HERB：由 Rice-Beltz 概念驱动的氢脆机制评估统一框架

赵凯[1*]

1. 江南大学机械工程学院，无锡 214122，中国

摘要

氢脆（HE）机制的多尺度图景长期以来一直存在争议。笔者在此报告一个由 Rice-Beltz 概念驱动的热力学一致的 HERB 框架，同时纳入裂纹尖端附近的氢输运以及塑性区内的空洞生长。仅由裂纹尖端的位错发射触发，HERB 理论在单一框架内统一了多种氢脆机制，例如氢增强脱粘、氢增强局部塑性、纳米空洞聚合和氢增强应变诱发空位。具体而言，通过将 Rice-Beltz 模型与过渡态理论相结合，建立了用于预测氢影响的位错发射的广义模型。考虑到球形夹杂物陷阱能的动态变化，在裂纹尖端前方的无位错区中对氢输运进行了建模。通过将 Hutchinson-Rice-Rosengren 解与基于机制的应变梯度塑性经典理论相结合，获得了几何必需位错密度的半解析表达式。通过探索随机分析的可行性，本理论表明，氢影响的空洞动力学由介于 Lifshitz-Allen-Cahn 与 Lifshitz-Slyozov-Wagner 定律极限之间的位错密度所主导，尽管单个事件仍然不可预测。这些认识从根本上重塑了多个尺度上的氢/位错相互作用，包括核心宽度、短程和长程层次。

关键词：氢脆；朗之万方程；位错；HRR；MSG

1. 引言

氢是宇宙中最轻、含量最丰富的元素，能够渗入固态金属的基体，降低其断裂韧性、抗疲劳性和延展性，即。*e.* 所谓的氢脆（氢脆）[1-6]。目前，作为最成熟的储氢方式，高压气态氢（$HPGH_2$）储存具有充放气速度快等优点

* 通讯作者：kai.zhao@jiangnan.edu.cn (K. Z.)

、储氢设备结构简单、制备压缩氢的能耗低，且适用温度范围广 [7]。然而，在 $HPGH_2$储存和运输过程中，氢原子会渗透储氢容器壁并在裂纹尖端聚集，从而促进裂纹扩展，增加 $HPGH_2$储罐失效的风险 [8, 9]。因此，揭示氢增强失效过程的内在物理机制具有重要的理论和实践意义。

自 Johnson 在 19th 世纪观察到氢脆以来，[10], 人们提出了多种机制，例如氢增强脱粘（HEDE）[11-14]，、氢增强局部塑性（HELP） [15-18],、吸附诱导位错发射（AIDE） [19], 、纳米空洞聚合（NVC） [20, 21]，以及氢增强应力诱导空位（HESIV）[22] ，以阐释氢如何使金属发生脆化。在最常被援引的氢脆机制中，HEDE 指的是氢在晶界（GB）或其他界面偏聚，导致原子键强度降低，进而引发脱粘[23]。然而，值得注意的是，尽管近期在先进高强钢中观察到了亚晶界解理和穿晶断裂，但直接支持 HEDE 作用的实验依据仍然很少[24]。事实上，正如 Song 和 Curtin 所指出的[25], ，强行要求裂纹尖端的应力强度必须低于K_{Ie} 位错发射所需的数值，在物理上并不现实。相反，氢的主要作用是抑制裂纹尖端的位错发射，使解理成为唯一的能量耗散机制[24]。

自 Birnbaum [16], Sofronis [26], Robertson [27] 等人以来的开创性研究表明，以位错为主导的氢增强局部塑性已成为主流氢脆机制之一[28]。氢增强局部塑性模型的基本物理机制是：氢使位错运动更容易，从而促进滑移局域化，导致局部原子错配不断累积，并可能形成危险的应力集中[29]。然而，氢增强局部塑性机制是否导致氢脆，仍是一个悬而未决的问题[29], ，因为氢增强应力集中如何演变为灾难性失效，受弱链统计规律支配，因而极难预测和控制。在氢增强局部塑性机制的连续介质图像[16], 中，局部塑性（即：塑性应变ε_p）是确定性的。然而，先前研究 [30-32] 表明，小尺度塑性具有间歇性的应变率涨落和应变雪崩特征，且这些现象遵循稳定的幂律统计。因此，问题在于，氢增强局部塑性机制的连续介质概念是否适用于小尺度塑性。对此，我将从三个不同层次进行逐级探讨。

在位错芯宽度层面，Peierls-Nabarro（***PN***）模型[33-39] 及其改进模型[40-43]已被广泛用于描述位错周围的奇异场。尽管已有大量模拟

[44-47] 致力于描述氢环境下的位错核心结构，但***HELP***机制的连续介质模型尚未考虑氢对位错核心能的影响[48]。Yu等人开展的巨正则系综蒙特卡罗（GCMC）模拟*et al.* [45] 表明，氢会增大核心半径并降低核心能，从而降低位错线能。基于密度泛函理论，Li等人*et al.* [44] 揭示了氢致体心立方钨中螺型位错核心结构转变。具体而言，在低氢浓度下，位错保持其本征易芯结构，氢原子附着在位错的“外围”以增强位错运动；相反，在高氢浓度下，位错转变为硬芯的类金属氢化物结构，而氢原子则被嵌入位错的“主体”中，从而显著降低位错迁移率。Leyson等人*et al.* [49] 开发了一种多尺度方法，用于研究氢与刃型位错核心及其应变场的相互作用，并揭示了氢化物形成区间与非氢化物形成区间之间存在陡峭转变，该转变取决于与体系纳米氢化物形核核心相关的临界氢化学势μ_H^c 。最近，Zhang等人*et al.* [50] 提出了一种随机Peierls-Nabarro（***sPN***）模型，用于考虑高熵合金（HEA）面间势扰动的标准差，从而使位错宽度、Peierls应力和Peierls能呈现随机变化。鉴于高熵合金中的成分无序与位错芯宽度范围内氢原子的随机分布具有相似性，不禁要问：***sPN***模型是否可用于描述氢/位错相互作用?

在短程相互作用层面，即氢原子（及其衍生的氢-空位复合体）如何影响位错的形核 [51, 52], 与运动，以及两个相邻位错之间的相互作用，Sofronis 和 Birnbaum [26] 已对其进行了评估；事实上，这一机制在 HELP 机制的最初版本中就已提出，即氢致“弹性屏蔽”会降低两个位错之间的弹性力。纳米压痕实验 [52, 53], 证明，“缺陷活性剂”概念 [27, 54-57] 可用于理解氢效应：氢通过降低位错和层错的形成能，影响位错形核。Leyson 等人 [58] 开发了一个多尺度模型，用于描述氢存在时位错环均匀形核的起始过程，并准确预测了实验观测到的突跳力下降。尽管多数研究倾向于认为氢原子（或氢化空位）只会增强 [29, 59-61] 或阻碍 [62-64]位错运动，但近期的原位扫描电子显微镜实验 [65] 表明，在体心立方金属中，氢既能促使位错运动，也能使位错钉扎。Katzarov 等人的动力学蒙特卡罗模拟 [66] 也表明，稳态位错速度并不会随体相氢浓度单调变化，从而支持氢对位错迁移率具有双重作用 [67]。

在长程相互作用层面，即氢原子如何影响位错系综的集体行为（以及其他类型缺陷，如晶界、孪晶界 [68], 析出物 [69,70], 空位团簇 [21]），由于复杂多体系统具有不可预测性，其背后的机制仍不清楚。多数研究关注位错 [71], 晶界 [72, 73], 和析出物 [74-79], 的氢捕获能力，却很少探讨这些预存缺陷如何影响氢环境下的塑性演化 [80-83]。Koyama 等人 [84] 结合原位电子通道衬度成像实验、分子动力学（MD）和巨正则系综蒙特卡罗（GCMC）模拟，揭示了位错运动的驱动力来自晶界氢偏聚所造成的高应力集中。Li 等人 [21] 基于平均场速率理论 [85] 和分组数值方法 [86], 开发了团簇动力学模型，用于研究氢/空位体系的长期演化。然而，在他们的模型中，位错密度被设为常数。近期，Zhao等人 [87] 提出了一种平均场图景，用于解释纳米压痕过程中氢对位错集体行为的影响。尽管我们的模型能够正确捕捉塑性突进，但未能重现力-位移曲线的间歇性波动，这表明必须考虑位错反应动力学的随机性 [88]。

氢增强局部塑性机制的连续介质模型[27] 的一个主要缺点是，它们只能描述氢气氛对位错的影响，却未明确涉及断裂过程。为了将氢增强局部塑性机制与氢致断裂联系起来，人们提出了唯象模型，例如纳米空洞聚合[20, 21], 和氢增强应变诱发空位[22] 机制。因此，这些研究强烈表明，我们应将氢脆视为一种受氢调控的全局性（即跨越多个时空尺度）韧脆转变（DBT），而不是局限于氢参与的局部过程这一狭小领域。

韧脆转变 [89, 90] 是指材料断裂行为的变化：材料在低温下表现出脆性特征，而在高温下则变得更具延展性。尽管这一现象早在一个多世纪前 [90], 就已被发现，韧脆转变的根本机制仍存在争议，即这一转变究竟由位错形核 [91-93] 还是位错迁移率 [94-96]主导。Rice [92] 将 PN 概念纳入位错形核描述，指出在 II型（面内剪切）载荷下，位错发射受涉及不稳定层错能（USF）的能量判据 γ_{usf}控制。后续研究通过考虑弹性各向异性 [97], 、裂纹钝化的影响 [98, 99],、三维位错核 [93], 、连续形核事件 [100], 以及裂纹尖端[102]形成的表面台阶 [101]，进一步发展了 Rice 框架和 Rice-Thomson模型。在先前的研究中 [103, 104], , 我们探讨了在存在

氢环境下，微观结构缺陷（例如晶界）对 Peierls-Rice-Beltz（PRB）框架内位错发射合理化的可行性。然而，正如先前研究[89, 105], 所指出的，要完整描述氢相关韧脆转变过程，还需要了解位错迁移率；本研究将通过氢增强局部塑性机制对此加以考虑。

按照传统对韧脆转变的理解，在本征脆性材料中，解理先于任何位错发射发生；而在本征韧性材料中，位错发射则会阻止解理[105]。然而，先前的实验[106-110] 表明，尖锐解理裂纹发出的位错并不一定能保证解理固体呈现韧性行为。因此，准解理过程作为解理与位错发射这两种极端机制之间的中间失效机制而出现。Martin等 [111, 112] 通过强滑移带交汇处及其沿线形核的空洞的生长与扩展，阐明了氢脆钢中的准解理现象。此外，Neeraj等 [20] 提出了另一种用于即。例如，纳米空洞形核、生长与聚合（NVC）微观机制来解释氢脆。因此，本研究将评估纳米裂纹萌生与空洞动力学，以建立氢增强局部塑性机制与断裂过程之间的联系。

从 PRB theory [93], 出发，我尝试构建一个理论框架（命名为 HERB），通过同时纳入多种氢脆机制，包括 HEDE、HELP、NVC 和 HESIV，分层描述裂纹尖端的位错发射、氢输运（扩散和捕获）、空位聚合及空洞形核。研究表明，跨越多个时空尺度的随机性使单个空洞生长事件难以预测，而大量事件的统计趋势在物理上是明确的。

2. 理论框架

本节介绍 HERB 框架的主要内容。首先，在第 2.1 节中，通过引入应变能密度最小化来重新归一化局部的 K_I^* 和 K_{II}^* 场，并基于经典的 Rice–Beltz 理论推导混合 I 型+II 型载荷下从裂纹尖端发射位错的过程。随后，在第 2.2 节中，考虑氢陷阱的捕获能力随外加载荷动态变化，分析裂纹尖端附近弹性核内的氢输运。最后，在第 2.3 节中建立塑性区内空洞生长的随机动力学，并将 Hutchinson-Rice-Rosengren（HRR）解引入基于机制的应变梯度（MSG）塑性理论，以推导位错密度的分布。

2.1 第一阶段I：裂纹尖端的位错发射

基于考虑位错屏蔽效应的 Rice-Thomson模型 [91]，评估图1所示构型中氢环境下裂纹尖端附近作用于位错的总作用力，

$$f = f_K + f_{d^2} + f_{dd'} + f_{gbe} + f_H \,, \tag{2.1.1}$$

其中，第一项 f_K 源于钝裂纹尖端的应力场。对于平面问题的线弹性分析，Muskhelishvili [113]，首先建立了成熟的传统方法，随后 Irwin [114] 对其进行了扩展，通过考虑级数展开的首项，得到了尖锐裂纹附近应力场的众所周知的方程。Creager 和 Paris [115] 进一步推导了钝裂纹的解，

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} = {} & \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}}\left(\cos\frac{\theta}{2} - \frac{1}{2}\sin\theta\sin\frac{3\theta}{2} - \frac{\rho}{2r}\cos\frac{3\theta}{2}\right) \\ & + \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}}\left(-2\sin\frac{\theta}{2} - \frac{1}{2}\sin\theta\cos\frac{3\theta}{2} + \frac{\rho}{2r}\sin\frac{3\theta}{2}\right),\end{aligned} \tag{2.1.2}$$

$$\begin{aligned}\sigma_{yy} = {} & \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}}\left(\cos\frac{\theta}{2} + \frac{1}{2}\sin\theta\sin\frac{3\theta}{2} + \frac{\rho}{2r}\cos\frac{3\theta}{2}\right) \\ & + \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}}\left(\frac{1}{2}\sin\theta\cos\frac{3\theta}{2} - \frac{\rho}{2r}\sin\frac{3\theta}{2}\right),\end{aligned} \tag{2.1.3}$$

$$\begin{aligned}\tau_{xy} = {} & \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}}\left(\frac{1}{2}\sin\theta\cos\frac{3\theta}{2} - \frac{\rho}{2r}\sin\frac{3\theta}{2}\right) \\ & + \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}}\left(\cos\frac{\theta}{2} - \frac{1}{2}\sin\theta\sin\frac{3\theta}{2} - \frac{\rho}{2r}\cos\frac{3\theta}{2}\right),\end{aligned} \tag{2.1.4}$$

其中，K_I 和 K_{II} 是广义 I 型和 II 型应力强度因子（SIF），假设将钝缺口替换为尖锐裂纹，并将裂纹尖端平移至曲率中心 C [116]，（r，θ）定义为图1中的极坐标 $\mathrm{x}_1O'y_1$。随后将 f_K 求得为 $b\tau_{r\theta}$，其中 b 为伯格斯矢量，极坐标系中的剪切分量 $\tau_{r\theta}$ 通过坐标变换计算如下：

$$\begin{aligned}\tau_{r\theta} &= \cos\theta\sin\theta\left(\sigma_{yy} - \sigma_{xx}\right) + \left(\cos^2\theta - \sin^2\theta\right)\tau_{xy} \\ &= \frac{K_I}{2\sqrt{2\pi r}}\sin\frac{\theta}{2}\left(1 + \cos\theta + \frac{\rho}{r}\right) + \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}}\left(\cos\frac{3\theta}{2} + \frac{1}{2}\sin\theta\sin\frac{\theta}{2} - \frac{\rho}{2r}\cos\frac{\theta}{2}\right). \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2\pi r}}\left[K_I\sin\frac{\theta}{2}\left(1 + \cos\theta + \frac{\rho}{r}\right) + K_{II}\cos\frac{\theta}{2}\left(-1 + 3\cos\theta - \frac{\rho}{r}\right)\right]\end{aligned} \tag{2.1.5}$$

式（2.1.1）中的第二项 f_{d^2} 是自由表面效应导致的自像力。首先，为了区分沿裂纹表面的应力分量 σ_{yy} 和 τ_{yx}，沿裂纹表面引入像位错分布 [117]。由从裂纹尖端或晶界发射的位错 ζ 所导致的、距裂纹尖端 β 处的像位错（ζ_i）分布（见图1）为：

$$F_x(\beta) = \frac{-b}{\pi\rho_i}\sqrt{\frac{r}{|\beta|}}\left\{\cos\eta\cos\left(\phi-\frac{\theta}{2}\right) + \frac{1}{2}\sin\theta\sin\left(\phi-\eta+\frac{\theta}{2}\right) - \sin\phi\sin\left(2\phi-\eta-\frac{\theta}{2}\right)\right\}, \tag{2.1.6}$$

and

$$F_y(\beta) = \frac{-b}{\pi\rho_i}\sqrt{\frac{r}{|\beta|}}\left\{2\sin\eta\cos\left(\phi-\frac{\theta}{2}\right) + \cos\left(2\phi-\frac{\theta}{2}\right)\sin(\phi-\eta) - \frac{1}{2}\sin\theta\sin\left(\phi-\eta+\frac{\theta}{2}\right)\right\}. \tag{2.1.7}$$

此处，F_x（β）$d\beta$ 表示 β 与 $\beta + d\beta$之间像位错的伯格斯矢量 x 方向分量之和，b 为伯格斯矢量的大小，ϕ 和 η 是图1中定义的角度。将式（2.1.6）和式（2.1.7）代入离散位错 [118] 的应力场方程，并沿裂纹表面对 β 上的函数进行积分，可得所有像位错施加的应力场：

$$\sigma_{xx} = \frac{\mu}{2\pi(1-\upsilon)}\left\{-\int_{-\infty}^{0}\frac{y[3(x-\beta)^2+y^2]}{[(x-\beta)^2+y^2]^2}F_x(\beta)\mathrm{d}\beta + \int_{-\infty}^{0}\frac{(x-\beta)[(x-\beta)^2-y^2]}{[(x-\beta)^2+y^2]^2}F_y(\beta)\mathrm{d}\beta\right\}, \tag{2.1.8}$$

$$\sigma_{yy} = \frac{\mu}{2\pi(1-\upsilon)}\left\{-\int_{-\infty}^{0}\frac{y[(x-\beta)^2-y^2]}{[(x-\beta)^2+y^2]^2}F_x(\beta)\mathrm{d}\beta + \int_{-\infty}^{0}\frac{(x-\beta)[(x-\beta)^2+3y^2]}{[(x-\beta)^2+y^2]^2}F_y(\beta)\mathrm{d}\beta\right\}, \tag{2.1.9}$$

and

$$\tau_{xy} = \frac{\mu}{2\pi(1-\upsilon)}\left\{-\int_{-\infty}^{0}\frac{(x-\beta)[(x-\beta)^2-y^2]}{[(x-\beta)^2+y^2]^2}F_x(\beta)\mathrm{d}\beta + \int_{-\infty}^{0}\frac{y[(x-\beta)^2-y^2]}{[(x-\beta)^2+y^2]^2}F_y(\beta)\mathrm{d}\beta\right\}. \tag{2.1.10}$$

考虑到数值求解的实际操作，Shimokawa 和 Tsuboi [119] 将积分区间设为 -100 < β < 0 nm，并按照与 f_K相同的方法计算了 f_{d^2}。此外，还应说明一些几何约束，

$$\eta = \arctan\left(\frac{r\sin\theta}{r\cos\theta-\alpha}\right), \tag{2.1.11}$$

$$\rho_r = \frac{r\sin\theta}{\sin\eta}, \tag{2.1.12}$$

$$\phi = \arctan\left(\frac{r\sin\theta}{r\cos\theta+\beta}\right), \tag{2.1.13}$$

and

$$\rho_i = \frac{r\sin\theta}{\sin\phi}, \tag{2.1.14}$$

其中，式 (2.1.12) 和 (2.1.14) 中的下标“r”和“i”分别表示实数和虚数（位错）。

式(2.1.1)中的第三项 $f_{dd\prime}$ 可分解为直接相互作用力 $f_{dd\prime,\ d}$和间接相互作用力 $f_{dd\prime,\ i}$，它们是晶界发射位错 ζ 后，残余位错 ζ'所产生的，如图1所示。换言之，残余位错 ζ'对位错 ζ产生两种应力场：直接应力场和间接应力场。直接作用力 $f_{dd\prime,\ d}$ 可计算如下：

$$f_{dd\prime,d} = -\frac{\mu b^2}{2\pi(1-\upsilon)\rho_r}. \tag{2.1.15}$$

另一方面，间接作用力 $f_{dd\prime,\ i}$ 可用与 f_{d^2}相同的方法计算，其中，残余位错 ζ'所产生的像位错分布可通过设定 $b = -b$、 $\rho_i = \alpha + \beta$、$r = \alpha$和 $\phi = \eta = \theta = 0$获得。然后，将这些分布代入式(2.1.8)–(2.1.10)，即可确定 $f_{dd\prime,\ i}$ 的值。

第四项 $f_{gbe} = -4\Delta E_{gb}\rho_0/\pi$（$\rho_0^2 + \rho_r^2$）（其中，$\Delta E_{gb}$ 是位错发射导致的能量变化，ρ_0 是根据Rice-Thomson模型 [119]确定的截断距离）被假设为由位错从晶界发射后发生的局部晶界结构转变所致，详情见我们此前的研究 [104]。

第五项 f_H 是氢气氛 [103],对位错施加的剪切力

$$f_H = -\tau_H b, \tag{2.1.16}$$

重新查看图1，并考虑一个以发射位错核心为中心的笛卡尔坐标系 $x_2O''y_2$，以及位于极坐标 (r', φ)处的一条氢膨胀线。氢膨胀线沿滑移面在发射位错核心处施加的剪应力为：

$$\frac{\sigma_{r\prime r\prime}-\sigma_{\varphi\varphi}}{\pi r\prime^2}\sin2\varphi = -\frac{\mu\Delta a}{\pi r\prime^2}\sin2\varphi \tag{2.1.17}$$

其中，$\sigma_{r\prime r\prime}$ 和$\sigma_{\varphi\varphi}$ 是距膨胀线r'处的平面应变轴对称场中的非零应力分量，而$\Delta a = \Delta a'/2(1-\upsilon)$对应于“无约束膨胀面积”$\Delta a' = V_H/N_A$h，其中$V_H$ $(= N_A\Omega)$为固溶氢的偏摩尔体积，h为距离

两相邻氢原子沿膨胀线[26]之间的距离。应用线性叠加原理，坐标为(r'，φ)处无限小面积dS内膨胀线引起的剪应力$\mathrm{d}\tau_H$ 可写为:

$$\mathrm{d}\tau_H = n\mathrm{d}S\left(-\frac{\mu\Delta a}{\pi r'^2}\right)\sin 2\varphi \tag{2.1.18}$$

其中，n (= c_Hh) 为膨胀线的面内浓度（也表示垂直于膨胀线的平面内单位面积上的氢原子数），c_H 为位错核心附近的氢浓度 [16],

$$c_H(r',\varphi) = \frac{c_0}{1-c_0}\exp\left(-\frac{W_{int}}{k_BT}\right)/\left(1+\frac{c_0}{1-c_0}\exp\left(-\frac{W_{int}}{k_BT}\right)\right), \tag{2.1.19}$$

其中，W_{int} 为半无限平面内氢团簇与位错之间的相互作用能,

$$W_{int} = -\frac{\mu b(1+\upsilon)\sin\varphi}{3\pi(1-\upsilon)r'}\Omega\,, \tag{2.1.20}$$

将上述式（2.1.18）在氢气氛所占据的整个面积 S 上积分，氢致净剪应力 τ_H 为,

$$\tau_H = \frac{\mu\Omega}{2\pi(1-\upsilon)}\int_{r_c}^{r_H}\int_0^{2\pi} c_H\sin\frac{2\varphi}{r'}\mathrm{d}\varphi\mathrm{d}r' \tag{2.1.21}$$

其中，r_c 为核心　半径，即位错的核心半径，r_H 为位错周围氢团簇的半径　　.

虽然上文已构建氢环境下裂纹尖端附近的应力场，但此处引入 Rice [92] 和 Rice 和 Beltz [93] 开发的二维 Peierls 模型（即 PRB 框架），用于描述位错形核的温度依赖的激活能垒,

$$U\left[\vec{\delta}(r)\right] = U_0 + \int_0^\infty \Phi\left[\vec{\delta}(r)\right]\mathrm{d}r + \frac{1}{2}\int_0^\infty s[\delta(r)]\cdot\delta(r)\mathrm{d}r - \int_0^\infty \frac{K_{II}^{eff}}{\sqrt{2\pi r}}\delta(r)\mathrm{d}r\,, \tag{2.1.22}$$

with

$$s[\delta(r)] = \frac{\mu}{2\pi(1-\upsilon)}\int_0^\infty\sqrt{\frac{\xi}{r}}\frac{\mathrm{d}\delta(\xi)/\mathrm{d}\xi}{r-\xi}\mathrm{d}\xi\,, \tag{2.1.23}$$

其中，第一项 U_0 是受载含裂纹固体在没有任何滑移时的弹性应变能；势能Φ 是由滑移不连续性 $\vec{\delta}$ 引起的原子堆垛能变化；第三项表示

微小滑移增量之间的弹性交互能；第四项表示滑移与裂纹表面之间的弹性交互能。

施加载荷下单位长度的激活能等于稳定平衡滑移分布 $\vec{\delta}_{stable}(r)$ 与鞍点滑移分布 $\vec{\delta}_{saddle}(r)$ 对应能量之差，

$$Q_{2d} = U\left[\vec{\delta}_{saddle}(r)\right] - U\left[\vec{\delta}_{stable}(r)\right]. \tag{2.1.24}$$

通过对剪切分布进行摄动分析，Rice 和 Beltz [93] 得到了激活能的闭式近似：

$$\Theta_{2d} = \frac{(1-\upsilon)Q_{2d}}{\mu b^2} = m\left(1 - \sqrt{\frac{G}{\gamma_{usf}}}\right)^{3/2}, \tag{2.1.25}$$

其中，由于无量纲因子 m 对$\gamma_{usf}/\mu b$ [120, 121]的依赖极弱，因此近似取为 0.287；施加的能量释放率 G 可通过 $G = (1-\upsilon)K_{II}^{eff^2}/2\mu$ [121] 与有效II型应力强度因子 K_{II}^{eff} 相关联。

通过名义上定义局域I型应力强度因子 K_I^* 和II型应力强度因子 K_{II}^* （这是从连续介质力学到原子力学的关键步骤，因为此处考虑了原子尺度细节），我们可以将氢辅助 Rice-Thomson-Shimokawa-Tsuboi（RTST）模型中的总作用力改写为：

$$f = b\tau_{r\theta}^*, \tag{2.1.26}$$

其中，$\tau_{r\theta}^*$ 是极坐标系中的名义剪切分量，可参照公式 (2.1.5) 与名义应力强度因子建立类似的关系，

$$\tau_{r\theta}^* = f/b = \frac{1}{2\sqrt{2\pi r}}\left[K_I^* \sin\frac{\theta}{2}\left(1 + \cos\theta + \frac{\rho}{r}\right) + K_{II}^* \cos\frac{\theta}{2}\left(-1 + 3\cos\theta - \frac{\rho}{r}\right)\right], \tag{2.1.27}$$

同时，局部应变能密度（即公式 (2.1.22) 中 U_0 对体积的一阶导数）可表示为，

$$V_\varepsilon = \frac{1}{2}[\tilde{\sigma}]^T[\tilde{\varepsilon}] \tag{2.1.28}$$

应力和应变矩阵为，

$$[\tilde{\sigma}] = \begin{matrix}\sigma_{xx}^* \\ \sigma_{yy}^* \\ \tau_{xy}^*\end{matrix}, [\tilde{\varepsilon}] = \begin{matrix}\varepsilon_{xx}^* \\ \varepsilon_{yy}^* \\ \gamma_{xy}^*\end{matrix} \tag{2.1.29}$$

应变矩阵为,

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx}^{*} &= \left(\sigma_{xx}^{*} - \upsilon\sigma_{yy}^{*}\right)/E \\ [\tilde{\varepsilon}] = \varepsilon_{yy}^{*} &= \left(\sigma_{yy}^{*} - \upsilon\sigma_{xx}^{*}\right)/E \\ \gamma_{xy}^{*} &= 2(1+\upsilon)\tau_{xy}^{*}/E\end{aligned} \tag{2.1.30}$$

对于平面应力，且,

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx}^{*} &= (1+\upsilon)\left((1-\upsilon)\sigma_{xx}^{*} - \upsilon\sigma_{yy}^{*}\right)/E \\ [\tilde{\varepsilon}] = \varepsilon_{yy}^{*} &= (1+\upsilon)\left((1-\upsilon)\sigma_{yy}^{*} - \upsilon\sigma_{xx}^{*}\right)/E \\ \gamma_{xy}^{*} &= 2(1+\upsilon)\tau_{xy}^{*}/E\end{aligned} \tag{2.1.31}$$

对于平面应变。具体而言，笛卡尔坐标系中名义应力场的分量为,

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}^{*} = {} & \frac{K_I^{*}}{\sqrt{2\pi r}}\left(\cos\frac{\theta}{2} - \frac{1}{2}\sin\theta\sin\frac{3\theta}{2} - \frac{\rho}{2r}\cos\frac{3\theta}{2}\right) \\ & + \frac{K_{II}^{*}}{\sqrt{2\pi r}}\left(-2\sin\frac{\theta}{2} - \frac{1}{2}\sin\theta\cos\frac{3\theta}{2} + \frac{\rho}{2r}\sin\frac{3\theta}{2}\right)\end{aligned} \tag{2.1.32-a}$$

$$\begin{aligned}\sigma_{yy}^{*} = {} & \frac{K_I^{*}}{\sqrt{2\pi r}}\left(\cos\frac{\theta}{2} + \frac{1}{2}\sin\theta\sin\frac{3\theta}{2} + \frac{\rho}{2r}\cos\frac{3\theta}{2}\right) \\ & + \frac{K_{II}^{*}}{\sqrt{2\pi r}}\left(\frac{1}{2}\sin\theta\cos\frac{3\theta}{2} - \frac{\rho}{2r}\sin\frac{3\theta}{2}\right),\end{aligned} \tag{2.1.32-b}$$

$$\begin{aligned}\tau_{xy}^{*} = {} & \frac{K_I^{*}}{\sqrt{2\pi r}}\left(\frac{1}{2}\sin\theta\cos\frac{3\theta}{2} - \frac{\rho}{2r}\sin\frac{3\theta}{2}\right) \\ & + \frac{K_{II}^{*}}{\sqrt{2\pi r}}\left(\cos\frac{\theta}{2} - \frac{1}{2}\sin\theta\sin\frac{3\theta}{2} - \frac{\rho}{2r}\cos\frac{3\theta}{2}\right).\end{aligned} \tag{2.1.32-c}$$

在剪应力的线性约束条件（式（2.1.27））下，通过对名义应力强度因子 (K_I^{*}, K_{II}^{*}) 求应变能密度的最小值，可以求得两个标量变量的取值，即名义应力强度因子。从数学上讲，这是一个有限维空间中的约束优化问题，可得以下解,

$$\begin{cases}K_I^{*} = \frac{D(A_{22}B - A_{12}C)}{A_{11}C^2 - 2A_{12}BC + A_{22}B^2} \\ K_{II}^{*} = \frac{D(A_{11}C - A_{12}B)}{A_{11}C^2 - 2A_{12}BC + A_{22}B^2}\end{cases} \tag{2.1.33}$$

其中:

$$\begin{aligned}B &= \sin(\theta/2)(1 + cos\theta + \rho/r) \\ C &= \cos(\theta/2)(-1 + 3cos\theta - \rho/r) \\ D &= 2\sqrt{2\pi r}(f/b)\end{aligned} \tag{2.1.34}$$

系数 A_{11}、 A_{12}、 A_{22} 以及推导的更多细节可参见附录 A。

为考虑晶界和氢气氛对位错形核的影响，我们在氢信息RTST模型 [92, 104],中，将式（2.1.22）中的有效II型应力强度因子 K_{II}^{eff} 与式（2.1.33）中上述定义的局域I型应力强度因子 K_I^* 和局域II型应力强度因子 K_{II}^* 联系起来

$$K_{II}^{eff} = K_I^* \cos^2\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} + K_{II}^* \cos\frac{\theta}{2}\left(1 - 3\sin^2\frac{\theta}{2}\right), \tag{2.1.35}$$

因此，PRB 框架现在可以扩展为考虑晶界裂纹处的位错发射，具体如下：

$$\frac{(1-\upsilon)Q_{2d}}{\mu b^2} = m\left(1 - \sqrt{\frac{1-\upsilon}{2\mu\gamma_{usf}}}\left|K_{II}^{eff}\right|\right)^{3/2}. \tag{2.1.36}$$

然而，上述推导出的激活能是外加I型应力强度因子 K_I 和外加II型应力强度因子 K_{II}的隐函数，不能直接用于后续步骤中基于过渡态理论的位错形核分析。受先前研究 [122, 123], 的启发，并考虑温度依赖性，激活吉布斯自由能可改写为：

$$Q_{2d}(K_I, K_{II}, T) = (1 - T/T_m)Q_{2d}(K_I, K_{II}), \tag{2.1.37}$$

其中，T_m 为表面无序化温度（初步近似下可取熔化温度）[122],，而零温度下的激活焓 Q_{2d}（K_I, K_{II}, $T = 0$）为：

$$Q_{2d}(K_I, K_{II}) = C\left(1 - \frac{K_r}{K_r^0}\right)^n, \tag{2.1.38}$$

其中，C、 n、 K_r^0 是通过拟合由式(2.1.36)至式(2.1.38)计算得到的零温激活焓Q_{2d}值而获得的拟合参数。约化（或等效）应力强度因子K_r 是外加I型应力强度因子K_I 和外加II型应力强度因子 K_{II} [124]的函数,

$$K_r \equiv K_r(K_I, K_{II}) = \sqrt{K_I^2 + K_{II}^2} \tag{2.1.39}$$

在实际应用中，我们使用式（2.1.38）的归一化形式，即 $\Theta_{2d}(K_I, K_{II}) = \tilde{C}\left(1 - \frac{K_r}{K_r^0}\right)^n$ ，其中无量纲参数为 $\tilde{C} = C\frac{1-\upsilon}{\mu b^2}$。位错形核的平均速率可描述为：

$$\omega = \omega_0 N \exp\left(-\frac{Q_{3d}(K_I, K_{II}, T)}{k_B T}\right), \tag{2.1.40}$$

其中，ω_0 为尝试频率（初步估算时，可取德拜频率，即$k_B T_D/\hbar$，其中T_D 为德拜温度）。在过渡态理论（TST）框架下，当外加I型应力强度因子K_I 和II型应力强度因子K_{II}的约化K_r 等于最概然应力强度因子K_{Id}^p时，就会发生位错形核事件：

$$\left.\frac{Q_{3d}(K_I,K_{II},T)}{k_B T}\right|_{K_r=K_r^p} = \ln\left(\left.\frac{k_B T N\omega_0}{\dot{K}_r \Omega(K_I,K_{II},T)}\right)\right|_{K_r=K_r^p}, \tag{2.1.41}$$

其中，$N\omega_0$ 表示裂纹尖端附近潜在形核位点的数量乘以尝试频率ω_0 [125]。三维能垒Q_{3d} 由二维能垒Q_{2d}通过标度因子s_0估算得到，即$Q_{3d} = s_0 Q_{2d}$。类激活体积项定义为，

$$\Omega(K_I,K_{II},T) = -\frac{\partial Q_{3d}}{\partial K_r} = \left(1-\frac{T}{T_m}\right)\frac{s_0 Cn}{K_r^0}\left(1-\frac{K_r}{K_r^0}\right)^{n-1}. \tag{2.1.42}$$

利用表 1 所列的材料常数对方程 (2.1.41) 进行数值求解，可得从晶界裂纹处位错形核所需的最可能混合模式应力强度因子 K_r^p 。通过比较K_r^p 与沿晶裂纹解理所需的临界应力强度因子 K_{IG} [104, 126]，即可确定断裂模式：脆性解理，或通过位错发射实现韧性钝化。

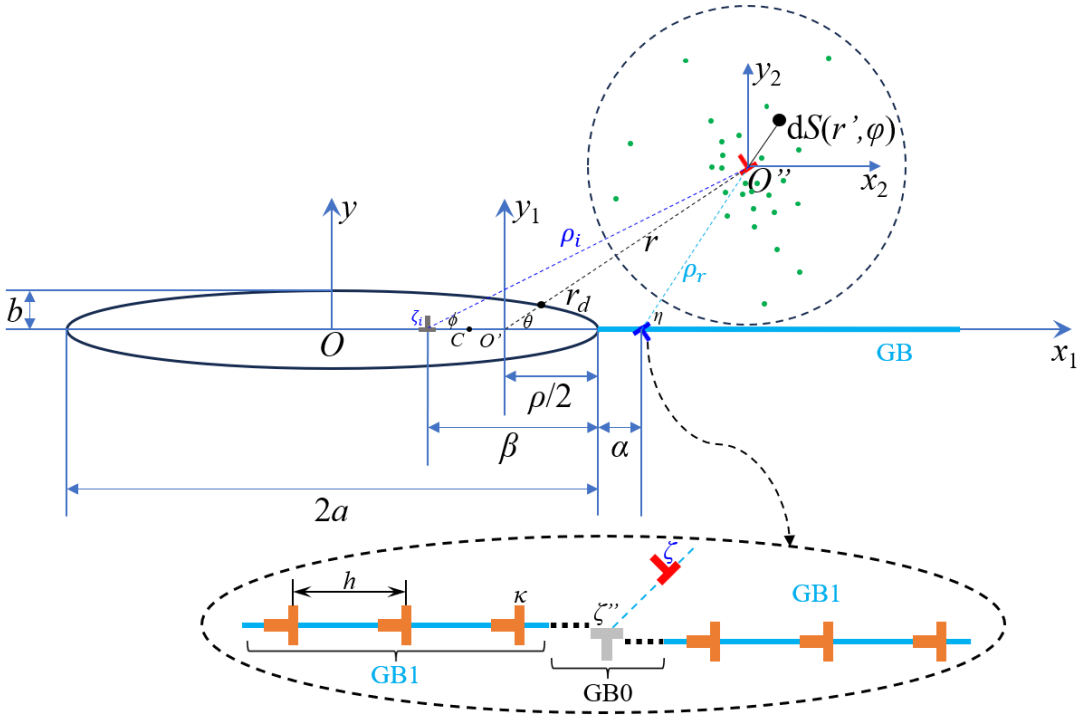


图1. 氢环境下从晶间裂纹尖端发射的刃型位错示意图。绿点表示氢原子。

2.2 阶段II：通过 ***HEDE***机制实现无位错区中的脆性解理

发射出的位错从裂纹尖端滑移离开后，会停留在滑移面上并形成塑性区。随着裂纹钝化和应力松弛同时发生，裂纹尖端与塑性区之间会形成一个无位错区（DFZ）[127], , 如图 2 示意所示。类似于 Thomson弹性核心区的概念 [128], , DFZ尺寸 R_c 可确定为 [129],

$$R_C = \frac{\xi}{\lambda^2}\frac{E(\alpha b)^2}{W_{ad}} \tag{2.2.1}$$

其中，参数 ξ （平面应力时取值为 1，平面应变时取值为（$1-\upsilon^2$））表征 HRR理论 [130-134]中所示的约束状态；$\sqrt{2\pi}\lambda$ 在平面应力时为 1，在平面应变时为（$1-2\upsilon$）；α 是可通过实验测量的材料常数，反映塑性变形体中运动位错之间相互作用的强度 [135], , 而 W_{ad} 则仅为粘附功。Tehranchi等人近期的理论研究 [12] 表明，在氢环境下，HEDE机制可通过降低解理的应力强度因子 K_{Ic} ，使其低于延性位错发射和钝化所需的值 K_{Ie} 而发挥作用。因此，我们来考察无位错区内的氢输运；通过调节粘附功与氢浓度 [128,之间的函数关系，可以实现 HEDE 概念。氢偏析导致的粘附功变化可利用成熟的热力学关系 [129, 137],进行预测。

$$W_{ad} = W_{ad}^0 - \int_0^{\Gamma}[\mu_b(\Gamma_b) - \mu_s(\Gamma_s/2)]\mathrm{d}\Gamma \tag{2.2.2}$$

其中，W_{ad}^0 是纯界面的粘附功，Γ 是偏聚元素（即氢）的表面过剩量，而$\mu_b(\Gamma_b)$和$\mu_s(\Gamma_s/2)$分别是边界吸附等温线和表面吸附等温线。

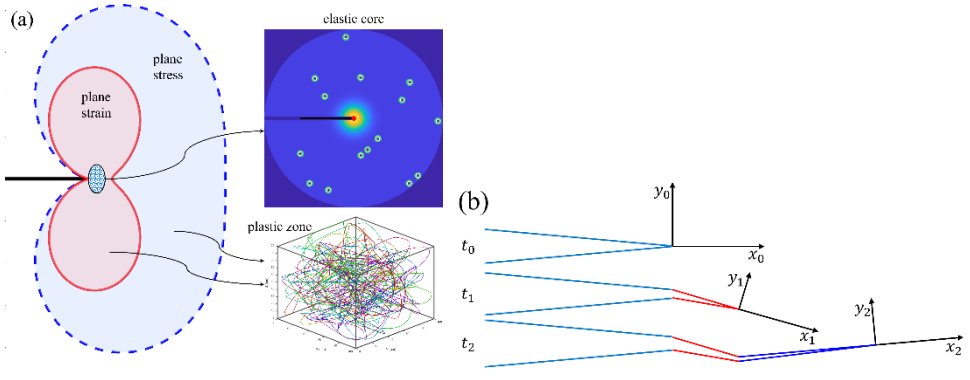


图2。（a）裂纹尖端附近弹性核内氢输运示意图。红色实线和蓝色虚线分别表示在I型加载下，采用平面应变和平面应力条件下的von Mises准则估算的塑性区形状。（b）不同时刻裂纹尖端坐标系动态重建示意图。

考虑到裂纹尖端附近存在各种微观组织及其对穿晶解理开裂的影响，将采用线弹性断裂力学（LEFM）方法评估各向异性裂纹扩展行为。Lieberman和Zirinsky [138, 139], 建立了确定任意取向单晶弹性常数的以下步骤,

1）确定连接两个正交单位坐标轴系的方向余弦，如下所示：

$$\begin{bmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} \\ \beta_{31} & \beta_{32} & \beta_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \tag{2.2.3}$$

2）将方向余弦的二次组合写入以下6×6 基体：

$$\gamma = \begin{bmatrix} \beta_{11}^2 & \beta_{12}^2 & \beta_{13}^2 & \beta_{12}\beta_{13} & \beta_{13}\beta_{11} & \beta_{11}\beta_{12} \\ \beta_{21}^2 & \beta_{22}^2 & \beta_{23}^2 & \beta_{22}\beta_{23} & \beta_{23}\beta_{21} & \beta_{21}\beta_{22} \\ \beta_{31}^2 & \beta_{32}^2 & \beta_{33}^2 & \beta_{32}\beta_{33} & \beta_{33}\beta_{31} & \beta_{31}\beta_{32} \\ 2\beta_{21}\beta_{31} & 2\beta_{22}\beta_{32} & 2\beta_{23}\beta_{33} & \begin{pmatrix}\beta_{22}\beta_{33}+\\ \beta_{23}\beta_{32}\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}\beta_{21}\beta_{33}+\\ \beta_{23}\beta_{31}\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}\beta_{22}\beta_{31}+\\ \beta_{21}\beta_{32}\end{pmatrix} \\ 2\beta_{31}\beta_{11} & 2\beta_{32}\beta_{12} & 2\beta_{33}\beta_{13} & \begin{pmatrix}\beta_{13}\beta_{32}+\\ \beta_{12}\beta_{33}\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}\beta_{13}\beta_{31}+\\ \beta_{11}\beta_{33}\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}\beta_{11}\beta_{32}+\\ \beta_{12}\beta_{31}\end{pmatrix} \\ 2\beta_{11}\beta_{21} & 2\beta_{12}\beta_{22} & 2\beta_{13}\beta_{23} & \begin{pmatrix}\beta_{12}\beta_{23}+\\ \beta_{13}\beta_{22}\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}\beta_{13}\beta_{21}+\\ \beta_{11}\beta_{23}\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}\beta_{11}\beta_{22}+\\ \beta_{12}\beta_{21}\end{pmatrix} \end{bmatrix} \tag{2.2.4}$$

用于变换弹性柔度矩阵S_{ij}，以及

$$\alpha = \begin{bmatrix} \beta_{11}^2 & \beta_{12}^2 & \beta_{13}^2 & 2\beta_{12}\beta_{13} & 2\beta_{13}\beta_{11} & 2\beta_{11}\beta_{12} \\ \beta_{21}^2 & \beta_{22}^2 & \beta_{23}^2 & 2\beta_{22}\beta_{23} & 2\beta_{23}\beta_{21} & 2\beta_{21}\beta_{22} \\ \beta_{31}^2 & \beta_{32}^2 & \beta_{33}^2 & 2\beta_{32}\beta_{33} & 2\beta_{33}\beta_{31} & 2\beta_{31}\beta_{32} \\ \beta_{21}\beta_{31} & \beta_{22}\beta_{32} & \beta_{23}\beta_{33} & \begin{pmatrix}\beta_{22}\beta_{33}+\\ \beta_{23}\beta_{32}\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}\beta_{21}\beta_{33}+\\ \beta_{23}\beta_{31}\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}\beta_{22}\beta_{31}+\\ \beta_{21}\beta_{32}\end{pmatrix} \\ \beta_{31}\beta_{11} & \beta_{32}\beta_{12} & \beta_{33}\beta_{13} & \begin{pmatrix}\beta_{13}\beta_{32}+\\ \beta_{12}\beta_{33}\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}\beta_{13}\beta_{31}+\\ \beta_{11}\beta_{33}\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}\beta_{11}\beta_{32}+\\ \beta_{12}\beta_{31}\end{pmatrix} \\ \beta_{11}\beta_{21} & \beta_{12}\beta_{22} & \beta_{13}\beta_{23} & \begin{pmatrix}\beta_{12}\beta_{23}+\\ \beta_{13}\beta_{22}\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}\beta_{13}\beta_{21}+\\ \beta_{11}\beta_{23}\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}\beta_{11}\beta_{22}+\\ \beta_{12}\beta_{21}\end{pmatrix} \end{bmatrix} \tag{2.2.5}$$

用于变换弹性常数矩阵C_{ij}。体心立方铁在基本坐标系（x-[100], y-[010], z-[001]）中的弹性系数为：C_{11} = 243.36 吉帕；C_{12} = 145.01 吉帕；C_{44} = 116.04 吉帕[140]。

3) 计算变换后的基体：

$$S' = \gamma S \gamma^T \tag{2.2.6-a}$$

$$C' = \alpha C \alpha^T \tag{2.2.6-b}$$

其中，γ^T 和 α^T 分别是 γ 和 α 的转置矩阵。12 种不同取向下变换后的柔度系数 S'_{ij} 可见我们先前的研究[104]。

如 Zhang 等人 [141], 所示，无限各向异性介质中半裂纹的位移场和应力场可由列赫尼茨基形式体系导出。Sih 等人 [142]给出了详细描述及其在裂纹中的应用。此处我们简要回顾主要公式，其中各向异性线弹性介质中平面应变问题的控制方程为,

$$b_{11}\frac{\partial^4 U}{\partial y^4} + b_{22}\frac{\partial^4 U}{\partial x^4} + (2b_{12} + b_{66})\frac{\partial^4 U}{\partial x^2 \partial y^2} - 2b_{16}\frac{\partial^4 U}{\partial x \partial y^3} - 2b_{26}\frac{\partial^4 U}{\partial x^3 \partial y} = 0 \tag{2.2.7}$$

其中 U 为艾里应力函数，b_{ij} 与由式(2.2.6-a)确定的取向相关柔度模量 S'_{mn} 相关联,

$$b_{ij} = S'_{ij} - \frac{S'_{i3}S'_{j3}}{S'_{33}} \tag{2.2.8}$$

从数学角度看，平面应力问题与平面应变问题除进入约化应变—应力关系的弹性常数值不同外完全相同。此后，约定a_{ij} （$= S'_{ij}$）和 b_{ij} （i、j = 1，2，6）分别为平面应力问题和平面应变问题中使用的约化弹性常数 [142]。为简洁起见，此处不再重复几乎相同的平面应力问题推导。在先前研究 [104], 中，我们已针对12种不同晶格取向计算了 b_{ij} 系数，覆盖的晶界角范围为 [20.05o, 148.4o]。控制方程式(2.2.7)的特征方程为,

$$b_{11}\mu_j^4 - 2b_{16}\mu_j^3 + (2b_{12} + b_{66})\mu_j^2 - 2b_{26}\mu_j + b_{22} = 0 \tag{2.2.9}$$

将根记为 μ_i （$i = 1\sim4$、$\mu_1 = \bar{\mu}_3$ 和 $\mu_2 = \bar{\mu}_4$），并引入两个变量 $s_1 = \mu_1$、$s_2 = \mu_2$，一般平面应变问题的艾里应力函数可表示为:

$$U(x, y) = 2\Re[U_1(z_1) + U_2(z_2)] \tag{2.2.10}$$

其中，$z_i = x + s_i y$ （i = 1，2）、U_1 和 U_2 是由边界条件确定的任意函数。因此，位移场可表示为:

$$\begin{aligned} u_x &= 2\Re[p_1\phi(z_1) + p_2\psi(z_2)], \\ u_y &= 2\Re[q_1\phi(z_1) + q_2\psi(z_2)]. \end{aligned} \tag{2.2.11}$$

其中，p_i 和q_i 的形式为：

$$\begin{aligned} p_1 &= b_{11}s_1^2 + b_{12} - b_{16}s_1, \quad p_2 = b_{11}s_2^2 + b_{12} - b_{16}s_2, \\ q_1 &= \frac{b_{12}s_1^2 + b_{22} - b_{26}s_1}{s_1}, \qquad q_2 = \frac{b_{12}s_2^2 + b_{22} - b_{26}s_2}{s_2}. \end{aligned} \tag{2.2.12}$$

根据无限介质中裂纹的边界条件，可以确定应力函数 ϕ 和 ψ 。因此，裂纹尖端在极坐标（θ, r）中的位移场可表示为：

$$\begin{aligned} u_x &= K_I\sqrt{\frac{2r}{\pi}}\Re\left[\frac{1}{s_1-s_2}\left(s_1p_2\sqrt{\cos\theta + s_2\sin\theta} - s_2p_1\sqrt{\cos\theta + s_1\sin\theta}\right)\right], \\ u_y &= K_I\sqrt{\frac{2r}{\pi}}\Re\left[\frac{1}{s_1-s_2}\left(s_1q_2\sqrt{\cos\theta + s_2\sin\theta} - s_2q_1\sqrt{\cos\theta + s_1\sin\theta}\right)\right]. \end{aligned} \tag{2.2.13}$$

对于 I型加载，

$$\begin{aligned} u_x &= K_{II}\sqrt{\frac{2r}{\pi}}\Re\left[\frac{1}{s_1-s_2}\left(p_2\sqrt{\cos\theta + s_2\sin\theta} - p_1\sqrt{\cos\theta + s_1\sin\theta}\right)\right], \\ u_y &= K_{II}\sqrt{\frac{2r}{\pi}}\Re\left[\frac{1}{s_1-s_2}\left(q_2\sqrt{\cos\theta + s_2\sin\theta} - q_1\sqrt{\cos\theta + s_1\sin\theta}\right)\right]. \end{aligned} \tag{2.2.14}$$

对于 II型加载，分别为。

应力场为：

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}}\Re\left[\frac{s_1s_2}{s_1-s_2}\left(\frac{s_2}{\sqrt{\cos\theta+s_2\sin\theta}} - \frac{s_1}{\sqrt{\cos\theta+s_1\sin\theta}}\right)\right], \\ \sigma_{yy} &= \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}}\Re\left[\frac{1}{s_1-s_2}\left(\frac{s_1}{\sqrt{\cos\theta+s_2\sin\theta}} - \frac{s_2}{\sqrt{\cos\theta+s_1\sin\theta}}\right)\right], \\ \tau_{xy} &= \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}}\Re\left[\frac{s_1s_2}{s_1-s_2}\left(\frac{1}{\sqrt{\cos\theta+s_1\sin\theta}} - \frac{1}{\sqrt{\cos\theta+s_2\sin\theta}}\right)\right]. \end{aligned} \tag{2.2.15}$$

对于 I型加载，

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}}\Re\left[\frac{1}{s_1-s_2}\left(\frac{s_2^2}{\sqrt{\cos\theta+s_2\sin\theta}} - \frac{s_1^2}{\sqrt{\cos\theta+s_1\sin\theta}}\right)\right], \\ \sigma_{yy} &= \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}}\Re\left[\frac{1}{s_1-s_2}\left(\frac{1}{\sqrt{\cos\theta+s_2\sin\theta}} - \frac{1}{\sqrt{\cos\theta+s_1\sin\theta}}\right)\right], \\ \tau_{xy} &= \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}}\Re\left[\frac{1}{s_1-s_2}\left(\frac{s_1}{\sqrt{\cos\theta+s_1\sin\theta}} - \frac{s_2}{\sqrt{\cos\theta+s_2\sin\theta}}\right)\right]. \end{aligned} \tag{2.2.16}$$

分别对应于II型加载。因此，冯·米塞斯等效应力为：

$$\sigma_{vm} = \sqrt{\left[\left(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}\right)^2 + \left(\sigma_{yy} - \sigma_{zz}\right)^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^2\right]/2 + 3\tau_{xy}^2} \tag{2.2.17}$$

其中，$\sigma_{zz} = 0$ 适用于平面应力，$\sigma_{zz} = \upsilon(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$ 适用于平面应变。Novak 等人 [70] 已证明，未充氢钢中的韧性断裂由应变控制，而存在氢时引发脆性断裂的局部断裂事件则由应力控制。因此，将微裂纹萌生准则设定为冯·米塞斯应力达到无位错区内所有平面缺陷和体积缺陷中脱粘强度的最小值，可得：

$$\sigma_{vm} = \min\{\Sigma_{db}^{GB,H}, \Sigma_{db}^{inc,H}, \Sigma_{db}^{PB,H}, \dots\} \tag{2.2.18}$$

其中，$\Sigma_{db,H}^{GB}$、$\Sigma_{db}^{inclu,H}$ 和$\Sigma_{db,}^{PB,H}$ 分别表示氢环境下晶界、夹杂物和相界的脱粘强度，在数学上可写为局部氢浓度c_H的函数，

$$\begin{cases} \Sigma_{db}^{GB,H} = \Sigma_{db}^{GB}(c_H) \\ \Sigma_{db}^{inc,H} = \Sigma_{db}^{inc}(c_H) \\ \Sigma_{db}^{PB,H} = \Sigma_{db}^{PB}(c_H) \\ \cdots \end{cases} \tag{2.2.19}$$

由于微观结构缺陷（例如晶界、第二相颗粒）的存在，裂纹路径通常会发生偏转，甚至分叉。因此，坐标系应随裂纹路径的发展而实时重建，如图2-(b)所示。然而，此处仅为演示目的，我们考虑图1所示的沿晶断裂。具体而言，若裂纹沿两个（上、下）晶粒之间的晶界扩展（如图1所示），则必须考虑晶界能γ_{gb} 的影响，以计算形成两个新表面所需的能量，即杜普雷方程；这两个表面在晶体学上可能不同[143, 144]，

$$G_I^{gb} = \gamma_s^1 + \gamma_s^2 - \gamma_{gb}\,, \tag{2.2.20}$$

其中，γ_s^1 和 γ_s^2 分别为相邻晶粒的自由表面能（如图1所示，简单地将上方晶粒称为晶粒 #1，下方晶粒称为晶粒 #2）。在塑性变形可忽略的情况下，沿对称晶界断裂应始终比沿平行于晶界的晶面发生解理（晶粒内部）更有利（$\gamma_s^1 = \gamma_s^2 = \gamma_s$）[145]。我们此前的研究中给出了 12 个不同晶界的计算结果G_I^{gb} 和K_{IG} [104]。对于未充氢的晶界，$W_{ad}^0 = G_I^{gb}$。更一般地，对于 Hirth 和 Rice 所描述的快速脱粘情况[137]，，理想断裂功（即式(2.2.2)）可重新表述为 [70]，$2\gamma_{int} = 2\gamma_s - \gamma_i -$（$\Delta g_i - \Delta g_s$）$\Gamma$。在氢致

钢中沿晶断裂的研究中[70]， $2\gamma_s$ 和γ_i 分别表示无氢时的自由表面能和碳化物/基体界面能；Δg_s 和Δg_i 分别表示氢吸附到分离后形成的自由表面以及颗粒/基体界面时的吉布斯自由能超额；Γ 表示界面氢覆盖度，以单位面积上的氢溶质原子数衡量。

在氢环境下，受经典格里菲斯理论启发，并作一阶近似，可得一般相界的脱粘强度为：

$$\Sigma_{db} = \beta\sqrt{\frac{E^* W_{ad}}{d_0}} \tag{2.2.21}$$

其中，β 是用于考虑界面缺陷几何形状和加载模式的因子，E^* 是约化弹性模量，d_0 是缺陷的特征长度。具体而言，颗粒尺寸为l的碳化物，其强度Σ 可通过Smith模型[70, 146], 降低，即：

$$\frac{l}{d}\Sigma^2 + \tau_{eff}^2\left(1 + \frac{4}{\pi}\frac{\tau_0}{\tau_{eff}}\sqrt{\frac{l}{d}}\right)^2 = \frac{4E\gamma_{eff}}{\pi(1-\upsilon^2)d} \tag{2.2.22}$$

其中，d 是晶粒直径，τ_0 是阻碍位错运动的应力，τ_{eff} 是有效应力，等于施加的剪切应力τ_{xy} 与应力τ_0之差，即$\tau_{eff} = \tau_{xy} - \tau_0$；$\gamma_{eff}$ 是碳化物/基体界面的有效脱粘功，它是位错携带的氢溶质原子数量的函数，

$$\gamma_{eff} = 2\gamma_{int} + \gamma_p \tag{2.2.23}$$

其中，伴随脱粘起始事件产生的塑性功γ_p 为[147, 148] ，

$$\gamma_p = A(2\gamma_{int})^q \tag{2.2.24}$$

Sofronis-McMeeking-Krom-Koers-Bakker（SMKKB）氢输运方程如下： [70,149],

$$\frac{C_L + C_T(1-\theta_T)}{C_L}\frac{\partial C_L}{\partial t} - \nabla\cdot(D_L\nabla C_L) + \nabla\cdot\left(\frac{D_L C_L \tilde{V}_H}{RT}\nabla\sigma_H\right) + \theta_T\frac{\mathrm{d}N_T}{\mathrm{d}\varepsilon_p}\frac{\partial\varepsilon_p}{\partial t} = 0 \tag{2.2.25}$$

其中，C_L 和 C_T 分别是晶格位置和陷阱位置中的氢浓度；D_L 是正常间隙晶格位置（NILS）$D_L = M_L RT$中的浓度无关扩散率，其中 M_L 是氢在晶格位置中的迁移率；$\tilde{V}_H$ 是氢的偏摩尔体积，即 293 K 下α-铁的 2.0×10^{-6} m^3 [150]；σ_H 是静水应力 $\sigma_H = \frac{1}{3}\sum_{i=1}^{3}\sigma_{ii}$；$\theta_T$ 是陷阱位置的占据率

而 N_T 是陷阱密度。公式（2.2.25）中的最后一项称为（塑性）应变速率因子，在 Sofronis 和 McMeeking 的原始模型中未予考虑 [151]。

然而，大量实验[152] 表明，氢致断裂可能发生在弹性应变阶段，因此公式（2.2.25）的有效性——即其中氢陷阱由最后的塑性项主导——受到质疑。让我们考虑基体中的一个球形夹杂，氢捕获能力实际上由陷阱结合能ΔE_T决定，它是界面能E_i 与弹性应变能E_s [153]之和。假设基体与夹杂的弹性常数相等，并将剪切模量记为G，泊松比记为υ，失配位错的伯格斯矢量大小记为b，球形夹杂的无应变半径记为r，则有，

$$E_i = 4\pi r^2 Gb\left\{\frac{1}{10} + \left[1+\beta-\sqrt{1+\beta^2}-\beta\ln\left(2\beta\left(\sqrt{1+\beta^2}-\beta\right)\right)\right]/2\pi^2\right\} \tag{2.2.26-a}$$

$$E_s = 4\pi r^2 G\delta_0^2(1+\upsilon)/3(1-\upsilon) \tag{2.2.26-b}$$

其中，$\beta = \pi f_0/(1-\upsilon)$，失配$f_0$ 定义为$f_0 = |a_m - a_i|/a_m$ （a_m 和a_i 分别为基体和夹杂的晶格常数），参数δ_0 由Nabarro [154, 155],根据膨胀应变ε_0 （针对小应变）给出

$$\delta_0 = (1+4G/3K)\varepsilon_0 = \sqrt[3]{\Omega_i/\Omega_m} - 1 \tag{2.2.27}$$

其中，K 为夹杂物的体积模量，Ω_i 和Ω_m 分别为夹杂物和基体的原子体积（为简洁起见，假设$\Omega_i > \Omega_m$ ）。下标 0 表示弛豫状态，根据 Jesser [153, 156] 可得:

$$f = |\delta - \delta_0| = (1+4G/3K)|\varepsilon_v - \varepsilon_0| \tag{2.2.28}$$

其中，ε_v 是外加载荷引起的体积应变。总能量$E_i + E_s$ （即陷阱结合能ΔE_T）与错配f呈非线性关系，因此也与体积应变ε_v呈非线性关系。这意味着氢陷阱的捕获能力会在加载过程中动态变化，但此前的大多数模拟研究都假设其保持不变。假设归一化陷阱密度（$N_T^{(i)}/N_T^{total}\Big|_{t=0}$）在无应变状态下（即$t = 0$时）相对于陷阱结合能$\Delta E_T$ 遵循给定的分布，

$$N_T^{(i)}/N_T^{total}\Big|_{t=0} = \varphi(\Delta E_T)|_{t=0} \tag{2.2.29}$$

加载时，球形夹杂周围的基体会发生弹性变形，导致晶格错配发生变化，进而引起陷阱结合能变化。因此，陷阱密度分布$\varphi(\Delta E_T)$会动态演化，公式（2.2.25）可改写为：

$$\left(1+(1-\theta_T)\frac{C_T}{C_L}\right)\frac{\partial C_L}{\partial t}-D_L\nabla\cdot(\nabla C_L)+\frac{D_L\widetilde{V}_H}{RT}\nabla\cdot(C_L\nabla\sigma_H)+\theta_T\frac{\mathrm{d}N_T}{\mathrm{d}(\Delta E_T)}\frac{\partial(\Delta E_T)}{\partial\varepsilon_v}\frac{\partial\varepsilon_v}{\partial t}=0 \quad (2.2.30)$$

对于承受I型或II型载荷的平面问题，在裂纹尖端附近的弹性核内，应变分量可根据公式（2.2.15）或公式（2.2.16）中计算得到的应力分量表示为：

$$\begin{cases}\varepsilon_{xx}=\frac{1}{2G}\left[\sigma_{xx}-\frac{\lambda^*}{2(\lambda^*+G)}(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})\right]\\ \varepsilon_{yy}=\frac{1}{2G}\left[\sigma_{yy}-\frac{\lambda^*}{2(\lambda^*+G)}(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})\right]\\ \varepsilon_{xy}=\frac{1}{2G}\tau_{xy}\end{cases} \quad (2.2.31)$$

其中，$\lambda^*=\frac{3-\kappa}{\quad}G$，科洛索夫常数为：$\kappa-1$

$$\kappa=\begin{cases}3-4\upsilon, & \text{for plane strain}\\ \frac{3-\upsilon}{1+\upsilon}, & \text{for plane stress}\end{cases} \quad (2.2.32)$$

因此，对于本文在笛卡尔坐标下的研究，体积应变$\varepsilon_v=\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}+\varepsilon_{zz}$（平面应力情况下为$\varepsilon_{zz}\neq 0$）使得公式（2.2.25）最后一项中的偏差$\partial\varepsilon_v/\partial t$与所施加的应力强度因子变化率$\dot{K}_I$（或$\dot{K}_{II}$）成正比，并且：

$$\partial(\Delta E_T)/\partial\varepsilon_v=\partial E_i/\partial\varepsilon_v+\partial E_s/\partial\varepsilon_v \quad (2.2.33)$$

其中：

$$\partial E_i/\partial\varepsilon_v=(\partial E_i/\partial\beta)\cdot(\partial\beta/\partial\varepsilon_v)$$
$$=-\frac{2r^2Gb}{\pi}\ln\left(2\beta\left(\sqrt{1+\beta^2}-\beta\right)\right)\cdot\frac{\pi(1+4G/3K)}{1-\upsilon}\mathrm{sgn}(\varepsilon_v-\varepsilon_0) \quad (2.2.34\text{-a})$$

$$\partial E_s/\partial\varepsilon_v=\frac{8\pi r^2G(1+4G/3K)^2(1+\upsilon)}{3(1-\upsilon)}\varepsilon_v \quad (2.2.34\text{-b})$$

其中，量β已更新为$\beta=\pi f/(1-\upsilon)$，实数x的符号函数（或符号函数）定义为，

$$\mathrm{sgn}(x):=\begin{cases}-1 & \text{if } x<0\\ 0 & \text{if } x=0\\ 1 & \text{if } x>0\end{cases} \quad (2.2.35)$$

为了在数值实现中计算$\mathrm{d}N_T\mathrm{d}(/\quad \Delta E_T\ )$，必须在每个时间步长中迭代地重新计算陷阱密度分布$\varphi($ $\Delta E_T)$。然而，在半解析研究中，通常假设高斯分布（例如，$N_T^{(i)} = \frac{N_{Tm}}{}(i)\ \sqrt{2\pi}\sigma \exp\left[-(\Delta E_T(i)\right.$

$\left.\frac{-\Delta E_{Tm}^{\ i}}{2\sigma^2}\right]^2)()$，其中，$N_{Tm}^{(i)}$ 为第i类捕~~获位点的峰~~值密度，$\Delta E_{Tm}^{(i)}$ 为该分布的平均能量，σ 为标准差）或威布尔分布等，并不足以近似实验中捕获位点的真实分布，同时文献[157-159],中采用了如下估计

$$N_T = N_L\left(\frac{D_L}{D_{eff}} - 1\right)\exp\left(-\frac{\Delta E_T}{RT}\right) \tag{2.2.36}$$

其中，D_{eff} is 通过与 NILS扩散系数 D_L 相关的有效扩散系数 h,

$$D_{eff} = \frac{D_L}{1+\partial C_T/\partial C_L} :\rightarrow\ \frac{D_L}{D_{eff}} = 1 + (1-\theta_T)\frac{C_T}{C_L} \tag{2.2.37}$$

因此，式（2.2.30）中的 $\mathrm{d}N_T\mathrm{d}(/\quad \Delta E_T\ )$ 可表示为:

$$\frac{\mathrm{d}N_T}{\mathrm{d}(\Delta E_T)} = -\frac{N_L}{RT}\frac{(1-\theta_T)C_T}{C_L}\exp\left(-\frac{\Delta E_T}{RT}\right) \tag{2.2.38}$$

需要指出的是，在上述理论框架中，我们仅展示了理想球形夹杂的密度分布动态变化，而其他缺陷（如晶界和孪晶界）的氢捕获能力也会随局部应变场动态变化。

在此背景下，从统计学角度来看，[70, 160], 我们可以评估数值域中一个单元（承受应力 σ）的断裂概率 $\mathrm{d}\phi$ ，表示为:

$$\mathrm{d}\phi = 1 - \exp\left(-\mathrm{d}V\int_0^{\sigma} g(\Sigma)\mathrm{d}\Sigma\right) \tag{2.2.39}$$

其中，$g(\Sigma)\mathrm{d}\Sigma$ 表示单位体积内强度处于 $[\Sigma, \Sigma + \mathrm{d}\Sigma]$范围内的颗粒数；对此，一个简便且通用的表达方式是采用三参数威布尔假设 [161],

$$\int_0^{\sigma} g(\Sigma)\mathrm{d}\Sigma = \left(\frac{\sigma-\Sigma_u}{\Sigma_0}\right)^m f N_T^{(i)} \tag{2.2.40}$$

其中，m 为形状因子，Σ_0 为尺度参数，Σ_u 为强度下限（最大可行开裂颗粒的强度），f 表示单位体积内参与脱粘过程的“符合条件”颗粒所占的比例，按 Lin等人[160] 和Novak 等人[70]的建议取值为 5%。整个结构的总失效概率Φ 为,

$$\Phi = 1 - \exp\left(-\int_0^V \int_0^\sigma g(\Sigma)\mathrm{d}\Sigma\mathrm{d}V\right) \tag{2.2.41}$$

具体而言，我们采用耦合有限元（FE）框架，在每个时间步依次求解固体力学和质量传输的边值问题。该计算域采用四节点双线性等参四边形单元（Q4）进行离散，并使用2×2 高斯积分进行数值积分。然而，若要进行更精确的模拟，例如采用元胞自动机和相场技术来描述包含晶界、夹杂颗粒等的三维微观结构，则应通过在用户自定义子程序中实现式（2.2.2）和式（2.2.21）来实现HEDE机制。

2.3 阶段-III：塑性区内的氢致空洞形成

现在，让我们进入弹性核之外的塑性区，如图2所示。先前的研究[162]已经表明，空洞生长可通过空位凝聚实现，而这些空位主要由交截割阶的拖曳产生，并与位错密度存在内在关联。与此同时，在氢环境中，已有研究提出氢-空位复合体可与位错[21] 相互作用，从而促进实验中观察到的纳米空洞形成[20]。因此，此处应优先从理论上评估位错密度场，即将HRR 解纳入MSG塑性理论。

重新审视弹性-塑性材料中裂纹尖端附近应力与变形场的著名HRR 解，该解最初是在形变塑性框架下针对幂律硬化材料的I型问题建立的。首先，考虑单轴加载下的如下本构关系[163],

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = \alpha_0 \left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^n \tag{2.3.1}$$

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = \begin{cases} \sigma/\sigma_0, & \sigma < \sigma_0 \\ \alpha_0(\sigma/\sigma_0)^n, & \sigma \geq \sigma_0 \end{cases} \tag{2.3.2}$$

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = \frac{\sigma}{\sigma_0} + \alpha_0 \left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^n \tag{2.3.3}$$

其中，σ_0 和 ε_0 分别为参考应力和应变；α_0 为无量纲材料参数，n 为硬化指数。在裂纹尖端附近，上述三种应力-应变关系均可近似表示为：

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \approx \alpha_0 \left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^n \tag{2.3.4}$$

假设材料遵循J2塑性，则 [164],

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\upsilon}{E} s_{ij} + \frac{1-2\upsilon}{3E} \sigma_{kk} \delta_{ij} + \frac{3}{2} \alpha_0 \varepsilon_0 \left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right)^{n-1} \frac{s_{ij}}{\sigma_0} \tag{2.3.5}$$

其中，$\sigma_e = \sqrt{\frac{3}{2} s_{ij} s_{ij}}$ 为有效应力，偏应力张量为：

$$s_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3} \sigma_{kk} \delta_{ij} \tag{2.3.6}$$

接着，将弹性远场混合度参数定义为 [165, 166],

$$M_e = \frac{2}{\pi} \arctan \left| \lim_{r \to \infty} \frac{\sigma_{\theta\theta}(\theta=0)}{\sigma_{r\theta}(\theta=0)} \right| = \frac{2}{\pi} \arctan \left| \frac{K_I}{K_{II}} \right| \in [0,1] \tag{2.3.7}$$

而塑性近场混合度参数为：

$$M_p = \frac{2}{\pi} \arctan \left| \lim_{r \to 0} \frac{\sigma_{\theta\theta}(\theta=0)}{\sigma_{r\theta}(\theta=0)} \right| = \frac{2}{\pi} \arctan \left| \frac{\tilde{\sigma}_{\theta\theta}(\theta=0, M_p)}{\tilde{\sigma}_{r\theta}(\theta=0, M_p)} \right| \in [0,1] \tag{2.3.8}$$

对于混合 I 型+II 型载荷下的平面问题，有：

I</style））平面应
变

引入艾里应力函数，并根据相容方程推导出控制应力函数的偏微分方程后，该问题可化简为一个四阶非线性微分方程：

$$\begin{aligned} \nabla^2 \nabla^2 \phi + \frac{3\alpha_0}{4} \Big\{ \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) \left[\sigma_e^{n-1} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} \right) \right] \\ + \frac{4}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} \left[r \sigma_e^{n-1} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial \theta} \right) \right] \Big\} = 0 \end{aligned} \tag{2.3.9}$$

其中，双调和项为，

$$\begin{aligned} \nabla^2 \nabla^2 \phi = \frac{\partial^4 \phi}{\partial r^4} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial^4 \phi}{\partial r^2 \partial \theta^2} + \frac{1}{r^4} \frac{\partial^4 \phi}{\partial \theta^4} + \frac{2}{r} \frac{\partial^3 \phi}{\partial r^3} \\ - \frac{2}{r^3} \frac{\partial^3 \phi}{\partial r \partial \theta^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{4}{r^4} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^3} \frac{\partial \phi}{\partial r} \end{aligned} \tag{2.3.10}$$

方程（2.3.9）的近似解通过对半径进行级数展开，聚焦于裂纹尖端，

$$\phi(r,\theta)\sim r^s\tilde{\phi}(\theta)+r^t\tilde{\phi}_2(\theta)+\cdots \tag{2.3.11}$$

并且解可以仅限于主导首项,

$$\phi(r,\theta)=K_M^p r^s\tilde{\phi}(\theta) \tag{2.3.12}$$

由于弹性能在总能量中所占比例任意小，式(2.3.9)中的双调和项可以略去，因此化简后的式(2.3.9)关于θ 成为齐次的，并可表示为关于s的特征值方程,

$$\begin{aligned}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}-n(s-2)(n(s-2)+2)\right)\left\{\tilde{\sigma}_e^{n-1}\left[s(2-s)\tilde{\phi}+\frac{\mathrm{d}^2\tilde{\phi}}{\mathrm{d}\theta^2}\right]\right\}\\ +4(s-1)(n(s-2)+1)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\tilde{\sigma}_e^{n-1}\frac{\mathrm{d}\tilde{\phi}}{\mathrm{d}\theta}\right)=0\end{aligned} \tag{2.3.13}$$

考虑到所采用的记号，我们可以将上述式(2.3.13)改写为,

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}-a_1\right)\left[\tilde{\sigma}_e^{n-1}\left[a_2\tilde{\phi}+\frac{\mathrm{d}^2\tilde{\phi}}{\mathrm{d}\theta^2}\right]\right]+a_3\frac{d}{d\theta}\left(\tilde{\sigma}_e^{n-1}\frac{\mathrm{d}\tilde{\phi}}{\mathrm{d}\theta}\right)=0 \tag{2.3.14}$$

其中,

$$\tilde{\sigma}_e^2=\frac{3}{4}\left(a_2\tilde{\phi}+\frac{\mathrm{d}^2\tilde{\phi}}{\mathrm{d}\theta^2}\right)^2+a_4\left(\frac{\mathrm{d}\tilde{\phi}}{\mathrm{d}\theta}\right)^2 \tag{2.3.15}$$

式中,

$$\begin{cases}a_1=n(s-2)[n(s-2)+2]\\ a_2=s(2-s)\\ a_3=4(s-1)[n(s-2)+1]\\ a_4=3(1-s)^2\end{cases} \tag{2.3.16}$$

非线性四阶微分特征值方程式(2.3.14)通过变换为一阶微分方程组来求解,

$$\begin{cases}\frac{d\tilde{\phi}}{d\theta}=\tilde{\phi}_1\\ \frac{d\tilde{\phi}_1}{d\theta}=\tilde{\phi}_2\\ \frac{d\tilde{\phi}_2}{d\theta}=\tilde{\phi}_3\\ \frac{d\tilde{\phi}_3}{d\theta}=\varphi(\tilde{\phi},\tilde{\phi}_1,\tilde{\phi}_2,\tilde{\phi}_3)\end{cases} \tag{2.3.17}$$

其中,

$$\begin{aligned}\varphi(\tilde{\phi},\tilde{\phi}_1,\tilde{\phi}_2,\tilde{\phi}_3) = &-\left[\frac{3}{4}n(a_2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2)^2 + a_4\tilde{\phi}_1^2\right]^{-1}\\ &\times\{\tilde{\sigma}_e^2[(a_2-a_1+a_3)\tilde{\phi}_2 - a_1a_2\tilde{\phi}]\\ &+\frac{n-3}{2}\varphi_1(a_2\tilde{\phi}_1+\tilde{\phi}_3)+\frac{n-1}{2}(a_2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2)\\ &\times\left[\frac{3}{2}(a_2\tilde{\phi}_1+\tilde{\phi}_3)^2+\frac{3}{2}(a_2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2)a_2\tilde{\phi}_2+2a_4(\tilde{\phi}_2^2+\tilde{\phi}_1\tilde{\phi}_3)\right]\\ &+\frac{n+1}{2}\varphi_1(a_2\tilde{\phi}_1+\tilde{\phi}_3)+a_3\frac{n-1}{2}\varphi_1\tilde{\phi}_1\\ &+\frac{1}{\tilde{\sigma}_e^2}\frac{(n-3)(n-1)}{4}\varphi_1^2(a_2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2)\}\end{aligned} \tag{2.3.18}$$

and,

$$\varphi_1(\tilde{\phi},\tilde{\phi}_1,\tilde{\phi}_2,\tilde{\phi}_3) = \frac{3}{2}(a_2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2)(a_2\tilde{\phi}_1+\tilde{\phi}_3)+2a_4\tilde{\phi}_1\tilde{\phi}_2 \tag{2.3.19}$$

无量纲位移场的分量为,

$$\begin{cases}\tilde{u}_r(\theta) = \frac{3}{4}(n+1)\tilde{\sigma}_e^{n-1}[a_2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2]\\ \tilde{u}_\theta(\theta) = \frac{n+1}{n}\left[\frac{d\tilde{u}_r}{d\theta} - 3\tilde{\sigma}_e^{n-1}(1-s)\cdot\tilde{\phi}_1\right]\end{cases} \tag{2.3.20}$$

其中,

$$\begin{cases}\frac{d\tilde{u}_r}{d\theta} = \frac{3(n+1)}{4}\tilde{\sigma}_e^{n-3}\left[\frac{n-1}{2}\varphi_1(a_2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2)+\tilde{\sigma}_e^2(a_2\tilde{\phi}_1+\tilde{\phi}_3)\right]\\ \tilde{u}_\theta - \frac{d\tilde{u}_r}{d\theta} = \frac{1}{n}\frac{d\tilde{u}_r}{d\theta} - 3\frac{n+1}{n}\tilde{\sigma}_e^{n-1}(1-s)\tilde{\phi}_1\\ \tilde{u}_r + \frac{d\tilde{u}_\theta}{d\theta} = (s-2)\tilde{u}_r\end{cases} \tag{2.3.21}$$

II）平面应力

与平面应变条件的分析类似，平面应力情况下控制应力函数的方程为:

$$\begin{aligned}&\nabla^2\nabla^2\phi + \frac{\alpha_0}{2}\left\{r^{-1}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left[\sigma_e^{n-1}\left(2r\frac{\partial^2\phi}{\partial r^2}-\frac{\partial\phi}{\partial r}-r^{-1}\frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2}\right)\right]\right.\\ &+6r^{-2}\frac{\partial^2}{\partial r\partial\theta}\left[\sigma_e^{n-1}r\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{-1}\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\right)\right]\\ &+r^{-1}\frac{\partial}{\partial r}\left[\sigma_e^{n-1}\left(-2r^{-1}\frac{\partial\phi}{\partial r}-2r^{-2}\frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial r^2}\right)\right]\\ &\left.+r^{-2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\left[\sigma_e^{n-1}\left(-\frac{\partial^2\phi}{\partial r^2}+2r^{-1}\frac{\partial\phi}{\partial r}+2r^{-2}\frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2}\right)\right]\right\} = 0\end{aligned} \tag{2.3.22}$$

其中，双调和项 $\nabla^4\phi$ （表示弹性应变贡献）可以省略，因为其指数为 r^{s-2}，而塑性部分的第一项包含 r^{ns-2}。如果 $n>0$，则有 $s-2>$

$ns-2$。因此，塑性分量的第一项比弹性分量具有更高的奇异性，这意味着当 $r\to 0$ 时，可以合理地省略双调和项，

$$\begin{aligned}&\left[n(s-2)-\frac{d^2}{d\theta^2}\right]\cdot\left[\tilde{\sigma}_e^{n-1}\left(s(s-3)\tilde{\phi}-2\frac{d^2\tilde{\phi}}{d\theta^2}\right)\right]\\&+n(s-2)[n(s-2)+1]\cdot\tilde{\sigma}_e^{n-1}\left[s(2s-3)\tilde{\phi}-\frac{d^2\tilde{\phi}}{d\theta^2}\right]\\&+6(s-1)[n(s-2)+1]\frac{d}{d\theta}\left(\tilde{\sigma}_e^{n-1}\cdot\frac{d\tilde{\phi}}{d\theta}\right)=0\end{aligned}\tag{2.3.23}$$

其中，

$$\tilde{\sigma}_e^2=s^2(s^2-3s+3)\tilde{\phi}^2+3(s-1)^2\tilde{\phi}_1^2+\tilde{\phi}_2^2+s(3-s)\tilde{\phi}\tilde{\phi}_2\tag{2.3.24}$$

上述关于s 的特征值方程可以转化为一个线性常微分方程组，该方程组是s、 $\tilde{\phi}$ 及其导数的函数，即，

$$\begin{cases}\frac{d\tilde{\phi}}{d\theta}=\tilde{\phi}_1\\\frac{d\tilde{\phi}_1}{d\theta}=\tilde{\phi}_2\\\frac{d\tilde{\phi}_2}{d\theta}=\tilde{\phi}_3\\\frac{d\tilde{\phi}_3}{d\theta}=\psi\left(\tilde{\phi},\tilde{\phi}_1,\tilde{\phi}_2,\tilde{\phi}_3\right)\end{cases}\tag{2.3.25}$$

其中，

$$\begin{aligned}\psi\left(\tilde{\phi},\tilde{\phi}_1,\tilde{\phi}_2,\tilde{\phi}_3\right)=&\left(b_{10}\tilde{\phi}^2+b_{11}\tilde{\phi}_1^2+b_{12}\tilde{\phi}_2^2+b_{13}\tilde{\phi}\tilde{\phi}_2\right)^{-1}\\&\times\left\{\tilde{\sigma}_e^2\left(b_1\tilde{\phi}+b_2\tilde{\phi}_2\right)+\left(b_3\tilde{\phi}+b_4\tilde{\phi}_2\right)[b_5\varphi_1^2/\tilde{\sigma}_e^2\right.\\&+b_6\left(b_1\tilde{\phi}_1^2+\tilde{\phi}\tilde{\phi}_2\right)+b_7\tilde{\phi}_2^2+2\tilde{\phi}_3^2+b_8\tilde{\phi}_1\tilde{\phi}_3\big]\\&\left.+\psi_1\left[b_9\tilde{\phi}_1-2(n-1)\tilde{\phi}_3\right]\right\}\end{aligned}\tag{2.3.26}$$

且，

$$\begin{aligned}\psi_1=&2s^2(s^2-3s+3)\tilde{\phi}\tilde{\phi}_1+(5s^2-9s+6)\tilde{\phi}_1\tilde{\phi}_2\\&+2\tilde{\phi}_2\tilde{\phi}_3+s(3-s)\tilde{\phi}\tilde{\phi}_3\end{aligned}\tag{2.3.27}$$

其中，

$$
\begin{aligned}
&b_1 = -ns(s-2)^2[3+n(2s-3)],\\
&b_2 = s(s-3)+n(s-3)[3+n(s-2)]-6(s-1)[1+n(s-2)]\\
&b_3 = s(s-3)(n-1)/2, b_4 = 1-n,\\
&b_5 = (n-3)/2, b_6 = 2s^2(s^2-3s+3),\\
&b_7 = 5s^2-9s+6, b_8 = 4s^2-6s+6,\\
&b_9 = (n-1)\{s(s-3)-3(s-1)[n(s-2)+1]\},\\
&b_{10} = 2s^2(s^2-3s+3)+s^2(s-3)^2(n-1)/2,\\
&b_{11} = 6(1-s)^2, b_{12} = 2n, b_{13} = 2ns(3-s)
\end{aligned}
\tag{2.3.28}
$$

无量纲径向位移和切向位移为:

$$
\begin{cases}
\tilde{u}_r(\theta) = \frac{1}{n(s-2)+1}\tilde{\sigma}_e^{n-1}\left\{s(3-s)\frac{\tilde{\phi}}{2}+\tilde{\phi}_2\right\}\\
\tilde{u}_\theta(\theta) = \frac{n+1}{n}\left[\frac{d\tilde{u}_r(\theta)}{d\theta}-3\tilde{\sigma}_e^{n-1}(1-s)\tilde{\phi}_1\right]
\end{cases}
\tag{2.3.29}
$$

其中,

$$
\begin{cases}
\frac{d\tilde{u}_r(\theta)}{d\theta} = \frac{\tilde{\sigma}_e^{n-1}}{n(s-2)+1}\left\{\frac{(n-1)\psi_1}{2\tilde{\sigma}_e^2}\left[\frac{s(3-s)}{2}\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2\right]+\frac{s(3-s)}{2}\tilde{\phi}_1+\tilde{\phi}_3\right\}\\
\frac{d\tilde{u}_\theta(\theta)}{d\theta} = \tilde{\sigma}_e^{n-1}\left[s\left(s-\frac{3}{2}\right)\tilde{\phi}-\frac{1}{2}\tilde{\phi}_2\right]-\tilde{u}_r(\theta)
\end{cases}
\tag{2.3.30}
$$

将上述无量纲位移分量代入以下缩放积分，可得:

$$
I_n(\theta,\theta^*,n) = \int_{-\pi}^{\pi}\Omega(\theta,\theta^*,n)\mathrm{d}\theta
\tag{2.3.31}
$$

and,

$$
\begin{aligned}
\Omega(\theta,\theta^*,n) = &\frac{n}{n+1}\tilde{\sigma}_e^{n+1}\cos\theta\\
-\left[\tilde{\sigma}_{rr}\left(\tilde{u}_\theta-\frac{\mathrm{d}\tilde{u}_r}{\mathrm{d}\theta}\right)-\tilde{\sigma}_{r\theta}\left(\tilde{u}_r+\frac{\mathrm{d}\tilde{u}_\theta}{\mathrm{d}\theta}\right)\right]&\sin\theta\\
-\frac{1}{n+1}(\tilde{\sigma}_{rr}\tilde{u}_r+\tilde{\sigma}_{r\theta}\tilde{u}_\theta)&\cos\theta
\end{aligned}
\tag{2.3.32}
$$

Shih [166] 证明，在纯 I 型（或纯 II 型）下，塑性应力强度因子 K_M^p 可利用 Rice 的 J 积分直接表示为相应的弹性应力强度因子（即 K_I 和 K_{II}）的函数。同样，在混合 I+II 型小范围屈服条件下，K_M^p 也可表示为 J 积分的函数,

$$
J = \frac{(K_I^2+K_{II}^2)}{E'} = \frac{\alpha_0\sigma_0^2}{E'}I_n(\theta^*)\left(K_M^p\right)^{n+1}
\tag{2.3.33}
$$

and,

$$K_M^p = \left[\frac{(K_I^2+K_{II}^2)}{\alpha_0\sigma_0^2 I_n(\theta^*)}\right]^{1/(n+1)} \tag{2.3.34}$$

其中，$E' = E$ 对于平面应力，$E' = E/(1-\upsilon^2)$ 对于平面应变，θ^* 为裂纹扩展方向角，α 和 n 为式（2.3.1）~（2.3.4）中定义的硬化参数。弹性应力强度因子 K_I 和 K_{II} 定义如下：

$$\begin{cases} K_I = \frac{\sigma\sqrt{\pi a}}{2}[1+\eta-(1-\eta)\cos 2\Theta] \\ K_{II} = \frac{\sigma\sqrt{\pi a}}{2}(1-\eta)\sin 2\Theta \end{cases} \tag{2.3.35}$$

对于图3所示的应力控制加载下的宏观构型，Shlyannikov [165], 中，K_I 和K_{II} 受本研究第一阶段 K_r^p 求解结果的约束，因此，将式（2.1.39）代入式（2.3.34），即可得到塑性应力强度因子 $K_M^p = \left[\frac{K_r^2}{\alpha_0\sigma_0^2 I_n(\theta^*)}\right]^{1/(n+1)}$。然而，在科学与工程领域探索更一般的情形时，图3所示的构型仍是最常用的构型。

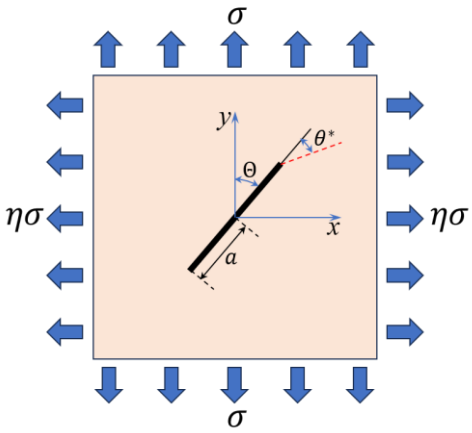


图3. 全局坐标系与加载模式[165]。

III</style））求解非线性特征值问题的数值迭代方法

为求解非线性特征值方程，采用打靶法和有限差分法进行迭代求解。然而，打靶法及其变体不适用于混合模态分析。Shlyannikov 提出了一种采用有限差分过程的更准确方法 [167]，并获得了精度极高且收敛速度非常快的解。方程组 (2.3.17) 和方程组 (2.3.25) 的有限差分形式如下：

$$\begin{cases}\tilde{\phi}_{i+1}-\tilde{\phi}_i=\frac{\Delta\theta_i}{2}\left(\tilde{\phi}_{1,i+1}+\tilde{\phi}_{1,i}\right)\\ \tilde{\phi}_{1,i+1}-\tilde{\phi}_{1,i}=\frac{\Delta\theta_i}{2}\left(\tilde{\phi}_{2,i+1}+\tilde{\phi}_{2,i}\right)\\ \tilde{\phi}_{2,i+1}-\tilde{\phi}_{2,i}=\frac{\Delta\theta_i}{2}\left(\tilde{\phi}_{3,i+1}+\tilde{\phi}_{3,i}\right)\\ \tilde{\phi}_{3,i+1}-\tilde{\phi}_{3,i}=\frac{\Delta\theta_i}{2}\left(\varphi_{i+1}+\varphi_i\right)\end{cases} \tag{2.3.36}$$

其中，$i=1,\ \ldots,\ i_{max}$，且 i_{max} 是区间 $-\pi\le\theta\le\pi$ 内节点的数量。积分步长 $\Delta\theta_i=\theta_{i+1}-\theta_i$ 以适当方式变化。因此，求解非线性方程组 (2.3.17) 和 (2.3.25)，转化为求代数方程组 (2.3.36) 的根。

在描述方程(2.3.17)和方程(2.3.25)的解之前，我们将针对同一系统构造柯西问题。假设已知第 v 次迭代的近似解，则系统方程(2.3.17)和方程(2.3.25)中的最后一个方程可视为关于相对变量的一个非线性方程，即考虑第 (v+1) 次迭代中的 i+1 节点，

$$\begin{aligned}\Phi\left(\tilde{\phi}_{3,i+1}^{v+1}\right)\equiv\tilde{\phi}_{3,i+1}^{v+1}-\tilde{\phi}_{3,i}-\{&\varphi_{i+1}\left(\tilde{\phi}_{i+1}\left(\tilde{\phi}_{3,i+1}^{v+1}\right),\tilde{\phi}_{1,i+1}\left(\tilde{\phi}_{3,i+1}^{v+1}\right),\tilde{\phi}_{2,i+1}\left(\tilde{\phi}_{3,i+1}^{v+1}\right),\tilde{\phi}_{3,i+1}^{v+1}\right)\\ &+\varphi_i\left(\tilde{\phi}_i,\tilde{\phi}_{1,i},\tilde{\phi}_{2,i},\tilde{\phi}_{3,i}\right)\}\frac{\Delta\theta_i}{2}=0\end{aligned} \tag{2.3.37}$$

其中，需要注意的是，在 i+1 节点处，

$$\begin{cases}\varphi_{i+1}\equiv\varphi_{i+1}\left(\tilde{\phi}_{i+1},\tilde{\phi}_{1,i+1},\tilde{\phi}_{2,i+1},\tilde{\phi}_{3,i+1}^{v+1}\right)\\ \tilde{\phi}_{i+1}\equiv\tilde{\phi}_{i+1}\left(\tilde{\phi}_{3,i+1}^{v+1}\right)\\ \tilde{\phi}_{1,i+1}\equiv\tilde{\phi}_{1,i+1}\left(\tilde{\phi}_{3,i+1}^{v+1}\right)\\ \tilde{\phi}_{2,i+1}\equiv\tilde{\phi}_{2,i+1}\left(\tilde{\phi}_{3,i+1}^{v+1}\right)\end{cases} \tag{2.3.38}$$

其中，数值 $\tilde{\phi}_{i+1},\tilde{\phi}_{1,i+1},\tilde{\phi}_{2,i+1}$ 通过方程(2.3.17)或方程(2.3.25)表示，

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}_{2,i+1}^{(v+1)}&=\tilde{\phi}_{2,i}+\frac{\Delta\theta_i}{2}\left(\tilde{\phi}_{3,i+1}^{(v+1)}+\tilde{\phi}_{3,i}\right)\\ \tilde{\phi}_{1,i+1}^{(v+1)}&=\tilde{\phi}_{1,i}+\frac{\Delta\theta_i}{2}\left[2\tilde{\phi}_{2,i}+\frac{\Delta\theta_i}{2}\left(\tilde{\phi}_{3,i+1}^{(v+1)}+\tilde{\phi}_{3,i}\right)\right]\\ \tilde{\phi}_{i+1}^{(v+1)}&=\tilde{\phi}_i+\frac{\Delta\theta_i}{2}\left\{2\tilde{\phi}_{1,i}+\frac{\Delta\theta_i}{2}\left[2\tilde{\phi}_{2,i}+\frac{\Delta\theta_i}{2}\left(\tilde{\phi}_{3,i+1}^{(v+1)}+\tilde{\phi}_{3,i}\right)\right]\right\}\end{aligned} \tag{2.3.39}$$

上述方程（2.3.39）采用牛顿法求解，具体细节见参考文献 [167]。随后，受 MSG塑性理论 [168]，的启发，我们可以根据裂纹尖端附近的应变场推导出位错密度场，如下所示：

I) 平面应变

应变场为:

$$\begin{cases}\varepsilon_{rr}=(\sigma_{rr}-\upsilon\sigma_{\theta\theta})/E+\frac{3}{4}\alpha_0\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right)^{n-1}(\sigma_{rr}-\sigma_{\theta\theta})/E\\ \varepsilon_{\theta\theta}=(\sigma_{\theta\theta}-\upsilon\sigma_{rr})/E+\frac{3}{4}\alpha_0\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right)^{n-1}(\sigma_{\theta\theta}-\sigma_{rr})/E\\ \varepsilon_{r\theta}=(1+\upsilon)\sigma_{r\theta}/E+\frac{3}{2}\alpha_0\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right)^{n-1}\sigma_{r\theta}/E\end{cases} \tag{2.3.40}$$

在渐近意义下，与塑性分量相比，弹性分量在应变场中可以忽略，因此有:

$$\begin{cases}\varepsilon_{rr}\cong\varepsilon_{rr}^{p}=\frac{3}{4}\alpha_0\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right)^{n-1}(\sigma_{rr}-\sigma_{\theta\theta})/E\\ \varepsilon_{\theta\theta}\cong\varepsilon_{\theta\theta}^{p}=\frac{3}{4}\alpha_0\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right)^{n-1}(\sigma_{\theta\theta}-\sigma_{rr})/E\\ \varepsilon_{r\theta}\cong\varepsilon_{r\theta}^{p}=\frac{3}{2}\alpha_0\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right)^{n-1}\sigma_{r\theta}/E\end{cases} \tag{2.3.41}$$

其中，混合模式弹塑性应力分布的主导奇异性解为:

$$\begin{cases}\sigma_{rr}=K_M^p r^{s-2}\tilde{\sigma}_{rr}(\theta)=K_M^p r^{s-2}\left(s\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2\right)\\ \sigma_{\theta\theta}=K_M^p r^{s-2}\tilde{\sigma}_{\theta\theta}(\theta)=K_M^p r^{s-2}\cdot s\cdot(1-s)\tilde{\phi}\\ \sigma_{r\theta}=K_M^p r^{s-2}\tilde{\sigma}_{r\theta}(\theta)=K_M^p r^{s-2}(1-s)\tilde{\phi}_1\end{cases} \tag{2.3.42}$$

并且，有效应力为:

$$\sigma_e=K_M^p r^{s-2}\tilde{\sigma}_e(\theta) \tag{2.3.43}$$

其中，角分布函数 $\tilde{\sigma}_e(\theta)$ 已在前文的公式（2.3.15）中定义。因此，塑性应变场可重写为:

$$\begin{cases}\varepsilon_{rr}^{p}=\frac{3\alpha_0 K_M^p}{4E}\left(\frac{K_M^p}{\sigma_0}\right)^{n-1}r^{n(s-2)}f_{rr}(\theta)\\ \varepsilon_{\theta\theta}^{p}=\frac{3\alpha_0 K_M^p}{4E}\left(\frac{K_M^p}{\sigma_0}\right)^{n-1}r^{n(s-2)}f_{\theta\theta}(\theta)\\ \varepsilon_{r\theta}^{p}=\frac{3\alpha_0 K_M^p}{2E}\left(\frac{K_M^p}{\sigma_0}\right)^{n-1}r^{n(s-2)}f_{r\theta}(\theta)\end{cases} \tag{2.3.44}$$

其中，角分布函数为,

$$\begin{cases}f_{rr}(\theta)=\tilde{\sigma}_e^{n-1}\left(s^2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2\right)\\ f_{\theta\theta}(\theta)=-f_{rr}(\theta)\\ f_{r\theta}(\theta)=\tilde{\sigma}_e^{n-1}(1-s)\tilde{\phi}_1\end{cases} \tag{2.3.45}$$

II) 平面应力

类似地，应变场如下，

$$\begin{cases}\varepsilon_{rr}=(\sigma_{rr}-\upsilon\sigma_{\theta\theta})/E+\alpha_0\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right)^{n-1}\left(\sigma_{rr}-\frac{\sigma_{\theta\theta}}{2}\right)/E\\ \varepsilon_{\theta\theta}=(\sigma_{\theta\theta}-\upsilon\sigma_{rr})/E+\alpha_0\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right)^{n-1}\left(\sigma_{\theta\theta}-\frac{\sigma_{rr}}{2}\right)/E\\ \varepsilon_{r\theta}=\sigma_{r\theta}/2\mu+\frac{3}{2}\alpha_0\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right)^{n-1}\sigma_{r\theta}/E\end{cases} \tag{2.3.46}$$

其中，塑性分量为：

$$\begin{cases}\varepsilon_{rr}^{p}=\alpha_0\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right)^{n-1}\left(\sigma_{rr}-\frac{\sigma_{\theta\theta}}{2}\right)/E\\ \varepsilon_{\theta\theta}^{p}=\alpha_0\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right)^{n-1}\left(\sigma_{\theta\theta}-\frac{\sigma_{rr}}{2}\right)/E\\ \varepsilon_{r\theta}^{p}=\frac{3}{2}\alpha_0\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right)^{n-1}\sigma_{r\theta}/E\end{cases} \tag{2.3.47}$$

其中，应力场的形式与式（2.3.42）相同，而其 $\tilde{\sigma}_e(\theta)$ 已在前文式（2.3.24）中定义。因此，塑性应变场可改写为：

$$\begin{cases}\varepsilon_{rr}^{p}=\frac{\alpha_0K_M^p}{E}\left(\frac{K_M^p}{\sigma_0}\right)^{n-1}r^{n(s-2)}g_{rr}(\theta)\\ \varepsilon_{\theta\theta}^{p}=\frac{\alpha_0K_M^p}{E}\left(\frac{K_M^p}{\sigma_0}\right)^{n-1}r^{n(s-2)}g_{\theta\theta}(\theta)\\ \varepsilon_{r\theta}^{p}=\frac{3\alpha_0K_M^p}{2E}\left(\frac{K_M^p}{\sigma_0}\right)^{n-1}r^{n(s-2)}g_{r\theta}(\theta)\end{cases} \tag{2.3.48}$$

其中，角分布函数为：

$$\begin{cases}g_{rr}(\theta)=\tilde{\sigma}_e^{n-1}\left[\frac{s(1+s)}{2}\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2\right]\\ g_{\theta\theta}(\theta)=\tilde{\sigma}_e^{n-1}\left[s\left(\frac{1}{2}-s\right)\tilde{\phi}-\frac{\tilde{\phi}_2}{2}\right]\\ g_{r\theta}(\theta)=\tilde{\sigma}_e^{n-1}(1-s)\tilde{\phi}_1\end{cases} \tag{2.3.49}$$

III) 位错密度的解析计算

在MSG塑性理论中，[168, 169], 有效塑性应变梯度定义为[170],

$$\eta^p=\sqrt{c_1\eta_{iik}^p\eta_{jjk}^p+c_2\eta_{ijk}^p\eta_{ijk}^p+c_3\eta_{ijk}^p\eta_{kji}^p} \tag{2.3.50}$$

其中，系数分别确定为$c_1 = 0$、 $c_2 = 1/4$和$c_3 = 0$。因此，上述式（2.3.50）可改写为：

$$\eta^p = \frac{1}{2}\sqrt{\boldsymbol{\eta}^p \boldsymbol{\eta}^p} \tag{2.3.51}$$

其中，三阶应变梯度张量的各分量可表示为：

$$\eta^p_{ijk} = \nabla\varepsilon^p_{ik,j} + \nabla\varepsilon^p_{jk,i} - \nabla\varepsilon^p_{ij,k} \text{ ; with } i,j,k \in \{r,\theta\} \tag{2.3.52}$$

其中， ∇ 表示柱坐标系 (r, θ, z) 中适用于物理分量的协变导数，该坐标系是二维极坐标系 (r, θ) 的推广。Fleck 和 Hutchinson 给出了 HRR场的应变梯度张量，如下所示：[169],

$$\eta_{ijk} = \ell^{-1}\mathcal{Y}_0 \left(\frac{J}{\Sigma_0 \mathcal{Y}_0 C_n r}\right)^{n/(n+1)} \tilde{\eta}_{ijk}(\theta, n) \tag{2.3.53}$$

然而，他们并未给出各分量的具体表达式。这里，参照附录 B 中详细介绍的张量场梯度公式，给出塑性应变梯度张量的 6 个平面内分量如下：

$$\begin{cases} \eta^p_{rrr} = \frac{\partial \varepsilon^p_{rr}}{\partial r} \\ \eta^p_{\theta\theta r} = 2\left(\frac{\partial \varepsilon^p_{r\theta}}{r\partial\theta} + \frac{\varepsilon^p_{rr} - \varepsilon^p_{\theta\theta}}{r}\right) - \frac{\partial \varepsilon^p_{\theta\theta}}{\partial r} \\ \eta^p_{r\theta r} = \frac{\partial \varepsilon^p_{rr}}{r\partial\theta} - \frac{2\varepsilon^p_{r\theta}}{r} \\ \eta^p_{rr\theta} = 2\frac{\partial \varepsilon^p_{r\theta}}{\partial r} - \left(\frac{\partial \varepsilon^p_{rr}}{r\partial\theta} - \frac{2\varepsilon^p_{r\theta}}{r}\right) \\ \eta^p_{\theta\theta\theta} = \frac{\partial \varepsilon^p_{\theta\theta}}{r\partial\theta} + \frac{2\varepsilon^p_{r\theta}}{r} \\ \eta^p_{r\theta\theta} = \frac{\partial \varepsilon^p_{\theta\theta}}{\partial r} \end{cases} \tag{2.3.54}$$

a) 平面应变

具体而言，令 $\beta_0 = \frac{3\alpha_0 K^p_M}{4E}\left(\frac{K^p_M}{\sigma_0}\right)^{n-1}$ 和 $m = n(s-2)$，对于平面应变，我们有：

$$\begin{cases}\eta_{rrr}^{p}=m\beta_0 r^{m-1}f_{rr}(\theta)\\ \eta_{\theta\theta r}^{p}=\beta_0 r^{m-1}[4f'_{r\theta}(\theta)+f_{rr}(\theta)-(m+1)f_{\theta\theta}(\theta)]\\ \eta_{r\theta r}^{p}=\beta_0 r^{m-1}[f'_{rr}(\theta)-4f_{r\theta}(\theta)]\\ \eta_{rr\theta}^{p}=\beta_0 r^{m-1}[4(m+1)f_{r\theta}(\theta)-f'_{rr}(\theta)]\\ \eta_{\theta\theta\theta}^{p}=\beta_0 r^{m-1}[f'_{\theta\theta}(\theta)+4f_{r\theta}(\theta)]\\ \eta_{r\theta\theta}^{p}=m\beta_0 r^{m-1}f_{\theta\theta}(\theta)\end{cases} \tag{2.3.55}$$

其中，角函数的一阶导数为：

$$\begin{aligned}f'_{rr}(\theta)=&\left[\frac{3}{4}\left(a_2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2\right)^2+a_4\tilde{\phi}_1^2\right]^{(n-1)/2}\left(s^2\tilde{\phi}_1+\tilde{\phi}_3\right)\\&+\frac{n-1}{2}\left(s^2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2\right)\left[\frac{3}{4}\left(a_2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2\right)^2+a_4\tilde{\phi}_1^2\right]^{(n-3)/2}\\&\times\left[\frac{3}{2}\left(a_2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2\right)\left(a_2\tilde{\phi}_1+\tilde{\phi}_3\right)+2a_4\tilde{\phi}_1\tilde{\phi}_2\right]\end{aligned} \tag{2.3.56}$$

$$f'_{\theta\theta}(\theta)=-f'_{rr}(\theta) \tag{2.3.57}$$

$$\begin{aligned}f'_{r\theta}(\theta)=&(1-s)\tilde{\phi}_2\left[\frac{3}{4}\left(a_2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2\right)^2+a_4\tilde{\phi}_1^2\right]^{(n-1)/2}\\&+\frac{n-1}{2}(1-s)\tilde{\phi}_1\left[\frac{3}{4}\left(a_2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2\right)^2+a_4\tilde{\phi}_1^2\right]^{(n-3)/2}\\&\times\left[\frac{3}{2}\left(a_2\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2\right)\left(a_2\tilde{\phi}_1+\tilde{\phi}_3\right)+2a_4\tilde{\phi}_1\tilde{\phi}_2\right]\end{aligned} \tag{2.3.58}$$

b) 平面应力

同样，对于平面应力，令 $\beta_0=\frac{3\alpha_0K_M^p}{4E}\left(\frac{K_M^p}{\sigma_0}\right)^{n-1}$ 和 $m=n(s-2)$，则有：

$$\begin{cases}\eta_{rrr}^{p}=m\beta_0 r^{m-1}g_{rr}(\theta)\\ \eta_{\theta\theta r}^{p}=\beta_0 r^{m-1}[3g'_{r\theta}(\theta)+g_{rr}(\theta)-(m+1)g_{\theta\theta}(\theta)]\\ \eta_{r\theta r}^{p}=\beta_0 r^{m-1}[g'_{rr}(\theta)-3g_{r\theta}(\theta)]\\ \eta_{rr\theta}^{p}=\beta_0 r^{m-1}[3(m+1)g_{r\theta}(\theta)-g'_{rr}(\theta)]\\ \eta_{\theta\theta\theta}^{p}=\beta_0 r^{m-1}[g'_{\theta\theta}(\theta)+3g_{r\theta}(\theta)]\\ \eta_{r\theta\theta}^{p}=m\beta_0 r^{m-1}g_{\theta\theta}(\theta)\end{cases} \tag{2.3.59}$$

其中，角函数的导数为：

$$\begin{aligned}g'_{rr}(\theta)=&\left[\frac{s(1+s)}{2}\tilde{\phi}_1+\tilde{\phi}_3\right]\left(l_0\tilde{\phi}^2+l_1\tilde{\phi}_1^2+l_2\tilde{\phi}_2^2+l_3\tilde{\phi}\tilde{\phi}_2\right)^{(n-1)/2}\\&+\frac{n-1}{2}\left[\frac{s(1+s)}{2}\tilde{\phi}+\tilde{\phi}_2\right]\left(l_0\tilde{\phi}^2+l_1\tilde{\phi}_1^2+l_2\tilde{\phi}_2^2+l_3\tilde{\phi}\tilde{\phi}_2\right)^{(n-3)/2}\\&\times\left[2l_0\tilde{\phi}\tilde{\phi}_1+(2l_1+l_3)\tilde{\phi}_1\tilde{\phi}_2+2l_2\tilde{\phi}_2\tilde{\phi}_3+l_3\tilde{\phi}\tilde{\phi}_3\right]\end{aligned} \tag{2.3.60}$$

$$
\begin{aligned}
g'_{\theta\theta}(\theta) = &\left[s\left(\frac{1}{2}-s\right)\tilde{\phi}_1 - \frac{\tilde{\phi}_3}{2}\right]\left(l_0\tilde{\phi}^2 + l_1\tilde{\phi}_1^2 + l_2\tilde{\phi}_2^2 + l_3\tilde{\phi}\tilde{\phi}_2\right)^{(n-1)/2} \\
&+\frac{n-1}{2}\left[s\left(\frac{1}{2}-s\right)\tilde{\phi} - \frac{\tilde{\phi}_2}{2}\right]\left(l_0\tilde{\phi}^2 + l_1\tilde{\phi}_1^2 + l_2\tilde{\phi}_2^2 + l_3\tilde{\phi}\tilde{\phi}_2\right)^{(n-3)/2} \\
&\times\left[2l_0\tilde{\phi}\tilde{\phi}_1 + (2l_1+l_3)\tilde{\phi}_1\tilde{\phi}_2 + 2l_2\tilde{\phi}_2\tilde{\phi}_3 + l_3\tilde{\phi}\tilde{\phi}_3\right]
\end{aligned} \tag{2.3.61}
$$

$$
\begin{aligned}
g'_{r\theta}(\theta) = &(1-s)\tilde{\phi}_2\left(l_0\tilde{\phi}^2 + l_1\tilde{\phi}_1^2 + l_2\tilde{\phi}_2^2 + l_3\tilde{\phi}\tilde{\phi}_2\right)^{(n-1)/2} \\
&+\frac{n-1}{2}(1-s)\tilde{\phi}_1\left(l_0\tilde{\phi}^2 + l_1\tilde{\phi}_1^2 + l_2\tilde{\phi}_2^2 + l_3\tilde{\phi}\tilde{\phi}_2\right)^{(n-3)/2} \\
&\times\left[2l_0\tilde{\phi}\tilde{\phi}_1 + (2l_1+l_3)\tilde{\phi}_1\tilde{\phi}_2 + 2l_2\tilde{\phi}_2\tilde{\phi}_3 + l_3\tilde{\phi}\tilde{\phi}_3\right]
\end{aligned} \tag{2.3.62}
$$

其中，系数为：

$$
\begin{cases}
l_0 = s^2(s^2-3s+3) \\
l_1 = 3(s-1)^2 \\
l_2 = 1 \\
l_3 = s(3-s)
\end{cases} \tag{2.3.63}
$$

因此，在平面问题的数值实现中，我们可以直接将有效塑性应变梯度 η^p 写为：

$$
\eta^p = \frac{1}{2}\sqrt{\left(\eta^p_{rrr}\right)^2 + \left(\eta^p_{\theta\theta r}\right)^2 + \left(\eta^p_{r\theta r}\right)^2 + \left(\eta^p_{rr\theta}\right)^2 + \left(\eta^p_{\theta\theta\theta}\right)^2 + \left(\eta^p_{r\theta\theta}\right)^2} \tag{2.3.64}
$$

然后，根据 MSG塑性理论，几何必需位错密度（GNDs）ρ_G（晶体协调变形所需）与有效塑性应变梯度 η^p 之间的关系为：

$$
\rho_G = \tilde{r}\eta^p/b \tag{2.3.65}
$$

其中，$\tilde{r}$ 为 Nye因子，假设其约为 1.90，以考虑面心立方金属的晶体各向异性[170-172]。

统计存储位错（SSDs）的密度 ρ_S （以随机方式相互捕获）为 [170],

$$
\rho_S = \left(\frac{\sigma_{ref} f(\varepsilon^p)}{M\alpha G b}\right)^2 \tag{2.3.66}
$$

其中，σ_{ref} 为参考应力，$f(\varepsilon^p)$是等效塑性应变ε^p的无量纲函数，可由单轴应力-应变曲线给出；M 为Taylor因子，α 为取值为[0.3、0.5]的经验系数，G 为剪切模量，b 为伯格斯矢量。因此，总位错密度计算如下：

$$
\rho_D = \rho_G + \rho_S \tag{2.3.67}
$$

值得注意的是，在Thomson [128], 针对纯I型加载的另一项解析研究中，裂纹尖端附近的位错密度场表示为：

$$\rho_D = \frac{\epsilon_0}{b}\left(\frac{K_I^2\cos\theta}{\pi\sigma_0^2}\right)^{n/(1+n)}\frac{\cos 2\theta}{r^{1+n/(1+n)}} + \frac{3}{2b}\frac{n\epsilon_0}{1+n}\left(\frac{K_I^2}{\pi\sigma_0^2}\right)^{n/(1+n)}\frac{\sin\theta\sin 2\theta}{\cos^{1/(1+n)}\theta}\frac{1}{r^{1+n/(1+n)}} \tag{2.3.68}$$

其中，σ_0、 ϵ_0、 n 是以下应变硬化本构中的参数，

$$\sigma/\sigma_0 = (\epsilon/\epsilon_0)^n, \epsilon > \epsilon_0 \tag{2.3.69}$$

先前的实验 [173-175] 表明，塑性变形会导致空位过饱和，空位浓度可高达10^{-3}。正如 Noell 等人等人所综述[176], ，关于塑性变形过程中空位如何产生，主要有两种理论。Saada 提出的第一种机制[177, 178], 关注不同滑移面上的非螺位错湮灭；第二种机制则认为，螺位错与林位错相交并切过林位错后，会在螺位错上形成伯格斯矢量尺度刃位错段[162], ，并已通过大尺度原子模拟得到验证[179, 180]。

正如 Militzer 等人所示[181], ，空位浓度c_V 的净变化率为：$\mathrm{d}c_v/\mathrm{d}t = \Pi = \chi\Omega_0\sigma\dot{\varepsilon}/Q_f$，其中，$\chi$ 是无量纲常数，Ω_0 是（基体材料的）原子体积，σ是流变应力，$\dot{\varepsilon}$ 是应变速率，Q_f 是空位形成能。虽然 Taylor 关系$\sigma\sim\sqrt{\rho_D}$[182, 183] 和$\dot{\varepsilon}\sim\rho_D$ [21] 广为人知，但这表明空位生成高度依赖于位错密度ρ_D。然而，这种简单的考量并未考虑空位与其他类型微观组织相互作用引起的运动学湮灭。根据描述非平衡点缺陷（晶体基体中的空位和间隙原子）动力学的经典反应速率理论，空位和（氢）间隙原子的浓度演变如下[184],

$$\begin{cases}\dfrac{\partial c_v}{\partial t} = \mathcal{M}_v - D_v\left(S_v^\rho + S^R\right)c_v - \varkappa c_v c_i - \nabla\cdot J_v \\ \dfrac{\partial c_i}{\partial t} = \mathcal{M}_i - D_i\left(S_i^\rho + S^R\right)c_i - \varkappa c_v c_i - \nabla\cdot J_i\end{cases} \tag{2.3.70}$$

其中，$\mathrm{M}_v = \mathrm{M}_i = \mathrm{M}$ 为缺陷产生速率（~ Π 如上所推导）；$D_{v,\ i} = D_{i,\ v}^{\ 0} e^{-E_{v,\ i}^{m}/k_BT}$ 分别为空位和氢间隙原子对应的扩散率；$E_{v,\ i}^{\ m}$ 表示缺陷（空位、间隙原子）的迁移能；$S_{v,\ i}^{\ \rho}$ 分别为空位（$S_v^\rho \equiv Z_{vN}\rho_N + Z_{vV}\rho_V + Z_{vI}\rho_I$）和间隙原子的位错阱强度，其中 ρ_N 为网络位错密度（近似等于式 (2.3.67) 中定义的 ρ_D ），ρ_V 和 ρ_I 表示

空位环和间隙环的密度；此处，$Z_{\{\cdot,\cdot\}}$ 为偏好因子，其性质为：$Z_{vN} = Z_{vV} = Z_{vI} = 1, Z_{iN} = 1 + B,$ $Z_{iI} \cong Z_{iV} \cong 1 + B'$，其中，$B$ 和 $B' \geq B$ 分别为网络偏置和环偏置的超额量（$B \ll 1$）；汇强度 $S^R = 4\pi NR$ 根据空洞密度 N 及其半径 R 确定；$\varkappa = 4\pi r_0(D_v + D_i)/\Omega$ 为复合系数，由 r_0 （空位环半径）的相互作用半径、原子体积 Ω 及相应的扩散率定义；J_v 和 J_i 分别为空位和间隙原子的通量，因为这些点缺陷是可移动的物种。

需要指出的是，上述动力学方程最初是为 Kharchenko等人的辐照约定设计的[184], ，在该约定中，空位和自间隙原子会以所谓的弗伦克尔对形式同时产生，因此具有相同的产生率 M。然而，作为一阶近似，鉴于实验[185], 表明空位浓度和氢浓度通常处于同一数量级c_v，我们可以假设本研究中的空位浓度（c_i）与氢间隙原子浓度（$_i$ ）具有大致相同的产生率。尽管如此，如果已知其确切表达式并希望进行更精确的模拟，仍可灵活地将产生率 Mt写入氢浓度关于时间$_i$的动力学方程中：Mt。

在外部机械载荷、辐照等作用下，点缺陷会聚集形成空洞，并随着系统演化而生长，最终导致失效或肿胀。空洞生长（肿胀）速率为 $\dot{S} \equiv \mathrm{d}\,\mathrm{d}t\ \overline{\Delta V}\ \overline{V}$ ；当空洞密度 N 固定时，有 $\dot{S} = 4\pi NR^2\underline{\dot{R}}$。从物理上看，空洞生长速率归因于空位吸收所引起的体积变化 $4\pi D_v RNc_v$ 、间隙原子吸收所引起的体积变化$-4\pi D_i RNc_i$，以及热空位发射所引起的体积变化 $-4\pi D_v RN(c_v^e(R) - c_v^e(\infty))$；$c_v^e(R) = c_{v0}e^{R_s/}$ ^{R} 表示半径为 R 的空洞附近的平衡空位浓度，其中，$c_{v0} = e^{-E_v^f/k_BT}$ 表示平衡空位浓度，E_v^f (= 1. 53 eV for α-Fe [21])表示空位形成能， $R_s \equiv 2\gamma\Omega/k_BT$ ，γ 表示空洞的表面能， $c_v^e(\infty) = c_{v0}$ 定义了平坦表面附近的空位浓度。因此，空洞半径的动态演化可描述为：

$$\frac{\partial R}{\partial t} = \frac{1}{R}\left\{D_v\left[c_v - \left(c_v^e(R) - c_v^e(\infty)\right)\right] - D_i c_i\right\} \tag{2.3.71}$$

作为初步近似，我们暂不考虑空洞扩散。假设位错密度为常数，则可将式 (2.3.70) 和式 (2.3.71) 视为一个闭环系统。

此外，通过使用汇强度及相应的扩散率，可以分别估算空位和间隙原子的平均寿命尺度为 $\tau_{v,\ i} = (D_{v,\ i}S_{v,}^{\ \rho}{}_{i})^{-1}$。然后，通过引入扩散长度 $L_d = \sqrt{D_v\tau_v}$、标度因子 $\mu \equiv \varkappa\tau_v$、空洞汇的重整化密度 $\theta \equiv 4\pi N\Omega^{1/3}/S_v^{\rho}$,

可以将 $x \equiv \mu c_v$ 和 $y \equiv \mu c_i$ 定义为点缺陷的重整化浓度，它们随无量纲时间 $\tau \equiv t/\tau_v$ 和空间 $\boldsymbol{r}' \equiv \boldsymbol{r}/L_d$ 动态演化，产生率为 $P \equiv \mathrm{M}\mu\tau_v$。因此，主方程可以改写为以下无量纲形式，

$$\begin{cases} \partial_t x = P - (1+\theta R)x - xy - \nabla \cdot J_v \\ \partial_t y = P - \epsilon(1+\kappa\theta R)y - xy - \epsilon\nabla \cdot J_i \\ v\partial_t R = [x - (x(R) - x_0) - \kappa\epsilon y]/R \end{cases} \tag{2.3.72}$$

其中，注意到 $\tau \to t, \tilde{R} \equiv R/a \to R$ （$a = \Omega^{1/3}$ 为晶格常数），$\tilde{J}_v \equiv \mu\tau_v J_v \to J_v$ 和 $\tilde{J}_i \equiv \mu\tau_i J_i \to J_i$，$\tilde{\nabla} \equiv L_d\nabla \to \nabla$。此处无量纲参数定义为：$\epsilon \equiv \tau_v/\tau_i \gg 1, \kappa \equiv S_v^\rho/S_i^\rho < 1, v \equiv S_v^\rho \mu a^2, x_0 \equiv \mu c_{v0}$，无量纲变量 $x(\bar{R}) \equiv \mu c_v^e(R) \to x(R)$。

从物理上看，损伤率 P 始终以随机方式波动，即缺陷群体以及空洞半径的演化受随机动力学控制。基于这一逻辑，我们假设缺陷产生速率 P 围绕其平均值 P_0 波动：$P \to P(t) = P_0 + \xi(t)$，其中 $\xi(t)$ 为白噪声，其统计性质为：$\langle \xi(t) \rangle = 0$，$\langle \xi(t)\,\xi(t') \rangle = 2P_0\Sigma\delta(t-t')$，其中 Σ 为噪声强度，$\delta(t-t')$ 为狄拉克δ函数。在本研究中，对于位错介导的空位凝聚，平均缺陷产生率计算为 [181]，

$$P_0 = \mathcal{M}_0\mu\tau_v = \chi\Omega_0\bar{\sigma}\dot{\bar{\varepsilon}}/E_v^f \tag{2.3.73}$$

其中，M_0 为M的平均值，$\bar{\sigma}$ 为平均流动应力，$\dot{\bar{\varepsilon}}$ 为平均应变速率，Ω_0 （=1.18×10^{-29} m^3）为原子体积。具体而言，系数χ 表示施加应力所做的机械功中储存在所产生空位中的比例；在接近0.5T$_m$ 的高温下，其数值趋近于0.1，其中T$_m$ 为熔点[186]。如上所述，考虑到$\bar{\sigma} \sim \sqrt{\bar{\rho}_D}$ 和$\dot{\bar{\varepsilon}} \sim \bar{\rho}_D$，空位产生率$P_0$ 因而可以表示为平均位错密度$\bar{\rho}_D$的函数：$P_0 \sim \bar{\rho}_D^{3/2}$，其中$\bar{\rho}_D$ 可结合HRR和MSG理论进行评估。

在上述公式（2.3.72）中，可以发现空洞半径R是最慢模态。因此，令$\partial_t x \cong \partial_t y = 0$并仅保留最关键的贡献，可得$x \cong P/(1+\theta R)$和$y \cong P/\epsilon(1+\theta R)$，将它们代入R的微分方程后，可得到以下空洞动力学方程：

$$v\partial_t R = \frac{1}{R}\left[\frac{P(1-\kappa)}{1+\theta R} - x_0\left(e^{R_s/R} - 1\right)\right] \tag{2.3.74}$$

注意到 $P = P_0 + \xi(t)$，接下来我们考虑到涨落仅可能发生在 $P_0 \neq 0$，并为简便起见令$P \equiv P_0$，即，

$$v\partial_t R = \frac{1}{R}\left[\frac{(P_0+\xi(t))(1-\kappa)}{1+\theta R} - x_0\left(e^{R_s/R}-1\right)\right] \tag{2.3.75}$$

于是，我们得到如下朗之万方程：

$$v\partial_t R = \frac{1}{R}\left[\frac{P(1-\kappa)}{1+\theta R} - x_0\left(e^{R_s/R}-1\right)\right] + g(R)\xi(t) \tag{2.3.76}$$

其中需要指出的是 $\bar{R}_s \equiv R_s/a \to R_s$，而 $g(R) = \sqrt{1-\kappa}/(R(1+\theta R))$ 与噪声振幅有关，并满足涨落耗散定理 [184]。通过在 Stratonovich意义 [184], 下处理随机动力学，我们可以得到平均空洞尺寸，

$$v\partial_t\langle R\rangle = \langle\frac{1}{R}\left(\frac{P(1-\kappa)}{1+\theta R} - x_0\left(e^{R_s/R}\right)\right)\rangle - \Sigma P(1-\kappa)\,\langle\frac{1+2\theta R}{\left(R(1+\theta R)\right)^3}\rangle \tag{2.3.77}$$

其中，最后一项与所谓的噪声诱导漂移有关。在宏观近似下，我们可以令 $\langle A(\cdot)\rangle \cong A(\langle\cdot\rangle), \forall A$, 以估算噪声对系统动力学的影响。

$$v\partial_t\langle R\rangle = \frac{1}{\langle R\rangle}\left(\frac{P(1-\kappa)}{1+\theta\langle R\rangle} - x_0\left(e^{R_s/\langle R\rangle}\right)\right) - \Sigma P(1-\kappa)\frac{1+2\theta\langle R\rangle}{\left(\langle R\rangle(1+\theta\langle R\rangle)\right)^3} \tag{2.3.78}$$

具体而言，考虑均匀极限并排除绝热快速模 x 和 y，在上述式(2.3.78)中令 $\partial_t\langle R\rangle = 0$，即可得到临界空洞半径 R_c 的定态方程，

$$P = \frac{x_0}{1-\kappa}\frac{\left(e^{R_s/R_c}-1\right)(1+\theta R_c)}{1-\Sigma\frac{1+2\theta R_c}{R_c^2(1+\theta R_c)^2}} \tag{2.3.79}$$

在大空洞密度极限（$\theta \to \infty$）下，上述式(2.3.79)可改写为，

$$P \approx \frac{x_0}{1-\kappa}\left(e^{R_s/R_c}-1\right)(1+\theta R_c) \tag{2.3.80}$$

这对于确定性（$\Sigma = 0$）和随机性（$\Sigma \neq 0$）情形都成立。代入关系$x \cong P/(1+\theta R)$，利用展开式 $e^{R_s/R_c} \cong 1 + R_s/R_c$ 并引入空位过饱和$\Delta_x \equiv x/x_0$，即可得到临界空洞半径早期演化的表达式 $R_c = R_s/(1-\kappa)\Delta_x$。再次强调，这里对均匀系统中的快速模（点缺陷浓度 x 和 y）进行了绝热消去，其中位错和空洞均为活性汇。

为探究外部随机源对空洞尺寸增长普适性的影响，将朗之万方程 Eq.(2.3.76) 重整化为：

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = v(u) + g(u)\xi(t) \tag{2.3.81}$$

其中，$u \equiv R/R_{c0}$ 是无量纲空洞半径（在无外部影响时，$R_{c0} \equiv R_c(\beta = 0)$ 为临界半径，即 $\beta = 0$；这里引入控制参数 $\beta \equiv (1-\kappa)P/x_0$），$v(u) = (1+\beta)/u - 1/u^2 - \chi u$，$g(u) = 1/u$，而 $\xi(t)$ 是满足 $\langle \xi(t) \rangle = 0$ 且 $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\beta\Sigma\delta(t-t')$ 的高斯白噪声。正如 Kharchenko等人 [184], 所论证的，控制参数 β 会影响 χ 的特殊值，而 $v(u)$ 在 $u^* = \sqrt{(1+\beta)/3\chi}$ 处具有唯一最大值 $v(u^*) = 0$。因此，可以求得 $\chi(\beta)$ 的重整化稳态值：$\chi(\beta; t \to \infty) \equiv \chi^* = 4(1+\beta)^3/27$ [187], ，并将其用于后续计算。

需要指出的是，式 (2.3.81) 是一个带乘性噪声的随机微分方程（SDE），可写为：

$$\mathrm{d}u = v(u)\mathrm{d}t + \frac{\sqrt{2\beta\Sigma}}{u} \circ \mathrm{d}W \tag{2.3.82}$$

其中，$\circ$ 表示 Stratonovich 乘积，$\mathrm{d}W$ 是标准维纳过程（$\langle \mathrm{d}W^2 \rangle = dt$），扩散系数为 $\sigma(u) = \sqrt{2\beta\Sigma}/u$。为了使用 Lamperti 变换将乘性噪声转换为加性噪声（适用于 Stratonovich 意义），我们引入新变量 y，使扩散项变为常数：

$$y = \int_0^u \frac{\mathrm{d}u'}{\sigma(u')} = \int_0^u \frac{u'}{\sqrt{2\beta\Sigma}}\mathrm{d}u' = \frac{u^2}{2\sqrt{2\beta\Sigma}} \tag{2.3.83}$$

为简洁起见，令 $\sigma_0 = \sqrt{2\beta\Sigma}$，则 $y = u^2/2\sigma_0$。解出 u，可得 $u = \sqrt{2\sigma_0 y}$。由于该随机微分方程采用 Stratonovich 意义，链式法则可像普通微积分中一样应用：

$$\mathrm{d}y = \frac{\partial y}{\partial u} \circ du = \left(\frac{u}{\sigma_0}\right) \circ \left(v(u)\mathrm{d}t + \frac{\sigma_0}{u} \circ \mathrm{d}W\right) = \frac{v(u)u}{\sigma_0}\mathrm{d}t + dW \tag{2.3.84}$$

注意，Stratonovich 解释确保不会出现额外的 Itô 修正项；不同于 Itô 约定，后者会在漂移项中出现额外的 $-(1/2)\sigma'(u)/\sigma(u)$ 项。

将 $v(u)$ 代入式 (2.3.84)，得到具有加性噪声的变换后随机微分方程：

$$\mathrm{d}y = \frac{1}{\sigma_0}[(1+\beta) - u^{-1} - \chi u^2]\mathrm{d}t + \mathrm{d}W \tag{2.3.85}$$

通过对上述式 (2.3.85) 进行数值求解，可以获得空洞动力学的随机轨迹。

接下来，我们将考察晶格弹性变形所导致的点缺陷系统中的空间不稳定性形成。缺陷通量的形式为：

$$\begin{cases} J_v = -D_v[(1-\varepsilon c_v)\nabla c_v - \eta_v \nabla^3 c_v] \\ J_i = -D_i[(1-\varepsilon c_i)\nabla c_i - \eta_i \nabla^3 c_i] \end{cases} \tag{2.3.86}$$

其中，弹性相互作用强度为 $\varepsilon = K\Omega^{-1}{\varpi_v}^2{}_i/k_BT$，$K = E/3(1-2\upsilon)$ 为体积模量，$|\varpi_{v,\ i}| \approx a^3 \approx \Omega$ 为膨胀参数（$\varpi_v < 0, \varpi_i > 0$）。因此，$\varepsilon$ 可改写为 $\varepsilon \approx K\Omega/k_BT$。将 $c_v \equiv x/\mu$ 和 $c_i \equiv y/\mu$ 代入上述方程，并分别乘以参数$\mu\tau_v$，即可得到重整化通量：

$$\begin{cases} J_v = -L_d[(1-\varepsilon' x)\nabla x - \eta_v' \nabla^3 x] \\ J_i = -L_d[(1-\varepsilon' y)\nabla y - \eta_i' \nabla^3 y]\kappa\epsilon \end{cases} \leftrightarrow \begin{cases} J_v \equiv L_d \tilde{J}_v \\ J_i \equiv L_d \tilde{J}_i \kappa\epsilon \end{cases} \tag{2.3.87}$$

其中，$\varepsilon' = \varepsilon/\mu$，$\eta_{v,}{}'_i = \eta_{v,\ i}/L_d^2$。然后，通过将$\boldsymbol{r}$ 空间中的算子∇ 变换为重整化$\boldsymbol{r}'$空间中的算子 $\frac{1}{L_d}\tilde{\nabla}$，我们可以得到，

$$\begin{cases} \nabla \cdot J_v \leftrightarrow \tilde{\nabla} \cdot \tilde{J}_v \\ \nabla \cdot J_i \leftrightarrow \kappa\epsilon \tilde{\nabla} \cdot \tilde{J}_i \end{cases} \tag{2.3.88}$$

即，记号$\tilde{*}$ 表示将变量$*$ 在实数空间中的运算变换到重整化空间。因此，我们有如下重整化主方程，

$$\begin{cases} \partial_t x = P - (1+\theta R)x - xy + \tilde{\nabla} \cdot \left[(1-\varepsilon' x)\tilde{\nabla} x - \eta_v' \tilde{\nabla}^3 x\right] + \xi(t) \\ \partial_t y = P - \epsilon(1+\kappa\theta R)y - xy + \kappa\epsilon \tilde{\nabla} \cdot \left[(1-\varepsilon' y)\tilde{\nabla} y - \eta_i' \tilde{\nabla}^3 y\right] + \xi(t) \\ v\partial_t R = [x - (x(R) - x_0) - \kappa\epsilon y]/R \end{cases} \tag{2.3.89}$$

其中，重整化纳布拉算子 $\tilde{\nabla} = (\partial/\partial x,\ \partial/\partial y,\ \partial/\partial z)$是一个向量，拉普拉斯算子 $\tilde{\Delta} \equiv \tilde{\nabla}^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$，因此标量函数$\varphi$ 的三阶导数为，

$$\tilde{\nabla}^3 \varphi \equiv \tilde{\nabla}\left(\tilde{\nabla}^2 \varphi\right) \equiv \tilde{\nabla}\left(\tilde{\Delta}\varphi\right) = \begin{pmatrix} \partial\left(\tilde{\Delta}\varphi\right)/\partial x \\ \partial\left(\tilde{\Delta}\varphi\right)/\partial y \\ \partial\left(\tilde{\Delta}\varphi\right)/\partial z \end{pmatrix} \tag{2.3.90}$$

为避免与二维数值实现中的 xOy坐标系混淆，我们分别将 x 和 y 改写为 $\tilde{c}_v$ 和 $\tilde{c}_i$，

$$\begin{cases} \partial_t \tilde{c}_v = P - (1+\theta R)\tilde{c}_v - \tilde{c}_v\tilde{c}_i + \tilde{\nabla} \cdot \left[(1-\varepsilon'\tilde{c}_v)\tilde{\nabla}\tilde{c}_v - \eta_v' \tilde{\nabla}^3 \tilde{c}_v\right] + \xi(x,y,t) \\ \partial_t \tilde{c}_i = P - \epsilon(1+\kappa\theta R)\tilde{c}_i - \tilde{c}_v\tilde{c}_i + \kappa\epsilon \tilde{\nabla} \cdot \left[(1-\varepsilon'\tilde{c}_i)\tilde{\nabla}\tilde{c}_i - \eta_i' \tilde{\nabla}^3 \tilde{c}_i\right] + \xi(x,y,t) \\ v\partial_t R = \left[\tilde{c}_v - \tilde{c}_{v0}\left(e^{\tilde{R}_s/R} - 1\right) - \kappa\epsilon\tilde{c}_i\right]/R \end{cases} \tag{2.3.91}$$

需要注意的是，快速模 $\tilde{c}_v(x,y,t)$ 和 $\tilde{c}_i(x,y,t)$ 是空间坐标 (x, y) 和时间 t 的函数，而最慢模态 R 的形式为，

$$v\partial_t\langle R\rangle = \left[\langle\tilde{c}_v\rangle - \tilde{c}_{v0}\left(e^{\tilde{R}_s/\langle R\rangle}-1\right) - \kappa\epsilon\langle\tilde{c}_i\rangle\right]/\langle R\rangle \tag{2.3.92}$$

其中，系综平均〈R〉 = 〈R〉(t)、〈$\tilde{c}_v$〉 = 〈$\tilde{c}_v$〉(t)和〈$\tilde{c}_i$〉 = 〈$\tilde{c}_i$〉(t)仅是时间t的函数。或者，也可以采用如下形式的朗之万方程，

$$v\partial_t R = \frac{1}{R}\left[\frac{P(1-\kappa)}{1+\theta R} - \tilde{c}_{v0}\left(e^{\tilde{R}_s/R}-1\right)\right] + g(R)\xi(t) \tag{2.3.93}$$

上述随机偏微分方程（SPDE）在尺寸为128l×128l的二次网格上求解，并采用周期边界条件；网格尺寸为l = 0.5，时间步长为Δt = 0.0001。

基于上文建立的理论体系，我们在此可以绘制一幅图，以展示当前HERB方案所涉及的多种氢脆机制在多个时空尺度上的协同作用，如图4所示。

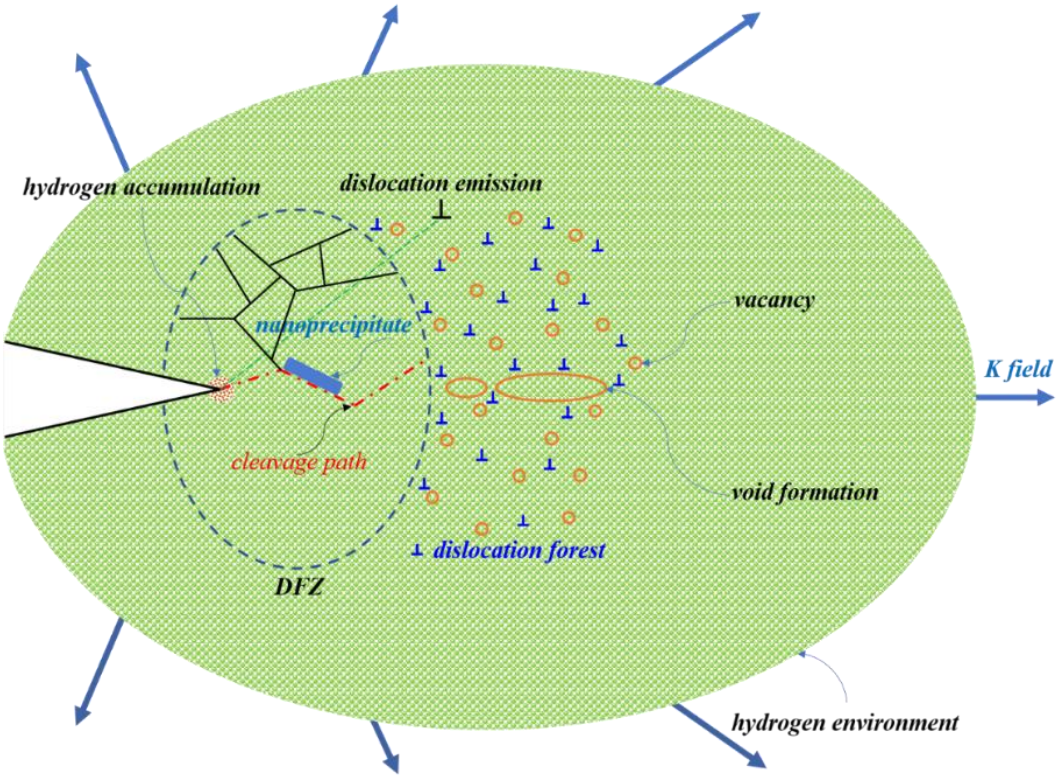


图4. HERB方案整体示意图。

表 1. 体心立方铁的材料参数 [104]。

伯格斯矢量，b (Å)	2.4825	参考文献 [93]
剪切模量，μ (吉帕)	69.3	参考文献 [93]
泊松比 ，υ	0.291	参考文献 [93]
表面能，γ_{surf} (J/m^2)	2.37	参考文献 [92]
$\gamma_{surf}/\gamma_{usf}$	2.2（弗伦克尔） 3.2（嵌入原子法）	参考文献 [92]
德拜温度，T_D (K)	477（0 K 时） 373（298 K 时）	参考文献[188] 参考文献[189]
表面无序化温度，T_m (K)	1811	参考文献 [190]

3. 结果

本节将从氢环境下裂纹尖端的位错发射出发，阐述多种氢脆机制如何在整个氢脆过程中被共同激活。

3.1 氢环境下的位错发射

定义混合度参数 $M_e = K_{II}/K_I$，图 5 展示了混合 I型+II 型加载下位错从裂纹尖端发射的能量学特征。如图 5a 所示，当作用于位错的总作用力等于 0 时的临界值 K_I 随混合度增加。然而，各种情况下的能量极大值（即临界 K_I 处的能量）几乎相同。这一结果表明了本理论的自洽性，因为位错发射所需的激活能与加载模式无关。体心立方铁的材料参数列于表 1，钝裂纹的尖端半径为 $\rho/b = 10$，并假设位错发射距离为 $r = b$ 。

为了通过 TST 研究速率依赖性，我们进一步拟合力大于 0 时的能量曲线部分，并求解最可能（约化）应力强度因子 K_r^p，如图 6 所示。结果表明，K_r^p 的值显著受混合度 M_e 影响。一般而言，随着氢浓度 c_H 增加，K_r^p 也会增大。然而，情况并非总是如此，例如在纯 I 型加载下（即 M_e =0），相对较低速率时，c_H = 1000 原子百万分率情形的约化应力强度因子 K_r^p 大于 c_H = 100 原子百万分率情形；但在较高速率下则呈现相反趋势。

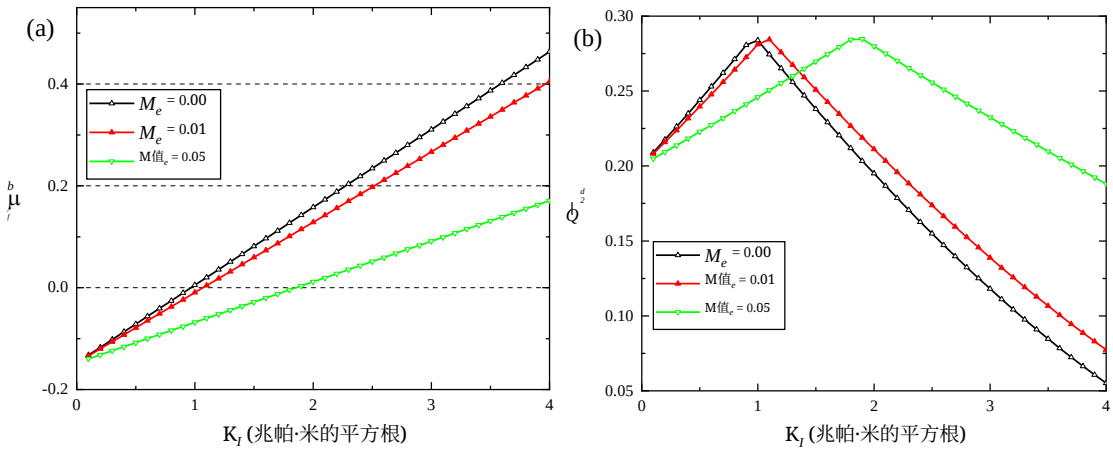


图 5. 混合I型+II加载下的激活能。(a) 归一化力$f/\mu b$ 与外加I型应力强度因子K_I的关系；(b) 归一化活化能$\tilde{Q}_{2d} = (1-\upsilon)Q_{2d}/\mu b^2$ 与K_I的关系，其中μ 为剪切模量，b 为伯格斯矢量的大小，υ 为泊松比。氢浓度设定为c_H = 100 原子百万分率，滑移角在此为θ = 8° 。

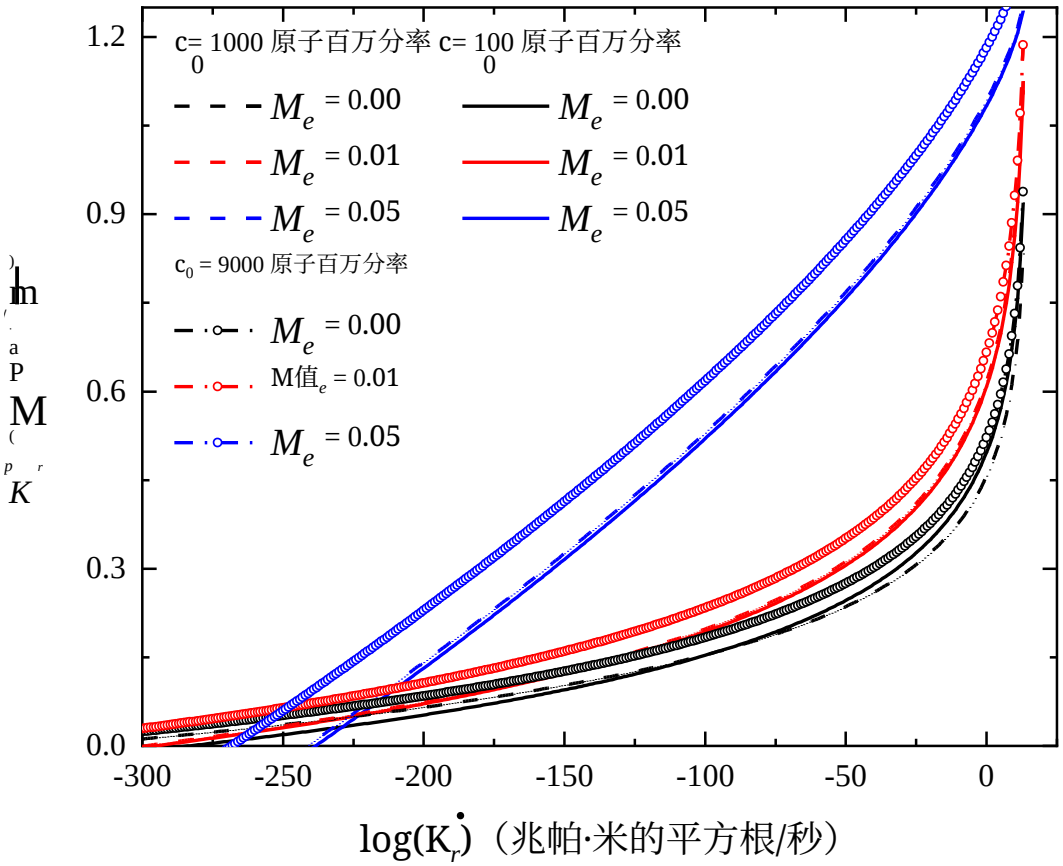


图 6. 最可能（约化）应力强度因子K_r^p 随加载速率在不同氢浓度下的变化。滑移角在此设定为θ =8° 。

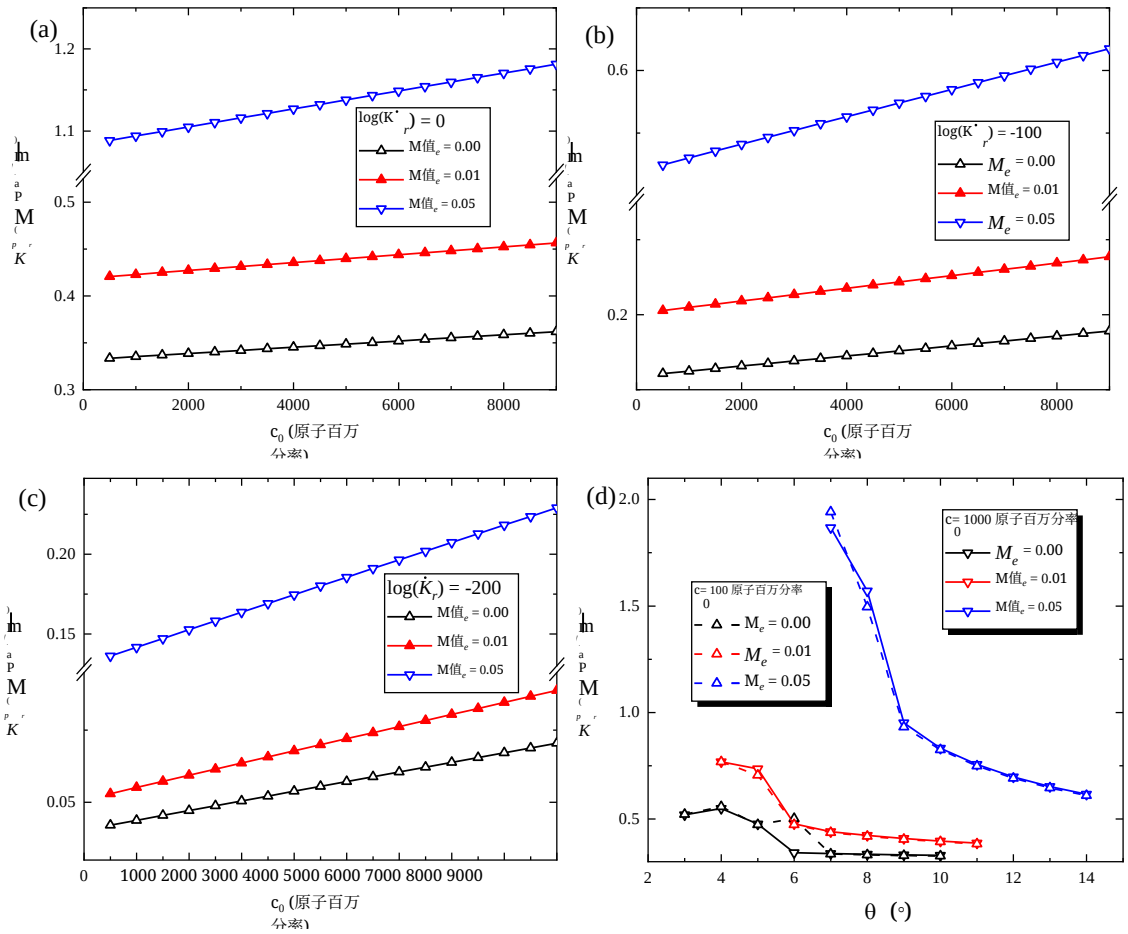


图 7. 平面应力条件下，不同加载速率时最可能（约化）应力强度因子 K_r^p 随远场氢浓度 c_0 的变化：(a) $\log(\dot{K}_r) = 0$ 兆帕√m/s；(b) $\log(\dot{K}_r) = -100$ 兆帕√m/s；(c) $\log(\dot{K}_r) = -200$ 兆帕√m/s。此处滑移角设为 $\theta = 8°$。(d) 恒定加载速率 $\log(\dot{K}_r) = 0$ 兆帕√m/s 下，最可能（约化）应力强度因子 K_r^p 与滑移角 θ 的关系。

如图 7 所示，最可能（约化）应力强度因子 K_r^p 通常随氢浓度 c_H 几乎线性增加。令 $K_{II}^p = M_e K_I^p$，并将其代入式 (2.1.39)，可得最可能的（外加）I 型应力强度因子 K_I^p 为 $K_I^p = K_r^p/\sqrt{1+M_e^2}$。因此，位错发射所需的最可能 I 型应力强度因子 K_I^p 只需按约化应力强度因子 K_r^p进行缩放；根据式 (2.1.39) 的定义，这实际上等价于 J 积分（$J = (K_I^2 + K_{II}^2)/E'$，其中平面应力和应变条件下分别有 $E' = E$ 和 $E/(1-\upsilon^2)$）。

到目前为止，我们讨论的都是平面应力条件下的位错发射。图 A1（见附录 A）展示了平面应变条件下的结果；除了 K_r^p 值略有差异（甚至可以忽略）外，其余结果几乎与平面应力条件下的结果相同。

需要指出的是，以上所有结果均基于如下假设进行评估：不稳定层错能 γ_{usf} 不受氢充入的影响（见表 1）。然而，原子模拟（见附录 C）表明，金属中的氢浓度 c_H 可能会对 γ_{usf} 产生显著影响。假设二者呈线性相关 $\gamma_{usf} = \gamma_{usf}^0 + k \cdot c_H$ （其中，γ_{usf}^0 恰为表 1 中未充氢试样所用的不稳定层错能，而 k 为拟合参数），并且不失一般性，我们对斜率 k开展参数研究，平面应力情况下的结果如图 8 所示。结果发现，对于 $M_e = 0.00$ 的情形，最可能的应力强度因子 K_r^p 会随不稳定层错能斜率 k 的增大而增大。

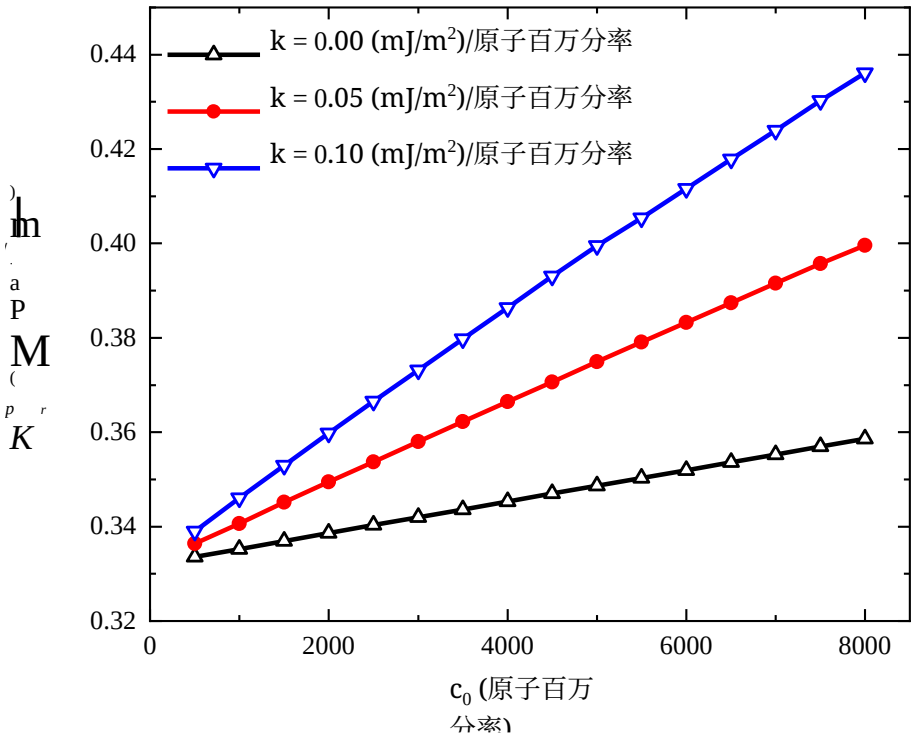


图 8. 在平面应力条件下，当 $M_e = 0.00$ 时，不同不稳定层错能斜率 k 对应的最可能（约化）应力强度因子 K_r^p 随远场氢浓度 c_0 的变化。

3.2 裂纹尖端附近瞬态无位错区内的氢输运

在瞬态弹性核心（即无位错区）内计算氢输运方程之前，我们需要使用式 (2.2.1) 评估其尺寸。假设广义 Ramberg–Osgood（RO）本构定律的大应变极限成立：

$$\frac{\tilde{\sigma}}{\sigma_0} = \left(\frac{E\tilde{\varepsilon}_p}{\beta\sigma_0}\right)^n \tag{4.2.1}$$

其中，$\tilde{\sigma}$ 为有效应力（$=\sqrt{3s_{ij}s_{ij}/2}$，其中 s_{ij} 为应力偏量），σ_0 为单轴屈服应力，$\tilde{\varepsilon}_p$ 为有效塑性应变（$=\sqrt{3\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij}/2}$），$E$ 为杨氏模量，~~n 为加工~~硬化指数，β 为数量级为 1 的经验前因子（在原始 RO 公式中为 = 3/7）。式 (2.2.1) 可重新归一化为：

$$\frac{R_c}{b} = \xi\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right)^2 \frac{E}{\sigma_0}\left(\frac{W_{ad}}{\sigma_0 b}\right)^{-1} \tag{4.2.2}$$

图9给出了归一化弹性核心尺寸R_c/b 随归一化黏附功$W_{ad}/\sigma_0 b$的变化关系，其中杨氏模量为 E = 200 吉帕，屈服应力为σ_0 = 300 兆帕。结果表明，平面应变下的DFZ尺寸大于平面应力下的DFZ尺寸，且DFZ尺寸随α的增大而增大。即使对于相对较小的值$\alpha = 0.5$，在归一化粘附功为$W_{ad}/\sigma_0 b = 0.5$时，归一化DFZ尺寸（R_c/b）在平面应变和平面应力下分别约为1.1×10^4 和0.49×10^4。因此，根据式(2.2.20)，可以预期沿晶断裂的弹性核心尺寸大于穿晶解理的弹性核心尺寸，而根据式(2.2.2)，氢的引入会进一步增大该尺寸。

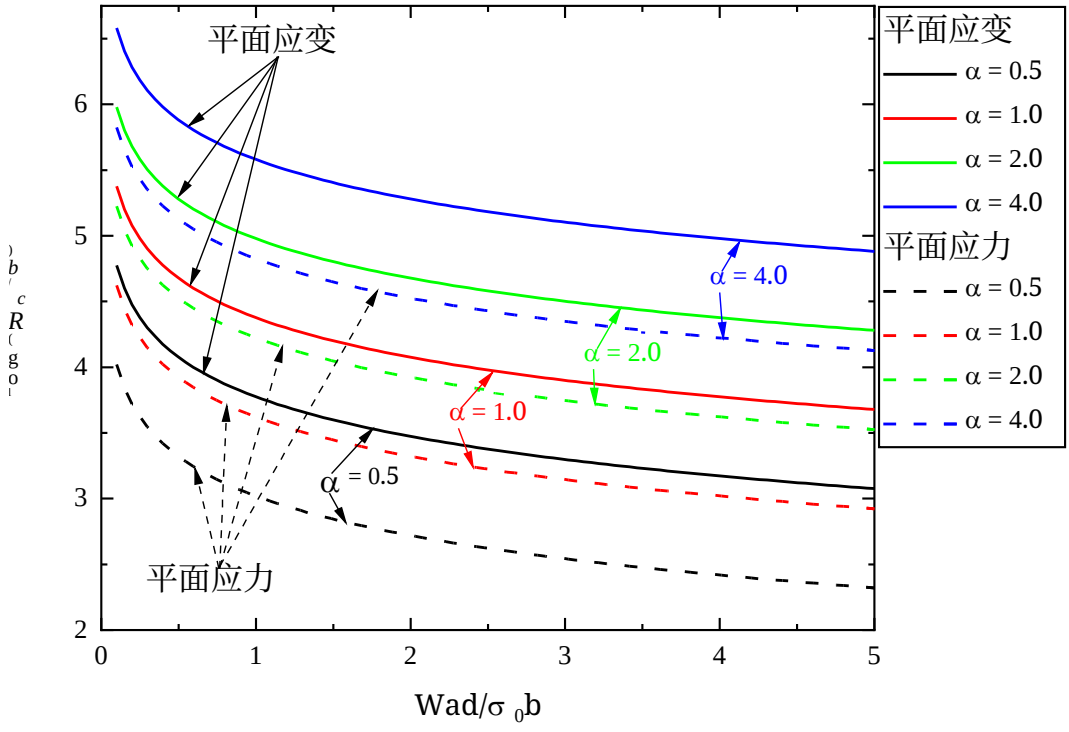


图9. 粘附功与弹性核心尺寸的变化关系。υ = 0.3 表示平面应变条件。

表2. 平面应变条件下加载的体心立方铁晶间解理各向异性线弹性断裂力学参数（单位：10^{-3}/吉帕），更多详情见参考文献[104]。

索引	取向	p_1	p_2	q_1	q_2
#1	(112)/[1$\bar{1}$0]	9.2859	-0.3134	1.6121	7.5348
#2	(111)/[1$\bar{1}$0]	13.0878	0.8761	-0.5444	5.0467
#3	(114)/[1$\bar{1}$0]	0.3880	0.3880	4.4901	4.4901
#4	(221)/[1$\bar{1}$0]	3.5750	3.5750	0.8813	0.8813
#5	(113)/[1$\bar{1}$0]	3.8058	-0.3102	3.0627	6.5005
#6	(332)/[1$\bar{1}$0]	8.2325	2.1959	-0.3929	2.7287
#7	(223)/[1$\bar{1}$0]	12.5168	0.1591	0.7090	6.8899
#8	(334)/[1$\bar{1}$0]	13.2862	0.3638	0.3067	6.4217
#9	(116)/[1$\bar{1}$0]	-0.6764	-0.6764	3.8875	3.8875
#10	(552)/[1$\bar{1}$0]	2.4688	2.4688	0.8504	0.8504
#11	(118)/[1$\bar{1}$0]	-1.0218	-1.0218	3.4829	3.4829
#12	(335)/[1$\bar{1}$0]	11.5017	-0.0239	1.0557	7.2239

考虑到裂纹路径可能反映在无位错区内，我们计算了平面应变意义下的各向异性线弹性断裂力学参数，如表2所示。为简洁起见，此处不评估相应的平面应力情形，其数学细节可见参考文献[191, 192]。不失一般性，此处仍仅考虑各向同性材料情形，读者可借助式(2.2.13)–(2.2.16)将本分析方便地推广至各向异性情形。根据Anderson的著作[193],，我们评估了冯·米塞斯等效应力（式(2.2.17)）和体积应变的角向分布，如图10所示。研究发现，II型加载下的归一化冯·米塞斯应力$\bar{\sigma}_{vm}$总体上大于I型加载（见图10-(a)）。图10-(b)表明，在II型加载下，体积应变在裂纹尖端附近会发生急剧转变，平面应变情形尤为明显。式(2.2.30)在40×40 μm的域内数值求解，时间步长取为Δt = 0.001 s，网格尺寸取为Δl = 0.2 μm，一条边缘裂纹位于左侧中心线上，其尖端位于域中心。材料参数设定为：杨氏模量E = 207 吉帕，泊松比υ =0.3，伯格斯矢量b = 0.25 nm，NILS扩散率D_L = 1.5×10^{-8} m^2/s，并假定夹杂颗粒具有相同半径r = 1 μm，环境温度T = 300 K。

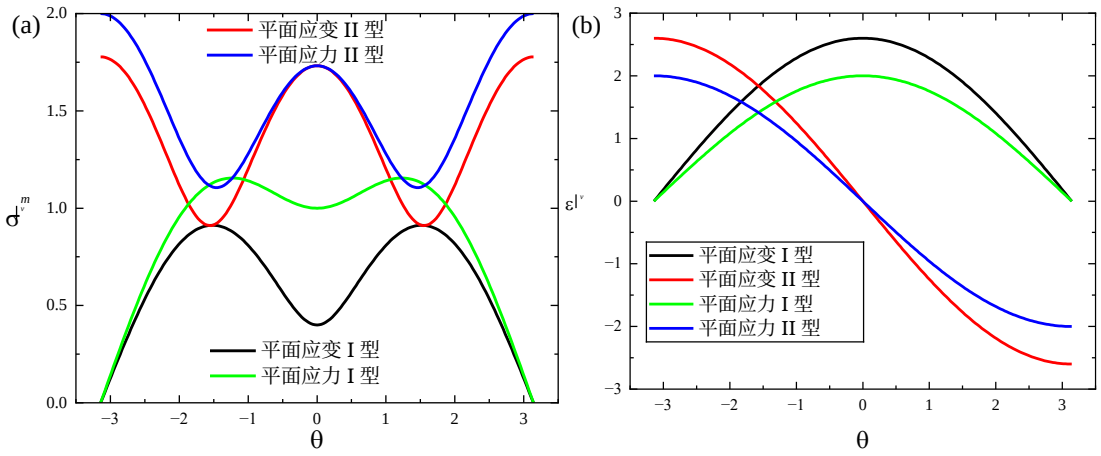


图10。（a）归一化冯·米塞斯应力的角向分布 $\bar{\sigma}_{vm}$ （= $\sigma_{vm}\sqrt{2\pi r}/K_I$，或 $\sigma_{vm}\sqrt{2\pi r}/K_{II}$，分别对应 I 型或 II 型加载），（b）归一化体积应变的角向分布 $\bar{\varepsilon}_v$ （= $\varepsilon_v E\sqrt{2\pi r}/(1-2\upsilon)K_I$，或 $\varepsilon_v E\sqrt{2\pi r}/(1-2\upsilon)K_{II}$，分别对应 I 型或 II 型加载）。

图 11 展示了平面应变情形下，以恒定加载速率 $\dot{K}_I$ 进行 I 型加载时，裂纹尖端附近应力分量和氢浓度的分布。结果与 Sofronis 和 McMeeking [151] 以及 Krom 等人 [149], 的研究结果吻合良好，其中对称轴（θ = 0°，即韧带）上的 NILS 氢浓度 C_L 起初增加，并在距裂纹尖端一定距离处达到最大值。

图 12 展示了平面应变条件下 I型加载的结果。与 I型加载的对应情况不同，II型加载下的氢浓度分布并不呈对称分布。

图 13 和图 14 分别展示了平面应力条件下 I型和 II型加载的结果。氢浓度呈现出与相应平面应变情况相似的特征，但数值有所不同。

值得注意的是，在施加载荷达到 $K_{I,\ II}$ = 2.5 兆帕$\sqrt{\text{m}}$ 之前，平面应变条件下的 II型加载情形中会出现负的捕获氢浓度 C_T ，因为尖锐裂纹一侧出现了极大的（压缩）应变（见图10-(b)）。C_T 的负值表明氢原子受到强烈排斥，无法进入压缩区域。然而，如果基于电子显微断层成像和三维电子背散射衍射实验构建真实的基于微观结构的有限元模型，则不会出现这一现象 [194], ；这是因为其中不会存在（数学意义上的）尖锐裂纹，裂纹尖端处集中的应变会通过塑性变形得到释放。

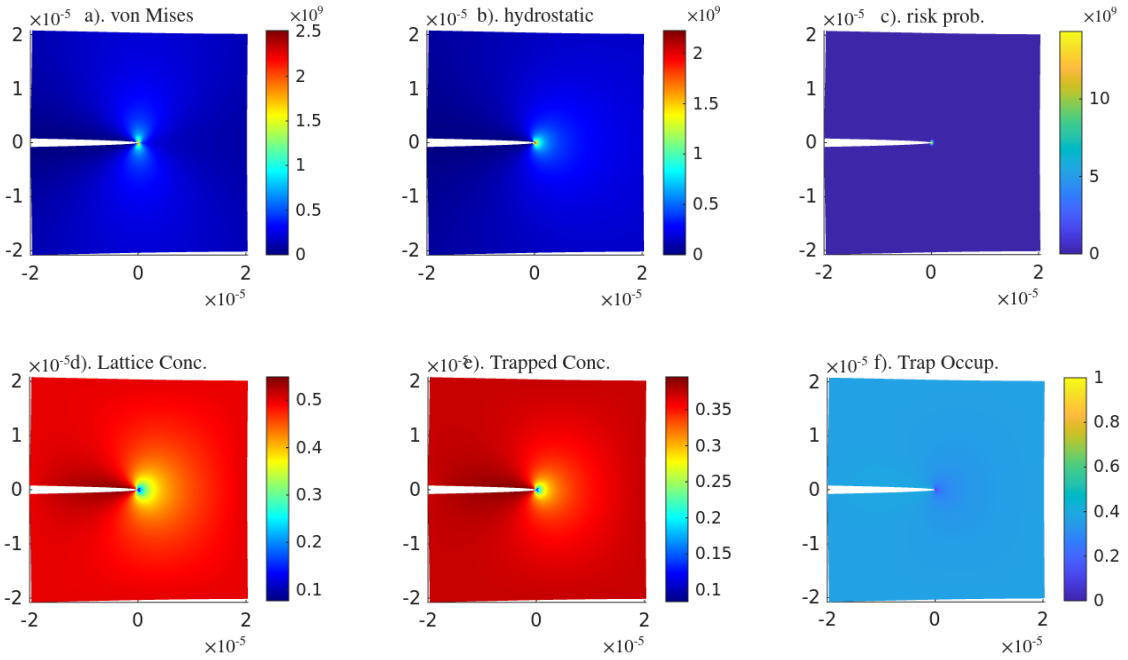


图 11. 加载速率为 K_I = 0.5 兆帕√m/s 时，t = = 5 s 平面应变 I型加载下的耦合裂纹尖端场与氢输运。(a) 冯·米塞斯应力 σ_{vm}；(b) 静水应力 σ_H；(c) 风险概率 dϕ；(d) NILS 氢浓度 c_L；(e) 捕获氢浓度 c_T；(f) 捕获位点氢占有率 θ_T。本图采用国际单位制（SI）。

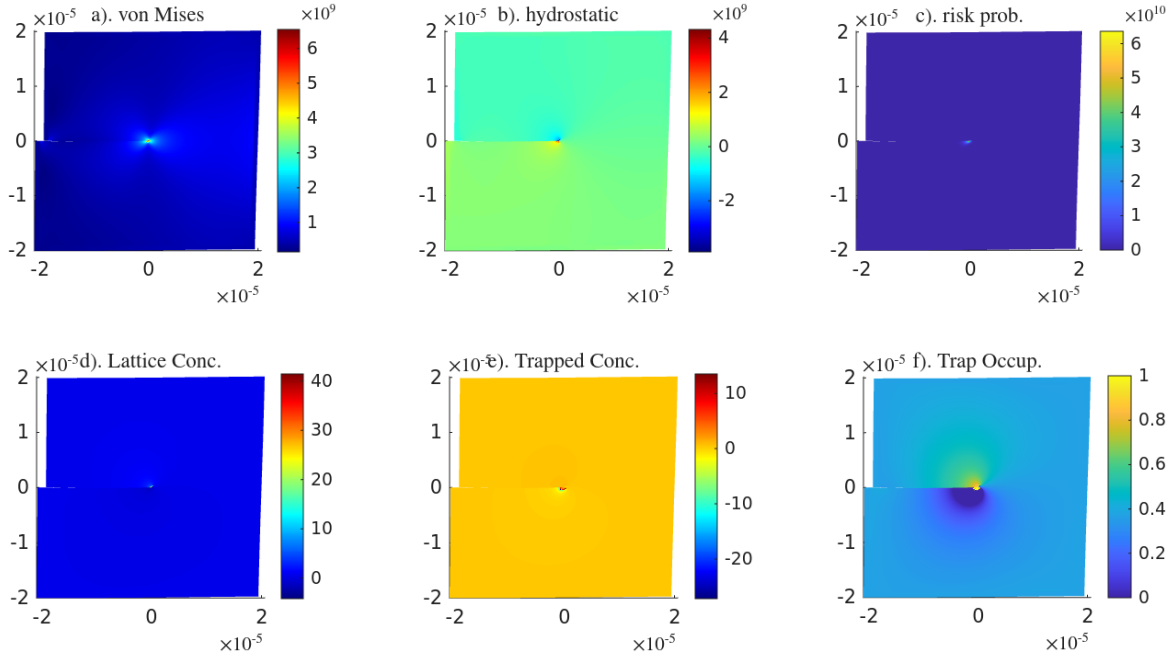


图 12. 加载速率为 K_{II} = 0.5 兆帕√m/s 时，t = = 5 s 平面应变 II型加载下的耦合裂纹尖端场与氢输运。(a) 冯·米塞斯应力 σ_{vm}；(b) 静水应力 σ_H；(c) 风险概率 dϕ；(d) NILS 氢浓度 c_L；(e) 捕获氢浓度 c_T；(f) 捕获位点氢占有率 θ_T。本图采用国际单位制（SI）。

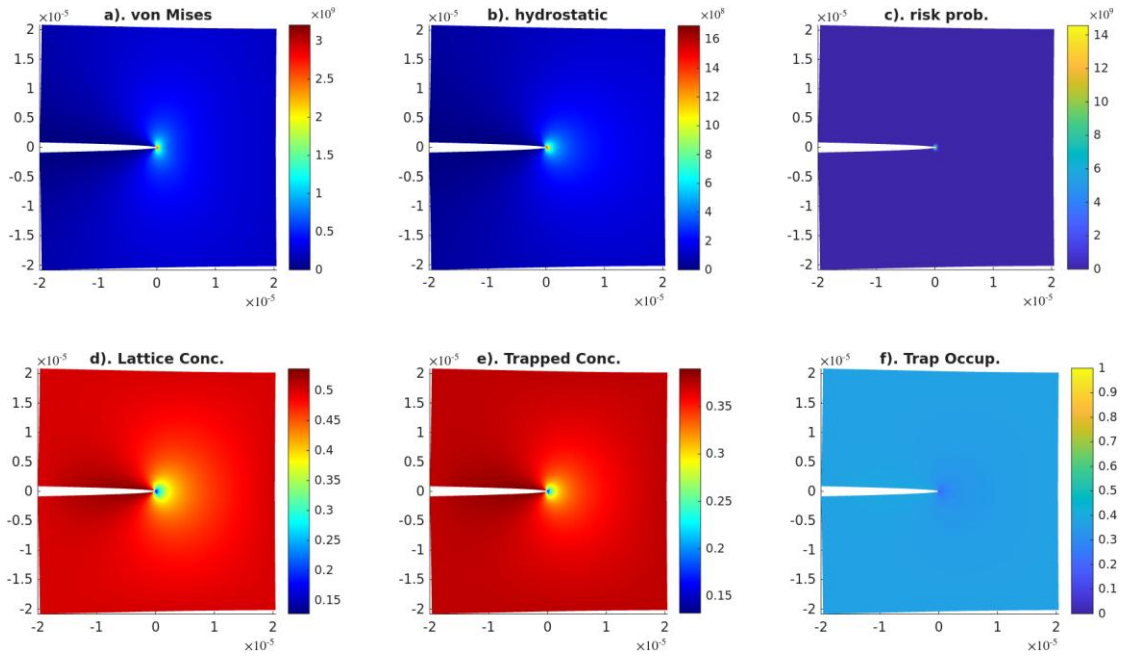


图 13. 加载速率为 K_I = 0.5 兆帕√米/秒时，t = 5 秒平面应力 I型加载下的耦合裂纹尖端场与氢输运。(a) 冯·米塞斯应力 σ_{vm}；(b) 静水应力 σ_H；(c) 风险概率 dϕ；(d) NILS 氢浓度 c_L；(e) 捕获氢浓度c_T；(f) 捕获位点氢占有率 θ_T。本图采用国际单位制（SI）。

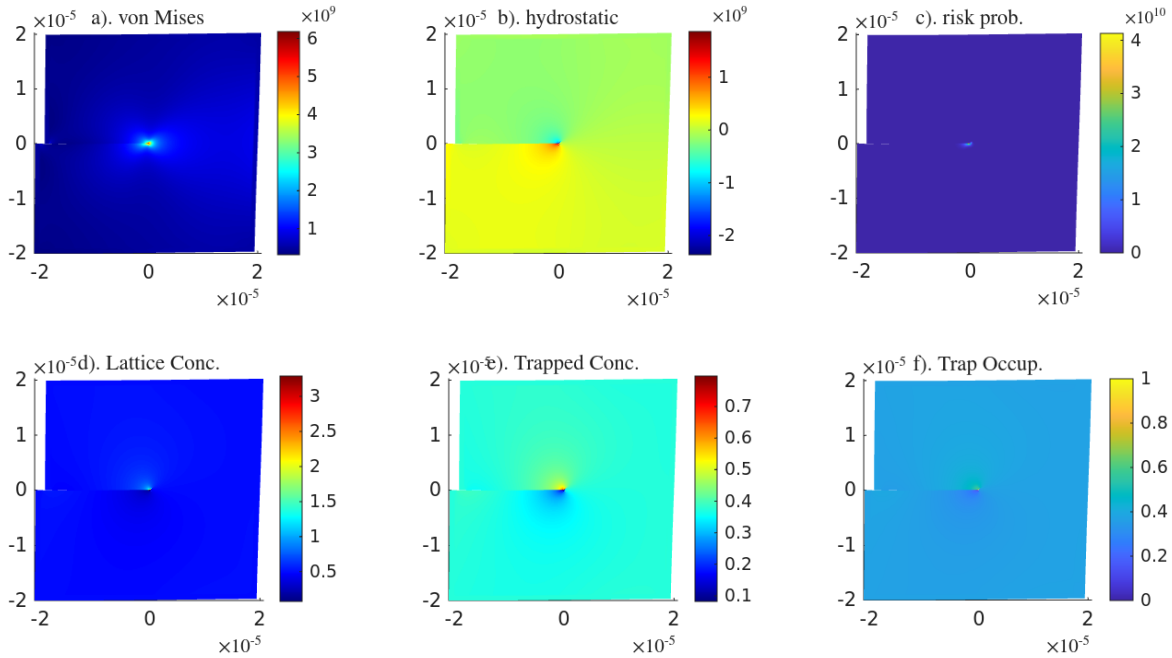


图 14. 加载速率为 K_{II} = 0.5 兆帕√米/秒时，t = 5 秒平面应力 II型加载下的耦合裂纹尖端场与氢输运。(a) 冯·米塞斯应力 σ_{vm}；(b) 静水应力 σ_H；(c) 风险概率 dϕ；(d) NILS 氢浓度 c_L；(e) 捕获氢浓度 c_T；(f) 捕获位点氢占有率 θ_T。本图采用国际单位制（SI）。

从以上图中可以发现，尽管裂纹尖端的高局部应力集中会引发局部塑性，即第一阶段的位错发射，但并不需要发生大范围整体屈服（体心立方铁的屈服强度为 ~ 10 吉帕）[103, 104, 195]。如图15-(a)所示，NILS 氢浓度 C_L 在裂纹尖端附近达到最低值。图15-(b)显示，在II型加载下，总失效概率Φ 的增长速度比I型加载下更快；同时，平面应变条件下的失效概率高于平面应力条件。

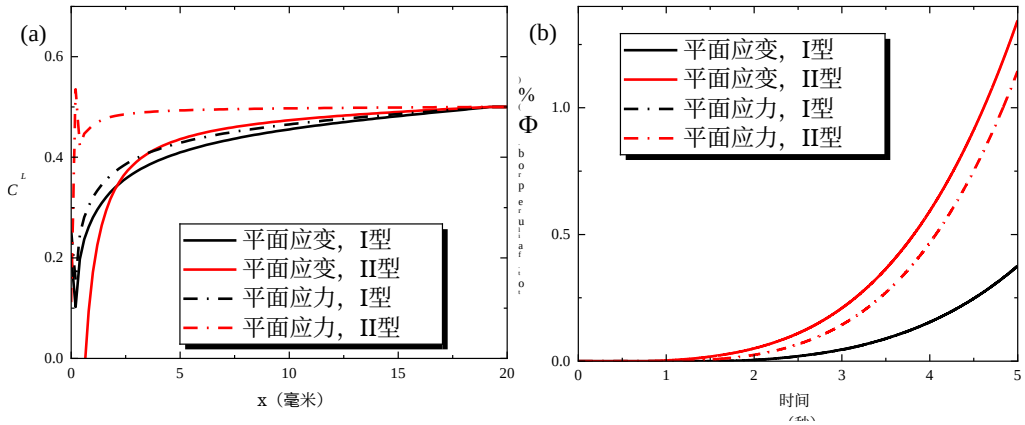


图15. (a) 沿韧带的 NILS 氢浓度C_L 分布；(b) 总失效概率Φ 随加载时间t的变化，加载速率为$K_{I,\ II} = 0.5$ 兆帕√米/秒。值得注意的是，在I型加载下，无论是平面应变还是平面应力情形，Φ 函数几乎相同。

3.3 随机空洞动力学的演变

图16展示了 n = 3 和 6 时 I型裂纹尖端场在平面应变条件下的 HRR 解，与 Dai 等人 [196], 的结果吻合良好，因此验证了第 2.3 节所建立的解析过程的正确性和准确性。

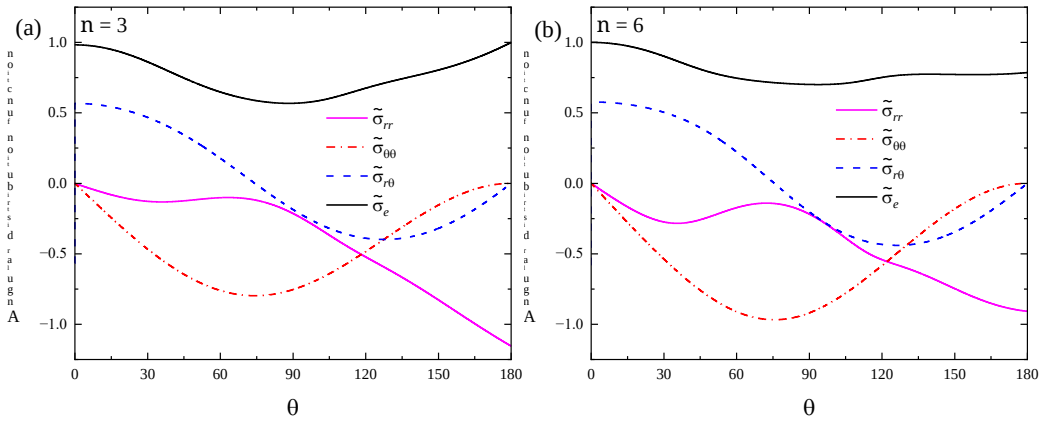
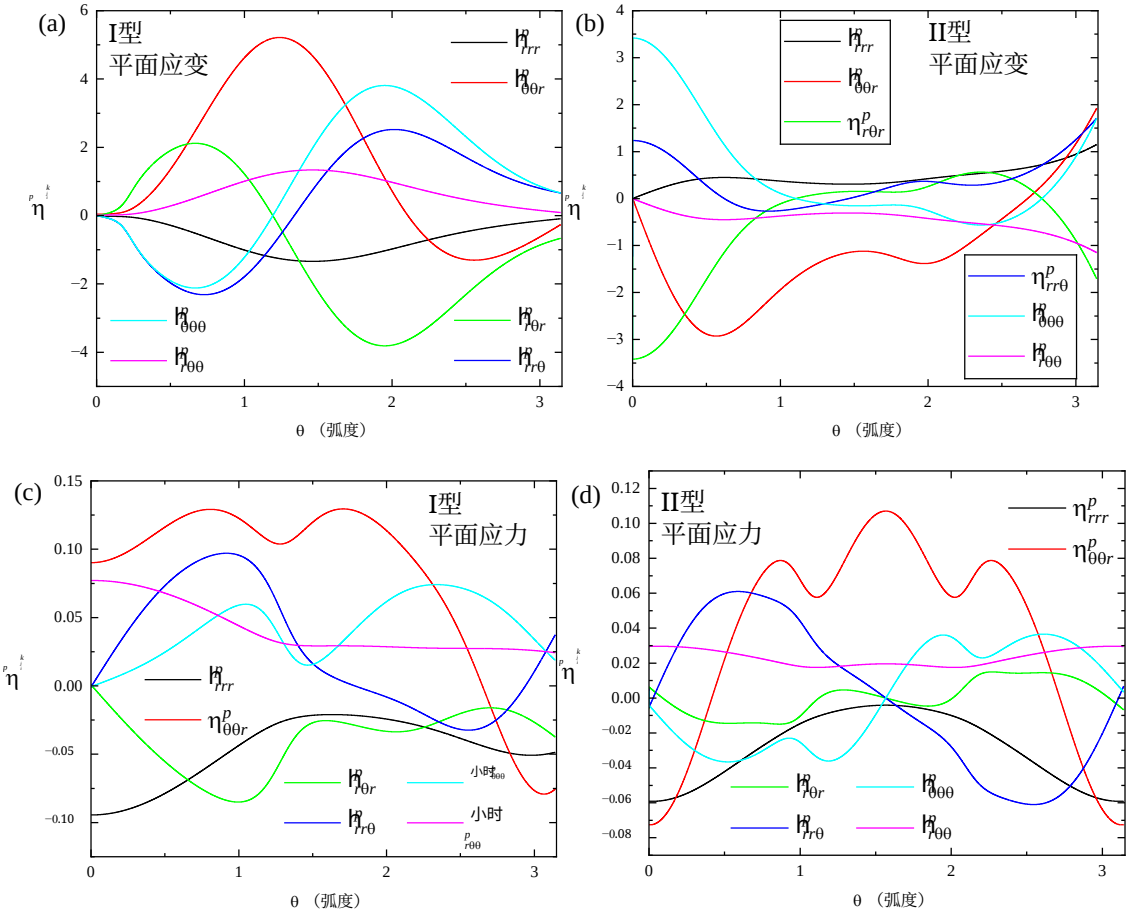
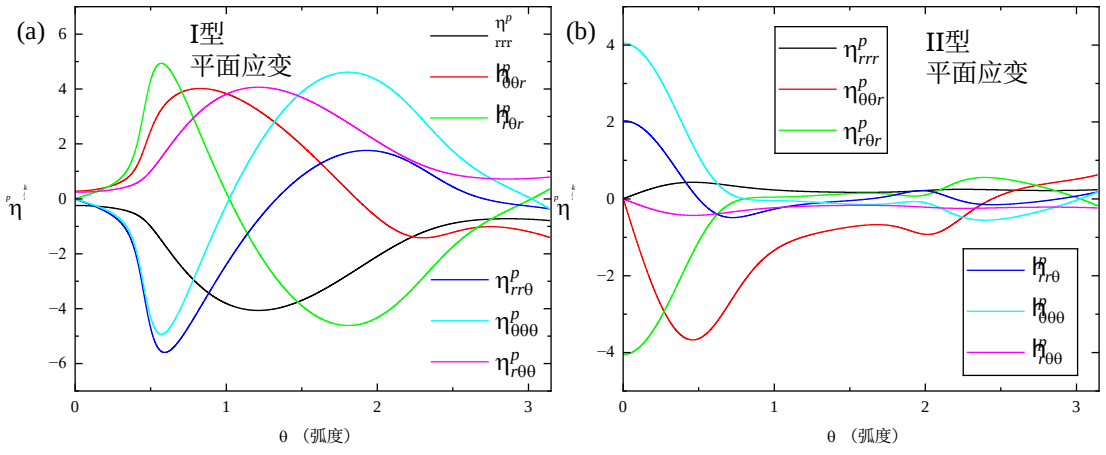


图1 6. （a）n = 3；（b）n = 6 RO 材料的 II 型裂纹尖端场在平面应变条件下的应力分量角分布函数 HRR 解。

图17和图18分别展示了 n $\tilde{\eta}^{p}_{ijk}$ =和 6 时 RO 材料中归一化的塑性应变梯度张量分量 $\eta^{p}_{ijk}/(\beta_0 r^{m-1})$。



Fig。 17. RO 材料中塑性应变梯度张量 $\tilde{\eta}^{p}_{ijk} \equiv \eta^{p}_{ijk}/(\beta_0 r^{m-1}) \rightarrow \eta^{p}_{ijk}$ 在 n = 3 下的归一化分量。



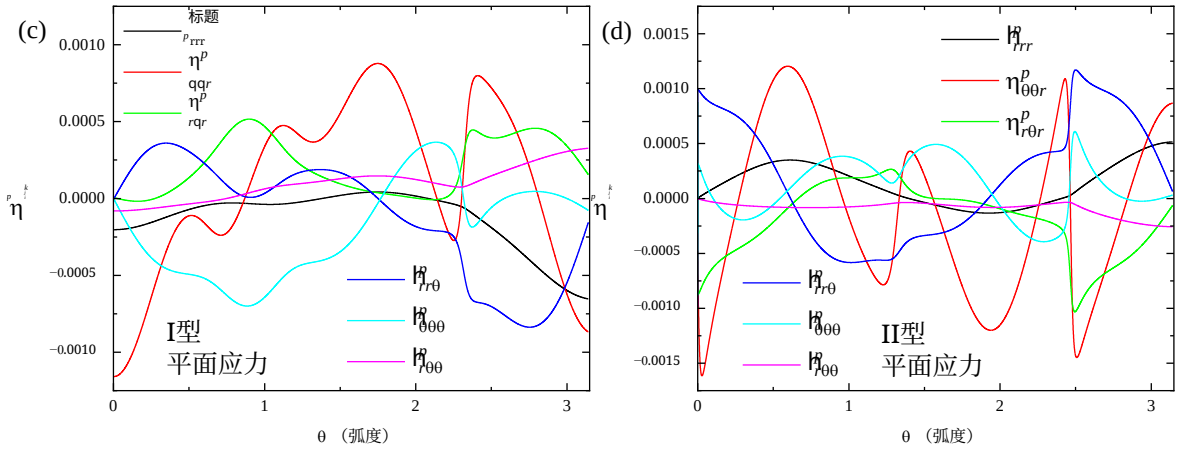


图18. n = 6 RO 材料的塑性应变梯度张量 $\tilde{\eta}^{p}_{ijk} \equiv \eta^{p}_{ijk}/(\beta_0 r^{m-1}) \rightarrow \eta^{p}_{ijk}$ 的归一化分量。

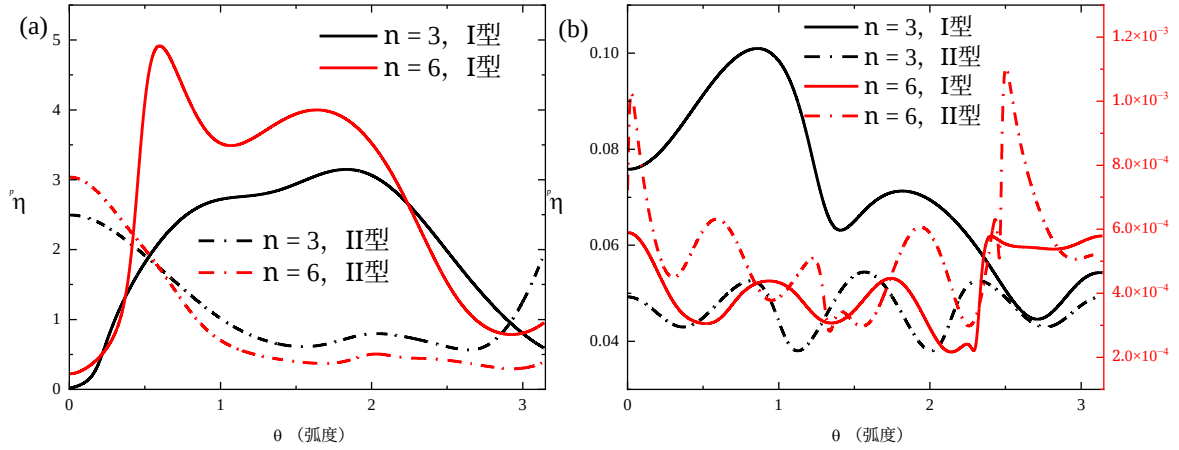


图19. 不同 RO 材料分别在 (a) 平面应变；(b) 平面应力加载条件下的归一化有效塑性应变梯度 $\tilde{\eta}^{p} \equiv \eta^{p}/(\beta_0 r^{m-1}) \rightarrow \eta^{p}$ 。

图19比较了 n = 3 和 n = 6 RO 材料的有效塑性应变梯度 η^{p} 。研究发现，硬化参数 n 的方差会显著改变 η^{p}，进而改变几何必需位错的密度。先前的实验 [197] 表明，RO 硬化参数 n 会随氢充入而发生变化。尽管在平面应变条件下，n = 3 和 n = 6 对应的有效塑性应变梯度 η^{p} 仍处于同一数量级，但在平面应力条件下，两者将相差 2 ~ 3 个数量级。因此，氢致几何必需位错密度变化也将强烈依赖于加载模式。

利用 Heun方法，本文求解了 Langevin 方程 Eq.(2.3.81)，时间步长为 Δt =0.001。图20展示了在 $\beta = 1$ 和 $\Sigma = 1$条件下随机空洞生长的10,000条轨迹。图21展示了不同 $\beta \in \{1,2\}$ 和 $\Sigma \in \{1,2\}$取值下的平均空洞半径〈u〉和弥散度〈$(\delta u)^2$〉，其结果与 Kharchenko等人 [184]的结果吻合良好。

图22给出了式(2.3.91)中取$\theta = 0.01$、 $P = 0.25$、 $\epsilon = 1000$、 $\kappa = 0.01$、 $\varepsilon' = 0.01$和$\eta_v' = \eta_i' = 0.001$时归一化空位浓度与氢间隙原子浓度的空间演化。通过调节空洞汇强度θ，我们进一步在图23中评估了平均空位浓度〈$\tilde{c}_v$〉及其弥散度〈$(\delta\tilde{c}_v)^2$〉。图24表明，平均空洞半径〈R〉以代数形式〈R〉$\propto t^z$变化，其中生长指数z 随θ的增大而减小。正如Kharchenko等人[184], 所论证的，当位错作为点缺陷汇的贡献较大时（即$\theta \to 0$），〈R〉的时间依赖性将衰减为带有$z = 1/2$的Lifshitz-Allen-Cahn定律。随着（预先存在的）空洞贡献的增长（即$\theta \uparrow$），指数z 减小，并将达到与Lifshitz-Slyozov-Wagner理论[184]相关的较低值$z = 1/3$。因此我们可以得出，氢→ RO本构关系（n）→ 位错密度（ρ_D）→ 空洞动力学（z）。

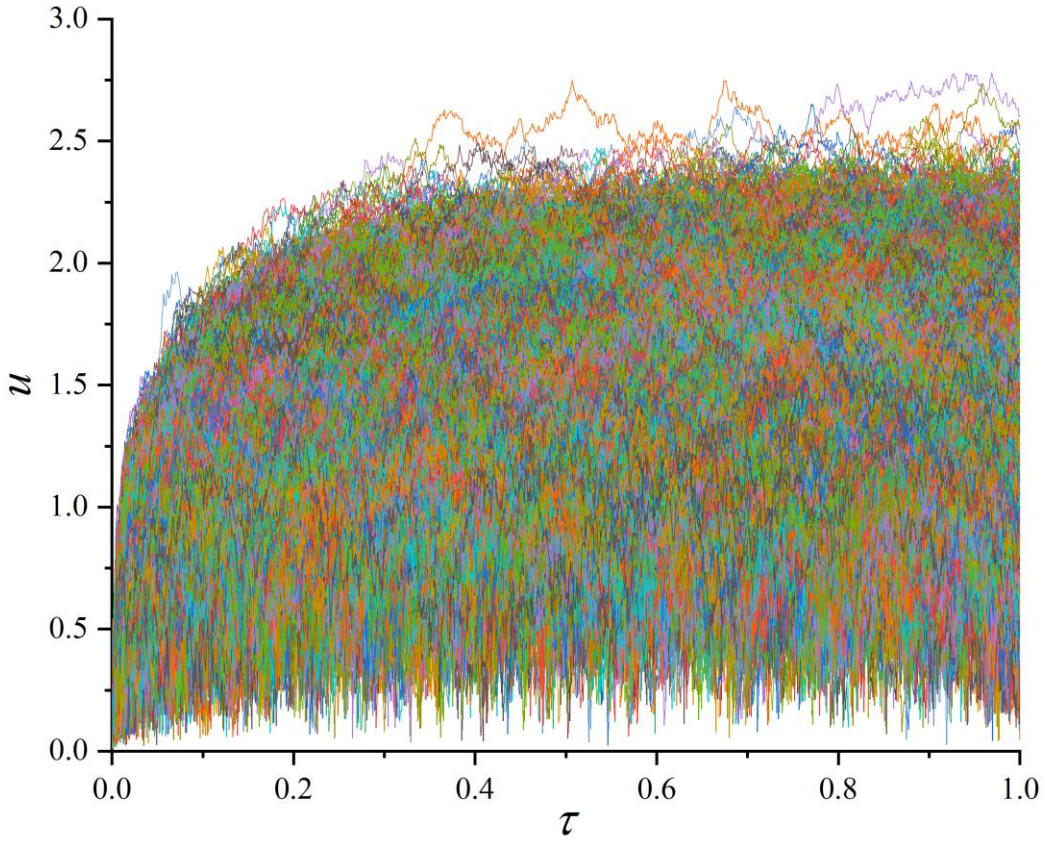


图 20. 由式 (2.3.81) 定义的 Langevin动力学的 10,000 条随机轨迹，其中 $\beta = 1$、 $\Sigma = 1$。

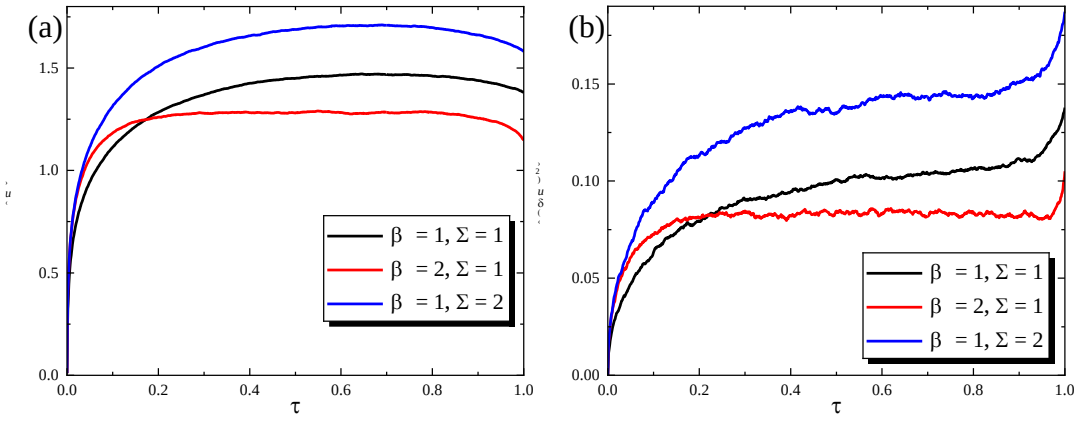


图 21. 不同 β 和 Σ 下 (a) 平均空洞半径 〈u〉和 (b) 弥散度 〈$(\delta u)^2$〉的变化规律。

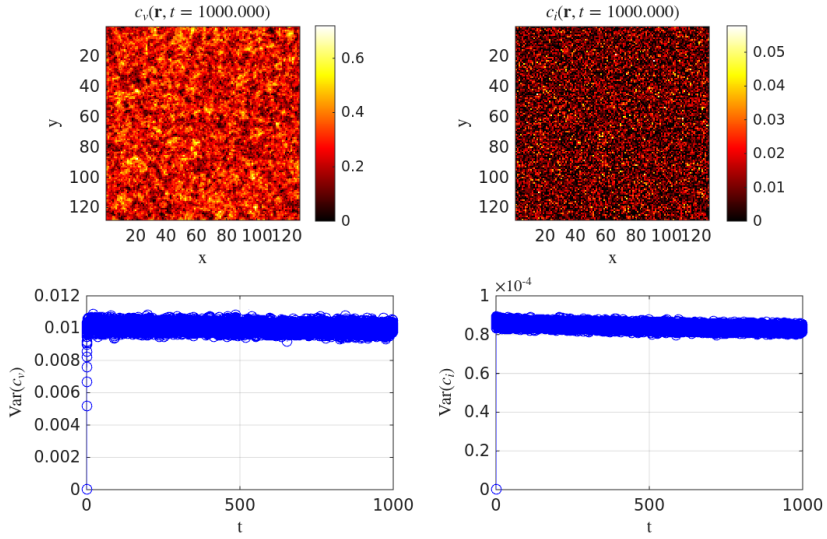


图 22. 在式 (2.3.91) 中 $\theta = 0.01$、 $P = 0.25$、 $\epsilon = 1000$、 κ =0.01、 $\varepsilon' = 0.01$、 $\eta'_v = \eta'_i = 0.001$ 条件下，基体相内空位和（氢）间隙原子浓度的快照。

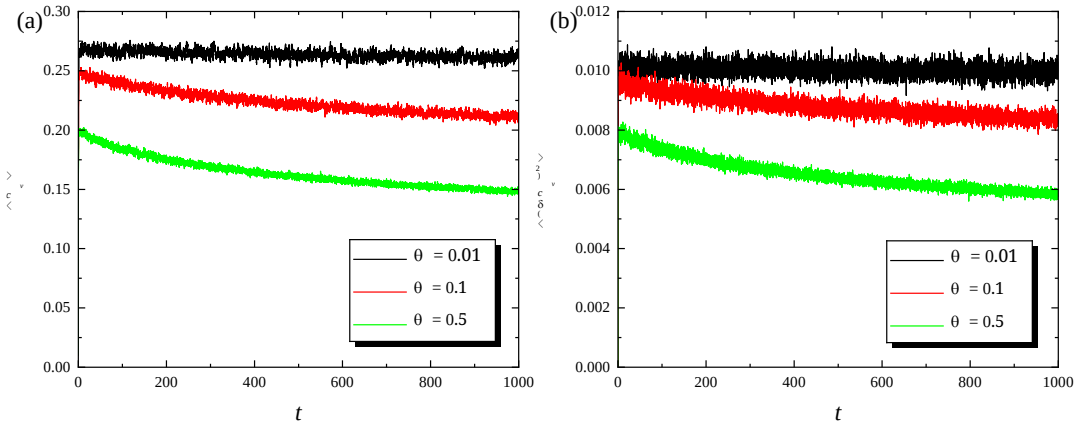


图 23. (a) 平均空位浓度 〈$\tilde{c}_v$〉和 (b) 其弥散度 〈$(\delta\tilde{c}_v)^2$〉随时间的变化。

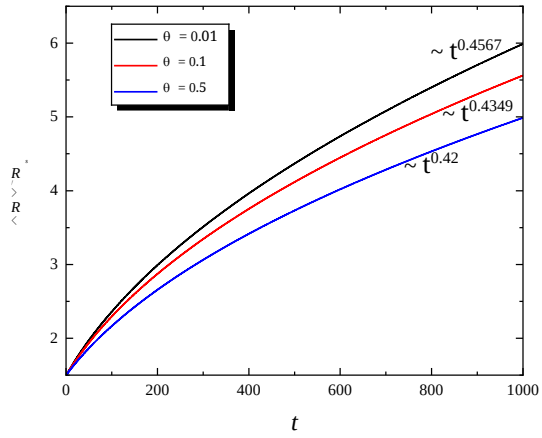


图24. 空洞归一化平均半径〈R〉/R_s 随时间 t 的变化。拟合斜率通过对区间 $t \in [500,1000]$ 内的数据进行拟合得到。

4. 讨论

第3节已展示 HERB 框架的数值结果，本文将在此讨论其内在物理机制。

4.1 氢气氛对位错核心结构的影响

尽管氢效应并未以线性形式参与式(2.1.19)和式(2.1.21)，但在第3.1节中，该模型预测的最概然应力强度因子K_I^p 几乎随远场氢浓度c_0 线性增加。与我们之前的研究相比（其中仅考虑了纯I型加载）[103], ，该研究同样预测最概然应力强度因子与氢浓度之间存在单调关系；本研究引入应变能密度最小化后，能够正确捕捉I型+II型混合加载下的裂纹尖端场。本模型的另一项显著改进，正是考虑了氢分布，而在我们之前的模型中，该分布被近似处理为Song和Curtin [25] 提出的速率相关分布[103]。需要指出的是，应用式(2.1.19)和式(2.1.21)实际上表明，本模型的第一阶段假定处于热力学平衡状态，而未考虑氢原子的运动学输运。然而，对于发生在晶格振动特征时间周期内的原子尺度瞬态断裂，可以合理地假设氢已经以平衡状态分布在裂纹尖端的近邻区域。

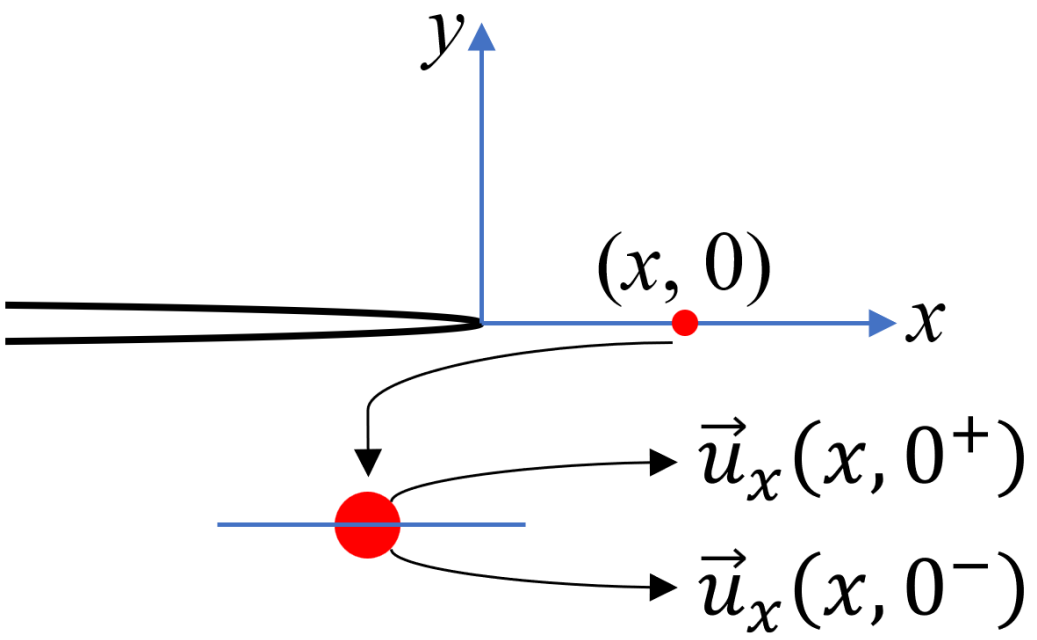


图25. Rice理论中所考虑的示意构型。红色球体表示x轴上的材料点(x, 0)。

尽管如此，考虑到位错核心区域内的强奇异性，以及氢气氛对核心结构的影响[47, 48, 198]，仅采用平衡氢分布仍然不够。让我们重新审视Rice及其同事的开创性工作[92, 93, 199]，，并考虑一个位于平面$y = 0$ 上的相似无限裂纹$x < 0$ （见图25）；现在，我们分析平面$y = 0$ 上$x > 0$滑移（位错发射）的形成，并定义滑移不连续分布$\vec{\zeta}(x) = \vec{u}_x(x, 0^+) - \vec{u}_x(x, 0^-)$、晶格失配势能$\Phi(\vec{\zeta})$以及晶格回复应力$\tau[\zeta(x)] \equiv \Phi'[\zeta(x)] = \mathrm{d}\Phi\ \mathrm{d}\zeta$。滑移面上任意点$x$ 处的应力τ_{xy} 来源于两个方面：外加载荷K和内部位错分布$b(x)$。因此，有：a）外加载荷应力：$\sigma_{load}(x) = \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi x}}$，这是由应力强度因子$K_{II}$加载的II型裂纹在裂纹尖端前方距离$x$ 处的应力；b）弹性反应力：$\sigma_{self}(x;\ \zeta) = \frac{\mu}{2\pi(1-\upsilon)} \int_0^\infty \sqrt{\frac{x'}{x}}\ \mathrm{d}\zeta(x')/\mathrm{d}x'\ x-x'\ \mathrm{d}x'$。在无限介质中，由位于$x'$处的位错在$x$ 处引起的应力为~ $1\ (x - x')/$ 。

然而，在裂纹附近，必须引入项$\sqrt{x'\ /x}$，以计及裂纹表面上的无牵引边界条件（$x < 0$）。

将氢（溶质原子）的分布视为类似于式 (2.1.22) 中的失配势修饰，则总能量泛函可改写为失配能与弹性势能之和减去载荷所做的功：

$$E[\vec{\zeta}] = E_0 + \int_0^\infty \{\Phi[\vec{\zeta}(x)] + V_{sol}[\vec{\zeta}(x); c_H, \cdots]\}\mathrm{d}x + E_{elastic}[\vec{\zeta}] - W_{load}[\vec{\zeta}] \tag{4.1.1}$$

其中，第一项 E_0 （等同于式 (2.1.22) 中的第一项 U_0 ）表示受载弹性固体的能量，该固体沿狭缝的 ζ 受约束为 0，且裂纹前方的剪应力为 $\tau_0 = K_{II}/\sqrt{2\pi x}$。第二项为溶质修饰错配能，其中原始 PN 势 Φ 与广义层错（GSF）层间势 Ψ相关，但并不相等；其中，Φ（ζ） $= \Psi$（Δ） $-\mathrm{h}\tau^2/2\mu$，其中 ζ 是 $\vec{\zeta}$（x）的大小，h 是垂直于滑移面方向上的层间距，而 τ （$= \mathrm{d}\Phi\ \mathrm{d}/\ \zeta = \mathrm{d}\Psi\ \mathrm{d}/\ \Delta$）是沿 $\vec{\zeta}$方向作用于滑移面上的剪应力（即晶格回复应力）。受近期研究 [50, 200], 的启发（该研究提出了所谓的 sPN 模型），我们通过用随机变量 ω对层间势 Φ 进行缩放，来修正经典 PN 模型，以处理核心宽度内溶质原子的随机占据情况,

$$\begin{aligned} E_{misfit} &= \int_0^\infty \{\Phi[\vec{\zeta}(x)] + V_{sol}[\vec{\zeta}(x); c_H, \cdots]\}\mathrm{d}x \\ &= \int_0^\infty \omega(x)\Phi[\vec{\zeta}(x)]\mathrm{d}x \\ &\approx \omega \int_0^\infty \Phi[\vec{\zeta}(x)]\mathrm{d}x \end{aligned} \tag{4.1.2}$$

采用随机振幅层间势时，平衡位错错配函数为,

$$\zeta(x) = \frac{b}{\pi}\arctan\left(\frac{x}{\lambda}\right) + \frac{b}{2} \tag{4.1.3}$$

其中，平衡位错核心宽度 λ 为,

$$\lambda = \frac{h}{2(1-\upsilon)\omega} = \frac{\lambda_0}{\omega} \tag{4.1.4}$$

其中，$\lambda_0 = \mathrm{h}\ /2\ \ 1-\upsilon\ \ (\ )$是经典 PN 模型中的核心宽度。

第三项和第四项也分别等同于式（2.1.22）中的对应项，但仅在滑移受限于$y = 0$ 面这一简单情形下才会衰减；其中第三项 $E_{elastic}$ 是位错塞积的非局域弹性能,

$$\begin{aligned} E_{elastic} &= \frac{1}{2}\int_0^\infty \zeta(x)\sigma_{self}(x;\zeta)\mathrm{d}x \\ &= \frac{\mu}{4\pi(1-\upsilon)}\int_0^\infty \zeta(x)\left[P.V.\int_0^\infty \sqrt{\frac{x\prime}{x}}\frac{1}{x-x\prime}\frac{\mathrm{d}\zeta(x\prime)}{\mathrm{d}x\prime}\mathrm{d}x'\right]\mathrm{d}x \end{aligned} \tag{4.1.5}$$

第四项 W_{load} 是外部 K 场所做的功,

$$W_{load} = \int_0^\infty \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi x}}\zeta(x)\mathrm{d}x \tag{4.1.6}$$

值得注意的是，Warner 和 Curtin [92], 没有采用原始的弗伦克尔正弦函数，而是提出了一种新的广义层错面间势解析形式 $\Psi(\Delta)$，可通过原子模拟进行评估，以纳入场变量的影响，例如氢浓度 c_H、温度 T，即 $\Psi(\Delta) \rightarrow \Psi(\Delta; c_H, T, \cdots)$，其中广义层错能（GSFE）曲线的四个极值点（$\gamma_{ssf}$，$\gamma_{usf}$，$\gamma_{stf}$，$\gamma_{utf}$）是这些场变量的函数。至此，我们可以得到一种新的随机 Peierls-Rice-Beltz（sPRB）模型，用于处理溶质原子环境下从裂纹尖端发射位错的情况，同时考虑位错核心区域内溶质浓度的短程波动。不过，我们在此不再进一步讨论 sPRB 模型，其详细内容将在另一篇即将发表的论文中介绍。

还应注意，当前的位错发射模型仍建立在氢增强局部塑性机制之上，而近期实验 [65] 与模拟 [66] 支持氢对位错迁移率的双重作用。因此，在未来研究中，式(2.1.1)中的最后一项f_H（用于计入氢效应）应对氢浓度呈非线性依赖。此外，尽管当前框架仅考虑了位错滑移，修改后的版本中还应纳入孪生与相变 [201] 。

4.2 动态 外加载荷下氢捕获能力的变化

如式(2.2.26)所示，即使不存在整体塑性，陷阱结合能也会随弹性应变而变化。尽管Gornostyrev和Katsnelson[202] 通过将总弹性能表示为失配位错以及负责相变的虚位错，讨论了析出物/基体界面从共格态向非共格态转变的可行性，但同样可以预期，在外加（弹性）载荷作用下，由于（无位错区内）原子间距的变化，共格态与非共格态之间的这种转变也可能发生。

尽管本研究目前并未在时间维度上考虑塑性区内的捕获位点，析出物/基体界面仍可能通过位错形核或与预存位错的相互作用，由共格转变为半共格[203]。近期数值模拟[204, 205] 也揭示了滑移位错与失配颗粒相互作用所引起的应变能弛豫。因此，陷阱结合能的分布（$\varphi(\Delta E_T)$）也会随加载而动态变化，即$\varphi(\Delta E_T) \rightarrow \varphi(\Delta E_T; t)$，从而使第一近似（即该分布$\varphi(\Delta E_T; t)$坍缩为随时间$t$ 变化的单值函数ΔE_T （$\Delta E_T \rightarrow \Delta E_T(t)$），见式(2.2.36)）不足以用于实际工程分析。具体而言，如图26所示，假设共有10000个颗粒，其陷阱能最初服从高斯分布（均值

能量ϑ_m = 1 fJ，标准差ϑ_{std} = 0.2 fJ），可以发现，根据式(2.2.33)，能量分布直方图在弹性加载下会偏离高斯（正态）分布。可在未来研究中对第2.2节所建立的平均场理论加以改进，即引入随机分析，即$\Delta E_T(t) = \Delta E_T^0 + \xi(t)$，其中$\Delta E_T^0$为加载前初始分布$\varphi(\Delta E_T;\ t = 0)$的统计平均值，$\xi(t)$为具有如下统计性质的白噪声：$\langle \xi(t) \rangle = 0$，$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\Delta E_T^0 \Sigma \delta(t - t')$，其中Σ 为噪声强度，$\delta(t - t')$为狄拉克δ函数，与我们在第 2.3 节中的定义类似。为应用本理论，工程师可利用已在商业有限元软件包中良好实现的数值技术（如相场法等），通过在三维计算域内生成随机分布的球形夹杂物（可由实验推断），来捕捉每个夹杂颗粒的析出物/基体界面处的能量涨落。

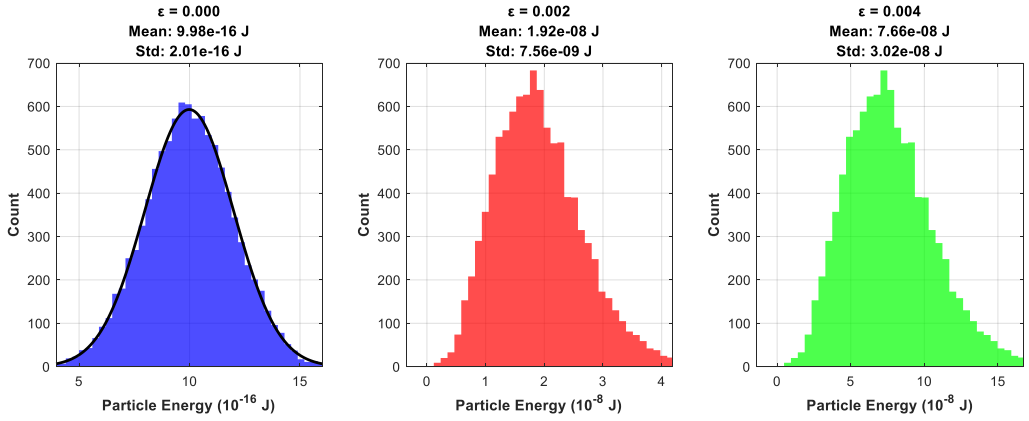


图26. 不同弹性应变条件下的颗粒能量直方图，弹性应变分别为 ε = 0.000、0.002 和 0.004。假设基体中嵌入了 10000 个颗粒，其半径服从高斯分布（平均半径为 r_m = 50 nm，标准差为 r_{std} = 10 nm）。材料参数设定如下：剪切模量 G 为 = 80 GPa，体积模量 K 为 = 160 GPa，泊松比为 υ = 0.33，伯格斯矢量 b 为 = 2.5 Å。参考膨胀应变设为 $\varepsilon_0 = 0$ here。

4.3 空洞形核导致的准解理断裂

需要指出的是，先前研究已评估了***GND***和***SSD***密度的分布[206-208] 通过在商用有限元软件包中实现传统***MSG***本构关系。具体而言，Martínez-Pañeda和Fleck[209] 指出，高阶***SGP***模型预测裂纹尖端附近存在非常接近弹性应力状态的区域，类似于无位错区，从而支持了本研究对弹性区和塑性区的划分。尽管已有证据表明，传统***MSG***与经典塑性（即， ***HRR*** 场）在距离裂纹~ 1 μm处给出相同的应力分布，尖端[208, 210], 这进一步验证了本模型的可行性：将***HRR***与***MSG***结合以获得

第 2.3 节中的位错密度半解析解。Radu等人的实验表明，[197], RO硬化指数（n）会随氢浓度变化而改变（而材料参数（α）几乎保持不变），从而导致位错密度场发生变化。Nazar等人最近也报告了氢对RO本构关系的类似影响[211]。本研究评估了氢环境下空洞形成的初始阶段，但要将HERB框架与连续介质模型（例如Gurson模型）衔接起来，还需要了解空洞生长[212-216]。结合大规模分子动力学模拟与热力学建模，Zhao等人[217] 进一步证明，空洞均匀形核之前必须先发生塑性变形，而引入氢原子并不会显著促进空洞形核。先前研究[123, 218-220], 表明，即使空洞小至三空位，空洞生长也可通过发射剪切环实现[221, 222]。因此，氢可能通过与发射的位错环相互作用来影响空洞生长，并在方程（2.3.70）右侧引入新项；这一问题将在未来的研究中探讨。

还需要指出的是，先前的实验 [223, 224] 已揭示了一种准解理断裂机制：先在弹性畸变较大的无位错区内形成纳米裂纹，随后纳米裂纹与主裂纹相连。Zhu等人 [105] 提出了一种由位错塞积于无位错区所驱动的机制，以探究准解理过程，但他们没有考虑到空洞形核可能同时发生在无位错区之外。鉴于氢脆实验 [111], 中观察到空洞形核会促进准解理，因此可以预期，氢致灾难性失效应是多种氢脆机制 [225]协同作用的结果。需要强调的是，准解理和空洞诱导的韧性断裂都是材料的基本断裂模式，而氢则起催化剂的作用。因此，可以将当前的 HERB 框架概念化为一种氢催化断裂机制，将断裂过程视为一个高维反应空间。在这种涉及塑性变形、质量传输、热耗散等过程的复杂非平衡系统中，最大熵产生原理（MEPP，又称 Ziegler最大耗散原理（MDP）[226, 227]）或许能提供“最容易且最便捷”的演化路径 [228], ；近期则提出了一种氢增强熵（HEENT）机制 [229, 230] 。事实上，Zajkani 和 Khonsari [231] 基于 Ziegler最大耗散原理构建了一个热力学-力学一致框架，以建立机械退化速率与疲劳循环进程之间的关联。Gaede等人 [232] 利用 Ziegler最大耗散原理将耗散势与损伤阈值及损伤演化定律联系起来。Whaley [233] 指出，对于等温准静态断裂，最大熵产生原理（或 Ziegler最大耗散原理）等同于稳定性判据，即 $\frac{\partial W}{\partial \varepsilon}\Big|_t = 0$ 和 $\frac{\partial^2 W}{\partial \varepsilon^2}\Big|_t < 0$, 其中 W 为裂纹

尖端应变能密度。因此，未来的研究中，各种氢脆机制之间的竞争或许会受到最大耗散原理的约束，因为与氢捕获相关的熵增加会提高系统整体的热力学稳定性 [229]。热力学框架的数学细节将在另一篇即将发表的论文中介绍。

5. 结论

基于经典的 Rice-Beltz 模型，我构建了一个多尺度框架，用以描述裂纹尖端的位错发射，以及氢环境下近场和远场的力学响应。

1) 建立了一种理论模型，用于预测混合 I+II 型加载下位错发射所需的临界应力强度因子。与我们以往的研究相比，本研究的创新之处在于引入应变能密度最小化方法，以确定重整化后的 K_I^* 和 K_{II}^*。考虑到核心宽度内氢分布的随机性，我还探讨了未来研究中构建 sPRB模型的可行性。

2) 考虑动态加载下晶格错配变化所引起的陷阱能变化，我将经典的 SMKKB氢输运方程改写为以陷阱能和（弹性）体积应变表示的形式。鉴于夹杂物（例如微合金钢中的碳化物）的捕获能力并非一成不变，我们当前的模型能够解释实验观察到的、未发生整体塑性时的氢脆现象。为简洁起见，本研究采用陷阱能分布的平均场近似；未来研究可通过引入随机噪声对模型进行修正。

3）通过将 HRR 解纳入 MSG塑性理论，我得到了平面问题中几何必需位错密度场的半解析表达式。

4）采用朗之万方程描述氢环境下空位凝聚所导致的空洞生长动力学的随机特性。

本HERB框架的一个关键要素是随机分析，它刻画了塑性相关过程的内禀涨落；而据作者所知，这一点此前在氢脆研究领域中尚未被考虑。本研究的工作也将有助于建立一个热力学-力学一致框架，以约束各种氢脆机制之间的竞争。

CRediT作者贡献声明

K. Zhao：概念化、撰写初稿、审阅与编辑、项目管理、资金获取。

利益冲突声明

作者声明，他们不存在已知的竞争性经济利益或个人关系，可能对本文所报告的工作产生影响。

致谢

谨此感谢国家自然科学基金（项目编号：12102145）和江苏省自然科学基金（项目编号：BK20210444）提供的资助。

附录 A：混合条件下应变能密度的最小化

模态加载

重新考察剪应力等效约束的式 (2.1.27)，为简洁起见，我们定义 $\eta = \rho/r$ ，并令 s =sin (θ/2)、c =cos (θ/2)。利用三角恒等式，可得：

$$\begin{aligned} \sin\theta &= 2sc \\ \cos\theta &= c^2 - s^2 \end{aligned} \tag{A.1}$$

因此，式 (2.1.34) 中定义的系数可简化为：

$$\begin{aligned} B &= s(1 + c^2 - s^2 + \eta) \\ C &= c(-1 + 3(c^2 - s^2) - \eta) \end{aligned} \tag{A.2}$$

剪应力等效约束式 (2.1.27) 可改写为：

$$BK_I^* + CK_{II}^* = D, \text{with}, D = 2\sqrt{2\pi r} f/b \tag{A.3}$$

约化应力场可改写为，

$$\begin{cases} \sigma_{xx}^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi r}}(K_I^* f_1 + K_{II}^* g_1) \\ \sigma_{yy}^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi r}}(K_I^* f_2 + K_{II}^* g_2) \\ \tau_{xy}^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi r}}(K_I^* f_3 + K_{II}^* g_3) \end{cases} \tag{A.4}$$

利用多角度恒等式,

$$\begin{aligned}\sin(3\theta/2) &= 3s - 4s^3\\ \cos(3\theta/2) &= 4c^3 - 3c\end{aligned} \tag{A.5}$$

角函数可简化为,

$$\begin{cases} f_1 = c - sc(3s - 4s^3) - \frac{\eta}{2}(4c^3 - 3c) = c\left(1 - 3s^2 + 4s^4 + \frac{3\eta}{2}\right) - 2\eta c^3 \\ f_2 = c + sc(3s - 4s^3) + \frac{\eta}{2}(4c^3 - 3c) = c\left(1 + 3s^2 - 4s^4 - \frac{3\eta}{2}\right) + 2\eta c^3 \\ f_3 = sc(4c^3 - 3c) - \frac{\eta}{2}(3s - 4s^3) = sc^2(4c^2 - 3) - \frac{\eta s}{2}(3 - 4s^2) \\ g_1 = -2s - sc(4c^3 - 3c) + \frac{\eta}{2}(3s - 4s^3) = -2s - sc^2(4c^2 - 3) + \frac{\eta s}{2}(3 - 4s^2) \\ g_2 = f_3 \\ g_3 = f_1 \end{cases} \tag{A.6}$$

这些简化结果降低了高次幂的复杂性，并便于对能量表达式进行平方运算 .

应变能密度为,

$$V_\varepsilon = \frac{1}{2E}\left[(\sigma_{xx}^*)^2 + \left(\sigma_{yy}^*\right)^2 - 2\upsilon\sigma_{xx}^*\sigma_{yy}^* + 2(1+\upsilon)\left(\tau_{xy}^*\right)^2\right] \tag{A.7}$$

对于平面应力，且,

$$V_\varepsilon = \frac{1+\upsilon}{2E}\left[(1-\upsilon)(\sigma_{xx}^*)^2 + (1-\upsilon)\left(\sigma_{yy}^*\right)^2 - 2\upsilon\sigma_{xx}^*\sigma_{yy}^* + 2\left(\tau_{xy}^*\right)^2\right] \tag{A.8}$$

对于平面应变。

令 $k = 1/\sqrt{2\pi r}$，代入应力后得到一个二次型:

$$V_\varepsilon = \frac{k^2}{2E}[A_{11}(K_I^*)^2 + 2A_{12}K_I^*K_{II}^* + A_{22}(K_{II}^*)^2] \tag{A.9}$$

对于平面应力，且,

$$V_\varepsilon = \frac{(1+\upsilon)k^2}{2E}[A'_{11}(K_I^*)^2 + 2A'_{12}K_I^*K_{II}^* + A'_{22}(K_{II}^*)^2] \tag{A.10}$$

对于平面应变，其中包含简化角函数的系数为,

$$\begin{aligned}A_{11} &= f_1^2 + f_2^2 - 2\upsilon f_1 f_2 + 2(1+\upsilon)f_3^2\\ A_{12} &= f_1 g_1 + f_2 g_2 - \upsilon(f_1 g_2 + f_2 g_1) + 2(1+\upsilon)f_3 g_3\\ A_{22} &= g_1^2 + g_2^2 - 2\upsilon g_1 g_2 + 2(1+\upsilon)g_3^2\end{aligned} \tag{A.11}$$

对于平面应力，且,

$$
\begin{aligned}
A'_{11} &= (1-\upsilon)(f_1^2+f_2^2) - 2\upsilon f_1 f_2 + 2f_3^2 \\
A'_{12} &= (1-\upsilon)(f_1 g_1 + f_2 g_2) - \upsilon(f_1 g_2 + f_2 g_1) + 2f_3 g_3 \\
A'_{22} &= (1-\upsilon)(g_1^2+g_2^2) - 2\upsilon g_1 g_2 + 2g_3^2
\end{aligned} \tag{A.12}
$$

对于平面应变。

为在线性约束下使二次型 V_ε 最小化，可以使用拉格朗日乘数法或直接代入。定义向量 $\mathbf{K} = [K_I^*, K_{II}^*]^T$、二次矩阵 $\boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}$ $(A_{12} = A_{21})$、约束向量$\boldsymbol{a} = [B, C]^T$和标量 D后，优化目标为：$\min \frac{1}{2}\mathbf{K}^T\boldsymbol{Q}\mathbf{K}$ s.t. $\boldsymbol{a}^T\mathbf{K} = D$，其闭式解为，

$$
\mathbf{K} = \boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{a}\left(\frac{D}{\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{a}}\right) \tag{A.13}
$$

其中，逆矩阵为，

$$
\boldsymbol{Q}^{-1} = \frac{1}{\det \boldsymbol{Q}}\begin{bmatrix} A_{22} & -A_{12} \\ -A_{21} & A_{11} \end{bmatrix} \tag{A.14}
$$

其行列式为，

$$
\det \boldsymbol{Q} = A_{11}A_{22} - A_{12}^2 \tag{A.15}
$$

于是，

$$
\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{a} = \frac{A_{11}C^2 - 2A_{12}BC + A_{22}B^2}{\det Q} \tag{A.16}
$$

还需注意，V_ε 是应力强度因子的正定二次型，这意味着海森矩阵（二阶导数矩阵）为正定矩阵，从而保证存在全局最小值，而非最大值或鞍点。

或者，将 $K_{II}^* = (D - BK_I^*)/C$ （或 $K_I^* = (D - CK_{II}^*)/B$）代入 V_ε，并令 $\mathrm{d}V_\varepsilon/\mathrm{d}K_I^* = 0$ （或 $\mathrm{d}V_\varepsilon/\mathrm{d}K_{II}^* = 0$），可得，

$$
\begin{aligned}
&A_{11}C^2K_I^* + A_{12}C(D - 2BK_I^*) + A_{22}B(-D + BK_I^*) = 0 \\
&\Rightarrow K_I^* = \frac{D(A_{22}B - A_{12}C)}{A_{11}C^2 - 2A_{12}BC + A_{22}B^2}
\end{aligned} \tag{A.17}
$$

or,

$$
\begin{aligned}
&A_{11}C(-D + CK_{II}^*) + A_{12}B(D - 2CK_{II}^*) + A_{22}B^2K_{II}^* = 0 \\
&\Rightarrow K_{II}^* = \frac{D(A_{11}C - A_{12}B)}{A_{11}C^2 - 2A_{12}BC + A_{22}B^2}
\end{aligned} \tag{A.18}
$$

实际上，公式 (A.17) 和公式 (A.18) 中的分母 $\Delta = A_{11}C^2 - 2A_{12}BC + A_{22}B^2$ 表示 $\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{a}\cdot\det\boldsymbol{Q}$，从而确保凸性（假设 $\boldsymbol{Q} > 0$）。

假设不稳定层错能与局部氢浓度 c_H 无关，图 A1 显示，平面应变条件下，最可能（约化）应力强度因子 K_r^p 随环境氢浓度 c_0 变化的关系，与图 7 所示的平面应力情形几乎相同。

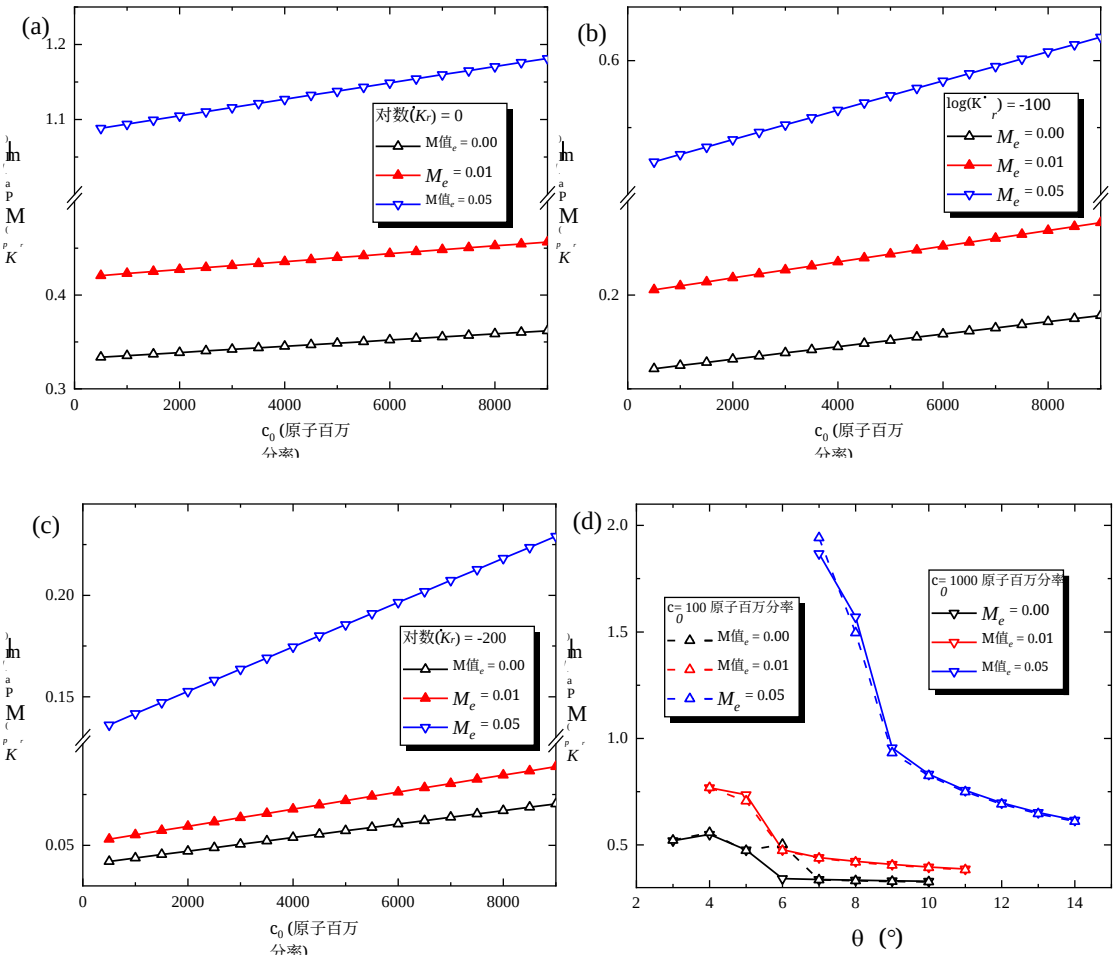


图 A1. 平面应变条件下，不同加载速率时最可能（约化）应力强度因子 K_r^p 随氢浓度 c_H 的变化：(a) $\log(\dot{K}_r) = 0$ 兆帕√米/秒；(b) $\log(\dot{K}_r) = -100$ 兆帕√米/秒；(c) $\log(\dot{K}_r) = -200$ 兆帕√米/秒。此处滑移角设为 θ= 8°。(d) 恒定加载速率 $\log(\dot{K}_r) = 0$ 兆帕√米/秒下，最可能（约化）应力强度因子 K_r^p 与滑移角 θ 的关系。

附录 B：柱坐标系中的塑性应变梯度推导

坐标

一般而言，二阶张量场 $\boldsymbol{T}$ 的梯度定义为以下三阶张量，

$$\text{grad}\,\boldsymbol{T}=\frac{\partial \boldsymbol{T}}{\partial x_k}\otimes\boldsymbol{e}_k=\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_k}\boldsymbol{e}_i\otimes\boldsymbol{e}_j\otimes\boldsymbol{e}_k \tag{B.1}$$

或者，也可以将其写为：

$$\boldsymbol{\nabla T}=\frac{\partial\left(T_{jk}\boldsymbol{e}_j\otimes\boldsymbol{e}_k\right)}{\partial x_i}\otimes\boldsymbol{e}_i=\frac{\partial T_{jk}}{\partial x_i}e_j\otimes e_k\otimes e_i=T_{jk,i}e_j\otimes e_k\otimes e_i \tag{B.2}$$

然而，需要注意的是，该梯度不同于以下量：

$$\nabla\otimes\boldsymbol{T}=\boldsymbol{e}_i\frac{\partial}{\partial x_i}\otimes\left(T_{jk}\boldsymbol{e}_j\otimes\boldsymbol{e}_k\right)=\frac{\partial T_{jk}}{\partial x_i}e_i\otimes e_j\otimes e_k \tag{B.3}$$

假设 $\boldsymbol{T}(r,\theta,z)$ 是一个张量场，其分量为 $T_{\alpha\beta}(r,\theta,z)$（其中，$\alpha,\beta\in\{r,\theta,z\}$），且定义在柱坐标系中，那么我们可以利用该张量场的张量积表示，求出 $\boldsymbol{T}$ 关于 r、θ 和 z 的导数，

$$\begin{aligned}\frac{\partial \boldsymbol{T}(r,\theta,z)}{\partial r}=&\frac{\partial T_{rr}}{\partial r}e_r\otimes e_r+\frac{\partial T_{r\theta}}{\partial r}e_r\otimes e_\theta+\frac{\partial T_{rz}}{\partial r}e_r\otimes e_z\\&+\frac{\partial T_{\theta r}}{\partial r}e_\theta\otimes e_r+\frac{\partial T_{\theta\theta}}{\partial r}e_\theta\otimes e_\theta+\frac{\partial T_{\theta z}}{\partial r}e_\theta\otimes e_z\\&+\frac{\partial T_{zr}}{\partial r}e_z\otimes e_r+\frac{\partial T_{z\theta}}{\partial r}e_z\otimes e_\theta+\frac{\partial T_{zz}}{\partial r}e_z\otimes e_z\end{aligned} \tag{B.4}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \boldsymbol{T}(r,\theta,z)}{\partial \theta}=&\frac{\partial T_{rr}}{\partial \theta}e_r\otimes e_r+\frac{\partial T_{r\theta}}{\partial \theta}e_r\otimes e_\theta+\frac{\partial T_{rz}}{\partial \theta}e_r\otimes e_z\\&+\frac{\partial T_{\theta r}}{\partial \theta}e_\theta\otimes e_r+\frac{\partial T_{\theta\theta}}{\partial \theta}e_\theta\otimes e_\theta+\frac{\partial T_{\theta z}}{\partial \theta}e_\theta\otimes e_z\\&+\frac{\partial T_{zr}}{\partial \theta}e_z\otimes e_r+\frac{\partial T_{z\theta}}{\partial \theta}e_z\otimes e_\theta+\frac{\partial T_{zz}}{\partial \theta}e_z\otimes e_z\\&+T_{rr}e_r\otimes e_\theta+T_{rr}e_\theta\otimes e_r-T_{r\theta}e_r\otimes e_r+T_{r\theta}e_\theta\otimes e_\theta+T_{rz}e_\theta\otimes e_z\\&+T_{\theta r}e_\theta\otimes e_\theta-T_{\theta r}e_r\otimes e_r-T_{\theta\theta}e_\theta\otimes e_r-T_{\theta\theta}e_r\otimes e_\theta-T_{\theta z}e_r\otimes e_z\\&+T_{zr}e_z\otimes e_\theta-T_{z\theta}e_z\otimes e_r\end{aligned} \tag{B.5}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \boldsymbol{T}(r,\theta,z)}{\partial z}=&\frac{\partial T_{rr}}{\partial z}e_r\otimes e_r+\frac{\partial T_{r\theta}}{\partial z}e_r\otimes e_\theta+\frac{\partial T_{rz}}{\partial z}e_r\otimes e_z\\&+\frac{\partial T_{\theta r}}{\partial z}e_\theta\otimes e_r+\frac{\partial T_{\theta\theta}}{\partial z}e_\theta\otimes e_\theta+\frac{\partial T_{\theta z}}{\partial z}e_\theta\otimes e_z\\&+\frac{\partial T_{zr}}{\partial z}e_z\otimes e_r+\frac{\partial T_{z\theta}}{\partial z}e_z\otimes e_\theta+\frac{\partial T_{zz}}{\partial z}e_z\otimes e_z\end{aligned} \tag{B.6}$$

那么，张量场 $\boldsymbol{T}$ 的梯度记作 $\nabla\boldsymbol{T}$ （或 grad $\boldsymbol{T}$），其分量可表示为 $(\nabla T)_{\alpha\beta\lambda}$ （其中，$\alpha,\beta,\lambda\in\{r,\theta,z\}$）：

当 $\lambda=r$ 或 $\lambda=z$时，

$$(\nabla T)_{\alpha\beta\lambda}=\left(\frac{\partial T}{\partial\lambda}e_\beta\right)\cdot e_\alpha \tag{B.7}$$

即，

$$(\nabla T)_{\alpha\beta r}=\frac{\partial T_{\alpha\beta}}{\partial r} \tag{B.8}$$

$$(\nabla T)_{\alpha\beta z}=\frac{\partial T_{\alpha\beta}}{\partial z} \tag{B.9}$$

然而，当 $\lambda=\theta$时，各分量具有以下形式，

$$\begin{aligned}
(\nabla T)_{rr\theta}&=\frac{\partial T_{rr}}{r\partial\theta}-\frac{T_{r\theta}}{r}-\frac{T_{\theta r}}{r}\\
(\nabla T)_{r\theta\theta}&=\frac{\partial T_{r\theta}}{r\partial\theta}+\frac{T_{rr}}{r}-\frac{T_{\theta\theta}}{r}\\
(\nabla T)_{rz\theta}&=\frac{\partial T_{rz}}{r\partial\theta}-\frac{T_{\theta z}}{r}\\
(\nabla T)_{\theta r\theta}&=\frac{\partial T_{\theta r}}{r\partial\theta}+\frac{T_{rr}}{r}-\frac{T_{\theta\theta}}{r}\\
(\nabla T)_{\theta\theta\theta}&=\frac{\partial T_{\theta\theta}}{r\partial\theta}+\frac{T_{r\theta}}{r}+\frac{T_{\theta r}}{r}\\
(\nabla T)_{\theta z\theta}&=\frac{\partial T_{\theta z}}{r\partial\theta}+\frac{T_{rz}}{r}\\
(\nabla T)_{zr\theta}&=\frac{\partial T_{zr}}{r\partial\theta}-\frac{T_{z\theta}}{r}\\
(\nabla T)_{z\theta\theta}&=\frac{\partial T_{z\theta}}{r\partial\theta}+\frac{T_{zr}}{r}\\
(\nabla T)_{zz\theta}&=\frac{\partial T_{zz}}{r\partial\theta}
\end{aligned} \tag{B.10}$$

或者，Zhao 和 Pedroso [234] 也直接给出了柱坐标下由位移场推导出的 27 个应变梯度的物理分量；他们考虑到在第 2.3 节中已将无量纲位移场的 HRR 解表示为 $\tilde{u}_r(\theta)$ 和 $\tilde{u}_\theta(\theta)$。然而，Swaddiwudhipong 等人 [235] 指出，基于总应变和变形推导出的应变梯度张量 $\boldsymbol{\eta}=\nabla\nabla\boldsymbol{u}$适用于有效塑性应变梯度（$\eta^p$）所用的表达式，并给出了相应的柱坐标系形式，因为弹性分量通常较小，可以忽略 [169]。

为简洁起见，我们进一步将塑性应变场 $\varepsilon^p = \varepsilon^p(r,\theta,z)$ 分量的协变导数记为 $\nabla\varepsilon_{ij,}{}^{p}{}_{k}$，它也等价于表示式 $(\nabla\varepsilon^p)_{ijk}$，其中 $i,j,k \in \{r,\theta,z\}$。随后，通过消去与 Christoffel 符号相关的项，并同时考虑应变场的对称性 [234],，即可得到塑性应变梯度张量场的分量。

$$\eta^p_{rrr} = \nabla\varepsilon^p_{rr,r} + \nabla\varepsilon^p_{rr,r} - \nabla\varepsilon^p_{rr,r} = \nabla\varepsilon^p_{rr,r} \tag{B.11-1}$$

$$\eta^p_{r\theta r} = \nabla\varepsilon^p_{rr,\theta} + \nabla\varepsilon^p_{\theta r,r} - \nabla\varepsilon^p_{r\theta,r} = \nabla\varepsilon^p_{rr,\theta} \tag{B.11-2}$$

$$\eta^p_{rzr} = \nabla\varepsilon^p_{rr,z} + \nabla\varepsilon^p_{zr,r} - \nabla\varepsilon^p_{rz,r} = \nabla\varepsilon^p_{rr,z} \tag{B.11-3}$$

$$\eta^p_{\theta rr} = \nabla\varepsilon^p_{\theta r,r} + \nabla\varepsilon^p_{rr,\theta} - \nabla\varepsilon^p_{\theta r,r} = \nabla\varepsilon^p_{rr,\theta} \tag{B.11-4}$$

$$\eta^p_{\theta\theta r} = \nabla\varepsilon^p_{\theta r,\theta} + \nabla\varepsilon^p_{\theta r,\theta} - \nabla\varepsilon^p_{\theta\theta,r} = 2\nabla\varepsilon^p_{\theta r,\theta} - \nabla\varepsilon^p_{\theta\theta,r} \tag{B.11-5}$$

$$\eta^p_{\theta zr} = \nabla\varepsilon^p_{\theta r,z} + \nabla\varepsilon^p_{zr,\theta} - \nabla\varepsilon^p_{\theta z,r} \tag{B.11-6}$$

$$\eta^p_{zrr} = \nabla\varepsilon^p_{zr,r} + \nabla\varepsilon^p_{rr,z} - \nabla\varepsilon^p_{zr,r} = \nabla\varepsilon^p_{rr,z} \tag{B.11-7}$$

$$\eta^p_{z\theta r} = \nabla\varepsilon^p_{zr,\theta} + \nabla\varepsilon^p_{\theta r,z} - \nabla\varepsilon^p_{z\theta,r} \tag{B.11-8}$$

$$\eta^p_{zzr} = \nabla\varepsilon^p_{zr,z} + \nabla\varepsilon^p_{zr,z} - \nabla\varepsilon^p_{zz,r} = 2\nabla\varepsilon^p_{zr,z} - \nabla\varepsilon^p_{zz,r} \tag{B.11-9}$$

$$\eta^p_{rr\theta} = \nabla\varepsilon^p_{r\theta,r} + \nabla\varepsilon^p_{r\theta,r} - \nabla\varepsilon^p_{rr,\theta} = 2\nabla\varepsilon^p_{r\theta,r} - \nabla\varepsilon^p_{rr,\theta} \tag{B.11-10}$$

$$\eta^p_{r\theta\theta} = \nabla\varepsilon^p_{r\theta,\theta} + \nabla\varepsilon^p_{\theta\theta,r} - \nabla\varepsilon^p_{r\theta,\theta} = \nabla\varepsilon^p_{\theta\theta,r} \tag{B.11-11}$$

$$\eta^p_{rz\theta} = \nabla\varepsilon^p_{r\theta,z} + \nabla\varepsilon^p_{z\theta,r} - \nabla\varepsilon^p_{rz,\theta} \tag{B.11-12}$$

$$\eta^p_{\theta r\theta} = \nabla\varepsilon^p_{\theta\theta,r} + \nabla\varepsilon^p_{r\theta,\theta} - \nabla\varepsilon^p_{\theta r,\theta} = \nabla\varepsilon^p_{\theta\theta,r} \tag{B.11-13}$$

$$\eta^p_{\theta\theta\theta} = \nabla\varepsilon^p_{\theta\theta,\theta} + \nabla\varepsilon^p_{\theta\theta,\theta} - \nabla\varepsilon^p_{\theta\theta,\theta} = \nabla\varepsilon^p_{\theta\theta,\theta} \tag{B.11-14}$$

$$\eta^p_{\theta z\theta} = \nabla\varepsilon^p_{\theta\theta,z} + \nabla\varepsilon^p_{z\theta,\theta} - \nabla\varepsilon^p_{\theta z,\theta} = \nabla\varepsilon^p_{\theta\theta,z} \tag{B.11-15}$$

$$\eta^p_{zr\theta} = \nabla\varepsilon^p_{z\theta,r} + \nabla\varepsilon^p_{r\theta,z} - \nabla\varepsilon^p_{zr,\theta} \tag{B.11-16}$$

$$\eta^p_{z\theta\theta} = \nabla\varepsilon^p_{z\theta,\theta} + \nabla\varepsilon^p_{\theta\theta,z} - \nabla\varepsilon^p_{z\theta,\theta} = \nabla\varepsilon^p_{\theta\theta,z} \tag{B.11-17}$$

$$\eta_{zz\theta}^{p} = \nabla\varepsilon_{z\theta,z}^{p} + \nabla\varepsilon_{z\theta,z}^{p} - \nabla\varepsilon_{zz,\theta}^{p} = 2\nabla\varepsilon_{z\theta,z}^{p} - \nabla\varepsilon_{zz,\theta}^{p} \tag{B.11-18}$$

$$\eta_{rrz}^{p} = \nabla\varepsilon_{rz,r}^{p} + \nabla\varepsilon_{rz,r}^{p} - \nabla\varepsilon_{rr,z}^{p} = 2\nabla\varepsilon_{rz,r}^{p} - \nabla\varepsilon_{rr,z}^{p} \tag{B.11-19}$$

$$\eta_{r\theta z}^{p} = \nabla\varepsilon_{rz,\theta}^{p} + \nabla\varepsilon_{\theta z,r}^{p} - \nabla\varepsilon_{r\theta,z}^{p} \tag{B.11-20}$$

$$\eta_{rzz}^{p} = \nabla\varepsilon_{rz,z}^{p} + \nabla\varepsilon_{zz,r}^{p} - \nabla\varepsilon_{rz,z}^{p} = \nabla\varepsilon_{zz,r}^{p} \tag{B.11-21}$$

$$\eta_{\theta rz}^{p} = \nabla\varepsilon_{\theta z,r}^{p} + \nabla\varepsilon_{rz,\theta}^{p} - \nabla\varepsilon_{\theta r,z}^{p} \tag{B.11-22}$$

$$\eta_{\theta\theta z}^{p} = \nabla\varepsilon_{\theta z,\theta}^{p} + \nabla\varepsilon_{\theta z,\theta}^{p} - \nabla\varepsilon_{\theta\theta,z}^{p} = 2\nabla\varepsilon_{\theta z,\theta}^{p} - \nabla\varepsilon_{\theta\theta,z}^{p} \tag{B.11-23}$$

$$\eta_{\theta zz}^{p} = \nabla\varepsilon_{\theta z,z}^{p} + \nabla\varepsilon_{zz,\theta}^{p} - \nabla\varepsilon_{\theta z,z}^{p} = \nabla\varepsilon_{zz,\theta}^{p} \tag{B.11-24}$$

$$\eta_{zrz}^{p} = \nabla\varepsilon_{zz,r}^{p} + \nabla\varepsilon_{rz,z}^{p} - \nabla\varepsilon_{zr,z}^{p} = \nabla\varepsilon_{zz,r}^{p} \tag{B.11-25}$$

$$\eta_{z\theta z}^{p} = \nabla\varepsilon_{zz,\theta}^{p} + \nabla\varepsilon_{\theta z,z}^{p} - \nabla\varepsilon_{z\theta,z}^{p} = \nabla\varepsilon_{zz,\theta}^{p} \tag{B.11-26}$$

$$\eta_{zzz}^{p} = \nabla\varepsilon_{zz,z}^{p} + \nabla\varepsilon_{zz,z}^{p} - \nabla\varepsilon_{zz,z}^{p} = \nabla\varepsilon_{zz,z}^{p} \tag{B.11-27}$$

对于平面问题，我们仅考虑 6 个平面内分量：

$$\eta_{rrr}^{p} = \nabla\varepsilon_{rr,r}^{p} = \frac{\partial\varepsilon_{rr}^{p}}{\partial r} \tag{B.12-1}$$

$$\eta_{\theta\theta r}^{p} = 2\nabla\varepsilon_{\theta r,\theta}^{p} - \nabla\varepsilon_{\theta\theta,r}^{p} = 2\left(\frac{\partial\varepsilon_{r\theta}^{p}}{r\partial\theta} + \frac{\varepsilon_{rr}^{p} - \varepsilon_{\theta\theta}^{p}}{r}\right) - \frac{\partial\varepsilon_{\theta\theta}^{p}}{\partial r} \tag{B.12-2}$$

$$\eta_{r\theta r}^{p} = \nabla\varepsilon_{rr,\theta}^{p} = \frac{\partial\varepsilon_{rr}^{p}}{r\partial\theta} - \frac{2\varepsilon_{r\theta}^{p}}{r} \tag{B.12-3}$$

$$\eta_{rr\theta}^{p} = 2\nabla\varepsilon_{r\theta,r}^{p} - \nabla\varepsilon_{rr,\theta}^{p} = 2\frac{\partial\varepsilon_{r\theta}^{p}}{\partial r} - \left(\frac{\partial\varepsilon_{rr}^{p}}{r\partial\theta} - \frac{2\varepsilon_{r\theta}^{p}}{r}\right) \tag{B.12-4}$$

$$\eta_{\theta\theta\theta}^{p} = \nabla\varepsilon_{\theta\theta,\theta}^{p} = \frac{\partial\varepsilon_{\theta\theta}^{p}}{r\partial\theta} + \frac{2\varepsilon_{r\theta}^{p}}{r} \tag{B.12-5}$$

$$\eta_{r\theta\theta}^{p} = \nabla\varepsilon_{\theta\theta,r}^{p} = \frac{\partial\varepsilon_{\theta\theta}^{p}}{\partial r} \tag{B.12-6}$$

最后，我们可以得到式 (2.3.54)。

附录 C：数值方案

推进基于 PRB 模型的评估所需的关键知识是 GSFE 曲线的计算，该曲线应是氢浓度的函数。在不失一般性的前提下，本文使用大规模原子/分子并行模拟器（LAMMPS）代码 [236]计算常见金属（例如 α-Fe 和 FeNiCr 中熵合金（MEA））的 GSFE。α-Fe 模拟系统中 Fe 与氢原子之间的原子间相互作用，采用 Finnis-Sinclair 型修正 [25] 的嵌入原子法（EAM）势描述。该势最初由 Ramasubramaniam 等人开发 [237]，并由 Song和Curtin 修正 [25]。MEA 模拟系统中的原子间相互作用采用 Zhou 等人开发的 EAM 势描述 [238]。速度-Verlet 积分的时间步长设为 1 fs。沿 x、y 和 z 轴方向均施加周期性边界条件。立方盒模拟系统最初在 NPT 系综中于 300 K 下达到平衡。对于 FeNiCr MEA，还采用蒙特卡洛方法进行额外弛豫，随后再次在 NPT 系综中达到平衡。之后，将氢原子随机插入模拟盒中。通过刚性移动晶体试样的两半来评估 GSFE 曲线；体心立方晶格和面心立方晶格的堆垛序列分别见文献 [239, 240] 和 [241, 242] 。图 C1-(a) 展示了体心立方铁的 {112}〈111〉滑移系的 GSFE，其伯格斯矢量为 $b = a$〈111〉/2，其中 a 是 Fe 的晶格常数。图 C1-(b) 显示，不稳定层错能 γ_{usf} 几乎随氢浓度 c_H的增加而线性增大。

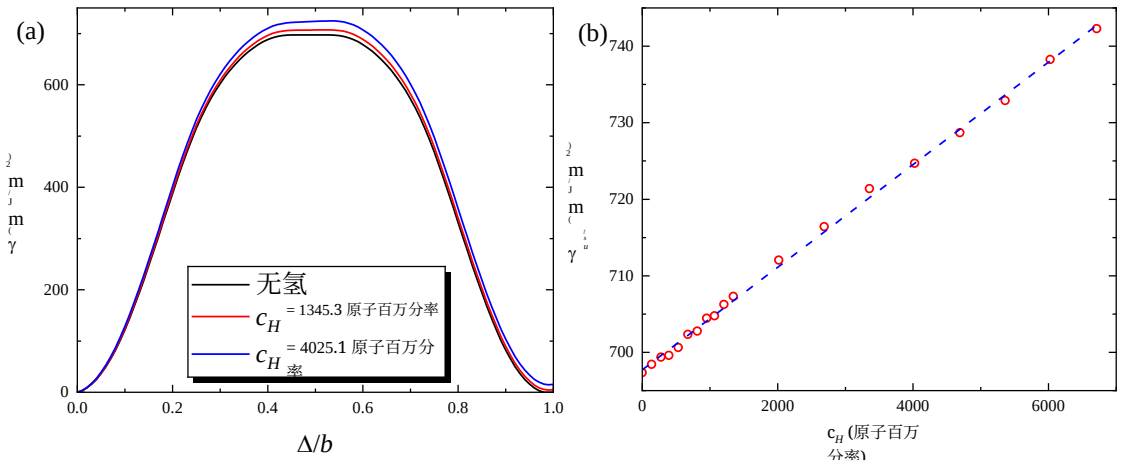


图 C1. (a) 不同氢浓度下体心立方铁的广义层错能曲线，c_H = 0、139.3、673.1、1345.3、2687.0 和 4025.1 原子百万分率，b/a = 〈111〉/2；(b) γ_{usf} 随氢浓度 c_H 的变化，蓝色虚线是对红色空心圆进行线性拟合得到的，斜率 k =0.0067 (mJ/m²)/原子百万分率。

图 C2-(a) 展示了不同氢浓度下，面心立方 FeNiCr 多主元合金的 {111}〈112〉滑移系的广义层错能曲线，其伯格斯矢量为 $b_p = a\langle 11\bar{2}\rangle/6$，其中 a 是 FeNiCr 多主元合金的晶格常数。图 C2-(b) 展示了四个参数 γ_{usf}、 γ_{ssf}、 γ_{utf} 和 γ_{stf} 随氢浓度 c_H线性变化。

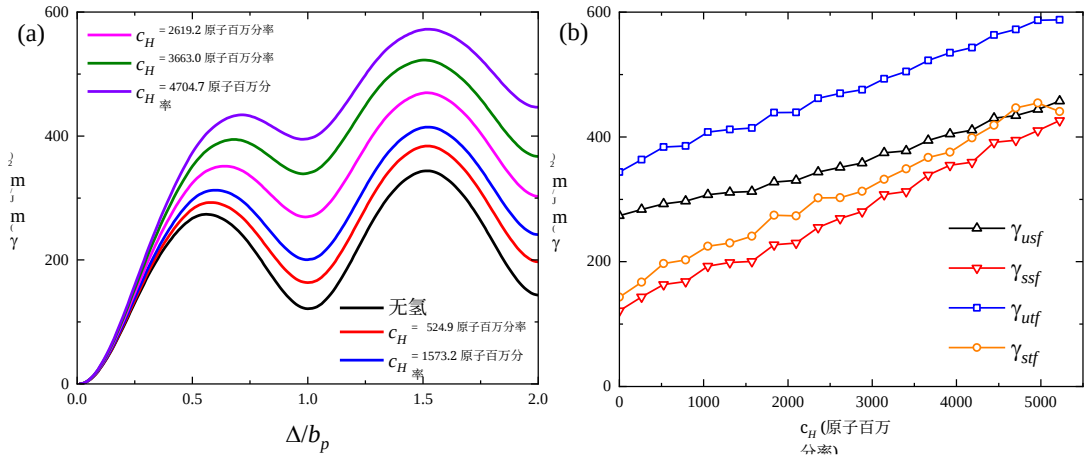


图 C2. (a) 不同氢浓度下 FeNiCr 多主元合金的广义层错能曲线，$b_p/a = \langle 11\bar{2}\rangle/6$；(b) γ_{usf}、 γ_{ssf}、 γ_{utf} 和 γ_{stf} 随氢浓度 c_H 的变化。

数据可用性声明

如有合理需求，可提供相关数据。

参考文献

[1] I.M. Robertson, P. Sofronis, A. Nagao, M.L. Martin, S. Wang, D.W. Gross, K.E. Nygren, 氢脆的理解, 《冶金与材料学报A辑》 46 (2015) 2323-2341.[2] H. Yu, A. Díaz, X. Lu, B. Sun, Y. Ding, M. Koyama, J. He, X. Zhou, A. Oudriss, X. Feaugas, Z. Zhang, 氢脆: 显著的材料挑战 - 全面综述与未来方向, 《化学评论》124 (2024) 6271-6392.[3] A. Campari, F. Ustolin, A. Alvaro, N. Paltrinieri, 关于氢脆及氢能技术基于风险的检验的综述, 《International Journal of Hydrogen Energy》48 (2023) 35316-35346.[4] F.F. Dear, G.C.G. Skinner, 钢中氢脆机制：讨论, 《英国皇家学会哲学汇刊A辑：数学、物理与工程科学》375 (2017) 20170032.[5] Y.-S. Chen, C. Huang, P.-Y. Liu, H.-W. Yen, R. Niu, P. Burr, K.L. Moore, E. Martínez-Pañeda, A. Atrens, J.M. Cairney, 金属中的氢陷阱与氢脆——综述, 《International Journal of Hydrogen Energy》136 (2025) 789-821.[6] O. Barrera, D. Bombac, Y. Chen, T.D. Daff, E. Galindo-Nava, P. Gong, D. Haley, R. Horton, I. Katzarov, J.R. Kermode, C. Liverani, M. Stopher, F. Sweeney, 理解并缓解钢的氢脆：从原子尺度到连续尺度的实验、建模和设计进展综述, 《材料科学杂志》53 (2018) 6251-6290.[7] J. Zheng, X. Liu, P. Xu, P. Liu, Y. Zhao, J. Yang, 高压气态储氢技术的发展, 《International Journal of Hydrogen Energy》

37 (2012) 1048-1057。[8] P.C. Okonkwo, E.M. Barhoumi, I. Ben Belgacem, I.B. Mansir, M. Aliyu, W. Emori, P.C. Uzoma, W.H. Beitelmal, E. Akyüz, A.B. Radwan, R.A. Shakoor, 《储氢罐氢脆机理过程专题综述》, 《International Journal of Hydrogen Energy》48 (2023) 12935-12948。[9] W. Liu, J. Zhang, L. Qu, B. Wei, M. Niu, C. Sun, 《高压气态氢环境下缺口X80钢的氢脆：空心试样测试与有限元分析的见解》, 《International Journal of Hydrogen Energy》188 (2025) 152125。

[10] W.H. Johnson, 《氢和酸作用下铁和钢产生的一些显著变化》, Nature 11 (1875) 393-393。[11] M. Koyama, C.C. Tasan, E. Akiyama, K. Tsuzaki, D. Raabe, 《双相钢中的氢辅助脱聚与局部塑性》, 《Acta Materialia》70 (2014) 174-187。[12] A. Tehranchi, X. Zhou, W.A. Curtin, 《镍中氢脆的脱聚路径：机理与定量预测》, 《Acta Materialia》185 (2020) 98-109。[13] A.R. Troiano, 《氢和其他间隙原子在金属力学行为中的作用》, Trans. Am. Soc. Met. 52 (1960) 54-80。[14] R.A. Oriani, P.H. Josephic, 《钢氢致开裂的平衡方面》, 《Acta Metall.》22 (1974) 1065-1074。[15] C.D. Beachem, 《氢辅助开裂（氢"脆化"）的新模型》, Metall. Mater. Trans. B 3 (1972) 441-455。[16] H.K. Birnbaum, P. Sofronis, 《氢增强局部塑性——一种氢相关断裂机制》, Mater. Sci. Eng. A 176 (1994) 191-202。[17] S.M. Myers, M.I. Baskes, H.K. Birnbaum, J.W. Corbett, G.G. DeLeo, S.K. Estreicher, E.E. Haller, P. Jena, N.M. Johnson, R. Kirchheim, S.J. Pearton, M.J. Stavola, 《氢与晶体固体中缺陷的相互作用》, Rev. Mod. Phys. 64 (1992) 559-617。[18] S. Laliberté-Riverin, J. Bellemare, F. Sirois, M. Brochu, 《通过断口形貌学确定氢脆应力强度阈值》, Materialia 12 (2020) 100759。[19] S.P. Lynch, 《镍单晶中的氢脆与液态金属脆化》, Scr. Metall. 13 (1979) 1051-1056。[20] T. Neeraj, R. Srinivasan, J. Li, 《铁素体钢的氢脆：关于变形显微组织、纳米尺度韧窝及纳米空洞化失效的观察》, 《Acta Materialia》60 (2012) 5160-5171。[21] 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变形诱导前体纳米空洞形成的重要性》, 体心立方铁, 《International Journal of Plasticity》74 (2015) 175-191。[22] M. Nagumo, K. Takai, 《应变诱导空位在钢氢脆中的主导作用：综述》, 《Acta Materialia》165 (2019) 722-733。[23] I.H. Katzarov, A.T. Paxton, 《氢脆 II：分析氢增强脱粘在α-Fe的(111)晶面上的作用》, 《物理评论·材料》1 (2017) 033603。[24] P. Gong, A. Turk, J. Nutter, F. Yu, B. Wynne, P. Rivera-Diaz-del-Castillo, W. Mark Rainforth, 《先进高强钢中的氢脆机理》, 《Acta Materialia》223 (2022) 117488。[25] 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。[26] P. Sofronis, H.K. Birnbaum, 《氢-位错-杂质相互作用的力学——I. 剪切模量增加》, 《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》43 (1995) 49-90。[27] I.M. Robertson, 《氢对位错动力学的影响》, 《Engineering Fracture Mechanics》68 (2001) 671-692。[28] M.L. Martin, M. Dadfarnia, A. Nagao, S. Wang, P. Sofronis, 《结构材料氢脆中氢增强局部塑性机制的阐释》, 《Acta Materialia》165 (2019) 734-750。[29] V. Bulatov, W. Cai, 《一次研究一个位错》, 《自然·材料》22 (2023) 679-680。[30] T. Richeton, J. Weiss, F. Louchet, 《位错雪崩：温度、晶粒尺寸和应变硬化的作用》, 《Acta Materialia》53 (2005) 4463-4471。[31] T. Richeton, P. Dobron, F. Chmelik, J. Weiss, F. Louchet, 《金属单晶塑性的临界特性》, Mater. Sci. Eng. A 424 (2006) 190-195。[32] J.R. Greer, J.-Y. Kim, M.J. Burek, 《纳米尺度单晶纳米柱的原位力学测试》, JOM 61 (2009) 19-25。[33] R. Peierls, 《位错的尺寸》, Proceedings of the Physical Society 52 (1940) 34。[34] F.R. N. Nabarro, 《简单立方晶格中的位错》, Proceedings of the Physical Society 59 (1947) 256。[35] B. Joós, Q. Ren, M.S. Duesbery, 《采用广义层错回复力的硅中位错Peierls-Nabarro模型》, Phys. Rev. B 50 (1994) 5890-5898。[36] B. Joós, M.S. Duesbery, 《位错的Peierls应力：解析公式》, 《Physical Review Letters》78 (1997) 266-269。[37] G. Lu, 《位错的Peierls—Nabarro模型：一种历史悠久的理论及其最新发展》, 载于：S. Yip（编）, 《材料建模手册：方法》, Springer Netherlands, Dordrecht, 2005年, 第793-811页。[38] S. Patrizi, T. Sangsawang, 《从Peierls–Nabarro模型到位错连续体的运动方程》, Nonlinear Analysis 202 (2021) 112096。[39] G. Schoeck, 《Peierls模型：进展与局限》, Mater. Sci. Eng. A 400-401 (2005) 7-17。[40] Y. Yao, T.C. Wang, 《界面失配位错的修正Peierls–Nabarro模型》, 《Acta Materialia》47 (1999) 3063-3068。[41] H.B. Huntington, 《刃型位错核心Peierls-Nabarro模型的修正》, Proceedings of the Physical Society. Section B 68 (1955) 1043。[42] Y. Xiang, H. Wei, P. Ming, W. E, 《Al和Cu中弯曲位错及位错环核心结构的广义Peierls–Nabarro模型》, 《Acta Materialia》56 (2008) 1447-1460。[43] G. Schoeck, 《广义Peierls–Nabarro模型》, 《哲学杂志 A》69 (1994) 1085-1095。[44] Y.-H. Li, H.-B. Zhou, F. Gao, G. Lu, G.-H. Lu, F. Liu, 《氢诱导体心立方钨中的位错核心重构》, 《Acta Materialia》226 (2022) 117622。[45] P. Yu, Y. Cui, G.-z. Zhu, Y. Shen, M. Wen, 《位错芯半径和能量在氢与位错相互作用中的关键作用》, 《Acta Materialia》185 (2020) 518-527。[46] M.S. Hasan, M.F. Kapci, B. Bal, M. Koyama, H. Bayat, W. Xu, 《氢脆氢增强局部塑性机制的纯金属Fe原子尺度研究》, 《International Journal of Hydrogen Energy》57 (2024) 60-68。[47] M.S. Hasan, H. Bayat, C. Delaney, C. Foronda, W. Xu, 《氢诱导Fe中位错核心转变及其对位错迁移率的影响》, TMS 2024第153届年会暨展览补充论文集, Springer Nature Switzerland, Cham, 2024年, 第1000-1007页。[48] C. Nowak, X.W. Zhou, 《基于时间平均分子动力学研究氢气氛与体心立方Fe中位错特征之间的相互作用》, 《Physical Chemistry Chemical Physics》25 (2023) 8369-8375。[49] G.P.M. Leyson, B. Grabowski, J. Neugebauer, 《位错诱导纳米氢化物的多尺度描述》, 《Acta Materialia》89 (2015) 50-59。[50] L. Zhang, Y. Xiang, J. Han, D.J. Srolovitz, 《随机性对高熵合金强度的影响》, 《Acta Materialia》166 (2019) 424-434。[51] G. Stenerud, R. Johnsen, J.S. Olsen, J. He, A. Barnoush, 《氢对718合金中位错形核的影响》, 《International Journal of Hydrogen Energy》42 (2017) 15933-15942。[52] A. Barnoush, H. Vehoff, 《氢脆研究的最新进展：氢对位错形核的影响》, 《Acta Materialia》58 (2010) 5274-5285。

[53] D. Wang, X. Lu, Y. Deng, X. Guo, A. Barnoush，原位电化学纳米压痕揭示氢对 Fe-22Mn-0.6C 孪生诱发塑性钢纳米力学性能的影响，《Acta Materialia》166（2019）618-629。[54] R. Kirchheim，通过溶质偏聚降低晶界、位错线和空位形成能。I. 理论背景，《Acta Materialia》55（2007）5129-5138。[55] R. Kirchheim，通过溶质偏聚降低晶界、位错线和空位形成能：II. 实验依据及其影响，《Acta Materialia》55（2007）5139-5148。[56] R. Kirchheim，重新审视氢脆模型与氢致均匀位错形核，《Scripta Materialia》62（2010）67-70。[57] R. Kirchheim，重点关注氢的可移动溶质原子引起的固溶软化与硬化，《Scripta Materialia》67（2012）767-770。[58] G.P.M. Leyson, B. Grabowski, J. Neugebauer，氢增强均匀位错形核的多尺度建模，《Acta Materialia》107（2016）144-151。[59] P.J. Ferreira, I.M. Robertson, H.K. Birnbaum，氢对位错间相互作用的影响，《Acta Materialia》46（1998）1749-1757。[60] L. Huang, D. Chen, D. Xie, S. Li, Y. Zhang, T. Zhu, D. Raabe, E. Ma, J. Li, Z. Shan，定量试验揭示氢增强α铁中的位错运动，《自然·材料》22（2023）710-716。[61] Y. Ogawa, M. Tanaka, T. Fujita, A. Shibata，通过 Haasen 图重新考察含氢 Fe–Cr–Ni 奥氏体钢中的热激活位错运动，《International Journal of Hydrogen Energy》74（2024）170-182。[62] D. Xie, S. Li, M. Li, Z. Wang, P. Gumbsch, J. Sun, E. Ma, J. Li, Z. Shan，氢化空位钉扎铝中的位错，《Nature Communications》7（2016）13341。[63] M.F. Baltacioglu, M.F. Kapci, J.C. Schön, J. Marian, B. Bal，通过分子动力学获得的体心立方铁唯象氢致刃型位错迁移率定律，《International Journal of Hydrogen Energy》87（2024）917-927。[64] M.F. Kapci, J.C. Schön, B. Bal，氢在α铁中刃型位错迁移率及晶界-位错相互作用中的作用，《International Journal of Hydrogen Energy》46（2021）32695-32709。[65] K.-S. Kim, Q.-J. Li, J. Li, C.C. Tasan，氢既能使体心立方金属中的位错运动，也能将其钉扎，《Nature Communications》16（2025）3936。[66] I.H. Katzarov, D.L. Pashov, A.T. Paxton，氢脆 I. 氢增强局部塑性分析：氢对 α-Fe 中螺位错速度的影响，《物理评论·材料》1（2017）033602。[67] Y. Murakami, T. Kanezaki, Y. Mine，氢对氢脆的抑制作用，《冶金与材料学报A辑》41（2010）2548-2562。[68] A.M.Z. Tan, Z. Li, Y. Zhao, U. Ramamurty, H. Gao，模拟面心立方复杂浓缩合金中孪晶界改善的耐氢脆性，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》188（2024）105657。[69] S.S. Shishvan, G. Csányi, V.S. Deshpande，氢致快速断裂，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》134（2020）103740。[70] P. Novak, R. Yuan, B.P. Somerday, P. Sofronis, R.O. Ritchie，钢中氢致沿晶断裂的统计物理微观力学模型，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》58（2010）206-226。[71] M. Dadfarnia, M.L. Martin, A. Nagao, P. Sofronis, I.M. Robertson，位错输运氢的建模，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》78（2015）511-525。[72] D. Di Stefano, M. Mrovec, C. Elsässer，镍晶界处氢陷阱与扩散的第一性原理研究，《Acta Materialia》98（2015）306-312。[73] S. Wang, M.L. Martin, I.M. Robertson, P. Sofronis，氢环境对铁晶界分离的影响，《Acta Materialia》107（2016）279-288。[74] D. Di Stefano, R. Nazarov, T. Hickel, J. Neugebauer, M. Mrovec, C. Elsässer，氢与α铁中 TiC 析出物相互作用的第一性原理研究，《物理评论 B》93（2016）184108。[75] Y.-S. Chen, H. Lu, J. Liang, A. Rosenthal, H. Liu, G. Sneddon, I. McCarroll, Z. Zhao, W. Li, A. Guo, J.M. Cairney，观察到氢在位错、晶界和析出物处的捕获，《科学》367（2020）171。[76] L. Vandewalle, T. Depover, K. Verbeken，碳化物捕获氢的当前前沿：从理论到实验，《International Journal of Hydrogen Energy》136（2025）888-901。[77] T. Depover, K. Verbeken，位错处的氢对 Fe-C-X 合金氢脆敏感性的有害影响：氢增强局部塑性机制的实验验证，《International Journal of Hydrogen Energy》43（2018）3050-3061。[78] Y. Wang, B. Sharma, Y. Xu, K. Shimizu, H. Fujihara, K. Hirayama, A. Takeuchi, M. Uesugi, G. Cheng, H. Toda，通过调控纳米析出物抵抗高强度铝合金的氢脆，《Nature Communications》13（2022）6860。[79] A. Nagao, M.L. Martin, M. Dadfarnia, P. Sofronis, I.M. Robertson，纳米级 (Ti,Mo)C 析出物对回火板条马氏体钢氢脆的影响，《Acta Materialia》74（2014）244-254。[80] V.S. Krasnikov, P.A. Bezborodova, A.E. Mayer，氢在θ′析出物上富集对 Al-Cu 合金剪切强度的影响，《International Journal of Plasticity》（2022）103475。[81] C.-T. Santos Maldonado, A. Zafra, E. Martínez Pañeda, P. Sandmann, R. Morana, M.-S. Pham，位错胞对变形加工及增材制造因科镍 718 氢脆的影响，《材料通讯》5（2024）223。[82] W. Chen, W. Zhao, P. Gao, F. Li, S. Kuang, Y. Zou, Z. Zhao，2000 MPa 级热冲压钢中位错、析出物与氢原子的相互作用，《材料研究与技术杂志》18（2022）4353-4366。[83] J. Li, C. Lu, L. Pei, C. Zhang, R. Wang，通过原子尺度建模研究氢对晶格位错与晶界相互作用的调控，《International Journal of Hydrogen Energy》45（2020）9174-9187。[84] M. Koyama, S.M. Taheri-Mousavi, H. Yan, J. Kim, B.C. Cameron, S.S. Moeini-Ardakani, J. Li, C.C. Tasan，氢脱附过程中微米尺度位错运动的起源，《科学进展》6（2020）eaaz1187。[85] Y.G. Li, W.H. Zhou, R.H. Ning, L.F. Huang, Z. Zeng, X. Ju，氦离子与中子辐照下钨中氦积累的团簇动力学模型，《计算物理通讯》11（2012）1547-1568。[86] S.I. Golubov, A.M. Ovcharenko, A.V. Barashev, B.N. Singh，描述点缺陷团簇演化的动力学方程近似求解分组法，《哲学杂志 A》81（2001）643-658。[87] K. Zhao, J. He, A.E. Mayer, Z. Zhang，纳米压痕条件下氢对位错集体行为的影响，《Acta Materialia》148（2018）18-27。[88] J.M. Tarp, L. Angheluta, J. Mathiesen, N. Goldenfeld，相场晶体模型中的晶体塑性位错密度间歇性涨落，《Physical Review Letters》113（2014）265503。[89] Y. Lu, Y.-H. Zhang, E. Ma, W.-Z. Han，螺位错相对于刃型位错的迁移率控制金属中的韧脆转变，《美国国家科学院院刊》118（2021）e2110596118。

[90] I. Finnie, R.A. Mayville，钢中韧脆转变认识的历史回顾，《工程材料与技术杂志》112（1990）56-60。[91] J.R. Rice, R. Thomson，晶体的韧性与脆性行为，《Philosophical Magazine》29（1974）73-97。[92] J.R. Rice，基于 Peierls 概念分析裂纹尖端的位错形核，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》40（1992）239-271。[93] J.R. Rice, G.E. Beltz，裂纹处位错形核的激活能，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》42（1994）333-360。[94] P.B. Hirsch, S.G. Roberts, J. Samuels，硅中的脆韧转变。II. 解释，《美国皇家学会学报 A 辑：数学与物理科学》421（1989）25-53。[95] A. Giannattasio, S.G. Roberts，钨中脆韧转变温度的应变率依赖性，《Philosophical Magazine》87（2007）2589- 2598。[96] P. Gumbsch, J. Riedle, A. Hartmaier, H.F. Fischmeister，控制钨单晶脆韧转变的因素，《科学》282（1998）1293-1295。[97] Y. Sun, G.E. Beltz，基于各向异性弹性的裂纹尖端位错形核公式，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》42（1994）1905-1932。[98] L. L. Fischer, G. E. Beltz，裂纹钝化对位错形核与解理竞争的影响，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》49（2001）635-654。[99] S.J. Zhou, A.E. Carlsson, R. Thomson，裂纹钝化对裂纹位错发射的影响，《Physical Review Letters》72（1994）852-855。[100] G. Xu, A.S. Argon, M. Ortiz，混合加载模式下从裂纹尖端形核位错：对晶体脆性与韧性行为的启示，《哲学杂志 A》72（1995）415-451。[101] P. Andric, W.A. Curtin，I 型裂纹尖端位错发射的新理论，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》106（2017）315-337。[102] X. Li, W. Li, D.L. Irving, L.K. Varga, L. Vitos, S. Schönecker，等摩尔难熔高熵合金中裂纹尖端的韧性与脆性响应，《Acta Materialia》189（2020）174-187。[103] K. Zhao, F. Zhao, Q. Lin, X. Li, J. Xiao, Y. Gu, Q. Chen，加载速率对氢环境下裂纹尖端位错发射的影响，《材料今日通讯》37（2023）107269。[104] K. Zhao, Y. Ding, H. Yu, J. He, Z. Zhang，沿晶断裂的扩展 Rice 模型，《International Journal of Mechanical Sciences》286（2025）109891。[105] T. Zhu, W. Yang, T. Guo，位错塞积驱动的准解理过程，《Acta Materialia》44（1996）3049-3058。[106] M.J. Lii, X.F. Chen, Y. Katz, W.W. Gerberich，Fe-3wt%Si 晶体中韧性/脆性交替事件的位错建模与声发射观察，《Acta Metallurgica et Materialia》38（1990）2435-2453。[107] W. Zielinski, M.J. Lii, W.W. Gerberich，平衡状态下裂纹尖端位错发射构型—I. Fe2wt%Si 的原位透射电子显微镜观察，《Acta Metallurgica et Materialia》40（1992）2861-2871。[108] H. Huang, W.W. Gerberich，平衡状态下裂纹尖端位错发射构型—II. 与解析模型和计算机模拟模型的比较，《Acta Metallurgica et Materialia》40（1992）2873-2881。[109] P.G. Marsh, W. Zielinski, H. Huang, W.W. Gerberich，平衡状态下裂纹尖端位错发射构型—III. 在高施加应力强度下的应用，《Acta Metallurgica et Materialia》40（1992）2883-2894。[110] C.S. John，预解理硅单晶中的脆韧转变，《Philosophical Magazine》32（1975）1193-1212。[111] M.L. Martin, J.A. Fenske, G.S. Liu, P. Sofronis, I.M. Robertson，关于氢脆钢中准解理断裂面的形成与性质，《Acta Materialia》59（2011）1601-1606。[112] M.L. Martin, I.M. Robertson, P. Sofronis，从变形过程角度解读氢致断裂面：一种新方法，《Acta Materialia》59（2011）3680-3687。[113] N.I. Muskhelishvili，《弹性数学理论若干基本问题》，Springer Dordrecht，1977。[114] G.R. Irwin，穿过板材的裂纹端部附近的应力与应变分析，《应用力学杂志》24（1957）361-364。[115] M. Creager, P.C. Paris，钝裂纹的弹性场方程及其与应力腐蚀开裂的关系，《International Journal of Fracture Mechanics》3（1967）247- 252。[116] M. Huang, Z. Li，钝裂纹尖端的位错发射准则，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》52（2004）1991-2003。[117] V. Lakshmanan, J.C.M. Li，从 I 型裂纹沿倾斜晶面发射的刃型位错，《材料科学与工程 A》104（1988）95-104。[118] K. Zhou, A.A. Nazarov, M.S. Wu，含位错偶极的双晶纳米薄膜抗拉强度的原子模拟，《Philosophical Magazine》88（2008）3181-3191。[119] T. Shimokawa, M. Tsuboi，作为有效位错源的倾斜晶界中的原子尺度沿晶裂纹尖端塑性，《Acta Materialia》87（2015）233-247。[120] D.H. Warner, W.A. Curtin, S. Qu，裂纹尖端过程的速率依赖性可预测面心立方金属中的孪生趋势，《自然·材料》6（2007）876- 881。[121] D.H. Warner, W.A. Curtin，面心立方金属中位错形核温度依赖活化能垒的起源与意义，《Acta Materialia》57（2009）4267-4277。[122] T. Zhu, J. Li, A. Samanta, A. Leach, K. Gall，表面位错形核的温度与应变率依赖性，《Physical Review Letters》100（2008）025502。[123] K. Zhao, I.G. Ringdalen, J.Y. Wu, J.Y. He, Z.L. Zhang，含预存纳米孔洞金属的韧性机制，《Computational Materials Science》125（2016）36-50。[124] S.M.O. Tavares, P.M.S.T. de Castro，等效应力强度因子：缺乏唯一定义所带来的影响，《应用科学》，2023，页码 4820。[125] C.R. Weinberger, A.T. Jennings, K. Kang, J.R. Greer，金纳米线中位错形核与强度的原子模拟和连续介质建模，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》60（2012）84-103。[126] Z. Zhao, Y. Wei，体心立方铁中沿晶微裂纹前方塑性变形诱发晶界消除的内在特征，《International Journal of Plasticity》184（2025）104208。[127] J. Chen, S. Takezono，I 型裂纹尖端的无位错区，《Engineering Fracture Mechanics》50（1995）165-173。[128] R. Thomson，延性材料中的脆性断裂及其在氢脆中的应用，《材料科学杂志》13（1978）128-142。[129] D.M. Lipkin, G.E. Beltz，存在位错塑性时解理断裂的简易弹性胞元模型，《Acta Materialia》44（1996）1287-1291。[130] J.W. Hutchinson，硬化材料中拉伸裂纹末端的奇异行为，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》16（1968）13-31。[131] J.W. Hutchinson，裂纹尖端的塑性应力应变场，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》16（1968）337-342。[132] J.R. Rice, G.F. Rosengren，幂律硬化材料中裂纹尖端附近的平面应变变形，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》16（1968）1- 12。

[133] C.F. Shih, J.W. Hutchinson, 《平面应力裂纹问题的全塑性解与大范围屈服估算》, 《工程材料与技术杂志》98（1976年）289-295.[134] C.F. Shih, M.D. German, 《通过HRR奇异性对裂纹尖端场进行单参数表征的要求》, 《International Journal of Fracture》17（1981年）27-43.[135] D. Hull, D.J. Bacon, 第10章——晶体固体强度, 载于: D. Hull, D.J. Bacon（编）, 《位错导论》（第五版）, Butterworth-Heinemann, 牛津, 2011年, 第205-249页。[136] J.-S. Wang, 《氢致脆化的热力学方面》, 《Engineering Fracture Mechanics》68（2001年）647-669.[137] J.P. Hirth, J.R. Rice, 《界面吸附热力学对脱粘的影响》, 《冶金与材料学报A辑》11（1980年）1501-1511.[138] D.S. Lieberman, S. Zirinsky, 《任意取向单晶弹性常数的简化计算》, 《晶体学报》9（1956年）431-436.[139] D.S. Lieberman, S. Zirinsky, 《任意取向单晶弹性常数的简化计算: 更正》, 《晶体学报》10（1957年）242.[140] M.I. Mendelev, S. Han, D.J. Srolovitz, G.J. Ackland, D.Y. Sun, M. Asta, 《适用于晶态和液态铁的新型原子间势的开发》, 《Philosophical Magazine》83（2003年）3977-3994.[141] L. Zhang, G. Csányi, E. van der Giessen, F. Maresca, 《通过高斯近似势的主动学习揭示体心立方铁中的原子尺度断裂》, 《npj计算材料》9（2023年）217.[142] G.C. Sih, P.C. Paris, G.R. Irwin, 《直线各向异性体中的裂纹》, 《International Journal of Fracture Mechanics》1（1965年）189-203.[143] A.P. Sutton, R.W. Balluffi, 《晶体材料中的界面》, Clarendon, 牛津, 1995年。[144] M. Lane, 《界面断裂》, 《材料研究年度评论》33（2003年）29-54.[145] J.J. Möller, E. Bitzek, 《晶界裂纹的断裂韧性与键捕获》, 《Acta Materialia》73（2014年）1-11.[146] E. Smith, 《低碳钢中解理微裂纹的形核与生长》, 《屈服与断裂的物理基础》会议论文集（1966年）36-46.[147] M.L. Jokl, V. Vitek, C.J. McMahon, 《可变形固体脆性断裂的微观理论: 理想断裂功与塑性功之间的关系》, 《Acta Metallurgica》28（1980年）1479-1488.[148] C.J. McMahon, V. Vitek, 《偏析杂质对沿晶断裂能的影响》, 《Acta Metallurgica》27（1979年）507-513.[149] A.H.M. Krom, R.W.J. Koers, A. Bakker, 《钝化裂纹尖端附近的氢输运》, 《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》47（1999年）971-992.[150] J.P. Hirth, 《氢对铁和钢性能的影响》, 《冶金与材料学报A辑》11（1980年）861-890.[151] P. Sofronis, R.M. McMeeking, 《钝化裂纹尖端附近氢输运的数值分析》, 《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》37（1989年）317-350.[152] A. Shibata, T. Yonemura, Y. Momotani, M.-h. Park, S. Takagi, Y. Madi, J. Besson, N. Tsuji, 《局部应力、应变和氢含量对低碳马氏体钢氢相关断裂行为的影响》, 《Acta Materialia》210（2021年）116828.[153] W.A. Jesser, 《摩擦应力在失配位错生成中的作用》, 《南非科学杂志》104（2008年）379-382.[154] F.R.N. Nabarro, 《弹性应变对合金中偏析颗粒形状的影响》, 《物理学会会刊》52（1940年）90.[155] F.R.N. Nabarro, 《合金中析出所产生的应变》, 《伦敦皇家学会会刊: A辑, 数学与物理科学》175（1940年）519-538.[156] W.A. Jesser, 《球形析出物失去共格性的理论》, 《Philosophical Magazine》19（1969年）993-999.[157] I. Chattoraj, S.B. Tiwari, A.K. Ray, A. Mitra, S.K. Das, 《研究钢制管线管在模拟酸性环境中暴露期间因氢侵入导致的机械性能退化》, 《腐蚀科学》37（1995年）885-896.[158] C.F. Dong, Z.Y. Liu, X.G. Li, Y.F. Cheng, 《充氢对X100管线钢氢致开裂敏感性的影响》, 《International Journal of Hydrogen Energy》34（2009年）9879-9884.[159] Y. Wang, X. Wu, Z. Zhou, X. Li, 《喷丸处理后氢向钢中输运的数值分析》, 《物理学研究成果》11（2018年）5-16.[160] T. Lin, A.G. Evans, R.O. Ritchie, 《穿晶解理脆性断裂的统计模型》, 《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》34（1986年）477-497.[161] W. Weibull, 《材料强度的统计理论》, 《工程科学学会会刊》12（1939年）153.[162] A.M. Cuitiño, M. Ortiz, 《面心立方单晶中通过空位凝聚发生的韧性断裂》, 《Acta Materialia》44（1996年）427-436.[163] W. Yang, 《宏观与微观断裂力学》, 国防工业出版社, 1995年。[164] T.C. Wang, S.H. Chen, 《高级断裂力学》, 科学出版社, 2009年。[165] V. Shlyannikov, A. Tumanov, 《利用模态混合参数表征试样中的裂纹尖端应力场》, 《International Journal of Fracture》185（2014年）49-76.[166] C.F. Shih, 《混合模态平面应变裂纹问题的小范围屈服分析》, 载于: G.R. Irwin（编）, 《断裂分析: 1973年全国断裂力学研讨会论文集, 第二部分》, ASTM国际, 1974年, 第0页。[167] V.N. Shlyannikov, 《平面应力和平面应变小范围屈服条件下的混合模态裂纹行为》, 载于: V.N. Shlyannikov（编）, 《弹塑性混合模态断裂准则与参数》, Springer Berlin Heidelberg, 柏林, 海德堡, 2003年, 第1-72页。[168] H. Gao, Y. Huang, W.D. Nix, J.W. Hutchinson, 《基于机制的应变梯度塑性——I. 理论》, 《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》47（1999年）1239-1263.[169] N.A. Fleck, J.W. Hutchinson, 《应变梯度塑性》, 载于: J. W. Hutchinson, T.Y. Wu（编）, 《应用力学进展》, 爱思唯尔1997年, 第295-361页。[170] M. Isfandbod, E. Martínez-Pañeda, 《一种用于氢辅助断裂的基于机制的多陷阱相场模型》, 《International Journal of Plasticity》144（2021年）103044.[171] A. Arsenlis, D.M. Parks, 《几何必需位错密度和统计储存位错密度的晶体学方面》, 《Acta Materialia》47（1999年）1597-1611.[172] M.X. Shi, Y. Huang, H. Gao, 《非均匀塑性变形中的J 积分与几何必需位错》, 《International Journal of Plasticity》20（2004年）1739-1762.[173] K.L. Murty, K. Detemple, O. Kanert, J.T.M. Dehosson, 《利用原位核磁共振研究铝中应变、温度和应变速率变化对变形诱导空位浓度的影响》, 《冶金与材料学报A辑》29（1998年）153-159.[174] T. Ungár, E. Schafler, P. Hanák, S. Bernstorff, M. Zehetbauer, 《利用原位X射线衍射测定铜在塑性变形过程中的空位产生》, 《材料科学与工程A辑》462（2007年）398-401.[175] M.J. Zehetbauer, 《非平衡空位对强化的影响》, 《关键工程材料》97-98（1995年）287-306.[176] P.J. Noell, R.B. Sills, A.A. Benzerga, B.L. Boyce, 《金属韧性断裂过程中的空洞形核: 综述》, 《材料科学进展》135（2023年）101085.[177] G. Saada, 《论位错交割产生的点缺陷的性质》, 《Acta Metallurgica》9（1961年）965-966.

[178] G. Saada, 《面心立方金属中通过加工硬化产生点缺陷》, 《Physica》27（1961年）657-660.[179] S.J. Zhou, D.L. Preston, F. Louchet, 《利用大规模分子动力学和位错能学研究带割阶的分解位错所形成的空位》, 《Acta Materialia》47（1999年）2695-2703.[180] M.J. Buehler, A. Hartmaier, H. Gao, M.A. Duchaineau, F.F. Abraham, 《加工硬化的动态复杂性：大规模分子动力学模拟》, 《力学学报》21（2005年）103-111.[181] M. Militzer, W.P. Sun, J.J. Jonas, 《模拟变形诱导空位对偏析和析出的影响》, 《Acta Metallurgica et Materialia》42（1994年）133-141.[182] T. G.I., 《金属中的塑性应变》, 《Journal of the Institute of Metals》62（1938年）307-324.[183] G.I. Taylor, 《晶体塑性变形机制。第一部分——理论》, 《伦敦皇家学会会刊A辑》145（1934年）362-387.[184] D.O. Kharchenko, V.O. Kharchenko, A.I. Bashtova, 《非平衡随机点缺陷系统中空洞尺寸增长的研究》, 《欧洲物理学杂志B辑》89（2016年）123.[185] S. Harada, S. Yokota, Y. Ishii, Y. Shizuku, M. Kanazawa, Y. Fukai, 《Ni–H、Co–H和Pd–H体系中空位浓度与氢浓度之间的关系》, 《Journal of Alloys and Compounds》404-406（2005年）247-251.[186] H. Mecking, Y. Estrin, 《空位生成对塑性变形的影响》, 《Scripta Metallurgica》14（1980年）815-819.[187] E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevski, 第十二章——相变动力学, 载于：E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevski（编）, 《物理动力学》, Pergamon出版社，阿姆斯特丹，1981年，第427-447页.[188] G.R. Stewart, 《低温比热的测量》, 《Review of Scientific Instruments》54（1983年）1-11.[189] C.Y. Ho, R.W. Powell, P.E. Liley, 《元素的热导率》, 《Journal of Physical and Chemical Reference Data》1（2009年）279-421.[190] J. Langner, J.R. Cahoon, 《快速加热使纯铁的α-γ转变温度升高》, 《冶金与材料学报A辑》41（2010年）1276-1283.[191] A.V. Savikovskii, A.S. Semenov, 《平面应力状态下正交各向异性材料混合模式应力强度因子的计算》, 《圣彼得堡国立理工大学学报：物理与数学》15（2022年）102–123.[192] A.V. Savikovskii, A.S. Semenov, 《平面应变状态下立方对称材料裂纹断裂参数的计算》, 《圣彼得堡国立理工大学学报：物理与数学》16（2023年）131–149.[193] T.L. Anderson, 《断裂力学：基础与应用》, 第3版，CRC出版社，2005年.[194] A. Sarmah, S. Asqardoust, M.K. Jain, H. Yuan, 《基于三维微观结构的铝板大塑性应变韧性损伤建模》, 《International Journal of Plasticity》181（2024年）104088.[195] T. Zhu, J. Li, S. Yip, 《裂纹尖端位错环发射的原子尺度研究》, 《Physical Review Letters》93（2004年）025503.[196] Y. Dai, Y. Liu, Y.J. Chao, 《II型蠕变条件下裂纹尖端场的高阶渐近分析》, 《International Journal of Solids and Structures》125（2017年）89-107.[197] V. Radu, A. Ion, A. Nitu, 《氢浓度对Zr-2.5%Nb压力管合金Ramberg–Osgood本构方程的影响》, 《核研究与教育促进可持续发展的第11届年度国际会议》，核研究所，皮特什蒂（罗马尼亚），2018年，第16-20页.[198] H. Park, S. Moon, K. Kang, 《原子氢对体心立方钨中〈111〉{112}单个位错行为的影响：原子尺度研究》, 《Journal of Nuclear Materials》589（2024年）154842.[199] Y. Sun, G.E. Beltz, J.R. Rice, 《基于原子模型对裂纹尖端位错形核中拉伸-剪切耦合的估算》, 《材料科学与工程A辑》170（1993年）67-85.[200] F. Shuang, L. Laurenti, P. Dey, 《最大回复力的标准差控制面心立方多主元合金的本征强度》, 《Acta Materialia》282（2025）120508.[201] S.J. Wang, H. Wang, K. Du, W. Zhang, M.L. Sui, S.X. Mao, 《体心立方钼中的变形诱导结构转变》, 《Nature Communications》5（2014年）3433.[202] Y.N. Gornostyrev, M.I. Katsnelson, 《金属合金中错配稳定的嵌入纳米颗粒》, 《Physical Chemistry Chemical Physics》17（2015年）27249-27257.[203] S.S. Quek, Y. Xiang, D.J. Srolovitz, 《错配球形夹杂周围界面共格性的丧失》, 《Acta Materialia》59（2011年）5398-5410.[204] Y. Xiang, D.J. Srolovitz, 《位错攀移对颗粒绕过机制的影响》, 《Philosophical Magazine》86（2006年）3937-3957.[205] Y. Xiang, D.J. Srolovitz, L.T. Cheng, W. E, 《位错绕过颗粒机制的水平集模拟》, 《Acta Materialia》52（2004年）1745-1760.[206] V. Shlyannikov, E. Martínez-Pañeda, A. Tumanov, R. Khamidullin, 《应变梯度塑性中的I型和II型应力强度因子及位错密度行为》, 《Theoretical and Applied Fracture Mechanics》116（2021年）103128.[207] Y. Huang, S. Qu, K.C. Hwang, M. Li, H. Gao, 《基于机制的应变梯度塑性的经典理论》, 《International Journal of Plasticity》20（2004年）753-782.[208] S. Qu, Y. Huang, H. Jiang, C. Liu, P.D. Wu, K.C. Hwang, 《基于机制的应变梯度塑性（CMSG）经典理论中的断裂分析》, 《International Journal of Fracture》129（2004年）199-220.[209] E. Martínez-Pañeda, N.A. Fleck, 《I型裂纹尖端场：应变梯度塑性理论与J2流动理论》, 《European Journal of Mechanics A/Solids》75（2019年）381-388.[210] H. Jiang, Y. Huang, Z. Zhuang, K.C. Hwang, 《基于机制的应变梯度塑性中的断裂》, 《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》49（2001年）979-993.[211] S. Nazar, S. Lipiec, E. Proverbio, 《用于安全氢气运输的API 5L X65钢氢脆有限元建模》, 《材料科学杂志：工程材料》20（2025）9.[212] H. Yu, J.S. Olsen, A. Alvaro, L. Qiao, J. He, Z. Zhang, 《用于氢脆模拟的氢耦合Gurson模型》, 《Engineering Fracture Mechanics》217（2019年）106542.[213] M. Lin, H. Yu, Y. Ding, G. Wang, V. Olden, A. Alvaro, J. He, Z. Zhang, 《统一氢增强塑性与脱粘的预测模型》, 《Scripta Materialia》215（2022年）114707.[214] R. Depraetere, W. De Waele, S. Hertelé, 《用于模拟塑性主导氢脆机理的全耦合连续损伤模型》, 《Computational Materials Science》200（2021年）110857.[215] S. Chroeun, Y. Charles, J. Mougenot, M. Gaspérini, 《孔隙中氢瞬时捕获的有限元建模》, 《International Journal of Hydrogen Energy》160（2025年）150607.[216] A.A. Benzerga, J.-B. Leblond, 《通过空洞生长至聚合实现的韧性断裂》, 载于：H. Aref, E.v.d. Giessen（编）, 《应用力学进展》, 爱思唯尔2010年，第169-305页。

[217] K. Zhao、J.Y. He、I.G. Ringdalen、Z.L. Zhang，非晶化介导塑性对静水拉伸下理想晶格中氢-空洞相互作用的影响，《应用物理学杂志》123（2018年）245101。[218] V.A. Lubarda、M.S. Schneider、D.H. Kalantar、B.A. Remington、M.A. Meyers，位错发射引起的空洞生长，《Acta Materialia》52（2004年）1397-1408。[219] S. Traiviratana、E.M. Bringa、D.J. Benson、M.A. Meyers，金属中的空洞生长：原子尺度计算，《Acta Materialia》56（2008年）3874-3886。[220] E.M. Bringa、S. Traiviratana、M.A. Meyers，面心立方金属中的空洞萌生：加载取向与纳米晶效应的影响，《Acta Materialia》58（2010年）4458-4477。[221] Y. Tang、E.M. Bringa、B.A. Remington、M.A. Meyers，钽单晶中纳米空洞的生长与塌缩，《Acta Materialia》59（2011年）1354-1372。[222] Y. Tang、E.M. Bringa、M.A. Meyers，金属中通过纳米尺度空洞萌生与生长导致的韧性拉伸失效，《Acta Materialia》60（2012）4856-4865。[223] Q.-z. Chen、W.-y. Chu、C.-m. Hsiao，韧性断裂中微裂纹形核与钝化的原位观察，《Scripta Metallurgica et Materialia》30（1994年）1355-1358。[224] Y. Zhang、Y.-B. Wang、W.-Y. Chu、C.-M. Hsiao，钛铝化合物中微裂纹形核的原位透射电镜观察，《Scripta Metallurgica et Materialia》31（1994年）279-283。[225] M. Wasim、M.B. Djukic、T.D. Ngo，氢增强塑性与氢脆脱粘机制对钢断裂抗力的影响，《工程失效分析》123（2021年）105312。[226] L.M. Martyushev、V.D. Seleznev，物理、化学与生物学中的最大熵产生原理，《物理报告》426（2006年）1-45。[227] H. Ziegler，《热机械学导论》，北荷兰出版社，2012。[228] L.M. Martyushev，最大熵产生原理：两个基本问题，《英国皇家学会哲学汇刊B辑：生物科学》365（2010年）1333-1334。[229] M. Moshtaghi、M. Safyari、M.M. Khonsari，氢增强熵（HEENT）：一种氢脆预测概念，《International Journal of Hydrogen Energy》53（2024年）434-440。[230] M. Safyari、N. Takata、D. Kim、M.M. Khonsari、M. Moshtaghi，氢对增材制造铝合金中动态析出的影响：氢增强熵机制的证据，《Journal of Alloys and Compounds》1027（2025）180395。[231] A. Zajkani、M. Khonsari，疲劳失效熵的统一热力学-力学一致框架，《材料力学》207（2025）105379。[232] O. Gaede、A. Karrech、K. Regenauer-Lieb，各向异性损伤力学作为改进破坏前与破坏后井壁稳定性分析的新方法，《国际地球物理杂志》193（2013年）1095-1109。[233] P.W. Whaley，疲劳过程中的熵产生作为失效判据。工程材料局部断裂理论，1984年。[234] J. Zhao、D. Pedroso，正交曲线坐标中的应变梯度理论，《International Journal of Solids and Structures》45（2008年）3507-3520。[235] S. Swaddiwudhipong、K.K. Tho、J. Hua、Z.S. Liu，C0轴对称单元中的基于机制的应变梯度塑性，《International Journal of Solids and Structures》43（2006年）1117-1130。[236] S. Plimpton，短程分子动力学的快速并行算法，《计算物理学杂志》117（1995年）1-19。[237] A. Ramasubramaniam、M. Itakura、E.A. Carter，基于密度泛函理论的α-铁中氢的原子间势，《物理评论B》79（2009年）174101。[238] X.W. Zhou、C. Nowak、R.S. Skelton、M.E. Foster、J.A. Ronevich、C. San Marchi、R.B. Sills，Fe–Ni–Cr–H原子间势及奥氏体不锈钢中氢影响层错能的预测，《International Journal of Hydrogen Energy》47（2022年）651-665。[239] A. Ojha、H. Sehitoglu、L. Patriarca、H.J. Maier，铁基体心立方合金中的孪晶形核——建模与实验，《材料科学与工程中的建模与模拟》22（2014年）075010。[240] J.J. Möller、M. Mrovec、I. Bleskov、J. Neugebauer、T. Hammerschmidt、R. Drautz、C. Elsässer、T. Hickel、E. Bitzek，应变体心立方金属中的${110}$面缺陷：经典势常见人为现象的起源与影响，《物理评论·材料》2（2018年）093606。[241] S. Kibey、J.B. Liu、M.J. Curtis、D.D. Johnson、H. Sehitoglu，氮对高氮钢中广义层错能和层错宽度的影响，《Acta Materialia》54（2006年）2991-3001。[242] X. Liu、H. Lee、Y. Li、L. Myhill、D. Rodney、P.-A. Geslin、N.C. Admal、G. Po、E. Martinez、Y. Cui，多主元合金的原子信息偏位错动力学，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》208（2026年）106478。