

氦浓度对单晶铁缺陷演化及力学性能的影响规律与微观关联机制*

王路生¹⁾ 沈量¹⁾ 罗龙¹⁾ 彭彦鸿¹⁾ 杨国平²⁾ 赵晗³⁾ 丁军^{1)†}

1) (重庆理工大学机械工程学院, 重庆 400054)

2) (核工业西南物理研究院, 成都 610041)

3) (成都工业学院智能制造学院, 成都 611730)

(2025 年 8 月 13 日收到; 2025 年 9 月 22 日收到修改稿)

理解原子尺度下氦浓度对低活化钢缺陷演化和力学性能的内在关联是设计兼具优异抗肿胀和抗辐照性能聚变结构材料的关键. 本文通过分子动力学模拟研究了氦浓度对单晶铁缺陷演化和力学行为的影响机理. 结果表明 $N_{\text{He}} < 3.0\%$ 时, 弗伦克尔缺陷对 (Frenkel pairs, FPs) 数量快速线性增长至峰值后稳定; 而当 $N_{\text{He}} \geq 3.0\%$ 时, 形成的间隙大团簇会吸收附近间隙原子而长大, 并减缓湮灭速率, 导致 FPs 数量继续增长, 但间隙团簇被空位环绕后, 不再阻碍复位, 数量二次稳定. 当 N_{He} 增至 3.0% 时, 单晶铁的弹性模量、屈服强度和韧性分别下降了 21%, 88% 和 57%, 此后氦浓度增大, 力学性能不再降低. 这是由于 $N_{\text{He}} < 3.0\%$ 时, 随着氦浓度上升, 氦致缺陷增多, 导致韧性降低, 促进位错形核, 使弹性模量和屈服强度下降; 而当 $N_{\text{He}} \geq 3.0\%$ 时, 氦致位错缺陷形成, 而团簇数量变化甚微, 导致韧性不再下降, 弹性模量和屈服强度随之稳定. $N_{\text{He}} = 3.0\%$ 时出现的大团簇阻碍滑移系滑移, 改变滑移平面方向, 削弱主滑移系作用, 导致小滑移带增多, 塑性变形机制由交滑移转变为滑移带相遇后分解为离散位错和点缺陷. 研究揭示了氦浓度对单晶铁缺陷演化及力学性能的影响规律和关键机制, 为聚变铁基材料设计提供理论依据.

关键词: 单晶铁, 氦浓度, 缺陷演化, 力学性能

DOI: 10.7498/aps.75.20251089

CSTR: 32037.14.aps.75.20251089

1 引言

作为聚变反应堆第一壁与包层结构材料, 低活化钢^[1,2]在服役过程中由于嬗变反应形成的氦致损伤, 将会严重威胁其服役寿命和聚变堆结构安全. 由于氦原子因溶解度低^[3], 易在辐照缺陷处聚集成氦泡^[4], 并被位错^[5,6]和晶界俘获^[7], 进而加剧材料膨胀、硬化及脆化^[8]. 因此, 深入理解低活化钢的氦致损伤行为, 对评估结构材料服役寿命及缓解氦

效应具有重要的科学意义.

近年来, 得益于扫描电子显微镜、透射电子显微镜等表征技术及纳米压痕微区力学测试技术的提升, 能够通过相关实验促进对氦行为及氦泡演化规律的理解. Xia 等^[9]通过不同温度、不同剂量的氦离子辐照实验, 发现纳米晶低活化铁素体/马氏体钢中氦泡优先聚集于晶界, 温度升高导致氦泡尺寸增大、密度降低, 剂量增大使氦泡尺寸与密度同步上升, 且晶界密度越高对氦的捕获能力越强. Wei 等^[10]开展了中国低活性马氏体钢 (CLAM)

* 国家自然科学基金青年基金项目 (批准号: 52405341)、重庆市自然科学基金面上项目 (批准号: CSTB2023NSCQ-MSX0363)、重庆市教委科学技术研究计划青年项目 (批准号: KJQN202301117)、计算物理全国重点实验室项目 (批准号: 6142A05QN24012) 和重庆理工大学研究生创新项目 (批准号: gzlcy20252017) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: dingjunawen@126.com

的高能氦离子辐照损伤研究,发现室温下氦离子辐照形成氦泡,单氦辐照硬化增量与剂量正相关;顺序双离子辐照中 Fe 离子促进氦泡生长和位错环形成,但对硬度增量无显著贡献. Yang 等^[11]使用 6.4 MeV 的 Fe 离子在 600 nm 深度对样品进行 5 dpa 的辐照,并在相同深度分别采用 3 种不同氦注入比和不同辐照温度进行实验,发现其形成的位错环和氦泡与氦注入比和辐照温度成正相关. 郭洪燕等^[12]研究氦离子与钨的相互作用及氦泡在钨微观结构演化中的作用. 氦离子注入钨表面后造成损伤,形成细孔和鼓泡. 其中绒毛状纳米结构,存在大量层错、细孔及纳米级氦泡. Agarwal 等^[13]研究氦在 ZrC 中的效应. 发现 ZrC 易形成氦泡, 1373 K 退火后微小气泡形成高度超压的对齐簇, 1773 K 时氦泡显著生长并引发表面起泡导致基体损伤,其微观结构演变成超细纳米晶粒并伴有纳米裂纹. 核反应分析 (nuclear reaction analysis, NRA) 表明氦以双峰形式存在, 1373 K 后开始释放氦,高温下释放显著增加. Harrison 等^[14]通过 He 离子辐照研究损伤微观结构,发现随温度升高,氦泡直径增大; 500—750 °C 存在位错环但在 1000 °C 消失,间隙环比例随 He—appm/dpa 比例增大,归因于氦泡密度增大降低空位通量. 上述实验研究借助先进表征技术揭示了氦泡演化的相关规律,但受限于氦泡演化规律时间较快 (微秒级别) 和苛刻的实验条件 (高温和辐照条件),导致原子级动态演化过程的实时捕捉仍面临空间分辨率与时间尺度的匹配难题,难以深入理解氦泡形核、长大机制.

分子动力学 (molecular dynamics, MD)^[15–17]模拟能从原子尺度上对粒子之间的相互作用过程进行追踪,其具有原子级分辨率与动态过程仿真能力的优势,有助于对氦原子团簇化至氦泡形成的演化机制理解. 陈敏等^[18]采用 MD 方法,研究了不同压力下氦-空位复合物的尺寸、氦含量与材料肿胀及稳定性的关系,发现氦含量增大会使体系内聚能减小、体积膨胀、稳定性降低;复合物尺寸增大时,内聚能增大、体胀减小、稳定性提升;氦泡中氦原子数达到临界值后停止长大. Kobayashi 等^[19]通过 MD 模拟发现,高温下氦原子在辐照钨中通过缺陷吸附与自间隙原子积累形成位错环,诱发氦泡自诱导生长. Galloway 和 Ackland^[20]采用 MD 模拟分析铁中辐照离位损伤下的空隙移动及扩散行为,发现空隙在级联作用下可整体移动并显著增

强扩散,但氦泡会阻碍这种迁移机制. Yu 等^[21]分析了 Fe-0.1%He 合金中位移级联过程中初级碰撞原子与氦对辐照损伤的协同效应,发现位移级联产生的空位均位于级联中心区域,氦的存在不影响弗伦克尔缺陷对的生成数量,间隙团簇数量和尺寸随温度和初级碰撞原子 (primary knock-on atom, PKA) 能量增加而增大. Lucas 和 Schaublin^[22]通过 MD 模拟研究 α -铁位移级联中氦原子行为,发现间隙氦增加弗伦克尔缺陷对 (Frenkel pairs, FPs) 生成、置换氦减少其产生,两类氦均通过强结合能稳定自间隙团簇并抑制迁移,形成氦-空位复合团簇,且辐照温度显著影响缺陷演化机制. Hu 等^[23,24]通过 MD 模拟研究置换氦原子对 α -Fe 位移级联的影响,发现氦浓度、辐照温度及 PKA 能量共同影响缺陷演化,低温下高浓度置换氦减少缺陷产生,高温时增多,且形成大尺寸氦-空位团簇并改变缺陷空间分布;氦原子浓度升高会显著增加缺陷数量,其增速随 PKA 能量和初始温度上升而增大,热激活自捕获是位移级联中氦捕获的主要机制,不同于纯铁缺陷分布特征. Deng 等^[25]通过 MD 模拟体心立方 (BCC) 铁中 He 团簇及氦泡成核,小团簇及自间隙原子可迁移而氦-空位团簇不可迁移,自间隙原子多形成 $\langle 111 \rangle$ 团簇并生成 $1/2 \langle 111 \rangle$ 的位错环,不同氦浓度下自间隙原子团簇 (或环) 与氦-空位团簇的结合情况存在差异. Gao 等^[26]利用 MD 模拟研究聚变用低活化铁素体/马氏体钢中氦浓度和辐照温度对间隙氦与位移级联的影响,发现低浓度间隙氦促进 FPs 复合、高浓度抑制复合并促进末期缺陷生成;置换氦数量随浓度和温度升高而增加,高温促进峰值缺陷产生及末期缺陷复合. Chen 等^[27]通过 MD 模拟铁中位移级联与 PKA 能量的关系并统计缺陷,发现非热缺陷数量概率密度近似正态分布,低能时存活点缺陷平均数与能量成正比、标准差恒定,高能时平均数和标准差均与能量呈幂律关系,且低/高能区间变化趋势分别符合 NRT 和 Bacon 模型. 这些研究聚焦于氦原子与位移级联的相互作用,从原子尺度阐明了氦诱导材料损伤的微观机制,为理解氦行为下材料微观结构及力学性能变化提供理论支撑.

综上所述,由于位移级联过程中氦原子初始能量状态对材料中氦原子行为及损伤机制的显著影响,现有研究多聚焦于含初始能量条件下的相互作用规律. 本文针对氦浓度对单晶铁缺陷演化及力学

性能的影响规律与微观关联机制的问题, 阐明原子尺度下氦浓度对低活化钢氦缺陷演化行为, 以及力学性能和塑性变形行为的影响机制, 建立具有不同氦浓度 (0.5%—4.5%) 的体心立方铁的分子动力学模型, 并采用 Wigner-Seitz 胞元分析和团簇聚类方法, 追踪 FPs 及团簇缺陷演化规律, 揭示 500 °C 温度下氦浓度诱导 FPs 和团簇的影响机理. 此外, 结合拉伸力学模拟分析氦行为对单晶铁弹性模量、屈服强度和韧性等力学性能的影响规律, 揭示氦浓度诱导缺陷演化、力学性能、与塑性变形行为的关联机制.

2 模型与方法

为探究 500 °C 环境下氦浓度对单晶铁中氦行为及力学性能的作用机制, 构建含不同氦浓度的单晶铁氦扩散分子动力学模型 (见图 1). 如图 1(a) 所示, 模型沿 X , Y , Z 轴的晶体学取向依次设定为 $[111]$, $[1\bar{1}0]$ 和 $[11\bar{2}]$, 对应轴向长度 L_X , L_Y , L_Z 分别为 13.34 nm, 18.96 nm 和 16.07 nm. 由于氦原子半径远小于铁原子半径, 氦原子以间隙形式存在 BCC 铁中, 而第一性原理计算表明氦原子占据四面体间隙时能量最低^[28], 为追求初始氦原子能量最小, 故氦原子都以四面体间隙掺杂在模型中.

设计的氦原子浓度分别为 0.5%, 1.5%, 3.0% 和 4.5%, 模型如图 1(b)—(e) 所示. 为降低模型尺寸效应的影响, 在所有方向施加周期性边界条件. 当氦原子浓度在 0.5%—4.5% 时, 体系原子总数介于 351986—365295 之间, 原子数量的最大相对误差控制在 3.5% 以内, 该误差范围内的原子数差异对材料塑性变形及力学行为的影响可忽略不计. 所有分子动力学模拟计算均基于大规模原子模拟软件平台 LAMMPS^[29] 完成.

为模拟单晶铁中氦原子的演化过程及塑性变形行为, 原子间相互作用采用 Caro 等^[30,31] 开发的 EAM 势函数进行描述, 该势函数在位错演化^[32] 及塑性变形模拟^[33] 中已被验证具有良好适用性. 本文中分子动力学模拟包含氦行为演化和拉伸力学性能测试两个关键过程. 模拟前, 通过共轭梯度法^[34] 对体系初始构型进行能量最小化处理, 以获得稳定的初始状态. 运用 NPT 系综结合 Nose-Hoover 方法^[35,36] 将体系温度控制在 500 °C、压力维持在 0.1 bar, 设置 0.001 ps 的时间步长和 20 ps 的总模拟时长, 模拟 500 °C 下单晶铁内部的氦演化过程. 通过 Wigner-Seitz (WS) 方法^[37,38] 与团簇分析方法^[39] 识别模拟体系中的点缺陷及团簇缺陷, 进而探究氦浓度对单晶铁缺陷演化的影响规律. 为分析氦浓度对材料力学性能及变形行为的作

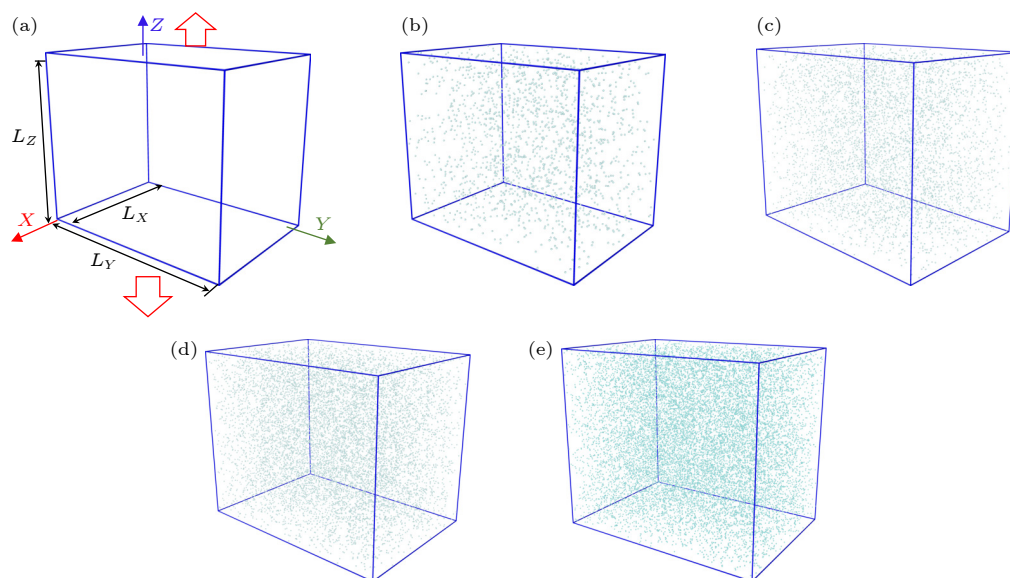


图 1 含有不同氦浓度的单晶铁拉伸的分子动力学模型示意图及对应氦浓度模型 (a) 模型示意图; (b) $N_{\text{He}} = 0.5\%$; (c) $N_{\text{He}} = 1.5\%$; (d) $N_{\text{He}} = 3.0\%$; (e) $N_{\text{He}} = 4.5\%$. Fe 原子被隐藏以更好地观察氦原子分布和形貌

Fig. 1. Schematic of molecular dynamics models for tensile deformation of single-crystal iron with different helium concentrations and corresponding models: (a) Schematic of the model; (b) $N_{\text{He}} = 0.5\%$; (c) $N_{\text{He}} = 1.5\%$; (d) $N_{\text{He}} = 3.0\%$; (e) $N_{\text{He}} = 4.5\%$. Fe atoms are hidden to better observe the distribution and morphology of helium atoms.

用, 在氦行为演化结束后, 以 0.001 ps^{-1} 的应变率沿 Z 轴对体系施加拉伸载荷, 总变形量设定为 21%. 模拟结果利用 OVITO^[40] 进行后处理, 通过临近列表分析 (CNA) 方法^[41,42] 和位错分析 (DXA) 方法^[43,44] 分别表征拉伸过程中的晶体结构转变和位错演化.

3 结果与讨论

3.1 氦致缺陷演化机理

3.1.1 氦浓度对 FPs 的演化影响

图 2 详细地展示了在 $500 \text{ }^{\circ}\text{C}$ 下, 不同氦浓度对单晶铁模型内部缺陷演化过程的影响. 为更清晰地观察单晶铁中缺陷的演化情况 (仅显示 FPs), 红

色小球表示空位缺陷, 蓝色小球表示间隙原子缺陷.

$N_{\text{He}} = 0.5\%$ 的单晶铁 (图 2(a)) 在初始阶段 ($t = 0.1 \text{ ps}$), 由于氦原子在铁基体中的间隙占位, 引起局部晶格畸变并诱发应力集中, 导致原子偏离平衡位置, 从而形成由空位和间隙原子构成的 FPs; 同时产生空位-间隙小团簇. 随着模拟时间增至 0.3 ps , FPs 数量快速增多, 空位-间隙小团簇的尺寸也随之增大. 至 $t = 0.5 \text{ ps}$ 时, 体系内 FPs 数量达到峰值. 此后, FPs 的演化受到生成速率与湮灭速率竞争关系的共同控制: 一方面, FPs 的生成速率主要取决于氦原子诱导的局部晶格畸变与应力集中效应, 氦原子与铁原子在半径上的显著差异使得氦更易推动原子偏离平衡位置, 从而形成 FPs,

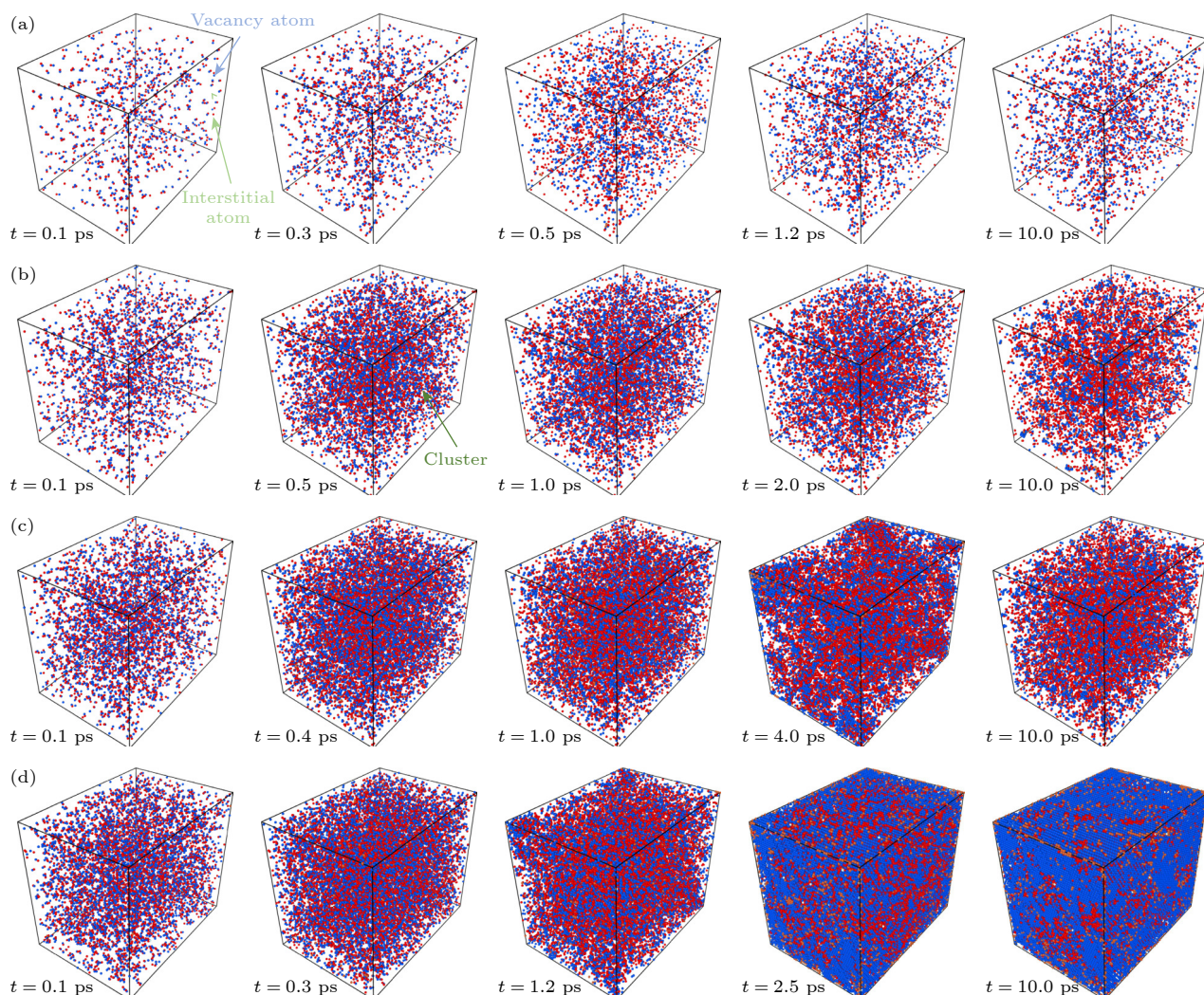


图 2 不同氦浓度单晶铁中缺陷演化过程 (a) $N_{\text{He}} = 0.5\%$; (b) $N_{\text{He}} = 1.5\%$; (c) $N_{\text{He}} = 3.0\%$; (d) $N_{\text{He}} = 4.5\%$. 红色小球代表空位, 蓝色小球代表间隙原子

Fig. 2. Defect evolution processes in single-crystal iron with different helium concentrations: (a) $N_{\text{He}} = 0.5\%$; (b) $N_{\text{He}} = 1.5\%$; (c) $N_{\text{He}} = 3.0\%$; (d) $N_{\text{He}} = 4.5\%$. Red spheres represent vacancies, and blue spheres represent interstitial atoms.

氦浓度的升高会进一步增强这一效应; 另一方面, FPs 的湮灭速率由间隙原子与空位的复合过程主导, 当缺陷数量增加时, 空位与间隙在空间上的相遇概率升高, 复合速率随之增强, 直至湮灭速率与生成速率相匹配. 结果表明, 从 $t = 1.2$ ps 至 $t = 10.0$ ps, 体系逐渐达到动态平衡, FPs 数量保持稳定. 图 2(b) 给出的 $N_{\text{He}} = 1.5\%$ 的单晶铁中 FPs 的演化过程与 $N_{\text{He}} = 0.5\%$ 的情况具有相似性, 但由于氦浓度更高, 局部晶格畸变更显著, 促进了团簇数量的进一步增多, 并形成了更大尺寸的团簇.

图 2(c) 呈现了 $N_{\text{He}} = 3.0\%$ 下单晶铁中 FPs 的演化过程. 当模拟时间在 0.1—1.0 ps 时, FPs 数量快速增长, 并诱导形成空位-间隙小团簇. 继续延长模拟时间 (1.0—4.0 ps), FPs 的生成速率和湮灭速率达到动态平衡, 导致 FPs 数量不再显著增加. 当模拟时间为 4.0 ps 时, 体系内 FPs 数量再次增多, 这不同于 $N_{\text{He}} = 0.5\%$ 和 $N_{\text{He}} = 1.5\%$ 的 FPs 一直不变的情况. 模拟时间增至 10.0 ps 时, 体系内 FPs 数量依旧持续增加, 同时仍有新的空位-间隙小团簇在持续形成.

$N_{\text{He}} = 4.5\%$ 下单晶铁 (图 2(d)) 中 FPs 的演化过程在二次稳定之前与 3.0% 氦浓度下过程相似. 初始阶段 (0.1—1.2 ps) FPs 数量快速增长达到一次稳定阶段 (1.2—2.5 ps). 当模拟时间推进到 2.5 ps 时, 体系内 FPs 数量再度增加, 二次增长速率远高于 $N_{\text{He}} = 3.0\%$, 与一次增长速率接近. 当模拟时间为 10.0 ps 时, 体系内 FPs 数量再次稳定.

图 3 展示了 500 °C 温度下不同氦浓度单晶铁

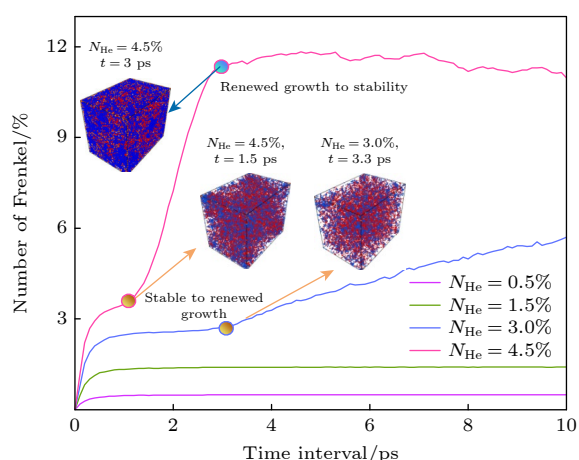


图 3 弗伦克尔缺陷对数量

Fig. 3. Number of Frenkel pairs.

中 FPs 数量随时间变化过程的影响. 当氦浓度 $N_{\text{He}} < 3.0\%$ 时, FPs 数量演化可分为弹道阶段和稳定阶段. 然而, 当氦浓度 $N_{\text{He}} = 3.0\%$ 时, FPs 经过弹道和稳定阶段后数量会再次增加. FPs 历经一次增长→平稳→再次增长过程, 氦浓度升高到 4.5% 时, FPs 会历经一次增长→一次平稳→二次增长→二次稳定的过程, 且二次增长速率远高于 $N_{\text{He}} = 3\%$ 时. 在低氦浓度条件下 FPs 的形成速率和湮灭速率达到平衡, 而高浓度下 FPs 的生成速率大于湮灭速率, 动态平衡将被打破, 导致 FPs 继续增加.

3.1.2 氦浓度对团簇缺陷的影响

材料内部生成的 FPs, 其中空位和间隙原子会发生聚集现象, 从而形成团簇缺陷. 为精准地表征体系处于稳定阶段时的团簇缺陷, 采用团簇聚类分析方法. 即对空位团簇, 对其截断半径设定为第二近邻距离 ($r_2 = 0.285$ nm); 对间隙团簇, 其截断半径设定为第三近邻距离 ($r_3 = 0.403$ nm).

图 4 给出了在缺陷演化的稳定阶段 ($t = 10.0$ ps), 不同氦浓度下单晶铁中团簇的形成状况. 最大团簇尺寸 (参与形成团簇的原子数量) 如图 5 所示, 图 4(a) 给出 $N_{\text{He}} = 0.5\%$ 的情况, 间隙团簇最大尺寸为 9, 空位团簇最大尺寸为 4, 模型中均匀分布的小团簇总数为 2907. 当 $N_{\text{He}} = 1.5\%$ 时, 最大间隙团簇尺寸为 52, 最大空位团簇尺寸为 5 (图 4(b)), 有 5922 个团簇分布在模型中, 比 $N_{\text{He}} = 0.5\%$ 的单晶铁, 团簇尺寸和数量成倍增加. 当 $N_{\text{He}} = 3\%$ 时, 模型中团簇总数为 14727, 间隙团簇最大尺寸为 8019, 空位团簇最大尺寸为 250 (图 4(c)), 团簇缺陷相较于 $N_{\text{He}} < 3.0\%$ 时, 数量、尺寸都大幅度增加. 当 $N_{\text{He}} = 4.5\%$ 时, 间隙团簇最大尺寸为 22888, 空位团簇最大尺寸为 944 (图 4(d)), 模型中团簇缺陷总数为 18695, 相比于 $N_{\text{He}} = 3\%$ 的团簇缺陷, 数量和尺寸涨幅有限. 随着氦浓度的增大, 模型内的团簇缺陷的数量显著增加, 团簇尺寸跨越式变大.

综上所述, FPs (一个间隙原子和空位原子) 和团簇缺陷的演化过程与氦浓度密切相关, 氦致损伤缺陷演化机理如图 6 所示. 图 6(a) 给出了 $N_{\text{He}} < 3.0\%$ 时的缺陷演化示意图, 初始阶段, 完美晶格因氦行为产生 FPs, 同时伴随空位与间隙团簇 (全为小团簇) 生成, FPs 数量快速增长, 即产生大量的间隙和空位原子, 部分间隙原子在温度驱动下运动

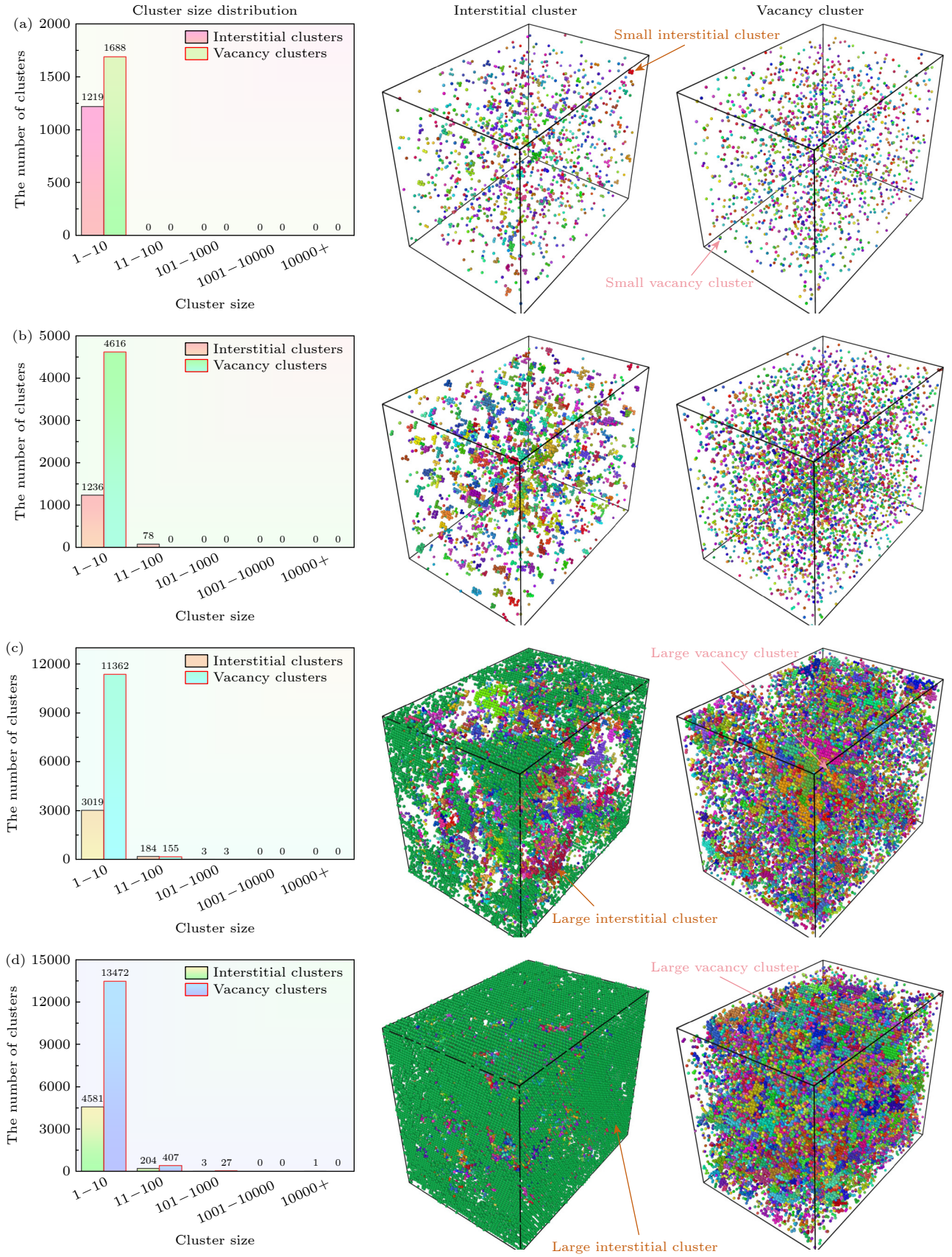

 图 4 缺陷演化最后阶段不同氦浓度的团簇分布图 (a) $N_{\text{He}} = 0.5\%$; (b) $N_{\text{He}} = 1.5\%$; (c) $N_{\text{He}} = 3.0\%$; (d) $N_{\text{He}} = 4.5\%$

Fig. 4. Distribution maps of clusters at the final stage of defect evolution with different helium concentrations: (a) $N_{\text{He}} = 0.5\%$; (b) $N_{\text{He}} = 1.5\%$; (c) $N_{\text{He}} = 3.0\%$; (d) $N_{\text{He}} = 4.5\%$.

至空位处, 发生复位, 使 FPs 湮灭, 随着 FPs 的数量增多 (即空位和间隙数量增多), 更多的间隙原子和空位原子复合, 湮灭速率上升, 最终与生成速率相等, 导致 FPs 数量保持稳定. $N_{\text{He}} \geq 3.0\%$ 的缺陷演化示意图如图 6(b) 所示, 一次增长阶段和稳定阶段都和 $N_{\text{He}} < 3.0\%$ 相一致, 直至间隙团簇聚集形成大团簇. 大团簇通过吸附并困留间隙原子, 阻碍其与空位的复合, 降低湮灭速率, 从而引发 FPs 数量的二次增长 (即空位和间隙数量的二次增长). 随后, 当团簇被空位环绕并达到新的几何或能量平衡时, 体系进入新的稳态, 不再阻碍复位, 重新平衡, 导致湮灭速率等于生成速率, 从而使 FPs 数量二次稳定.

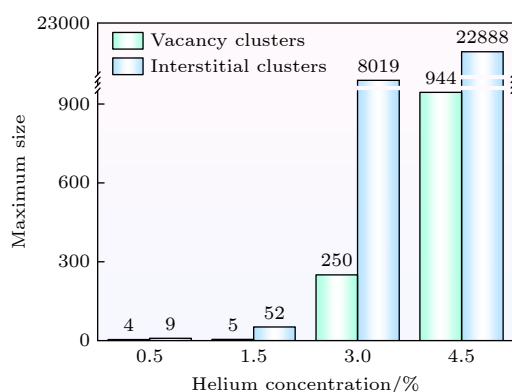


图 5 不同氦浓度单晶铁在稳定阶段的最大团簇尺寸

Fig. 5. Maximum cluster size of single-crystal iron with different helium concentrations at the stable stage.

3.2 氦浓度对力学性能的影响

氦浓度对单晶铁力学行为的影响见图 7. 从图 7(a) 应力应变曲线可以看出, 初始阶段不同氦浓度的应力应变曲线趋势相似, 应力随着应变增大而增大. 随着应变增大, 对比低氦浓度单晶铁, 高氦浓度 (如 $N_{\text{He}} \geq 3.0\%$) 的曲线所对应的应力增长更为缓慢, 且没有明显的屈服现象.

图 7(b) 所示的弹性模量、屈服强度、韧性中, 无氦单晶铁的弹性模量为 200.5 GPa, 不同氦浓度时单晶铁的弹性模量 ($N_{\text{He}} = 0.5\%$ 时为 198.2 GPa; $N_{\text{He}} = 1.5\%$ 时为 181 GPa; $N_{\text{He}} = 3.0\%$ 时为 154.5 GPa; $N_{\text{He}} = 4.5\%$ 时为 166.4 GPa) 与无氦单晶铁相比分别下降 1.14%, 9.73%, 22.94%, 20.00%, 随着氦浓度的不断升高, 弹性模量先降低后稳定. 不同氦浓度单晶铁的屈服强度分别为 11.5 GPa, 4.8 GPa, 2.4 GPa, 2.4 GPa, 与无氦单晶铁的 22.5 GPa 相比, 分别下降了 47.56%, 77.33%, 88%, 88%, 随着氦浓度增大, 屈服强度先降低后稳定. 无氦单晶铁的韧性为 2.27 J/m³, $N_{\text{He}} = 0.5\%$ 时韧性为 1.16 J/m³, $N_{\text{He}} = 1.5\%$ 时韧性为 0.98 J/m³, $N_{\text{He}} = 3.0\%$ 时韧性为 0.95 J/m³, $N_{\text{He}} = 4.5\%$ 时韧性为 0.98 J/m³, 不同氦浓度单晶铁的韧性与无氦单晶铁相比分别下降了 48.9%, 56.83%, 58.15%, 56.83%, 随着氦浓度的不断升高, 韧性先降低后平稳. 综上所述, 当 $N_{\text{He}} < 3.0\%$ 时, 氦浓度增大, 使单晶铁的弹性模

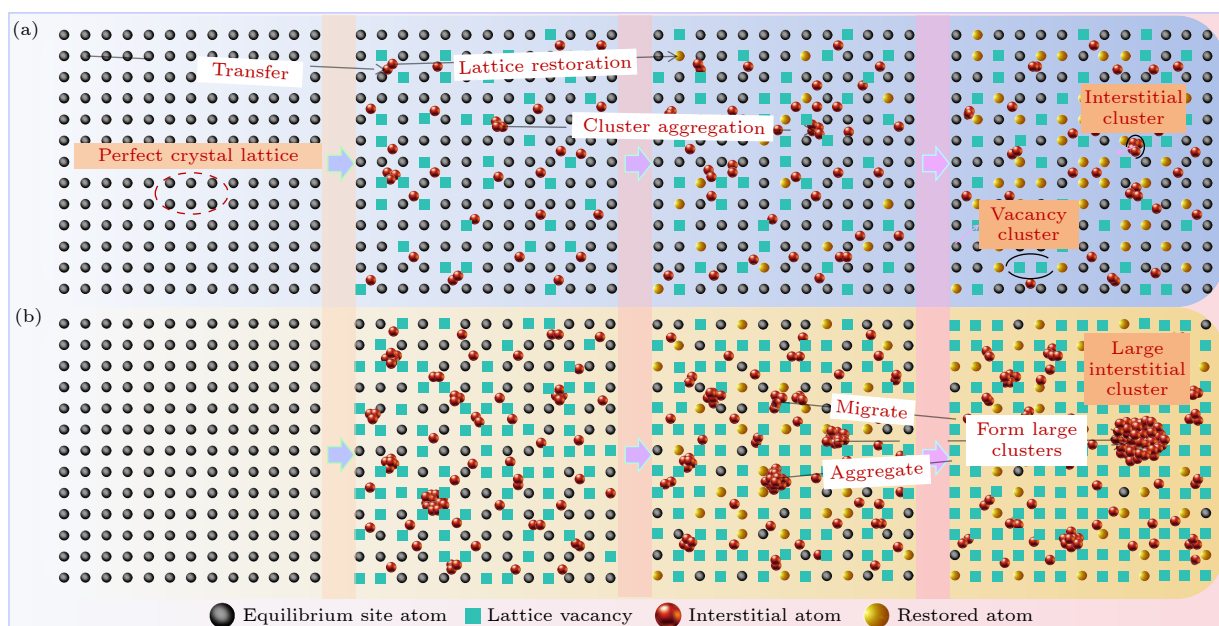


图 6 缺陷演化示意图 (a) $N_{\text{He}} < 3.0\%$; (b) $N_{\text{He}} \geq 3.0\%$

Fig. 6. Schematic of defect evolution: (a) $N_{\text{He}} < 3.0\%$; (b) $N_{\text{He}} \geq 3.0\%$.

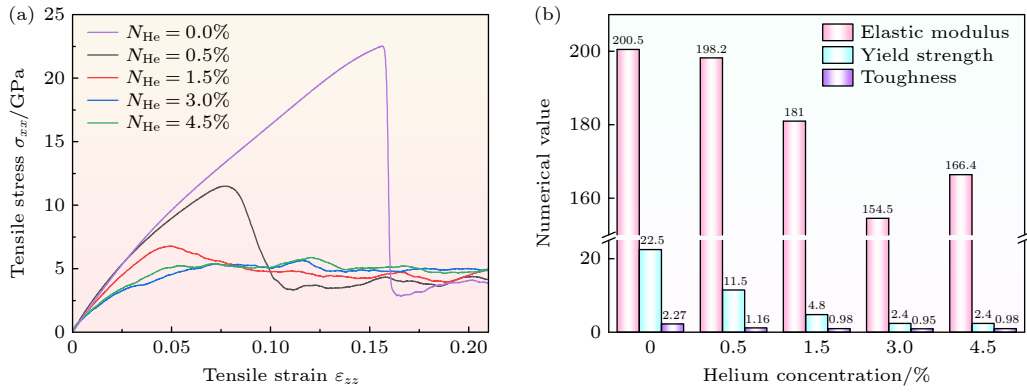


图 7 氦浓度对单晶铁力学行为的影响 (a) 应力应变曲线; (b) 弹性模量、屈服强度、韧性

Fig. 7. Effect of helium concentration on mechanical behavior of single-crystal iron: (a) Stress-strain curves; (b) elastic modulus, yield strength, and toughness.

量、屈服强度和韧性降低, 而当 $N_{He} \geq 3.0\%$ 后, 弹性模量、屈服强度和韧性分别下降 21%, 88%, 57% 后不随氦浓度升高而变化。

结合单晶铁缺陷的数量变化, 可知当 $N_{He} < 3.0\%$ 时, 氦浓度升高促进缺陷数量增加, 导致位错形核加速, 使屈服强度和弹性模量下降, 更多的缺陷数量使得韧性降低; 当 $N_{He} \geq 3.0\%$ 后, 模型初始存在的位错和团簇缺陷数量随氦浓度升高的涨幅较小, 使得韧性不变, 缺陷数量的变化较小将不影响位错形核, 从而弹性模量和屈服强度也随之稳定。所以模拟体系中的单晶铁缺陷作为控制缺陷, 主导了材料的力学性能变化。

图 8 为不同氦浓度单晶铁在拉伸过程中的剪切应变分布。无氦单晶铁模型的应变在 0.057—0.117 时, 模型处于弹性变形阶段, 形成大量点缺陷。增大应变至 0.12, 模型当中的点缺陷形核长大, 在应变累积下诱导滑移系开动, 形成滑移剪切带 (红色带状区域), 模型出现屈服。继续增大应变到 0.21, 原子继续沿滑移系方向滑移, 导致剪切带进一步扩展成主剪切带, 导致模型的应力下降, 如图 8(a) 所示。

$N_{He} = 0.5\%$ 单晶铁拉伸过程中的剪切应变分布如图 8(b) 所示, 在应变 0.003—0.015 的弹性变形当中, 模型中团簇缺陷变形较大, 并出现大量点缺陷。当应变增至 0.093, 位错在团簇位置形核长大, 位错密度上升, 积累应变后导致剪切集中区 (白色带状区域) 形成, 使得模型的屈服极限降低。当应变从 0.12 增至 0.21 时, 持续增加的应变驱动滑移系开动, 导致出现剪切带并扩展, 模型应力下降。

如图 8(c) 所示, 在 $N_{He} = 1.5\%$ 单晶铁的弹性变形过程 ($\varepsilon = 0.003$ —0.012) 中, 模型中团簇缺陷

变形较大。点缺陷数量随应变增加而上升。当应变从 0.054 增至 0.21 时, 点缺陷位错形核生长, 位错密度上升, 导致剪切集中区出现。应变积累诱导滑移系开动, 剪切集中区发生扩展形成剪切带 (红色带状区域)。对比 $N_{He} = 0.5\%$ 时, 滑移带的数量更多, 分布更广, 模型应力进一步下降。

图 8(d), (e) 分别为 $N_{He} = 3.0\%$ 和 $N_{He} = 4.5\%$ 单晶铁拉伸过程中的剪切应变分布。在应变处于 0.003—0.009 (弹性变形阶段), 团簇缺陷变形明显, 点缺陷的数量随应变的增大而增加。当应变从 0.06 增至 0.21, 点缺陷位错形核生长, 位错密度上升, 导致剪切集中区出现。应变积累驱动滑移系开动, 使剪切集中区扩展成剪切带并扩大, 在屈服阶段由于多条剪切带的交汇阻止滑移系进一步开动, 使应力不再下降。对比低氦浓度 ($N_{He} < 3.0\%$), 滑移带的分布更加均匀使模型能够出现剪切带交汇。

3.3 氦浓度对单晶铁塑性变形行为的影响

为进一步揭示氦浓度对单晶铁拉伸力学行为的影响机理, 采用 CNA 和 DXA 表征方法获得不同浓度单晶铁在拉伸过程中的原子构型。图 9 展示了无氦单晶铁在拉伸过程中的原子构型演化。如图 9(a)—(c) 所示的弹性阶段, 以点缺陷形成为主。继续增大应变 (图 9(d)), 点缺陷继续形成并诱导位错形核, 开动的滑移系以 $\langle 111 \rangle \{112\}$ 滑移系为主, 位错类型为 $1/2 \langle 111 \rangle$ 全位错。如图 9(e) 所示, 拉伸应变 $\varepsilon = 0.135$ 时, 多个滑移平面在拉伸作用下继续促进滑移系开动和位错发射, 整个模型的位错密度显著上升, 模型中的原子大部分以 $\langle 111 \rangle \{112\}$ 滑移系为主, $\langle 111 \rangle \{123\}$ 滑移系为辅, 出现的大部分

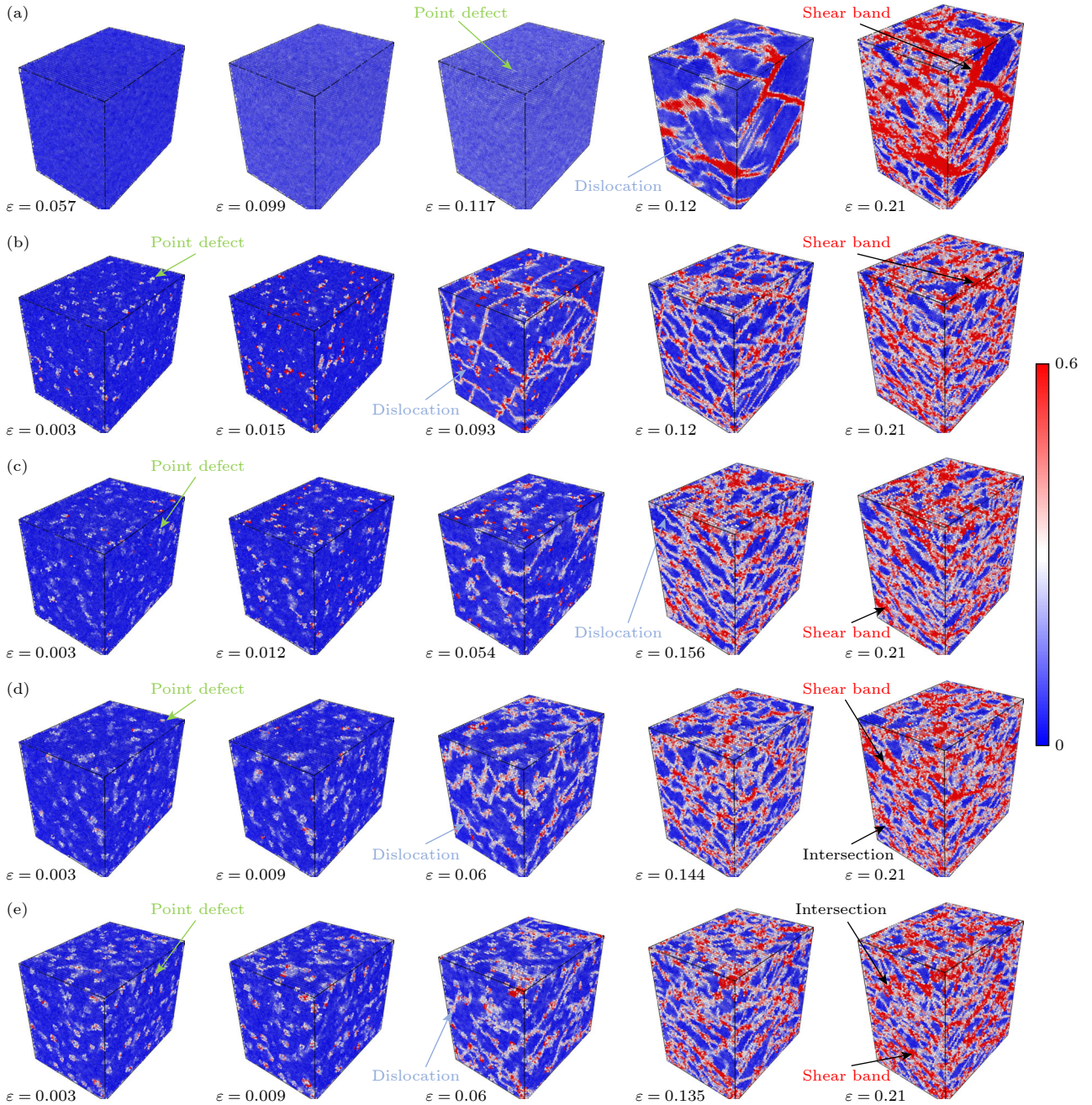


图 8 不同氦浓度的剪切应变云图 (a) 原始单晶铁; (b) $N_{\text{He}} = 0.5\%$; (c) $N_{\text{He}} = 1.5\%$; (d) $N_{\text{He}} = 3.0\%$; (e) $N_{\text{He}} = 4.5\%$

Fig. 8. Shear stress-strain contour plots after helium concentration effect: (a) Original single-crystal iron; (b) $N_{\text{He}} = 0.5\%$; (c) $N_{\text{He}} = 1.5\%$; (d) $N_{\text{He}} = 3.0\%$; (e) $N_{\text{He}} = 4.5\%$.

位错转变成 $1/2 \langle 111 \rangle$ 和 $\langle 100 \rangle$ 型的位错. 当拉伸应变增大至 $\varepsilon = 0.165$ 时 (图 9(f)), 分离的滑移平面保持不变, 但其他方向的滑移平面与分离的滑移平面相遇并交叉滑移即出现交滑移现象, 在滑移平面附近剪切位错环形核、并沿着滑移平面发射并运动. 图 9(g), (h) 给出应变从 0.189—0.210 的变化, 更多滑移平面相遇发生交滑移, 并分解为剪切位错环, 而剪切位错环在后续变形中因为相互作用进一步分解成离散位错, 从而使模型中位错密度下降.

因此无氦单晶铁的塑性变形在前期以位错形核生成的位错在 $\langle 111 \rangle \{112\}$ 滑移系成长为主, 在变形中期变形以 $\langle 111 \rangle \{112\}$ 和 $\langle 111 \rangle \{123\}$ 滑移平面的交滑移为主导, 并在滑移平面附近上剪切位错环中形核, 末期剪切位错环分解成离散位错在单晶铁的塑性变形起着重要作用.

图 10 展示了 $N_{\text{He}} = 0.5\%$ 单晶铁在拉伸过程中的原子构型演化过程, 图 10(a), (b) 给出弹性阶段, 初始时刻模型内部存在大量的点缺陷 (氦行为

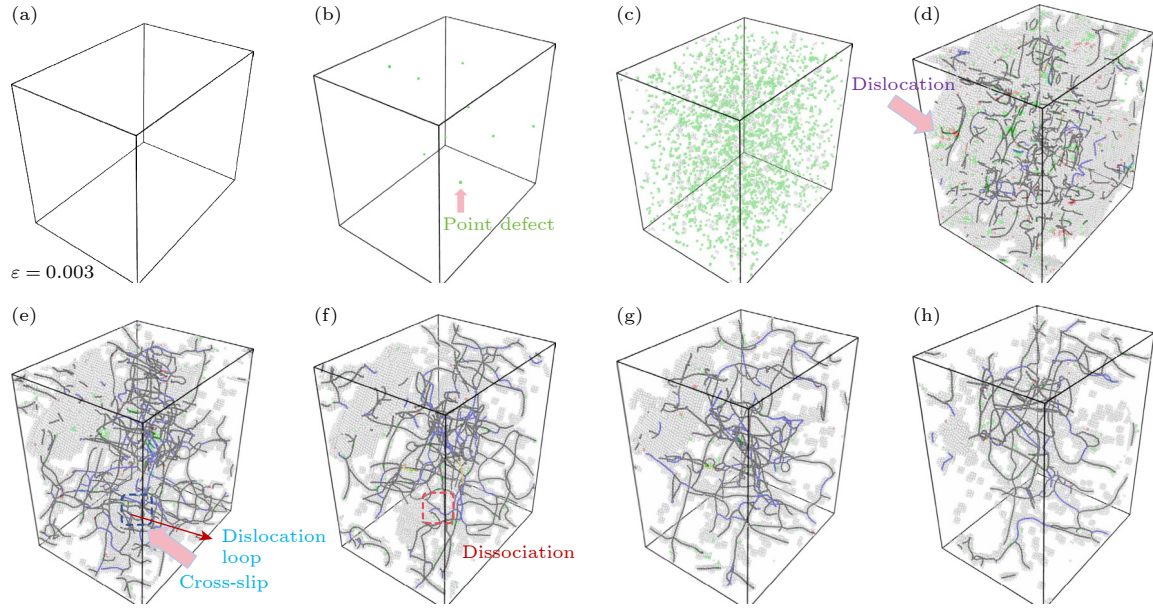


图9 无氦的单晶铁在拉伸过程中的原子构型演化 (a) $\varepsilon = 0.003$; (b) $\varepsilon = 0.054$; (c) $\varepsilon = 0.108$; (d) $\varepsilon = 0.12$; (e) $\varepsilon = 0.135$; (f) $\varepsilon = 0.165$; (g) $\varepsilon = 0.189$; (h) $\varepsilon = 0.21$; 灰白色原子表示“other”，绿色表示“fcc”；线条为位错线，黑色表示“ $1/2 \langle 111 \rangle$ ”，蓝色表示“ $\langle 100 \rangle$ ”，黄色表示“ $\langle 110 \rangle$ ”

Fig. 9. Atomic configuration evolution of single-crystal iron without helium concentration effect during tensile deformation: (a) $\varepsilon = 0.003$; (b) $\varepsilon = 0.054$; (c) $\varepsilon = 0.108$; (d) $\varepsilon = 0.12$; (e) $\varepsilon = 0.135$; (f) $\varepsilon = 0.165$; (g) $\varepsilon = 0.189$; (h) $\varepsilon = 0.21$; gray-white atoms denote “other”, green denotes “fcc”; lines are dislocation lines, black denotes “ $1/2 \langle 111 \rangle$ ”, blue denotes “ $\langle 100 \rangle$ ”, and yellow denotes “ $\langle 110 \rangle$ ”.

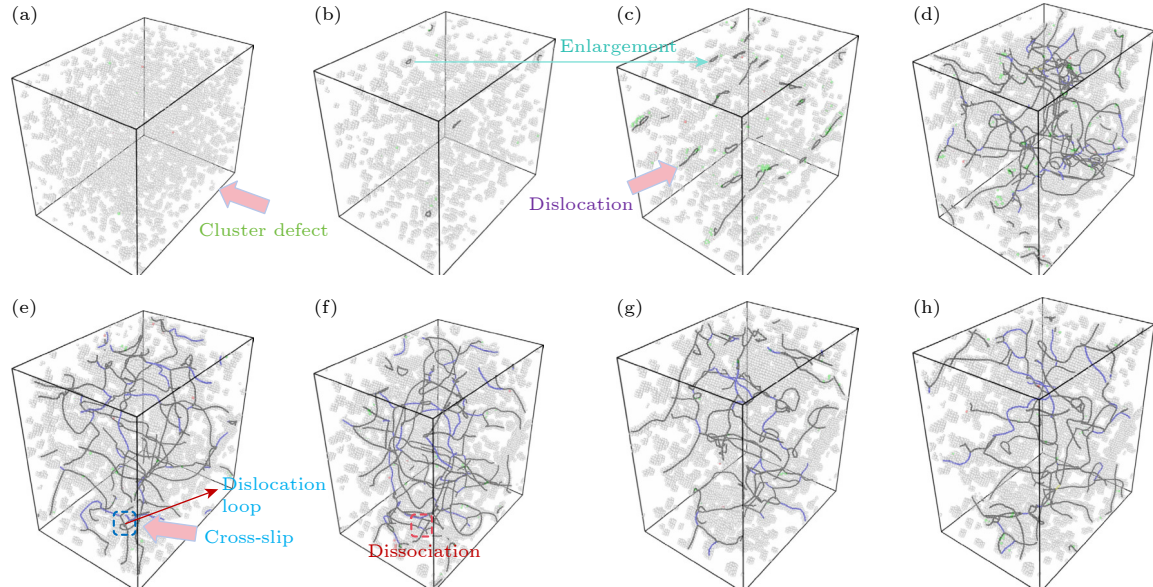


图10 $N_{\text{He}} = 0.5\%$ 单晶铁在拉伸过程中的原子构型演化 (a) $\varepsilon = 0$; (b) $\varepsilon = 0.048$; (c) $\varepsilon = 0.075$; (d) $\varepsilon = 0.096$; (e) $\varepsilon = 0.126$; (f) $\varepsilon = 0.162$; (g) $\varepsilon = 0.186$; (h) $\varepsilon = 0.210$

Fig. 10. Atomic configuration evolution of single-crystal iron with 0.5% helium concentration during tensile deformation: (a) $\varepsilon = 0$; (b) $\varepsilon = 0.048$; (c) $\varepsilon = 0.075$; (d) $\varepsilon = 0.096$; (e) $\varepsilon = 0.126$; (f) $\varepsilon = 0.162$; (g) $\varepsilon = 0.186$; (h) $\varepsilon = 0.210$.

形成的大量的FPs), 在拉伸作用下部分会发生湮灭, 但仍然存在不可湮灭的团簇缺陷, 为后续变形中为位错形核提供形核点. 当拉伸应变增至 $\varepsilon = 0.075$ (图10(c)) 时, 模型中团簇位错形核, 模型中

的团簇缺陷使促使位错形核, 模型的弹性模量和屈服强度降低. 如图10(d)所示, 拉伸应变继续增至 $\varepsilon = 0.096$, 沿 $\langle 111 \rangle \{112\}$ 滑移系滑移并形成滑移带, 滑移带之间存在大量的点缺陷, 滑移带裹挟这

些点缺陷在滑移带附近的团簇处开始位错形核, 进而出现大量的 $1/2 \langle 111 \rangle$ 型的位错, 位错密度显著上升. 图 10(e), (f) 所示. 当拉伸应变持续增大, 位错持续生成和长大, 使位错数量增多; 由于受到团簇缺陷的阻碍, 滑移带相遇后的交滑移的作用减弱, 部分滑移带相遇后直接分解, 使位错数量下降. 模型中位错成长占主导地位, 其他起次要作用, 导致模型位错密度升高. 随着应变继续加载 (图 10(g), (h)), 位错成长效应减弱, 更多的滑移带相遇, 发生交滑移或直接分解, 从而降低模型内的位错数量. $N_{\text{He}} = 0.5\%$ 单晶铁的塑性变形过程与无氦的变形过程相似, 但前期由于氦行为后产生的团簇缺陷, 使韧性下降, 促进位错形核, 导致弹性模量和屈服强度降低, 后期团簇使交滑移作用减弱, 两滑移带相遇后直接分解成离散位错和点缺陷, 导致位错密度下降.

$N_{\text{He}} = 1.5\%$ 单晶铁在拉伸过程中的原子构型演化过程如图 11 所示, 与 $N_{\text{He}} = 0.5\%$ 单晶铁的塑性变形过程类似, 但由于氦浓度升高后产生的点缺陷数量以及团簇的数量和尺寸成倍增加, 让韧性进一步下降, 促进位错形核, 导致弹性模量和屈服强度进一步降低, 后期滑移带的厚度更薄, 交滑移作用进一步减弱, 滑移带相遇后直接分解, 使位错密度降低.

$N_{\text{He}} = 3.0\%$ 单晶铁在拉伸过程中的原子构型

演化过程如图 12 所示, 由于氦浓度的增大, 弹性变形 (图 12(a)–(c)) 阶段, 初始时刻模型内部存在一定数量的位错缺陷和大量的团簇缺陷, 更多的初始缺陷让韧性下降, 进一步促进位错形核, 模型屈服强度和弹性模量进一步降低. 在拉伸载荷的作用下, 部分点缺陷发生湮灭回复, 而部分团簇缺陷则被保留, 为后续变形中为位错形核提供形核点. 且模型内部存在的大尺寸团簇起阻碍作用, 导致主滑移系的方向已经不可确定, 转而形成多个小滑移带, 随着滑移带移动并裹挟在团簇缺陷附近的点缺陷成长和位错形核, 从而使位错密度增大. 当应变继续增至 $\varepsilon = 0.072$ 时, 如图 12(d) 所示, 滑移带相遇后分解成离散位错或点缺陷, 并在后续 (图 12(e)–(h)) 滑移带相遇后分解的作用增强, 从而导致位错的密度降低. 相比 $N_{\text{He}} = 1.5\%$ 单晶铁的塑性变形过程, 由于氦浓度升高后产生的更多的团簇和位错缺陷, 促进位错形核, 模型弹性模量和屈服强度进一步降低, 主滑移系的作用减弱, 交滑移作用不显, 取而代之的是滑移带相遇后直接分解成离散位错或点缺陷, 导致位错密度降低.

图 13 为 $N_{\text{He}} = 4.5\%$ 单晶铁在拉伸过程中的原子构型演化过程, 与 $N_{\text{He}} = 3\%$ 单晶铁变化过程很相似. 这是由于初始的位错和团簇缺陷的数量增加幅度不大, 导致韧性不发生变化, 不影响位错形核, 屈服强度和弹性模量不再降低. 塑性变形中主滑移

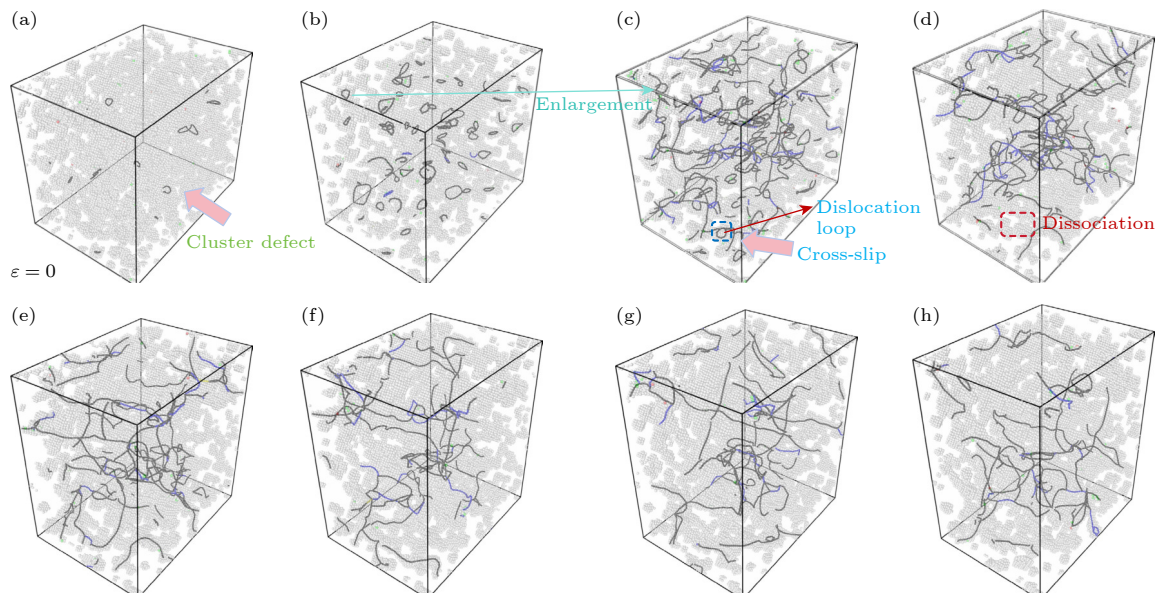


图 11 $N_{\text{He}} = 1.5\%$ 单晶铁在拉伸过程中的原子构型演化 (a) $\varepsilon = 0$; (b) $\varepsilon = 0.024$; (c) $\varepsilon = 0.060$; (d) $\varepsilon = 0.096$; (e) $\varepsilon = 0.126$; (f) $\varepsilon = 0.150$; (g) $\varepsilon = 0.174$; (h) $\varepsilon = 0.210$

Fig. 11. Atomic configuration evolution of single-crystal iron with 1.5% helium concentration during tensile deformation: (a) $\varepsilon = 0$; (b) $\varepsilon = 0.024$; (c) $\varepsilon = 0.060$; (d) $\varepsilon = 0.096$; (e) $\varepsilon = 0.126$; (f) $\varepsilon = 0.150$; (g) $\varepsilon = 0.174$; (h) $\varepsilon = 0.210$.

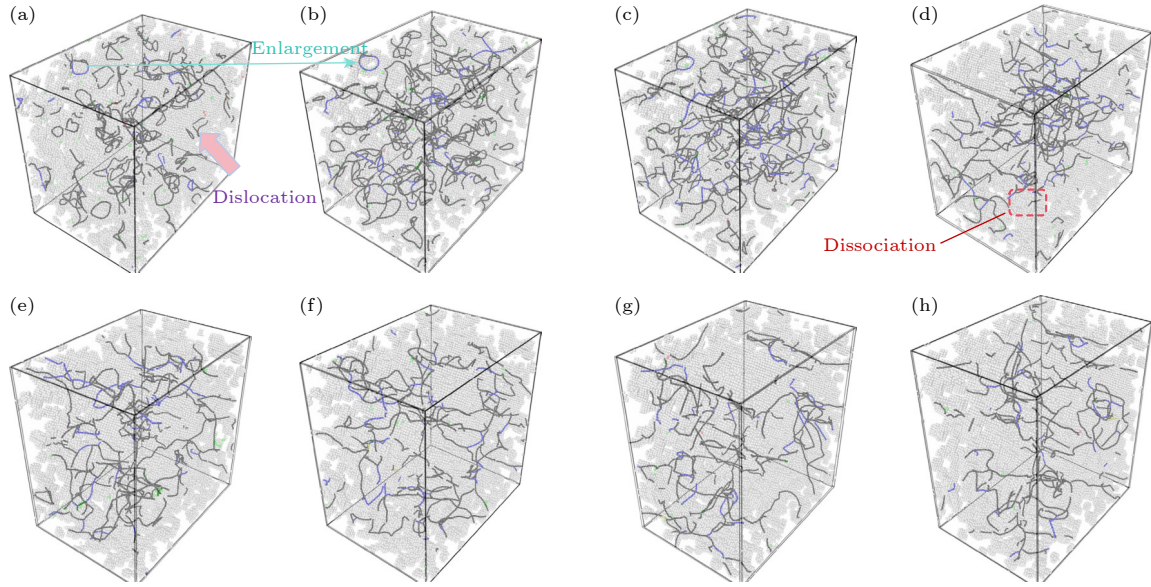


图 12 $N_{\text{He}} = 3.0\%$ 单晶铁在拉伸过程中的原子构型演化 (a) $\varepsilon = 0$; (b) $\varepsilon = 0.012$; (c) $\varepsilon = 0.030$; (d) $\varepsilon = 0.072$; (e) $\varepsilon = 0.120$; (f) $\varepsilon = 0.135$; (g) $\varepsilon = 0.180$; (h) $\varepsilon = 0.210$

Fig. 12. Atomic configuration evolution of single-crystal iron with 3.0% helium concentration during tensile deformation: (a) $\varepsilon = 0$; (b) $\varepsilon = 0.012$; (c) $\varepsilon = 0.030$; (d) $\varepsilon = 0.072$; (e) $\varepsilon = 0.120$; (f) $\varepsilon = 0.135$; (g) $\varepsilon = 0.180$; (h) $\varepsilon = 0.210$.

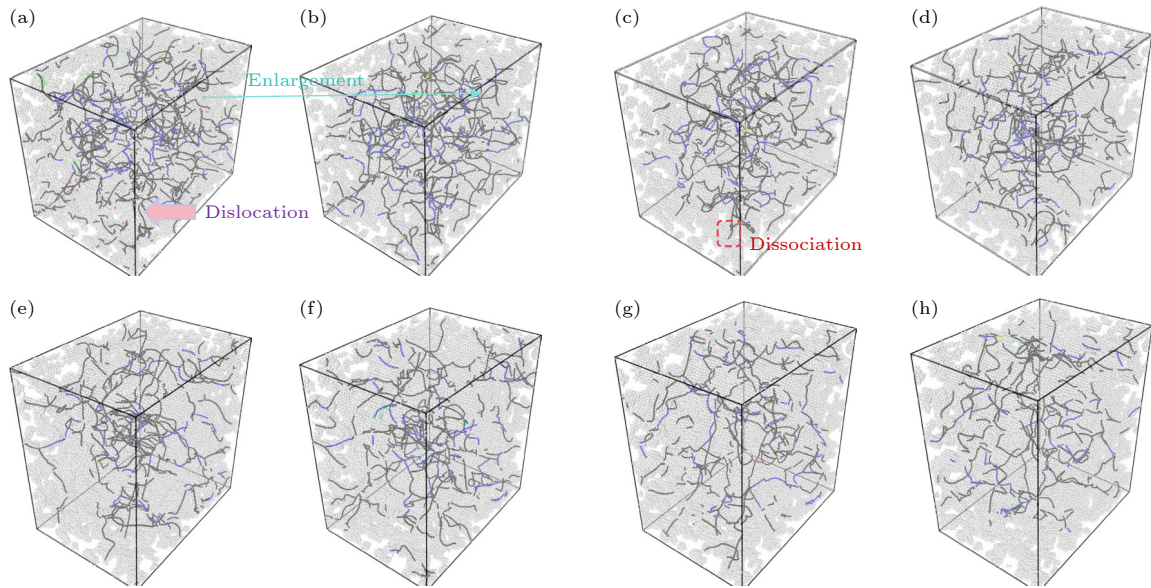


图 13 $N_{\text{He}} = 4.5\%$ 单晶铁在拉伸过程中的原子构型演化 (a) $\varepsilon = 0$; (b) $\varepsilon = 0.012$; (c) $\varepsilon = 0.030$; (d) $\varepsilon = 0.075$; (e) $\varepsilon = 0.126$; (f) $\varepsilon = 0.144$; (g) $\varepsilon = 0.189$; (h) $\varepsilon = 0.210$

Fig. 13. Atomic configuration evolution of single-crystal iron with 4.5% helium concentration during tensile deformation: (a) $\varepsilon = 0$; (b) $\varepsilon = 0.012$; (c) $\varepsilon = 0.030$; (d) $\varepsilon = 0.075$; (e) $\varepsilon = 0.126$; (f) $\varepsilon = 0.144$; (g) $\varepsilon = 0.189$; (h) $\varepsilon = 0.210$.

系的作用不明显, 交滑移不存, 更多的小滑移带相遇后直接分解为离散位错或点缺陷, 位错密度降低。

单晶铁在拉伸过程中的晶体结构演化从图 9—图 13 可以看出, 氦原子的存在显著促进了晶格的局部无序化, 但并不导致整体 BCC 结构的完全丧失。总体上, 体系仍呈现出“局部无序化-整体保持晶格框架”的特征。同时, DXA 分析显示, 随着氦浓

度的升高, 模型最无序时保持 BCC 结构的原子比例: 在 $N_{\text{He}} = 0.5\%$ 时, 仍有约 92% 的原子保持 BCC 排布; 当 $N_{\text{He}} = 1.5\%$, 该比例下降至 88%; 在 $N_{\text{He}} = 3.0\%$ 时进一步降低至 80%; 当 $N_{\text{He}} = 4.5\%$ 时, 仅有约 74% 的原子维持 BCC 结构。这表明氦浓度的升高显著促进了局部晶格无序化, 但整体 BCC 框架依然占据主导地位。

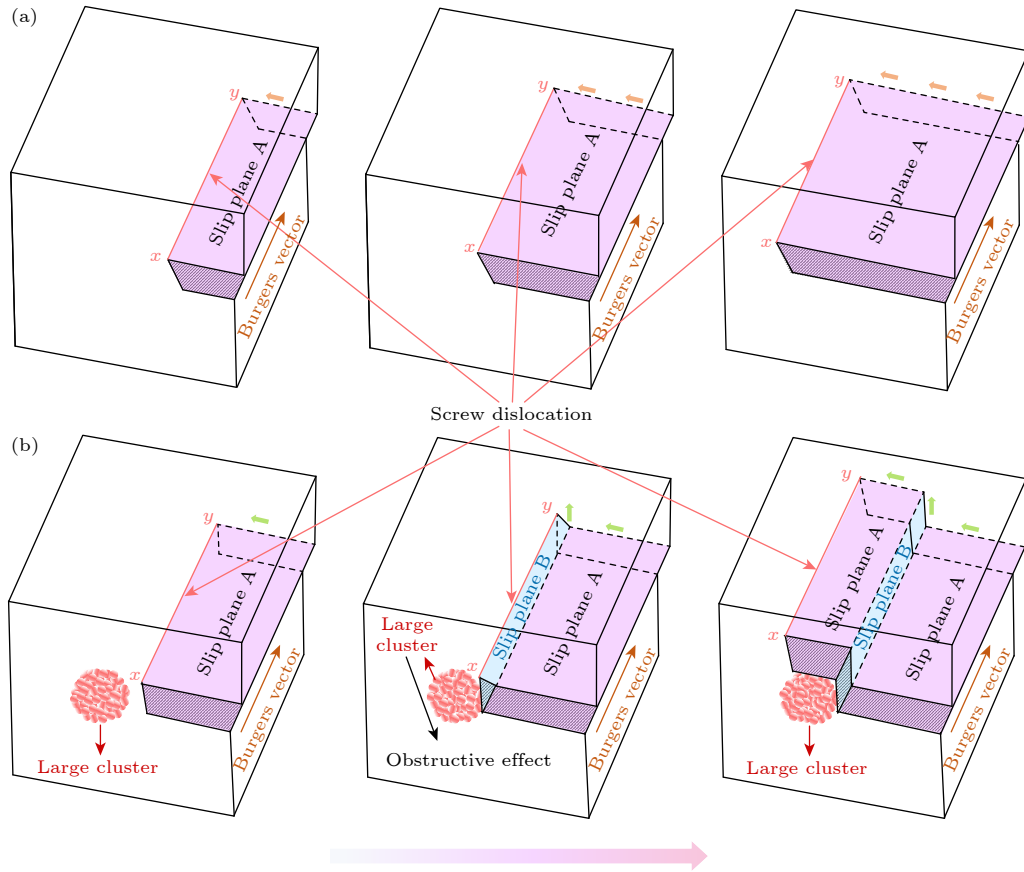
图 14 氦致塑性影响微观机制示意图 (a) $N_{\text{He}} < 3.0\%$; (b) $N_{\text{He}} \geq 3.0\%$ Fig. 14. Schematic of micro-mechanisms for helium-induced plasticity: (a) $N_{\text{He}} < 3.0\%$; (b) $N_{\text{He}} \geq 3.0\%$.

图 14 为氦浓度对氦缺陷影响单晶铁微观塑性变形机制的示意图, $N_{\text{He}} < 3.0\%$ (图 14(a)) 和 $N_{\text{He}} \geq 3.0\%$ (图 14(b)) 下的微观机制. 由于大团簇阻碍滑移系原子滑移, 改变滑移平面方向, 致使原本的主滑移系的作用减弱, 形成更多的小滑移带, 导致微观塑性变形机制由交滑移转变为滑移带相遇后直接分解为离散位错和点缺陷.

4 结 论

本文采用分子动力学模拟, 研究氦浓度对单晶铁缺陷演化与力学性能的影响规律及微观机制. 分析氦浓度影响下的缺陷演化过程, 包括 Frenkel 缺陷演化和团簇缺陷演化; 同时研究拉伸过程中的应力应变曲线、剪切应变云图以及缺陷演化过程. 得到的主要结论如下.

1) 当 $N_{\text{He}} < 3.0\%$ 时, 氦行为让 FPs 数量快速增长, 间隙原子大量生成, 其中部分会复位, FPs 的湮灭速率随数量上升而上升, 最终等于生成速率, 导致 FPs 数量保持稳定; 而 $N_{\text{He}} \geq 3.0\%$ 时, 一次

增长和稳定与 $N_{\text{He}} < 3.0\%$ 相同, 间隙大团簇形成后吸附间隙原子长大, 阻碍复位, 使 FPs 的湮灭速率降低, 导致二次增长. 大团簇被空位环绕, 不再阻碍 FPs 复位, 重新平衡使 FPs 数量二次稳定.

2) 当 $N_{\text{He}} < 3.0\%$ 时, 氦浓度增大导致单晶铁的力学性能下降; 而当 $N_{\text{He}} = 3.0\%$ 时, 单晶铁的弹性模量, 屈服强度和韧性对比无氦单晶铁分别下降了 21%, 88% 和 57%. $N_{\text{He}} \geq 3.0\%$ 后单晶铁的力学性能不再发生变化.

3) 当 $N_{\text{He}} < 3.0\%$ 时, 氦浓度升高促使缺陷数量增多, 促进位错形核, 使屈服强度和弹性模量下降, 更多的缺陷数量使得韧性降低; 当 $N_{\text{He}} \geq 3.0\%$ 后, 模型初始存在的位错和团簇缺陷数量随氦浓度升高的涨幅较小, 使得韧性不变, 不影响位错形核, 弹性模量和屈服强度也随之稳定. 临界浓度 ($N_{\text{He}} = 3.0\%$) 时, 出现的大团簇会阻碍滑移系的滑移, 使滑移平面方向发生改变, 削弱主滑移系的作用, 进而导致小滑移带数量增多, 塑性变形机制也从交滑移转变为滑移带相遇后分解为离散位错和点缺陷.

参考文献

- [1] Xie X Y, Mao C L, Liu C X, Luo J T, Liu Y C 2025 *Int. J. Plast.* **188** 104313
- [2] Yu M, Liu X K, Liu H Z, Jin S X, Xiong Y, Guo L P, Zhang W P 2025 *Radiat. Phys. Chem.* **237** 113035
- [3] Zhou H B, Wang J L, Jiang W, Lu G H, Aguiar J A, Liu F 2016 *Acta Mater.* **119** 1
- [4] Yamamoto T, Odette G R, Miao P, Edwards D J, Kurtz R J 2009 *J. Nucl. Mater.* **386–388** 338
- [5] Wang Y X, Xu Q, Yoshiie T, Pan Z Y 2008 *J. Nucl. Mater.* **376** 133
- [6] Hetherly J, Martinez E, Di Z F, Nastasi M, Caro A 2012 *Scr. Mater.* **66** 17
- [7] Han W Z, Demkowicz M J, Fu E G, Wang Y Q 2012 *Misra A Acta Mater.* **60** 6341
- [8] Ullmaier H 1984 *Nucl. Fusion* **24** 1039
- [9] Xia L D, Liu W B, Liu H P, Zhang J H, Chen H, Yang Z G, Zhang C 2018 *Nucl. Eng. Technol.* **50** 132
- [10] Wei Y P, Liu P P, Zhu Y M, Wang Z Q, Wan F R, Zhan Q 2016 *J. Alloys Compd.* **676** 481
- [11] Yang Z, Yang J Y, Liao Q, Xu S, Li B S 2021 *Chin. Phys. B* **30** 056517
- [12] Guo H Y, Xia M, Yan Q Z, Guo L P, Chen J H, Ge C C 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 077803 (in Chinese) [郭洪燕, 夏敏, 燕青芝, 郭立平, 陈济红, 葛昌纯 2016 物理学报 **65** 077803]
- [13] Agarwal S, Bhattacharya A, Trocellier P, Zinkle S J 2019 *Acta Mater.* **163** 14
- [14] Harrison R W, Greaves G, Hinks J A, Donnelly S E 2017 *J. Nucl. Mater.* **495** 492
- [15] Morishita K, Sugano R, Wirth B D 2003 *J. Nucl. Mater.* **323** 243
- [16] Tschopp M, Gao F, Solanki K 2016 *Acta Mater.* **124** 544
- [17] Zhou Y L, Wang J, Hou Q, Deng A H 2014 *J. Nucl. Mater.* **446** 49
- [18] Chen M, Wang J, Hou Q 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1149 (in Chinese) [陈敏, 汪俊, 侯氢 2009 物理学报 **58** 1149]
- [19] Kobayashi R, Hattori T, Tamura T, Ogata S 2015 *J. Nucl. Mater.* **463** 1071
- [20] Galloway G J, Ackland G J 2013 *Phys. Rev. B* **87** 104106
- [21] Yu J N, Yu G, Yao Z W, Schäublin R 2007 *J. Nucl. Mater.* **367–370** 462
- [22] Lucas G, Schäublin R 2008 *J. Phys. Condens. Matter* **20** 415206
- [23] Hu N W, Deng H Q, Xiao S F, Hu W Y 2013 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B* **303** 72
- [24] Hu N W, Deng H Q, Wang C L, Hu W Y 2016 *RSC Adv.* **6** 27113
- [25] Yang L, Deng H Q, Gao F, Heinisch H L, Kurtz R J, Hu S Y, Li Y L, Zu X T 2013 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B* **303** 68
- [26] Gao C, Tian D F, Li M S, Qian D Z 2018 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B* **418** 46
- [27] Chen Y T, Morishita K 2022 *Nucl. Mater. Energy* **30** 101150
- [28] Yang Y S, Wang L S 2022 *Int. J. Hydrogen Energy* **47** 24398
- [29] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [30] Martínez E, Schwen D, Caro A 2015 *Acta Mater.* **84** 208
- [31] Caro A, Hetherly J, Stukowski A, Caro M, Martínez E, Srivilliputhur S, Zepeda-Ruiz L, Nastasi M 2011 *J. Nucl. Mater.* **418** 261
- [32] Wang L S, Yan S L, Meng M, Xue K M, Li P 2022 *J. Nucl. Mater.* **567** 153818
- [33] Anento N, Serra A 2020 *Comput. Mater. Sci.* **179** 109679
- [34] Li P, Wang L S, Yan S L, Meng M, Zhou Y F, Xue K M 2021 *Int. J. Refract. Met. Hard Mater.* **94** 105376
- [35] Hoover W G 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1695
- [36] Hoover W G 1986 *Phys. Rev. A* **34** 2499
- [37] Gibson J B, Goland A N, Milgram M, Vineyard G H 1960 *Phys. Rev.* **120** 1229
- [38] Nordlund K, Ghaly M, Averbach R S, Caturla M, Diaz de la Rubia T, Tarus J 1998 *Phys. Rev. B* **57** 7556
- [39] Barrett C D, Tschopp M A, El Kadiri H 2012 *Scr. Mater.* **66** 666
- [40] Stukowski A 2010 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [41] Honeycutt J D, Andersen H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [42] Stukowski A 2012 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 045021
- [43] Stukowski A, Albe K 2010 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 085001
- [44] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A 2012 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 085007

Effects of helium concentration on defect evolution and mechanical properties in single-crystal iron: Laws and microscopic correlation mechanisms^{*}

WANG Lusheng¹⁾ SHEN Liang¹⁾ LUO Long¹⁾ PENG Yanhong¹⁾
 YANG Guoping²⁾ ZHAO Han³⁾ DING Jun^{1)†}

1) (*School of Mechanical Engineering, Chongqing University of Technology, Chongqing 400054, China*)

2) (*Southwestern Institute of Physics, Nuclear Industry, Chengdu 610041, China*)

3) (*School of Intelligent Manufacturing, Chengdu Technological University, Chengdu 611730, China*)

(Received 13 August 2025; revised manuscript received 22 September 2025)

Abstract

Understanding the intrinsic correlation between helium concentration and the evolution of defects as well as mechanical properties in low-activation steel on an atomic scale is crucial for designing fusion materials with excellent resistance to swelling and embrittlement. This study investigates the effect of helium concentration on single-crystal iron through molecular dynamics simulations, thereby clarifying the mechanisms by which helium concentration affects helium defect evolution, mechanical properties, and plastic deformation behavior of low-activation steel on an atomic scale. Models of body-centered cubic (BCC) iron with different helium concentrations (0.5%–4.5%) are established. Wigner-Seitz cell analysis and cluster clustering methods are employed to track the evolution of Frenkel Pairs (FPs) and cluster defects, revealing the mechanism of helium concentration-induced FPs and cluster formation at 500 °C. Furthermore, combined with tensile mechanical simulations, the effects of helium behavior on the mechanical properties of single-crystal iron, such as elastic modulus, yield strength, and toughness, are analyzed, and the correlation mechanisms between helium concentration-induced defect evolution, mechanical properties, and plastic deformation behavior are revealed. The results show that when $N_{\text{He}} < 3.0\%$, the number of FPs linearly reaches to a peak and then stabilizes. This is because helium behavior causes a rapid increase in the number of FPs and a large number of interstitial atoms are generated, some of which recombine. The annihilation rate of FPs increases with their number increasing and eventually equals the generation rate, resulting in a stable number of FPs. When $N_{\text{He}} \geq 3.0\%$, the initial increase and stabilization are the same as those for $N_{\text{He}} < 3.0\%$. However, after the formation of large interstitial clusters, they absorb interstitial atoms and grow, hindering recombination and reducing the annihilation rate of FPs, thus leading to a secondary increase. The large clusters are surrounded by vacancies and no longer hinder FP recombination, and a new balance is achieved, resulting in a secondary stabilization of the FP number. When N_{He} increases to 3.0%, the elastic modulus, yield strength, and toughness of single-crystal iron decrease by 21%, 88%, and 57%, respectively; beyond this concentration, the mechanical properties no longer decrease. This is because when $N_{\text{He}} < 3.0\%$, as helium concentration increases, helium-induced defects increase, leading to a decrease in toughness and promoting dislocation nucleation, thus reducing the elastic

^{*} Project supported by the Youth Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52405341), the General Program of Natural Science Foundation of Chongqing, China (Grant No. CSTB2023NSCQ-MSX0363), the Youth Program of Science and Technology Research Plan of Chongqing Municipal Education Commission, China (Grant No. KJQN202301117), the State Key Laboratory of Computational Physics, China (Grant No. 6142A05QN24012), and the Postgraduate Innovation Project of Chongqing University of Technology, China (Grant No. gzlcx20252017).

[†] Corresponding author. E-mail: dingjunawen@126.com

modulus and yield strength. When $N_{\text{He}} \geq 3.0\%$, dislocations exist in the initial defects, and the number of clusters changes slightly; toughness no longer decreases, and dislocation nucleation is not affected, leading to the stabilization of elastic modulus and yield strength. At $N_{\text{He}} = 3.0\%$, the formation of large clusters hinders the movement of slip systems, changes the orientation of slip planes, weakens the effectiveness of the main slip system, which leads to an increase in small slip bands and causes the plastic deformation mechanism to transform from cross-slip to decomposition into discrete dislocations and point defects once the slip bands intersect with each other. This study reveals the influence patterns and key mechanisms of helium concentration on defect evolution and mechanical properties of single-crystal iron, providing a theoretical basis for designing fusion iron-based materials.

Keywords: single-crystal iron, helium concentration, defect evolution, mechanical properties

DOI: [10.7498/aps.75.20251089](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251089)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251089](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251089)



氦浓度对单晶铁缺陷演化及力学性能的影响规律与微观关联机制

王路生 沈量 罗龙 彭彦鸿 杨国平 赵晗 丁军

Effects of helium concentration on defect evolution and mechanical properties in single-crystal iron: Laws and microscopic correlation mechanisms

WANG Lusheng SHEN Liang LUO Long PENG Yanhong YANG Guoping ZHAO Han DING Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 010804 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251089

CSTR: 32037.14.aps.75.20251089

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251089>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

官能化对五边形石墨烯力学性能的影响及机理研究

Investigation of effects of functionalization on mechanical properties of penta-graphene

物理学报. 2021, 70(22): 226201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210764>

非晶合金高温流变行为与动力学弛豫耦合机理

Coupling mechanism between high-temperature rheological behavior and dynamic relaxation in metallic glasses

物理学报. 2025, 74(13): 136401 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250392>

$U_{1x}Th_xO_2$ 混合燃料力学性能的分子动力学模拟

Effects of Th doping on mechanical properties of $U_{1x}Th_xO_2$: An atomistic simulation

物理学报. 2021, 70(12): 122801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202239>

不同荷载作用下二维硼烯的力学性能及变形破坏机理

Mechanical properties and deformation mechanisms of two-dimensional borophene under different loadings

物理学报. 2024, 73(11): 116201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240066>

电流处理调控CoCrFeNi高熵合金纤维的组织结构与力学性能

Optimizing microstructure and mechanical properties of CoCrFeNi high-entropy alloy microfibers by electric current treatment

物理学报. 2025, 74(13): 138102 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250518>

$M(Mn, Ti, Mo)$ 掺杂 α -Fe稳定性、电子结构和力学性能的第一性原理计算

First-principles study of stabilities, electronic structures, and mechanical properties of $M(Mn, Ti, Mo)$ -doped α -Fe

物理学报. 2025, 74(24): 246202 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251044>