

循环载荷下纳米铜/铝薄膜孔洞形核、生长及闭合的分子动力学模拟

刘强 郭巧能 钱相飞 王海宁 郭睿林 肖志杰 裴海蛟

Molecular dynamics simulation of void nucleation, growth and closure of nano-Cu/Al films under cyclic loading

Liu Qiang Guo Qiao-Neng Qian Xiang-Fei Wang Hai-Ning Guo Rui-Lin Xiao Zhi-Jie Pei Hai-Jiao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 133101 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20181901

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181901>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

铝纳米颗粒的热物性及相变行为的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of the thermophysical properties and phase change behaviors of aluminum nanoparticles

物理学报. 2015, 64(8): 083601 <https://doi.org/10.7498/aps.64.083601>

轴压和扭转复合载荷作用下氮化硼纳米管屈曲行为的分子动力学模拟

Buckling behavior of boron nitride nanotubes under combined axial compression and torsion via molecular dynamics simulations

物理学报. 2018, 67(24): 246101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180641>

纳米尺度下气泡核化生长的分子动力学研究

Molecular dynamics study of bubble nucleation on a nanoscale

物理学报. 2018, 67(23): 234702 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180993>

纳米多晶铜的超塑性变形机理的分子动力学探讨

Superplastic deformation mechanism of nanocrystalline copper: a molecular dynamics study

物理学报. 2015, 64(12): 126201 <https://doi.org/10.7498/aps.64.126201>

金刚石表面无定形碳氢薄膜生长的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulations on the growth of thin amorphous hydrogenated carbon films on diamond surface

物理学报. 2015, 64(1): 018102 <https://doi.org/10.7498/aps.64.018102>

掺杂硅纳米梁谐振频率的理论模型及分子动力学模拟

Study on resonance frequency of doping silicon nano-beam by theoretical model and molecular dynamics simulation

物理学报. 2017, 66(10): 106103 <https://doi.org/10.7498/aps.66.106103>

循环载荷下纳米铜/铝薄膜孔洞形核、生长及闭合的分子动力学模拟*

刘强¹⁾ 郭巧能^{1)†} 钱相飞¹⁾ 王海宁²⁾ 郭睿林²⁾ 肖志杰²⁾ 裴海蛟¹⁾

1) (郑州大学物理工程学院, 郑州 450001)

2) (郑州大学国际学院, 郑州 450001)

(2018年10月25日收到; 2019年5月4日收到修改稿)

本文运用分子动力学模拟了在应变幅比为 $R = -1$ 的循环载荷条件下, 扩散焊纳米铜/铝双层薄膜内部孔洞形核、生长以及闭合的演化机理. 研究发现, 在循环载荷条件下, 孔洞主要在铜/铝双层膜的铝侧内部形核, 且有孔洞 I 和孔洞 II 两种演化方式. 孔洞 I 在铜-铝相互扩散形成双层膜时在因柯肯达尔效应所产生出的空隙缺陷位置处形核, 这种形核方式下, 空隙缺陷形成空位后, 空位在铝侧无序结构内部向铜原子数相对密集的区域移动. 当空位聚集形成孔洞时, 孔洞在固定位置生长. 孔洞 II 在压杆位错被克服所形成的空隙缺陷位置处形核, 在铝侧形核后的孔洞没有发生移动. 与孔洞 I 相比, 孔洞 II 在应变加载过程中孔洞形核时的应力大、孔洞生长速度较快且尺寸稍大, 在应变卸载阶段孔洞闭合速度也较快. 两种孔洞在形核、生长和闭合过程中有两方面的共同特点: 1) 两种孔洞都是在铝侧无序结构内部空隙缺陷处形核. 2) 两种孔洞在其生长、闭合过程中外形变化相同. 在孔洞生长阶段, 两种孔洞在外形上都是先沿应变加载方向拉伸长大, 然后沿与应变加载相垂直的方向长大, 最后趋向球形发展. 在孔洞闭合阶段, 两种孔洞在外形上首先沿应变加载方向压缩成椭球状, 然后沿与应变加载相垂直的方向从孔洞两端向孔洞中心闭合消失. 在随后的循环加载过程中, 孔洞消失位置处没有再次出现新孔洞, 而是在铝侧其它位置无序结构内部空隙缺陷处形核.

关键词: 分子动力学, 铜/铝薄膜, 循环载荷, 孔洞

PACS: 31.15.xv, 66.30.J-, 91.60.Ed, 62.25.-g

DOI: 10.7498/aps.68.20181901

1 引言

铜和铝是工业生产上常用的金属材料, 由铜铝连接可制备出铜铝复合材料, 这种材料因具有塑性和强度良好、接触电阻低、导电导热性好等优点, 也具有耐腐蚀、经济等特点而备受人们关注, 在电子、电力、能源和生活用具等领域具有广泛的应用, 如铜包铝复合线、铜铝复合接头、铜铝复合板以及微电子封装中应力工程的柔性互连等^[1-5]. 实际上

材料器件在微加工和服役过程中也难免存在夹杂物、孔洞、裂纹等缺陷, 其中孔洞缺陷最为普遍并且对金属材料的性能影响最为严重^[6-10], 因此, 对铜/铝复合材料内部孔洞演化规律的研究在预防因孔洞缺陷造成事故方面具有重要的理论指导意义.

李亚江等^[11]和白莉^[12]采用真空扩散焊制备铜/铝复合材料时, 发现在铝侧靠近界面位置有大量孔洞存在. 李小兵等^[13]应用透射电子显微镜对轧制和退火制备而成铝/铜复合材料的界面进行观察, 在铝侧也发现大量孔洞. 路王珂等^[14]对退火后

* 国家自然科学基金 (批准号: 11372283)、河南省教育厅科学技术研究重点项目 (批准号: 13A140674) 和河南省高等学校重点科研项目 (批准号: 17A430001) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: gqiaoneng@163.com

的铜铝复合板的力学性能进行测试和对界面组织结构研究时,发现铝侧孔洞的数量随退火温度的升高而增多.王波等^[15]用热辅助超声波进行铜/铝层状复合材料增材制造并对材料进行拉伸,结果显示孔洞在界面位置形核.而在异种金属连接上,在应力拉伸或疲劳作用下,发现孔洞都是首先在铜/镍薄膜的界面处形核^[16-17].而对面心立方结构金属内部孔洞缺陷微观结构演化的研究则主要集中在单金属材料内部.在实验方面,祁美兰^[18]对高纯铝进行了一维应变平面冲击波加载实验,结果表明,离准层裂面距离近则孔洞尺寸大、数量多,反之则孔洞尺寸小、数量少.冉小霞^[19]对纯铝进行冲击加载的实验结果是孔洞在晶界处产生并沿晶界成长.徐斌等^[20]则研究了压下率和变形温度对孔洞闭合的影响.刘宏伟^[21]的纯铝压缩和拉伸实验显示,孔洞之间相距较远时孔洞单独生长,相邻较近时孔洞粘连生长.

理论上,用分子动力学模拟方法,Avinash等^[22]对纳米多晶铜体系进行动态加载,指出低温下塑性变形是孔洞形核与生长的主要方式,高温扩散促进孔洞的形核与生长.庞卫卫等^[23]研究了在拉伸应变下单晶铜内纳米孔洞的形核,认为孔洞在位错密集区通过不同层错面的不断交割而形核.在孔洞生长方面,Belak^[24]对单晶铜进行加载实验,研究表明孔洞的生长是由于各向异性位错形核和发射实现的.Sirirat等^[25]模拟了单轴拉伸应变下铜单晶的孔洞生长机制,发现孔洞生长的主要原因是切向应力的释放.张宁等^[26]针对单向拉伸载荷作用下含孔洞双晶铜晶体的力学行为,研究了晶粒内部孔洞大小、数量和晶界对孔洞力学行为的影响.Simar等^[27]研究了镍单晶内部刃型位错与孔洞的相互作用,发现随孔洞尺寸的增加,孔洞阻碍位错强度增大.另外,胡晓燕等^[28]、梁华和李茂生^[29]研究了单轴加载下单晶铝内部晶向对纳米孔洞的生长和附近区域形变的影响.方洲等^[30]研究了单轴拉伸作用下含孔洞单晶铝的裂纹扩展行为,指出孔洞尺寸越大,孔洞越容易与邻近孔洞聚合.Yang等^[31]研究了单晶铜板内孔洞周围原子应力集中的现象,发现孔洞附近原子的排布方式是原子应力集中的关键因素.郭巧能等^[32]在超薄铜膜的疲劳性能影响研究中指出,在循环载荷作用下,孔洞于位错交截处形核,孔洞尺寸随循环次数增大.在孔洞闭合方面,张永军^[33]对含孔洞纯铜在500℃下保温,发

现孔洞填充是孔洞闭合的主要过程.

以上对孔洞的研究主要集中在面心立方金属材料内部,对铜/铝复合材料或是异种金属内部孔洞形核演化的研究较少.因此,本文采用分子动力学方法研究了在循环载荷作用下,铜/铝薄膜内部孔洞形核、生长和闭合的微观结构变化及形变机制.

2 模型和模拟方法

图1为构建的初始模型,上层为单晶铜,下层为单晶铝,接触面为理想的(001)面,铜侧和铝侧尺寸大小分为 $28a_{Cu} \times 28a_{Cu} \times 19a_{Cu}$, $25a_{Al} \times 25a_{Al} \times 17a_{Al}$ (铜的晶格常数 $a_{Cu} = 0.3615$ nm,铝的晶格常数 $a_{Al} = 0.4050$ nm),其中含59584个铜原子,42500个铝原子.[100], [010]和[001]晶向分别对应 X , Y , Z 轴. X , Y 方向采用周期性边界条件, Z 方向采用自由边界条件,分别固定铜上表面和铝下表面3层原子,用以施加应变加载.由麦克斯韦速率分布给出原子的初始速度,原子的牛顿运动方程采用Verlet法进行数值积分,时间步长为2 fs,模拟压强始终为1个大气压.本文采用Cai等^[34]提出的嵌入原子势(embedded atom method, EAM)表示模型内原子之间的相互作用,并在大规模并行计算软件LAMMPS^[35]中模拟计算,模拟过程中,首先在1 K温度下运行20 ps使模型充分弛豫,然后升温至符合铝原子扩散系数理论值的温度800 K^[36]并保温使得铜和铝之间相互充分扩散,接着降温至300 K并运用Nose/Hoover热浴法^[37]使系统温度维持在室温300 K下,在此温度下弛豫200 ps得到初始模型.然后以应变幅比 $R = -1$ 对初始模型沿 Z 轴方向进行循环加载,在循环加载过程中,

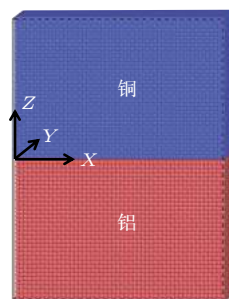


图1 纳米铜/铝双层膜模型(注:上层蓝色为铜原子,下层红色为铝原子)

Fig. 1. Cu/Al bilayer films model (The upper blue for copper atoms and the lower red for aluminum atoms).

先拉伸至设定应变幅值, 然后卸载并反向加载到该应变幅值, 最后卸载至 0 应变完成一个循环加载. 在此过程中, 每次拉伸或者反向加载都是施加 0.03% 的应变, 弛豫 1600 步, 应变率为 $9.375 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$. 然后多次循环, 以研究孔洞的形核、生长以及闭合情况及其机理, 最后应用 OVITO^[38] 可视软件进行具体的视图分析.

3 模拟结果分析和讨论

对铜/铝双层膜进行循环应变加载时, 其应变幅取为相同条件下单轴拉伸时屈服应力所对应的应变^[36], 图 2 给出了循环应变加载的应力-时间曲线. 通过观察循环过程中原子结构的位错演化过程来研究每个循环时所出现的孔洞形核、生长以及闭合情况, 发现有孔洞 I 和孔洞 II 两种演化方式. 孔洞 I 是在循环加载前, 铜/铝扩散形成双层膜时产生出的空隙缺陷位置处形核的, 其形核位置在图 2 蓝色实心圆标记处, 应力为 $\sigma = 1.7205 \text{ GPa}$; 孔洞 II 是在压杆位错被克服引发的空隙缺陷位置处形核的, 其形核位置在图 2 红色实心方块标记处, 应力为 $\sigma = 2.2968 \text{ GPa}$, 可以看出孔洞 I 形核所需要的应力小于孔洞 II 形核所需要的应力.

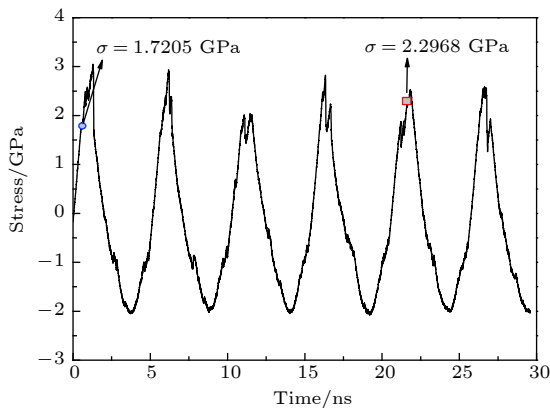


图 2 纳米铜/铝双层膜在循环载荷作用下应力-时间曲线
Fig. 2. Stress-time curve of Cu/Al bilayer films under cyclic loading.

3.1 孔洞 I 的演化: 铜铝扩散形成双层膜时所产生出的空隙缺陷引发孔洞的形核、生长和闭合

3.1.1 孔洞 I 的形核

图 3 和图 4 分别为铜/铝双层膜在应变加载下

孔洞形核 I 演化的成分原子位置图和原子结构图, 这些图是沿 [100] 晶向截取孔洞附近区域 3 层原子厚度的局部图. 从图 3(a) 可以看出, 当应变 $\varepsilon = 0.0000$ 时即循环应变加载前, 铜/铝双层膜中铝侧扩散铜原子附近的铝原子排列稍显混乱, 并已经有空隙存在. 而且从图 4(a) 可以看出, 循环应变加载前, 孔洞形核前的孔洞位置及附近区域原子结构已经由面心立方结构 (face-centered cubic, FCC) 变为无序结构 (OTHER) 和少量密排六方结构 (hexagonal closepacked structure, HCP), 表明该位置区域出现了缺陷. 这些空隙缺陷和 OTHER 结构是由于铜原子向铝侧内扩散过程中产生了柯肯达尔效应, 使得铝侧铜原子扩散位置处发生点阵变形, 由此产生了一定量的空隙、位错和 OTHER 结构.

随应变增加, 当 $\varepsilon = 0.0510$ 时, 在距离孔洞形核中心位置的附近出现了 2 条肖克莱位错线 S_1 , S_2 和 1 条 OTHER 位错线 Q_1 (图 5). 另外, 在孔洞形核位置附近有 HCP 结构产生, 由于在孔洞形核位置附近产生层错使得这一区域应力集中释放的同时空隙变大.

随拉伸应变的继续增加, 当 $\varepsilon = 0.0528$ 时, 孔洞形核位置区域 (110) 面之间的空隙增大 (图 3(a)), 这是由于肖克莱位错 S_1 和 S_2 交截形成了一个压杆位错 R_1 (图 6), 此压杆位错对应的割阶导致原空隙变大 (图 4(b)). 当进一步加载到 $\varepsilon = 0.0531$ 时, 此变大了的空隙向铜原子的位置处移动, 并在扩散铜原子左侧聚集形成一个空位 (图 3(c) 和图 4(c)), 这是由于空位与扩散铜原子之间存在一定的结合能^[39], 在拉伸应力的作用下, 空位向扩散铜原子数量相对较多的位置发生移动形成了稳定的空位-溶质原子结构^[40]. 继续加载时由于该空位附近新产生出的肖克莱位错与压杆位错 R_1 相互作用形成肖克莱位错而导致此压杆位错消失, 这种情况类似于徐振海等^[41] 在单晶铜纳米线屈服机理的分子动力学模拟研究中观察到的情况.

继续加载到 $\varepsilon = 0.0537$ 时, 在拉伸应力的作用下, 空位向铜原子数较多的区域移动. 另外, 另一个新形成的空位也向铜原子数较多的位置移动 (图 3(d)—(e)), 这是由于在所研究空位的正前方附近形成了新的肖克莱位错 S_3 , 其右上及右下位置各自又形成了 2 个新的压杆位错 R_2 和 R_3 , 如图 7 位错分析图所示, 正是这些压杆位错、扩散铜原子

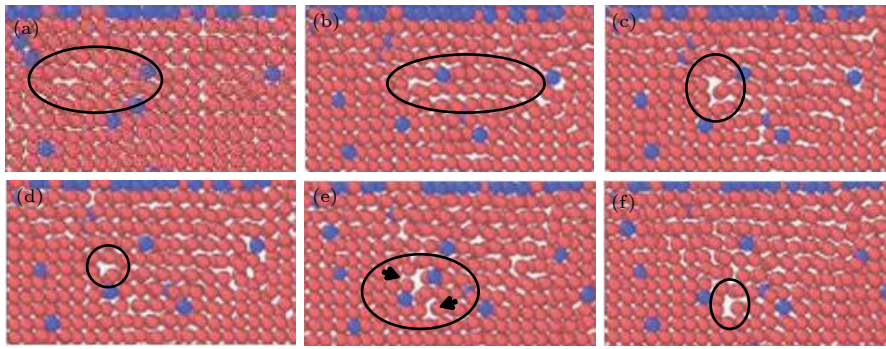


图 3 孔洞 I: 孔洞形核演化截图 (红色代表铝原子, 蓝色代表铜原子) ε 分别为 (a) 0.0000; (b) 0.0528; (c) 0.0531; (d) 0.0534; (e) 0.0537; (f) 0.0540

Fig. 3. Void I: screenshot of the nucleation evolution of the void (red for aluminum atoms, blue for copper atoms), ε is (a) 0.0000; (b) 0.0528; (c) 0.0531; (d) 0.0534; (e) 0.0537; (f) 0.0540.

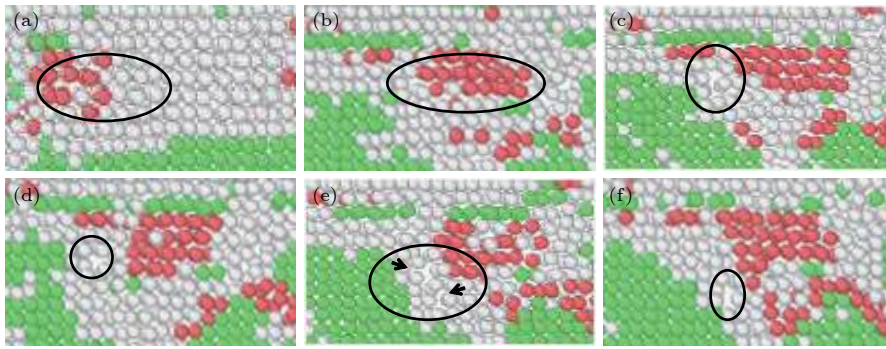


图 4 孔洞 I: 孔洞形核演化的原子结构分析截图 (红色代表 HCP 结构, 绿色代表 FCC 结构, 白色代表 OTHER 结构) ε 分别为 (a) 0.0000; (b) 0.0528; (c) 0.0531; (d) 0.0534; (e) 0.0537; (f) 0.0540

Fig. 4. Void I: screenshot of the atomic structure of nucleation evolution of the void (red for HCP structure, green for FCC structure, white for OTHER structure), ε is (a) 0.0000; (b) 0.0528; (c) 0.0531; (d) 0.0534; (e) 0.0537; (f) 0.0540.

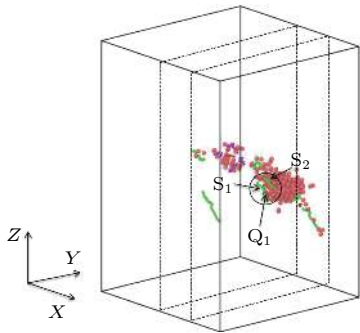


图 5 $\varepsilon = 0.0510$ 时, 孔洞 I: 孔洞形核位置处的位错分析截图 (红色原子为 HCP 结构原子, 紫色为 $\langle 110 \rangle/6$ 压杆位错线, 绿色为 $\langle 112 \rangle/6$ 肖克莱位错线, 深红色为 OTHER 结构位错线)

Fig. 5. $\varepsilon = 0.0510$, Void I: screenshot of dislocation analysis at the nucleation position of the void (red atoms are HCP structure atoms, purple represents $\langle 110 \rangle/6$ the stair-rod dislocation line, green represents $\langle 112 \rangle/6$ the shockley dislocation line, dark red represents the OTHER structure dislocation line).

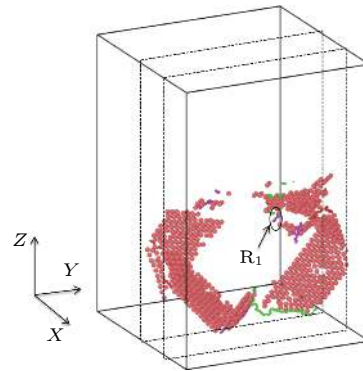


图 6 $\varepsilon = 0.0528$ 时, 孔洞 I: 孔洞形核位置处的位错分析截图 (红色原子为 HCP 结构原子, 紫色为 $\langle 110 \rangle/6$ 压杆位错线, 绿色为 $\langle 112 \rangle/6$ 肖克莱位错线, 深红色为 OTHER 结构位错线)

Fig. 6. $\varepsilon = 0.0528$, Void I: screenshot of dislocation analysis at the nucleation position of the void (red atoms for HCP structure atoms, purple represents $\langle 110 \rangle/6$ the stair-rod dislocation line, green represents $\langle 112 \rangle/6$ the shockley dislocation line, dark red represents the OTHER structure dislocation line).

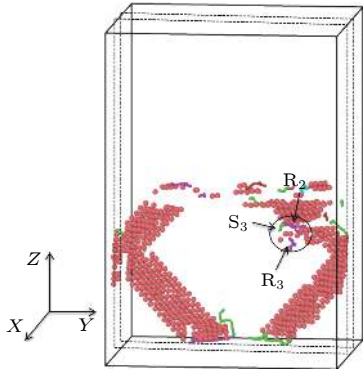


图 7 $\varepsilon = 0.0537$ 时, 孔洞 I: 孔洞形核位置处的位错分析截图 (红色原子为 HCP 结构原子, 紫色为 $\langle 110 \rangle/6$ 压杆位错线, 绿色为 $\langle 112 \rangle/6$ 肖克莱位错线, 深红色为 OTHER 结构位错线)

Fig. 7. $\varepsilon = 0.0537$, Void I: screenshot of dislocation analysis at the nucleation position of the void (red atoms are HCP structure atoms, purple represents $\langle 110 \rangle/6$ the stair-rod dislocation line, green represents $\langle 112 \rangle/6$ the shockley dislocation line, dark red represents the OTHER structure dislocation line).

与空位的相互作用导致此空位沿 Z 轴继续向下移动, 并与新形成的空位相聚集形成空位团 (图 3(f) 和图 4(f)).

3.1.2 孔洞 I 的生长

图 8 和图 9 分别为铜/铝双层膜在应变加载下孔洞生长 I 演化的成分原子位置图和原子结构图, 这些图是沿 $[100]$ 晶向截取孔洞附近区域 3 层原子厚度的局部图. 如图 8(a)—(b) 所示, 当负载增加到 $\varepsilon = 0.0600$ 时, 空位团周围空隙继续向空位团处聚集, 使得空位团沿应变拉伸方向长大, 形成微孔洞, 同时, 孔洞周围原子面之间的空隙消失; 从图 9(a)—(b) 可以看出, 此时孔洞位置处 HCP 结构继续向 OTHER 结构转化, OTHER 结构向 FCC 结构转变, 同时孔洞沿拉伸应变方向长大, 这是由于空位团形成后, 该区域应力被释放, 又重新恢复 FCC 晶格结构. 当外载达到 $\varepsilon = 0.0750$ 时, 孔洞便开始在固定位置生长, 在随后拉伸应变过程

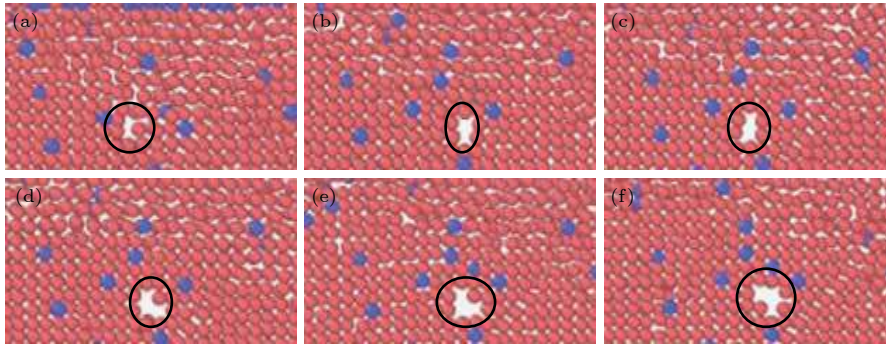


图 8 孔洞 I: 孔洞生长演化图 (红色代表铝原子, 蓝色代表铜原子) ε 分别为 (a) 0.0540; (b) 0.0600; (c) 0.0750; (d) 0.0900; (e) 0.1050; (f) 0.1206

Fig. 8. Void I: screenshot of the growth evolution of the void (red for aluminum atoms, blue for copper atoms), ε is (a) 0.0540; (b) 0.0600; (c) 0.0750; (d) 0.0900; (e) 0.1050; (f) 0.1206.

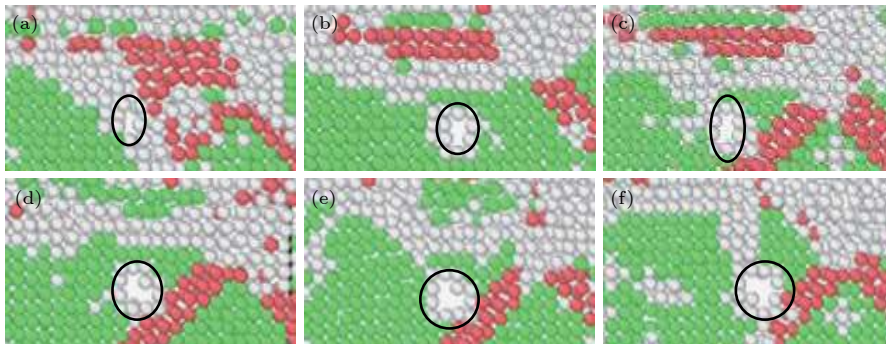


图 9 孔洞 I: 孔洞生长演化的原子结构分析截图 (红色代表 HCP 结构, 绿色代表 FCC 结构, 白色代表 OTHER 结构) ε 分别为 (a) 0.0540; (b) 0.0600; (c) 0.0750; (d) 0.0900; (e) 0.1050; (f) 0.1206

Fig. 9. Void I: screenshot of the atomic structure of the growth evolution of the void (red for the HCP structure, green for the FCC structure, white for the OTHER structure), ε is (a) 0.0540; (b) 0.0600; (c) 0.0750; (d) 0.0900; (e) 0.1050; (f) 0.1206.

中, 周围原子面间距再次拉大形成空隙, 空隙向微孔洞处聚集, 孔洞沿与应力拉伸相垂直的方向长大, 孔洞体积增大, 形状趋向球形发展, 此时孔洞附近区域的空隙随之稍减小, 原子又恢复原来排列方式, 如图 8(c) 所示, 这是由于在右侧新生层错的作用下, 空位团沿拉伸方向长大形成微孔洞 (图 9(c)). 在随后的拉伸应变过程中, 如图 8(d)—(f) 所示, 孔洞以上述方式成长, 当达到应变幅时, 孔洞外形生长不大, 这是由于孔洞周围没有较大的晶格结构变化, 所以孔洞体积几乎不变, 但周围扩散铜原子有向孔洞位置处聚集的趋向 (图 9(d)—(f)).

总之, 孔洞长大是由于孔洞周围原子面间距在拉伸应变的作用下产生空隙, 空隙向孔洞聚集, 从而使得孔洞长大. 从结构上整体分析, 孔洞在位错的作用下长大, 当孔洞周围晶格结构不发生变化时, 孔洞外形变化不大, 几乎不成长. 这种孔洞几乎不生长的原因是由于扩散铜原子在铝侧局部区域置换铝原子形成了置换固溶体, 造成该区域强化 (固溶强化), 从而使得孔洞不易长大. 经计算得出孔洞形核区域铜原子的原子数密度范围为 1.72%—2.63%, 如图 10 两竖直线段中间区域所示, 此浓度在 Cu-Al 相图 [42] 上为 χ 固溶体 (铝作为溶剂), 实验证明, 从铜铝过渡层 (铜铝浓度均大于 5%) 到铝侧中显微硬度逐渐降低, 但大于纯铝的硬度 [11,43].

3.1.3 孔洞 I 的闭合

从应变卸载阶段的图 11(a)—(d) 可以看出, 孔洞沿应变卸载方向变成椭球状 (压缩平面与压缩方向垂直), 椭球型孔洞沿长轴 [010] 晶向由两端逐渐向椭球中心闭合减小, 这时孔洞周围有新层错的

生成 (图 12(a)—(c)). 继续卸载, 如图 12(c)—(d) 所示, 孔洞附近位错转变为 FCC 结构, 当应变卸载至 0 时, 模型内部层错也随之减少直至消失.

在如图 11(e)—(f) 所示的应变压缩阶段, 当椭圆形孔洞减小至单空位时, 空位随应变压缩向下移动, 随应变压缩的增加, 单空位消失, 此时孔洞完全闭合. 从图 12(d)—(e) 来看, 在应变反向压缩阶段, 孔洞沿 [010] 晶向继续减小直至消失, 孔洞被 OTHER 结构原子占据, OTHER 结构原子向 FCC 结构原子转化, 恢复 FCC 结构. 在孔洞闭合阶段, 孔洞相邻的层错对孔洞闭合起主要作用, 层错原子填充进孔洞内部, 使得孔洞体积变小, 随后才是孔洞周围原子填充, 最后孔洞完全闭合.

总之, 孔洞在闭合过程中, 首先沿应变卸载方向收缩成椭球形, 随后孔洞沿椭球型短长轴方向向椭球中心闭合 [33], 这是由于在应变卸载时, 铜/铝

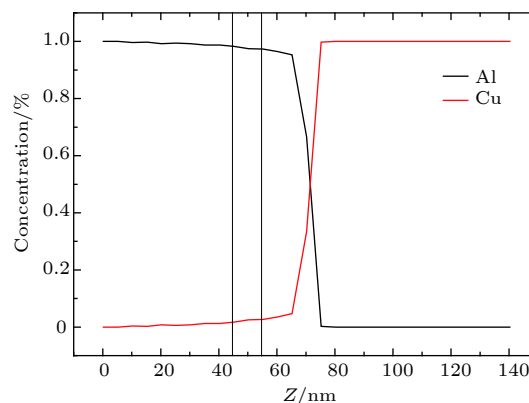


图 10 扩散后铜和铝原子在拉伸方向 (Z 轴) 的原子浓度分布

Fig. 10. Atomic concentration distribution of copper and aluminum atoms in the tensile direction (Z-axis) after diffusion.

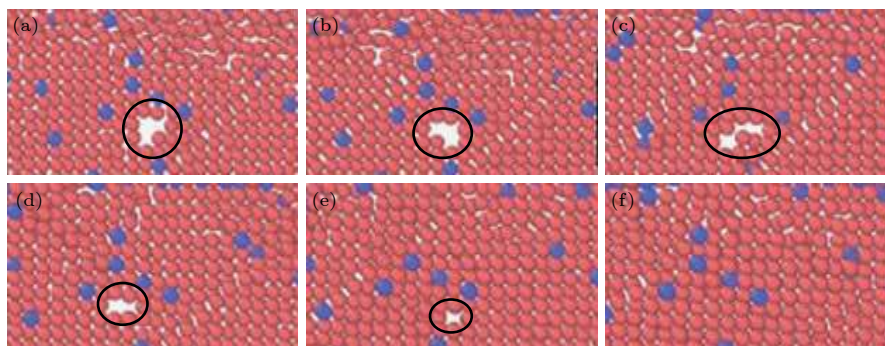


图 11 孔洞 I: 孔洞闭合演化图 (红色代表铝原子, 蓝色代表铜原子) ε 分别为 (a) 0.0906; (b) 0.0606; (c) 0.0306; (d) 0.0006; (e) -0.0294; (f) -0.0444

Fig. 11. Void I: screenshot of the closure evolution of the void (red for aluminum atoms, blue for copper atoms), ε is (a) 0.0906; (b) 0.0606; (c) 0.0306; (d) 0.0006; (e) -0.0294; (f) -0.0444.

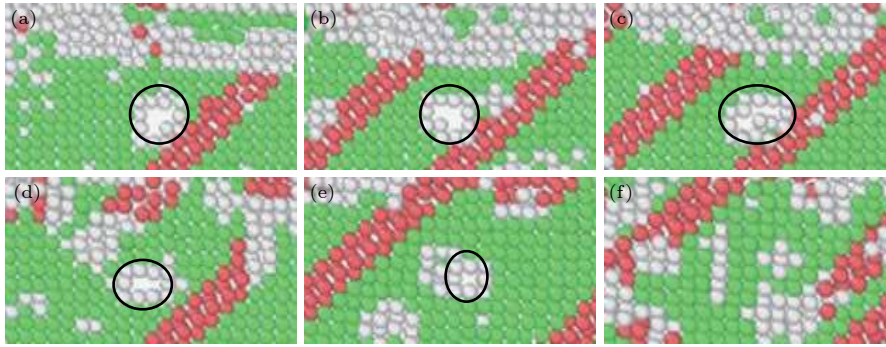


图 12 孔洞 I: 孔洞闭合演化的原子结构分析截图 (红色代表 HCP 结构, 绿色代表 FCC 结构, 白色代表 OTHER 结构) ϵ 分别为 (a) 0.0906; (b) 0.0606; (c) 0.0306; (d) 0.0006; (e) -0.0294; (f) -0.0444

Fig. 12. Void I: screenshot of the atomic structure of the closure evolution of the void (red for HCP structure, green for FCC structure, white for OTHER structure), ϵ is (a) 0.0906; (b) 0.0606; (c) 0.0306; (d) 0.0006; (e) -0.0294; (f) -0.0444.

双层膜内有残余应力, 使得铜/铝双层膜内的孔洞仍有部分恢复原状的能力, 但不能完全恢复^[44]; 随应变反向加载, 在压应力的作用下, 椭球型孔洞逐渐压缩减小, 直至消失^[45].

在随后的应变循环过程中, 该孔洞位置处没有产生缺陷的循环积累, 孔洞在铝侧的其它 OTHER 结构空隙缺陷位置处形核.

3.2 孔洞 II: 由压杆位错被克服所产生出的空隙缺陷引发孔洞的形核、生长和闭合

3.2.1 孔洞 II 的形核

3.2.1.1 空隙的形成

与孔洞 I 情况相比, 一方面孔洞 II 周围的扩散铜原子成分比孔洞 I 少得多, 所以铜原子对孔洞演化过程影响较小; 另一方面由于孔洞处在扩散层以外较远位置, 所以其周围没有像孔洞 I 那样在铜铝扩散时形成空隙, 孔洞 II 的空隙是在循环拉伸加载阶段形成的.

在第五次应变循环拉伸加载到 $\epsilon = 0.0600$ 时, 如图 13 所示, 在孔洞形核位置处分别形成了两个内禀堆垛层错, 一个位于 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面, 其柏氏矢量为 $b_1 = \frac{1}{6} [2\bar{1}\bar{1}]$; 另一个位于 $(1\bar{1}1)$ 面, 其柏氏矢量为 $b_2 = \frac{1}{6} [121]$. 这两个层错前部的肖克莱位错相交, 发生如下反应:

$$\frac{1}{6} [2\bar{1}\bar{1}] + \frac{1}{6} [121] \rightarrow \frac{1}{6} [\bar{1}10]. \quad (1)$$

这样两肖克莱位错发生交截而生成压杆位错, 进而形成割阶和 1/3 空位列^[46](即空隙).

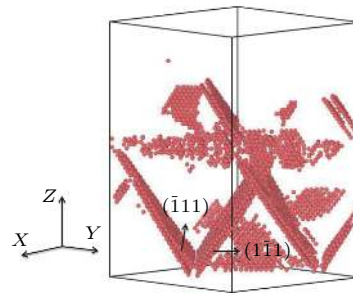


图 13 孔洞 II: 孔洞形核位置处 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面位错与 $(1\bar{1}1)$ 面位错交截形成压杆位错的分析图 (只显示 HCP 原子)

Fig. 13. Void II: An analytical diagram of the stair-rod dislocation formed by the intersection of $(\bar{1}\bar{1}1)$ plane dislocations and $(1\bar{1}1)$ plane dislocations at the nucleation position of the void (only HCP atoms are shown).

3.2.1.2 孔洞 II 的形核

图 14 和图 15 分别为铜/铝双层膜随应变加载下孔洞形核 II 演化的成分原子位置图和原子结构图, 这些图是沿 $[100]$ 晶向截取孔洞附近区域 3 层原子厚度的局部图.

如成分原子位置图 14(a)—(d) 和原子结构图 15(a)—(c) 所示, 随应变的增加, 当达到 $\epsilon = 0.1050$ 时, 铜/铝双层膜中铝侧压杆位错被克服, 孔洞形核位置处 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面上位错向 OTHER 结构转变, $(1\bar{1}1)$ 面上的位错向孪晶转变, 加之外来扩散铜原子的作用, 孔洞形核处 OTHER 结构原子进入紊乱状态, 同时产生了空位原子列. 继续增加应变负载, 如图 14(d)—(f) 和图 15(e)—(f) 所示, OTHER 原子区域 (001) 面之间间距稍增大, 形成一定大小的空隙, 空隙向空位原子列聚集形成一定大小的空位团, 在扩散铜原子的作用下变成不可动空位团^[47]. 这种由压杆位错被克服而引发的孔洞形核^[8,23], 只

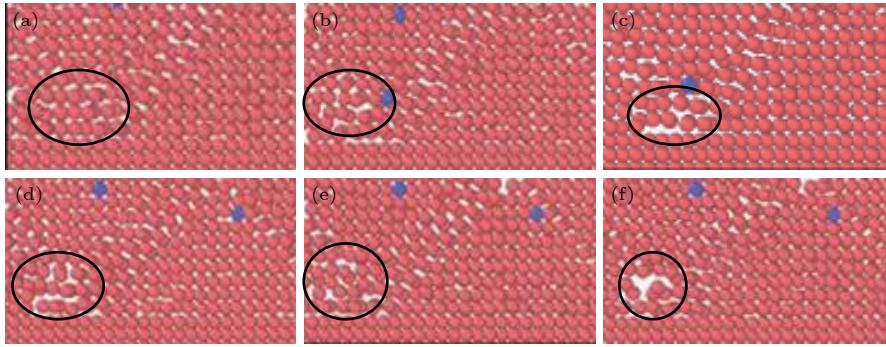


图 14 孔洞 II: 孔洞形核演化图 (红色代表铝原子, 蓝色代表铜原子) ε 分别为 (a) 0.1050; (b) 0.1155; (c) 0.1158; (d) 0.1161; (e) 0.1164; (f) 0.1167

Fig. 14. Void II: screenshot of the nucleation evolution of the void (red for aluminum atoms, blue for copper atoms), ε is (a) 0.1050; (b) 0.1155; (c) 0.1158; (d) 0.1161; (e) 0.1164; (f) 0.1167.

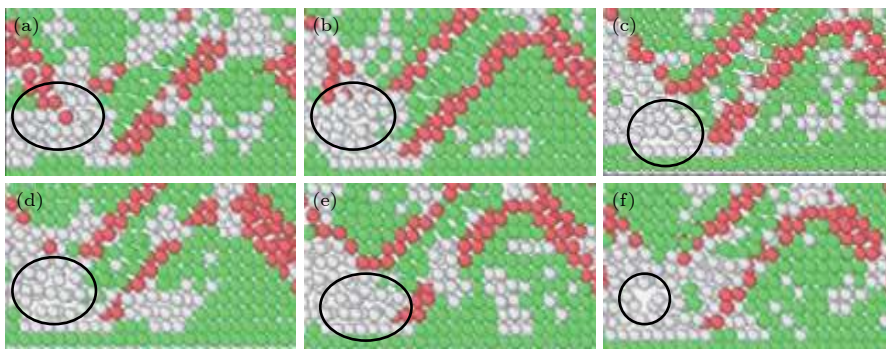


图 15 孔洞 II: 孔洞形核演化的原子结构分析截图 (红色代表 HCP 结构, 绿色代表 FCC 结构, 白色代表 OTHER 结构) ε 分别为 (a) 0.1050; (b) 0.1155; (c) 0.1158; (d) 0.1161; (e) 0.1164; (f) 0.1167

Fig. 15. Void II: screenshot of the atomic structure of the nucleation evolution of the void (red for HCP structure, green for FCC structure, white for OTHER structure), ε is (a) 0.1050; (b) 0.1155; (c) 0.1158; (d) 0.1161; (e) 0.1164; (f) 0.1167.

有孔洞形核位置处结构变化较大, 压杆位错左边 HCP 结构向 OTHER 结构转变, 压杆位错右边的位错转化为孪晶, 而孔洞周围原子结构变化不大, 这说明随应变的增加, 压杆位错被克服, 使得应力通过孔洞以及位错向孪晶转化方式释放.

另外, 如图 4 和图 15 所示, 孔洞 I 与孔洞 II 的形核都是在排列紊乱的 OTHER 原子结构区域内部形核.

3.2.2 孔洞 II 的生长

如图 16(a)—(b) 和图 17(a)—(c) 所示, 随拉伸负载增加, 孔洞沿拉伸方向增长, 孔洞体积相应增大, 孔洞附近 OTHER 结构原子开始增多, 有部分 OTHER 结构向 HCP 结构转化. 继续拉伸, 如图 16(c)—(e) 和图 17(c)—(e) 所示, 孔洞沿 [010] 晶向 (与拉伸方向垂直的方向) 增大, 孔洞形状为近球形, 孔洞附近 OTHER 结构原子继续增多. 如图 16(f) 和图 17(f) 所示, 当拉伸应变达到幅值 $\varepsilon =$

0.1206 时, 孔洞体积几乎不变, 形状向球形转变.

与孔洞 I 相比, 如图 17 和图 8 所示, 孔洞 II 在生长过程中孔洞尺寸较大, 孔洞 II 生长经历了 $\Delta\varepsilon = 0.0036$ 的应变, 远小于孔洞 I 生长所经历的 $\Delta\varepsilon = 0.0666$ 应变, 孔洞 II 长大速度较快, 但它们的生长外形变化方式相同.

3.2.3 孔洞 II 的闭合

在卸载阶段, 如图 18(a)—(c) 和图 19(a)—(c) 所示, 孔洞两侧 {111} 面原子向孔洞处滑移, 产生大面积的层错, 孔洞沿 [001] 晶向 (拉伸应变卸载方向) 减小, 收缩成椭球形. 卸载到 $\varepsilon = 0.0456$ 时, 如图 18(c)—(e) 和图 19(c)—(e) 所示, 孔洞沿椭圆短长轴 ([010] 晶向) 向孔洞中心收缩减小, 紧接着孔洞几乎完全被 OTHER 原子填充, 孔洞位置处又处于位错交截状态^[48]. 卸载到 $\varepsilon = 0.0306$ 时, 如图 18(f) 和图 19(f) 所示, 孔洞位置处原子间距进一步减小, 原子排列紧密, 孔洞位置处 HCP 结构

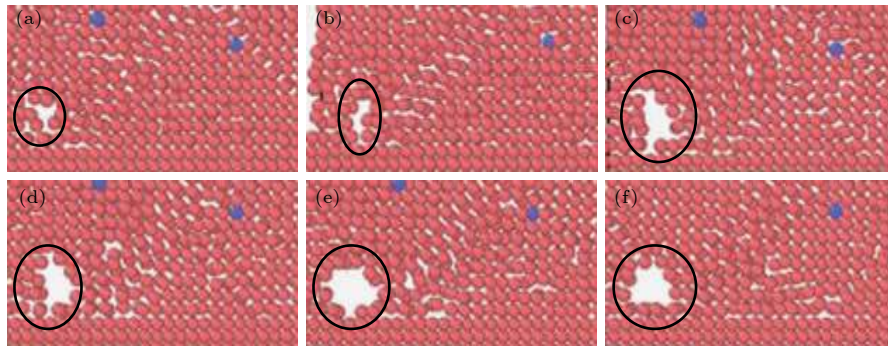


图 16 孔洞 II: 孔洞生长演化截图 (红色代表铝原子, 蓝色代表铜原子) ε 分别为 (a) 0.1170; (b) 0.1173; (c) 0.1179; (d) 0.1182; (e) 0.1185; (f) 0.1206

Fig. 16. Void II: screenshot of the growth evolution of the void (red for aluminum atoms, blue for copper atoms), ε is (a) 0.1170; (b) 0.1173; (c) 0.1179; (d) 0.1182; (e) 0.1185; (f) 0.1206.

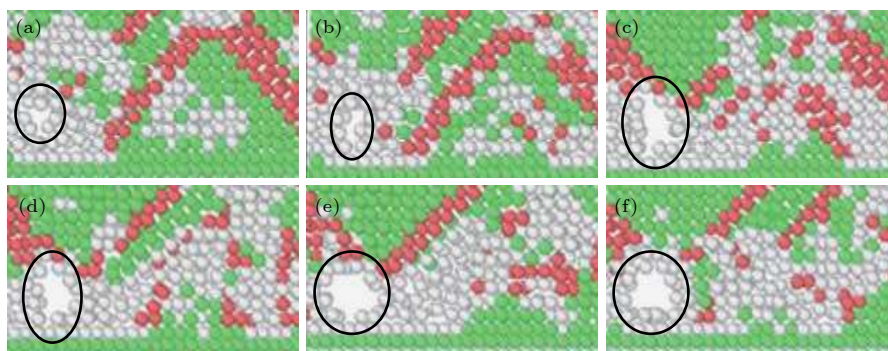


图 17 孔洞 II: 孔洞生长演化的原子结构分析截图 (红色代表 HCP 结构, 绿色代表 FCC 结构, 白色代表 OTHER 结构) ε 分别为 (a) 0.1170; (b) 0.1173; (c) 0.1179; (d) 0.1182; (e) 0.1185; (f) 0.1206

Fig. 17. Void II: screenshot of the atomic structure of the growth evolution of the void (red for the HCP structure, green for the FCC structure, white for the OTHER structure), ε is (a) 0.1170; (b) 0.1173; (c) 0.1179; (d) 0.1182; (e) 0.1185; (f) 0.1206.

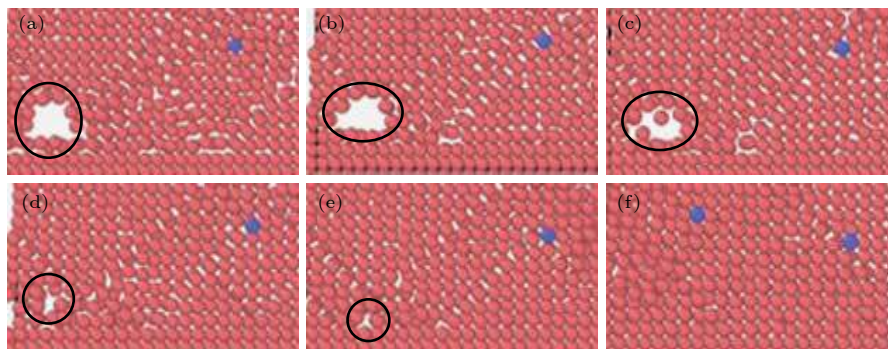


图 18 孔洞 II: 孔洞闭合演化截图 (红色代表铝原子, 蓝色代表铜原子) ε 分别为 (a) 0.1203; (b) 0.0906; (c) 0.0756; (d) 0.0606; (e) 0.0456; (f) 0.0306

Fig. 18. Void II: screenshot of the closure evolution of the void (red for aluminum atoms, blue for copper atoms), ε is (a) 0.1203; (b) 0.0906; (c) 0.0756; (d) 0.0606; (e) 0.0456; (f) 0.0306.

继续向 OTHER 转变直至几乎全部消失, OTHER 结构转化为 FCC 结构.

与孔洞 I 相比, 孔洞 II 闭合经历了 $\Delta\varepsilon = 0.0897$ 的应变, 小于孔洞 I 生长所经历的 $\Delta\varepsilon = 0.1650$ 应变, 孔洞 II 在闭合过程中闭合较快, 并且

在没有进入反向压缩阶段就已完全闭合, 孔洞 II 两侧位错向孔洞处发展, 最后又回到压杆位错状态, 这说明在卸载过程中, 位错又重新生成并沿反向演化. 但孔洞 II 与孔洞 I 在闭合过程中外形变化形式相同.

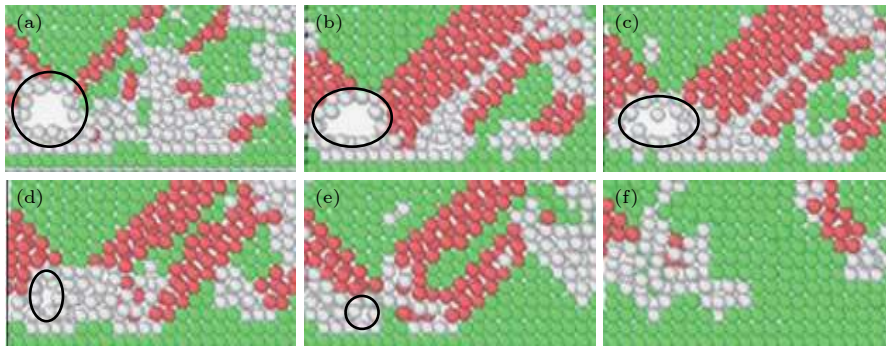


图 19 孔洞 II: 孔洞闭合演化的原子结构分析截图 (红色代表 HCP 结构, 绿色代表 FCC 结构, 白色代表 OTHER 结构) ε 分别为 (a) 0.1203; (b) 0.0906; (c) 0.0756; (d) 0.0606; (e) 0.0456; (f) 0.0306

Fig. 19. Void II: screenshot of the atomic structure of the closure evolution of the void (red for HCP structure, green for FCC structure, white for OTHER structure), ε is (a) 0.1203; (b) 0.0906; (c) 0.0756; (d) 0.0606; (e) 0.0456; (f) 0.0306.

4 结 论

本文运用分子动力学方法研究了扩散焊纳米铜/铝双层膜在循环载荷下, 孔洞的形核、长大以及闭合, 结果表明:

1) 在应变循环载荷作用下, 孔洞形核、生长以及闭合存在于不同的应变阶段, 在应变拉伸阶段孔洞形核、长大, 在应变卸载或反向加载阶段孔洞闭合. 在孔洞形核阶段, 都是在紊乱的 OTHER 结构区域内形核. 孔洞长大过程中, 外形首先沿应变加载方向拉伸长大, 然后沿与应变加载方向相垂直的方向长大, 趋向球形发展. 孔洞闭合过程中, 沿应变卸载方向收缩减小, 最后沿与应变卸载相垂直的方向闭合消失.

2) 孔洞有两种演化方式: 孔洞 I 是铜扩散到铝原子过程中引发的空隙缺陷而形核, 空隙缺陷形成空位后, 空位在铝侧 OTHER 结构内部向铜原子数相对密集的区域发生位置的移动, 当空位聚集形成孔洞时便在固定位置生长扩大; 孔洞 II 形核前主要是压杆位错被克服而引发的空隙缺陷而形核, 孔洞形核后在铝侧没有位置的移动. 与孔洞 I 相比, 孔洞 II 形核时的应力大, 形核后迅速长大, 尺寸大, 在闭合过程中孔洞闭合消失也较快.

参考文献

- [1] Morris J E (translated by Luo X B, Chen X Y) 2013 *Nanopackaging Nanotechnologies and Electronics Packaging* (Beijing: Machinery Industry Press) pp394–419 (in Chinese) [莫里斯著 (罗小兵, 陈明祥译) 2013 纳米封装: 纳米技术与电子封装 (北京: 机械工业出版社) 第394—419页]
- [2] Xie J, Wu W D, Ye C G, Huang L Z, Yuan G H 2004 *High Pow. Las. Part. Beam* **16** 607 (in Chinese) [谢军, 吴卫东, 叶成钢, 黄丽珍, 袁光辉 2004 强激光与粒子束 **16** 607]
- [3] Xie J, Wu W D, Du K, Zheng F C, Ye C G, Huang L Z, Yuan G H 2004 *Atom. Energy Sci. Technol.* **38** 120 (in Chinese) [谢军, 吴卫东, 杜凯, 郑凤成, 叶成钢, 黄丽珍, 袁光辉 2004 原子能科学技术 **38** 120]
- [4] Zhou Q, Li S, Huang P, Xu K W, Wang F, Lu T J 2016 *APL Mater.* **4** 096102
- [5] Liu H, Ke F J, Pan H, Zhou M 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 407 (in Chinese) [刘浩, 柯孚久, 潘晖, 周敏 2007 物理学报 **56** 407]
- [6] Wang C J 2017 *Heat Treat Met.* **42** 204 (in Chinese) [王长健 2017 金属热处理 **42** 204]
- [7] Zhao Y H, Li Y J, Yang Z A, Zhang G C 2006 *Chin. J. Comput. Phys.* **23** 343 (in Chinese) [赵艳红, 李英骏, 杨志安, 张广财 2006 计算物理 **23** 343]
- [8] Xu S, Guo Y F 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 196201 (in Chinese) [徐爽, 郭雅芳 2013 物理学报 **62** 196201]
- [9] Zheng H, Liu H F, Zhang G C 2004 *Comp. Mater. Sci.* **30** 230
- [10] Pang W W, Zhang G C, Xu A G, Lu G 2011 *Chin. J. Comput. Phys.* **28** 540 (in Chinese) [庞卫卫, 张广财, 许爱国, 卢果 2011 计算物理 **28** 540]
- [11] Li Y J, Wu H Q, Chen M A, Yang M, Feng T 2001 *Chin. J. Nonferrous Met.* **11** 424 (in Chinese) [李亚江, 吴会强, 陈茂爱, 杨敏, 冯涛 2001 中国有色金属学报 **11** 424]
- [12] Bai L 2012 *Hot Work. Technol.* **41** 167 (in Chinese) [白莉 2012 热加工工艺 **41** 167]
- [13] Li X B, Zu G Y, Wang P 2015 *Trans. Nonferrous Met. Soc. China* **25** 36
- [14] Lu W K, Xie J P, Wang A Q, Li J W, Zhang Y D 2014 *Mater. Mech. Eng.* **38** 14 (in Chinese) [路王珂, 谢敬佩, 王爱琴, 李继文, 张银娣 2014 机械工程材料 **38** 14]
- [15] Wang B, Zhang H T, Zhu X M, Wang Y F, Jin W, He P 2018 *Chin. J. Mech. Eng.* **54** 95 (in Chinese) [王波, 张洪涛, 朱训明, 王云峰, 金伟, 何鹏 2018 机械工程学报 **54** 95]
- [16] Cheng C, Chen S D, Wu Y Z, Huang H X 2015 *J. Mater. Eng.* **43** 60 (in Chinese) [成聪, 陈尚达, 吴勇芝, 黄鸿翔 2015 材料工程 **43** 60]
- [17] Wang Y C, Liang F, Tan H F, Zhang B, Zhang G P 2018 *Mater. Sci. Eng. A* **714** 43
- [18] Qi M L 2006 *Ph. D. Dissertation* (Wuhan: Wuhan University of Technology) (in Chinese) [祁美兰 2006 博士学位论文 (武汉: 武汉理工大学)]
- [19] Ren X X 2015 *M. S. Thesis* (Wuhan: Wuhan University of Technology) (in Chinese) [冉小霞 2015 硕士学位论文 (武汉: 武汉理工大学)]

- [20] Xu B, Sun M Y, Li D Z 2012 *Acta Metall. Sin.* **48** 1194 (in Chinese) [徐斌, 孙明月, 李殿中 2012 金属学报 **48** 1194]
- [21] Liu H W 2010 *M. S. Thesis* (Ningbo: Ningbo University) (in Chinese) [刘宏伟 2010 硕士学位论文 (宁波: 宁波大学)]
- [22] Avinash M D, Arunachalam M R, Bruce L, Mohammed A Z, Donald W B 2009 *Phys. Rev. B* **80** 104108
- [23] Pang W W, Zhang P, Zhang G C, Xu A G, Zhao X G 2012 *Sci. China* **42** 464 (in Chinese) [庞卫卫, 张平, 张广财, 许爱国, 赵宪庚 2012 中国科学 **42** 464]
- [24] Belak J 1998 *J. Comput. Aided Mater. Des.* **5** 193
- [25] Sirirat T, Eduardo M B, David J B, Marc A M 2008 *Acta Mater.* **56** 3874
- [26] Zhang N, Yang X H, Chen C Y 2010 *Chin. J. Comput. Mech.* **27** 330 (in Chinese) [张宁, 杨新华, 陈传尧 2010 计算力学学报 **27** 330]
- [27] Sinar A, Voigt H L, Wirth B D 2011 *Comp. Mater. Sci.* **50** 1811
- [28] Hu X Y, Xu J G, Yan X X 2012 *Ordn. Mater. Sci. Eng.* **35** 52 (in Chinese) [胡晓燕, 徐建刚, 闫新兴 2012 兵器材料科学与工程 **35** 52]
- [29] Liang H, Li M S 2019 *Chin. J. Comput. Phys.* **36** 211 (in Chinese) [梁华, 李茂生 2019 计算物理 **36** 211]
- [30] Fang Z, Liu X B, Xu Q J 2018 *Machinery Design & Manufacture* **32** (in Chinese) [方洲, 刘晓波, 徐庆军 2018 机械设计与制造 **32**]
- [31] Yang X H, Zhou T, Chen C Y 2007 *Comp. Mater. Sci.* **40** 51
- [32] Guo Q N, Cao Y G, Sun Q, Liu Z X, Jia Y, Huo Y P 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 107103 (in Chinese) [郭巧能, 曹义刚, 孙强, 刘忠侠, 贾瑜, 霍裕平 2013 物理学报 **62** 107103]
- [33] Zhang Y J 2003 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: University of Science & Technology Beijing) (in Chinese) [张永军 2003 博士学位论文 (北京: 北京科技大学)]
- [34] Cai J, Ye Y Y 1996 *Phys. Rev. B* **54** 8398
- [35] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [36] Han X J 2018 *M. S. Thesis* (Zhenzhou: Zhengzhou University) (in Chinese) [韩雪杰 2018 硕士学位论文 (郑州: 郑州大学)]
- [37] Evans D J, Holian B L 1985 *J. Chem. Phys.* **83** 4069
- [38] Stukowski A 2010 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [39] Zhang B C 1993 *Nonferrous metals and their heat treatment* (Xi'an: Northwest Polytechnic University Press) pp128–145 (in Chinese) [张宝昌 1993 有色金属及其热处理 (西安: 西北工业大学出版社) 第128—145页]
- [40] Ma H H 2008 *M. S. Thesis* (Shenyang: Shenyang University of Technology) (in Chinese) [马欢欢 2008 硕士学位论文 (沈阳: 沈阳工业大学)]
- [41] Xu Z H, Yuan L, Shan D B, Guo B 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4835 (in Chinese) [徐振海, 袁林, 单德彬, 郭斌 2009 物理学报 **58** 4835]
- [42] Yang Z 2017 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: General Research Institute for Nonferrous Metals) (in Chinese) [杨振 2017 博士学位论文 (北京: 北京有色金属研究总院)]
- [43] Du W J, Xie M, Pu C J, Chen Y T, Yang Y F, Zhang J M, Liu M M, Hu J Q, Wang S B 2013 *T. Mater. Heat Treat.* **33** 14 (in Chinese) [杜文佳, 谢明, 溥存继, 陈永泰, 杨云峰, 张吉明, 刘满门, 胡洁琼, 王塞北 2013 材料热处理学报 **33** 14]
- [44] Wang J H, Zheng J P, Liu J C, Huang D H 2006 *Mechanical Behavior of Materials 1* (Tianjin: Tianjin University Press) pp13–40 (in Chinese) [王吉会, 郑俊萍, 刘家臣, 黄定海 2006 材料力学性能 1 (天津: 天津大学出版社) 第13—40页]
- [45] Li Y H, Tan W, Zhang N, Wang Y, Deng Z Y 2008 *J. Shenyang Ligong Univ.* **27** 64 (in Chinese) [李永华, 檀雯, 张宁, 王勇, 邓子玉 2008 沈阳理工大学学报 **27** 64]
- [46] Guo Q N, Yue X D, Yang S E, Huo Y P 2010 *Comp. Mater. Sci.* **50** 319
- [47] Ohkubo H, Shimomura Y, Mukouda I, Sugio K, Kiritani M 2003 *Mater. Sci. Eng. A* **350** 30
- [48] Yang B, Zheng B L, Hu X J, He P F, Yue Z F 2016 *Acta Metall. Sin.* **52** 129 (in Chinese) [杨彪, 郑百林, 胡兴健, 贺鹏飞, 岳珠峰 2016 金属学报 **52** 129]

Molecular dynamics simulation of void nucleation, growth and closure of nano-Cu/Al films under cyclic loading*

Liu Qiang¹⁾ Guo Qiao-Neng^{1)†} Qian Xiang-Fei¹⁾ Wang Hai-Ning²⁾
Guo Rui-Lin²⁾ Xiao Zhi-Jie²⁾ Pei Hai-Jiao¹⁾

1) (*School of Physical Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China*)

2) (*International College, Zhengzhou university, Zhengzhou 450001, China*)

(Received 25 October 2018; revised manuscript received 4 May 2019)

Abstract

In this paper, molecular dynamics method is used to simulate the evolution mechanism of void nucleation, growth and closure of diffusion-welded copper/aluminum bilayer film under cyclic loading condition with a strain-to-width ratio of $R = -1$. It is found that under cyclic loading condition, the voids mainly nucleate inside the aluminum side of the copper/aluminum bilayer film, and two kinds of evolution modes of voids I and II are found. The void I nucleates at the position of the gap defect produced by the Kirkendall effect when the copper-aluminum diffuses to form the bilayer film. Under this nucleation mode, after the gap defects have become void, the void moves into the area where copper atoms are relatively dense inside the OTHER structure on the aluminum side. When gaps accumulate to form voids, the voids grow at a fixed position. The void II on the aluminum side nucleates at the position of the gap defect formed by overcoming the stair-rod dislocation and then remains motionless in the process of nucleation, growth and closure. Comparing with the void I, the stress corresponding to the nucleation of void II is large, the growth speed of the void II is fast and the size of the void II is slightly large in the process of strain loading. The void II closure speed is also faster in the strain unloading stage. The two kinds of voids have two common characteristics in the process of nucleation, growth and closure. 1) Both kinds of voids nucleate at the position of the gap defect inside OTHER structure on the aluminum side. 2) In the process of voids growth and closure, both kinds of voids have the same shape changes. In the void growth stage, both kinds of voids first grow along the strain loading direction, then expand in the direction perpendicular to the strain loading direction, and finally, the shapes of two kinds of voids tend to become spherical. In the stage of void closure, the two kinds of voids are first compressed into ellipsoidal shape along the strain loading direction, and then disappear from both ends of the void to the center of the void in the direction perpendicular to the strain loading direction. In the subsequent cyclic loading process, none of new voids appears again at the position where the voids disappeared, but the nucleation of voids at other position of gap defect forms inside the other structure located on the aluminum side.

Keywords: molecular dynamics, Cu/Al film, cyclic load, void

PACS: 31.15.xv, 66.30.J-, 91.60.Ed, 62.25.-g

DOI: 10.7498/aps.68.20181901

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11372283), the Foundation of Henan Educational Committee of China (Grant No. 13A140674), and the Research Foundation of the Higher Education Institutions of Henan Province of China (Grant No. 17A430001).

† Corresponding author. E-mail: gqiaoneng@163.com