



采用分子动力学模拟浇铸三层膜铜/铝/铜 循环载荷下的孔洞演化

裴海蛟, 郭巧能, 杨仕娥, 周恒持, 蔡 能, 郑永胜

(郑州大学 物理学院(微电子学院), 郑州 450052)

摘 要: 采用分子动力学模拟浇铸法制备的铜/铝/铜三层膜在循环载荷作用下的变形过程, 分析孔洞的演化机理。结果表明: 铝薄膜的中部和界面处靠近铝侧出现孔洞。铝薄膜中部的孔洞演化为: 压杆位错被克服, 出现空隙; 形核处新产生的压杆位错被克服, 空隙长大。数次发射位错环, 空位团长大形成孔洞; 孔洞形核附近退孪晶形成层错, 应力释放, 孔洞长大; 应力集中、释放使得层错消失、出现, 孔洞进一步长大; 孔洞形核附近的层错发生交截, 且在形核处发射位错, 使得孔洞长到最大。压缩力下, 孔洞被无序结构原子填充, 沿应变加载方向缩小。无序结构原子填充孔洞, 孔洞闭合。界面处靠近铝侧孔洞的演化为: 压杆位错被克服, 出现空隙。应变增加, HCP 结构的原子转换为无序结构的原子, 空隙沿应变加载方向长大, 形成孔洞。随着加载的进行, 层错出现, 应力释放, 孔洞随之增大。随着应变的继续增加, 孔洞沿应变加载方向缩小, 无序结构原子填充孔洞; 周围无序结构原子转化为 FCC 结构原子, 孔洞闭合。

关键词: 分子动力学; 铜/铝/铜三层膜; 循环载荷; 孔洞

文章编号: 1004-0609(2021)-09-2475-15

中图分类号: TB383.2

文献标志码: A

引文格式: 裴海蛟, 郭巧能, 杨仕娥, 等. 采用分子动力学模拟浇铸三层膜铜/铝/铜循环载荷下的孔洞演化[J]. 中国有色金属学报, 2021, 31(9): 2475–2489. DOI: 10.11817/j.ysxb.1004.0609.2021-36678

PEI Hai-jiao, GUO Qiao-neng, YANG Shi-e, et al. Void evolution of casting Cu/Al/Cu three-layer film by molecular dynamics simulation under cyclic loading[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2021, 31(9): 2475–2489. DOI: 10.11817/j.ysxb.1004.0609.2021-36678

纳米薄膜材料的力学、电学、光学、热学等性能都表现出良好的特异性, 可用于制备各种高密度磁记录介质、集成电路元器件、半导体器件以及各种涂层^[1–6]等。薄膜技术的发展, 为系统的微元化提供了最有效的手段^[7]。多层膜材料具有整体材料和任何单一组分薄膜难以达到的各种特殊性能, 能满足各种特殊应用需求, 近年来这方面研究引起了人们的极大关注, 成为薄膜材料的研究热点之一^[8]。然而材料在服役过程中, 其承受的循环载荷在达到极限时, 将会发生疲劳失效和断裂, 给工业生产带来很大损失, 最重要的原因就是没有及早的发现材料在工作中的损伤情况^[9], 因其具有突发性和隐蔽

性, 难以被准确预测, 常带来重大的安全隐患。疲劳失效的裂纹往往萌生于孔洞处, 并在孔洞处有较大的裂纹扩展速率^[10]。孔洞的成核、生长及合并已经普遍被认为是塑性材料延展性破坏的主要原因, 也是材料强度的决定因素^[11]。由于时间尺度和空间尺度的限制, 利用理论模拟可获得许多无法用实验方法得到的微观机制。通过分子动力学或其他模拟方法研究材料的变形行为, 可以在原子尺度上直接追踪材料的动态力学响应行为, 有助于人们深入理解纳米材料的微观结构与性能之间的关系^[12–13]。

郭巧能等^[14]采用分子动力学方法模拟了温度对超薄铜膜疲劳性能的影响, 结果表明, 铜薄膜疲

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11372283)

收稿日期: 2021-02-25; **修订日期:** 2021-07-13

通信作者: 郭巧能, 教授, 博士; 电话: 15136275356; E-mail: gqiaoneng@163.com

劳损伤进化过程为：空位聚集-空隙形成-裂纹萌生-断裂。LIU 等^[15]用分子动力学模拟研究冲击载荷铜薄膜的疲劳行为和表面损伤，结果表明，纳米冲击疲劳损伤的破坏过程分为三个阶段：塑性变形阶段、疲劳阶段、严重断裂和疲劳重复阶段。在疲劳阶段，压痕深度值会突然下降，其转折点是薄膜的疲劳寿命。刘强等^[16]采用分子动力学方法模拟研究铜/铝双层薄膜在循环载荷下的薄膜内部孔洞演化，结果表明，孔洞主要在铜/铝双层膜的铝内部形核，且孔洞有两种形核方式，分别是柯肯达尔效应和压杆位错被克服产生空隙。ZHOU 等^[17]发现相对于单层铜薄膜和铝薄膜，Cu/Al 多层膜具有非常高的硬度，利用分子动力学模拟，他们证明了铜/铝界面附近的混合对于稳定铜层和铝层的层错是非常重要的，层间混合产生的高强度与一般认为只有尖锐的界面结构才能强化多层膜形成鲜明对比。TIAN 等^[18]采用分子动力学方法研究了半共格{111}铜铝多层膜的冲击响应和层裂行为，结果表明，韧性损伤只发生在铝层，在铜层中不发生。YIN 等^[19]用分子动力学模拟研究 Cu/Al 多层膜在压缩过程中高应变率加载下的界面演化特征和变形机理，结果表明，随着应变率的增加，屈服强度和延性略有增加，在所有应变率加载下，应力-应变曲线均呈现两个主要屈服点。

目前，对铜铝多层膜疲劳性能的研究较少。因此，本文采用分子动力学方法研究了浇铸法制备的铜/铝/铜三层膜在循环载荷的条件下，材料内部孔洞缺陷的演化。

1 模拟方法

图 1 所示为铜/铝/铜三层膜初始原子构型上、下层为单晶铜原子，中间层为单晶铝原子，接触面为理想的(001)面，其中模型尺寸由 $28a_1 \times 28a_1 \times 28a_1 \times 2$ 和 $\times 25a_2 \times 25a_2 \times 99a_2$ 组成(铜的晶格常数 $a_1=0.3615$ nm, 铝的晶格常数 $a_2=0.405$ nm), 共 423116 个原子[100]、[010]、[001]晶向分别对应 X、Y、Z 轴。模型在 X、Y 轴采用周期性边界条件，Z 轴采用自由边界条件。铜的上下表面分别固定 3 层原子，用以施加应变加载。原子的运动轨迹遵从牛顿运动定理，运动方程的数值求解采用 Verlet 法，

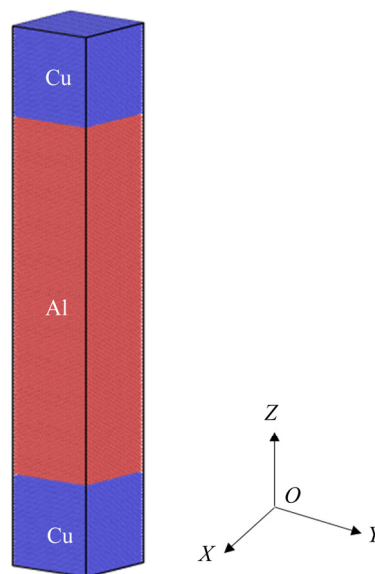


图 1 铜/铝/铜三层膜模型

Fig. 1 Cu/Al/Cu three-layer film model (Cu atoms in blue, Al atoms in red)

时间步长为 2 fs，模拟压强始终为一个大气压。

本文采用 CAI 等^[20]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 Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator(LAMMPS)^[21]中模拟计算。将模型置于 1 K 下，运行 40 ps，让系统进行充分弛豫，使原子处于平衡状态。接着，铜原子升温至 673 K，保温一段时间。之后，铝原子升温至 1013 K。然后，让铝液和固态铜原子接触浇铸 0.5 ns。最后，对模型降温至 300 K，运用 Nose/Hoover 热浴法^[22]在 300 K 下对模型进行保温。与实验进行对比，根据刘文川等^[23]的金属铸造生产经验公式(1)，代入壁厚等参数后，得到平板型铝合金通用浇铸时间公式：

$$t_A = \left[\sqrt{m} + \sqrt[3]{3\delta \cdot m} \cdot \left(\frac{2}{3} \right)^{n-1} \right] \quad (1)$$

式中： t_A 为浇铸有效时间，s； m 为铸件质量，kg； δ 为铸件壁厚，mm； n 为平板件数； m 所示为 Cu 层和 Al 层薄膜的质量和为 1.9738×10^{-20} kg；壁厚 δ 是 Cu 层薄膜的厚度为 1×10^{-8} m， $n=3$ ，代入并计算得 $t_A=0.5$ ns。本文选取的浇铸时间与实验公式计算出的结果一致，表明此模型的计算结果具有实际意义。

以应变幅比 $R=-1$ 对初始模型沿 Z 轴方向进行循环加载。在加载过程中, 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, 最后卸载至应变为 0 时, 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 $9.375 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ 。进行多次循环, 研究孔洞的形核、生长以及闭合的微观结构和变形机理, 最后应用 OVITO 可视软件进行具体的视图分析。

2 结果分析

图 2 所示为浇铸过程中 Cu、Al 原子扩散图。当 Al 液与固态 Cu 原子浇铸 0.5 ns 后, Cu 原子和 Al 原子相互扩散, 界面消失, 如图 2(a)所示; 此时模型中存在大量的无序结构原子, 如图 2(d)所示。当模型降温至 300 K 时, 界面处 Cu 原子和 Al 原子相互扩散增多, 如图 2(b)所示; 大量无序结构原子转换为 FCC 结构原子, Al 薄膜中形成层错, 应力释放, 在界面处仍然有较多无序结构原子, 如图 2(e)所示。在 300 K 保温一段时间后浇铸完成, 此时 Cu 原子和 Al 原子进一步相互扩散, 如图 2(c)所示; 无

序结构原子继续转换为 FCC 结构原子, Al 薄膜中形成层错增多, 应力进一步释放, 如图 2(f)所示。

对铜/铝/铜三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。图 3 所示为循环加载的应力-时间曲线。在应力 $\sigma_1=1.61393 \text{ GPa}$, 应变 $\varepsilon=8.07\%$ 时, 在铝薄膜的中部出现孔洞, 如图 4(a)所示, 形核处出现无序结构原子, 表明孔洞形核处出现位错。在应力 $\sigma_2=0.82868 \text{ GPa}$, 应变 $\varepsilon=3.78\%$ 时, 在界面处靠近铝侧出现孔洞, 如图 4(b)所示, 孔洞形核处出现无序结构原子和少量的 HCP 结构原子。

2.1 铝薄膜中部孔洞的形核

随着应变的加载, 第二次应变循环加载到应力 $\sigma_1=1.61393 \text{ GPa}$, 应变 $\varepsilon=8.07\%$ 时, 位错之间发生反应, 如式(2)和式(3)所示。Shockley 位错反应分别生成压杆位错, 如图 5 所示。接着, 压杆位错被克服, 出现空隙^[24]。

$$\frac{1}{6}[12\bar{1}] + \frac{1}{6}[\bar{2}\bar{1}1] \rightarrow \frac{1}{6}[\bar{1}10] \quad (2)$$

$$\frac{1}{6}[\bar{2}\bar{1}1] + \frac{1}{6}[211] \rightarrow \frac{1}{3}[001] \quad (3)$$

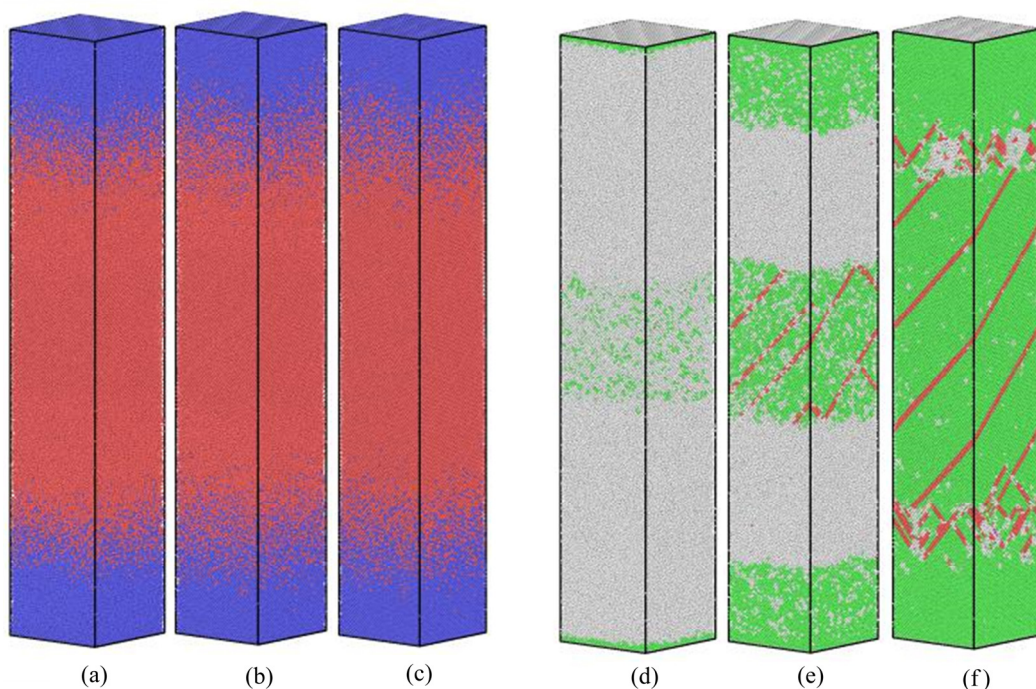


图 2 浇铸过程中 Cu、Al 原子的扩散图

Fig. 2 Diffusion diagram of Cu, Al atoms during casting: (a), (d) After casting 0.5 ns ; (b), (e) After cooling; (c), (f) After casting (Red represents Al atoms, blue represents Cu atoms; Atoms structure at same status presented in Fig. (d)–(f), red represents HCP structure atoms, green represents FCC structure atoms, and white represents other structure atoms)

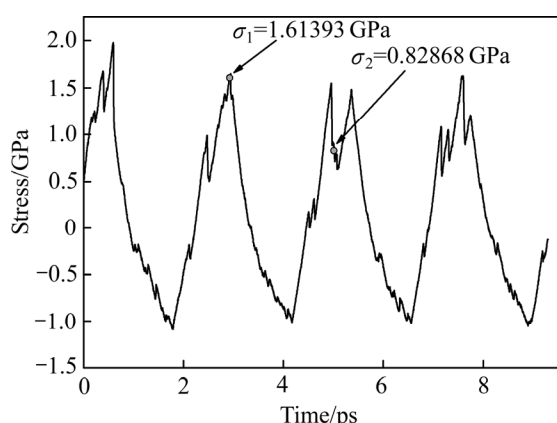


图3 铜/铝/铜三层膜在循环载荷作用下应力-时间曲线
Fig. 3 Stress-time curve of Cu/Al/Cu three-layer film under cyclic loading

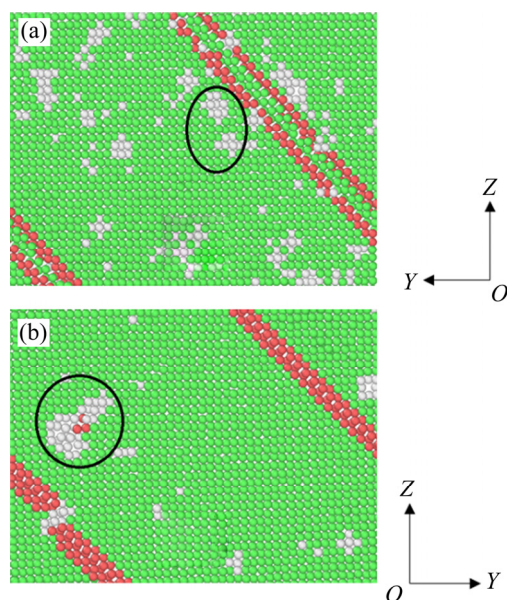


图4 $\varepsilon=8.07\%$ 时铝薄膜中部形核处原子和 $\varepsilon=3.78\%$ 时界面处靠近铝侧孔洞形核处原子结构图

Fig. 4 Screenshots of void nucleation evolution on middle of Al film at $\varepsilon=8.07\%$ (a) and on interface near Al side at $\varepsilon=3.78\%$ (b) (Red represents HCP structure atoms; green represents FCC structure atoms; white represents other structure atoms)

图6和7所示分别为铝薄膜中部形核演化的原子成分图和原子结构图。这些图是沿[100]晶向截取孔洞附近三层原子厚度的局部图。当应变 $\varepsilon=8.37\%$ 时,形成两个压杆位错,如图8所示。当应变 $\varepsilon=8.4\%$ 时,压杆位错被克服,应力得到释放形成层错,使得空位团长大,如图6(a)和图7(a)所示。这与何安民等^[25]对单晶 Cu(001)薄膜塑性变形的分子动力学

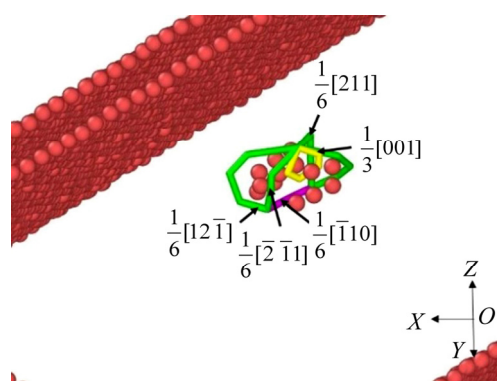


图5 $\varepsilon=8.07\%$ 时铝薄膜的中部孔洞形核处局部位错截图
Fig. 5 Local dislocation screenshot in void nucleation at middle of Al film at $\varepsilon=8.07\%$ (Red atoms is HCP structure atoms; purple is Stair-rod dislocation, yellow is Hirth dislocation; green is Shockley dislocation; dark red is other dislocation)

模拟结果一致,该研究表明:当材料内部形成大量堆积层错及孪晶后,仍然承受一定残余应力,为释放这些应力,新生成的孪晶密排面上的原子也发生滑移,形成层错。

继续拉伸,空隙沿应变加载方向长大,这个阶段孔洞周围原子结构基本没有发生变化(见图6(b)、(c)和图7(b)、(c))。应变继续增加,伴随着 Shockley 位错的滑移,层错中部分 HCP 结构原子转化为 FCC 结构原子,当 $\varepsilon=8.7\%$ 时,孔洞周围的层错形成孪晶,如图9所示。

继续加载,孔洞形核位置处发射位错环。随着应变卸载的进行,位错环多次出现又消失,再次出现时位错环有两种变化情况:一种是直接转换为另一种位错环,另一种情况是位错环发生转动。图10和11所示分别为形核位置处位错环演化的原子成分图和原子结构图。这些图是沿[100]晶向截取的局部图,为将位错环完全显示出来,在这里截取厚度取为9层原子。

当 $\varepsilon=8.94\%$ 时,孔洞形核位置处发射 Shockley 位错环,共格孪晶界之间空位坍塌,其原因是空位的形成引起晶格畸变,破坏了原子键,造成崩塌^[26],共格孪晶界之间的空位聚集在一起形成 Shockley 位错环,如图10(a)所示,这与 WU 等^[27]的结论相似。随着应变卸载的增加,Shockley 位错环和无序位错环之间发生互相转换,如图10(b)~(e)所示。位

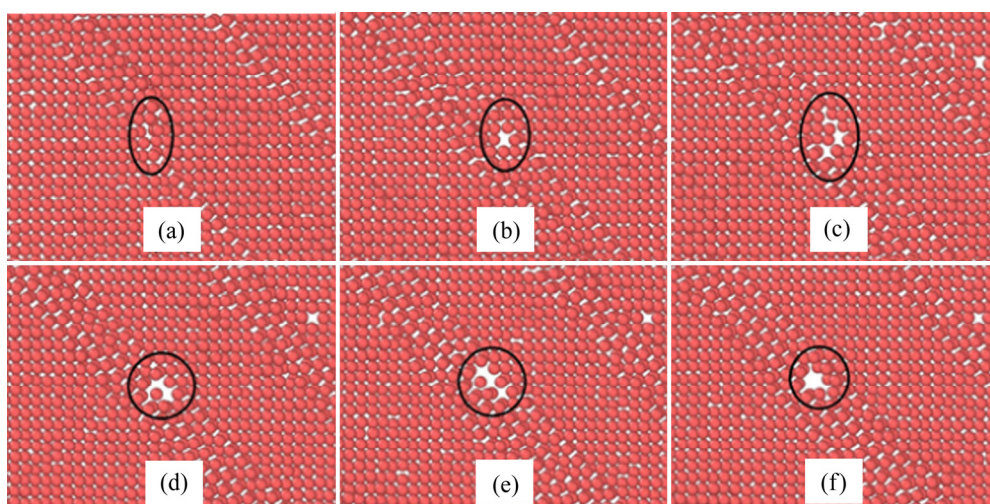


图 6 铝薄膜中部孔洞形核的演化截图

Fig. 6 Screenshots of void nucleation evolution at middle of Al film (Red represents Al atoms): (a) $\varepsilon=8.4\%$; (b) $\varepsilon=8.43\%$; (c) $\varepsilon=8.46\%$; (d) $\varepsilon=7.44\%$; (e) $\varepsilon=5.88\%$; (f) $\varepsilon=5.52\%$

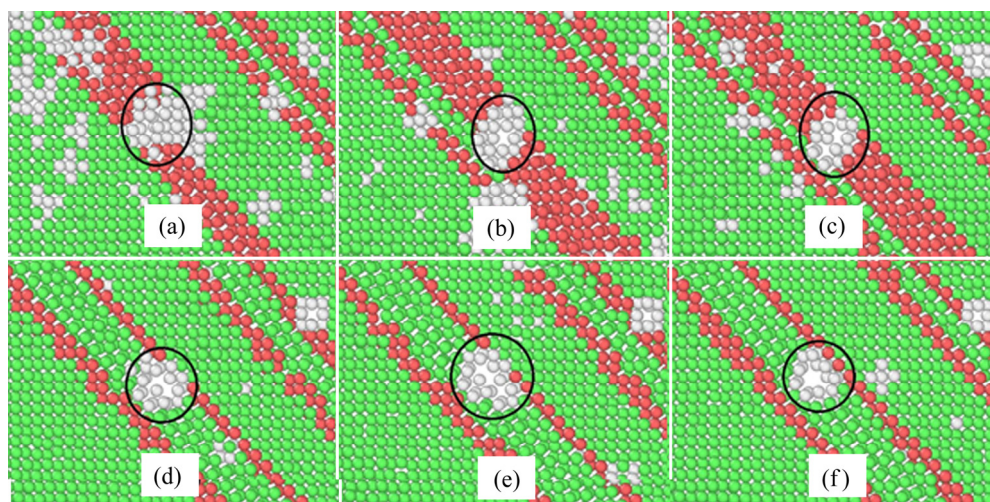


图 7 铝薄膜中部孔洞形核的演化原子结构截图

Fig. 7 Screenshots of atoms structure of void nucleation evolution at middle of Al film (Red represents HCP structure atoms, green represents FCC structure atoms, and white represents other structure atoms): (a) $\varepsilon=8.4\%$; (b) $\varepsilon=8.43\%$; (c) $\varepsilon=8.46\%$; (d) $\varepsilon=7.44\%$; (e) $\varepsilon=5.88\%$; (f) $\varepsilon=5.52\%$

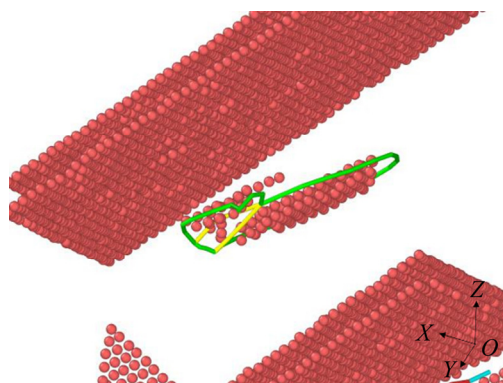
图 8 $\varepsilon=8.37\%$ 时铝薄膜中部孔洞形核处的局部位错截图

Fig. 8 Local dislocation screenshot in void nucleation at middle of Al film at $\varepsilon=8.37\%$ (red atoms is HCP structure atoms, yellow is Hirth dislocation, green is Shockley dislocation, and dark red is Other dislocation)

错环附近无序结构原子转化为 FCC 结构的原子如图 11(b)~(d), FCC 结构原子和 HCP 结构原子转为无序结构原子, 如图 11(d)和(e)。当 $\varepsilon=8.19\%$ 时, Shockley 位错环发生转动, 如图 10(f)~(h)。位错环与孔洞之间的距离发生变化, 距离较近时, 使得孔洞长大减弱^[28]。位错环附近 FCC 结构原子转变为无序结构原子, 无序结构转换为 HCP 结构原子, 如图 11(f)~(g)所示。无序结构原子转换为 FCC 结构原子, 如图 11(g)和(h)所示。当 $\varepsilon=6.42\%$ 时, 压杆位错环和无序位错环互相转化如图 10(i)~(k)。接着, 有形成层错四面体的趋势, 但由于铝的层错能较高, 最后没有形成层错四面体, 如图 10(l)和(m)

所示。在此过程中,位错环周围原子结构基本没有变化,如图 11(l)和(m)所示;当 $\varepsilon=6.03\%$ 时,Shockley 位错环和压杆位错环互相转换,如图 10(n)~(p)所示,位错环附近 HCP 结构的原子转换为无序结构的原子,如图 11(n)~(p)所示。之后,Shockley 位错环消失,形核位置处没有出现过位错环。可以观察到通过发射位错环使得空位团长大形成孔洞,如图 6(d)~(f)所示。庞卫卫等^[29]研究也证实了这一点,对

于有微孔洞的晶体,孔洞都是通过发射位错环而长大的。

图 12 所示为位错环演化过程时孔洞形核位置处的应力-时间曲线,图 12 中(a)~(p)所示为分别对应图 10 中的(a)~(p)。由图 12 可知,形核处的应力不断集中又释放。位错环出现时,应力大部分处于下降状态,也就是说通过形成位错环可以释放应力。只有在即将形成孔洞时,位错环对应的应力处

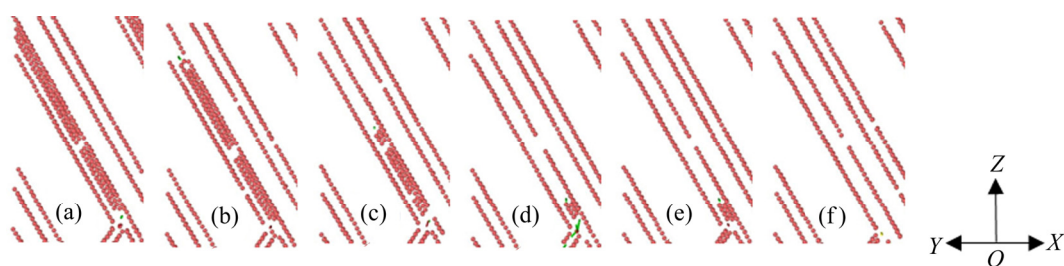


图 9 铝薄膜中部孔洞形核处孪晶形成的位错截图

Fig. 9 Screenshots of dislocation of twin formation in void nucleation at middle of Al film (Red atoms is HCP structure atoms, green is Shockley dislocation): (a) $\varepsilon=8.61\%$; (b) $\varepsilon=8.64\%$; (c) $\varepsilon=8.67\%$; (d) $\varepsilon=8.7\%$; (e) $\varepsilon=8.73\%$; (f) $\varepsilon=8.76\%$

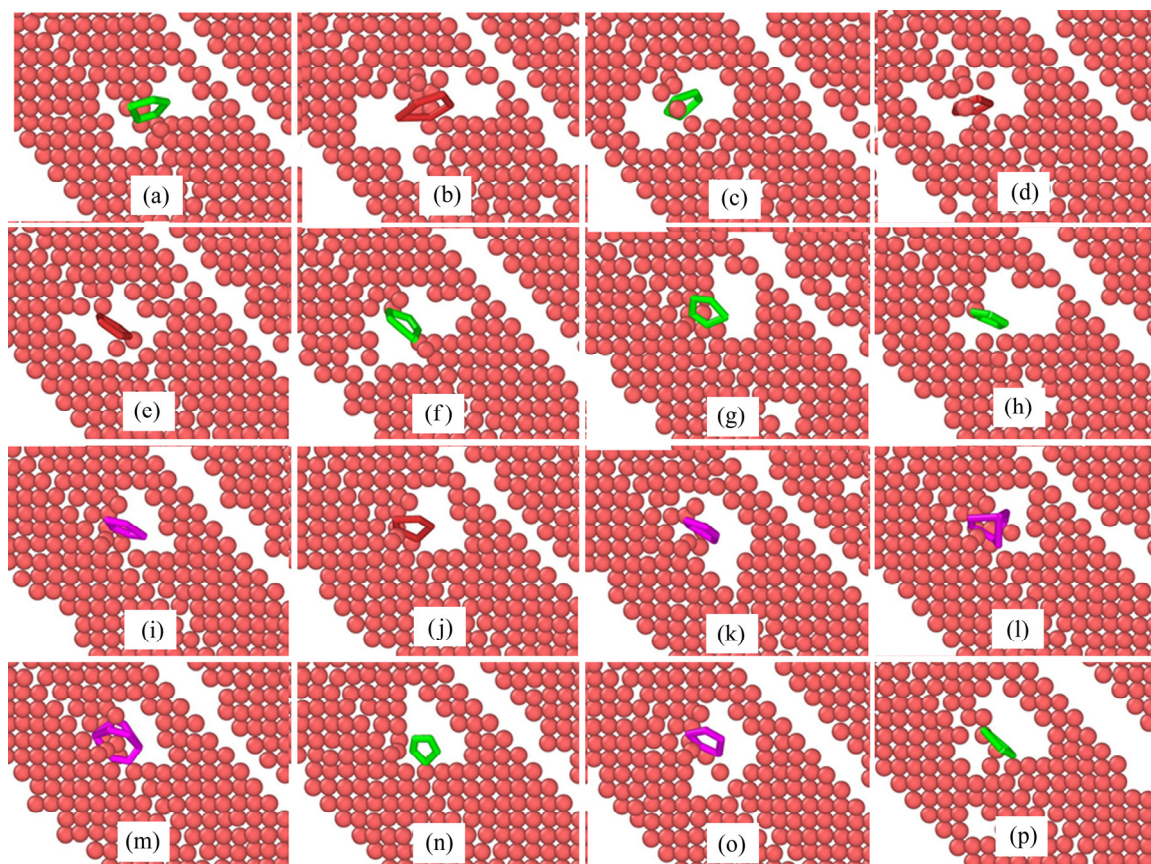


图 10 铝薄膜的中部孔洞形核处位错环演化截图

Fig. 10 Screenshots of dislocation loop evolution in void nucleation at middle of Al film (Red atoms is HCP structure atoms, purple is Stair-rod dislocation, yellow is Hirth dislocation, green is Shockley dislocation and dark red is Other dislocation): (a) $\varepsilon=8.94\%$; (b) $\varepsilon=8.88\%$; (c) $\varepsilon=8.55\%$; (d) $\varepsilon=8.52\%$; (e) $\varepsilon=8.37\%$; (f) $\varepsilon=8.19\%$; (g) $\varepsilon=6.75\%$; (h) $\varepsilon=6.48\%$; (i) $\varepsilon=6.42\%$; (j) $\varepsilon=6.36\%$; (k) $\varepsilon=6.33\%$; (l) $\varepsilon=6.27\%$; (m) $\varepsilon=6.24\%$; (n) $\varepsilon=6.03\%$; (o) $\varepsilon=5.91\%$; (p) $\varepsilon=5.55\%$

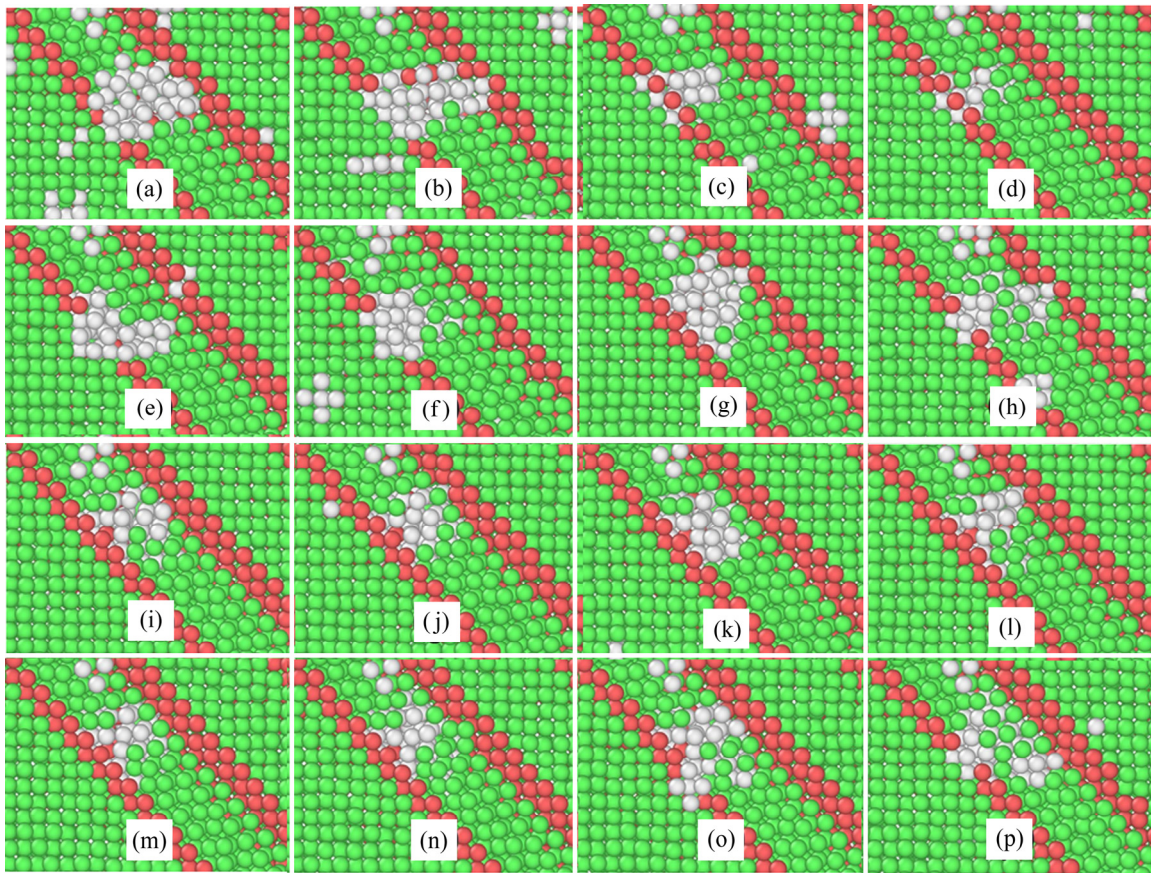


图 11 铝薄膜中部孔洞形核处位错环演化的原子结构截图

Fig. 11 Screenshots of atoms structure of dislocation loop evolution in void nucleation at middle of Al film (Red represents HCP structure atoms, green represents FCC structure atoms, and white represents other structure atoms): (a) $\varepsilon=8.94\%$; (b) $\varepsilon=8.88\%$; (c) $\varepsilon=8.55\%$; (d) $\varepsilon=8.52\%$; (e) $\varepsilon=8.37\%$; (f) $\varepsilon=8.19\%$; (g) $\varepsilon=6.75\%$; (h) $\varepsilon=6.48\%$; (i) $\varepsilon=6.42\%$; (j) $\varepsilon=6.36\%$; (k) $\varepsilon=6.33\%$; (l) $\varepsilon=6.27\%$; (m) $\varepsilon=6.24\%$; (n) $\varepsilon=6.03\%$; (o) $\varepsilon=5.91\%$; (p) $\varepsilon=5.55\%$

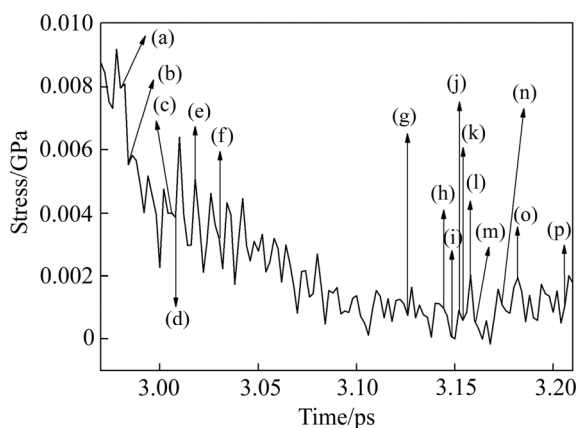


图 12 铝薄膜中部孔洞形核处位错环演化的应力-时间曲线

Fig. 12 Stress-time curve of dislocation loop evolution in void nucleation at middle of Al film: (a) $\varepsilon=8.94\%$; (b) $\varepsilon=8.88\%$; (c) $\varepsilon=8.55\%$; (d) $\varepsilon=8.52\%$; (e) $\varepsilon=8.37\%$; (f) $\varepsilon=8.19\%$; (g) $\varepsilon=6.75\%$; (h) $\varepsilon=6.48\%$; (i) $\varepsilon=6.42\%$; (j) $\varepsilon=6.36\%$; (k) $\varepsilon=6.33\%$; (l) $\varepsilon=6.27\%$; (m) $\varepsilon=6.24\%$; (n) $\varepsilon=6.03\%$; (o) $\varepsilon=5.91\%$; (p) $\varepsilon=5.55\%$

于较高位置。在 $\varepsilon=8.37\%$ 和 $\varepsilon=6.36\%$ 处即出现图 10(e) 和 (j) 的无序位错环时, 应力较高。OVITO 分析位错时将柏氏矢量不属于任何类的位错定义为无序位错, 因此, 无序位错环不一定符合这个性质。在 $\varepsilon=6.27\%$, 即图 10(l) 时趋于形成层错四面体, 而形成层错四面体需要较高的应力^[30], 所以此时应力处于较高状态。孔洞形核处发射位错环时, 能量整体呈下降趋势, 与应力整体下降的趋势相对应, 如图 13 所示。

总之, 孔洞形核处压杆位错被克服, 产生空隙。接着, 两个压杆位错被克服, 使得空隙进一步长大。最后, 在孔洞形核处数次发射位错环, 空位团长大形成孔洞。

2.2 铝薄膜中部孔洞的生长

图 14 和 15 所示分别为铝薄膜的中部孔洞生长

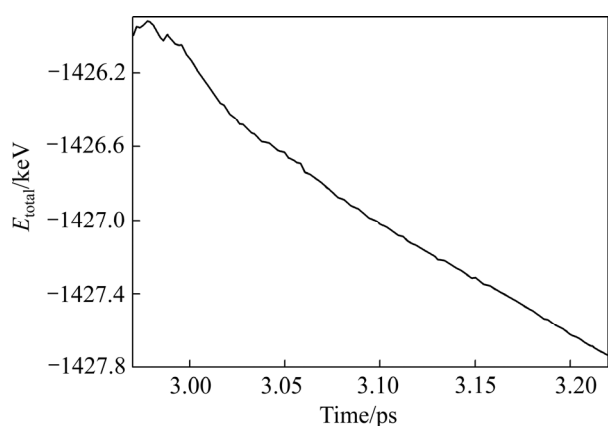


图 13 铝薄膜中部孔洞形核处位错环演化的能量-时间曲线

Fig. 13 Energy-time curve of dislocation loop evolution in void nucleation at middle of Al film

演化的原子成分图和原子结构图, 这些图是沿[100]晶向截取孔洞附近3层原子厚度的局部图。随着应变卸载的进行, 孔洞沿加载方向长大。在这个过程中, 发生退孪晶现象, 形成层错, 如图 14(a)、(b)和图 15(a)、(b)所示。退孪晶时, Shockley 位错在孪晶界上产生台阶, 台阶随时间不断滑移到表面上消失, 最后形成层错, 如图 16(a)~(e)所示。这与实验上 LI 等^[31]对纯铝原位拉伸高分辨电镜研究的结果一致, 文献[31]表明: 由于铝的层错能较高, 孪晶界平面上退孪晶部分位错滑动的 Peierls-Nabarro 力较低, 可以自发退孪晶。应力释放使得孔洞长得更大^[32]。当 $\varepsilon = -0.69\%$ 时, Shockley 位错滑移使得层

错消失^[33]。

随着应变反向压缩的进行, 孔洞大小基本不变。当 $\varepsilon = -5.76\%$ 时, 应力集中又释放使得层错再次出现, 孔洞长大, 如图 14(c)和 15(c)所示。 $\varepsilon = -7.56\%$ 时, 层错消失。当 $\varepsilon = -7.65\%$ 时, 层错出现, 孔洞形状垂直应变加载的方向, 如图 14(d)和 15(d)所示。随着应变加载的进行, 孔洞略有增大, 当 $\varepsilon = 3.03\%$ 时, 层错消失, 当 $\varepsilon = 3.06\%$ 时, Shockley 位错滑移产生新的层错。当 $\varepsilon = 3.6\%$ 时, 层错发生交截, 通过在孔洞处发射 Shockley 位错使得孔洞进一步长大, 如图 14(e)和 15(e)所示。这与 PANG 等^[34]通过分子动力学模拟对 FCC 延性金属在单轴高应变速率拉伸过程中位错产生和孔洞形核起源研究的结论一致, 当两个层错交截产生空穴串, 假如位错能在这些空穴串表面成核, 这些空穴串就能通过发射位错转化为孔洞。

当 $\varepsilon = 4.62\%$ 时, 层错再次消失。随着应变卸载的进行, 孔洞沿加载方向, 其大小基本不发生变化。当 $\varepsilon = 1.29\%$ 时, Shockley 位错滑移产生层错^[33]。当 $\varepsilon = 0.72\%$ 时, 新产生的堆垛层错并之前层错发生交截, 当 $\varepsilon = 0.27\%$ 时, 孔洞位置处发射 Shockley 位错使得孔洞长到最大, 如图 14(f)和 15(f)所示。

总之, 退孪晶形成层错释放应力使得孔洞长大, 应力集中释放使得层错消失又重新出现, 孔洞进一步长大, 接着形成新的层错与之前层错发生交截, 通过在孔洞处发射位错, 使得孔洞长到最大。

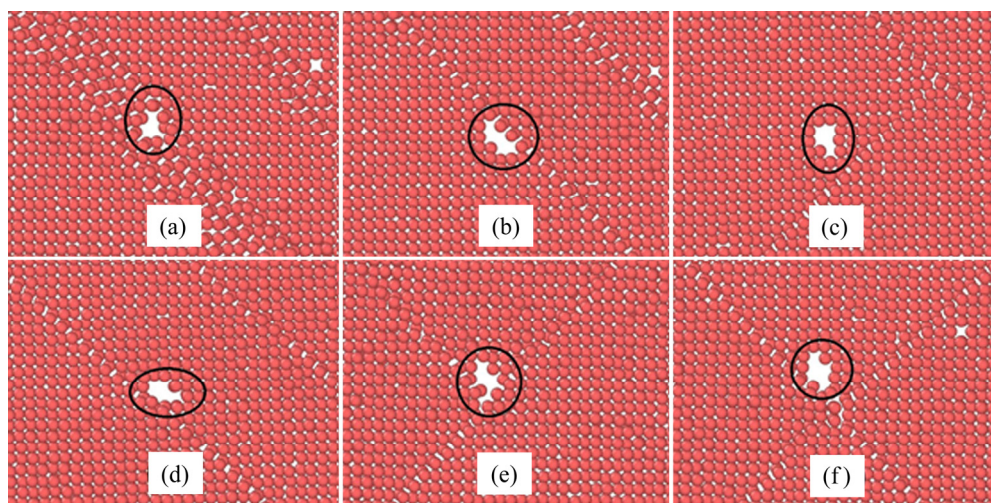


图 14 铝薄膜中部孔洞的生长演化截图

Fig. 14 Screenshots of void growth evolution at middle of Al film (Red represents Al atoms, blue represents Cu atoms): (a) $\varepsilon = 5.49\%$; (b) $\varepsilon = 1.86\%$; (c) $\varepsilon = -5.76\%$; (d) $\varepsilon = -7.68\%$; (e) $\varepsilon = 3.6\%$; (f) $\varepsilon = 0.27\%$

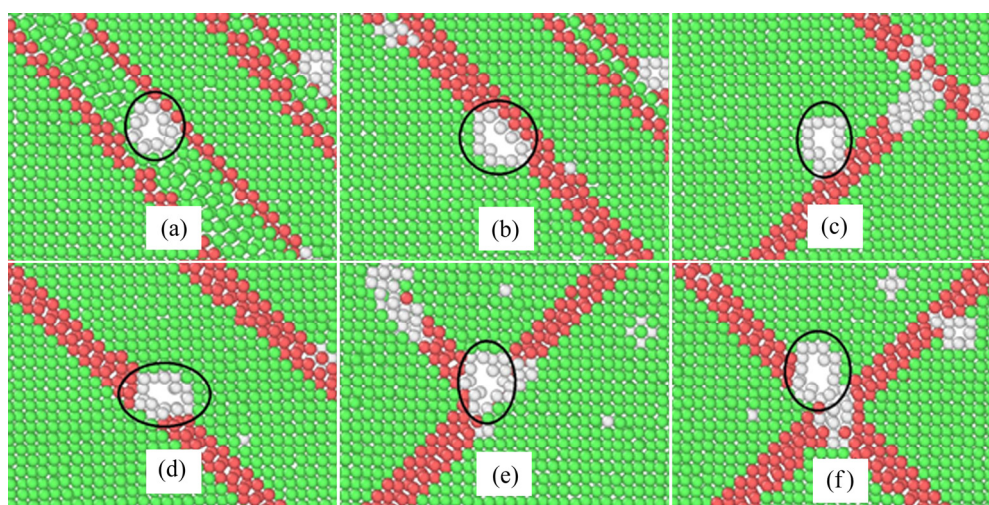


图 15 铝薄膜中部孔洞生长演化原子结构截图

Fig. 15 Screenshots of atoms structure of void growth evolution at middle of Al film (Red represents HCP structure atoms, green represents FCC structure atoms, and white represents other structure atoms): (a) $\varepsilon=5.49\%$; (b) $\varepsilon=1.86\%$; (c) $\varepsilon=-5.76\%$; (d) $\varepsilon=-7.68\%$; (e) $\varepsilon=3.6\%$; (f) $\varepsilon=0.27\%$

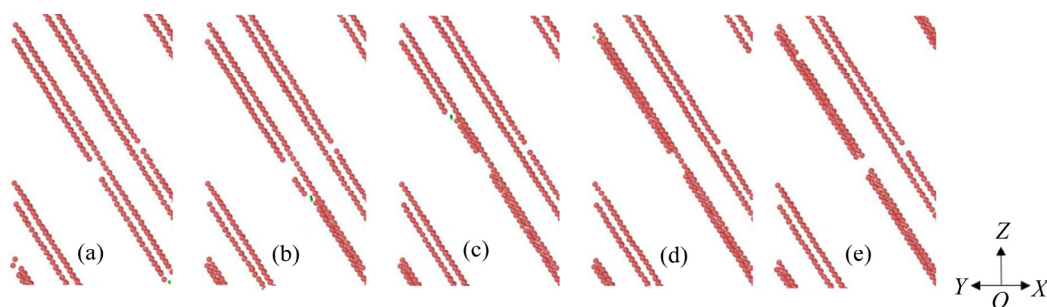


图 16 铝薄膜中部退孪晶的位错分析截图

Fig. 16 Screenshots of dislocation analysis of detwinning at middle of Al film (Red atoms is HCP structure atoms, purple is Stair-rod dislocation, yellow is Hirth dislocation, green is Shockley dislocation and dark red is Other dislocation): (a) $\varepsilon=51.72\%$; (b) $\varepsilon=51.75\%$; (c) $\varepsilon=51.78\%$; (d) $\varepsilon=51.81\%$; (e) $\varepsilon=51.84\%$

2.3 铝薄膜中部孔洞的闭合

图 17 和 18 所示分别为铝薄膜中部孔洞闭合演化的原子成分图和原子结构图, 这些图是沿[100]晶向截取孔洞附近 3 层原子厚度的局部图。随着应变反向压缩的进行, 在压缩应力的作用下, 孔洞被无序结构原子填充, 沿着应变加载方向逐渐缩小为空位团, 如图 17(a)、(b)和图 18(a)、(b)所示。接着, 空位团合并再缩小, 空位团周围无序结构原子转化为 FCC 结构原子, 如图 17(c)、(d)和图 18(c)、(d)所示。当 $\varepsilon=-2.49\%$ 时, 孔洞附近交截的层错有部分为孪晶, 部分层错厚度增加, 如图 18(e)所示。当 $\varepsilon=-3.42\%$ 时, 孔洞附近有部分孪晶转换为层错, 部分层错厚度减小, 孔洞被无序结构原子填充, 完成闭合, 如图 17 (f)和 18(f)所示。

值得注意的是, 在本研究中, 界面处靠近铝侧

也出现孔洞, 与刘强等^[16]界面处靠近铝侧的孔洞相比, 尺寸较小, 这可能是由于多层膜与双层膜的不同造成的。为验证这一想法, 对界面处靠近铝侧的孔洞也进行了研究。

2.4 铜/铝/铜薄膜界面处靠近铝侧孔洞的演化

2.4.1 界面处靠近铝侧孔洞的形核

图 19(a)~(d)所示为界面处靠近铝侧孔洞形核演化的原子成分图, 图 20(a)~(d)所示为相同应变值下的原子结构图。这些图是沿[100]晶向截取孔洞附近三层原子厚度的局部图。随着应变加载的进行, 在应力 $\sigma_2=0.82868$ GPa。应变 $\varepsilon=3.78\%$ 时, 在铜/铝/铜三层膜中界面处靠近铝薄膜侧, 位错发生反应, 如式(4)、(5)和(6)所示。Shockley 位错发生反应生成压杆位错, 压杆位错和 Shockley 部分位错反应生

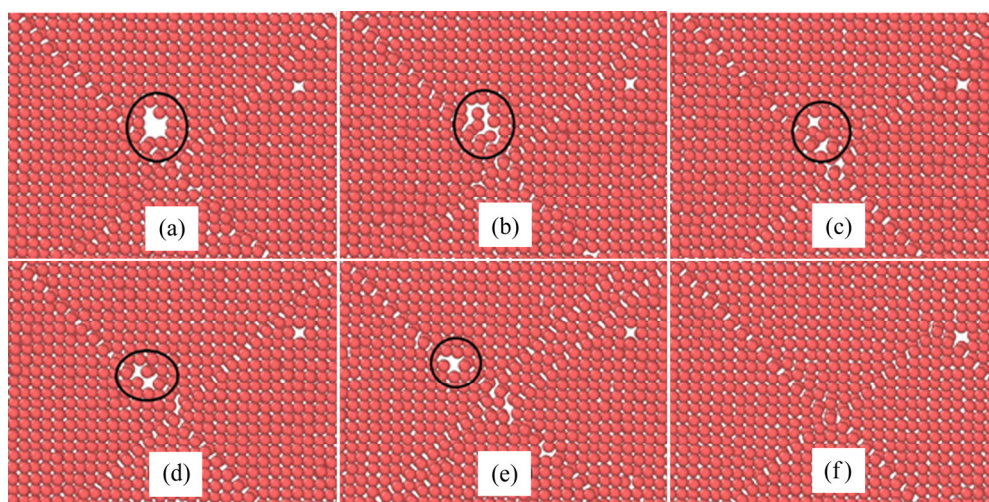


图 17 铝薄膜中部孔洞闭合演化截图

Fig. 17 Screenshots of void closure evolution at middle of Al film (Red represents Al atoms, blue represents Cu atoms): (a) $\varepsilon=-0.78\%$; (b) $\varepsilon=-0.81\%$; (c) $\varepsilon=-0.87\%$; (d) $\varepsilon=-0.9\%$; (e) $\varepsilon=-2.49\%$; (f) $\varepsilon=-3.57\%$

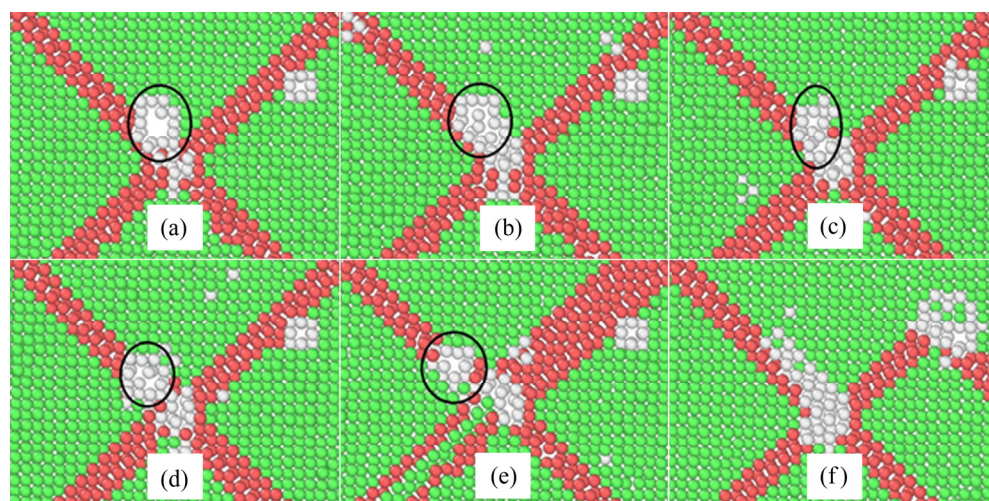


图 18 铝薄膜中部孔洞闭合演化的原子结构截图

Fig. 18 Screenshots of atoms structure of void closure evolution at middle of Al film (Red represents HCP structure atoms, green represents FCC structure atoms, and white represents other structure atoms): (a) $\varepsilon=-0.78\%$; (b) $\varepsilon=-0.81\%$; (c) $\varepsilon=-0.87\%$; (d) $\varepsilon=-0.9\%$; (e) $\varepsilon=-2.49\%$; (f) $\varepsilon=-3.57\%$

成压杆位错, 如图 21 所示。随后, 压杆位错被克服, 出现空隙^[25], 如图 19(a)所示。此外, 在孔洞形核处出现少量 HCP 结构的原子, 如图 19(e)所示。

$$\frac{1}{6}[\bar{1}12] + \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}\bar{2}] \rightarrow \frac{1}{6}[\bar{1}00] \quad (4)$$

$$\frac{1}{6}[1\bar{2}\bar{1}] + \frac{1}{6}[\bar{1}12] \rightarrow \frac{1}{6}[0\bar{1}1] \quad (5)$$

$$\frac{1}{6}[21\bar{1}] + \frac{1}{6}[0\bar{1}1] \rightarrow \frac{1}{3}[100] \quad (6)$$

随着应变的增加, 孔洞形核处 HCP 结构的原

子转换为无序结构的原子, 空隙沿着应变加载方向逐渐长大, 如图 19(b)、(c)和图 20(b)、(c)所示。当应力达到 0.7432 GPa 时, 空隙长大为孔洞, 如图 19(d)和图 20(d)所示。

2.4.2 界面处靠近铝侧孔洞的生长

图 22 和 23 所示分别为界面处靠近铝侧孔洞生长演化的原子成分图和原子结构图, 这些图是沿 [100]晶向截取孔洞附近三层原子厚度的局部图。随着应变加载的进行, 孔洞沿应变加载方向, 这个过程中, 孔洞略有增大, 周围原子结构基本没发生变

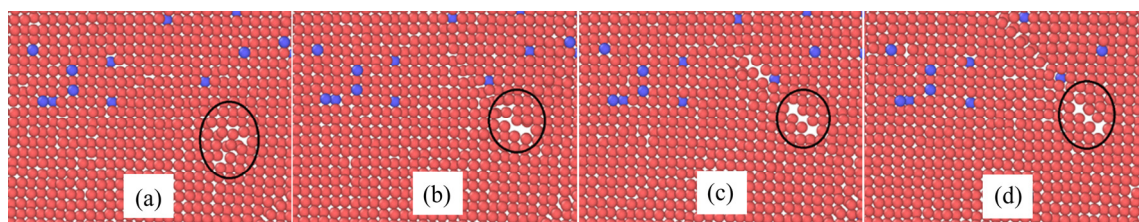


图 19 界面处靠近铝侧孔洞形核演化截图

Fig. 19 Screenshots of void nucleation evolution at interface near Al side (Red represents Al atoms, blue represents Cu atoms): (a) $\varepsilon=3.78\%$; (b) $\varepsilon=3.81\%$; (c) $\varepsilon=3.87\%$; (d) $\varepsilon=4.11\%$

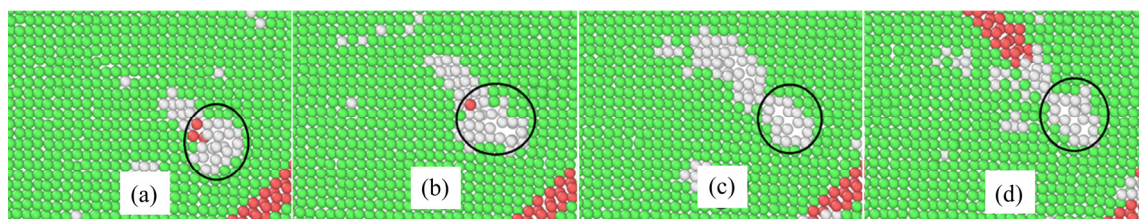


图 20 相同应变值下孔洞形核的原子结构

Fig. 20 Atoms structure of void nucleation evolution at same strain values (Red represents HCP structure atoms, green represents FCC structure atoms, and white represents other structure atoms): (a) $\varepsilon=3.78\%$; (b) $\varepsilon=3.81\%$; (c) $\varepsilon=3.87\%$; (d) $\varepsilon=4.11\%$

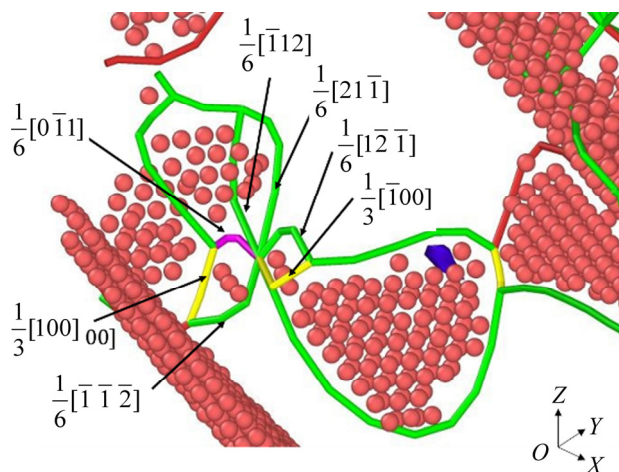


图 21 $\varepsilon=3.78\%$ 时界面靠近铝侧的孔洞位置处局部位错截图

Fig. 21 Screenshot of local dislocation of void near Al side of interface at $\varepsilon=3.78\%$ (red atoms is HCP structure atoms, purple is Stair-rod dislocation, yellow is Hirth dislocation, green is Shockley dislocation, and dark red is Other dislocation)

化,如图 22(a)、(b)和图 23(a)、(b)所示。当 $\varepsilon=8.37\%$ 时,孔洞沿着垂直应变加载的方向,如图 22(c)所示。 $\varepsilon=1.08\%$ 时, Shockley 位错滑移使得层错出现,应

力释放,孔洞沿着应变加载的方向长大,如图 22(d)和图 23(d)所示。

2.4.3 界面处靠近铝侧孔洞的闭合

图 24 和 25 所示分别为界面处靠近铝侧孔洞闭合演化的原子成分图和原子结构图,这些图是沿 $[100]$ 晶向截取孔洞附近三层原子厚度的局部图。随着应变加载的进行,当 $\varepsilon=0.12\%$ 时, Shockley 位错滑移使层错消失。孔洞沿着应变加载方向逐渐缩小为空位团,孔洞被无序结构原子填充,孔洞略向铜原子位置移动,这是由于空位与铜原子之间存在结合能^[35],如图 24(a)~(c)和图 25(a)~(c)所示。继续加载,孔洞完全闭合,无序结构原子转化为 FCC 结构原子,如图 25(d)所示。

此结果表明,铜/铝/铜三层膜中,铜薄膜与铝薄膜交替生长,材料中出现两种界面,即铜基铝膜界面和铝基铜膜界面。铜基铝膜半共格界面的加入,对位错起到阻碍作用,使得材料韧性增强,类似于梁桂强等^[36]对铜基镍膜和镍基铜膜界面机构影响力学性能的研究。此外,程东等^[37]研究表明,多层膜的界面会阻碍位错继续向材料内部扩展,大量的位错聚集铝薄膜或铜薄膜内,位错之间相互排

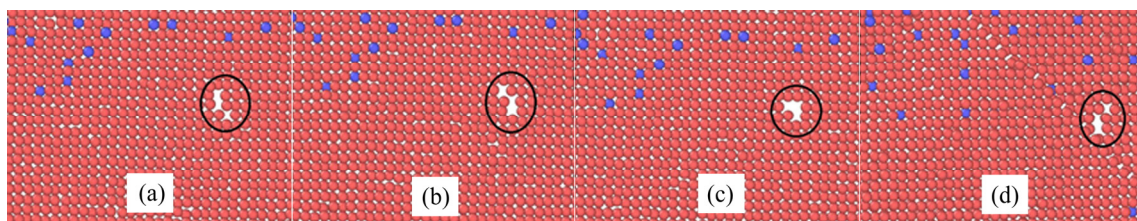


图 22 界面处靠近铝侧孔洞生长演化截图

Fig. 22 Screenshots of void growth evolution at interface near Al side (Red represents Al atoms, blue represents Cu atoms): (a) $\varepsilon=7.29\%$; (b) $\varepsilon=7.92\%$; (c) $\varepsilon=8.37\%$; (d) $\varepsilon=0.03\%$

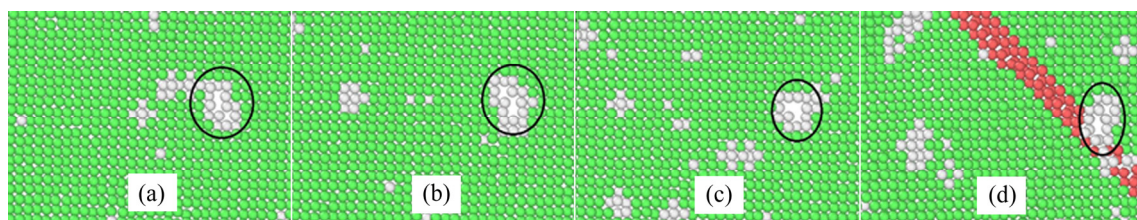


图 23 界面处靠近铝侧孔洞生长演化的原子结构截图

Fig. 23 Screenshots of atoms structure of void growth evolution at interface near Al side (Red represents HCP structure atoms, green represents FCC structure atoms, and white represents other structure atoms): (a) $\varepsilon=7.29\%$; (b) $\varepsilon=7.92\%$; (c) $\varepsilon=8.37\%$; (d) $\varepsilon=0.03\%$

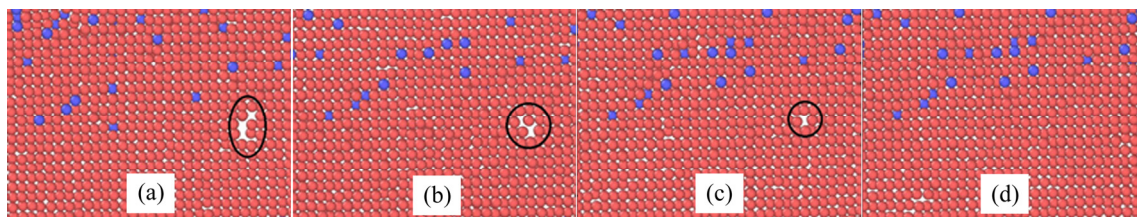


图 24 界面处靠近铝侧孔洞闭合演化截图

Fig. 24 Screenshots of void closure evolution at interface near Al side (Red represents Al atoms, blue represents Cu atoms): (a) $\varepsilon=0.24\%$; (b) $\varepsilon=6.54\%$; (c) $\varepsilon=6.72\%$; (d) $\varepsilon=6.75\%$

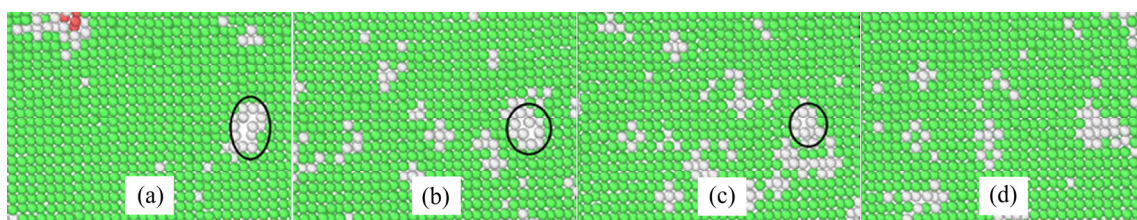


图 25 界面处靠近铝侧孔洞闭合演化的原子结构截图

Fig. 25 Screenshots of atoms structure of void closure evolution at interface near Al side (Red represents HCP structure atoms, green represents FCC structure atoms, and white represents other structure atoms): (a) $\varepsilon=0.24\%$; (b) $\varepsilon=6.54\%$; (c) $\varepsilon=6.72\%$; (d) $\varepsilon=6.75\%$

斥或发生位错反应。

在铜/铝/铜三层膜循环加载中，出现的两个孔洞都是在形核位置处形成压杆位错，接着压杆位错被克服形成空隙。铝薄膜中部的孔洞在形核时发射位错环，位错环出现又消失，再次出现时位错环有

两种变化情况：一种情况是直接转换为另一种位错环；另一种情况是位错环直接发生转动。经过数次发射位错环使得空位团长大形成孔洞。界面处靠近铝侧扩散的铜原子置换铝薄膜中的铝原子，形成置换固溶体。铜原子对位错有钉扎作用，阻碍位错的

运动。因此,与铝薄膜中的孔洞相比,界面处靠近铝侧的孔洞较小。

3 结论

1) 铝薄膜中部的压杆位错被克服,产生空隙,接着两个新形成的压杆位错被克服,使得空隙进一步长大。最后,在孔洞形核处数次发射位错环使得空位团长大形成孔洞。通过退孪晶形成层错释放应力使得孔洞长大,应力集中又释放使得层错消失又重新出现,孔洞进一步长大,接着形成新的层错与之前层错发生交割,通过在孔洞处发射位错,使得孔洞长到最大。在压缩应力的作用下,孔洞被无序结构原子填充,沿着应变加载方向逐渐缩小为空位团。接着,空位团合并再缩小,空位团周围无序结构原子转化为FCC结构原子。最后,孔洞被无序结构原子填充,完成闭合。

2) 界面处靠近铝侧的压杆位错被克服,出现空隙。随着应变的增加,孔洞形核处HCP结构的原子转换为无序结构的原子,空隙沿着应变加载方向逐渐长大为孔洞。随着应变加载的进行,孔洞沿应变加载方向,这个过程中,孔洞略有增大,周围原子结构基本没发生变化。随后,孔洞沿着垂直应变加载的方向。最后,孔洞沿着应变加载的方向长大。随着应变加载的进行,孔洞沿着应变加载方向逐渐缩小为空位团,孔洞被无序结构原子填充,孔洞的位置略向铜原子移动。继续加载,孔洞完全闭合。孔洞周围无序结构原子转化为FCC结构原子。

3) 除了无序位错环外,当孔洞即将形成时出现位错环,此时位错环周围的晶体应力较低。在Cu-Al多层膜材料中孔洞容易出现在结合能较低的薄膜中,其次是界面,界面出现孔洞的概率与薄膜的排列顺序有关。

REFERENCES

- [1] YANG W M C, TSAKALAKOS T, HILLIARD J E. Enhanced elastic modulus in composition-modulated gold-nickel and copper-palladium foils[J]. *Journal of Applied Physics*, 1977, 48(3): 876–879.
- [2] SROLOVITZ D J, YALISOVE S M, BILELLO J C. Design of multiscalar metallic multilayer composites for high strength, high toughness, and low CET mismatch[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1995, 26(7): 1805–1813.
- [3] WOOD J T, EMBURY J D, ASHBY M F. An approach to materials processing and selection for high-field magnet design[J]. *Academic Accelerator*, 1997, 45(3): 1099–1104.
- [4] FLEVARIS N K, LOGOTHETIDIS S. Optical anisotropy in compositionally modulated Cu-Ni films by spectroscopic ellipsometry[J]. *Applied Physics Letters*, 1987, 50(22): 1544–1546.
- [5] XIANG Y, TSUI T Y, VLASSAK J J. The mechanical properties of freestanding electroplated Cu thin films[J]. *Journal of Materials Research*, 2007, 21(6): 1607–1618.
- [6] 魏思远.铜/钕纳米多层膜界面结构及其原位力学行为研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2007.
WEI Si-yuan. Interface structure and in-situ nanomechanical testing of Cu/V nanoscale metallic multilayers[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2007.
- [7] 肖婷予. 纳米尺度薄膜铜疲劳行为及其尺寸效应[D]. 沈阳: 东北大学, 2013.
XIAO Ting-yu. Fatigue behavior of nanoscale copper films and its size effect[D]. Shenyang: Northeastern University, 2013.
- [8] 程东. Cu/Ni 纳米多层膜微观强化机理及微摩擦学特性的分子动力学模拟[D]. 大连: 大连海事大学, 2005.
CHENG Dong. Research on strengthening micromechanisms and tribological behavior of Cu/Ni multilayers with molecular dynamic simulations[D]. Dalian: Dalian Maritime University, 2005.
- [9] 马磊. 铁、镍及镍合金疲劳断裂行为的原子模拟[D]. 长沙: 湖南大学, 2015.
MA Lei. The atomistic simulation of fatigue fracture behavior in iron, nickel and nickel based alloys[D]. Changsha: Hunan University, 2015.
- [10] 高斯峰, 肖俊峰, 南晴, 等. 镍基单晶高温合金疏松缺陷研究[J]. *热加工工艺*, 2016, 45(19): 70.
GAO Si-feng, XIAO Jun-feng, NAN Qing, et al. Study on porosity of nickel-based single crystal superalloys[J]. *Hot Working Technology*, 2016, 45(19): 70–72.
- [11] 张俊善. 材料强度学[M]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社, 2004: 107.
ZHANG Jun-shan. Strength of materials[M]. Harbin: Harbin Institute of Technology Press, 2004: 107.
- [12] ABRAHAM F F. How fast can cracks move? A research adventure in materials failure using millions of atoms and big computers[J]. *Advances in Physics*, 2003, 52(8): 1–10.

- 727–790.
- [13] BULATOR V, ABRAHAM F F, KUBIN L, et al. Connecting atomistic and mesoscale simulations of crystal plasticity[J]. *Nature*, 1998, 391(6668): 669–672.
- [14] 郭巧能, 曹义刚, 孙 强, 等. 温度对超薄铜膜疲劳性能影响的分子动力学模拟[J]. *物理学报*, 2013, 62(10): 352–359.
- GUO Qiao-neng, CAO Yi-gang, SUN Qiang, et al. Temperature dependence of fatigue properties of ultrathin copper films: molecular dynamics simulations[J]. *Acta Physica Sinica*, 2013, 62(10): 352–359.
- [15] LIU J N, XU B S, WANG H D, et al. Investigations on fatigue behavior and surface damage of Cu film by nano impact and molecular dynamics simulation[J]. *Surface and Coating Technology*, 2019, 364: 204–210.
- [16] 刘 强, 郭巧能, 钱相飞, 等. 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[J]. *物理学报*, 2019, 68(13): 133101.
- LIU Qiang, GUO Qiao-neng, QIAN Xiang-fei, et al. Molecular dynamics simulation of void nucleation, growth and closure of nano-Cu/Al films under cyclic loading[J]. *Acta Physica Sinica*, 2019, 68(13): 133101.
- [17] ZHOU Q, LI S, HUANG P, et al. Strengthening mechanism of super-hard nanoscale Cu/Al multilayers with negative enthalpy of mixing[J]. *APL Materials*, 2016, 4(9): 096102.
- [18] TIAN X, CUI J Z, YANG M, et al. Molecular dynamics simulations on shock response and spalling behaviors of semi-coherent {111} Cu-Al multilayers[J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2020, 172: 105414.
- [19] YIN F X, ZHAO Y Z, YU S Y, et al. Molecular dynamics studies on the interface evolution characteristics and deformation mechanisms of Cu/Al multilayers during compression process[J]. *Journal of Applied Physics*, 2019, 125(2): 025112.
- [20] CAI J, YE Y Y. Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-rang force for fcc metal and their alloys[J]. *Physical Review B*, 1996, 54(12): 8398–8410.
- [21] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1–19.
- [22] EVANS D J, HOLIAN B L. The nose-hoover thermostat[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1985, 83(8): 4069–4074.
- [23] 刘文川, 王兴平, 祝举章, 等. 有色金属铸件有效浇注时间计算公式探讨[J]. *特种铸造及有色合金*, 1999, 6: 39–41.
- LIU Wen-chuan, WANG Xing-ping, ZHU Jü-zhang, et al. Discussion on calculating formula for efficient pouring time of non-ferrous metal casting[J]. *Special Casting & Nonferrous Alloys*, 1999, 6: 39–41.
- [24] GUO Q N, YUE X D, YANG S E, et al. Tensile properties of ultrathin copper films and their temperature dependence[J]. *Computational Materials Science*, 2010, 50(2): 319–330.
- [25] 何安民, 邵建立, 王 裴, 等. 单晶 Cu(001)薄膜塑性变形的分子动力学模拟[J]. *物理学报*, 2010, 59(12): 8836–8842.
- HE An-min, SHAO Jian-li, WANG Pei, et al. Plastic deformation of single-crystalline copper films with surface orientation [001]: Molecular dynamics simulation[J]. *Acta Physica Sinica*, 2010, 59(12): 8836–8842.
- [26] 梁迎春, 盆洪民, 白清顺. 单晶 Cu 材料纳米切削特性的分子动力学模拟[J]. *金属学报*, 2009, 45(10): 1205–1210.
- LIANG Ying-chun, PEN Hong-min, BAI Qing-shun. Molecular dynamics simulation of nanometric cutting characteristics of single crystal Cu[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2009, 45(10): 1205–1210.
- [27] WU L P, YU W S, HU S L, et al. Radiation response of nanotwinned Cu under multiple-collision cascades[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2018, 505: 183–192.
- [28] 梁晋洁, 高 宁, 李玉红. 体心立方 Fe 中〈100〉位错环对微裂纹扩展影响的分子动力学研究[J]. *物理学报*, 2020, 69(11): 116102.
- LIANG Jin-jie, GAO Ning, LI Yu-Hong. Effect of interstitial 〈100〉 dislocation loop on expansion of micro-crack in body centered cubic iron investigated by molecular dynamics method[J]. *Acta Physica Sinica*, 2020, 69(11): 116102.
- [29] 庞卫卫, 张 平, 张广财, 等. 高应变率拉伸下纳米空洞的成核与早期生长[J]. *中国科学*, 2012, 42(5): 464–474.
- PANG Wei-wei, ZHANG Ping, ZHANG Guang-cai, et al. The nucleation and growth of nanovoids under high tensile strain rate[J]. *Science China*, 2012, 42(5): 464–474.
- [30] WANG Q L, BAI Q S, CHEN J X, et al. Stress-induced formation mechanism of stacking fault tetrahedral in nano-cutting of single crystal copper[J]. *Applied Surface Science*, 2015, 355: 1153–1160.
- [31] LI B Q, SUI M L, LI B, et al. Reversible twinning in pure aluminum[J]. *Physical Review Letters*, 2009, 102(20): 205504.
- [32] AN X L, NI S, SONG M, et al. Deformation twinning and detwinning in face-centered cubic metallic materials[J]. *Advanced Engineering Materials*, 2019, 22(1): 1900479.
- [33] 郝龙虎. 孪晶结构 FCC 金属纳米线变形机制的分子动力学模拟研究[D]. 北京: 北京工业大学, 2019.
- HAO Long-hu. Molecular dynamics simulation study of plastic deformation mechanism of face-centered-cubic metal

- nanowires with twin structures[D]. Beijing: Beijing University of Technology, 2019.
- [34] PANG W W, ZHANG P, ZHANG G C, et al. Dislocation creation and void nucleation in FCC ductile metals under tensile loading: A general microscopic picture[J]. Scientific Reports, 2014, 4: 6981.
- [35] 张宝昌. 有色金属极热处理[M]. 西安: 西北工业大学出版社, 1993: 128.
- ZHANG Bao-chang. Nonferrous metals and their heat treatment[M]. Xi'an: Northwest Polytechnic University Press, 1993: 128.
- [36] 梁桂强, 邵睿, 姚琳, 等. 半共格界面铜镍双层膜力学差异机制分析[J]. 摩擦学学报, <https://kns.cnki.net/kcms/detail/62.1095.O4.20200817.124 0.002.html>.
- LIANG Gui-qiang, SHAO Rui, YAO Lin, et al. Difference of nano mechanism analysis of mechanical properties of cu-ni bilayers with semi-coherent interface[J]. Tribology, <https://kns.cnki.net/kcms/detail/62.1095.O4.20200817.124 0.002.html>.
- [37] 程东, 严志军, 严立. Cu/Ni 多层膜强化机理的分子动力学模拟[J]. 金属学报, 2008, 44(12): 1461–1464.
- CHENG Dong, YAN Zhi-jun, YAN Li. Molecular dynamics simulation of strengthening mechanism of Cu/Ni multilayers[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2008, 44(12): 1461–1464.

Void evolution of casting Cu/Al/Cu three-layer film by molecular dynamics simulation under cyclic loading

PEI Hai-jiao, GUO Qiao-neng, YANG Shi-e, ZHOU Heng-chi, CAI Neng, ZHENG Yong-sheng

(School of Physics and Microelectronics, Zhengzhou University, Zhengzhou 450052, China)

Abstract: The molecular dynamics method was used to simulate the deformation process of the Cu/Al/Cu three-layer film prepared by the casting method under cyclic loading, the evolution process of void was analyzed. The results show that the voids appear at the middle of the Al film and the interface near the Al film side. The evolution process of the void at the middle of the Al film is as follows: the Hirth dislocation and Stair-rod dislocation at the middle of the Al film are overcome, allowing the gaps to grow. Then, launching the dislocation loop several times at the void nucleation, the vacancy group grows and forms the void. Detwinning crystal forms a stacking fault, releasing the stress and allowing the void to grow. The stress concentration and release make the stacking fault disappear and reappear, and then, the void further grows. The stacking faults near the void nucleation are intercepted, and the dislocation are emitted at the void nucleation, and the void grows to the maximum. Under the compressive force, the void is filled by atoms with other structure, which shrinks into a vacancy cluster along the strain loading direction. The void is filled by atoms with other structure, and closes. The evolution process of the void near the Al side at the interface is as follows: Hirth dislocations and Stair-rod dislocations are overcome, and a gap appears. As strain increases, the atoms of the HCP structure at the nucleation of the void are converted to the atoms with the other structure, and the gap grows along the strain loading direction to form the void. The stacking faults appear, the stress is released, and the void grows with strain loading. Continue to load, and the void shrinks into vacant cluster along the strain loading direction, and the atoms of other structure fill the void. The atoms of other structure around the void are converted to atoms of FCC structure, so void closes.

Key words: molecular dynamics; Cu/Al/Cu three-layer film; cyclic load; void

Foundation item: Project(11372283) supported by the National Natural Science Foundation of China

Received date: 2021-02-25; **Accepted date:** 2021-07-13

Corresponding author: GUO Qiao-neng; Tel: +86-15136275356; E-mail: gqiaoneng@163.com

(编辑 李艳红)