

The Nucleation and Emission of Dislocation of Nano Fe/Ni Interface*

Yinku Zhou, Shangda Chen[#]

Faculty of Materials, Optoelectronics and Physics, Xiangtan University, Xiangtan
Email: [#]chensd@xtu.edu.cn

Received: Feb. 13th, 2012; revised: Feb. 27th, 2012; accepted: Mar. 10th, 2012

Abstract: Molecular dynamics simulations were carried out to investigate the nucleation and emission of dislocation initialized from an interface within a Fe/Ni bilayer. A tensile loading was applied parallel to the issued interface. After relaxation, rectangular shaped dislocations were observed at the Fe(0 0 1)/Ni(1 1 0) interface. The simulation results show that glide dislocation nucleated from the interface firstly when the strain reach 7.2%, and emitted into Fe layer as the strain increasing. The dislocation nucleated and emitted in Ni layer only when the strain reached 8.4%. Glide dislocations were found to mainly occur on {1 0 1} plane in Fe layer and on {1 1 1} plane in Ni layer.

Keywords: Fe/Ni Interface; Molecular Dynamics; Misfit Dislocation; Glide Dislocation

纳米 Fe/Ni 薄膜界面位错的形核和发射*

周银库, 陈尚达[#]

湘潭大学材料与光电物理学院, 湘潭
Email: [#]chensd@xtu.edu.cn

收稿日期: 2012 年 2 月 13 日; 修回日期: 2012 年 2 月 27 日; 录用日期: 2012 年 3 月 10 日

摘要: 用分子动力学模拟的方法研究了拉伸加载下位错在 Fe/Ni 界面的形核和发射过程。拉伸沿 Fe[1 0 0] 方向进行, 平行于界面。由于晶格失配, 系统弛豫后在 Fe(0 0 1)/Ni(1 1 0) 界面处会形成长方形的失配位错网络。模拟结果显示, 当应变达到 7.2% 时, 滑移位错首先在界面处失配位错线上形核, 随着应变增加滑移位错向铁内部发射, 而在镍内部并没有位错发射。当应变达到 8.4% 时, 镍内才出现位错发射。在 Fe 基底中位错主要在 {1 1 0} 滑移面上滑移, 而在 Ni 中主要在 {1 1 1} 滑移面上滑移。

关键词: Fe/Ni 界面; 分子动力学; 失配位错; 滑移位错

1. 引言

在过去十年里, 对金属多层膜力学性能的研究取得了巨大的进展。纳米尺度的金属多层膜在屈服应力、塑性、抗腐蚀性能等方面具有特殊的性能^[1]。这种特殊性能主要归因于多层膜中存在界面, 而位错和界面相互作用对金属多层膜机械性能的影响依赖于

界面的类型^[2-4]。

过去几十年里, 分子动力学方法已被广泛应用于材料科学等领域。随着高性能计算机的发展, 原子模拟在材料性能预测与设计方面已成为一种有效的方法。已经有大量的研究者用分子动力学方法研究晶界和界面处位错的形核和发射过程^[2-6]。然而, 大部分这些研究主要关注于同种类型的材料, 如晶界、FCC/FCC 界面。不同类型的材料, 如 FCC/BCC 界面, 被研究的相对较少。Hoagland 等人对非共格的 Cu/Nb

*资助信息: 国家自然科学基金青年基金(10702058)和中国博士后科学基金(20090451100)的资助。

[#]通讯作者。

界面进行了研究^[7], 其主要关注于在二维条件下位错和界面的相互作用; Wang 等人^[8]用类似方法更细致地研究了位错和不同类型界面的相互作用, 认为 Cu/Nb 作为非共格界面系统, 界面会阻碍滑移位错的发射。这些工作对理解位错和 FCC/BCC 界面的相互作用机理提供了非常宝贵的信息。Fe/Ni 镀层作为一种重要的结构功能材料, 由于其具有较好的抗腐蚀性能^[9]、断裂韧性, 以及较好的塑性^[10], 而被广泛应用于许多领域。本文以 Fe/Ni 薄膜为研究对象, 用分子动力学方法来研究侧向拉伸下位错和界面的相互作用。

2. 模拟方法

Fe/Ni 薄膜系统的建立如图 1 所示。模型中 Fe 晶体和 Ni 晶体分别是体心立方(BCC)结构和面心立方(FCC)结构。整个模拟原胞 X、Y、Z 方向的尺寸分别为 21.10 nm, 9.15 nm, 7.80 nm, 其中 Fe 层的厚度(Z 轴方向)为 5.7 nm, Ni 的为 2.1 nm。模拟中 Fe、Ni 的晶格常数分别取 0.2855 nm 和 0.352 nm。

模拟中原子间相互作用势采用广泛应用的 EAM 势函数^[11], 模拟是采用 Sandia 国家实验室提供的 MD 代码 LAMMPS^[12]进行的, LAMMPS 是 Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator(大尺度原子/分子大规模并行模拟器)首个字母的简写, 它是目前应用最为广泛的经典分子动力学软件, 被广泛应用于材料, 物理, 化学和生物等领域。模拟采用 NVT 系综, 即系统的温度、体积和原子数目保持恒定。为了消除热振动的影响, 系统温度采用 Nosé-Hoover 热浴控制为 1 K。另外, 采用 Velocity-Verlet 积分方法, 时间步长设定为 1 fs。

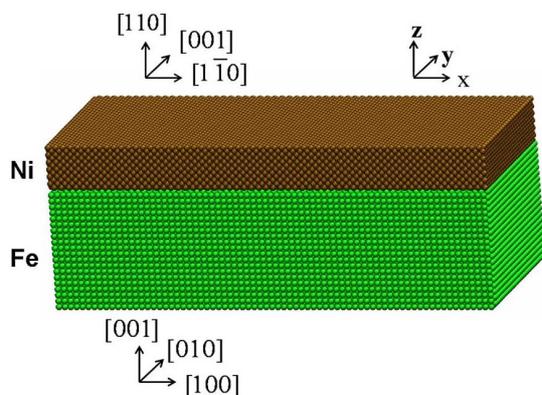


Figure 1. Initial configuration of Fe/Ni bilayer
图 1. Fe/Ni 薄膜系统的初始模型

整个模拟的过程包括以下几个步骤: 首先在给定温度下对 Fe/Ni 多层膜系统进行弛豫 100,000 步达到能量稳定。在弛豫过程中, 允许 X, Y 方向自由收缩。然后, 每隔 1000 时间步在 bcc-Fe 的左、右两端同时拉 $\Delta L = 0.01$ nm 长度的强度进行拉伸, 也就是说每伸长 $2\Delta L$, 然后弛豫 1000 步, 对应的应变率为 10^9s^{-1} , 这样不断循环, 直至将 Fe/Ni 系统拉断为止, 在这期间每 1000 步记录系统的原子位置、应力、温度等信息。为了可视化晶体缺陷, 我们采用 Kelchner 等人^[13]提出的中心对称参数方法, 中心对称参数定义为:

$$P = \sum_{i=1, \alpha} |R_i + R_{i+\alpha}|^2 \quad (1)$$

其中 α 为近邻原子对数, R_i 和 $R_{i+\alpha}$ 是对称原子相对中心原子的位失。对于 BCC 结构, α 等于 4; FCC 结构, α 为 6。当 $P=0$ 时, 说明此原子是完好部分。当 P 不为零时, 不同的金属, 取一定的临界值 P , 然后区分原子是位错、堆垛层错, 或表面原子。为了方便显示缺陷结构, 中心对称参数接近零的原子被移除。

3. 结果及讨论

在初始构形的弛豫过程中, 由于界面两侧晶格不匹配, 弛豫后在 Fe(001)/Ni(110) 界面处产生了长方形的失配位错网络。这些一系列交错的位错线分别平行于 [100] 和 [010] 方向, 如图 2 所示。

由于位错线的能量正比于 b^2 , b 为失配位错的 Burgers 矢量, Burgers 矢量越小, 位错线的能量就越小。另外, 在 Ni(110) 面上, 最短的位矢为 $(1/2)[1\bar{1}0]$; 在 Fe(001) 面上, 最短的位矢为 [100] 和 [010]。因此, 在 Fe(001)/Ni(110) 界面上, 位错原子的 Burgers 矢量为 $a_{\text{Ni}}/2[1\bar{1}0]$ 沿 [100] 方向, $a_{\text{Fe}}[010]$ 沿 [010] 方向, 其中 a_{Ni} 、 a_{Fe} 分别是 Ni 和 Fe 的晶格常数。通常将失配

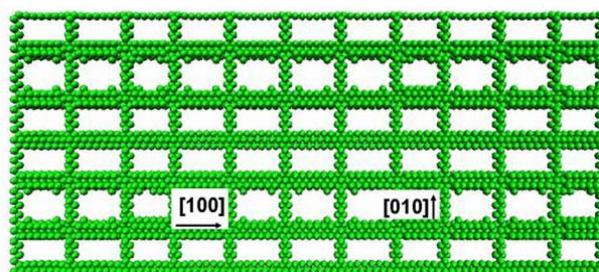


Figure 2. Misfit dislocation network configuration at the Fe/Ni interface
图 2. Fe/Ni 界面 Fe 晶体中的初始失配位错网络

度定义为一个量 δ ，以 Fe、Ni 为例来表示即为：

$\delta = 2(d_{\text{Ni}} - d_{\text{Fe}})/(d_{\text{Ni}} + d_{\text{Fe}})$ ，这里 d_{Ni} 、 d_{Fe} 分别 Ni 和 Fe 晶体中原子间的距离。两近邻平行失配位错间的距离 $L = b/\delta$ ，这里 b 为失配位错的 Burgers 矢量。这样我们可以分别算出 [100] 和 [010] 两个方向失配位错的间距分别为 18.15 Å 和 13.69 Å。由图 2 可得到沿 [100] 方向位错线间的距离为 19.18 Å，沿 [010] 方向为 15.25 Å，模拟结果和理论计算较为接近。

位错形核主要有均匀形核、应力集中处形核、晶界源等。其中均匀形核需要极大的应力，只有在极端条件下才会发生；应力集中处形核主要见于杂质原子引起的位错形核，其它如裂纹等应力集中处也容易形成位错；多晶材料塑性流变一个重要的位错源是晶粒间的界面区，同样，相界处由于晶格失配，也是重要的位错源。图 3 是拉伸时不同应变阶段 Fe 层中的位错结构。从图 3(a)可以看出，当应变(ϵ)达到 7.2%时，有非常短的滑移位错从界面失配位错线上形核，其原因是晶体内部不存在杂质原子和应力集中处，位错很自然的优先在界面处形核。随着进一步拉伸，滑移位错沿 (101) 和面进一步生长，滑移面附近的原子被迫变成位错原子(图 3(b))。从图 3 可以看出，滑移位错只从界面失配位错线上形核和发射，其它地方没有位错形核和发射，失配位错是滑移位错的发射源。

位错发射有滑移和攀移两种方式，其中滑移是位错运动的主要方式，攀移通常只有在高温下才能出现。我们模拟的是低温情况，所以位错的运动都是以

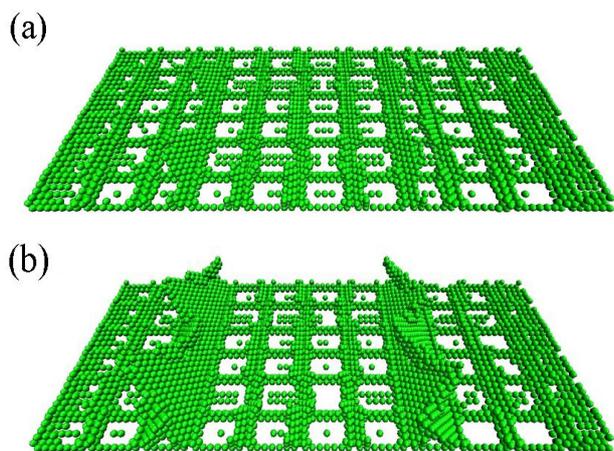


Figure 3. The nucleation and emission of dislocations from the Fe/Ni interface: (a) $\epsilon = 7.2\%$; (b) $\epsilon = 7.4\%$

图 3. 滑移位错从 Fe/Ni 界面的失配位错线形核和发射: (a) $\epsilon = 7.2\%$; (b) $\epsilon = 7.4\%$

滑移的方式进行。图 4 是 Fe/Ni 系统不同应变下的位错构型图。当受到侧向拉伸变形时，图 4(a)和(b)显示在 Fe/Ni 界面处位错优先形核和发射，这导致应力应变曲线中当应变达到 7.2%时应力急剧下降。从图 4(a)到(d)可以看出，当应变从 7.2%达到 8.2%时，所有位错发射仅限于 Fe 一边，而 Ni 内部并没有位错发射，这主要是因为 Ni 的屈服强度大于 Fe 的屈服强度。当应变小于 8.2%时，虽然有大量的位错在 Fe 中增殖，却没有位错穿过 Fe-Ni 界面，表明界面对滑移位错同样具有阻碍作用。

随着拉伸进行，位错在界面的塞积越来越多，从图(e)可以看出当应变达到 8.4%时，位错在 Fe/Ni 界面处的失配位错上形核并向 Ni 内部发射。在 Fe 层中，位错首先沿 $(\bar{1}01)$ 和 (101) 面滑移，如图 4(a)和(b)所示。这些位错在滑移面进一步扩展并彼此碰撞，然后转向 (110) 和 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 滑移面，如图 4(c)所示。随着进一步拉伸，大量的位错在 Fe 和 Ni 层中形核和增殖，如图 4(g)所示。这导致应力应变曲线中出现了带有微小波动的平坦区域，此过程伴随着 Fe 基底中晶格的重排。随着 Fe 晶格重排的进行，位错的数量开始减少，如图 4(g)-(h)所示。当到达点(h)时，晶格重排完成，这将导致应力应变曲线中出现了第二个弹性区域。晶格重排通过 $(\bar{1}01)$ 面发生孪晶转变完成，这和别的一些文献中报道纳米晶铁的应力应变曲线^[14-16]基本一致。根据文献[14,17,18]，这种晶格重排和局部晶格转向不稳有关，局部晶格失稳导致晶格重排，进而扩展到整个晶体。在 Ni 层中，位错在界面处失配位错上优先形核，如图 4(e)所示。然后主要在 $(1\bar{1}1)$ 和 $(1\bar{1}\bar{1})$ 面滑移，如图 4(f)所示。

4. 结论

本文用分子动力学方法模拟了侧向载荷作用下位错和 Fe/Ni 界面的相互作用，得到以下主要结论：弛豫后，在 Fe(001)/Ni(110) 界面会形成长方形的失配位错网络，而这些失配位错是拉伸时的位错发射源；当应变达到 7.2%时，滑移位错首先在界面处失配位错线上形核，并随着应变增大而向铁内部发射，此时镍内部并无位错发射。当应变达到 8.4%时，镍内部才出现位错发射。在 Fe 基底中位错主要在 $\{101\}$ 面滑移，而在 Ni 中主要在 $\{111\}$ 面滑移。

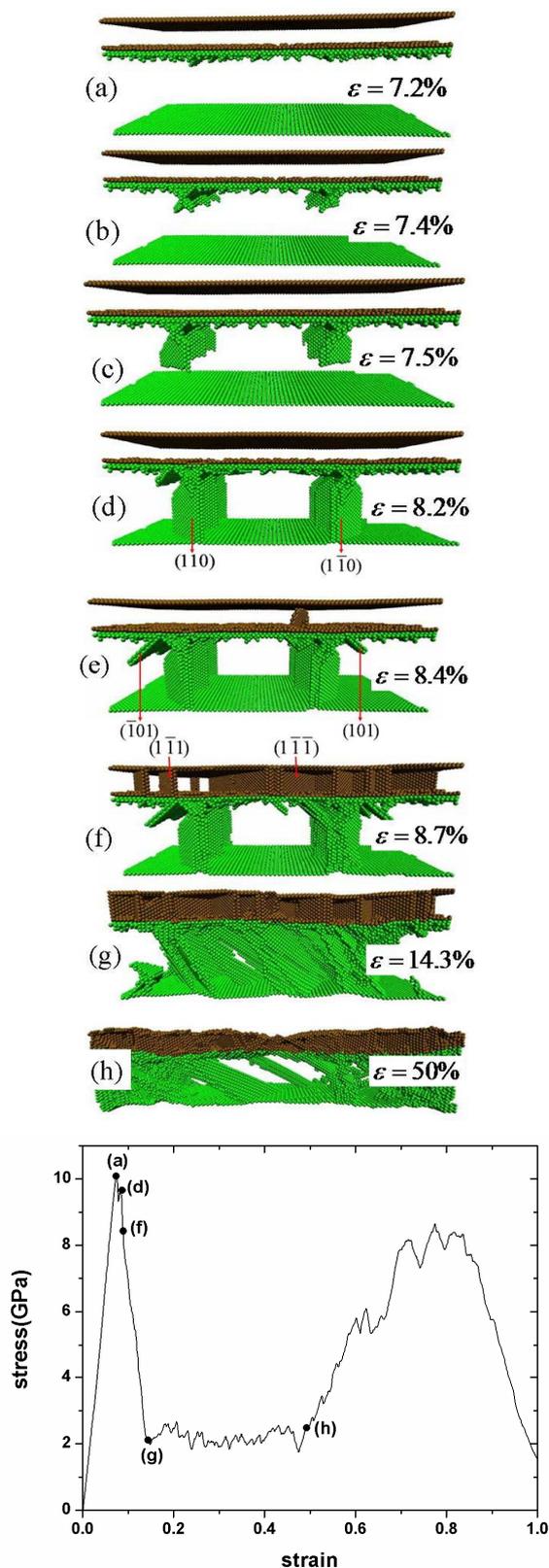


Figure 4. The nucleation and emission of dislocations from the interface and stress-strain curves
 图 4. 位错从界面处的形核和发射过程及应力应变曲线

5. 致谢

感谢国家自然科学基金青年基金(10702058)和中国博士后科学基金(20090451100)的资助。

参考文献 (References)

- [1] S. J. Lloyd, J. M. Molina-Aldareguia. Multilayered materials: A palette for the materials artist. Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A, 2003, 361(1813): 2931-2949.
- [2] P. M. Derlet, P. Gumbsch, R. G. Hoagland, et al. Atomistic simulations of dislocations in confined volumes. MRS Bulletin, 2009, 34(3): 184-189.
- [3] D. L. Zheng, S. D. Chen, A. K. Soh, et al. Molecular dynamics simulations of glide dislocations induced by misfit dislocations at the Ni/Al interface. Computational Materials Science, 2010, 48(3): 551-555.
- [4] S. Shao, S. N. Medyanik. Dislocation-interface interaction in nanoscale fcc metallic bilayer. Mechanics Research Communications, 2010, 37(3): 315-319.
- [5] D. Saraev, R. E. Miller. Atomic-scale simulations of nanoindentation-induced plasticity in copper crystals with nanometer-sized nickel coatings. Acta Materialia, 2006, 54(1): 33-45.
- [6] S. N. Medyanik, S. Shao. Strengthening effects of coherent interfaces in nanoscale metallic bilayers. Computational Materials Science, 2009, 45(4): 1129-1133.
- [7] R. G. Hoagland, R. J. Kurtz and C. H. Henager. Slip resistance of interfaces and the strength of metallic multilayer composites. Scripta Materialia, 2004, 50(6): 775-779.
- [8] J. Wang, R. G. Hoagland, J. P. Hirth, et al. Atomistic modeling of the interaction of glide dislocations with "weak" interfaces. Acta Materialia, 2008, 56(19): 5685-5693.
- [9] M. Gavrilu, J. P. Millet and H. Mazille. Corrosion behaviour of zinc-nickel coatings, electrodeposited on steel. Surface & Coatings Technology, 2000, 123(2): 164-172.
- [10] Z. S. Ma, S. G. Long, X. B. Zhang, et al. Effect of tension deformation on microstructure and mechanism of electrodeposited nickel coating. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2007, 17(1): 818-822.
- [11] G. Bonny, R. C. Pasianot and L. Malerba. Fe-Ni many-body potential for metallurgical applications. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2009, 17(1): Article ID 025010.
- [12] S. Plimpton. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. Journal of Computational Physics, 1995, 117(1): 1-19.
- [13] C. L. Kelchner, S. J. Plimpton and J. C. Hamilton. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation. Physical Review B, 1998, 58(17): 11085-11088.
- [14] S. A. Kotrechko, A. V. Filatov and A. V. Ovsjannikov. Molecular dynamics simulation of deformation and failure of nanocrystals of bcc metals. Theoretical and Applied Fracture Mechanics, 2006, 45(2): 92-99.
- [15] G. E. Norman, V. V. Stegailov and A. V. Yanilkin. The modeling of high-rate tension of crystalline iron by the method of molecular dynamics. High Temperature, 2007, 45(2): 164-172.
- [16] T. Hitomi, N. Morita, Y. Yoshida, et al. A study of structural phase transitions caused with tensile stress of single crystal iron-simulations of uniaxial tension tests using molecular dynamics. Journal of the Japan Society of Precision Engineering, 1999, 65(11): 1798-803 (in Japanese).
- [17] R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff. Molecular dynamics (MD) simulation of uniaxial tension of some single-crystal cubic metals at nanolevel. International Journal of Mechanical Sciences, 2001, 43(10): 2237-2260.
- [18] D. M. Clatterbuck, D. C. Chrzan and J. J. W. Morris. The influence of triaxial stress on the ideal tensile strength of iron. Scripta Materialia, 2003, 49(10): 1007-1011.