

The Effect of Layer Thickness and Interfacial Defect with Steps on Mechanical Properties of Cu/Ni Multilayers Thin Film

Meng Yang, Jangang Xu, Yunguang Zhang

School of Science, Xi'an University of Posts and Telecommunications, Xi'an Shaanxi

Email: yphysics@163.com, xjgo@xupt.edu.cn

Received: Mar. 14th, 2015; accepted: Mar. 25th, 2015; published: Mar. 30th, 2015

Copyright © 2015 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

Abstract

The effect of layer thickness and interfacial defect with steps of copper-nickel multilayer thin film on deformation mechanism is investigated by molecular dynamics simulations. The results indicate the yield stress is found to increase with increasing layer thickness. The result is mainly due to the fact that the room for dislocation storage can be affected by the changes of layer thickness. Furthermore, the studies show that interfacial defect with steps dominates interfacial barrier effect, resulting in the lowest yield stress.

Keywords

Molecular Dynamics, Cu/Ni Multilayers Thin Film, Mechanical Property

层厚度和晶界“阶梯型”缺陷对铜 - 镍复合薄膜的力学性能分子动力学模拟研究

杨 萌, 徐建刚, 张云光

西安邮电大学理学院, 陕西 西安

Email: yphysics@163.com, xjgo@xupt.edu.cn

收稿日期: 2015年3月14日; 录用日期: 2015年3月25日; 发布日期: 2015年3月30日

摘要

本文采用分子动力学方法研究了层厚度和“阶梯型”晶界缺陷对铜-镍纳米薄膜的力学性能的影响。模拟结果表明,随着层厚度的增加,薄膜的应力逐渐增大,这是因为材料的层厚度越大,材料存储位错的能力就越强,及屈服强度越高。除此之外,研究结果发现晶界存在“阶梯型”缺陷降低了晶界对于位错传播的阻碍作用,使得铜-镍纳米薄膜屈服强度降低。

关键词

分子动力学模拟, 铜-镍复合纳米薄膜, 力学性能

1. 引言

近年来,金属复合纳米材料因为其潜在的力学性能,吸引了越来越多的关注。例如,纳米复合材料表现出的高强度、延展性、高韧性等,使得其在生物,化工,电子等领域得到了广泛关注。在微观领域里,不同尺寸下的位错运动[1]-[3],晶体的不同取向[4][5]都会影响着材料内部所激活的滑移系以及可动位错与位错、晶界面交互作用的微观变形机制。因此研究铜-镍纳米薄膜的尺寸效应等对其力学性能的影响以及变形机制,可望为制备具有更高性能的纳米材料奠定理论基础。

纳米复合材料不同层厚度表现出了不同的变形机制。Abdolrahim等[1]研究了铜-镍多层复合纳米材料双轴拉伸的形变机制,发现拉伸过程中激活更多的滑移系会使纳米材料的性能增强的变形机制。Yuan等[2]通过分子动力学的方法研究了铜-银纳米线的力学性能。而王涛等[3]通过分子动力学模拟发现铜-镍纳米线随着金属层厚度的减小其屈服应力表现出先升高后降低的明显尺寸效应。虽然近年来已经有一些关于多层金属的层厚度对其力学性能影响的文献,但是,几乎没有研究过层厚度对铜-镍多层复合纳米薄膜的力学性能的影响。

晶界是一种最常见的材料微观结构,晶界的结构与性质控制着材料的物理,化学性能。目前,晶界[6]-[11]的结构对纳米材料变形机制的影响已得到广泛研究,尤其是双金属之间的晶界[12]-[18]。双金属晶界的结构,晶界与位错之间的相互作用,以及双金属晶界的缺陷都对纳米复合材料的力学性能有着重要的影响。目前,Abdolrahim等[16]模拟了铜-镍晶界“阶梯型”缺陷对材料初始成核以及屈服强度的影响。Shao等[18]研究了铜-镍,铜-镍-镍的晶界出现“阶梯型”缺陷对材料孔洞成核的影响。然而,关于晶界“阶梯型”缺陷对铜-镍纳米复合材料性能的影响的研究确鲜有报道。

本文研究铜-镍纳米薄膜在不同层厚度以及晶界存在不同数量“阶梯型”缺陷下的力学性能所采用的是分子动力学模拟方法。该方法可对材料进行定性研究,可获取原子运动细节,因而可探究材料内部微观结构演化过程,所以分子动力学模拟方法已被广泛应用在分子模拟实验中。研究结果可为制备高性能的铜-镍多层复合纳米薄膜提供科学的理论依据。

2. 初始模型

本文采用分子动力学方法研究了<111>晶向的铜-镍纳米薄膜在单轴拉伸载荷下的力学性能。初始模型如图1所示,X,Z均采用周期性边界条件,Y采用自由边界条件。在模拟中,所有模型的X方向尺寸为2.04 nm,Y方向尺寸为17.7 nm,z方向建立了5种不同的层厚度模型,分别为2.5 nm、3.75 nm、5.01 nm、6.89 nm和8.13 nm。不同层厚度下的铜-镍模型的原子总数在31,104与93,312之间。

分子动力学模拟结果的精准性与原子间相互作用的势函数的选取有关。为了准确的模拟铜-镍纳米

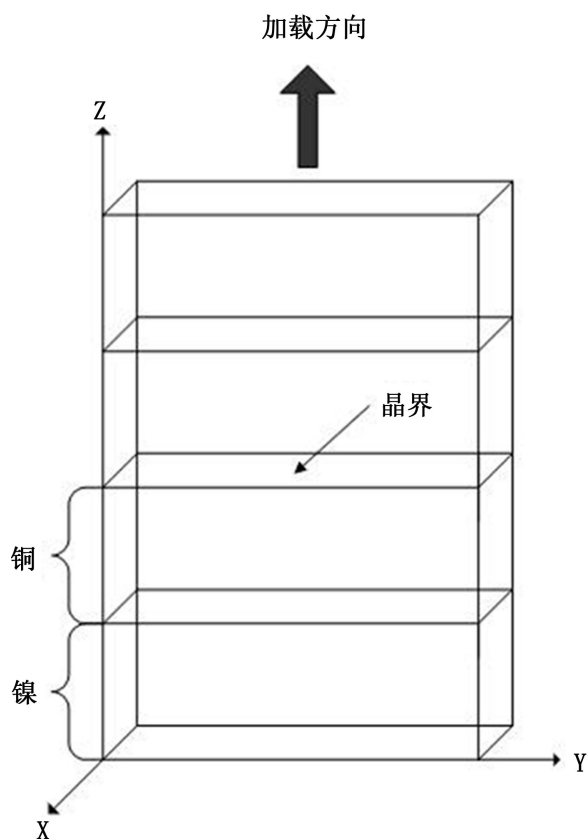


Figure 1. initial model of Cu/Ni multilayers thin film
图 1. 铜-镍多层复合纳米薄膜的初始模型

薄膜模型，本文采用 Zhou 等[19]改进的 EAM 势来模拟铜-铜，镍-镍以及铜-镍原子间相互作用。在模拟过程中，采用“热浴法”调节温度，使系统温度控制在 0.01 K。采用 Velocity-verlet [20]算法求解原子运动方程，时间步长为 $3 fs$ 。在模型的 z 方向施加 0.001 的均匀拉伸应变。

为了更清楚的观察铜-镍纳米薄膜在单轴拉伸载荷下的变形机制，研究采用了可视化软件 OVITO [21]。该软件应用公共近邻分析方法(CAN) [22]对不同的晶体结构着以不同的颜色观察，FCC 标示成绿色，HCP 标示成红色，其他结构的原子标示成灰色，这使得研究者能够更清楚的观察诸如位错之类的变形现象。

3. 结果与讨论

3.1. 层厚度的影响

应力-应变关系曲线可以反映材料的基本力学性能。图 2 为不同层厚度下的铜-镍纳米薄膜在均匀载荷加载下的应力-应变关系曲线。从图中可以看出，随着拉伸应变的不断增大，应力先是线性增加到一个临界值(a 区域内箭头所指出)，此为初始位错成核点，标志着材料进入塑性阶段，之后出现二次硬化达到另一个峰值点(b 区域内)，此峰值对应的应力为临界应力(屈服强度)，所对应的应变为临界应变。此外，应力-应变曲线中低应变区域中近似线性的弹性阶段中，可以计算出曲线所对应的杨氏模量，从图 2 观察发现层厚度的改变对杨氏模量的影响微乎其微。

图 3 反映了不同层厚度下的屈服强度，从图中观察发现随着层厚度的增加，屈服强度逐渐增大，并且达到一定厚度之后屈服强度趋于一个稳定值，这与 Yuan 等[2]所做的铜-银纳米线在不同层厚度下的力学性能所得结果相一致。当层厚度为 6.89 nm 时，继续增加层厚度，发现纳米薄膜的性能改变很小。这

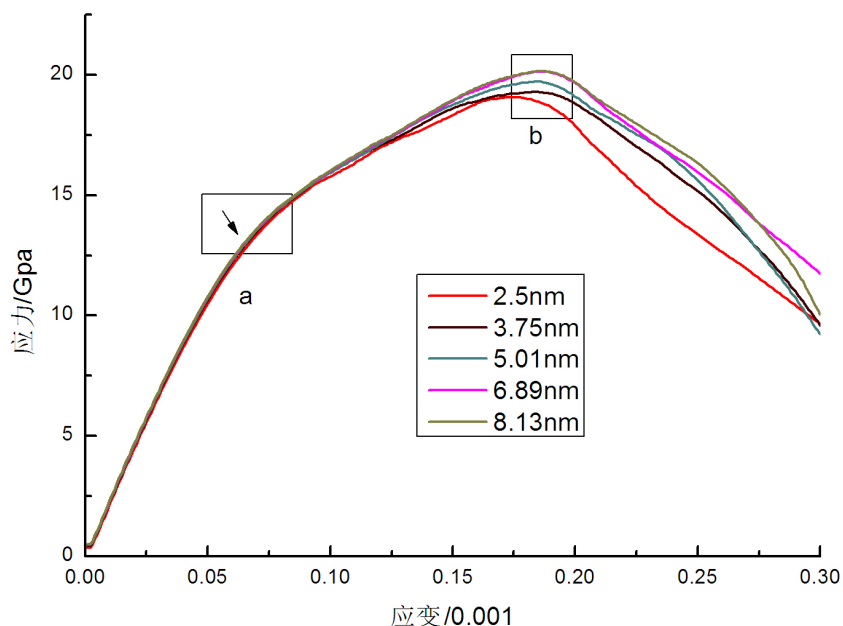


Figure 2. Stress-strain curves of the Cu/Ni multilayers thin films under uniaxial tensile loading and with different layer thicknesses

图 2. 不同层厚度下铜 - 镍纳米薄膜的应力 - 应变曲线

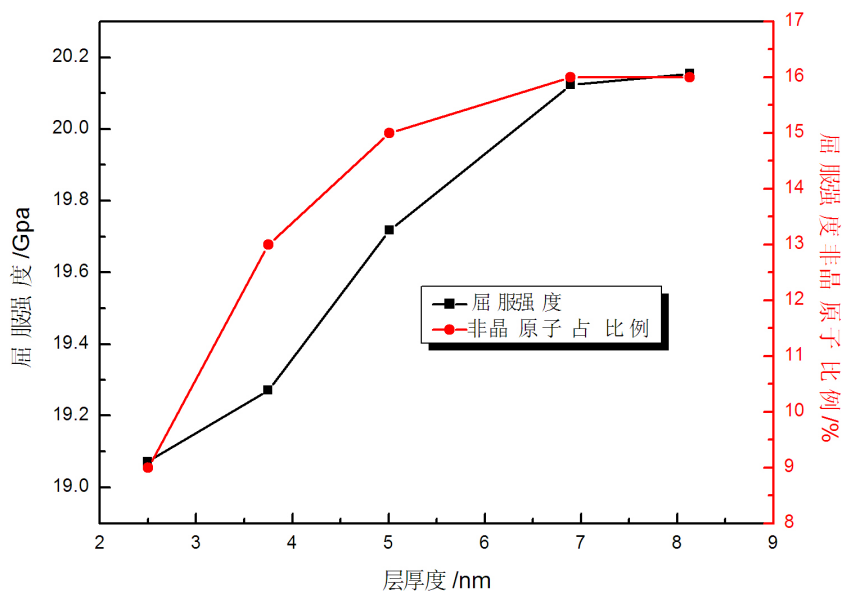


Figure 3. The curves of the yield stress and amorphous ratio under different layer thickness

图 3. 不同层厚度下屈服强度和该应变下的非晶原子百分比曲线

是由于材料在拉伸过程中排斥力的大小和不同层厚度存储位错能力对材料特性影响所导致的[6]。为了进一步了解铜 - 镍纳米薄膜的变形机制，我们对比了层厚度为 2.5 nm 和 8.13 nm 的微观结构图，如图 4 所示。材料的层厚度为 8.13 nm 时位错存储能力明显高于层厚度为 2.5 nm。较小的层厚度存储位错的能力较弱，使得位错在材料的铜层内堆积，限制了材料的力学性能。铜 - 镍的晶界面属于半共格界面，在晶界面上分布着失配位错，失配位错所形成的应力场[23]会对位错运动以及材料的力学性能产生重要的影响。较小的层厚度限制了晶界上应力场的分布范围，使得晶界对位错的限制作用减弱，位错易于穿过晶界到

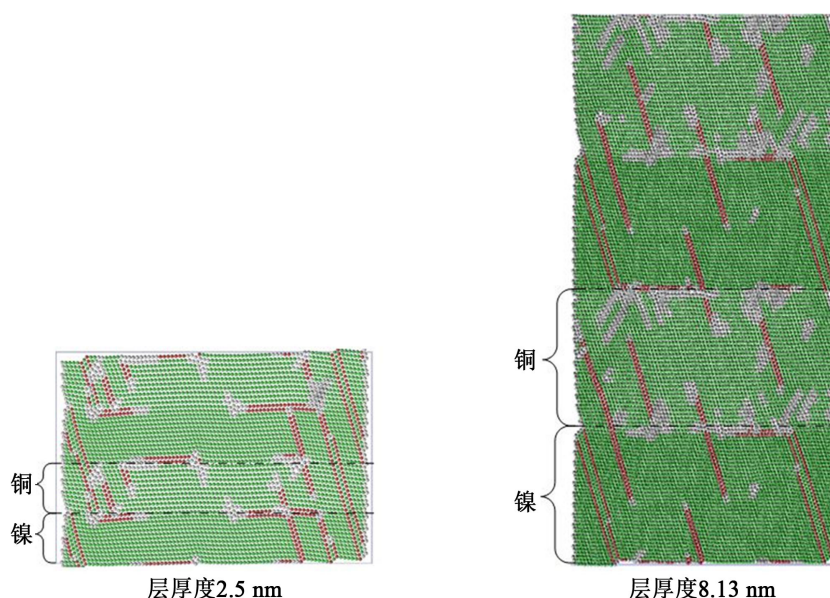


Figure 4. Atomic structure of the Cu/Ni multilayer thin films with two different layer thicknesses (2.5 nm and 8.13 nm) under critical strain.

图 4. 层厚度 2.5 nm 的复合纳米线和层厚度为 8.13 nm 的复合纳米线在临界应变上的原子结构图

达相邻子层内，材料强度减弱，反之，失配位错对滑移位错的限制作用较强，提高了材料的性能。图 4 还可观察到在拉伸过程中，材料内出现了非晶化，非晶占比率越高，材料存储位错的能力越强，观察图 3 发现材料非晶化的曲线与不同层厚度的屈服强度的曲线走势基本一致，也就是说随着层厚度的增加双金属晶界对位错的存储能力增强。

3.2. 晶界“阶梯型”缺陷对纳米复合材料的影响

在这一节我们利用分子动力学方法模拟研究了晶界上出现“阶梯型”缺陷对铜-镍纳米复合材料的力学性能的影响。图 5 为铜-镍纳米薄膜的晶界存在三个“阶梯型”缺陷的初始模型，铜、镍的子层厚度分别为 5 nm 和 2.5 nm。在模拟过程中我们分别选择了晶界无缺陷，以及存在一个、二个、三个“阶梯型”缺陷的模型。所有模型的“阶梯型”缺陷的长和高都一样，分别为 $2.2 \text{ nm} \times 0.6 \text{ nm}$ 。每个“阶梯型”缺陷间隔也是相同的为 3.54 nm。

图 6 为晶界无缺陷以及晶界上分别为一个、两个和三个“阶梯型”缺陷所对应的应力-应变曲线，结果表明晶界无缺陷时，纳米薄膜的屈服强度较高，随着“阶梯型”缺陷的增加，屈服强度逐渐减小，而杨氏模量却没有显著的影响。为了进一步探索材料的变形机制，图 7 给出在拉伸载荷下，无“阶梯型”缺陷的材料(如图 7(a))和有三个“阶梯型”缺陷的材料(如图 7(b))分别在位错初始成核以及达到最高屈服点时的原子结构图。从图中我们可以观察到当界面无缺陷时，初始位错成核于铜层的自由表面处，随着应变的继续加载，位错先是沿着滑移面在铜层内传播，抵达晶界处时，由于晶界面上存在的排斥力限制了位错的运动，使得大量位错被限制在铜层内运动，位错之间相互排斥或发生位错反应，从而使得多层薄膜强度提高[24]。对于晶界存在“阶梯型”缺陷的材料，如图 7(b)所示，初始位错成核于“阶梯型”缺陷的边界处，这是由于应力主要集中于界面缺陷的边界处。随着拉伸应变的增大，更多的位错成核于晶界，致使晶界的排斥力不足以把位错限制在铜层内运动，位错很容易通过晶界到达临近的镍层，所以晶界有缺陷的材料屈服强度更弱。

4. 结论

本文采用分子动力学对铜-镍多层复合纳米薄膜的力学性能进行了分析和研究。首先建立了不同层厚度的铜-镍纳米薄膜模型，并进行单轴拉伸，研究结果表明随着层厚度的增加，应力逐渐增加，这是由于子层空间所能容纳位错能力决定的，以及位错与界面的相互作用支配的。其次，研究了晶界缺陷对于纳米薄膜的力学性能的影响，模拟结果显示晶界的缺陷造成应力集中于缺陷边界处，影响了晶界对于

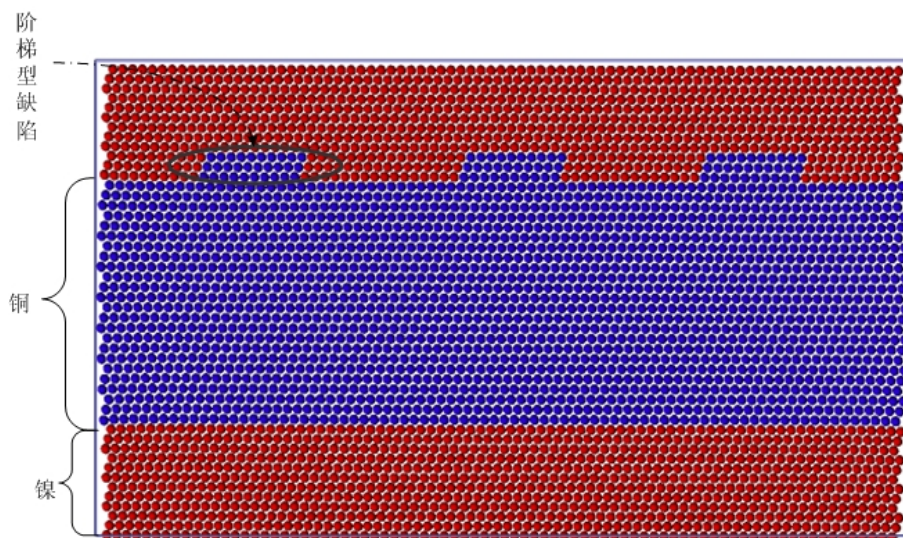


Figure 5. The Cu/Ni multilayer thin films with three interfacial steps

图 5. 铜-镍纳米薄膜的晶界存在三个阶梯型缺陷的初始模型

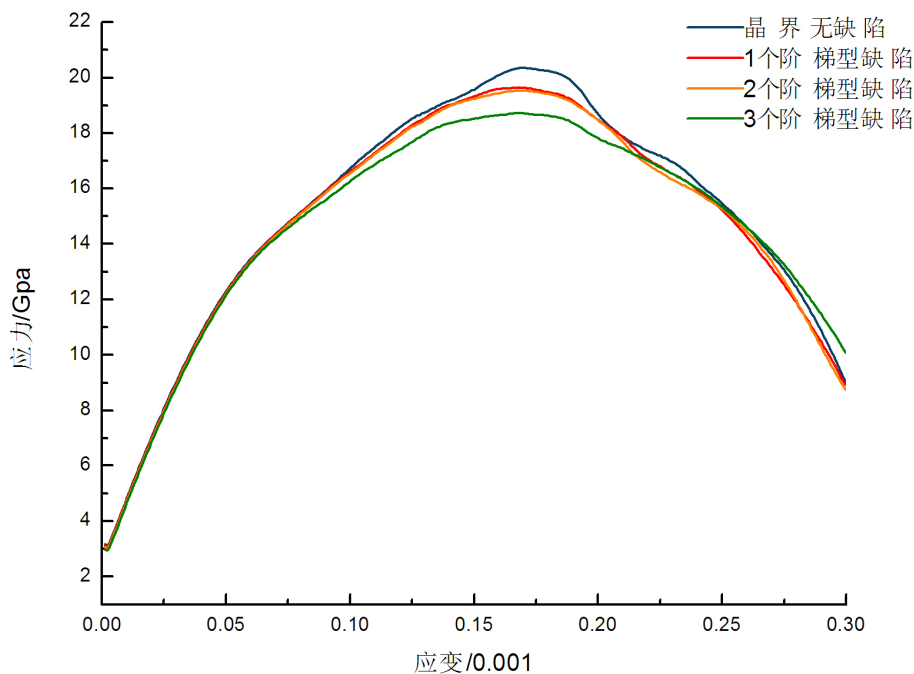


Figure 6. Stress-strain behavior of the Cu/Ni multilayer thin films with a defect free perfect interface and others with one, two and three interfacial steps

图 6. 晶界无缺陷以及晶界上分别为一个，两个和三个阶梯型缺陷所对应的应力 - 应变曲线

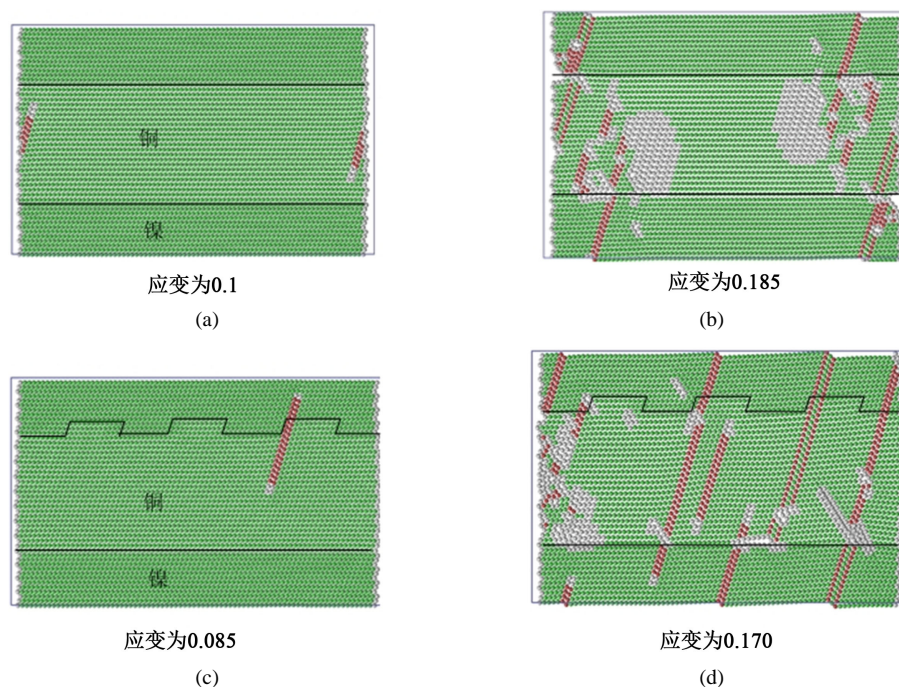


Figure 7. (a) The Cu/Ni multilayer thin films with a defect free perfect interface under different tension strain 0.1, and 0.185 and (b) the Cu/Ni multilayer thin films three interfacial steps under different tension strain 0.085, and 0.170

图 7. (a) 晶界无缺陷的材料在应变为 0.1 和 0.185 时的原子结构图; (b) 晶界上存在三个“阶梯型”缺陷的材料应变为 0.085 和 0.170 时的原子结构图

位错传播的阻碍效果以及使得镍层更易位错成核，材料性能降低。

参考文献 (References)

- [1] Abdolrahim, N., Zbib, H.M. and Bahr, D.F. (2014) Multiscale modeling and simulation of deformation in nanoscale metallic multilayer systems. *International Journal of Plasticity*, **52**, 33-50.
- [2] Yuan, F. and Wu, X. (2012) Layer thickness dependent tensile deformation mechanisms in sub-10nm multilayer nanowires. *Journal of Applied Physics*, **111**, Article ID: 124313.
- [3] 王涛, 卢子兴, 杨振宇 (2011) Cu/Ni 多层纳米线力学性能尺寸效应的分子动力学模拟. *计算力学学报*, **B04**, 147-151.
- [4] Chen, S.D., Zhou, Y.K. and Soh, A.K. (2012) Orientation and rate dependence of wave propagation in shocked beta-SiC from atomistic simulations. *Computational Materials Science*, **61**, 239-242.
- [5] Wang, F.Y., Liu, Y.H., Yin, X., et al. (2010) The interface and surface effects of the bicrystal nanowires on their mechanical behaviors under uniaxial stretching. *Journal of Applied Physics*, **108**, Article ID: 074311.
- [6] Song, H.Y. and Li, Y.L. (2012) Effect of stacking fault and temperature on deformation behaviors of nanocrystalline Mg. *Physics Letters A*, **376**, 529-533.
- [7] An, M.R. and Song, H.Y. and Su, J.F. (2012) Atomic simulations of influence of twinning on crack propagation of Al. *Chinese Physics B*, **21**, Article ID: 106202.
- [8] Brinkmann, A., Langer, F., Scholler, F., et al. (2011) Molecular dynamics simulation of interfaces and surfaces in structures derived from quartz- and ZSM-5 crystallites. *Physica B: Condensed Matter*, **406**, 293.
- [9] Song, H.Y., Li, Y.L. and An, M.R. (2014) Atomic simulations of the effect of twist grain boundaries on deformation behavior of nanocrystalline copper. *Computational Materials Science*, **84**, 40-44.
- [10] Cheng, K.Y., Tieu, K., Lu, C., et al. (2014) Molecular dynamics simulation of the grain boundary sliding behaviour for Al₉₃Si₇(210). *Computational Materials Science*, **81**, 52-57.
- [11] Cao, A.J., Wei, Y.G. and Ma, E. (2008) Grain boundary effects on plastic deformation and fracture mechanisms in Cu nanowires: Molecular dynamics simulations. *Physical Review B*, **77**, Article ID: 195429.

- [12] Xie, Y.P. and Zhao, S.J. (2012) First principles study of Al and Ni segregation to the α -Fe/Cu (100) coherent interface and their effects on the interfacial cohesion. *Computational Materials Science*, **63**, 329-335.
- [13] Zhang, R.F., Germann, T.C., Wang, J., Liu, X.Y. and Beyerlein, I.J. (2014) Role of interface structure on the plastic response of Cu/Nb nanolaminates under shock compression: Non-equilibrium molecular dynamics simulations. *Computational Materials Science*, **86**, 118.
- [14] Ma, F., Zhang, J.M. and Xu, K.W. (2013) Theoretical analysis of interface energy for unrelaxed Ag(001)/Ni(001) twist interface boundaries with MAEAM. *Acta Materialia*, **61**, 7488.
- [15] Zbib, H.M., Overman, C.T., Akasheh, F. and Bahr, D. (2010) Analysis of plastic deformation in nanoscale metallic multilayers with coherent and incoherent interfaces. *Mechanics Research Communications*, **37**, 315.
- [16] Abdolrahim, N., Mastorakos, I.N., Shao, S., Bahr, D.F. and Zbib, H.M. (2014) The effect of interfacial imperfections on plastic deformation in nanoscale metallic multilayer composites. *Computational Materials Science*, **86**, 118-123.
- [17] Hoagland, R.G., Kurtz, R.J. and Henager, C.H. (2004) Slip resistance of interfaces and the strength of metallic multilayer composites. *Scripta Materialia*, **50**, 775-779.
- [18] Shao, S., Zbib, H.M., Mastorakos, I.N. and Bahr, D.F. (2014) The void nucleation strengths of the Cu-Ni-Nb-based nanoscale metallic multilayers under high strain rate tensile loadings. *Computational Materials Science*, **82**, 435-441.
- [19] Zhou, X.W., Wadley, H.N.G., Johnson, R.A., Larson, D.J., Tabat, N., Cerezo, A., et al. (2001) Atomic scale structure of sputtered metal multilayers. *Acta Materialia*, **49**, 4005-4015.
- [20] Hockney, R.W. (1970) The potential calculation and some applications. *Methods in Computational Physics*, **9**, 136.
- [21] Stukowski, A. (2010) Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—The open visualization tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **18**, Article ID: 015012.
- [22] Faken, D. and Jonsson, H. (1994) Systematic analysis of local atomic structure combined with 3D computer graphics. *Computational Materials Science*, **2**, 279-286.
- [23] 程东, 严志军, 严立 (2006) Cu/Ni 多层膜中交变应力场对可动位错的制约. *金属学报*, **2**, 118-122.
- [24] 程东, 严志军, 严立 (2008) Cu/Ni 多层膜强化机理的分子动力学模拟. *金属学报*, **12**, 1461-1464.