

摩擦学学报

TRIBOLOGY



半共格界面铜镍双层膜力学差异机制纳观探析

梁桂强, 邵睿, 姚琳, 霍嘉杰, 陈晶晶

Mechanism Analysis of Mechanical Properties for Cu-Ni Bilayers with Semi-Coherent Interface: A Molecular Simulation

LIANG Guiqiang, SHAO Rui, YAO Lin, HUO Jiajie, CHEN Jingjing

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.16078/j.tribology.2020126>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基底纹理对镍/铜纳米双层膜刮擦行为影响的分子动力学模拟

Molecular Dynamics Simulation of Substrate Texture's Effect on Nano-Scratch of Nickel/Copper Bilayer Film

摩擦学学报. 2019, 39(5): 577 <https://doi.org/10.16078/j.tribology.2019035>

氮化碳增强聚四氟乙烯摩擦学性能的分子动力学模拟

Molecular Dynamics Simulation on the Tribological Properties of the Carbon Nitride Reinforced PTFE

摩擦学学报. 2021, 41(2): 223 <https://doi.org/10.16078/j.tribology.2020136>

导电滑环Au涂层摩擦磨损行为的分子动力学模拟

Molecular Dynamics Simulation of Friction and Wear Behaviors of Au Coating for Conductive Slip Ring

摩擦学学报. 2018, 38(1): 108 <https://doi.org/10.16078/j.tribology.2018.01.014>

单晶硅高速磨削亚表层损伤机制的分子动力学仿真研究

Subsurface Damage in High-speed Grinding Process of Monocrystalline Silicon Based on Molecular Dynamics

摩擦学学报. 2017, 37(6): 845 <https://doi.org/10.16078/j.tribology.2017.06.017>

基于分子动力学方法的多层石墨烯超滑失效机理分析

Mechanism Analysis for the Breakdown of Superlubricity with Multilayer Graphene Based on Molecular Dynamics Method

摩擦学学报. 2017, 37(5): 594 <https://doi.org/10.16078/j.tribology.2017.05.005>



关注微信公众号, 获得更多资讯信息

DOI: 10.16078/j.tribology.2020126

半共格界面铜镍双层膜力学差异 机制纳观探析

梁桂强^{1,2}, 邵睿³, 姚琳³, 霍嘉杰³, 陈晶晶^{4,5*}

(1. 大理大学 工程学院, 云南 大理 671000;

2. 北京领航科工教育科技有限公司, 北京 100084;

3. 中国核电工程有限公司, 北京 100000;

4. 宁德师范学院 信息与机电工程学院, 福建 宁德 352100;

5. 南京航空航天大学 航空学院, 江苏 南京 210016)

摘要: 为深入了解纳米金属多层膜在沉积法交替制备中, 因晶格失配制备出不同半共格界面的金属多层膜受载诱导的力学特性差异的机制, 本文作者基于经典力学的分子动力学法, 对半共格Cu基Ni膜和Ni基Cu膜两种界面结构的力学性能展开探析, 揭示出多层膜半共格界面失配位错网与压痕诱导产生可动位错的相互作用规律. 研究发现: 铜镍双层膜半共格界面结构可有效提升力学性能, 归因于铜镍半共格界面受载产生的柏氏矢量Shockley分位错的差异. Cu基Ni膜半共格界面上的失配位错网对压痕中产生的可动位错表现为排斥, 有利于位错穿透半共格区域进入铜基中, 对外表现为强化作用; Ni基Cu膜半共格界面上的失配位错网对压痕中产生的可动位错表现为吸引, 阻碍位错穿透半共格区域进入镍基中, 对外表现为软化作用, 增强了材料抵抗变形的能力、耐磨性和韧性. 该性质差异可用Koehler提出的两种不同材料模量间镜像力理论解释. 此研究结果对铜镍多层膜作为涂层应用于微机电系统、海洋装备和航空航天等重大战略领域有着重要理论指导意义与借鉴价值.

关键词: 铜镍双层膜; 半共格界面; 纳米压痕; 分子动力学; 位错环

中图分类号: TH117.3

文献标志码: A

文章编号: 1004-0595(2021)05-0647-10

Mechanism Analysis of Mechanical Properties for Cu-Ni Bilayers with Semi-Coherent Interface: A Molecular Simulation

LIANG Guiqiang^{1,2}, SHAO Rui³, YAO Lin³, HUO Jiajie³, CHEN Jingjing^{4,5*}

(1. College of engineering, Dali university, Yunnan Dali 671000, China

2. Beijing Linghang Kegong Education Science and Technology Company, Beijing 100084, China

3. China Nuclear Power Engineering Co., Ltd., Beijing 100000, China

4. School of Information and Mechatronics Engineering, Ningde Normal University, Fujian Ningde 352100, China

5. College of Aerospace Engineering, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Jiangsu Nanjing 210016, China)

Abstract: Due to the influence of interface lattice mismatch, nano metal multilayers with different interface structures can be prepared in the alternate deposition process. However, the difference of interface structure often has an extremely

Received 22 June 2020, revised 22 July 2020, accepted 24 July 2020, available online 28 September 2021.

*Corresponding author. E-mail: chenjingjingfzu@126.com, Tel: +86-15750843783.

This project was supported by the Key Research and Development Projects of Science and Technology from Xiangtan City (CG-YB20191001), the Natural Science Foundation of Fujian Province (2017J01709, 2018J01509), the Major Project of Ningde Normal University (2017ZDK19) and the Fujian University Students at Innovation and Entrepreneurship Education Project ([2017] 52).

湘潭市科技重点研发项目(CG-YB20191001), 福建省自然科学基金项目(2017J01709, 2018J01509), 宁德师范学院重大科研培育项目(2017ZDK19)和2017年福建省互联网+大学生创新创业省级教育(闽教学[2017] 52号)资助.

important influence on the mechanical properties of nano indentation. Therefore, in this paper, the significant difference of mechanical properties between Cu based Ni film and Ni based Cu film semi-coherent interface structure was analyzed, and the interaction law of interface structure and dislocation induced by indentation was revealed. It was found that the different interface structures in the Cu/Ni bilayer film significantly affected the mechanical properties of the material. Among them, the existence of the semi-coherent interface of the Cu/Ni bilayer film can repel the movable dislocations produced in the indentation by the mismatched dislocation network on the semi-coherent interface of the Cu based Ni film, and so it was advantageous for the dislocation to penetrate the semi-coherent region into the copper film, which can be turned into strengthening effect externally. The mismatch dislocation network on the semi-coherent interface of Ni based Cu film had an attractive effect on the movable dislocations produced in the indentation, so that the dislocation was prevented from penetrating the semi-coherent region into the nickel film, which was shown as softening effect externally and can enhance the toughness of the material. In addition, the theoretical formula of mirror force between different moduli proposed by Koehler can be used to describe the significant difference. The research results will play a very practical guiding significance and theoretical reference value for the application of nano multilayers as coatings in MEMS, surface protection and wear resistance of marine equipment, aerospace and other fields.

Key words: Cu/Ni multilayers; semi-interface; nano-indentation; molecular dynamics; dislocation loop

纳米金属多层膜是两种及以上元素组成的多层状超薄膜,通过交替沉积而成,凭借其优异韧性、超高强度和耐辐照等力学性能被广泛应用于集成电路、海洋装备、微纳机电系统和空天防辐射装备领域^[1-2]。然而,沉积法制备的金属多层膜会在两单层膜间形成不同界面结构,导致金属多层膜有着迥然不同的性质^[3],比如材料软硬性、耐磨性、防腐性和摩擦性能等不同。根据金属多层膜的界面晶格失配度,可分为共格界面、半共格界面和非共格界面三种类型。由于铜与镍晶格失配度小,铜镍多层膜在沉积中易形成半共格界面,在界面中有失配位错网状特征产生。

近来,通过试验与理论计算结合,国内外学者聚焦于金属多层膜的界面结构设计与其力学性能提升的基础科学问题^[3-12]。Zhu等^[3]基于透射电镜和纳米压痕法,研究了铜/镍多层膜的显微组织、硬度和蠕变行为,结果表明:具有良好调制结构的多层膜在低周期形成相干超晶格,并发现铜镍多层膜在调制周期为7~17 nm时,其强度随着调制周期下降而增加。李锐等^[9]基于分子动力学法(简称MD)研究不同界面结构(共格界面、共格孪晶界面、半共格孪晶界面)对Cu/Ni多层膜力学性质的影响。结果指出:纳米压痕时,不同界面结构起到的强化或软化作用机理不同。Mckeown等^[10]用原子力显微镜对铜银和铜镍多层膜的硬度进行测试,发现调制周期大于10 nm时,两种多层膜都满足Hall-Petch准则。Fu等^[11-12]采用MD法研究了共格孪晶界面和厚度对CuNi多层膜的力学性能影响,指出孪晶界与压痕产生的部分位错间发生耦合反应,形成了以软化为主的孪晶界,该孪晶部分滑移以及孪晶界平行的部分滑移均能有效降低材料硬度。上述研究虽对

铜镍多层膜的不同界面结构所表现的力学性质差异做了分析与讨论,并取得一定进展,但对半共格界面CuNi多层膜力学特性差异的机制,有待进一步深入研究。受纳米时空尺度限制,用精密仪器法研究纳米多层膜力学性质差异机制所耗人物财的代价十分高昂,而MD法可克服传统研究法的不足,在动态演绎纳米金属多层膜的原子轨迹迁移中独具特色。

因此,本文作者根据试验沉积法制备的铜镍双层金属膜中,常出现Cu基Ni膜和Ni基Cu膜两种界面结构。基于分子动力学法,建立铜镍双层膜半共格界面物理模型,研究两种半共格界面结构的力学特性差异机制。在此研究中将为半共格界面铜镍多层膜力学特性差异提供机理解释,也对金属多层膜应用于精仪、空天、船舶和生化等领域提供重要的理论参考价值。

1 分子动力学计算

1.1 MD设置

依据纳米压痕法可测量样品载荷与压深关系,及硬度力学属性^[13]。采用MD法建立四种物理模型(见图1),研究半共格界面结构Cu基Ni膜和Ni基Cu膜的力学差异机制。试验中发现沿[111]方向的Cu/Ni多层膜生长孪晶界面结构的力学性质有明显差异^[5]。因此,建模时,半共格界面铜镍多层膜物理模型X、Y、Z轴晶向选取分别为 $[\bar{1}\bar{1}2]$ 、 $[\bar{1}10]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 。采用半球形金刚石压头作为纳米压痕的施加载荷对象,并刚性化处理。根据沉积法制备金属多层膜的排列顺序不同,建立了Cu基Ni膜和Ni基Cu膜两种界面结构,上层膜厚度为10 a,基体厚度为30 a,其中a表示对应基体晶格常数。铜镍双层膜的Cu晶格常数为0.361 5 nm, Ni晶格常数为

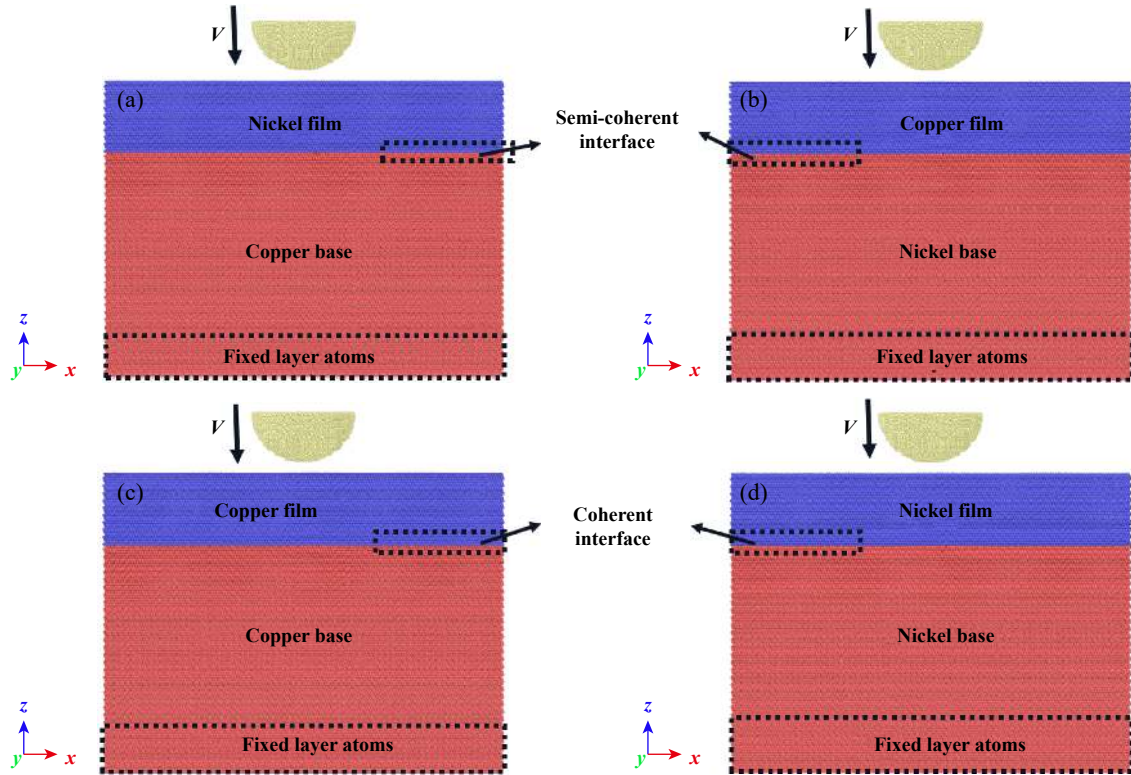


Fig. 1 Nano-indentation model of Cu-Ni bilayer film: (a) Cu based Ni film, (b) Ni based Cu film (c) single crystal Cu, (d) single crystal Ni

图 1 铜镍膜双层膜纳米压痕物理模型: (a)铜基镍膜, (b)镍基铜膜, (c)单晶铜, (d)单晶镍

0.352 nm. 整个计算采用单晶铜、单晶镍、铜基镍膜和镍基铜膜四种模型. 单晶铜和单晶镍的基底与铜镍双层膜基底尺寸保持一致, 基底上层膜尺寸也均保持一致, 单晶铜和单晶镍在界面区为共格区域[见图1(c)和图1(d)]. 四种模型的压头半径均一致, 设为4 nm, 压头以50 m/s匀速沿着Z轴负方向加载. 为使压痕产生的位错与界面充分反应, 最大压深为3 nm. 为消除体系“尺度效应”和“界面效应”影响^[14-16], 模型X和Y轴采用周期性边界, Z轴采用非周期性边界, 并固定Z轴最低端5层原子, 防止基底原子轨迹迁变而引起计算精度降低^[17-18]. 为保证铜镍多层膜位错演变不受温度波动影响, 给予体系10 K的随机初始速度, 并采用朗之万控制运动层原子温度为10 K. 整个计算基于NVE系统对牛顿方程计算迭代, 时间步长为1 fs^[19], 经2 ns充分弛豫后, 体系结构、温度和总能量趋于平衡. 所有计算实施基于开源LAMMPS软件完成.

1.2 MD势函数描述

基于Verlet算法^[20]将任意第*i*个原子在*t*+ Δt 和*t*- Δt 时刻的位置坐标分别用时刻*t*的位置坐标按泰勒公式展开:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + \Delta t \cdot v(t) + (\Delta t)^2 \cdot \frac{a(t)}{2} + \dots \quad (1)$$

$$r(t - \Delta t) = r(t) - \Delta t \cdot v(t) + (\Delta t)^2 \cdot \frac{a(t)}{2} + \dots \quad (2)$$

将式(1)和(2)相加可得原子在*t*+ Δt 时刻的位置:

$$r(t + \Delta t) = 2r(t) - r(t - \Delta t) + (\Delta t)^2 \cdot \frac{F(t)}{m} \dots \quad (3)$$

将式(1)和(2)相减可得原子在*t*时刻速度为

$$v(t) = \frac{r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (4)$$

在式(1~4)中:*m*表示原子质量, *F*(*t*)为原子所受的力, *v*(*t*)和*a*(*t*)分别表示原子在*t*时刻的速度和加速度.

由于MD计算的势函数选取对计算结果准确性起到决定性作用. 所以本文中拟采纳的势函数皆来源可靠文献支撑. 其中Embedded Atom Method (简称EAM)势函数可描述Cu-Cu、Ni-Ni、Cu-Ni间相互作用^[21]. 文献^[11-12]也表明, 该势函数在研究半共格界面铜镍双层膜变形机制中有显著优势, EAM势表达式见式(5).

$$E_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \Phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i E_i(\rho_i) \quad (5)$$

上式(5)中: *E*_{tot}为总能量, 右式中第一项为原子*i*, *j*之间的对势, 第二项为嵌入势.

金刚石压头与铜镍双层膜间的相互作用则采用

Morse势函数^[22],其表达式见式(6):

$$E(r) = D(\exp^{-2\alpha(r-r_0)} - 2\exp^{-\alpha(r-r_0)}) \quad (6)$$

式(6)中: D 、 α 、 r_0 分别表示结合能系数、势能梯度系数、平衡距离, C-Ni、C-Cu势参数参阅文献[23-24], 具体值列于表1中.

表1 C-Ni、C-Cu的Morse势具体参数选取^[23-24]

Table 1 Parameters of Morse potential function are listed for C-Ni and C-Cu interaction

Interface	D/eV	$A/(\text{nm}^{-1})$	r_0/nm
C-Ni	1.009 4	19.875	0.256
C-Cu	0.087	17.0	0.22

1.3 位错类型识别

运用CNA方法^[25]辨别压痕中位错类型,表征单晶铜和单晶镍及铜镍多层膜变形微结构差异.图2绿色原子表示面心立方结构(FCC),红色原子表示密排六方结构(HCP),蓝色原子表示体心立方结构(BCC),白色原子表示其他原子结构.为更清晰观察位错原子演化过程和半共格界面失配位错网构型,在可视化中删除FCC和BCC及其他结构类型,仅显示HCP结构.由于金属Cu和Ni为面心立方,经2 ns驰豫后,两模型会在界面处形成共格区域[见图2(a)黄虚线框]及半共格区域[见图2(b)黄虚线框].图2中绿色原子为面心立方结构,双层红色原子表示堆垛层错.

2 结果与分析

2.1 半共格界面力学特性差异

在铜镍多层膜中Cu/Ni/Cu/Ni……交替生长,在界面中常出现两种半共格界面,即Cu基Ni膜和Ni基Cu膜

Cu膜.因此,本文中作者详细讨论CuNi多层膜的两种半共格界面结构力学特性差异化机制.首先需定量计算材料两种界面结构硬度,并与共格区域的单晶铜和单晶镍比对.图3(a)为四种模型的硬度与压深曲线关系,硬度计算^[26]根据 $H=F/S$, F 表示载荷, S 表示接触面积.取图3(a)的压深 h 为0.5~2.5 nm范围内的硬度值求平均,得出图3(b)四种模型力学特性表征的硬度值.

从图3(b)知:Cu基Ni膜硬度(20.95 GPa)与单晶Ni硬度(21.19 GPa)表现轻微差异,而Cu基Ni膜硬度(20.95 GPa)却比单晶铜硬度(17.3 GPa)高了3.65 GPa,结果表明:在Cu基上镀Ni膜,可获得与单晶Ni硬度相当,大幅度提高了Cu材料的硬度.为进一步探究Cu基Ni膜硬度比单晶Cu高且和单晶Ni相当的主因,分析可能受两方面影响:一方面是基底上Ni膜尺寸厚度的影响,另一方面是Cu基Ni膜形成的半共格界面结构导致.对此,绘制出Ni膜厚度为7 a、10 a和13 a的载荷与压深曲线[见图4(a)].结果表明:Ni膜厚度为7 a、10 a和13 a的载荷曲线随压深增加互相交替上升,曲线间未表现出明显差异化,说明Ni膜的厚度不占主导.极大可能是Cu基Ni膜半共格界面引入,使得该材料硬度与单晶镍硬度相当,其机理见下文解释.从图3(b)还可知: Ni基表面镀Cu膜硬度(16.22 GPa)比单晶Cu硬度(17.3 GPa)却小了1.08 GPa,比单晶Ni硬度小4.97 GPa.表明Ni基Cu膜半共格界面引入会软化该材料,增强了该材料的耐磨性.可见,Cu基表面镀Ni膜和Ni基表面镀Cu膜表现出截然不同的力学特性,其差异化机理解释见下文阐述.

为探究铜镍半共格界面不同的力学差异本质,需着重考虑两方面因素:一方面是共格区域的单晶铜和

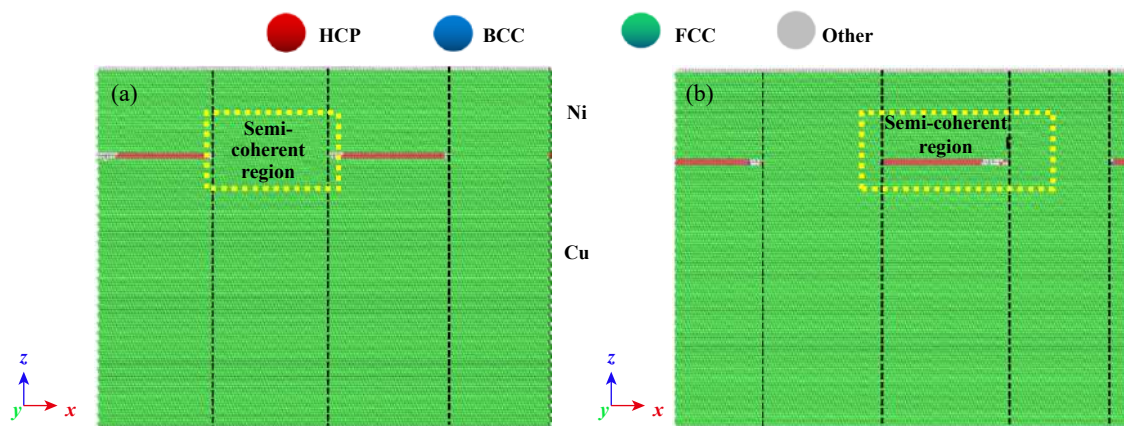


Fig. 2 Semi-coherent interface structure of Cu-Ni bilayer film: (a) semi-coherent interface of Cu based Ni film; (b) semi-coherent interface of Ni based Cu film

图2 铜镍双层膜半共格界面结构: (a) Cu基Ni膜半共格界面; (b) Ni基Cu膜半共格界面

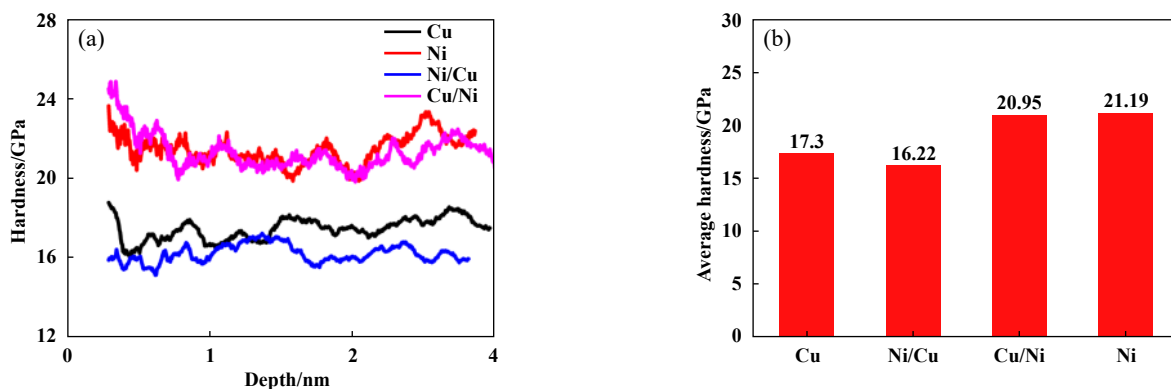


Fig. 3 Comparison of mechanical properties for four models: (a) comparison of hardness of four models; (b) mean hardness for four models

图3 四种模型的力学性质对比: (a) 硬度与压深关系; (b) 四种模型的硬度平均值

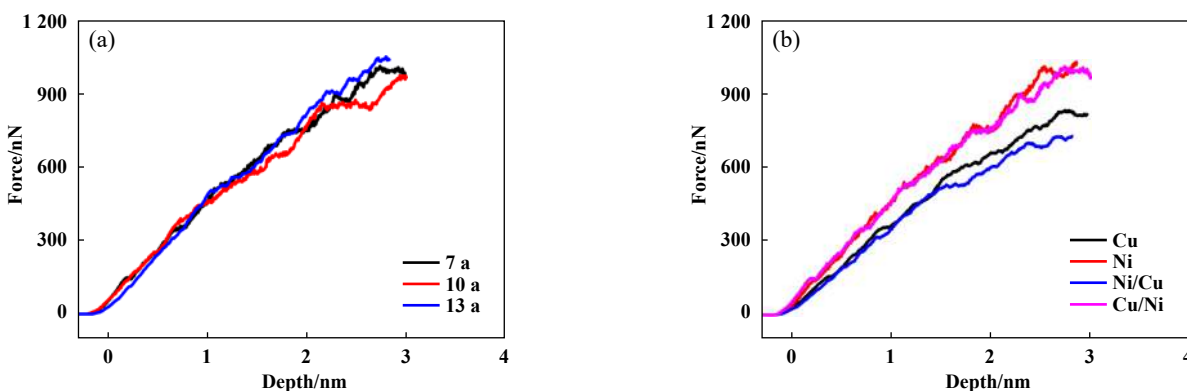


Fig. 4 (a) Load vs depth for Cu based samples with different Ni film thickness; (b) Load vs depth for four models

图4 (a)不同Ni膜厚度的Cu基样品载荷与压深关系; (b)四种模型的载荷与压深曲线

单晶镍受载诱导的位错演化特征; 另一方面是半共格界面失配位错网与上层膜塑性变形的可动位错间耦合反应. 因此, 先对共格区域单晶Cu和单晶Ni进行微结构分析, 分别取压深 h 为0.5、1.5和3 nm的微结构展示(见图5). 从图5可知, 受载时, 单晶铜和单晶镍都发生不同程度塑性变形, 出现密排六方结构, 且该位错结构数随压深增加而增多. 采用Dislocation Extraction Algorithm (简称DXA)法^[27]识别压痕中分位错线, 该方法能有效描述压痕中的伯氏矢量Shockley分位错(见图5绿色线). 从图5知, 随着压痕持续进行, 图5中分位错线会沿伯氏矢量方向增殖繁衍(见图5绿色线), 并在增殖运动中, 相邻位错间会产生排斥与吸引, 进而演化出新位错构型. 单晶Cu会形成棱柱型位错环[见图5(c)虚线]. 整个压痕中, 位错环微结构演化详见图6(a). 图6(a)表明棱柱型位错环能稳定一定时间, 获得与文献[18]一致的结论. 对比图5(a, c, e)和图5(b, d, f)可明显观察到, 单晶镍抗塑性变形能力较单晶铜强, 以致其硬度明显高于单晶Cu[见图3(b)], 具体差值为单晶镍

硬度高于单晶铜3.89 GPa; 文献[3]中采用试验法测出单晶镍硬度比单晶铜硬度高3.4 GPa, 表明MD计算结果与试验结果获得一致性, 间接验证了模拟设置和势函数选取是可靠的. 此外, 随着压痕持续进行, 单晶Ni也形成棱柱型位错环结构[见图5(f)虚线], 该位错环特征演化结构见图6(b). 从图3~4可知, 单晶Cu和单晶Ni的载荷与硬度曲线, 皆随压深增加而近似线性振荡趋势递增, 其主因是单晶金属内的塑性变形位错环的不断增殖繁衍和位错间耦合反应导致.

2.2 半共格界面力学差异机理

为探索半共格界面上失配位错网与上层膜塑性变形的位错间相互作用, 首先需了解铜镍双层膜两种不同半共格界面结构特征(见图7). 图7展示了半共格界面处有三角形堆垛层错区出现(图7红色区), 且与非位错区(见图7空白区)交替排列, 堆垛层错边缘会形成Shockley分位错(见图7绿色线). 从图7知: 铜镍双层膜半共格界面结构的Shockley分位错可交汇形成“钉轧”效果, 构成界面失配位错网状结构[见图7(a~b)]. 通过

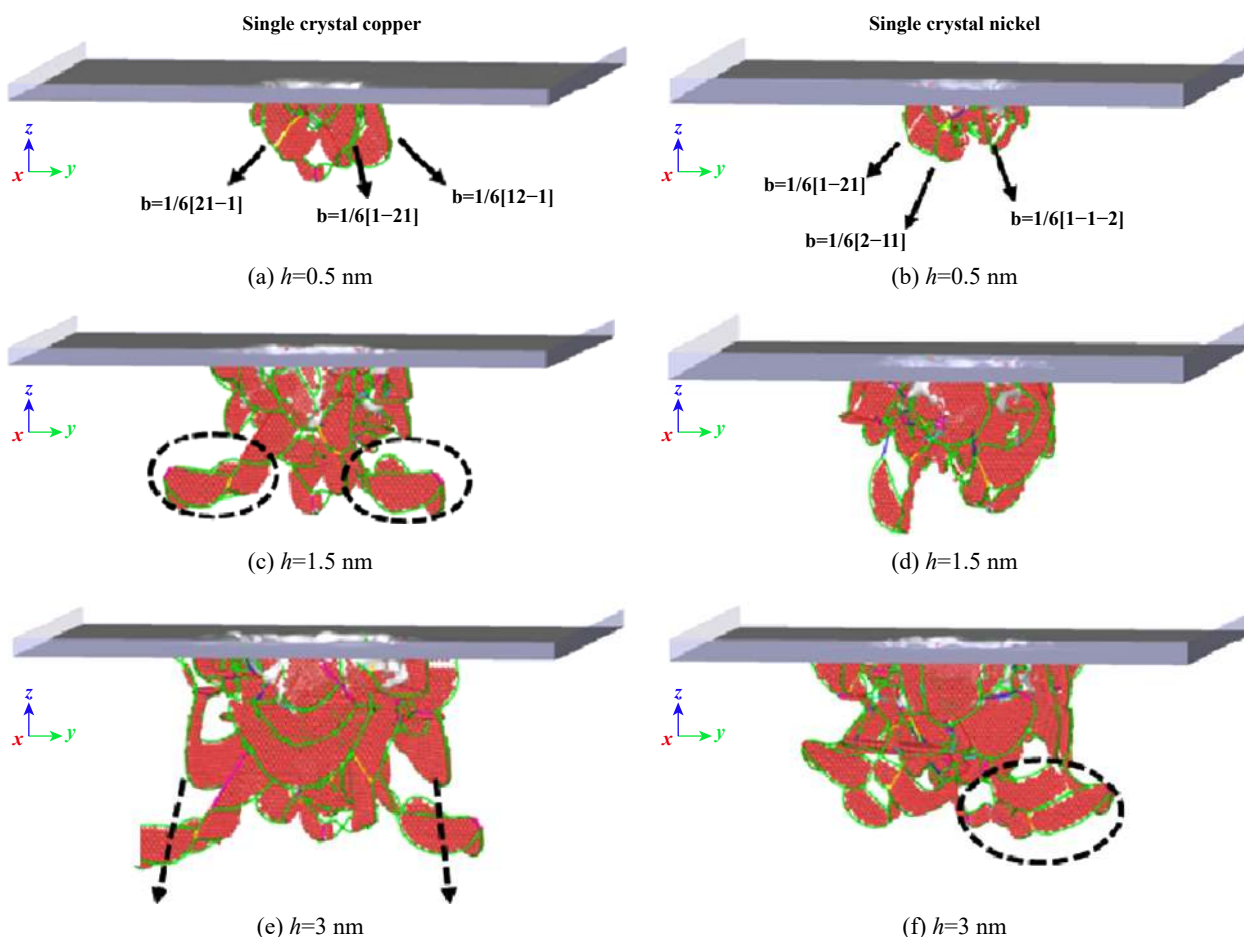


Fig. 5 Micro-structure evolution for single crystal Cu and single crystal Ni substrate during nano-indentation: (a,c,e) evolution process of single crystal Cu; (b,d,f) evolution process of single crystal Ni

图 5 共格区域下的单晶Cu和单晶Ni压痕微结构演化过程: (a, c, e)为单晶Cu演化过程; (b, d, f)为单晶Ni演化过程

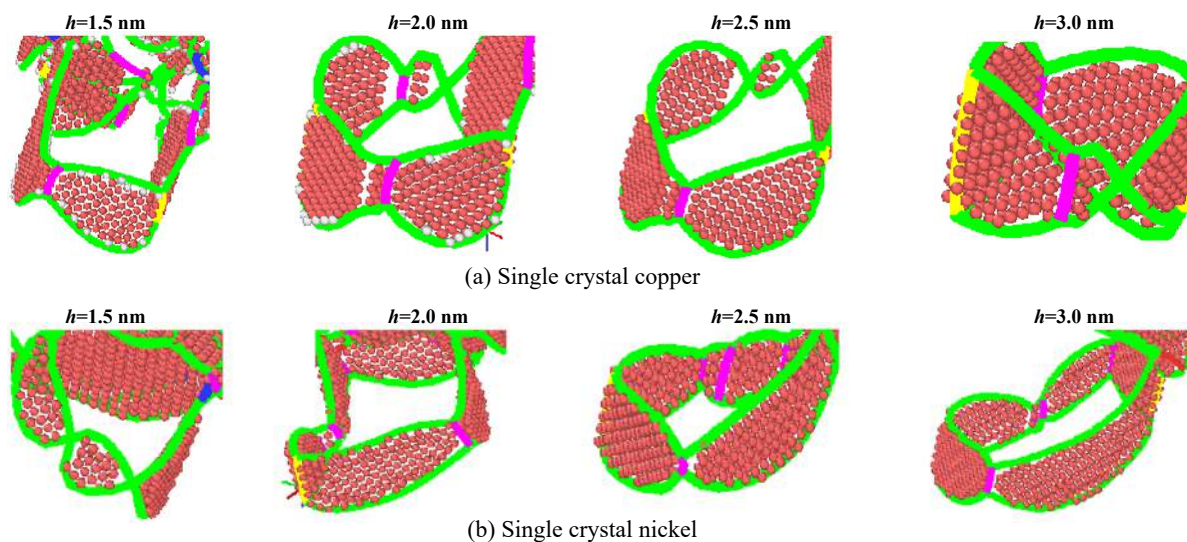


Fig. 6 Structure evolution of prismatic dislocation ring during nano-indentation for (a) single crystal copper and (b) single crystal nickel

图 6 共格区域的(a)单晶铜和(b)单晶镍纳米压痕加载的棱形位错环结构演化

采用DXA法^[27]计算出分位错线取向, 得出Cu基Ni膜界面的Shockley分位错柏氏矢量为 $1/6[211]$ 、 $1/6[\bar{1}2\bar{1}]$ 、

$1/6[1\bar{1}2]$ [见图7(a)箭头]; 而Ni基Cu膜界面的Shockley分位错柏氏矢量为 $1/6[12\bar{1}]$ 、 $1/6[\bar{2}\bar{1}\bar{1}]$ 、 $1/6[\bar{1}\bar{1}2]$ [见图7(b)

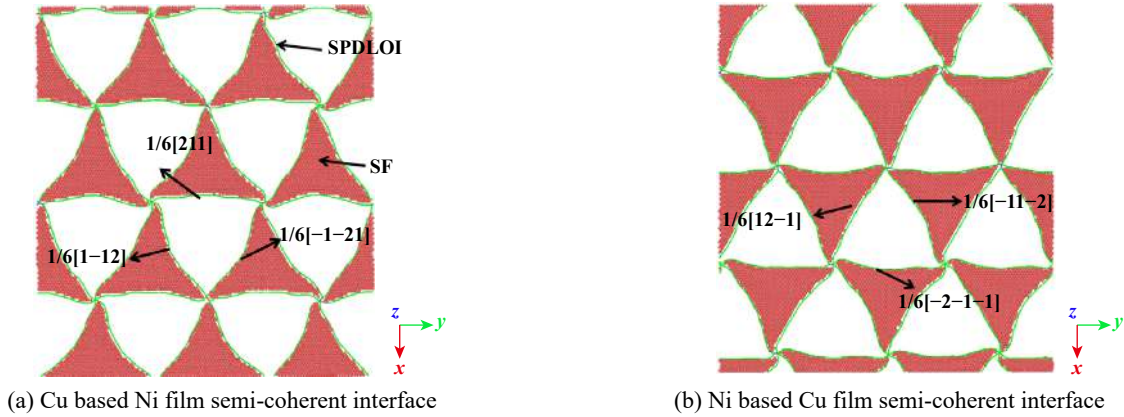


Fig. 7 Semi-coherent interface morphology on X - Y plane: (a) Cu based Ni film semi-coherent interface; (b) Ni based Cu film semi coherent interface

图7 X - Y 平面半共格界面形貌: (a) Cu基Ni膜半共格界面; (b) Ni基Cu膜半共格界面

箭头]. 可见, 两种不同界面结构的铜镍双层膜的Shockley分位错柏氏矢量有明显差异. 可猜想铜镍半共格界面的柏氏矢量显著差异, 会极大影响半共格界面位错的运动轨迹, 进而改变金属多层膜力学性质.

分别取铜镍双层膜在压深 h 为1.25、2和3 nm时的微结构分析(见图8). 对比图8(a~b)知: 半共格界面上失配位错网与压痕中产生的位错间发生了耦合反应, 导致原有半共格界面的失配位错网结构发生弯曲变形而消耗部分能量, 改变了半共格区域形态, 而演化出新失配位错网构型(见图8). 潘金生等^[28]针对同一滑移面下两位错间相互作用力形式提出1个理论性公式(见式7): 根据此公式把图8(a)和图8(b)中的柏氏矢量分别代入式(7), 可得以下两种情况讨论: 一种是在Cu基Ni膜界面中, 观察图8(a)中Cu基Ni膜微结构界面失配位错网上的分位错线与堆垛层错间由于 $b_1 \times b_2 > 0, b_3 \times b_4 > 0$, 说明两Shockley分位错间相互作用表现为排斥力, 导致半共格区域构型发生了变化[见图8(a,c,e)], 消耗掉更多能量. 但由于失配位错网钉扎作用, 易引起该位错网构型发生弯曲变形, 进而增大共格区域面积, 而相应减小了半共格区域面积[见图8(e)], 易使得纳米压痕产生的位错可直接穿透Cu基Ni膜的半共格界面直接进入铜膜中[见图8(c,e)]. 另一种是在Ni基Cu膜中, 观察图8(b)可知, 失配位错网的分位错线与堆垛层错间由于 $b_5 \times b_6 < 0, b_7 \times b_8 < 0$, 表明两Shockley分位错间相互作用表现为吸引力, 容易相互咬合而形成新的位错释放能量, 导致失配位错网发生弯曲变形, 阻碍了堆垛层错穿过Ni基Cu膜半共格界面而进入镍膜中[见图8(d,f)].

$$fx = \frac{Gb_x \times b_y}{2\pi r} \quad (7)$$

式(7)中: G 表示剪切模量, b 为柏氏矢量, r 表示两位错间间距. 若 $fx > 0$, 两位错间表现为排斥作用; 若 $fx < 0$, 两位错间表现为吸引作用.

随压深持续增加, 从图8(c)知, 在Cu基Ni膜中, 失配位错网因与堆垛层错排斥作用明显, 可清晰看出图8(c)相比图8(a)共格区域面积增大不少, 导致一部分位错更易穿过共格界面区域进入到Cu膜中[见图8(c)]. 在图8(d)的Ni基Cu膜中, 压痕产生的大量位错因与半共格界面失配位错网发生相互吸引作用释放出能量, 导致压痕产生的位错被限定在Cu膜内, 无法穿透进入Ni膜内, 相当于Ni基Cu膜半共格界面对位错起到阻碍作用, 导致其韧性增强, 提高了该材料耐磨性. 在压深为3 nm时, 从图8(e)相比图8(c)、图8(f)相比图8(d), 再次证实Cu基Ni膜半共格界面的强化排斥作用越加明显, 而Ni基Cu膜半共格界面的软化吸引作用更加凸显.

基于上述铜镍双层膜半共格界面结构导致位错穿透半共格界面出现显著差异特征, 本文作者运用Koehler^[29]提出的两种不同模量间材料所形成的界面对位错产生一种镜像力, 给不同界面间的作用力赋予公式化, 文献[30]也对此给出公式(8), 图9为该公式示意图, 方便理解公式变量含义.

$$F = \frac{RE_B b^2 (t_B - 2r)}{4\pi(t_B - r)} \quad (8)$$

式(8)中: $R = (E_A - E_B)(E_A + E_B)$, 如 $F > 0$, 界面对位错为排斥力, $F < 0$, 界面对位错具有吸引力. 在Cu基Ni膜中, E_A, E_B 分别表示Cu、Ni弹性模量, b 为Shockley分位错柏氏矢量, t_B 表示Ni层厚度, r 表示位错在Ni层内距离界面的距离. 依据文献[31]的Cu弹性模量为124 GPa, Ni弹性模量为218 GPa. 当位错接近界面时, $t_B > 2r$, 而 $E_A < E_B$. 由镜像力公式可得, 镜像力 F 对Ni内

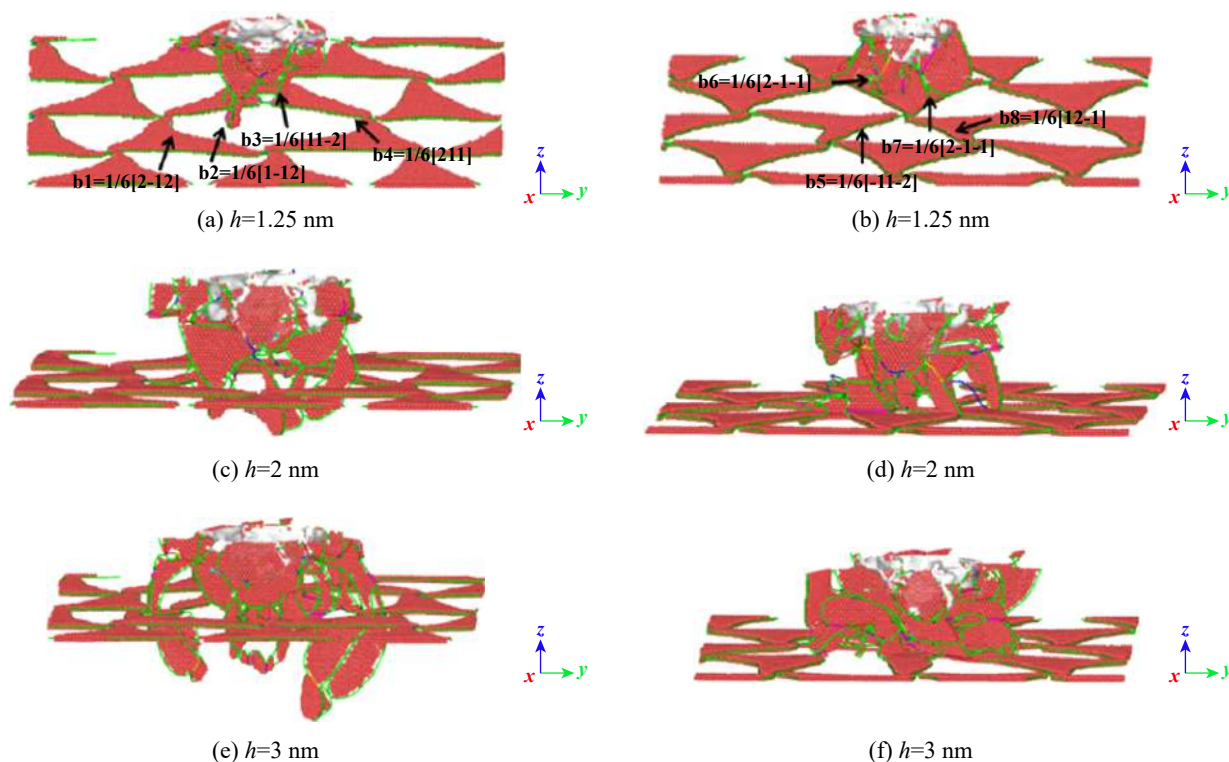


Fig. 8 Micro-structure evolution for semi-coherent interface for Cu-Ni bilayer film ($h=1.25, 2, 3$ nm): (a,c,e) semi-coherent interface of Cu based Ni film; (b,d,f) semi-coherent interface of Ni based Cu film

图8 压痕的铜镍双层膜半共格界面微结构演化(压深 $h=1.25, 2$ 和 3 nm): (a,c,e) Cu基Ni膜半共格界面; (b,d,f) Ni基Cu膜半共格界面

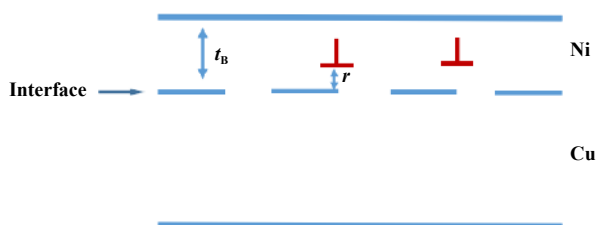


Fig. 9 Theoretical model of mirror force
图9 镜像力理论模型

位错表现为负值,界面对位错具有吸引力,位错有利于从共格区域进入到Cu膜中.在Ni基Cu膜中镜像力 F 对Ni的位错表现为正值,界面对位错具有排斥作用,使位错在界面处堆积,很难进入到Ni基中.可见,镜像力公式可很好地解释本结果的微观现象,获得与潘金生提出的理论公式一致的结论.因此,界面结构的共格程度由多层膜上下晶体结构的失配程度所决定.由于Cu-Ni晶格失配度为2.7%,模型经充分弛豫只形成半共格界面结构,尚未对其他半共格失配度的界面结构进行讨论.

3 结论

采用分子动力学法对半共格界面引起铜镍双层

膜力学特性显著差异的机制展开深究,揭示出铜镍多层膜半共格界面结构与压痕诱导产生的位错间相互作用规律.纵观本文中所述论据,现归纳总结出以下重要结论:

a. 在理论计算中,单晶Ni和单晶Cu受载荷作用,晶体内部发生不同程度的塑性变形,并出现一定程度HCP缺陷结构,该缺陷数目随压深增加而增多,且单晶镍在压痕中产生的塑性变形程度较单晶铜明显减弱,以致其硬度整体表现强于单晶Cu.

b. 铜镍双层膜的半共格界面结构可改变材料力学性质.其中,Cu基表面镀Ni膜可使铜材料得到强化,达到硬度与单晶Ni相当,而Ni基表面镀Cu膜可使该材料出现软化,其硬度远低于单晶镍,材料软化使得韧性增强,增强了材料抵抗变形能力和耐磨性.

c. 分析了上层膜中受压痕载荷影响产生的位错与半共格界面上的失配位错网结构的相互作用力,Cu基Ni膜的强化作用归因于Cu基Ni膜界面上的失配位错网对压痕位错起排斥作用,导致半共格界面的共格区域增大,更有利于压痕位错穿过界面进入Cu基;而弱化作用来自于Ni基Cu膜界面上的失配位错网对位错的吸引,限制了压痕位错只在Cu层膜内运动,不

利于位错穿透进入Ni基中.

参考文献

- [1] Misra A, Krug H. Deformation behavior of nanostructured metallic multilayers[J]. *Advanced Engineering Materials*, 2001, 3(4): 217–222. doi: [10.1002/1527-2648\(200104\)3:4<217::AID-ADEM217>3.0.CO;2-5](https://doi.org/10.1002/1527-2648(200104)3:4<217::AID-ADEM217>3.0.CO;2-5).
- [2] Embury J D, Hirth J P. On dislocation storage and the mechanical response of fine scale micro-structures[J]. *Acta Metallurgica Et Materialia*, 1994, 42(6): 2051–2056. doi: [10.1016/0956-7151\(94\)90030-2](https://doi.org/10.1016/0956-7151(94)90030-2).
- [3] Zhu X Y, Liu X J, Zong R L. Microstructure and mechanical properties of nanoscale Cu/Ni multilayers[J]. *Materials Science Engineering A*, 2010, 527(4-5): 1243–1248. doi: [10.1016/j.msea.2009.09.058](https://doi.org/10.1016/j.msea.2009.09.058).
- [4] Rao S I, Hazzledine P M. Atomistic simulations of dislocation-interface interactions in the Cu-Ni multilayer system[J]. *Philosophical Magazine A*, 2000, 80(9): 2011–2040. doi: [10.1080/01418610008212148](https://doi.org/10.1080/01418610008212148).
- [5] Yan X L, Coetsee E, Wang J Y. Quantitative evaluation of sputtering induced surface roughness and its influence on AES depth profiles of polycrystalline Ni/Cu multilayer thin films[J]. *Applied Surface Science*, 2017, 411(5): 73–8103.194. doi: [10.1016/j.apsusc.2017.10.1016/j.apsusc.2017.10.1016](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.10.1016/j.apsusc.2017.10.1016).
- [6] Weng Shayuan, Ning Huiming, Hu Ning, et al. Strengthening effects of twin interface in Cu/Ni multilayer thin films-A molecular dynamics study[J]. *Materials & Design*, 2016, 111(10): 1–8. doi: [10.1016/j.matdes.2016.08.069](https://doi.org/10.1016/j.matdes.2016.08.069).
- [7] Fu Tao, Peng Xianghe, Zhao Yinbo, et al. MD simulation of effect of crystal orientations and substrate temperature on growth of Cu/Ni bilayer films[J]. *Applied Physics A*, 2016, 122(2): 1–9. doi: [10.1007/s00339-015-9592-3](https://doi.org/10.1007/s00339-015-9592-3).
- [8] Cheng Dong, Yan Zhijun, Yan Li. Molecular dynamics simulation of strengthening mechanism of Cu/Ni multilayers[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2008, 44(12): 1461–1464 (in Chinese) [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]. doi: [10.1016/j.actamat.2008.08.036](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2008.08.036).
- [9] Li Rui, Liu Teng, Chen Xiang. Influence of interface structure on nanoindentation behavior of Cu/Ni multilayer film: Atomic scale simulation[J]. *Acta Physica Sinica*, 2018, 67(19): 1–10 (in Chinese) [李锐, 刘腾, 陈翔. 界面结构对Cu/Ni多层膜纳米压痕特性影响的分子动力学模拟[J]. *物理学报*, 2018, 67(19): 1–10]. doi: [10.7498/aps.67.20180958](https://doi.org/10.7498/aps.67.20180958).
- [10] McKeown J, Misra A, Kung H, et al. Microstructures and strength of nanoscale Cu-Ag multilayers[J]. *Scripta Materialia*, 2002, 46(8): 593–598. doi: [10.1016/S1359-6462\(02\)00036-2](https://doi.org/10.1016/S1359-6462(02)00036-2).
- [11] Fu Tao, Peng Xianghe, Chen Xiang, et al. Molecular dynamics simulation of nanoindentation on Cu/Ni nanotwinned multilayer films using a spherical indenter[J]. *Scientific Reports*, 2016, 6: 35665. doi: [10.1038/srep35665](https://doi.org/10.1038/srep35665).
- [12] Fu Tao, Peng Xianghe, Weng Shayuan, et al. Molecular dynamics simulation of effects of twin interfaces on Cu/Ni multilayers[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2016, 658(16): 1–7. doi: [10.1016/j.msea.2016.01.055](https://doi.org/10.1016/j.msea.2016.01.055).
- [13] Wang Yongqiang, Tang Sai, Guo Jian. Molecular dynamics study on deformation behaviour of monocrystalline GaN during nano abrasive machining[J]. *Applied Surface Science*, 2020, 510(20): 145492. doi: [10.1016/j.apsusc.2020.145492](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.145492).
- [14] Huang Jianmeng, Chen Jingjing, Li Ning. Analysis of the contact and friction force behaviour between different indenter shape and substrate on atomic scale[J]. *Tribology*, 2015, 35(3): 308–314 (in Chinese) [黄健萌, 陈晶晶, 李凝. 两种不同形状压头与单晶铜基体间接触力和摩擦力的纳观分析[J]. *摩擦学学报*, 2015, 35(3): 308–314]. doi: [10.16078/j.tribology.2015.03.010](https://doi.org/10.16078/j.tribology.2015.03.010).
- [15] Chen Jingjing, Hu Hongjun, Lai Lianfeng. Effect of adhesive contact failures on single crystal copper with different diamond radius[J]. *Surface Technology*, 2018, 47(8): 1–5 (in Chinese) [陈晶晶, 胡洪钧, 赖联锋. 金刚石探针曲率半径对单晶铜表面粘附接触失效影响分析[J]. *表面技术*, 2018, 47(8): 1–5]. doi: [10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2018.08.000](https://doi.org/10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2018.08.000).
- [16] Chen Jingjing, Hu Hongjun, Li Baozhen. Molecular dynamics simulation of failure in adhesive contact with single crystal copper[J]. *Surface Technology*, 2017, 46(8): 195–200 (in Chinese) [陈晶晶, 胡洪钧, 李保震. 纳观单晶铜表面粘着接触失效的分子动力学模拟[J]. *表面技术*, 2017, 46(8): 195–200]. doi: [10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2017.08.032](https://doi.org/10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2017.08.032).
- [17] Cui Yuhong, Li Haitao, Xiang Henggao, et al. Plastic deformation in zinc-blende AlN under nanoindentation: a molecular dynamics simulation[J]. *Applied Surface Science*, 2019, 466(20): 757–764. doi: [10.1016/j.apsusc.2018.10.009](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.10.009).
- [18] Xiang Henggao, Li Haitao, Fu Tao, et al. Formation of prismatic loops in AlN and GaN under nanoindentation[J]. *Acta Materialia*, 2017, 138(23): 131–139. doi: [10.1016/j.actamat.2017.06.045](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.06.045).
- [19] Chen Jingjing, Zhang Hui, Xiang Henggao. Atomistic modelling of interface structure and deformation mechanisms in the Al/GaN multilayer under compression[J]. *Molecular Simulation*, 2019, 45(11): 921–926. doi: [10.1080/08927022.2019.1610952](https://doi.org/10.1080/08927022.2019.1610952).
- [20] Verlet L. Computer “experiment” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules[J]. *Health Physics*, 1967, 22(1): 79–85. doi: [10.1097/00004032-197201000-00013](https://doi.org/10.1097/00004032-197201000-00013).
- [21] Foiles S M, Baskes M I, Daw M S. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys[J]. *Physical Review B*, 1988, 33(12): 7983–7991. doi: [10.1103/PhysRevB.33.7983](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.33.7983).
- [22] Morse P M. Diatomic molecules according to the ware mechanics II: Vibrational levels[J]. *Physical Review*, 1929, 34(2): 57–64. doi: [10.1103/PhysRev.33.932](https://doi.org/10.1103/PhysRev.33.932).

- [23] Chang Wen-Yang, Fang Te-Hua, Lin Shiang-Jiun, et al. Nanoindentation response of nickel surface using molecular dynamics simulation[J]. *Molecular Simulation*, 2010, 36(11): 815–822. doi: [10.1080/08927021003677761](https://doi.org/10.1080/08927021003677761).
- [24] Imran M, Hussain F, Rashid M, et al. Molecular dynamics study of the mechanical characteristics of Ni/Cu bilayer using nanoindentation[J]. *Chinese Physics B*, 2012, 21(12): 126802. doi: [10.1088/1674-1056/21/12/126802](https://doi.org/10.1088/1674-1056/21/12/126802).
- [25] Weng Shengbin, Chen Jingjing, Zhou Jianqiang, et al. Analysis of elastic-plastic deformation behaviors and failure mechanisms for single crystal copper induced by nanoindentation[J]. *Surface Technology*, 2021, 50(5): 216–223 (in Chinese) [翁盛彬, 陈晶晶, 周建强, 等. 纳米压痕诱导单晶铜弹塑性变形分析与破坏机理研究[J]. *表面技术*, 2021, 50(5): 216–223]. doi: [10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2021.05.024](https://doi.org/10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2021.05.024).
- [26] Fan Xiaocui, Rui Zhiyuan, Cao Hui, et al. Nanoindentation of γ -TiAl with different crystal surfaces by molecular dynamics simulations[J]. *Materials*, 2019, 12(5): 770–777. doi: [10.3390/ma12050770](https://doi.org/10.3390/ma12050770).
- [27] Alexander S, Vasily V B, Athanasions A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces[J]. *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2012, 20(12): 085007. doi: [10.1088/0965-0393/20/8/085007](https://doi.org/10.1088/0965-0393/20/8/085007).
- [28] Pan Jinsheng, Tong Jianmin, Tian Minbo. *Fundamental of material science*[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2011: 252 (in Chinese) [潘金生, 仝健民, 田民波. *材料科学与基础*[M]. 北京: 清华大学出版社, 2011: 252].
- [29] Koehler J S. Attempt to design a strong solid[J]. *Physical Review B*, 1970, 2(2): 547–551. doi: [10.1103/PhysRevB.2.547](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.2.547).
- [30] Cheng Dong. Research on strengthening micromechanisms and tribological behaviour of Cu/Ni multilayers with Molecular Dynamic Simulations[D]. Dalian: Dalian Maritime University, 2005: 78-79 (in Chinese) [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: 78-79].
- [31] Yu Yongning. *Principles of metallography*[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2003: 298-299 (in Chinese) [余永宁. *金属原理*[M]. 北京: 冶金工业出版社, 2003: 298-299].