

Anales de Mecánica de la Fractura

TEXTO DE LAS COMUNICACIONES PRESENTADAS EN EL

**XXXII ENCUENTRO DEL
GRUPO ESPAÑOL DE FRACTURA**

Número 32

Zamora

27, 28 y 29 de abril de 2015



VNiVERSiDAD
D SALAMANCA
CAMPUS OF INTERNATIONAL EXCELLENCE



FractUSal 2015

Anales de Mecánica de la Fractura Vol. 32 (2015)

Proceedings

32nd Spanish Conference on Fracture and Structural Integrity
Encuentro del Grupo Español de Fractura
International Edition
32 SCFSI / 32 GEF



ESIS TC-10 Workshop
ENVIRONMENTALLY ASSISTED CRACKING
&
HYDROGEN EMBRITTLEMENT

Zamora, Spain, 27-29 April 2015

©ANALES DE MECÁNICA DE LA FRACTURA
Editado por la Secretaría del Grupo Español de Fractura

"Reservados todos los derechos para todos los países. Ninguna parte de esta publicación, incluido el diseño de la cubierta puede ser reproducida, almacenada o transmitida de ninguna forma, ni por ningún medio, sea electrónico o de cualquier otro, sin previa autorización escrita por parte de la Editorial"

I.S.S.N: 0213-3725
Fecha impresión: Abril 2015

CÁLCULO DE LA VELOCIDAD DE PROPAGACIÓN DE LA FISURA DEBIDO A FRAGILIZACIÓN POR HIDRÓGENO

J. Sánchez^{1*}, A. Ridruejo², E. Muñoz¹, C. Andrade¹, J. Fullea¹, P. de Andres³

¹ Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja (IETec-CSIC).
Serrano Galvache 4, 28033, Madrid, España
* Correo-e: javier.sanchez@csic.es

² Departamento de Ciencia de Materiales, Universidad Politécnica de Madrid, E.T.S.I. de Caminos, Canales y Puertos.
Profesor Aranguren 3, 28040, Madrid, España

³ Instituto de Ciencias de Materiales de Madrid (ICMM-CSIC)
Sor Juana Inés de la Cruz, 3, Cantoblanco, 28049 Madrid, España

RESUMEN

La fragilización por hidrógeno está presente en muchos de los fallos de estructuras o componentes de acero. En estudios anteriores se ha mostrado el efecto del hidrógeno dentro de la red de hierro a nivel atómico y se concluía que el hidrógeno no establece enlace químico con el hierro pero introduce tensiones internas que debilitan los enlaces hierro-hierro y disminuyen la tenacidad de fractura. En el presente trabajo se ha simulado la propagación de una fisura por el efecto del hidrógeno. Se ha acoplado el transporte de hidrógeno, los gradientes de tensiones y la variación de la tenacidad de fractura en un modelo multifísico de elementos finitos. El comportamiento en fractura se ha simulado mediante dos leyes cohesivas, una ley lineal y una ley polinómica. Los resultados muestran que existe una influencia de la ley cohesiva sobre la propia velocidad de propagación de la fisura y el perfil de concentración de hidrógeno.

ABSTRACT

Hydrogen embrittlement is ubiquitous in many of the failures of steel structures components. The effect of hydrogen inside a periodic lattice of iron has been previously studied at the atomic level concluding that hydrogen does not establish significant chemical bonds with iron; instead it introduces internal stresses that weaken the iron-iron bonds and decrease toughness for fracture. In this work we simulate the crack propagation under the hydrogen influence. Hydrogen transport, stress gradients and the evolution of fracture toughness were analyzed together in a multi-physics finite element model. Fracture behavior has been simulated using two different models for the cohesive law with either a lineal or a polynomial dependence. Results show that the choice for the cohesive law influences the crack propagation rate and the hydrogen concentration profiles.

PALABRAS CLAVE: Fragilización por Hidrógeno, Acero, Velocidad de Propagación de la Fisura, Simulación.

1. INTRODUCCIÓN

La Fragilización por Hidrógeno (FH) es una de las principales causas de fallo en los componentes metálicos expuestos a ambientes agresivos y puede estar asociada a otros tipos de degradación, como es la corrosión o la corrosión bajo tensión [1-3]. Desde el punto de vista teórico, existen diversas aproximaciones al fenómeno de la FH que pueden reproducir en mayor o menor medida el comportamiento de los diferentes metales o aleaciones frente a la FH [4-15]. En el caso del acero ferrítico se ha demostrado que el H no establece enlace con los átomos de Fe [16], además introduce unas tensiones/distorsiones en la red bcc-Fe

que condicionan el camino de difusión [17, 18] y debilitan el enlace Fe-Fe [9], o lo que es lo mismo reduce la energía de fractura del acero [4, 6, 19, 20].

Existe una amplia bibliografía para el caso del acero dedicada al fenómeno de difusión en función del medio y considerando las diferentes trampas existentes y su desorción [21, 22], el comportamiento mecánico y la reducción en la tenacidad de fractura [2, 8, 23]. Por otra parte, desde la mecánica de fractura se ha abordado el problema del crecimiento de las fisuras desde diferentes puntos de vista, siendo uno de los más utilizados el modelo de fisura cohesiva cuando se trata de estudiar el crecimiento de una fisura discreta [24-26]. Algunos

autores han aplicado esta metodología para el caso de la FH en aceros [10].

El objetivo de este artículo es desarrollar un método de cálculo que permita estimar la velocidad de propagación de la fisura comparando dos curvas distintas para el caso de un acero ferrítico; una curva lineal [10] y otra tipo escalón de Heaviside (aproximada por un polinomio de grado 6) [27].

2. METODOLOGÍA

A continuación se presenta la metodología adoptada para simular la propagación de una fisura por fragilización por hidrógeno teniendo en cuenta: (i) la generación de hidrógeno en la superficie de la fisura, (ii) el transporte de hidrógeno hacia la zona en proceso de fractura donde existe un gradiente de tensiones y, por último, (iii) se ha aplicado un modelo de fisura cohesivo que incluye una penalización por la presencia de hidrógeno.

En este trabajo se ha considerado únicamente el hidrógeno presente en la red de hierro. La ecuación de transferencia de materia tiene en cuenta, además del gradiente de concentración de hidrógeno C , el gradiente de tensiones a través de la presión hidrostática p [10]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} - D \nabla^2 C + \frac{DV_H}{RT} \nabla C \nabla p = - \frac{DV_H}{RT} C \nabla^2 p \quad (1)$$

Donde V_H es el volumen molar parcial del hidrógeno, R es la constante de los gases ideales y T es la temperatura absoluta.

Las condiciones de contorno aplicadas en este modelo se basan en la adsorción de hidrógeno en equilibrio con el medio y que a su vez depende de las tensiones mecánicas [10]. Esta condición de contorno se aplica sobre la superficie de la fisura:

$$C = C_{eq}(p) = C_{eq}(0) e^{pV_H/RT} \quad (2)$$

Donde $C_{eq}(p)$ es la concentración en equilibrio en la superficie de la fisura a la presión hidrostática p y $C_{eq}(0)$ corresponde con la concentración en equilibrio a la presión hidrostática de valor cero [10].

A través de la ecuación de Langmuir podemos relacionar la adsorción de hidrógeno sobre la superficie de acero con la concentración en equilibrio sobre dicha superficie metálica (temperatura constante):

$$\theta = \frac{C}{C + e^{-\frac{\Delta g_b^0}{RT}}} \quad (3)$$

En esta ecuación se define Δg_b^0 como la diferencia de energía para el hidrógeno sobre la superficie de la fisura y para el hidrógeno dentro de la red de hierro.

El comportamiento en fractura se ha simulado mediante dos leyes cohesivas diferentes: (i) ley cohesiva de grado 6, y (ii) ley cohesiva lineal. La primera ley cohesiva (Coh_{nolin}) está relacionada con la propuesta por Elices et al. [27]. Como aproximación a dicha ley se ha empleado un polinomio de grado 6 y la parte final se ha ajustado con una exponencial para facilitar la convergencia del programa de elementos finitos.

$$Coh_{nolin}(u) = \begin{cases} f_t - B_{nolin} u^6 & , u < 0.95 u_f \\ (f_t - B_{nolin} (0.95 u_f)^6) e^{((0.95 u_f - u) 20 \times 10^5)}, 0.95 u_f < u \end{cases} \quad (4)$$

Donde u es la separación entre los labios de la fisura, u_f es la separación crítica a partir de la cual se considera que el material se encuentra decohesionado y $B_{nolin} = f_t / u_f^6$

Otro de los parámetros que definen la ley cohesiva es f_t , la tensión inicial cuando $u = 0$. Diversos autores proponen que este valor es aproximadamente 4 veces el límite elástico, σ_{y0} [10]:

$$f_t = 4\sigma_{y0} \quad (5)$$

La segunda ley cohesiva que se va a utilizar está relacionada con los estudios de Serebrinsky et al. [10] (Coh_{lin}). Esta ley se caracteriza por tener un comportamiento lineal, que responde a las siguientes ecuaciones:

$$Coh_{lin}(u) = \begin{cases} f_t - B_{lin} u, & u < u_f \\ 0 & , u_f < u \end{cases} \quad (6)$$

Donde $B_{lin} = f_t / u_f$

Experimentalmente se ha observado que la tenacidad de fractura en el acero disminuye en presencia de hidrógeno [29]. Cálculos ab-initio realizados por Jiang y Carter [19] proponen la siguiente ecuación que relaciona la disminución en la energía de fractura (Q) con el recubrimiento de hidrógeno (θ):

$$Q = 1 - 1,0467\theta + 0,1687\theta^2 \quad (7)$$

Por lo tanto, en un proceso de fragilización por hidrógeno es necesario actualizar la energía de fractura, G_f^{HE} , durante el cálculo de elementos finitos, en función de la concentración de hidrógeno, C .

Es posible aplicar el factor Q directamente sobre la energía de fractura, lo cual supone una reducción en la tensión inicial de la curva de ablandamiento f_t . Al hacerlo de esta forma no se penaliza la separación

crítica u_f , únicamente la tensión máxima f_i . Para lograr este efecto, se propone la siguiente ecuación donde, a través de un cambio de variables, se modifica la ley cohesiva disminuyendo tanto f_i como u_f en función de la concentración de hidrógeno C :

$$G_f^{HE} = G_f Q(C) = (Q(C))^{0.6} \int_0^{u_f} f\left(\frac{u}{(Q(C))^{0.4}}\right) du \quad (8)$$

En la Fig. 1 se muestran las leyes cohesivas empleadas en el estudio para: (i) el caso de que no haya hidrógeno ($Q = 1$); y (ii) el caso en que el hidrógeno actúe reduciendo la energía de fractura por un factor Q .

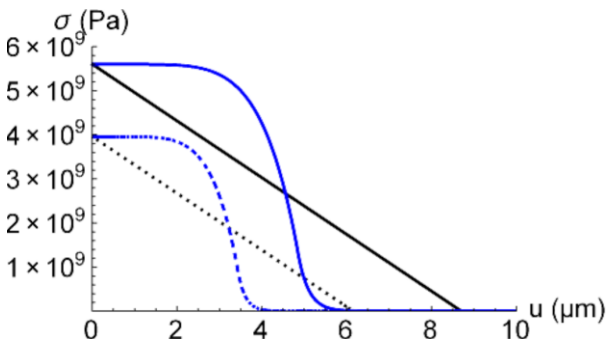


Fig. 1. Funciones de ablandamiento: (i) la función lineal sin hidrógeno ($Q = 1$) línea continua en color negro, (ii) la función lineal con hidrógeno ($Q = 0.5$) línea punteada de color negro, (iii) la función no lineal sin hidrógeno ($Q = 1$) línea discontinua en color azul, y (iv) la función no lineal con hidrógeno ($Q = 0.5$) línea discontinua en color azul.

3. RESULTADOS NUMÉRICOS

Para las simulaciones se ha considerado una placa de acero de $20 \times 20 \text{ mm}^2$ con una pre-fisura, $2a = 0.8 \text{ mm}$. Tanto la parte superior como la inferior están sometidas a una carga distribuida en toda su longitud. Véase figura 2.

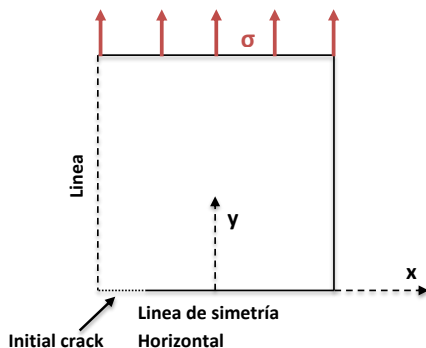


Fig. 2. Geometría, condiciones de contorno y de simetría.

Existen dos planos de simetría perpendiculares al eje vertical y horizontal que atraviesan la probeta por su

centro, que permite simplificar el cálculo a $1/4$ de la probeta. Se ha considerado que el camino de propagación de la fisura coincide con el eje x . En este eje se ha introducido la ley cohesiva correspondiente a una condición de contorno tipo muelle no lineal, donde se ha tenido en cuenta el desplazamiento, $2u$, como apertura de la fisura en la ley cohesiva.

La tensión remota aplicada (σ) es de 1400 MPa . La concentración inicial de hidrógeno es nula y se ha considerado que la entrada de hidrógeno se produce en la superficie de la fisura según la ecuación 2.

En las tablas 1 y 2 se muestran las constantes mecánicas y de transporte de hidrógeno en el acero.

Tabla 1. Propiedades mecánicas.

E (GPa)	ν	ρ (kg/m ³)	K_{IC} (MPa $\sqrt{\text{m}}$)
207	0,3	7850	75

Tabla 2. Parámetros de transporte del hidrógeno en el acero.

D_{eff} (m ² /s)	V_H (m ³ /mol)	Δg_b^0 (kJ/mol)
10^{-10}	$2 \cdot 10^{-6}$	30

En la figura 3 se muestra el resultado de la simulación para el caso de la ley cohesiva lineal y para un tiempo de 350 s. En esta figura se puede observar que la fisura ya ha comenzado a propagar y que se produce una acumulación de hidrógeno en la zona en proceso de fractura. En las figuras 4 y 5 se muestra la concentración de H en el frente de la fisura para diferentes tiempos. Independientemente de la ley cohesiva aplicada, se produce un máximo de la concentración de H en el frente de la fisura, que se va desplazando a medida que se produce la propagación de la misma. De forma cualitativa, se observa que la concentración de hidrógeno es más puntual para el caso de la ley lineal (ver figura 4), mientras que para el caso de la ley no-lineal se produce una acumulación más distribuida (ver figura 5).

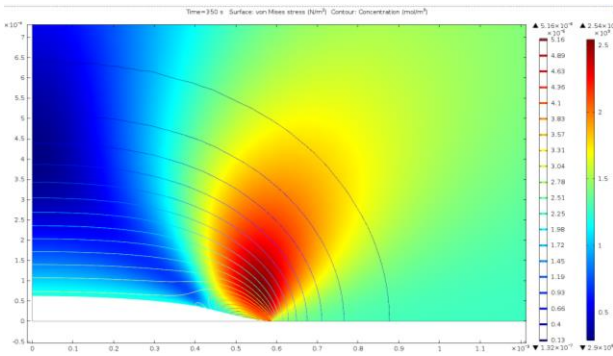


Fig. 3. Resultados de tensión de von Mises y concentración de hidrógeno para el caso de la ley cohesiva lineal y para $t = 350$ s. Deformada $\times 10$ en el eje y.

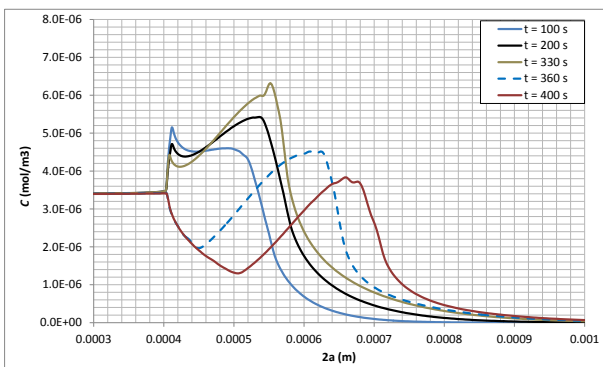


Fig. 4. Concentración de H en el frente de la fisura para el caso de una ley cohesiva lineal.

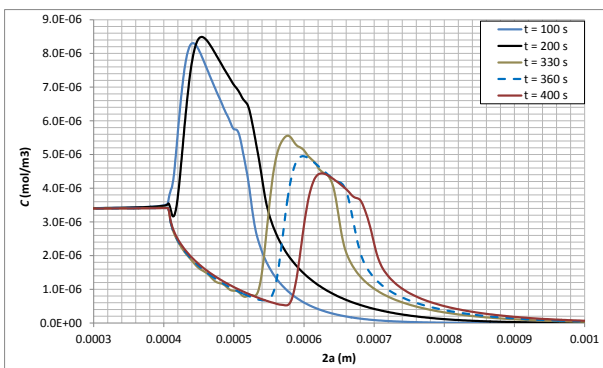


Fig. 5. Concentración de H en el frente de la fisura para el caso de una ley cohesiva no-lineal.

Para analizar la posición del frente de la fisura, se ha considerado la posición del punto que alcanza la separación crítica u_f . En la figura 6 se muestra la posición del frente de la fisura para ambas leyes cohesivas. En el caso de una ley no-lineal el comienzo de la propagación se produce para un tiempo inferior, 200 s, frente a más de 330 s para el caso de la ley lineal. Sin embargo, a los 600 s alcanzan el mismo valor en la posición del frente de la fisura. En ambos casos, la propagación de la fisura tiene lugar de forma discontinua, con saltos de aproximadamente $2 \mu\text{m}$ (ver

figura 7). Para el tratamiento de datos se han ajustado las curvas a una función exponencial.

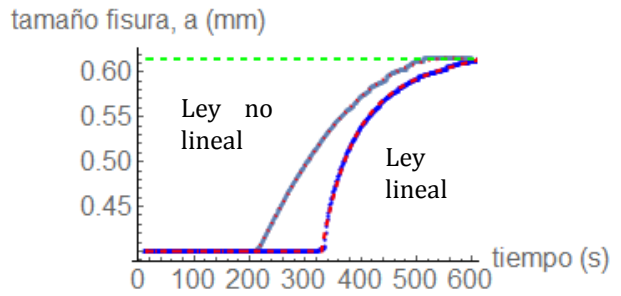


Fig. 6. Posición del frente de la fisura para las dos leyes cohesivas: resultados de la simulación (línea continua) y ajuste a una ecuación exponencial (línea discontinua).

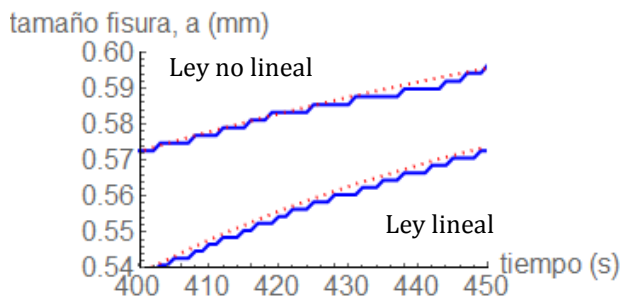


Fig. 7. Detalle de la posición del frente de la fisura para las dos leyes cohesivas.

Derivando las curvas anteriores se obtiene la velocidad de propagación de la fisura (Crack Propagation Rate, *CPR*). En la figura 8 se muestran los valores de *CPR* en función del factor de intensidad de tensiones, K_I , para ambas leyes cohesivas, obteniéndose valores ligeramente mayores para el caso de la ley lineal. Para estas condiciones de simulación se produce la parada de la fisura. Al aumentar el tamaño de la fisura, a , se produce una mayor concentración de H en la sección resistente, no sólo en el frente de la fisura. Como consecuencia de un aumento de la concentración de hidrógeno en la zona en proceso de fractura se produce una disminución de la tenacidad de fractura que induce la fractura frágil del componente, que por ser inestable ya no puede ser capturada por la simulación.

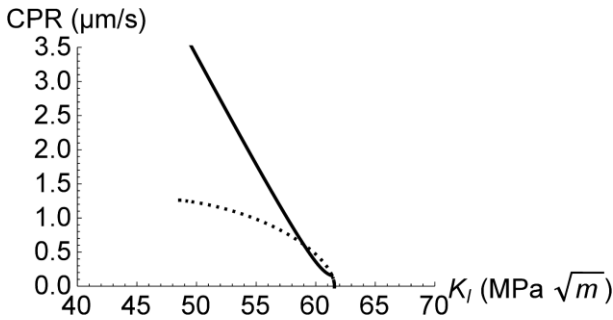


Fig. 8. Velocidad de propagación de la fisura versus factor de intensidad de tensiones de tensiones: en trazo continuo el resultado para la ley lineal y en trazo discontinuo el resultado para la ley no lineal.

4. CONCLUSIONES

La velocidad de propagación de la fisura debida a la fragilización por hidrógeno depende de la ley cohesiva empleada. Esto se debe al hecho de que la concentración de hidrógeno depende de la propia ley cohesiva a través de su influencia en el gradiente de tensiones. La ley cohesiva lineal produce una concentración de tensiones en una región más localizada que la ley no lineal. Del mismo modo, la concentración de hidrógeno en el caso de la ley lineal produce un aumento de la concentración de forma puntual, mientras que en el caso de la ley no lineal se produce una mayor acumulación de hidrógeno en el frente de la fisura.

La mayor acumulación de hidrógeno en el caso de la ley no lineal es coherente con el resultado de la simulación en el que el tiempo de iniciación de la propagación de la fisura es menor para la misma ley no lineal. Es decir, la mayor acumulación de hidrógeno para la ley no lineal produce una mayor reducción de la tenacidad de fractura y, por lo tanto, el inicio más temprano de la propagación de la fisura.

En ambos casos se capta la propagación discontinua de la fisura con saltos aproximadamente de 2 μm , lo cual coincide con resultados experimentales.

Para las condiciones de simulación introducidas se produce una parada de la fisura al crecer el tamaño de la misma hasta que se produce la ruptura frágil del elemento simulado. Este resultado se explica por la acumulación de hidrógeno en el ligamento resistente que compite con la propagación de la fisura debida a la concentración de hidrógeno de forma local en el frente de la fisura.

REFERENCIAS

[1] Sanchez, J., et al., Stress corrosion cracking mechanism of prestressing steels in bicarbonate

solutions. *Corrosion Science*, 2007. 49(11): p. 4069-4080.

[2] Elices, M., et al., Hydrogen embrittlement of steels for prestressing concrete: The FIP and DIB tests. *Corrosion*, 2008. 64(2): p. 164-174.

[3] Elices, M., et al., Failure analysis of prestressed anchor bars. *Engineering Failure Analysis*, 2012. 24(0): p. 57-66.

[4] Song, J. and W.A. Curtin, Mechanisms of hydrogen-enhanced localized plasticity: An atomistic study using α -Fe as a model system. *Acta Materialia*, 2014. 68(0): p. 61-69.

[5] Gangloff, R.P., et al., Measurement and Modeling of Hydrogen Environment-Assisted Cracking in Monel K-500. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2014.

[6] Song, J. and W.A. Curtin, Atomic mechanism and prediction of hydrogen embrittlement in iron. *Nat Mater*, 2013. 12(2): p. 145-151.

[7] Castedo, A., et al., Hydrogen induced changes in structural properties of iron: Ab initio calculations, in *RILEM Bookseries*. 2012. p. 79-84.

[8] Sanchez, J., J. Fulla, and C. Andrade, High Strength Steels Fracture Toughness Variation by the Media. *Modelling of Corroding Concrete Structures*, 2011. 5: p. 137-146.

[9] Castedo, A., et al., Ab initio study of the cubic-to-hexagonal phase transition promoted by interstitial hydrogen in iron. *Physical Review B*, 2011. 84(9): p. 094101.

[10] Serebrinsky, S., E.A. Carter, and M. Ortiz, A quantum-mechanically informed continuum model of hydrogen embrittlement. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2004. 52(10): p. 2403-2430.

[11] Birnbaum, H.K., I.M. Robertson, and P. Sofronis, Hydrogen effects on plasticity, in *Multiscale Phenomena in Plasticity: From Experiments to Phenomenology, Modelling and Materials*, J. Lepinoux, et al., Editors. 2000. p. 367-381.

[12] Oriani, R.A. and P.H. Josephic, Equilibrium and kinetic studies of hydrogen-assisted cracking of steel. *Acta Metallurgica*, 1977. 25(9): p. 979-988.

[13] Oriani, R.A., Mechanistic theory of hydrogen embrittlement of steels. *Berichte Der Bunsen-Gesellschaft Fur Physikalische Chemie*, 1972. 76(8): p. 848-857.

- [14] Williams, D.P. and H.G. Nelson, Evaluation of hydrogen embrittlement mechanisms. *Metallurgical Transactions*, 1971. 2(7): p. 1987-&.
- [15] Westlake, D.G., A generalized model for hydrogen embrittlement. *Asm Transactions Quarterly*, 1969. 62(4): p. 1000-&.
- [16] Sanchez, J., et al., Hydrogen in α -iron: Stress and diffusion. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 2008. 78(1).
- [17] Sanchez, J., et al., Ab initio molecular dynamics simulation of hydrogen diffusion in α -iron. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 2010. 81(13).
- [18] Sanchez, J., et al., Hydrogen Embrittlement of High Strength Steels. *Diffusion in Materials - Dimat2008*, 2009. 289-292: p. 203-209.
- [19] Jiang, D.E. and E.A. Carter, First principles assessment of ideal fracture energies of materials with mobile impurities: implications for hydrogen embrittlement of metals. *Acta Materialia*, 2004. 52(16): p. 4801-4807.
- [20] Song, J. and W.A. Curtin, A nanoscale mechanism of hydrogen embrittlement in metals. *Acta Materialia*, 2011. 59(4): p. 1557-1569.
- [21] Li, D.M., R.P. Gangloff, and J.R. Scully, Hydrogen trap states in ultrahigh-strength AERMET 100 steel. *Metallurgical and Materials Transactions a-Physical Metallurgy and Materials Science*, 2004. 35A(3): p. 849-864.
- [22] Thomas, R.L.S., et al., Trap-governed hydrogen diffusivity and uptake capacity in ultrahigh-strength AERMET 100 steel. *Metallurgical and Materials Transactions a-Physical Metallurgy and Materials Science*, 2002. 33(7): p. 1991-2004.
- [23] Toribio, J. and E. Ovejero, Failure analysis of cold drawn prestressing steel wires subjected to stress corrosion cracking. *Engineering Failure Analysis*, 2005. 12(5): p. 654-661.
- [24] Sancho, J.M., et al., An embedded cohesive crack model for finite element analysis of mixed mode fracture of concrete. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 2006. 29(12): p. 1056-1065.
- [25] Sanz, B., J. Planas, and J.M. Sancho, An experimental and numerical study of the pattern of cracking of concrete due to steel reinforcement corrosion. *Engineering Fracture Mechanics*, 2013. 114: p. 26-41.
- [26] Fathy, A.M., et al., Determination of the bilinear stress-crack opening curve for normal- and high-strength concrete. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 2008. 31(7): p. 539-548.
- [27] Elices, M., et al., The cohesive zone model: advantages, limitations and challenges. *Engineering Fracture Mechanics*, 2002. 69(2): p. 137-163.
- [28] Irwin, G.R., Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate. *Journal of Applied Mechanics*, 1957. 24: p. 361-364.
- [29] Enos, D.G. and J.R. Scully, A critical-strain criterion for hydrogen embrittlement of cold-drawn, ultrafine pearlitic steel. *Metallurgical and Materials Transactions a-Physical Metallurgy and Materials Science*, 2002. 33(4): p. 1151-1166.