

# Xác định độ bền phá hủy của cặp vật liệu ghép đôi Ni/Al bằng phương pháp động lực học phân tử

Trần Thế Quang<sup>1,2,\*</sup>, Vương Văn Thanh<sup>1</sup>, Đỗ Văn Trường<sup>1</sup>



Use your smartphone to scan this QR code and download this article

## TÓM TẮT

Cặp vật liệu ghép đôi ở kích thước nanô mét được sử dụng nhiều trong các ngành công nghiệp, đặc biệt là ngành công nghiệp vi điện tử. Do sự biến dạng khác nhau giữa hai lớp vật liệu ghép đôi, phá hủy thường xảy ra trên bề mặt chung giữa hai lớp vật liệu. Trong bài báo này, phương pháp động lực học phân tử (Molecular dynamics - MD) được sử dụng để nghiên cứu tính chất cơ học của cặp vật liệu ghép đôi Ni/Al dưới biến dạng kéo. Mô hình Ni/Al được khảo sát có kích thước là 10.90 nm x 5.27 nm x 4.22 nm/10.93 nm x 5.26 nm x 4.21 nm với các tốc độ biến dạng lần lượt là  $1.83 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ ,  $5.48 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ ,  $1.83 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  và  $5.48 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ . Tương tác giữa các nguyên tử trong hệ được biểu diễn thông qua hàm thế năng EAM (Embedded Atom Method). Kết quả tính toán của nghiên cứu chỉ ra rằng mô đun đàn hồi của cặp vật liệu ghép đôi Ni/Al không thay đổi dưới các tốc độ biến dạng khác nhau, trong khi đó độ bền phá hủy của Ni/Al tăng khi tốc độ biến dạng tăng. Thêm vào đó, ảnh hưởng của vị trí đặt tải và nhiệt độ đến độ bền phá hủy của Ni/Al cũng được khảo sát. Với tốc độ biến dạng  $1.83 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ , độ bền phá hủy của Ni/Al ở nhiệt độ 100°K và 700°K có giá trị lần lượt là 6.6 GPa và 4.3 GPa. Các kết quả đạt được của nghiên cứu giúp ích trong việc thiết kế và chế tạo các thiết bị dựa trên cặp vật liệu ghép đôi Ni/Al.

**Từ khóa:** Độ bền phá hủy, tốc độ biến dạng, động lực học phân tử, Ni/Al

## GIỚI THIỆU

Nhờ ưu điểm kết cấu gọn nhẹ và sử dụng ít chi tiết, vật liệu đa lớp ngày càng được sử dụng nhiều trong các ngành công nghiệp, ví dụ như công nghiệp hàng không, công nghiệp ô tô, công nghiệp vi điện tử<sup>1-5</sup>, lý do là chúng có những đặc tính nổi trội so với vật liệu đơn lớp<sup>6,7</sup>. Bởi vì độ bền cơ học của vật liệu đa lớp ảnh hưởng lớn đến sự làm việc ổn định cũng như tuổi thọ của thiết bị, nên việc khảo sát các tính chất cơ học của vật liệu này là một nhiệm vụ cần thiết.

Như đã biết, vật liệu ghép được tạo thành từ hai phương pháp cơ bản: phương pháp gián tiếp và phương pháp trực tiếp.

Với vật liệu đa lớp có kích thước từ micrô mét trở lên, liên kết bám dính giữa hai lớp được tạo thành từ các tấm vật liệu chuẩn bị trước nhờ các tác nhân nhiệt độ, áp suất như phương pháp cuộn ARB (accumulative roll bonding)<sup>8,9</sup>, phương pháp hàn nổ<sup>10</sup>, trong khi đó liên kết bám dính giữa các lớp vật liệu có chiều dày nhỏ hơn micrô mét lại được tạo thành từ một tấm vật liệu nền sau đó được phủ trực tiếp lớp vật liệu khác lên bằng các phương pháp như phương pháp bốc bay (evaporation method) hoặc phương pháp phun xạ (sputtering method). Gần đây, song song với những cặp vật liệu bán dẫn/kim loại<sup>11-17</sup> được sử dụng nhiều trong các thiết bị vi điện tử với mục đích dẫn điện,

các cặp vật liệu kim loại/kim loại cũng được sử dụng rộng rãi trong các chi tiết máy nhằm tăng độ bền cơ học cho máy. Trong số các cặp kim loại/kim loại, cặp vật liệu Ni/Al đang được sử dụng khá phổ biến, cặp vật liệu này không những chịu nhiệt cao mà còn khả năng chống oxy hóa, chống mài mòn cho vật liệu lớp bên trong.

Ở kích thước khối, đã có một số nghiên cứu tập trung vào cặp vật liệu Ni/Al. Chan và cộng sự<sup>18</sup> đã khảo sát trở kháng của Ni/Al khi thay đổi nhiệt độ. Mohan và cộng sự<sup>19</sup> nghiên cứu về tốc độ phát triển, khu vực xuất hiện cũng như hướng lan truyền của vết nứt khi biến dạng kéo Ni/Al.

Ở kích thước cỡ nano, cặp vật liệu Ni/Al đã được nhóm tác giả<sup>20,21</sup> nghiên cứu, các kết quả của họ tập trung vào tính dẫn nhiệt và nhiệt điện trở tại bề mặt chung Ni/Al khi thay đổi nhiệt độ. Hou và Melikhova<sup>22</sup> khảo sát mối quan hệ giữa các gradient trường ứng suất cục bộ và sự biến dạng cơ học của dây nano Ni/Al. Nghiên cứu của Zheng và các cộng sự<sup>23</sup> đã chứng minh về sự hình thành trượt do xô lệch mạng tinh thể tại bề mặt chung của Ni/Al.

Mặc dù cặp vật liệu Ni/Al đã được nghiên cứu, tuy nhiên các nghiên cứu mới chỉ tập trung vào tính dẫn nhiệt, trở kháng nhiệt, sự trượt của mạng tinh thể cũng như sự hình thành trường ứng suất cục bộ tại

<sup>1</sup>Viện Cơ khí- Đại học Bách khoa Hà Nội, Việt Nam

<sup>2</sup>Khoa Công nghệ- Đại học Thái Bình, Việt Nam

### Liên hệ

**Trần Thế Quang**, Viện Cơ khí- Đại học Bách khoa Hà Nội, Việt Nam

Khoa Công nghệ- Đại học Thái Bình, Việt Nam

Email: tranthequang12@gmail.com

### Lịch sử

- Ngày nhận: 24-3-2020
- Ngày chấp nhận: 30-12-2020
- Ngày đăng: 31-1-2021

DOI : 10.32508/stdjet.v3i4.804



### Bản quyền

© ĐHQG Tp.HCM. Đây là bài báo công bố mở được phát hành theo các điều khoản của the Creative Commons Attribution 4.0 International license.



**Trích dẫn bài báo này:** Quang T T, Thanh V V, Trường D V. **Xác định độ bền phá hủy của cặp vật liệu ghép đôi Ni/Al bằng phương pháp động lực học phân tử.** *Sci. Tech. Dev. J. - Eng. Tech.*; 3(4):531-536.

bề mặt liên kết mà chưa đề cập nhiều đến độ bền phá hủy. Trong nghiên cứu này, với mục đích làm sáng tỏ vấn đề về độ bền phá hủy, mô phỏng động lực học phân tử qua phần mềm LAMMP (Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)<sup>24</sup> sử dụng hàm thế EAM (Embedded Atom Method) được lựa chọn để khảo sát sự ảnh hưởng của tốc độ biến dạng, vị trí đặt tải kéo, nhiệt độ đến độ bền phá hủy của bề mặt chung Ni/Al. Bên cạnh đó, bản chất của sự phá hủy giữa hai lớp vật liệu cũng được khám phá.

## PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG

Hình 1 biểu diễn mô hình mô phỏng của cặp vật liệu Ni/Al hướng tinh thể của hệ là [100], [010], [001] tương ứng lần lượt với các trục x, y và z. Kích thước của cặp Ni/Al lần lượt là 10.90 nm x 5.27 nm x 4.221 nm/10.93 nm x 5.26 nm x 4.212 nm (31a x 15a x 12a / 27a x 13a x 10.4a) với thông số mạng  $a_{Ni} = 0.352$  nm và  $a_{Al} = 0.405$  nm. Điều kiện biên chu kỳ được áp theo trục x, z. Biến dạng cơ học được đặt theo phương y. Sự tương tác giữa các nguyên tử được biểu diễn thông qua hàm thế năng EAM<sup>25</sup>, trong đó tổng năng lượng của hệ được xác định theo công thức<sup>26</sup>.

$$E = \sum_i^N F_i \left( \sum_{i \neq j} \rho_j(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{ij \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) \quad (1)$$

ở đây,  $E$  là tổng năng lượng của hệ,  $\Phi$  là hàm tương tác cặp (pair potential) giữa nguyên tử thứ  $i$  và  $j$ .  $F$  là hàm liên kết,  $r$  là mật độ điện tử của nguyên tử  $i$  và  $j$ ,  $r$  là khoảng cách giữa các nguyên tử  $i$  và  $j$ .

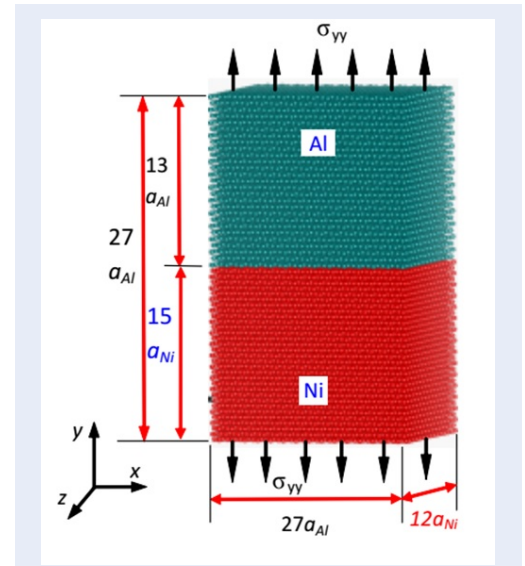
Với mục đích ngăn chặn sự ảnh hưởng của dao động nhiệt của các nguyên tử, nhiệt độ trong hệ được điều chỉnh bằng phương pháp Nose - Hoover. Ban đầu hệ được cân bằng nhiệt NVT ( $N$ : số nguyên tử trong hệ,  $V$ : thể tích,  $T$ : nhiệt độ). Sau đó, hệ được cân bằng NVE ( $N$ : số nguyên tử trong hệ,  $V$ : thể tích,  $E$ : năng lượng).

Để tính toán vận tốc của các nguyên tử thuật toán vận tốc Verlet<sup>27</sup> được sử dụng:

$$v(t) = \frac{r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (2)$$

trong đó,  $v(t)$  là vận tốc của một nguyên tử tại thời điểm  $t$ ;  $r(t)$  là vị trí của một nguyên tử tại thời điểm  $t$ ;  $\Delta t$  là biến thiên thời gian.

Các mô phỏng sử dụng với bước thời gian là 0.005ps và nhiệt độ là 300°K. Sau khi cân bằng, cặp vật liệu ghép đôi Ni/Al được kéo với tốc độ biến dạng có giá trị lần lượt là  $1.83 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ ,  $5.48 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ ,  $1.83 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  và  $5.48 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ .



Hình 1: Mô hình với các kích thước của cặp vật liệu ghép đôi Ni/Al

Ứng suất trong hệ được xác định trong LAMMPS<sup>28</sup> qua phương trình:

$$\sigma_{ij} = -\frac{1}{V} \sum_{\alpha}^N \left( m^{\alpha} v_i^{\alpha} v_j^{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\beta \neq \alpha} r_i^{\alpha\beta} F_j^{\alpha\beta} \right) \quad (3)$$

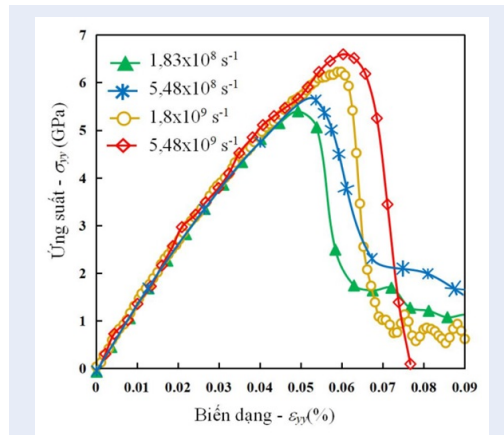
ở đây,  $V$  là thể tích của hệ,  $m$  là khối lượng của nguyên tử  $a$ ,  $v_i$  và  $v_j$  tương ứng là vận tốc của nguyên tử thứ  $i$  và  $j$ .  $F$  là lực tương tác giữa nguyên tử  $a$  và  $\beta$ ,  $r$  là khoảng cách giữa nguyên tử  $a$  và  $\beta$ .

## KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

### Ảnh hưởng của tốc độ biến dạng

Hình 2 biểu diễn đường cong quan hệ giữa ứng suất và biến dạng của cặp vật liệu ghép đôi Ni/Al thu được ở các tốc độ biến dạng  $1.83 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ ,  $5.48 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ ,  $1.83 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  và  $5.48 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  với nhiệt độ  $T = 300^{\circ}\text{K}$  và bước thời gian là 5fs. Mô hình ban đầu được cân bằng NVE, NVP và NVT với thời gian lần lượt là 50 ps, 100 ps và 25 ps, sau đó biến dạng kéo với thời gian là 500 ps ÷ 100 ps tương ứng với các tốc độ biến dạng. Từ quan hệ ứng suất - biến dạng trong vùng tuyến tính với biến dạng  $e < 0,03$ , mô đun đàn hồi được xác định và liệt kê trong Bảng 1. Kết quả thu được cho thấy các mô đun đàn hồi không có sự khác biệt, hay nói cách khác độ cứng của hệ vật liệu không bị thay đổi khi tốc độ biến dạng thay đổi. Tuy nhiên, độ bền phá hủy của bề mặt liên kết lại bị ảnh hưởng lớn bởi tốc độ biến dạng. Khi tăng tốc độ biến dạng, độ bền phá hủy tăng (Bảng 1). Ở tốc độ biến dạng  $5.48 \times 10^9$

$s^{-1}$  độ bền phá hủy đạt tới 6.59 GPa và giảm xuống 5.63 GPa ở tốc độ biến dạng  $1.83 \times 10^8 s^{-1}$ . Điều này có thể giải thích là do khi tốc độ biến dạng tăng trở kháng biến dạng tăng và tính dẻo giảm. Tốc độ biến dạng tăng gây tốc độ biến cứng nhanh hơn tốc độ khử biến cứng làm giảm tính biến dạng. Khi tốc độ biến dạng lớn, mạng tinh thể xô lệch mạnh, do đó tốc độ phục hồi về vị trí cân bằng của các nguyên tử nhỏ hơn tốc độ biến dạng đồng thời tổng năng lượng liên kết giữa các nguyên tử tăng do khoảng cách các nguyên tử bị kéo ra xa, gây hiệu ứng kích thước<sup>29</sup> làm tăng độ bền phá hủy của liên kết Ni/Al.



**Hình 2:** Quan hệ giữa ứng suất và biến dạng của <100>/{100} Ni/Al dưới các tốc độ biến dạng khác nhau ở nhiệt độ  $T = 300 \text{ }^\circ\text{K}$ .

### Ảnh hưởng của vị trí đặt tải kéo

Nhằm kiểm tra ảnh hưởng của vị trí kéo đến độ bền phá hủy của bề mặt chung giữa hai lớp vật liệu, ba trường hợp được đề nghị để khảo sát. Trường hợp thứ nhất cố định cạnh trên (của vật liệu Al), kéo cạnh dưới (của vật liệu Ni). Trường hợp thứ 2 đảo lại, cố định cạnh dưới, kéo cạnh trên. Trường hợp thứ 3 là kéo đồng thời cạnh trên và dưới. Kết quả thu được minh họa trên Hình 3. Khi tốc độ biến dạng bằng  $1.83 \times 10^8 s^{-1}$  (Hình 3a) và  $5.48 \times 10^8 s^{-1}$  (Hình 3b), có sự khác nhau về độ bền phá hủy. Cụ thể khi kéo ở cạnh phía lớp Ni, độ bền phá hủy là lớn nhất, tiếp theo là kéo ở cạnh phía Al và cuối cùng đồng thời kéo từ hai phía. Sự ảnh hưởng này có thể được giải thích là do năng lượng liên kết khác nhau giữa các nguyên tử trong vật liệu Ni và Al. Năng lượng liên kết của mạng tinh thể Ni lớn hơn Al vì khoảng cách mạng tinh thể Ni nhỏ hơn Al. Khi kéo đồng thời từ hai phía, năng lượng cần để cắt đứt liên kết giữa nguyên tử Ni và Al ở bề mặt chung đến từ hai phía kéo, nguyên nhân này được

coi là làm giảm độ bền phá hủy. Kết quả thu được cũng phù hợp với nghiên cứu<sup>22</sup>, cặp vật liệu có mặt ghép chung giữa lớp vật liệu cứng và mềm. Tuy nhiên, khi kéo ở tốc độ biến dạng lớn,  $\dot{\epsilon} = 5.48 \times 10^9 s^{-1}$  (Hình 3c), sự ảnh hưởng của vị trí kéo là không đáng kể. Nguyên nhân có thể là do năng lượng kéo ở vận tốc kéo đủ lớn nên sự cắt đứt liên kết giữa nguyên tử Ni và Al ở bề mặt chung không còn ảnh hưởng bởi vị trí kéo.

### Ảnh hưởng của nhiệt độ

Như đã biết, khi nhiệt độ thay đổi, có sự dịch chuyển của các nguyên tử và dẫn đến sự thay đổi tính chất cơ, lý của vật liệu nói chung. Hình 4 minh họa quan hệ giữa ứng suất - biến dạng của Ni/Al ở tốc độ biến dạng  $1.83 \times 10^8 s^{-1}$  ở các nhiệt độ khác nhau từ  $100^\circ\text{K}$  đến  $700^\circ\text{K}$  với bước nhiệt độ là  $100^\circ\text{K}$ . Kết quả thu được chỉ ra rằng nhiệt độ có ảnh hưởng độ bền phá hủy của Ni/Al. Cụ thể là độ bền phá hủy tăng khi nhiệt độ giảm. Ở nhiệt độ  $100^\circ\text{K}$  độ bền phá hủy xấp xỉ 6.6 GPa hơn đáng kể độ bền phá hủy ở  $700^\circ\text{K}$ , xấp xỉ 4.3 GPa, phù hợp với các kết quả ở nghiên cứu của nhóm tác giả Xin Wang và cộng sự (2014), Hocker và cộng sự (2011)<sup>20,30</sup>. Sự khác biệt này có thể được giải thích là khi nhiệt độ tăng dao động của các nguyên tử tăng làm giảm năng lượng liên kết của chúng, trở kháng biến dạng của vật liệu giảm, giúp quá trình biến dạng xảy ra dễ dàng hơn.

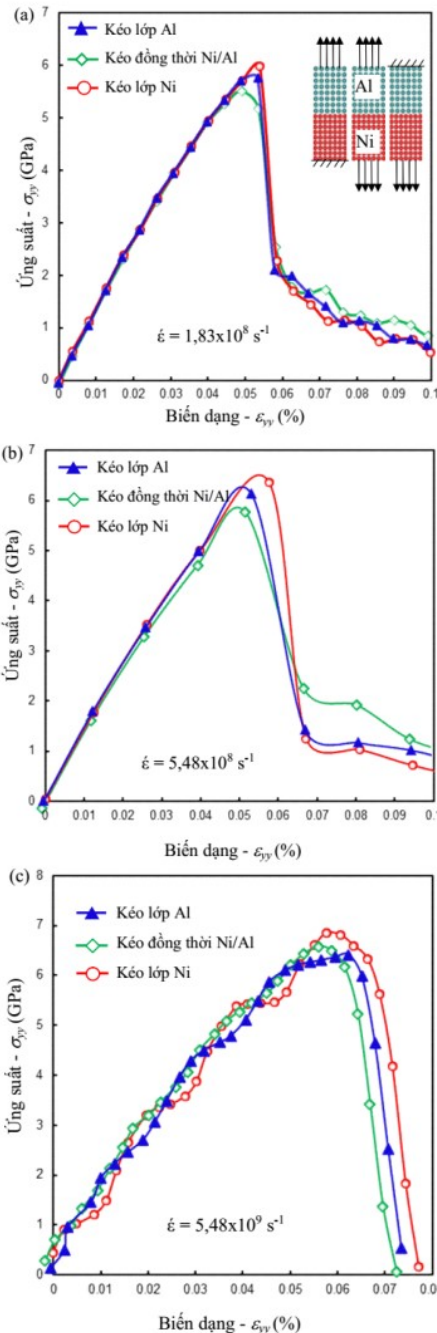
### KẾT LUẬN

Trong nghiên cứu này, phương pháp mô phỏng động lực học phân tử được sử dụng để khảo sát ảnh hưởng của tốc độ biến dạng, vị trí kéo và nhiệt độ đến độ bền phá hủy giữa 2 lớp vật liệu Ni/Al. Các kết quả thu được có thể tóm tắt như sau:

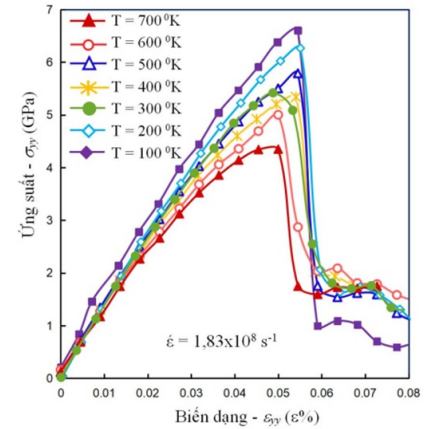
- Độ bền phá hủy tăng khi tốc độ biến dạng tăng. Độ bền phá hủy giữa hai lớp vật liệu Ni/Al có giá trị lần lượt là 5.62 GPa, 5.92 GPa, 6.33 GPa và 6.59 GPa, tương ứng với các tốc độ biến dạng lần lượt là  $1.83 \times 10^8 s^{-1}$ ,  $5.48 \times 10^8 s^{-1}$ ,  $1.83 \times 10^9 s^{-1}$  và  $5.48 \times 10^9 s^{-1}$ .
- Ở tốc độ biến dạng  $1.83 \times 10^8 s^{-1}$  và  $5.48 \times 10^8 s^{-1}$ , độ bền phá hủy có sự khác nhau ở 3 vị trí kéo. Độ bền không có sự khác nhau khi tốc độ biến dạng bằng  $5.48 \times 10^9 s^{-1}$ ;
- Ở tốc độ biến dạng  $1.83 \times 10^8 s^{-1}$ , độ bền phá hủy được khảo sát là tăng khi nhiệt độ giảm. Độ bền phá hủy ở nhiệt độ  $100^\circ\text{K}$  cao gấp 1.53 lần so với độ bền ở nhiệt độ  $700^\circ\text{K}$ ;
- Mô đun đàn hồi của Ni/Al gần như là hằng số khi thay đổi tốc độ biến dạng, thay đổi nhiệt độ và thay đổi vị trí kéo.

**Bảng 1:** Mô đun đàn hồi và ứng suất lớn nhất của <100>/[100] Ni/Al dưới các tốc độ biến dạng khác nhau ở nhiệt độ  $T = 300^\circ\text{K}$ .

Tốc độ biến dạng ( $\text{s}^{-1}$ )	Mô đun đàn hồi $E$ (GPa)	Ứng suất lớn nhất $\sigma$ (GPa)	Biến dạng lớn nhất $\epsilon$ (%)
$1.83 \times 10^8$	138.43	5.62	0.052
$5.48 \times 10^8$	138.71	5.92	0.053
$1.83 \times 10^9$	136.16	6.33	0.062
$5.48 \times 10^9$	135.85	6.59	0.061



**Hình 3:** Quan hệ giữa ứng suất và biến dạng, bước thời gian là  $5f$ ,  $T = 300^\circ\text{K}$ , với các vị trí đặt lực kéo khác nhau. (a) Tốc độ biến dạng  $\dot{\epsilon} = 1.83 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ . (b) Tốc độ biến dạng  $\dot{\epsilon} = 5.48 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ . (c) Tốc độ biến dạng  $\dot{\epsilon} = 5.48 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ .



**Hình 4:** Quan hệ giữa ứng suất và biến dạng của <100>/[100] Ni/Al dưới các nhiệt độ khác nhau ở tốc độ biến dạng  $\dot{\epsilon} = 1.83 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ .

### XUNG ĐỘT LỢI ÍCH

Nhóm tác giả xin cam đoan rằng không có bất kỳ xung đột lợi ích nào trong công bố bài báo.

### ĐÓNG GÓP CỦA CÁC TÁC GIẢ

Trần Thế Quang: Tham gia vào việc đưa ra ý tưởng viết bài, mô phỏng và viết bản thảo.

Vương Văn Thanh: Mô hình hóa và giải thích dữ liệu.

Đỗ Văn Trường: Đưa ra ý tưởng, phương pháp luận và biên tập.

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Gleiter H. Nanostructured materials, basic concepts and microstructure. Acta Mater. 2000;48(1):1–29. Available from: [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(99\)00285-2](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(99)00285-2).
- Huang D, Zhang Q, Qiao P. Molecular dynamics evaluation of strain rate and size effects on mechanical properties of FCC

- nickel nanowires. *Comp Mater Sci.* 2011;50:903–910. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.commat.2010.10.028>.
3. Lu L, Shen YF, Chen XH. Ultrahigh strength and high electrical conductivity in copper. *Science.* 2004;304(5669):422–426. PMID: 15031435. Available from: <https://doi.org/10.1126/science.1092905>.
  4. Wan Q, et al. Fabrication and ethanol sensing characteristics of ZnO nanowire gas sensors. *Appl, Phys, Lett.* 2004;84:3654. Available from: <https://doi.org/10.1063/1.1738932>.
  5. Liu HQ, Kameoka J, Czaplowski DA, Craighead HG. Polymeric nanowire chemical sensor. *Nano Lett.* 2004;4:671. Available from: <https://doi.org/10.1021/nl049826f>.
  6. Mehrez H, Wlasenko A, Larade B, Taylor J, Grutter P, Guo H. I-V characteristics and differential conductance fluctuations of Au nanowires. *Phys Rev B.* 2002;65:195419. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.195419>.
  7. Alexandrov AS, Kabanov VV. Magnetic Quantum Oscillations in Nanowires. *Phys, Rev, Lett.* 2005;95. PMID: 16196806. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.076601>.
  8. Saito Y, Utsunomiya H, Tsuji N, Sakai T. *Acta Mater.* 1999;47:579–583. Available from: [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(98\)00365-6](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(98)00365-6).
  9. Eizadjou M, Kazemi Talachi, A, Danesh Manesh H, Shakur Shahabi H, Janghorban K. *Compos. Sci, Technol.* 2008;68:2003–2009.
  10. Bataev IA, Ogneva TS, Bataev AA, Mali VI, Esikov MA, Lazurenko DV, Guo Y, Jorge Junior AM. Explosively welded multilayer Ni-Al composites. *Materials and Design.* 2015;88:1082–1087. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2015.09.103>.
  11. Liu HJ, Wang SG, Du A, Zhang CB. *J, Mater. Sci. Technol.* 2004;20.
  12. Zhang Q, Čađin T, Duin AV, et al. *Phys. Rev. B.* 2004;69:045423. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.045423>.
  13. Nokbin S, Limtraku JI, Hermansson K. *Surf. Sci.* 2004;566. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.susc.2004.06.039>.
  14. Dmitriev SV, Yoshikawa N, Tanaka Y, Kagawa Y. *Mater. Sci. Eng. A.* 2006;418:36–44. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2005.11.016>.
  15. Zaoui A. *Phys. Rev. B.* 2004;69:115403. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.115403>.
  16. Zhukovski YF, Kotomin EA, Fuks D, Dorfman S. *Surf. Sci.* 2004;p. 566–568. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.susc.2004.05.033>.
  17. Liu LM, Wang SQ, Ye HQ. *Acta Mater.* 2004;52:3681–3688. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2004.04.022>.
  18. Simon SMC, et al. Aluminum and nickel contact metallizations on thin film diamond. *American Institute of Physics Journal of Applied Physics.* 1995;78:2877. Available from: <https://doi.org/10.1063/1.360096>.
  19. Mohan R, Purohit Y, and Kelkar A. Mechanical Behavior of Nanoscale Multilayer Metallic Composites, Dynamic Crack Propagation in Nanoscale Ni-Al Bilayer Composite. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience.* 2015;12:60–69. Available from: <https://doi.org/10.1166/jctn.2015.3698>.
  20. Wang X, Shen S. Effect of temperature and strain on thermal properties of Ni/Al laminated structure. *Computational Material Science.* 2014;84:13–17. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.commat.2013.11.037>.
  21. Ya Z, Anglin B, Strachan A. *The Journal of Chemical Physics.* 2007;127:184702. PMID: 18020653. Available from: <https://doi.org/10.1063/1.2802366>.
  22. Hou M, Melikhova O, *Acta Mater.* 2009;57:453–465. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2008.09.037>.
  23. Zheng DL, Chen SD, Soh AK, Ma Y. Molecular dynamics simulations of glide dislocations induced by misfit dislocations at the Ni/Al interface. *Computational Materials Science.* 2010;48:551–555. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.commat.2010.02.022>.
  24. LAMMPS. 2011; Available from: <http://lammps.sandia.gov>.
  25. Purja PGP and Mishin Y. Development of an interatomic potential for the Ni-Al system. *Phil. Mag.* 2009;89:3245. Available from: <https://doi.org/10.1080/14786430903258184>.
  26. Daw MS, Baskes MI. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Phys. Rev. B.* 1984;29:6443–6453. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.6443>.
  27. Verlet L. Computer experiments on classical fluids: I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Phys. Rev.* 1967;159:98–103. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.159.98>.
  28. Plimpton S, Comput J. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics.* 1995;117:1–19. Available from: <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>.
  29. Murday JS. AMPTIAC Newsletter. 2002;6:5.
  30. Hocker S, Schmauder S, Kumar P. *Eur. Phys. J. B.* 2011;82:133–141. Available from: <https://doi.org/10.1140/epjb/e2011-20135-9>.