

渗氢环境下体心立方晶体中位错与裂纹的相互影响*

生月^{1**} 李明¹ 党健¹ 李衍杰²

(¹ 中车青岛四方机车车辆股份有限公司, 青岛, 266109)(² 中国铁路济南局集团有限公司, 济南, 250031)

摘要 基于离散位错理论,建立了裂纹尖端渗入氢原子影响下的裂纹与位错相互作用模型,并在此模型的基础上考虑了氢原子对位错穿晶、晶界裂纹萌生以及主裂纹产生的影响.通过计算,分析了不同裂纹尖端渗氢浓度与范围对裂纹前方位错分布产生的影响,给出了晶界裂纹萌生与裂纹尖端氢原子的关系,分析了主裂纹前方无位错区内切应力受裂纹尖端渗氢的影响.

关键词 裂纹,离散位错,氢环境,滑移面,晶界

DOI: 10.19636/j.cnki.cjasm42-1250/o3.2025.012

0 引言

在材料科学中,裂纹是材料失效的主要原因之一.当金属材料当中的裂纹长度较小时,金属晶体的结构(如,晶面方向,晶粒大小,晶界角度等)会对裂纹的扩展产生相对较大的影响^[1].近年来随着氢能源的广泛使用,氢脆现象对晶体中裂纹的影响受到广泛的关注.

就金属材料而言,目前已提出的氢脆机理主要有:氢压理论、氢增强局部塑性、氢促进分离、氢促进位错发射、氢增强应变诱导空位等^[2-9].从微观来看,氢脆形成的机理是氢原子渗透到晶粒内部,从而造成原子键合力降低或影响位错运动^[10-17].在宏观层面表现为材料力学性能的下降以及断裂形式的改变,如 Wu 等^[18]和 Yonezu 等^[19,20]的研究表明氢含量的增加降低了裂纹扩展的应力强度因子阈值.为了解氢脆的作用机理目前经常使用宏观和微观实验的方法,但目前所知的宏观力学实验只能得出氢脆对材料性能的影响,无法表征微观晶体中的氢脆行为.对于研究氢脆的微观机理目前研究人员主要使用纳米压痕实验和微压缩和微悬臂弯曲实验. Bahr 等^[21]和 Nibur 等^[22]的研究表明,氢渗入晶体中降低了材料进入塑性所需要的应力,且促进了更

多滑移面的激活. Gao^[23]通过对单晶铁材料进行纳米压痕实验得出,氢的渗入促进了位错的形成与发射.

在本文中,考虑了氢渗透入裂纹尖端对裂纹前方发射位错产生的影响,通过离散位错的方式对该模型进行建模,模拟裂纹尖端位错在氢渗入的影响下的运动.研究了不同氢浓度以及氢的渗入范围对位错的影响,最终得到裂纹的扩展趋势.

1 裂纹尖端位错模型

1.1 裂纹尖端渗氢模型

一般人们认为氢在金属晶体中是以氢原子的形式存在.对于平面应变状态下,各向同性弹性体中裂纹尖端渗入氢原子后产生的应力为^[24,25]:

$$\begin{cases} \sigma_{Hxx} + \sigma_{Hyy} = 2 \left(\frac{\partial \varphi_H}{\partial z} + \frac{\partial \bar{\varphi}_H}{\partial z} \right) \\ \sigma_{Hyy} - \sigma_{Hxx} \cdot i = \frac{\partial \varphi_H}{\partial z} + \frac{\partial \bar{\omega}_H}{\partial z} + (z - \bar{z}) \frac{\partial^2 \bar{\varphi}_H}{\partial z^2} \end{cases} \quad (1)$$

其中:

$$\frac{\partial \varphi_H}{\partial z} = \frac{B_j}{4(z - \bar{z}_j)^2} \left(\sqrt{\frac{z}{\bar{z}_j}} + \sqrt{\frac{\bar{z}_j}{z}} - 2 \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial \bar{\omega}_H}{\partial z} = \frac{B_j}{4(z - \bar{z}_j)^2} \left(\sqrt{\frac{z}{\bar{z}_j}} + \sqrt{\frac{\bar{z}_j}{z}} + 2 \right) \quad (3)$$

* 2025-05-07 收到修改稿, 2025-05-14 网络首发.

** 通讯作者. E-mail: 331641933@qq.com.

$$B_j = \frac{\mu V^* C_A h^2}{2\pi(1-\nu)} \quad (4)$$

其中, σ_{Hxx} 、 σ_{Hyy} 和 σ_{Hxy} 分别为渗氢造成的 x 、 y 方向的正应力与 xy 方向的剪应力. $z = x + yi$ 为所求位置在直角坐标系上的坐标位置, $i = \sqrt{-1}$, $z_j = x_j + y_j i$ 为材料内渗入的氢原子在坐标系上的位置(如图

1 所示, 该方法通过将材料内渗氢范围转换为多条膨胀线, 将整个渗氢范围离散化为多个正方形格子, z_j 为格子中心的位置). C_A 为渗入氢的原子浓度, h 为方格边长. V^* 为氢的摩尔体积, μ 和 ν 分别为材料的剪切模量和泊松比.

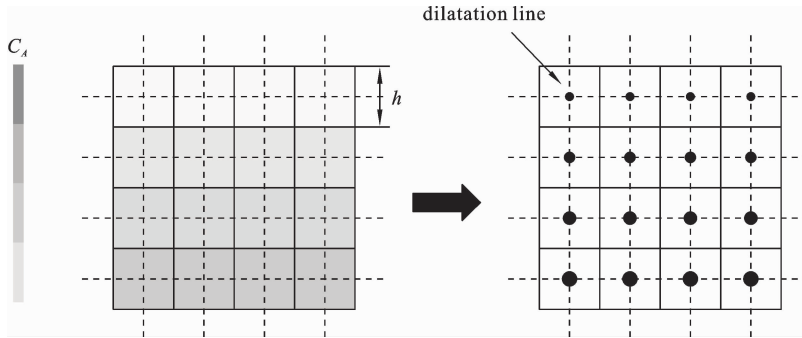


图 1 材料内渗氢浓度离散化示意图

Fig. 1 Schematic diagram of discretization of hydrogen permeation concentration in the material

裂纹尖端渗氢范围与位错发射模型如图 2 所示, s_1 为位错在晶粒 1 中的滑移面(由式(8)计算可知, 滑移面(100)上晶格摩擦力远大于(110)面故本文设置的滑移面为(110)平面), 本文计算中假设 $\theta_1 = 0^\circ$ (滑移面与裂纹面之间的夹角在实际中是随机的, 本文选取 $\theta_1 = 0^\circ$ 进行计算), s_2 为位错穿过晶界

后的滑移面, s_3 和 s_4 (本文计算模型处于二维平面, 同一晶粒内(110)平面之间夹角为 0° 或 90°) 为残余位错发射到晶粒中可能的滑移面(残余位错发射及晶界裂纹萌生将在 1.3 节中介绍).

1.2 裂纹尖端位错发射

在金属晶体材料中, 由于应力集中效应及晶体

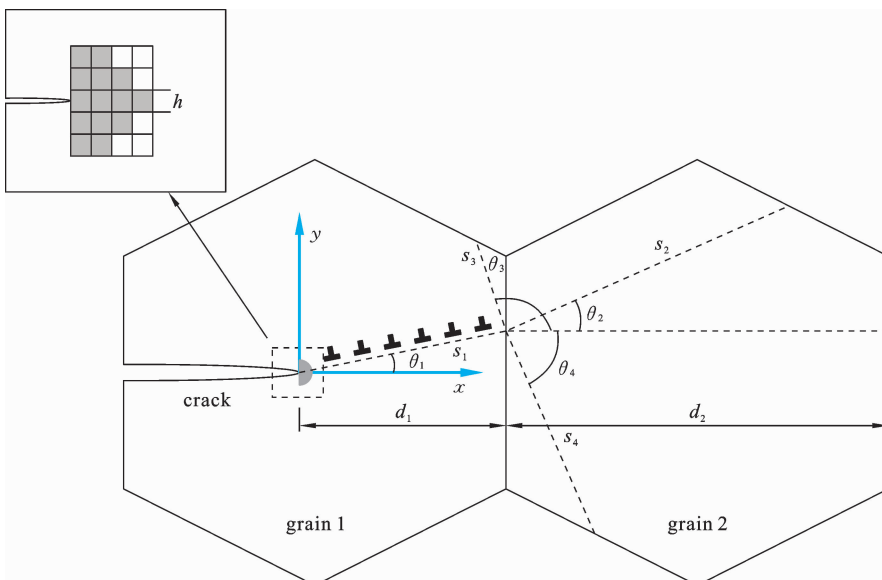


图 2 金属晶体材料裂纹尖端渗氢与位错发射示意图

Fig. 2 Schematic diagram of hydrogen permeation and dislocation emission at the crack tip of metal crystal

中原子呈点阵排列方式,材料内的裂纹往往会向前方滑移面上发射位错,且这些位错会受到裂纹的驱动力影响而在滑移面上移动。

受渗入氢原子影响下的裂纹尖端发射位错的临界应力条件为^[26]:

$$\sigma_{r_0} = \sigma_{r_0\theta}^K + \sigma_{r_0\theta}^{im} + \tau_f + \sigma_{Hr_0\theta} + \sum_{j=1, j \neq h}^n \sigma_{r\theta}(r_h, r_j, \theta) > 0 \quad (5)$$

即位错在距离裂纹尖端一个位错芯半径 r_0 处受到的合力大于零时,位错从裂纹尖端产生并发射至滑移面上。 $\sigma_{r_0\theta}^K$ 为裂纹在距离裂纹尖端 r_0 处产生的剪应力大小,裂纹产生的剪应力为^[27]:

$$\sigma_{r_0\theta}^K = \frac{K_I}{2\sqrt{2\pi r}} \sin\theta \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + \frac{K_{II}}{2\sqrt{2\pi r}} (3\cos\theta - 1) \cos\frac{\theta}{2} \quad (6)$$

其中, K_I 、 K_{II} 分别为裂纹的 I 型和 II 应力强度因子, (r, θ) 为所求位置的极坐标。 $\sigma_{r_0\theta}^{im}$ 为裂纹镜像应力在距离裂纹尖端 r_0 处的大小,镜像应力为^[27]:

$$\sigma_{r_0\theta}^{im} = -\frac{\mu}{4\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{b_e^2 \sqrt{z}}{4z^{\frac{3}{2}}} \left(\sqrt{\frac{z}{z}} + 1 \right) + \frac{b_x \bar{b}_e}{4} \times \left[\frac{3}{z} + \frac{1}{2\sqrt{z\bar{z}}} \left(1 - \frac{\bar{z}}{z} \right) + \frac{3 - \sqrt{z/\bar{z}}}{\sqrt{z}(\sqrt{z} + \sqrt{\bar{z}})} \right] - \frac{\bar{b}_e^2}{4b_e \bar{z}} \left(1 + \frac{\bar{z}}{z} \right) \right\} \quad (7)$$

其中, $b_e = b_x + b_y i$, b_x 和 b_y 分别为位错的伯氏矢量 b 在 x 轴和 y 轴上的分量。

$$\tau_f = \frac{2\mu}{1-\nu} \exp\left(-\frac{4\pi\xi}{b}\right) \quad (8)$$

为材料的晶格摩擦率^[3], $\xi = \frac{c}{2(1-\nu)}$ 为位错的半宽度, c 为原子的面间距。

$\sigma_{Hr_0\theta}$ 是氢原子在距离裂纹尖端一个位错芯半径距离下产生的沿滑移面方向的剪应力大小,可由式(1)-(4)求解。

$\sum_{j=1, j \neq h}^n \sigma_{r\theta}(r_h, r_j, \theta)$ 为位错之间的相互作用应力,可由下式求解得到^[26]:

$$\sigma_{r\theta} = (\sigma_{yy} - \sigma_{xx}) \cos\theta \sin\theta + \sigma_{xy} \cos(2\theta) \quad (9)$$

其中, $\sigma_{xx} = -\text{Im}g$, $\sigma_{yy} = \text{Re}g$, $\sigma_{xy} = \text{Re}\left[4\frac{\partial\varphi}{\partial z} - g\right]$ 。

$$g = \frac{\partial\varphi}{\partial z} + \frac{\partial\bar{\omega}}{\partial z} + (z - \bar{z}) \frac{\partial^2\bar{\varphi}}{\partial z^2} \quad (10)$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial z} = A \left[\frac{1}{z - z_j} \left(\sqrt{\frac{z}{z}} + 1 \right) + \frac{1}{z - \bar{z}_j} \left(\sqrt{\frac{z}{z}} - 1 \right) \right] + \frac{\bar{A}(z_j - \bar{z}_j)}{2(z - \bar{z}_j)^2} \left(\sqrt{\frac{z}{z}} + \sqrt{\frac{z}{z_j}} - 2 \right) \quad (11)$$

$$\frac{\partial\bar{\omega}}{\partial z} = A \left[\frac{1}{\bar{z} - z_j} \left(\sqrt{\frac{z}{z}} - 1 \right) + \frac{1}{\bar{z} - \bar{z}_j} \left(\sqrt{\frac{z}{z}} + 1 \right) \right] + \frac{\bar{A}(z_j - \bar{z}_j)}{2(\bar{z} - \bar{z}_j)^2} \left(\sqrt{\frac{z}{z}} + \sqrt{\frac{z}{z_j}} + 2 \right) \quad (12)$$

其中, $A = \frac{\mu b_e}{8\pi i(1-\nu)}$, $z = x + yi$ 为所求位置, $i = \sqrt{-1}$, $z_j = x_j + y_j i$ 为位错位置。

位错从裂纹尖端发射后,在滑移面上的平衡位置可由位错所受合力为零求解得到:

$$\sigma_{r\theta} = \sigma_{r_0\theta}^K + \sigma_{r_0\theta}^{im} + \tau_f + \sigma_{Hr_0\theta} + \sum_{j=1, j \neq h}^n \sigma_{r\theta}(r_h, r_j, \theta) = 0 \quad (13)$$

1.3 位错穿晶及晶界裂纹萌生

由于晶界对位错运动有一定的阻碍作用,裂纹发射的位错会在晶界处产生积塞.当靠近晶界处的位错受到的驱动力超过晶界的阻碍时,位错穿晶进入下一个晶粒.同时,由于晶界两侧晶粒取向差的原因,穿晶位错伯氏矢量方向和滑移方向发生改变,导致晶界中留下残余位错,残余位错伯氏矢量为 $\Delta b = b_1 - b_2$, b_1 为位错在第一个晶粒内的伯氏矢量, b_2 为位错在第二个晶粒内的伯氏矢量.位错能否穿晶取决于作用在晶界上的分切剪应力大小^[28]:

$$\tau b_1^2 \geq \tau_{pass} b_1^2 = \psi_{GB} b_1 + \alpha \mu (\Delta b)^2 \quad (14)$$

式中 τ 为作用在位错上沿滑移面方向的分切剪应力, τ_{pass} 是位错穿晶的剪应力条件,当作用在位错上沿滑移面方向的分切剪应力大于 τ_{pass} 时,位错穿晶。 α 是材料参数^[29], ψ_{GB} 是单位长度下的晶界能,晶界能量与晶粒之间的取向差密切相关^[30]:

$$\psi_{GB} = \begin{cases} \frac{k\Delta\theta}{\theta_{g1}} & (0^\circ < \Delta\theta \leq \theta_{g1}) \\ k & (\theta_{g1} < \Delta\theta \leq \theta_{g2}) \\ \frac{k(90^\circ - \Delta\theta)}{90^\circ - \theta_{g2}} & (\theta_{g2} < \Delta\theta \leq 90^\circ) \end{cases} \quad (15)$$

其中, $\Delta\theta$ 是第一个晶粒和第二个晶粒之间晶界夹角, k , θ_{g1} 和 θ_{g2} 为材料常数。

随着穿过晶界进入下一个晶粒位错数量的增加,晶界内的残余位错的伯氏矢量逐渐长大.当残余

位错的伯氏矢量满足条件时,残余位错将从晶界发出一个完全位错.残余位错能否发射主要取决于两个条件:一是累积在晶界的残余位错的伯氏矢量在将要发射到的滑移面上的投影大于该平面上位错的伯氏矢量.其次是能量条件^[28,31]:

$$\alpha\mu(\Delta B)^2 \geq \psi_{\Delta} = \left[\alpha\mu b^2 + \alpha\mu(\delta b)^2 + \sum_{j=1}^n \left(b \cdot \int_{\infty}^{x_d} \sigma_{xy}^b dx \right) \right] \quad (16)$$

其中, ΔB 是晶界残余位错伯氏矢量, δb 是晶界中残余位错发射一个完整位错之后的伯氏矢量, $\delta b = \Delta B - b$. σ_{xy}^b 是晶粒中已存在的位错在晶界处产生的应力, n 是晶粒中的位错数量, x_d 是晶粒中其他位错与发射出的位错之间的距离.本文中裂纹面与晶粒 1 中的滑移面角度 θ_1 取为 0° , 滑移面 s_3 中不存在晶界中发射出的位错(由式(8)可知(100)平面上的晶格摩擦力远大于(110)平面上的晶格摩擦力,因此本文中位错的滑移面为(110)平面,当 θ_1 取为 0° 时,滑移面 s_3 与晶界重合),只有 s_4 平面上存在晶界残余位错发射到晶粒中的完整位错.

随着裂纹发射出的位错数量逐渐增加,位错在晶界处的积塞数量随之增加,晶界处由位错引起的应力集中增大.可能导致晶界微裂纹萌生,如图 3 所示.楔形裂纹形核如下式所示:

$$\Delta\psi = \psi - \psi_c > 0 \quad (17)$$

其中, ψ 是位错的能量^[29]:

$$\psi = \int_{r_0}^R r dr \int_0^{2\pi} d\theta \left[\frac{1}{2\mu} \sigma_{xy}^2 + \frac{1}{2E} (\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yy}^2 - 2\nu\sigma_{xx}\sigma_{yy}) \right] + \sum_{j=1}^n \left(\Delta B \cdot \int_{\infty}^{x_d} \sigma_{xy}^b dx \right) \quad (18)$$

其中, E 为材料的弹性模量, σ_{xx} 、 σ_{yy} 和 σ_{xy} 是位错在裂纹存在的情况下的应力,可以由式(9)-(12)求解得到. ψ_c 是萌生楔形裂纹所需要能量,可以通过下式求解:

$$\frac{\partial \psi_c}{\partial a_w} = 2\gamma - \left[(1-\nu^2) \frac{K_{Iw}^2 + K_{IIw}^2}{E} \right] \quad (19)$$

其中, a_w 是萌生的楔形裂纹长度, γ 是材料表面能, K_{Iw} 和 K_{IIw} 分别是位错积塞造成的晶界处楔形裂纹 I 型和 II 型应力强度因子^[32]:

$$K_{Iw} = \frac{EW_n}{4(1-\nu^2)} \sqrt{\frac{2}{\pi a}} + \sigma_n^\infty \sqrt{\frac{\pi a}{2}} \quad (20)$$

$$K_{IIw} = \frac{EW_s}{4(1-\nu^2)} \sqrt{\frac{2}{\pi a}} + \sigma_s^\infty \sqrt{\frac{\pi a}{2}} \quad (21)$$

其中, W_n 和 W_s 分别为楔形裂纹强度的法向和切向分量受晶界处积塞的位错数量与伯氏矢量方向影响. σ_n^∞ 和 σ_s^∞ 为作用在楔形裂纹上的远场应力的法向和切向分量.若晶界处积塞的位错数量为 n_p , 则有:

$$\begin{cases} W_n = \sum_{j=1}^{n_p} b_j \cos(\theta_j) \\ W_s = \sum_{j=1}^{n_p} b_j \sin(\theta_j) \end{cases} \quad (22)$$

其中, θ_j 是楔形裂纹所在平面与 b 的夹角,本文中楔形裂纹所在平面即为晶界平面.

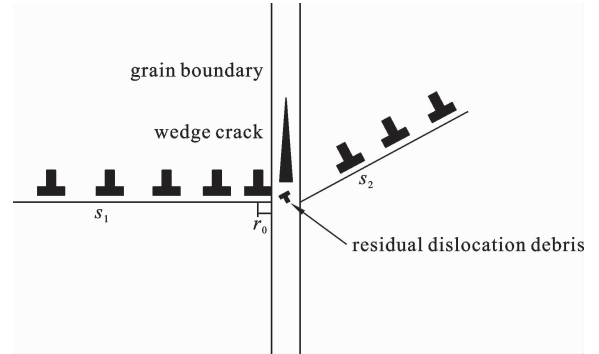


图 3 晶界内楔形裂纹成核示意图

Fig. 3 Schematic diagram of wedge crack initiation in grain boundaries

2 结果与讨论

2.1 验证

使用与文献中相同的材料 Ni^[26]: $\mu = 78$ GPa, $\nu = 0.34$, $b = 0.25$ nm, $\tau_f = 0$ 与 Cu^[33]: $\mu = 48$ GPa, $\nu = 0.34$, $b = 0.25$ nm, $\tau_f = 0$, 计算裂纹尖端发射的位错.对材料施加远场拉应力载荷,假设裂纹前方只存在一个滑移面,且位错只在第一个晶粒内部移动,在裂纹发射位错的计算过程中不考虑晶格摩擦力产生的对位错运动的阻力,如图 4 所示.其中横坐标为裂纹尖端至晶界的距离 d ,纵坐标为裂纹发射位错数量 n .分别计算纳米晶 Ni 与 Cu 中裂纹尖端发射的位错数量.从图 4 中可以看出,位错发射数量随裂纹

尖端至晶界距离的增加而增加,并且随着裂纹尖端到晶界的距离增加而逐渐变缓.图 4 中分别给出了本

文计算方法得到的裂纹尖端发射位错数量与 Ovid'ko 的裂纹尖端发射位错数量,两者之间差距较小.

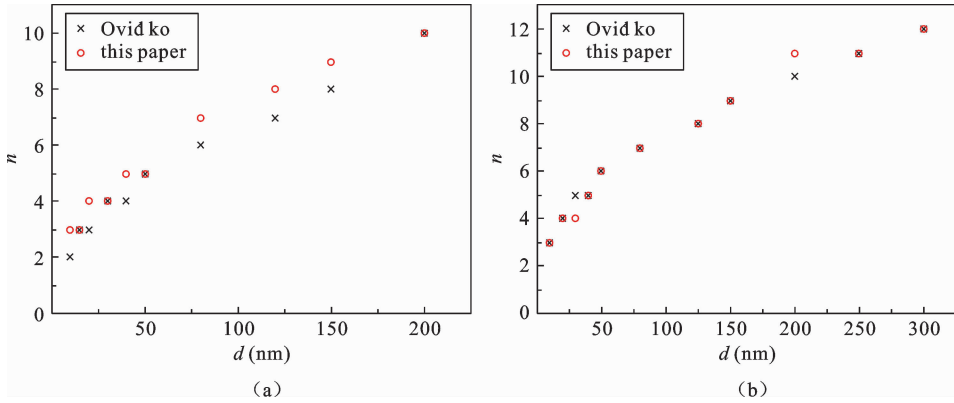


图 4 纳米晶(a) Ni 与(b) Cu 中裂纹尖端至晶界距离 d 与位错数量 n 的关系

Fig. 4 The relationship between the distance d from the crack tip to the grain boundary and the number of dislocations n in nanocrystals (a) Ni and (b) Cu

2.2 氢对裂纹尖端位错分布的影响

跟据前文计算方法,对图 2 所示模型进行计算.使用 α -Fe 材料进行计算(本文建立的模型适用于体心立方晶体与面心立方晶体的计算,对于不同的晶体类型只需在计算时确定裂纹前方的滑移面与滑移面上的晶格摩擦力即可): $\mu=48$ GPa, $\nu=0.366$, $b=0.143$ nm, $\tau_f=46.3$ MPa, $\gamma=2$ J \cdot m $^{-2}$,为材料表面能, $d=5$ μ m.对材料施加远场剪应力,裂纹 II 型应力强度因子 $K_{II}=0.38$ MPa \cdot \sqrt{m} (介于临界位错发射条件和材料断裂韧性之间).由于氢在材料内渗入的极大值数量级约为 10^4 appm $^{[34]}$,且裂尖的高应力集中会促进氢原子局部富集 $^{[34]}$,因此本文使用氢浓度范围为 0%-10%.

裂纹前方位错分布(为便于观察,将计算得到的离散位错位置转化为位错在滑移面上的分布密度)如图 5、6 所示,从图 5 和图 6 中可以看出:位错由于裂纹驱动力和渗入氢原子的共同作用在晶界处产生积塞,穿晶位错会使第一个晶粒中的位错密度在晶界处呈现先减小后增长的趋势,并导致晶粒 1 内的位错密度起伏较大(随着位错穿晶,晶界处生成残余位错,残余位错在晶界附近产生较大的应力场,同时穿过晶界进入下一个晶粒的位错也会在晶界附近产生一定的应力,使得位错密度较大的波动).裂纹尖端存在无位错区.

观察图 5(a)可知,在相同的氢渗入范围下,当氢浓度增大时,裂纹尖端的无位错区明显增大,位错在晶粒 1 中的分布变化较剧烈.相较于无氢情况,晶粒 2 中位错至晶界距离更远,原因为:裂纹尖端氢原子产生的剪应力随浓度的增加而增加(由式(1)-(4)可知),氢原子对位错运动的驱动力增加,所有位错均向远离裂纹尖端方向运动.

图 5(c)更直观地展示了裂纹尖端渗氢对位错运动的促进作用.由于晶界倾斜角的增加,晶界对位错运动阻碍增大,加载过程中不存在位错穿晶,晶粒 1 中的位错排列更为平滑.裂纹前方无位错区长度与滑移面上位错密度随裂纹尖端渗氢浓度的增加而增加.同时因为氢原子的存在,裂纹在相同情况下发射出的位错更多,且氢原子渗入浓度增加会把位错向晶界处推动,使晶粒 1 中滑移面上的位错密度有明显增加.

图 6(a)、(b)和(c)分别给出了裂纹尖端渗氢浓度为 6%时不同渗氢范围 h (本文使用离散化后的方格表示渗氢范围大小,由于方格数目一定,用每个方格边长 h 表示渗氢范围大小)影响下的滑移面上位错密度曲线.与上述结论相似,裂纹尖端的无位错区和滑移面上的位错密度均随裂纹尖端渗入氢原子的范围增加而增加.

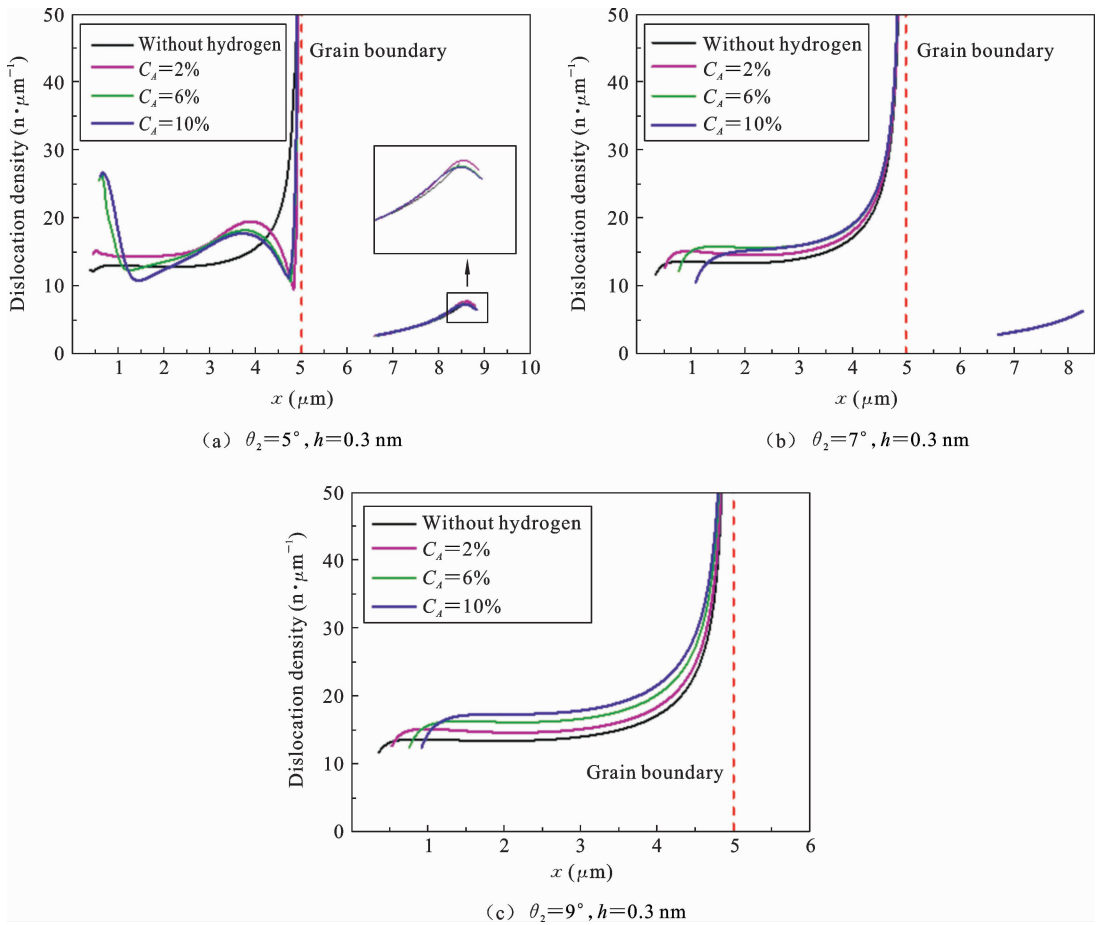


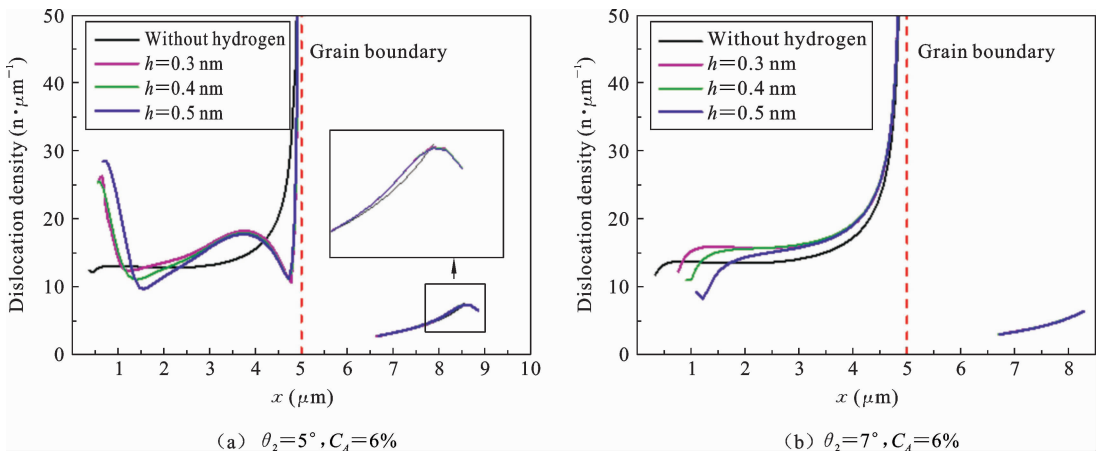
图 5 裂纹尖端不同渗氢浓度 C_A 对位错分布的影响($d=5 \mu\text{m}$)

Fig. 5 The influence of different hydrogen permeation concentrations C_A at the crack tip on the distribution of dislocations ($d=5 \mu\text{m}$)

2.3 裂纹尖端渗氢对晶界处弹性能的影响

晶界处楔形裂纹萌生所需能量如图 7 所示. 其中横坐标 a 为晶界内楔形裂纹萌生长度, 纵坐标为楔形裂纹萌生所需要的能量 ψ . 能量最低时(此时

整个系统最稳定), 为该状态下能够萌生的裂纹长度. 图 7 中能量最低点为 $6.78 \times 10^{-5} \text{ mJ}$, 此时晶界处萌生了一个 0.76 nm 长的楔形裂纹(图 7 中曲线与晶界处位错积塞数量有关, 本文中晶界宽度取值



(a) $\theta_2=5^\circ, C_A=6\%$

(b) $\theta_2=7^\circ, C_A=6\%$

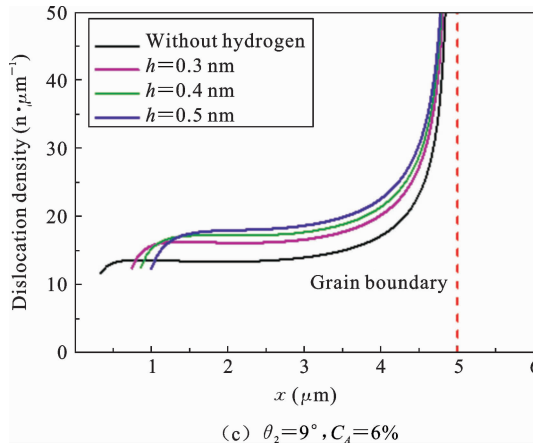


图 6 裂纹尖端不同渗氢范围 h 对位错分布的影响 ($d=5 \mu\text{m}$)

Fig. 6 The influence of different hydrogen permeation ranges h at the crack tip on the distribution of dislocations ($d=5 \mu\text{m}$)

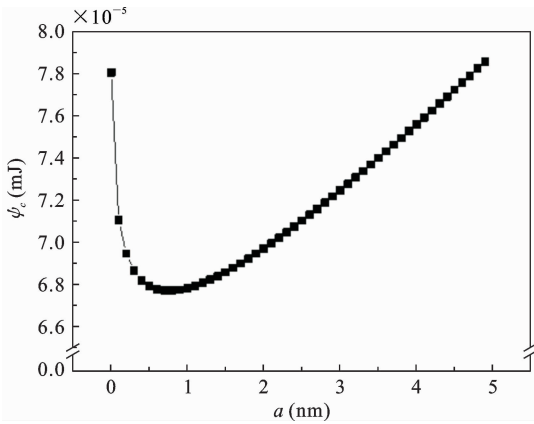


图 7 晶界处楔形裂纹萌生能量

Fig. 7 The initiation energy of wedge cracks at grain boundaries

为晶粒大小的 1%，在此区间内位错积塞数量为 5）。

位错受裂纹尖端渗氢影响下在晶界处产生的弹性能如图 8、9 和 10 所示，其中横坐标为晶粒 1 中滑移面上位错数量 n_1 ，纵坐标为晶界处弹性能 ψ 。对比相同裂纹尖端渗氢范围（图 8(a)、(b) 和 (c)），当裂纹尖端渗氢浓度增加时，滑移面上的位错至晶界距离较近（2.2 节），晶界处弹性能随着位错位置的接近而增大，导致渗氢浓度增加时，晶界处的弹性能增长速率较快。但由于晶界倾斜角较小，晶界处积塞的位错数量较少。当渗氢浓度增加时，位错穿晶更早发生，晶界内的残余位错也更早出现，且残余位错的伯氏矢量增长速率较快（位错穿晶发生更为频繁），使晶界中的残余位错更早满足再发射条件，降低了晶界处弹性能。因此，当裂纹尖端渗氢浓度增加时，虽

然晶界处的弹性能增长较快，但也更早发生弹性能的下降，使晶界处的弹性能最大值反而比氢原子渗入浓度较低时更低。对于裂纹尖端相同的渗氢浓度来说（图 8(d)），更大的渗氢范围会促进裂纹尖端位错向晶界处移动，产生了与上述氢浓度增加后相似的结论。

随着晶界倾斜角增加，晶界处位错积塞数量增加。由图 5(b) 可知，在晶界倾斜角为 7° 时，仍有部分位错穿晶，但由于穿晶位错较少，晶界内残余位错不满足残余位错再发射条件，晶界处弹性能未得到释放，这在图 9 中也可以得到（图 9 中晶界处的弹性能并没有发生如图 8 中类似的下降段）。裂纹尖端渗氢浓度和范围与晶界处弹性能的关系与上文相同，晶界处弹性能随裂纹尖端渗氢浓度与范围的增加而增加。但因为晶界倾斜角的增加，晶界对位错的阻碍作用相对于晶界倾斜角为 5° 时更大，晶界处位错积塞数量更多，晶界处的弹性能最大值也更大。但由于此时依旧有位错穿晶发生，晶界处积塞的位错数量不会过高，晶界处的弹性能得到一定程度的释放，因此在晶界倾斜角为 7° 时，并没有晶界裂纹萌生。同时因为位错穿晶的存在，使得在晶界倾斜角为 7° 时，不同裂纹尖端渗氢浓度与范围对晶界处的弹性能影响不会过大（相较于晶界倾斜角为 9° ），使得晶界处弹性能增长曲线之间差值很小。

当两个晶粒之间的晶界倾斜角增加至 9° 时，计算结果如图 10 所示，由于晶界角度的增加，晶界对位错的阻碍作用较大，位错穿晶没有发生。位错在晶

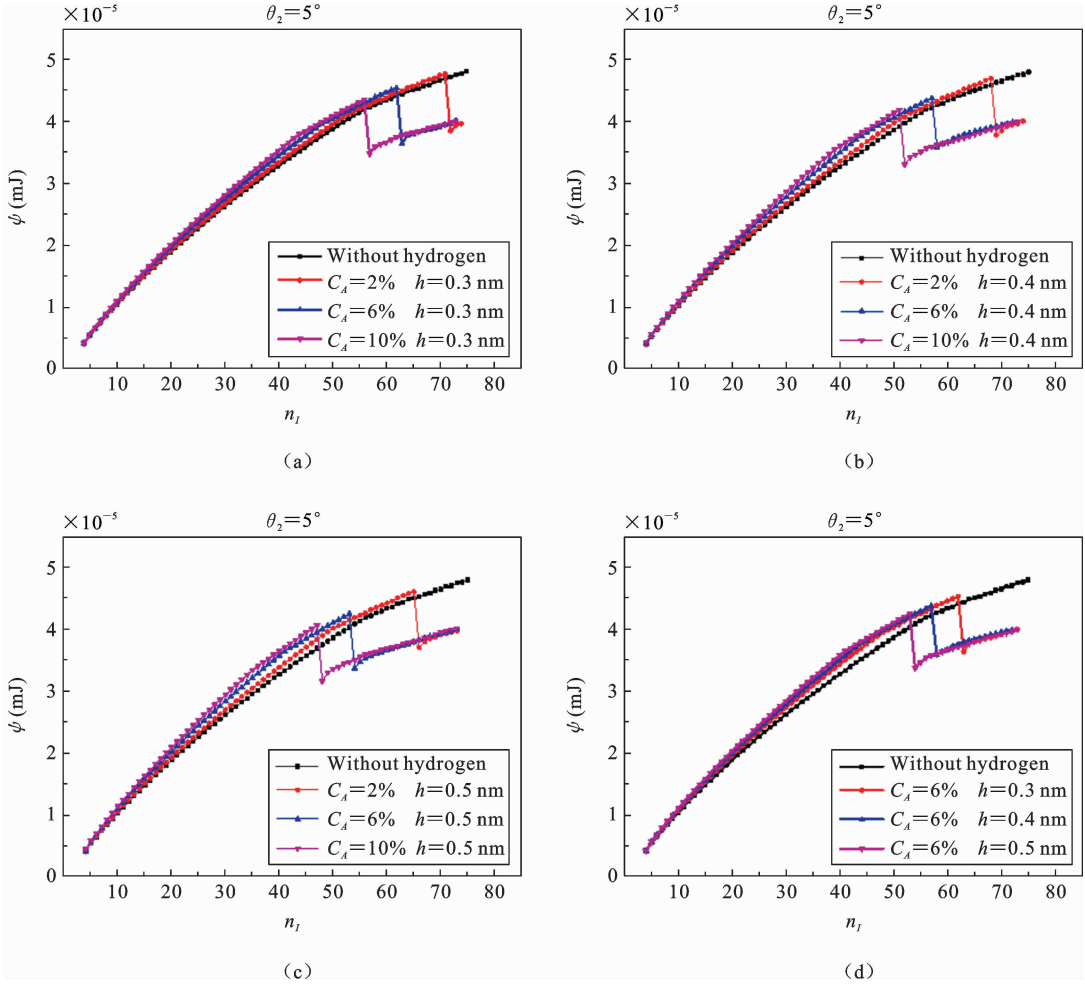
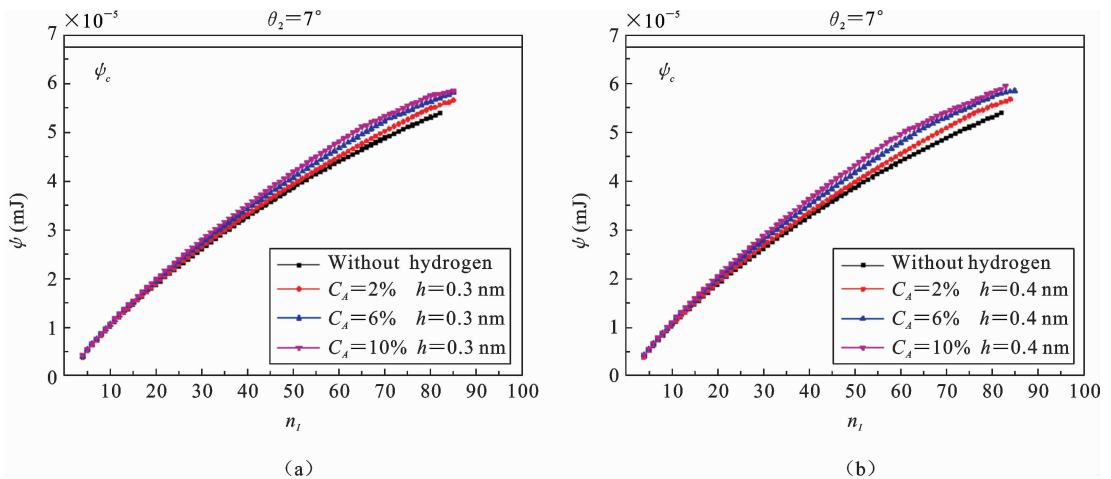


图 8 晶界倾斜角为 5° 时裂纹尖端渗氢范围 h 和浓度 C_A 影响下晶界处弹性能变化 ($d = 5 \mu\text{m}$)

Fig. 8 Changes in elastic properties at grain boundaries under the influence of hydrogen permeation range h and concentration C_A at the crack tip when the grain boundary angle is 5° ($d = 5 \mu\text{m}$)



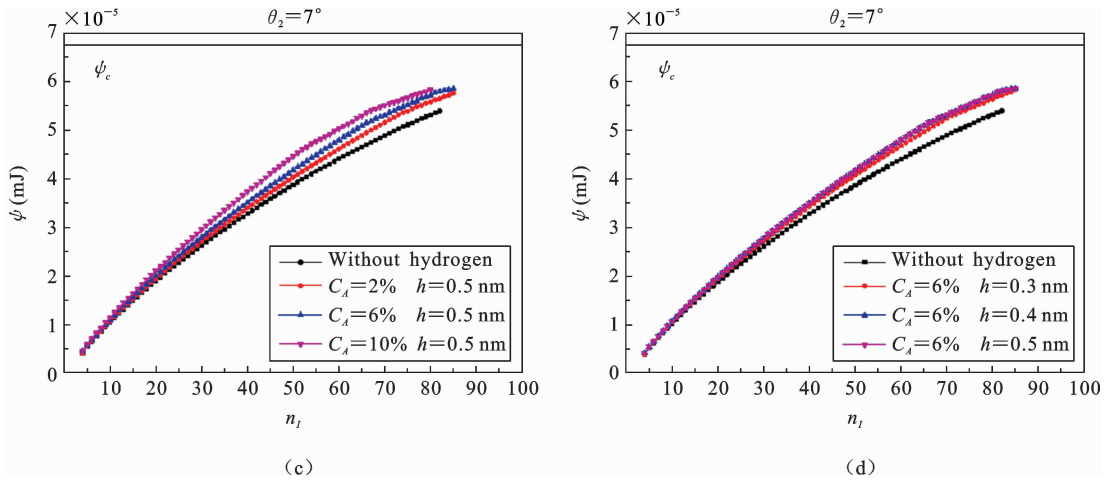


图 9 晶界倾斜角为 7°时裂纹尖端渗氢范围 h 和浓度 C_A 影响下晶界处弹性能变化($d=5 \mu\text{m}$)

Fig. 9 Changes in elastic properties at grain boundaries under the influence of hydrogen permeation range h and concentration C_A at the crack tip when the grain boundary angle is 5° ($d=5 \mu\text{m}$)

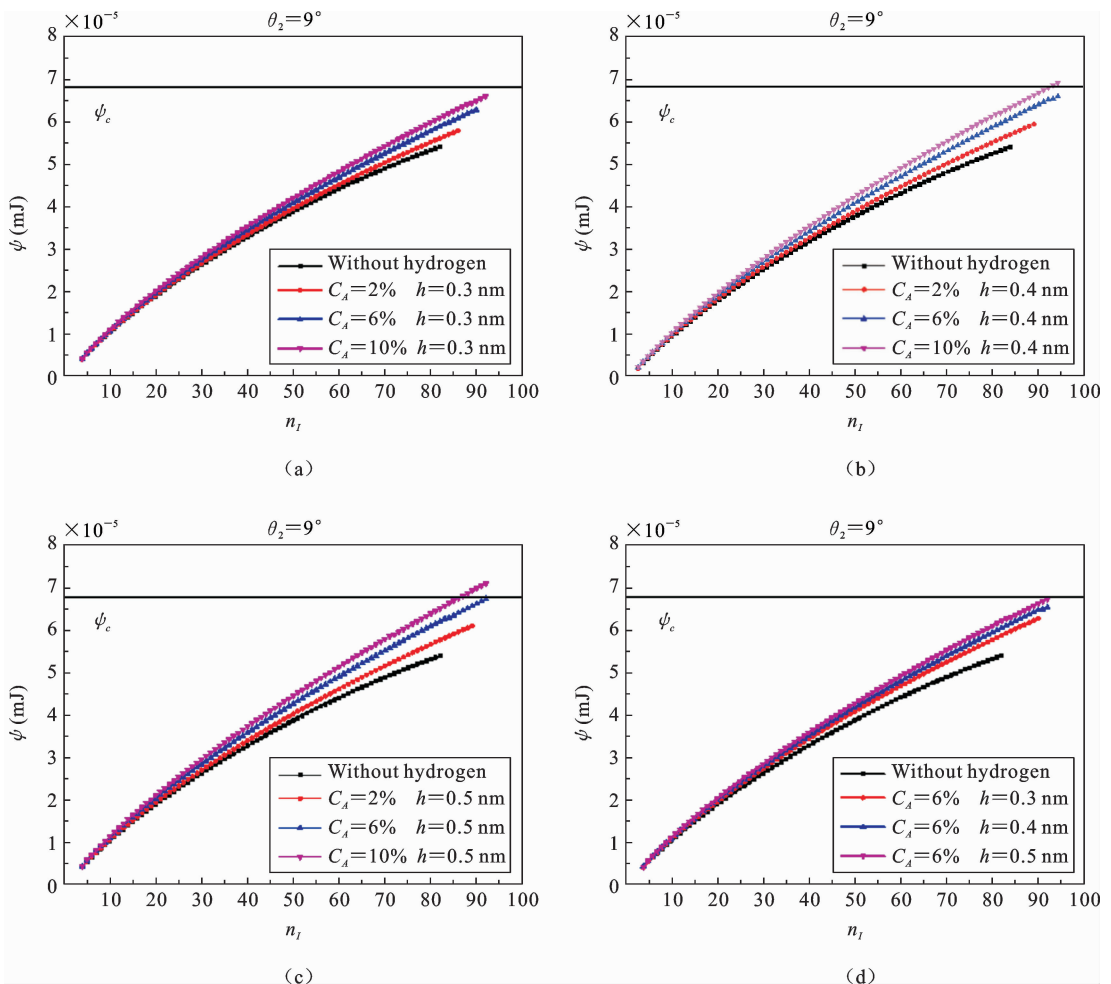


图 10 晶界倾斜角为 9°时裂纹尖端渗氢范围 h 和浓度 C_A 影响下晶界处弹性能变化($d=5 \mu\text{m}$)

Fig. 10 Changes in elastic properties at grain boundaries under the influence of hydrogen permeation range h and concentration C_A at the crack tip when the grain boundary angle is 5° ($d=5 \mu\text{m}$)

界处大量积塞,使得晶界处的弹性能增长较快.同时由于位错无法穿晶,晶界处的弹性能无法释放,晶界处弹性能较大.当裂纹尖端渗氢浓度 $C_A = 10\%$, 渗氢范围的离散化单元格长度 $h = 0.4 \text{ nm}$, 以及氢原子浓度 $C_A = 6\%$ 和 $C_A = 10\%$ 渗氢范围的离散化单元格长度 $h = 0.5 \text{ nm}$ 时,晶界处萌生微裂纹.

2.4 氢渗入对主裂纹的影响

裂纹尖端渗入氢原子除了会对晶界处弹性能产生影响以外,还会对主裂纹产生影响. Suresh^[36] 提到,在初始阶段,裂纹具有“之”字形传播路径,裂纹通过纯剪切在晶粒中沿滑移面方向扩展. Miller^[37] 提出了短裂纹扩展理论,认为剪切是短裂纹扩展的主要影响因素.因此,本文使用裂纹尖端附近的剪应力来判断裂纹的扩展趋势.

主裂纹前方无位错区内剪应力大小受裂纹尖端附近渗入氢原子与裂纹尖端位错的共同影响曲线如图 11、12 所示.当裂纹尖端渗氢浓度增加时,主裂纹尖端无位错区内的剪应力逐渐增大.由 2.2 节可知,当裂纹尖端渗氢浓度增加时,由于氢的渗入使得裂纹尖端位错整体平衡位置靠近晶界,裂纹尖端无位错区长度增加.由于位错会对裂纹产生一定屏蔽作用,该屏蔽作用与位错数量、位置均有关.当裂纹尖端渗氢浓度增加时,位错数量增加,但相较于位错数量的增加,因氢原子渗入而造成的位错位置变化对主裂纹尖端无位错区内的剪应力影响更大.由式 (9)-(12) 可知,位错应力场在位错芯附近变化较大,因此距离裂纹越近的位错对裂纹尖端影响越大.

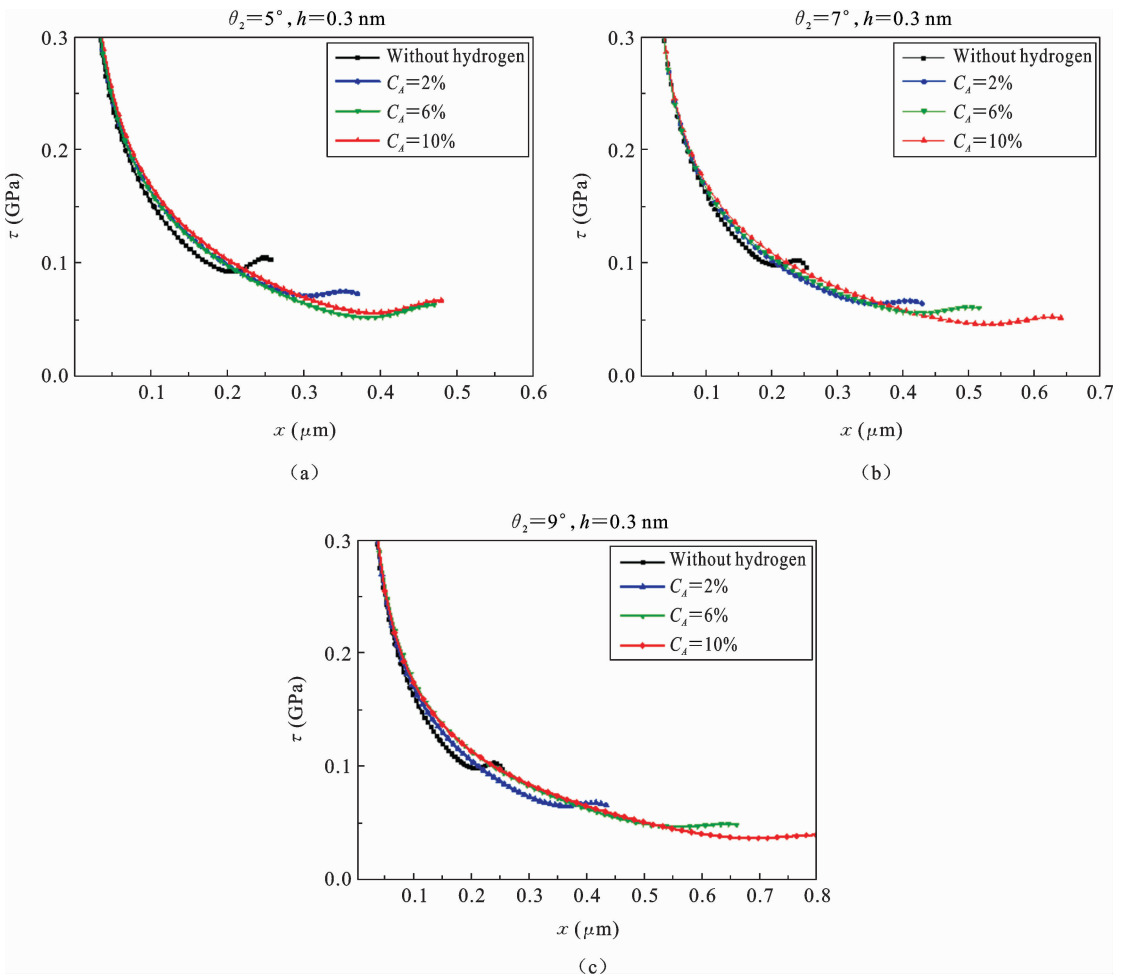


图 11 不同晶界倾斜角下裂纹尖端剪应力 τ 与渗氢浓度 C_A 之间的关系

Fig. 11 The relationship between the shear stress τ at the crack tip and the hydrogen permeation concentration under different grain boundary angles

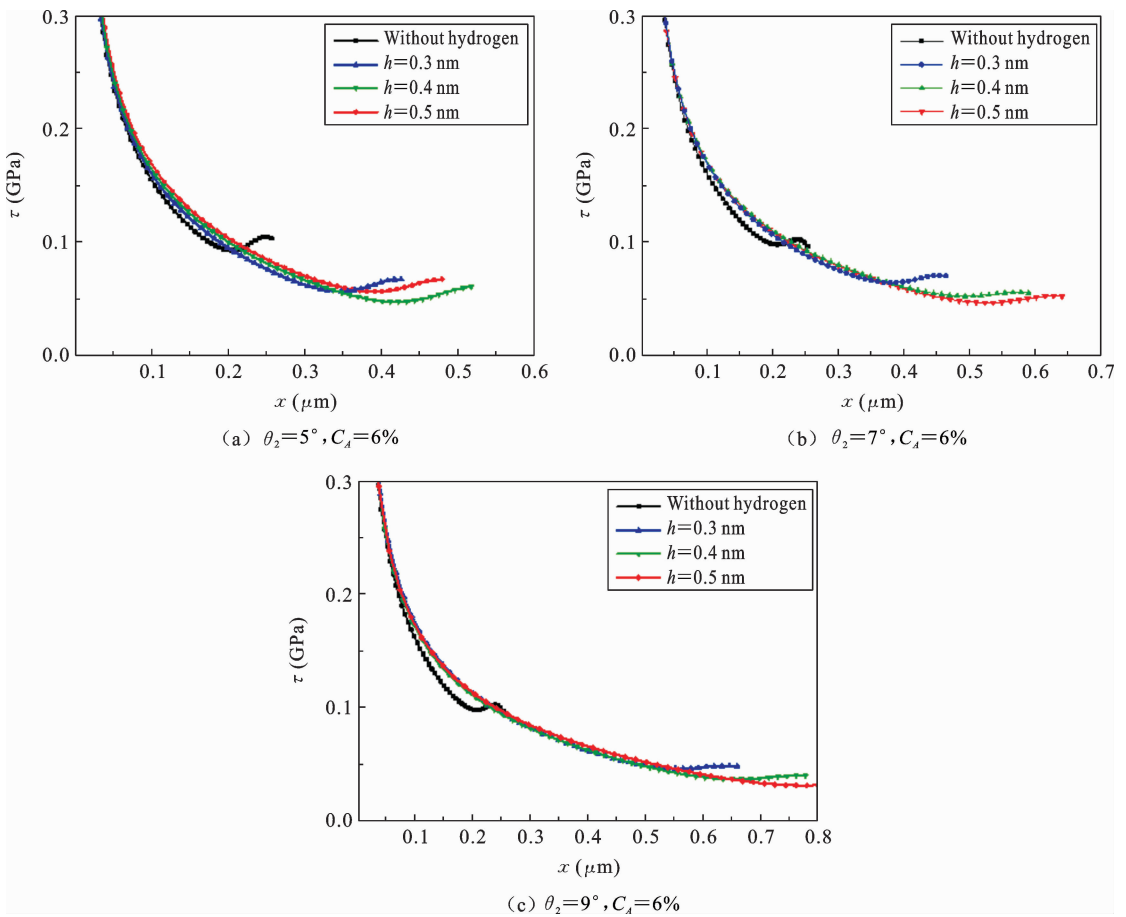


图 12 不同晶界倾斜角下裂纹尖端剪应力 τ 与渗氢范围 h 之间的关系

Fig. 12 The relationship between the shear stress τ at the crack tip and the hydrogen permeation concentration under different grain boundary angles

氢原子对位错与裂纹的影响为：靠近裂纹尖端处的位错被氢原子推离裂纹尖端，使得有更大裂纹屏蔽效应的位错（相对靠近裂纹尖端的位错）远离裂纹尖端，虽然这会导致裂纹产生更多的位错，但相较于无氢情况，这些造成晶粒中位错数量增加的位错因相对裂纹尖端距离较远，产生的屏蔽效应很弱。因此裂纹才会在发射更多数量位错的情况下其前方的无位错区内的剪应力更小。

对于裂纹尖端不同渗氢范围，可以得到与裂纹尖端不同渗氢浓度相似的结论。当裂纹尖端渗氢范围增大时，无位错区内的剪应力也逐渐增大。

3 总结

本文建立了材料内部含有氢原子情况下的裂纹与位错模型。分析了氢原子渗入裂纹尖端后对位错

分布、晶界裂纹萌生和主裂纹扩展的影响，得到以下结论：

(1) 裂纹尖端渗氢会使位错运动到更远的位置，裂纹发射的位错数量随渗氢浓度与范围的增加而增加，若晶界角度较小，相较于无氢情况，晶界处更容易发生位错穿晶。

(2) 造成晶界处楔形裂纹萌生的主要因素为两晶粒间晶界倾斜角大小。晶界倾斜角较小时，氢的存在并不会使晶界处更容易萌生楔形裂纹；晶界倾斜角增大时，裂纹尖端渗氢会增加晶界裂纹萌生的可能性。

(3) 裂纹尖端渗氢浓度与范围的增加会导致位错整体远离裂纹并增大无位错区长度，减弱位错对裂纹的屏蔽效应，使裂纹前方无位错区内剪应力增大，主裂纹倾向于扩展。

参考文献

- [1] Ewing J A, Rosenhain W. Bakerian Lecture: The crystalline structure of metals[J]. Proceedings of the Royal Society of London (1854-1905), 1899, 65:172-177.
- [2] Dadfarnia M, Novak P, Ahn D C, et al. Recent advances in the study of structural materials compatibility with hydrogen[J]. Advanced Materials, 2010, 22: 1128.
- [3] Xie D, Li M, Shan Z. Review on hydrogen-microstructure interaction in metals[J]. Materials China, 2018, 37(3): 215-223.
- [4] Troiano, Alexander R. The role of hydrogen and other interstitials in the mechanical behavior of metals[J]. Metallurg. Microstruct. Anal., 2016, 5(6): 557-569.
- [5] Li X, Ma X, Zhang J, et al. Review of hydrogen embrittlement in metals: hydrogen diffusion, hydrogen characterization, hydrogen embrittlement mechanism and prevention[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2020, 33: 759-773.
- [6] Jia G, Lei M, Li M, et al. Hydrogen embrittlement in hydrogen-blended natural gas transportation systems: A review[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2023, 48(82): 32137-32157.
- [7] Beachem C D. A new model for hydrogen-assisted cracking (hydrogen “embrittlement”)[J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 1972, 3: 441.
- [8] Lynch S P. Environmentally assisted cracking: Overview of evidence for an adsorption-induced localised-slip process [J]. Acta Metall, 1988, 36: 2639.
- [9] Nagumo M, Nakamura M, Takai K. Hydrogen thermal desorption relevant to delayed-fracture susceptibility of high-strength steels[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2001, 32: 339.
- [10] Martin M L, Dadfarnia M, Nagao A, et al. Enumeration of the hydrogen-enhanced localized plasticity mechanism for hydrogen embrittlement in structural materials[J]. Acta Materialia, 2019, 165: 734-750.
- [11] Gangloff R P, Somerday B P. Gaseous Hydrogen Embrittlement of Materials in Energy Technologies[M]. Cambridge: Woodhead Publishing Limited, 2012.
- [12] Chu W Y, Qiao L J, Li J X, et al. Hydrogen Embrittlement and Stress Corrosion Cracking[M]. Beijing: Science Press, 2013.
- [13] Saito K, Takai K. Hydrogen desorption behavior trapped in various microstructures of high-strength steels using thermal desorption analysis[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2021, 52: 531-543.
- [14] Ren X C, Zhou Q J, Chu W Y, et al. The mechanism of nucleation of hydrogen blister in metals[J]. Chinese Science Bulletin, 2007, 52: 725.
- [15] Martin M L, Robertson I M, Sofronis P. Interpreting hydrogen-induced fracture surfaces in terms of deformation processes: A new approach [J]. Acta Materialia, 2011, 59: 3680.
- [16] Martin M L, Fenske J A, Liu G S, et al. On the formation and nature of quasi-cleavage fracture surfaces in hydrogen embrittled steels[J]. Acta Materialia, 2011, 59: 1601.
- [17] Robertson I M, Sofronis P, Nagao A, Martin M L, Wang S, Gross D W, Nygren K E. Hydrogen embrittlement understood[J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 2015, 46: 2323-2341.
- [18] Wu K, Lu X, Zhou P, et al. Improved resistance to hydrogen embrittlement by tailoring the stability of retained austenite[J]. Materials Science and Technology, 2017, 33(13): 1497-1504.
- [19] Yonezu A, Arino M, Kondo T, et al. On hydrogen-induced Vickers indentation cracking in high-strength steel[J]. Mechanics Research Communications, 2010, 37(2): 230-234.
- [20] Yonezu A, Hara T, Kondo T, et al. Evaluation of threshold stress intensity factor of hydrogen embrittlement cracking by indentation testing[J]. Materials Science & Engineering A, 2012, 531 (Jan. 1): 147-154.
- [21] Bahr D, Field D, Nibur K, et al. Hydrogen and deformation: Nano- and microindentation studies [J]. JOM, 2003, 55(2): 47-50.
- [22] Nibur K A, Bahr D F, Somerday B P, et al. Hydrogen effects on dislocation activity in austenitic stainless steel[J]. Acta Materialia, 2006, 54(10): 2677-2684.

- [23] Gao X. Displacement burst and hydrogen effect during loading and holding in nanoindentation of an iron single crystal[J]. *Scripta Materialia*, 2005, 53(11): 1315-1320.
- [24] Chateau J P, Delafosse D, Magnin T. Numerical simulations of hydrogen-dislocation interactions in FCC stainless steels. part I: hydrogen-dislocation interactions in bulk crystals[J]. *Acta Materialia*, 2002, 50(6): 1507-1522.
- [25] Chateau J P, Delafosse D, Magnin T. Numerical simulations of hydrogen-dislocation interactions in fcc stainless steels. Part II: hydrogen effects on crack tip plasticity at a stress corrosion crack[J]. *Acta Materialia*, 2002, 50(6): 1523-1538.
- [26] Ovid'ko I A, Sheinerman A G. Grain size effect on crack blunting in nanocrystalline materials[J]. *Scripta Materialia*, 2009, 60(8): 627-630.
- [27] Lin I, Thomson R. Cleavage, dislocation emission, and shielding for cracks under general loading[J]. *Acta Metallurgica*, 1986 34(2): 187-206.
- [28] Li Z, Hou M, Huang M, Ouyang C. Strengthening mechanism in micro-polycrystals with penetrable grain boundaries by discrete dislocation dynamics simulation and Hall-Petch effect[J]. *Computational Materials Science*, 2009, 46(4): 1124-1134.
- [29] Hirth J P. *Theory of Dislocations* [M]. 2nd Edition. New York: Wiley, 1983.
- [30] Hasson G C, Goux C. Interfacial energies of tilt boundaries in aluminium. Experimental and theoretical determination[J]. *Scripta Metallurgica*, 1971, 5(10): 889-894.
- [31] Fedorov A A, Gutkin M Y, Ovid'ko I A. Transformations of grain boundary dislocation pile-ups in nano-and polycrystalline materials[J]. *Acta Materialia*, 2003, 51.4: 887-898.
- [32] Das E S P, Marcinkowski M J. Accommodation of the stress field at a grain boundary under heterogeneous shear by initiation of microcracks[J]. *Journal of Applied Physics*, 1972, 43(11): 4425-4434.
- [33] Ovid'ko I A, Sheinerman A G. Crack blunting through lattice dislocation slip in nanocrystalline and ultrafine-grained materials[J]. *Materials Science Forum*, 2010, 633-634: 55-62.
- [34] Liang S, Huang M, Zhao L, Zhu Y, Li Z. Effect of multiple hydrogen embrittlement mechanisms on crack propagation behavior of FCC metals: Competition vs. synergy[J]. *International Journal of Plasticity*, 2021, 143: 103023.
- [35] 兰亮云, 孔祥伟, 邱春林, 杜林秀. 基于多尺度力学实验的氢脆现象的最新研究进展[J]. *金属学报*, 2021, 57(7): 15. (Lan Liangyun, Kong Xiangwei, Qiu Chunlin, Du Linxiu. A review of recent advance on hydrogen embrittlement phenomenon based on multi-scale mechanical experiments[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2021, 57(7): 15. (in Chinese))
- [36] Suresh S. *Fatigue of Materials* [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1998.
- [37] Miller K J. The behaviour of short fatigue cracks and their initiation part II-a general summary[J]. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 1987, 10(2): 93-113.

Interaction Between Dislocations and Cracks in Body-Centered Crystals Exposed to Hydrogen

Yue Sheng¹ Ming Li¹ Jian Dang¹ Yanjie Li²

(¹CRRC Qingdao Sifang Co., Ltd., Qingdao, 266109)(²China Railway Jinan Group Co., Ltd., Jinan, 250031)

Abstract To investigate how hydrogen atoms affect the fracture of metallic materials at the microscopic level, this paper develops a model of crack-dislocation interaction incorporating hydrogen infiltration at the crack tip across multiple grains, based on discrete dislocation theory. The model examines how hydrogen alters dislocation distribution on slip planes within grains, affects dislocation penetration through grain boundaries, and initiates wedge cracks at these boundaries. It applies to both body-centered cubic (BCC) and face-centered cubic (FCC) crystals.

Through calculations, the impact of varying hydrogen concentrations and infiltration ranges at the crack tip on dislocation distribution in front of the crack is analyzed. Results show that hydrogen at the crack tip promotes dislocation emission, increases the driving force for dislocation movement on slip planes, and facilitates dislocation penetration through grain boundaries. The relationship between wedge crack initiation at grain boundaries and hydrogen presence at the crack tip is explored. It is found that at large grain boundary angles, an increase in the hydrogen concentration and infiltration range at the crack tip makes it easier for wedge cracks to initiate at grain boundaries.

Additionally, the model assesses how hydrogen infiltration at the crack tip influences shear stress in the dislocation-free zone in front of the main crack. It reveals that increased hydrogen concentration and infiltration range at the crack tip enlarge the dislocation-free zone in front of the crack, reducing the shielding effect of dislocations and facilitating crack propagation.

This model effectively demonstrates the influence of hydrogen atoms at crack tips on dislocations in crystals, providing a foundation for studying metal fracture in hydrogen environments.

Key words crack, discrete dislocation, hydrogen environment, slip plane, grain boundary