

## 本期封面



2004年9期

栏目:

DOI:

论文题目: <111>生长铜膜中孪晶形成与出现几率的分子动力学模拟

作者姓名: 周耐根 周浪

工作单位: 南昌大学材料科学与工程学院, 南昌 330047

通信作者: 周耐根

通信作者Email: [ngzhou@ncu.edu.cn](mailto:ngzhou@ncu.edu.cn)

文章摘要:

运用分子动力学和静力学方法对, <111> 生长铜膜中孪晶形成的原子过程与能量进行了模拟研究. 所用的原子间相互作用势为 Finnis-Sinclair型镶嵌原子法(EAM)势. 模拟和计算分析结果表明, <111>生长铜膜表面沉积原子在不同局部可形成正常排列的fcc畴或错排的hcp畴; 沉积原子处于hcp位置时体系的能量比fcc位置时要高, 其增量决定了孪晶面出现几率. 沉积原子错排能还受相邻{111}孪晶面的影响, 其间距小于3个原子层厚时, 沉积原子错排能与不形成孪晶的A1晶体表面沉积原子错排能相当, 此时形成孪晶面的几率极低; 随间距的增加, 表面沉积原子错排能迅速降低, 在间距达到约12个原子层厚以后, 降到略低于完整Cu晶体{111}表面的沉积原子错排能, 这表明此时出现孪晶面的几率比在完整晶体表面形成一个新的孪晶面的几率要大.

关键词: 铜膜, 孪晶, 分子动力学

分类号: 0484.1

关闭