

HYDROGEN SEGREGATION IN THE FIELD RESIDUAL STRESSES

Vlasov N.M., Fedik, I.I *

Scientific Industrial Association “Luch”,
24, Zheleznodorozhnaya St., Podolsk, Moscow region, 142100, Russia

Introduction

Residual stresses occur in the materials while carrying out technological operations. The character of stresses distribution has an essential effect on diffusion processes running. For example, the substitutional impurities having a larger atom radius (in relation to the basic metal) migrate into the tension stresses area, and impurities having a small atom radius migrate into the compression stresses area. The solid solution segregation from the impurities of various kinds comes about in such a manner [1,2]. Hydrogen belongs to introduction impurities. Such impurities increase the crystal lattice parameters. They behave like the substitution impurities of a larger atom radius. The objective of this paper is the analysis of hydrogen atoms segregation kinetics within a cylindrical cladding with the residual stresses. The choice of such a model system is caused by the following reasons. Firstly, obtaining of the residual stresses by cutting and adding (removing) part of the material followed by the connection of the cut edges is possible in the cylindrical cladding. Secondly, the logarithmic dependence on a radial coordinate of the first invariant of the residual stresses tensor allows to obtain the exact analytical solution of the diffusion equation in the field of forces.

Results and discussion

The hydrogen atoms interact with the residual stresses having opposite signs. The interaction potential is determined by the relation

$$V = -\frac{\sigma_{ii}}{3} \delta v \quad (1)$$

where σ_{ii} - first invariant of the residual stresses tensor, δv - crystal volume change

when placing hydrogen atoms. For a hydrogen atom $\delta v > 0$ and so $\sigma_{ii} > 0$ potential V takes a negative value. It corresponds to the hydrogen atoms attraction to the tensile stress area. For $\sigma_{ii} < 0$ and $\delta v > 0$ potential V takes a positive value. The hydrogen atoms are displaced out of the compression stresses area. Kinetics of the hydrogen segregation is described by a non-stationary diffusion equation in the field of potential V

$$\frac{1}{D} \frac{\partial C}{\partial t} = \Delta C \pm \frac{\nabla(C \nabla V)}{kT}, \quad r_0 < r < R,$$
$$C(r,0)=0, \quad C(r_0,t)=C_p^1, \quad C(R,t)=C_p^2, \quad (2)$$

where D - diffusion coefficient of hydrogen atoms, r_0 and R – inside and outside radiuses of the cylindrical cladding, k – Boltzmann constant, T - absolute temperature, C_p^1 and C_p^2 -equilibrium atoms concentrations on the boundaries. The positive value of the second member of the right equation part (2) corresponds to acceleration of the diffusion process kinetics from the inner cladding surface. It is caused by the character of the residual stresses distribution: tension on the inner surface and compression on the outer one. The negative value of this member accelerates hydrogen atoms diffusion from the outer cladding surface. In this case the compression stresses are changed with the tension stresses and accelerates the hydrogen atoms diffusion. Physical sense of the initial and boundaries conditions of the problem (2) is obvious. At the initial moment the hydrogen atoms concentration is equal to zero. The boundary conditions at r_0 and R signify that the equilibrium hydrogen concentration remains on the boundaries area in correspondence with the interaction potential V . The exact analytical problem solution (2) was obtained for system Zr-H. The principle of superposition was applied when solving the

* Fax: 2391749; E-mail: iifedik@podolsk.ru

problem. The diffusion processes are examined from the inner and outer cladding boundaries. It is connected with the character of the residual stresses distribution. The latter ones lead to changing symmetry of the diffusion equation for the specific value of potential V . The residual stresses define the equilibrium concentration on the cladding boundaries and of hydrogen atoms segregation kinetics.

Conclusions

The residual stresses within the cylindrical cladding change the character of the diffusion processes running for hydrogen atoms. The segregation kinetics is described with the non-stationary diffusion equation in the field of the forces under the corresponding initial and boundaries conditions. The potential of the hydrogen atom interaction with the residual stresses field logarithmically depends on the radial coordinate. The exact analytical solution

of the diffusion equation was obtained taking into account the residual stresses distribution. Acceleration of the process kinetics is defined by the diffusion equation symmetry and the values of the equilibrium hydrogen concentration on the area boundaries. In dependence on the conditions one or another factor takes preference.

References

1. Vlasov N.M., Fedik I.I. Decomposition solid solution in the field residual stresses. Dokl.Acad. Nauk 2002; 382 (2): 186-189.
2. Vlasov N.M., Fedik I.I. Hydrogen segregation in the area of threefold junctions of grain boundaries. Int J. Hydrogen Energy 2002, 27:921-926.

СЕГРЕГАЦИЯ ВОДОРОДА В ПОЛЕ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ

Власов Н.М., Федик И.И.*

НИИ НПО «Луч», ул. Железнодорожная, Подольск
Московской области, 142100, Россия

Введение

Остаточные напряжения возникают в материале изделий при проведении технологических операций. Характер распределения напряжений оказывает существенное влияние на протекание диффузионных процессов. Так, например, примеси замещения большого атомного радиуса (по отношению к основному металлу) мигрируют в область напряжений растяжения, а примеси малого атомного радиуса – в область напряжений сжатия. Так происходит расслоение твердого раствора из примесей замещения разного сорта [1,2]. Водород принадлежит к примесям внедрения. Такие примеси увеличивают параметр кристаллической решетки. Они ведут себя аналогично примесям замещения большого атомного радиуса. Целью данной работы является анализ кинетики сегрегации атомов водорода в цилиндрической оболочке с остаточными напряжениями. Выбор такой модельной системы обусловлен следующими причинами. Во-первых, в цилиндрической оболочке возможно получение остаточных напряжений путем разреза и добавления (исключения) части материала с последующим соединением берегов разреза. Во-вторых, логарифмическая зависимость от радиальной координаты первого инварианта тензора остаточных напряжений позволяет получить точное аналитическое решение уравнения диффузии в поле сил.

Результаты и обсуждение

Атомы водорода взаимодействуют с остаточными напряжениями разного знака. Потенциал взаимодействия для размерного эффекта определяется соотношением

$$V = -\frac{\sigma_{\ell\ell}}{3} \delta v, \quad (1)$$

где $\sigma_{\ell\ell}$ – первый инвариант тензора остаточных напряжений, δv – изменение объема кристалла при размещении атома водорода. Для атома водорода $\delta v > 0$ и потому при

$\sigma_{\ell\ell} > 0$ потенциал V принимает отрицательное значение. Это соответствует притяжению атома водорода к области растягивающих напряжений. Для $\sigma_{\ell\ell} < 0$ и $\delta v > 0$ потенциал V принимает положительное значение. Атомы водорода вытесняются из области сжимающих напряжений. Кинетика сегрегации водорода описывается нестационарным уравнением диффузии в поле потенциала V

$$\frac{1}{D} \frac{\partial C}{\partial t} = \Delta C \pm \frac{\nabla(C \nabla V)}{kT}, \quad r_0 < r < R,$$
$$C(r,0)=0, \quad C(r_0,t)=C_p^1, \quad C(R,t)=C_p^2, \quad (2)$$

где D – коэффициент диффузии атомов водорода, r_0 и R – внутренний и внешний радиусы цилиндрической оболочки, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, C_p^1 и C_p^2 – равновесные концентрации атомов водорода на границах области. Положительное значение второго члена правой части уравнения (2) соответствует замедлению кинетики процесса диффузии с внутренней поверхности оболочки. Это обусловлено характером распределения остаточных напряжений: растяжение на внутренней поверхности и сжатие на внешней. Отрицательное значение этого члена ускоряет диффузию атомов водорода с внешней поверхности оболочки. В этом случае напряжения сжатия сменяются напряжениями растяжения и ускоряют процесс диффузии атомов водорода. Физический смысл начального и граничных условий задачи (2) очевиден. В начальный момент времени концентрация атомов водорода равна нулю. Краевые условия при r_0 и R означают, что на границах области сохраняется равновесная концентрация водорода в соответствии с потенциалом взаимодействия V . Получено точное аналитическое решение задачи (2) для системы Zr-H. При решении задачи использован принцип суперпозиции. Диффузионные процессы рассматриваются с внутренней и внешней границы оболочки. Это связано с характером распределения

* Fax:2391749; E-mail: iifedik@podolsk.ru

остаточных напряжений. Последние приводят к изменению симметрии уравнения диффузии для конкретного значения потенциала V . Остаточные напряжения определяют равновесные концентрации на границах оболочки и кинетику сегрегации атомов водорода.

Выводы

Остаточные напряжения в цилиндрической оболочке изменяют характер протекания диффузионных процессов для атомов водорода. Кинетика сегрегации описывается нестационарным уравнением диффузии в поле сил при соответствующих начальном и граничных условиях. Потенциал взаимодействия атома водорода с полем остаточных напряжений логарифмически зависит от радиальной координаты. Получено

точное аналитическое решение уравнения диффузии с учетом распределения остаточных напряжений. Ускорение (замедление) кинетики процесса определяется симметрией уравнения диффузии и значениями равновесных концентраций водорода на границах области. В зависимости от условий превалирует тот или иной фактор.

Литература

1. Власов Н.М., Федик И.И. Расслоение твердого раствора в поле остаточных напряжений. Доклады РАН. 2002.Т.382 (2): 186-189.
2. Vlasov N.M., Fedik I.I. Hydrogen segregation in the area of threefold junctions of grain boundaries. Int J. Hydrogen Energy 2002, 27:921-926.