

## 温度对超薄铜膜疲劳性能影响的分子动力学模拟\*

郭巧能<sup>†</sup> 曹义刚 孙强 刘忠侠 贾瑜<sup>‡</sup> 霍裕平

(郑州大学物理工程学院, 郑州 450001)

(2012年7月11日收到; 2012年9月21日收到修改稿)

用嵌入原子势的分子动力学方法模拟了温度对超薄铜膜疲劳性能的影响. 通过模拟, 首先给出了超薄铜膜的总能量及应力随循环周次的变化曲线; 根据叠加经验式得出的叠加量随循环周次变化曲线, 判断出各种恒定温度下超薄铜膜的疲劳寿命. 由 200—400 K 温度范围内超薄铜膜的疲劳寿命 - 温度变化曲线, 可以发现存在两个温度区域: 在约 370 K 以下, 超薄铜膜的疲劳寿命随温度升高缓慢增加, 而在约 370 K 以上增加较快. 建立了模型并用位错演化机制解释了超薄铜膜疲劳寿命的温度依赖关系.

关键词: 分子动力学, 疲劳, 温度效应, 位错

PACS: 71.15.Pd, 68.35.Gy, 68.60.Dv, 68.55.Ln

DOI: 10.7498/aps.62.107103

## 1 引言

金属薄膜广泛应用于大规模集成电路及微电机系统中, 因为这些器件在微加工制备 (如溅射、沉积、刻蚀等) 过程中以及随后的服役过程中受到热、电等引起的循环应力的作用, 使其性能或功能下降甚至失效. 比如在微型射频开关中, 微米尺寸的悬臂梁器件由于受到高频谐振的作用会出现疲劳损伤而逐渐改变其响应频率及电阻等参量, 继而导致微传感器及致动器输出量的改变而使其失效. 因此, 研究不同环境温度下和循环荷载下薄膜材料的力学性能对保证微纳米器件的可靠性和功能至关重要. 为缩短金属薄膜的研究周期并降低其研究成本, 可选用模拟方法来研究薄膜材料的疲劳性能. 分子动力学方法不仅可以缩短金属薄膜疲劳性能的实验研究周期并降低其研究成本, 且可在原子尺度上直接探究材料的动力学响应行为, 探究纳米尺度材料微观结构与力学性质间的内在关系. 本文通过分子动力学方法, 模拟不同温度下金属薄膜的疲劳性能, 揭示出不同温度下纳米金属薄膜的循环拉伸形变机理和疲劳寿命, 以期为更好地使用金属薄膜、延长其使用寿命提供理论依据.

铜薄膜布线广泛应用于集成电路中, 研究铜薄膜的力学性能尤其疲劳性能, 搞清铜薄膜的变形行为具有重要的理论和实际应用价值. 目前, 人们已开展了铜薄膜的各种形变的实验和理论研究<sup>[1-22]</sup>. 其中铜薄膜的疲劳性能实验方面研究有: Kraft 等<sup>[13]</sup> 研究了多晶铜薄膜的疲劳行为的尺寸效应. Zhang 等<sup>[14]</sup> 研究了铜薄膜的疲劳行为的厚度效应, 并且发现疲劳损伤随厚度的变化是由在小尺度下位错运动及位错 - 位错相互作用受阻引起的. Zhang 等<sup>[15]</sup> 和 Kraft 等<sup>[16]</sup> 都研究了有基体支持铜薄膜的疲劳断裂行为. Maire 等<sup>[17]</sup> 对等通道转角挤压法制作的铜薄膜已开展循环应力 - 应变响应的研究. Read 研究组<sup>[18,19]</sup> 已经对电子束蒸发工艺制作的铜薄膜进行拉伸和疲劳试验的研究. Merchant 等<sup>[20,21]</sup> 进行了电镀和轧制铜薄膜的弯曲疲劳特性的研究.

上面这些研究集中在室温下的铜薄膜疲劳性能. 而铜薄膜疲劳性能的温度效应研究得还远远不够. 在理论模拟方面, Chang 和 Fang<sup>[22]</sup> 用 Lennard-Jones 势的分子动力学方法给出了各种温度下纳米铜薄膜的拉伸和拉 - 压疲劳行为. 而用嵌入原子势的分子动力学方法来模拟铜薄膜疲劳性能的国内

\* 河南省教育厅科学技术研究重点项目 (批准号: 13A140674, 12A140012) 和教育部科研基金 (批准号: 20114101110001) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: gqin@zzu.edu.cn

‡ 通讯作者. E-mail: jiayu@zzu.edu.cn

外研究更不多见,其主要原因是计算和处理数据的工作量极大.本文提出了一个可判断出薄膜疲劳寿命的叠加经验式.

由于分子动力学方法施加了极高的应变率,而使得它们很少涉及有关实验条件下塑性的定量信息.为了把分子动力学方法和实验结果进行直接的定量关联,类似于 Zhu 等<sup>[23]</sup>的工作,前期工作把温度和应变率考虑进去,完成了此设想:在分子动力学模拟中,从考虑温度和应变率依赖的割阶成核应力的表达中计算出激活参数,并以此解释了铜薄膜单轴拉伸性能的温度效应<sup>[24]</sup>,即当温度低于 370 K 的时候,刃位错成分为主,这个机制主要特征是克服 Peierls-Nabarro 势垒和几个局部钉扎;而在 370 K 附近刃位错和螺位错成分相当,率控制机制是管道扩散;超过 370 K 的时候,螺位错成分为主,率控制机制是位错攀移.在此工作基础上,本文用嵌入原子势的分子动力学方法模拟了铜薄膜疲劳性能的温度效应,通过每一步的循环加载模拟,给出在不同温度下铜薄膜原子级循环形变特征,并用位错演化机制解释循环拉伸铜薄膜时所表现出的温度依赖关系.

## 2 计算模型与方法

本研究所用的嵌入原子势分子动力学模拟方法详见参考文献<sup>[24]</sup>的叙述.

铜薄膜疲劳性能的温度效应的模拟模型由 96000 个原子组成,此模型的尺度是  $20a \times 60a \times 20a$ ,这里  $a$  为晶格常数.我们选定的晶格常数 ( $a = 3.6176 \text{ \AA}$ ) 是用分子静力学方法在所有模拟之前使样品最初的内应力趋于 0 获得的.  $X$  轴、 $Y$  轴、 $Z$  轴分别沿  $[100]$ 、 $[010]$  和  $[001]$  方向.考虑到一个二维无限大的薄膜: $Y$  轴沿厚度方向,周期边界条件被施加在  $X$  和  $Z$  轴方向上.这里加载方向沿  $Z[001]$  方向.

上述这个模型尺度的选取是由于 Chen 等<sup>[25]</sup>用位错模型解释了晶粒尺度效应,他们把成核一个全位错所需的临界剪切应力与要启动一个 Shockley 不全位错和堆垛层错所需的应力进行比较,且当小于这个临界特征尺度时,不全位错成核最有利;当大于这个尺度时,全位错成核最有利.本文把获得临界特征尺度方法<sup>[25,26]</sup>用到铜膜上.当铜膜厚度大于 17 nm 时,全刃型位错成核最有利,再考虑到温度因数,故取铜膜厚度为 21.706 nm.对于薄

膜长度和宽度的选取,一方面考虑到不全位错、层错、扩展位错<sup>[27]</sup>等能进行交割;另一方面,考虑到满足周期边界条件的方向上不同尺度的原胞很容易导致模拟误差,类似于许多分子动力学模拟的研究方法<sup>[28-34]</sup>,本模拟中所取原胞的长度和宽度均为 7.2352 nm.

在分子动力学方法循环拉伸模拟中,所有原子都被放置在平衡位置上,通过一个给定温度沿  $X$  轴、 $Z$  轴方向上无应力条件,在等压等温 (NPT) 系统<sup>[35]</sup>完成,这是 Nose-Hoover 等温和 Parrinello-Pahman 等压的结合,即在循环拉伸过程中,用 Parrinello-Rahman 等压使得在  $X$  轴方向边界条件无应力和用 Nose-Hoover 来实现等温控制.用 Melchionna 等<sup>[36]</sup>的 5-Gear 预测校正算法来求解运动方程.拉伸应变负载是通过  $Z$  轴方向的解耦合边界条件和标度  $Z$  轴坐标来实现的.每一步拉伸应变是 0.001.拉伸、弛豫、卸载、弛豫反复进行直到材料失效.本疲劳模拟研究中,当样品被循环拉伸至断裂时定义为断裂点.通过选择应变步长和弛豫时间来实现低于临界值的常应变率  $3.13 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ <sup>[24]</sup>下的循环拉伸模拟.

本研究通过在恒定总应变范围 (0—0.20) 内对铜薄膜进行循环加载来实现疲劳模拟,这里的应变比为 0.本文在 200—400 K 温度范围内研究了铜薄膜的循环拉伸形变机制.

分子动力学方法有允许缺陷成核和自发进化的优势,出现位错的原子结构可用此方法来直接观察分析<sup>[37-39]</sup>,因此在疲劳加载过程中,发生在样品中的塑性形变可以用位错演化来解释.用分子动力学方法考察、识别位错时,如果使用势能分布法,尽管在任何时候都可以识别出位错的位置<sup>[39-42]</sup>,但这种辨认位错的方法只适用于低温,因为当温度超过 200 K 时原子热运动较剧烈,晶格原子和位错芯的能量分布都会重叠,将导致位错线不能确定而无法识别.在本研究中的温度范围超出 200 K,故不能用此势能分布法识别位错的位置,因此采用了公共近邻分析法<sup>[43]</sup>来识别出堆垛层错,围绕这些堆垛层错周围的在  $\{111\}$ 、 $\{110\}$  和  $\{100\}$  面上的位错也被抽出分析,以便确定这些堆垛层错的演化过程.亦即根据分子动力学模拟中所记录的每一个循环载荷步的原子位置,来观察和分析围绕由公共近邻分析法识别出的堆垛层错的发展及其间的交互作用行为,进而观察点缺陷的产生、空隙的形成及裂纹萌生,等等.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 循环加载下铜薄膜疲劳寿命的确定

将分子动力学模拟过程中给出的随循环周次变化的总能(势能与动能之和)和应力变化关系叠加起来,就可得出随循环数变化的总能和应力的叠加变化曲线,由此叠加变化曲线的最小值点就可确定铜薄膜在循环加载下的断裂点,它所对应的循环周次为疲劳寿命.这里,随循环周次变化的叠加曲线的获得方法为:首先在随循环数变化的总能和应力曲线中分别找到总能的最小值和应力最大值,再将同一循环次数的总能和应力分别除以总能的最小值和应力最大值后相加就得到该周数对应的叠加值.

图1和图2分别给出了293 K时用分子动力学方法模拟循环加载过程中铜薄膜的总能和应力随循环数的变化关系曲线.根据本文提出的叠加经验式:

$$\beta = \frac{E_t}{E_{tmin}} + \frac{\sigma}{\sigma_{max}}, \quad (1)$$

其中  $E_t$  为总能(势能与动能之和),  $E_{tmin}$  为总能最小值(图1中  $E_{tmin} = -5.31776 \times 10^{-19}$  J),  $\sigma$  为应力,  $\sigma_{max}$  为应力最大值(图2中  $\sigma_{max} = 11.82138$  GPa),  $\beta$  是一个无量纲量.

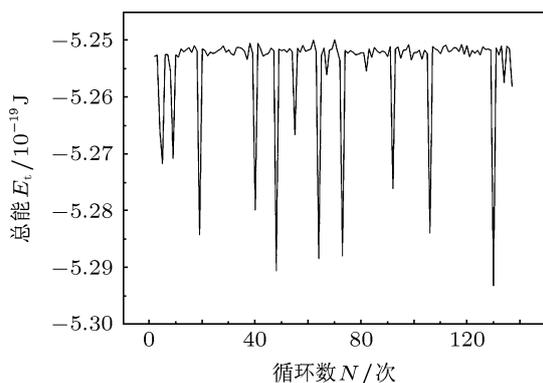


图1 293 K时超薄铜膜的总能随循环数的变化

图3是叠加纯数  $\beta$  随循环数变化曲线,该曲线中最小值点即为铜薄膜在循环加载下的断裂点,它所对应的循环次数就是疲劳寿命(图3中,当  $N = 48$  次循环时,  $\beta = 1.65858 = \beta_{min}$ ,所以293 K下的疲劳寿命为48次循环).由此不需要在每次循环中找断裂点(因此可节约处理数据的时间),而只需调出模拟数据、绘出原子构型继而找出断裂所在处,然后根据所找与断裂位置对应的原子构型,

绘出断裂前各循环次所对应这个原子构型的情况,最后可得出循环荷载下铜薄膜由形变到断裂原子构型演化图.

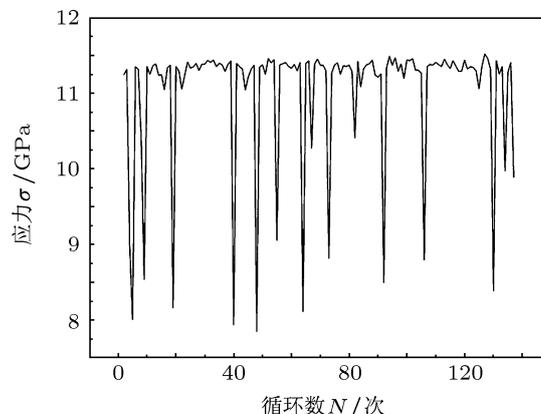


图2 293 K时超薄铜膜的应力随循环数的变化

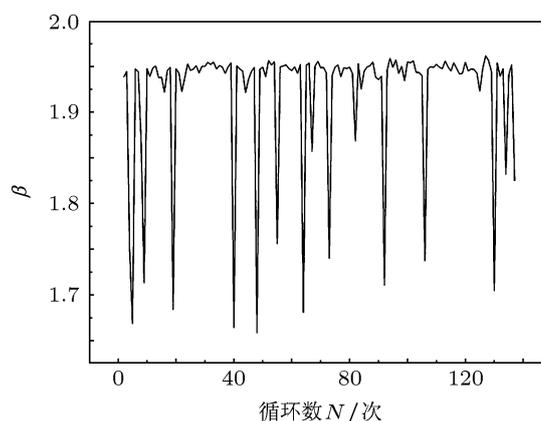


图3 叠加纯数  $\beta$  随循环数的变化曲线

#### 3.2 铜薄膜疲劳寿命的温度效应

图4给出了应变幅度为0.20时,铜薄膜在循环加载下疲劳寿命随温度的变化曲线.图4表明在所研究的温度范围内,随着温度的升高,铜薄膜的疲劳寿命增加.进一步,当在330 K ( $330 \text{ K} \leq T \leq 380 \text{ K}$ ,称为大约370 K)以下时,随着温度的升高,铜薄膜的疲劳寿命增加幅度较小;但在330 K (大约370 K)以上,随着温度的升高,铜薄膜的疲劳寿命增加较快.

为了与应变幅度为0.20时做对比,图5给出了应变幅度为0.22时,在循环加载下铜薄膜疲劳寿命随温度的变化曲线.图5表明在所考虑的温度范围内,随着温度的升高,铜薄膜的疲劳寿命变长;并且大约370 K以下,随着温度的升高,铜薄膜的疲劳寿命增加较快.这些与应变幅度为0.20时,铜薄膜

在循环加载下疲劳寿命随温度的基本变化特征一样. 而与应变幅度为 0.20 时, 在循环加载下铜薄膜的疲劳寿命随温度的变化特征明显不同的是: 同一温度下, 由于应变幅度的增加而导致了疲劳寿命缩短. 这一结果与 Chang 和 Fang<sup>[22]</sup> 的分子动力学方法模拟铜薄膜拉-压疲劳性能的结果一致.

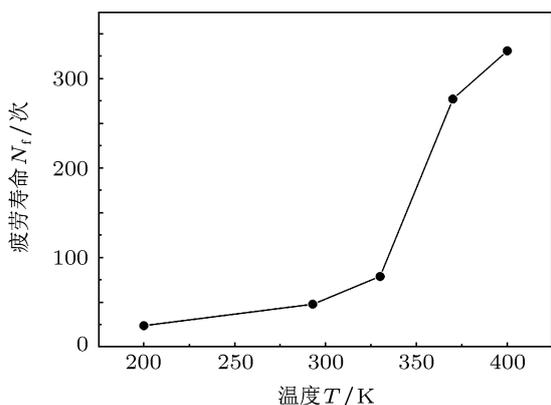


图 4 应变幅度为 0.20 时铜薄膜疲劳寿命随温度的变化

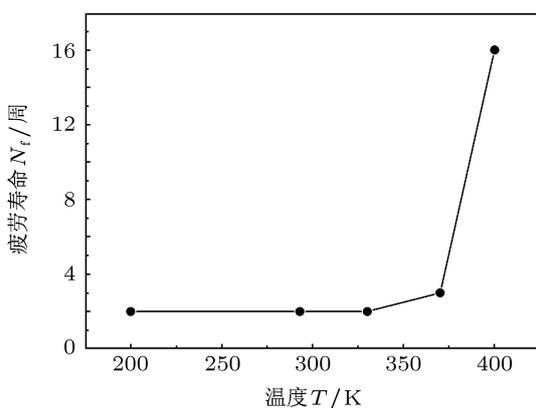


图 5 应变幅度为 0.22 时铜薄膜疲劳寿命随温度的变化曲线

分析以上两种情形下的模拟结果, 可以得出结论: 大约 370 K 以上, 铜薄膜疲劳寿命随温度升高增加较快; 大约 370 K 以下, 铜薄膜疲劳寿命随温度升高增加较慢. 因此, 在所考虑的 200—400 K 温度范围内, 370 K 是个临界转变温度; 而这与以前所报道的单轴拉伸铜薄膜时存在临界温度 370 K 的结果<sup>[21,24]</sup>是一致的.

### 3.3 疲劳断裂前循环变形原子结构演化

根据断裂位置处所对应的原子结构图, 再向前推就可找到断裂前出现空隙所在处, 并取出围绕这些空隙附近区域的原子结构图, 研究分子动力学模拟中所记录的这些区域原子结构演化图, 结合观察

和分析围绕由公共近邻分析法识别出的堆垛层错的发展及其间的交互作用行为, 就可以了解空隙长大、裂纹萌生、断裂发生机理.

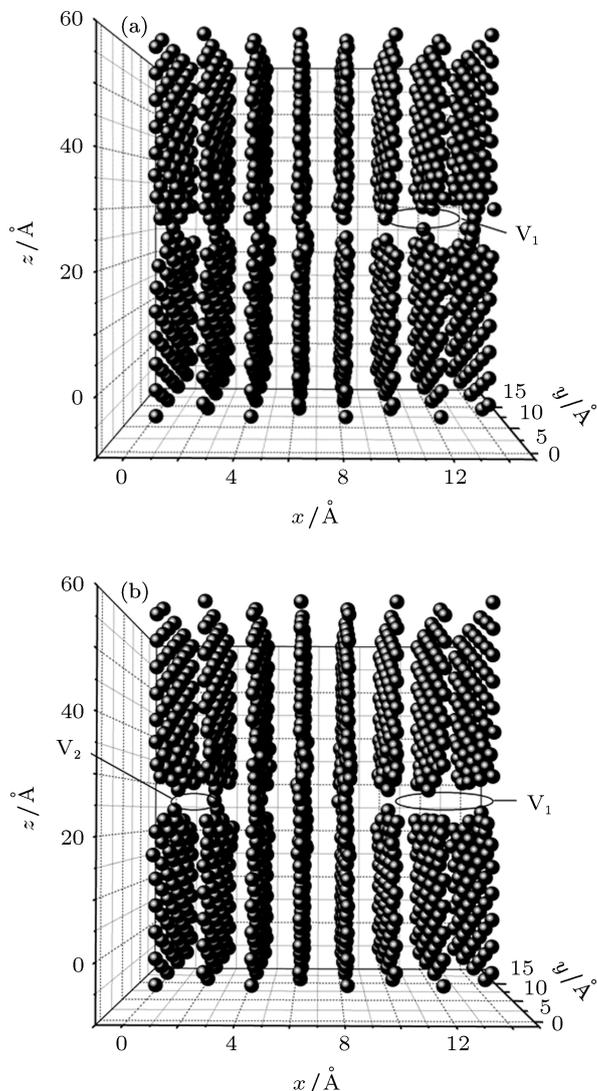


图 6 循环加载下 (a) 在第四次循环中出现的局部空隙  $V_1$ , (b) 在第五次循环中这个局部空隙  $V_1$  增大, 另一个局部空隙  $V_2$  开始形成

由于沿 [100] 方向循环拉伸激活的是多滑移系统, 导致从不同的滑移平面上激活出的位错最有可能发生相互作用. 200 K 温度时在总应变幅为 0.20 控制条件下, 铜薄膜第一次循环荷载时, 加载阶段, 起源于薄膜自由表面的 Shockley 不全刃位错被启动, 有些形成刃型堆垛层错 (简称刃层错), 其中有些层错发展为扩展位错, 随荷载增加, 不同的 {111} 平面上的刃层错 (或扩展位错) 交截后, 部分空位列形成; 卸载阶段, 一些位错消失, 另一些位错和部分空位列仍然存在. 在第二次循环加载时, 有新的不全刃位错、刃层错、部分空位列产生, 一些空位列

形成; 卸载后, 一些位错、部分空位列和空位列保留. 在第三次循环加载时, 伴随上述循环后保留的位错, 新的刃层错 (或刃型成分为主的混合层错)、不全位错、部分空位列、空位列产生, 而后局部空隙成核发生; 卸载后, 一些位错、部分空位列、空位列和局部空隙保留. 图 6(a) 给出铜薄膜在第四次循环加载时出现的局部空隙  $V_1$ . 铜薄膜在第五次循环加载时出现的局部空隙情况表示在图 6(b) 中; 由图 6(b) 可知, 第五次循环中, 已在第四次循环中形成的局部空隙  $V_1$  长大, 另一个局部空隙  $V_2$  开始出现. 这说明裂纹萌生是由于多次循环加载的作用引起空隙长大而形成的, 任何单次的拉 - 卸载只是起到了局部的破坏作用. 这与 Schwaiger 和 Kraft<sup>[44]</sup> 及 Zhang 等<sup>[14,45]</sup> 所提出的薄膜疲劳裂纹萌生机制“薄膜疲劳损伤主要由刃位错湮灭引起, 因而导致空位超饱和、进而导致空隙、最后形成裂纹”是基本一致的, 同时也与 Cu 单晶疲劳中裂纹萌生机制<sup>[46-48]</sup> 基本一致.

### 3.4 疲劳损伤机制的探讨

在总应变 (0—0.20) 控制的低周疲劳模拟条件下, 由于外加循环应力高于屈服极限, 因此, 除了产生弹性应变外, 还会产生塑性形变, 故将材料的总应变幅  $\Delta\varepsilon_t$  写成弹性应变幅  $\Delta\varepsilon_e$  和塑性应变幅  $\Delta\varepsilon_{pl}$  两部分, 即

$$\Delta\varepsilon_t = \Delta\varepsilon_e + \Delta\varepsilon_{pl} \approx \sigma_y/E + \Delta\varepsilon_{pl}, \quad (2)$$

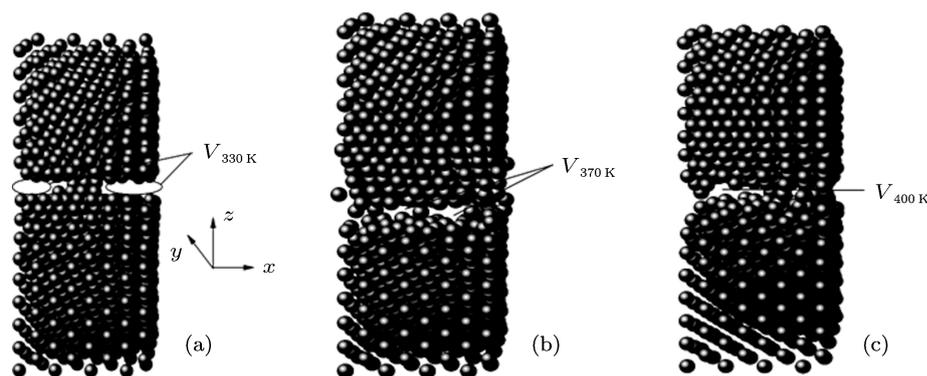


图 7 在同一塑性应变幅 0.05 时, 三种温度下铜薄膜达到相同循环次数且都出现疲劳损伤时围绕空隙附近区域原子结构的三维图 (a) 330 K; (b) 370 K; (c) 400 K

与 Schwaiger 和 Kraft<sup>[44]</sup> 所提出的裂纹萌生机制类似, 我们认为薄膜疲劳损伤主要由刃型堆垛层错湮灭 (因为类似于两个相邻滑移面上异号全刃型位错接近而形成空位型偶极子, 两个刃层错交截亦可形成部分空位型压杆位错偶) 引起, 因而导致空位超饱和、进而导致空隙、最后裂纹萌生. 以下来

这里,  $\Delta\varepsilon_t$  为总应变幅 (本模拟中  $\Delta\varepsilon_t = 0.20$ ),  $E$  为杨氏模量,  $\sigma_y$  为屈服强度. 我们用与本疲劳模拟相同的模型, 在各种温度下对铜薄膜再进行单轴拉伸的分子动力学模拟, 将得出的铜薄膜弹性模量和应力 - 应变曲线中的应力最大值分别代替 (2) 式中的  $E$  值和  $\sigma_y$  值, 就可得出不同温度 200, 293, 330, 370, 400 K 时铜薄膜的塑性应变幅  $\Delta\varepsilon_{pl}$ , 且其值均近似为 0.05. 这样, 图 4 也表示出了在同一塑性应变幅 0.05 时, 疲劳寿命 ( $N_f$ ) 随温度变化的关系曲线.

图 7(a)—(c) 分别给出了同一塑性应变幅 0.05 下铜薄膜在三种温度 330, 370 和 400 K 下都达到 53 次循环且都出现疲劳损伤 (空隙形成) 时围绕空隙附近区域原子结构的三维图. 图 7 说明在施加相同塑性形变时, 裂纹萌生前已经形成的空隙尺寸随温度升高而减小 (因为  $V_{330\text{ K}} > V_{370\text{ K}} > V_{400\text{ K}}$ ), 或者说要形成相同尺寸的空隙随温度升高需要有更多的循环次数.

空隙形成源于局部超饱和空位的聚集, Polak<sup>[46]</sup> 及 Essmann 等<sup>[47]</sup> 已研究了 Cu 单晶疲劳中空位作用. Essmann 和 Mughrabi<sup>[48]</sup> 发现在 Cu 单晶疲劳中当具有相反符号柏格矢量的位错在距离为 1.6 nm (刃位错) 或 50 nm (螺位错) 时自发湮灭, 且 Essmann 和 Balluffi<sup>[47]</sup> 发现在 Cu 单晶疲劳中刃位错湮灭产生的空位浓度远大于平衡值, 因而疲劳寿命主要由裂纹萌生处较大空隙形成所需要的时间来控制.

估算铜薄膜疲劳形变中所产生空位数与塑性应变幅关系. 在疲劳半周期间所施加的塑性应变幅导致在尺度为  $a$  薄膜中形成  $D$  个位错 (其中包括  $D_e$  个柏格矢量大小为  $b$  的刃层错和  $D_s$  个螺型堆垛层错), 根据本循环疲劳和单轴拉伸模拟观察知, 温度  $T < T_0 = 370\text{ K}$  刃型成分为主,  $T_0$  附近刃型和螺型

成分相当,  $T > T_0$  螺型成分为主; 即, 随温度升高刃型成分降低、螺型成分升高. 为简单起见, 在 Kraft 等<sup>[13]</sup> 工作启发下, 这些情况可表达为

$$D_e = \begin{cases} (1 - T/T_0)D & (T < T_0) \\ T_0 D/T & (T > T_0) \end{cases},$$

由上式得:

$$D = \begin{cases} T_0 D_e / (T_0 - T) & (T < T_0) \\ D_e T / T & (T > T_0) \end{cases}, \quad (3)$$

而由  $\Delta\varepsilon_{pl} \propto D = (D_e + D_s)$ , 则

$$\begin{aligned} \Delta\varepsilon_{pl} &= Dsb/a \\ &= \begin{cases} T_0 D_e sb/a(T_0 - T) & (T < T_0) \\ T D_e sb/aT_0 & (T > T_0) \end{cases}, \quad (4) \end{aligned}$$

这里  $s$  为激活滑移的 Schmid 因子. 而且有: 一定循环周数后, 形成一稳态位错构型, 进行交割的刃层错之间距离可看作湮灭距离. 于是, 随后循环载荷所产生每个新层错都将湮灭.

在疲劳半周期间当  $D_e$  个刃层错湮灭时所产生空位数  $V_a$  估算为

$$V_a = m(a/b)D_e, \quad (5)$$

这里,  $m$  是每个格子所产生的空位数,  $a/b$  是在尺度为  $a$  的单晶薄膜中沿刃层错方向的格子数. 设  $h$  为薄膜的厚度, 则单晶薄膜中的格子数  $Z_1$  为

$$Z_1 = a^2 h / b^3. \quad (6)$$

结合 (4), (5) 和 (6) 式, 则  $2N$  半周循环后空位浓度  $C$  为

$$\begin{aligned} C &= 2NV/Z_1 \\ &= \begin{cases} 2Nmb\Delta\varepsilon_{pl}(T_0 - T)/T_0sh & (T < T_0) \\ 2Nmb\Delta\varepsilon_{pl}T_0/Tsh & (T > T_0) \end{cases}, \quad (7) \end{aligned}$$

对厚度  $h = 21.706 \text{ nm}$  的铜薄膜, 在温度为  $293 \text{ K}$  下承受塑性应变幅  $0.05$  循环加载时, 如取  $m/s = 1/3$ , 则其空位浓度为  $0.003$ , 这大于 fcc 金属熔点处的空位浓度  $0.001$ <sup>[49]</sup>. 因此在这种机理下, 能产生足够多的空位去形成空隙进而裂纹萌生. 因为根据 (7) 式, 在薄膜厚度确定下, 在一定循环数后的空位浓度随温度升高而降低 (即在一定循环数后裂纹萌生随温度升高更难发生), 所以在较高温度就需

要更多的循环周数来得到临界空位浓度 (正如图 7 表示出的那样). 更准确地说, 当  $T < T_0$  时, 在一定循环数后的空位浓度随温度升高而降低, 那么就可推测出随温度升高铜薄膜疲劳寿命增加; 当  $T > T_0$  时, 在一定循环数后的空位浓度随温度升高而比  $T < T_0$  时降低更快 (因为当  $T > T_0$  时, 随温度升高, 螺位错成分增加, 刃位错成分减少而使得层错湮灭导致的空位浓度降低更多), 亦可推出随温度升高铜薄膜疲劳寿命增加较快. 这也正好用 (7) 式解释了当  $T < T_0$  时, 随温度升高, 抗疲劳性稍稍升高, 当  $T > T_0$  时抗疲劳性较大提高的模拟结果. 这里模拟结果 “在一定循环数后裂纹萌生随温度升高更难发生” 已为单晶铜疲劳性能温度效应的实验<sup>[50]</sup> 所发现: 几乎同一塑性应变幅 ( $4.2 \text{ K}$  时为  $0.00019$ ;  $72 \text{ K}$  时为  $0.0002$ ) 同一循环数  $5000$  下  $4.2 \text{ K}$  时疲劳裂纹已经萌生, 而  $72 \text{ K}$  时才出现 “梯状” 花样. 另外, 因为在  $T > T_0$  范围内, 随温度升高, 刃位错成分下降 (因而刃层错湮灭变少), 螺位错成分占主导且增加, 但由于薄膜尺度 ( $h = 21.706 \text{ nm} < 50 \text{ nm}$ ) 的限制而使螺层错形成不充分、湮灭无法正常进行, 这导致同样应变幅下同样循环数下随温度升高出现的空位浓度更低、空隙更小的结果.

## 4 结论

本文工作用嵌入原子势的分子动力学方法研究了各种温度下循环拉伸的薄铜膜形变行为.

1) 嵌入原子势的分子动力学方法模拟给出了铜薄膜总能及应力随循环数变化的曲线, 由此判断出在某一温度下铜薄膜的疲劳寿命.

2) 模拟结果表明, 铜薄膜疲劳损伤进化过程为: 空位聚集 - 空隙形成 - 裂纹萌生 - 断裂.

3) 基于模拟得到的疲劳寿命 - 温度变化曲线和位错演化图, 建立了模型, 解释了发现的超薄铜膜疲劳寿命的温度依赖关系, 即在大约  $370 \text{ K}$  下, 随温度上升, 超薄铜膜疲劳寿命增加缓慢; 高于大约  $370 \text{ K}$  时, 超薄铜膜疲劳寿命增加较快.

本论文工作是在与美国阿克伦大学 (The University of Akron) 潘尔年 (Ernian Pan) 教授的合作研究中完成的, 作者在此深表谢意.

- [1] Nix W D, Mehl Medalist R F 1989 *Metall. Trans. A* **20** 2217
- [2] He A M, Shao J L, Wang P, Qin C S 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 8836 (in Chinese) [何安民, 邵建立, 王裴, 秦承森 2010 物理学报 **59** 8836]
- [3] Zhang G P, Schwaiger R, Volkert C A, Kraft O 2003 *Philos. Mag. Lett.* **83** 477
- [4] Nicola L, Giessen E V, Needleman A 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 5920
- [5] Nicola L, Xiang Y, Vlassak J J, van der Giessen E, Needleman A 2006 *J. Mech. Phys. Solids* **54** 2089
- [6] Tanimoto H, Fujiwara K, Mizubayashi H 2005 *Sci. Tech. Adv. Mater.* **6** 620
- [7] Huang H B, Spaepen F 2000 *Acta Mater.* **4** 3261
- [8] Balk T J, Dehm G, Arzt E 2003 *Acta Mater.* **51** 4471
- [9] Espinosa H D, Prorok B C, Peng B 2004 *J. Mech. Phys. Solids* **52** 667
- [10] Gruber P A, Bohm J, Onuseit F, Wanner A, Spolenak R, Arzt E 2008 *Acta Mater.* **56** 2318
- [11] Read D, Geiss R, Ramsey J, Scherban T, Xu G, Blaine J, Miner B, Emery R D 2003 *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **778** 93
- [12] Florando J N, Nix W D 2005 *J. Mech. Phys. Solids* **53** 619
- [13] Kraft O, Wellner P, Hommel M, Schwaiger R, Arzt E 2002 *Z. Metallkd.* **93** 392
- [14] Zhang G P, Volkert C A, Schwaiger R, Arzt E, Kraft O 2005 *J. Mater. Res.* **20** 201
- [15] Zhang B, Sun K H, Gong J, Sun C, Wang Z G, Zhang G P 2007 *Key Eng. Mater.* **353–358** 116
- [16] Kraft O, Schwaiger R, Wellner P 2001 *Mater. Sci. Eng. A* **319–321** 919
- [17] Maier H J, Gabor P, Gupta N, Karaman I, Haouaoui M 2006 *Int. J. Fatigue* **28** 243
- [18] Keller R R, Phelps J M, Read D T 1996 *Mater. Sci. Eng. A* **214** 42
- [19] Read D T 1998 *Int. J. Fatigue* **20** 203
- [20] Merchant H D, Minor M G, Liu Y L 1999 *J. Electron. Mater.* **28** 998
- [21] Merchant H D, Khatibi G, Weiss B 2004 *J. Mater. Sci.* **39** 4157
- [22] Chang W J, Fang T H 2003 *J. Phys. Chem. Solids* **64** 1279
- [23] Zhu T, Li J, Samanta A, Leach A, Gall K 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 025502
- [24] Guo Q N, Yue X D, Yang S E, Huo Y P 2010 *Comput. Mater. Sci.* **50** 319
- [25] Chen M W, Ma E, Hemker K J, Sheng H W, Wang Y M, Cheng X M 2003 *Science* **300** 1275
- [26] Gruber P A, Solenthaler C, Arzt E, Spolenak R 2008 *Acta Mater.* **56** 1876
- [27] Yang D Z 1991 *Dislocations and Metal Strengthening Mechanisms* (Harbin: Harbin Institute of Technology Press) (in Chinese) [杨德庄 1991 位错与金属强化机制 (哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社)]
- [28] Ju C C, Chen D L, Chen T C 2001 *Proceedings of The 18th CSME National Conference on Mechanical Engineering Taipei, Taiwan, December 7–8, 2001* p159
- [29] Lin Z C, Huang J C 2004 *Nanotechnology* **15** 1509
- [30] Lin Z C, Huang J C 2004 *Nanotechnology* **15** 510
- [31] Komanduri R, Chandrasekaran N, Raff L M 2001 *Int. J. Mech. Sci.* **43** 2237
- [32] Chen D L, Ju C C, Chen T C 2001 *Proceedings of The 18th CSME National Conference on Mechanical Engineering Taipei, Taiwan, December 7–8, 2001* p1063
- [33] Chang W J, Fang T H 2003 *J. Phys. Chem. Solids* **64** 1279
- [34] Ma X L, Yang W 2003 *Nanotechnology* **14** 1208
- [35] Allen M P, Tildesley D J 1987 *Computer Simulation of Liquids* (Oxford: Oxford University Press)
- [36] Melchionna S, Ciccotti G, Holian B L 1993 *Mol. Phys.* **78** 533
- [37] Schiotz J 2001 *Phil. Mag. Lett.* **81** 301
- [38] Kolluri K, Gungor M R, Maroudas D 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 221907
- [39] Zhou S J, Preston D L, Lomdahl P S, Beazley D M 1998 *Science* **279** 1525
- [40] Zhou S J, Preston D L, Louchet F 1999 *Acta Mater.* **47** 2695
- [41] Li M, Chu W Y, Gao K W, Qiao L J 2003 *J. Phys.: Condens. Matter* **15** 3391
- [42] Vegge T, Jacobsen W 2002 *J. Phys.: Condens. Matter* **14** 2929
- [43] Honeycutt J D, Andersen H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [44] Schwaiger R, Kraft O 1999 *Scripta Mater.* **41** 823
- [45] Zhang G P, Volkert C A, Schwaiger R, Wellner P, Arzt E, Kraft O 2006 *Acta Mater.* **54** 3127
- [46] Polak J 1987 *Mater. Sci. Eng. A* **92** 71
- [47] Essmann U, Gosele U, Mughrabi H 1981 *Phil. Mag. A* **44** 405
- [48] Essmann U, Mughrabi H 1979 *Phil. Mag. A* **40** 731
- [49] Simmons R O, Balluffi R W 1960 *Phys. Rev.* **117** 52
- [50] Kwon L E, Fine M E, Weertman J 1989 *Acta Metall.* **37** 2937

# Temperature dependence of fatigue properties of ultrathin copper films: molecular dynamics simulations\*

Guo Qiao-Neng<sup>†</sup> Cao Yi-Gang Sun Qiang Liu Zhong-Xia Jia Yu<sup>‡</sup> Huo Yu-Ping

(School of Physics and Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

(Received 11 July 2012; revised manuscript received 21 September 2012)

## Abstract

The molecular dynamics simulations are performed with single-crystal copper thin films under cyclic loading to investigate temperature effects on the mechanical responses. First, the method to determine the number of cycles to failure is reported: the total energy-the number of cycles curve and the stress-the number of cycles curve for nanoscale copper film are obtained; using the two curves and an additional quantitative expression, we obtain the additional quantity-the number of cycles curve, from which fatigue life of copper film is obtained. Next, under cyclic loading, with temperature rising, the number of cycles to failure of copper films increases in different manners at different temperatures: when the temperature is above about 370 K, the number of cycles to failure goes up quickly with temperature; when below about 370 K, the number of cycles rises slowly. Finally, the mechanisms of the strange temperature dependence of cyclic deformation can be explained by our developed model based on the evolutionary features of dislocation.

**Keywords:** molecular dynamics, fatigue, temperature effect, dislocation

**PACS:** 71.15.Pd, 68.35.Gy, 68.60.Dv, 68.55.Ln

**DOI:** 10.7498/aps.62.107103

---

\* Project supported by the Foundation of Henan Educational Committee, China (Grant Nos.13A140674, 12A140012) and the Ministry of Education of China (Grant No. 20114101110001).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: gqin@zzu.edu.cn

<sup>‡</sup> Corresponding author. E-mail: jiayu@zzu.edu.cn