



Rainer Falkenberg (Autor)  
**Simulation von Wasserstoffdiffusion und  
Rißwachstum infolge wasserstoffinduzierter  
Spannungsrißkorrosion mit einer Analyse der  
Kopplungsphänomenologie**



<https://cuvillier.de/de/shop/publications/682>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentzsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,  
Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: [info@cuvillier.de](mailto:info@cuvillier.de), Website: <https://cuvillier.de>

---

Permeationsstromdichten geben sehr deutliche Hinweise auf den zeitabhängigen Aufbau der Konzentration des atomaren Wasserstoffs. Diese Methodik ist anwendbar, da sich sowohl die Sorptions- als auch die Permeationskinetik mit Grenzflächenwechselwirkungen auseinandersetzen. Bei den hier und auch üblicherweise verwendeten Probenstärken von  $d = 1 \text{ mm}$  [Dietzel et al., 2006; Juilfs, 2001] bis  $d = 35 \text{ }\mu\text{m}$  [Flis et al., 1999; Flis-Kabulska et al., 2007, 2008] treten Grenzflächeneffekte stärker als bei dickeren Proben hervor, da die Volumendiffusion nicht als dominierend angesehen werden kann. Als Sorbent wird hierbei der nach der „oberflächennahen Schicht“ folgende Werkstoff angesehen. Das Sorptiv liegt in der Umgebung als molekularer Wasserstoff vor, welches nach Adsorption, Dissoziation und Absorption dann als Sorbat im Werkstoff gelöst vorliegt. Hierbei fungiert die „oberflächennahe Schicht“ als Grenzfläche, die vom Sorptiv überwunden werden muß. Diese Verbindung zwischen Sorption und Permeation wurde bereits in [Ali-Khan et al., 1978] herangezogen. Die Einlagerung von atomarem Wasserstoff erfolgt überwiegend in Tetraeder- ( $\alpha$ -Fe) bzw. auch in energetisch ungünstigeren Oktaederplätzen ( $\gamma$ -Fe) [Jiang and Carter, 2004b]. Da letztendlich die Einlagerung des Sorbats als Ausgleichsvorgang zur Herstellung eines Gleichgewichts zwischen verschiedenen Phasen begründet ist, wird die Löslichkeit durch eine Verschiebung des Gleichgewichtspunktes verändert. Das chemische Potential ist abhängig von Druck und Temperatur, so daß bei einer Veränderung dieser Umgebungsgrößen die Löslichkeit signifikant schwanken kann [Da Silva and McLellan, 1976; da Silva et al., 1976; Sugimoto and Fukai, 1992]. Zusätzlich beeinflusst eine aufgebrachte plastische Deformation ebenfalls die Ergebnisse der Permeation, wie an dem hier untersuchten Werkstoff herausgestellt werden konnte [Dietzel et al., 2006; Juilfs, 2001], da die Haftstellendichte zunimmt [Maier et al., 1991] und der dort immobilisierte Wasserstoff nicht mehr ohne weiteres ausgasen kann [Zakroczymski, 1999]. Promotoren, wie beispielsweise P, As, Sb sowie S, Se, Te fördern die Aufnahme von Wasserstoff [Flis-Kabulska et al., 2007] ebenso wie das Anlegen eines kathodischen Schutzpotentials [Flis et al., 1999]. Im Gegensatz dazu verhindern sich bildende Deckschichten die Aufnahme von Wasserstoff, in dem sie Oxidfilme bilden [Flis-Kabulska et al., 2008].

Durch den Vorgang der *Diffusion* breitet sich der atomare Wasserstoff im Werkstoff aus. Dieser Stofftransport wird durch das Spannungsfeld beeinflusst, da das chemische Potential unter anderem Spannungsgradienten enthält [Alefeld and Voelkl, 1978; Fukai, 2005]. Bereiche hoher Spannungskonzentrationen führen zu einer hohen elastischen Gitteraufweitung. Ein verstärktes Einsetzen von Stofftransportprozessen in diese Bereiche ist zu beobachten. Die plastischen Prozesse nehmen ebenfalls zu und somit auch die damit verbundene Dichte der Materialfehlstellen. Diese Gefügeinhomogenitäten fungieren als Störpotential und verhalten sich gegenüber atomar gelöstem Wasserstoff wie Haftstellen. Diese binden den frei beweglichen Wasserstoff und entziehen ihn somit der Gitterdiffusion (auch bekannt als „trapping“). Daher akkumuliert atomar gelöster Wasserstoff sowohl in Bereichen hoher plastischer Deformation als auch in Zonen hoher hydrostatischer Spannung. Die Wasserstoffdiffusion wird mit Hilfe einer erweiterten Diffusionsgleichung beschrieben, die zwischen Wasserstoff in Haft- und Gitterstellen unterscheidet [McNabb and Foster, 1963; Oriani, 1970], damit der Haftstellenmechanismus der Materialimperfektionen berücksichtigt werden kann. In dieser Diffusionsgleichung steuern mechanische

Größen, wie beispielsweise der Gradient der hydrostatischen Spannung, die akkumulierte plastische Vergleichsdehnung und die Dehnratesowohl zum Transportterm als auch direkt zur lokalen zeitlichen Änderung der Wasserstoffkonzentration bei.

Das *Deformationsverhalten* wird mit Hilfe eines elastisch-plastischen Gesetzes nach v. Mises mit isotroper Verfestigung modelliert. In [Robertson, 2001] wurde mit Hilfe einer TEM<sup>1</sup> in-situ Studie experimentell nachgewiesen, daß die Mobilität von Versetzungen durch die Anwesenheit von atomarem Wasserstoff erhöht wird. Es wurde davon ausgegangen, daß der gelöste Wasserstoff eine Atmosphäre erzeugt, die die Versetzungen umschließt und damit die zur Versetzungsbewegung gegenüber der Umgebung notwendige Energiebarriere vermindert. Mit dem aus dieser Studie abgeleiteten Degradationsmechanismus wurde das sogenannte HELP<sup>2</sup>-Modell begründet, welches einen Einfluß des Wasserstoffs auf die lokale Fließgrenze berücksichtigt. Die Multiplikation der ursprünglichen und vom Wasserstoff unbeeinflussten Fließgrenze mit einer konzentrationsabhängigen Funktion führt zu einer Abhängigkeit von der lokalen Wasserstoffkonzentration [Beachem, 1972; Birnbaum and Sofronis, 1994].

Das *Rißwachstum* wird mit Hilfe eines Kohäsivzonenmodells modelliert. Die Grundlagen für das Kohäsivzonenmodell wurden durch [Barenblatt, 1962] in Form eines Separationsgesetzes für die Dekohäsion von Atomgittern gelegt. Dadurch konnte die Spannungssingularität an der Rißspitze in der linear-elastischen Bruchmechanik verhindert werden. Das Separationsgesetz beschreibt die (Kohäsiv-) Spannungsantwort auf eine Separation zweier sich ausbildenden Materialoberflächen. Die Kohäsivfestigkeit bestimmt zusammen mit der kritischen Separation und dem Separationsgesetz die Separationsenergie, die aufzuwenden ist, um eine komplette Materialseparation herbeizuführen. Beim Erreichen des Wertes der kritischen Separation setzt gleichzeitig das Rißwachstum ein. Dem HEDE<sup>3</sup>-Mechanismus folgend wird durch Wasserstoff eine Verminderung der interatomaren Bindungsfestigkeit hervorgerufen [Oriani and Josephic, 1974; Oriani, 1972; Troiano, 1960]. Daher wird in dem hier zur Anwendung kommenden Kohäsivzonenmodell die Kohäsivfestigkeit durch die Anwesenheit von Wasserstoff herabgesetzt.

Beide Degradationsmodelle, HEDE und HELP, sind sowohl in der experimentellen Gemeinschaft [Birnbaum, 1990; Bond et al., 1988, 1989] bzgl. HELP und [Gerberich and Foecke, 1990; Gerberich and Wright, 1981; Gerberich et al., 1993; Moody and Robinson, 1993; Moody et al., 1988, 1990a,b] bzgl. HEDE als auch in der theoretischen Gemeinschaft [Hoagland and Heinisch, 1992] bzgl. HELP und [Angelo et al., 1993; Fu and Painter, 1991; Moody and Foiles, 1992, 1991] bzgl. HEDE etabliert.

Im Zuge der Implementierung der genannten Teilgebiete *Oberflächenkinetik*, *Diffusion*, *Deformation* und *Rißwachstum* in eine FE-Softwareumgebung liefert die Simulation zielführende Resultate. Im simulierten Modell können die Konzentrationsfelder des Was-

---

<sup>1</sup>Transmissionen-Elektronen-Mikroskopie

<sup>2</sup>Hydrogen Enhanced Localised Plasticity

<sup>3</sup>Hydrogen Enhanced Decohesion

---

serstoffs und die mechanischen Feldgrößen ausgewertet und CTOD-Rißwiderstandskurven (R-Kurven) sowie Kraft-Verformungskurven generiert werden. Um die hier theoretisch erzeugten Ergebnisse zu validieren, wurden Ergebnisse aus im Vorfeld durchgeführten experimentellen Untersuchungen an C(T)-40-Bruchmechanikproben in einem korrosiven Medium herangezogen. Hierbei wurden unter anderem R-Kurven aufgenommen, die eine Aussage über das Rißwachstumsverhalten zulassen [ASTM E 1820 - 99a, 2000]. Bei Durchführung der genannten Bruchmechanikversuche in einer korrosiven Umgebung ist man in der Lage, die Wechselwirkungen zu untersuchen, die hier zwischen dem im Werkstoff agierenden Korrosionsmedium und den mechanischen Prozessen stattfinden [Dietzel, 1991]. Solche Versuche erfordern nicht nur einen hohen apparativen und meßtechnischen Aufwand, sie sind insbesondere auch sehr zeit- und damit kostenintensiv. Das Ziel der vorliegenden Untersuchung besteht daher darin, diese Bruchmechanikversuche in einer korrosiven Umgebung zu simulieren, um den Vorgang der wSpRK abzubilden.

Bisher wurden Untersuchungen mit gleicher bzw. ähnlicher Zielsetzung durchgeführt. Ausgehend von [Sofronis and McMeeking, 1989] sowie den Arbeiten von [Krom et al., 1997, 1999a,b], die sich hauptsächlich mit der Wasserstoffdiffusion auseinandersetzten, führten weitergehende Untersuchungen auf die Simulation des Einflusses von Wasserstoff auf das Rißwachstum. In [Scheider et al., 2008] diskutierten die Autoren den Einfluß des Wasserstoffs auf die Kohäsivfestigkeit, um Rißwachstum mit Hilfe eines Kohäsivzonenmodells zu simulieren. Sie verwendeten einen phänomenologischen Anpassungsparameter zur Reduktion der Kohäsivfestigkeit sowie eine konventionelle Diffusionsgleichung nach Fick. Tiefergehende Zusammenhänge über physikalische Ursachen, die zur Reduktion der Kohäsivfestigkeit führen sowie eine Berücksichtigung des „trapping“-Effektes wurden mit diesen Simulationen nicht abgebildet. In [Olden et al., 2007, 2008; Serebrinsky et al., 2004] wurde ebenfalls der Einfluß von Wasserstoff auf das Separationsgesetz eines Kohäsivzonenmodells untersucht. Hierfür wurde der HEDE-Mechanismus als mikrophysikalische Begründung herangezogen. Zur Simulation der Wasserstoffdiffusion wurde von [Serebrinsky et al., 2004] ein Diffusionsgesetz mit mechanischen Spannungstermen verwendet, [Olden et al., 2007, 2008] benutzte ein in der FE-Softwareumgebung Abaqus bereits enthaltenes erweitertes Diffusionsgesetz; beide bildeten ebenfalls kein „trapping“ ab. Dies wurde stattdessen in diesen beiden Untersuchungen mit Hilfe einer effektiven Diffusionskonstante modelliert. Hinsichtlich des HELP-Mechanismus wurden von [Liang et al., 2004; Sofronis et al., 2001] Untersuchungen vorgestellt, die auf eine Modellierung der zeitabhängigen Wasserstofftransportvorgänge verzichteten und ausschließlich Gleichgewichtszustände auswerten. Hierbei konzentrierten sich die Berechnungen auf die Einflüsse des Wasserstoffs auf plastische Vorgänge, eine Betrachtung des Rißwachstums erfolgte nicht. Anhand dieses Kurzüberblicks ist erkennbar, daß eine Verbindung von erweiterter Diffusion sowohl mit Rißwachstumsprozessen als auch plastischen Prozessen im Rahmen einer Simulation nicht verfolgt wurde. Eine weitergehende zusätzliche Berücksichtigung von Oberflächenprozessen erfolgte in keiner der genannten numerischen Simulationen.

Neben Stahlwerkstoffen spielen auch Nichteisenmetalle als Konstruktionswerkstoffe eine besondere Rolle. Im Leichtbau wird eine Gewichtsoptimierung durch besonders

leichte Werkstoffe herbeigeführt. Hierfür kommen insbesondere Werkstofflegierungen aus Titan, Aluminium und Magnesium beispielsweise in der Raumfahrt zum Einsatz. Auch diese Werkstoffe sind empfindlich gegenüber wSpRK [Bond et al., 1987, 1988; Lynch, 1988; Shih et al., 1988; Somerday, 1998; Somerday et al., submitted; Song et al., 2005; Swann et al., 1977; Winzer et al., 2007, 2008]. Die Modellierung des Verhaltens dieser Werkstoffe ist allerdings nicht Bestandteil der vorliegenden Arbeit. Dennoch sollte eine Übertragung des hier erstellten Modells auf andere Werkstoffe grundsätzlich aufgrund der phänomenologischen Beschreibung möglich sein.