

级联碰撞与嬗变氢协同作用下铜中初始位错形核机制研究

王天成, 余 旭, 胡天一, 黄 海

(郑州大学 物理学院材料物理教育部重点实验室, 河南 郑州 450001)

摘要: 铜及其合金因具有优异的导热性、热稳定性、力学性能及良好的抗中子辐照能力, 被认为是聚变堆偏滤器热沉部件的首选结构材料。但是, 对于铜材料在中子辐照离位损伤与嬗变反应所产生的氢协同作用下的相关机制, 目前仍缺乏深入理解。本研究基于分子动力学方法, 对铜离位损伤与嬗变生成氢的协同效应进行研究, 着重分析了协同作用下铜内部位错形核机制, 特别探讨了嬗变氢原子浓度(2000~8000 appm)、PKA入射能量(1.0~7.0 keV)以及模拟温度(100~900 K)的影响。结果表明, 氢浓度的升高会增加点缺陷数量, 加剧钉扎效应, 促进位错密度上升并形成复杂的纠缠结构。PKA入射能量的增大会导致位错线长度和密度显著增加。在低温段, 温度升高会促进级联中心位错纠缠结构的发展; 而在高温段, 温度升高会促进位错湮灭和断裂, 导致级联中心位错纠缠结构瓦解。这些发现为聚变堆用抗辐照铜合金的设计提供了参考。

关键词: 聚变堆; 铜; 初级离位损伤; 氢; 位错形核; 分子动力学

doi: 10.3969/j.issn.1009-3842.2026.03.005

中图分类号: TL341; TL631; O774 文献标识码: A 文章编号: 1009-3842(2026)03-0039-09

偏滤器作为聚变堆核心组件, 对聚变反应的稳定运行及反应堆服役寿命的影响极为关键。近年来, 铜及其合金因具有高热导率、优异力学强度及较好的抗中子辐照性能, 已成为偏滤器热沉部件首选材料^[1-3]。然而, 聚变堆内工况极为恶劣, 材料不仅需承受高热负荷冲击, 还要承受14.1 MeV中子轰击引发的离位损伤。这些离位损伤通常由大量空位与间隙原子构成, 随后会进一步聚集成位错环、空洞等缺陷结构。与此同时, 中子入射到材料中还可发生核嬗变(n, α)反应, 产生大量氢原子。由于氢在金属中溶解度极低, 在高温作用下, 易在位错环、空洞等缺陷处聚集并长大为氢泡。此外, 聚变示范堆(DEMO)的发展目标中, 要求偏滤器中子辐照剂量较国际热核聚变实验堆(ITER)提高一个数量级(达到 2.6×10^{22} n/m²)。为适应下一代聚变装置的苛刻服役工况, 迫切需要研发抗中子辐照性能更优的铜基热沉材料^[4-5]。

辐照缺陷与氢的耦合作用通常会导致材料硬化、脆化、肿胀及表面起泡等现象, 从而引发偏滤器热沉部件过早失效, 严重影响聚变堆服役可靠

性。因此, 当前亟需深入研究铜基材料中子辐照损伤行为, 以指导抗辐照铜基新材料的研发。事实上, 已有不少科研人员针对铜合金的辐照损伤或氢效应展开过探索。例如, Brager等^[6]发现商用铜合金在辐照下会出现较为明显的辐照肿胀(如Cu-0.1%Ag出现高达1%/dpa肿胀), 而添加Be可有效抑制该效应。Ding等^[7]通过原位透射电子显微镜与分子动力学(MD)模拟发现, 纳米氢泡可异常提高亚微米铜晶体的延展性, 尤其对于所含氢泡尺寸处于亚10 nm的单晶铜, 其具有更高强度、更稳定的塑性流动及更佳延展性。Li等^[8-9]的MD模拟表明, 单晶铜中缺陷的形成及位错密度演化受预应变的大小和方向以及初级离位原子(PKA)的能量共同影响。例如, 在5%的预应变下, 一方面, 位错密度在不同PKA能量下均随时间变化而逐渐增加; 另一方面, PKA能量的增加会导致位错密度相应增加。此外, Shargh等^[10]的模拟结果指出, 铜中纳米氢泡的生长及缺陷激活阈值取决于氢泡尺寸和氢空位比。Li等^[11]的原子模拟进一步显示, 铜中氢团簇生长会诱发堆垛层错, 并通过发射<110>取向的自间隙原

收稿日期: 2025-11-12; 修订日期: 2026-02-14

基金项目: 国家自然科学基金(12105249); 河南省自然科学基金(252300423007); 河南省青年人才托举工程(2025HYTP047); 河南省重点研发与推广专项(科技攻关)项目(242102230052); 郑州大学青年骨干教师培养计划(2025ZDGGJS010); 郑州大学大学生创新创业训练计划项目(S202510459208)

作者简介: 王天成(2005—), 男, 河南平顶山人, 学士, 研究方向: 核材料辐照效应, E-mail: wtc@stu.zzu.edu.cn; 通信作者: 黄海, 副教授, E-mail: huanghai@zzu.edu.cn

子(SIA)团簇触发位错环的形成。尽管已有这些重要进展,但目前关于铜辐照缺陷与氦耦合效应的研究仍有限,许多基本机制(特别是原子尺度行为方面)仍然知之甚少。

经典MD在研究辐照诱导缺陷迁移、氦成团演化及其二者协同作用方面具有实验难以实现的独特优势。另一方面,考虑到辐照损伤与嬗变生成氦均会诱导位错及位错环生成并影响材料性能,因此从辐照诱导的位错演化角度来剖析二者的协同效应,是评估材料损伤程度及预测其长期服役行为的一个重要窗口。基于这些考量,本研究借助MD模拟来研究铜中辐照损伤与嬗变生成氦的协同效应:主要通过调控PKA能量、氦浓度及模拟温度等参量,着重分析协同作用下铜中位错的时空分布特征,进而揭示其初始位错形核机制。研究结果有助于深化对铜中辐照损伤与嬗变氦耦合效应的理解,并为其在聚变堆中的性能评估提供重要参考。

1 模拟方法

本研究采用Kashinath等^[12-13]所推导的EAM势函数对铜-氦体系进行描述。该势函数能精确描述Cu-Cu、Cu-He和He-He原子间相互作用,并嵌入了Ziegler-Biersack-Littmark排斥势,可有效实现级联碰撞过程模拟。为验证所用势函数的可靠性,预先计算了相关基本物理性质:Cu的晶格常数为3.615 Å、体模量为141.38 GPa,He在八面体间隙的形成能为4.16 eV。这些数值与实验及第一性原理结果吻合较好^[12-14],表明该势函数可用于本研究涉及的铜-氦体系辐照损伤模拟。为构建铜-氦体系原子模型,首先建立了一个含250880个原子的 $28a_0 \times 28a_0 \times 28a_0$ 的单晶铜超胞($a_0=3.615$ Å);晶胞取向为 $[110] \parallel x$ 、 $[\bar{1}10] \parallel y$ 和 $[001] \parallel z$,且各方向均施加周期性边界条件以反映块材特征。随后,在晶胞中随机引入一定浓度的He原子(图1)。在预先经过共轭梯度能量最小化处理后,体系接着在零压下采用Nose-Hoover恒压恒温系综(NPT)进行20.0 ps热弛豫,以达到体系平衡状态。

随后,在模拟体系中随机选取一个PKA,使其沿 $\langle 135 \rangle$ 晶向入射,以减小沟道效应,继而引发级联碰撞过程。其间,模型最外层约7.2 Å厚的区域通过Nosé-Hoover恒温器(NVT系综)维持恒温以促

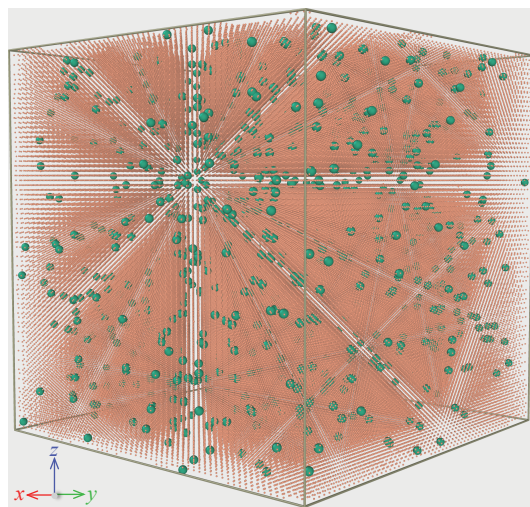


图1 预设一定浓度氦的单晶铜超胞模型(棕色代表Cu原子、蓝色代表He原子)

Fig. 1 Supercell model of single crystal copper with pre-defined concentration of helium (brown dots denote Cu; blue spheres denote He)

使体系热量耗散出去,而其余原子则在微正则系综(NVE)下弛豫,整个模拟过程持续22.0 ps。模拟共设置三组条件:1)在固定PKA能量为5.0 keV、温度为300 K前提下,考察氦原子浓度为0, 2000, 4000, 6000和8000 appm的影响;2)在固定氦浓度为4000 appm、温度为300 K前提下,研究PKA能量为1.0、3.0、5.0和7.0 keV的影响;3)在固定氦浓度为4000 appm、PKA能量为3.0 keV前提下,考察温度为100、300、500、700和900 K的影响。每个条件均进行了10次独立模拟计算,以确保结果统计可靠。所选用参数范围均参考已有研究结果设定,以便进行对比分析。其中,所选PKA的能量覆盖了聚变中子辐照产生PKA能谱中对缺陷积累贡献较显著的低能段,该范围被广泛用于揭示级联损伤的原子尺度基础机制^[8-9]。所有模拟均采用分子动力学开源代码LAMMPS进行计算^[15],并结合可视化软件OVITO进行数据后处理分析^[16]。同时,采用OVITO内置的位错提取算法(DXA)来提取和分析模拟过程中的位错结构及其演变行为。

2 结果与讨论

2.1 氦浓度影响

图2显示了不同氦浓度的铜模拟体系在300 K下经5.0 keV的PKA引发级联碰撞后,在内部所诱

生位错密度随时间演变的规律(注:图中阴影区域为平均值的标准偏差,下同)。从图中可看出,不同氦浓度下各曲线具有大致相同的演化特征,即先快速升高,再下降,形成一个较低的峰,然后再逐渐升高。出现这种现象的原因可能是:当PKA引入后,级联中心区域产生大量无序区域,并同时形成大量点缺陷和位错;当点缺陷扩散到位错线附近时,会被位错核心吸收,导致位错攀移,这使得位错长度增加,并发生弯曲^[17];位错密度增加后,位错之间相互作用增强,发生动态恢复,位错通过滑移或攀移湮灭,导致密度下降^[18-19]。先前的研究表明,在级联碰撞过程中,氦原子有聚集形成较大尺寸团簇的趋势^[20-21],同时,还会与空位等点缺陷形成团簇,这些团簇内部往往具有很高压力^[22-23]。在团簇内部高压以及次级、三级离位原子等因素共同作用下^[24],铜基体内部会形成强大应力场,促进新位错形成,导致位错密度再次上升^[21]。从图2中还可以发现,第一个位错密度峰出现的时间随氦浓度的升高而延后,峰值则随氦浓度的升高而提升,最终存活的位错密度随氦浓度的升高而增加。这是由于He原子与空位形成的 He_nV_m 团簇会阻碍点缺陷复合,当He浓度升高时,体系中的点缺陷(即空位与SIA)数量增加^[25],从而引发更多位错形成。

为了进一步阐释氦浓度变化对级联碰撞过程的影响,本研究分析了不同氦浓度下铜模拟体系中四个阶段位错分布情况,如图3所示。从图中可以看出:初始时刻[图3(a1~a4)],当氦浓度较低

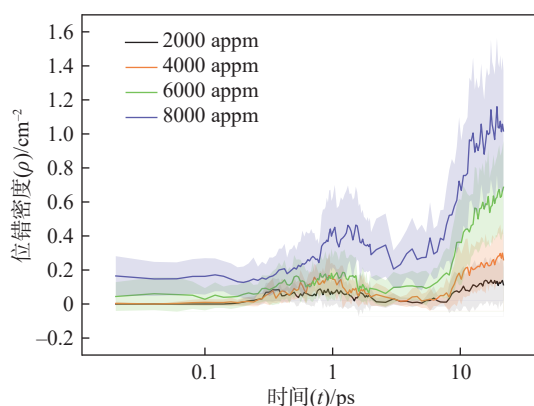


图2 不同氦浓度的铜在300 K下经5.0 keV的PKA所诱生位错密度随时间演变的规律

Fig. 2 Evolution of dislocation density induced by a 5.0 keV PKA in copper with different helium concentrations at 300 K

时,没有明显的位错线出现;而当氦浓度较高时(如8000 appm),会出现较多位错线,且随机分布在体系中。热峰阶段[图3(b1~b4)],级联中心均出现位错线,且随氦浓度升高,位错线数量不仅增加,而且总长度也更长。退火阶段[图3(c1~c4)],级联中心位错减少,且随氦浓度升高,位错存活数量更多,种类也更复杂。稳态时刻[图3(d1~d4)],在氦浓度较低时,体系中没有明显位错残留(如2000 appm);而当氦浓度升高时,级联中心出现复杂的位错纠缠结构。这些位错纠缠结构主要由Shockley不全位错主导,这与Manna等^[24]的研究结果类似。除此之外,当氦浓度较高时,位错纠缠结构中出现了Stair-rod位错和Frank位错环。Stair-rod位错通常在相交的{111}面内由两个不全位错相互作用形成,其结果是产生一个不可动位错,并导致位错堆积^[26];Frank位错环的出现是由于材料内部空位层(负Frank位错)或间隙原子层(正Frank位错)的坍塌或过饱和所致,这些位错环可能导致材料硬化^[27]。当氦浓度较高时,体系中存在更多的空位等点缺陷,为形成更多位错环提供了可能;而位错环会阻碍其他位错线滑移,产生钉扎效应,进而导致位错弯曲,形成更为扭曲的位错纠缠结构^[28]。

2.2 PKA能量影响

图4显示了300 K下含4000 appm氦浓度的铜模拟体系分别由不同能量PKA引发级联碰撞后,在内部所诱生位错密度随时间演变的规律。从图中可看出,各曲线整体趋势与图2中所得结论大致类似,都呈现先上升再下降,最后再上升的趋势。当PKA能量增加时,热峰出现的时间推迟,峰值也更高,最终剩余的位错也更多。特别是当PKA能量为1.0 keV时,在热峰之后位错密度上升趋势并不明显,在某一稳定值附近波动,表明此时所产生的位错数量相对稳定;而当PKA能量增加时,由于初始点缺陷的数量也增加,这会明显影响级联碰撞区域的尺寸和形态:高PKA能量通常会导致更大、更复杂的离位级联区,由此深度影响位错的形成,这与以往研究结果一致^[29-30]。其中,自间隙原子(SIA)倾向于形成可滑移的间隙原子簇^[31],其在级联碰撞退火阶段可能进一步演化成位错环,而更多的点缺陷

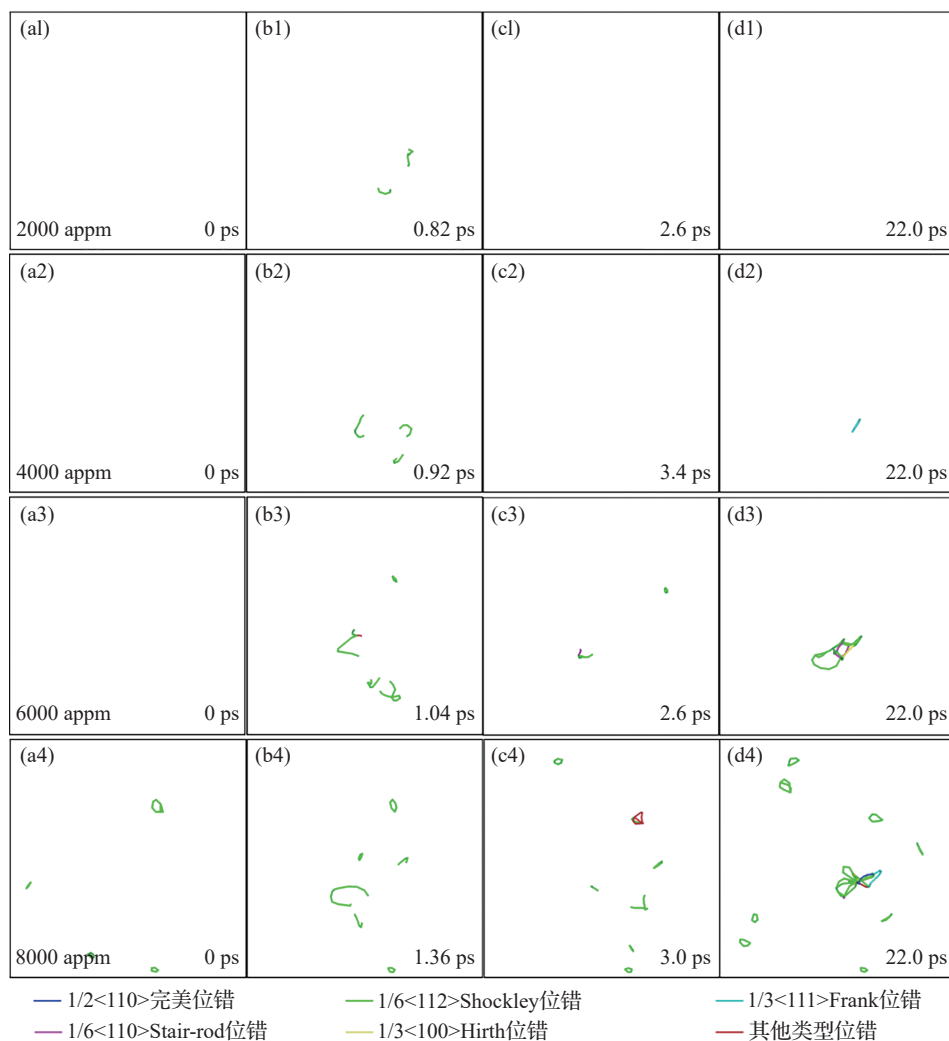


图3 不同氦浓度的铜在 300 K 下级联碰撞不同阶段所诱生的位错分布情况

Fig. 3 Distribution of dislocations in copper systems at 300 K, shown at different stages of a cascade collision with different helium concentrations: (a1~d1) 2000 appm; (a2~d2) 4000 appm; (a3~d3) 6000 appm; (a4~d4) 8000 appm

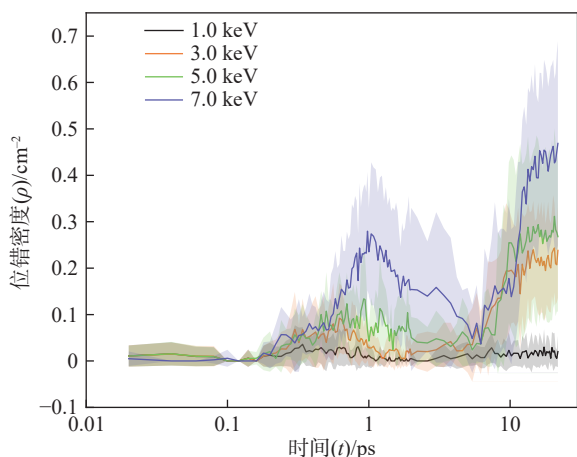


图4 300 K 下含 4000 appm 氦的铜经不同能量 PKA 所诱生位错密度随时间演变的规律

Fig. 4 Evolution of dislocation density induced by PKAs at varying energies in a copper system containing 4000 appm helium at 300 K

也为形成更多位错提供了基础。

为了进一步阐释 PKA 能量变化对级联碰撞过程的影响,本研究也分析了不同 PKA 能量下铜模拟体系四个阶段中位错分布情况,如图 5 所示。从图中可以发现:初始时刻[图 5(a1~a4)],体系中没有明显位错出现;热峰阶段[图 5(b1~b4)],级联中心附近区域会出现位错,主要在 PKA 能量较高(≥ 5.0 keV)时出现,且当 PKA 能量越高时,不仅位错数量增多,位错总长度也会更长;退火阶段[图 5(c1~c4)],此时级联中心位错数量较热峰阶段呈减少趋势;稳态时刻[图 5(d1~d4)],级联中心出现异常密集位错,组成复杂位错纠缠结构,且 PKA 能量升高时,位错结构更复杂、尺寸更大,这一现象与 Manna 等^[24]的研究结果一致。

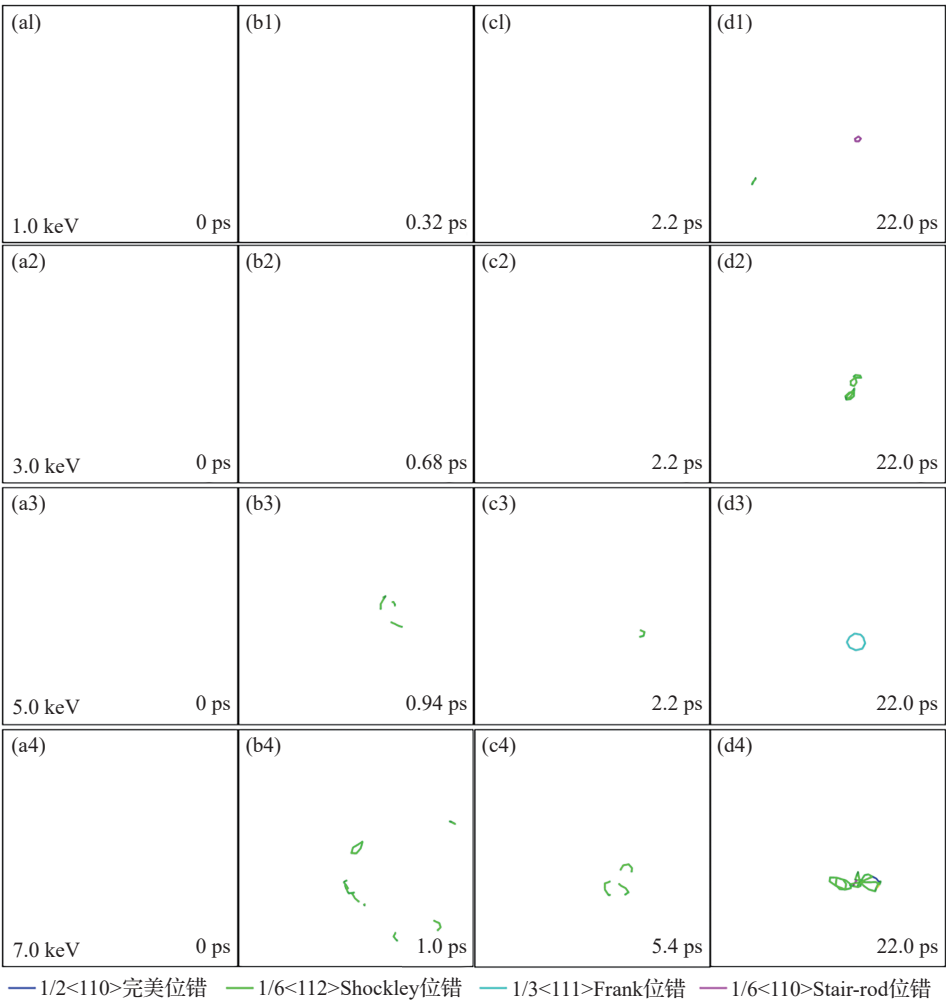


图5 不同能量PKA作用下含4000 appm氦的铜级联碰撞不同阶段所诱生的位错分布情况

Fig. 5 Distribution of dislocations in a copper system containing 4000 appm helium, shown at different stages of a cascade collision induced by PKAs at varying energies: (a1~d1) 1.0 keV; (a2~d2) 3.0 keV; (a3~d3) 5.0 keV; (a4~d4) 7.0 keV

2.3 模拟温度影响

图6显示了不同模拟温度下含4000 appm氦浓度的铜模拟体系由5.0 keV的PKA引发级联碰撞后，在内部所诱生位错密度随时间演变的规律。从图中可以看出，当温度较低时(≤ 500 K)，各曲线与图2中所得结论大致类似。在热峰阶段，随着温度升高，峰值出现时间延后，同时峰值变高；最终存活的位错数量也随温度升高而增加。在温度较高时(>500 K)，位错数量先快速增加，后不断波动，整体呈缓慢增加趋势。此外，在500、700及900 K下，体系最终存活的位错数量基本处于相近水平。

为了进一步阐释模拟温度变化对级联碰撞过程的影响，本研究分析了不同模拟温度下铜模拟体系四个阶段中位错分布情况，如图7所示。从图中可

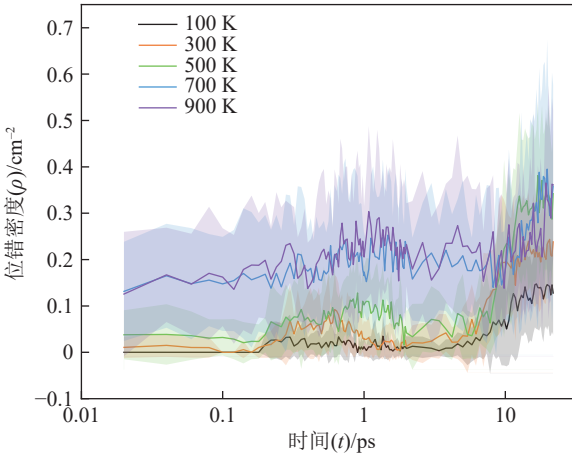


图6 不同温度下含4000 appm氦的铜经5.0 keV PKA所诱生位错密度随时间演变的规律

Fig. 6 Evolution of dislocation density induced by a 5.0 keV PKA in copper systems containing 4000 appm helium at different temperatures

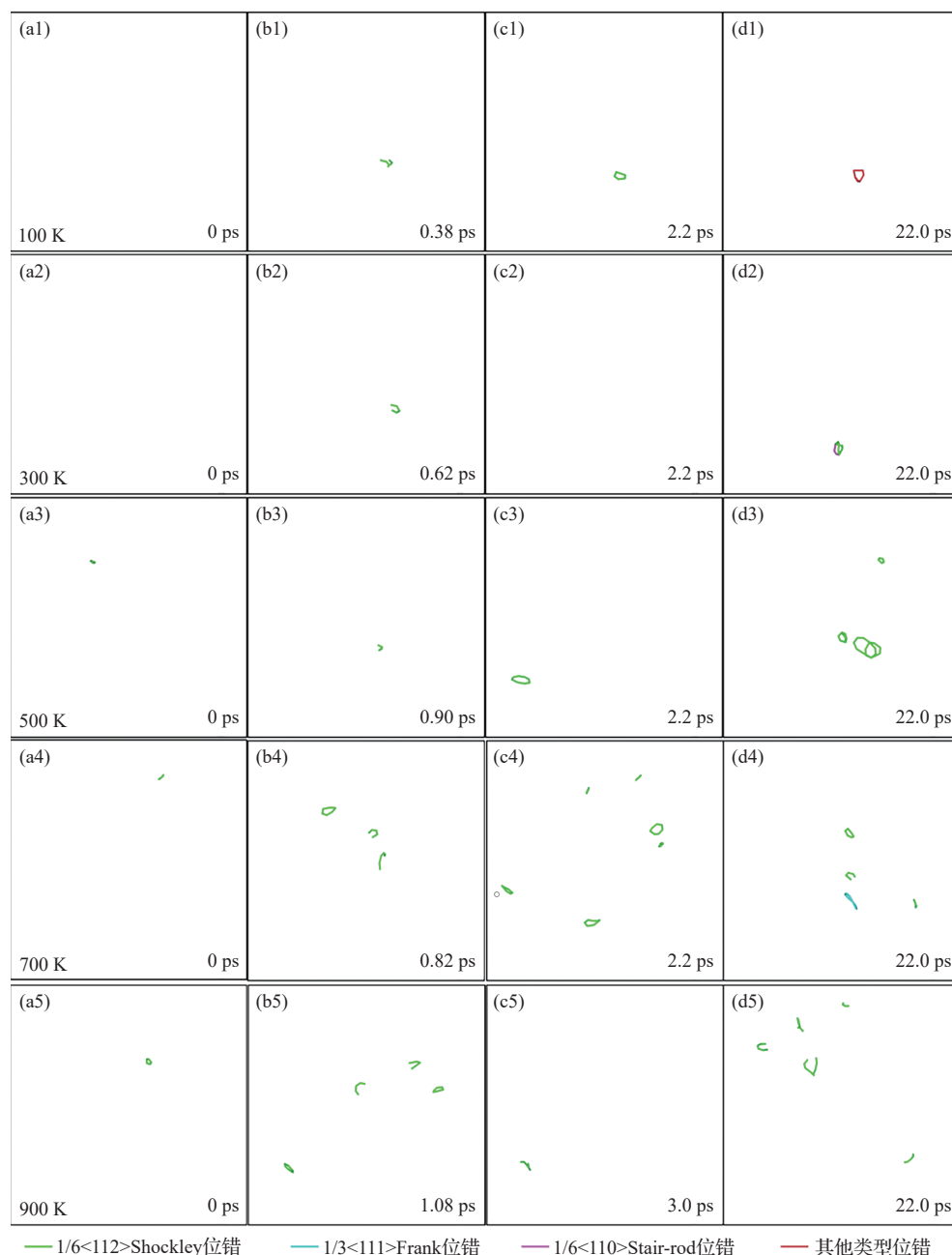


图 7 不同温度下含 4000 appm 氦的铜级联碰撞不同阶段所诱生的位错分布情况

Fig. 7 Distribution of dislocations in a copper system containing 4000 appm helium, shown at different stages of a cascade collision at different temperatures: (a1~d1) 100 K; (a2~d2) 300 K; (a3~d3) 500 K; (a4~d4) 700 K; (a5~d5) 900 K

以看出,当模拟温度较低时(≤ 500 K),体系最终存活的位错主要聚集在级联中心附近,且组成的位错纠缠结构随温度升高变得更复杂、尺寸也更大。出现这一现象的原因可能是:当温度升高,原子热运动加剧,使得点缺陷的迁移率提高;SIA和空位开始移动,并形成更大的团簇,如间隙型位错环,这些位错环可以相互合并或与辐照前期生成的位错相互作用,导致级联中心位错纠缠结构扩大^[28]。此

外,位错滑移和攀爬可能受到热激活的影响,导致位错更易运动和重组,从而促进位错纠缠结构的扩展^[32]。当温度较高时(> 500 K),会在中心区外出现小尺寸位错,最终级联中心的位错纠缠结构相对于500 K以下的体系表现为尺寸更小,也更简单。出现这一现象的原因可能是:高温提供了足够的能量,使得缺陷(包括SIA、空位和较小的位错环)的迁移和湮灭速率显著加快,位错之间可能会发生湮

灭反应^[33]。这导致了图6中900 K温度下出现位错密度随时间异常演化这一现象。此外,在较高温度下晶格中的应力可能得到释放,位错线的弓出和运动变得更为容易。同时,温度较高时,氢团簇尺寸也会更大,成为新的应力源,使得一些较长的位错线断裂形成较短的位错线。这可能是温度较高时级联中心并未出现复杂位错纠缠结构的因素之一。

3 结 论

综上所述,本研究针对铜中辐照损伤与嬗变氢的协同效应,借助分子动力学模拟方法,着重从嬗变氢浓度、PKA入射能量以及模拟温度三方面来探究协同作用下铜中初始位错形核机制,得出以下主要研究结论:

1)级联作用下,嬗变氢原子浓度增加,不仅会引起点缺陷数量的增加,促进位错形成,还会加剧钉扎效应,使最终存活的位错纠缠结构更大、更复杂。

2)PKA能量增加会使SIA、空位等缺陷数量增加,进而导致位错数量以及位错线长度增加。

3)在相对低温区间(如100~500 K),温度会促进级联中心位错纠缠结构形成;而在高温区间(如700~900 K),温度会促进位错湮灭和断裂,导致级联中心位错纠缠结构瓦解。

本工作揭示了金属铜中离位损伤与嬗变氢之间复杂的相互作用,阐明了氢浓度、PKA能量及温度对位错形成及演化的影响。研究结果提供了关键原子尺度机制解析,对预测聚变辐照环境中铜构件寿命较为重要,为聚变堆热沉部件用铜基材料辐照耐受性的评价提供了一定理论依据和参考,如通过成分与微观结构设计,协同管理氢的行为、调控初始缺陷结构以及适应服役温度环境,从而提升材料在辐照下的长期稳定性。

参考文献:

- [1] 韦奕麒, 韩芳, 汤仲虬, 等. 铜及其合金研究进展[J]. 铜业工程, 2024(5): 40-62.
- [2] Ueda Y, Schmid K, Balden M, et al. Baseline high heat flux and plasma facing materials for fusion[J]. Nuclear Fusion, 2017, 57(9): 092006.
- [3] Kalinin G, Matera R. Comparative analysis of copper alloys for the heat sink of plasma facing components in ITER[J]. Journal of Nuclear Materials, 1998, 258: 345-350.
- [4] Someya Y, Tobita K, Hiwatari R, et al. Fusion DEMO reactor design based on nuclear analysis[J]. Fusion Engineering and Design, 2018, 136: 1306-1312.
- [5] Ye Y H, Ma L, Tang T Z, et al. Characterization of microstructure and properties of Ti35 alloy and its high-fluence hydrogen irradiation-induced surface exfoliation[J]. The European Physical Journal Plus, 2024, 139(9): 822.
- [6] Brager H R, Heinisch H L, Garner F A. Effects of neutron irradiation at 450 °C and 16 dpa on the properties of various commercial copper alloys[J]. Journal of Nuclear Materials, 1985, 133: 676-679.
- [7] Ding M S, Du J P, Wan L, et al. Radiation-induced helium nanobubbles enhance ductility in submicron-sized single-crystalline copper[J]. Nano Letters, 2016, 16(7): 4118-4124.
- [8] Li B, Wang L, Jian W R, et al. Irradiation-initiated plastic deformation in prestrained single-crystal copper[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2016, 368: 60-65.
- [9] Li B, Long X J, Shen Z W, et al. Interactions between displacement cascades and $\Sigma 3 \langle 110 \rangle$ tilt grain boundaries in Cu[J]. Journal of Nuclear Materials, 2016, 481: 46-52.
- [10] Shargh A K, Bosić O, Abdolrahim N. Mechanisms of helium nanobubble growth and defect interactions in irradiated copper: a molecular dynamics study[J]. Journal of Nuclear Materials, 2023, 574: 154199.
- [11] Li M, Hou Q, Cui J C, et al. Atomistic simulations of helium clustering in copper[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2020, 482: 17-24.
- [12] Kashinath A, Demkowicz M J. A predictive interatomic potential for He in Cu and Nb[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2011, 19(3): 035007.

- [13] Yu X, Wang H L, Huang H. Investigating helium-induced thermal conductivity degradation in fusion-relevant copper: a molecular dynamics approach [J]. *Materials*, 2025, 18(15): 3702.
- [14] González C, Fernández-Pello D, Cerdeira M A, et al. Helium bubble clustering in copper from first principles [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2014, 22(3): 035019.
- [15] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1-19.
- [16] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010, 18(1): 015012.
- [17] Denton C D, Heredia-Avalos S, Moreno-Marín J C, et al. Influence of the distance of a collisional cascade to an edge dipole in α -Fe on dislocation mobility and defect production [J]. *Nuclear Materials and Energy*, 2024, 39: 101663.
- [18] Koizumi T, Ogođa K, Kuroda M. Permanent strength of metals: a case study on FCC metals processed by severe plastic deformation [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2022, 53(6): 2004-2017.
- [19] Zhang M Y, Zhong M, Yuan S, et al. Influence of initial defects on the mechanical properties of single crystal copper: discrete dislocation dynamics study [J]. *Materials Science Forum*, 2018, 913: 627-635.
- [20] Wei G, Hu S L, Cai G X, et al. Carbon nanomaterials in nickel and iron helping to disperse or release He atoms [J]. *Materials Today Communications*, 2022, 32: 104024.
- [21] Hatton P, Perez D, Frolov T, et al. He bubble-induced phase transformation of W grain boundaries revealed by accelerated molecular dynamics [J]. *Acta Materialia*, 2024, 269: 119821.
- [22] Li L L, Peng L, Shi J Y, et al. Large helium-vacancy clusters coalescence during helium bubble evolution under cascade in iron with edge dislocation: a MD simulation [J]. *Computational Materials Science*, 2021, 197: 110601.
- [23] Cui D W, Wang Y W, Cao Z Q, et al. Origin and fate of loop punching in Mo-5Re alloy [J]. *Acta Materialia*, 2025, 283: 120550.
- [24] Manna M, Pal S. Improvement in radiation resistance of nanocrystalline Cu using grain boundary engineering: an atomistic simulation study [J]. *Journal of Materials Science*, 2022, 57(42): 19832-19845.
- [25] Jiang M X, Liu L X, Qiu R Y, et al. Impacts of helium and hydrogen on the defect evolution in tungsten under high-energy cascades: a molecular dynamics study [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2025, 611: 155814.
- [26] Puigvi M A, Osetsky Y N, Serra A. Interactions between vacancy and glissile interstitial clusters in iron and copper [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2004, 365(1/2): 101-106.
- [27] Tipping P G. Understanding and mitigating ageing in nuclear power plants: materials and operational aspects of plant life management (PLiM) [M]. Cambridge, UK: Woodhead Publishing; Elsevier, 2010.
- [28] Li Y P, Ran G, Guo Y J, et al. The evolution of dislocation loop and its interaction with pre-existing dislocation in He+-irradiated molybdenum: in-situ TEM observation and molecular dynamics simulation [J]. *Acta Materialia*, 2020, 201: 462-476.
- [29] Hu N W, Deng H Q, Wang C L, et al. Atomic simulation of helium trapping in displacement cascades [J]. *RSC Advances*, 2016, 6(32): 27113-27118.
- [30] Jia T X, Wang Z J, Xue Y Y, et al. The influence of temperature and energy on defect evolution and clustering during cascade in GaAs [J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2021, 502: 198-204.
- [31] Bai X M, Voter A F, Hoagland R G, et al. Efficient annealing of radiation damage near grain boundaries via interstitial emission [J]. *Science*, 2010, 327(5973): 1631-1634.
- [32] Szajewski B A, Pavia F, Curtin W A. Robust atomistic calculation of dislocation line tension [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2015, 23(8): 085008.
- [33] Bao W C, Wang X G, Lu Y, et al. Effect of native carbon vacancies on evolution of defects in ZrC_{1-x} under He ion irradiation and annealing [J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2022, 119: 87-97.

Mechanisms of Initial Dislocation Nucleation in Copper under Synergistic Effects of Cascade Collisions and Transmuted Helium

Wang Tiancheng, Yu Xu, Hu Tianyi, Huang Hai

(Key Laboratory of Materials Physics, Ministry of Education, School of Physics, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

Abstract: Copper and copper alloys are considered the primary structural material for fusion reactor divertor heat sinks due to their excellent thermal conductivity, thermal stability, mechanical properties, and relatively good resistance to neutron irradiation. However, a lack of in-depth understanding regarding the mechanisms of displacement damage in copper induced by synergistic effects of neutron irradiation and transmuted helium still exists. In this study, the synergistic effects were investigated using molecular dynamics simulations, with a focus on dislocation nucleation mechanisms. Influences of transmuted helium concentration (2000~8000 appm), primary knock-on atom (PKA) energy (1.0~7.0 keV), and simulation temperature (100~900 K) were systematically examined. Results showed that increased helium concentration raised the number of point defects, enhanced pinning effect, and promoted dislocation density and the formation of complex entanglement structures. Higher PKA energy led to a notable rise in length and density of dislocation line. At lower temperatures, rising temperature promoted development of dislocation entanglement structures in the cascade center, while at higher temperatures, it facilitated dislocation annihilation and break-up, resulting in the collapse of these entanglement structures. These findings provided important insights for the design of irradiation-resistant copper alloys for fusion reactors.

Key words: fusion reactor; copper; primary displacement damage; helium; dislocation nucleation; molecular dynamics

doi: 10.3969/j.issn.1009-3842.2026.03.005

引文格式: 王天成, 余旭, 胡天一, 黄海. 级联碰撞与嬗变氦协同作用下铜中初始位错形核机制研究[J]. 铜业工程, 2026(3): 39-47.

Wang Tiancheng, Yu Xu, Hu Tianyi, Huang Hai. Mechanisms of initial dislocation nucleation in copper under synergistic effects of cascade collisions and transmuted helium [J]. Copper Engineering, 2026(3): 39-47.

投稿网址: www.tygc.net

微信公众号: jxtygc