# 物理学报 Acta Physica Sinica



#### 多孔金属薄膜阻尼减振微观机理研究

姜文全 杜广煜 巴德纯 杨帆

Micro-mechanism of damping vibration attenuation on porous metal coating

Jiang Wen-Quan Du Guang-Yu Ba De-Chun Yang Fan

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 64, 146801 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.146801 在线阅读 View online: http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.146801 当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I14

您可能感兴趣的其他文章 Articles you may be interested in

#### 退火温度和退火气氛对Ni/Au与p-GaN之间欧姆接触性能的影响

Influence of different annealing temperature and atmosphere on the Ni/Au Ohmic contact to p-GaN 物理学报.2013, 62(20): 206801 http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.206801

直流磁控溅射厚度对 Cu( $\ln_x Ga_{1-x}$ )Se<sub>2</sub> 背接触 Mo 薄膜性能的影响 Effect of thickness on the properties of Cu( $\ln_x Ga_{1-x}$ )Se<sub>2</sub> back conduct Mo thin films prepared by DC sputtering 物理学报.2013, 62(11): 116801 http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.116801

Ge<sub>20</sub>Sb<sub>15</sub>Se<sub>65</sub> 薄膜的热致光学特性变化研究 Thermal-induced optical changes in the amorphous Ge<sub>20</sub>Sb<sub>15</sub>Se<sub>65</sub> film 物理学报.2013, 62(9): 096801 http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.096801

调制结构对 c-VC/h-TiB<sub>2</sub> 纳米多层膜的超硬效应的影响 Influence of modulation structure on the superhardness effect in c-VC/h-TiB<sub>2</sub> nanomultilayer 物理学报.2013, 62(1): 016801 http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.016801

NO 在 Pt(111) 表面的振动和离解 The vibration and dissociation of NO onPt (111) surface 物理学报.2012, 61(22): 226801 http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.226801

# 多孔金属薄膜阻尼减振微观机理研究<sup>\*</sup>

姜文全<sup>1)2)</sup> 杜广煜<sup>1)</sup> 巴德纯<sup>1)†</sup> 杨帆<sup>2)</sup>

(东北大学机械工程及自动化学院, 沈阳 110819)
 (辽宁石油化工大学机械工程学院, 抚顺 113001)

(2014年12月23日收到;2015年1月31日收到修改稿)

研究了多孔金属薄膜的阻尼性能和微观机理.采用分子动力学方法及扫描电镜 (SEM) 原位观察实验手 段对多孔金属薄膜阻尼进行研究,得出金属薄膜应变滞后于应力周期性变化以及弹性势能周期性衰减的规 律,并通过应变滞后应力的时间差求得损耗因子;从微观结构上可看出,在薄膜孔缺陷附近 (110) 晶向上经历 了位错产生、并且位错呈阶梯状向前发射的变化;在 SEM 原位拉伸、卸载实验中观察到有微裂纹的萌生、斜向 阶梯扩展、收缩及消失的周期过程.结果表明:在周期载荷作用下,多孔金属薄膜的孔缺陷附近产生的位错可 以挣脱开弱钉扎点并限制在强钉扎点上,由于位错的变化及附近晶界间的相对滑动产生内摩擦,消耗了系统 的部分弹性势能,引起金属薄膜的阻尼减振效应,从而揭示了多孔金属涂层阻尼产生的微观机理.

关键词: 分子动力学, 多孔金属薄膜, 阻尼性能, 内耗 PACS: 68.60.-p, 68.35.Ja, 05.10.-a, 62.40.+i

### 1引言

在航空、航海及动力工程领域中,受外部激励 作用的机械构件将产生振动和噪声,影响构件的 正常工作,甚至可能产生重大经济损失及人身安全 等严重后果<sup>[1-3]</sup>.阻尼因其能够消耗外界能量,从 而使系统的外载荷振幅值逐渐恢复到受激前的状 态<sup>[4-6]</sup>,因此阻尼技术成为当前减振降噪的主要途 径之一.

由于金属薄膜具有较好的强度、硬度和阻尼性能,被广泛用于解决航空航天等领域的振动问题, 这些金属材料性能宏观尺度上的数值模拟和实验 已得到相关领域研究人员的高度关注<sup>[7-9]</sup>.如余黎 明等<sup>[10]</sup>通过数值模拟研究了弹性模量与金属薄膜 阻尼之间的关系; Choi和Nix<sup>[11]</sup>利用测量铜薄膜 内耗实验探讨金属薄膜的阻尼性能.然而,从微观 角度充分理解位错以及各种界面(如晶粒间界、晶 界等)的运动及它们之间的交互作用引起的能量耗 散是研究材料阻尼的有效的途径<sup>[12-14]</sup>,并且这些 阻尼(内耗)机理主要涉及固体材料的晶体结构以 及晶体缺陷等问题,为了理解材料的阻尼机理,需 要充分理解材料的晶体结构以及晶体缺陷对阻尼 性能的影响.本文通过真空镀膜技术制备出多孔金 属阻尼薄膜,并对金属薄膜表面进行检测时,发现 薄膜表面上时常会存在微观缺陷,其缺陷对薄膜和 基体的阻尼性能影响有待于进一步研究.为此,应 用分子动力学模拟及原位拉伸-卸载实验方法,对 带有微缺陷的多孔金属阻尼薄膜进行微观分析,以 探讨微观角度下的多孔金属薄膜的阻尼机理,旨在 为金属阻尼薄膜的阻尼减振技术研究及应用提供 依据.

**DOI:** 10.7498/aps.64.146801

## 2 分子动力学模拟

#### 2.1 模型建立

建模过程借助LAMMPS代码实现, 沿x, y, z

†通信作者. E-mail: dchba@mail.neu.edu.cn

#### http://wulixb.iphy.ac.cn

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 51005043)、中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: N130403012, N140301001) 和 高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20120042110031) 资助的课题.

<sup>© 2015</sup> 中国物理学会 Chinese Physical Society

坐标轴方向分别对应于铜立方晶胞的[100], [010], [001] 三个晶向,模型大小为 $50a \times 20a \times 8a$ , a为 晶格常数, a = 3.615 Å. 该模型中铜原子总数为 32000 个,根据多孔金属材料微观结构特点<sup>[15,16]</sup>, 在模型内采用随机函数删除5000 个原子,并随机 建立多个直径为2 nm的蜂窝形点缺陷(如图1). 由于模拟过程是在[100] 晶向(即x轴方向)施加外 部载荷,观察金属铜的微观形态和力学性能,因 此在空间坐标系的x轴方向采用周期性边界条件, 相当于小体积元胞在x轴方向是嵌在一个无穷大 的块体物质中,可以消除加载过程模型的表面效 应.坐标系的y轴和z轴方向采用非周期性的自由 边界条件,运动方程的积分采用 velocity-verlet 算 法<sup>[17–19]</sup>,原子间相互作用势函数选取镶嵌原子势 (EAM)<sup>[20,21]</sup>.



图1 铜薄膜模型

Fig. 1. The model of the copper film.

#### 2.2 模拟结果

模型整体施加交变位移载荷,载荷幅为 2.8×10<sup>-8</sup> mm,周期为5.0×10<sup>-2</sup> s,时间步长 为 $0.002 \times 10^{-12}$  s,每100步输出一次结果,分别得 到模型的应力、应变曲线(如图2)、微观结构变化 (如图3)和弹性势能量变化曲线(如图4).



图 2 (网刊彩色)应力、应变曲线





图 3 (网刊彩色) 模型微观结构图 (a) 1/4 周期; (b) 1/2 周期; (c) 3/4 周期; (d) 1 周期

Fig. 3. (color online) The model microstructure: (a) 1/4 period; (b) 1/2 period; (c) 3/4; (d) 1 period.



图 4 模型弹性势能变化

Fig. 4. The change of model elastic energy.

3 实验部分

#### 3.1 试样制备

如图5(a)和图5(b)所示,两个加载-卸载试样 其标距l=10mm,宽度W = 10mm.其中试样a为



图 5 (网刊彩色) 原位拉伸-卸载试样 (a) 聚酰亚胺薄膜; (b) 镀铜后聚酰亚胺薄膜; (c) 扫描电镜下的铜膜断面; (d) 扫描电镜下的铜膜表面

Fig. 5. (color online) The specimen *in situ* observation under tensile/unloading: (a) the polyimide film; (b) the polyimide film with copper coating; (c) the cross section of the copper coating in SEM; (d) the copper coating surface in SEM.

聚酰亚胺,厚度t = 175 µm;试样 b 是采用 E 型电 子束蒸发镀膜系统,在试样 a 聚酰亚胺基底材料上 制备 10 µm 厚铜膜 (见图 5 (c))的膜基结构.为制 备原位加载扫描电镜测试样品,按夹持装置所要求 的尺寸剪裁基片,对裁剪好的基片进行清洗,用纯 净水清洗后再用无水乙醇进行超声波清洗 10 min, 烘干后将基片固定在基片架上,即可开始电子束蒸 发沉积制备试样.

#### 3.2 微观形貌观察

采用扫描电镜对试样b进行表面和截面微观 组织观察,由于基底材料为不导电的聚酰亚胺,扫 描电镜试样先在背面贴上导电胶固定在样品台上, 需要进行截面观察的试样进行喷金处理,然后再 将样品台置于扫描电镜观察腔内.通过扫描电镜 的微观表面结构观察(见图5(d)),可见铜膜致密性 较好,但制备过程中仍然残留了大小不等的材料 缺陷,主要以孔隙的缺陷形式不均匀地分布在材料 内部.

#### 3.3 加载-卸载的原位观察

采用2 mm/min的位移控制加载,加载到 192 N时进行卸载,每隔0.01 s输出载荷F和位 移变量 l'. 由 (1) 和 (2) 式求出铜膜应力 $\sigma$ 应变 $\varepsilon$ , 并 绘制出应力应变关系曲线如图 6 所示.

$$\sigma = \frac{F_{\rm PI} + _{\rm Cu} - F_{\rm PI}}{W \times t_{\rm Cu}},\tag{1}$$

$$=\frac{l'-l}{l},$$
 (2)

式中: W 为试样宽度, t<sub>Cu</sub> 为铜膜厚度, l 为试件原 长, l' 为位移变量, 单位均为mm; F<sub>PI+Cu</sub> 膜基结构 上载荷, F<sub>PI</sub> 聚酰亚胺上载荷, 单位均为N.

ε





试样b在扫描电镜观察腔内进行加载-卸载, 并对其表面结构变化进行原位观察,获得缺陷部位 的微观变化图(见图7).





图 7 多孔金属薄膜微观结构图 (a) 微裂纹萌生; (b) 多 缺陷处裂纹叠加

Fig. 7. The surface microstructure of porous metal coating: (a) the micro-crack initiation; (b) the micro-cracks superposition at defects.

从图7中可以看出,加载过程中缺陷部位最 先开始塑性变形,当应力达到1.90 GPa时,点缺 陷四周开始有3条微裂纹萌生(见图7(a)),放大到 2000×观察可见孔缺陷周边的较大裂纹1呈阶梯状 向外扩展,继续加载多缺陷处裂纹叠加并曲折增长 (见图7(b)).在卸载过程裂纹逐渐缩小直至消失.

4 结果与讨论

### 4.1 应力、应变变化

根据分子动力学模拟结果(见图2)可知,含缺陷铜薄膜在周期性应变加载作用下,应力随之呈周期性变化.第一个波动周期中,时间为 $1.0 \times 10^{-12}$  s时,应力出现极大值1.75 GPa,时间为 $3.4 \times 10^{-12}$  s时,应力最低值为-0.77 GPa;第二个波动周期中,时间为 $5.8 \times 10^{-12}$  s时,应力出现极大值0.81 GPa,时间为 $8.4 \times 10^{-12}$  s时,应力最低值为-0.48 GPa;第三个波动周期中,时间为 $11.0 \times 10^{-12}$  s时,应力

出现极大值 0.69 GPa, 时间为  $13.4 \times 10^{-12}$  s时, 应 力最低值为 -0.39 GPa; 第四个波动周期中, 时间 为  $16 \times 10^{-12}$  s时, 应力出现极大值 0.66 GPa, 时 间为  $18.4 \times 10^{-12}$  s时, 应力最低值为 -0.36 GPa; 应力峰值随着运行时间增加而逐渐衰减, 最终铜 薄膜将进入屈服状态 (见图 2). 而应变幅为 0.28, 应变峰值分别出现在  $1.2 \times 10^{-12}$  s,  $3.8 \times 10^{-12}$  s,  $6.2 \times 10^{-12}$  s,  $8.8 \times 10^{-12}$  s,  $11.2 \times 10^{-12}$  s, $13.8 \times 10^{-12}$  s,  $16.2 \times 10^{-12}$  s,  $11.2 \times 10^{-12}$  s,  $13.8 \times 10^{-12}$  s,  $0.4 \times 10^{-12}$  s,  $0.4 \times 10^{-12}$  s,  $0.4 \times 10^{-12}$  s,  $0.325 \times 10^{-12}$  s, 损耗因子 $\eta$ 可由 (3) 式求得:

$$\eta = \operatorname{tg}\left(\frac{\tau}{T} \times 2\pi\right),\tag{3}$$

式中, *τ* 为应变滞后于应力的时间, 单位为s; *T* 为 载荷周期, 单位为s.

通过对聚酰亚胺薄膜和镀铜后的聚酰亚胺进 行拉伸、卸载实验研究,得出图6所示的应力-应变 关系曲线.由图6可见,铜膜应变峰值滞后于应力 峰值变化;等应变的情况下,应力值逐渐衰减,其与 图2中模拟的结果变化趋势符合较好,从而进一步 验证了铜薄膜的阻尼性能.

#### 4.2 微观结构变化

在周期载荷作用下,含点缺陷的铜膜其微观结 构变化如图3所示: 运行到1/4周期时, 缺陷附近 (110) 晶向上产生位错,并向前发射;1/2周期时,铜 薄膜模型回到原始尺寸,但位错进一步向前发射, 部分位错阶梯状向前发射: 3/4周期时, 铜膜模型 整体被压缩, 点缺陷数量减少, 多处出现层错和孪 晶:1周期时,铜薄膜模型又被拉回原来尺寸,点缺 陷数量增多,并在点缺陷附近(110)晶向上出现层 错.模拟过程产生的位错可以挣脱开弱钉扎点并限 制在强钉扎点上,同时位错呈阶梯状向前发射及位 错附近晶界相对滑移产生内摩擦. 在后续载荷周 期中,新形成的点缺陷和原缺陷周围的晶格结构重 复第一周期的变化过程. 另一方面, 通过镀铜薄膜 原位拉伸-卸载观察实验,可以看出铜薄膜在周期 载荷过程中,点缺陷处不断有微裂纹萌生-扩展-消 失的变化,缺陷数量越多,其变化越明显.综合以 上分析可知,在周期载荷作用下,铜薄膜的点缺陷 处出现位错、层错及孪晶;较大尺度上体现为微裂 纹的萌生、扩展的变化;在此变化过程中有部分机 械能转换成内能被消耗,从而体现出铜薄膜的阻尼 性能.

#### 4.3 系统弹性势能变化

在模拟过程中,对薄膜系统加载恒幅周期性载 荷,计算出系统原子总动能恒定不变,其系统储存 的弹性势能变化如图4所示.在第一个模拟周期中: 0到1/2周期,系统储存的弹性势能由-33331 eV 上升到-31550 eV; 1/2周期到1周期, 弹性势能出 现回落,由-31550 eV降至-33384 eV;1周期到 3/2周期, 弹性势能出现小幅度回升, 由-33384 eV 升至-32050 eV; 3/2周期到2周期, 弹性势能再 次下降,由-32050 eV降至-333489 eV. 接下来的 周期中,重复类似的变化过程.在模拟的四个周 期中,每个周期的最高弹性势能分别为-31550, -32050, -32200和-32250 eV; 最低弹性势能分别 为-34400, -33510, -33550和-33590 eV. 综上可 见,薄膜内部微观结构的内耗(内摩擦),消耗了 系统的弹性势能, 使得弹性势能波动变化并逐渐 降低.

5 结 论

通过分子动力学方法模拟及原位拉伸-卸载实 验,对周期载荷作用的含表面缺陷金属阻尼涂层阻 尼性能进行研究,得到如下结论:

 系统的应力随周期应变载荷呈周期递减变 化,体现为铜薄膜在周期载荷作用下,其强度逐渐 减弱;

2) 通过分子动力学模拟得到的应力、应变随时间变化曲线可以看出,应变的峰值变化时间滞后于应力峰值;通过实验方式可求得镀铜后薄膜应力-应变滞后环的面积大于未镀铜薄膜的滞后环面积,从而定量地描述出含缺陷铜薄膜的阻尼性能;

3)在微观结构上,含缺陷铜薄膜缺陷附近 (110)晶向上经历了位错产生,位错可以挣脱开弱 钉扎点并限制在强钉扎点上,呈阶梯状向前发射;

4)由于金属薄膜中位错的变化及附近晶界间的相对滑动产生内摩擦,消耗了系统的部分弹性势能,使得系统储存的弹性势能周期波动并呈逐渐递减的变化;在原位拉伸-卸载实验结果体现出微裂。

纹萌生、扩展及恢复的变化过程消耗掉了部分能量, 从而揭示了其阻尼产生机理.

#### 参考文献

- Tian Y, Huang L, Luo M K 2013 Acta Phys. Sin. 62 050502 (in Chinese) [田艳, 黄丽, 罗懋康 2013 物理学报 62 050502]
- [2] Yu S J 2014 Acta Phys. Sin. 63 116801 (in Chinese) [余 森江 2014 物理学报 63 116801]
- [3] Zhang L Y, Jin G X, Cao L, Wang Z Y 2012 Chin. Phys.B 21 120502
- [4] Ge T S 2000 Foundation of Solid Internal Friction Theory: Grain Boundary Relaxation and Structure (Beijing: Science Press) pp442-526 (in Chinese) [葛庭燧 2000 固 体内耗理论基础——晶界弛豫与晶界结构 (北京: 科学出版 社) 第 442—526 页]
- [5] Masti R S, Sainsbury M G 2005 Thin Wall. Struct. 43 1355
- [6] Patsias S, Tassini N, Lambfinou K 2006 Mater. Sci. Eng. A 442 504
- [7] Yin F, Ohsawa Y, Sato A, Kawahara K 2001 Mater. Trans. 42 385
- [8] Dao M, Lu L, Asaro R J, de Hosson J T M, Ma E 2007 Acta Mater. 55 4041
- [9] Liu S S, Wen Y H, Zhu Z Z 2008 Chin. Phys. B 17 2621
- [10] Yu L M, Ma Y, Zhou C G, Xu H B 2005 Int. J. Solids Struct. 42 3045
- [11] Choi D H, Nix W D 2006 Acta Mater. 54 679
- [12] Zhang L, Lü C, Kiet T, Pei L Q, Zhao X 2014 Chin. Phys. B 23 098102
- [13] Muhammad I, Fayyaz H, Muhammad R 2012 Chin. Phys. B 21 126802
- [14] Li X, Cai W, An J, Kim S, Nah J, Yang D, Piner R, Velamakanni A, Jung I, Tutuc E, Banerjee S K, Colombo L, Ruoff R S 2009 Science **324** 1312
- [15] Zhang Q, Hiroyuki T 2011 Acta Phys. Sin. 60 114103
  (in Chinese) [张强, 户田裕之 2011 物理学报 60 114103]
- [16] Du G Y, Sun W, Ba D C, Han Q K 2014 CN Patent 103602955A (in Chinese) [杜广煜, 孙伟, 巴德纯, 韩清凯 2014 CN103602955A]
- [17] Rozmanov D, Kusalik P G 2010 Phys. Rev. E 81 056706
- [18] Guo Q N, Yue X D, Yang S E, Huo Y P 2010 Comput. Mater. Sci. 50 319
- [19] Yuan Q, Zhao Y P 2012 Proc. R. Soc. A 468 310
- [20] Ao B Y, Xia J X, Chen P H, Hu W Y, Wang X L 2012 Chin. Phys. B 21 026103
- [21] Fan J H 2008 Multiscale Analysis for Deformation and Failure of Materials (Beijing: Science Press) pp40–132 (in Chinese) [范镜泓 2008 材料变形与破坏的多尺度分析 (北京:科学出版社) 第40—132页]

# Micro-mechanism of damping vibration attenuation on porous metal coating<sup>\*</sup>

Jiang Wen-Quan<sup>1)2)</sup> Du Guang-Yu<sup>1)</sup> Ba De-Chun<sup>1)†</sup> Yang Fan<sup>2)</sup>

1) (School of Mechanical Engineering and Automation, Northeastern University, Shenyang 110819, China)

2) (School of Mechanical Engineering, Liaoning Shihua University, Fushun 113001, China)

( Received 23 December 2014; revised manuscript received 31 January 2015 )

#### Abstract

Based on molecular dynamics method and in-situ scanning electron microscopy (SEM) observations, the damping efficiency of the porous metal coating is discussed in this paper. Molecular dynamics simulation is performed to study the plastic deformations of Cu films with vibration. In the simulation, embedded atom method (EAM) is selected and in the method an interatomic potential function is used. And porous copper coating is carried out for calculating by using velocity-verlet algorithm. The plastic deformation is due to the dislocation nucleation near free surfaces, and the dislocation is shaped into forward emission in the  $\langle 110 \rangle$  crystal orientation near the defects. At the same time, the change curves of stress and strain are drawn by origin software. Damping factor  $(\eta)$  is calculated by using the time of strain lagging stress. The regulation of elastic potential energy attenuation is obtained by energy calculation. On the other hand, in-situ tensile/compression experiment is conducted by the FEI Quanta 200 SEM with a maximum load capacity of 2 kN at room temperature. A copper layer is deposited on the surface of the polyimide film by the electron beam evaporation deposition method. The thickness of the copper layer is 10  $\mu$ m and the thickness of polyimide is  $175 \mu m$ . Using the scanning electron microscope, microstructures of the coating are observed. It could be seen that the coating and the polyimide film are both better in compactness. Using *in-situ* testing machine at SEM, the samples with and without copper coatings are respectively tested under tensile and unloading. The rate of displacement loading is 2 mm/min, the results of load (F) and displacement (l') are printed every 0.1 s. The loading direction is horizontal. During in-situ tensile/compression test, the straining is stopped several times in order to make the observations and take micrographs. The digital SEM images are directly transferred to a computer via a direct memory access type A/D converter, which can rapidly capture clear images of the  $1024 \times 943$  pixel frames. The simulations and experimental results indicate that the dislocation near defects get rid of weak pinning points and limit to the strong pinning point, the internal friction is generated due to the change of dislocation and the relative sliding near grain boundary, and the stored elastic potential energy is consumed, which causes the damping effect of the film.

Keywords: molecular dynamics, porous metal coating, damping capacity, internal friction PACS: 68.60.-p, 68.35.Ja, 05.10.-a, 62.40.+i DOI: 10.7498/aps.64.146801

<sup>\*</sup> Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51005043), the Fundamental Research Funds for the Central Universities of Ministry of Education of China (Grant Nos. N130403012, N140301001), and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20120042110031).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: dchba@mail.neu.edu.cn