

金属多层膜的强度及界面强化能力研究进展

朱晓飞, 颜家伟, 张广平*

中国科学院金属研究所, 沈阳材料科学国家(联合)实验室, 沈阳 110016

* E-mail: gpzhang@imr.ac.cn

收稿日期: 2012-01-18; 接受日期: 2012-03-05

国家自然科学基金(批准号: 51001105, 50971125, 50890173)和国家重点基础研究发展计划(“973”计划)(批准号: 2010CB631003)资助项目

摘要 介绍了近年来国内外有关金属多层膜强度及其界面强化能力研究的进展. 结合近年来的研究结果, 分析并总结了金属多层膜强化的物理机制以及界面强化能力的模型, 并对金属多层膜研究的发展趋势进行了展望. 已有结果表明, 金属多层膜的强度通常随组元层的单层厚度减小而逐渐增大, 并符合类似 Hall-Petch 的强化关系, 但当单层厚度小于某一临界值以后, 不同体系多层膜的强度与单层厚度之间偏离了 Hall-Petch 关系, 表现出不同的变化趋势; 金属多层膜的界面类型及结构对其强化能力有显著影响, 同时也影响金属多层膜的塑性变形和断裂行为.

关键词
金属多层膜
强度
尺寸效应
界面效应

1 引言

金属多层膜是一种由两种或两种以上组元交替沉积生长形成的多层(层状)结构, 通常将相邻两组元层的总厚度称为一个调制周期或调制波长, 组元层的厚度比称为调制比. 组元材料、调制周期或调制比以及组元间的界面结构这 3 个因素决定了金属多层膜的总体性能. 通过选择合适的组元材料和组元层厚度, 可以制备出具有优异的电学、磁学、光学以及力学等性能的多层薄膜, 以满足微/纳米技术领域的特殊需求. 自 1921 年 Blum^[1]采用电化学方法制备出具有较高拉伸强度的层状 Cu/Ni 合金之后, 金属多层膜的力学行为及其强化机制一直是材料科学领域的一个热点问题之一. 与块体组元材料相比, 当金属多层膜的调制周期减小到纳米尺度时, 其强度不仅高于其块体组元材料的强度, 且显著高于采用体积混合法则计算的复合强度. 在最近的 30 年里, 人们采用多种研究方法对许多金属多层膜体系的强度与强

化机理进行了研究, 提出了适用于不同材料体系和不同尺度范围的变形和强化机制模型, 使得人们在组元尺度以及界面结构/类型的变化对多层膜强化能力的影响方面有了更深入的理解和认识. 本文主要介绍基于位错理论的金屬多层膜强化机制以及多层膜界面性能对其强度和强化能力的若干影响规律.

2 金属多层膜的强度及其尺寸效应

2.1 金属多层膜的强度

在 20 世纪 70 年代初, Koehler^[2]提出, 当组元层的厚度减小到位错不能在界面塞积的尺度时, 即使是 2 个强度很低的组元也能组成具有足够高强度的多层材料. 随后的实验结果表明, 绝大多数金属多层膜的强度/硬度具有显著的尺寸效应^[3-14]. 图 1 总结了文献中报道的一些金属多层膜硬度与组元层单层厚度(λ)间关系. 从图 1 中可以看出, 即使对于同一多层膜(如 Cu/Ag)体系, 不同研究者所得强度数值差别较

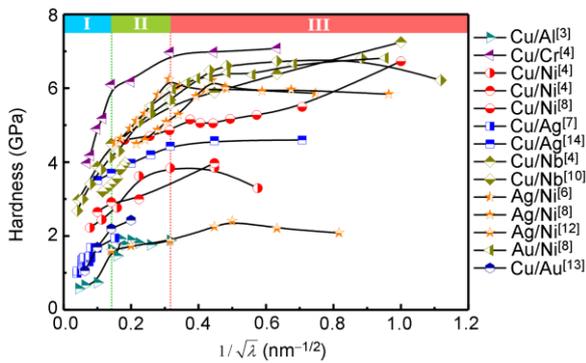


图 1 金属多层膜硬度与单层厚度关系

大, 这一方面是因为所采用的实验方法不同; 另一方面可能是材料微观结构和应力状态也存在差异. 虽然不同研究者报道的实验数值具有的分散性, 但总体上可以将金属多层膜的硬度与单层厚度关系划分为 3 个区域. 区域 I: 多层膜的单层厚度在亚微米及其以上尺度的区域. 金属多层膜的硬度与单层厚度之间符合 Hall-Petch (H-P)关系, 即多层膜硬度与单层厚度的平方根倒数成正比($H = H_0 + K / \lambda^{1/2}$). 在该区域, 各金属多层膜体系除硬度数值大小不同以外, 其 H-P 斜率(K)数值也不同, 表明金属多层膜的界面与多晶材料的晶界作用相似, 即对位错的运动均具有阻碍作用. 随着单层厚度进一步减小, 多层膜的硬度仍然增加, 但其逐渐偏离了根据 H-P 关系外延的强度, 如图 1 中的区域 II 所示. 当单层厚度减小到 10 nm 以下时(区域 III), 不同多层膜体系的硬度与单层厚度表现出了不同的变化趋势. 如 Cu/Cr 多层膜的硬度不随单层厚度变化, 硬度出现一个平台区; Cu/Nb 多层膜硬度随着单层厚度减小一直逐渐增加; Cu/Ni 多层膜的硬度在出现极大值以后, 随单层厚度进一步减小而出现下降的趋势. Cu/Au 和 Cu/Cr 多层膜的纳米压痕实验研究结果表明^[13, 15, 16]: 当多层膜的单层厚度较大时, 其强度/硬度均符合 Hall-Petch 关系, 但当单层厚度小于 50 和 35 nm 时, 两种多层膜硬度虽然仍在增加, 但增长的幅度明显小于根据 H-P 关系外延的强度, 这种变化趋势和文献报道的实验结果非常相似, 说明相同的尺度下(区域 I)不同类型的多层膜体系具有相似的强化机制.

表 1 总结了由面心立方-面心立方(FCC-FCC)和由面心立方-体心立方(FCC-BCC)两种金属组成的金属多层膜体系的极值强度(H_{max})及其所对应的单层厚度范围和相应的 H-P 斜率. 从中可以看出, 大多数金

表 1 不同体系金属多层膜的某些力学性能参数

Multilayer system	H_{max} (GPa)	λ at H_{max} (nm)	H-P slope (MPa/m ^{1/2})	Ref.	
FCC-FCC	Cu/Al	2.2	20 ~ 70	0.123	[3]
	Cu/Ni	4.9	5.0	0.077	[4]
	Ag/Ni	6.2	5.0	-	[6]
	Cu/Au	4.5	< 25	0.156	[13]
	Au/Ni	6.5	1.0~2.0	-	[17]
	Ag/Cu	4.5	1.0	0.116	[18]
	Cu/Cr	7.0	2.0~10	0.310	[4]
	Cu/Nb	6.8	2.5	0.160	[4]
FCC-BCC	Pt/Fe	9.6	2.0	0.232	[5]
	Ag/Cr	4.9	2.5	0.074	[5]
	Cu/W	8.9	4.0	-	[19]
	Al/Nb	4.8	1.0~2.5	0.120	[20]
	Cu/V	5.2	1.0	0.150	[20]

属多层膜体系在 2~5 nm 范围时强度值达到最大. 相对于 FCC-FCC 多层膜体系, FCC-BCC 多层膜体系可以达到更高的极值强度. 多层膜体系中 H-P 斜率是衡量界面对位错穿越的阻碍能力, 决定多层膜强度随单层厚度减小而增加的速率(即强化能力). 从表中可以看出, FCC-BCC 多层膜体系的 H-P 斜率相对较高, 且随模量较大组元的模量增加而增加. 根据界面对滑移位错的障碍强度源于界面失配位错网对滑移位错交割阻力的假设, Li 等人^[13]对多层膜的界面强化能力给出了统一解释, 将在下文中介绍.

无支撑金属多层膜的拉伸实验结果表明, 与硬度实验结果相似, 多层膜的拉伸屈服强度也随单层厚度减小而增加. 同时, 当单层厚度减小时, 多层膜的塑性往往会逐渐下降. Huang 和 Spaepen^[7]研究了无支撑 Cu/Ag 多层膜的拉伸性能. 他们发现, 当单层厚度从 200 nm 减小到 50 nm 时, Cu/Ag 多层膜的强度从 ~480 MPa 增加到 700 MPa 左右, 但多层膜的断裂应变下降到 0.16%, 当单层厚度进一步减小时, Cu/Ag 多层膜在发生屈服之前已经发生断裂, 宏观上表现为脆性断裂. Wang 等人^[21]最近制备出一种含有单层厚度为 5~10 nm 非晶层的 Cu/Cu₃Zr(非晶)多层膜. 其拉伸实验结果表明, 该多层膜结构不但可以显著提高多层膜的强度而且可以将其断裂应变提高到~14%. 他们认为, 这与非晶层对晶体层在加载过程中产生的位错具有容纳吸收作用有关. 可以看出, 金属多层膜的强度和塑性不但与其几何约束有关, 同时还与多层膜组元层之间的界面结构有关.

多层膜的强化来源于层界面对位错运动的限制和阻碍, 因而界面的结构和性质很大程度上决定了

多层膜的最终强度. Fu 等人^[20]比较了不同 FCC/BCC 多层膜体系的极值硬度与平均双轴模量间的关系. 图 2 给出了表 1 中部分 FCC/FCC 和 FCC/BCC 多层膜体系的极值硬度与平均双轴模量关系. 从图中可以看出, 除了 Cu/Al 多层膜极值强度较小以外(通过拉伸实验屈服强度换算的硬度($H_{max}=3\sigma_y$)), 大多数金属多层膜极值强度均在 4~7 GPa 之间, 且具有 FCC/BCC 界面类型多层膜的极值强度较大. 通过比较图 2 中虚线所连接的 3 对多层膜体系可以看出, 无论是 FCC/BCC 类型的界面或 FCC/FCC 类型的界面, 组元之间的模量差异是影响多层膜极值强度的重要因素, 即 Koehler 应力是这些多层膜极值强度的主要贡献. 同时从图中还可以看出, 对于某些 FCC/FCC 的多层膜体系(如 Cu/Ag 和 Cu/Ni)以及 FCC/BCC 的多层膜体系(如 Cu/Nb 和 Cu/Cr), 尽管对比的两组体系之间模量差异很大, 但其极值强度差别并不大, 所以多层膜极值强度应当还取决于组元材料的其他物理参数(如晶格常数)和界面性质. 上述实验结果表明, 多层膜强度研究具有复杂性.

2.2 金属多层膜的位错强化机制

如前所述, 金属多层膜的强度随单层厚度的减小而增加, 其强度与单层厚度关系可以分成 3 个区域, 它们分别对应于 3 种不同的强化机制. 在区域 I 中, 当单层厚度为微米或亚微米尺度时, 由于层内尺寸较大, 在剪切模量较小组元层中开动的位错由于界面的阻碍作用, 将在界面处塞积如图 3(a)所示. 位错在界面处的塞积, 造成应力集中. 当外加应力和位

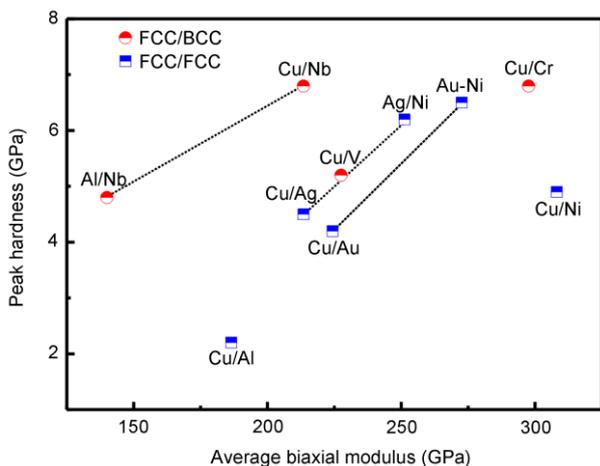


图 2 金属多层膜极值硬度与平均双轴模量关系

错塞积产生的应力之和大于界面障碍强度时, 位错将克服界面障碍或激活界面位错源, 多层膜将发生屈服. Rao 和 Hazzledine^[22]基于位错塞积机制, 得出领先位错克服界面障碍所需的外加切应力为

$$\tau = \tau_0 + \sqrt{\frac{Gbsin\phi}{\pi(1-\nu)V_s} \frac{\tau^*}{\lambda}}, \quad (1)$$

其中, τ_0 为位错滑移所需要克服的包括点阵阻力和固溶强化等效应力引起的应力; G 和 ν 分别为多层膜的有效剪切模量和泊松比, 可以采用混合法则(即按体积平均)计算; V_s 为发生位错塞积组元层的体积分数; b 为位错柏氏矢量; ϕ 为滑移面与界面间夹角; τ^* 为界面的障碍强度; $f(\lambda)$ 为离散位错校正因子, 当位错塞积由连续模型转变为离散分布时, $f(\lambda)$ 的数值由 1 增加到 4. 从(1)式可以看出, 随着单层厚度的减小, 多层膜的强度与单层厚度之间符合 Hall-Petch 关系. 随着单层厚度减小, 组元层通道内滑移面上可容纳和塞积的位错数量也逐渐减小. Armstrong 等人^[23]指出, 当单边塞积位错数目小于 6 或两端塞积位错数目小于 3 时, 多层膜强度与单层厚度关系将偏离 H-P 关系. 这与图 2 中的区域 II 中观察到的现象相符. 多层膜强度偏离 H-P 关系还与界面障碍强度 τ^* 是单层厚度的函数有关.

由位错塞积模型可以推测出一个临界尺度, 当单层厚度与该临界尺寸相当时, 每个滑移面上只能容纳一个位错. 显然, 此时 H-P 关系不能用来描述多层膜的强度. Embury 和 Hirth^[24]认为, 在具有纳米尺度的多层膜中, 当位错间距减小到与薄膜厚度相当时, 位错将在剪切模量较小的组元层内弓出运动, 并在界面上沉积一段界面位错, 如图 3(b)所示. 开动位错所需应力为

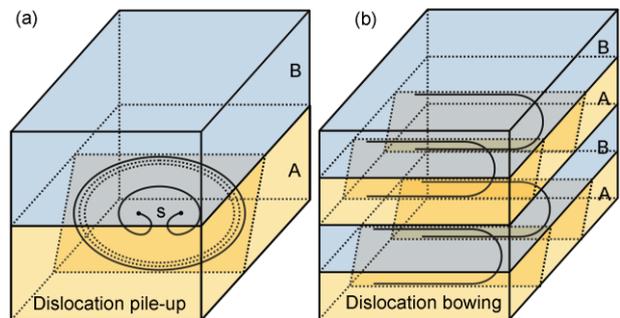


图 3 金属多层膜中位错强化机制模型示意图

(a) 位错塞积模型; (b) 位错弓出模型

$$\tau = \frac{Gb}{\pi(1-\nu)\lambda} \ln\left(\frac{s}{2\pi b}\right), \quad (2)$$

式中, G 和 b 分别为模量较小组元层的剪切模量和柏氏矢量, λ 为多层膜单层厚度, s 为界面位错间距. 从(2)式可以看出, 在该尺度范围内, 薄膜的强度与薄膜厚度的倒数成正比.

位错塞积机制和位错弓出强化机制均起源于界面对位错运动的约束和限制. 当多层膜的单层厚度减小到某一临界尺度以致位错源很难开动时, 即位错弓出所需的应力增大到和界面障碍强度相当时, 界面将失去对位错运动的阻挡能力, 此时多层膜的变形主要受位错萌生和跨越界面机制所主导. 位错一旦产生将直接跨越界面, 导致多层膜的整体屈服. 此时, 多层膜的强度也将达到极值, 且该数值与界面的障碍强度相当. 因此, 多层膜的极值/饱和强度取决于单根位错滑过界面所需的应力.

综上所述, 金属多层膜的强化与材料的微观结构尺度或几何尺度以及界面对位错活动的约束有关. 其强化机制包括位错塞积机制、位错弓出机制以及位错跨越界面剪切机制. 金属多层膜的强度与尺度关系取决于上述哪种强化机制起主导作用.

上述位错强化模型或多或少的存在一些缺陷, 尚不能完全描述金属多层膜的力学行为. 例如, 位错塞积模型没有考虑位错的形核, 界面障碍强度也不确定; 位错弓出模型忽略了共格应力和热失配应力的影响, 同时假设界面障碍强度足够高以至于位错被限制在层内滑移. 因此, 为了改进各强化模型适用性, 需要深入理解和精确表征多层膜界面的障碍强度.

3 金属多层膜的界面

如何提高材料的强度是材料科学研究的核心理念之一. 强化材料的途径大致可分为 4 类: 固溶强化、第二相弥散强化、加工(或应变)强化和晶粒细化强化. 这些强化技术的实质是引入各种缺陷(点、线、面及体缺陷等)来阻碍位错的运动, 使材料难以发生塑性变形从而提高其强度^[25]. 金属多层膜中存在的大量层间界面, 可以显著提高多层膜的强度. 当单层厚度减小到纳米量级时, 多层膜强度可以达到理论强度的 $1/2 \sim 1/3$ ^[4]. 由前一节硬度和单层厚度关系可知, 不同体系金属多层膜的 H-P 斜率通常并不相同,

表明不同的界面类型对提高材料强度的能力存在差异, 然而该强化能力与界面的哪些性能有关? 本节将对上述问题展开讨论, 首先介绍多层膜材料的界面的类型和界面特点, 然后讨论多层膜界面的强化能力, 最后介绍位错与界面的交互作用.

3.1 界面结构的分类与特点

在研究界面的强化能力前需要对界面的结构进行表征. 材料中的界面可以分成两类: 同相界面, 由相同晶体结构及相同化学成分的组元组成的界面, 包括晶界和孪晶界等; 异质界面, 由不同晶体结构(化学成分也可能不同)组元组成的界面, 例如多层膜中的组元层之间的界面.

对于异质界面来说, 根据界面两侧材料的点阵参数差异, 一般可分为共格界面, 半共格界面和非共格界面. 由于组元材料性能的差异, 在多层膜制备过程中会产生一定的失配应变. 当薄膜厚度较小时, 该应变可以通过组元晶格参数的变化来调节, 此时界面仍可以保持共格关系; 随着薄膜厚度增加, 薄膜体系的应变能将逐渐增大, 为了降低体系能量, 将在界面处萌生失配位错, 此时界面转变为半共格界面^[26]. 金属多层膜的界面类型与组元的晶体结构也有关. FCC/FCC 类型的多层膜通常形成共格或半共格的界面, 而 FCC/BCC 多层膜一般形成半共格或非共格的界面.

Clemens 等人^[5]总结了多层膜结构和界面的特点. 当组元的晶体结构相似且晶格常数失配适中时, 多层膜通常形成晶粒对晶粒的外延结构. 对互溶的 FCC/FCC 多层膜体系(如 Cu/Au)来说, 通常在界面处形成立方-立方(cube-on-cube)的取向关系, 并在界面处形成失配位错, 但失配位错间距比共格应力完全松弛所对应失配位错间距要大; 对于不互溶的 FCC/BCC 多层膜体系(如 Cu/Nb 和 Cu/Cr), 其通常具有明晰的界面. 组元晶粒一般形成柱状晶的形貌, 同时具有较强的织构取向关系. 例如 Cu/Cr 多层膜体系在较大单层厚度范围内, 具有 Kurdjumov-Sachs 取向关系^[27].

根据界面两侧组元滑移面和滑移方向是否连续, Hoagland 等人^[9]将多层膜的界面分为透明界面和模糊界面. 对于界面两侧具有立方-立方的取向关系多层膜体系(如 Cu/Ni), 界面两侧滑移面和滑移方向几乎是连续的, 这种界面被称为透明界面. 而剪切强度

为有限值的界面, 对靠近界面的可动位错具有吸引作用, 同时可造成运动到界面上位错的核芯发生扩展, 这样的界面由于自身就是位错滑移的障碍, 因此被称为模糊界面。

3.2 界面障碍强度及界面强化能力

根据(1)式可知, H-P 斜率取决于界面的障碍强度 τ^* , 因此 H-P 的斜率体现了界面的强化能力. Li 等人^[13]总结了大量二元多层膜体系的 H-P 斜率与界面失配度的关系, 发现二元金属多层膜的界面强化能力随着点阵失配度的增加而逐渐升高. 他们提出了一个理论模型, 认为界面处因组元晶格常数失配产生的失配位错网络对层内位错运动起阻碍作用, 该障碍力的大小与失配位错的密度有关. 该模型能够很好地描述一些简单二元金属多层膜体系(如 FCC/FCC 和 FCC/BCC)的界面强化能力, 理论预测与实际测量的结果符合的较好, 如图 4 所示。

从上面的介绍可知, 金属多层膜的界面障碍强度 τ^* 是影响多层膜强度的重要参量. 界面的障碍强度还受哪些因素影响, 国内外的研究者对此进行了深入的研究^[22, 28-30]. Anderson 等人^[28]认为多层膜界面障碍的强度主要包括 7 个因素: 1) 结构因素, 如界面两侧滑移面和滑移方向连续性; 2) 界面两侧组元无应力时的晶格常数以及与之相关的界面失配位错对领先位错的钉扎作用; 3) 组元弹性模量失配产生的位错镜像力; 4) 界面上位错核心的扩展; 5) 有序化失配, 如有序材料中全位错在另一层中分解为不全位错并伴随着一个反相畴界; 6) 化学应力, 与

界面两侧组元层错能差异有关; 7) 在半共格或非共格界面上形成残余位错时所需的应力。

对于 Cu/Ni 多层膜, 其界面障碍强度主要包括四个因素, 即由模量失配、晶格常数失配、层错能差异和滑移面及滑移方向的不连续性引起的应力. Rao 和 Hazzledine^[22]采用原子尺度模拟的方法, 估算了上述几种因素对 Cu/Ni 界面障碍强度的影响. 当单层厚度较大时, 弹性模量差异对界面障碍强度的贡献与界面取向和位错特征无关, 模量失配引起的界面障碍强度为 0.01~0.015G(G 为铜的剪切模量). 但当单层厚度与位错核心宽度相当时, 由于位错核心的扩展, 模量失配引起的界面障碍强度急剧减小, 调制周期为 1.8 nm 时, 减小为 0.004G. 由层错能差异产生的界面障碍强度约为模量差异引起界面障碍强度的 1/3. 组元晶格常数失配引起的共格应力, 一方面直接对滑动位错产生作用力, 另一方面通过影响界面失配位错密度、改变组元弹性模量和滑动位错核芯结构来改变界面障碍强度. 滑移面的不连续性对多层膜的界面障碍强度影响较大. 即使是共格的(111)孪晶界面, 由于界面的层错能小于 Ni 层的层错能, 位错将通过交滑移方式进入界面而不是跨过界面进入 Ni 层. 上述界面对于 60°的混合位错的障碍强度为 0.03~0.04G, 远大于其他因素引起的界面障碍强度. 总体而言, 在单层厚度大于位错核芯宽度及其以上尺度时, (111)界面取向的 Cu/Ni 多层膜的界面障碍强度约为 0.02G, 此后, 界面障碍强度随单层厚度减小而减小; 当多层膜的单层厚度大于形成共格界面所对应的临界单层厚度时, 随着单层厚度减小, (100)界面取向的 Cu/Ni 多层膜的界面障碍强度从 0.02G 逐渐减小到 0.01G, 此后出现一个平台区, 当单层厚度小于位错核芯宽度时, 界面强度随单层厚度减下而减小, 如图 5 所示。

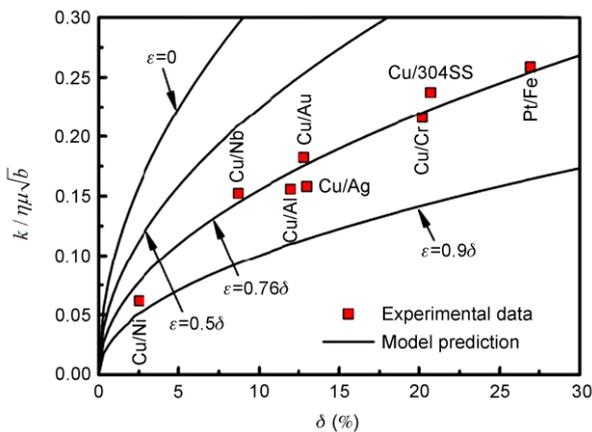


图 4 不同二元金属多层膜的归一化 H-P 斜率与点阵失配关系^[13]

3.3 界面对变形和断裂行为的影响

界面障碍强度不仅影响多层膜的强度, 而且对多层膜的塑性变形和断裂行为也有显著影响. Zhang 等人^[29, 31, 32]通过纳米压痕方法研究了 Cu/Au 和 Cu/Cr 多层膜体系在集中载荷作用下的变形行为. 他们发现随着单层厚度减小, 多层膜易于在压痕周边发生局部剪切失稳变形, 如图 6(a)所示. 进一步的实验证明, Cu/Au 多层膜即使在大尺度下也会发生剪切失稳变形, 如图 6(b)所示, 这与具有纳米尺度单层厚度的剪

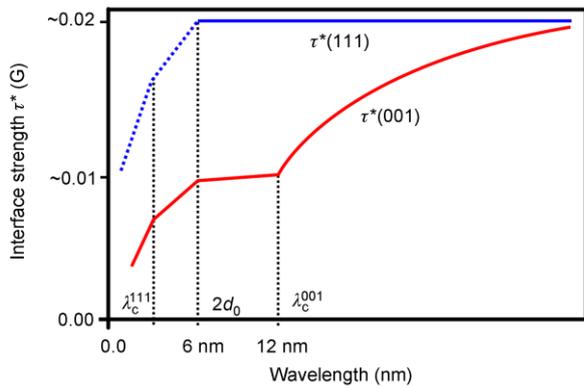


图 5 Cu/Ni 多层膜(111)和(100)界面障碍强度与调制周期关系示意图^[22]

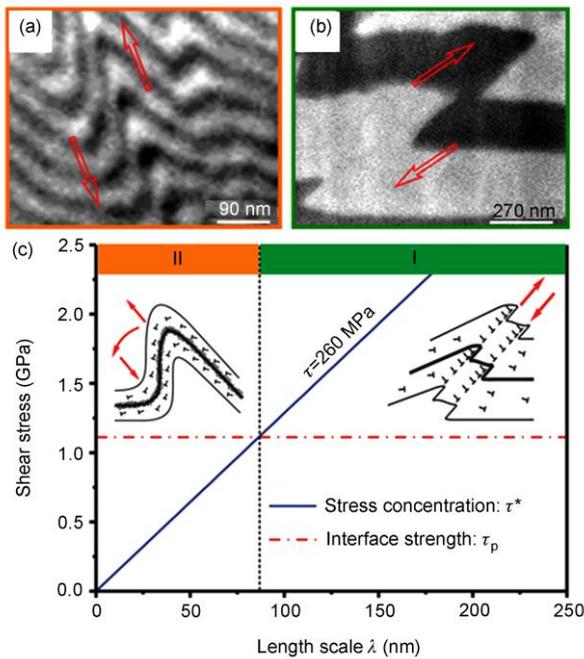


图 6 单层厚度分别为(a) 250 nm 和(b) 25 nm 的 Cu/Au 多层膜中两种典型的塑性失稳变形行为, (c)界面强度和位错塞积应力的理论计算^[29]

切失稳变形行为(图 6(a))有着本质的区别。理论计算表明(图 6(c)), 前者是滑移面在位错塞积应力集中作用下的跨界面剪切, 而后者是位错运动和晶界滑移在局部区域内的共同协调行为。通过比较位错在层内运动所需应力和界面因剪切模量失配和晶格失配而在界面产生的界面障碍力两者的相对大小, Zhang 等人^[30]人发现, 当多层膜的单层厚度小于某一临界值(λ^*)时, 位错将跨越界面导致多层膜发生剪切型断裂(如图 7 所示)。同时可以看出, FCC/BCC 体系多层

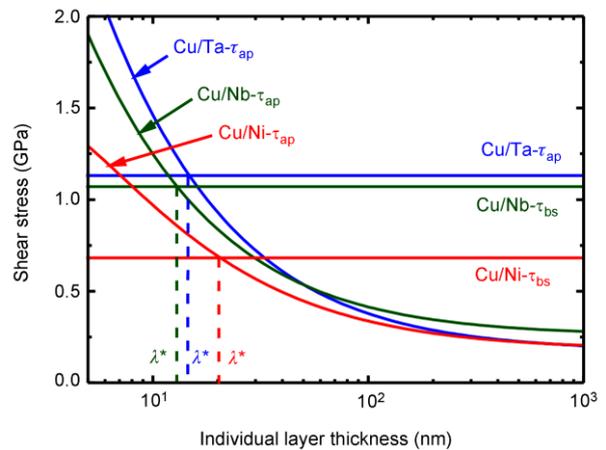


图 7 位错在层内运动所需应力(τ_{ap})和界面障碍强度(τ_{bs})相对大小表明, 当多层膜的单层厚度小于某一临界值(λ^*)时, 位错易于穿越界面, 导致剪切型断裂^[30]

膜发生剪切断裂时的临界单层厚度比 FCC/FCC 体系多层膜要小。最近, Zhang 等人^[33, 34]系统深入的研究了调制比变化对 FCC/BCC 多层膜体系断裂行为的影响, 得出塑性层位错容纳能力是决定多层膜断裂行为的关键因素。

3.4 界面与位错交互作用的分子动力学模拟

近年来通过分子动力学模拟来揭示金属多层膜的位错强化机理方面的研究非常活跃, 并取得了许多重要的进展, 为人们从原子尺度层次上理解位错与界面的交互作用提供理论指导。

如上所述, 由两种不同晶体结构类型组元组成的金属多层膜(如 FCC/BCC)体系, 通常会形成半共格和非共格界面。Wang 等人^[35]采用分子动力学模拟了位错穿过非共格的 Cu/Nb 界面的过程。他们发现, 由于运动位错应力场与界面的交互作用, 运动到界面附近的位错首先会被界面捕获, 位错核芯将沿界面扩展; 在滑移到相邻的组元层中之前, 扩展的位错核芯必须收缩, 形成新的位错环; 当新形成的位错环克服了因界面剪切和残存在界面上位错产生的引力后, 将在相邻组元滑移面上弓出运动, 从而完成位错穿越界面的整个过程。被界面捕获的可动位错除可沿界面扩展以外, 还可通过吸收和释放空位的方式在垂直于界面方向上发生攀移运动^[36]。Li 等人^[37]通过透射电镜原位压痕方法在 Al/Nb 多层膜体系中观察到了上述攀移过程。需要指出的是, 由于分子动力学模拟的时间步长很小, 模拟过程的应变速率和相应的应力通常都很高, 甚至

与真实实验的条件有着数量级上的差别. 尽管如此, 分子动力学模拟为我们理解位错与界面的交互作用的微观过程提供了许多有益的启示.

4 结论与展望

在最近 30 年的研究中, 人们对金属多层膜的强度随其组元层厚度减小而表现出的“越小越强”的规律以及强化机制已有了深入的理解, 提出了若干多层膜的强化机制与模型. 虽然每个模型的适用范围有限, 但阐明了由于微观结构和几何尺寸约束对材料强度和变形断裂行为的影响规律. 大多数理论模型不能完全解释多层膜实验中观察到的强化现象, 一方面与多层膜结构自身具有的复杂性有关, 如制备方法不同导致微观结构的差异; 另一方面, 为了获得简便的解析解, 在建立各种强化模型时通常忽略

了某些因素的影响或使用了不十分合理的假设. 在今后的多层膜强化机制的理论研究中应当侧重于将微观结构(尤其是纳米尺度多层膜的界面结构)表征与机理研究相结合, 从而在更深的层次上揭示材料微观结构与力学行为的内在联系. 当多层膜的几何结构或微观结构尺度减小到纳米量级时, 常规力学性能测试设备将无法适用, 因此开发适用于多层膜力学性能表征的新方法也将是未来多层膜研究领域亟需解决问题之一. 此外, 由于多层膜材料不仅广泛应用于微/纳米系统中, 且也将成为最具发展前途的高性能结构材料之一, 因此, 如何深入理解这种多层结构的尺度与界面的优化组合原理, 如何实现其具有良好的疲劳与断裂性能^[38-40]、强度-韧性的最佳匹配^[41]、优异的耐磨性能^[42]以及具有在某些苛刻环境(如粒子辐照、高温和强磁场)下^[43]的特殊使役性能也将是多层材料发展需要解决的热点问题.

参考文献

- Blum W. The structure and properties of alternately deposited metals. *Trans Am Electrochem Soc*, 1921, 40: 307-320
- Koehler J S. Attempt to design a strong solid. *Phys Rev B*, 1970, 2(2): 547-551
- Lehoczy S L. Strength enhancement in thin-layered Al-Cu laminates. *J Appl Phys*, 1978, 49(11): 5479-5485
- Misra A, Verdier M, Lu Y C, et al. Structure and mechanical properties of Cu-X (X = Nb, Cr, Ni) nanolayered composites. *Scr Mater*, 1998, 39(4-5): 555-560
- Clemens B M, Kung H, Barnett S A. Structure and strength of multilayers. *MRS Bull*, 1999, 24(2): 20-26
- Geisler H, Schweitz K O, Chevallier J, et al. Hardness enhancement and elastic modulus behaviour in sputtered Ag/Ni multilayers with different modulation wavelengths. *Philos Mag A*, 1999, 79(2): 485-500
- Huang H B, Spaepen F. Tensile testing of free-standing Cu, Ag and Al thin films and Ag/Cu multilayers. *Acta Mater*, 2000, 48(12): 3261-3269
- Schweitz K O, Chevallier J, Böttiger J, et al. Hardness in Ag/Ni, Au/Ni and Cu/Ni multilayers. *Philos Mag A*, 2001, 81(8): 2021-2032
- Hoagland R G, Kurtz R J, Henager C H. Slip resistance of interfaces and the strength of metallic multilayer composites. *Scr Mater*, 2004, 50(6): 775-779
- Misra A, Hirth J P, Hoagland R G. Length-scale-dependent deformation mechanisms in incoherent metallic multilayered composites. *Acta Mater*, 2005, 53(18): 4817-4824
- Misra A, Zhang X, Hammon D, et al. Work hardening in rolled nanolayered metallic composites. *Acta Mater*, 2005, 53(1): 221-226
- Kang B C, Kim H Y, Kwon O Y, et al. Bilayer thickness effects on nanoindentation behavior of Ag/Ni multilayers. *Scr Mater*, 2007, 57(8): 703-706
- Li Y P, Zhang G P, Wang W, et al. On interface strengthening ability in metallic multilayers. *Scr Mater*, 2007, 57(2): 117-120
- Wen S P, Zong R L, Zeng F, et al. Nanoindentation investigation of the mechanical behaviors of nanoscale Ag/Cu multilayers. *J Mater Res*, 2007, 22(12): 3423-3431
- Li Y P, Zhu X F, Tan J, et al. Comparative investigation of strength and plastic instability in Cu/Au and Cu/Cr multilayers by indentation. *J Mater Res*, 2009, 24(3): 728-735
- Li Y P, Zhu X F, Zhang G P, et al. Investigation of deformation instability of Au/Cu multilayers by indentation. *Philos Mag*, 2010, 90(22): 3049-3067
- Baker S P, Nix W D. Mechanical properties of compositionally modulated Au-Ni thin-films - Nanoindentation and microcantilever deflection experiments. *J Mater Res*, 1994, 9(12): 3131-3145
- McKeown J, Misra A, Kung H, et al. Microstructures and strength of nanoscale Cu-Ag multilayers. *Scr Mater*, 2002, 46(8): 593-598
- Wen S P, Zong R L, Zeng F, et al. Evaluating modulus and hardness enhancement in evaporated Cu/W multilayers. *Acta Mater*, 2007, 55(1): 345-351
- Fu E G, Li N, Misra A, et al. Mechanical properties of sputtered Cu/V and Al/Nb multilayer films. *Mater Sci Eng A*, 2008, 493(1-2): 283-287
- Wang Y M, Li J, Hamza A V, et al. Ductile crystalline-amorphous nanolaminates. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2007, 104(27): 11155-11160
- Rao S I, Hazzledine P M. Atomistic simulations of dislocation-interface interactions in the Cu-Ni multilayer system. *Philos Mag A*, 2000, 80(9): 2011-2040
- Armstrong R W, Chou Y T, Fisher R M, et al. The limiting grain size dependence of the strength of a polycrystalline aggregate. *Philos Mag*,

- 1966, 14(131): 943–951
- 24 Embury J D, Hirth J P. On dislocation storage and the mechanical response of fine scale microstructures. *Acta Metall Mater*, 1994, 42(6): 2051–2056
- 25 Lu K, Lu L, Suresh S. Strengthening materials by engineering coherent internal boundaries at the nanoscale. *Science*, 2009, 324(5925): 349–352
- 26 Freund L B, Suresh S. *Thin Film Materials: Stress, Defect Formation and Surface Evolution*. Cambridge: Cambridge University Press, 2003. 34–43
- 27 Li Y P, Zhang G P. On plasticity and fracture of nano structured Cu/X (X = Au, Cr) multilayers: The effects of length scale and interface/boundary. *Acta Mater*, 2010, 58(11): 3877–3887
- 28 Anderson P M, Foecke T, Hazzledine P M. Dislocation-based deformation mechanisms in metallic nanolaminates. *MRS Bull*, 1999, 24(2): 27–33
- 29 Li Y P, Zhu X F, Tan J, et al. Two different types of shear-deformation behaviour in Au-Cu multilayers. *Philos Mag Lett*, 2009, 89(1): 66–74
- 30 Zhu X F, Li Y P, Zhang G P, et al. Understanding nanoscale damage at a crack tip of multilayered metallic composites. *Appl Phys Lett*, 2008, 92(16): 161905
- 31 Zhang G P, Liu Y, Wang W, et al. Experimental evidence of plastic deformation instability in nanoscale Au/Cu multilayers. *Appl Phys Lett*, 2006, 88(1): 013105
- 32 Li Y P, Tan J, Zhang G P. Interface instability within shear bands in nanoscale Au/Cu multilayers. *Scr Mater*, 2008, 59(11): 1226–1229
- 33 Zhang J Y, Zhang X, Liu G, et al. Dominant factor controlling the fracture mode in nanostructured Cu/Cr multilayer films. *Mater Sci Eng A*, 2011, 528(6): 2982–2987
- 34 Zhang J Y, Zhang X, Wang R H, et al. Length-scale-dependent deformation and fracture behavior of Cu/X (X = Nb, Zr) multilayers: The constraining effects of the ductile phase on the brittle phase. *Acta Mater*, 2011, 59(19): 7368–7379
- 35 Wang J, Misra A. An overview of interface-dominated deformation mechanisms in metallic multilayers. *Curr Opin Solid State Mater Sci*, 2011, 15(1): 20–28
- 36 Wang J, Hoagland R G, Misra A. Room-temperature dislocation climb in metallic interfaces. *Appl Phys Lett*, 2009, 94(13): 131910
- 37 Li N, Wang J, Huang J Y, et al. *In situ* TEM observations of room temperature dislocation climb at interfaces in nanolayered Al/Nb composites. *Scr Mater*, 2010, 63(4): 363–366
- 38 Wang Y C, Misra A, Hoagland R G. Fatigue properties of nanoscale Cu/Nb multilayers. *Scr Mater*, 2006, 54(9): 1593–1598
- 39 Zhu X F, Zhang G P. Tensile and fatigue properties of ultrafine Cu-Ni multilayers. *J Phys D-Appl Phys*, 2009, 42(5): 055411
- 40 Liu H S, Zhang B, Zhang G P. Enhanced toughness and fatigue strength of cold roll bonded Cu/Cu laminated composites with mechanical contrast. *Scr Mater*, 2011, 65(10): 891–894
- 41 Liu H S, Zhang B, Zhang G P. Delaying premature local necking of high-strength Cu: A potential way to enhance plasticity. *Scr Mater*, 2011, 64(1): 13–16
- 42 Misra A, Thilly L. Structural metals at extremes. *MRS Bull*, 2010, 35(12): 965–976
- 43 Demkowicz M J, Bellon P, Wirth B D. Atomic-scale design of radiation-tolerant nanocomposites. *MRS Bull*, 2010, 35(12): 992–998