

B2-NiAl 纳米薄膜厚度对其弹性性能影响的模拟研究

阳喜元 张晋平 吴玉蓉 刘福生

Simulation studies on the influence of nanofilm thickness on the elastic properties of B2-NiAl

Yang Xi-Yuan Zhang Jin-Ping Wu Yu-Rong Liu Fu-Sheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 016803 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.016803

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.016803>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I1>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

单层石墨烯片的非线性板模型

[A nonlinear plate theory for the monolayer graphene](#)

物理学报.2014, 63(15): 156201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.156201>

$U_{1-x}Pu_xO_2$ 热膨胀性质分子动力学模拟研究

[Molecular dynamic study on thermal expansion of \$U_{1-x}Pu_xO_2\$](#)

物理学报.2014, 63(8): 083103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.083103>

Al_n (n=13--32) 团簇熔化行为的分子动力学模拟研究

[Molecular dynamical simulations of the melting properties of \$Al_n\$ \(n=13--32\) clusters](#)

物理学报.2013, 62(19): 193104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.193104>

MnPd 合金相变, 弹性和热力学性质的第一性原理研究

[Ab initio calculation of phase transitions, elastic, and thermodynamic properties of MnPd alloys](#)

物理学报.2012, 61(24): 246201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.246201>

外部压力下 β 相奥克托金晶体弹性性质变化的第一性原理研究

物理学报.2012, 61(20): 206201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.206201>

B2-NiAl 纳米薄膜厚度对其弹性性能影响的模拟研究*

阳喜元^{1)2)†} 张晋平²⁾ 吴玉蓉³⁾ 刘福生⁴⁾

1) (岭南师范学院物理科学与技术学院, 湛江 524048)

2) (湖南文理学院物理与电子科学学院, 常德 415000)

3) (厦门理工学院材料科学与工程系, 厦门 361024)

4) (湖南工业大学材料与冶金工程学院, 株洲 412007)

(2014年5月24日收到; 2014年8月21日收到修改稿)

本文应用分子动力学 (MD) 技术和改进分析型嵌入原子模型 (MAEAM) 研究 B2-NiAl 纳米薄膜有关弹性性能的尺寸效应和表面效应. 首先计算块体 B2-NiAl 合金的弹性性能和该类薄膜的厚度尺寸对其表面能的影响, 发现块体 B2-NiAl 薄膜的弹性性能与已有的实验和理论计算结果接近, 而薄膜表面能仅与表面原子组分有关, 基本不受其厚度尺寸的影响. 在此基础上, 重点研究了纳米薄膜的弹性性能随其厚度尺寸变化关系, 发现所有纳米薄膜弹性性能都随其尺寸增加而呈指数变化, 并受表面原子组分调控. 并进一步分析尺寸影响纳米薄膜弹性性能的内在机理, 发现纳米薄膜的晶面间距偏离和表面是影响其弹性性能随尺寸变化的主要因素, 并与以前实验和理论研究结果相符合.

关键词: 厚度, 弹性性能, B2-NiAl 纳米薄膜, 模拟研究

PACS: 68.55.jd, 62.20.D-, 63.22.Dc, 31.15.xv

DOI: 10.7498/aps.64.016803

1 引言

B2-NiAl 金属间化合物具有高熔点、低密度、良好热导率和强抗氧化性等特点, 且其在性能和成本上具有很大优势, 已广泛地应用于航空航天、机械和国防等领域^[1,2]. 特别是因其良好自润滑特性, 常以高温涂层材料形式而广泛应用于舰艇、装甲车辆等军用装备和体育场、离岸平台等民用设施^[3]. 如利用 NiAl 基合金的低密度及其与 Ni 基高温合金大体相当的热膨胀, 制备涡轮发动机叶片和导向片, 能够有效地减少发动机的重量和内部热残余应力等, 从而降低热疲劳耗损, 是制备发动机等设备的最佳材料. 基于 B2-NiAl 材料应用的报道, 人们对其做了许多研究. Xu 等^[4] 研究 NiAl 金属间

化合物具有较高的热导率, 能够降低因涡轮叶片和导向叶片材料温度差所引起的内热应力, 从而在热震动过程中能有效地降低晶体结构热膨胀系数的失配, 对舰艇和飞机等动力设备起到有效保护. Sierra 等^[5,6] 研究影响 NiAl 涂层与其基体界面之间结合强度, 发现随 Ni, Al 粉末质量增加, 黏附性能增强的 NiAl 涂层能阻止涂层脱落和增强基体材料抗压能力, 并解释其黏附性能增强主要机理. 此外, 发展热障涂层技术, 可有效提高发动机的工作温度, 进而延长其使用寿命^[7]. 如欧桃平等^[8] 用固体粉末渗铝法研究在镍基高温合金基体上制备 Ni-Al 涂层, 发现 NiAl 合金抗氧化性能与其厚度有密切关系. 以上研究表明 NiAl 合金作为涂层材料有广泛的应用, 但严重受制于其高温强度低和室温塑性差不足等^[9]. 作为特殊的薄膜材料, NiAl 基合

* 国家自然科学基金 (批准号: 51201063) 和湖南文理学院科研项目 (批准号: 13ZD11, 13YB31) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: oxyx889@163.com

金涂层的微观结构、界面性质及其结合、厚度尺寸等对沉积层的结构和性质有重要影响。

已有研究表明金属薄膜材料的微型尺度化会导致其与相应块体材料迥异的行为、结构和性能^[10,11]。汪渊等^[12]研究金属W薄膜晶体生长取向的尺寸效应,结果表明,当W薄膜厚度小于其临界尺寸时,表面能起主导作用,具有最小表面能(110)晶面的生长速度最快,即W膜生长具有<110>择优取向。当W薄膜尺寸超过临界厚度时,应变能逐渐起主要作用,随着厚度增加,薄膜生长沿<110>择优取向程度减弱,而沿<211>方向的生长增强,说明体心立方(bcc)结构的金属薄膜生长取向存在着明显尺寸效应,同时受薄膜表面能和应变能之间动态竞争所调控。Tang等^[13]研究表明表面影响金属薄膜弹性模量及其随厚度变化尺寸关系,并分析其中的内在机理。此外,Dolgusheva等^[14]研究尺寸对bcc结构Zr薄膜结构相变影响,发现Zr薄膜厚度小于6.1 nm时,其结构不稳定,会从bcc结构转变为fcc结构,并详细地解释其中相结构转变机理及其表面在Zr薄膜相变过程中的作用。由此看来,影响薄膜微结构、性质以及外延生长的内外因素很多^[11],但是其尺寸是其中最为主要因素,探讨这些因素之间内在关系及其作用,对于薄膜的设计、制备和应用等有着重要意义。

本文将将以B2-NiAl金属纳米薄膜为例,讨论其弹性性能随尺寸变化的趋势及其内在机理,从而加深人们对合金纳米薄膜(尤其是那些具有特殊用途的纳米涂层材料)微观结构对其弹性性能影响的了解。

2 模拟技术与方法

本文应用分子动力学(MD)技术研究尺寸对NiAl纳米薄膜弹性性能的影响以及其表面效应,各金属原子间的相互作用采用改进分析型嵌入原子势函数(MAEAM)^[15]描述,该模型的有关参数在以前工作^[16]有详细报道。

首先建立一个完整的B2-NiAl立方晶体结构,如图1中黑色线条所示,其坐标轴分别沿X[100],Y[010]和Z[001]方向,各方向大小分别为 $20a \times 20a \times 40a$,其中, $a = 2.89 \text{ \AA}$ 为300 K温度下B2-NiAl合金的晶格常数。然后在垂直于Z[001]轴分别截取相等数目的(001)晶面而得到对称NiAl

薄层,而在X[100]和Y[010]轴方向上施加周期性边界条件,进而得到一定厚度纳米薄膜。由于所截取(001)晶面层数的不同而得到各种尺寸的纳米薄膜,如图1中晶格所示。根据B2-NiAl晶体结构和截取(001)晶面层数的不同,所截取薄膜的表面原子组分是不同的,为了方便表述,本文把表面由Ni原子组成的薄膜记为NF-Ni,而表面由Al原子组成的薄膜记为NF-Al。将所获NiAl纳米薄膜晶格在正则系综(NVT)中作MD充分弛豫,以获取具有稳定结构的薄膜,所用时间步长为5 fs,总共弛豫时间大约为200 ps。在此基础上,再对有关物理量统计50 ps以获取其宏观量。在模拟过程中,我们用四阶预测校正方法^[17]求解体系中各原子运动方程,并利用No \acute{e} -Hoover算法^[18,19]来维持模拟体系温度恒定。

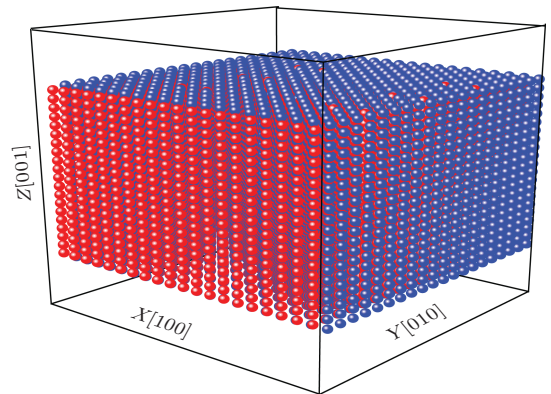


图1 (网刊彩色) B2-NiAl纳米薄膜结构示意图(其中红色小球代表Ni原子,而蓝色小球则代表Al原子)

B2-NiAl具有立方晶体结构,其有三个独立弹性常数 c_{11} , c_{12} , c_{44} ,均为晶体产生单位应变时所需的应力值。当弹性常数越大,表明晶体发生相同应变是所需外应力越大,即晶体形变越难以发生^[20]。其中, c_{11} , c_{12} 分别表示晶体的纵、横向应变弹性常数, c_{44} 则表示晶体材料剪切应变弹性常数,计算方法如下^[21,22]:

$$C_{ijkl} = \frac{\Omega_0}{k_B T} (\langle P_{ij} P_{kl} \rangle - \langle P_{ij} \rangle \langle P_{kl} \rangle) + \frac{2Nk_B T}{\Omega_0} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + \langle \chi_{ijkl} \rangle, \quad (1)$$

其中, $\langle \rangle$ 表示对MD弛豫时间求平均, Ω_0 为体系的体积, N 为体系的总原子数。第一项是指各原子的微观应变振动对弹性常数的贡献,其中 P_{ij} , P_{kl} 为微观应力张量。第二项为动能项,是指原子沿某一方向振动对弹性常数的贡献,其中 δ_{ik} 等为克罗内

克张量, 第三项表示原子间势能对整个模型弹性常数所做的贡献, 其中 χ_{ijkl} 表示由于势能所引起模型的瞬时弹性常数, 考虑热效应, 所以取平均. k_B 为玻尔兹曼常数, T 为体系温度.

3 结果与讨论

3.1 块体合金的弹性性能

块体 NiAl 合金弹性性能 c_{11} , c_{12} , c_{44} 的计算结果列于表 1 中, 其包含已有实验和其他理论结果. 表 1 显示本文计算 c_{11} 和 c_{12} 值与相关的实验值接近 [23,24], 与第一原理计算结果略有差异 [25,26], 但是符合程度要优于 Zhang 等 [27] 用 EAM 模型的计算结果. 而 c_{44} 计算结果与第一原理差别较小, 与其他理论和实验值相差较大, 其原因可能与本文在模拟盒子三个坐标轴方向上施加微小的等静压应变 $e = (\delta, \delta, \delta, 0, 0, 0)$ 有关, 而弹性常数 c_{44} 则与在晶体上施加三轴剪切应变 $e = (\delta, \delta, \delta, 0, 0, 0)$ 有密切关系 [28]. 此外, 根据 Chen 等 [29] 研究结果, 弹性性能的大小还与选取的计算方法及相关技术等有关. 相比而言, 本文计算结果与实验和理论的非常接近, 说明本文采用 MAEAM 方法能够有效地描述各原子之间的相互作用.

表 1 弹性常数的计算结果和相关参考值

	c_{11}/GPa	c_{12}/GPa	c_{44}/GPa
Present	211.58	129.06	60.40
Expt [23]	199	137	116
Expt [24]	204.6	135.4	116.8
Cal. by Lu [25]	159.26	144.14	93.96
Cal. by Hu [26]	164.06	152.17	97.48
Cal. by Zhang [27]	115.14	131.19	124.04

3.2 表面能

表面是影响金属纳米薄膜弹性性能的重要因素, 其大小反映了薄膜表面对材料微观结构和性能影响的敏感程度 [12,30], 表面能 γ 的计算方法 [30] 如下:

$$\gamma = \frac{E_{\text{nanofilm}} - N\bar{E}}{2S}, \quad (2)$$

其中, E_{nanofilm} 为一定厚度尺寸纳米薄膜的总能量, S 为纳米薄膜的表面积, N 为纳米薄膜所含总原子

数目, \bar{E} 为块体 NiAl 合金原子平均能量, 各尺寸薄膜表面能如图 2 所示.

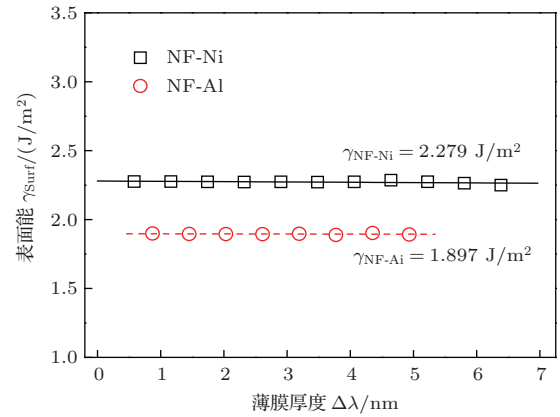


图 2 NiAl 纳米薄膜厚度尺寸对其表面能的影响 (方框“□”为 NF-Ni 薄膜的表面能, 圆圈“○”为 NF-Al 薄膜的表面能)

图 2 显示纳米薄膜的表面能随其厚度尺寸变化趋势, 其大小随尺寸变化非常小, 说明厚度尺寸对表面能影响不明显. 即在 300 K 温度下, NiAl 纳米薄膜的表面效应随尺寸变化不明显. 但是由于各纳米薄膜表面原子组分的差异, 它们的表面能大小则略有不同. 图 2 显示 NF-Ni 纳米薄膜表面能约等于 2.279 J/m^2 , 接近 Ni 材料的表面能 [31,32], 即此类型薄膜表面能不受其内部原子种类的影响. 而 NF-Al 薄膜表面能约为 1.897 J/m^2 , 约等于 Al 材料表面能的两倍 [31,32], 说明 NF-Al 纳米薄膜表面能除了受表面层原子组分影响外, 其表面附近的内部原子也对表面能产生较强影响. 此外, 根据沙宪伟等 [33] 对 NiAl 表面能的处理, 将本文两种类型薄膜的表面能相加再取平均, 约等于 2.088 J/m^2 , 结果与沙宪伟等 [33] 和 Kuznetsov 等 [34] 的结果接近.

3.3 弹性性能

表面能较大表示其表面张力也大, 意味着其有关弹性性能的变化受外界因素 (如尺寸、温度等) 影响就相对小些, 所以 NiAl 薄膜因其表面原子组分的差异, 尺寸对薄膜弹性常数影响的会略有不同, 如图 3 所示. 对于 NF-Ni 薄膜, 其尺寸效应相对弱些, 因为表面能大. 相反, NF-Al 薄膜表面能小, 其尺寸效应相对明显些, 尤其是对小尺寸薄膜而言, 因为表面附近原子对其表面能明显的影响, 这与 Yan 等 [35] 有关报道的结论符合. 另外, 从图 3 中我们发现, 除了 NF-Ni 的弹性常数 c_{12} 外, 其他薄膜弹

性常数随其尺寸增加而呈现指数增加, 最后接近于常数. 而NF-Ni弹性常数 c_{12} 变化趋势则相反, 其随着其尺寸增加而呈指数减小, 最后接近 202.538 GPa. 对以上结果进行数值拟合, 薄膜弹性常数随尺寸变化关系如下:

$$c_{ij} = c_{ij,\infty} + \eta \times e^{-\frac{\Delta\lambda}{\Delta\lambda_0}}, \quad (3)$$

其中 c_{ij} 为弹性常数, $c_{ij,\infty}$ 表示块体 NiAl 合金的弹性常数, η 和 $\Delta\lambda_0$ 为拟合常数, 其值列于表 2.

由于弹性常数随尺寸减少而降低导致材料软化现象在 Ronald 等研究 [36] 有报道, 只是因数据处理方法的差异才导致其两者之间变化关系略有不同. 外推弹性常数 c_{ij} 值略大于直接计算块体 NiAl 合金相对值, 接近表 1 中所列的实验和理论结果, 其原因主要是由于表面的严重收缩导致其内部晶格处于压应力状态而强化了弹性性能. 另外, 根据图 2 中表面能大小, NF-Ni 薄膜的表面应力明显大

些, 导致该薄膜表面收缩更加严重, 从而使得该类型薄膜的弹性模量要高些, 这一结论在图 3 中得以进一步验证. 然而, 纳米薄膜 NF-Ni 的弹性常数 c_{12} 值大于 NF-Al 薄膜的, 这与其表面原子组分有关, 但其随尺寸增加而呈指数地减小, 与 NF-Al 薄膜弹性常数 c_{12} 随尺寸变化趋势相反, 表明弹性性能随尺寸变化趋势还与晶格结构的对称性和应变施加的方向等因素有关.

以前研究表明, 材料硬度与其切变模量 G 和杨氏模量 E 有密切关系 [37], 即 G 和 E 越大, 材料硬度也越大. 根据 Jhi 等 [38] 采用的方法计算以下材料 G 和 E ,

$$G = \frac{1}{5}(c_{11} - c_{12} + 3c_{44}), \quad (4)$$

$$B = \frac{1}{5}(c_{11} + 2c_{12}), \quad (5)$$

$$E = \frac{9BG}{3B + G}. \quad (6)$$

表 2 NiAl 合金薄膜弹性常数随其尺寸变化关系 (3) 的拟合常数

弹性常数	NF-Al			NF-Ni		
	$c_{ij,\infty}$ /GPa	η /GPa	$\Delta\lambda_0$ /nm	$c_{ij,\infty}$ /GPa	η /GPa	$c_{ij,\infty}$ /nm
c_{11}	279.647	-40.316	-1.003	282.673	-8.311	0.651
c_{12}	194.672	-55.878	0.907	202.538	29.709	1.260
c_{44}	87.618	-32.135	0.795	87.575	-13.008	0.867

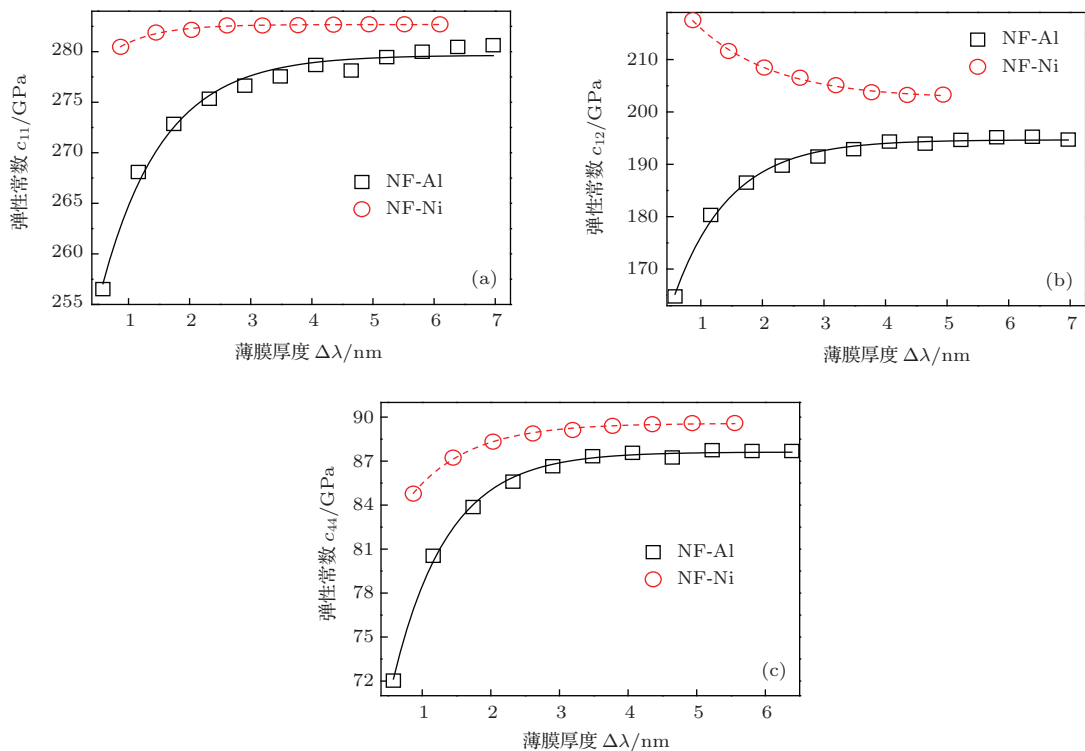


图 3 厚度尺寸对 B2-NiAl 纳米薄膜弹性常数的影响 (其中方框“□”表示 NF-Al 薄膜, 圆圈“○”表示 NF-Ni 薄膜 (a) c_{11} ; (b) c_{12} ; (c) c_{44})

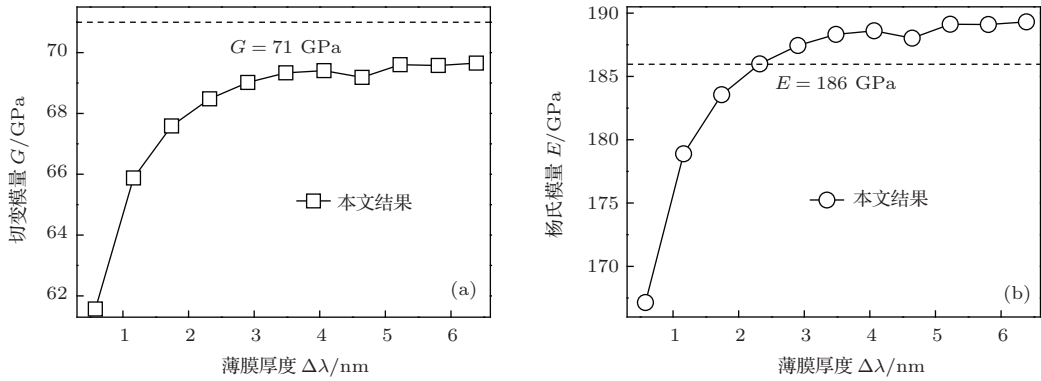


图4 合金薄膜尺寸对切变模量 G 和杨氏模量 E 的影响, 水平虚线为 Hsieh 等^[41] 所得结果 (a) 切变模量 G ; (b) 杨氏模量 E

其中(5)式中的 B 为体模量. B2-NiAl 纳米薄膜 G 和 E 随着其尺寸变化的趋势如图4所示, 与图3中弹性常数随尺寸变化的趋势类似. 当薄膜厚度超过临界值时, G 和 E 接近恒量, 意味着这些 B2-NiAl 纳米薄膜材料的硬度尺寸效应不明显, 与已有研究结果符合^[25,39]. 随着 B2-NiAl 纳米薄膜尺寸不断减小, G 和 E 也随之减小, 表明薄膜硬度也越来越小, 其原因是小尺寸薄膜的表面原子比例大, 导致其中断键数目的原子比例偏高, 从而降低了薄膜的力学性能而出现软化现象.

3.4 厚度对薄膜弹性性能影响机理

基于前面研究, 我们取尺寸为 $\Delta\lambda = 1.1608 \text{ nm}, 2.6118 \text{ nm}, 5.804 \text{ nm}$ 的 B2-NiAl 纳米薄膜为研究对象来进一步探讨其弹性性能随尺寸变化关系及其机理. Garruchet 等^[30] 对 Al 晶面间距偏差的定义, 即 $\kappa_{ij} = \frac{\Delta_{i,j} - \Delta_{\text{bulk}}}{\Delta_{\text{bulk}}} \times 100\%$, 其中 Δ_{ij} 为相邻的不同原子组分 (Ni 和 Al) (100) 晶面之间的距离, 而 $\Delta_{\text{bulk}} = a_0/2$ 为完整晶体两个相邻 (100) 晶面之间的距离, $a_0 = 0.289 \text{ nm}$ 为 B2-NiAl 合金晶格常数. 基于所选不同厚度薄膜, 我们计算 B2-NiAl 薄膜 (100) 晶面间距偏差 κ_{ij} , 如图5所示, 其中晶面原子层数从薄膜表面开始, $L_{i,i+1}$ 表示第 i 和 $(i+1)$ (100) 晶面间距, 由于所选纳米薄膜具有对称性, 所以其晶面间距分别表示为 $\pm L_{i,i+1}$.

图5表明整个 B2-NiAl 纳米薄膜的晶面间距偏差 κ_{ij} 小于0, 说明相对于完整晶体材料来说, 整个 NiAl 薄膜处于收缩状态. 对于 NF-Ni 来说, 表面区域晶面间距偏差 κ_{ij} 更为明显些, 如图5(b)所示, 而 NF-Al 的表面层间距偏差 κ_{ij} 相对小些, 但是其

下表面间距偏差 κ_{ij} 又要大些, 如图5(a)和(c)所示. 通过比较图3中与表1中的结果, 我们发现晶面间距减小是导致 B2-NiAl 纳米薄膜弹性性能大于块体合金的主要原因. 图5显示表面区域大约四个原子层间 ($L_{1,2}, L_{2,3}, L_{3,4}$) 的间距偏差变化幅度明显大于其内部间距的偏差, 说明薄膜弹性性能的变化趋势主要由表面层间距偏差所引起的. 随着尺寸增大, 表面区域原子数目所占比例也随之减小, 这些表面晶面间距偏差也逐渐减弱, 说明薄膜表面效应也随之减弱, 与前面讨论薄膜表面能所得结论类似. 相对于薄膜内部晶面间距偏差, 尺寸为 1.1608 nm 和 5.804 nm 薄膜的表面晶面间距偏差值要小于其内部晶面间距偏差, 图5(a)和(c)所示, 即相对于薄膜内部原子层间距来说, 它们的表面是处于膨胀状态. 而尺寸为 2.6118 nm 的薄膜表面晶面间距偏差情况则相反, 图5(b)所示, 即相对于其内部原子层间距来说, 其表面是处于收缩状态. 经研究发现尺寸为 1.1608 nm (图5(a)) 和 5.804 nm (图5(c)) 薄膜表面由 Al 组成, 而尺寸为 2.6118 nm 薄膜 (图5(b)) 的表面则由 Ni 组成, 如图5中嵌入原子结构图所示, 这可以解释: 在尺寸相同的情况下, NF-Al 的弹性性能小于 NF-Ni, 与郑晖等^[40] 研究表面原子组分对 NiAl 金属间化合物相关性影响的结论基本符合.

另外, 由于 Ni 原子具有较高的电子密度和较强的电负性^[41], 且由于薄膜表面的不对称结构, 导致它们与内层的 Al 原子之间相互作用增强, 根据 Meng 等解释^[42], 薄膜表面层 Ni 原子的电荷重新组合, 导致电子密度分布不均匀, 进而产生较大的压应力, 造成表面原子沿 $Z[001]$ 轴方向发生向内的移动, 表现为 NF-Ni 薄膜表面晶面间距偏差 $\kappa_{1,2}$ 更

加明显,如图5(b)所示. 这样此类型薄膜的弹性性能明显大于相应块体材料的. 而NF-Al薄膜的情况则因Al原子具有较低电子密度和较弱的电负性,使得其表面的Al原子与其次表层的Ni原子之间相互作用力较小,造成表面的晶面间距偏差 $\kappa_{1,2}$ 也较小. 但是次表层Ni原子因晶格结构对称性遭到破坏,使得次表层Ni原子电子分布不均匀而趋向于

内部,这样,次表层Ni原子与第三层的Al原子之间相互作用增强,从而导致此类型薄膜晶面间距偏差 $\kappa_{2,3}$ 是最小的,如图5(a)和(c)所示,由此可知此类型薄膜弹性性能也小于NF-Ni的. 但由于整个薄膜处于收缩状态,其弹性性能还是比相应块体材料的大,也意味着两种类似薄膜内部都具强弱不同的压应力,与孙等^[43]的研究结果类似.

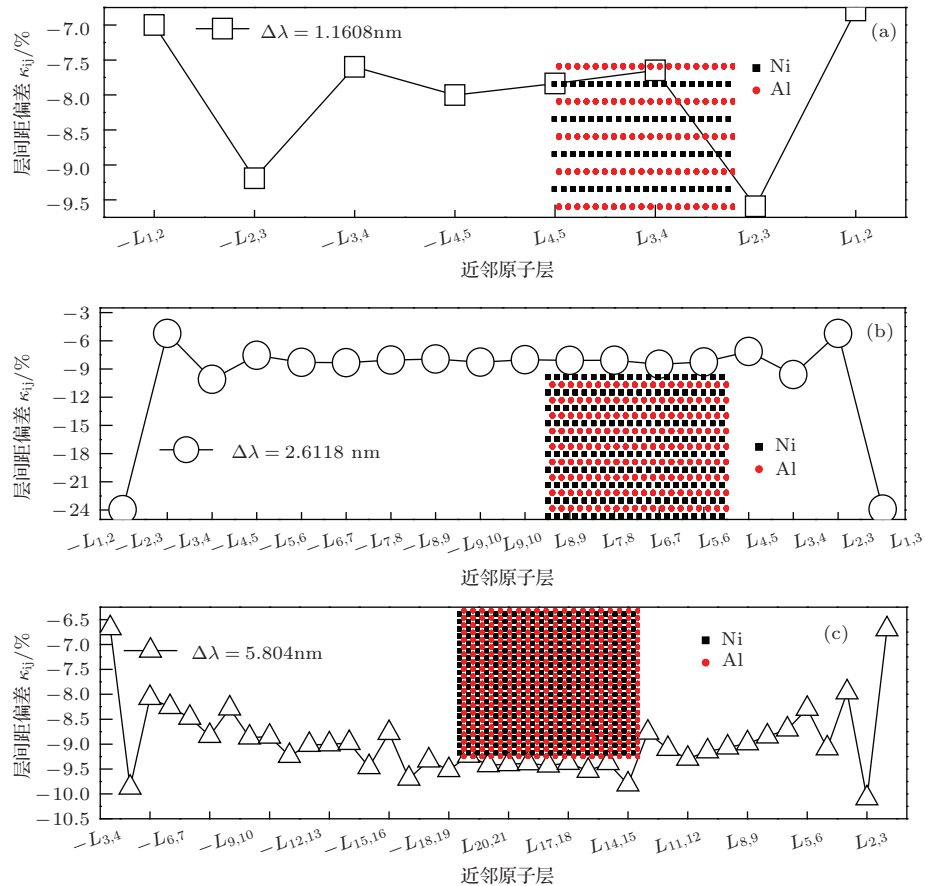


图5 (网刊彩色)不同尺寸B2-NiAl纳米薄膜的晶面间距偏差 κ_{ij} (a) $\Delta\lambda = 1.1608 \text{ nm}$; (b) $\Delta\lambda = 2.6118 \text{ nm}$; (c) $\Delta\lambda = 5.804 \text{ nm}$. 嵌入图表示各尺寸薄膜(010)晶面结构图,黑色方框“■”表示Ni原子,红色圆圈“●”表示Al原子

从图5中薄膜层间距偏差程度看,薄膜表面的层间距偏差比较明显,且受表面原子组分控制,但是随着薄膜尺寸增大,表面区域层间距偏差值接近常数,说明表面层间距偏差对B2-NiAl薄膜弹性性能的影响越来越小. 相反,薄膜内部层间距偏差虽然小于表面的,但是不同尺寸薄膜的层间距偏差 κ_{ij} 还是比较明显. 下面以薄膜最中间两相邻(001)晶面层为例来探讨B2-NiAl薄膜厚度对内层层间距偏差的影响,如图6所示,其中间晶面层间距偏差 κ_{ij} 随薄膜尺寸变化满足四次多项式拟合,即当薄膜厚度小于2.0 nm时,层间距偏差 κ_{ij} 随薄膜厚度增加而减小,但是变化幅度很大. 对照图3和

图4描述弹性性能随尺寸变化关系,发现在此范围内各弹性性能的尺寸效应也非常明显,说明此阶段的弹性性能变化与薄膜内部晶面层间距偏离 κ_{ij} 有密切联系,薄膜内部原子层间距是影响其弹性性能变化的主要因素. 但薄膜厚度处于(2—6)nm时,各晶面层间距偏差 κ_{ij} 基本不随尺寸增大而发生变化,说明在此尺寸范围内薄膜弹性性能变化不明显,但仍然与块体材料的弹性性能有差别,与图3和图4结果符合. 一旦薄膜尺寸超过6.0 nm,其层间距偏差逐步接近块体Al材料的层间距偏差^[44],说明较大尺寸薄膜的弹性性能基本不随尺寸变化而接近于常数. 综上所述,薄膜的弹性性能大小主

要取决于其内部晶面层间距偏差 κ_{ij} , 而弹性性能随尺寸变化的趋势则主要取决于表面层间距偏差 κ_{ij} 和表面原子组分等。

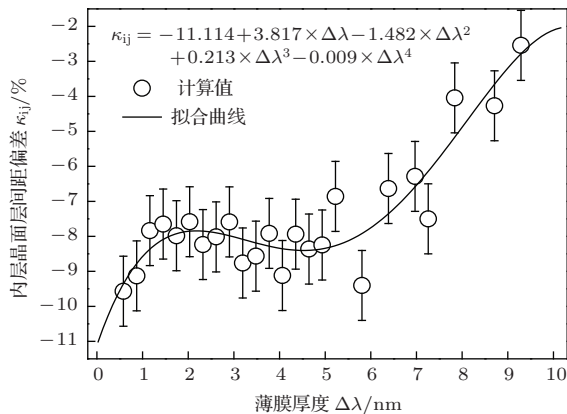


图6 尺寸对B2-NiAl纳米薄膜内层晶面层间距偏差 κ_{ij} 的影响, 实线为拟合曲线

4 结 论

本文应用MD和MAEAM研究B2-NiAl纳米薄膜材料弹性性能的尺寸效应和表面效应, 得到以下结论:

1) 计算块体B2-NiAl合金材料的弹性常数, 与已有实验和理论结果相符合。

2) 研究了B2-NiAl薄膜表面能的尺寸效应, 发现其表面能随厚度尺寸变化不明显。

3) 研究B2-NiAl纳米薄膜弹性性能的尺寸效应, 结果表明所有被研究弹性性能都随其尺寸增加而呈指数变化, 即

$$c_{ij} = c_{ij,\infty} + \eta \times e^{-\frac{\Delta\lambda}{\Delta\lambda_0}},$$

并接近于常数。在此基础上, 进一步计算两类薄膜的切变模量 G 和杨氏模量 E , 发现这两种模量随薄膜厚度增加的变化趋势类似于其的弹性性能变化。

4) 分析薄膜弹性性能随其厚度尺寸变化的内在机理, 发现薄膜晶面层间距偏差是影响其弹性性能变化趋势主要因素, 同时受到薄膜表面原子组分调控。相比于块体材料, 其弹性性能增加源于薄膜内部各晶面间距的相对减小。

参考文献

[1] Darolia R, Lahrman D, Field R 1992 *Script. Metall. Mater.* **26** 1007
 [2] Xu Q C, Ven A V 2011 *Acta Mater.* **59** 1095

[3] Su J X, Lu P C, Wang Z P 2013 *Transactions of the China Welding Institution* **34** 65 (in Chinese) [苏景新, 路鹏程, 王志平 2013 焊接学报 **34** 65]
 [4] Xu G H, Zhang K F, Huang Z Q 2012 *Adv. Powder Technol.* **23** 366
 [5] Sierra S, Vázquez A J 2006 *Intermetallics* **14** 848
 [6] Sierra S, Vázquez A J 2006 *Surf. Coat. Tech.* **200** 4383
 [7] Gleeson B 2006 *J. Propul. Power* **22** 375
 [8] Ou T P, Cao G H 2012 *The Chinese Journal of Nonferrous Metals* **22** 1725 (in Chinese) [欧桃平, 操光辉 2012 中国有色金属学报 **22** 1725]
 [9] Liu C T, Stringer J, Mundy J N 1997 *Intermetallics* **5** 579
 [10] Fertig R S, Baker S P 2009 *Prog. Mater. Sci.* **54** 874
 [11] Ren X P, Zhou B, Li L T, Wang C L 2013 *Chin. Phys. B* **22** 016801
 [12] Wang Y, Song Z X, Xu K W 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 7248 (in Chinese) [汪渊, 宋忠孝, 徐可为 2007 物理学报 **56** 7248]
 [13] Tang Y Z, Zheng Z J, Xia M F, Bai Y L 2009 *Acta Mech. Solid. Sin.* **22** 605
 [14] Dolgusheva E B, Trubitsin V Yu 2014 *Comput. Mater. Sci.* **84** 23
 [15] Wu Y R 2007 *Ph. D. Dissertation* (Changsha: Hunan University) (in Chinese) p16-20 [吴玉蓉 2007 博士学位论文 (长沙: 湖南大学) 第16—20页]
 [16] Yang X Y, Hu W Y, Zhang X M 2013 *Appl. Surf. Sci.* **264** 563
 [17] Parrinello M, Rahman A 1981 *J. Appl. Phys.* **52** 7182
 [18] Nosé S 1984 *J. Chem. Phys.* **81** 511
 [19] Hoover W G 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1695
 [20] Chen G, Liao L J, Hao W 2007 *The Basis of Crystal Physics* (The 2nd Edition) (Beijing: Science Press) p153-164 [陈纲, 廖理几, 郝伟 2007 晶体物理学基础 (第二版) (北京: 科学出版社), 第153—164页]
 [21] Çağın T, Ray J R 1988 *Phys. Rev. B* **38** 7940
 [22] Çağın T, Ray J R 1988 *Phys. Rev. B* **37** 699
 [23] Rusovic N, Warlimont H 1977 *Phys. Stat. Solid. A* **44** 609
 [24] Davenprot T, Zhou T, Trivisonc 1999 *Phys. Rev. B* **59** 3421
 [25] Lu Y L, Hou Y H, Chen Z, Mu H 2013 *Sci. Chin.: Phys. Mech. Astron.* **43** 152 (in Chinese) [卢艳丽, 侯华欣, 陈铮, 牧虹 2013 中国科学: 物理学天文学 **43** 152]
 [26] Hu Y J, Peng P, Li G F, Zhou D W, Han S C 2006 *The Chinese Journal of Nonferrous Metals* **16** 47 (in Chinese) [胡艳军, 彭平, 李贵发, 周惦武, 韩绍昌 2006 中国有色金属学报 **16** 47]
 [27] Zhang J H, Wu S Q, Wen Y H, Zhu Z Z 2010 *J. At. Mol. Sci.* **1** 253
 [28] Wang S Q, Ye H Q 2003 *J. Phys.: Condens. Matt.* **15** 5307
 [29] Chen Q Y, Tan S Y, Lai X C, Chen J 2012 *Chin. Phys. B* **21** 087801
 [30] Garruchet S, Politana O, Salazar J M, Montesin T 2005 *Surf. Sci.* **586** 15
 [31] Zhang J M, Ma F, Xu K W 2004 *Chin. Phys.* **13** 1082

- [32] Wang B, Zhang J M, Lu Y D, Gan X Y, Yin B X, Xu K W 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 016601 (in Chinese) [王博, 张建民, 路严冬, 甘秀英, 殷保祥, 徐可为 2011 物理学报 **60** 016601]
- [33] Sha X W, Zhang X M, Chen K Y, Li Y Y 1996 *Acta Metel. Sin.* **32** 1184 (in Chinese) [沙宪伟, 张修睦, 陈魁英, 李依依 1996 金属学报 **32** 1184]
- [34] Kuznetsov V M K, Kadrov R I, Rudenskii G E 1998 *J. Mater. Sci. Technol.* **14** 320
- [35] Yan X L, Wang J Y 2013 *Thin Solid Films* **529** 483
- [36] Ronald E M, Vijay B S 2000 *Nanotechnology* **11** 139
- [37] Chen K Y, Zhao L R, John R, John S T 2003 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36** 2725
- [38] Jhi S H, Ihm J, Louie G S, Marvin L C 1999 *Nature* **399** 132
- [39] Hsieh C L, Tuan W H, Wu T T 2004 *J. Eur. Ceramic Soc.* **24** 3789
- [40] Zheng H, Shen L, Bai B, Sun B 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 016104 (in Chinese) [郑晖, 申亮, 白彬, 孙博 2012 物理学报 **61** 016104]
- [41] Yang XY, Hu W Y 2014 *J. Appl. Phys.* **115** 153507
- [42] Meng D Y, Lin P, Yan X S, Qi X, Yang L 2012 *J. Phys. Chem. Solid.* **73** 881
- [43] Sun X L, Hong R J, Qi H J, Fan X Z, Shao J D 2006 *Acta. Phys. Sin.* **55** 4923 (in Chinese) [孙喜莲, 洪瑞金, 齐红基, 范正修, 邵建达 2006 物理学报 **55** 4923]
- [44] Li R, Zhong Y H, Huang C, Tao X M, Ouyang Y F 2013 *Physica B* **422** 51

Simulation studies on the influence of nanofilm thickness on the elastic properties of B2-NiAl*

Yang Xi-Yuan^{1)2)†} Zhang Jin-Ping²⁾ Wu Yu-Rong³⁾ Liu Fu-Sheng⁴⁾

1) (Physics Science and Technology School, Nanling Normal University, Zhanjiang 524048, China)

2) (College of Physics and Electronics, Hunan University of Arts and Science, Changde 415000, China)

3) (Department of Materials Science and Engineering, Xiamen University of Technology, Xiamen 361024, China)

4) (College of Metallurgical Engineering, Hunan University of Technology, Zhuzhou 412007, China)

(Received 24 May 2014; revised manuscript received 21 August 2014)

Abstract

In this paper the molecular dynamics (MD) technique and the modified analytic embedded atom method (MAEAM) are applied to study the influence of size and surface condition of the nanofilm on the elastic properties of B2-NiAl. The elastic properties of the bulk NiAl alloy and the size dependence of the surface energy of nanofilms are first calculated. It is found that the calculated results of the elastic properties are consistent with those from experiments and theories; and the surface energy, which is barely influenced by the thickness, is controlled by the surface atomic composition. On this basis, our investigations are mainly focused on the relationship between the elastic properties of nanofilms and their thickness. The obtained results indicate that the elastic properties of the nanofilm may change exponentially with the increasing thickness, which can also be regulated by the surface atomic composition. Furthermore, the inherent mechanism of the thickness and surface that affects this relationship is analyzed in detail, showing that the surface atomic composition and the deviation of interplanar spacing in nanofilms are two major factors for determining the thickness dependence of the elastic properties. These are in good agreement with the previous theoretical and experimental studies.

Keywords: thickness, elastic properties, B2-NiAl nanofilm, simulation studies

PACS: 68.55.jd, 62.20.D-, 63.22.Dc, 31.15.xv

DOI: 10.7498/aps.64.016803

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51201063), and the Scientific Research foundation of Hunan University of Arts and Science, China (Grant Nos. 13ZD11, 13YB31).

† Corresponding author. E-mail: oxy889@163.com