

FeNiCr 中熵合金氢致裂纹扩展的原子尺度研究*

卢晓庆^{1) #} 顾云军^{2) #} 赵凯^{1) 3) †}

1) (江南大学机械工程学院, 无锡 214122)

2) (中国工程物理研究院流体物理研究所, 冲击波物理和爆轰物理实验室, 绵阳 621900)

3) (江苏省食品先进制造装备技术重点实验室, 无锡 214122)

(2025 年 12 月 26 日收到; 2026 年 2 月 10 日收到修改稿)

通过分子动力学模拟与理论建模, 探究了 FeNiCr 中熵合金中氢致裂纹扩展的机制, 重点分析了氢浓度、化学短程有序 (CSRO) 和晶体取向对裂纹尖端塑性的影响. 基于扩展的 Rice-Belz 理论框架, 研究发现氢提高了位错发射的能垒, 从而抑制了裂纹尖端的塑性变形. 与无序固溶体相比, CSRO 不仅可以提高位错形核的临界应力强度因子, 还可引导氢在裂纹尖端发生偏聚, 形成氢气团. 此外, 氢对位错运动具有双重影响, 低氢浓度下氢促进位错滑移, 而在高浓度下氢气团对位错产生钉扎效应, 使位错线形态趋于不规则.

关键词: 氢脆, 裂纹尖端塑性, 化学短程有序, 中熵合金**DOI:** 10.7498/aps.75.20251771**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251771

1 引言

在过去的 50 年中, 氢能因其在推动全球脱碳的巨大潜力而受到广泛关注^[1]. 然而, 氢的广泛应用仍受限于其物理特性, 尤其是导致金属脆化的倾向, 即所谓的氢脆 (HE) 现象^[2]. 作为氢能应用中的主要挑战, 氢通过与金属微观结构的相互作用, 会严重降低材料的强度、延展性和断裂韧性^[3]. 尽管研究者已提出多种理论模型, 如氢致局部塑性 (HELP)^[4]、氢致脆性断裂 (HEDE)^[5] 以及氢促应变诱导空洞理论 (HESIV)^[6] 等, 但氢脆的微观机制仍存在争议. 鉴于氢脆问题的复杂性, 开发新型抗氢脆材料是亟待解决的关键课题. 通过实验手段定量地解析不同氢脆机制的成本高昂, 因此数值模拟方法被广泛用于揭示氢与材料结构的相互作用机制^[7,8].

与传统以单一元素为主的合金不同, 多主元合

金 (MPEAs), 亦称中/高熵合金, 通过多种元素的近等原子比组合, 展现出更高的拉伸强度与延展性^[9], 使其在众多领域具有广阔的应用潜力^[10]. 例如, Cui 等^[11] 指出提高 Cr 和 Co 含量可有效降低 CoCrFeMnNi 合金中的氢扩散系数; Han 等^[12] 基于选区衍射的半定量表征技术研究发现, 短程有序结构在 MPEAs 中可能普遍存在. 大量研究表明, 短程有序能够影响位错迁移率与位错密度^[13], 从而提高合金的极限强度与延展性. 作为 MPEAs 中普遍存在的原子尺度结构特征, 短程有序已被证实可显著地调控位错运动、氢的扩散与偏聚行为, 进而影响合金的氢脆敏感性.

近年来, FeNiCr 中熵合金因其优异的延展性、耐腐蚀与抗辐照性能备受关注^[14]. 尽管研究表明提高 Cr 含量可进一步改善其力学与耐腐蚀性^[9], 但该合金的氢脆行为尚不明确. 为此, 本研究采用分子动力学模拟, 系统地研究了在预充氢条件下,

* 国家自然科学基金 (批准号: 12102145) 和江苏省自然科学基金 (批准号: BK20210444) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: kai.zhao@jiangnan.edu.cn

不同加载率与晶体取向对裂纹尖端初始塑性变形的影响. 通过位错发射的临界应力强度因子定量地评估氢的作用, 并将模拟结果与基于 Rice-Beltz 框架^[15,16]的理论预测进行对比. 通过薄板剪切法计算了关键材料参数堆垛层错能随氢浓度的变化规律. 结果表明, 氢通过调控 FeNiCr 合金的堆垛层错能够影响位错行为. 进一步地, 通过对比 MD/MC 混合模拟构建的具有化学短程有序 (CSRO) 结构的 FeNiCr 合金样品与其无序固溶体样品, 发现 CSRO 结构显著提升了材料的抗氢脆性能.

2 方法

2.1 理论模型

裂纹尖端塑性通过扩展 Rice 和 Beltz 开发的二维 (平面应变) Peierls 模型进行分析^[15], 该模型用于全位错成核. 原则上, 该模型估计了包含从 $-\infty$ 到 0 沿 x 轴方向延伸的初始裂纹系统的总能量, 并沿从裂纹尖端以角度 θ 相对于 x 轴出现的滑移面的滑移. 总能量表达式为

$$U[\delta(r)] = U_0 + \int_0^\infty \Phi[\delta(r)] dr + \frac{1}{2} \int_0^\infty \begin{bmatrix} s[\delta_e(r)] \\ (1-v)s[\delta_s(r)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta_e(r) \\ \delta_s(r) \end{bmatrix} dr - \int_0^\infty \frac{K_{II}^{\text{eff}}}{\sqrt{2\pi r}} \delta_e(r) dr, \quad (1)$$

其中 U_0 为未发生任何滑移的加载裂纹固体的弹性应变能; $\Phi[\delta(r)]$ 为裂纹尖端前方滑移面上 $r = 0-\infty$ 范围内滑移不连续分布 $\delta_e(r)$ 贡献的能量. 对于任意滑移分布 $f(r)$, 裂纹尖端前方滑移面上的应力可表示为

$$s[f(r)] = \frac{\mu}{2\pi(1-v)} \int_0^\infty \sqrt{\frac{\xi}{r}} \frac{df(\xi)}{r-\xi} d\xi, \quad (2)$$

其中 μ 是剪切模量; ξ 为沿滑移面距裂纹尖端的距离. 势能 Φ 与广义堆垛层错能 (GSFE) 相关, 其中考虑了氢浓度的影响:

$$\Phi[\delta] = E(\Delta) - h\tau^2/2\mu, \quad (3)$$

其中 δ 表示 $\delta(r)$; h 为 {111} 晶面间距; τ 表示滑移面上沿 $\delta(r)$ 方向的剪切应力. 参数 Δ 用于量化滑移面相邻原子层之间的相对位移程度.

(1) 式等号右侧最后一项量化了远场载荷所做

的功, 本研究中远场载荷以 I 型应力强度因子 K_I 为特征. 作用于滑移平面的有效 II 型应力强度因子,

$$K_{II}^{\text{eff}} = K_I \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}. \quad (4)$$

为简化模型, 先导分位错的滑移行为可通过引入有效屏蔽应力强度因子 $K_{II}^{\text{eff}*}$ 来描述. 对于先导分位错而言, 其有效应力强度因子可直接由远场载荷在滑移方向上的投影给出:

$$K_{II}^{\text{eff}*}(\varphi) = K_{II}^{\text{eff}} \cos \varphi. \quad (5)$$

在任意载荷下, 单位长度的激活能是稳定平衡滑移分布 $\delta_{\text{stable}}(r)$ 与鞍点滑移分布 $\delta_{\text{saddle}}(r)$ 之间的能量差:

$$Q_{2D} = U[\delta_{\text{saddle}}(r)] - U[\delta_{\text{stable}}(r)]. \quad (6)$$

考虑到位错形核是一个热激活过程, 上述能垒表示为

$$Q_{3D}(K_I, T) = (1 - T/T_m) Q_{3D}(K_I), \quad (7)$$

其中 T_m 为表面无序化温度; Q_{3D} 通过使用 Q_{2D} 与比例因子 $5b$ 乘积估算得出^[17], 该比例因子可视为位错环在势能面鞍点处的宽度^[18]. 在过渡态理论 (TST) 框架下^[19], 平均形核速率 ω 可表示为

$$\omega = \omega_0 \exp\left(-\frac{Q_{3D}}{k_B T}\right), \quad (8)$$

其中 ω_0 为试探频率, k_B 为玻尔兹曼常数. 当应力强度因子 (SIF) 以恒定速率 \dot{K} 增加时, 位错形核事件可以表示为^[20]

$$\frac{Q_{3D}(K_I^p, T)}{k_B T} = \ln \frac{k_B T N \omega_0}{\dot{K}_I \Omega(K_I^p, T)}, \quad (9)$$

其中, $N\omega_0$ 表示裂纹尖端附近潜在形核位点的数量与试探频率的乘积; Ω 表示一个类似于激活体积的项, 其定义为 $-\partial Q_{3D}/\partial K_I$. 通过数值求解 (9) 式, 可以得到应力强度因子 K_I^p .

2.2 数值模拟

本研究采用 LAMMPS 软件进行分子动力学模拟. 如图 1(a) 所示, 位错沿滑移面发射, 该滑移面与裂纹面夹角为 θ , 滑移方向相对于滑移面内裂纹前沿法线的偏转角为 φ . 本文考虑了 3 种构型, 具体几何参数列于表 1. 首先通过混合 MC/MD 方法构建了具有 CSRO 结构的 FeNiCr 模型, 图 1(b) 展示了具有 CSRO 结构样品的原子构型 (以取向

A 为例). 图 1(c) 通过 Warren-Cowley 参数对 CSRO 特征进行了表征, 其中形成 Ni-Ni 原子对趋势最强, Cr-Cr 原子对趋势较弱, 形成 Cr 原子弱偏聚, 同时 Fe-Ni 原子对则表现出排斥倾向. 基于已建立的 CSRO 构型制备了圆柱形试样, 并在其几何中心位置预制裂纹, 试样半径约 200 Å、沿 z 轴方向厚度约 70 Å (图 1(d)). 作为对比, 随机固溶体样品如图 1(e) 所示. Fe-Ni-Cr-H 体系的原子间相互作用采用 Zhou 等 [21] 开发的嵌入原子势进行描述, 该势函数能够准确地描述氢原子与晶体缺陷之间的相互作用能. 首先, 采用共轭梯度法将整个体系弛豫至能量最低状态并使用 Noše-Hoover 热浴在等温等压系综中进一步弛豫. 沿 x 和 y 方向边界条件设置为非周期性, z 轴方向为周期性边界条件. 通过设置裂纹尖端半径约为 2 Å, 在试样左侧去除若干层原子以构建原子级钝裂纹. 随后以 1 atom/ps

的速率将氢原子随机插入裂纹尖端周围半径约 80 Å 的圆柱区域内, 并弛豫 500 ps. 加载过程中, 根据各向同性线弹性断裂力学给出的裂纹尖端位移场解, 在边界原子处施加 I 型应力强度因子场 [22]. 系统初始加载的 I 型应力强度因子设定为 $K_{I0} = 0.40 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$, 它不足以引起裂纹扩展, 但允许 H 充分偏析. 使用 OVITO 软件 [23] 进行可视化分析, 微观结构演化通过自适应近邻分析法 [24] 和位错提取算法 [25] 进行识别.

表 1 样品几何参数, 其中偏转角 φ 均为 0°
Table 1. Geometry of specimens, with the twist angle φ all set to 0° .

| | θ ($^\circ$) | x | y | z |
|------|-----------------------|-----------------------|---------|-----------------|
| 取向 A | 35.26 | [0 0 1] | [1 1 0] | $[\bar{1} 1 0]$ |
| 取向 B | 54.74 | $[\bar{1} \bar{1} 4]$ | [2 2 1] | $[\bar{1} 1 0]$ |
| 取向 C | 70.53 | $[\bar{1} \bar{1} 2]$ | [1 1 1] | $[\bar{1} 1 0]$ |

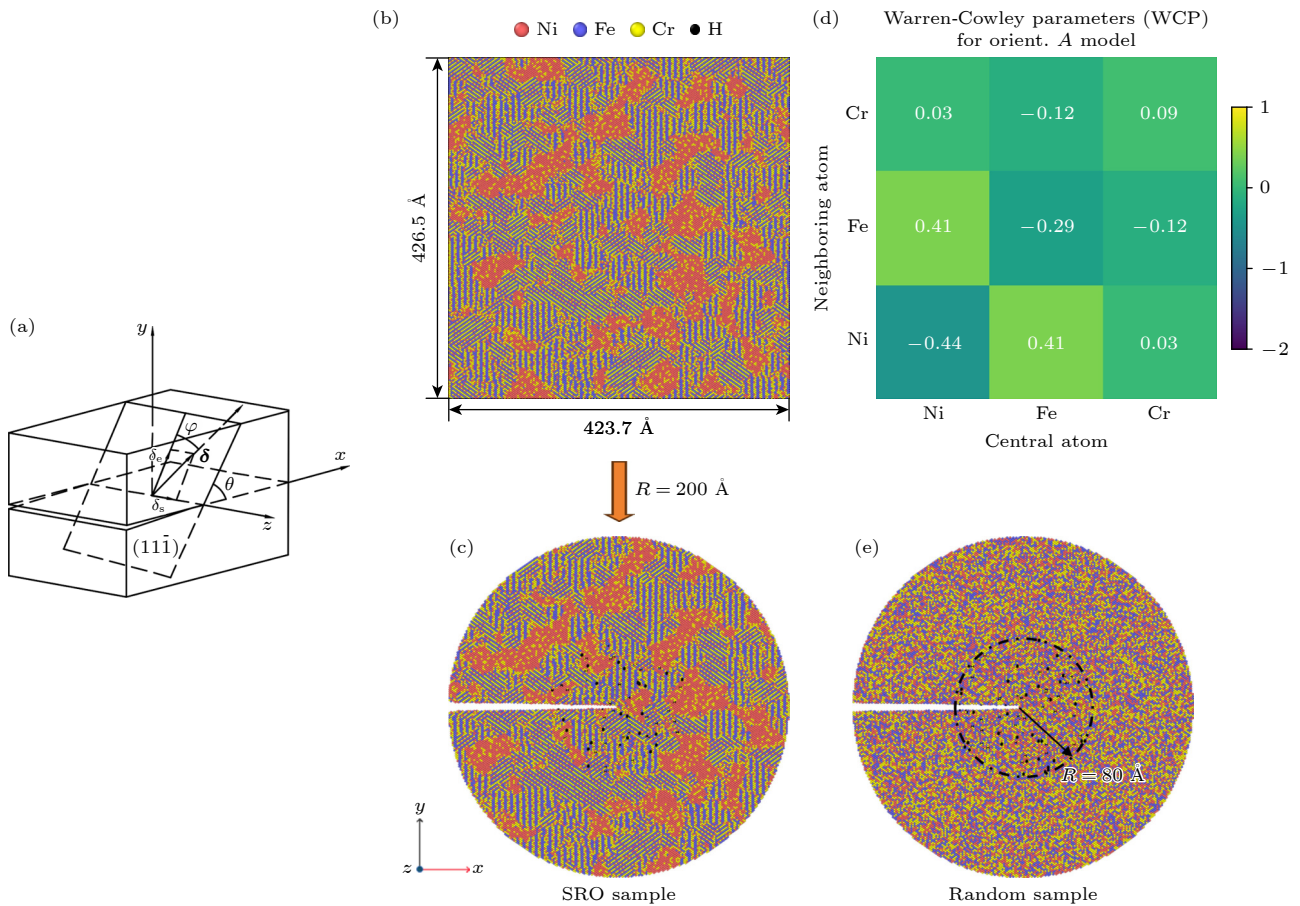


图 1 (a) 裂纹在面心立方晶格中相对于 (111) 滑移面的晶体学取向; (b) 采用混合 MD/MC 制备的 CSRO 样品 (此处仅展示了取向 A); (c) 含预制裂纹的圆柱形 CSRO 样品; (d) 用于表征 CSRO 的 Warren-Cowley 参数; (e) 随机固溶体样品

Fig. 1. (a) Crystallographic orientation of the crack with respect to the (111) slip plane; (b) the CSRO sample prepared by the hybrid MD/MC method, with only orientation A shown here; (c) the Warren-Cowley parameter employed for characterizing CSRO; (d) cylindrical CSRO sample containing a crack; (e) random solid-solution sample.

3 结果和讨论

3.1 堆垛层错能的计算

采用薄板剪切法^[26]计算(111)晶面上的堆垛层错能,其晶格矢量分别沿[112], $[\bar{1}10]$ 和 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 方向.模拟盒子被分为上下两部分,下半部分固定,上半部分沿[112]方向进行微小增量刚性位移,逐渐形成堆垛层错.沿 $[\bar{1}10]$ 和[112]方向施加周期性边界条件.将氢原子随机插入模拟盒子中心区域,随后以相对滑移量(Δ)为变量得到广义堆垛层错能^[27],该堆垛层错能计算中考虑了CSRO的影响.如图2所示, γ_{usf} , γ_{ssf} , γ_{utf} 及 γ_{stf} 均随着氢浓度(单位为appm, 1 appm = 10^{-6} (原子分数))增加呈线性变化.

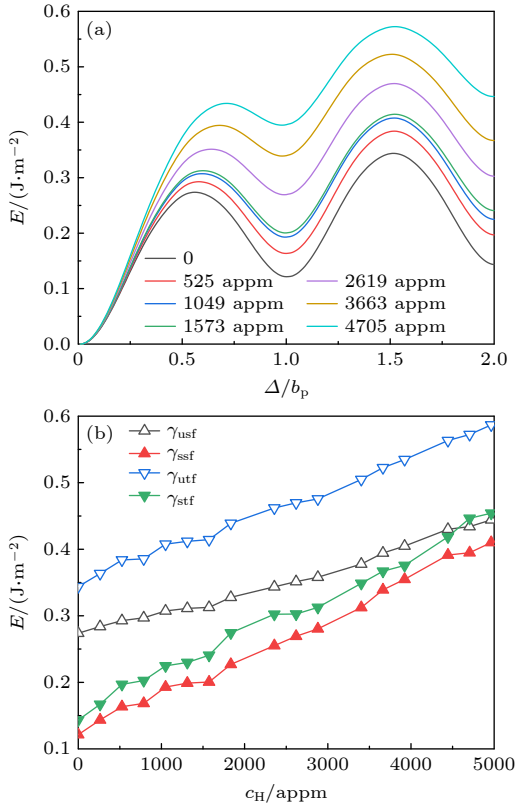


图2 (a)不同氢浓度下广义堆垛层错能随位移(Δ)的变化;(b) γ_{usf} , γ_{ssf} , γ_{utf} 及 γ_{stf} 随着氢浓度(c_{H})的变化关系
Fig. 2. (a) The GSF energy as a function of the slip displacement (Δ) for various hydrogen concentrations; (b) γ_{usf} , γ_{ssf} , γ_{utf} and γ_{stf} as a function of the hydrogen concentration (c_{H}).

3.2 位错发射所需的应力强度因子 K_{Ie}

为了评估氢对裂纹尖端变形的影响,在不同加载率下对三种氢浓度(646, 1291, 2579 appm)进

行了分子动力学模拟.如图3所示,与已有研究^[28]一致,在高加载率下,位错发射所需的临界应力强度因子(K_{Ie})与氢浓度之间未能总结出统一的规律.然而,基于过渡态理论的Rice模型^[17]预测,在三种取向下最可能的临界应力强度因子 K_{Ie} 均随着氢浓度与加载率的增加而上升.本理论与先前研究^[29]的差异源于经典Peierls-Nabarro模型无法准确描述MPEAs中位错芯区域内原子占位的随机性.

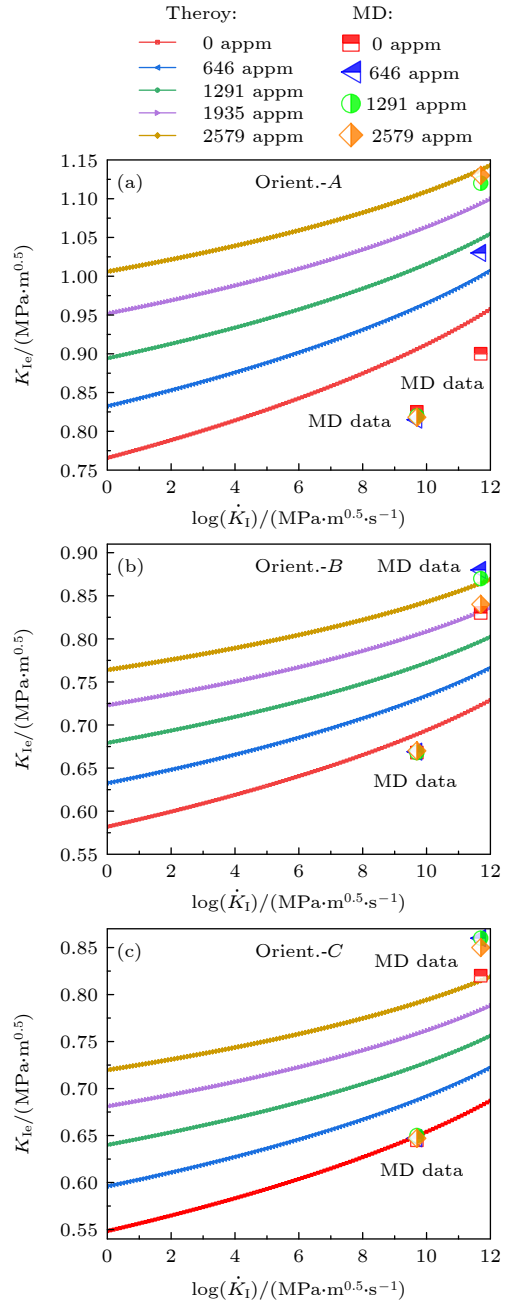


图3 不同氢浓度下最可能应力强度因子 K_{Ie} 的理论预测与分子动力学模拟结果随加载率 \dot{K}_{I} 的变化关系

Fig. 3. Theoretical predictions of the most probable SIF K_{Ie} and the MD results versus the loading rate \dot{K}_{I} under various hydrogen concentrations.

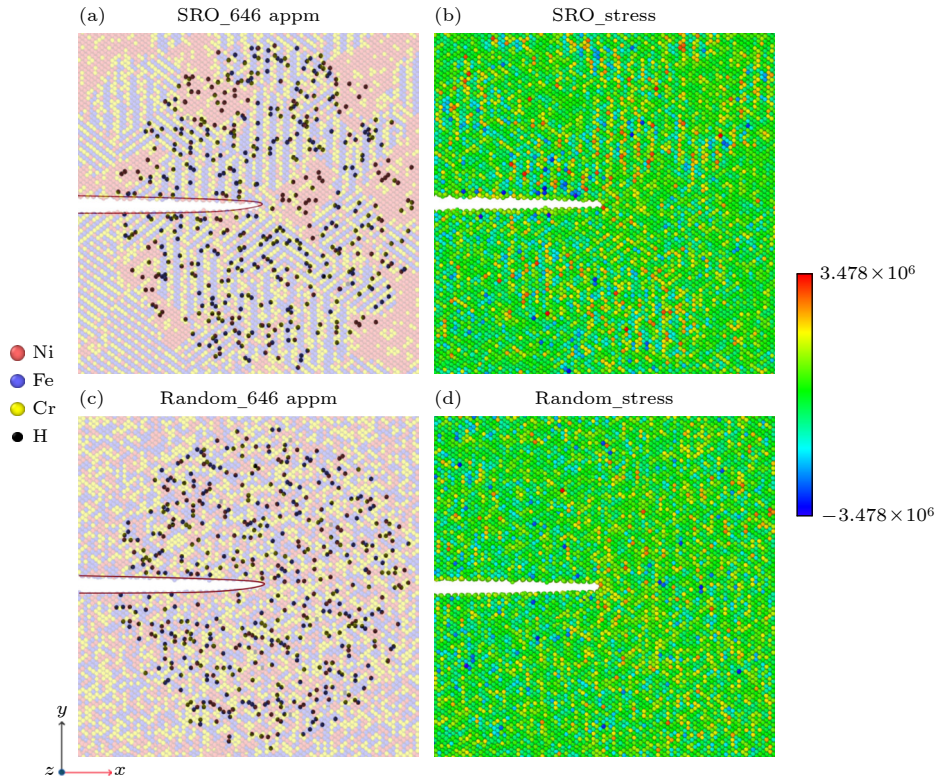


图 4 (a), (c) CSRO 样品和随机样品裂纹尖端附近氢原子 (黑色) 分布图; (b), (d) σ_{yy} 应力分量分布云图由蓝色 (低应力) 至红色 (高应力) 渐变

Fig. 4. (a), (c) Distribution of hydrogen atoms (black) near the crack tip in the CSRO sample and the random solid solution sample, respectively; (b), (d) cloud maps of the stress component distribution σ_{yy} , with the color gradient ranging from blue (low stress) to red (high stress).

3.2.1 氢的影响

图 4 展示了取向 A 样品在加载率为 $\dot{K}_I = 5 \times 10^9 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}/\text{s}$ 条件下不同氢浓度对裂纹尖端塑性变形的影响结果. 如图 4(a) 和图 4(c) 所示, 裂纹尖端氢原子分布的动态模拟结果表明, 与随机固溶体相比, CSRO 结构使氢原子呈现有序化分布特征, 并促进其在裂纹尖端聚集. 这是由于 Cr 与 Ni 晶格常数差异导致晶格畸变形成局部高应力区 (图 4(b) 和图 4(d)), 氢原子在应力梯度驱动下偏聚至这些区域. 这种 CSRO 对氢原子的捕获效应与 Liu 等^[30] 通过二次离子质谱 (SIMS) 获得的实验观测结果一致. 模拟结果显示, 裂纹尖端均通过发射位错而钝化实现塑性变形, 未观察到解理断裂. 如图 5(a) 所示, 含有 CSRO 样品的裂纹尖端初次位错发射所需的临界应力强度因子 (K_{Ic}) 显著高于随机样品, 甚至超过单晶 Ni 等纯金属的对应值^[31], 这直接证实了 CSRO 对材料的强化作用. 如图 5(b) 和图 5(c), 根据 CSRO 样品模拟结果显示裂纹尖端首次发射 $1/6[2\bar{1}1]$ Shockley 不全位错 (SP1),

虽然 MD 模拟结果表明氢浓度对初次位错发射所需的应力强度因子影响并不显著, 但氢的存在促进 SP1 的滑移.

随着载荷增加至 $K_I = 0.88 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$ 时, 裂纹尖端继续发射 $1/6[2\bar{1}1]$ 不全位错 (SP2, SP3, 如图 6(a) 所示). SP2 和 SP3 发射所需应力强度因子记录在图 6(b), 其数值在不同氢浓度下的波动范围小于 $0.03 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$, 表明氢对其影响不明显. 图 7 为未充氢和充氢条件下 SP2 和 SP3 的运动轨迹图. 在未充氢条件下, SP2 直至 K_I 达到 $0.935 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$ 时才脱钉并向基体滑移. 如图 6(a) 和图 7(e) 所示, 当 K_I 增至 $1.02 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$ 时, SP3 在同一滑移系上发射, 此位错消除了前一缺陷 (SP2) 留下的堆垛层错, 并且快速通过了氢气团区域. 然而在充氢条件下, 如图 7(f) 所示, SP3 在氢气团区域恢复钉扎, 与未充氢下的结果形成鲜明对比. 进一步分析发现, 当氢浓度为 1291 appm 时, 如图 7(c) 和图 7(g), SP2 和 SP3 在氢气团区域的钉扎作用相较于无氢或低氢条件均显著减弱, 这一现象可归因于 HELP

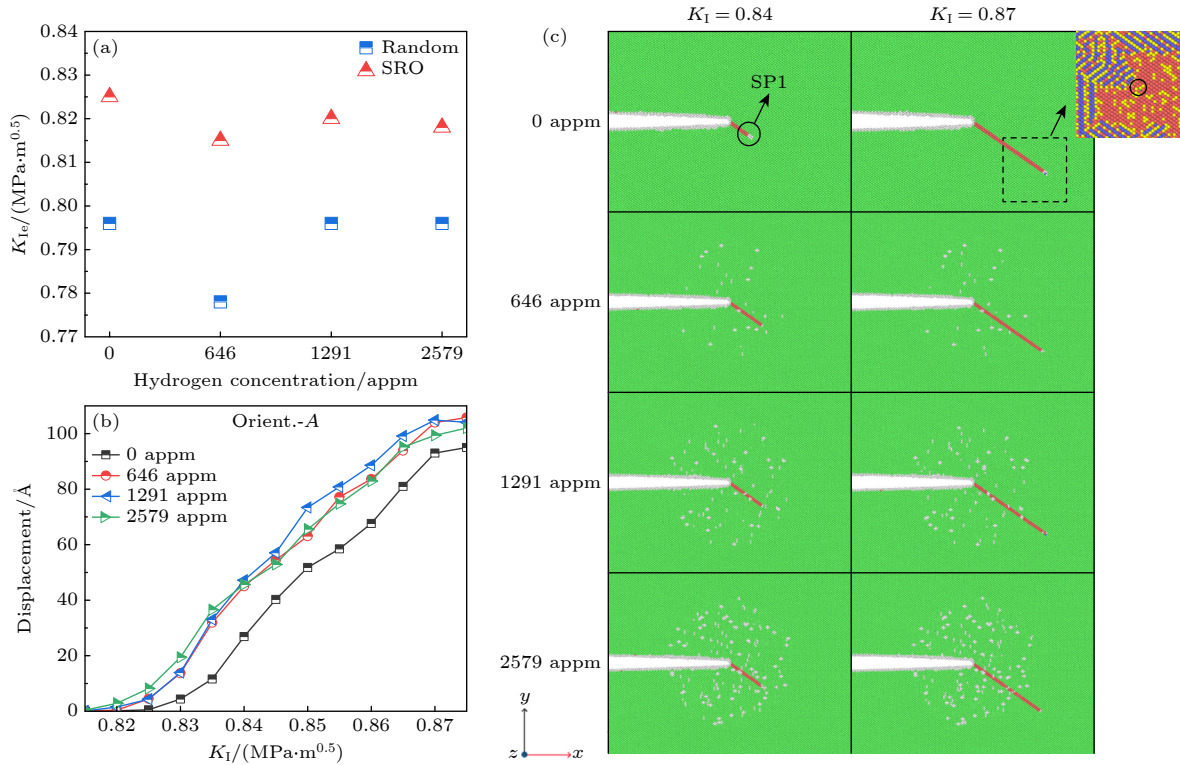


图 5 (a) 随机样品和 CSRO 样品裂纹尖端初次位错发射所需的临界应力强度因子; (b) CSRO 样品裂纹尖端初次发射肖克利不全位错 SP1 在不同氢浓度下的位移; (c) CSRO 样品 MD 模拟结果的 DXA 分析快照图

Fig. 5. (a) Critical stress intensity factor required for the initial dislocation emission at the crack tip in the random sample and the CSRO sample; (b) displacement of the initially emitted Shockley partial dislocation SP1; (c) snapshot from the DXA of the MD simulation results for the CSRO sample, illustrating the motion of SP1.

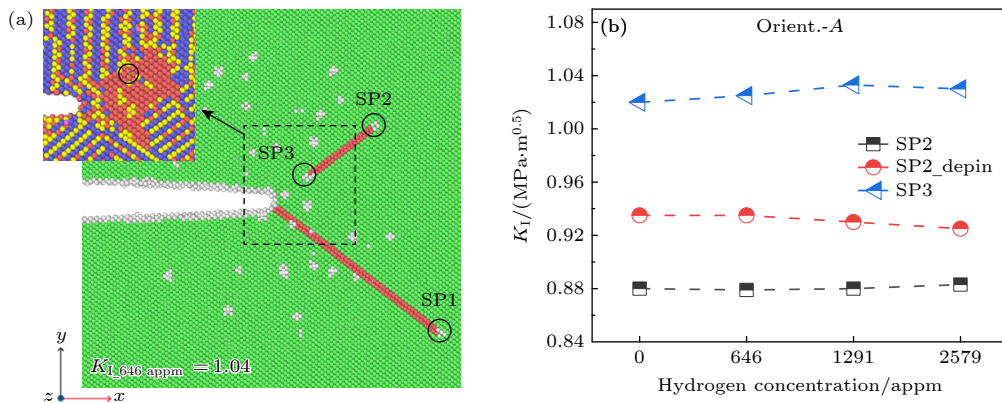


图 6 (a) 取向 A 下在氢浓度为 646 appm、应力强度因子为 1.04 MPa·√m 条件下获得的 DXA 快照图; (b) 不同氢浓度下不全位错 SP2 和 SP3 发射所需的应力强度因子值

Fig. 6. (a) DXA snapshot obtained at a hydrogen concentration of 646 appm and a stress intensity factor of 1.04 MPa·√m; (b) stress intensity factor values required for the emission of partial dislocations SP2 and SP3.

机制, 氢原子通过屏蔽效应削弱了位错间的相互作用, 降低了位错滑移所需的分剪切应力. 然而, 在氢浓度达到 2579 appm 时 (图 7(d) 和图 7(h)), SP3 的单位时间滑移距离减小, 滑移速率减慢. 位错线形态呈现明显不规则特征, 这是由于氢原子浓度较大, 位错滑移过程中, 氢与位错结合, 位错脱离氢

时需要克服能量势垒, 对位错运动产生拖曳或钉扎作用.

3.2.2 晶体取向的影响

取向 B 和取向 C 样品的模拟结果显示, 氢浓度对初次位错发射所需的应力强度因子影响较小, 其

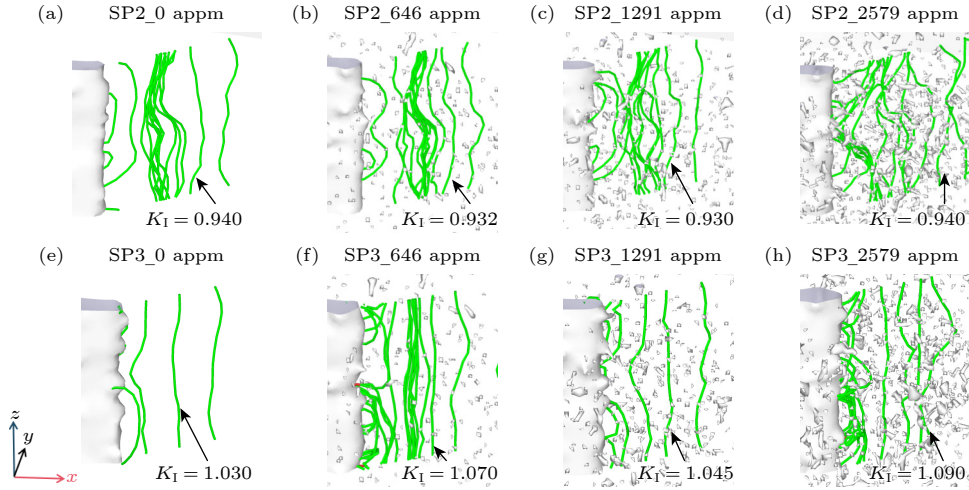


图 7 不同氢浓度下位错 SP2 和 SP3 的运动轨迹图, 其中绿色线代表肖克利不全位错, 白色团簇为氢原子引起的缺陷

Fig. 7. Motion trajectories of dislocations SP2 and SP3 under different hydrogen concentrations, where Shockley partial dislocations are colored green, and the white clusters represent defects induced by hydrogen atoms.

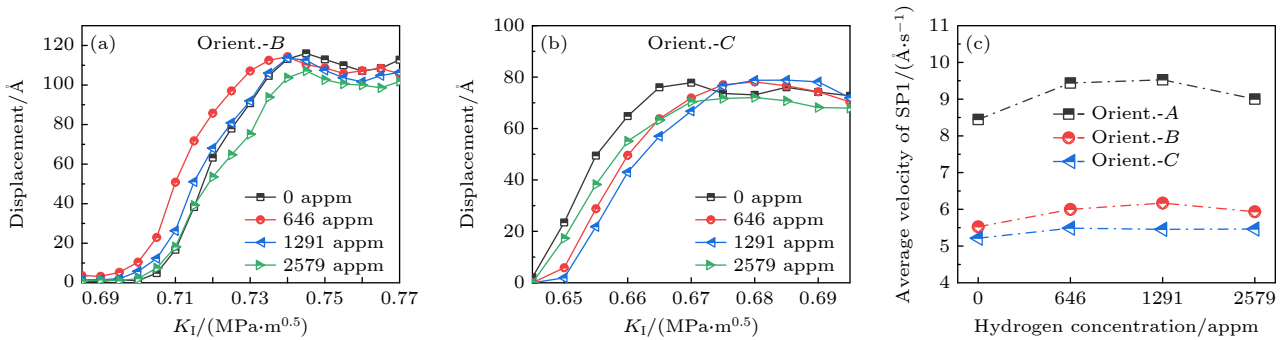


图 8 (a) 取向 *B* 不同氢浓度下 SP1 滑移的位移变化; (b) 取向 *C* 不同氢浓度下 SP1 滑移的位移变化; (c) 位错 SP1 在不同氢浓度下的平均滑移速率

Fig. 8. (a) Displacement variation of SP1 slip under different hydrogen concentrations in orientation *B*; (b) displacement variation of SP1 slip under different hydrogen concentrations in orientation *C*; (c) average slip velocity of the leading partial dislocation SP1 as a function of hydrogen concentration.

数值在不同氢浓度下波动范围小于 $0.02 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$. 对初始位错 SP1 的位移和滑移速率进行统计, 如图 8 所示, 位移趋于平缓归因于氢气团的钉扎, 从位错滑移速率分析表明, 低氢浓度 (1291 appm) 时氢存在可有效促进位错滑移, 高氢浓度 (2579 appm) 下滑移变慢主要受氢原子钉扎或拖曳作用影响, 这与取向 *A* 的观察结果一致. 随着取向角 θ 增大, 裂纹尖端局部应力场在滑移面上的分剪切应力越小, 导致位错整体滑移速率减慢. 值得注意的是, 如图 9(a) 和图 9(c) 所示, 在取向 *B* 样品中, SP2 发射后, 裂纹尖端观测到孪晶的形成, 氢对孪晶形成所需的应力强度因子影响不显著, 其数值在充氢与未充氢下的差异小于 $0.03 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$. 随着应力持续增加, 裂纹尖端的变形孪晶宽度逐渐扩展, 塑性变形进一步积累. 如图 9(b) 和图 9(d) 所示, 在取

向 *C* 样品中, SP2 在与 SP1 相同滑移面发射, 导致堆垛层错退化.

3.3 理论预测与模拟结果差异机理分析

经典 Rice-Beltz 理论框架假设在一个具有明确周期势的均匀连续介质中, 通过 GSFE 势能面来表征滑移面上的力, 并假设该势能面在空间上是均匀的 [15]. 然而, 在多主元合金中, 化学成分波动和化学短程有序破坏了这种均匀性, 位错芯区域的原子占位是随机的, 局域势能面因周围原子种类的不同而发生变化. 位错形核的局部能量鞍点受原子状态影响, 会使形核能垒呈现波动, 并非单一确定值 [32,33]. 氢原子的引入则会进一步改变局域能量景观 [34]. 因此, 基于该理论预测值与真实值之间有一定的偏差. 其次, 本文采用的高加载率在时间

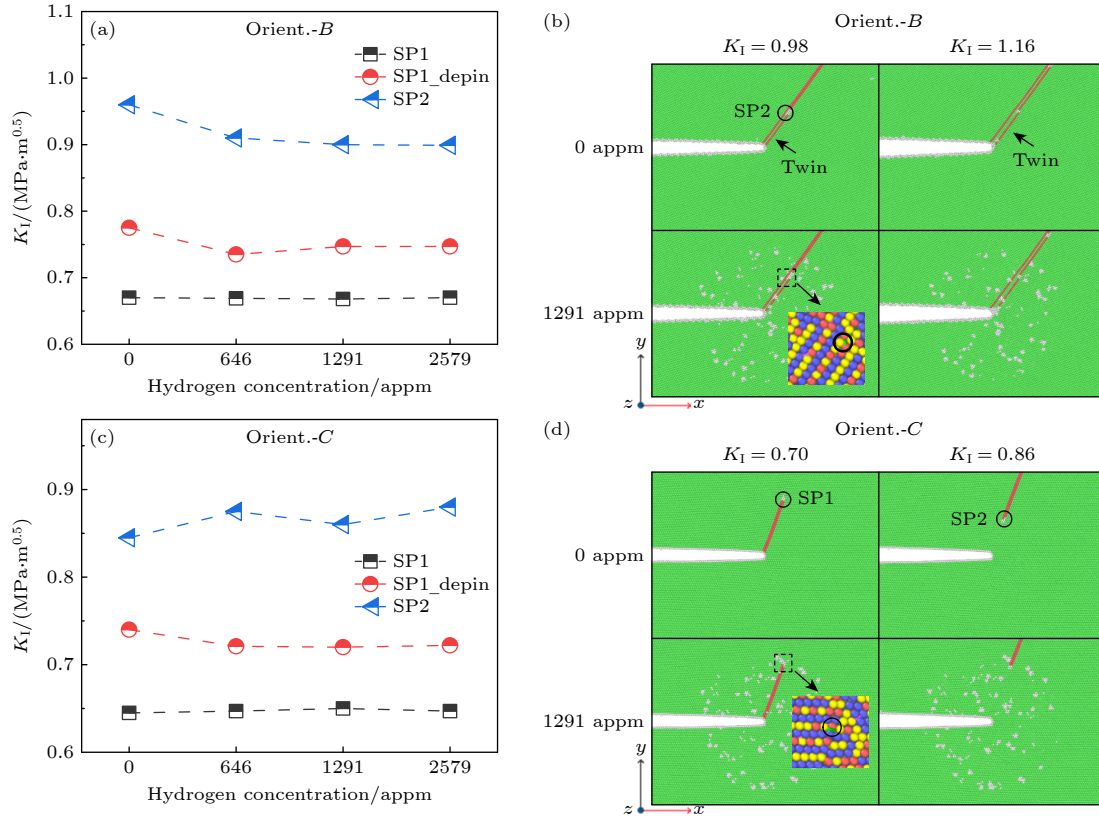


图9 (a), (c) 取向 B 和取向 C 样品在不同氢浓度条件位错 SP1, SP2 发射及 SP1 脱钉所需应力强度因子; (b), (d) 取向 A 和取向 B 不同氢浓度裂纹尖端位错发射快照图

Fig. 9. (a), (c) The stress intensity factors required for the nucleation of dislocations SP1 and SP2, as well as for the unpinning of SP1, in samples with orientation B and orientation C , respectively, under varying hydrogen concentrations; (b), (d) display snapshots of dislocation emission at the crack tip for orientation B and orientation C under different hydrogen concentrations.

尺度上使模拟过程远离准静态平衡条件. 在此条件下, 位错形核的热激活特性会被抑制. 此外, 受限于模拟体系的尺寸与时间尺度问题, 高加载率下获得的位错形核事件统计样本有限, 也进一步增加了 K_{Ie} 与氢浓度关系的离散性与随机性.

4 结论

本研究通过分子动力学模拟与理论分析, 揭示了 FeNiCr 中熵合金中氢致裂纹扩展的微观机制. 基于经典 Rice-Belitz 模型, 发现氢抑制裂纹尖端的塑性形核. 材料的 CSRO 能够提高位错发射临界应力, 并促进氢在裂纹尖端附近偏聚. 分子动力学模拟表明, 当氢浓度较低时, 氢存在会促进位错滑移, 而氢浓度较高时, 氢气团的钉扎作用使位错线形态趋于不规则, 滑移速率减慢. 此外, 晶体取向通过影响滑移面与裂纹面夹角, 调控临氢环境下的塑性响应. 抗氢脆合金设计可通过调控局部化学有序来优化氢分布与位错相互作用, 相关跨尺度机

制有待结合实验进一步验证.

参考文献

- [1] Johnson N, Liebreich M, Kammen D M, Ekins P, McKenna R, Staffell I 2025 *Nat. Rev. Clean Technol.* **1** 351
- [2] Robertson I M, Sofronis P, Nagao A, Martin M L, Wang S, Gross D W, Nygren K E 2015 *Metall. Mater. Trans. B* **46** 1085
- [3] Meda U S, Bhat N, Pandey A, Subramanya K N, Lourdu Antony Raj M A 2023 *Int. J. Hydrogen Energy* **48** 17894
- [4] Hirth J P 1980 *Metall. Trans. A* **11** 861
- [5] Oriani R A, Josephic P H 1974 *Acta Metall.* **22** 1065
- [6] Takai K, Shoda H, Suzuki H, Nagumo M 2008 *Acta Mater.* **56** 5158
- [7] Martínez-Pañeda E, Golahmar A, Niordson C F 2018 *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **342** 742
- [8] Gobbi G, Colombo C, Miccoli S, Vergani L 2019 *Adv. Eng. Software* **135** 102673
- [9] Fu A, Liu B, Lu W, Liu B, Li J, Fang Q, Li Z, Liu Y 2020 *Scr. Mater.* **186** 381
- [10] Wang C, Han K, Liu X, Zhu Y, Liang S, Zhao L, Huang M, Li Z 2022 *J. Alloys Compd.* **922** 166259
- [11] Cui M, Zhang T, Ni J, Zhao W, Li S, Liu Q, Zhang S, Ye Z, Deng Y, Chen Y 2025 *Int. J. Hydrogen Energy* **106** 1275
- [12] Han Y, Chen H, Sun Y, Liu J, Wei S, Xie B, Zhang Z, Zhu

- Y, Li M, Yang J, Chen W, Cao P, Yang Y 2024 *Nat. Commun.* **15** 6486
- [13] Yin S, Zuo Y, Abu-Odeh A, Zheng H, Li X G, Ding J, Ong S P, Asta M, Ritchie R O 2021 *Nat. Commun.* **12** 4873
- [14] Li N, Feng S, Sun S, Wei R 2024 *Intermetallics* **170** 108329
- [15] Rice J R, Beltz G E 1994 *J. Mech. Phys. Solids* **42** 333
- [16] Zhao K, Ding Y, Yu H, He J, Zhang Z 2025 *Int. J. Mech. Sci.* **286** 109891
- [17] Yamakov V I, Warner D H, Zamora R J, Saether E, Curtin W A, Glaessgen E H 2014 *J. Mech. Phys. Solids* **65** 35
- [18] Gordon P A, Neeraj T, Luton M J 2008 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **16** 045006
- [19] Eyring H 1935 *J. Chem. Phys.* **3** 107
- [20] Zhu T, Li J, Samanta A, Leach A, Gall K 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 025502
- [21] Zhou X W, Nowak C, Skelton R S, Foster M E, Ronevich J A, San Marchi C, Sills R B 2022 *Int. J. Hydrogen Energy* **47** 651
- [22] Adlakha I, Solanki K N 2018 *J. Appl. Phys.* **123** 014304
- [23] Stukowski A 2009 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [24] Tsuzuki H, Branicio P S, Rino J P 2007 *Comput. Phys. Commun.* **177** 518
- [25] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A 2012 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 085007
- [26] Datta A, Waghmare U V, Ramamurty U 2009 *Scr. Mater.* **60** 124
- [27] Andric P, Curtin W A 2017 *J. Mech. Phys. Solids* **106** 315
- [28] Zhao K, He J, Zhang Z 2020 *J. Appl. Phys.* **127** 015101
- [29] Zhao K, Zhao F, Lin Q, Li X, Xiao J, Gu Y, Chen Q 2023 *Mater. Today Commun.* **37** 107269
- [30] Liu G D, Luo X M, Chen H L, Zou J P, Zhang B, Zhang G P 2024 *Mater. Charact.* **217** 114329
- [31] Tehranchi A, Zhou X, Curtin W A 2020 *Acta Mater.* **185** 98
- [32] Li Q J, Sheng H, Ma E 2019 *Nat. Commun.* **10** 3563
- [33] Zhang R, Zhao S, Ding J, Chong Y, Jia T, Ophus C, Asta M, Ritchie R O, Minor A M 2020 *Nature* **581** 283
- [34] Huang L, Chen D, Xie D, Li S, Zhang Y, Zhu T, Raabe D, Ma E, Li J, Shan Z 2023 *Nat. Mater.* **22** 710

Atomic-scale study of hydrogen-assisted crack propagation in FeNiCr medium entropy alloy*

LU Xiaoqing^{1) #} GU Yunjun^{2) #} ZHAO Kai^{1) 3) †}

1) (School of Mechanical Engineering, Jiangnan University, Wuxi 214122, China)

2) (National Key Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang 621900, China)

3) (Jiangsu Key Laboratory of Advanced Food Manufacturing Equipment Technology, Wuxi 214122, China)

(Received 26 December 2025; revised manuscript received 10 February 2026)

Abstract

This study investigates the hydrogen-assisted crack propagation mechanisms in FeNiCr medium-entropy alloys (MEAs) through molecular dynamics (MD) simulations, focusing on the roles of hydrogen concentration, chemical short-range ordering (CSRO), crystallographic orientation, and loading rate. By extending the Rice-Thomson framework, it is demonstrated that hydrogen increases the energy barrier for dislocation emission, suppressing crack-tip plasticity. Compared to random solid solutions, CSRO-structured FeNiCr alloys exhibit a higher critical stress intensity factor for dislocation nucleation and promote hydrogen segregation near the crack tip to form a hydrogen atmosphere. At lower hydrogen concentrations, hydrogen facilitates dislocation glide, consistent with the hydrogen-enhanced localized plasticity (HELP) mechanism. At elevated concentrations, however, the hydrogen atmosphere strongly pins dislocations, leading to highly tortuous dislocation lines.

Keywords: hydrogen embrittlement, crack-tip plasticity, chemical short-range ordering, medium entropy alloy

DOI: [10.7498/aps.75.20251771](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251771)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251771](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251771)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12102145) and the Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. BK20210444).

These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: kai.zhao@jiangnan.edu.cn

FeNiCr中熵合金氢致裂纹扩展的原子尺度研究

卢晓庆 顾云军 赵凯

Atomic-scale study of hydrogen-assisted crack propagation in FeNiCr medium entropy alloy

LU Xiaoqing GU Yunjun ZHAO Kai

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 100804 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251771

CSTR: 32037.14.aps.75.20251771

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251771>

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

Ti-2.5Al-2Zr-1Fe在慢应变速率下的氢脆行为与机理研究

Study of hydrogen embrittlement behavior and mechanism of Ti-2.5Al-2Zr-1Fe by slow strain rate method

物理学报. 2024, 73(21): 216103 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240896>

(NiCoV)₉₅W₅中熵合金的动态力学性能与变形机理

Dynamic mechanical properties and deformation mechanism of (NiCoV)₉₅W₅ medium entropy alloy

物理学报. 2025, 74(8): 086103 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250141>

温度对CoCrFeMnNi高熵合金冲击响应和塑性变形机制影响的分子动力学研究

Molecular dynamics study of temperature effects on shock response and plastic deformation mechanism of CoCrFeMnNi high-entropy alloys

物理学报. 2022, 71(24): 246101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221621>

尺寸依赖的CoCrFeNiMn晶体/非晶双相高熵合金塑性变形机制的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of size dependent plastic deformation mechanism of CoCrFeNiMn crystalline/amorphous dual-phase high-entropy alloys

物理学报. 2022, 71(24): 243101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221368>

含硅高熵材料中的有序-无序相变

Order-disorder phase transition in silicon-containing high-entropy materials

物理学报. 2025, 74(16): 166402 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250307>

纳米晶CoNiCrFeMn高熵合金力学性能的原子尺度分析

Mechanical performance analysis of nanocrystalline CoNiCrFeMn high entropy alloy: atomic simulation method

物理学报. 2022, 71(19): 199601 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220733>