

[补充信息]

电场作用下 Cu/Cu₃Sn 界面原子扩散行为的分子动力学模拟

郭丽婷, 李晓延[✉], 姚鹏, 李扬

北京工业大学材料科学与工程学院, 北京 100124

[Supplementary Information]

Molecular Dynamics Simulation of Diffusion Behavior of Atoms at the Interface of Cu/Cu₃Sn Under Electric Field

GUO Liting, LI Xiaoyan[✉], YAO Peng, LI Yang

College of Materials Science and Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China

研究背景

从传统意义上来说, 一般连接加工是采用不同的工艺方法实现分离界面的结合, 从而达到被连接件之间的整体或永久结合。连接加工已成为结构和装备制造的重要技术。随着现代制造业的发展, 连接加工一方面在大型复杂结构(如航空航天、能源动力、国防军事等领域)制造中发挥着不可或缺的作用, 另一方面在微型精密制造(如芯片制造、电子封装等)发挥着不可替代的作用。制造的精密化、复杂化和大型化决定了所制造结构和装备的高成本和长周期。这些结构和装备中, 个别被连接界面的性能和质量往往决定了整个结构或装备的性能和质量。服役过程中个别被连接界面的性能退化可能导致整个结构或装备的报废。造成上述结果的一个重要原因是大多数界面被连接成永久结合而无法更新。即便在结构或装备的报废处理中, 永久结合界面也因无法拆解给环境友好处理及资源化带来极大的困难。

目前, 对界面分离的研究非常有限, 一些现有的技术大多停留在机械切割或热切割这类简单、初级的界面分离上, 这些方法并不适用于现代复杂制造或精密制造。本课题以 Cu-Sn 界面的扩散分离展开研究, 通过施加电场, Cu 原子与 Sn 原子由于扩散速率差异产生柯肯达尔效应, 会导致 Cu/Cu₃Sn 界面出现空洞, 在进一步的扩散过程中, 微空洞聚合、长大, 最终贯穿界面, 即可实现连接界面的分离。

MEAM 势函数

本研究采用的是 MEAM 势函数(表 S1 和表 S2 所示为势函数中各参数值), 其势函数形式为:

$$E_{\text{total}} = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_j(R_{ij}) \quad (\text{S1})$$

$$F_i(\rho_i) = A_i E_i^0 \rho_i \ln \rho_i \quad (\text{S2})$$

式中: $F_i(\rho_i)$ 为第 i 个原子的嵌入能; ρ_i 为距离原子 i 为 R 的第 j 个原子在 i 处产生的电子密度; $\phi_j(R_{ij})$

为原子 i 和原子 j 之间的两体作用势; E_i^0 为原子 i 在相关结构中的结合能; A_i 为结构参数。

表 S1 纯金属的势函数的各参数值

Table S1 MEAM potential parameters of pure metal

Atom	E^0	r_e	B	A	$\beta^{(0)}$	$\beta^{(1)}$	$\beta^{(2)}$	$\beta^{(3)}$	$t^{(1)}$	$t^{(2)}$	$t^{(3)}$	C_{\min}	C_{\max}	d
Cu	3.54	2.555	142.0	0.94	3.83	2.20	6.0	2.2	2.72	3.04	1.95	1.21	2.8	0.05
Sn	3.14	2.807	42.6	0.93	4.88	2.15	1.4	6.0	6.00	1.15	-0.3	1.41	2.8	0.0

表 S2 金属间的势函数的各参数值

Table S2 Intermetallic MEAM potential parameters

Compound	E_c	r_e	B	C_{\min} (112)	C_{\min} (121)	C_{\min} (122)	C_{\min} (221)	C_{\max} (112)	C_{\max} (121)	C_{\max} (122)	C_{\max} (221)
Cu_3Sn	3.494	2.837	136.3	1.985	1.501	0.116	0.101	2.788	2.716	1.624	2.023