

УДК 620.172.2

*А.В. Болеста, В.М. Фомин*

## **Моделирование деформации тонких пленок методом молекулярной динамики**

*A.V. Bolesta, V.M. Fomin*

## **Simulation of Thin Film Deformation by Molecular Dynamics Method**

В статье представлены результаты молекулярно-динамического исследования процессов наноинdentирования и одноосной деформации тонкой пленки меди.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, тонкие пленки, наноинdentирование, одноосная деформация.

Использование тонких пленок в современных интегральных устройствах и датчиках поднимает важнейшие вопросы механических свойств и взаимодействия твердых тел на микромасштабном уровне. В силу малой толщины пленок объемная доля атомов, находящихся вблизи свободных поверхностей и границ раздела между материалами, становится существенной и, соответственно, существенным становится вклад этих атомов в поведенческое композиционного материала. Чрезвычайно малые пространственные масштабы, характеризующие толщину приповерхностных и интерфейсных слоев, уже не позволяют полностью описать весь спектр наблюдаемых физических явлений при помощи континуальных моделей, и это делает актуальным моделирование механического поведения таких систем с помощью подхода, в котором явным образом учитывается дискретность среды, метода молекулярной динамики. В настоящей работе рассмотрены различные виды нагружения: инdentирование, одноосное растяжение и циклическое нагружение. Основное внимание уделено выявлению и согласованию особенностей кривых нагружения с процессами, происходящими на атомарном уровне.

Также выполнено молекулярно-динамическое моделирование квазистатического деформирования тонких пленок меди. Взаимодействие атомов меди и алюминия описывалось с помощью потенциала межатомного взаимодействия метода внедренного атома (МВА) [1–3]. Многочастичный МВА потенциал хорошо себя зарекомендовал в задачах моделирования деформации металлических кластеров и гетероструктур [4–6]. Расчет траекторий движения проводился с помощью параллельного молекулярно-динамического пакета LAMMPS [7]. Воздействие инdentора моделировалось вдавливанием в ма-

The article results the molecular-dynamics simulation of thin copper film nanoindentation and uniaxial deformation.

**Key words:** molecular dynamics, thin films, nanoindentation, uniaxial deformation.

териал полусферы, отталкивающей все атомы, которые ее касаются. Таким образом, инdentор предполагался недеформируемым и бесструктурным. Несмотря на то, что обычно в экспериментах по наноинdentированию используются инdentоры в виде пирамиды, острие инdentора всегда обладает конечным радиусом кривизны в несколько десятков нанометров. Поэтому на пространственных масштабах, на которых оперирует метод молекулярной динамики, вполне оправданно считать инdentор сферическим. Скорость движения инdentора составляла 10 м/с. Моделирование квазистатического одноосного растяжения и сжатия композиции проводилось путем периодического масштабирования размера расчетной ячейки в заданном направлении с релаксацией системы в промежутках между масштабированием. При этом в данном направлении к системе прикладывались периодические граничные условия. Скорость увеличения размера расчетной ячейки равнялась 10 м/с, что значительно меньше скорости звука в меди и алюминии и соответствовало квазистатической деформации. Рассмотрены два вида структурного состояния исследуемых пленок: бездефектный монокристалл и поликристалл с размером зерна в несколько нанометров. Также исследованы два варианта подложки, на которую нанесена пленка, – недеформируемая жесткая подложка и монокристаллический алюминий. Показано, что присутствует масштабный эффект при вдавливании сферических инdentоров радиусом менее 10 нм в монокристаллическую пленку меди с гладкой атомарной поверхностью – твердость возрастает с уменьшением радиуса инdentора, достигая 15 ГПа (рис. 1). Такую же величину твердости 15 ГПа демонстрирует монокристаллическая пленка при инdentировании острым алмазным инdentором на глубину 2 нм. Кроме того, показано,

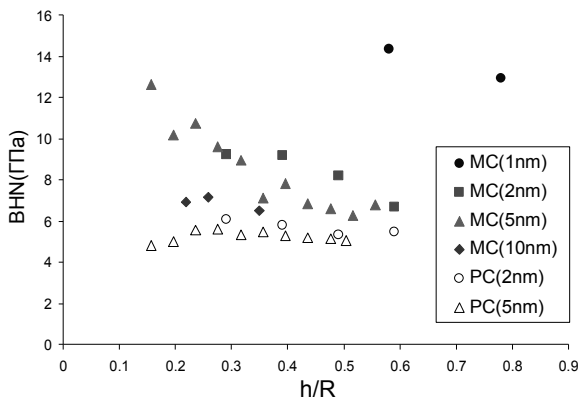


Рис. 1. Твердость по Бринеллю VHN для медной монокристаллической (MC) и поликристаллической (PC) пленки в зависимости от глубины проникновения индентора  $h$ , нормированной на радиус индентора  $R$ . Приведены результаты расчетов для  $R$ , равного 1, 2, 5 и 10 нм

что твердость уменьшается с увеличением глубины погружения, что вызвано накоплением дефектов упаковки в объеме меди по мере проникновения

индентора в пленку. Наличие шероховатости поверхности медной пленки задерживает рост кривой нагружения на глубину порядка степени шероховатости. В случае вдавливания сферического индентора в поликристаллическую пленку меди с характерным размером зерна около 2 нм масштабный эффект зависимости от радиуса и глубины внедрения индентора не наблюдается и величина твердости стабилизируется на уровне 5–6 ГПа. Для одноосного растяжения показано, что состояние свободной поверхности оказывает значительное влияние на предел упругости пленки монокристаллической меди: введение шероховатости поверхности снижает предел упругости в два раза – от 10 до 5%. Одноосная же деформация пленки поликристаллической ультрадисперсной меди с характерным размером зерна 2 нм демонстрирует еще большее снижение предела упругости – примерно до 1.5%. На границе раздела, образованной сопряжением монокристаллических медной пленки и алюминиевой подложки, наблюдалось формирование структуры шахматной доски с периодом, зависящим от несоответствия констант кристаллической решетки материалов (рис. 2).

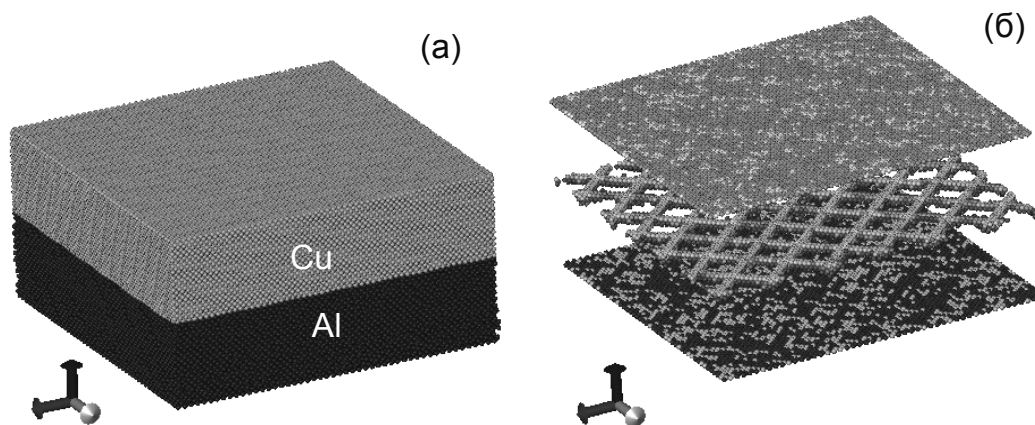


Рис. 2. Изображение двухслойной металлической гетероструктуры Cu–Al (а). На (б) показаны только атомы с локальной координацией, отличной от ГЦК структуры

Данная структура границы раздела играет важную роль как источник дислокаций, понижая предел упругости композиции. Кроме того, наблюдается зависимость кривой нагружения при индентировании от расположения индентора относительно структуры данной шахматной границы раздела между медной пленкой и алюминиевой основой. Наиболее ярко данная зависимость проявляется на

участке перехода от упругой деформации к пластической. Циклическая одноосная деформация Cu/Al композиции разрушает шахматную структуру границы раздела, связанную с несоответствием констант кристаллической решетки, и приводит к формированию новой энергетически более выгодной структуры с пространственными размерами, зависящими от толщины пленки и размера образца.

### Библиографический список

1. Daw M.S., Baskes M.I. Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals // Phys Rev Lett. – 1983. – V. 50.
2. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals // Phys Rev B. – 1984. – V. 29.

3. Cai J., Ye Y.Y. Simple Analytical Embedded-atom-potential Model Including a Long-range Force for FCC Metals and Their Alloys // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 54.
4. Болеста А.В., Головнев И.Ф., Фомин В.М. Исследование процесса столкновения сферического кластера меди с жесткой стенкой методом молекулярной динамики // Физическая мезомеханика. – 2000. – Т. 3, №5.
5. Болеста А.В., Головнев И.Ф., Фомин В.М. Плавление на контакте при соударении кластера никеля с жесткой стенкой // Физическая мезомеханика. – 2001. – Т. 4, №1.
6. Болеста А.В., Головнев И.Ф., Фомин В.М. МД моделирование квазистатического растяжения композиции Al/Ni вдоль границы раздела // Физическая мезомеханика. – 2002. – Т. 5, №4.
7. Plimpton S.J. Fast Parallel Algorithms for Short-range Molecular Dynamics // J. Comp. Phys. – 1995. – V. 117. (<http://lammps.sandia.gov/index.html>).