

层厚度和应变率对铜-金复合纳米线力学性能影响的模拟研究

樊倩 徐建刚 宋海洋 张云光

Effects of layer thickness and strain rate on mechanical properties of copper-gold multilayer nanowires

Fan Qian Xu Jian-Gang Song Hai-Yang Zhang Yun-Guang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 016201 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.016201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.016201>

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

界面旋转角对双晶镁力学性质影响的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of effect of tilt angle on mechanical property of magnesium bicrystals

物理学报.2014, 63(4): 046201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.046201>

纳米铜薄膜塑性变形中空位型缺陷形核与演化的分子动力学研究

Generation and evolution of vacancy-type defects in nano-Cu films during plastic deformation by means of molecular dynamics

物理学报.2013, 62(19): 196201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.196201>

聚酰亚胺/铜纳米颗粒复合物的分子动力学模拟研究

Molecular dynamics simulation study of polyimide/copper-nanoparticle composites

物理学报.2013, 62(18): 186202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.186202>

聚乙烯/银纳米颗粒复合物的分子动力学模拟研究

Molecular dynamics simulation of polyethylene/silver-nanoparticle composites

物理学报.2013, 62(10): 106201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.106201>

堆垛层错和温度对纳米多晶镁变形机理的影响

The effects of stacking fault and temperature on deformation mechanism of nanocrystalline Mg

物理学报.2012, 61(22): 226201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.226201>

层厚度和应变率对铜-金复合纳米线力学性能影响的模拟研究*

樊倩^{1)†} 徐建刚¹⁾ 宋海洋^{1)2)‡} 张云光¹⁾

1)(西安邮电大学理学院, 西安 710121)

2)(西安石油大学材料科学与工程学院, 西安 710065)

(2014年5月5日收到; 2014年9月10日收到修改稿)

采用分子动力学模拟方法, 研究了层厚度和应变率对铜-金多层复合纳米线在均匀拉伸载荷下力学性能的影响, 并分析了铜-金位错成核机理. 研究表明, 随着铜-金层厚度的增加, 复合材料的屈服强度也随之增大; 高应变率时复合材料的力学性能比低应变率时要强, 低应变率的塑性形变主要是位错运动和孪晶形变, 而高应变率主要以单原子运动为主, 表现出了非晶化. 该研究对制备高性能的多层复合材料提供了一定的理论依据.

关键词: 分子动力学模拟, 铜-金多层复合纳米线, 力学性能

PACS: 62.25.-g, 31.15.xv, 61.82.Rx

DOI: 10.7498/aps.64.016201

1 引言

纳米材料表/界面结构^[1-3]对材料的力学^[4]、电^[5]和热^[6]等性能有非常重要影响, 如多金属晶界、堆垛层错晶界^[7]、孪晶界^[8,9]及旋转晶界^[10-12]等. 多金属纳米材料界面结构要比孪晶界复杂, 不同界面与位错相互作用不同, 纳米材料会表现出不同的变形机理, 从而强度不同. 纳米金属多层复合材料(NMMs)由于尺寸效应和表面效应而具有高强度、高韧性、超塑性, 广泛应用于机械、生物、电子、化工等诸多研究领域. 对于多金属纳米材料, 像铜-镍^[13,14], 铜-银^[15-17], 铜-镍-银^[18,19], 铜-银^[20,21]等力学性能已被研究, 表界面结构、不同层厚度下的位错运动和应变率等都会显著地影响NMMs的力学性能, 改变复合材料的变形机理. 两种不同晶体结构金属组成的NMMs或同种晶体结构不同金属组成的NMMs, 由于交界界

面^[22]的不同, 他们的强度、硬度和塑性都会有很大不同^[23-25]. 近几年在理论的指导下, 现有材料制备技术已经能够合成较为理想的多层周期性的复合纳米材料, 如铜-镍^[26]、铜-镍-银^[27]等复合材料. 因此, 为了寻找一种更高性能的纳米多层复合材料, 深入的了解各种不同NMMs的微观表界面结构^[28]和不同层厚度下的位错发射滑移机理^[29]变得至关重要.

近年来有关NMMs的研究越来越受到各学者的青睐, Abdolrahim等^[15]研究了铜-银双轴拉伸的形变机理, 发现不同层厚度存在不同的形变机理. Yuan等^[20]通过分子动力学的方法研究了铜-银多层纳米线的力学性能, 发现随着各层厚度的减小, 其形变机理从较大厚度的位错运动到较小厚度的界面旋转转变. 而王涛等^[30]通过分子动力学方法模拟得出铜-镍多层纳米线随着层厚度的减小其屈服应力表现出先升高后降低的明显尺寸效应; 而后Chen等^[31]研究了单轴拉伸载荷加载下, 铜

* 国家自然科学基金(批准号: 10902083)、教育部新世纪优秀人才支持计划(批准号: NCET-12-1046)、陕西省青年科技新星支持计划(批准号: 2012KJXX-39)和陕西省自然科学基金基础研究计划项目(批准号: 2014JQ1036)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: fqprogram@sina.com

‡ 通信作者. E-mail: gsfshy@sohu.com

(001)/镍(001)旋转晶界所形成的不同晶格失配网络对其力学性能的影响. 最近, Shao等^[18]致力于在不同应变率和不同层厚度下的铜-铌、铜-镍、铜-镍-铌的孔洞成核机理的研究. 虽然NMMs力学性能的研究引起了广泛关注, 但对铜-金多层复合材料力学性能的研究却很少, 然而铜-金纳米复合材料在锻造技术^[32]和纳米压印^[33,34]中却能表现出良好的性能. 因此, 本文采用分子动力学模拟方法, 研究了不同层厚度铜-金纳米线在拉伸载荷下的力学性能, 并分析了应变率对复合纳米线拉伸形变的影响.

2 模型及方法

采用分子动力学方法研究了铜[111]//金[111]在拉伸载荷下的力学性能, 图1(a)为其初始模型, 由于铜和金晶格常数分别为0.362 nm和0.408 nm, 属于半共格界面, 初始模型在界面处存在原始失配位错^[35], 图1(b)所示为其截面视图. 在模拟中, x 和 y 方向均采用自由边界条件, 为了保证铜、金两种金属在 x, y 方向上拥有近乎相同的尺度, 模型在 x, y 方向上的长度分别为6.646 nm和6.641 nm. z 方向采用周期性边界条件, 建立了6种不同层厚度的模型, 沿着 z 方向尺度从7.996 nm到41.857 nm变化, 伴随着原子数目从25080到132420变化. 如图1(a)所示, 各模型均为铜、金两种金属交叠排列的6层结构. 模拟中采用“热浴法”使系统在模拟过程中的温度维持在0.01 K, 采用Velocity-verlet^[36]算法求解原子运动方程, 时间步长为3 fs.

模拟过程为: 在等温等压条件下, 首先让初始模型弛豫60 ps, 使得系统处于能量最低即稳定状态; 在模型的 z 方向施加0.001的均匀拉伸应变, 在 x 和 y 方向保持零压, 让系统弛豫一段时间, 使原子回到平衡态. 重复以上位移载荷加载、弛豫过程, 使原子受力处于准静态状态. 为了观察不同应变率对铜-金多层纳米线力学性能的影响, 分别采用两种不同的应变率 $1.111 \times 10^9/\text{s}$ 和 $3.333 \times 10^8/\text{s}$ 进行模拟.

本文采用嵌入原子势(EAM)^[37,38]作为各原子相互作用的势函数, 系统总能量可表示为

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i), \quad (1)$$

其中, ϕ_{ij} 是第 i 个原子和第 j 个原子之间的两体作用对势, F_i 是把原子 i 埋入电子密度为 ρ_i 的位置所

需要的能量, ρ_i 可表示如下:

$$\rho_i = \sum_{j,j \neq i} f_j(r_{ij}), \quad (2)$$

其中, $f_j(r_{ij})$ 是第 j 个原子在第 i 个原子处产生的电子云密度; 同时, 两体作用对势的表达式为

$$\phi(r) = \frac{A \exp \left[-\alpha \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \kappa \right)^{20}} - \frac{B \exp \left[-\beta \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \lambda \right)^{20}}, \quad (3)$$

其中, r_e 是平衡原子间距离, A, B, α, β 是四个可调参数, κ, λ 是截断函数参数; 电子云密度函数拥有和对势函数相同的 β, λ 参数值, 其表达式为

$$f(r) = \frac{f_e \exp \left[-\beta \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \lambda \right)^{20}}. \quad (4)$$

合金模型中, 不同种类原子 a 和 b 之间的两体作用对势可表示为

$$\phi^{ab}(r) = \frac{1}{2} \left(\frac{f^b(r)}{f^a(r)} \phi^{aa}(r) + \frac{f^a(r)}{f^b(r)} \phi^{bb}(r) \right). \quad (5)$$

该EAM势的所有参数, 我们都能很好的从Zhou等^[37]所做的气体金属多层原子结构中找出. 为了更好地观察拉伸过程中形成的缺陷原子, 采用公共近邻分析法CAN(common neighbor analysis)^[39]给予不同原子结构不同的颜色, 从而可以实时辨别各种形变机理. 利用集成了CNA的开放性可视化工具OVITO(open visualization tool)^[40]便能直接观察多层复合材料原子结构的演变过程.

本文采用维里定理^[41,42]推导出的平均应力, 表达式如下:

$$\sigma^{\mu\eta} = \frac{1}{\Omega} \left(- \sum_i m_i v_i^\mu v_i^\eta + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} F_{ij}^\mu r_{ij}^\eta \right), \quad (6)$$

其中, $\sigma^{\mu\eta}$ 表示的就是平均应力, Ω 代表所有原子的总体积; (6)式的前半部分代表了第 i 个原子的动能分量, 而后半部分是原子间相互作用力. m_i, v_i^μ, v_i^η 分别指的是第 i 个原子的质量和速度, 同时 F_{ij}^μ 代表第 i 个原子和第 j 个原子之间的相互作用力, 其

中 μ, η 表示的是坐标分量. r_{ij}^η 表示第 i 个原子和第 j 个原子沿着 η 方向的矢量差.

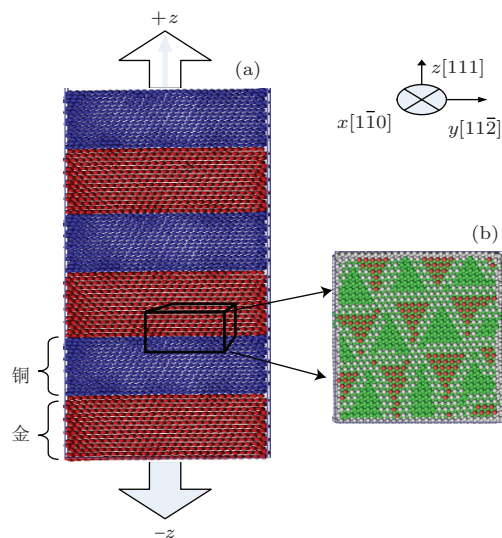


图1 (网刊彩色) 初始模型 (其中红色为 hcp 结构原子, 绿色为 fcc 结构原子, 灰色为其他结构原子) (a) 研究所用的基本模型; (b) 界面原子排列俯视图

3 结果及讨论

首先本文对比了铜-金复合材料和两种纯金属的机械变形机理. 图2给出了同种规模的纯金属铜、纯金属金及铜-金复合纳米线应力应变曲线. 从图中可以看出位错成核屈服强度, 金对应a点, 铜-金对应b点, 铜对应c点, 铜-金复合纳米线处于纯金和纯铜之间, 这是因为具有相同晶体结构的铜和金晶格常数分别为0.362 nm和0.408 nm, 存在着约为11.35%的晶格失配, 当两种金属交替堆积排列在一起的时候, 两金属交界面上存在着界面内应力, 拥有较大晶格常数的金原子层被迫受到压力, 而较小晶格常数的铜原子层被迫受到拉力. 因此,

在拉伸的过程中, 初始外拉力会先将金原子层的被迫压力中和掉才能表现出受外拉状态, 而铜原子层上的外拉力会在其被迫拉力的基础上进行叠加, 最终导致交界面的金原子层比纯金纳米线更难位错成核即 $b > a$, 交界面的铜原子层却没有纯铜纳米线的抗拉伸性能好即 $b < c$. 此外, 图2中金的杨氏模量和位错成核屈服强度均小于铜, 因此铜-金复合纳米线更易从金处位错成核, 再加上纳米线模型的特性, 即在 x 和 y 方向均为自由边界条件, 因而存在很大的表面效应, 立方体的棱角上表面应力更加集中. 综合金属金、铜及复合纳米线的特性, 初始位错成核于金的自由表面且位于立方体的角上, 如图3(a)所示. 继续拉伸加载, 成核于金处的位错在金层迅速滑移, 其后面留下了一些堆垛层错, 如图3(b)所示, 当到达铜-金交界面时, 位错穿过交界面继续向铜层传播, 如图3(c)所示, 直到遇到第二个交界面, 位错会被限制在铜层内部滑移, 如图3(d)所示, 这是因为金属金的相对原子量较大, 高应变率下其塑性形变主要是原子非晶化.

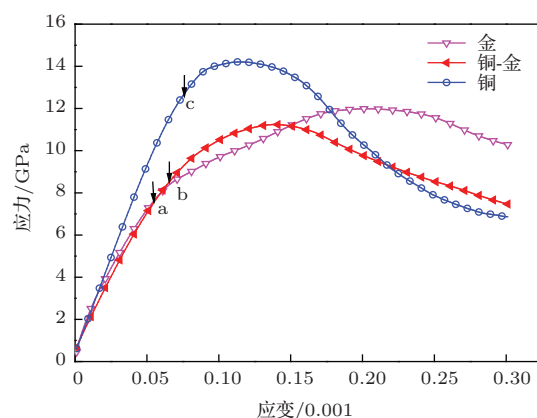


图2 (网刊彩色) 金、铜-金和铜应力应变曲线 (对应的a, b, c 分别为其位错成核屈服点)

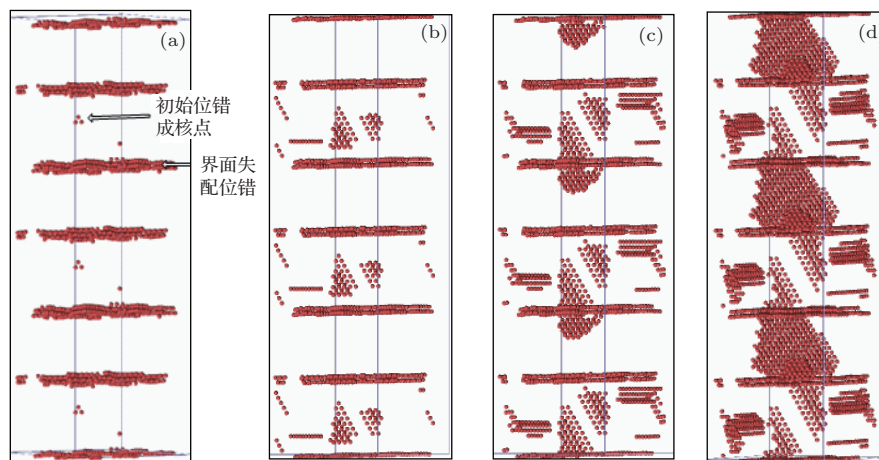


图3 (网刊彩色) 层厚度3.331 nm 铜-金复合纳米线的初始位错成核及其演变原子结构图 (图中只给出了 hcp 结构原子) (a) 为初始位错成核; (b), (c), (d) 分别为拉伸加载下不同时刻原子瞬时结构图

图4为不同层厚度铜-金纳米线在应变率为 $1.111 \times 10^9/\text{s}$ 均匀载荷加载下的应力应变曲线. 可以看到, 复合纳米线最高屈服点随着层厚度的增加而增加, 并且达到一定厚度之后屈服强度趋于一个稳定值, 这与Yuan等^[20]所做的铜-银复合纳米线结果基本一致. 为了对这一现象做出合理解释, 图5给出了对于不同平均层厚度下的最高屈服点和该屈服点下的非晶原子百分比(非fcc原子占相应规模下的总原子百分数)曲线. 从图中可以看出, 两条曲线的走势基本一致, 也就是说随着层厚度的增加双金属晶界对位错的存储能力增强, 但当层厚度达到一定值时, 继续增加层厚度, 非晶原子比例增加幅度变的很小或是趋于一个稳定值. 我们还可以看到图4中1.330 nm最大屈服应变为0.111, 而其他层厚度的最大屈服应变基本都是0.136, 也可以用位错存储原理来解释, 即较小层厚度时, 界面对位错的存储能力较小, 金处的位错很容易穿过界面到达铜处.

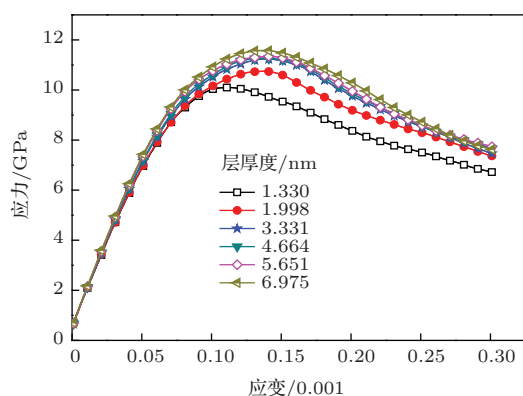


图4 (网刊彩色) 不同层厚度下铜-金复合纳米线的应力应变曲线

为了从微观角度分析, 图6(a)和(b)分别给出了层厚度为1.330 nm和6.975 nm的复合纳米线在最高屈服点上的原子结构图. 我们可以看到层厚度为1.330 nm的复合纳米线在最高屈服点时, 由于层厚度较小限制了铜层位错沿着滑移面滑移的空间, 导致了较多的位错在相互平行的面上滑移, 即只出现了一个滑移系(图中箭头所示), 拉伸过程只存在该滑移面和界面失配位错之间的交互, 这就导致了材料出现二次硬化达到最高屈服点随即软化. 而层厚度为6.975 nm的复合纳米线, 从图6(b)可以观察到较多的位错成核于界面, 从而铜层形成了较多的活跃滑移系, 即出现了两个滑移系(图中分别用 S_1 和 S_2 箭头标示), 但由于层厚度的限制, 位错不能很容易的滑移, 拉伸过程中两个不同滑移面和界

面失配位错, 三者交互作用, 从而导致了较高屈服强度, 这与Abdolrahim等^[15]得出的滑移系越多材料强度越强的结果一致.

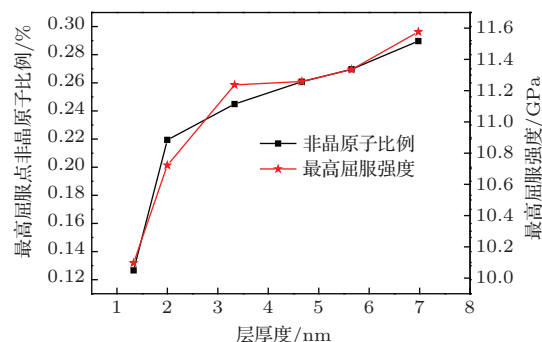


图5 (网刊彩色) 不同层厚度下最高屈服强度和该应变下的非晶原子百分比曲线

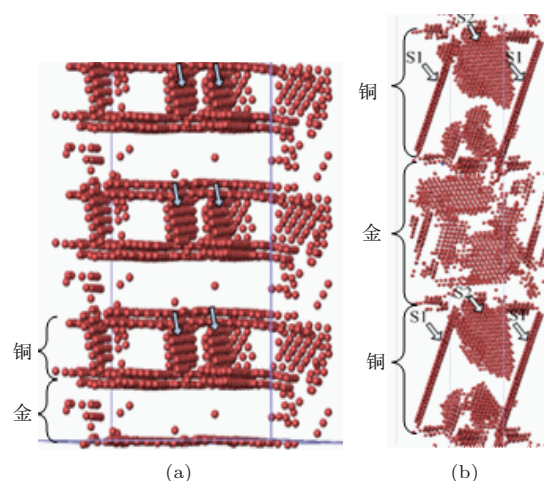


图6 (网刊彩色)(a) 层厚度1.330 nm的复合纳米线在最高屈服点上的原子结构图; (b) 层厚度6.975 nm的复合纳米线在最高屈服点上的原子结构图(图中仅给出了hcp结构原子)

为了研究应变率对复合材料力学性能的影响, 图7给出了层厚度均为3.331 nm在不同应变率下的应力应变曲线. 从图中可以看出, 应力都是随着加载应变的不断增大, 先是线性增大到一个临界值(a, c点, 定义为位错成核屈服点, 标示着材料进入塑性阶段), 之后都出现了二次硬化达到另一个峰值(b, d点, 定义为最高屈服点), 但对于任一应变, 其对应的高应变率($1.111 \times 10^9/\text{s}$)应力均大于低应变率($3.333 \times 10^8/\text{s}$)应力, 特别是当应变大于a点(低应变率的位错成核屈服点)后, 这与Ma等^[43]得出的金纳米线屈服强度随着应变率的增大而增强的结果一致. 图8给出了该层厚度下两种不同应变率的原子结构图, 分别选取大于各自最高屈服应变0.02的原子结构图. 从图8(a)可以看出, 低应变率 $3.333 \times 10^8/\text{s}$ 载荷加载下, 在应变为0.086(稍大

于最高屈服应变 0.066)时,原子主要通过位错滑移和孪晶形变来释放能量,从而比较容易发生塑性变形即应力应变曲线相对较小.从图8(b)可以看出,高应变率 $1.111 \times 10^9/\text{s}$ 载荷加载下,在应变为 0.156 (稍大于最高屈服应变 0.136)时,相对较软的金原子层在拉伸加载下一直都处于无定型状态,铜原子层部分非晶化,这是因为在冲击拉伸加载下,各原子之间很难通过彼此间动量和能量的交换来释放能量,因此单原子运动控制着整个塑性形变,即打破原始晶体的有序长程力形成新的无序长程力,这就导致了高应变率下的应力应变曲线相对较高.

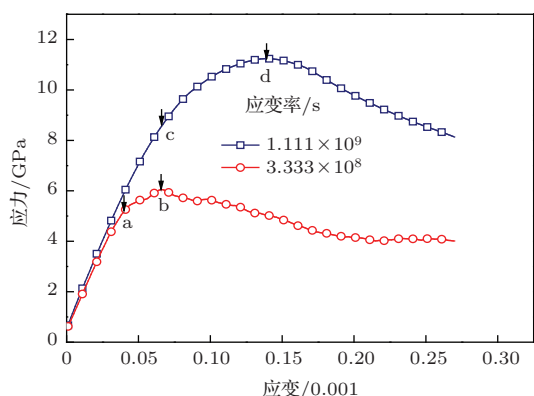


图7 (网刊彩色)厚度 3.331 nm 的复合材料在不同应变率下的应力应变曲线

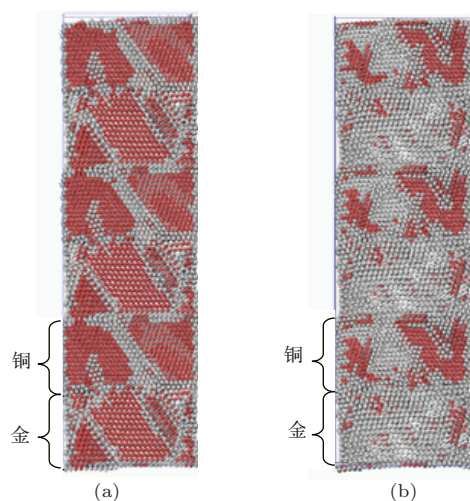


图8 (网刊彩色)两种应变率塑性阶段的原子结构图,图中只给出了形变原子(红色为hcp结构原子,灰色为其他结构原子)(a)应变率为 $3.333 \times 10^8/\text{s}$;(b)应变率为 $1.111 \times 10^9/\text{s}$

4 结 论

本文利用分子动力学方法对铜-金多层复合纳米线的力学性能进行了研究,采用EAM势函数描

述铜-铜、金-金及铜-金原子之间的相互作用.通过模拟结果,分析了铜-金复合纳米线的位错成核机理,及层厚度和应变率对其力学性能的影响.研究结果表明,不受层厚度和应变率的影响,铜-金复合纳米线位错均成核于金表面位错集中处(即四边形菱角处);同时,还发现随着层厚度的增加,铜-金纳米线的最高屈服强度也随之增大,最后趋于一稳定值,这受控于双金属界面对位错的存储能力.最后,本文对比了两种不同应变率拉伸载荷下复合纳米线的形变机理,发现不同应变率下复合纳米线的塑性形变机理不同,即低应变率下的位错滑移及孪晶形变和高应变率下的单原子运动,使得高应变率的最高屈服强度远大于低应变率的最高屈服强度.

参考文献

- [1] Xu S, Guo Y F 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 196201 (in Chinese) [徐爽, 郭雅芳 2013 物理学报 **62** 196201]
- [2] Zhang J H, Li M, Gu F, Liu Q Q 2012 *Chin. Phys. B* **21** 016203
- [3] Gu F, Zhang J H, Xu L H, Liu Q Q, Li M 2011 *Chin. Phys. Lett.* **28** 106102
- [4] Imran M, Hussain F, Rashid M, Ahmad S A 2012 *Chin. Phys. B* **21** 126802
- [5] Li C, Xu J, Li W, Jiang X F, Sun S H, Xu L, Chen K J 2013 *Chin. Phys. B* **22** 107201
- [6] Wang Z G, Huang R, Wen Y H 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 166102 (in Chinese) [汪志刚, 黄晓, 文玉华 2012 物理学报 **61** 166102]
- [7] Song H Y, Li Y L 2012 *J. Appl. Phys.* **112** 054322
- [8] An M R, Song H Y 2013 *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **56** 1938
- [9] Song H Y, Li Y L 2012 *Phys. Lett. A* **376** 529
- [10] Song H Y, Li Y L, An M R 2014 *Comput. Mater. Sci.* **84** 40
- [11] Song H Y, Li Y L 2012 *J. Appl. Phys.* **111** 044322
- [12] Whang C, Song H Y, An M R 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 046201 (in Chinese) [王琛, 宋海洋, 安敏荣 2014 物理学报 **63** 046201]
- [13] Liu Y, Bufford D, Wang H, Sun C, Zhang X 2011 *Acta Mater.* **59** 1924
- [14] Zhu X F, Zhang G P, Yan C, Zhu S J, Sun J 2010 *Philos. Mag. Lett.* **90** 413
- [15] Abdolrahim N, Zbib H M, Bahr D F 2014 *Int. J. PLASTICITY* **52** 33
- [16] Abdolrahim N, Mastorakos I N, Shao S, Bahr D F, Zbib H M 2014 *Comput. Mater. Sci.* **86** 118
- [17] Zhang R F, Germann T C, Wang J, Liu X Y, Beyerlein I J 2013 *Scripta Mater.* **68** 114
- [18] Shao S, Zbib H M, Mastorakos I N, Bahr D F 2014 *Comput. Mater. Sci.* **82** 435
- [19] Mastorakos I N, Abdolrahim N, Zbib H M 2010 *Int. J. Mech. Sci.* **52** 295
- [20] Yuan F P, Wu X L 2012 *J. Appl. Phys.* **111** 124313

- [21] Verdier M, Huang H, Spaepen F, Embury J D, Kung H 2006 *Philos. Mag.* **86** 5009
- [22] Sangid M D, Ezaz T, Sehitoglu H, Robertson I M 2011 *Acta. Mater.* **59** 283
- [23] Zbib H M, Overman C T, Akasheh F, Bahr D 2011 *Int. J. Plasticity* **27** 1618
- [24] Abdolrahim N, Mastorakos I N, Zbib H M 2010 *Phys. Rev. B* **81** 054117
- [25] Wang J, Misra A 2014 *Curr. Opin. Solid. St. M.* **18** 19
- [26] Kramer D E, Foecke T 2002 *Philos. Mag. A* **82** 3375
- [27] Yan J W, Zhang G P, Zhu X F, Liu H S, Yan C 2013 *Philos. Mag* **93** 434
- [28] Schweitz K O, Chevallier J, Bottiger J 2001 *Philos. Mag. A* **81** 2021
- [29] Beyerlein I J, Wang J, Zhang R F 2013 *Acta. Mater.* **61** 7488
- [30] Wang T, Lu Z X, Yang Z Y 2011 *Chin. J. Comput. Mech.* **28** 147 (in Chinese) [王涛, 卢子兴, 杨振宇 2011 计算力学学报 **28** 147]
- [31] Chen S D, Zhou Y K, Soh A K 2012 *Comput. Mater. Sci.* **61** 239
- [32] Lin S J, Wu C D, Fang T H, Kuo L M 2012 *Comput. Mater. Sci.* **59** 114
- [33] Li Y P, Zhu X F, Tan J, Wu B, Zhang G P 2009 *Philos. Mag. Lett.* **89** 66
- [34] Li Y P, Zhu X F, Zhang G P, Tan J, Wang W, Wu B 2010 *Philos. Mag.* **90** 3049
- [35] Crone J C, Knap J, Chung P W, Rice B M 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 141910
- [36] Hockney R W 1970 *Methods Comput. Phys.* **9** 136
- [37] Zhou X W, Wadley H N G, Johnson R A, Larson D J, Tabat N, Cerezo A, Long A K P, Smith G D W, Clifton P H, Martens R L, Kelly T F 2001 *Acta. Mater.* **49** 4005
- [38] Wadley H N G, Zhou X, Johnson R A, Neurock M 2001 *Prog. Mater. Sci.* **46** 329
- [39] Faken D, Jonsson H 1994 *Comput. Mater. Sci.* **2** 279
- [40] Stukowski A 2010 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [41] Cheung K S Yip S 1991 *J. Appl. Phys.* **70** 5688
- [42] Diao J, Gall K, Dunn M L, Zimmerman J A 2006 *Acta. Mater.* **54** 643
- [43] Ma F, Ma S L, Xu K W, Chu P K 2007 *Nanotechnology* **18** 455702

Effects of layer thickness and strain rate on mechanical properties of copper-gold multilayer nanowires^{*}

Fan Qian^{1)†} Xu Jian-Gang¹⁾ Song Hai-Yang^{1)2)‡} Zhang Yun-Guang¹⁾

1) (*School of Science, Xi'an University of Posts and Telecommunications, Xi'an 710121, China*)

2) (*College of Materials Science and Engineering, Xi'an Shiyou University, Xi'an 710065, China*)

(Received 5 May 2014; revised manuscript received 10 September 2014)

Abstract

Effects of individual layer thickness and strain rate on the mechanical behavior of copper-gold multilayer nanowires as well as the dislocation nucleation mechanism under a uniform tensile loading are investigated using molecular dynamics method. Simulations indicate that the highest yield strength increases with the increase of the individual layer thickness. Furthermore, the result also shows that the mechanical properties in the tensile process at different strain rates are dramatically different from each other, where the dislocation motion and twinning deformation are at a lower strain rate, while the individual atoms are at a higher strain rate for leading to amorphization. The general conclusions derived from this work can provide a guideline for the design of high performance multilayer composite materials.

Keywords: molecular dynamics, copper-gold multilayer nanowires, mechanical property

PACS: 62.25.-g, 31.15.xv, 61.82.Rx

DOI: 10.7498/aps.64.016201

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10902083), the Program for New Century Excellent Talents in University, China (Grant No. NCET-12-1046), the New Scientific and Technological Star of Shaanxi Province, China (Grant No. 2012KJXX-39), and the Natural Science Basic Research Plan in Shaanxi Province of China (Grant No. 2014JQ1036).

[†] Corresponding author. E-mail: fqprogram@sina.com

[‡] Corresponding author. E-mail: gsfshy@sohu.com