Аптуков, В.Н. Анализ упругих деформаций, индуцированных гидридным превращением в магнии, в рамках градиентной теории упругости / В.Н. Аптуков, Н.Е. Скрябина, Д. Фрушар. – DOI: 10.15593/perm.mech/2025.3.02 // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2025. – № 3. – С. 19–28.

Perm Polytech Style: Aptukov V.N., Skryabina N.E., Fruchart D. Analysis of Elastic Deformations Induced by Hydride Transformation in Magnesium within the Gradient Theory of Elasticity. *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2025, no. 3, pp. 19-28. DOI: 10.15593/perm.mech/2025.3.02

пермский политех

**ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА**
**№ 3, 2025**
**PNRPU MECHANICS BULLETIN**
https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index



Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2025.3.02
УДК 539.3

# АНАЛИЗ УПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ, ИНДУЦИРОВАННЫХ ГИДРИДНЫМ ПРЕВРАЩЕНИЕМ В МАГНИИ, В РАМКАХ ГРАДИЕНТНОЙ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ

**В.Н. Аптуков[1], Н.Е. Скрябина[1], Д. Фрушар[2]**

[1]Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Российская Федерация
[2]Université Grenoble Alpes &CNRS, Institut Néel, Grenoble, France

О СТАТЬЕ

Получена: 02 июля 2024 г.
Одобрена: 07 июля 2025 г.
Принята к публикации: 30 июля 2025 г.

*Ключевые слова:*

магний, гидрид магния, фазовое превращение, градиентная теория упругости, энергетические соотношения.

АННОТАЦИЯ

Один из принципов устойчивого развития связан с изменением энергетического баланса в пользу возобновляемых источников энергии. В перспективе это означает замену традиционного ископаемого топлива на новое, которые характеризуется меньшим содержанием вредных выбросов. Альтернативой углеводородному сырью может служить водород, который является идеальным энергоносителем. Для его безопасного использования и транспортировки часто предлагается металлогидридный способ хранения, например, в виде гидрида магния. На пути практической реализации этой идеи существует ряд трудностей, одна из которых – кинетика гидридного превращения. Скорость и полнота превращения «магний – гидрид магния» зависит от многих параметров. Например, фазовый переход, обусловленный гидридным превращением, сопровождается локальным изменением объема и достигает значительных величин (в магнии до 30 %). В свою очередь изменение объема инициирует появление напряжений вблизи границы раздела «гидрид – матрица». Напряжения, обусловленные деформацией исходного материала, по-разному влияют на интенсивность проникновения водорода: растягивающие напряжения способствуют, а сжимающие препятствуют этому процессу.

Существующие модели зарождения гидридной фазы в магнии не учитывают наличие межкристаллитных границ. В теоретических моделях – это классическая интерпретация возникновения напряжений на границе раздела двух фаз. Расчеты, проведенные в настоящем исследовании, основаны на теории градиентного поля. Считается, что градиентная теория более подходит для описания упругого поведения материалов на микроуровне, где размерный параметр имеет порядок характерного параметра объекта, например, зерна.

Полученные в данном исследовании результаты позволяют сделать принципиально важный вывод: распределение деформации (напряжений) вблизи зародыша гидрида носит не локальный, а дальнодействующий характер. Более того, показано, что быстрое изолированное образование $MgH_2$ сменяется замедлением этого процесса в процессе слияния зародышей. Локальное образование гидрида энергетически выгодно только при некотором определенном объеме гидрида. По мере увеличения его объема энергетический выигрыш исчерпывается, и система «гидрид – матрица» переходит в новое энергетическое состояние. На практике это означает, что кинетика роста гидридной фазы неравномерна и зависит от объёма превращенной фазы.

© **Аптуков Валерий Нагимович** – д. т. н., профессор, начальник центра фундаментальной математики ПГНИУ, e-mail: aptukov@psu.ru, ID: 0000-0001-8048-3804.
**Скрябина Наталия Евгеньевна** – д. ф.-м. н., профессор, e-mail: natskryabina@mail.ru.
**Фрушар Даниель** – руководитель подразделения QUEST Института Нееля CNRS&UGA, e-mail: daniel.fruchart@neel.cnrs.fr.

**Valery N. Aptukov** – Doctor of Technical Sciences, Professor, Head of the center of Fundamental Mathematic, Perm State University, e-mail: aptukov@psu.ru.
**Nataliya E. Skryabina** – Doctor of Physics and Mathematical Sciences, Professor, Perm State University, e-mail: natskryabina@mail.ru.
**Daniel Fruchart** – Research Director Emerite at Department of QUEST, Institut Néel CNRS&UGA, e-mail: daniel.fruchart@neel.cnrs.fr.

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)

# ANALYSIS OF ELASTIC DEFORMATIONS INDUCED BY HYDRIDE TRANSFORMATION IN MAGNESIUM WITHIN THE GRADIENT THEORY OF ELASTICITY

**V.N. Aptukov[1], N.E. Skryabina[1], D. Fruchart[2]**

[1]Perm State University, Perm, Russian Federation
[2]Université Grenoble Alpes &CNRS, Institut Néel, Grenoble, France

ARTICLE INFO

Received: 02 July 2024
Approved: 07 July 2025
Accepted for publication:
30 July 2025

*Keywords:*

magnesium, magnesium hydride, phase transformation, gradient theory of elasticity, energy relationships.

ABSTRACT

One of main sustainable development principles is associated with changing the energy balance in favor of renewable energy sources. In the future, this means replacing traditional fossil fuels by new fuels characterized by lower levels of gas pollution.

Hydrogen, as an alternative to carbonaceous resources, constitutes an ideal clean fuel. Its storage as metal hydrides is one of the best solutions in terms of safety and disposal. Magnesium hydride is more particularly advantageous for both its volumetric capacity and energy balance. However, the implementation of its use faces some difficulties, including the kinetics of hydride formation. The rate and completeness of magnesium to magnesium hydride conversion depends on several parameters. For example, the formation of hydride corresponds to a marked change of volume, reaching up to 30 % from Mg to $MgH_2$. Consequently, the volume increase initiates the occurrence of stresses in the vicinity of the hydride/matrix interface. The stresses caused by deformations of the initial matrix lead to different effects on penetration of hydrogen: tensile stresses contribute but compressive stresses inhibit this process.

Although experimental studies were based on hydride nucleation modeling, the presence of grain boundaries was not taken into account in the theoretical models. In theoretical models, this is a classical interpretation of the development of stresses at the interface between two phases. In the present investigation, the calculations are based on a gradient field theory model. The gradient field theory is particularly suitable to describe the elastic behavior of materials at the microscale, where the dimension parameters are on the same level as the characteristic parameter e.g. of the grain size.

In the present study, the major results make it possible to conclude that the distribution of strains (stresses) is not restricted to the near vicinity of the hydride core, but it exhibits a long-range character. Furthermore, it is shown that the rapid formation of isolated $MgH_2$ nuclei is replaced by a slowdown of this process during the nucleus coalescence process. Local and discretized hydride formation is only energetically favorable for a specific value of the nucleus volume. As its volume increases, the energy balance changes and the hydride-matrix system transits to a new state with a new level of energy balance. In practice, this means that the growing kinetics of the hydride phase is not steady as it depends on the volume of the converted phase.

## Введение

Необходимость снижения парниковых газов в атмосфере, уменьшения выбросов $CO_2$ и диверсификация химических технологий с целью повышения эффективности производства требуют новых подходов к поиску и замене традиционных источников энергии на новые, с меньшим содержанием вредных выбросов. Подобная задача не имеет быстрого решения и требует комплексных исследований научных, инженерных и конструкторских коллективов. Водород является идеальным энергоносителем. Однако существующие на сегодня методы его хранения, такие как газ под высоким давлением или сжиженный водород, не могут соответствовать будущим целям его применения, прежде всего по безопасности. Металлогидридный способ хранения водорода лишен этого недостатка. В последнее время проводятся интенсивные исследования гидридов металлов с целью улучшения свойств и кинетики гидрирования [1–3].

Группа гидридов на основе Mg является многообещающим кандидатом для конкурентоспособного хранения водорода с обратимой водородной емкостью до 7,6 мас.% [4; 5]. Несмотря на то что первая промышленная установка, основанная на металлогидридном способе хранения водорода [6], была произведена в 2012 г., вплоть до настоящего времени этот опыт не получил широкого распространения. Основная причина заключается в том, что масштабирование этого успешного эксперимента требует создания инфраструктуры, которая включает как само предложение, так и потребность его использования. Основным тормозящим фактором на этом пути является кинетика сорбции/десорбции водорода в магнии, на которую оказывают влияние различные факторы. Не последнее место среди них отводится напряжениям, возникающим в ходе гидридного превращения и инициирующим развитие как упругой, так и (в ряде случаев) пластической деформации. Существует общее представление, что такие напряжения при многократном повторении циклов «сорбция/десорбция водорода» приводят к изменению фракционного состава исходного материала, что оказывает влияние на обратимость процесса [7; 8].

Гидрид магния $MgH_2$ представляет собой химическое соединение. Водород, проникая в магний в достаточном для образования гидрида количестве, провоцирует фазовый переход, который сопровождается изменением параметров элементарной ячейки. Вначале в металле под

действием градиента концентрации водорода возникает градиент расширения кристаллической решетки металла, что приводит к появлению внутренних напряжений в структуре магния, индуцированных водородом. Такие напряжения называют концентрационными напряжениями, или водородоупругостью [9]. При возникновении устойчивого зародыша гидрида когерентная связь «гидрид – матрица» нарушается, и при разнице в объемах элементарных ячеек 30 % гидридный зародыш провоцирует появление упругих деформаций вокруг него. В процессе роста зародыша из-за этого же несоответствия объемов возможно развитие пластической деформации металла, которая сопровождается возникновением и ростом плотности дислокаций в матрице [10; 11].

Поскольку пластическая деформация в этом случае обусловлена фазовым (гидридным) превращением, иногда говорят о «водородофазовых» напряжениях [12]. Ряд авторов предполагает [13–17], что деформации в этом случае локализованы только вблизи гидрида и могут достигать значительной величины вплоть до разрушения материала. Задача еще более усложняется, если принять во внимание место зарождения гидрида (внутри матрицы, на свободной поверхности, ювенильной поверхности или в зоне роста трещины, на линии дислокации и т.д.). Одновременно учесть все возможные факторы, влияющие на кинетику роста новой фазы, практически невозможно, поэтому существует несколько моделей этого процесса [18]. Трудность проверки той или иной модели связана с тем, что они включают несколько элементарных физических механизмов.

В последние годы возрос интерес к расчетным методам исследования, которые позволяют выделить различные стадии возникновения и роста зародышей новой фазы [19–21]. Деформационное поведение материала в процессе гидридного превращения актуально и в качестве прототипа для моделирования зародышеобразования при фазовом переходе, а результаты расчетов для проверки можно соотнести с экспериментом. В качестве примера приведем работы [22; 23], где были предложены новые энергетические условия устойчивости механической системы «магний – гидрид магния», интерпретирующие появление новой фазы в напряженно-деформированном состоянии системы путем перехода к соответствующей термоупругой задаче. Авторами выявлены энергетически выгодные величины и формы зародышей в зависимости от физико-механических параметров системы. Дальнейшее развитие этого направления расчетов с новой формулировкой энергетических условий, а также оценка влияния близлежащих свободных поверхностей (полостей) или зародышей гидрида на величину полной энергии системы, представлено в работе [24].

В настоящее время интенсивно развиваются теории обобщенного континуума, использующие неклассические определяющие соотношения [25]. Это связано, прежде всего, с необходимостью описания размерных эффектов, в том числе в наноструктурированных материалах, различных сверхтонких структурах, материалах с большими градиентами неоднородностей, и другими задачами на мезо- и микроуровне [26]. Первоначальные идеи исходят к моделям братьев Коссера (1910), далее неклассические теории развивались в работах Тупина, Миндлина и других ученых [27–29].

На практике используются, как правило, упрощенные (прикладные) модели с малым количеством параметров, в частности, однопараметрические модели [30; 31]. Наиболее распространенной однопараметрической градиентной теорией упругости является вариант Айфантиса [32], который положен в основу расчетов, приведенных в данном исследовании. Основное внимание обращено на условия возникновения и распределения деформации, которая является неотъемлемой частью процесса фазового превращения, сопровождая образование зародыша гидрида магния. Это связано со следующими факторами. Во-первых, абсорбция водорода металлом на первом этапе его проникновения представляет собой градиентное распределение водорода вглубь исследуемого объекта. Во-вторых, на этом этапе распределение водорода неоднородно. Это подразумевает, что в локальных микрообъемах материала концентрация водорода превышает пороговые для диффузионного распределения значения, а в ряде случаев может достигать критического значения, достаточного для образования гидрида. Таким образом, описание возникновения и оценка уровня деформаций и напряжений в окрестности зародыша гидрида в рамках градиентной теории представляет исследовательский интерес. Статья посвящена изучению упругих деформаций, индуцированных образованием гидрида, анализу фазового превращения в слое при одноосной деформации и влиянию различных параметров на полную энергию системы в рамках градиентной теории упругости.

## Постановка задачи

*Общие соотношения.* Простейший вариант градиентной теории упругости изотропного материала основывается на выражении плотности энергии упругой деформации $w$ как функции деформации и ее градиента [32]

$$w = \frac{1}{2}\lambda\varepsilon_{ii}\varepsilon_{jj} + \mu\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij} + l^2\left(\frac{1}{2}\lambda\varepsilon_{ii,k}\varepsilon_{jj,k} + \mu\varepsilon_{ij,k}\varepsilon_{ij,k}\right), \quad (1)$$

где $l$ – градиентный параметр, имеющий размерность длины.

Считается, что градиентная теория более подходит для описания упругого поведения материалов на микроуровне, причем параметр $l$ имеет порядок характерного размера объекта, например, зерна.

Тензор малых деформаций определяется обычным образом

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}). \quad (2)$$

Тензор напряжений Коши $\tau_{ij}$ записывается обычным образом

$$\tau_{ij} = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon_{ij}}. \quad (3)$$

Полные напряжения определяются как

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - m_{ijk,k} = (1 - l^2\Delta)\tau_{ij}, \quad (4)$$

где $m_{ijk} = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon_{ij,k}} = l^2 \tau_{ij,k}$ – компоненты тензора моментных напряжений; $\Delta$ – оператор Лапласа.

Уравнения равновесия формулируются для полных напряжений

$$\sigma_{ij,j} + f_i = 0, \quad (5)$$

где $f_i$ – компоненты вектора объемных сил.

В области фазового превращения (гидрида) полная деформация складывается из упругой части (1.1) $\varepsilon_{ij}^e$ и части, связанной с фазовым превращением $\varepsilon_{ij}^f$

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^f. \quad (6)$$

Мы предполагаем, что гидрид растет изотропно – одинаково по всем направлениям [24], поэтому $\varepsilon_{ij}^f = \frac{1}{3}\varepsilon_V^f \delta_{ij}$, где $\varepsilon_V^f$ – объемная деформация при фазовом превращении. Выразим из (6) упругие деформации $\varepsilon_{ij}^e$ и подставим их в плотность энергии упругой деформации $w$ (1), получим после преобразований

$$\begin{aligned} w_f = {} & \frac{1}{2}\lambda_f (\varepsilon_V - \varepsilon_V^f)^2 + \mu_f \left(\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3}\varepsilon_V^f \delta_{ij}\right)\left(\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3}\varepsilon_V^f \delta_{ij}\right) + \dots \\ & \dots + l_f^2 \left\{ \frac{1}{2}\lambda_f (\varepsilon_{V,k} - \varepsilon_{V,k}^f)^2 + \right. \\ & \left. + \mu_f \left(\varepsilon_{ij,k} - \frac{1}{3}\varepsilon_{V,k}^f \delta_{ij}\right)\left(\varepsilon_{ij,k} - \frac{1}{3}\varepsilon_{V,k}^f \delta_{ij}\right) \right\}, \end{aligned} \quad (7)$$

где $l_f$ – градиентный параметр в области гидрида.

В этом случае, напряжения $\tau_{ij}$ и $m_{ijk}$ выражаются как

$$\begin{aligned} \tau_{ij} &= \left(\lambda_f \varepsilon_V - K_f \varepsilon_V^f\right)\delta_{ij} + 2\mu_f \varepsilon_{ij}, \\ m_{ijk} &= l_f^2 \left\{ \left(\lambda_f \varepsilon_{V,k} - K_f \varepsilon_{V,k}^f\right)\delta_{ij} + 2\mu_f \varepsilon_{ij,k} \right\}, \end{aligned} \quad (8)$$

где $K_f = \lambda_f + \frac{2}{3}\mu_f$ – объемный модуль гидрида.

Следующее упрощение для рассматриваемой задачи состоит в предположении постоянства распределения деформации фазового превращения по объему гидрида $\varepsilon_V^f = \text{const}$ [22; 24]. С учетом этого окончательно получим

$$\begin{aligned} \tau_{ij} &= \left(\lambda_f \varepsilon_V - K_f \varepsilon_V^f\right)\delta_{ij} + 2\mu_f \varepsilon_{ij}, \\ m_{ijk} &= l_f^2 \left(\lambda_f \varepsilon_{V,k} \delta_{ij} + 2\mu_f \varepsilon_{ij,k}\right). \end{aligned} \quad (9)$$

Физические уравнения (9) связывают напряжения Коши и моментные напряжения с упругими деформациями и деформациями фазового превращения при сделанном предположении.

*Одноосная деформация слоя, состоящего из матрицы и гидрида.* В области гидридного превращения выделим слой единичной толщины, который содержит магний и гидрид. Пусть координата $x_1 = x$ направлена поперек слоя, тогда $u = u_1(x), u_2 = u_3 = 0$.

Деформации выражаются как

$$\varepsilon_x(x) = \frac{\partial u}{\partial x} = \varepsilon_{11}, \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = 0, \varepsilon_V = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33} = \varepsilon_x.$$

В области матрицы $h \le x \le 1$, где $h$ – предельное значение зоны превращения (толщина слоя гидрида)

$$\begin{aligned} \tau_{11} = \tau_x &= \frac{\partial w}{\partial \varepsilon_{11}} = \lambda \varepsilon_V \delta_{11} + 2\mu\varepsilon_{11} = (\lambda + 2\mu)\varepsilon_{11} = (\lambda + 2\mu)\varepsilon_x, \\ \tau_{22} = \tau_y &= \frac{\partial w}{\partial \varepsilon_{22}} = \lambda \varepsilon_V \delta_{22} = \lambda \varepsilon_x, \\ \tau_{33} = \tau_z &= \frac{\partial w}{\partial \varepsilon_{33}} = \lambda \varepsilon_V \delta_{33} = \lambda \varepsilon_x, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\sigma_{11} = \tau_{11} - m_{111,1} = \tau_{11} - l^2 \tau_{11,11} = (\lambda + 2\mu)\left(\varepsilon_x - l^2 \frac{\partial^2 \varepsilon_x}{\partial x^2}\right),$$

$$\sigma_{22} = \sigma_{33} = \lambda \left(\varepsilon_x - l^2 \frac{\partial^2 \varepsilon_x}{\partial x^2}\right).$$

Уравнение равновесия (5)

$$\frac{\partial \varepsilon_x}{\partial x} - l^2 \frac{\partial^3 \varepsilon_x}{\partial x^3} = 0. \quad (11)$$

В области гидрида (переменные обозначаем верхним индексом «1») $0 \le x < h$

$$\begin{aligned} \tau_{11}^{(1)} = \tau_x^{(1)} &= \frac{\partial w_f}{\partial \varepsilon_{11}} = (\lambda_f + 2\mu_f)\varepsilon_x^{(1)} - K_f \varepsilon_V^f, \\ \tau_{22}^{(1)} = \tau_y^{(1)} &= \frac{\partial w_f}{\partial \varepsilon_{22}} = \lambda_f \varepsilon_V - K_f \varepsilon_V^f, \\ \tau_{33}^{(1)} = \tau_z^{(1)} &= \frac{\partial w_f}{\partial \varepsilon_{33}} = \lambda_f \varepsilon_V - K_f \varepsilon_V^f. \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^{(1)} &= \tau_{11}^{(1)} - m_{111.1}^{(1)} = \tau_{11}^{(1)} - l_f^2 \tau_{11,11}^{(1)} = \\ &= (\lambda_f + 2\mu_f)\left(\varepsilon_x^{(1)} - l_f^2 \frac{\partial^2 \varepsilon_x^{(1)}}{\partial x^2}\right) - K_f \varepsilon_V^f, \end{aligned}$$

$$\sigma_{22}^{(1)} = \sigma_{33}^{(1)} = \lambda_f (\varepsilon_x^{(1)} - l_f^2 \frac{\partial^2 \varepsilon_x^{(1)}}{\partial x^2}).$$

Уравнение равновесия в области гидрида

$$\frac{\partial \varepsilon_x^{(1)}}{\partial x} - l_f^2 \frac{\partial^3 \varepsilon_x^{(1)}}{\partial x^3} = 0. \quad (13)$$

Интегрирование уравнений (11) и (13) дает выражения для деформаций и их производных

$$\varepsilon_x\left(x\right)=C_1+C_2e^{x/l}+C_3e^{-x/l},$$
$$\varepsilon_x^{(1)}\left(x\right)=D_1+D_2e^{x/l_f}+D_3e^{-x/l_f},$$
$$\frac{\partial\varepsilon_x}{\partial x}=\frac{C_2}{l}e^{x/l}-\frac{C_3}{l}e^{-\frac{x}{l}},\ \frac{\partial\varepsilon_x^{(1)}}{\partial x}=\frac{D_2}{l_f}e^{x/l_f}-\frac{D_3}{l_f}e^{-x/l_f},\quad(14)$$

а также перемещений

$$u\left(x\right)=C_0+C_1x+C_2le^{x/l}-C_3le^{-x/l},$$
$$u^{(1)}\left(x\right)=D_0+D_1x+D_2l_fe^{x/l_f}-D_3l_fe^{-x/l_f}.\quad(15)$$

Из уравнений (11) и (13) следует, что

$$\sigma_x=\left(\lambda+2\mu\right)C_1,\qquad\sigma_x^{(1)}=(\lambda_f+2\mu_f)D_1-K_f\varepsilon_V^f.\quad(16)$$

Для определения восьми неизвестных постоянных $C_i,D_i,i=\overline{0,3}$ требуется сформулировать граничные условия, четыре из которых являются классическими

$$u^{(1)}\left(0\right)=0,\ u\left(1\right)=0,\ u^{(1)}\left(h\right)=u\left(h\right),\ \sigma_x^{(1)}\left(h\right)=\sigma_x\left(h\right),\quad(17)$$

где $h$ – толщина слоя гидрида.

Дополнительные граничные условия в рамках градиентной теории упругости

$$\varepsilon_x^{(1)}\left(0\right)=0,\ \varepsilon_x\left(1\right)=0,\ \varepsilon_x^{(1)}\left(h\right)=0,\ \varepsilon_x\left(h\right)=0.\quad(18)$$

Таким образом, задача определения полей перемещений, деформаций и напряжений в слое сведена к решению восьми линейных уравнений (17), (18) относительно неизвестных постоянных $C_i,D_i,i=\overline{0,3}$.

Прокомментируем последние два условия в (18) на контактной границе между гидридом и матрицей при $x=h$. Обычно используемые в градиентной теории упругости дополнительные граничные условия на контакте двух разнородных пластин – это требования гладкости – непрерывности деформаций и их производных. Однако в нашей задаче о фазовом превращении такие требования приводят к некорректным результатам, а именно к смещению контактной границы в область гидрида $u\left(h\right)<0$. Это физически невозможно, поскольку гидрид при образовании стремится расшириться, что приводит к $u\left(h\right)>0$. Для условий (18), принятых в статье, этот недостаток устраняется (рис. 3).

*Энергетические соотношения для градиентной теории*. Согласно [24], полная энергия системы «матрица – гидрид» записывается в виде

$$\mathrm{J}=\frac{1}{2}\int_V\sigma_{ij}\,\varepsilon_{ij}\,dV+\frac{1}{2}\int_{V_f}\sigma_{ij}^f\varepsilon_{ij}^f\,dV-\int_S p_i^*u_i\,dS-$$
$$-K_f\varepsilon_V^f\int_{S_f}u_n\,dS-\gamma_{Vf}V_f+\gamma_{Sf}S_f\to\min.\quad(19)$$

Для рассматриваемого случая одноосной деформации слоя с учетом полученного решения

$$\frac{1}{2}\int_V\sigma_{ij}\,\varepsilon_{ij}\,dV=\frac{1}{2}SC_1\left(\lambda+2\mu\right)\times$$
$$\times\left[C_1\left(1-h\right)+C_2l\left(e^{\frac{1}{l}}-e^{\frac{h}{l}}\right)-C_3l\left(e^{-\frac{1}{l}}-e^{-\frac{h}{l}}\right)\right],$$

$$\frac{1}{2}\int_{V_f}\sigma_{ij}^f\varepsilon_{ij}^f\,dV=\frac{1}{2}SD_1\left[(\lambda_f+2\mu_f)D_1-K_f\varepsilon_V^f\right]\times$$
$$\times\left[D_1h+D_2l_f\left(e^{h/l_f}-1\right)-D_3l_f\left(e^{-h/l_f}-1\right)\right],\quad(20)$$

$$\int_S p_i^*u_i\,dS=0,\ K_f\varepsilon_V^f\int_{S_f}u_n\,dS=K_f\varepsilon_V^fS\left[C_0+C_1h+C_2le^{\frac{h}{l}}-C_3le^{-\frac{h}{l}}\right],$$

$$-\gamma_{Vf}V_f+\gamma_{Sf}S_f=-\gamma_{Vf}hS+\gamma_{Sf}S,$$

где $p_i^*$ – компоненты вектора поверхностных нагрузок; $V_f$, $S_f$ – объем и поверхность гидрида; $\gamma_{Vf}$, $\gamma_{Sf}$ – коэффициенты, учитывающие вклад физико-химических эффектов в полную энергию при фазовом превращении.

## Результаты и их обсуждение

*Особенности распределения перемещений и деформаций в слое, состоящем из гидрида и матрицы.* Классическое распределение перемещений и деформаций по толщине слоя достигается при малых величинах градиентных параметров $l,l_f$. Чем больше эти параметры, тем значительнее отклонение от классического решения. На рис. 1 представлены распределения перемещений при $l=l_f$=0,01 (классический вариант).

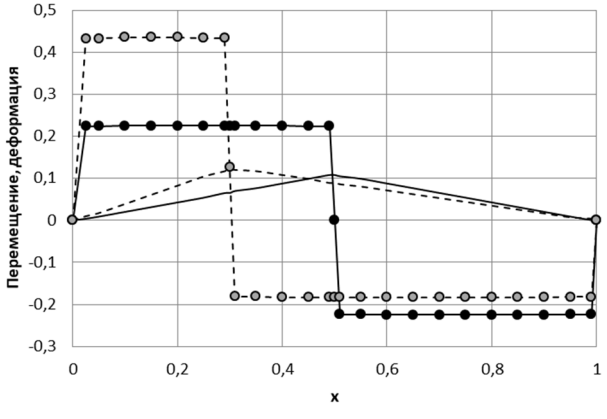



Рис. 1. Распределение перемещений (сплошная линия: $h$ = 0,5; пунктирная линия: $h$ = 0,3) и деформаций (черный круг: $h$ = 0,5; серый круг: $h$ = 0,3) по толщине слоя

Fig. 1. Distribution of displacements (solid line: $h$ = 0.5; dotted line: h = 0.3) and deformations (black circle: $h$ = 0.5; gray circle: $h$ = 0.3) over the layer thickness

Таким образом, в классическом решении перемещения являются линейными функциями, а деформации – кусочно-постоянными функциями (кроме окрестности

границ отрезка и контакта). При уменьшении толщины слоя гидрида $h$ величина деформации увеличивается.

Как следует из (16), напряжения являются постоянными по толщине слоя, но величина их зависит как от линейного размера гидрида $h$, так и от значений градиентных параметров $l, l_f$.

На рис. 2 показаны зависимости напряжения, индуцированного появлением гидрида, от толщины слоя гидрида $h$ при различных значениях градиентных параметров, принимаемых одинаковыми $l=l_f$. Белый маркер соответствует $l=l_f$=0,01; светло-серый – 0,1; темно-серый – 0,2; черный – 0,5.

Из рисунка следует, что увеличение $h$ ведет к росту (по абсолютной величине) сжимающих напряжений. Причем при размерах гидрида в диапазоне 0,2–0,3 классическое решение дает более чем в 1,5–2 раза выше уровень напряжений, чем решение в рамках градиентной теории упругости. Однако при достижении значений $h > 0,5$ различия между двумя вариантами решения нивелируются.

Если учесть, что градиентный параметр $l=l_f$ соизмерим с линейным размером объекта (в нашем случае – зерна), этот результат можно трактовать как наложение полей напряжений от соседних зерен. То есть по сути это есть определенная граница, переход за которую уравнивает значимость результатов расчета по двум принципиально различным подходам.

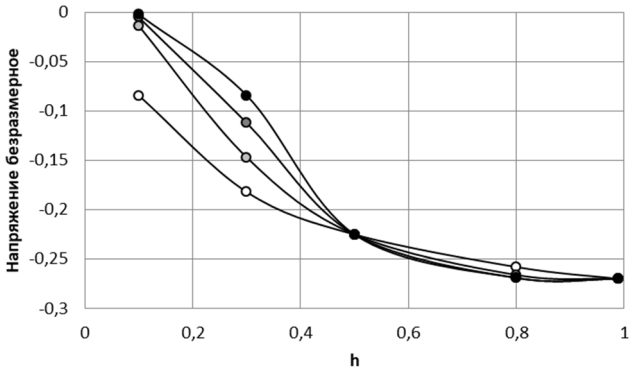



Рис. 2. Зависимости напряжения от толщины слоя гидрида ($h$)

Fig. 2. Stress dependences on hydride layer thickness ($h$)

Как уже отмечалось выше, поля перемещений и деформаций при больших градиентных параметрах максимально отличаются от классического решения. На рис. 3 показаны распределения перемещений и деформаций (аналогично рис. 1) для $l = l_f$=1.

Линиями показаны перемещения (сплошная – $h$ = 0,5; пунктирная – $h$ = 0,3; точечная – $h$ = 0,1), а маркерами (и линиями) деформации (черный круг – $h$ = 0,5; серый круг – $h$ = 0,3; белый круг – $h$ = 0,1). Отличия от классического решения (см. рис. 1) состоят в «сглаживании» деформаций и отклонении их от кусочно-постоянной функции, значительном уменьшении уровня максимальных деформаций – более чем на порядок.

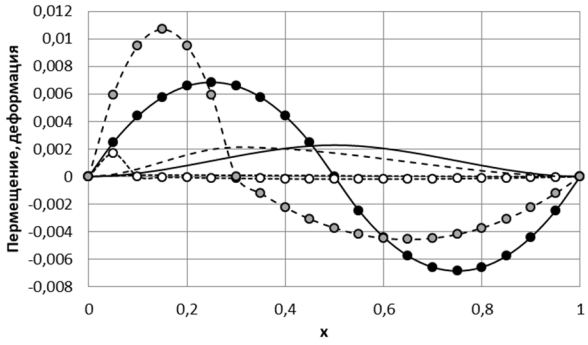



Рис. 3. Распределение перемещений (линии) и деформаций (маркеры с линиями) по толщине слоя

Fig. 3. Distribution of displacements (lines) and deformations (markers with lines) over the layer thickness

*Особенности влияния различных факторов на полную энергию системы.* Зависимости $J = f(h)$, где $J$ – полная энергия системы, показаны на рис. 4: пунктирная линия – $l = l_f$ = 1,0; белый круг – $l = l_f$ = 0,5; светло-серый круг – $l = l_f$ = 0,3; темно-серый круг – $l = l_f$ = 0,2; черный круг – $l = l_f$ = 0,1; сплошная линия – $l = l_f$ = 0,01 (классическое решение). Значения параметров, характеризующих физико-химические процессы $\gamma_{Vf}$ = 0,3; $\gamma_{Sf}$ = 1.

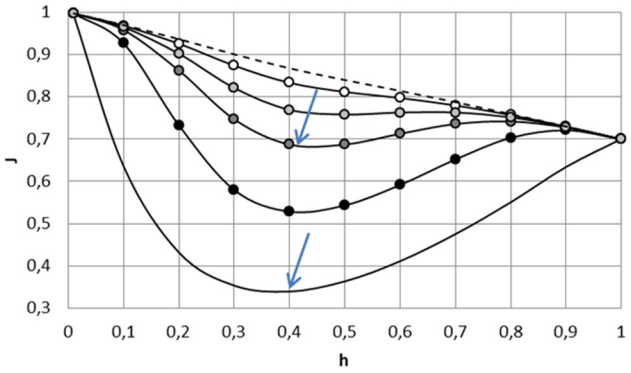



Рис. 4. Зависимость полной энергии от толщины слоя гидрида ($\gamma_{Vf}$ = 0,3; $\gamma_{Sf}$ = 1)

Fig. 4. Dependence of total energy on hydride layer thickness ($\gamma_{Vf}$ = 0,3; $\gamma_{Sf}$ = 1)

Очевидно, что классическое решение дает более глубокий минимум, достигаемый при $h^*$ = 0,4. Решение в рамках градиентной теории упругости дает более «мелкий» минимум, несколько смещаемый в сторону увеличения $h^*$. При увеличении градиентного параметра локальный минимум «выполаживается», переходя в глобальный минимум при $h^* \to 1$.

Обращает на себя внимание установленная закономерность, а именно наличие «глобального минимума». Здесь опять следует напомнить, что параметр $l = l_f$ соизмерим с линейной величиной зерна. Полученный результат в целом позволяет предположить, что энергетический выигрыш системы в пределах одного зерна меняется нелинейно, и, проходя через минимум, далее выигрыш энергии снижается по мере увеличения

линейной величины зерна, то есть по мере увеличения влияния соседних объектов – зерен. Переход частных минимумов в общий глобальный минимум энергии можно связать со сменой контролирующего фазовое превращение механизма, когда превращение охватывает значительный объем материала и его микроструктурные особенности теряют свою значимость. При этом, однако, сохраняется влияние выигрыша полной энергии в процессе фазового превращения, как это уже было показано ранее [23; 24].

В качестве экспериментального аналога этого заключения можно рассмотреть механизм диффузии водорода в материалах (в частности, в магнии), основанный преимущественно на теории диффузии [33–36]. Принято считать, что диффузия по границам зерен вносит определяющий вклад в температурном интервале до $0{,}6T_{\text{пл}}$ ($T_{\text{пл}}$ – температура плавления) и в поликристаллических материалах в общем случае осуществляется в несколько этапов, или, как принято говорить, реализуется в виде ряда сменяющих друг друга диффузионных режимов [37]. Диффузия водорода в магний имеет свои особенности. Ввиду малого размера экранизированного протона, одновременно с движением по границам зерен водород абсорбируется и в приповерхностном слое металла. Далее происходит проникновение вещества в объем. Через определенное время диффузионные фронты, возникшие в результате его протекания через соседние границы зерен и поверхность, практически полностью перекрываются, и концентрация выравнивается по всему диффузионному фронту. Это представление необходимо дополнить существенным замечанием: в тех локальных микрообъемах, где концентрация водорода оказывается достаточной для образования гидрида, происходит фазовое превращение и возникают напряжения, которые нарушают идеальную картину диффузии и влияют на дальнейшее образование $MgH_2$. При всех несомненных достоинствах диффузионных моделей проникновения водорода в металл они не учитывают вероятность одновременно происходящего гидридного превращения. В контексте данной работы необходимо заметить, что, согласно существующей точке зрения [38], гидридные зародыши магния при соприкосновении образуют сплошной слой, препятствующий дальнейшему проникновению водорода вследствие малого коэффициента диффузии водорода в гидриде, однако роль образования напряжений/деформаций на границе раздела «гидрид – матрица» в процессе фазового перехода не учитывается. Полученные результаты позволяют восполнить этот пробел и сместить акцент именно на роль напряжений на границе раздела «гидрид – матрица» в процессе фазового перехода. Для понимания этого обратимся вновь к однопараметрической градиентной теории.

Максимально простой вариант этой теории (Айфантис) в одномерном варианте для декартовой системы координат можно записать как:

$$\sigma_x = E\varepsilon_x + lE\frac{\partial \varepsilon_x}{\partial x}, \qquad (21)$$

где $E$ – модуль упругости; $l$ – градиентный параметр, имеющий размерность длины.

Если в некотором диапазоне $x_0 \le x \le x_1$ напряжение постоянно $\sigma_x = C$, то соотношение (21) представляет собой дифференциальное уравнение относительно $\varepsilon_x$, решение которого имеет вид

$$\varepsilon_x = \frac{C}{E} - C_1 \exp(-\frac{x}{l}), \qquad (22)$$

где $C_1$ – постоянная интегрирования.

Пусть при $x = x_0$, $\varepsilon_x = \varepsilon_{x0}$, тогда

$$\varepsilon_x = \frac{C}{E} - (\frac{C}{E} - \varepsilon_{x0})\exp(\frac{x_0 - x}{l}). \qquad (23)$$

Распределение деформации при заданных параметрах $x_0 = 0$; $x_1 = 2$; $\varepsilon_{x0} = 0{,}001$; $\frac{C}{E} = 0{,}01$ для различных значений градиентного параметра $l$ показаны на рис. 5.

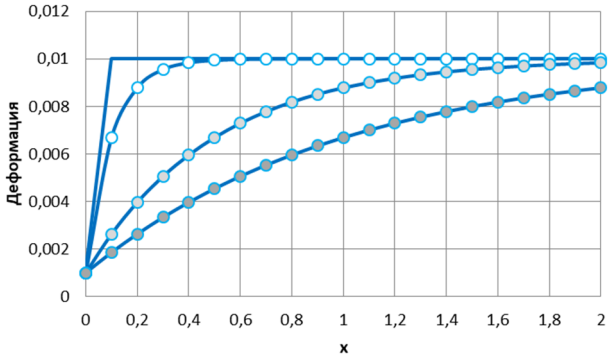



Рис. 5. Распределение деформации для различных значений градиентного параметра: $l = 0{,}01$ – линия; $l = 0{,}1$ – белый маркер; $l = 0{,}5$ – светло-серый маркер; $l = 1{,}0$ – темно-серый маркер

Fig. 5. Strain distribution for different values of the gradient parameter: $l = 0.01$ – line; $l = 0.1$ – white marker; $l = 0.5$ – light gray marker; $l = 1.0$ – dark gray marker

Здесь параметр $\frac{C}{E} = \frac{\sigma}{E}$ играет роль классической деформации, соответствующей приложенному напряжению, а параметр $\varepsilon_{x0}$ – деформация, задаваемая на границе участка. При малом значении $l = 0{,}01$ деформация практически сразу (скачком в классической теории) выходит на уровень $\frac{\sigma}{E} = 0{,}01$. С ростом градиентного параметра (с отклонением от классического решения) выход на уровень $\frac{\sigma}{E} = 0{,}01$ достигается при больших значениях $x$.

С позиции гидридного превращения из этого следует главный вывод: распределение деформации (напряжений) вблизи зародыша гидрида носит не локальный, а дальнодействующий характер. Результаты, представленные на рис. 5, позволяют утверждать, что локальное образование гидрида энергетически выгодно только при

определенном объеме гидрида. По мере увеличения его объема энергетический выигрыш исчерпывается, и система «гидрид – матрица» переходит в новое энергетическое состояние.

Таким образом, градиентная теория хорошо согласуется с представлениями о механизме образования гидрида магния, объясняя возникновение «переходных» зон (областей с небольшим процентным содержанием гидрида) и влияния напряжений на разных этапах его образования.

## Заключение

Согласно литературе, применение градиентной теории упругости оправданно на микроуровне: в масштабах расчетной области, сравнимых с размером (или менее) зерна. Таким образом, при больших размерах области матрицы и зародыша гидрида по сравнению с некоторым характерным размером, например, размером зерна, мы должны ориентироваться на классическое решение. При малых размерах зародыша гидрида, сравнимых или меньших (и/или значительно меньших) размера зерна, считается, что более верным является решение по градиентной теории – кривые с «выполаживающимся» минимумом.

Сложный характер зависимости полной энергии от относительного объема гидридной фазы позволяет предположить наличие как минимум двух механизмов, контролирующих ее образование и рост. С позиции кинетики гидридных превращений это могут быть механизмы «зародышеобразования и роста» и/или «диффузионный», который в свою очередь базируется на преимущественном характере проникновения водорода в металл по границам зерен или по телу зерна. По-видимому, напряжения, возникающие вблизи зародыша, создают условия для преимущественной реализации одного из механизмов. Когда выигрыш свободной энергии исчерпывается, гидридное превращение вступает в новую фазу своего развития. В любом случае, представленные в данном исследовании результаты демонстрируют явную предрасположенность системы «магний – водород» к снижению энергетического барьера превращения в зависимости от размера гидридного зародыша.

## Библиографический список


1. David, E. An overview of advanced materials for hydrogen storage / E. David // Journal of Materials Processing Technology. – 2005. – Vol. 162–163. – P. 169–177. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2005.02.027

2. Review on Solid State Hydrogen Storage Material / Prabhukhot, R. Prachi, Wagh, M. Mahesh, Gangal, C.A Aneesh // Advances in Energy and Power. – 2016. – Vol. 4(2). – P. 11–22. DOI: 10.13189/aep.2016.040202

3. An analytical review of recent advancements on solid-state hydrogen storage / El Harrak Abdechafik, H.A. Ousaleh, S. Mehmood, Y.F. Baba, I. Bürger, M. Linder, A. Faik // International Journal of Hydrogen Energy. – 2024. – Vol. 52, Part D. no. 2. – P. 1182–1193. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2023.10.218

4. Magnesium-based alloys for solid-state hydrogen storage applications: A review / C.N.C. Hitam, M.A.A. Aziz, A.H. Ruhaimi, M.R. Taib // International Journal of Hydrogen Energy. – 2021. – Vol. 46. iss. 60, 1. – P. 31067–31083. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2021.03.153

5. Hydrogen Solid State Storage on MgH2 Compacts for Mass Applications / D. Fruchart, M. Jehan, N. Skryabina, P. de Rango // Metals. – 2023. – Vol. 13, no 5. – P. 992. DOI: 10.3390/met13050992

6. Jehan, M. McPhy-Energy Proposal for Solid Hydrogen Storage Materials and Systems / M. Jehan, D. Fruchart // Journal of Alloys and Compounds. – 2013. – Vol. 580. – P. 343–348. DOI: 10.1016/j.jallcom.2013.03.266

7. Correlation between microstructural and mechanical behavior of nanostructured MgH2 upon hydrogen cycling / S. Nachev, P. De Rango, D. Fruchart, N. Skryabina, Ph. Marty // Journal of Alloys and Compounds. – 2015. – Vol. 645, suppl. 1, 5. – P. 434–437. DOI: 10.1016/j.jallcom.2014.12.088

8. De Rango, P. Hydrogen storage systems based on magnesium hydride: from laboratory tests to fuel cell integration / P. De Rango, P. Marty, D. Fruchart // Appl. Phys. – 2016. – A. 122. – P. 126. DOI: 10.1007/s00339-016-9646-1

9. Глухова, Ж.Л. Явление водородоупругости в системах металл-водород / Ж.Л. Глухова, В.А. Гольцов // Альтернативная энергетика и экология – ISJAEE. – 2014. – № 1 (141). – С. 138–151.

10. Makenas, B.J. Phase changes in the niobium-hydrogen system I: Accommodation effects during hydride precipitation / B.J. Makenas, H.K. Birnbaum // Acta Metallurgica. – 1980. – Vol. 28. iss. 7. – P. 979–988. DOI: 10.1016/0001-6160(80)90116-9

11. Carpenter, G.J.C. The dilatational misfit of zirconium hydrides precipitated in zirconium / G.J.C. Carpenter // Journal of Nuclear Materials. – 1973. – Vol. 48(3). – P. 264–266. DOI: 10.1016/0022-3115(73)90022-6

12. Гольцов, В.А. Явления, обусловленные водородом и индуцированными им фазовыми превращениями / В.А. Гольцов // Взаимодействие водорода с металлами / Отв. ред. А.П. Захаров. – М.: Наука, 1987. – Гл. 9. – С. 264–292.

13. Coleman, C.E. Cracking of Hydride-forming Metals and Alloys / C.E. Coleman // Comprehensive Structural Integrity. – 2003. – Vol. 6. – P. 103–161. DOI: 10.1016/B0-08-043749-4/06104-8

14. Birnbaum, H.K. Mechanical properties of metal hydrides / H.K. Birnbaum // Journal of the Less Common Metals. – 1984. – Vol. 104 (1). – P. 31–41. DOI: 10.1016/0022-5088(84)90433-8

15. Hydrogen Embrittlement and Stress Corrosion Cracking: A Troiano Festschrift / eds: A.R. Troiano, R. Gibala, R.F. Hehemann. – ASM International, 1984. – 324 p.

16. Birnbaum, H.K. Hydrogen-enhanced localized plasticity – a mechanism for hydrogen-related fracture / H.K. Birnbaum, P.P. Sofronis // Materials science and Engineering: A. – 1994. – Vol. 176 (1-2). – P. 191–202. DOI: 10.1016/0921-5093(94)90975-X

17. Mechanisms of Hydrogen Related Fracture – A Review / H.K. Birnbaum, I.M. Robertson, P. Sofronis, D. Teter // In Proceedings of the Second International Conference on Corrosion-Deformation Interactions. CDI'96, Nice, France, 24–26 September 1996. – P. 172–195.

18. Pasquini, L. Design of Nanomaterials for Hydrogen Storage Energies. – 2020. – V.13 – 3503. DOI: 10.3390/en13133503

19. Microstructural development involving nucleation and growth phenomena simulated with the Phase Field method / J.P. Simmons, Youhai Wen, C. Shen, Y.Z. Wang // Materials Science and Engineering: A. – 2004. – Vol. 365 (1–2). – P. 136–143. DOI: 10.1016/j.msea.2003.09.019

20. Gupta, P. Simulation of non-planar three dimensional hydraulic fracture propagation / P. Gupta, C.A. Duarte // Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech. – 2014. – Vol. 38. – P. 1397–1430. DOI: 10.1002/nag.2305

21. Martinez-Paneda, E. A phase field formulation for hydrogen assisted cracking / E. Martinez-Paneda, A. Golahmar, C. Niordson // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 2018. – Vol. 342. – P. 742–761. DOI: 10.1016/j.cma.2018.07.021.S2CID 52360579

22. Аптуков, В.Н. Энергетические условия формирования гидрида магния / В.Н. Аптуков, Н.Е. Скрябина, Д. Фрушар // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2022. – № 2. – С. 25–38. DOI: 10.15593/perm.mech/2022.2.03

23. Аптуков, В.Н. Энергетические условия, определяющие размерный диапазон области образования гидрида магния / В.Н. Аптуков, Н.Е. Скрябина, Д. Фрушар // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2023. – № 6. – С. 5–17. DOI: 10.1016/j.jalmes.2024.100064

24. Skryabina, N. Role of induced elastic deformations at the $Mg/MgH_2$ transformation / N. Skryabina, V. Aptukov, D. Fruchart // Journal of Alloys and Metallurgical Systems. – 2024. – Vol. 5. 100064. DOI: 10.1016/j.jalmes.2024.100064

25. Трусов, П.В. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения / П.В. Трусов, А.И. Швейкин. – Новосибирск: Изд. СО РАН, 2019. – 605 с.

26. Лурье, С.А. Метод идентификации параметров градиентных моделей неоднородных структур с использованием дискретно-атомистического моделирования / С.А. Лурье, Ю.О. Соляев // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2014. – № 3. – С. 89–112.

27. Toupin, R.A. Elastic materials with couple stresses / R.A. Toupin // Arch. Rational Mech. Anal. – 1962. – Vol. 11. – P. 385–414.

28. Mindlin, R.D. Micro-structure in linear elasticity / R.D. Mindlin // Arch. Rational Mech. Anal. – 1964. – Vol. 16. – P. 51–78.

29. Васильев, В.В. О корректных нелокальных обобщенных теориях упругости / В.В. Васильев, С.А. Лурье // Физическая мезомеханика. – 2016. – Т. 19, № 1. – С. 47–59.

30. Полуобратное решение задачи чистого изгиба балки в градиентной теории упругости: отсутствие масштабных эффектов / Е.В. Ломакин, С.А. Лурье, Л.Н. Рабинский, Ю.О. Соляев // Доклады АН. – 2018. – Т. 479, № 4. – С. 390–394.

31. Ватульян, А.О. Колебание полосы с отслоением в рамках однопараметрической модели Айфантиса градиентной теории упругости / А.О. Ватульян, О.В. Явруян // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2022. – № 3. – С. 70–82.

32. Altan, B.S. On Some Aspects in the Special Theory of Gradient Elasticity / B.S. Altan, E.C. Aifantis // Journal of the Mechanical Behavior of Materials. – 1997. – Vol. 8, no 3. – P. 231–282.

33. Fukai, Y. Diffusion of hydrogen in metals / Y. Fukai, H. Sugimoto // Advances in Physics. – 1985. – Vol. 34 (2). – P. 263–326. DOI: 10.1080/00018738500101751

34. Toribio, J. A generalised model of hydrogen diffusion in metals with multiple trap types / J. Toribio, V. Kharin // Philosophical Magazine. – 2015. – Vol. 95(31). – P. 3429–3451. DOI: 10.1080/14786435.2015.1079660

35. Express penetration of hydrogen on Mg(1013) along the close-packed-planes / L. Ouyang, J. Tang, Y. Zhao, H. Wang, X. Yao, J. Liu, J. Zou, M. Zhu // Sci. Rep. – 2015. – Vol. 5. – P. 10776. DOI: 10.1038/srep10776

36. Self-recording and manipulation of fast long-range hydrogen diffusion in quasi-free magnesium / X. Duan, R. Griessen, R.J. Wijngaarden, S. Kamin, N. Liu // Phys. Rev. Materials. – 2018. – Vol. 2 (8). – P. 085802. DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.2.085802

37. Mehrer, H. Diffusion in solids: fundamentals, methods, materials diffusion-controlled processes / H. Mehrer. – Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007. – 651 p.

38. Lyu, J. Experimentally Observed Nucleation and Growth Behavior of $Mg/MgH_2$ during De/Hydrogenation of $MgH_2/Mg$ / J. Lyu, V. Kudiiarov, A. Lider // A Review. Materials. – 2022. – Vol. 15. – P. 8004. DOI: 10.3390/ma15228004

## References

1. David, E. An overview of advanced materials for hydrogen storage // Journal of Materials Processing Technology. – 2005. – V. 162–163. – pp. 169–177. http://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2005.02.027.

2. Prabhukhot, Prachi R., Wagh, Mahesh M., Gangal, Aneesh C. A Review on Solid State Hydrogen Storage Material // Advances in Energy and Power. – 2016. – V. 4(2). – pp. 11–22. http://doi.org/10.13189/aep.2016.040202.

3. Abdechafik, El Harrak, Ousaleh, H. A., Mehmood, S., Baba, Y. F., Bürger, I., Linder, M., Faik, A. An analytical review of recent advancements on solid-state hydrogen storage // International Journal of Hydrogen Energy. – 2024. – V. 52, Part D. – N 2. – pp. 1182–1193. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.10.218.

4. Hitam, C.N.C., Aziz, M.A.A., Ruhaimi, A.H., Taib, M.R. Magnesium-based alloys for solid-state hydrogen storage applications: A review // International Journal of Hydrogen Energy. – 2021. – V. 46. – Issue 60, 1. – pp. 31067–31083. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.03.153.

5. Fruchart, D., Jehan, M., Skryabina, N., de Rango, P. Hydrogen Solid State Storage on MgH2 Compacts for Mass Applications // Metals. – 2023. – V. 13. – N 5. – P. 992. https://doi.org/10.3390/met13050992.

6. Jehan, M., Fruchart, D. McPhy-Energy Proposal for Solid Hydrogen Storage Materials and Systems // Journal of Alloys and Compounds. – 2013. – V. 580. – pp. 343–348. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2013.03.266.

7. Nachev, S., De Rango, P., Fruchart, D., Skryabina, N., Marty, Ph. Correlation between microstructural and mechanical behavior of nanostructured MgH2 upon hydrogen cycling // Journal of Alloys and Compounds. – 2015. – V. 645. – Supplement 1, 5. – pp. 434–437. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.12.088.

8. De Rango, P., Marty, P., Fruchart, D. Hydrogen storage systems based on magnesium hydride: from laboratory tests to fuel cell integration // Appl. Phys. – 2016. – A. 122. – P. 126. https://doi.org/10.1007/s00339-016-9646-1.

9. Gluhova Ž.L., Gol'cov V.A. Âvlenie vodorodouprugosti v sistemah metall-vodorod // Al'ternativnaâ ènergetika i èkologiâ – ISJAEE. – 2014. – № 1 (141). – С. 138–151.

10. Makenas, B.J., Birnbaum, H.K. Phase changes in the niobium-hydrogen system I: Accommodation effects during hydride precipitation // Acta Metallurgica. – 1980. – V. 28. – Issue 7. – pp. 979–988. https://doi.org/10.1016/0001-6160(80)90116-9.

11. Carpenter, G.J.C. The dilatational misfit of zirconium hydrides precipitated in zirconium // Journal of Nuclear Materials. – 1973. – V. 48(3). – pp. 264–266. https://doi.org/10.1016/0022-3115(73)90022-6.

12. Gol'cov V.A. Âvleniâ, obuslovlennye vodorodom I inducirovannymi im fazovymi prevraŝ eniâmi // Vzaimodejstvie vodoroda

s metallami / Otv. red. A.P. Zaharov. – M.: Nauka, 1987. – Gl. 9. – P. 264–292.

13. Coleman, C.E. Cracking of Hydride-forming Metals and Alloys // Comprehensive Structural Integrity. – 2003. – V. 6. – pp. 103–161. https://doi.org/10.1016/B0-08-043749-4/06104-8.

14. Birnbaum, H.K. Mechanical properties of metal hydrides // Journal of the Less Common Metals. – 1984. – V. 104 (1). – pp. 31–41. https://doi.org/10.1016/0022-5088(84)90433-8.

15. Hydrogen Embrittlement and Stress Corrosion Cracking: A Troiano Festschrift. Eds: A.R. Troiano, R. Gibala, R.F. Hehemann, ASM International, 1984, 324 p.

16. Birnbaum H.K., Sofronis P. Hydrogen-enhanced localized plasticity – a mechanism for hydrogen-related fracture // Materials science and Engineering: A. – 1994. – V. 176 (1-2). – pp. 191–202. https://doi.org/10.1016/0921-5093(94)90975-X.

17. Birnbaum, H.K., Robertson, I.M., Sofronis, P., Teter, D. Mechanisms of Hydrogen Related Fracture – A Review. In Proceedings of the Second International Conference on Corrosion-Deformation Interactions. CDI'96, Nice, France, 24–26 September 1996; pp. 172–195.

18. Pasquini, L. Design of Nanomaterials for Hydrogen Storage Energies. – 2020. – V. 13 – 3503. https://doi.org/10.3390/en13133503.

19. Simmons, J.P., Wen, Youhai, Shen, C., Wang, Y.Z. Microstructural development involving nucleation and growth phenomena simulated with the Phase Field method // Materials Science and Engineering: A. – 2004. – V. 365 (1–2). – pp. 136–143. https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.09.019.

20. Gupta, P., Duarte, C.A. Simulation of non-planar three dimensional hydraulic fracture propagation // Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech. – 2014. – V. 38. – pp. 1397–1430. https://doi.org/10.1002/nag.2305.

21. Martinez-Paneda, E., Golahmar, A., Niordson, C. A phase field formulation for hydrogen assisted cracking // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 2018. – V. 342. – pp. 742–761. DOI: 10.1016/j.cma.2018.07.021. S2CID 52360579.

22. Aptukov V., Skryabina N., Fruchart D. Energy conditions for the formation of magnesium hydride // PNRPU Mechanics Bulletin. 2022. No 2. Pp. 25–38. https: // DOI: 10.15593/perm.mech/2022.2.03.

23. Aptukov V., Skryabina N., Fruchart D. Energy conditions determining size range impacting formation of magnesium hydride // PNRPU Mechanics Bulletin. 2023. No 6. Pp. 5–17. https://doi.org/10.1016/j.jalmes.2024.100064.

24. Skryabina N., Aptukov V., Fruchart D. Role of induced elastic deformations at the $Mg/MgH_2$ transformation // Journal of Alloys and Metallurgical Systems. – 2024. – V. 5. 100064. https://doi.org/10.1016/j.jalmes.2024.100064.

25. Trusov P.V., Shveikin A.I. Mnogourovnevye modeli mono- i polikristallicheskikh materialov: teoriia, algoritmy, primery primeneniia. – Novosibirsk: Izd. SO RAN, 2019. – 605 s.

26. Lurie, S., Solyaev, Y. Identification method of gradient models parameters of inhomogeneous structures based on discrete atomic simulations // PNRPU Mechanics Bulletin. 2014. No 3. Pp. 89–112. DOI: 10.15593/perm.mech/2014.3.06.

27. Toupin, R. Elastic materials with couple stresses // Arch. Rational Mech. Anal. – 1962. – V 11. – pp. 385–414.

28. Mindlin, R. Micro-structure in linear elasticity // Arch. Rational Mech. Anal. – 1964. – V 16. – pp. 51–78.

29. Vasilyev, V.V., Lurie, S.A. On correct nonlocal generalized theories of elasticity // Physical Mesomechanics. 2016. V. 19. No 1. Pp. 269–281.

30. Lomakin E.V., Lurie S.A., Rabinskii L.N., Soliaev Iu.O. Poluobratnoe reshenie zadachi chistogo izgiba balki v gradientnoi teorii uprugosti: otsutstvie masshtabnykh effektov // Doklady AN. – 2018. – T. 479. – № 4. – S. 390–394

31. Vatulyan, A.O., Yavruyan, O.V. Vibrations of a strip with delamination in the framework of the one-parameter Aifantis model of gradi-ent elasticity // PNRPU Mechanics Bulletin. 2023, No. 3. Pp. 70–82. https:// DOI: 10.15593/perm.mech/2022.3.08.

32. Altan, B., Aifantis, E. On Some Aspects in the Special Theory of Gradient Elasticity // Journal of the Mechanical Behavior of Materials, 1997, Vol. 8, N 3, pp. 231–282.

33. Fukai, Y., Sugimoto, H. Diffusion of hydrogen in metals // Advances in Physics. – 1985. – V.34 (2). – pp. 263–326. https://doi.org/10.1080/00018738500101751.

34. Toribio, J., Kharin, V. A generalised model of hydrogen diffusion in metals with multiple trap types // Philosophical Magazine. – 2015. – V. 95(31). – pp. 3429–3451. https://doi.org/10.1080/14786435.2015.1079660.

35. Ouyang, L., Tang, J., Zhao, Y., Wang, H., Yao, X., Liu, J., Zou, J., Zhu, M. Express penetration of hydrogen on Mg(1013) along the close-packed-planes // Sci. Rep. – 2015. – 5. – P. 10776. https//: www.org.doi:10.1038/srep10776.

36. Duan, X., Griessen, R., Wijngaarden, R.J., Kamin, S., Liu, N. Self-recording and manipulation of fast long-range hydrogen diffusion in quasi-free magnesium // Phys. Rev. Materials. – 2018. – V. 2 (8). – P. 085802. https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.2.085802.

37. Mehrer, H. Diffusion in solids: fundamentals, methods, materials diffusion-controlled processes. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007. 651 p.

38. Lyu, J., Kudiiarov, V., Lider, A. Experimentally Observed Nucleation and Growth Behavior of $Mg/MgH_2$ during De/Hydrogenation of $MgH_2/Mg$ // A Review. Materials. – 2022. – 15. – P. 8004. https://doi.org/10.3390/ma15228004.

**Финансирование.** Исследование не имело спонсорской поддержки.
**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
**Вклад авторов равноценный.**

**Funding.** The study was not sponsored.
**Conflict of interest.** The authors declare no conflict of interest.
**The contribution of the authors is equivalent.**