



面向空间环境的微-纳两级多孔铜质子辐照损伤与自由表面湮灭机制研究

莫龙飞^{1,2}, 李豪^{1,2}, 黄志锋^{1,2,3*}, 张联盟^{1,2}, 陈斐^{1,2,3*}

1. 武汉理工大学材料复合新技术全国重点实验室, 武汉 430070

2. 湖北省先进复合材料技术创新中心, 武汉 430070

3. 武汉理工大学材料科学与工程国际化示范学院, 武汉 430070

* E-mail: zhifenh@whut.edu.cn; chenfei027@whut.edu.cn

收稿日期: 2025-09-09; 接受日期: 2025-10-31; 网络版发表日期: 2025-11-19

中国载人航天工程空间利用系统项目(编号: KJZ-YY-WCL03, KJZ-YY-NCL406)资助

摘要 多孔金属因其具有低密度、高比强度和高比表面积等优点, 广泛应用于航空航天领域, 本文针对空间高能质子辐照对航天器材料的损伤问题, 研究了具有微-纳两级多孔结构铜材料的辐照行为与机制. 通过脱合金制备出具备连续韧带网络结构的多孔铜, 在此基础上开展140 keV质子辐照实验, 并结合分子动力学模拟分析辐照损伤机制. 显微结构观察表明, 在 1×10^{17} ion/cm²辐照剂量下, 韧带近表面区域出现非晶层与缺陷带, 缺陷带内部存在空位团簇和层错四面体等典型辐照损伤. 分子动力学模拟进一步揭示, 自由表面作为有效缺陷汇可显著吸收点缺陷, 但其对间隙原子的偏置吸收机制抑制了空位-间隙对复合, 促使空位团聚并形成位错网络, 近表面应力场不对称性驱动缺陷向表面迁移, 该研究从结构和机理层面为抗辐照多孔金属材料的设计提供了理论支撑.

关键词 多孔铜, 质子辐照, 自由表面, 分子动力学模拟, 缺陷演化

1 引言

航天器在极端空间环境中会受到太阳宇宙射线和银河宇宙射线等高能辐射的侵蚀, 其中80%以上的辐射来自高能质子^[1]. 因此, 研发能够耐受严苛辐照条件的航天器材料, 对保障空间探测系统的可靠性与寿命至关重要^[1~3]. 在此类环境中, 材料内部将产生大量点缺陷, 这些缺陷持续累积并聚集形成位错环、堆垛层错四面体(stacking fault tetrahedron, SFT)等更复杂的缺陷结构^[4,5]. 缺陷的演化可能导致材料发生膨胀、脆

化及非晶化等现象, 进而加速其在辐照环境下的性能退化与失效^[6~9]. 因此, 发展一类具有优异抗辐照性能的材料, 对提升航天器在极端辐射环境中的运行极限与服役寿命具有重要意义.

为了增强材料的抗辐照性, 人们研究了各种类型的缺陷汇, 如晶界(grain boundaries, GBs)、孪晶边界(twin boundaries, TBs)、相界等^[10~15]. 多孔金属与全致密粗晶(coarse-grain, CG)金属相比, 能够表现出更强的抗溶胀性, 因为它们每单位体积的自由表面积较大. 自由表面常被认为是完美的间隙空位复位点, 是理想的

引用格式: 莫龙飞, 李豪, 黄志锋, 等. 面向空间环境的微-纳两级多孔铜质子辐照损伤与自由表面湮灭机制研究. 中国科学: 技术科学, 2025, 55: 2031–2040
Mo L F, Li H, Huang Z F, et al. Proton irradiation damage and free surface annihilation mechanisms in micro-nano hierarchical porous copper for space environments (in Chinese). Sci Sin Tech, 2025, 55: 2031–2040, doi: 10.1360/SST-2025-0257

缺陷汇, 可以制备具有极大比表面积的纳米多孔金属以提升材料的辐照耐受性^[16,17]。然而, 关于纳米多孔金属在气体辐照下的辐照性能的研究至今仍非常有限。Sun等人^[18]制备了具有辐照耐受性的纳米多孔Ag, 表明了纳米多孔结构能够有效增强Ag的辐照耐受性, 与粗晶粒Ag相比, 纳米多孔Ag具有更小的缺陷簇体积与更大的缺陷簇间隔距离, 导致缺陷簇的扩散速率与生长速率大幅下降; Kolluri等人^[19]使用原子建模表明纳米多孔Au在辐照环境下相邻的韧带将会相互塌陷融合形成更粗的韧带使自由表面减小, 事实上, 具有纳米多孔结构的金属在辐照环境下的韧带粗化现象不可避免; Yang等人^[20]利用分子动力学模拟发现所有在{111}晶面滑移的位错最终被Cu纳米线的自由表面吸收; Hu等人^[21]的研究直接发现了纳米多孔Cu中的自由表面能够增强对He离子的辐照耐受性, 纳米孔结构在辐照后得到完全保留, 并且表面韧带发生了轻微粗化。

本文通过对Cu-Fe-Al合金进行去合金处理制备出块状微-纳两级多孔铜, 研究了多孔铜质子辐照后韧带微观结构的演变, 同时使用分子动力学模拟揭示了自由表面在辐照初期缺陷演化过程中的作用机制。

2 实验

2.1 微-纳两级多孔铜制备

原料采用成分为Cu₅₀Fe₂₅Al₂₅(原子比)的球形金属粉末, 使用行星球磨机对粉末进行充分混合后, 利用等离子放电活化烧结(plasma activation sintering, PAS)技术制备前驱体合金。随后将清洁干净的前驱体合金放入5 wt.%的硫酸中, 并将容器置于水浴(60°C)下脱合金16 h, 以制备具有连续韧带结构的微-纳两级多孔Cu。使用去离子水和无水乙醇反复冲洗, 并在真空环境下干燥, 以避免硫酸盐残留以及多孔Cu氧化。

2.2 质子辐照实验

使用SRIM-2013程序^[22]计算了在25 eV位移能阈值条件下Cu在质子辐照后受深度影响的损伤积累水平, 估计质子束穿透深度以及辐照损伤。

使用200 keV串联式质子注入机对多孔Cu进行质子辐照实验, 该质子注入机通过二级加速使质子达到140 keV, 该能量对应于近地轨道400 km高度附近的高通量、低能量(<300 keV)质子环境, 是航天器材

料面临的重要威胁因素。质子辐照前将辐照腔室抽真空至 1×10^{-5} Pa, 辐照温度为25°C。辐照剂量率恒定为 5×10^{11} ion/cm², 最终辐照剂量为 1×10^{17} ion/cm², 质子束与样品表面成90°夹角进行辐照, 计算得出最大辐照损伤水平约为0.7 dpa。

2.3 多孔Cu质子辐照缺陷表征

通过扫描电子显微镜(SEM Quanta FEG 250)对样品表面形貌进行观察, 通过聚焦离子束(FEI Helios Nanolab600i FIB-SEM DualBeam)对TEM样品进行制备, Ga离子束垂直于辐照样品表面进行切割, 切割完成后使用3 kV, 24 pA的离子束对切割完成的TEM样品进行10 s的非晶清扫, 以减少由FIB造成的非晶区面积增加, 通过透射电子显微镜(FEI Talos F200X)对多孔Cu进行明场TEM(bright field TEM, BFTEM)、高分辨率TEM(high resolution TEM, HRTEM), 其中明场TEM用于精细观察多孔Cu辐照前后韧带结构与韧带宽度变化, 高分辨率TEM用以研究多孔Cu辐照后韧带边缘的缺陷形貌。

2.4 分子动力学模拟

本研究采用分子动力学软件LAMMPS对铜纳米线开展级联碰撞模拟来研究空间质子辐照过程中自由表面与缺陷的相互作用。模型构建以(1-10), (11-2)及(111)晶向作为基矢, 构建直径为25 nm的纳米线模型, 如图1所示。模拟过程中施加周期性边界条件, 并选用Jin等人^[23]所开发的嵌入原子势(embedded atom method, EAM)描述原子间相互作用。为准确模拟高能原子碰撞, 利用样条函数将Ziegler-Biersack-Littmark(ZBL)普适排斥势^[24]与EAM势平滑衔接。模拟前, 系统在300 K温度及0 MPa压力条件下进行100 ps的弛豫, 以确保达到热力学平衡。随后, 在纳米线表面选定一个初级碰撞原子(primary knock-on atom, PKA), 赋予其5 keV的动能, 并沿Y轴负方向入射。5 keV的PKA能量代表了140 keV质子能谱中能够产生显著级联碰撞的高能反冲原子事件。该能量选择能够在计算可行范围内, 有效再现级联碰撞的核心特征(如热峰、点缺陷产生与团聚)。为吸收多余能量并维持系统温度为300 K, 在Z轴两端施加Nosé-Hoover热浴^[25,26]。级联碰撞模拟分为两个阶段: 初始碰撞阶段采用自适应时间步长(由 10^{-4} fs逐步调整至1 fs), 并限制原子位移不超过每步

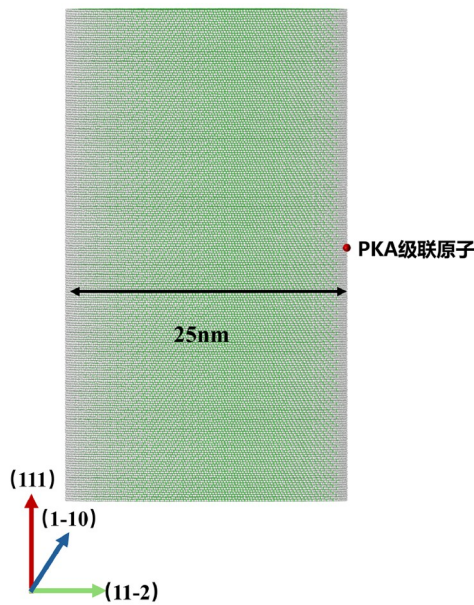


图 1 分子动力学模型

Figure 1 Molecular dynamics model.

0.05 Å, 以精确捕捉PKA的快速碰撞过程; 后续弛豫阶段则采用固定时间步长1 fs, 确保点缺陷的消除过程得到充分模拟. 最终, 采用OVITO软件对模拟结果进行后处理与可视化分析, 观察缺陷的演化行为.

3 结果与讨论

3.1 质子辐照后空位型缺陷的分布

空间环境中高能质子的能量沉积与损伤分布是评估航天器材料服役寿命的关键. 本研究利用SRIM2013

软件对纯铜材料在质子辐照条件下的损伤行为进行了数值模拟. 质子能量设定为140 keV, 靶材为纯铜, 原子离位阈能取值为25 eV. 模拟结果如图2所示. 图2(a)展示了质子运动轨迹(白色点)、初级离位原子(红色点)以及由此引发的次级碰撞路径(绿色点). 从空位与离位原子分布可以看出, 质子辐照所产生的空位主要集中在距表面400~800 nm的深度范围内. 当质子注量达到 10^{17} ion/cm²时, 基于拟合得到的空位分布及声子能量分布计算得出相应的辐照损伤分布(图2(b)). 图2(c)进一步显示, 140 keV质子辐照引起的损伤主要集中在距表面900 nm以内区域, 其中600~800 nm范围内的损伤程度较高, 且在约700 nm处出现峰值. 此外, 考虑到多孔铜材料中存在孔隙结构, 质子的实际辐照深度预计将有所增加. 上述模拟结果明确揭示了空间质子辐照损伤的集中区域, 为后续多孔铜材料在实际空间辐照环境下的损伤行为分析提供了理论基础.

3.2 微-纳两级多孔铜质子辐照实验

为了直接观测空间质子辐照环境对多孔材料微观损伤的影响, 本研究对微纳两级多孔铜进行了地面质子辐照实验. 图3展示了微-纳两级多孔铜质子辐照前后孔隙结构特征与表面形貌. 对辐照前多孔铜的微观结构进行统计表征, 基于图3(a)~(d)的SEM图像, 使用Image J软件统计分析发现其孔隙呈现典型的双峰分布. 统计结果显示, 微米级孔隙的尺寸主要介于2~6 μm之间, 而纳米级孔隙的尺寸主要介于200~700 nm之间. 从图3(e)和(f)可以看出辐照后韧带表面出现一层半透明的膜状物质, 同时韧带表面出现

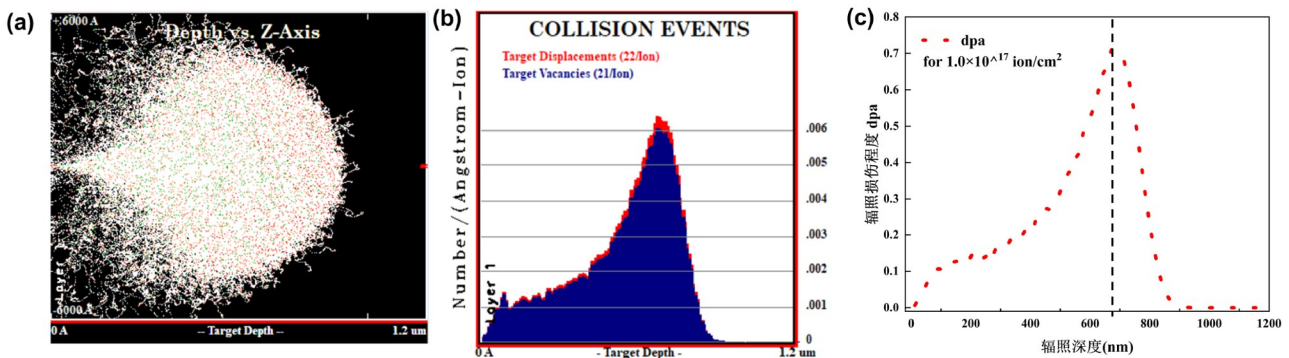


图 2 SRIM模拟140 keV辐照铜. (a) 一维损伤路径; (b) 辐照损伤分布; (c) 140 keV辐照损伤dpa与其深度分布

Figure 2 SRIM simulation of 140 keV irradiation on copper. (a) One-dimensional damage range, (b) irradiation damage distribution, (c) depth distribution of 140 keV irradiation damage in dpa.

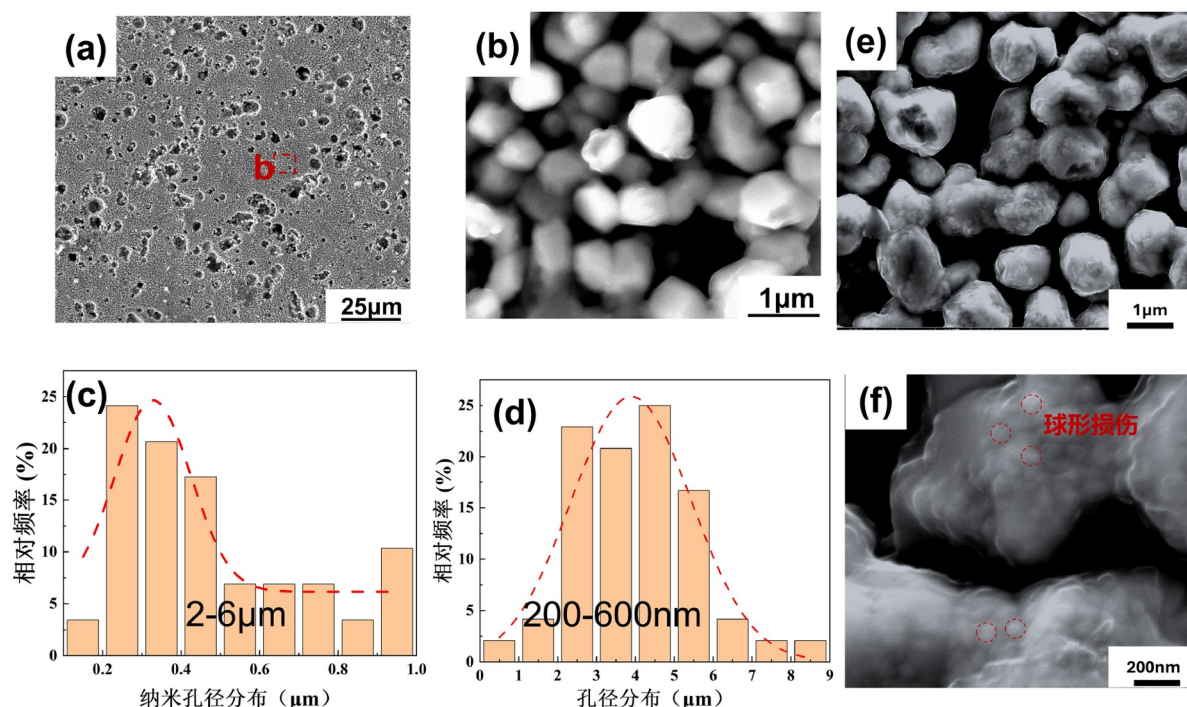


图3 质子辐照前后微-纳两级多孔铜孔隙结构特征与表面形貌. (a), (b) 辐照前微纳两级多孔铜; (c), (d) 微-纳两级多孔铜孔径分布; (e), (f) 辐照后微-纳两级多孔铜

Figure 3 Structural and surface characteristics of micro-nano two-level porous copper before and after proton irradiation. (a), (b) Before irradiation; (c), (d) pore size distribution of micro-nano dual-scale porous copper; (e), (f) after irradiation.

球形凸起. 该现象主要归因于靠近表面的碰撞级联过程中产生的强烈热尖峰^[27], 导致局部熔化或显著的原子位移, 结合入射质子对表面原子的溅射效应^[28], 以及表面受限环境对原子迁移的限制, 促使这些球形结构的聚集与形成.

图4展示了微-纳两级多孔铜近表面不同深度处损伤的微观图像. 图4(b)~(d)展示了表面0~400 nm范围内的缺陷分布, 如图4(b)所示韧带表面出现宽度为2~5 nm的缺陷带, 内部具有较少的缺陷. 如图4(c)所示, 缺陷带外侧存在非晶层(厚度约为4 nm), 表明SEM图像中的半透明膜为非晶态的铜. 同时缺陷带中存在大量的黑点辐照损伤, 黑点辐照损伤的主要类型包括空位团簇和层错四面体等缺陷. 自由表面作为理想的缺陷汇能够有效地吸收缺陷, 导致靠近韧带表面存在大量缺陷的富集从而形成了缺陷带. 图4(e)和(f)展示了表面400~1200 nm范围内的缺陷分布. 如图4(e)和(f)所示, 韧带中存在大量辐照缺陷簇(黄色圆圈所示), 对比图4(b)可以发现, 随着辐照深度的增加缺陷密度大幅增加. 根据经典的级联碰撞假设^[29,30], 当高能质子

的能量 E_1 小于或者接近铜原子位移阈值 E_{disp} 时产生新位移的可能性减小, 这使得在材料内形成连续缺陷变得具有挑战性, 此阶段的缺陷表现为黑点损伤. 对比图2可知微-纳两级多孔铜韧带中辐照深度与辐照损伤程度大致符合SRIM的模拟结果.

3.3 近表面辐照缺陷演化机制分析

理解空间辐照环境下缺陷的早期演化机制, 是设计新型抗辐照航天器材料的基础. 图5(a)~(d)展示了动能为5 keV的表面PKA诱发辐照损伤的演化过程. 在初始弹道阶段, PKA的动能通过碰撞迅速传递至周围晶格, 引发原子级联碰撞, 导致明显的表面溅射(图5(b)箭头所示)并形成一个高度局域化的热峰(如图5(b1)所示). 局部能量沉积形成的热峰导致近表面区域温度急剧升高, 引发局部熔化, 大量原子脱离晶格位置并呈现剧烈无序运动, 从而为显著的原子混合提供了条件. 弹道阶段结束后, 系统进入热淬火与再结晶阶段: 热峰能量通过热传导逐渐耗散, 熔化区迅速冷却, 冷却速率可达 $10^{12} \sim 10^{14}$ K/s, 超快的淬火速率极大地抑制了原子的

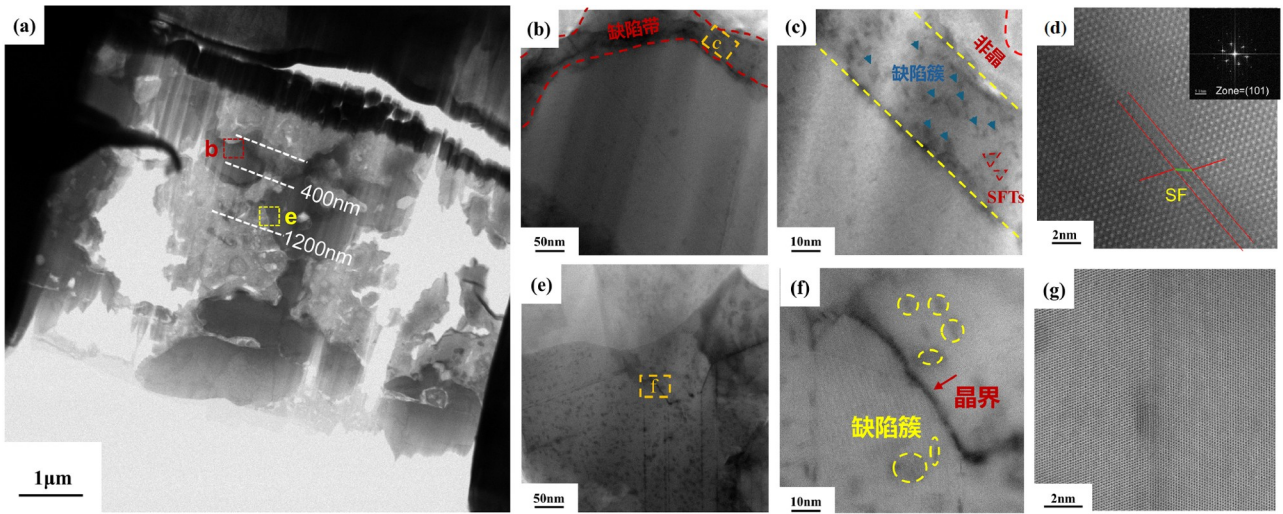


图 4 质子辐照后微-纳两级多孔铜不同深度处微观结构. (a) 整体情况; (b)~(d) 0~400 nm 范围内韧带缺陷分布; (e)~(g) 400~1200 nm 范围内缺陷分布

Figure 4 Microstructure of micro-nano two-level porous copper at different depths after proton irradiation. (a) Overall situation; (b)~(d) distribution of ligament defects within the range of 0~400 nm; (e)~(g) defect distribution within the range of 400~1200 nm.

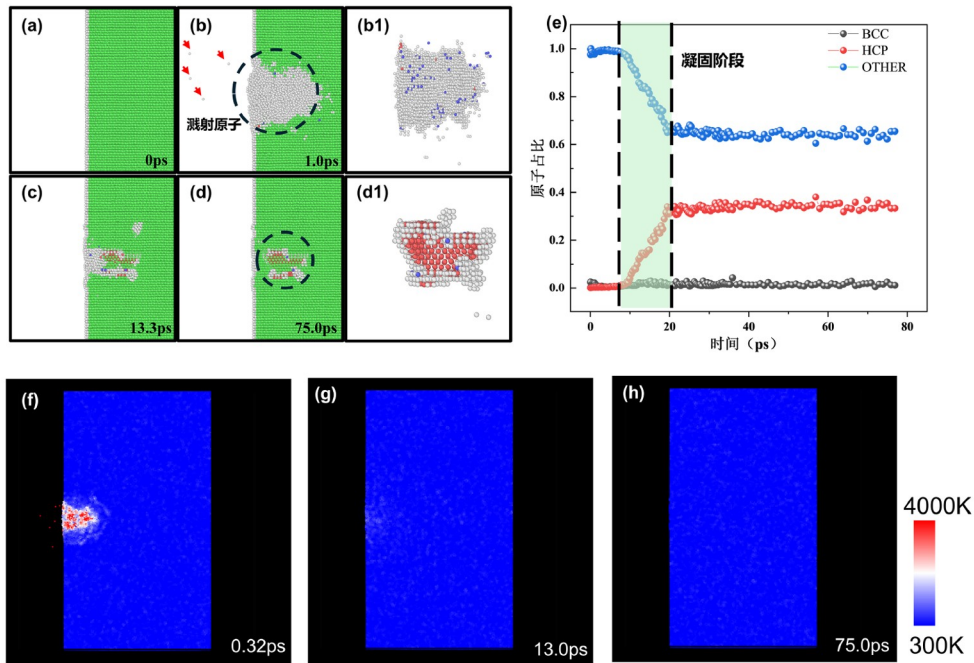


图 5 动能为 5 keV 的表面 PKA 诱发辐照损伤的演化过程及温度分布. (a)~(d) 辐照损伤随时间的演变; (e) 不同原子占比随时间的演变; (f)~(h) 辐照过程中温度分布

Figure 5 Evolution of irradiation damage and temperature distribution induced by a 5 keV surface PKA. (a)~(d) Temporal evolution of irradiation damage; (e) fraction of different atom types over time; (f)~(h) temperature distribution during the irradiation process.

扩散与重排, 图5(e)的统计结果为此提供了佐证: 在冷却阶段, 代表非平衡结构的HCP原子比例显著增加, 这正是快速淬火过程中晶格恢复不完整的直接证据。结

合分子动力学模拟和实验结果, 在质子辐照过程中热峰核心区域的温度显著超过铜的熔点, 同时超快的淬火速率抑制晶化, 此外, 缺陷带内空位团簇的聚集(如

图4(b)所示)进一步降低了局部晶格稳定性, 协同促进了非晶化过程^[27,31].

图6(a)~(d)展示了辐照级联过程中近表面弗兰克尔缺陷随时间演化的特征. 与体相辐照中点缺陷沿晶格固有低势垒路径(如111方向)迁移的行为不同^[32,33], 近表面缺陷表现出明显的向两侧表面定向扩散趋势(见图6(a)和(b)). 该现象主要归因于自由表面对应力场对称性的破坏. 图6(e)~(h)利用维里公式计算的应力场结果表明, 级联碰撞引发了剧烈的应力波动. 在近表面区域, 这些应力波动与应力梯度及指向表面的图像力^[34]相互耦合, 共同为缺陷提供了定向驱动力. 应力波动有助于缺陷克服局部能垒, 而非对称的应力场则引导缺陷优先迁移至表面这一低能汇. 图6(c)和(d)显示, 部分空位团簇被表面有效吸收, 未被吸收的团簇则在体相中聚集, 形成稳定的缺陷结构. 研究表明, 近表面应力场的各向异性及图像力效应是主导表面辐照缺陷早期演化的关键因素. 这一机制与体相辐照中以晶格导向迁移为主的行为存在本质差异, 凸显了自由表面在空间环境下既作为缺陷汇聚点, 又可能导致体内空位残留的双重作用.

图7通过W-S方法对表面PKA原子辐照与中心PKA原子辐照过程中点缺陷数量随时间变化的关系进

行了对比分析. 如图7(a)所示, 在表面辐照模拟中, 间隙原子数量始终低于空位数量, 这主要归因于辐照过程中质子溅射效应导致部分原子逸出表面. 将图7(a)和(b)进行比较可见, 表面辐照条件下间隙原子与空位的复合时间明显长于中心辐照, 主要原因在于自由表面对间隙原子具有偏置吸收效应, 从而抑制了间隙-空位对的复合过程. 自由表面对间隙原子表现出显著偏置吸收行为的主要原因在于间隙原子的迁移能垒远低于空位, 使得间隙原子更容易在辐照后快速扩散至表面并被吸收. 进入稳定阶段后, 表面辐照模拟中的缺陷数量仍表现出一定波动, 表明即使在稳定阶段, 近表面区域的空位团簇与自由表面之间也存在持续的相互作用. 这表明, 在空间环境的持续辐照条件下, 近表面区域的缺陷演化呈现出动态且长期的特征. 为定量评估空位团簇的演化行为, 对比了表面与体相辐照模拟达到稳定状态后的空位团簇尺寸分布(图7(c)). 结果显示, 体相辐照条件下的空位主要以单空位或小团簇形式存在. 与之形成鲜明对比的是, 表面辐照条件下的空位团簇尺寸分布右移, 出现了更多大尺寸的团簇. 这一统计证据明确揭示了自由表面对空位团聚的促进作用: 其对间隙原子的选择性吸收, 有效抑制了点缺陷复合, 使得空位在体相中有更充分的时间和机会通过

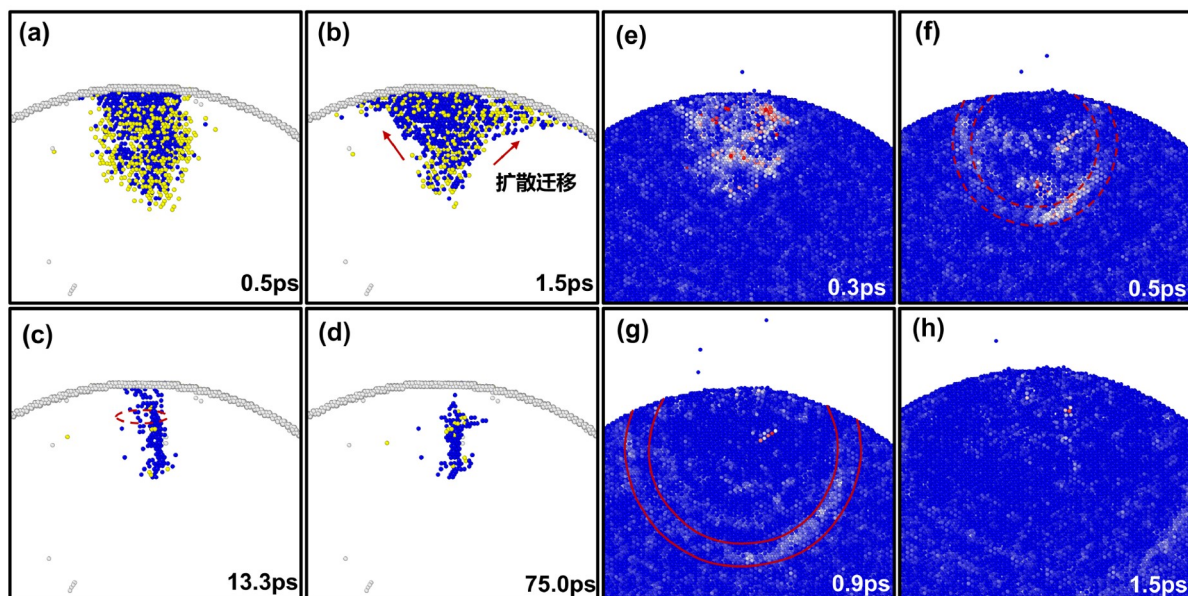


图6 近表面辐照诱导弗兰克尔缺陷的演化及局部应力场分布. (a)~(d) 弗兰克尔缺陷随时间的演化过程; (e)~(h) 辐照过程中应力场的分布

Figure 6 Evolution of near-surface irradiation-induced Frenkel pairs and the corresponding local stress field distribution. (a)~(d) Temporal evolution of Frenkel defects; (e)~(h) distribution of the stress field during irradiation.

迁移而聚合变大.

图8结合W-S方法与DXA分析方法, 系统揭示了近表面辐照过程中弗兰克尔缺陷、位错网络与自由表面之间的动态相互作用机制. 研究发现, 自由表面对间隙原子表现出显著的偏析和汇集效应, 促使大量间隙原子优先迁移至表面并形成吸附原子, 进而导致体相空位持续聚集, 逐步演化为空位团簇及位错网络结构. 近表面位错网络的湮灭主要通过两种机制实现: 其一, 在表面图像力的作用下, 近表区位错发生滑移并最终

逸出表面(图8(c)和(d)), 该过程通常在表面形成由空位构成的凹坑^[32]; 其二, 位错网络本身富含空位, 能够作为吸收汇捕获体相残余的间隙原子(图8(d)~(f)), 从而促进缺陷的复合与湮灭. 尽管已有原位辐照实验表明自由表面对位错环、层错四面体等缺陷具有良好的吸收能力^[18,19,35], 本研究模拟结果显示, 在皮秒(ps)时间尺度内, 位错网络还未能被表面完全吸收. 该发现表明, 尽管自由表面为缺陷湮灭的有效通道, 其吸收效率还受到缺陷迁移动力学及应力驱动机制的限制.

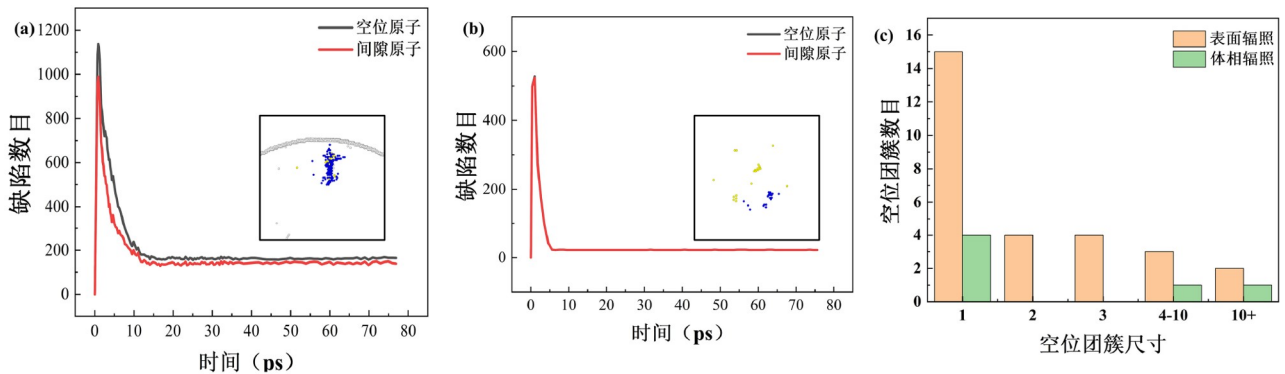


图7 基于W-S方法的表面与体相PKA辐照缺陷随时间演化以及空位团簇尺寸. (a) 表面辐照过程中缺陷随时间的演化; (b) 体相辐照过程中缺陷随时间的演化; (c) 空位团簇尺寸分布

Figure 7 Temporal evolution of irradiation-induced defects and vacancy cluster size from surface and bulk PKAs based on the W-S method. (a) Defect evolution during surface irradiation; (b) defect evolution during bulk irradiation; (c) size distribution of vacancy clusters.

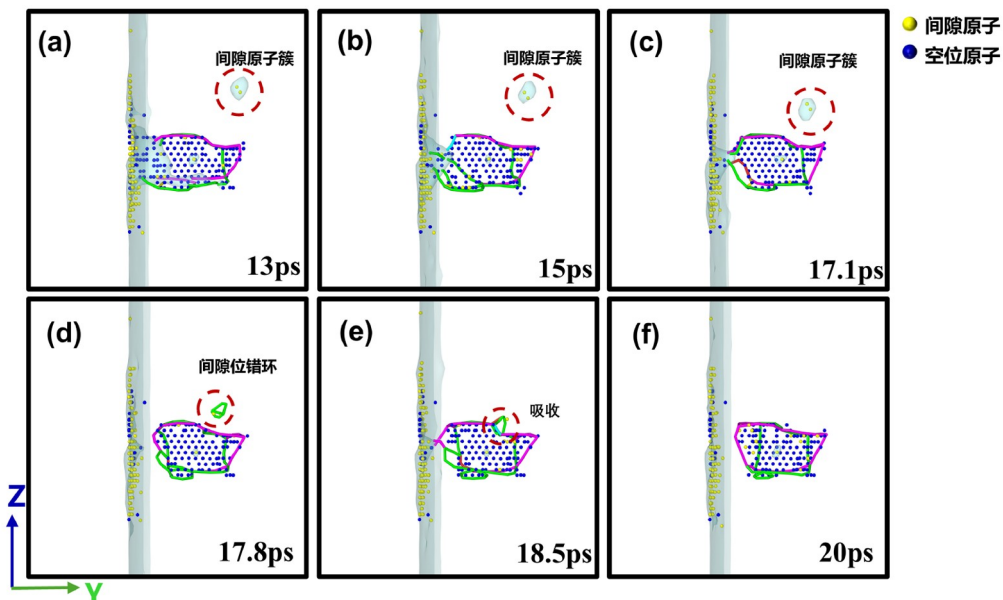


图8 (a)~(f) 基于W-S与DXA算法的近表面缺陷动态演化及位错网络吸收过程

Figure 8 (a)~(f) Comparison of near-surface defect evolution and dislocation network absorption processes based on the W-S and DXA methods.

4 结论

本文通过脱合金法制备了微-纳两级多孔铜, 并综合运用质子辐照实验与分子动力学模拟, 系统研究了其在高能质子辐照下的微观结构演变与缺陷行为机制. 主要结论如下:

(1) SRIM模拟表明, 140 keV质子对铜的辐照损伤主要集中在距表面400~800 nm的深度范围内, 损伤峰值位于700 nm处;

(2) 在 1×10^{17} ion/cm²的辐照剂量下, 多孔铜韧带近表面形成一层非晶化铜膜, 同时韧带内部形成宽度约2~5 nm的缺陷带, 缺陷带内部富含空位团簇、SFT等典型辐照损伤结构;

(3) 近表面应力场的不对称性为点缺陷向表面的定向迁移提供了驱动力, 自由表面对间隙原子具有偏置吸收效应, 该效应抑制了空位-间隙对的复合, 导致空位在体内残留并团聚.

参考文献

- 1 Tunes M A, Stemper L, Greaves G, et al. Prototypic lightweight alloy design for stellar-radiation environments. *Adv Sci*, 2020, 7: 2002397
- 2 Duzellier S, Gordo P, Melicio R, et al. Space debris generation in GEO: Space materials testing and evaluation. *Acta Astronaut*, 2022, 192: 258–275
- 3 Reddy M R. Effect of low earth orbit atomic oxygen on spacecraft materials. *J Mater Sci*, 1995, 30: 281–307
- 4 Shumov A E, Novikov L S, Shaevich S K, et al. Results of the Komplast experiment on the long-term exposure of materials specimens on the ISS surface. *Adv Space Res*, 2015, 56: 2188–2195
- 5 Bringa E M, Monk J D, Caro A, et al. Are nanoporous materials radiation resistant? *Nano Lett*, 2012, 12: 3351–3355
- 6 Fu E G, Carter J, Swadener G, et al. Size dependent enhancement of helium ion irradiation tolerance in sputtered Cu/V nanolaminates. *J Nucl Mater*, 2009, 385: 629–632
- 7 Rodriguez-Nieva J F, Ruestes C J, Tang Y, et al. Atomistic simulation of the mechanical properties of nanoporous gold. *Acta Mater*, 2014, 80: 67–76
- 8 Caro M, Mook W M, Fu E G, et al. Radiation induced effects on mechanical properties of nanoporous gold foams. *Appl Phys Lett*, 2014, 104: 233109
- 9 Jernkvist L O, Massih A R. Multi-field modelling of hydride forming metals. Part I: Model formulation and validation. *Comput Mater Sci*, 2014, 85: 363–382
- 10 Kandare S P, Bhoraskar V N, Phatangare A B, et al. Effect of 6 MeV electron irradiation on nano-Cu₂ZnSnS₄. *J Mater Sci-Mater Electron*, 2021, 32: 19042–19051
- 11 Chen Y, Yu K Y, Liu Y, et al. Damage-tolerant nanotwinned metals with nanovoids under radiation environments. *Nat Commun*, 2015, 6: 7036
- 12 Dillon S J, Tang M, Carter W C, et al. Complexion: A new concept for kinetic engineering in materials science. *Acta Mater*, 2007, 55: 6208–6218
- 13 Kernohan R H, Wechsler M S. Neutron irradiation of Cu-Al at elevated temperatures. *J Phys Chem Solids*, 1961, 18: 175–180
- 14 Li J, Fan C, Li Q, et al. In situ studies on irradiation resistance of nanoporous Au through temperature-jump tests. *Acta Mater*, 2018, 143: 30–42
- 15 Liu W, Ji Y, Tan P, et al. Irradiation induced microstructure evolution in nanostructured materials: A review. *Materials*, 2016, 9: 105
- 16 Makarochkin A, Yahel E, Makov G. Blister growth model in proton-irradiated metals—Application to tungsten irradiated by MeV protons. *J Nucl Mater*, 2022, 564: 153712
- 17 Fu E G, Caro M, Zepeda-Ruiz L A, et al. Surface effects on the radiation response of nanoporous Au foams. *Appl Phys Lett*, 2012, 101: 191607
- 18 Sun C, Bufford D, Chen Y, et al. In situ study of defect migration kinetics in nanoporous Ag with enhanced radiation tolerance. *Sci Rep*, 2014, 4: 3737
- 19 Kolluri K, Demkowicz M J. Coarsening by network restructuring in model nanoporous gold. *Acta Mater*, 2011, 59: 7645–7653
- 20 Yang Z Y, Jiao F F, Lu Z X, et al. Coupling effects of stress and ion irradiation on the mechanical behaviors of copper nanowires. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2013, 56: 498–505
- 21 Hu Z Y, Chen H Q, Zhao Y B, et al. Abundant free surface in nanoporous copper films enhancing tolerance against helium ion irradiation. *J Alloys Compd*, 2020, 843: 155829
- 22 Stoller R E, Toloczko M B, Was G S, et al. On the use of SRIM for computing radiation damage exposure. *Nucl Instruments Methods Phys Res*

[Sect B-Beam Interact Mater Atoms](#), 2013, 310: 75–80

- 23 Jin M, Cao P, Yip S, et al. Radiation damage reduction by grain-boundary biased defect migration in nanocrystalline Cu. [Acta Mater](#), 2018, 155: 410–417
- 24 Biersack J P, Ziegler J F. The Stopping and Range of Ions in Solids. In: Ryssel H, Glawischnig H. Ion Implantation Techniques. Heidelberg: Springer Berlin, 1982. 122–156
- 25 Nosé S. A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble. [Mol Phys](#), 1984, 52: 255–268
- 26 Hoover W G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. [Phys Rev A](#), 1985, 31: 1695–1697
- 27 Johannessen B, Kluth P, Llewellyn D J, et al. Amorphization of embedded Cu nanocrystals by ion irradiation. [Appl Phys Lett](#), 2007, 90: 073119
- 28 Zhao Y, Ning R, Yi X, et al. Formation of multilayer structure and evolution of shape recovery characteristics in proton irradiated TiNi alloy thin films. [Mater Charact](#), 2020, 164: 110348
- 29 Kinchin G H, Pease R S. The displacement of atoms in solids by radiation. [Rep Prog Phys](#), 1955, 18: 1–51
- 30 Norgett M J, Robinson M T, Torrens I M. A proposed method of calculating displacement dose rates. [Nucl Eng Des](#), 1975, 33: 50–54
- 31 Berthelot A, Hémon S, Gourbilleau F, et al. Nanometric size effects on irradiation of tin oxide powder. [Nucl Instruments Methods Phys Res Sect B-Beam Interact Mater Atoms](#), 1998, 146: 437–442
- 32 Lee H G, Yoo S H, Lee B, et al. Free-surface effect on displacement cascades in BCC W: Molecular dynamics study. [Nucl Fusion](#), 2020, 60: 126009
- 33 Wang N, Deng H Q, Hu N W, et al. Molecular dynamics simulation of cascade collisions in alpha-iron and vanadium (in Chinese). *Sci Sin Tech*, 2012, 42: 473–480 [王宁, 邓辉球, 胡能文, 等. α -铁和钒中级联碰撞的分子动力学模拟研究. 中国科学: 技术科学, 2012, 42: 473–480]
- 34 Sang H, Yang A, Zhang Y, et al. The effect of W/Cu phase boundary on the evolution of end-of-range dislocation loop induced by He ion irradiation at 773 K. [Mater Charact](#), 2025, 224: 114996
- 35 Li J, Chen Y, Wang H, et al. In situ study on enhanced heavy ion irradiation tolerance of porous Mg. [Scripta Mater](#), 2018, 144: 13–17

Proton irradiation damage and free surface annihilation mechanisms in micro-nano hierarchical porous copper for space environments

MO LongFei^{1,2}, LI Hao^{1,2}, HUANG ZhiFeng^{1,2,3}, ZHANG LianMeng^{1,2} & CHEN Fei^{1,2,3}

¹ State Key Laboratory of Advanced Technology for Materials Synthesis and Processing, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China

² Hubei Technology Innovation Center for Advanced Composites, Wuhan 430070, China

³ International School of Materials Science and Engineering, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China

Porous metals, renowned for their low density, high specific strength, and high specific surface area, are widely used in the aerospace sector. This study addresses the issue of material damage in spacecraft caused by high-energy proton irradiation in space, focusing on the irradiation behavior and mechanisms of micro-nano hierarchical porous copper. A dealloying method was employed to fabricate porous copper with a continuous ligament network structure. Subsequently, 140 keV proton irradiation experiments were conducted, complemented by molecular dynamics simulations to analyze the irradiation damage mechanisms. Microstructural observations reveal that at an irradiation dose of 1×10^{17} ions/cm², an amorphous layer and a defect band form in the near-surface region of the ligaments. The defect band contains typical irradiation-induced damage features, such as vacancy clusters and stacking fault tetrahedra. Molecular dynamics simulations further demonstrate that free surfaces act as effective sinks for point defects. However, the biased absorption of interstitials over vacancies inhibits vacancy-interstitial recombination, promoting vacancy aggregation and the formation of dislocation networks. The asymmetric stress field near the surface drives the migration of defects toward the surface. This study provides theoretical insights for the design of irradiation-resistant porous metallic materials from both structural and mechanistic perspectives.

porous copper, proton irradiation, free surface, molecular dynamics simulation, defect evolution

doi: [10.1360/SST-2025-0257](https://doi.org/10.1360/SST-2025-0257)