

“单轴预应变对 Cr、Mo 掺杂 α -Fe 中 H 占位及扩散的影响”拓展补充材料

蔡一全¹ 尹益辉¹ 李继承^{1,2}

1 中国工程物理研究院 总体工程研究所 绵阳 621900

2 西南科技大学 工程材料与结构冲击振动四川省重点实验室 绵阳 621999

Supplementary Material for H Occupation and Diffusion of Cr and Mo Doped α -Fe under Uniaxial Pre-strain

CAI Yiquan¹, YIN Yihui¹, LI Jicheng^{1,2}

*1 China Academy of Engineering Physics, Institute of Systems Engineering, Mianyang 621900,
China*

*2 Key Laboratory of Engineering Materials and Structural Shock Vibration in Sichuan
Province, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621999, China*

<https://www.ams.org.cn/CM/10.11600/0412.1961.2025.00414>

资助项目 国家自然科学基金项目 No.12072333

收稿日期 2025-12-22 定稿日期 2026-01-30

作者简介 蔡一全, 男, 1997 年生, 博士生

通讯作者 尹益辉, yinyh@caep.ac.cn, 主要从事结构和材料的多场耦合分析研究

李继承, lijc401@caep.cn, 主要从事极端服役环境下结构及材料相关研究

引用格式 蔡一全, 尹益辉, 李继承. 单轴预应变对 Cr、Mo 掺杂 α -Fe 中 H 占位及扩散的影响 [J]. 金属学报, 202x, 6x: xx

Cai Y Q, Yin Y H, Li J C. H occupation and diffusion of Cr and Mo doped α -Fe under uniaxial pre-strain [J]. Acta Metall. Sin., 202x, 6x: XX. DOI: 10.11900/0412.1961.2025.00414

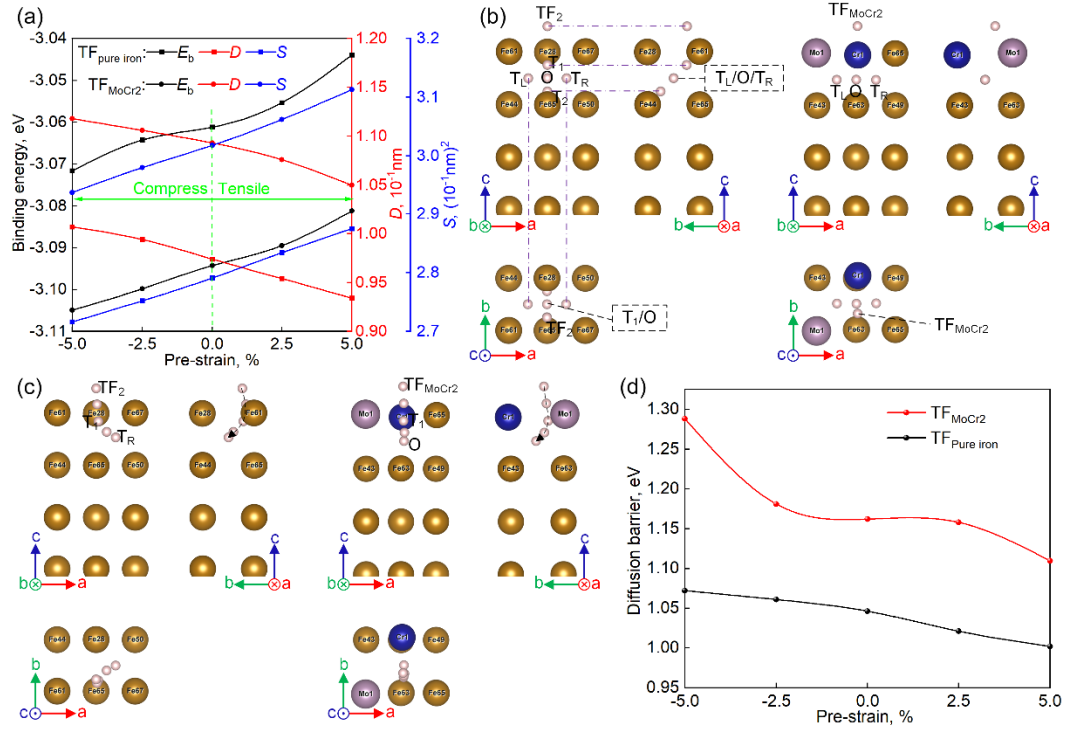
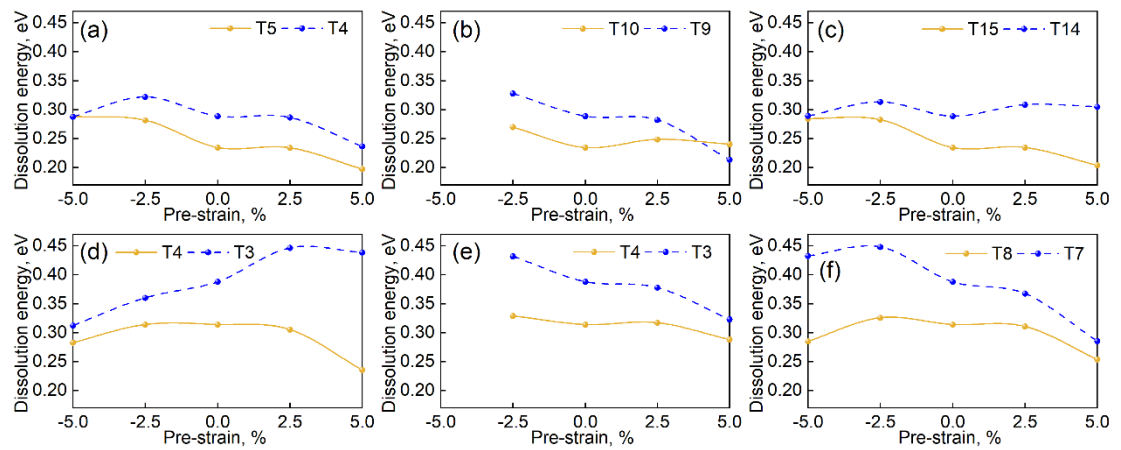


图 S1 表面 H 的扩散路径与能垒

Fig.S1 Binding energy (E_b) and geometric parameters (D , S) (a), hydrogen diffusion pathway (b, c), and associated diffusion barriers (d) from surface to bulk图 S2 不同预应变(ϵ)条件下 SB 和 LB 构型中 H 在 T 位点的溶解能(E_{sol}) (不考虑色散校正)Fig.S2 Dissolution energy (E_{sol}) of H at T sites in SB (a-c) and LB (d-f) configurations under varying pre-strain (ϵ) (without dispersion correction)

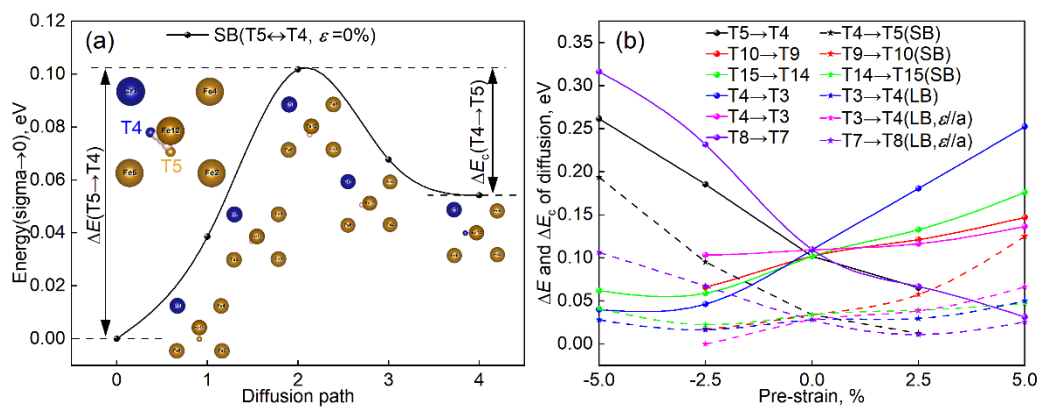


图 S3 扩散路径与能垒(不考虑色散校正)

Fig.S3 Diffusion pathway (a) and energy barriers (b) (without dispersion correction)