聚变条件下体心立方铁中含氢和氦的核壳结构空腔的应力驱动的动态演化

Jin Wang[a]、Fengping Luo[a]、Yiheng Chen[a]、Denghuang Chen[a]、Bowen Zhang[a]、Yuxin Liu[a]、Guangyu Wang[b]、Yunbiao Zhao[a]、Sheng Mao[b]、Mohan Chen[a, b]、Hong-Bo Zhou[c]、Jianming Xue[a]、Yugang Wang[a]和Chenxu Wang[a, *]

[a]北京大学核物理与技术国家重点实验室、应用物理与技术研究中心，中国北京，邮编*100871*

[b]北京大学力学与工程科学学院，中国北京*100871*[c]北京航空航天大学物理系，中国北京*100191** 通讯作者。电子邮箱：*cxwang@pku.edu.cn*（Chenxu Wang）。

摘要

理解聚变条件下形成的微观结构的动态行为，对于设计聚变反应堆用高性能结构材料至关重要。在聚变条件下，由于辐照诱导空位与经嬗变产生的氢原子和氦原子之间的相互作用，形成了核壳结构空腔。本研究将热力学分析与分子动力学模拟相结合，以探究在外加应力／应变场下体心立方铁中形成的核壳空腔的原子尺度机制与动态响应。热力学分析既为聚变中子辐照下的空腔结构提供了基础参考，也为原子模拟提供了初始构型。在此框架基础上，原子尺度模拟表明，氢和氦对空腔内的应力-应变响应及弹塑性变形演化起着决定性作用。在核壳构型中，氢原子发挥着与氦填充空腔中类似的功能，并协同地与

氦，从而在机械加载下诱导空洞变形。

关键词： 核壳结构；动态拉伸；氢氦协同作用；热力学理论；分子动力学模拟

聚变能是一项前沿技术，有望应对全球能源和气候挑战，因此成为未来可持续能源的主要候选方案。然而，聚变能的实现很大程度上取决于能否开发出可承受聚变反应堆内部极端条件的结构材料 [1]。与裂变中子不同，氘氚聚变中子不仅会造成严重的位移损伤，还会通过核嬗变产生大量氢（H）和氦（He） [2–5]。这些气体的协同作用会形成独特的微观结构缺陷，显著降低材料的宏观性能 [2]。在缺乏高通量聚变中子源的情况下，多离子束辐照技术 [6–13] 以及计算建模方法 [14–21] 是探索聚变条件下位移缺陷和嬗变气体影响及其机制的重要工具。

位移损伤与氦生成的协同效应已被发现会促进不同温度下的空洞肿胀 [6,8,9,22]，，导致机械性能退化，例如辐照硬化和氦致晶界脆化 [23–27]。作为典型的辐照诱导微观结构，氦气泡因其动态特性，在决定材料整体力学响应方面发挥着关键作用 [28]。近年来，大量研究利用原位 透射电子显微镜（TEM）研究辐照条件下氦气泡的演化 [11,29,30]以及机械加载下的演化[28,31–33]，，从而建立了其行为与宏观力学性能之间的直接关联。在原子尺度上，分子动力学（MD）模拟为这些微观结构过程提供了互补的机理见解，进而阐明了实验观察到的现象背后的物理起源。例如，一些 MD 研究模拟了持续

向金属样品中引入氦，形成过压气泡，其生长和演化通过 位错环冲出机制发生，并伴随着位错环的发射 [34–38]。类似地，其他模拟表明，受到外部应力作用的低压氦气泡可通过位错主导的屈服行为生长 [39–42]。

此外，多束离子辐照实验表明，与氦注入相比，氢/氦共注入会导致更显著的空洞肿胀[10,12]，，这说明氢在辐照诱导的微观结构演化中发挥着重要且不可忽视的作用。然而，在聚变条件下，辐照诱导的空位缺陷与嬗变气体（氢和氦）相互作用所引起的空洞演化行为仍未得到充分理解。尤其是，在应力/应变场作用下，氢在含氦空洞中的作用仍不明确，部分原因在于长期以来难以为铁–氢–氦体系开发准确且高效的原子间势。我们近期的研究 [19]采用新开发的铁–氢–氦原子间势和热力学分析，揭示了不同环境下形成具有核壳结构空洞的潜在物理机制（氦被限制在空洞中心，而氢则聚集在表面）。基于这一认识，进一步研究应力/应变场（辐照诱导或外加载荷）作用下同时含有氢原子和氦原子的空洞的动态响应与演化机制，对于设计具有理想抗辐照性能的铁基结构材料至关重要。

本研究首先采用热力学分析，确定氢原子在不同空腔构型中最可能的占据情况。这些结果用于指导后续分子动力学模拟中建立具有物理代表性的初始结构。在构建含有适当数量氢原子和氦原子的核壳空腔模型后，于分子动力学框架内施加三轴拉伸载荷，以引入静水应变场。该加载方法常用于研究合金中预先存在空腔的动态演化 [39,43,44]，以及块体材料中的空洞形核与生长 [45]。原子间相互作用

采用Huang等人开发的嵌入原子法（EAM）势进行描述 [17],该势在模拟氢原子和氦原子与体心立方铁中空位及自间隙原子团簇相互作用的能量特性方面，已证明兼具计算效率与准确性 [17–19]。所有模拟均使用LAMMPS（大规模原子/分子并行模拟器）完成 [46]，，可视化与缺陷分析在OVITO中进行 [47]。更多模拟细节见补充材料。

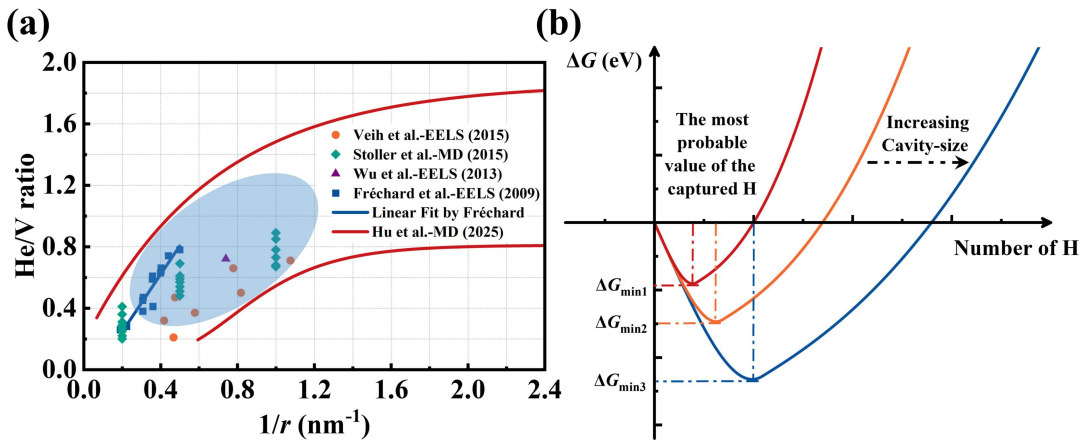


图 1。（a）辐照条件下钢中形成的氦气泡的 He/V 比率实验数据和计算数据 [48–52]。本研究主要关注与蓝色几何图形所示实验数据相对应的空腔尺寸。（b）示意图：通过计算系统（Δ*G*）在额外加入 H 后吉布斯自由能的变化，确定不同空腔（尺寸和 He/V 比率各异）中氢原子的最可能数量

atoms are trapped.

图 1 (a) 汇总了多项辐照实验和分子动力学模拟中形成的钢内稳定氦气泡的氦含量或 He/V 比率数据 [48–52]。由于辐照温度和氦注入速率存在差异，报告的 He/V 比率并非唯一值，而是在给定条件下处于特定范围内。分子动力学计算还提供了 He/V 比率随空腔尺寸变化的边界条件 [52]。超过这一临界比率会激活位错环冲出机制，导致空洞的尺寸和结构均不稳定。因此，整合这些来源的数据 [48–52]

可以确定特定半径（r）空洞的可靠 He/V 比率范围。图中以蓝色几何图形表示的实验数据所对应的空腔尺寸是主要考察范围，如 图 1 (a)所示。为涵盖不同辐照条件下预期的空腔结构范围，本研究考察了三种具有代表性的空洞半径及其对应的 He/V 比率范围：0.86 纳米 (He/V = 0。64 ~ 1.57)、1.43 纳米 (He/V = 0。28 ~ 1.26) 和 2.86 纳米 (He/V =0.2 ~ 0.82)。为进行详细分析，针对每种空腔尺寸，从相应范围内选取了特定的 He/V 比率：0.8、1.2、1.5 (r = 0.86纳米)、0.5、0.8、1.2(r = 1.43纳米)、0.2、0.5、0.8 (r = 2.86 纳米)。

初始系统中的空洞结构（He/V 比率和尺寸）确定后，空洞俘获第i个 H 原子过程中吉布斯自由能的变化（ΔG）可表示为：

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \tag{1}$$

其中，ΔH、ΔS和T 分别表示俘获过程中的焓变、熵变和热力学温度。

基于前述合理定义，[16,19,53]，系统内的焓变表示为：

$$\Delta H = -\sum_{z=2}^{m} E_{\mathrm{b}}^{\mathrm{v}}(0,0,z) - \sum_{y=1}^{n} E_{\mathrm{b}}^{\mathrm{He}}(0,y,m) - \sum_{x=1}^{i} E_{\mathrm{b}}^{\mathrm{H}}(x,n,m) \tag{2}$$

方程中的$_{\mathrm{b}}^{\mathrm{v}}$、$_{\mathrm{b}}^{\mathrm{He}}$和$_{\mathrm{b}}^{\mathrm{H}}$ 分别表示空位、He 原子和 H 原子与空洞的结合能。这里，m、n和i 分别表示形成的稳定空腔（$\mathrm{H}_i\mathrm{He}_n\mathrm{V}_m$）中的空位、He 原子和氢原子的数量。

因此，系统内的熵变可近似表示如下 [19]：

$$\Delta S = -(m-1)k_{\mathrm{B}}\ln\frac{C_{\mathrm{V}}}{1-C_{\mathrm{V}}} - nk_{\mathrm{B}}\ln\frac{C_{\mathrm{He}}}{1-C_{\mathrm{He}}} - ik_{\mathrm{B}}\ln\frac{C_{\mathrm{H}}}{1-C_{\mathrm{H}}} \tag{3}$$

其中，C_{V}、C_{He}和C_{H} 分别表示系统基体中的浓度，k_{B} 表示玻尔兹曼常数。

因此，方程（1）可合理地定义为：

$$\Delta G(i,n,m) = -\left\{\sum_{z=2}^{m} E_{\mathrm{b}}^{\mathrm{v}}(0,0,z) + \sum_{y=1}^{n} E_{\mathrm{b}}^{\mathrm{He}}(0,y,m) + \sum_{x=1}^{i} E_{\mathrm{b}}^{\mathrm{H}}(x,n,m)\right\} - \{(m-1)k_{\mathrm{B}}T\ln\frac{C_{\mathrm{V}}}{1-C_{\mathrm{V}}} + nk_{\mathrm{B}}T\ln\frac{C_{\mathrm{He}}}{1-C_{\mathrm{He}}} + ik_{\mathrm{B}}T\ln\frac{C_{\mathrm{H}}}{1-C_{\mathrm{H}}}\} \tag{4}$$

对于空位浓度固定为（C_V）、氦浓度固定为（C_{He}）的稳定空腔，在给定的辐照温度以及基体中的氢浓度（C_H）条件下，以下热力学判据可确定其捕获氢的能力：若捕获第（i+1）个氢原子后系统自由能的变化始终低于捕获第i个原子后的变化，即 ΔG （i+1, n, m）−ΔG （i, n, m）<0，则该空洞能够自发捕获更多氢。

因此，通过确定最小系统自由能（ΔG_{min}），即可得出特定辐照条件和空腔几何结构下，含氦空腔所捕获氢原子数量的最可能值，如图 1 (b)所示。此外，氢原子被空洞捕获后，在不同空腔尺寸和 He/V 比率下形成的氢/空位比详情见表1。值得注意的是，所选辐照温度 723 K 对应于钢中观察到的峰值肿胀温度 [10,12]，而基体中 1000 原子百万分比的氢浓度代表了高辐照剂量下的预期水平 [2,8]。

表1

在特定辐照条件下，氢（H）原子被捕获在不同结构（不同尺寸和 He/V 比率）的空腔内时，所形成的稳定氢/空位比的热力学分析。

空腔结构	He/V比	辐照条件	氢/空位比
r = 0.86 纳米	0.80	**温度** **723 K** **氢浓度** **1000 原子百万分比**	0.75
	1.20		0.70
	1.50		0.67
r = 1.43 纳米	0.50		0.48
	0.80		0.46
	1.20		0.43
r = 2.86 纳米	0.20		0.26
	0.50		0.25
	0.80		0.23

根据热力学结果，构建了一个核壳结构空腔 [10,19]，其中含有数量符合物理实际的氦原子和氢原子，用于模拟在特定辐照条件下形成的空腔。随后，对整个系统施加三轴拉伸加载，以引入静水应变场，如图

2 (a)。所选应变率 1×10^{6} s^{-1} 便于在较长的模拟时间尺度内观察空腔演化，同时提供与高应变率变形相关的原子尺度洞见 [45]。作为比较，还研究了尺寸相应的纯空洞（He/V = 0）。

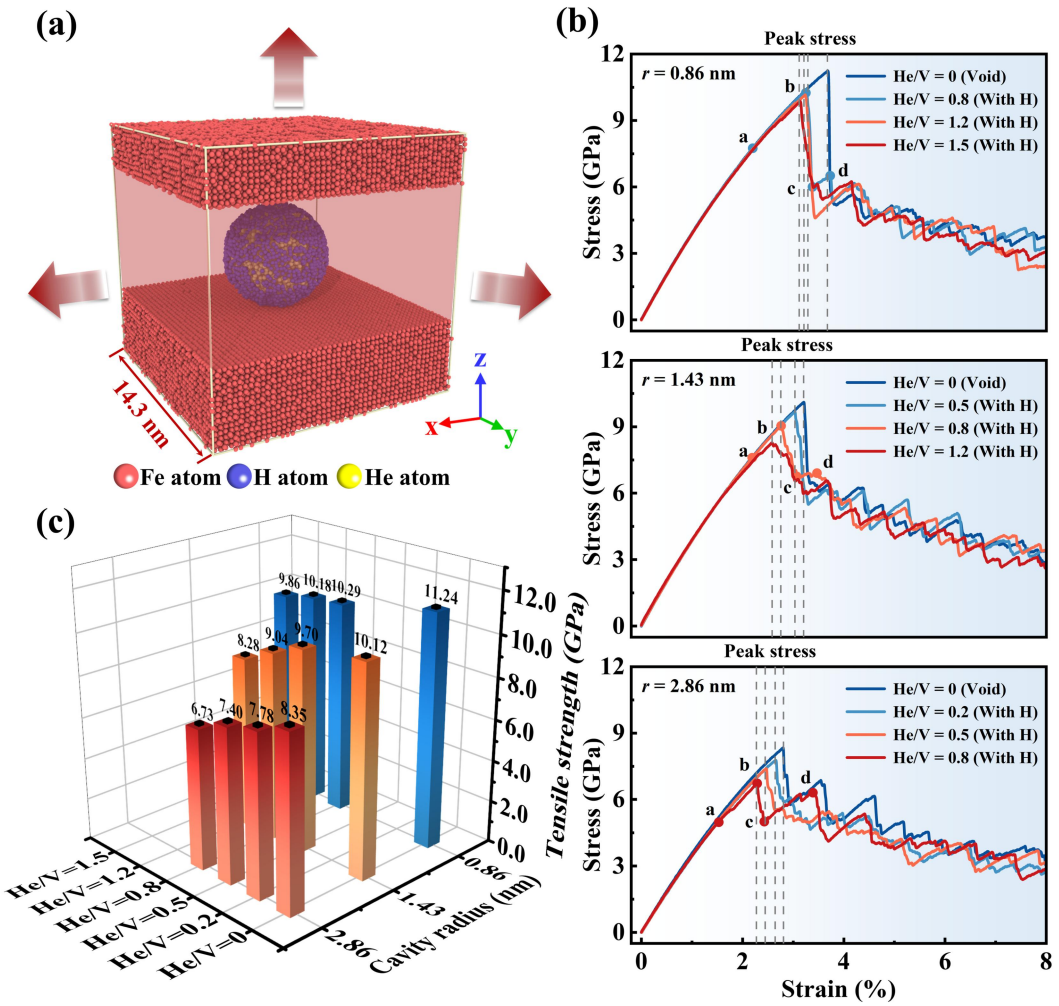


图2。（a）含有氢和氦的体心立方铁中，三轴拉伸加载诱导的静水应变场示意图。（b）含有不同结构空腔的体心立方铁中应力-应变曲线在 1×10^{6} s^{-1} 和 723 K下的演化。（c）这些空腔的抗拉强度响应（对应于 （b）中的峰值应力）。

如图2（b）所示，应力-应变响应表明，与纯空洞相比，氢/氦填充空腔显著改变了所有变形阶段，这一趋势在所研究的所有空腔尺寸中均保持一致。对于所有尺寸，初始弹性阶段似乎不受核壳空腔结构的影响，应力呈线性增加，直至达到峰值。然而，峰值应力（抗拉强度）

受到空腔内共存的氢和氦原子的显著影响。对于每种空腔尺寸，抗拉强度均随He/V 比率的增加而系统性降低，如图2（c）中定量所示。此外，这些空腔显著降低了块体材料达到峰值应力所需的临界应变，并且随着空腔内 He/V 比率的增加，这种影响更加显著。达到峰值应力后，块体发生塑性变形，应力-应变曲线的演变表明，塑性行为受到空腔内氢和氦共存的显著影响。

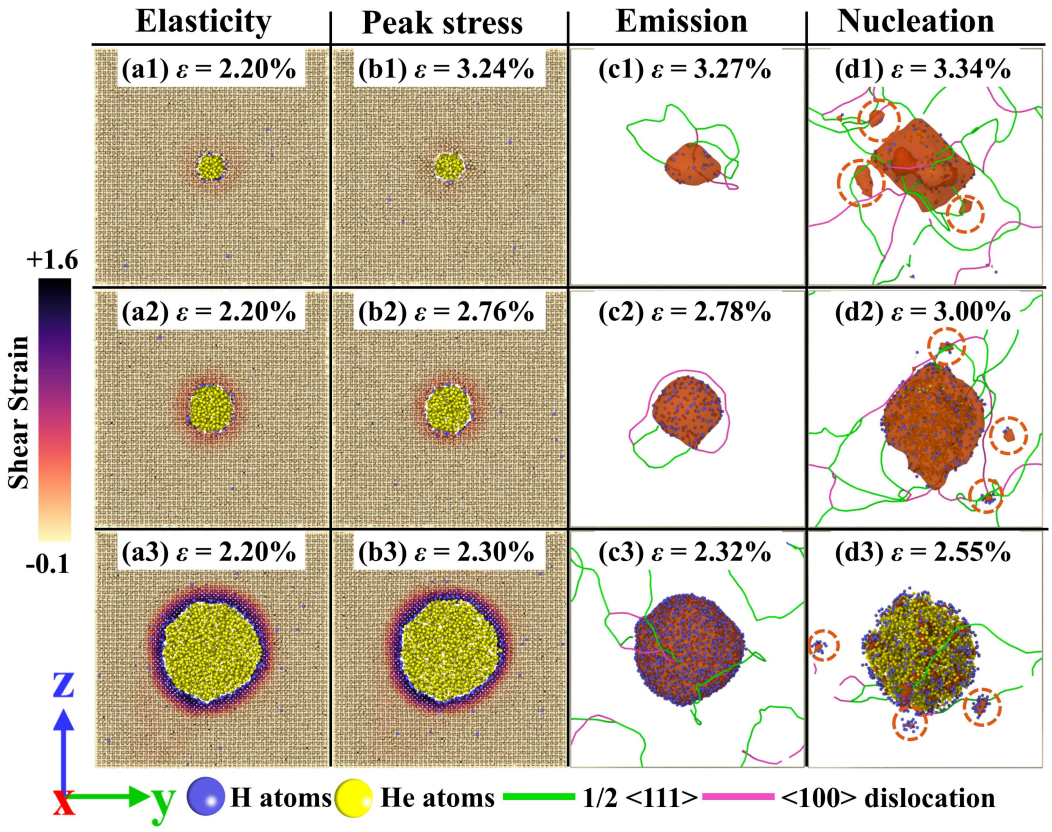


图3。原子分布（以剪切应变突出显示）和缺陷构型

在静水应变（=0）场下，He/Vε比值为 .8 时，各尺寸对应的示意图（CSM算法将空腔表面标记为橙色）。三种尺寸的截面图对应于应力-应变曲线（见图2 (b)）上由点 (a)、(b)、(c) 和 (d) 标示的变形响应阶段。在BCC中成核的空腔

-Fe during the plastic def 构型 i阶段以橙 ked with 橙色空 ircles.

为阐明其内在机制，图3展示了原子分布以及

应力-应变曲线演化不同阶段的缺陷结构构型。这些阶段代表了不同结构空腔在静水应变场作用下变形过程的特征阶段，即弹性变形、峰值应力、塑性变形和空腔形核。对于所有空腔尺寸，应力-应变曲线的弹性阶段似乎不受 H 和 He 存在的影响，但两种气体的协同作用显著增强了空腔周围的应变场。随着空腔尺寸增大，这种效应愈发明显（如 He/V=0.8 时所示），见图2(b)和图3。这一观察结果与我们近期的发现一致： [19] 滞留在卸载空腔中的 H 和 He 同样会改变局部应变场及其与其他缺陷的相互作用。

施加应力达到峰值应力后，样品经历了弹塑性变形转变。随后观察到，这些空腔可作为位错源；如图3 (c1-c3)所示，位错从空腔表面持续发射，促进了塑性变形的发生。各构型的位错密度、空腔体积和空腔数量的定量数据，以及相应的原子分布和缺陷分析，详见补充材料。结合图2 (b)所示的应力-应变响应可以发现，He/V 比率较高且尺寸较大的样品更容易激活位错发射。这是因为空腔核心处的氦原子产生了内部压力，使空腔内表面持续承受向外的拉应力[31,40–42]。此外，较大的空腔会形成更强的应力集中区域，从而有助于含有氢原子和氦原子的空腔诱发塑性变形。随着位错不断从空腔表面发射，当块体中的位错密度达到一定值时，位错塞积可能成为微孔洞的潜在形核位置 [54,55], ，进一步影响含空腔样品的宏观力学响应。

为阐明 H 在具有核-壳结构的空腔中的作用及其机制 1

结构，进一步研究采用了尺寸更大的空腔（r = 2.86 纳米），并比较了同时含有 H 和 He 的空腔与仅含有 He 原子的空腔在应力-应变曲线响应和缺陷演化方面的差异，如图4所示。与纯氦气泡相比，空腔中 H 的存在会进一步影响应力-应变演化，如图4 (a)所示。此外，图4 (b) 通过展示 H/He 和仅含 He 的空腔相对于尺寸相同的纯空洞的抗拉强度变化，量化了这种影响（Δ*TS*）。数据清楚表明，空腔壳层中的氢原子会显著降低抗拉强度。对于给定的 He/V 比率，H 的影响不仅表现为块体达到峰值应力所需的应变降低，还表现为每种 He/V 比率对应的抗拉强度显著下降。

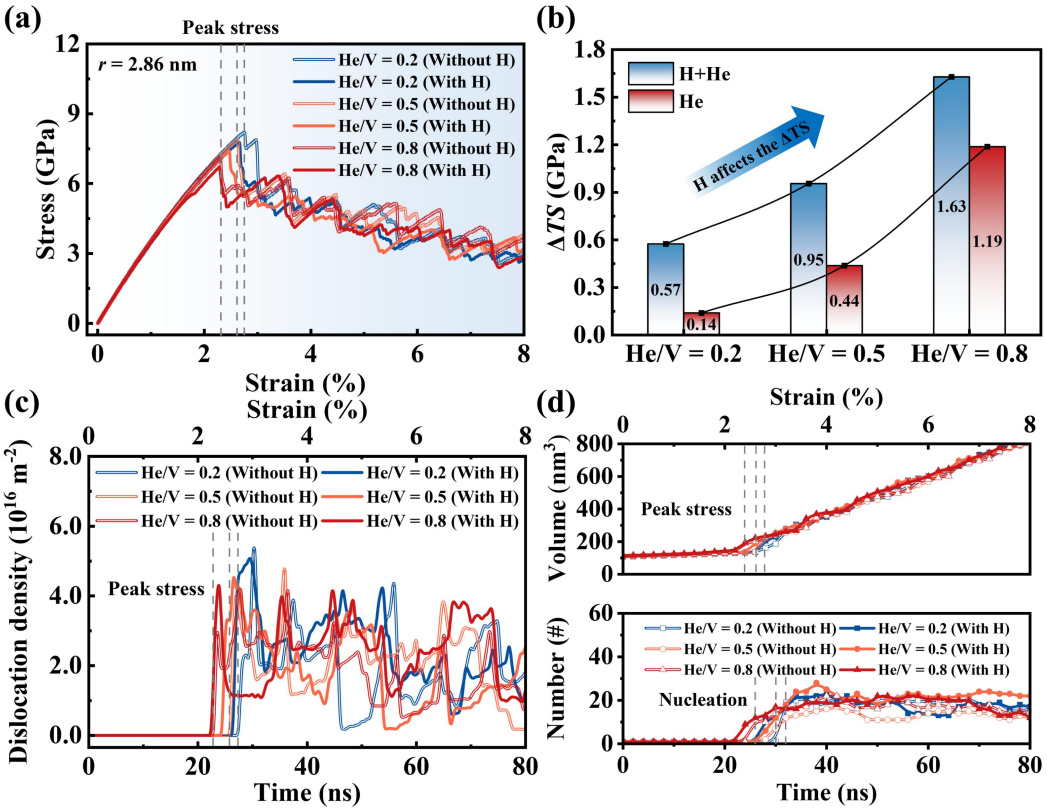


图4. (a) 半径为**r** .86 纳米的空腔中同时含有 H 和 He 原子时的应力-应变曲线响应，与仅含氦原子的空腔进行比较；(b) 比较不同结构空腔的抗拉强度变化值（Δ*TS*）与相应尺寸纯空洞的抗拉强度变化值。上述空腔（含氢或不含氢）的位错密度演变 (c)，以及体积和形核数 (d)。

此外，在达到峰值应力之前，弹性变形阶段空腔周围的应变场也会因空腔内的 H 而增强，如图5 (a1-a4)所示。与氦原子（被困在核心内）的行为不同，空洞缺陷引起的应变场主要受被空腔困在表面的 H 原子影响。如图4 (c) 和图5 (c1-c4)所示，在塑性损伤阶段，含有 H 和 He 原子的空腔以及仅含 He 原子的空腔都会发射位错，促进最初形成的空腔生长。考虑到 He 的存在，H 原子在导致空腔塑性损伤方面的主导作用似乎并未改变，反而进一步降低了空腔发射位错所需的应变阈值。空腔表面上存在 H（或者说 He_nV_m 复合体）时，其在应力/应变场作用下促进空腔发射位错的机制，与 H 在裂纹尖端和晶界等其他缺陷处发挥作用的机制类似 [56–59]。这种行为符合氢增强局部塑性（HELP）机制，该机制中氢-缺陷相互作用会促进变形。 [60–62]。后续研究将对这一机制进行详细分析。

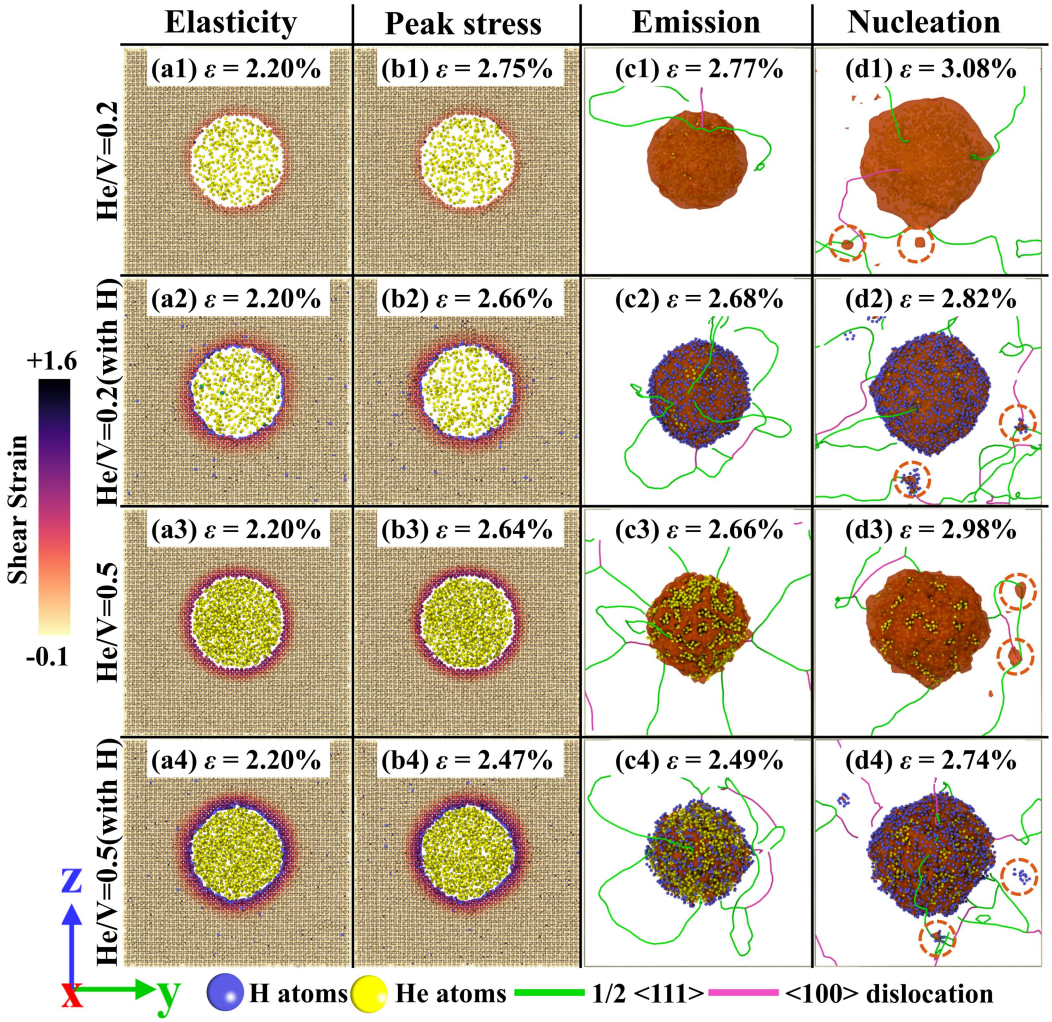


图5。半径为 2.86 纳米、He/V 比分别为 0.2 和 0.5（含氢或不含氢）的空洞在静水应变（ε）场下的原子分布（以剪切应变突出显示）和缺陷构型图（通过 CSM算法将空腔表面标记为橙色）。两种 He/V 比的截面图对应于应力-应变曲线（见图4 (a)）上 (a)、(b)、(c) 和 (d) 点所示的变形响应阶段。塑性变形阶段在体心立方铁中形核的空洞以橙色圆圈标记

随着空腔表面持续发射位错，基体中新形核的空腔数量起初增加，随后最终趋于稳定，如图4 (d) 和图5 (d1-d4)所示。在施加应力作用下，在所研究的所有 He/V 比率中，H 的存在始终促进基体材料中的空腔形核，并降低相应的应变阈值。由于 He 原子与空腔之间的结合能很高（~2.0 eV），[14,63], He 原子会稳定地留

即使在当前条件下，它们仍被困在空腔核心内。相反，由于氢与空腔之间的结合能较低 [14,64,65], ，一部分被困在表面上的氢原子会脱附进入块体。这一过程促使这些可移动的氢原子在局部应力场 [45]作用下促进额外空位的形成。随后，体相空腔的总数同时受到两种机制的调控：H增强的应变诱导空位 [45,58]以及H影响的空腔生长与合并 [66,67]。因此，在塑性损伤阶段，样品内形核空洞（空腔）的数量也会受到从空腔表面脱附的氢原子的影响。

总之，具有核壳结构的空腔显著改变了三轴/静水拉伸载荷下的动态响应。在弹性变形过程中，氢原子和氦原子显著增强了空腔周围的应力场。在弹塑性转变阶段，氢和氦有效降低了块体材料的抗拉强度。在随后的塑性阶段，这些空腔主要通过位错发射促进空腔生长，并同时促进基体内新空腔的形核。在该结构中，氢和氦表现出协同损伤效应，其中氢所起的作用在机制上与氦类似。具有核壳结构的空腔的变形主要由He产生的内压驱动，而偏析在空腔表面的氢会改变界面能和结构，从而加速变形。在不同尺寸和He/V比下，氢在同时含有氢原子和氦原子的空腔中的作用被观察到与HELP主导机制相一致。此外，后续研究将重点考察在温度、应变率和H/He注入速率等不同条件下，含氢原子和氦原子的空腔的力学响应与缺陷演化。

利益冲突声明

作者声明，他们不存在可能被认为会影响本文所报告工作的已知竞争性经济利益或个人关系。

致谢

本研究获得国家磁约束聚变能源研发计划（项目编号：2022YFE03110000）、国家自然科学基金委员会（项目编号：12192280、12422514、12275009 和 11935004）以及国家重点研发计划（项目编号：2025YFB3003603）的资助。作者衷心感谢生命科学联合中心（北京大学）高性能计算平台提供的计算资源与支持。

参考文献

[1] D. Cohen-Tanugi, M.G. Stapelberg, M.P. Short, S.E. Ferry, D.G. Whyte, Z.S. Hartwig, T. Buonassisi，聚变能源材料的长期研究与设计策略，Matter 7 (2024) 4148–4160。[2] J. Knaster, A. Moeslang, T. Muroga，聚变材料研究，Nat. Phys. 12 (2016) 424–434。[3] S.J. Zinkle, L.L. Snead，面向聚变能的材料抗辐照设计，Annu. Rev. Mater. Res. 44 (2014) 241–267。[4] S.J. Zinkle, G.S. Was，核能领域的材料挑战，《材料学报》61 (2013) 735–758。[5] S.J. Zinkle, J.T. Busby，裂变与聚变能源的结构材料，Mater. Today 12 (2009) 12–19。[6] E. Wakai, K. Kikuchi, S. Yamamoto, T. Aruga, M. Ando, H. Tanigawa, T. Taguchi, T. Sawai, K.Oka, S. Ohnuki，三束/双束离子辐照F82H钢的肿胀行为，《核材料杂志》318 (2003) 267–273。[7] B. Kaiser, C. Dethloff, E. Gaganidze, D. Brimbal, M. Payet, P. Trocellier, L. Beck, J. Aktaa，双束氦+/铁3+ 离子辐照EUROFER97中气泡形成的透射电子显微镜研究与建模，《核材料杂志》484 (2017) 59–67。[8] N. Zimber, P. Vladimirov, M. Klimenkov, U. Jäntsch, R. Vila, V. Chakin, F. Mota，三种潜在聚变候选钢在离子辐照下的微观结构演变，《核材料杂志》535 (2020) 152160。[9] Y.R. Lin, A. Bhattacharya, S.J. Zinkle，氦对双离子辐照铁和Fe-10Cr铁素体合金空洞肿胀的影响，《核材料杂志》569 (2022) 153907。

[10] L.N. Clowers, Z. Jiao, G.S. Was，候选聚变包层材料双离子和三离子辐照中氢、氦与辐照损伤之间的协同作用，《核材料杂志》565 (2022) 153722。[11] Z. Cao, C. Li, Y. Ding, D. Cui, Q. Zhong, G. Ran，铁+-氦+-氢2+同步原位辐照下纯铁的缺陷演化：氢与氦剂量比的影响，Materialia 38 (2024) 102227。[12] L.N. Clowers, G.S. Was，氢共注入对三离子辐照F82H钢微观结构的影响，《核材料杂志》601 (2024) 155331。[13] C. Wang, Y. Chen, Y. Gao, C. Xu, D. Fu, X. Yang, X. Xu, Y. Qian, B. Zhang, L. Xia, X. Ma, H. Liu, E. Fu, J. Xue, Y. Wang，北京大学先进核材料研究三束辐照设施，《核仪器与方法物理研究B辑：束流与材料原子相互作用》568 (2025) 165870。[14] E. Hayward, C. Deo，氢氦气泡中的协同效应，《凝聚态物理杂志》24 (2012) 265402。[15] F. Luo, J. Huang, Q. Liu, Z. Gao, W. Ge, F. Gao, Y. Wang, C. Wang，基于第一性原理计算动态研究体心立方铁空位周围的氢氦相互作用，《核聚变》63 (2023) 046005。[16] F. Luo, B. Zhang, Z. Gao, J. Huang, H.B. Zhou, G.H. Lu, F. Gao, Y. Wang, C. Wang，基于亲电相互作用预测金属体系中氦与纳米空腔相互作用能量特性的定量方法，《材料学杂志》10 (2024) 725–737。[17] H.X. Huang, Y.H. Li, T.R. Yang, H.B. Zhou, J.L. Li, H.Z. Ma, Y.Z. Niu, X.C. Li, H. Deng, G.H. Lu，利用新型Fe-H-He三元势研究铁中氢和氦与辐照缺陷的协同演化，《核材料杂志》607 (2025) 155687。[18] F. Wu, Z. Liu, Y. Chen, X. Guo, J. Xue, Y. Li, H. Huang, H. Zhou, H. Deng，用于研究体心立方铁中氢和氦协同效应的基于深度学习的神经网络势，《Comput. Mater. Sci.》246 (2025) 113434。[19] J. Wang, F. Luo, T. Zheng, B. Zhang, Y. Liu, D. Chen, X. Xie, M. Chen, H.B. Zhou, F. Gao, J. Xue, Y. Wang, C. Wang，聚变环境下共存的氢和氦在体心立方铁空腔中的演化，《材料学报》299 (2025) 121477。[20] D. Brimbal, L. Fournier, A. Barbu，团簇动力学建模研究高剂量的影响

辐照和氦对奥氏体不锈钢微观结构的影响，《核材料杂志》468（2016年）124–139。[21] L. Li、Y. Hu、L. Peng、J. Shi、Y. Sun、X. Hu、C. Hu，采用新型耦合分子动力学-对象动力学蒙特卡罗方法研究与聚变条件相关的体心立方铁中级联作用下的氦气泡演化，《核材料杂志》591（2024年）154908。[22] T. Tanaka、K. Oka、S. Ohnuki、S. Yamashita、T. Suda、S. Watanabe、E. Wakai，多离子辐照铁铬铁素体合金时氦与氢对缺陷演化的协同效应，《核材料杂志》329–333（2004年）294–298。[23] E. Wakai、S. Jitsukawa、H. Tomita、K. Furuya、M. Sato、K. Oka、T. Tanaka、F. Takada、T. Yamamoto、Y. Kato、Y. Tayama、K. Shiba、S. Ohnuki，JMTR中250 °C辐照的F82H钢因氦生成导致的辐照硬化和脆化，《核材料杂志》343（2005年）285–296。[24] E. Wakai、S. Takaya、Y. Matsui、Y. Nagae、S. Kato、T. Suzudo、M. Yamaguchi、K. Aoto、S. Nogami、A. Hasegawa、H. Abe、K. Sato、T. Ishida、S. Makimura、P.G. Hurh、K. Ammigan、D.J. Senor、A.M. Casella、D.J. Edwards，不同辐照环境下结构材料的辐照损伤，《核材料杂志》543（2021）152503。[25] P. Zhu、Y.R. Lin、S. Agarwal、V. Pauly、S. Taller、S.J. Zinkle，快中子和双离子辐照铁素体/马氏体钢的硬化与微观结构比较，《核材料杂志》599（2024年）155211。[26] R.L. Klueh、M.A. Sokolov、K. Shiba、Y. Miwa、J.P. Robertson，在高通量同位素反应堆中经300°C和400°C辐照的低活化铁素体/马氏体钢的脆化，《核材料杂志》283–287（2000）478–482。[27] H. Trinkaus、B.N. Singh，辐照过程中金属中的氦积累——现状如何？《核材料杂志》323（2003）229–242。[28] M.S. Ding、L. Tian、W.Z. Han、J. Li、E. Ma、Z.W. Shan，氦辐照亚微米铜中的纳米气泡碎裂与无气泡通道剪切局部化，《物理评论快报》117（2016）215501。[29] Z. Zhu、W. Ji、H. Huang，原位透射电子显微镜研究H2+ 和He+ 双束离子辐照镍基合金中氦气泡和位错环的演化，《材料科学与技术》

138（2023年）36 –
49.[30] T. Sun, T. Niu, Z. Shang, W.Y. Chen, M. Li, H. Wang, X. Zhang，双束辐照FeCrAl合金中晶界对氦气泡形成影响的原位研究，《材料学报》245 (2023) 118613.[31] M.S. Ding, J.P. Du, L. Wan, S. Ogata, L. Tian, E. Ma, W.Z. Han, J. Li, Z.W. Shan，辐照诱导的氦纳米气泡提高亚微米尺寸单晶铜的延展性，《Nano Lett.》16 (2016年) 4118–4124.[32] J. Gao, H. Huang, J. Liu, J. Zeng, R. Xie, Y. Li，通过原位小角X射线散射揭示拉伸变形过程中氦气泡的聚并机制，《Scr. Mater.》158 (2019) 121–125.[33] C. Liu, X.X. Ye, H. Huang，热机械耦合条件下纳米孪晶对He气泡演化影响的原位透射电子显微镜研究，《Scr. Mater.》256 (2025年) 116431.[34] H. Xie, N. Gao, K. Xu, G.H. Lu, T. Yu, F. Yin，钨中氦气泡生长的新型位错环冲出机制，《材料学报》141 (2017年) 10–17.[35] K. Xu, S. Jin, Y.H. Li, H.B. Zhou, H. Xie, N. Gao, F. Gao, G.H. Lu，深入认识He气泡生长的位错环冲出机制：塑性变形模式及其竞争，《Comput. Mater. Sci.》216 (2023年) 111825.[36] A.K. Shargh, O. Bosić, N. Abdolrahim，辐照铜中氦纳米气泡生长和缺陷相互作用的机制：一项分子动力学研究，《核材料杂志》574 (2023年) 154199.[37] Y. Hu, L. Peng, J. Shi, L. Li, Y. Sun, S. Chen, Y. Wan，温度对体心立方铁中氦-空位团簇形成与生长的影响：一项全面的分子动力学模拟，《核材料杂志》597 (2024年)155130.[38] P. Hatton, D. Perez, B.P. Uberuaga，氢诱导的氦气泡生长导致钨中位错穿刺行为发生变化，《核材料杂志》605 (2025年) 155555.[39] T. Zhou, F. Zhao, H. Zhou, F. Zhang, P. Wang，含氦气泡块体单晶铝动态拉伸断裂与损伤演化的原子模拟和连续介质建模，国际机械科学杂志234 (2022年) 107681。

[40] D.D. Jiang, J.L. Shao, A.M. He, P. Wang，含氦气泡纳米晶铝的动态断裂特性，《Scr. Mater.》234 (2023年) 115546.[41] Q. Zhu, J.L. Shao, P. Wang，单轴压缩和拉伸条件下双晶铜中He气泡的动态响应，《核材料杂志》574 (2023年) 154200.[42] P. dong Lin, Y. Lin, H. guang Li, S. gang Cui, J. feng Nie, B. wen Zhong, Y. peng Lu，含氦气泡单晶钨拉伸行为的分子动力学与机器学习研究，《Materials & Design》252 (2025年) 113831.[43] W.D. Wu, J.L. Shao，铝中纳米氦气泡演化的原子尺度分析：考虑应力三轴度和洛德参数的影响，《Engineering Fracture Mechanics》310 (2024年) 110527.[44] T. Zhou, F. Zhao, A. He, P. Wang，高温和高应变速率下动态拉伸过程中辐照铝中局部熔化与氦气泡的相互作用，《Materials & Design》252 (2025年) 113741.[45] L. Feng, W. Tang, Z. Chen, X. Zhang, Y. W. Zhang, W. Li, M. Xiang, X. Yao，关于不同应变率下铁中氢增强的应变诱导空位的原子尺度认识，《Scr. Mater.》252 (2024年) 116246. α [46] A.P. Thompson, H.M. Aktulga, R. Berger, D.S. Bolintineanu, W.M. Brown, P.S. Crozier, P.J. in 't Veld, A. Kohlmeyer, S.G. Moore, T.D. Nguyen, R. Shan, M.J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, S.J. Plimpton, LAMMPS——一种灵活的粒子材料建模模拟工具，适用于原子、介观和连续尺度，《Computer Physics Communications》271 (2022年) 108171.[47] A. Stukowski，使用OVITO（开放可视化工具）对原子尺度模拟数据进行可视化和分析，《Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering》18 (2010)015012.[48] S. Fréchard, M. Walls, M. Kociak, J.P. Chevalier, J. Henry, D. Gorse，利用电子能量损失谱研究马氏体钢中的氦气泡，《核材料杂志》393 (2009) 102–107.[49] Y. Wu, G.R. Odette, T. Yamamoto, J. Ciston, P. Hosemann，纳米结构铁素体合金中氦气泡的电子能量损失谱研究，《聚变反应堆材料》半年度进展报告DOE/ER-0313/54，橡树岭国家实验室（2013）173–179.[50] R.E. Stoller, Y.N. Osetsky，铁中氦行为的原子尺度评估，《核材料杂志》

455 (2014) 258–262.[51] V. Krsjak, C. Vieh, Y. Dai, 《铁素体马氏体钢中氦气泡形成的微观结构特征》, AIP会议录 2182 (2019)050026.[52] Y. Hu, L. Peng, J. Shi, Y. Ma, Y. Xie, Z. Wei, Y. Sun, Y. Wan, 《STIP中辐照RAFM钢氦气泡的氦空位比：通过分子动力学模拟获得的新视角》, 《核材料杂志》616 (2025年) 156096.[53] J. Hou, X.S. Kong, J. Sun, Y.W. You, X. Wu, C.S. Liu, J. Song, 《自聚集导致的氢泡形核：以钨为模型体系的密度泛函理论和统计模型研究》, 《核聚变》58 (2018) 096021.[54] J. Wang, F. Wang, X. Wu, Z. Xu, X. Yang, 《冲击压缩下单晶钽塑性和损伤行为的取向诱导各向异性》, 真空 207 (2023年) 111679.[55] P. Yang, P. Zhao, 《多重位错塞积协同作用促进位错边界处的空洞形核》, 国际塑性学报 171 (2023年) 103779.[56] S. Taketomi, R. Matsumoto, N. Miyazaki, 《氢对α铁II型裂纹尖端位错发射影响的原子尺度研究》, 国际机械科学杂志 52 (2010) 334–338.[57] J. Song, W.A. Curtin, 《铁中氢脆的原子机制与预测》, 自然·材料 12 (2013) 145–151.[58] M. Nagumo, K. Takai, 《应变诱发空位在钢氢脆中起主导作用：综述》, 《材料学报》165 (2019) 722–733.[59] R. Wang, L. Cheng, C. Yin, W. Lou, K. Wu, 《氢和空位对纯铁中对称倾斜晶界拉伸变形行为的影响》, 《国际氢能杂志》48 (2023年) 30930–30948.[60] S. Li, Y. Li, Y.C. Lo, T. Neeraj, R. Srinivasan, X. Ding, J. Sun, L. Qi, P. Gumbsch, J. Li, 《位错与氢-空位复合体的相互作用及其对 α-铁中变形诱发原纳米空洞形成的重要性》, 国际塑性学报 74 (2015) 175–191.[61] M.L. Martin, M. Dadfarnia, A. Nagao, S. Wang, P. Sofronis, 《结构材料中氢脆的氢增强局部塑性机制综述》

材料，《材料学报》165（2019）734–750。

[62] M.S. Hasan, M.F. Kapci, B. Bal, M. Koyama, H. Bayat, W. Xu, 《氢脆中氢增强局部塑性（HELP）机制的纯铁原子尺度研究》, 《国际氢能杂志》57 (2024年) 60–68.[63] C.J. Ortiz, R. Vila, J.M. Pruneda, 《氦和氢在 α-铁中的第一性原理研究》, arXiv:1205.6374v2 [cond-mat.mtrl-sci].[64] E. Hayward, C. Deo, 《体心立方铁中小型氢-空位团簇的能量特性》, 《凝聚态物理杂志》23 (2011) 425402.[65] E. Hayward, C.C. Fu, 《氢与 α-铁中空位之间的相互作用》, 《物理评论B》87 (2013) 174103.[66] D.C. Ahn, P. Sofronis, R.H. Dodds, 《空洞生长与聚合过程中氢致塑性流动局部化》, 《国际氢能杂志》32 (2007) 3734–3742.[67] Y. Liang, D.C. Ahn, P. Sofronis, R.H. Dodds, D. Bammann, 《氢陷阱效应对金属与合金中空洞生长与聚合的影响》, 《材料力学》40 (2008) 115–132。