

Investigation of Crack Growth in Deposited and Perfect Titanium/Titanium Nitride Structure by Molecular Dynamic Simulation

H. Amini*, P. Gholizadeh, E. Poursaeidi

Department of Mechanical Engineering, Zanjan University, Zanjan, Iran

ABSTRACT: The crack propagation behavior in the deposited titanium/titanium nitride bilayer is compared with the perfect structure using the molecular dynamics method. For this purpose, titanium nitride was deposited on the titanium substrate, then crack growth was investigated in the two structures. The titanium nitride film growth on the titanium substrate was an island, and the structure has defects and residual stress. The results showed that both the biaxial and normal stresses in the substrate and film are tensile and compressive, respectively. The cohesive energy of the interface was calculated by energy difference along with the atomic layers. In the following, a crack was considered perpendicular to the titanium/titanium nitride interface in both models, with an initial length of 15 Å. Due to the brittle behavior of the ceramic layer, the crack propagates rapidly until interface. The plastic deformation of the titanium layer and the structure of the interface blunt the tip of the crack and prevent it to fail. Also, the critical stress for crack growth in a perfect structure is found to 2.5 times its value in the deposited structure because of defects and residual stress.

Review History:

Received: Jun. 17, 2019
Revised: Nov. 21, 2019
Accepted: Dec. 09, 2019
Available Online: Dec. 26, 2019

Keywords:

Multilayer coating
Molecular dynamics
Deposition, Crack

1. INTRODUCTION¹

In some applications such as gas turbine compressor blade, the Ti/TiN multilayer coatings which are deposited by the Physical Vapor Deposition (PVD) on the compressor blade, prevent it from damaging. Depending on working conditions such as the corrosive environment, wear and erosion due to the sands and other particles ingested by the engines primary cracks are formed in multilayer coatings. Different deposition parameters such as partial pressure of the gas, substrate temperature, the energy of incident atoms and flux ratio affect the growth and properties of multilayer coatings [1]. Mechanical behavior of thin films such as strength and adhesion has a significant role in their performance. Iwasaki [2] presented a method based on Molecular Dynamics (MD) simulation for calculating the adhesion strength of the Al/Cu bilayer. Zientarski and Chocyk [3] investigated the deposition and stress evolution in Cu/Au and Fe/Au systems using MD. In both systems, in the early stage of growth one observes compressive stress. Next, the Cu/Au system has compressive stress, while tensile stress is observed in Fe/Au.

The continuum mechanics and fracture mechanics are used to study crack propagation at the macro scale, though it occurs widely at the micro-scale. Therefore, MD has been used to explore the mechanical properties and mechanisms of nanoscale material fracture. As the thickness of the layers decreases to the nanoscale, the preferred crystalline orientation and plane for the layers to grow on each other have an important effect on the mechanical characteristics

and the crack growth. Zhou et al. [4] reported four different mechanisms for crack growth in the Al/SiC interface considered eight different orientations by MD simulation. These four mechanisms demonstrated that crack growth behavior is dependent on the crystalline orientation in the interface. The purpose of this study was to investigate the crack growth in deposited and perfect Ti/TiN structures and the effect of defects and residual stress caused by the deposition process on it. First, the deposition of TiN on Ti substrate was carried out. Then, crack growth in both deposited and perfect structures analyzed and compared.

2. SIMULATION METHOD

2-1- Deposition

The 3D model of the deposition process is shown in Fig. 1. The substrate consists of 4000 Ti atoms with hcp structure with dimensions of $5a \times 10a \times 20a$ (lattice constant of Ti is $a=2.95$ Å) in the x , y , and z , respectively. The crystal orientation for the structure is $x(100)$, $y(010)$ and $z(001)$. The substrate atoms are divided into three groups: 1) Two atomic layers at the bottom of the substrate are fixed to prevent the substrate from moving due to the incident of Ti and N atoms. 2) Eight layers of intermediate atomic layers are defined as isothermal layers, using the Canonical Ensemble (NVT) ensemble. 3) The other upper layers are free to absorb the energy of the deposited atoms. The initial substrate temperature is

*Corresponding author's email: h.amini_67@yahoo.com

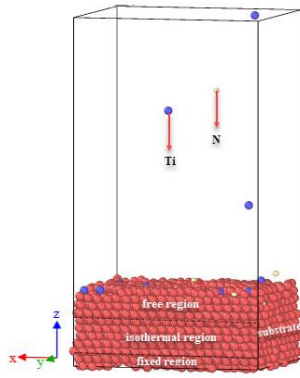


Fig. 1. Deposition of Ti and TiN on Ti substrate

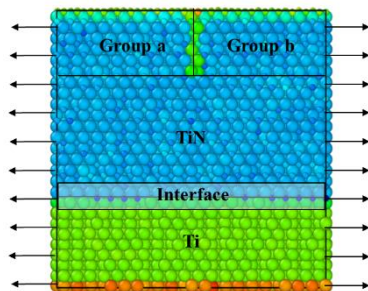


Fig. 2. Schematic of Ti/TiN perfect structure after equilibrium. Atoms are colored based on energy per atom.

600 K and the periodic boundary conditions are applied in both x and y directions. The deposition was performed by inserting 10,000 Ti and N atoms along z direction with 10 atoms/ps rate from an area 24-fold-lattice height toward the substrate surface. The kinetic energy of the incident atoms is 0.1 eV. After the deposition was completed, an equilibrium process was carried out for 200 ps until the system was fully equilibrated at 300 K.

In Fig. 2, the 3D model of Ti/TiN perfect structure has been shown, in which crystal plane $Ti(0001)||TiN(111)$ is considered in the interface. The x - y plane is the interface between the layers and the z -axis is normal to the interface. Periodic boundary conditions were applied in both the x and y directions and shrink in the z -direction. Due to the difference in lattice constants of Ti and TiN, the mismatch in both x and y directions is 1.68%. The simulation dimensions were chosen according to the deposition model. The equilibrium of the structure was reached at 300 K and zero bar with the Isothermal-Isobaric Ensemble (NPT) ensemble for 50 ps. According to Fig. 2, the initial crack with 15 Å length is located in the TiN layer by excluding the atomic interaction between a and b groups.

After deposition, an initial crack was created in deposited structure by removing atoms. Then, the structure was equilibrated for 20 ps. Next, both deposited and perfect Ti/TiN bilayer with a constant strain rate $0.5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ at 300 K is subjected to tensile loading parallel to the interface. To observe the plastic deformation during loading and crack growth, the Microcanonical Ensemble (NVE) ensemble is

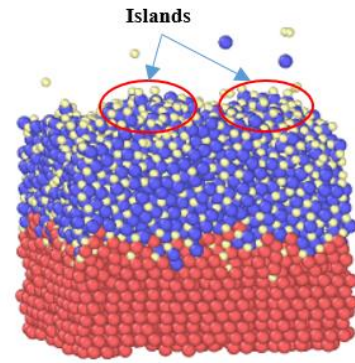


Fig. 3. Snapshot of the deposition process at 3466 ps

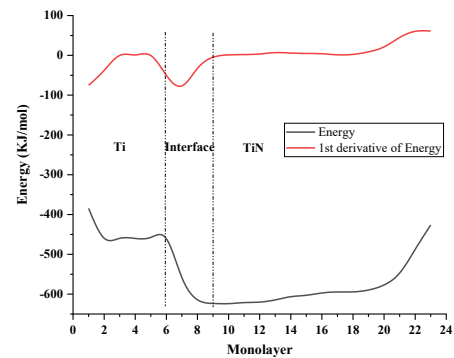


Fig. 4. The cohesive energy between Ti and TiN layers in the deposited Ti/TiN structure

implied. The time step in all simulations is 1 fs. The second nearest neighbor modified embedded-atom-method (2NN-MEAM) interatomic potential was used [5] to describe interactions between atoms [1]. Atomic modeling has been done using the Lammmps [6] code. Ovito [7] was used to visualize results.

3. RESULT AND DISCUSSION

Fig. 3 shows the deposition of the TiN film on the Ti substrate. In the TiN layer growth, islands are formed. The penetration of N atoms increases adhesion between film and substrate. The deposited structure has some defects, which is similar to what is happened in PVD process. In this study, the mean biaxial $(\sigma_{xx}^{ave} + \sigma_{yy}^{ave})/2$ and normal stresses $\sigma_{z,z}^{ave}$ were used to investigate the residual stress of the layers [8]. Both biaxial and normal stresses of the substrate are tensile converted to compressive stresses in the interface. In this region, the biaxial stress is higher than normal stress. Also, in TiN film stresses are compressive.

To calculate the cohesive energy between the film and substrate, the potential energy of each atomic layer was calculated and plotted in Fig. 4, in which energy drop in the interface is defined as the cohesive energy.

As shown in Fig. 5, at low strains, both metal, and ceramic layers are under elastic deformation and the crack opening is still unclear. Young's modulus of Ti/TiN is obtained 274.436 GPa. With increasing strain, the stress reaches the critical value and the crack begins to grow. Due to the brittle behavior of the TiN, the crack grows rapidly through its thickness.

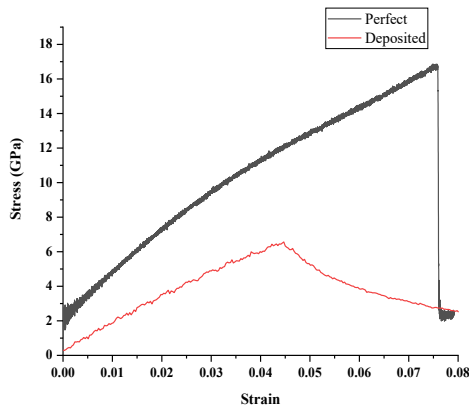


Fig. 5. Comparison of Strain-stress response of the Ti/TiN deposited and perfect structure

Because of crack growth, the stress decreases from the critical value to 2.44 GPa. The crack with a sharp tip travels to the Ti/TiN interface, then it is blunted by the interface. Comparison of the two stress-strain curves in Fig. 5 shows that the critical stresses for crack growth in the perfect and deposited structure are 16.72 GPa and 6.54 GPa, respectively. These results indicate that the perfect structure has a higher resistance to crack growth than the deposited structure. Also, the strain associated with critical stress for the perfect Ti/TiN structure is 0.075. However, this value for the deposited structure is 0.045. Based on the Griffith criterion [9], critical stress intensity factor (K_{IC}) and released energy rate (G_{IC}) of crack growth in the perfect structure were calculated 1.028 MPa.m^{1/2} and 3.357 J/m², respectively.

4. CONCLUSIONS

In this study, the deposition of TiN on Ti substrate was performed by MD method. Then crack growth in the perfect and deposited structure was compared. The deposition results show that the penetration of N atoms in the upper layers of the Ti substrate was observed, which increased the adhesion between the layers. Due to the difference between the lattice structure of the substrate and the coating (hcp/fcc) and the

penetration of the N atoms, the coating has an amorphous structure. The results illustrate that both biaxial and normal stresses for the substrate and TiN layer are tensile and compressive, respectively. The critical stress for crack growth was obtained 16.72 GPa for perfect structure and 6.54 GPa for deposited structure. Also, crack growth for the perfect structure occurs at 0.075 strain, while for the deposited structure is 0.045. The reason for the low critical stress and strain of crack growth in the deposited structure is due to residual stresses and defects.

REFERENCES

- [1] Z.H. Xu, L. Yuan, D.B. Shan, B. Guo, A molecular dynamics simulation of TiN film growth on TiN(0 0 1), *Computational Materials Science*, 50 (2011) 1432–1436.
- [2] T. Iwasaki, Molecular dynamics study of adhesion strength and diffusion at interfaces between interconnect materials and underlay materials, *Computational Mechanics*, 25 (2000) 78-86.
- [3] T. Zientarski, D. Chocyk, Structure and stress in Cu/Au and Fe/Au systems: A molecular dynamics study, *Thin Solid Films*, (2014) 1-6.
- [4] Y. Zhou, W. Yang, M. Hu, Z. Yang, The typical manners of dynamic crack propagation along the metal/ceramics interfaces: A molecular dynamics study, *Computational Materials Science*, 112 (2016) 27-33.
- [5] B.J. Lee, M.I. Baskes, Second nearest-neighbor modified embedded-atom-method potential, *Physical Review B*, 62 (2000) 8564-8567.
- [6] S. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *Journal of Computational Physics*, 117 (1995) 1-42.
- [7] A. Stukowski, Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18 (2010) 1-7.
- [8] L. Zhang, H. Yan, G. Zhu, S. Liu, Z. Gan, Molecular dynamics simulation of aluminum nitride deposition: temperature and N : Al ratio effects, *The Royal Society* 5(2018) 1-11.

HOW TO CITE THIS ARTICLE

H. Amini, P. Gholizadeh, E. Poursaeidi, Investigation of Crack Growth in Deposited and Perfect Titanium/Titanium Nitride Structure by Molecular Dynamic Simulation, *Amirkabir J. Mech. Eng.*, 53(2) (2021) 197-200.

DOI: [10.22060/mej.2019.16569.6391](https://doi.org/10.22060/mej.2019.16569.6391)





بررسی رشد ترک در دو ساختار لایه‌نشانی شده و ایده آل تیتانیوم/تیتانیوم‌نیتريد با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

حسن امینی*، پروین قلیزاده، اسماعیل پورسعیدی

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۸/۰۳/۲۷

بازنگری: ۱۳۹۸/۰۸/۳۰

پذیرش: ۱۳۹۸/۰۹/۱۸

ارائه آنلاین: ۱۳۹۸/۱۰/۰۵

کلمات کلیدی:

پوشش چندلایه

دینامیک مولکولی

لایه‌نشانی

رشد ترک

خلاصه: وجود عیوب و تنش‌های پسماند سبب تضعیف مقاومت پوشش‌های چندلایه در مقابل رشد ترک می‌شود. برای بررسی این موضوع رشد ترک در دو ساختار لایه‌نشانی شده و ایده آل تیتانیوم/تیتانیوم‌نیتريد با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شده است. برای این منظور ابتدا لایه‌نشانی تیتانیوم‌نیتريد بر روی بستر تیتانیوم انجام گرفته، سپس رشد ترک در دو ساختار مذکور بررسی گردیده است. رشد لایه تیتانیوم‌نیتريد بر روی تیتانیوم جزیره‌ای بوده و ساختار لایه‌نشانی شده دارای عیوب و تنش پسماند می‌باشد. نتایج نشان می‌دهد که هر دو تنش پسماند دوماحوری و نرمال، در بستر و پوشش به ترتیب کششی و فشاری می‌باشد. با استفاده از تغییر انرژی در لایه‌ها انرژی چسبندگی فصل مشترک محاسبه شده است که برابر ۱۶۶ کیلوژول بر مول می‌باشد. در قسمت دوم با جایگذاری ترکی به طول ۱۵ آنگستروم در لایه سرامیک در دو ساختار ایده آل و لایه‌نشانی شده رفتار رشد ترک بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که دلیل ترد بودن لایه سرامیک، در هر دو حالت ذکر شده ترک تا فصل مشترک لایه‌ها رشد می‌کند. در ادامه تغییر شکل پلاستیک لایه تیتانیوم و همچنین ساختار فصل مشترک بین دو لایه مانع از رشد ترک و شکست کامل می‌گردد. همچنین تنش بحرانی لازم برای رشد ترک در ساختار منظم ۲/۵ برابر مقدار آن در ساختار لایه‌نشانی شده است که دلیل آن وجود عیوب و تنش پسماند در ساختار لایه‌نشانی شده می‌باشد.

۱- مقدمه

با تیتانیوم‌نیتريد بعد از ۲۰۲۲ ساعت کاری نشان داده شده است [۱]. پوشش‌های چندلایه معمولاً با روش‌های رسوب فیزیکی بخار^۱ بر روی بستر لایه‌نشانی می‌شوند. پارامترهای مختلف لایه‌نشانی مانند فشار جزئی گاز محفظه، دمای بستر، انرژی اتم‌های پوشش در حین پوشش‌دهی و نرخ لایه‌نشانی بر رشد و خواص پوشش‌های چندلایه سرامیک/فلز تأثیر می‌گذارند [۲]. یکی از دلایل مهم افزایش مقاومت در ساختار پوشش‌های چندلایه کاهش ضخامت آن‌ها تا به مقیاس نانومتر گزارش شده است. زمانی که ضخامت تنها یکی از لایه‌ها در بازه کم‌تر از نانومتر باشد چگالی ساختار بین لایه‌ای افزایش می‌یابد. همچنین چگالی ساختار بین لایه‌های سرامیک/فلز در مقایسه با کسر حجمی سرامیک تأثیر بیش‌تری بر سختی^۲ دارد. شبیه‌سازی‌های

به دلیل شرایط کاری پره‌های توربین‌های گازی، این قطعات در معرض خوردگی و سایش بوده و نیازمند پوشش‌دهی می‌باشند. بر اثر تماس ذرات ساینده و مواد خورنده، سطح پره‌ها دچار سایش و تخریب گشته، که این نقاط منشا بروز ترک می‌باشند. در حضور بارهای نوسانی و پدیده خستگی، این ترک‌ها رشد نموده و در نهایت منجر به شکست می‌گردند. با بهره‌گیری از پوشش‌های چندلایه نانو ساختار سرامیک/فلز بر روی پره‌ها، ضمن کنترل رسوب ذرات، از خوردگی ناشی از رطوبت هوا نیز جلوگیری می‌شود. در شکل ۱ وضعیت سطحی پره‌ها در حالت بدون پوشش، بعد از ۱۳۳ ساعت کاری و پوشش‌دهی شده

1 Physical Vapor Deposition (PVD)

2 Hardness

* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: h.amini@znu.ac.ir



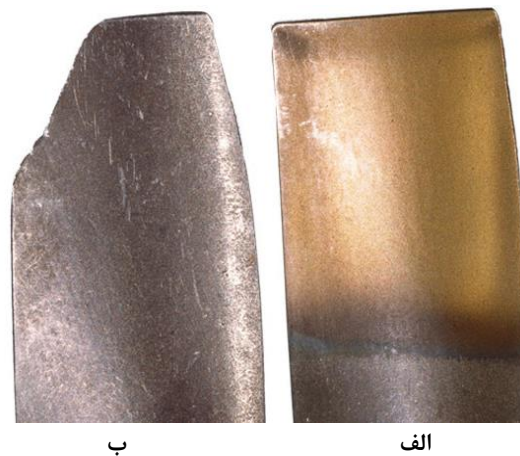


Fig. 1. Compressor blade; a) coated blade with TiN, b) uncoated blade [1]

شکل ۱: پره کمپرسور؛ الف) با پوشش تیتانیوم‌نیتريد، ب) بدون پوشش [۱]

اتمی نشان داده‌اند که مکانیزم اصلی تغییر شکل پلاستیک در فصل مشترک لایه‌ها، پلاستیسیته ساختار بین لایه‌ای است که باعث مقاومت بالای سرامیک/فلز می‌گردد [۳]. از دیگر خواص مکانیکی مهم لایه‌های نازک، تنش کششی لازم برای ایجاد ترک در آن‌ها می‌باشد، که تابع ضخامت لایه است.

رفتار مکانیکی لایه‌های نازک مانند استحکام و چسبندگی سهم بسزایی در کارایی آن‌ها دارد. ایواساکی [۴] روشی بر پایه دینامیک مولکولی برای محاسبه مقاومت چسبندگی پوشش دولایه مس و آلومینیوم ارائه دادند. عوامل موثر بر خواص مکانیکی شامل اندازه و شکل دانه‌های تشکیل شده درون لایه‌ها، حضور تهی جاها، نابجایی‌ها، خلل و فرج و ... می‌باشد. کائو و همکاران [۵] شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند لایه‌نشانی اتم‌های آلومینیوم بر روی بستر مس و پس از آن فرآیند نانوفوروندگی روی این نانو ساختار را انجام دادند. در این تحقیق تأثیر انرژی برخورد بر مورفولوژی لایه رسوب شده و خواص مکانیکی این نانو ساختار بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که رشد لایه با حالت اپیتکسی^۱ در انرژی برخورد زیر ۱ eV مشاهده می‌شود، اما زمانی که انرژی برخورد به ۱۰ eV افزایش می‌یابد، نفوذ لایه‌ها در یکدیگر همراه با افزایش بی‌نظمی ساختار شروع می‌شود. نتایج نانوفوروندگی نشان می‌دهد که لایه‌های نازک لایه‌نشانی شده، به علت تعداد عیوب قابل توجهی که در آن‌ها وجود دارد، دارای

سفتی کم‌تری نسبت به تک کریستال آلومینیوم می‌باشد؛ در حالی که بستر به‌وسیله ساختار میان لایه‌ای حاصل از عدم انطباق شبکه بین لایه‌های آلومینیوم و بستر مس، تقویت شده و سفتی آن افزایش می‌یابد. فنگ و همکاران [۶] رسوب گروهی^۲ اتم‌های مس روی سطح (۰۰۱) سیلیسیم را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیکی مولکولی مورد مطالعه قرار دادند. در این مطالعه گروه‌های اتمی مس با تعداد ۱۳، ۵۵ و ۱۴۷ در دماهای مختلف بستر بررسی شد. نتایج نشان داد که دما بیش‌ترین تأثیر را بر نفوذ و ساختار بزرگ‌ترین گروه اتمی دارد و در کوچک‌ترین گروه، کم‌ترین تأثیر را می‌گذارد. گروه اتمی ۵۵ انتخاب بهینه برای رسوب‌دهی گروهی مس پیشنهاد شد.

فرآیند لایه‌نشانی در دماهای بالایی انجام شده و سپس ساختارهای تولید شده در دمای محیط به تعادل می‌رسند. به دلیل تغییرات دما و اختلاف ضریب انبساط حرارتی مواد پوشش و بستر، تنش‌های پسماند در داخل مجموعه به وجود می‌آید. زینتارسکی و چوکیک [۷] ساختار و تنش در سیستم‌های طلا/مس و طلا/آهن را مورد مطالعه قرار دادند. نتایج نشان داد که اتم‌های رسوب شده مس نظم ساختار اتم‌های بستر را به هم نمی‌زند، اما اتم‌های آهن رسوب شده موجب بهم خوردن نظم سطوح طلا در بستر می‌شود. در هر دو سیستم طلا/مس و طلا/آهن، در مرحله اولیه رشد لایه، تنش پسماند فشاری مشاهده می‌شود. در مراحل بعدی سیستم طلا/مس دارای

2 Cluster

1 Epitaxy

دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار دادند. نتایج نشان داد که ترک در مود I به دلیل به وجود آمدن نابجایی ناشی از عدم انطباق موجود در ساختار بین لایه‌های مس/سیلیسیوم کاربرد به صورت نامتقارن نسبت به نوک ترک در سمت چپ و راست انتشار می‌یابد.

یو و همکاران [۱۲] در پژوهشی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی رشد ترک در ساختار آلومیناید نیکل Ni/Ni_3Al_1 را بررسی کردند. نتایج این تحقیق نشان داد تنش تسلیم برای ترک افقی قرار گرفته در مرز دانه بزرگ‌تر از تنش تسلیم به دست آمده برای ترک عمودی درون دانه‌ای می‌باشد. هانگ و همکاران [۱۳] انتشار ترک را در نانوساختار لایه نازک نیکل با در نظر گرفتن یک نمونه دوبعدی صفحه‌ای با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مطالعه کردند. نمونه شبیه‌سازی آن‌ها شامل ۶۰ اتم در راستای x و ۱۰۰ اتم در راستای y و ترکی افقی به طول ۱۱ اتم در وسط مرز عمودی سمت چپ صفحه بود. این ترک توسط غیرفعال کردن پتانسیل برهم کنش اتم‌های ناحیه بالا و پایین ترک ایجاد شد. تنش و متوسط انرژی به ازای هر اتم در نوک ترک، تطابق قابل قبولی با تحلیل‌های تئوری داشت. همچنین مقادیر زمان بحرانی شروع رشد ترک، تنش کششی عمودی و انرژی کل محاسبه شد.

ساختارهای چندلایه‌ای فلز/سرامیک در مقایسه با ساختارهای چندلایه‌ای فلز/فلز و پوشش‌های سرامیکی دارای مقاومت به خوردگی بهتر و داکتیلیتی بالاتری هستند. همچنین خواص مکانیکی فلز/سرامیک بستگی شدیدی به جهت اعمال تنش و علامت تنش (کششی یا فشاری بودن) دارد [۳]. ژو و همکاران [۱۴] مکانیزم‌های انتشار ترک بین لایه‌ای را در فصل مشترک آلومینیوم و سیلیسیوم کاربرد بررسی نمودند. برای این منظور هشت جهت‌گیری مختلف برای لایه آلومینیوم روی جهت‌گیری ثابت لایه سیلیسیوم کاربرد در نظر گرفته شد. نتایج این پژوهش نشان داد که با توجه به نوع فصل مشترک، انتشار ترک چهار مکانیزم اصلی دارد. در حالت اول، ترک به صورت مستقیم در فصل مشترک انتشار می‌یابد. در حالت دوم، نوک ترک به دلیل ایجاد دوقلوبی در آن تیزی خود را از دست می‌دهد. در حالت سوم، مشاهده شد که در نوک ترک، ترک‌های ریزی ایجاد شده و به ترک اصلی می‌پیوندند و در حالت آخر هم به دلیل نقص چینش ایجاد شده در نوک ترک، ترک کور می‌شود. تنش بحرانی جهت شروع رشد

تنش پسماند فشاری می‌باشد، در حالی که در طلا/آهن تنش کششی مشاهده می‌شود.

ژانگ و همکاران [۸] رسوب با سرعت پایین گروه‌های اتمی کم انرژی مس روی سطح (۰۰۱) آهن را با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان داد که رسوب‌دهی زمانی می‌تواند رخ دهد که اتم‌ها فعال بوده و انرژی کافی برای جابه‌جایی را به دست بیاورند. همچنین افزایش انرژی برخورد می‌تواند به طور موثر نفوذ سطحی گروه اتمی و چسبندگی گروه و بستر را بهبود بخشد. هوانگ [۹] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی لایه‌نشانی چندلایه نانوفیلم مس/کبالت تحت تأثیر گرانش در یک محیط خلاء را مورد مطالعه قرار داده است. نتایج نشان داد که در محدوده جاذبه، صافی سطح کم‌تر و تنش داخلی بزرگ‌تر می‌شود. با افزایش نرخ لایه‌نشانی، تنش داخلی نیز افزایش می‌یابد و مورفولوژی سطح فیلم نازک، ناهموارتر می‌شود. هرچند با افزایش دمای بستر، تنش داخلی نانو فیلم لایه‌نشانی شده کاهش می‌یابد اما انرژی پیوند بین دو لایه افزایش می‌یابد.

گرچه روش‌های مبتنی بر مکانیک محیط پیوسته برای مطالعه انتشار ترک در مقیاس‌های میکروسکوپی مورد استفاده قرار می‌گیرد، انتشار ترک به طور گسترده‌ای در مقیاس‌های مختلف میکروسکوپی نیز رخ می‌دهد. از این رو دینامیک مولکولی به طور گسترده جهت بررسی خواص مکانیکی و مکانیزم‌های شکست مواد در مقیاس نانو مورد استفاده قرار می‌گیرد. ژانگ [۱۰] انتشار ترک در تک کریستال نیکل را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی کرد. برای بررسی تاثیر جهت‌گیری کریستال در انتشار ترک، شبیه‌سازی در سه جهت‌گیری کریستالی انجام گردید. جهت در نظر گرفتن عیوب، یک لایه اتمی از چینش مکعب مرکز وجه پر حذف و نقص چینش به صورت ABCBCABC... ایجاد شد. نتایج نشان داد ترک مود اول با به وجود آمدن نابجایی‌ها در نوک ترک کور می‌گردد و تشکیل جاهای خالی و به هم پیوستن آن‌ها مکانیزم اصلی رشد ترک می‌باشد. نمودار تنش- کرنش به دست آمده برای سه جهت‌گیری نشان‌دهنده وابستگی رفتار ساختارها به جهت‌گیری آن‌ها می‌باشد. یانگ و همکاران [۱۱] طی تحقیقی انتشار ترک مرکزی در ساختار بین لایه‌ای مس/سیلیسیوم کاربرد را تحت بارگذاری کششی (مود I) و بارگذاری ترکیبی کششی و برشی (مود II) با استفاده از شبیه‌سازی

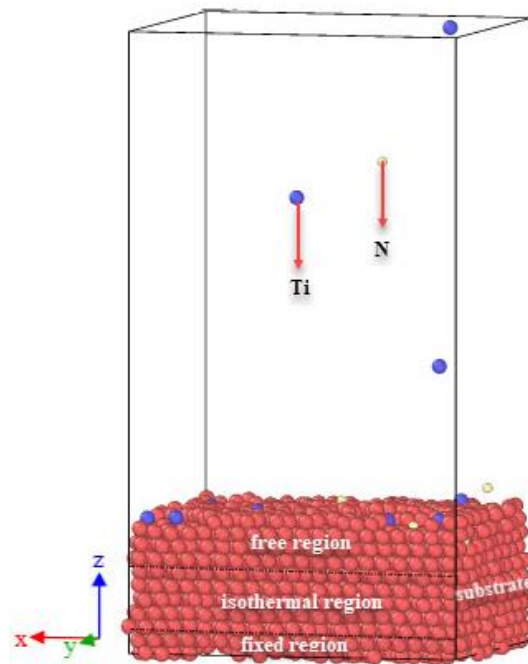


Fig. 2. Deposition of Ti and TiN on Ti substrate

شکل ۲: لایه‌نشانی اتم‌های تیتانیوم و نیتروژن بر روی بستر تیتانیوم

ترک گردند. همچنین در این ساختارها به علت برش آسان ساختار بین‌لایه‌ای، نایجایی‌های نزدیک به این ناحیه به دام می‌افتند که این امر باعث مقاومت بالای آن‌ها می‌شود [۳]. لی و همکاران [۱۶] نقش ساختار بین لایه‌ای و مس/نیوبیم و مس/نیکل در رشد ترک عمودی جاگذاری شده در لایه نیوبیم و نیکل را مورد مطالعه قرار دادند. از آنجایی که در ساختار مس/نیوبیم ساختار کریستالی به صورت مکعب مرکز وجه پر/مکعب مرکز پر و در ساختار مس/نیکل به صورت مکعب مرکز وجه پر/مکعب مرکز وجه پر می‌باشد نتایج نشان داد ساختار بین لایه‌ای مس/نیوبیم به دلیل تفاوت ساختار کریستالی، ضعیف‌تر بوده و به عنوان مانع خوبی در مقابل رشد ترک در لایه مس عمل کرده و موجب کور شدن ترک می‌گردد. دلیل این امر به وجود آمدن نایجایی‌ها در فصل مشترک است که منجر به آزاد شدن تمرکز تنش مورد نیاز برای رشد ترک می‌گردد.

ژانگ و همکاران [۱۷] رشد ترک را در تک لایه تیتانیوم خالص با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی کردند. نتایج آن‌ها نشان داد که با مکانیزم به وجود آمدن حفره‌ها^۳ (حفره‌ها زمانی تشکیل

ترک ۴ تا ۴/۵ گیگاپاسکال برای چهار حالت به دست آمد. استفانوا [۱۵] رشد ترک مود دوم را در ماده خالص مس با ساختار مکعب مرکز وجه پر و با استفاده از دو روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و مکانیک شکست خطی مورد بررسی قرار داد. در بررسی نتایج، زاویه‌ای که ترک مود دوم در آن رشد می‌کند به دست آمد که مطابقت قابل قبولی با نتایج تئوری به دست آمده داشت.

یانگ و همکاران [۳] در مطالعاتی تغییر شکل پلاستیک بین دو لایه تیتانیوم و تیتانیوم‌نیتريد را تحت بارگذاری کششی و فشاری عمود به ناحیه بین‌لایه‌ای، به روش دینامیک مولکولی با تابع پتانسیل دومین نزدیکترین همسایگی اتم جاننشانی‌شده اصلاح‌شده^۱ شبیه‌سازی کردند. نتایج نشان داد که عوامل موثر بر تغییر شکل پلاستیک در ساختارهای چندلایه عبارتند از، ضخامت لایه‌ها، نسبت ضخامت، نوع و ساختار فصل مشترک و خواص مکانیک هر لایه و اختلاف این خواص در لایه‌ها با یکدیگر. ساختار بین لایه‌ای ناهمگون^۲ در بین لایه‌های کامپوزیت‌ها و پوشش‌های چندلایه می‌تواند مانع رشد

1 Second Nearest-Neighbor Modified Embedded-Atom-Method (2NN-MEAM)

2 Heterointerface

3 Void

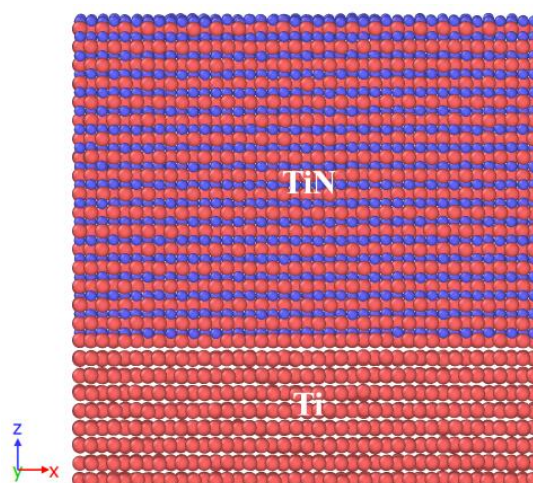


Fig. 3. Simulation model of the Ti/TiN bilayer with perfect lattice structure

شکل ۳: مدل ساختار منظم دولایه تیتانیوم/تیتانیوم‌نیتريد چیده شده

و $Z(001)$ است. اتم‌های بستر به سه گروه تقسیم شده است: (۱) دو لایه اتمی از سطح پایین کاملاً مقید شده تا مانع حرکت بستر در برابر برخورد اتم‌های تیتانیوم و نیتروژن شود، (۲) هشت لایه از اتم‌های میانی به عنوان کنترل کننده دمای سیستم می‌باشد که از هنگرد کانونیکال^۱ برای انتگرال گیری زمانی (الگوریتم ورت) روی معادلات حرکت غیرهمیلتونی نوس-هور استفاده شده تا مکان و سرعت جدید ذرات، برای رسیدن به دمای از پیش تعیین شده، به دست آید. (۳) سایر لایه‌های بالایی (نیوتونی) به طور کامل آزاد است تا انرژی اتم‌های لایه‌نشانی شده را جذب کرده و به گروه هم‌دما انتقال دهد. حرکت هر دو گروه اتمی هم‌دما و نیوتونی از قانون دوم نیوتون پیروی می‌کند. دمای اولیه بستر ۶۰۰ کلوین بوده و شرط مرزی دوره‌ای در دو جهت x و y اعمال شده و گام زمانی انتگرال گیری یک فمتوثانیه می‌باشد. لایه‌نشانی با نفوذ ۱۰۰۰۰ اتم تیتانیوم و نیتروژن در راستای Z با نرخ ۱۰ اتم بر پیکوثانیه از ناحیه‌ای با ارتفاع ۲۴ برابر ثابت شبکه بالای بستر انجام شد و مختصات x و y اتم‌های لایه‌نشانی به صورت تصادفی اختصاص گرفت. زاویه برخورد^۲ اتم‌های لایه‌نشانی (عمود بر سطح بستر) صفر درجه و انرژی جنبشی آن‌ها ۰/۱ الکترون‌ولت می‌باشد. بعد از اتمام لایه‌نشانی یک فرآیند تعادل به مدت ۲۰۰ پیکوثانیه انجام گرفت تا سیستم با دمای محیط کاملاً به تعادل برسد.

می‌شوند که تنش مورد نیاز برای به وجود آوردن آن‌ها در مقایسه با نیروی منحرف کننده راستای اتم‌ها بزرگ‌تر باشد) و سپس تجمع آن‌ها کنار هم، پیوند اتم‌ها شکسته می‌شود. برای طول ترک‌های متفاوت تنش بحرانی بین ۳ تا ۴ گیگاپاسکال به دست آمد که با افزایش طول ترک کاهش می‌یابد. همچنین تغییر شکل پلاستیک تحت بارگذاری دیده می‌شود. زمانی که کرنش به ۰/۰۱ می‌رسد، نابیایی‌هایی با زاویه ۴۵ درجه نسبت به سطح در ناحیه نوک ترک به وجود می‌آیند.

هدف این تحقیق بررسی رشد ترک در دو ساختار لایه‌نشانی شده و منظم تیتانیوم/تیتانیوم‌نیتريد و تاثیر عیوب و تنش پسماند ناشی از فرآیند لایه‌نشانی بر آن می‌باشد. برای این منظور ابتدا لایه‌نشانی تیتانیوم‌نیتريد بر روی بستر تیتانیوم انجام شده و سپس رشد ترک در این ساختار و ساختار منظم بررسی شده است.

۲- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

۲-۱- لایه‌نشانی

مدل سه‌بعدی فرآیند لایه‌نشانی مطابق شکل ۲ می‌باشد؛ این مدل شامل بستر با ساختار تک کریستال تیتانیوم و اتم‌های لایه‌نشانی تیتانیوم و نیتروژن است. بستر شامل ۴۰۰۰ اتم تیتانیوم با ساختار هگزاگونال و به ابعاد $5 \times 10 \times 20$ برابر ثابت شبکه به ترتیب در راستای x ، y و z می‌باشد. جهت گیری کریستالی ساختار $x(100)$ ، $y(010)$

1 Canonical Ensemble (NVT)

2 Incident Angle

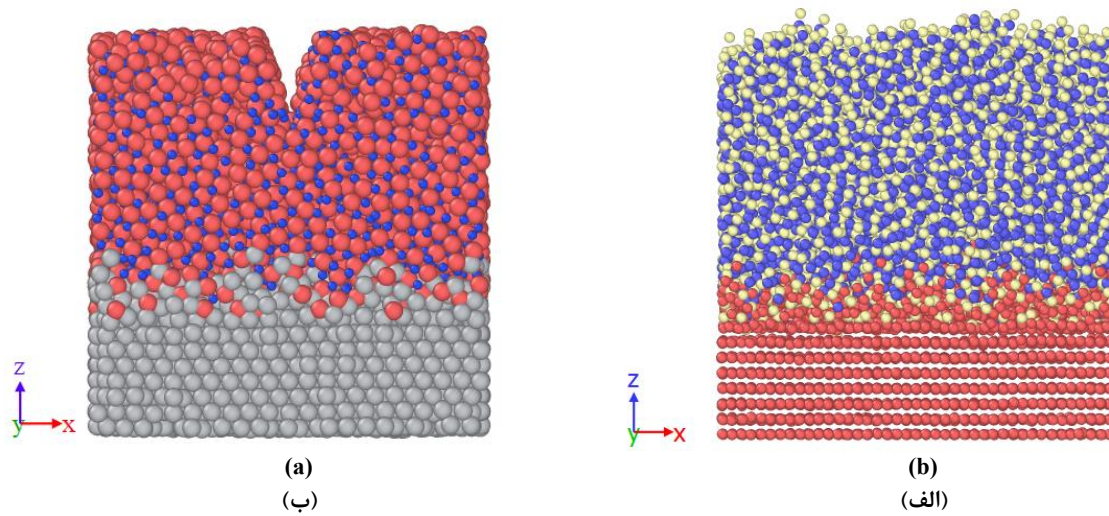


Fig. 4. a) Deposition structure of TiN film on Ti substrate, b) Deposition structure of Ti/TiN bilayer with a crack

شکل ۴: الف) مدل ساختار نامنظم دولایه تیتانیوم و تیتانیوم نیتريد لایه‌نشانی‌شده، ب) مدل ساختار لایه‌نشانی‌شده دولایه تیتانیوم/تیتانیوم نیتريد ترک‌دار

در هر دو جهت x و y ، $1/68$ درصد است. ابعاد شبیه‌سازی مطابق حالت لایه‌نشانی انتخاب شده است.

جهت مینیمم کردن انرژی کل ساختار، بیش‌ترین مقدار نیروی وارد بر هر اتم باید به کم‌تر از 1×10^{-6} N برسد. تعادل ساختار در دمای 300 کلوین و فشار صفر اتمسفر با هنگرد هم‌دم-هم‌فشار^۳ برای مدت 50 پیکوثانیه به دست می‌آید. در ادامه ساختار با نرخ کرنش ثابت $1/S$ $10^8 \times 0.5$ تحت بارگذاری کششی موازی با فصل مشترک لایه‌ها قرار گرفته است. برای مشاهده تغییر شکل پلاستیک در حین بارگذاری و رشد ترک از هنگرد میکروکانونیکال^۴ برای انتگرال‌گیری زمانی (الگوریتم ورلت) روی معادلات حرکت استفاده شده است. معادلات حرکت از قانون دوم نیوتن پیروی کرده و گام زمانی انتگرال‌گیری یک فمتوثانیه می‌باشد.

بعد از انجام لایه‌نشانی مطابق شکل ۴-الف به منظور مقایسه فرآیند رشد ترک در تیتانیوم/تیتانیوم نیتريد در دو حالت منظم (ساختار چیده شده به صورت منظم) و لایه‌نشانی، با حذف اتم‌های لایه‌نشانی‌شده مطابق شکل ۴-ب ترکی در ساختار لایه‌نشانی‌شده ایجاد شده است. سپس با اعمال شرایط تعادل، ساختار در مدت 20 پیکوثانیه به تعادل رسیده و در نهایت با اعمال بارگذاری کششی در

کلیه شبیه‌سازی‌های پژوهش حاضر با استفاده از پتانسیل چندجسمی دومین نزدیکترین همسایگی اتم جاننشانی‌شده اصلاح‌شده [۱۸] برای توصیف برهم‌کنش بین اتم‌ها انجام شده که قابلیت اطمینان و کاربرد آن قبلاً اثبات شده است [۲]. همچنین مدل‌سازی اتمی با استفاده از کدنویسی با نرم‌افزار لمپس انجام گرفته [۱۹] و برای مشاهده خروجی از نرم‌افزار اویتو استفاده گردیده است [۲۰].

۲-۲- رشد ترک

مدل سه‌بعدی شبیه‌سازی رشد ترک مطابق شکل ۳، شامل دو لایه تیتانیوم و تیتانیوم نیتريد با جهت‌گیری کریستالوگرافی صفحه (111) تیتانیوم نیتريد موازی با (001) تیتانیوم می‌باشد. در بین لایه‌ها جهت‌گیری کریستالی $[11\bar{2}0]_{\text{HCP}} \parallel [1\bar{1}0]_{\text{NaCl}}$ برای شبکه‌های مکعب مرکز وجه پراگمزاگونال انتخاب شده است $[11\bar{2}0]_{\text{HCP}} \parallel [1\bar{1}0]_{\text{NaCl}}$. صفحه $x-y$ صفحه بین لایه‌ها و محور z جهت عمود بر فصل مشترک می‌باشد. شرط مرزی دوره‌ای در دو جهت x و y و متغیر^۱ در جهت z اعمال شده است. به دلیل وجود اختلاف در ثابت شبکه‌ها، $a_{\text{Ti}} = 2/95 \text{ \AA}$ و $a_{\text{TiN}} = 2/99955 \text{ \AA}$ ، میزان عدم انطباق^۲ شبکه‌ها در بین لایه‌ها

3 Isothermal-Isobaric Ensemble (NPT)

4 Microcanonical Ensemble (NVE)

1 Shrink Boundary Condition

2 Mismatch

سطوح ترک صرف می‌شود. انرژی داخلی E را می‌توان به صورت زیر در نظر گرفت [۲۱]:

$$E = U^e + U^p \quad (۳)$$

که در آن U^e بیانگر انرژی کرنشی الاستیک و U^p بیانگر کار پلاستیک می‌باشد. اگر بارهای اعمال شده به جسم مستقل از زمان باشد ترک به آرامی توسعه می‌یابد و ترم نرخ تغییر انرژی جنبشی \dot{k} قابل چشم‌پوشی می‌باشد. در عمل دو حالت حدی تکیه‌گاه ثابت و حالت بار ثابت وجود دارد. برای هر دو حالت نرخ انرژی آزاد شده در طی رشد ترک به صورت زیر خواهد بود [۲۱]:

$$G = \frac{\partial U^e}{\partial A} \quad (۴)$$

همچنین معادله (۵) بیانگر رابطه بین نرخ رهایی انرژی و ضریب شدت تنش برای حالت بارگذاری مود I مکانیک شکست در حالت کرنش صفحه‌ای می‌باشد [۲۱]:

$$G_I = \frac{(1-\nu^2)}{E} K_I^2 \quad (۵)$$

که در آن E مدول الاستیک و ν ضریب پواسون می‌باشد.

۳- نتایج

صحت‌سنجی پتانسیل مورد استفاده و روش شبیه‌سازی با استفاده از نتایج کار پیشین [۳] انجام گرفته است. برای این منظور ساختار منظم دولایه تیتانیوم/تیتانیوم‌نیتريد به روش دینامیک مولکولی با استفاده از پتانسیل دومین نزدیکترین همسایگی اتم جانسانی‌شده اصلاح‌شده شبیه‌سازی شده‌است. ابعاد به صورت $179/973 \text{ \AA}$ در جهت x و $306/5286 \text{ \AA}$ در جهت z در نظر گرفته شده‌اند. همچنین ضخامت هر لایه ۵ نانومتر می‌باشد. مینیمم کردن انرژی تا زمانی که نیروی اعمالی به هر کدام از اتم‌ها کم‌تر از 10^{-1} N شود انجام شده‌است. تعادل ساختار در دمای ۱۰ کلوین برای مدت ۵۰ پیکوثانیه به دست آمده‌است. از هنگرد هم‌دم-هم‌فشار با گام زمانی یک فمتوثانیه در طی تعادل استفاده شده‌است. در مرحله بارگذاری،

راستای x مانند بارگذاری ساختار منظم ترک‌دار رشد ترک در این ساختار بررسی شده‌است.

۳-۲- روابط

تنش در مکانیک محیط‌های پیوسته به صورت حد ریاضی نیرو بر جزء سطح تعریف می‌شود. ولی از نظر فیزیکی این حد مفهوم واقعی ندارد. زیرا به علت گسسته بودن ماده در ابعاد اتمی مفهوم حدی تنش نمی‌تواند مورد استفاده قرار گیرد و در ابعاد اتمی صرفاً می‌توان نیروهای وارده بر اتم‌ها را مشاهده کرد. لذا برای این که بتوان مقایسه‌ای بین شبیه‌سازی‌های اتمی و محیط پیوسته انجام داد نیازمند تعریف مفهوم تنش در مقیاس اتمی است. لذا تنش در مفهوم اتمی صرفاً تفسیری از نیروهای مبادله شده بین اتم‌هاست و نباید با مفهوم محیط پیوسته آن اشتباه شود. تلاش فراوانی برای ارائه تعریفی مناسب برای تنش انجام شده است و روش‌ها گاهی اختلافاتی با هم دارند. تنش در مقیاس اتمی با استفاده از تنش بی‌تی‌دی^۱ به صورت زیر تعریف می‌شود [۷]:

$$\sigma = \frac{1}{V_i} \left[m_i v_i \otimes v_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} r_{ij} \otimes f_{ij} \right] \quad (۱)$$

که در آن σ تنش، $V(i)$ جرم، m_i جرم و v_i سرعت اتم i و r_{ij} فاصله و f_{ij} نیروی بین دو اتم i و j می‌باشد. نماد \otimes نشان‌دهنده ضرب تانسوری دو بردار می‌باشد. برای محاسبه تنش در راستا و ناحیه دلخواه، از این تنش اتمی میانگین‌گیری شده است.

با در نظر گرفتن ترکی با سطوح A در یک محیط تغییر شکل‌پذیر پیوسته که در معرض بارگذاری دلخواهی قرار دارد و با توجه به قوانین ترمودینامیک کلاسیک تعادل انرژی به صورت زیر خواهد بود [۲۱]:

$$\dot{W} = \dot{E} + \dot{k} + \dot{\Gamma} \quad (۲)$$

که در این رابطه، \dot{W} بیانگر کار انجام شده در واحد زمان توسط نیروی اعمالی، \dot{E} و \dot{k} بیانگر نرخ تغییر انرژی داخلی و انرژی جنبشی جسم و در نهایت $\dot{\Gamma}$ انرژی بر واحد زمانی است که جهت افزایش

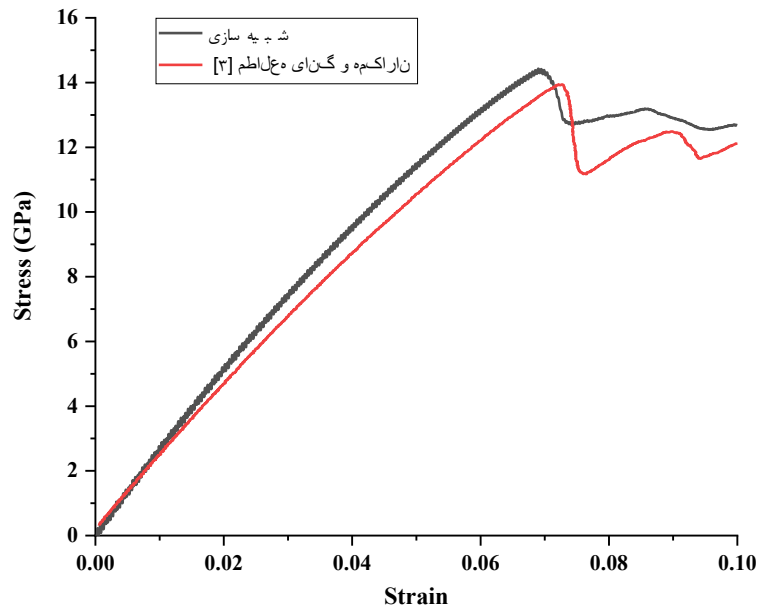


Fig. 5. Strain-stress response of the Ti/TiN bilayer structure subjected to tensile loading perpendicular to the interface [3]
 شکل ۵: نمودار تنش-کرنش ساختار منظم دولایه تیتانیوم/تیتانیوم‌نیتريد تحت بار کششی در جهت عمود بر فصل مشترک لایه‌ها [۳]

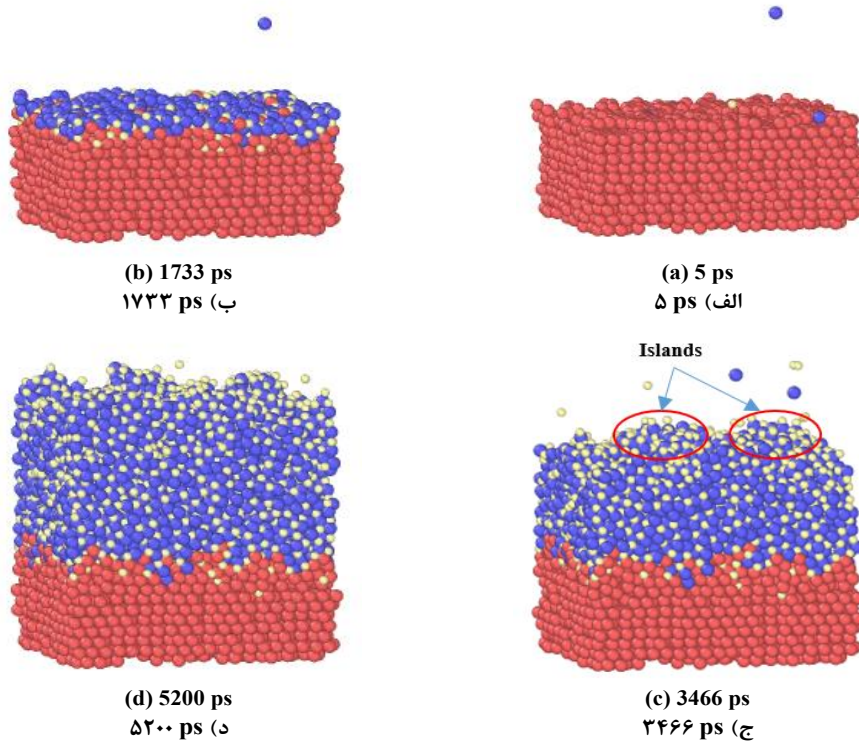


Fig. 6. Deposition process at different simulation time

شکل ۶: فرآیند لایه‌نشانی در زمان‌های مختلف

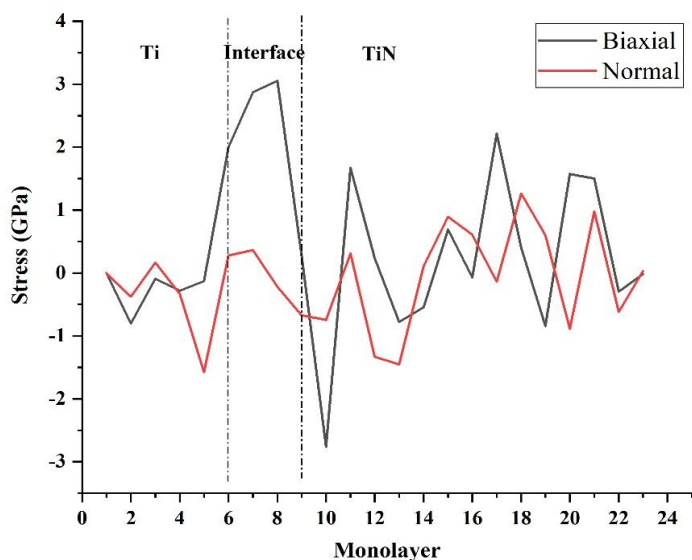


Fig 7. Residual stress curve of the deposited Ti/TiN structure

شکل ۷. نمودار تنش پسماند ساختار لایه‌نشانی شده تیتانیوم/تیتانیوم‌نیتريد

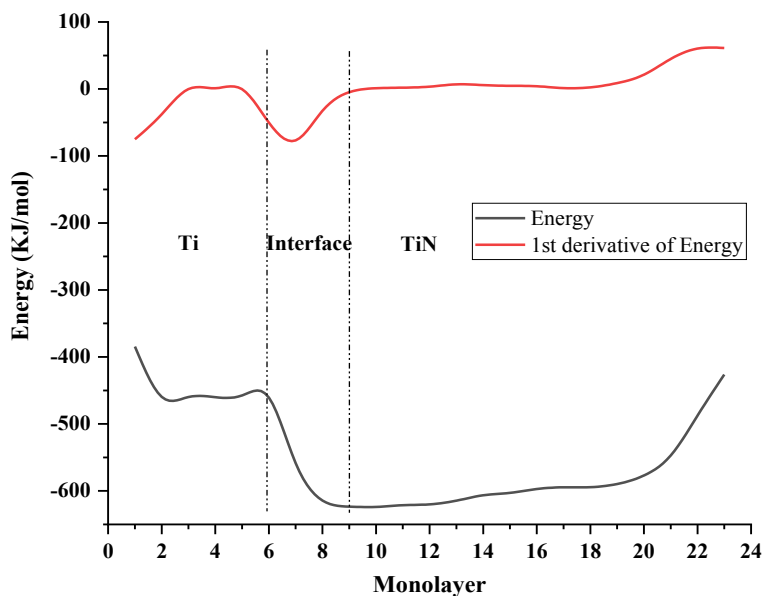


Fig. 8. The cohesive energy between Ti and TiN layers in the deposited Ti/TiN structure

شکل ۸: انرژی چسبندگی بین دو لایه تیتانیوم و تیتانیوم‌نیتريد در ساختار لایه‌نشانی شده تیتانیوم/تیتانیوم‌نیتريد

در محدوده خطی مدول الاستیک ساختار تیتانیوم/تیتانیوم‌نیتريد می‌باشد که برای شبیه‌سازی و مطالعه یانگ به ترتیب ۲۳۵ و ۲۲۰ گیگاپاسکال به دست آمده است. همچنین تنش تسلیم از شبیه‌سازی مقدار ۱۴/۳ گیگاپاسکال به دست آمد که این مقدار برای مقاله مرجع

ساختار دولایه تیتانیوم/تیتانیوم‌نیتريد تحت بارگذاری کششی در جهت عمود به فصل مشترک لایه‌ها با نرخ کرنش 3×10^{-8} قرار گرفته و نمودار تنش-کرنش تا کرنش ۰/۱ مطابق شکل ۵ به دست آمده و با کار پیشین مقایسه شده است. شیب منحنی تنش-کرنش

برابر ۱۳/۸ گیگاپاسکال می‌باشد. مقادیر به دست آمده از شبیه‌سازی برای تنش تسلیم و مدول یانگ به ترتیب دارای خطای ۳/۶۲ و ۶/۸۱ درصد می‌باشند.

۱-۳- لایه‌نشانی

فرآیند لایه‌نشانی مطابق شکل ۶ با شرایط ذکر شده در بخش ۲-۱ انجام شده است. همان‌طور که در شکل ۶-ج مشاهده می‌شود، رشد لایه تیتانیوم‌نیتريد به صورت جزیره‌ای می‌باشد. به دلیل کم‌تر بودن شعاع اتمی نیتروژن در مقایسه با شعاع اتمی تیتانیوم، در طی فرآیند لایه‌نشانی نفوذ اتم‌های نیتروژن در لایه‌های بالایی بستر تیتانیوم مشاهده می‌شود. این امر و یکسان نبودن ساختار بستر و پوشش موجب تشکیل یک ساختار آمورف در حین لایه‌نشانی می‌گردد. با این حال نفوذ اتم‌های نیتروژن موجب قفل‌شدگی دو لایه و افزایش چسبندگی بین آن‌ها می‌شود. این ساختار دارای عیوب کریستالی بوده و کاملاً شبیه چیزی است که در واقعیت اتفاق می‌افتد. سطح پوشش در پایان لایه‌نشانی مطابق شکل ۶-د ناصاف و دارای زبری سطح زیادی می‌باشد.

در فرآیند لایه‌نشانی تنش در لایه‌های نازک به دو نوع تنش حرارتی و تنش ذاتی^۱ تقسیم می‌شود. تنش نوع اول، به دلیل انجام فرآیند لایه‌نشانی در دمای بالا و اختلاف ضریب انبساط حرارتی بین مواد بستر و پوشش ایجاد می‌شود. تنش ذاتی یا داخلی به عواملی چون فرآیندهای رشد غیرتعادلی بستگی دارد و موجب تشکیل ساختارهای غیرتعادلی می‌گردد. به دلیل وجود این دو نوع تنش، لایه‌های نازک بدون وجود هیچ‌گونه نیروی خارجی تحت تنش‌های پسماند هستند. از میانگین تنش دوماحوری $\frac{(\sigma_{xx}^{ave} + \sigma_{yy}^{ave})}{2}$ σ_{Normal} و تنش نرمال $\sigma_{Biaxial} = \frac{\sigma_{xx}^{ave} + \sigma_{yy}^{ave}}{2}$ برای بررسی تنش پسماند لایه‌ها استفاده شده است. این انتخاب به این دلیل می‌باشد که اولاً مقدار این تنش‌ها در لایه‌نشانی یک مرتبه بزرگ‌تر از تنش‌های برشی است و ثانیاً این تنش‌ها مربوط به تنش پسماند فرآیند پوشش‌دهی می‌شوند که وابسته به ساختار پوشش می‌باشند [۲۲]. از آنجایی که علامت قراردادی برای نیروی دافعه مثبت و برای جاذبه منفی است، تنش مثبت بیانگر فشاری و تنش منفی نشان‌دهنده کششی بودن تنش می‌باشد [۲۳]. شکل

۷ نمودار تنش‌های پسماند در لایه‌های ساختار را نشان می‌دهد. در این نمودار تنش بر حسب لایه اتمی رسم شده و شماره‌گذاری لایه‌ها از کف بستر شروع شده است و تا انتهای لایه پوشش ادامه دارد که فاصله بین آن‌ها برابر ۲/۸۶۶۵ آنگستروم می‌باشد. تنش لایه شماره یک به دلیل ثابت بودن آن صفر گردیده و نواحی پوشش‌ها، بستر و فصل مشترک‌ها روی نمودار مشخص شده است. هر دو تنش پسماند دوماحوری و نرمال برای بستر کششی می‌باشد که با نزدیک شدن به فصل مشترک تبدیل به تنش فشاری می‌شود. تنش در این ناحیه به دلیل اختلاف ضریب انبساط حرارتی و همچنین نفوذ اتم‌ها و درهم آمیختگی بین لایه‌های دارای بیش‌ترین مقدار می‌باشد. همچنین در این ناحیه مقدار تنش پسماند دوماحوری بیش‌تر از نرمال است. در لایه تیتانیوم‌نیتريد تنش‌های پسماند فشاری هستند.

چسبندگی بین دو لایه کمیت مهمی است که همواره مورد توجه قرار گرفته است. در هنگام ساخت لایه‌های نازک، به خصوص پوشش‌های چندلایه، این کمیت باید در نظر گرفته شود. نقش این کمیت را می‌توان در تحمل فرآیندهای شیمیایی و گرمایی بعدی که بر روی لایه انجام می‌شود، نشان داد. عوامل مؤثر در چسبندگی متفاوت می‌باشند و نظرهای مختلفی در این مورد ارائه شده است. از نیروهای واندروالس برای بررسی انرژی چسبندگی بین لایه‌ها در سیستم‌های چندلایه استفاده می‌شود. برای محاسبه انرژی چسبندگی بین لایه‌ها، بعد از اتمام لایه‌نشانی سیستم کاملاً با دمای محیط به تعادل رسیده و سپس انرژی پتانسیل هر لایه اتمی محاسبه و بر حسب آن رسم شده است. شکل ۸ نمودار انرژی پتانسیل اتمی بر حسب تعداد لایه‌ها برای ساختار لایه‌نشانی شده را نشان می‌دهد. قسمت اول نمودار به دلیل ثابت بودن اتم‌های لایه‌های اول تیتانیوم دارای انرژی بیشتری است. انرژی در دو لایه تیتانیوم و تیتانیوم‌نیتريد تقریباً مقدار ثابتی دارد که در فصل مشترک این مقدار تغییر می‌کند. با نزدیک شدن به سطح پوشش نیز انرژی افزایش یافته است؛ زیرا سطح پوشش فعال و دارای سطح انرژی بیشتری می‌باشد. پرش نمودار در قسمت فصل مشترک یا به عبارتی دیگر اختلاف انرژی در این ناحیه بیانگر انرژی چسبندگی بین دولایه است که دارای مقدار ۱۶۶ کیلوژول بر مول می‌باشد. پیک مشتق اول نمودار انرژی، ضخامت فصل مشترک دولایه را نشان می‌دهد.

1 Intrinsic Stress

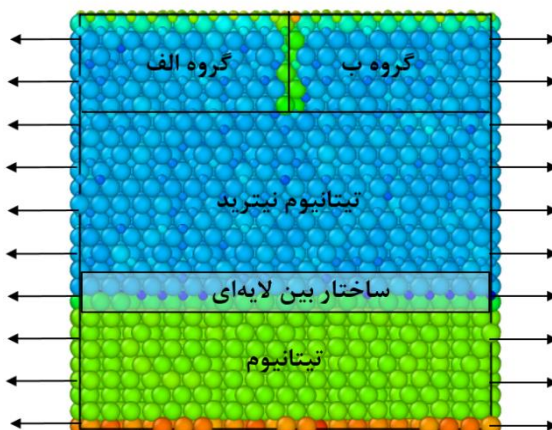


Fig. 9. Schematic of Ti/TiN perfect structure after equilibrium. Atoms are colored based on energy per atom in Ovito.

شکل ۹: شماتیک کلی ساختار بعد از تعادل. رنگ آمیزی اتم‌ها بر اساس انرژی بر واحد اتم در اویتو می‌باشد.

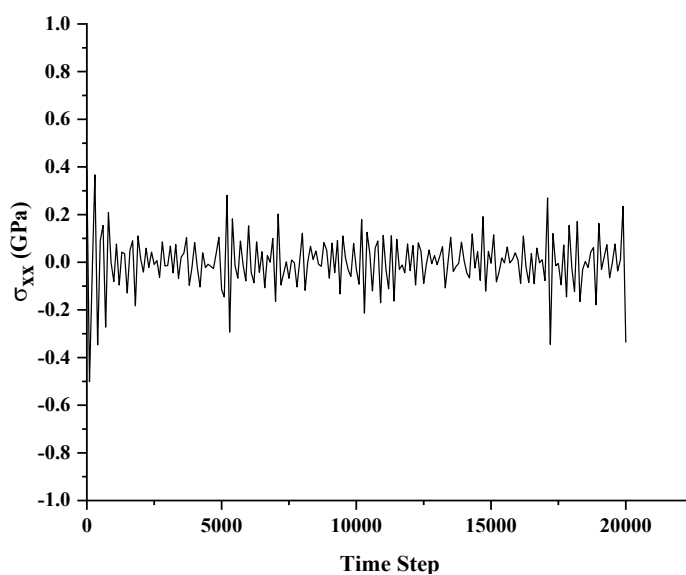


Fig. 10. Stress curve along the x direction under the time step for perfect Ti/TiN structure

شکل ۱۰: نمودار تنش در راستای X بر حسب گام زمانی برای ساختار منظم تیتانیوم/تیتانیوم نیتريد

می‌دهد و شامل ناهنجاری‌های حاصل از عدم انطباق در فصل مشترک می‌باشد. این ناهنجاری‌ها مسیری برای نفوذ اتم‌های کوچک‌تر نیتروژن فراهم می‌کنند که منجر به آسان شدن نفوذ و به وجود آمدن عیوب نقطه‌ای در این نواحی می‌شوند. مطابق شکل ۹ در لایه سرامیک با استفاده از گروه‌بندی نواحی و غیرفعال کردن برهم‌کنش اتمی میان گروه‌های الف و ب، ترکی در بین این دو گروه جاگذاری شده است.

۲-۳- رشد ترک

به دلیل تفاوت ساختار کریستالی در فلز تیتانیوم و سرامیک تیتانیوم نیتريد که در بخش ۲-۲ آورده شده است، فصل مشترک بین لایه‌ها دارای عدم انطباق می‌باشد. این ساختار بین‌لایه‌ای نیمه‌منطبق^۱، قابلیت نفوذ بالا و انرژی تغییر شکل کمی از خود نشان

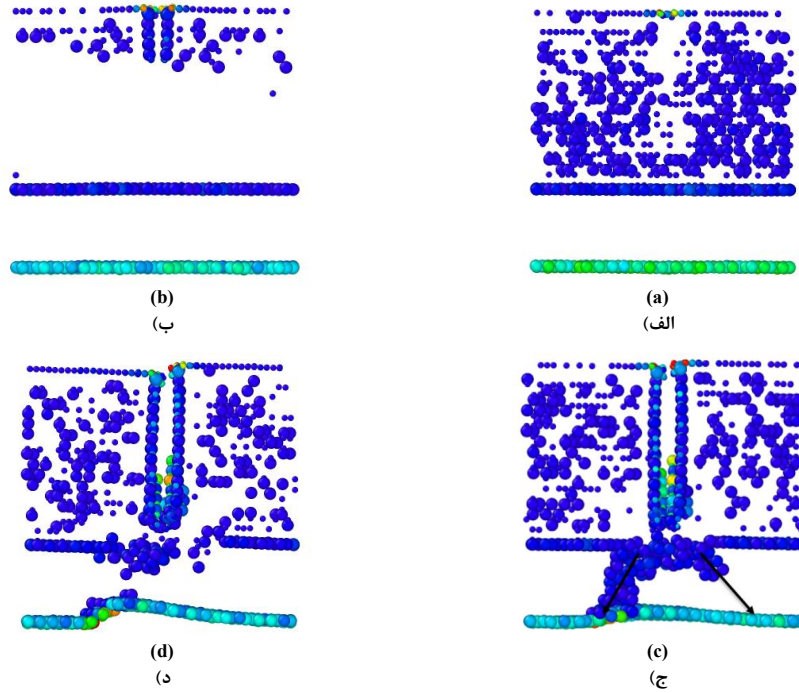


Fig. 11. Crack growth process in perfect structure. For further understanding, the atoms in perfect crystal have been removed by CSP parameter. Atoms are colored based on CSP in Ovito.

شکل ۱۱. فرآیند رشد ترک در ساختار دو لایه منظم. برای دید بهتر اتم‌هایی که در ساختار منظم شبکه بدون عیب هستند حذف گردیده است. همچنین رنگ‌آمیزی بر اساس پارامتر متقارن مرکزی^۱ در اویتو انجام شده است.

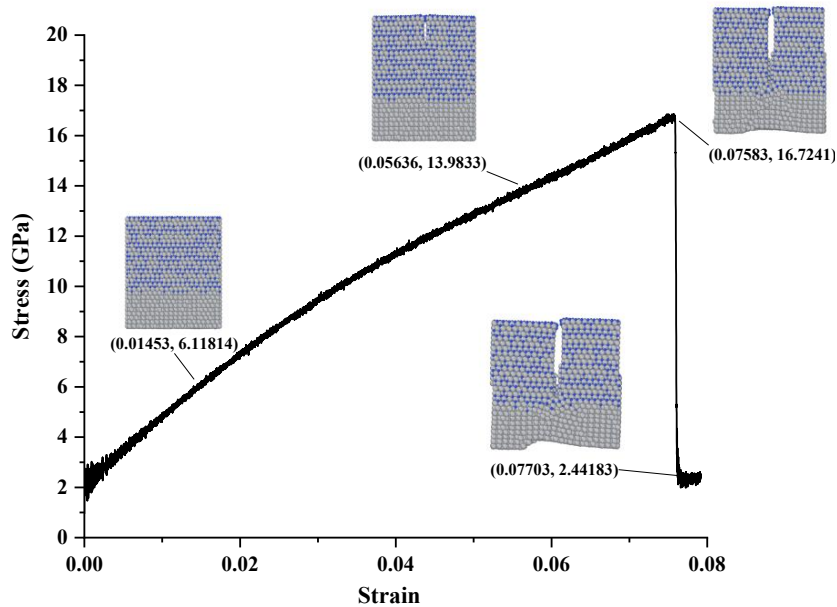


Fig. 12. Strain-stress response of the Ti/TiN perfect structure

شکل ۱۲: نمودار تنش-کرنش برای ساختار منظم تیتانیوم/تیتانیوم‌نیتريد

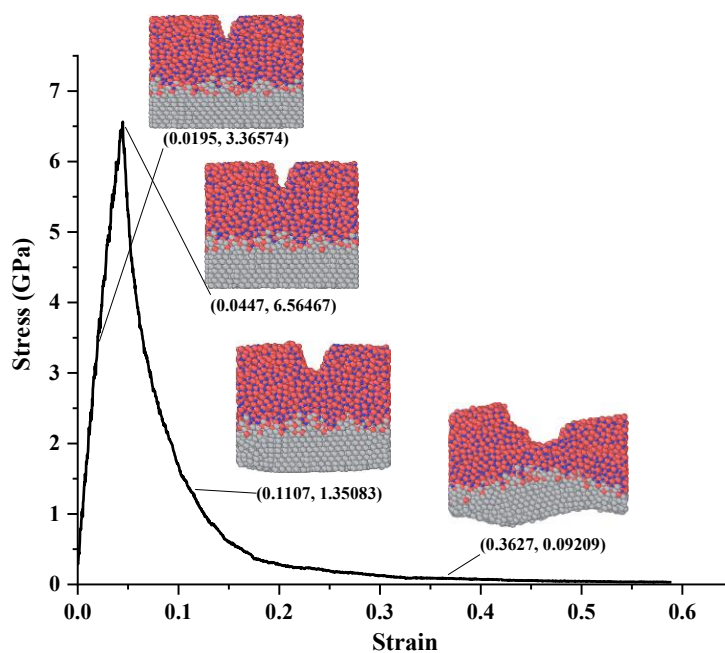


Fig. 13. Strain-stress response of the deposited Ti/TiN structure with crack under tensile loading

شکل ۱۳: نمودار تنش- کرنش بارگذاری کششی اعمال شده برای ساختار ترک‌دار لایه‌نشانی شده

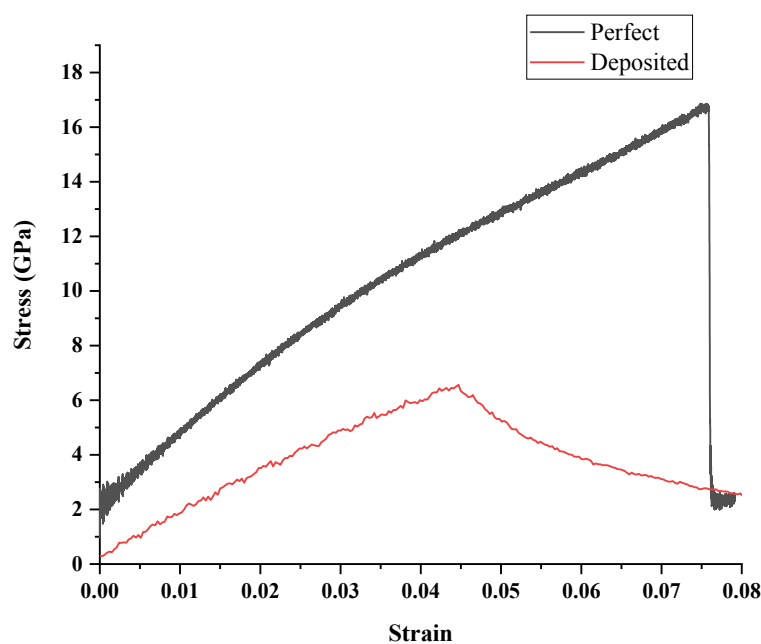


Fig. 14. Comparison of Strain-stress response of the Ti/TiN deposited and perfect structure

شکل ۱۴: نمودار تنش- کرنش دو ساختار منظم و لایه‌نشانی‌شده تیتانیوم/تیتانیوم‌نیتريد

دارای تنش‌های پسماند می‌باشد که در بخش ۳-۱ آورده شده است. وجود این تنش‌های پسماند در رفتار این پوشش‌ها تحت کشش تاثیر به‌سزایی دارد.

بارگذاری کششی در جهت x اعمال شده است. مطابق شکل ۱۰ ساختار قبل از اعمال بارگذاری به تعادل رسیده و تنش‌های موجود در آن صفر می‌شود. این در حالی است که ساختار لایه‌نشانی‌شده

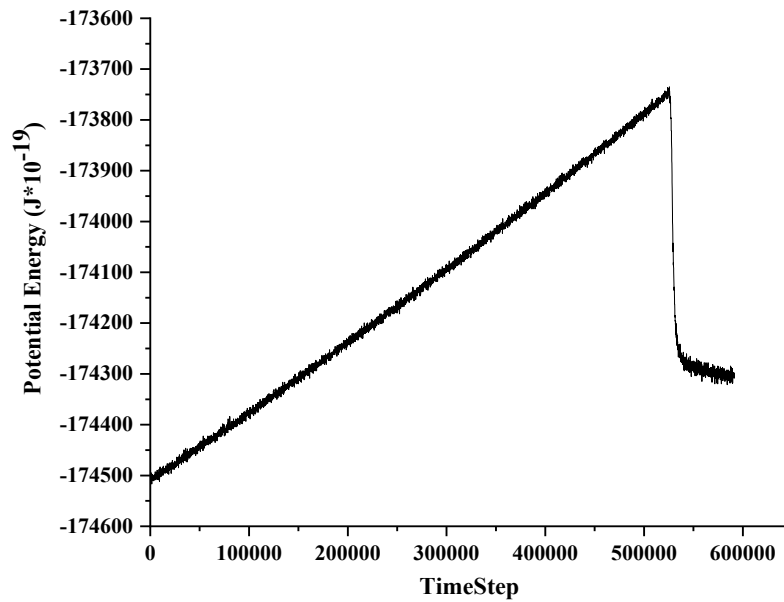


Fig. 15. Potential energy under the time step

شکل ۱۵: نمودار انرژی پتانسیل بر حسب گام زمانی

جدول ۱: مقادیر به دست آمده از شبیه سازی

Table 1. Mechanical properties obtained from the simulation

E (GPa)	G_C (J/m ²)	K_{IC} (MPa.m ^{1/2})
۲۷۴/۴۳۶	۳/۳۵۷	۱/۰۲۸

داده و به سرعت در ضخامت آن رشد می کند (شکل ۱۱-ب). همان طور که در نمودار تنش- کرنش شکل ۱۲ قابل مشاهده می باشد، به دلیل رشد ترک، تنش از مقدار بحرانی به مقدار ۲/۴۴ گیگاپاسکال افت پیدا کرده است. همچنین در این گام زمانی از شبیه سازی انرژی پتانسیل سیستم دچار افت ناگهانی می گردد. با رسیدن ترک به لایه فلز به دلیل وجود داشتن عدم انطباق در ساختار بین لایه ای و همچنین تغییر شکل پلاستیک لایه تیتانیوم رشد ترک در این ناحیه متوقف می شود. ساختار بین لایه ای نیمه منطبق همچنین از انتقال لغزش به وجود آمده در طی رشد ترک، از لایه ای به لایه دیگر جلوگیری کرده و سبب به دام افتادن نابجایی های مجاور ناحیه بین لایه ای می شود. به علاوه در طی بارگذاری، برهم کنش نابجایی های موجود در شبکه فلز و نابجایی های متراکم و انباشته شده در ساختار بین لایه ای منجر

ساختار به تعادل رسیده، تحت نرخ کرنش معلوم در راستای x تحت بارگذاری کششی قرار داده می شود. فرآیند رشد ترک و نمودار تنش- کرنش ساختار در شکل های ۱۱ و ۱۲ آورده شده است. مطابق شکل ۱۱- الف در کرنش های کم، هر دو لایه فلز و سرامیک تحت تغییر شکل الاستیک بوده و دهانه ترک هنوز مشخص نمی باشد. با افزایش کرنش، تنش نیز افزایش می یابد و لبه های ترک قابل مشاهده می باشد، ولی هنوز تنش به مقدار بحرانی برای رشد آن نرسیده است. در این حالت لایه سرامیک همچنان تغییر شکل الاستیک می دهد و لایه فلز وارد تغییر شکل پلاستیک شده است (نقطه دوم در شکل ۱۲). با رسیدن کرنش به مقدار ۰/۰۷، تنش به مقدار بحرانی ۱۶/۷۲ گیگاپاسکال رسیده و با افزایش جزئی کرنش ترک شروع به رشد می کند. به دلیل ترد بودن تیتانیوم نیتريد ترک رفتار ترد از خود نشان

و عیوب موجود در این ساختار می‌توان گفت.

در طی رشد ترک در لایه سرامیک در ساختار منظم، انرژی پتانسیل به دلیل رشد ترک افت می‌کند. با استفاده از این افت انرژی و میزان رشد ترک و با استفاده از روابط آورده شده در بخش ۲-۳ ضریب شدت تنش مود اول برای تیتانیوم‌نیتريد محاسبه می‌گردد. لازم به ذکر است طول رشد ترک از اختلاف مختصات اتم‌های نوک ترک بین گام‌های زمانی متوالی به دست آمده است. همچنین گفتنی است به دلیل اعمال شرط مرزی دوره‌ای در راستای x و y مسئله دارای شرایط کرنش صفحه‌ای بوده و K_I به دست آمده همان K_{IC} سرامیک تیتانیوم‌نیتريد می‌باشد. در جدول ۱ این مقادیر آورده شده است.

۴- نتیجه‌گیری

در این تحقیق فرآیند لایه‌نشانی تیتانیوم‌نیتريد بر روی بستر تیتانیوم انجام شد که در نتیجه آن رشد جزیره‌ای تیتانیوم‌نیتريد دیده شد. همچنین در طی لایه‌نشانی نفوذ اتم‌های نیتروژن در لایه‌های بالایی بستر تیتانیوم مشاهده شد که موجب افزایش چسبندگی بین لایه‌ها گردیده است. به دلیل اختلاف ساختار شبکه‌ای بستر و پوشش (هگزاگونال/مکعب مرکز وجه پر) و نفوذ اتم‌های نیتروژن، پوشش دارای ساختار آمورف می‌باشد. وجود تنش پسماند ناشی از لایه‌نشانی در دمای بالا و اختلاف ضریب انبساط حرارتی بین مواد بستر و پوشش مورد بررسی قرار گرفت که نتایج نشان داد هر دو تنش پسماند دومحوری و نرمال برای بستر و لایه تیتانیوم‌نیتريد به ترتیب کششی و فشاری هستند.

تنش بحرانی برای رشد ترک در ساختار منظم ۱۶/۷۲ گیگاپاسکال و برای ساختار لایه‌نشانی شده برابر ۶/۵۴ گیگاپاسکال به دست آمد. همچنین رشد ترک برای ساختار منظم در کرنش ۰/۰۷۵ اتفاق می‌افتد در حالی که برای ساختار لایه‌نشانی شده برابر ۰/۰۴۵ می‌باشد که در نتیجه ساختار منظم تا شروع رشد ترک کرنش بیشتری را تحمل کرده است. میزان رشد ترک در لایه سرامیک در حالت منظم بیش‌تر از ساختار لایه‌نشانی شده است به همین دلیل در این ساختار با رشد ترک افت تنش بیشتری اتفاق افتاده است. دلیل کاهش تنش و کرنش رشد ترک در ساختار لایه‌نشانی شده را وجود تنش‌های پسماند ساختار می‌توان گفت.

به ممانعت از انتشار آزاد نابجایی‌ها در ساختار بین‌لایه‌ای می‌شود که این امر سبب کرنش سختی خواهد شد. در لایه تیتانیوم نابجایی‌هایی با زاویه ۴۵ درجه نسبت به نوک ترک دیده می‌شود. در این صفحات ضریب اشمید دارای بیش‌ترین مقدار بوده و تنش برشی تصویر شده دارای بیش‌ترین مقدار می‌باشد که این سبب لغزش آسان این صفحات می‌گردد (شکل ۱۱-ج). همان‌طور که در شکل ۱۱-د پیداست ترک با رسیدن به ناحیه بین لایه کور شده و رشد آن متوقف می‌گردد.

ذکر این نکته حائز اهمیت است که رفتار ساختارهای چندلایه در مقیاس نانو به شدت متأثر از جهت‌گیری کریستالی می‌باشد. ساختار منظم با جهت‌گیری معلوم که شبیه‌سازی شد، ساختاری منظم نسبت به حالت واقعی می‌باشد چرا که عاری از هر گونه عیوبی است که در حالت واقعی در این ساختارها وجود دارد. برای مقایسه این حالت با حالت واقعی‌تر، ترکی در لایه سرامیک در ساختار لایه‌نشانی شده ایجاد شده و همان بارگذاری اعمال می‌گردد. همان‌طور که در نمودار تنش-کرنش این ساختار در شکل ۱۳ دیده می‌شود، ترک در تنش و کرنش به مراتب کم‌تر از حالت منظم شروع به رشد می‌کند. همچنین به دلیل عیوب موجود در ساختار لایه‌نشانی شده مانند حفره‌ها و جاهای خالی اتمی، ساختار مقاومت کم‌تری از خود نشان داده و سریع‌تر دچار کرنش و تغییر طول در راستای کشش شده و رشد ترک متوقف می‌شود.

از مقایسه دو نمودار تنش-کرنش در شکل ۱۴ مشخص می‌شود که تنش بحرانی برای رشد ترک در ساختار منظم ۱۶/۷۲ گیگاپاسکال و برای ساختار لایه‌نشانی شده این مقدار برابر ۶/۵۴ گیگاپاسکال می‌باشد، که ۲/۵ برابر بودن این تنش برای ساختار منظم نشان از مقاومت بالای این ساختار در جهت‌گیری بین‌لایه‌ای آن دارد. همچنین رشد ترک برای ساختار منظم در کرنش ۰/۰۷۵ اتفاق می‌افتد در حالی که برای ساختار لایه‌نشانی شده برابر ۰/۰۴۵ می‌باشد که در نتیجه ساختار منظم تا شروع رشد ترک کرنش بیشتری را تحمل کرده است. میزان رشد ترک در لایه سرامیک در حالت منظم بیش‌تر از ساختار لایه‌نشانی شده است به همین دلیل در این ساختار با رشد ترک افت تنش بیشتری اتفاق افتاده است. دلیل کاهش تنش و کرنش رشد ترک در ساختار لایه‌نشانی شده را وجود تنش‌های پسماند

منابع و مراجع

- [1] Nanocoating-Development-Center, Application of Hard and Resistant Nanocoatings in Industry, Nano Technology Development Headquarter, Tehran, 2017. (in Persian)
- [2] Z.H. Xu, L. Yuan, D.B. Shan, B. Guo, A molecular dynamics simulation of TiN film growth on TiN(1 0 0), Computational Materials Science, 1436–1432 (2011) 50.
- [3] W. Yang, G. Ayoub, I. Salehinia, B. Mansoor, H. Zbib, Multiaxial tension/compression asymmetry of Ti/TiN nano laminates: MD investigation, Acta Materialia, 135 360-348 (2017).
- [4] T. Iwasaki, Molecular dynamics study of adhesion strength and diffusion at interfaces between interconnect materials and underlay materials, Computational Mechanics, 25 86-78 (2000).
- [5] Y. Cao, J. Zhang, T. Sun, Y. Yan, F. Yu, Atomistic study of deposition process of Al thin film on Cu substrate, Applied Surface Science, 5997-5993 (2010) 256.
- [6] G.H. Feng, L. Wei, W.L. Min, L.G. Ping, Cluster size and substrate temperature affecting thin film formation during copper cluster deposition on a Si (001) surface, Chin. Phys. B, 113608-113601 (2012) 21.
- [7] T. Zientarski, D. Chocyk, Structure and stress in Cu/Au and Fe/Au systems: A molecular dynamics study, Thin Solid Films, (6-1 (2014).
- [8] S. Zhanga, H. Gongga, X. Chena, G. Lia, Z. Wang, Low energy Cu clusters slow deposition on a Fe (001) surface investigated by molecular dynamics simulation, Applied Surface Science, 442-433 (2014) 314.
- [9] J.C. Huang, The Study on Deposition of Cu/Co Multilayer Nano Thin Films under Gravitational Effect by Molecular Dynamics, in: L. Prior Meen (Ed.) International Conference on Applied System Innovation, IEEE, 2017, pp. 1582-1579.
- [10] J. Zhang, Molecular dynamics study of crack propagation behavior and mechanisms in Nickel, The Ohio State University, 2011.
- [11] Z. Yang, Y. Zhou, T. Wang, Q. Liu, Z. Lu, Crack propagation behaviors at Cu/SiC interface by molecular

فهرست علائم

علائم انگلیسی

A	طول ترک، m
a	ثابت شبکه Å
E	مدول الاستیسیته، GPa
E	انرژی داخلی J
f_{ij}	نیروی بین دو اتم i و j ، eV/Å
G	نرخ انرژی الاستیک آزاد شده در حین رشد ترک J/m ²
k	انرژی جنبشی J
m_i	حجم اتم i ، gr/mol
r_{ij}	فاصله بین دو اتم i و j ، m
U^e	انرژی کرنشی الاستیک J/m ³
U^p	کار پلاستیک J/m ³
V_i	حجم اتم i ، m ³
v_i	سرعت اتم i ، Å/ps
W	نیروی خارجی، N

علائم یونانی

σ	تنش، GPa
ν	ضریب پواسون
Γ	انرژی سطحی ناشی از رشد ترک J/m ²

زیرنویس

A	طول ترک
C	بحرانی
i	اتم i
I	مود اول مکانیک شکست
xx	راستای x
yy	راستای y
zz	راستای z

بالانویس

ave	متوسط
e	الاستیک
p	پلاستیک

- [17] B. Zhang, L. Zhou, Y. Sun, W. He, Y. Chen, Molecular dynamics simulation of crack growth in pure titanium under uniaxial tension, *Molecular Simulation*, ((2018) 10-1.
- [18] B.J. Lee, M.I. Baskes, Second nearest-neighbor modified embedded-atom-method potential, *Physical Review B*, 62 8567-8564 (2000).
- [19] S. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *Journal of Computational Physics*, 42-1 (1995) 117.
- [20] A. Stukowski, Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 7-1 (2010) 18.
- [21] E.E. Gdoutos, *Fracture Mechanics*, 2 ed., Springer, The Netherlands, 2005.
- [22] L. Zhang, H. Yan, G. Zhu, S. Liu, Z. Gan, Molecular dynamics simulation of aluminum nitride deposition: temperature and N : Al ratio effects, *The Royal Society* 11-1 (2018)5.
- [23] S.F. Hwang, Y.-H. Li, Z.-H. Hong, Molecular dynamic simulation for Cu cluster deposition on Si substrate, *Computational Materials Science*, 94-85 (2012) 56.
- dynamics simulation, *Computational Materials Science*, 25-17 (2014) 82.
- [12] J. Yu, Q. Zhang, R. Liu, Z. Yue, M. Tang, X. Li, Molecular dynamics simulation of crack propagation behaviors at the Ni/Ni₃Al grain boundary, *The Royal Society of Chemistry*, 32754-32749 (2014) 4
- [13] D. Huang, M. Wang, G. Lu, Continuum Fracture Analysis and Molecular Dynamic Study on Crack Initiation and Propagation in Nanofilms, *Journal of Nanomaterials*, 2014 7-1 (2014).
- [14] Y. Zhou, W. Yang, M. Hu, Z. Yang, The typical manners of dynamic crack propagation along the metal/ceramics interfaces: A molecular dynamics study, *Computational Materials Science*, 33-27 (2016) 112.
- [15] L.V. Stepanova, Modeling of crack growth under mixed-mode loading by a molecular dynamics method and a linear fracture mechanics approach, in: *Mechanics, Resource and Diagnostics of Materials and Structures American Institute of Physics*, 2017, pp. 0400594-0400591.
- [16] Y. Li, Q. Zhou, S. Zhang, P. Huang, K. Xu, F. Wang, T. Lu, On the role of weak interface in crack blunting process in nanoscale layered composites, *Applied Surface Science*, 962-957 (2018) 433.

برای ارجاع به این مقاله از عبارت زیر استفاده کنید:

H. Amini, P. Gholizadeh, E. Poursaeidi, *Investigation of Crack Growth in Deposited and Perfect Titanium/Titanium Nitride Structure by Molecular Dynamic Simulation*, *Amirkabir J. Mech. Eng.*, 53(2) (2021) 833-850.

DOI: [10.22060/mej.2019.16569.6391](https://doi.org/10.22060/mej.2019.16569.6391)



