 2 – 250; 3 – 500.

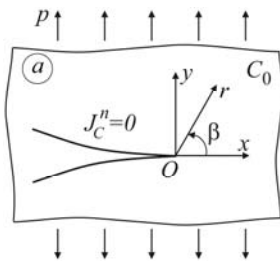
Fig. 3. Redistribution of relative hydrogen concentration, C/C_0 , in a radial direction at $\beta = \pi/2$ (a) and $\beta = 0$ (b): 1 – $p = 100$ МПа; 2 – 250; 3 – 500.

2. Тріщина Гріффітса. Тоді гідростатичні напруження [13, 14]

$$\sigma^p = \frac{2(1+\nu)K_I}{3\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\beta}{2}, \quad (15)$$

а розподіл концентрації водню в околі вершини тріщини

$$C(r, \beta) = C_0 \exp \left(k \frac{2(1+\nu)K_I}{3\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\beta}{2} + C_0 b \right) \times \exp \left[-\text{Lambert W} \left\{ C_0 b \exp \left(k \frac{2(1+\nu)K_I}{3\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\beta}{2} + C_0 b \right) \right\} \right]. \quad (16)$$



(b)

	893	1013	1075	1046	940	834	740	662	597	542
386	732	1164	1420	1454	1206	1019	873	761	674	604
144	252	1652	2662	1702	1305	1058	892	772	679	607
144	252	1652	2662	1702	1305	1058	892	772	679	607
732	1164	1420	1454	1206	1019	873	761	674	604	546
386	732	1164	1420	1454	1206	1019	873	761	674	604
	893	1013	1075	1046	940	834	740	662	597	542

(c)

	2,00	2,20	2,30	2,25	2,07	1,90	1,76	1,66	1,57	1,50
1,33	1,75	2,47	3,04	3,12	2,56	2,20	1,96	1,79	1,67	1,58
1,09	1,19	3,66	8,21	3,81	2,77	2,27	2,00	1,81	1,68	1,58
1,09	1,19	3,66	8,21	3,81	2,77	2,27	2,00	1,81	1,68	1,58
1,33	1,75	2,47	3,04	3,12	2,56	2,20	1,96	1,79	1,67	1,58
	2,00	2,20	2,30	2,25	2,07	1,90	1,76	1,66	1,57	1,50

Рис. 4. Схема навантаження (а), значення гідростатичних напружень (б) і розподіл відносної концентрації водню C/C_0 (с) в області вершини тріщини, обмеженій прямокутником $0,01l \times 0,004l$ ($2l = 0,01$ м – довжина тріщини; $p = 100$ МПа).

Fig. 4. Loading chart (a), value of hydrostatical stresses (b) and distribution of relative hydrogen concentration, C/C_0 , (c) in the area limited by the rectangle $0.01l \times 0.004l$ ($2l = 0.01$ m – crack length; $p = 100$ МПа).

За формулами (15), (16) розраховували відносну концентрацію водню C/C_0 . Одержали відповідні значення гідростатичних напружень та концентрації водню навколо такого дефекту й методом скінченних елементів [15] (рис. 4), а також порів-

няли зміну їх значень на продовженні тріщини, знайдених за формулами (15), (16), і розрахованих за методом скінченних елементів. Виявили їх несуттєве відхилення.

Зміну відносних гідростатичних напружень та відносної концентрації водню на продовженні тріщини ілюструє рис. 5. Як бачимо, на відстанях, що перевищують десятю частку півдовжини тріщини, концентрація водню урівноважується, причому зміна гідростатичних напружень повільніша. Водночас, їх зміна на продовженні тріщини повністю контролює відносну концентрацію водню C/C_0 .

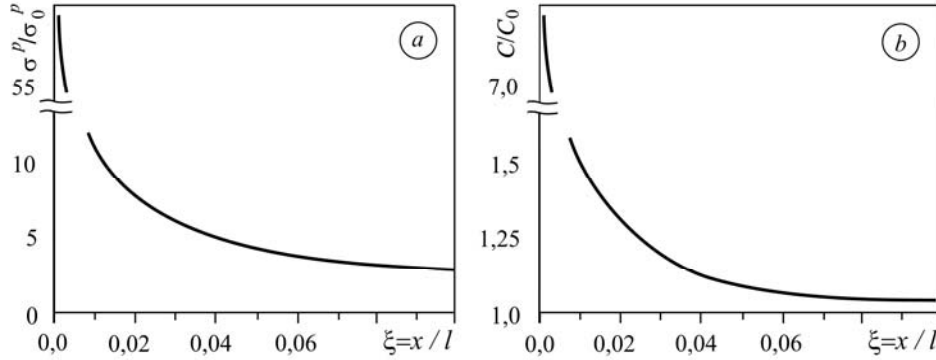


Рис. 5. Зміна відносних гідростатичних напружень σ^p / σ_0^p (a) та концентрації водню C/C_0 (b) на продовженні тріщини.

Fig. 5. Change of relative hydrostatical stresses, σ^p / σ_0^p , (a) and hydrogen concentration, C/C_0 , (b) on the crack extension.

3. Жорстке включення. Тут комплексний потенціал

$$\Phi(z) = \frac{\chi\Gamma m - \bar{\Gamma}m - \bar{\Gamma}'}{4\chi m} \frac{z}{\sqrt{z^2 - 4R^2m}} + \frac{\chi\Gamma m + \bar{\Gamma}m + \bar{\Gamma}'}{2\chi m},$$

де $R = (a + b)/2$; $m = (a - b)/(a + b)$; $\Gamma = \bar{\Gamma} = p/4$; $\bar{\Gamma}' = p/2$; $\chi = 3 - 4\nu$ – для плоскої деформації [13].

Розраховано (рис. 6) перерозподіл відносної концентрації водню C/C_0 на продовженні жорсткого включення для $b/a = 1/4$; $1/7$; $1/10$ при $p = 100$ МПа. Як бачимо, жорстке включення відштовхує водень, бо $C/C_0 < 1$, причому перерозподіл його концентрації зникає на відстані, рівній четверті великої півосі еліптичного жорсткого включення.

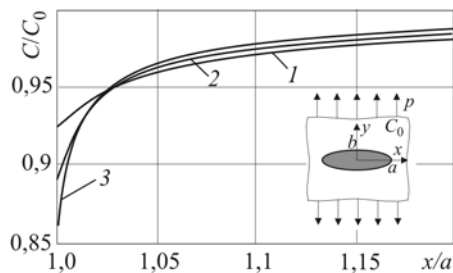


Рис. 6. Перерозподіл відносної концентрації водню C/C_0 на продовженні жорсткого включення: 1 – $a/b = 1/4$; 2 – $1/7$; 3 – $1/10$.

Fig. 6. Redistribution of relative hydrogen concentration, C/C_0 , on a rigid inclusion extension: 1 – $a/b = 1/4$; 2 – $1/7$; 3 – $1/10$.

Зауважимо, що для дефектів у металі типу епітрохоїди, епіциклоїди, гіпоциклоїди та інших канонічних форм [13] також можна подати відповідні розв'язки задач накопичення водню.

ВИСНОВКИ

Запропоновано аналітико-числовий алгоритм розрахунку перерозподілу вмісту водню навколо концентраторів напружень за дії зовнішніх механічних зу-

силь, прикладених до металевих тіл. Враховано зворотню дію водню на ініційовані ним напруження в металі. На цій основі встановлено розподіл вмісту водню навколо кругового концентратора напружень, тріщини, а також жорсткого включення; показано, що розтягальні напруження навколо колового дефекту призводять до зростання концентрації водню, яка майже вдвічі перевищує таку ж у зоні стискальних напружень; розрахунки порівняно з результатами, одержаними за методом скінченних елементів.

РЕЗЮМЕ. Для изучения влияния упругих деформаций при воздействии внешних усилий и внутренних напряжений в металле на перераспределение водорода возле концентраторов напряжений записана система дифференциальных уравнений градиентного типа. На основании ее решений предложены общий алгоритм и аналитические соотношения расчета концентрации водорода возле дефектов технологического и конструкционного характера. Определено перераспределение содержания водорода вокруг кругового концентратора напряжений, трещины и жесткого включения при действии внешних нагрузок в наводороженных упругих телах.

SUMMARY. To study the influence of elastic deformations under action of external forces and internal hydrogen stresses in a metal on the redistribution of hydrogen at the stress concentrators, the system of differential equations of a gradient type is written. On the basis of this system the solution to a general algorithm and analytical correlations of the calculation of hydrogen concentration at the defects of technological and structural character are proposed. The redistribution of hydrogen content around the circular stress concentrator, a crack and rigid inclusion under the action of the external loading in the hydrogenated elastic bodies is determined.

1. *Взаимодействие* водорода с металлами / В. Н. Агеев, И. Н. Бекман, О. П. Бурмистров и др. – М.: Наука, 1987. – 296 с.
2. *Стивак Л. В.* Синергетические эффекты деформационного оклика в термодинамических открытых системах металл–водород // *Успехи физ. наук.* – 2009. – **178**. – С. 897–922.
3. *Андрейків О. С., Гембара О. В.* Механіка руйнування та довговічність металевих матеріалів у воденьвмісних середовищах. – К.: Наук. думка, 2008. – 344 с.
4. *Водородные* концентрационные напряжения: природа, экспериментальные проявления, значимость для техники / В. А. Гольцов, Ж. Л. Глухова, Е. Н. Любименко, Т. А. Щеголева // *Наук. пр. ДонНТУ. Металургія.* – 2009. – Вип. 11 (159) – С. 165–173.
5. *Стацук М. Г.* Взаємовплив напружено-деформованого стану і концентрації водню в системі “метал–водень” // *Фіз.-хім. механіка матеріалів.* – 2011. – **47**, № 4. – С. 71–77.
6. *Стацук М. Г., Дорош М. І.* Визначення напружено-деформованого стану тіла, обумовленого концентрацією водню // *Механіка руйнування матеріалів і міцність конструкцій* / За заг. ред. В. В. Панасюка. – Львів: Фіз.-мех. ін-т ім. Г. В. Карпенка НАН України, 2009. – С. 689–694.
7. *Стацук М. Г., Дорош М. І.* Розрахунок концентрації водню та викликаних ним напружень у металевій смузі та пустотілому циліндрі // *Пр. Міжнар. наук.-техн. конф. “Теорія та практика раціонального проектування, виготовлення і експлуатації машинобудівних конструкцій”.* – Львів, 2010. – С. 93–94.
8. *Колачев Б. А.* Водородная хрупкость металлов. – М.: Металлургия, 1985. – 217 с.
9. *Study of correlation hydrogen – induced stress and hydrogen embrittlement* / T. Zhang, W. Y. Chu, K. W. Gao, L. J. Qiao // *Mater. Scie. and Engng.* – 2003. – **A 347**. – P. 291–299.
10. *Мартинсон Л. К., Малов Ю. И.* Дифференциальные уравнения математической физики. – М.: Изд. МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2002. – 368 с.
11. *Valluri S. R., Jeffrey D. J., and Corless R. M.* Some applications of the Lambert W function to physics // *Canadian J. Physics.* – 2000. – **78**. – P. 823–831.
12. *Демидов С. П.* Теория упругости. – М.: Высш. шк., 1979. – 432 с.
13. *Мухелишвили Н. И.* Некоторые основные задачи математической теории упругости. – М.: Наука, 1966. – 707 с.
14. *Стацук М. Г.* Задачи механики упругих тел с трещиноподобными дефектами. – К.: Наук. думка, 1993. – 359 с.
15. *Зенкевич О.* Метод конечных элементов в технике. – М.: Мир, 1975. – 543 с.

Одержано 25.07.2011