



ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА

№ 3, 2020

PNRPU MECHANICS BULLETIN

<https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index>



DOI: 10.15593/perm.mech/2020.3.13

УДК 539.3:539.422.22

МОДЕЛИ ВЛИЯНИЯ ВОДОРОДА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

Ю.А. Яковлев, В.А. Полянский, Ю.С. Седова, А.К. Беляев

Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

О СТАТЬЕ

Получена: 09 июня 2020 г.
Принята: 31 августа 2020 г.
Опубликована: 09 ноября 2020 г.

Ключевые слова:

водородная хрупкость, декогезия, локализованная пластичность, би-континуальная сплошная среда, транспорт водорода, разрушение, малый параметр.

АННОТАЦИЯ

В статье представлен обзор основных моделей механики, которые используются для описания эффектов водородной хрупкости, водородного растрескивания и индуцированного водородом разрушения. Основное внимание уделено моделям, которые применяются для расчета напряженно-деформированного состояния металлических образцов, деталей и узлов машин и имеют потенциал для конкретных инженерных приложений.

С механической точки зрения влияние водорода на свойства материалов представляет собой классическую задачу о влиянии малого параметра, так как критические для прочности и пластичности металлов концентрации водорода, как правило, невелики. Подавляющая часть моделей сводит это влияние к перераспределению водорода внутри объема металла и локализации его концентраций в критических зонах разрушения.

Авторами выделено четыре основных подхода, которые позволяют учесть влияние малого параметра: усиленная водородом декогезия (HEDE), усиленная водородом локализованная пластичность (HELP), учет дополнительного внутреннего давления, которое создает растворенный в металлах водород, и би-континуальный подход, который учитывает внутреннее давление водорода и ослабление материала в рамках единой модели сплошной среды.

Установлены связи между основными подходами. Проведена систематизация публикаций, выделены сходства и различия в описании внутреннего переноса и накопления водорода в металлах. Указано, что самое большое количество публикаций посвящено HEDE-модели, вместе с тем нет опубликованных данных о применении этой модели к реальным задачам инженерной практики, рассматривались только задачи о моделировании результатов механических испытаний цилиндрических и призматических образцов, с этой точки зрения другие, менее популярные подходы имеют больше практических применений.

Основным нерешенным вопросом при верификации всех моделей остается локальная концентрация водорода, которая является источником преждевременного разрушения металлов под нагрузкой. Все методы измерения локальных концентраций являются косвенными. Даже в случае применения тонких физических методов требуется механическая подготовка поверхности, во время которой сохранить естественную, исходную концентрацию водорода невозможно.

Отсутствие достоверных данных о распределении концентрации водорода не дает возможности однозначно определить все параметры моделей, что, с одной стороны, позволяет осуществить подгонку к любым экспериментальным данным, с другой – снижает прогностическую инженерную ценность всех моделей, так как при инженерном расчете на прочность недостаточно только качественного соответствия.

© ПНИПУ

© Яковлев Юрий Алексеевич – к.ф.-м.н., с.н.с., e-mail: yura.yakovlev@gmail.com, ID: 0000-0002-5041-0441.

Полянский Владимир Анатольевич – д.т.н., дир., e-mail: vapol@mail.ru, ID: 0000-0002-1199-1028.

Седова Юлия Сергеевна – стажер-исследователь, e-mail: julka0309@mail.ru, ID: 0000-0003-4397-6073.

Беляев Александр Константинович – д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН, г.н.с., e-mail: vice.ipme@gmail.com, ID: 0000-0002-5934-8138.

Yury A. Yakovlev – CSc in Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, e-mail: yura.yakovlev@gmail.com, ID: 0000-0002-5041-0441.

Vladimir A. Polyanskiy – Doctor of Technical Sciences, Director, ID: 0000-0002-1199-1028.

Yulia S. Sedova – Intern Researcher, e-mail: julka0309@mail.ru, ID: 0000-0003-4397-6073.

Alexander K. Belyaev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Corresponding Member of Russian Academy of Sciences, Chief Researcher, e-mail: vice.ipme@gmail.com, ID: 0000-0002-5934-8138.



Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

MODELS OF HYDROGEN INFLUENCE ON THE MECHANICAL PROPERTIES OF METALS AND ALLOYS

Yu.A. Yakovlev, V.A. Polyanskiy, Yu.S. Sedova, A.K. Belyaev

Institute for Problems in Mechanical Engineering of Russian Academy of Sciences,
St. Petersburg, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 09 June 2020
Accepted: 31 August 2020
Published: 09 November 2020

Keywords:

hydrogen embrittlement, decohesion, localized plasticity, bi-continuum medium, hydrogen transport, destruction, small parameter.

ABSTRACT

The article yields a survey of the key models of mechanics that are used to describe the effects of hydrogen embrittlement, hydrogen cracking, and hydrogen-induced destruction. The main attention is paid to models which are used to calculate the stress-strain state of metal samples, parts and machine components and have the potential for specific engineering applications.

From a mechanical perspective, the effect of hydrogen on the material properties is a classic problem of the influence of a small parameter, since the hydrogen concentrations critical for the strength and ductility of metals are usually small. In the vast majority of models this effect is reduced to the hydrogen redistribution within the material volume and localization of concentrations in the critical fracture zones.

The authors identified four main approaches that allow one to take into account the influence of a small parameter: (i) hydrogen-enhanced decohesion (HEDE), (ii) hydrogen-enhanced localized plasticity (HELP), (iii) account for additional internal pressure due to the hydrogen dissolved in metals, and (iv) bi-continuum approach that takes into account the internal hydrogen pressure and weakening of material in the framework of a special model of a solid.

The links between the main approaches are established. Systematization of publications was carried out, similarities and differences in the description of the internal transport and accumulation of hydrogen in metals are highlighted. It is indicated that the predominant number of publications is devoted to the HEDE model, but so far there is no published data on the application of this model to real problems of engineering practice; only modeling the results of mechanical tests of cylindrical and prismatic samples were considered. In fact, other less popular approaches have more practical applications.

The main unresolved issue in the verification of all models is the local concentration of hydrogen, which is a source of premature destruction of metals under load. All the methods for measuring local concentrations are indirect. Even in the case of applying sophisticated physical methods, mechanical surface preparation is required, which destroys the initial natural concentration of hydrogen.

The lack of reliable data on the distribution of hydrogen concentration excludes the possibility of unambiguously determination of all the model parameters. On the one hand, it allows fitting to any experimental data, and on the other hand, it reduces the predictive engineering value of all models, since a qualitative fitting is not sufficient for engineering strength analysis.

© PNRPU

Введение

Первым, кто обратил внимание на проблему водорода в металлах, был М. Фреми. В 1861 г. он опубликовал работу, посвященную влиянию водорода на свойства металлов и сплавов [1]. Изучая окклюзию водорода и других газов горячим металлом, он установил, что сталь становится сталью, только когда из нее удалят весь водород. Несколько позже Джонсон [2] установил, что насыщение водородом, которое происходит при обработке металлов кислотами, приводит к сильному снижению пластичности и ударной вязкости сталей. Несмотря на категоричность этих научных выводов, вплоть до начала XX в. разные способы улучшения свойств стали с помощью водорода были предметом изобретений [3–6]. А водородное растрескивание, происходящее вследствие насыщения металла газообразным водородом, было впервые изучено в палладию, который до сих пор, уже 150 лет, является самым популярным модельным металлом для изучения так называемой системы металл – водород [7, 8].

Только через 45 лет после опубликования результатов М. Фреми инженеры окончательно осознали опасность водорода для металлов. Вероятно, первыми инженерными проблемами были возникающие из-за водорода сквозные трещины в стенках оборудования для производства аммиака, растрескивание трубных досок котлов [8] и образование флокенов (*flakes or hair-cracks*) в прокате [9–11].

Необходимо отметить, что, как и полагается, инженерные проблемы были решены технологическим путем. Причиной большинства металлургических проблем типа образования флокенов и водородного растрескивания отливок была вода, которая попадала в металл при плавке, и тогда за влажностью шихты стали пристально следить [10]. Для аммиачного производства и котлов разработали специальные стали, стойкие к водородному растрескиванию. Водород, который накапливался в результате травления металла или при нанесении гальванических покрытий, удаляли методом прогрева металлических деталей в вакууме, в инертных газах или в сухом воздухе. Концентрацию или содержание водо-

рода в металле стали контролировать при производстве [12–14]. Все эти меры позволили практически полностью устранить проблемы, связанные с присутствием в материале водорода, в технике того времени. Даже сейчас от многих инженеров можно услышать, что данный вопрос в металлургии уже давно решен.

Внутренняя логика развития науки толкала исследования вперед, и только на тему взаимодействия водорода с палладием опубликованы тысячи научных работ. Одновременно оказалось, что окончательного решения проблемы водородного охрупчивания металлов и сплавов не существует. Поэтому инженерная практика все время сталкивалась с проблемами водородной хрупкости, водородного растрескивания, индуцированного водородом разрушения. Объясняется это тем, что водород есть везде – либо в виде химических соединений, самым распространенным из которых является вода, либо в газообразном состоянии.

В отличие от других компонентов металлов, предельно допустимая концентрация которых лимитируется минимум сотыми и тысячными долями процента, водород начинает оказывать влияние на свойства некоторых металлов при массовой концентрации порядка сотых долей процента. Такие концентрации находятся за пределами чувствительности большинства аналитических методов, используемых для определения содержания всех других компонентов сплавов.

Необходимо учитывать, что чувствительность различных характеристик сплавов к малым концентрациям водорода увеличивается по мере развития технологий. Для бессемеровских сталей предельно допустимая массовая концентрация водорода составляет порядка 0,0004 %, но для современных ультравысокопрочных сталей она примерно в 30 раз меньше, а для некоторых современных алюминиевых сплавов в 100 раз меньше. Даже если столь малые концентрации удастся обеспечить при производстве сплавов, то последующая обработка и эксплуатация металлических деталей на воздухе, всегда содержащем значительное количество паров воды, в пламени горящего топлива, в составе ядерных установок, в воде, в водородосодержащих и в агрессивных средах приводит к тому, что концентрация водорода увеличивается, и он начинает существенно влиять на свойства металлов и сплавов, в том числе механические: прочность, пластичность, ударную вязкость, трещиностойкость. Это делает невозможным исключение влияния водорода на свойства материалов с помощью специальных технологий, следовательно, необходимо учитывать влияние водорода на структуру и прочность материалов еще на этапе проектирования конструкций, а также в процессе их эксплуатации.

Особое место занимает так называемая водородная энергетика, которая включает широкий спектр технологий использования водорода в качестве экологически чистого энергоносителя. Особенностью этих технологий является близкая к 100 % концентрация водорода в рабочей среде машин, механизмов и конструкций,

которая делает невозможным технологическое исключение влияния водорода. Водородная деградация материалов неизбежна, и для практических целей важно установить, когда она будет существенной – через месяц или через 30 лет эксплуатации.

Поглощение металлом нейтронов, а также поглощение водорода из рабочей среды приводит к деградации механических свойств металлических деталей ядерных и термоядерных установок. Изменения накапливаются постепенно и особенно сильно влияют на циркониевые и титановые сплавы. В этом случае технологический контроль при изготовлении, например, труб теплообменных аппаратов не позволяет гарантировать надежную работу установки. Практически необходим расчет на прочность с учетом накопления водорода и его влияния на механические свойства металла.

Для некоторых технологий поглощение твердыми материалами водорода является полезным. Открытое в конце XX в. водородное пластифицирование титановых сплавов, технологии получения металлической пены и применяемая в электронике технология Smart Cut используют водород. Насыщение титановых сплавов водородом приводит при определенных температурах к сверхпластическому состоянию [15], что существенно снижает расходы на прессование деталей из этих сплавов. Правда, после прессования водород должен быть удален из металла, иначе при эксплуатации деталей развивается «классическая» водородная хрупкость [16]. Обстрел полупроводниковой пластины протонными пучками приводит к образованию внутри нее атомов, а затем молекул газообразного водорода, которые при прогреве пластины приводят либо к программируемому отколу, либо к созданию внутри пластины слоев нанопузырей водорода [17–19]. Как и для любых технологий, в этом случае необходимы модели и соотношения параметров, позволяющие предсказать результат использования водорода.

Явления, связанные с взаимодействием водорода с твердым телом, настолько многообразны, что нет возможности описать их все даже в рамках одной монографии. Тема исследования является популярной, ежегодно публикуется более сотни статей в рецензируемых изданиях. Всего их опубликовано около 30 тысяч. В фундаментальной книге Колачева [20] описано около 20 исследованных в разных работах разновидностей водородной хрупкости. Построение единой универсальной модели взаимодействия водорода с твердым телом или хотя бы с металлами и сплавами на данном этапе развития науки невозможно. С этим связано большое разнообразие подходов к построению моделей влияния водорода на структуру и прочность материалов. Эти модели традиционно состоят из двух частей – модели транспорта и аккумуляции водорода в твердом теле и модели влияния уже имеющегося внутри твердого тела распределения концентраций водорода на свойства материалов.

1. Транспорт водорода

Первоначально процесс транспорта водорода внутри твердого вещества рассматривался как процесс диффузии, описываемый уравнением Фика [21]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot [D(T, r) \nabla C]. \quad (1.1)$$

Здесь C – концентрация водорода; t – время; r – радиус-вектор; D – коэффициент диффузии; T – абсолютная температура.

Коэффициент диффузии считался зависящим от температуры по закону Аррениуса [22]:

$$D(T) = D_0 e^{-\frac{u}{RT}}, \quad (1.2)$$

где u – энергия активации диффузии; D_0 – константа диффузии; R – универсальная газовая постоянная.

В 30-х гг. XX в. Горский [23] теоретически установил, что деформация матрицы материала меняет градиент объемной концентрации примеси, что дополнительно приводит к диффузии, индуцированной механическими напряжениями. Модель оказалась адекватной и позволила открыть и описать подтвержденный экспериментально «эффект Горского».

Экспериментальные исследования показали, что применение уравнения Фика при аппроксимации данных дает огромный разброс значений коэффициентов диффузии и энергии активации для одних и тех же материалов. Дакен и Смит [24] объяснили этот разброс тем, что при насыщении металлов водородом существует предельное значение концентрации, которое зависит от способа и температурного режима обработки образца. Другими словами, законы диффузии работают, только если концентрация водорода меньше предельных значений. Поэтому в описание транспорта водорода в твердом теле ввели понятие о связанном водороде и ловушках водорода, распределенных в материале. Появилась модель МакНабба и Фостера [25], которая в предложенном ими одномерном виде записывается как

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_L}{\partial t} + N_x \frac{\partial \theta_x}{\partial t} &= D_L \frac{\partial^2 C_L}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial \theta_x}{\partial t} &= k_x C_L (1 - \theta_x) - k_L \theta_x. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Здесь C_L – концентрация водорода в «нормальной» кристаллической решетке; D_L – коэффициент диффузии в «нормальной» кристаллической решетке; N_x – объемная плотность ловушек водорода; θ_x – степень заполнения ловушек; $N_x \theta_x = C_x$ – объемная концентрация водорода, сосредоточенного в ловушках; k_x представляет вероятность перескока из нормальной решетки в ловушку, а k_L – наоборот, из ловушки в нормальную решетку. Первое уравнение описывает диффузию, а второе можно интерпретировать как «ловушечное». При этом

$$\begin{aligned} k_x(T) &= k_{x0} e^{-\frac{u_i}{RT}}, \\ k_L(T) &= k_{L0} e^{-\frac{u_b + u_i}{RT}}, \end{aligned} \quad (1.4)$$

где u_b – энергия связи водорода в ловушках; u_i – энергия захвата водорода ловушками. Под ловушками понимают границы монокристаллических зерен, инородные включения, внутренние дефекты (дислокации, вакансии, микротрещины и т.д.) [26–29].

По мере развития «ловушечной теории» для описания транспорта водорода использовались все более сложные математические модели. Следующей по хронологии была модель Ориани [30]. Он предложил учесть предельную насыщаемость не только дефектов или ловушек, но и самой «нормальной кристаллической решетки». Таким образом,

$$C_L = N_L \theta_L, \quad (1.5)$$

где N_L – плотность распределения «ловушек» или «сайтов водорода» нормальной кристаллической решетки, зависящая от температуры; $0 \leq \theta_L \leq 1$ – коэффициент заполнения ловушек нормальной кристаллической решетки. При малых концентрациях водорода получаются уравнения МакНабба и Фостера, но при полном заполнении ловушек появляется нелинейность, связанная с ограничениями на коэффициенты θ . Таким образом, появляется сразу как минимум шесть параметров для описания процесса транспорта водорода, а если в материале есть одновременно несколько типов ловушек с разными энергиями связи, то «ловушечных уравнений» становится больше, что позволяет интерпретировать фактически любой эксперимент [31, 32].

При этом очень часто в моделях поправка Ориани не учитывается, уравнение собственно диффузии водорода не меняется, вводятся дополнительные уравнения заполнения и опустошения распределенных ловушек водорода. В работах [33, 34] проводится обобщение всех моделей и сравнение экспериментальных результатов с результатами математического моделирования.

Отдельного рассмотрения требуют подходы, основанные на введении в уравнение диффузии слагаемых, учитывающих термодинамический или химический потенциал V . Например [35]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot \left[D(T, r) \left(\nabla C + \frac{C \nabla V}{RT} \right) \right]. \quad (1.6)$$

При учете влияния механических напряжений это уравнение имеет вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D[T] \Delta C - D[T] \frac{V_H \nabla C \cdot \nabla p}{RT} - D[T] \frac{C V_H \Delta p}{RT}, \quad (1.7)$$

где p – давление в шаровой части тензора напряжений; V_H – парциальный молярный объем водорода [20]. Аналогичную формулу, но значительно позже, выводит в своей работе С. Серебринский с соавторами [36].

Предложенная нами модель многоканальной диффузии водорода [37] создана на базе анализа экспериментальных данных о диффузии малых, естественных концентраций водорода, характерных для водородной хрупкости и индуцированного водородом разрушения большинства современных конструкционных металлов. В этом случае концентрации или содержание водорода измеряются миллионными и миллиардными массовыми долями, что позволяет пользоваться принципом суперпозиции и не учитывать нелинейные процессы, исследованные и описанные в работе Дакен и Смит [24]. Модель сводится к системе уравнений

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i(T) \Delta C_i, \quad (1.8)$$

$$i = 1, \dots, n.$$

Здесь C_i – концентрация водорода в канале диффузии с номером i , имеющем коэффициент диффузии $D_i(T)$, при этом суммарная концентрация водорода равна $\sum_i C_i$.

Таким образом, математическое описание транспорта водорода, используемое в механических моделях водородной хрупкости, базируется на элементарном уравнении диффузии и наборе химических реакций заполнения, равномерно распределенных по объему материала ловушек. Это приводит к тому, что в фундаментальном физическом справочнике [38] написано, что представленные в таблицах справочника значения коэффициента диффузии и энергии ее активации являются результатом осреднения многочисленных экспериментальных данных и справедливы «в лучшем случае лишь по порядку величины».

Имеется много работ, как дополняющих вышеперечисленные модели, так и имеющих принципиально другие подходы к описанию транспорта водорода, например, квантовомеханический или метод частиц с использованием погруженного потенциала, но они не используются в известных моделях влияния водорода на механические свойства металлов и сплавов, и их обзор не входит в нашу задачу.

2. Математические модели влияния водорода на механические свойства металлов и сплавов, основные модели

Ввиду огромного объема публикаций невозможно в рамках одного обзора упомянуть все модели взаимодействия водорода с твердым телом. Здесь существует огромное разнообразие экспериментальных данных, их различных интерпретаций и гипотез о физических механизмах взаимовлияния водорода и твердого тела. Более или менее полный перечень физических механизмов можно найти в монографиях [20, 39]. В настоящий момент обнаружены десятки различных видов ловушек водорода, подробный перечень которых для сталей приведен в работе [29].

Вместе с тем имеются конкретные инженерные задачи, связанные с расчетом конструкций на прочность и прогнозированием ресурса работы конструкционных материалов. При решении этих задач важно выделить основные механизмы, влияющие на структуру и прочность конструкционных материалов в условиях их реального технического использования. Самым известным из многочисленных результатов взаимодействия водорода с конструкционными материалами является образование трещин или зон водородной хрупкости, которая впоследствии приводит к растрескиванию металлов под нагрузкой. Теория развития трещин разрабатывалась одновременно с исследованиями водородной хрупкости, более того, некоторые закономерности пластического течения и разрушения (например, закон Холла – Петча [40]) были открыты при экспериментальном исследовании механизмов водородной хрупкости металлов.

В этой связи две самые популярные и общеизвестные расчетные модели водородной хрупкости – HEDE и HELP – основаны на подходах теории развития трещин и в качестве физического механизма разрушения рассматривают зарождение и сток дислокаций в вершине трещины. В момент создания этих моделей они существенно отличались друг от друга тем, что HEDE рассматривает принципиально хрупкое разрушение в результате развития водородного охрупчивания без пластических деформаций, а HELP, напротив, интерпретирует влияние растворенного в металле водорода, как химического вещества, снижающего энергию, необходимую для зарождения дислокаций. Таким образом, в результате HELP-механизма в вершине трещины, где под действием внутренних напряжений концентрируется водород, происходит «размягчение» металла или локализованная пластичность. По мере развития исследований выяснилось, что в большинстве практических задач эти механизмы индуцированного водородом разрушения в чистом виде не встречаются, и появился ряд «гибридных механизмов», обзор которых можно видеть в работе [41].

2.1. Модель хрупкого разрушения

Модель HEDE (Hydrogen Enhanced Decohesion, или усиленная водородом декогезия) связана с критериями разрушения, использующими величину раскрытия трещины. Основной идеей является уменьшение сцепления берегов трещины «когезии» за счет накопления водорода в материале и одновременное концентрирование водорода в области максимального растягивающего среднего нормального напряжения (шаровой части тензора напряжений). Декогезия происходит за счет уменьшения в энергии образования свободной поверхности. Подробный обзор последних результатов по модели HEDE приведен в [42].

Можно считать, что идею ослабления связей при внедрении водорода, лежащую в основе HEDE, впервые

выдвинул Трояно в 1960 г. [43]. Он же предложил для простоты считать, что концентрация водорода C будет определяться как

$$C = C_0 e^{-\frac{U}{RT}}, \quad (2.1)$$

$$U = p\Delta V,$$

где p – среднее нормальное напряжение; ΔV – изменение в объеме, производимые напряжениями за счет ослабления связей при внедрении в кристаллическую решетку водорода.

В основополагающей для HEDE работе Ориани [44] указано, что в результате насыщения водородом происходит уменьшение максимальных нормальных растягивающих усилий (maximum cohesive resistive force) в устье трещины $F_m(C)$ и изменение радиуса кривизны в устье $\rho(C)$ за счет зарождения в нем дислокаций. Если выполняется условие

$$2\sigma(L/\rho(C))^{1/2} < nF_m(C),$$

то трещина стабильна до тех пор, пока диффузия водорода не уменьшит $F_m(C)$. Здесь σ – максимальные напряжения в устье трещины; L – длина трещины; n – поверхностная плотность атомов решетки в устье трещины. Нарушение неравенства приводит к росту трещины, образованию новой поверхности. В свою очередь этот рост приводит к росту нормальных напряжений в новом положении устья трещины. Рост напряжений в новой локальной точке приводит к росту локальной концентрации водорода, которая постепенно уменьшает когезионное напряжение nF_m до очередного нарушения условия стабильности трещины. После этого происходит дальнейшее развитие трещины. Таким образом, трещина постепенно растет и «толкает» перед собой локальную зону повышенной концентрации водорода. Этот процесс происходит до тех пор, пока трещина не станет достаточно большой для роста без участия водорода. Рекуррентную схему Ориани записал в виде системы, обозначенной у него одиночным и двойным верхними штрихами:

$$\begin{cases} C'' = C'(\sigma'_z, \mu_H, \nu)_M, \\ \sigma''_z = 2\sigma(L/\rho(C''))^{1/2}. \end{cases} \quad (2.2)$$

Здесь μ_H – химический потенциал водорода в металле; ν – скорость роста трещины, верхние штрихи означают разные шаги рекуррентной схемы. Зависимость $F_m(C'')$ принимается линейной [45]:

$$F_m(C'') = F_{m0} - \alpha C''. \quad (2.3)$$

Необходимо отметить, что Ориани пишет лишь о нескольких слоях атомов на внутренней стороне устья трещины, подвергнутых пластической деформации, и остается фактически в рамках упругой теории разви-

тия трещин, которая хорошо работает в случае хрупкого материала, таким образом, модель HEDE описывает разрушение охрупченного водородом материала. Хрупкое разрушение в вершине трещины – механизм, подтвержденный многими исследованиями [46].

В работах Ориани имеется ряд неопределенностей: не заданы функции $C'(\sigma'_z, \mu_H, \nu)$, $\rho(C)$, неизвестен коэффициент α . При решении конкретных задач различные авторы определяли их по-разному. Например, в статьях [47, 48] подход Ориани сведен к тому, что на основании формулы, описывающей уменьшение энергии свободной поверхности за счет водорода, выводится формула для зависимости коэффициента интенсивности напряжений от концентрации водорода и проводится стандартный анализ развития трещины.

В конечном итоге была разработана конечно-элементная модель HEDE с реализацией в среде Abaqus [49], и многие авторы меняют лишь один элемент этой модели, не выписывая всего остального. Сразу необходимо отметить, что все расчеты с помощью HEDE-модели в известной нам литературе выполнялись на модельных примерах – цилиндрических или призматических образцах с надрезом или инициирующей трещиной известных размеров. Как правило, образцы выполнялись из калящихся мартенситных сталей, так как такой моделью определяется хрупкое разрушение, но есть работы, посвященные и обычной нержавеющей стали [50].

В современном виде модель состоит из следующих отдельных элементов:

- 1) уравнения упругой или вязкоупругой сплошной среды (в том числе материалы с упрочнением);
- 2) уравнения диффузии и захвата водорода ловушками «идеальной» кристаллической структуры, дислокациями и т.д.;
- 3) модель водородной деградации параметров когезионного закона;
- 4) уравнение раскрытия трещины в когезионной зоне (когезионный закон).

2.1.1. Перераспределение и накопление водорода

В случае если в уравнениях диффузии и захвата в ловушки водорода есть зависимость от механических напряжений и деформаций, алгоритм расчета становится рекуррентным, как это и предлагал Ориани, сначала задают концентрацию водорода, который считают равномерно распределенным по объему образца и между ловушками различной природы. После решения задачи о напряженно-деформированном состоянии с учетом начальной концентрации производится перерасчет распределения водорода, и механический расчет повторяется с учетом времени, прошедшего от начала механического нагружения образца. Диффузия происходит во времени, мгновенно концентрации водорода не меняется, поэтому можно считать рекуррентный процесс временным и, задавшись конкретной величиной шага по

времени, оценить инкубационное время до развития трещины. Это основной результат большинства публикаций.

Таким образом, по уравнениям, используемым для описания транспорта водорода, можно разделить все опубликованные работы на следующие категории:

- использующие зависимость Трояно (2.1) [43, 51–53];
- использующие закон Фика (1.1) [54–57];
- использующие термодинамический потенциал, который дает уравнение диффузии в форме (1.7) [58–72];
- использующие разные варианты модели МакНаба и Фостера (1.3) с учетом одного или двух видов ловушек, например, дислокаций или дислокаций и границ зерен [50, 73–87].

Как правило, концентрация водорода в ловушках C_T вычисляется по концентрации диффузно-подвижного водорода в «идеальной кристаллической решетке без дефектов» C_L . В некотором смысле такой подход является способом учесть запрещенные в «каноническом» HEDE-подходе пластические деформации с вычисляемой отдельно нормой ε_p . Например, в [64–66, 74, 77, 78] уравнение диффузии водорода в форме (1.7) записано для диффузно-подвижного водорода, далее предлагается использовать соотношение, полученное линеаризацией графика из статьи Таха и Софрониса [88]:

$$C_T = (49,0\varepsilon_p + 0,1)C_L. \quad (2.1.1)$$

Полная концентрация водорода

$$C = C_L + C_T. \quad (2.1.2)$$

Считается, что формула (2.1.1) учитывает рост плотности дислокаций, заполненных водородом в результате пластической деформации. При этом трехзначные числовые коэффициенты, полученные фактически для железа Таха и Софронисом [88], применяются для сталей X70, микроструктура которых, размер зерна и другие условия зарождения и движения дислокаций могут существенно отличаться от низкопрочной стали, описанной в [88].

Согласно [88, 89] степень заполненности ловушек θ_i может быть рассчитана с помощью коэффициентов K_{Ti} и заполненности θ_L кристаллической решетки: $\theta_i / (1 - \theta_i) = K_{Ti} \theta_L$. Эти зависимости получены в предположении $\theta_L \ll 1$ [89] из более общего уравнения равновесия между заполнением ловушек водорода разной природы, полученного Ориани [30].

С учетом этих зависимостей можно свести решение задачи о транспорте водорода к решению единственного уравнения относительно концентрации C_L , которое описывает его диффузию в решетке. Затем можно вычислить заполненность решеточных ловушек в идеальной кристаллической решетке и концентрацию водорода, зная, что $C_L = \theta_L N_L$, где константа N_L вычисляется с использованием различных дополнительных предполо-

жений, например, как результат произведения плотности атомов идеальной решетки на постоянный коэффициент, вычисленный по экспериментальным данным о концентрации водорода, приводящей к насыщению данного металла (максимально возможной при заданной температуре и нагрузке).

В работе [75] такой подход на основании модели МакНаба и Фостера [25] применяется для двух типов ловушек – граней зерен C_{Tgb} и дислокаций C_{Td} . Получено модифицированное с учетом степени заполненности ловушек θ_{gb} , θ_d уравнение (1.7). Оно имеет громоздкий вид:

$$\left(1 + \frac{N_{Td} K_{Td}}{N_L (1 + K_{Td} \theta_L)^2} + \frac{N_{Tgb} K_{Tgb}}{N_L (1 + K_{Tgb} \theta_L)^2} \right) \frac{\partial C_L}{\partial t} + \theta_d \frac{dN_{Td}}{dt} = \nabla \cdot \left(D \left(\nabla C_L - \frac{V_H C_L \nabla p}{RT} \right) \right). \quad (2.1.3)$$

Здесь коэффициенты K_{Ti} : $K_{Td} = \exp(-\Delta E_d / RT)$, $K_{Tgb} = \exp(-\Delta E_{gb} / RT)$, ΔE_d , ΔE_{gb} – энергии активации ловушек, $N_{gb} = C_{gb} / \theta_{gb}$, $N_{Td} = C_d / \theta_d$ – константы, которые подбираются из эксперимента, $N_{Td} = \sqrt{2} \rho_d / a$, a – параметр решетки; ρ_d – линейная плотность дислокаций. Эта плотность вычисляется на основании целого ряда дополнительных предположений по эквивалентному напряжению Мизеса [50, 88, 89, 90].

Аналогичный подход к вычислению концентрации водорода в ловушках с разным числом учитываемых типов ловушек применяется в [50, 51, 73, 80, 81, 84–86, 91]. Вычисленные в результате решения уравнения и дополнительных формул концентрации водорода в ловушках и кристаллической решетке суммируются. Суммарная концентрация C является величиной, определяющей водородную деградацию в вершине трещины.

Необходимо отметить оригинальный подход [83], где предлагается модель двухканальной диффузии. Для водорода внутри зерен предлагается использовать стандартное уравнение (1.7), но для диффузии по границам зерен предлагается использовать уравнение Фика со своим коэффициентом диффузии D_{gb} :

$$\frac{\partial C_{gb}}{\partial t} = D_{gb} \Delta C_{gb} + \frac{D_L}{d} n \cdot \nabla C_L |_{gb}. \quad (2.1.4)$$

Здесь C_{gb} – концентрация водорода на границах зерен; C_L – концентрация водорода внутри зерен; D_L и D_{gb} – соответствующие коэффициенты диффузии; n – вектор нормали к поверхности зерна; d – его размер. Проведенный в работе анализ скорости распространения концентрации водорода в двумерном случае на сетке из плоских шестиугольных зерен правильной формы и одинакового размера показал, что при $D_L \ll D_{gb}$ вся диффузия будет идти по границам зерен и первым кана-

лом диффузии (по кристаллической решетке) можно пренебречь при условии, что во втором канале диффузии (по границам зерен) вместо слагаемого, отвечающего за перенос водорода сквозь границы $\left. \frac{D_L}{d} n \cdot \nabla C_L \right|_{gb}$, будет фигурировать слагаемое $D_{gb} V_H \nabla \cdot (C_{gb} \nabla p) / RT$, учитывающее термодинамический потенциал. При этом полная концентрация водорода $C \approx C_{gb}$.

В работе [92] для вычисления концентрации водорода и деформации чистого никеля использована теория функционала плотности.

2.1.2. Закон водородной дегградации

Для характеристики связанных с водородом изменений в силах сцепления зерен (когезии) большинство авторов используют параметр заполнения ловушек водорода в металле, который получается по формуле равновесной относительной концентрации инородного вещества на границах зерен C_{gb}^{fr} при известной фракционной концентрации растворенного вещества внутри зерен C^{fr} , получена в [93] на основании закона Горского [23] и имеет вид

$$C_{gb}^{fr} = \frac{C^{fr}}{C^{fr} + (1 - C^{fr}) \exp(-(E - e) / RT)}, \quad (2.2.1)$$

где $(E - e)$ – разность энергий растворения и сорбции на границах зерен (необходимой для высвобождения атома вещества из зерна и сегрегации на границах зерен). С. Серебринский [36] предложил использовать эту формулу для параметра степени заполнения свободной поверхности трещины атомами водорода θ в виде

$$\theta = \frac{C}{C + \exp(-\Delta g_H / RT)}, \quad (2.2.2)$$

где Δg_H – разница свободной энергии Гиббса для водорода между адсорбированным внутри кристаллической решетки и свободным состоянием (выбирается из эксперимента). Это примерно совпадает с формулой (2.2.1) [93] при условии, что концентрация водорода пересчитана из объемной во фракционную (соотношение атомов водорода к атомам металла в объеме).

Необходимо отметить, что эта формула написана для случая сегрегации атомов примеси на поверхности монокристалла, и концентрация C_{gb}^{fr} там – поверхностная, на границе зерна, C^{fr} – внутренняя, внутри зерна, тогда как С. Серебринский применяет ее к монокристаллу, использует полную концентрацию C^{fr} внутри кристаллической решетки и внутри ловушек, подразумевая, что при разрыве связей весь водород оказывается на свободной поверхности, хотя для второй, ловушечной части энергия Гиббса должна отличаться от первой.

По величине θ в большинстве работ вычисляется удельная энергия свободной поверхности $\gamma(\theta)$, зависящая от сорбции водорода на ней. Для этого практически во всех работах и для всех металлов используется зависимость С. Серебринского [36], которая получена не из первых принципов, как следует из названия статьи, а путем аппроксимации графика из неопубликованной статьи соавторов С. Серебринского. Причем график получен соавторами для деформации чистого монокристалла железа, насыщенного водородом, в кристаллографическом направлении (110) (хотя непонятно, где там границы зерен):

$$\gamma(\theta) = (1 - 1,0467\theta + 0,1687\theta^2) \gamma(0). \quad (2.2.3)$$

Далее С. Серебринский и соавторы делают предположение, что максимальное значение относительного перемещения краев трещины, при котором не происходит разрыва связей между ними (декогезии), слабо зависит от величины θ . Это предположение подтверждается ссылкой на работу по алюминию [94]. Отсюда из очевидного энергетического соотношения $2\gamma(\theta) = \sigma_z(\theta) \delta(\theta)$, где $\sigma_z(\theta)$ – напряжения, нормальные к берегам трещины, следует закон водородной дегградации в виде

$$\sigma_z(\theta) = (1 - 1,0467\theta + 0,1687\theta^2) \sigma_z(0). \quad (2.2.4)$$

Необходимо отметить, что некоторые авторы применяют другие соотношения, вероятно, более подходящие для исследуемых ими материалов.

Так, в работе [73] используется два различных эмпирических соотношения для мартенситной закаленной стали AISI 4135 с разными температурами отпуска:

$$\sigma_z(C_L) = \sigma_z(C_L = 0) (0,431e^{-2,227C_L} + 0,579) \quad (2.2.5)$$

для образцов с меньшей исходной прочностью 1320 МПа, отпущенных при температуре 733 К, и

$$\sigma_z(C_L) = \sigma_z(C_L = 0) (0,431e^{-0,543C_L} + 0,6) \quad (2.2.6)$$

для образцов с исходной прочностью 1450 МПа, отпущенных при температуре 633 К. Авторы не обращают внимание на то, что формулы не дают тождества $\sigma_z(0) = \sigma_z(C_L = 0)$.

В работах [54, 95] используется линейная зависимость $\sigma_z(\theta) = (1 - \alpha C) \sigma_z(0)$, где коэффициент α подбирается с использованием экспериментальных данных.

В работе [84] для образцов из меди при вычислении изменений поверхностной энергии в результате накопления водорода использовано соотношение, полученное [96] «из первых принципов» для изменения энергии свободной поверхности при сегрегации атомов серы на поверхности зерен меди:

$$\gamma(\theta) = (1 - 0,6707\theta + 0,0843\theta^2) \gamma(0). \quad (2.2.7)$$

Таким образом, при вычислении водородной деградации или ослабления максимальных напряжений, необходимых для разрыва связей, практически все авторы используют соотношения, полученные для идеальной решетки железа при деформации ее в одном определенном кристаллографическом направлении, и только в тех известных нам случаях авторы пытаются адаптировать эти соотношения к конкретным сплавам, моделирование которых проводится в статьях.

2.1.3. Закон для сил сцепления

Предполагается, что напряжения сцепления $\sigma(\delta)$ между двумя атомными плоскостями, переходящими в берега трещины, зависят от расстояния между ними δ , возникающего в силу деформаций. При невозмущенном межатомном расстоянии $\delta = a$ напряжения сцепления нулевые, потом, при расстоянии порядка $\delta = 1,5a$, они достигают максимума и начинают убывать при дальнейшем увеличении δ вплоть до разрыва или существенного ослабления связей, характерного для свободных берегов трещины. Схема раскрытия вершины трещины изображена на рисунке.

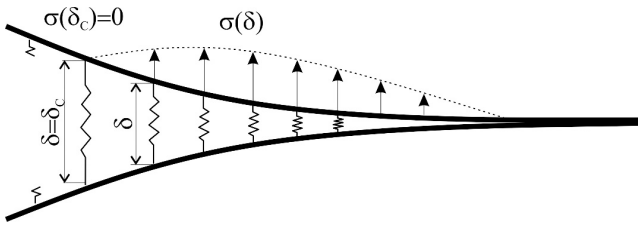


Рис. Схема раскрытия вершины трещины

Зная зависимость $\sigma(\delta)$, можно вычислить поверхностную энергию $\gamma = 0,5 \int_a^\infty \sigma(\delta) d\delta \approx 0,5 \int_0^{\delta_c} \sigma(\delta) d\delta$ и коэффициент интенсивности напряжений [48] $K_{IC} = \sqrt{E\gamma / (1-\nu^2)}$ и дальше использовать стандартный критерий роста трещины. При использовании конечных элементов между элементами в когезионной зоне задаются связи в виде нормальных напряжений, соответствующих закону для сил сцепления $\sigma(\delta)$. В этом случае, как только расстояние между ними δ станет больше критического δ_c (известного для данного материала и не зависящего от концентрации водорода), происходит разрыв связей и рост трещины.

Процедура учета когезионных сил считается стандартной. «Когезионный анализ» включен в стандартные КЭ-пакеты, поэтому современные авторы не уделяют внимания этому алгоритму, ограничиваясь обсуждением самого закона сцепления $\sigma(\delta)$.

В большинстве работ используется зависимость Ниделмана [97]:

$$\sigma(\delta) = \frac{27}{4} \sigma_z(\theta) \frac{\delta}{\delta_c} \left(1 - \frac{\delta}{\delta_c}\right)^2, \quad (2.3.1)$$

которая после интегрирования приводит к соотношению $\gamma = 9\sigma_z(\theta)\delta_c / 16$.

Эту формулу Ниделман получил для композитного материала с волокнами, имеющими прямоугольную форму поперечного сечения, отсюда дробный множитель. Несмотря на то, что канавки на всех металлических образцах, для которых применялась HEDE-модель, имеют круглую форму, формула Ниделмана является самой популярной [51, 60, 62, 73–77, 85, 92, 98].

В работе [73] для стабилизации численной процедуры вводится демпфирующий член с коэффициентом ζ , учитывающий скорость роста трещины:

$$\sigma(\delta) = \frac{27}{4} \sigma_z(\theta) \frac{\delta}{\delta_c} \left(1 - \frac{\delta}{\delta_c}\right)^2 + \zeta \frac{d}{dt} \left(\frac{\delta}{\delta_c}\right). \quad (2.3.2)$$

Помимо формулы Ниделмана, используются:

1. Линейная зависимость [99] вида

$$\sigma(\delta) = \sigma_z(\theta) \left(1 - \frac{\delta}{\delta_c}\right). \quad (2.3.3)$$

Недостатком такой зависимости является принципиальное несоответствие закону сцепления при малых δ , поэтому чаще применяется кусочно-линейная зависимость [58, 81]:

$$\sigma(\delta) = \begin{cases} \sigma_z(\theta) \frac{\delta}{\delta_0}, & 0 \leq \delta \leq \delta_0, \\ \sigma_z(\theta) \left(1 - \frac{\delta - \delta_0}{\delta_c - \delta_0}\right), & \delta_0 < \delta \leq \delta_c. \end{cases} \quad (2.3.4)$$

2. Экспоненциальная [55, 62, 83]:

$$\sigma = \frac{e^1 \delta}{\delta_c} \sigma_z(\theta) e^{-\delta/\delta_c}. \quad (2.3.5)$$

В обзорной работе [100] авторы отмечают, что влияние разных видов закона сцепления на результаты моделирования окончательно не изучено, в ряде работ оно характеризуется как сильное, в ряде работ, напротив, как незначительное. Наличие всех необходимых для HEDE модулей в пакете ABAQUS позволяет решать задачи, не задумываясь об этих проблемах (см., например [49, 101–103]).

Таким образом, имеется ряд неизученных проблем и противоречий в совокупности подходов, которые называются HEDE-моделью водородной хрупкости. Но все они содержат один очень существенный недостаток – для расчетов необходимо наличие трещины с известными параметрами. Это не позволяет моделировать реальные конструкции, взаимодействующие с внутренним и внешним водородом, так как параметры трещин априори, как правило, неизвестны. Вероятно,

с этим связан тот факт, что при большом числе опубликованных результатов все они посвящены моделированию поведения стандартных образцов для проведения механических испытаний с предварительным надрезом или канавкой.

2.2. Модель разрушения вследствие локальной пластичности

Принципиально другой подход к моделированию водородной деградации механических свойств материалов был разработан Софронисом и соавторами [104, 105]. Механизм, лежащий в основе этой модели, получил название HELP (*hydrogen-enhanced localised plasticity*, или усиленная водородом локализованная пластичность). Он заключается в локальном росте пластичности, возникающем вследствие насыщения водородом, и этим принципиально отличается от HEDE-механизма. Эта парадоксальная идея также основана на дислокационном подходе. Бичем [106] впервые обнаружил экспериментально, что насыщение металлических образцов водородом приводит к росту подвижности дислокаций и снижению энергетического порога их зарождения. В этом случае, согласно дислокационной теории, упрощается пластическое течение. Последующие исследования Бирнбаума [107–111] подтвердили наблюдения Бичема.

В современном виде модель HELP состоит из следующих основных элементов:

1) уравнения вязкоупругой сплошной среды с упрочнением;

2) модель водородной деградации параметров определяющего уравнения вязкоупругой сплошной среды с упрочнением;

3) уравнения диффузии и захвата водорода ловушками «идеальной» кристаллической структуры, дислокациями с учетом пластических деформаций.

В отличие от HEDE-модели, эти элементы трудно разделить, так как в определяющие уравнения входит концентрация водорода, на которую, в свою очередь, влияет норма пластической деформации. Как правило, все модификации этой модели касаются упрощенных подходов к вычислению распределения концентраций водорода и вида определяющих уравнений.

Наиболее полная и последовательная теория, связанная с индуцированной водородом локальной пластичностью, разработана Софронисом и соавторами. Софронисом было предложено несколько модификаций модели и даже совместная HELP–HEDE-модель развития трещины из зоны контакта металла и инородного включения в насыщенном водородом образце из высокопрочной стали.

К стандартным уравнениям вязкоупругой среды он добавил определяющие уравнения материала с HELP [91]. При одномерном растяжении они имеют вид

$$\sigma_y = \sigma_0^H(C) \left(1 + \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_0} \right)^{\frac{1}{n}}, \quad (2.2.2.1)$$

где σ_y – напряжения за пределом текучести; ε_0 – иницирующая или начальная пластическая деформация, которая была бы при отсутствии водорода; C – полная фракционная концентрация водорода (отношение числа атомов водорода к числу атомов металла в объеме с учетом всех видов ловушек водорода и кристаллической структуры); n – степенной показатель в законе упрочнения; ε_p – логарифмическая деформация;

$$\sigma_0^H(C) = \varphi(C) \sigma_0. \quad (2.2.2.2)$$

Здесь σ_0 – предел текучести без учета влияния водорода, для функции $\varphi(C)$ предлагается линейная зависимость с определяемым экспериментально постоянным коэффициентом $\mu < 1$,

$$\varphi(C) = (\mu - 1)C + 1. \quad (2.2.2.3)$$

Необходимо отметить, что определяющие уравнения (2.2.2.1) дают возможность описать лишь одномерную деформацию. Для трехмерного случая Софронис и соавторы [91] предлагают использовать тензор скоростей деформаций D_{ij} , который предлагается представить в виде суммы трех слагаемых: тензоров скорости упругих D_{ij}^e и пластических D_{ij}^p деформаций, а также деформаций, связанных с индуцированным водородом размягчением (дополнительной пластичностью) D_{ij}^H ,

$$D_{ij} = D_{ij}^e + D_{ij}^H + D_{ij}^p. \quad (2.2.2.4)$$

Для скоростей упругих и пластических деформаций записываются стандартные уравнения для вязкоупругого материала с упрочнением, с тем исключением, что вместо критерия перехода к пластической деформации Мизеса предлагается критерий

$$\sigma_e - \sigma_y(\varepsilon_p, C) = 0. \quad (2.2.2.5)$$

Здесь σ_e – норма Мизеса и $\varepsilon_p = \int \sqrt{2D_{ij}^p D_{ij}^p} / 3 \, dt$.

Тензор скоростей деформаций, связанных с индуцированным водородом размягчением, записывается как

$$D_{ij}^H = \frac{\lambda}{3 + \lambda(C - C_0)} \dot{C} \delta_{ij}, \quad (2.2.2.6)$$

где $\lambda = v_H / v_m$ – отношение объема, приходящегося на одну молекулу газообразного водорода к объему, приходящемуся на один атом металла, $v_H = V_H / N_A$; V_H – молярный объем водорода; N_A – число Авогадро.

Второй неотъемлемой частью HELP-модели является уравнение транспорта водорода. В работе [91] дифференциальные уравнения в форме МакНаба и Фостера [25] (1.3) заменены аппроксимацией решений с учетом равновесия между концентрацией водорода в ловушках и в кристаллической решетке, заданного Ориани [30].

Для парциальной концентрации водорода (атомы водорода к атомам металла в объеме), исходя из предположений, что диффузия происходит быстрее водородной деградации, решения уравнений для транспорта водорода можно рассматривать в стационарном приближении. Тогда

$$C = \beta \theta_L(p) + \alpha \vartheta_T(p, \varepsilon_p),$$

$$\theta_L(p) = \frac{\theta_L(0) \exp(-pV_H / RT)}{1 + (1 - \theta_L(0)) \exp(-pV_H / RT)}, \quad (2.2.2.7)$$

$$\vartheta_T(p, \varepsilon_p) = \frac{N_T(\varepsilon_p)}{N_L} \frac{\theta_L(p) K_T}{1 + (1 - \theta_L(p)) K_T}.$$

Здесь p – среднее нормальное напряжение в металле (шаровая часть тензора напряжений); $N_L = 1/v_m$ – плотность атомов кристаллической решетки металла, $K_T = \exp(E_T / RT)$, E_T – энергия связи водорода в ловушках (дислокациях); β – число возможных позиций водорода в кристаллической решетке, приходящихся на один атом решетки; α – число возможных позиций атомов водорода, приходящихся на одну ловушку – задаваемые константы (определяются из эксперимента). Путем аппроксимации экспериментальных модельных зависимостей плотности дислокаций от величины пластической деформации для сталей получена эмпирическая формула для плотности дислокационных ловушек $N_T(\varepsilon_p)$:

$$N_T(\varepsilon_p) = \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{a} (10^{10} + 2,0 \cdot 10^{16} \varepsilon_p), \varepsilon_p < 1/2, \\ \frac{\sqrt{2}}{a} 10^{16}, \varepsilon_p \geq 1/2. \end{cases} \quad (2.2.2.8)$$

где a – параметр кристаллической решетки металла.

Очевидна взаимосвязанность всех частей HELP-модели, а именно: упругие деформации при заданной нагрузке зависят от пластических, а те, в свою очередь, зависят от водородного размягчения, на которое влияет концентрация водорода, которая сама связана со средним нормальным напряжением и величиной нормы пластической деформации. Многие зависимости нелинейные, это привело к необходимости рекуррентного расчета, когда сначала решается задача о напряженно-деформированном состоянии вязкоупругого материала, потом вычисляется распределение концентраций водорода под действием равномерного нормального напряжения и матрица чувствительности лапласиана от тензора напряжений к пластическим деформациям и концентрации водорода, которая позволяет фактически линеаризовать уравнения и решить за один шаг методом конечных элементов задачу о напряжениях и деформациях, возникающих вследствие неравномерного распределения водорода [112].

В работе [113] HELP-модель применена к исследованию процесса зарождения пустот при движении вершины трещины, при этом подчеркивается, что речь идет о моделировании материала с хорошей растворимостью, в котором диффузионные процессы заканчиваются быстрее, чем происходит существенное изменение напряженно-деформированного состояния, связанного с ростом трещины. В противном случае игнорировать дифференциальные уравнения транспорта водорода нельзя.

В статье [88] авторы предлагают добавить в модель HELP дифференциальные уравнения для диффузии водорода в форме (2.1.4) [83] с учетом скоростей деформации. Авторами получено множество расчетных графиков пространственного распределения концентрации диффузионного водорода (находящегося в кристаллической решетке) и водорода, накопленного в ловушках. Сами они отмечают, что экспериментально проверить эти распределения невозможно. Вместе с тем аппроксимации этих зависимостей используются другими авторами для вычисления как по HELP-, так и по HEDE-моделям.

В статье [114] HELP-модель применена для моделирования роста внутренней сферической поры с начальным радиусом r_0 в насыщенном водородом цилиндрическом образе при одноосном растяжении. Авторами предлагается модифицировать зависимость $\sigma_0^H(C)$:

$$\sigma_0^H(C) = \sigma_0 \begin{cases} \left(1 + \frac{(\mu-1)C}{C_L^0}\right) \sigma_0, \sigma_0^H(C) \geq \eta \sigma_0, \\ \eta \sigma_0, \sigma_0^H(C) < \eta \sigma_0, \end{cases} \quad (2.2.2.9)$$

где $\eta < 1$ – задаваемый коэффициент; C_L^0 – начальная концентрация водорода в ненагруженном образце. В статье получено напряженно-деформированное состояние и перераспределение концентраций водорода при росте поры под нагрузкой.

В статье [115] авторы проводят модификацию уравнений HELP-модели в применении к задаче о выпучивании под действием давления водорода заземленного по краям диска. Используются дифференциальные уравнения (1.7) [35] с учетом степени заполненности ловушек θ_T , аналогичны (2.1.3), для описания транспорта и накопления водорода. Учитывается изменение плотности ловушек при пластической деформации для плотности ловушек согласно [116] в виде

$$\log(N_T(\varepsilon_p)) = 23,26 - 2,33 \exp(-5,5 \varepsilon_p), \quad (2.2.2.10)$$

где ε_p – эквивалентная пластическая деформация. Уравнение для критерия перехода к пластической деформации не содержит явной зависимости от концентрации водорода. После сопоставления результатов расчета и экспериментальных данных предложен следующий закон водородной деградации для напряжения разрушения σ_R^H .

$$\sigma_R^H(C_L) = \begin{cases} 640 \text{ МПа}, C_L < 9,5C_0 \\ -\frac{11,091C_L}{C_0} + 745,97 \text{ МПа}, 9,5C_0 \leq C_L \leq 15C_0, \\ 580 \text{ МПа}, C_L > 15C_0. \end{cases} \quad (2.2.2.11)$$

Здесь C_L – концентрация (диффузионного) водорода в кристаллической решетке; C_0 – определенная в [88] величина плотности ловушек водорода в кристаллической решетке металла, $C_0 = 2,084 \cdot 10^{21}$. Необходимо отметить, что в работе проводится моделирование реальной задачи, но результаты моделирования сопоставляются с экспериментом лишь косвенно, например, для получения зависимости (2.2.2.10), упрощающей расчетную схему.

В [117] проводится другая модификация HELP и вводится новая зависимость

$$\sigma_Y = \sigma_0 + R(1 - \exp(-\gamma \varepsilon_p)), \quad (2.2.2.12)$$

где σ_0, R, γ – параметры, определяемые экспериментально. В аналогичной работе [118] использованы все предположения [115], за исключением (2.2.2.11). HELP-модель применяется для двумерного моделирования поликристаллического материала, структура которого представляет собой монокристаллические зерна. На границах зерен заданы контактные условия взаимодействия. Для образца, содержащего около 50 зерен неправильной формы, задается растягивающее усилие, с двух свободных от нагрузки сторон заданы постоянные концентрации водорода, а две другие полагаются газонепроницаемыми. Результатом работы являются поля распределения концентрации водорода и пластических деформаций при растяжении материала вплоть до деформации 20 %.

В статьях [119, 90] модифицированная модель [88] использована для вычисления распределения концентрации водорода при четырехточечном изгибе надрезанного образца, получены расчетные распределения концентраций диффузионного водорода и водорода, находящегося в ловушках.

Применение дислокационных моделей позволяет описывать поведение материала, исходя из законов зарождения и движения дислокаций. В работе [120, 121] HELP-модель интерпретируется с этой точки зрения. Рассмотрено влияние дислокаций на напряженно-деформированное состояние, затем в формулы для расчета напряжений, вызванных дислокациями, введен коэффициент $\theta(1-\theta)$, где θ – коэффициент заполнения дислокаций водородом, вычисляемый по формуле (2.2.2.7). Дополнительно в работе вводится кусочно-линейная зависимость логарифма относительной скорости движения дислокаций от концентрации водорода. Эта зависимость является аппроксимацией зависимости, полученной при решении методом Монте-Карло уравнений квантовой физики для движения дислокаций в [122]. Модель применена к задаче об изгибе защем-

ленного с одной стороны прямоугольного призматического образца из монокристаллического α -Fe. Получены поля напряжений, связанных с зарождением и движением дислокаций при изгибе.

В работе [123] обсуждается основной механизм, связанный с водородом. Рассматривается вариант водородного размягчения и водородного наклепа, в модели они записаны как

$$\sigma_Y = \left(\xi \log_{\eta} \left(\frac{C_T}{N_L} \right) \right) \left(1 + \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_0} \right)^{\frac{1}{n}}, \quad (2.2.2.13)$$

$$\sigma_Y = \sigma_0 \left(1 + \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_0} \right)^{\frac{n}{2} \log_{\xi} \left(\frac{C_T}{N_L} \right)}. \quad (2.2.2.14)$$

Здесь $\xi, \eta, \sigma_0, \varepsilon_0, n, N_L$ – задаваемые из физических соображений параметры, причем комбинация значений ξ, η задана в виде невыделенной таблицы в тексте,

в зависимости от величины отношения $\frac{C_T}{N_L}$, при этом

не представлены аргументы относительно того, почему концентрация водорода в ловушках соотносится с плотностью возможных мест пребывания водорода в идеальной кристаллической решетке. Для концентрации связанного в ловушках водорода C_T применяются формула перерасчета с учетом пластических деформаций и уравнение диффузии в соответствии с работой [88]. Результаты моделирования поля пластических деформаций и распределения концентрации водорода используются для обсуждения на качественном уровне возможных вариантов для стального образца с трещиной под действием растягивающей одноосной нагрузки. Сделаны качественные выводы о влиянии отдельных параметров на величину пластической зоны и степень неравномерности распределения водорода.

3. Модели индуцированной водородом локализованной пластичности и растрескивания

Формально в рамках пакета Abaqus HELP- и HEDE-модели можно совместить. HELP использовать при описании пластического течения, а HEDE – при анализе развития трещины из канавки или надреза на образце. Это сделано в двумерной постановке в работе [124]. Смешанная модель применена для определения скорости роста усталостной трещины, с заранее известными параметрами. Авторы указывают на имеющиеся проблемы с определением большого числа параметров и констатируют лишь качественное соответствие результатов моделирования экспериментальным.

Смешанная модель с дополнительным учетом образования пустот под нагрузкой применена для моделирования роста трещины в вязкоупругом материале с надрезом в [113]. При этом использован упрощенный под-

ход [91] к моделированию транспорта водорода и закон сцепления, который от водорода не зависит.

В [125–127] рассматривается задача о росте трещины в хромистой высокопрочной стали 690 вокруг инородного включения в металл. Модель HELP в виде [91] дополнена законом когезионного сцепления, но, в отличие от HEDE, рассматриваются две компоненты усилий и перемещений в вершине трещины – нормальная по отношению к краям включения с индексом n и тангенциальная или параллельная краям включения с индексом t . Усилие, приходящееся на единицу длины линии в вершине трещины, записано как

$$T_n^0 = \frac{\sigma(q, \Gamma) u_n}{q \delta_n}, \quad T_t^0 = \frac{\sigma(q, \Gamma) C \delta_n}{q \delta_t^2},$$

где

$$\sigma(q, \Gamma) = \frac{27 \hat{\sigma}(\Gamma) q (1-q)^2}{4}, \quad q = \sqrt{\left(\frac{u_n}{\delta_n}\right)^2 + \left(\frac{u_t}{\delta_t}\right)^2},$$

$$\hat{\sigma}(\Gamma) = \hat{\sigma}(0) (1 - 0,2362 a^2 J_0 u_n C_T).$$

Здесь u_n, u_t – компоненты относительного перемещения берегов трещины; δ_n, δ_t – максимально возможные компоненты смещения, при превышении которых происходит разрыв связей; a – параметр кристаллической решетки, $J_0 = dS / dS_0$ характеризует деформацию площади берегов трещины; C_T – ловушечная концентрация водорода. С помощью МКЭ получены поля напряжений при растяжении квадратной в плане полосы с единичным инородным включением цилиндрической формы посередине, а для эллиптического цилиндрического – поры в [127].

Сравнивая результаты работ по HELP и HEDE, можно констатировать, что несмотря на значительно большее разнообразие подходов, использованных при разработке HEDE-модели, ее применение, как и HELP-модели, за десятилетия развития не вышло за рамки моделирования простейших опытов по растяжению или изгибу с предварительно надрезанных образцов или образцов с внутренней порой правильной формы. Имеется всего несколько работ, в которых делается попытка применить эти модели к реальным инженерным расчетам последствий взаимодействия водорода со стенками трубопроводов или деформируемым металлическим диском. Этот феномен можно объяснить тем, что обе модели описывают поведение единичной трещины, которая должна быть в металле и иметь известные форму, кривизну вершины, направление и размеры, в противном случае применить HELP- и HEDE-механизмы невозможно. Вместе с тем только в очень редких случаях эти параметры можно заранее, до начала разрушения, определить в реальных конструкциях, восстановление же зародышевых размеров трещин по изломам после разрушения далеко не всегда возможно.

Основным механизмом, определяющим деградацию механических свойств в обеих моделях, является диффузия и захват водорода в ловушки с локализацией повышенных концентраций в вершине трещины. Вместе с тем расчеты, выполненные авторами модели HELP в [91], показывают, что существенные изменения механических свойств в HELP для сталей происходят при локальных относительных массовых концентрациях водорода порядка 10^{-2} , что является недостижимо высокой концентрацией для большинства металлов. Стали, а тем более алюминиевые сплавы, даже при значительно меньших концентрациях самостоятельно растрескиваются вплоть до полного разрушения безо всякой внешней нагрузки.

Расчет локальной пластичности при теоретическом рассмотрении трещины со сферической вершиной показывает, что локальные концентрации водорода в вершине трещины всего в 100 раз выше средних [91]. С учетом того, что средние составляют обычно около 10^{-6} массовых долей, локальные концентрации не превышают 10^{-4} массовых долей. Таким образом, проверочный расчет не подтверждает, что под действием внешних механических нагрузок возможно локальное накопление водорода, необходимое для запуска физических механизмов локальной пластичности. Многие авторы отмечают, что измерение распределения концентраций водорода на микроуровне затруднено, что делает невозможным экспериментальную проверку адекватности примерно половины из уравнений моделей. С другой стороны, это дает возможность варьировать параметры моделей транспорта водорода и сами модели в широких пределах для подгонки результатов моделирования к экспериментальным данным.

Мы вынуждены оставить за рамками рассмотрения многочисленные работы, в которых на качественно-оценочном уровне обсуждается адекватность тех или иных механизмов моделей HELP и HEDE, отправив читателя к обзорам таких работ [128–131, 132].

4. Модели механики частиц

Большое количество опубликованных работ посвящено моделям, построенным на основе метода динамики частиц и молекулярной динамики. Здесь можно указать целую серию работ Куртина с соавторами, предлагающих единый подход к моделированию влияния водорода на свойства металлов [133–140] с заранее известными параметрами дефектов, и большое количество разрозненных работ, в которых используются различные методы динамики частиц, в том числе функционал плотности энергии и др.

С одной стороны, использование стандартных пакетов для метода динамики частиц позволяет авторам статей оставить за кадром основные уравнения движения частиц, рассматривая только элементы функционала плотности; с другой стороны, в большинстве работ нет привязки к континуальной механике, что не позволяет

обсуждать эти модели в рамках механического подхода, обзор которого делается нами.

Исключение составляют немногочисленные работы, в которых методом динамики частиц производится проверка адекватности основных HELP- и HEDE-моделей водородной деградации материалов. Этому посвящены, например, статьи [135, 137, 139].

5. Многоконтинуальные модели водородной хрупкости

Последовательная серия работ по многоконтинуальным моделям влияния водорода на механические свойства металлов принадлежит авторам обзора. Первой работой на эту тему является работа Д.А. Индейцева [141], где заложены основные идеи многоконтинуального подхода к взаимодействию металлов с водородом. Предполагается, что основной континуум моделирует свойства металла, а внутренний, находящийся в металле континуум – свойства водорода как идеальной жидкости, способной химически и механически взаимодействовать с вмещающей сплошной средой. Необходимо отметить, что сама модель базируется на том экспериментальном факте, что для большинства конструкционных сплавов проблемы, связанные с растворенным водородом, начинаются при средних концентрациях на уровне одной миллионной массовой доли, а для современных высокопрочных сплавов и алюминиевых сплавов – 0,1 миллионной массовой доли, т.е. сотен тысяч атомов вмещающего материала на один атом водорода. В этих условиях необходима механическая модель, описывающая влияние малого параметра. Концентрации водорода, участвующего в индуцированном водородом разрушении, настолько малы, что полученные при искусственном насыщении металлов водородом нелинейные зависимости и данные о предельно возможных концентрациях растворенного водорода и эффективных коэффициентах диффузии водорода, связанной с предельным заполнением внутренних ловушек, скорее всего, не актуальны в случаях практического использования конструкционных сплавов, за исключением объектов водородной энергетики и некоторых химических производств, где имеется непосредственный контакт металлов с водородом.

Модель описывает транспорт водорода и напряженно-деформированное состояние обеих сред одной системой уравнений, включающих уравнения баланса импульса и массы. Как такового отдельного уравнения диффузии водорода там нет. Используются три основных предположения:

1. Удельный поток водорода j между связанным и диффузно-подвижным состоянием определяется соотношением

$$j = \alpha(\varepsilon_p)n_L - \beta(\varepsilon_p)n_T, \quad (5.1)$$

где n_L , n_T – фракционные концентрации диффузно-подвижного и связанного водорода по отношению

к атомам вмещающего материала; $\alpha(\varepsilon_p, T)$ и $\beta(\varepsilon_p, T)$ – десорбционный и сорбционный коэффициенты материала; ε_p – норма пластической деформации; T – температура.

2. Определяющие уравнения материала, содержащего водород, получены из соображения о последовательном включении водородных связей в упругую цепочку атомов вмещающего материала, поэтому имеют вид (для одномерного случая)

$$\sigma = \frac{E_0 E_H}{E_H + n_T (E_0 - E_H)} \varepsilon, \quad (5.2)$$

где σ – напряжения; ε – деформации; E_0 – модуль Юнга вмещающего материала; E_H – модуль упругости, соответствующий ослабленным адсорбированным водородом связям внутри металлической матрицы (определяется по экспериментальным данным, как подгоночный параметр) [142].

Механическое взаимодействие осуществляется за счет давления водорода и изменения импульса потоков водорода, химическое, или процесс сорбции водорода, приводит к изменению энергии связей во всей системе, в результате вмещающий материал ослабляется при увеличении энергии связи водорода.

К преимуществам многоконтинуальной модели следует отнести возможность решения задач о динамическом нагружении металла, содержащего водород, в том числе циклическом [143–147], возможность учитывать одновременно внутреннее давление, создаваемое водородом, и влияние водорода на механические характеристики металла [148]. Функции $\alpha(\varepsilon_p, T)$, $\beta(\varepsilon_p, T)$ можно получить как путем простейшей линейной аппроксимации, так и на основании уравнений статистической физики [149], что позволяет с той или иной степенью точности описывать свойства различных материалов.

С помощью би-континуальной модели решены задачи о передаче водорода в соединении двух стальных деталей [146], усталости стержней [147], напряженно-деформированном состоянии стенок газопровода под внутренним давлением газа [148].

6. Модель внутреннего давления

Внедряясь в кристаллическую структуру металла, водород создает дополнительное давление, которое можно учитывать разными способами при расчете напряженно-деформированного состояния металлических образцов.

Например, в [150] предполагается, что в вершине надреза образца имеется нанопора с давлением водорода p , которое предлагается вычислить по формуле, соответствующей закону Сиверта

$$\sqrt{p} \cdot \exp\left(\frac{pV_H}{2RT}\right) = C/S. \quad (6.1)$$

Здесь V_H – удельный молярный объем водорода; C – концентрация водорода в вершине трещины (задается по граничным условиям); S – предельная растворимость. Сделан пересчет J -интеграла с учетом этой поры и проведены сопоставления данных МКЭ расчета развития трещины с данными эксперимента.

Аналогичный подход, но с учетом давления водорода в плоской зародышевой трещине эллиптической формы внутри стенки трубопровода применен в [151], концентрация водорода вычисляется по эмпирической формуле с учетом давления сероводорода и уровня pH во внешней среде.

В работе [152] рассматривается упругая внутренняя энергия, возникающая за счет давления водорода, и предлагается учитывать ее за счет введения эффективного модуля упругости G ,

$$G = G_o (1 - 0,08C_L),$$

где концентрация водорода C_L рассчитывается по формулам (2.2.2.6) из [91].

В работе [153] предлагается учитывать давление водорода, вычисленное по заданной концентрации водорода с помощью формулы (6.1), в вершине трещины радиусом кривизны r при подсчете коэффициента интенсивности напряжений K_I ,

$$K_I = \frac{2P}{\sqrt{\pi}} \sqrt{r}.$$

Давление водорода в поре заданного размера и формы в [154] предлагается определять как давление идеального газа с массой, равной интегралу от полного потока водорода через границу поры. Напряженно-деформированное состояние материала определяется без учета водорода. Диффузионный поток водорода рассчитывается по уравнению в форме (1.7) с учетом среднего нормального напряжения. За временной отрезок, на котором происходит интегрирование, принимается то время, в течение которого осуществляется механическое нагружение. При превышении критического давления водорода в поре, по идее авторов, наступает разрушение материала из-за разрушения дефектов.

В работах [155, 156] для моделирования ползучести, связанной с водородом, вводится линейная зависимость предела текучести и упругих модулей от параметра химического взаимодействия χ , который определяется из уравнений. Этот параметр вычисляется по мере химического взаимодействия $0 \leq \mu \leq 1$ по формуле

$$\chi = \frac{\mu - \mu_0}{1 - \mu_0},$$

где μ_0 – задаваемая константа, а для меры химического взаимодействия записано дифференциальное уравнение

$$\dot{\mu} = \frac{P^m}{s} \exp\left(-\frac{T}{T_0}\right) \ln\left(\frac{(1 - \mu_0)\mu_b}{\mu_0(1 - \mu_b)}\right), \quad (6.2)$$

где P – давление водорода в металле; T – температура; s , m , T_0 , μ_b – константы, подбираемые из эксперимента. Авторы предлагают сначала решать задачу расчета напряженно-деформированного состояния под механической нагрузкой без учета водорода методом конечных элементов, вычислить матрицы жесткости для всей конструкции, затем задать давление водорода, вычислить параметр химического взаимодействия χ , пересчитать матрицы жесткости и снова определить напряженно-деформированное состояние уже с учетом влияния водорода. Если пересчет делать на каждом шаге интегрирования уравнения (6.2), то можно получить зависимость напряжений и деформаций от времени при водородной деградации.

7. Другие модели

В работе [157] предлагается модель развития трещины в насыщенной водородом стали, которая применяется для испытаний на растяжение образцов из стали AISI 4340. Модель базируется на статистиках Ферми-Дирака, но после ряда упрощающих предположений постулируется, что скорость роста трещины пропорциональна скорости изменения концентрации водорода в зоне разрушения \dot{C} ,

$$\left(\frac{da}{dt}\right)_{II} = k\dot{C}.$$

В [158] предлагается после расчета распределения концентраций водорода по модели (1.6) [35] ввести поправки в шаровую часть тензора деформации в виде

$$\varepsilon_{ii}(C) = \varepsilon_{ii}(C=0) - \frac{1}{3} [f\theta^{hid} + (1-f)V_H C],$$

где f – задаваемый коэффициент; θ^{hid} – относительное объемное расширение матрицы металла при образовании гидридов; C – концентрация водорода, определяемая по экспоненциальной формуле (2.1) [43].

Простейшая аппроксимация экспериментальных зависимостей влияния водорода на усталость используется в [159]. В своей модели авторы пользуются простейшей зависимостью типа (2.1) [43] для вычисления полей распределения концентрации водорода C и формулами, прямо связывающими добавку к скорости роста трещины с концентрацией

$$\Delta\left(\frac{da}{dN}\right) = a\Delta K^b C^d,$$

где параметры a , b , d подбираются по экспериментальным кривым зависимости скорости роста трещины от диапазона коэффициента интенсивности напряжений $\frac{da}{dN}(\Delta K)$.

В работе [160] предлагается к значению деформаций металла, вычисленных без учета водорода, добав-

лять так называемую «межзеренную составляющую» ε^{in} , которая определяется путем интегрирования системы уравнений индуцированной водородом ползучести:

$$\begin{aligned}\dot{\varepsilon}^{in} &= A\sigma_0^n C_H \Phi(q), \\ \dot{q} &= D\dot{\varepsilon}^{in},\end{aligned}$$

где A , σ_0 , n , D и функция $\Phi(q)$ определяются экспериментально; C_H – известная средняя концентрация водорода в металле.

При расчете напряженно-деформированного состояния стенок трубопровода авторы работы [161] предлагают использовать кубичную зависимость напряжения от деформации в определяющих соотношениях материала вида

$$\sigma = A\varepsilon - B\varepsilon^3,$$

где параметры A , B являются эмпирическими линейными функциями от концентрации водорода, которая считается одинаковой во всей стенке трубы.

Заключение

Несмотря на большое количество опубликованных работ, можно выделить только пять основных подходов к моделированию влияния водорода на механические свойства материалов.

Подавляющее большинство работ посвящено методам моделирования развития трещин (модели HELP, HEDE, молекулярная динамика – построенные на основе дислокационных представлений, и модели внутреннего давления). Это не дает возможности использовать эти модели для инженерных расчетов на прочность, так как для них необходимо знать о наличии в материале трещины, точно знать ее форму, размеры, направление. С этим связано то, что практическое использование существующих моделей водородной хрупкости ограничено и имеется всего несколько работ, в которых рассматриваются реальные инженерные конструкции.

Би-континуальная модель водородной хрупкости лишена основного недостатка моделей, основанных на

дислокационном подходе, что позволяет с единых позиций рассматривать динамические задачи, связанные процессы перераспределения водорода и изменения напряженно-деформированного состояния.

Многие работы используют закономерности, которые не имеют отношения к рассматриваемой в них задаче. Например, для широкого перечня сортов сталей используются соотношения Софрониса для плотности дислокаций и концентрации водорода в ловушках с конкретными числовыми коэффициентами, полученными для конкретных материалов; практически всегда при моделировании развития трещин в сталях используются законы водородной деградации Серебринского, полученные им для чистого монокристаллического железа при деформации кристалла в определенном кристаллографическом направлении. Этот недостаток нивелируется множеством подгоночных параметров, главным из которых фактически является величина локальной концентрации водорода в вершине трещины.

Экспериментальное количественное измерение локального распределения концентраций водорода до сих пор трудная, нерешенная задача. Это не позволяет полноценно верифицировать модели, включающие специальную часть, связанную с описанием транспорта водорода. Поэтому следующий этап уточнения и развития моделей водородной хрупкости неизбежно потребует новых экспериментальных результатов, развития методов измерения локальной концентрации растворенного в металлах водорода как в модельных образцах, так и в частях реальных конструкций.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-18-50319 «Экспансия»).

Acknowledgments

The reported study was funded by the Russian Foundation for Basic Research (project number 19-18-50319 «Expansion»).

Библиографический список

1. Frey M.E. // Comptes Rendus. – 1861. – Vol. 52. – P. 323.
2. Johnson W.H. II. On some remarkable changes produced in iron and steel by the action of hydrogen and acids // Proceedings of the Royal Society of London. – 1875. – Vol. 23, no. 156–163 – P. 168–179.
3. Gesner G.W. U.S. Patent No. 657,426, 1898.
4. Andrew T., Bellis T.K. U.S. Patent No. 695,264, 1902.
5. Bontempi A. U.S. Patent No. 835,495, 1906.
6. Kinzel A.B. U.S. Patent No. 1,888,132, 1932.
7. Richardson O.W., Nicol J., Parnell T.I. The diffusion of hydrogen through hot platinum // The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. – 1904. – Vol. 8, no. 43. – P. 1–29.

8. Andrew J.H. A few suggestions on the theories of occlusion of gases by metals // Transactions of the Faraday Society. – 1919. – Vol. 14. – P. 232–239.

9. Parr S.W., Straub F.G. Embrittlement of Boiler Platel // Industrial & Engineering Chemistry. – 1927. – Vol. 19, no. 5. – P. 620–622.
- Hultgren A. Flakes or Hair-Cracks in Chromium Steel, with a Discussion of Shattered Zones and Transverse Fissures in Rails // Journal of the Iron and Steel Institute. – 1925. – Vol. 111. – P. 113.

10. Keiichi Ota On the importance of hydrogen-brittleness as a defect in steel qualities // Tetsu-to-Hagane. – 1938. – Vol. 24, no. 11. – P. 1005–1013.

11. Zapffe C.A., Sims C.E. Hydrogen embrittlement, internal stress and defects in steel // Trans. AIME. – 1941. – Vol. 145. – P. 225–271.

12. Jordan L., Eckman J.R. Determination of Oxygen and Hydrogen in Metals by Fusion in Vacuum // *Industrial & Engineering Chemistry*. – 1926. – Vol. 18, no. 3. – P. 279–282.
13. Brown W.D. "Apparatus for determining hydrogen in steel." U.S. Patent No. 2,387,878. 30 Oct. 1945.
14. Scafe R.M. Determination of Hydrogen in Steel Sampling and Analysis by Vacuum Extraction // *Transactions of the American Institute of Mining, Metallurgical and Petroleum Engineers*. – 1945. – Vol. 162. – P. 375.
15. О благоприятном влиянии водорода на технологическую пластичность титановых сплавов / Б.А. Колачев [и др.] // *Технология легких сплавов*. – 1974. – № 7. – С. 32.
16. Колачев Б.А., Носов В.К. Водородное пластифицирование и сверхпластичность титановых сплавов // *Физика металлов и металловедение*. – 1984. – Т. 57, № 2. – С. 288–297.
17. Feng X.Q., Huang Y. Mechanics of smart-cut® technology // *International Journal of Solids and Structures*. – 2004. – Vol. 41, no. 16–17. – P. 4299–4320.
18. "Smart cut": a promising new SOI material technology / M. Bruel [et al.] // *IEEE International SOI Conference Proceedings*. – 1995. – P. 178–179.
19. Silicon carbide on insulator formation using the Smart Cut process / L. Di Cioccio [et al.] // *Electronics Letters*. – 1996. – Vol. 32, no. 12. – P. 1144–1145.
20. Колачев Б.А. Водородная хрупкость металлов. – М.: *Металлургия*, 1985. – 216 с.
21. Fick A. Ueber diffusion // *Annalen der Physik*. – 1855. – Vol. 170, no. 1. – P. 59–86.
22. Arrhenius S.A. Über die Dissociationswärme und den Einfluß der Temperatur auf den Dissociationsgrad der Elektrolyte // *Z. Phys. Chem.* – 1889. – Vol. 4, no. 1. – P. 96–116.
23. Gorsky W.S. Theorie der elastischen Nachwirkung in ungeordneten Mischkristallen (elastische Nachwirkung zweiter Art) // *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*. – 1935. – Vol. 8. – P. 457–471.
24. Darken L.S., Smith R.P. Behavior of Hydrogen in Steel During and After Immersion in Acid // *Corrosion*. – 1949. – Vol. 5, no. 1. – P. 1–16.
25. McNabb A., Foster P.K. A new analysis of the diffusion of hydrogen in iron and ferritic steels // *Trans. AIME*. – 1963. – Vol. 227. – P. 618–627.
26. Pressouyre G.M. A classification of hydrogen traps in steel // *Metallurgical Transactions A*. – 1979. – Vol. 10, no. 10. – P. 1571–1573.
27. Pressouyre G.M. Hydrogen traps, repellers, and obstacles in steel; Consequences on hydrogen diffusion, solubility, and embrittlement // *Metallurgical Transactions A*. – 1983. – Vol. 14, no. 10. – P. 2189–2193.
28. Lecoester F., Chene J., Noel D. Hydrogen embrittlement of the Ni-base Alloy 600 correlated with hydrogen transport by dislocations // *Materials Science and Engineering: A*. – 1999. – Vol. 262, no. 1–2. – P. 173–183.
29. Hirth J.P. Effects of hydrogen on the properties of iron and steel // *Metallurgical Transactions A*. – 1980. – Vol. 11, no. 6. – P. 861–890.
30. Oriani R.A. The diffusion and trapping of hydrogen in steel // *Acta Metallurgica*. – 1970. – Vol. 18, no. 1. – P. 147–157.
31. Zaika Y.V., Bormatova E.P. Parametric identification of hydrogen permeability model by delay times and conjugate equations // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2011. – Vol. 36, no. 1. – P. 1295–1305.
32. Zaika Y.V., Kostikova E.K. Computer simulation of hydrogen thermodesorption // *Advances in Materials Science and Applications*. – 2014. – Vol. 3, no. 3. – P. 120–129.
33. Numerical modeling of thermal desorption mass spectroscopy (TDS) for the study of hydrogen diffusion and trapping interactions in metals / C. Hurley, F. Martin, L. Marchetti, J. Chene, C. Blanc, E. Andrieu // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2015. – Vol. 40, no. 8. – P. 3402–3414.
34. Kirchheim R. Hydrogen solubility and diffusivity in defective and amorphous metals // *Progress in Materials Science*. – 1988. – Vol. 32, no. 4. – P. 261–325.
35. Shewmon P.G. Diffusion in solids. – N. Y.: Mc Graw-Hill Book Co, Inc., 1963. – 200 p.
36. Serebrinsky S., Carter E.A., Ortiz M. A quantum-mechanically informed continuum model of hydrogen embrittlement // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2004. – Vol. 52, no. 10. – P. 2403–2430.
37. Polyanskiy A.M., Polyanskiy V.A., Yakovlev Yu.A. Experimental determination of parameters of multichannel hydrogen diffusion in solid probe // *Int. J. of Hydrogen Energy*. – 2014. – Vol. 39, no. 30. – P. 17381–17390.
38. Григорьев И.С. Физические величины: справочник. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
39. Гельд П.В., Рябов Р.А., Мохрачева Л.П. Водород и физические свойства металлов и сплавов. – М.: Наука. – 1985. – 230 с.
40. Hall E.O. The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results // *Proceedings of the Physical Society. Section B*. – 1951. – Vol. 64, no. 9. – P. 747–753.
41. The synergistic action and interplay of hydrogen embrittlement mechanisms in steels and iron: Localized plasticity and decohesion / M.B. Djukic [et al.] // *Engineering Fracture Mechanics*. – 2019. – Vol. 216. – P. 106528.
42. Jemblie L., Olden V., Akselsen O.M. A review of cohesive zone modelling as an approach for numerically assessing hydrogen embrittlement of steel structures // *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. – 2017. – Vol. 375, no. 2098. – P. 20160411.
43. Troiano A.R. The role of hydrogen and other interstitials in the mechanical behavior of metals // *Trans. ASM*. – 1960. – Vol. 52. – P. 54–80.
44. Oriani R.A. A mechanistic theory of hydrogen embrittlement of steels // *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*. – 1972. – Vol. 76, no. 8. – P. 848–857.
45. Oriani R.A., Josephic P.H. Equilibrium aspects of hydrogen-induced cracking of steels // *Acta metallurgica*. – 1974. – Vol. 22, no. 9. – P. 1065–1074.
46. Specimen thickness effect on the property of hydrogen embrittlement in single edge notch tension testing of high strength pipeline steel / Y. Li [et al.] // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2018. – Vol. 43, 32. – P. 15575–15585.
47. Gerberich W.W., Marsh P.G., Hoehn J.W. Hydrogen induced cracking mechanisms-are there critical experiments? // *Proceedings of the 1994 5th International Conference on the Effect of Hydrogen on the Behavior of Materials*. – Minerals, Metals & Materials Soc (TMS), 1996. – P. 539–551.
48. Olden V., Alvaro A., Akselsen O.M. Hydrogen diffusion and hydrogen influenced critical stress intensity in an API X70 pipeline steel welded joint—Experiments and FE simulations // *International journal of hydrogen energy*. – 2012. – Vol. 37, no. 15. – P. 11474–11486.
49. Elmukashfi E., Tarleton E., Cocks A.C.F. A modelling framework for coupled hydrogen diffusion and mechanical behaviour of engineering components // *Computational Mechanics*. – 2020. – P. 1–32.
50. Cohesive zone modelling of hydrogen induced cracking on the interface of clad steel pipes / L. Jemblie [et al.] // *Internat*

- tional Journal of Hydrogen Energy. – 2017. – Vol. 42, no. 47. – P. 28622–28634.
51. Díaz A., Alegre J.M., Cuesta I.I. Numerical simulation of hydrogen embrittlement and local triaxiality effects in notched specimens // *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. – 2017. – Vol. 90. – P. 294–302.
 52. Chan K.S., Moody J. A Hydrogen-Induced Decohesion Model for Treating Cold Dwell Fatigue in Titanium-Based Alloys // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 2016. – Vol. 47, 5. – P. 2058–2072.
 53. A phase-field model for solute-assisted brittle fracture in elastic-plastic solids / F.P. Duda [et al.] // *International Journal of Plasticity*. – 2018. – Vol. 102. – P. 16–40.
 54. Scheider I., Pfüff M., Dietzel W. Simulation of hydrogen assisted stress corrosion cracking using the cohesive model // *Engineering Fracture Mechanics*. – 2008. – Vol. 75, no. 15. – P. 4283–4291.
 55. Rimoli J.J., Ortiz M. A three-dimensional multiscale model of intergranular hydrogen-assisted cracking // *Philosophical Magazine*. – 2010. – Vol. 90, no. 21. – P. 2939–2963.
 56. Olden V., Thaulow C., Johnsen R. Modelling of hydrogen diffusion and hydrogen induced cracking in supermartensitic and duplex stainless steels // *Materials & design*. – 2008. – Vol. 29, no. 10. – P. 1934–1948.
 57. Modelling of stress-corrosion cracking by using peridynamics / D. De Meo [et al.] // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2016. – Vol. 41, no. 15. – P. 6593–6609.
 58. Prediction on Initiation of Hydrogen-Induced Delayed Cracking in High-Strength Steel Based on Cohesive Zone Modeling / Y. Wang [et al.] // *ASME 2014 Pressure Vessels and Piping Conference*. – 2014. – Vol. 6B.
 59. Multi-scale simulation of hydrogen influenced critical stress intensity in high Co–Ni secondary hardening steel / C. Wang [et al.] // *Materials & Design*. – 2015. – Vol. 87. – P. 501–506.
 60. Failure analysis of pre-stressed high strength steel bars used in a wind turbine foundation: Experimental and FE simulation / Y.F. Wang [et al.] // *Materials and Corrosion*. – 2016. – Vol. 67, no. 4. – P. 406–419.
 61. A cohesive zone model to simulate fatigue crack propagation under high pressure gaseous hydrogen / G. Bilotta [et al.] // *Advanced Materials Research*. – 2014. – Vol. 891. – P. 765–770.
 62. Sun Z., Benabou L. Modélisation de la fragilisation dynamique d'un matériau polycristallin sous traction monotone. 11e colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2013, Giens, France. (hal-01717064)
 63. Wu J.Y., Mandal T.K., Nguyen V.P. A phase-field regularized cohesive zone model for hydrogen assisted cracking // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 2020. – Vol. 358. – P. 112614.
 64. A cohesive zone model to simulate the hydrogen embrittlement effect on a high-strength steel / G. Gobbi [et al.] // *Frattura ed Integrità Strutturale*. – 2016. – Vol. 10, no. 35. – P. 260–270.
 65. Alvaro A., Olden V., Akselsen O.M. 3D cohesive modelling of hydrogen embrittlement in the heat affected zone of an X70 pipeline steel // *International journal of hydrogen energy*. – 2013. – Vol. 38, no. 18. – P. 7539–7549.
 66. Alvaro A., Olden V., Akselsen O.M. 3D cohesive modelling of hydrogen embrittlement in the heat affected zone of an X70 pipeline steel–Part II // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2014. – Vol. 39, no. 7. – P. 3528–3541.
 67. Application of hydrogen influenced cohesive laws in the prediction of hydrogen induced stress cracking in 25% Cr duplex stainless steel / V. Olden [et al.] // *Engineering Fracture Mechanics*. – 2008. – Vol. 75, no. 8. – P. 2333–2351.
 68. Hydrogen-enhanced fatigue crack growth behaviors in a ferritic Fe-3wt% Si steel studied by fractography and dislocation structure analysis / D. Wan [et al.] // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2019. – Vol. 44, no. 10. – P. 5030–5042.
 69. Martínez-Pañeda E., Golahmar A., Niordson C.F. A phase field formulation for hydrogen assisted cracking // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 2018. – Vol. 342. – P. 742–761.
 70. On the suitability of slow strain rate tensile testing for assessing hydrogen embrittlement susceptibility / E. Martínez-Pañeda [et al.] // *Corrosion Science*. – 2020. – Vol. 163. – P. 108291.
 71. Influence of hydrogen from cathodic protection on the fracture susceptibility of 25% Cr duplex stainless steel–Constant load SENT testing and FE-modelling using hydrogen influenced cohesive zone elements / V. Olden [et al.] // *Engineering Fracture Mechanics*. – 2009. – Vol. 76, no. 7. – P. 827–844.
 72. Multi-scale simulation of hydrogen influenced critical stress intensity in high Co–Ni secondary hardening steel / C. Wang [et al.] // *Materials & Design*. – 2015. – Vol. 87. – P. 501–506.
 73. A uniform hydrogen degradation law for high strength steels / H. Yu [et al.] // *Engineering Fracture Mechanics*. – 2016. – Vol. 157. – P. 56–71.
 74. Vergani L., Gobbi G., Colombo C. A numerical model to study the hydrogen embrittlement effect on low-alloy steels // *Key Engineering Materials*. – 2014. – Vol. 577. – P. 513–516.
 75. Cohesive zone modeling of hydrogen-induced delayed intergranular fracture in high strength steels / W. Wu [et al.] // *Results in Physics*. – 2018. – Vol. 11. – P. 591–598.
 76. Influence of hydrogen from CP On the fracture susceptibility of 25% Cr duplex stainless steel–FE modeling of constant load testing using hydrogen influenced cohesive zone elements / V. Olden [et al.] // *The Eighteenth International Offshore and Polar Engineering Conference*. – 2008.
 77. Olden V., Alvaro A., Akselsen O.M. Hydrogen diffusion and hydrogen influenced critical stress intensity in an API X70 pipeline steel welded joint–Experiments and FE simulations // *International journal of hydrogen energy*. – 2012. – Vol. 37, no. 15. – P. 11474–11486.
 78. Prediction of hydrogen embrittlement in 25% Cr duplex stainless steel based on cohesive zone simulation / V. Olden [et al.] // *ASME 2009 28th International Conference on Ocean, Offshore and Arctic Engineering*. – 2009. – P. 209–218.
 79. Olden V., Akselsen O.M. FE Simulation of Cold Cracking Susceptibility in X70 Structural Steel Welded Joints // *ASME 2011 30th International Conference on Ocean, Offshore and Arctic Engineering*. – 2011. – P. 445–454.
 80. Moriconi C., Hénaff G., Halm D. Cohesive zone modeling of fatigue crack propagation assisted by gaseous hydrogen in metals // *International journal of fatigue*. – 2014. – Vol. 68. – P. 56–66.
 81. The role of plasticity and hydrogen flux in the fracture of a tempered martensitic steel: A new design of mechanical test until fracture to separate the influence of mobile from deeply trapped hydrogen / D. Guedes [et al.] // *Acta Materialia*. – 2020. – Vol. 186. – P. 133–148.
 82. Del Busto S., Betegón C., Martínez-Pañeda E. A cohesive zone framework for environmentally assisted fatigue // *Engineering Fracture Mechanics*. – 2017. – Vol. 185. – P. 210–226.
 83. Benabou L. Coupled stress-diffusion modelling of grain boundary segregation and dynamic embrittlement in a copper alloy //

Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2019. – Vol. 27, no. 4. – P. 045007.

84. Anand L., Mao Y., Talamini B. On modeling fracture of ferritic steels due to hydrogen embrittlement // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2019. – Vol. 122. – P. 280–314.

85. A fully coupled implementation of hydrogen embrittlement in FE analysis / G. Gobbi [et al.] // *Advances in Engineering Software*. – 2019. – Vol. 135. – pp. 102673.

86. Gobbi G., Colombo C., Vergani L. Sensitivity analysis of a 2D cohesive model for hydrogen embrittlement of AISI 4130 // *Engineering Fracture Mechanics*. – 2016. – Vol. 167. – P. 101–111.

87. Tarleton E. Incorporating hydrogen in mesoscale models // *Computational Materials Science*. – 2019. – Vol. 163. – P. 282–289.

88. Taha A., Sofronis P. A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement // *Eng Fract Mech*. – 2001. – Vol. 68. – P. 803–837.

89. Sofronis P., McMeeking R. Numerical analysis of hydrogen transport near a blunting crack tip // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1989. – Vol. 37, no. 3. – P. 317–350.

90. A statistical, physical-based, micro-mechanical model of hydrogen-induced intergranular fracture in steel / P. Novak, R. Yuan, B.P. Somerday, P. Sofronis, R.O. Ritchie // *J Mech Phys Solids*. – 2010. – Vol. 58, no. 2. – P. 206–226.

91. Sofronis P., Liang Y., Aravas N. Hydrogen induced shear localization of the plastic flow in metals and alloys // *European Journal of Mechanics – A/Solids*. – 2001. – Vol. 20. – P. 857–872.

92. Hydrogen Embrittlement in Fe3% Si, Visited by Nanomechanical Testing and Cohesive Zone Simulation / V. Olden [et al.] // *International Hydrogen Conference (IHC 2016): Materials Performance in Hydrogen Environments*. – ASME Press, 2017. – 800 p.

93. McLean D. Grain boundaries in metals. – GB.: Clarendon Press, 1957. – 346 p.

94. Van der Ven A., Ceder G. Impurity induced van der Waals transition during decohesion // *Phys. Review B*. – 2003. – Vol. 67. – P. 060101.

95. Benedetti I., Gulizzi V., Milazzo A. Grain-boundary modelling of hydrogen assisted intergranular stress corrosion cracking // *Mechanics of Materials*. – 2018. – Vol. 117. – P. 137–151.

96. Wang X., Benabou L. First-principles investigation of intergranular fracture in copper by grain boundary segregation of sulfur // *Journal of Engineering Materials and Technology*. – 2018. – Vol. 140, no. 1.

97. Needleman A. A Continuum Model for Void Nucleation by Inclusion Debonding // *Appl. Mech. ASME*. – 1987. – Vol. 54, no. 3. – P. 525–531.

98. Cohesive zone modeling of hydrogen-induced stress cracking in 25% Cr duplex stainless steel / V. Olden, C. Thaulow, R. Johnsen, E. Otby // *Scripta Mater*. – 2007. – Vol. 57. – P. 615–618.

99. Nguyen O., Ortiz M. Coarse-graining and renormalization of atomistic binding relations and universal macroscopic cohesive behavior // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2002. – Vol. 50, no. 8. – P. 1727–1741.

100. Olden V., Thaulow C., Johnsen R. Modelling of hydrogen diffusion and hydrogen induced cracking in supermartensitic and duplex stainless steels // *Materials & design*. – 2008. – Vol. 29, no. 10. – P. 1934–1948.

101. Jothi S., Croft T.N., Brown S.G.R. Multiscale multiphysics model for hydrogen embrittlement in polycrystalline nickel // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2015. – Vol. 645. – P. S500–S504.

102. Y.F. Wang [et al.] Effect of Strain Induced α' Martensite on Concentration of Hydrogen Around a Crack Tip in Austenitic Stainless Steels: FE Simulation // *Procedia Engineering*. – 2015. – Vol. 130. – P. 746–753.

103. Charles Y., Nguyen H.T., Gaspérini M. FE simulation of the influence of plastic strain on hydrogen distribution during an U-bend test // *International Journal of Mechanical Sciences*. – 2017. – Vol. 120. – P. 214–224.

104. Birnbaum H.K., Sofronis P. Hydrogen-enhanced localized plasticity – a mechanism for hydrogen-related fracture // *Mater. Sci. Eng. A*. – 1994. – Vol. 176, no. 1–2. – P. 191–202.

105. Sofronis P., Birnbaum H.K. Mechanics of the hydrogen-dislocation-impurity interactions I. Increasing shear modulus // *J. Mech. Phys. Solid*. – 1995. – Vol. 43, no. 1. – P. 49–90.

106. Beachem C.D. A new model for hydrogen-assisted cracking (hydrogen ‘embrittlement’) // *Metall. Trans*. – 1972. – Vol. 3, no. 2. – P. 437–451.

107. Robertson I.M., Birnbaum H.K. An HVEM study of hydrogen effects on the deformation and fracture of nickel // *Acta Metall*. – 1986. – Vol. 34, no. 3. – P. 353–366.

108. Bond G.M., Robertson I.M., Birnbaum H.K. The influence of hydrogen on deformation and fracture processes in high-strength aluminum alloys // *Acta Metall*. – 1978. – Vol. 35, no. 9. – P. 2289–2296.

109. Hydrogen embrittlement and grain boundary fracture / I.M. Robertson, T. Tabata, W. Wei, F. Heubaum, H.K. Birnbaum // *Scripta Metall*. – 1984. – Vol. 18, no. 8. – P. 841–846.

110. Ferreira P.J., Robertson I.M., Birnbaum H.K. Hydrogen effects on the interaction between dislocations, *Acta Mater*. – 1998. – Vol. 46, no. 5. – P. 1749–1757.

111. Ferreira P.J., Robertson I.M., Birnbaum H.K. Hydrogen effects on the character of dislocations in high-purity aluminum // *Acta Mater*. – 1999. – Vol. 47, no. 10. – P. 2991–2998.

112. Liang Y., Sofronis P., Aravas N. On the effect of hydrogen on plastic instabilities in metals // *Acta Materialia*. – 2003. – Vol. 51, no. 9. – P. 2717–2730.

113. Sobotka J.C., Dodds Jr R.H., Sofronis P. Effects of hydrogen on steady, ductile crack growth: Computational studies // *International Journal of Solids and Structures*. – 2009. – Vol. 46, no. 22–23. – P. 4095–4106.

114. Ahn D.C., Sofronis P., Dodds Jr R.H. On hydrogen-induced plastic flow localization during void growth and coalescence // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2007. – Vol. 32, no. 16. – P. 3734–3742.

115. Finite element simulation of hydrogen transport during plastic bulging of iron submitted to gaseous hydrogen pressure / Y. Charles [et al.] // *Engineering Fracture Mechanics*. – 2019. – Vol. 218. – P. 106580.

116. Kumnick A.J., Johnson H.H. Deep trapping states for hydrogen in deformed iron // *Acta Metallurgica*. – 1980. – Vol. 28, no. 1. – P. 33–39.

117. Adaptation of hydrogen transport models at the polycrystal scale and application to the U-bend test / Y. Charles [et al.] // *Procedia Structural Integrity*. – 2018. – Vol. 13. – P. 896–901.

118. Hassan H., Govind K., Hartmaier A. Micromechanical modelling of coupled crystal plasticity and hydrogen diffusion // *Philosophical Magazine*. – 2019. – Vol. 99, no. 1. – P. 92–115.

119. Numerical Analysis of Hydrogen Transport Using a Hydrogen-Enhanced Localized Plasticity Mechanism / S.K. Kim [et al.] // *Proceedings of the World Academy of Science, Engineering and Technology*. – 2012. – Vol. 58. – P. 398–401.

120. Yu H., Cocks A., Tarleton E. Discrete dislocation plasticity HELPs understand hydrogen effects in bcc materials // *Jour-*

- nal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2019. – Vol. 123. – P. 41–60.
121. Yu H., Cocks A.C.F., Tarleton E. Simulating hydrogen in fcc materials with discrete dislocation plasticity // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2020. – Vol. 45, iss. 28. – P. 14565–14577
122. Katarov I.H., Pashov D.L., Paxton A.T. Hydrogen embrittlement I. Analysis of hydrogen-enhanced localized plasticity: Effect of hydrogen on the velocity of screw dislocations in α -Fe // *Physical Review Materials*. – 2017. – Vol. 1, no. 3. – P. 033602.
123. Effects of hydrogen-altered yielding and work hardening on plastic-zone evolution: A finite-element analysis / D. Sasaki [et al.] // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2015. – Vol. 40, no. 31. – P. 9825–9837.
124. Modelling the effect of hydrogen on ductile tearing resistance of steels: dedicated to Professor Dr. Hermann Riedel on the occasion of his 65th birthday / R. Falkenberg [et al.] // *International journal of materials research*. – 2010. – Vol. 101, no. 8. – P. 989–996.
125. Liang Y., Sofronis P. Toward a phenomenological description of hydrogen-induced decohesion at particle/matrix interfaces // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2003. – Vol. 51, no. 8. – P. 1509–1531.
126. Liang Y., Sofronis P. On hydrogen-induced void nucleation and grain boundary decohesion in nickel-base alloys // *J. Eng. Mater. Technol.* – 2004. – Vol. 126, no. 4. – P. 368–377.
127. Effect of hydrogen trapping on void growth and coalescence in metals and alloys / Y. Liang [et al.] // *Mechanics of Materials*. – 2008. – Vol. 40, no. 3. – P. 115–132.
128. Lynch S. Hydrogen embrittlement phenomena and mechanisms // *Corrosion Reviews*. – 2012. – Vol. 30, no. 3–4. – P. 105–123.
129. The synergistic action and interplay of hydrogen embrittlement mechanisms in steels and iron: localized plasticity and decohesion / M.B. Djukic [et al.] // *Engineering Fracture Mechanics*. – 2019. – P. 106528.
130. Gerberich W. Modeling hydrogen induced damage mechanisms in metals // *Gaseous hydrogen embrittlement of materials in energy technologies*. – Woodhead Publishing, 2012. – P. 209–246.
131. Enumeration of the hydrogen-enhanced localized plasticity mechanism for hydrogen embrittlement in structural materials / M.L. Martin [et al.] // *Acta Materialia*. – 2019. – Vol. 165. – P. 734–750.
132. Анализ теоретических представлений о механизмах водородного растрескивания металлов и сплавов / Н.Н. Сергеев [и др.] // *Известия Юго-Западного государственного университета*. – 2017. – Т. 21, № 3. – С. 6–33.
133. Song J., Curtin W.A. A nanoscale mechanism of hydrogen embrittlement in metals // *Acta Materialia*. – 2011. – Vol. 59, no. 4. – P. 1557–1569.
134. Song J., Curtin W.A. Atomic mechanism and prediction of hydrogen embrittlement in iron // *Nature materials*. – 2013. – Vol. 12, no. 2. – P. 145–151.
135. Song J., Curtin W.A. Mechanisms of hydrogen-enhanced localized plasticity: an atomistic study using α -Fe as a model system // *Acta Materialia*. – 2014. – Vol. 68. – P. 61–69.
136. Hydrogen–vacancy–dislocation interactions in α -Fe / A. Tehrani [et al.] // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2016. – Vol. 25, no. 2. – P. 025001.
137. Song J., Soare M., Curtin W.A. Testing continuum concepts for hydrogen embrittlement in metals using atomistics // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2010. – Vol. 18, no. 4. – P. 045003.
138. Tehrani A., Curtin W.A. Atomistic study of hydrogen embrittlement of grain boundaries in nickel: I. Fracture // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2017. – Vol. 101. – P. 150–165.
139. Tehrani A., Yin B., Curtin W.A. Softening and hardening of yield stress by hydrogen–solute interactions // *Philosophical Magazine*. – 2017. – Vol. 97, no. 6. – P. 400–418.
140. Atomistic investigation of the influence of hydrogen on dislocation nucleation during nanoindentation in Ni and Pd / X. Zhou [et al.] // *Acta Materialia*. – 2016. – Vol. 116. – P. 364–369.
141. Indeitsev D.A., Semenov B.N. About a model of structural-phase transformations under hydrogen influence // *Acta Mechanica*. – 2008. – Vol. 195, no. 1–4. – P. 295–304.
142. Беляев А.К., Кудинова Н.Р., Полянский В.А., Яковлев Ю.А. Описание деформации и разрушения материалов, содержащих водород с помощью реологической модели // *НТВ СПбГПУ. Физико-математические науки НТВ-ФМ*. – 2015. – № 3(225). – С. 57–65
143. Benchmark Study of Measurements of Hydrogen Diffusion in Metals / D.G. Arseniev [et al.] // *Dynamical Processes in Generalized Continua and Structures*. – Springer, Cham, 2019. – P. 37–61.
144. Surface effect of the waves of plastic deformation and hydrogen distribution in metals / A.K. Belyaev [et al.] // *2017 Days on Diffraction (DD)*. – IEEE, 2017. – P. 45–50.
145. Belyaev A.K., Blekhman I.I., Polyanskiy V.A. Equation for the evolution of trapped hydrogen in an elastic rod subjected to high-frequency harmonic excitation // *Acta Mechanica*. – 2016. – Vol. 227, no. 5. – P. 1515–1518.
146. Belyaev A.K., Polyanskiy V.A., Yakovlev Y.A. Hydrogen as an indicator of high-cycle fatigue // *Procedia IUTAM*. – 2015. – Vol. 13. – P. 138–143.
147. Параметрическая неустойчивость при циклическом нагружении как причина разрушения материалов, содержащих водород / А.К. Беляев [и др.] // *Изв. РАН. МТТ*. – 2012. – № 5. – С. 53–57
148. Belyaev A.K., Polyanskiy V.A., Yakovlev Y.A. Stresses in a pipeline affected by hydrogen // *Acta Mechanica*. – 2012. – Vol. 223, no. 8. – P. 1611–1619.
149. Индейцев Д.А., Осипова Е.В., Полянский В.А. Статистическая модель индуцированного водородом разрушения металлов // *ДАН Физика, Механика*. – 2014. – Т. 459, № 3. – С. 294–297.
150. Simulation of the effect of internal pressure on the integrity of hydrogen pre-charged BCC and FCC steels in SSRT test conditions / J.G. Sezgin [et al.] // *Engineering Fracture Mechanics*. – 2019. – Vol. 216. – P. 106505.
151. An effective finite element model for the prediction of hydrogen induced cracking in steel pipelines / A. Traidia [et al.] // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2012. – Vol. 37, no. 21. – P. 16214–16230.
152. Carrasco J.P., dos Santos N.C., Silva A.A. Numerical Simulation of the Hydrogen Effect on the Deformations of Test Body Models Loaded Under Tensile Stress // *International Journal of Modeling and Simulation for the Petroleum Industry*. – 2007. – Vol. 1, no. 1. – P. 55–62.
153. Model of parameters controlling resistance of pipeline steels to hydrogen-induced cracking / A. Traidia [et al.] // *Corrosion*. – 2014. – Vol. 70, no. 1. – P. 87–94.
154. Спёвак Л.Ф., Федотов В.П., Нефедова О.А. Параллельные алгоритмы для анализа прочности наводороженных конструкций // *Программные продукты и системы*. – 2012. – № 3. – С. 235–239.
155. Бубнов С.А., Овчинников И.Г. Моделирование ползучести и разрушения неравномерно прогретого толстостенного трубопровода в условиях высокотемпературной водо-

родной коррозии // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия: Физико-математические науки. – 2011. – № 4 (25). – С. 67–74.

156. Белов А.В. [и др.] К вопросу об использовании различных моделей учета воздействия водородосодержащей среды при расчете несущей способности стальных оболочечных конструкций // Современные проблемы науки и образования. – 2012. – № 6. – С. 101–109.

157. Gao M., Wei R.P. A "hydrogen partitioning" model for hydrogen assisted crack growth // Metallurgical Transactions A. – 1985. – Vol. 16, no. 11. – P. 2039–2050.

158. Varias A.G., Feng J.L., Sui Y.K. Finite element analysis for steady-state hydride-induced fracture in metals by composite

model // International Journal of Solids and Structures; 7-8. – 2006. – Vol. 43. – P. 2174–2192

159. Modeling the fatigue crack growth of X100 pipeline steel in gaseous hydrogen / R.L. Amaro [et al.] // International Journal of Fatigue. – 2014. – Vol. 59. – P. 262–271.

160. Длительная прочность стали и сварных соединений трубопроводов под воздействием водорода и напряженного состояния / К.Д. Басиев [и др.] // Экспозиция Нефть Газ. – 2017. – № 1 (54). – С. 42–45.

161. Моделирование водородного охрупчивания трубопровода как тонкостенной цилиндрической оболочки из нелинейно упругого материала / Л.А. Амина [и др.] // Вестник евразийской науки. – 2017. – Т. 9, № 4 (41). – С. 1–16.

References

1. Frey M.E. *Comptes Rendus*, 1861, vol. 52–p. 323.

2. Johnson W.H. II. On some remarkable changes produced in iron and steel by the action of hydrogen and acids. *Proceedings of the Royal Society of London*, 1875, vol. 23, no. 156-163, pp. 168-179.

3. Gesner G.W. U.S. Patent no. 657,426, 1898.

4. Andrew T., Bellis T.K. U.S. Patent no. 695,264, 1902.

5. Bontempi A. U.S. Patent no. 835,495, 1906.

6. Kinzel A.B. U.S. Patent no. 1,888,132, 1932.

7. Richardson O.W., Nicol J., Parnell T.I. The diffusion of hydrogen through hot platinum. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 1904, vol. 8, no. 43, pp. 1-29.

8. Andrew J.H. A few suggestions on the theories of occlusion of gases by metals. *Transactions of the Faraday Society*, 1919, vol. 14, pp. 232-239.

9. Parr S.W., Straub F.G. Embrittlement of Boiler Plate. *Industrial & Engineering Chemistry*, 1927, vol. 19, no. 5, pp. 620-622. Hultgren A. Flakes or Hair-Cracks in Chromium Steel, with a Discussion of Shattered Zones and Transverse Fissures in Rails. *Journal of the Iron and Steel Institute*, 1925, vol. 111, pp. 113.

10. Keiichi Ota On the importance of hydrogen-brittleness as a defect in steel qualities. *Tetsu-to-Hagane*, 1938, vol. 24, no. 11, pp. 1005-1013.

11. Zapffe C.A., Sims C. E. Hydrogen embrittlement, internal stress and defects in steel. *Trans. AIME*, 1941, vol. 145, pp. 225-271.

12. Jordan L., Eckman J.R. Determination of Oxygen and Hydrogen in Metals by Fusion in Vacuum. *Industrial & Engineering Chemistry*, 1926, vol. 18, no. 3, pp. 279-282.

13. Brown W.D. "Apparatus for determining hydrogen in steel." U.S. Patent no. 2,387,878. 30 Oct. 1945.

14. Scafe R.M. Determination of Hydrogen in Steel Sampling and Analysis by Vacuum Extraction. *Transactions of the American Institute of Mining. Metallurgical and Petroleum Engineers*, 1945, vol. 162, pp. 375.

15. Kolachev B.A. et al. O blagopriyatnom vliianii vodoroda na tekhnologicheskuiu plastichnost' titanovykh splavov [The beneficial effect of hydrogen on the technological plasticity of titanium alloys]. *Tekhnologiya legkikh splavov*, 1974, no. 7, pp. 32.

16. Kolachev B.A., Nosov V.K. Vodorodnoe plastifitsirovanie i sverkhplastichnost' titanovykh splavov [Hydrogen plasticization and superplasticity of titanium alloys]. *Fizika metallov i metallovedenie*, 1984, vol. 57, no. 2, pp. 288-297.

17. Feng X. Q., Huang Y. Mechanics of smart-cut® technology. *International Journal of Solids and Structures*, 2004, vol. 41., no. 16-17, pp. 4299-4320.

18. Bruel M. et al. "Smart cut": a promising new SOI material technology. *IEEE International SOI Conference Proceedings*, 1995, pp. 178-179.

19. Di Cioccio L. et al. Silicon carbide on insulator formation using the Smart Cut process. *Electronics Letters*, 1996, vol. 32, no. 12, pp. 1144-1145.

20. Kolachev B.A. Vodorodnaia khрупkost' metallov [Hydrogen fragility of metals]. *Moscow, Metallurgiya*, 1985, 216 p.

21. Fick A. Ueber diffusion. *Annalen der Physik*, 1855, vol. 170, no. 1, pp. 59-86.

22. Arrhenius S.A. Über die Dissociationswärme und den Einfluß der Temperatur auf den Dissociationsgrad der Elektrolyte. *Z. Phys. Chem*, 1889, vol. 4, no. 1, pp. 96-116.

23. Gorsky W.S. Theorie der elastischen Nachwirkung in ungeordneten Mischkristallen (elastische Nachwirkung zweiter Art). *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, 1935, vol. 8, pp. 457-471.

24. Darken L.S., Smith R.P. Behavior of Hydrogen in Steel During and After Immersion in Acid. *Corrosion*, 1949, vol. 5, no. 1, pp. 1-16.

25. McNabb A., Foster P.K. A new analysis of the diffusion of hydrogen in iron and ferritic steels. *Trans. AIME*, 1963, vol. 227, pp. 618-627.

26. Pressouyre G.M. A classification of hydrogen traps in steel. *Metallurgical Transactions A*, 1979, vol.10, no. 10, pp. 1571-1573.

27. Pressouyre G.M. Hydrogen traps, repellers, and obstacles in steel; Consequences on hydrogen diffusion, solubility, and embrittlement. *Metallurgical Transactions A*, 1983, vol.14, no. 10, pp. 2189-2193.

28. Lecoester F., Chene J., Noel D. Hydrogen embrittlement of the Ni-base Alloy 600 correlated with hydrogen transport by dislocations. *Materials Science and Engineering: A*, 1999, vol.262, no. 1-2, pp. 173-183.

29. Hirth J.P. Effects of hydrogen on the properties of iron and steel. *Metallurgical Transactions A*, 1980, vol. 11, no. 6, pp. 861-890.

30. Oriani R.A. The diffusion and trapping of hydrogen in steel. *Acta Metallurgica*, 1970, vol. 18, no. 1, pp. 147-157.

31. Zaika Y.V., Bormatova E.P. Parametric identification of hydrogen permeability model by delay times and conjugate equations. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2011, vol. 36, no. 1, pp. 1295-1305.

32. Zaika Y.V., Kostikova E.K. Computer simulation of hydrogen thermodesorption. *Advances in Materials Science and Applications*, 2014, vol. 3, no. 3, pp. 120-129.

33. Hurley C., Martin F., Marchetti L., Chene J., Blanc C., Andrieu E. Numerical modeling of thermal desorption mass spec-

- troscopy (TDS) for the study of hydrogen diffusion and trapping interactions in metals. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2015, vol. 40, no. 8, pp. 3402-3414.
34. Kirchheim R. Hydrogen solubility and diffusivity in defective and amorphous metals. *Progress in Materials Science*, 1988, vol. 32, no. 4, pp. 261-325.
35. Shewmon P.G. Diffusion in solids, N. Y.: Mc Graw-Hill Book Co, Inc., 1963, 200 pp.
36. Serebrinsky S., Carter E. A., Ortiz M. A quantum-mechanically informed continuum model of hydrogen embrittlement. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2004, vol. 52, no. 10, pp. 2403-2430.
37. Polyanskiy A.M., Polyanskiy V.A., Yakovlev Yu.A. Experimental determination of parameters of multichannel hydrogen diffusion in solid probe. *Int. J. of Hydrogen Energy*, 2014, vol. 39, no. 30, pp. 17381-17390.
38. Grigor'ev I.S. Fizicheskie velichiny. Spravochnik [Physical quantities. Reference book]. Moscow, *Energoatomizdat*, 1991, 1232 p.
39. Gel'd P.V., Riabov R.A., Mokhracheva L.P. Vodorod i fizicheskie svoystva metallov i splavov [Hydrogen and physical properties of metals and alloys]. Moscow, *Nauka*, 1985, 230 p.
40. Hall E.O. The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 1951, vol. 64, no. 9, pp. 747-753.
41. Djukic M.B. et al. The synergistic action and interplay of hydrogen embrittlement mechanisms in steels and iron: Localized plasticity and decohesion. *Engineering Fracture Mechanics*, 2019, vol. 216, pp. 106528.
42. Jemblie L., Olden V., Akselsen O. M. A review of cohesive zone modelling as an approach for numerically assessing hydrogen embrittlement of steel structures. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2017, vol. 375, no. 2098, pp. 20160411
43. Troiano A.R. The role of hydrogen and other interstitials in the mechanical behavior of metals. *Trans. ASM*, 1960, vol. 52, pp. 54-80.
44. Oriani R.A. A mechanistic theory of hydrogen embrittlement of steels. *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, 1972, vol. 76, no. 8, pp. 848-857.
45. Oriani R.A., Josephic P.H. Equilibrium aspects of hydrogen-induced cracking of steels. *Acta metallurgica*, 1974, vol. 22, no. 9, pp. 1065-1074.
46. Li Y. et al. Specimen thickness effect on the property of hydrogen embrittlement in single edge notch tension testing of high strength pipeline steel. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2018, vol. 43, vol. 32, pp. 15575-15585.
47. Gerberich W. W., Marsh P. G., Hoehn J. W. Hydrogen induced cracking mechanisms-are there critical experiments. *Proceedings of the 1994 5th International Conference on the Effect of Hydrogen on the Behavior of Materials, Minerals, Metals & Materials Soc (TMS)*, 1996, pp. 539-551.
48. Olden V., Alvaro A., Akselsen O.M. Hydrogen diffusion and hydrogen influenced critical stress intensity in an API X70 pipeline steel welded joint—Experiments and FE simulations. *International journal of hydrogen energy*, 2012, vol. 37, no. 15, pp. 11474-11486.
49. Elmukashfi E., Tarleton E., Cocks A. C. F. A modelling framework for coupled hydrogen diffusion and mechanical behaviour of engineering components. *Computational Mechanics*, 2020, pp. 1-32.
50. Jemblie L. et al. Cohesive zone modelling of hydrogen induced cracking on the interface of clad steel pipes. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, vol. 42, no. 47, pp. 28622-28634.
51. Díaz A., Alegre J.M., Cuesta I.I. Numerical simulation of hydrogen embrittlement and local triaxiality effects in notched specimens. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2017, vol. 90, pp. 294-302.
52. Chan K.S., Moody J. A Hydrogen-Induced Decohesion Model for Treating Cold Dwell Fatigue in Titanium-Based Alloys. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2016, vol. 47, vol. 5, pp. 2058-2072.
53. Duda F.P. et al. A phase-field model for solute-assisted brittle fracture in elastic-plastic solids. *International Journal of Plasticity*, 2018, vol. 102, pp. 16-40.
54. Scheider I., Pfuff M., Dietzel W. Simulation of hydrogen assisted stress corrosion cracking using the cohesive model. *Engineering Fracture Mechanics*, 2008, vol. 75, no. 15, pp. 4283-4291.
55. Rimoli J.J., Ortiz M. A three-dimensional multiscale model of intergranular hydrogen-assisted cracking. *Philosophical Magazine*, 2010, vol. 90, no. 21, pp. 2939-2963.
56. Olden V., Thaulow C., Johnsen R. Modelling of hydrogen diffusion and hydrogen induced cracking in supermartensitic and duplex stainless steels. *Materials & design*, 2008, vol. 29, no. 10, pp. 1934-1948.
57. De Meo D. et al. Modelling of stress-corrosion cracking by using peridynamics. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2016, vol. 41, no. 15, pp. 6593-6609.
58. Wang Y. et al. Prediction on Initiation of Hydrogen-Induced Delayed Cracking in High-Strength Steel Based on Cohesive Zone Modeling. *ASME 2014 Pressure Vessels and Piping Conference*, 2014, vol. 6B.
59. Wang C. et al. Multi-scale simulation of hydrogen influenced critical stress intensity in high Co–Ni secondary hardening steel. *Materials & Design*, 2015, vol. 87, pp. 501-506.
60. Wang Y.F. et al. Failure analysis of pre-stressed high strength steel bars used in a wind turbine foundation: Experimental and FE simulation. *Materials and Corrosion*, 2016, vol. 67, no. 4, pp. 406-419.
61. Bilotta G. et al. A cohesive zone model to simulate fatigue crack propagation under high pressure gaseous hydrogen. *Advanced Materials Research*, 2014, vol. 891, pp. 765-770.
62. Sun Z., Benabou L. Modélisation de la fragilisation dynamique d'un matériau polycristallin sous traction monotone. 11e colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2013, Giens, France. (hal-01717064)
63. Wu J.Y., Mandal T.K., Nguyen V.P. A phase-field regularized cohesive zone model for hydrogen assisted cracking. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, vol. 358, p. 112614.
64. Gobbi G. et al. A cohesive zone model to simulate the hydrogen embrittlement effect on a high-strength steel. *Frattura ed Integrità Strutturale*, 2016, vol. 10, no. 35, pp. 260-270.
65. Alvaro A., Olden V., Akselsen O.M. 3D cohesive modelling of hydrogen embrittlement in the heat affected zone of an X70 pipeline steel. *International journal of hydrogen energy*, 2013, vol. 38, no. 18, pp. 7539-7549.
66. Alvaro A., Olden V., Akselsen O.M. 3D cohesive modelling of hydrogen embrittlement in the heat affected zone of an X70 pipeline steel—Part II. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2014, vol. 39, no. 7, pp. 3528-3541.
67. Olden V. et al. Application of hydrogen influenced cohesive laws in the prediction of hydrogen induced stress cracking in 25% Cr duplex stainless steel. *Engineering Fracture Mechanics*, 2008, vol. 75, no. 8, pp. 2333-2351.

68. Wan D. et al. Hydrogen-enhanced fatigue crack growth behaviors in a ferritic Fe-3wt% Si steel studied by fractography and dislocation structure analysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019, vol. 44, no. 10, pp. 5030-5042.
69. Martínez-Pañeda E., Golahmar A., Niordson C.F. A phase field formulation for hydrogen assisted cracking. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2018, vol. 342, pp. 742-761.
70. Martínez-Pañeda E. et al. On the suitability of slow strain rate tensile testing for assessing hydrogen embrittlement susceptibility. *Corrosion Science*, 2020, vol. 163, pp. 108291.
71. Olden V. et al. Influence of hydrogen from cathodic protection on the fracture susceptibility of 25% Cr duplex stainless steel—Constant load SENT testing and FE-modelling using hydrogen influenced cohesive zone elements. *Engineering Fracture Mechanics*, 2009, vol. 76, no. 7, pp. 827-844.
72. Wang C. et al. Multi-scale simulation of hydrogen influenced critical stress intensity in high Co–Ni secondary hardening steel //Materials & Design, 2015, T. 87, C. 501-506.
73. Yu H. et al. A uniform hydrogen degradation law for high strength steels. *Engineering Fracture Mechanics*, 2016, vol. 157, pp. 56-71.
74. Vergani L., Gobbi G., Colombo C. A numerical model to study the hydrogen embrittlement effect on low-alloy steels. *Key Engineering Materials*, 2014, vol. 577, pp. 513-516.
75. Wu W. et al. Cohesive zone modeling of hydrogen-induced delayed intergranular fracture in high strength steels. *Results in Physics*, 2018, vol. 11, pp. 591-598.
76. Olden V. et al. Influence of hydrogen from CP On the fracture susceptibility of 25% Cr duplex stainless steel-FE modeling of constant load testing using hydrogen influenced cohesive zone elements. *The Eighteenth International Offshore and Polar Engineering Conference*, 2008.
77. Olden V., Alvaro A., Akselsen O.M. Hydrogen diffusion and hydrogen influenced critical stress intensity in an API X70 pipeline steel welded joint—Experiments and FE simulations. *International journal of hydrogen energy*, 2012, vol. 37, no. 15, pp. 11474-11486.
78. Olden V. et al. Prediction of hydrogen embrittlement in 25% Cr duplex stainless steel based on cohesive zone simulation. ASME 2009 28th International Conference on Ocean, Offshore and Arctic Engineering, 2009, pp. 209-218.
79. Olden V., Akselsen O.M. FE Simulation of Cold Cracking Susceptibility in X70 Structural Steel Welded Joints. ASME 2011 30th International Conference on Ocean. Offshore and Arctic Engineering, 2011, pp. 445-454.
80. Moriconi C., Hénaff G., Halm D. Cohesive zone modeling of fatigue crack propagation assisted by gaseous hydrogen in metals. *International journal of fatigue*, 2014, vol. 68, pp. 56-66.
81. Guedes D. et al. The role of plasticity and hydrogen flux in the fracture of a tempered martensitic steel: A new design of mechanical test until fracture to separate the influence of mobile from deeply trapped hydrogen. *Acta Materialia*, 2020, vol. 186, pp. 133-148.
82. Del Busto S., Betegón C., Martínez-Pañeda E. A cohesive zone framework for environmentally assisted fatigue. *Engineering Fracture Mechanics*, 2017, vol. 185, pp. 210-226.
83. Benabou L. Coupled stress-diffusion modelling of grain boundary segregation and dynamic embrittlement in a copper alloy. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2019, vol. 27, no. 4, pp. 045007.
84. Anand L., Mao Y., Talamini B. On modeling fracture of ferritic steels due to hydrogen embrittlement. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2019, vol. 122, pp. 280-314.
85. Gobbi G. et al. A fully coupled implementation of hydrogen embrittlement in FE analysis. *Advances in Engineering Software*, 2019, vol. 135, pp. 102673.
86. Gobbi G., Colombo C., Vergani L. Sensitivity analysis of a 2D cohesive model for hydrogen embrittlement of AISI 4130. *Engineering Fracture Mechanics*, 2016, vol. 167, pp. 101-111.
87. Tarleton E. Incorporating hydrogen in mesoscale models. *Computational Materials Science*, 2019, vol. 163, pp. 282-289.
88. Taha A., Sofronis P. A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement. *Eng Fract Mech*, 2001, vol. 68, pp. 803-837.
89. P. Sofronis, R. McMeeking Numerical analysis of hydrogen transport near a blunting crack tip. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1989, vol. 37, no. 3, pp. 317-350.
90. Novak P, 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, vol.58, no.2, pp.206-226
91. Sofronis P, Liang Y, Aravas N. Hydrogen induced shear localization of the plastic flow in metals and alloys. *European Journal of Mechanics – A/Solids*, 2001, vol. 20, pp.857-872.
92. Olden V. et al. Hydrogen Embrittlement in Fe3% Si, Visited by Nanomechanical Testing and Cohesive Zone Simulation.in Book: International Hydrogen Conference (IHC 2016): Materials Performance in Hydrogen Environments. ASME Press, 2017, 800p.
93. D. McLean Grain boundaries in metals, GB. Clarendon Press, 1957, 346 p.
94. Van der Ven, A., Ceder, G. Impurity induced van der Waals transition during decohesion. *Phys. Review B*. 2003, vol. 67, p. 060101.
95. Benedetti I., Gulizzi V., Milazzo A. Grain-boundary modelling of hydrogen assisted intergranular stress corrosion cracking. *Mechanics of Materials*, 2018, vol. 117, pp. 137-151
96. Wang X., Benabou L. First-principles investigation of intergranular fracture in copper by grain boundary segregation of sulfur. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 2018, vol. 140, no. 1.
97. Needleman, A. A Continuum Model for Void Nucleation by Inclusion Debonding. *Appl. Mech. ASME*, 1987, vol. 54, no. 3, pp. 525-531.
98. Olden, V., Thaulow, C., Johnsen, R., Otby, E. Cohesive zone modeling of hydrogen-induced stress cracking in 25% Cr duplex stainless steel. *Scripta Mater*, 2007, vol. 57, pp. 615-618.
99. Nguyen O., Ortiz M. Coarse-graining and renormalization of atomistic binding relations and universal macroscopic cohesive behavior. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2002, vol. 50, no. 8, pp. 1727-1741.
100. Olden V., Thaulow C., Johnsen R. Modelling of hydrogen diffusion and hydrogen induced cracking in supermartensitic and duplex stainless steels. *Materials & design*, 2008, vol. 29, no. 10, pp. 1934-1948.
101. Jothi S., Croft T.N., Brown S.G.R. Multiscale multiphysics model for hydrogen embrittlement in polycrystalline nickel. *Journal of Alloys and Compounds*, 2015, vol. 645, pp. S500-S504.
102. Wang Y. F. et al. Effect of Strain Induced α' Martensite on Concentration of Hydrogen Around a Crack Tip in Austenitic Stainless Steels: FE Simulation. *Procedia Engineering*, 2015, vol. 130, pp. 746-753.
103. Charles Y., Nguyen H. T., Gaspérini M. FE simulation of the influence of plastic strain on hydrogen distribution during an U-bend test. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2017, vol. 120, pp. 214-224.

104. H.K. Birnbaum, P. Sofronis, Hydrogen-enhanced localized plasticity – a mechanism for hydrogen-related fracture. *Mater. Sci. Eng. A.*, 1994, vol. 176, no.1-2, pp.191-202.
105. P. Sofronis, H.K. Birnbaum, Mechanics of the hydrogen-dislocation-impurity interactions I. Increasing shear modulus. *J. Mech. Phys. Solid*, 1995, vol. 43, no. 1, pp. 49-90.
106. C.D. Beachem, “A new model for hydrogen-assisted cracking (hydrogen ‘embrittlement’). *Metall. Trans*, 1972, vol. 3, no.2, pp. 437-451.
107. I.M. Robertson, H.K. Birnbaum, An HVEM study of hydrogen effects on the deformation and fracture of nickel. *Acta Metall*, 1986, vol.34, no.3, pp. 353-366.
108. G.M. Bond, I.M. Robertson, H.K. Birnbaum, The influence of hydrogen on deformation and fracture processes in high-strength aluminum alloys. *Acta Metall*, 1978, vol. 35, no. 9, pp. 2289-2296.
109. I.M. Robertson, T. Tabata, W. Wei, F. Heubaum, H.K. Birnbaum, Hydrogen embrittlement and grain boundary fracture. *Scripta Metall*, 1984, vol.18, no. 8. pp. 841-846.
110. P.J. Ferreira, I.M. Robertson, H.K. Birnbaum, Hydrogen effects on the interaction between dislocations. *Acta Mater*, 1998, vol.46, no. 5, pp.1749-1757.
111. P.J. Ferreira, I.M. Robertson, H.K. Birnbaum, Hydrogen effects on the character of dislocations in high-purity aluminum. *Acta Mater.*, 1999, vol.47, no. 10, pp. 2991-2998.
112. Liang Y., Sofronis P., Aravas N. On the effect of hydrogen on plastic instabilities in metals. *Acta Materialia*, 2003, vol. 51, no. 9, pp. 2717-2730.
113. Sobotka J. C., Dodds Jr R. H., Sofronis P. Effects of hydrogen on steady, ductile crack growth: Computational studies. *International Journal of Solids and Structures*, 2009, vol. 46, no. 22-23, pp. 4095-4106.
114. Ahn D. C., Sofronis P., Dodds Jr R. H. On hydrogen-induced plastic flow localization during void growth and coalescence. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2007, vol. 32, no. 16, pp. 3734-3742.
115. Charles Y. et al. Finite element simulation of hydrogen transport during plastic bulging of iron submitted to gaseous hydrogen pressure. *Engineering Fracture Mechanics*, 2019, vol. 218, pp. 106580.
116. Kumnick A. J., Johnson H. H. Deep trapping states for hydrogen in deformed iron. *Acta Metallurgica*, 1980, vol. 28, no. 1, pp. 33-39.
117. Charles Y. et al. Adaptation of hydrogen transport models at the polycrystal scale and application to the U-bend test. *Procedia Structural Integrity*, 2018, vol. 13, pp. 896-901.
118. Hassan H., Govind K., Hartmaier A. Micromechanical modelling of coupled crystal plasticity and hydrogen diffusion. *Philosophical Magazine*, 2019, vol. 99, no. 1, pp. 92-115.
119. Kim S. K. et al. Numerical Analysis of Hydrogen Transport Using a Hydrogen-Enhanced Localized Plasticity Mechanism. Proceedings of the World Academy of Science. *Engineering and Technology*, 2012, vol. 58, pp. 398-401.
120. Yu H., Cocks A., Tarleton E. Discrete dislocation plasticity HELPs understand hydrogen effects in bcc materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2019, vol. 123, pp. 41-60.
121. Yu H., Cocks A. C. F., Tarleton E. Simulating hydrogen in fcc materials with discrete dislocation plasticity. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2020, vol. 45, iss. 28, pp. 14565-14577
122. Katarov I.H., Pashov D.L., Paxton A.T. Hydrogen embrittlement I. Analysis of hydrogen-enhanced localized plasticity: Effect of hydrogen on the velocity of screw dislocations in α -Fe. *Physical Review Materials*, 2017, vol. 1, no. 3, pp. 033602.
123. Sasaki D. et al. Effects of hydrogen-altered yielding and work hardening on plastic-zone evolution: A finite-element analysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2015, vol. 40, no. 31, pp. 9825-9837.
124. Falkenberg R. et al. Modelling the effect of hydrogen on ductile tearing resistance of steels: dedicated to Professor Dr. Hermann Riedel on the occasion of his 65th birthday. *International journal of materials research*, 2010, vol. 101, no. 8, pp. 989-996.
125. Liang Y., Sofronis P. Toward a phenomenological description of hydrogen-induced decohesion at particle/matrix interfaces. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2003, vol. 51, no. 8, pp. 1509-1531.
126. Liang Y., Sofronis P. On hydrogen-induced void nucleation and grain boundary decohesion in nickel-base alloys. *J. Eng. Mater. Technol*, 2004, vol. 126, no. 4, pp. 368-377.
127. Liang Y. et al. Effect of hydrogen trapping on void growth and coalescence in metals and alloys. *Mechanics of Materials*, 2008, vol. 40, no. 3, pp. 115-132.
128. Lynch S. Hydrogen embrittlement phenomena and mechanisms. *Corrosion Reviews*, 2012, vol. 30, no. 3-4, pp. 105-123.
129. Djukic M. B. et al. The synergistic action and interplay of hydrogen embrittlement mechanisms in steels and iron: localized plasticity and decohesion. *Engineering Fracture Mechanics*, 2019, pp. 106528.
130. Gerberich W. Modeling hydrogen induced damage mechanisms in metals. Gaseous hydrogen embrittlement of materials in energy technologies. *Woodhead Publishing*, 2012, pp. 209-246.
131. Martin M. L. et al. Enumeration of the hydrogen-enhanced localized plasticity mechanism for hydrogen embrittlement in structural materials. *Acta Materialia*, 2019, vol. 165, pp. 734-750.
132. Sergeev N. N. et al. Analiz teoreticheskikh predstavlenii o mekhanizmakh vodorodnogo rastreskivaniia metallov i splavov [Analysis of theoretical concepts on the mechanisms of hydrogen cracking of metals and alloys]. *Izvestiia Iugo-Zapadnogo gosudarstvennogo universiteta*, 2017, vol. 21, no. 3, pp. 6-33.
133. Song J., Curtin W. A. A nanoscale mechanism of hydrogen embrittlement in metals. *Acta Materialia*, 2011, vol. 59, no. 4, pp. 1557-1569.
134. Song J., Curtin W. A. Atomic mechanism and prediction of hydrogen embrittlement in iron. *Nature materials*, 2013, vol. 12, no. 2, pp. 145-151.
135. Song J., Curtin W. A. Mechanisms of hydrogen-enhanced localized plasticity: an atomistic study using α -Fe as a model system. *Acta Materialia*, 2014, vol. 68, pp. 61-69.
136. Tehrani A. et al. Hydrogen–vacancy–dislocation interactions in α -Fe. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2016, vol. 25, no. 2, pp. 025001.
137. Song J., Soare M., Curtin W. A. Testing continuum concepts for hydrogen embrittlement in metals using atomistics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010, vol.18, no. 4, pp. 045003.
138. Tehrani A., Curtin W. A. Atomistic study of hydrogen embrittlement of grain boundaries in nickel: I. Fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2017, vol. 101, pp. 150-165.
139. Tehrani A., Yin B., Curtin W. A. Softening and hardening of yield stress by hydrogen–solute interactions. *Philosophical Magazine*, 2017, vol. 97, no. 6, pp. 400-418.
140. Zhou X. et al. Atomistic investigation of the influence of hydrogen on dislocation nucleation during nanoindentation in Ni and Pd. *Acta Materialia*, 2016, vol. 116, pp. 364-369.
141. Indeitsev D. A., Semenov B. N. About a model of structural-phase transformations under hydrogen influence. *Acta Mechanica*, 2008, vol. 195, no. 1-4, pp. 295-304.

142. Belyaev A. K. et al. The description of deformation and destruction of materials containing hydrogen by means of rheological model. *Saint Petersburg Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2015, vol. 1, no. 3, pp. 305-314.
143. Arseniev D. G. et al. Benchmark Study of Measurements of Hydrogen Diffusion in Metals. *Dynamical Processes in Generalized Continua and Structures*, Springer, Cham, 2019, pp. 37-61.
144. Belyaev A.K. et al. Surface effect of the waves of plastic deformation and hydrogen distribution in metals. 2017 Days on Diffraction (DD), *IEEE*, 2017, pp. 45-50.
145. Belyaev A. K., Blekhman I. I., Polyanskiy V. A. Equation for the evolution of trapped hydrogen in an elastic rod subjected to high-frequency harmonic excitation. *Acta Mechanica*, 2016, vol. 227, no. 5, pp. 1515-1518.
146. Belyaev A.K., Polyanskiy V.A., Yakovlev Y.A. Hydrogen as an indicator of high-cycle fatigue. *Procedia IUTAM*, 2015, vol. 13, pp. 138-143.
147. Belyaev A. K. et al. Parametric instability in cyclic loading as the cause of fracture of hydrogenous materials. *Mechanics of Solids*, 2012, vol. 47, no. 5, pp. 533-537.
148. Belyaev A.K., Polyanskiy V.A., Yakovlev Y.A. Stresses in a pipeline affected by hydrogen. *Acta Mechanica*, 2012, vol. 223, no. 8, pp. 1611-1619.
149. Indeitsev D.A., Osipova E.V., Polyanskiy V.A. A statistical model of hydrogen-induced fracture of metals. *Doklady Physics, Pleiades Publishing*, 2014, vol. 59, no. 11, pp. 534-538.
150. Sezgin J.G. et al. Simulation of the effect of internal pressure on the integrity of hydrogen pre-charged BCC and FCC steels in SSRT test conditions. *Engineering Fracture Mechanics*, 2019, vol. 216, pp. 106505.
151. Traidia A. et al. An effective finite element model for the prediction of hydrogen induced cracking in steel pipelines. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2012, vol. 37, no. 21, pp. 16214-16230.
152. Carrasco J.P., dos Santos N.C., Silva A.A. Numerical Simulation of the Hydrogen Effect on the Deformations of Test Body Models Loaded Under Tensile Stress. *International Journal of Modeling and Simulation for the Petroleum Industry*, 2007, vol. 1, no. 1, pp. 55-62.
153. Traidia A. et al. Model of parameters controlling resistance of pipeline steels to hydrogen-induced cracking. *Corrosion*, 2014, vol. 70, no. 1, pp. 87-94.
154. Spevak L.F., Fedotov V.P., Nefedova O. A. Parallel'nye algoritmy dlia analiza prochnosti navodorozhennykh konstrukttsii [Parallel Algorithms for Strength Analysis of Hydrogen Structures]. *Programmnye produkty i sistemy*, 2012, no. 3, pp. 235-239.
155. Bubnov S.A., Ovchinnikov I.G. Modelirovanie polzuchesti i razrusheniia neravnomerno progetogo tolstostennogo truboprovoda v usloviakh vysokotemperaturnoi vodorodnoi korrozii [Modeling of creep and fracture of unevenly heated thick-walled pipeline under conditions of high-temperature hydrogen corrosion]. *Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Seriya Fiziko-matematicheskie nauki*, 2011, no. 4 (25). – pp. 67–74
156. Belov A.V. et al. K voprosu ob ispol'zovanii razlichnykh modelei ucheta vozdeistviia vodorodosoderzhashchei sredy pri raschete nesushchei sposobnosti stal'nykh oblochechnykh konstrukttsii [To the question of using various models for taking into account the effect of a hydrogen-containing medium in calculating the bearing capacity of steel shell structures]. *Sovremennye problemy nauki i obrazovaniia*, 2012, no. 6, pp. 101-109.
157. Gao M., Wei R.P. A “hydrogen partitioning” model for hydrogen assisted crack growth. *Metallurgical Transactions A*, 1985, vol. 16, no. 11, pp. 2039-2050.
158. Varias A.G., Feng J.L., Sui Y.K. Finite element analysis for steady-state hydride-induced fracture in metals by composite model. *International Journal of Solids and Structures*; 7-8, 2006, vol. 43. pp. 2174–2192
159. Amaro R. L. et al. Modeling the fatigue crack growth of X100 pipeline steel in gaseous hydrogen. *International Journal of Fatigue*, 2014, vol. 59, pp. 262-271.
160. Basiev K.D. et al. Dlitel'naia prochnost' stali i svarnykh soedinenii truboprovodov pod vozdeistviem vodoroda i napriazhennogo sostoiianiia [Long-term strength of steel and welded joints of pipelines under the influence of hydrogen and stress]. *Ekspozitsiia Nefi' Gaz*, 2017, no. 1 (54). pp. 42-45
161. Amina L.A. et al. Modelirovanie vodorodnogo okhrupchivaniia truboprovoda kak tonkostennoi tsilindricheskoi oblochki iz nelineino uprugogo materiala [Modeling of hydrogen embrittlement of a pipeline as a thin-walled cylindrical shell of a nonlinear elastic material]. *Vestnik evraziiskoi nauki*, 2017, vol. 9, no. 4(41), pp. 1-16