

О. Пальчековський¹, А. Орлов¹, Ю. Яворський¹, І. Круглов¹

Деформування розтягом багатошарових систем Ni/Ti: сукупний вплив періоду модуляції та швидкості деформації за результатами моделювання методом молекулярної динаміки

¹Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського, Київ, Україна, yu.yavorskyi@kpi.ua

Механічний відгук багатошарових систем Ni/Ti визначається взаємодією між деформаційними процесами, опосередкованими міжфазними межами, та структурними перетвореннями в окремих шарах. У цій роботі методом молекулярної динаміки досліджено деформацію розтягом планарних багатошарових систем Ni/Ti з періодами модуляції від 28,6 нм до 9,5 нм за швидкостей деформації від 10^8 c^{-1} до 10^{10} c^{-1} . Зменшення періоду модуляції знижує міцність при розтязі приблизно на 8% та суттєво змінює характер деформування після досягнення границі плинності, зокрема розподіл дислокаційної активності між шарами Ni і Ti, а також утворення та збереження деформаційно-індукованої ОЦК-фази Ti. Збільшення швидкості деформації має порівняно слабкий вплив на міцність при розтязі, проте систематично затримує структурні перетворення. Виражені дефекти пакування в Ni формуються за деформації ~8% при швидкості 10^8 c^{-1} , але лише за ~13 % при 10^{10} c^{-1} . За найвищої швидкості деформації перетворення ГЦП→ОЦК у Ti також затримується та відбувається більш різко, що призводить до формування дрібніших і більш дисперсно розподілених ОЦК-областей. Загалом результати показують, що період модуляції переважно визначає механізм деформування та розподіл пластичної деформації між окремими шарами, тоді як швидкість деформації переважно контролює початок і кінетику деформаційних процесів.

Ключові слова: Молекулярна динаміка, періоди модуляції, одновісний розтяг, механічні властивості, багатошарові системи Ni/Ti, густина дислокацій.

Подано до редакції 26.04.2026 р.; прийнято до друку 20.09.2026 р.; опубліковано 30.09.2026 р.

Вступ

Багатошарові системи Ni/Ti становлять значний технологічний і фундаментальний інтерес. Вони є зручною вихідною архітектурою для формування функціональних тонких плівок NiTi, що використовуються в мікро/наноселектромеханічних (MEMS/NEMS) актуаторах, сенсорах, мікроклапанах, мікронасосах та інших подібних пристроях [1]. Багатошарова архітектура дає змогу контролювати хімічний склад шляхом варіювання товщини окремих шарів Ni і Ti з подальшою термічно активованою взаємною дифузією та утворенням інтерметалідних фаз [2–4]. Водночас значна від'ємна вільна енергія Гіббса змішування та асиметрична атомна рухливість

Ni і Ti сприяють перемішуванню на міжфазних межах і твердофазній аморфізації, ступінь яких суттєво залежить від періоду модуляції та густини міжфазних меж [5–8].

Для практичного застосування в MEMS/NEMS не менш важливою є механічна стабільність таких систем. Тонкоплівкові актуатори та сенсори працюють в умовах циклічних або короточасних механічних навантажень, при цьому плівки TiNi здатні генерувати значні оборотні деформації та напруження, зумовлені фазовими перетвореннями [1]. Тому їхні функціональні характеристики та надійність значною мірою залежать від опору втомі та стабільності механізмів деформування. У нанорозмірних багатошарових системах ці

властивості визначаються не лише власним механічним відгуком окремих металевих компонентів, а й дислокаційними процесами, опосередкованими міжфазними межами, та деформаційно-індукованими структурними перетвореннями.

Безпосереднє експериментальне спостереження цих процесів на атомарному рівні є складним, особливо в межах окремих шарів нанометрової товщини. Тому моделювання методом молекулярної динаміки (МД) є ефективним комплементарним підходом, що дає змогу безпосередньо аналізувати локальну деформацію, дислокаційну активність і фазові перетворення в процесі деформування. Атомістичні дослідження металевих багатошарових систем продемонстрували значну залежність їхнього механічного відгуку від структури міжфазних меж, характерної товщини шарів та умов навантаження. У багатошарових системах Cu/Ta було встановлено, що зміни періоду модуляції та структури міжфазних меж впливають на зародження і поширення дислокацій та відповідний механічний відгук при розтязі [9], тоді як моделювання за різних швидкостей деформації виявило відповідні зміни діаграм «напруження–деформація», еволюції дислокацій і структурних перетворень [10]. У багатошарових системах Ni/Co вплив товщини шарів і швидкості деформації був пов'язаний зі змінами дислокаційної активності, опосередкованої міжфазними межами, та утворенням дефектів пакування [11]. Для систем, що містять Ti, додатковим чинником є структурна нестабільність нанорозмірного Ti: зменшення товщини шару Ti може стабілізувати метастабільний Ti з об'ємноцентрованою кубічною (ОЦК) структурою в багатошарових системах Ti/V і Ti/Ta [12–13], тоді як моделювання Ti з гексагональною щільнопакованою (ГЦП) структурою продемонструвало деформаційно-індуковані перетворення за участю проміжних ОЦК-конфігурацій [14]. Дослідження багатошарових нанодротів Ti/Ni також показало, що товщина шарів і швидкість деформації можуть спільно впливати на міцність при розтязі та домінуючі механізми деформування [15]. Однак значно менше відомо про взаємодію цих двох чинників у планарних багатошарових системах Ni/Ti, де деформування визначається відгуком окремих шарів Ni і Ti та міжфазних меж між ними, а не вираженим впливом вільної поверхні, притаманним нанодротам. Зокрема, залишається нез'ясованим, як зміни періоду модуляції та швидкості деформації впливають на співвідношення між дислокаційно-опосередкованою пластичною деформацією та деформаційно-індукованими структурними перетвореннями і, відповідно, на загальний механічний відгук багатошарової системи.

У цій роботі для систематичного дослідження спільного впливу періоду модуляції та швидкості деформації на деформування розтягом планарних багатошарових систем Ni/Ti використано моделювання методом МД, виконане за допомогою програмного пакета Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS). Досліджено три періоди модуляції в діапазоні швидкостей

деформації від 10^8 c^{-1} до 10^{10} c^{-1} . Механічний відгук зіставлено зі структурною еволюцією на атомарному рівні, фазовими частками, локальною зсувною деформацією за фон Мізесом та густиною дислокацій, визначеною окремо для кожного шару, щоб встановити, як густина міжфазних меж і швидкість навантаження визначають фазові перетворення, локалізацію деформації та розподіл пластичної деформації між шарами Ni і Ti.

І. Методологія моделювання

Початкові атомістичні моделі багатошарових плівок Ni/Ti було побудовано за допомогою програмного засобу Atomsk [16] (рис. 1). Міжфазні межі формували шляхом сполучення щільнопакованих площин обох фаз уздовж осі z (напряму росту плівки), а саме ГЦК Ni(111) та ГЦП Ti(0001). Кристалографічні орієнтації в площині плівки було узгоджено як Ni[110] $\parallel$ Ti[2110] уздовж осі x та Ni[112] $\parallel$ Ti[0110] уздовж осі y відповідно до класичного орієнтаційного співвідношення для систем ГЦК/ГЦП. Для мінімізації початкових штучних деформацій структурної невідповідності на міжфазних межах було побудовано співмірні суперкомірки шляхом узгодження 120 та 101 елементарних комірок Ni і Ti уздовж осі x та 7 і 6 елементарних комірок уздовж осі y відповідно. Загальні розміри розрахункових областей становили приблизно $30 \text{ nm} \times 3 \text{ nm} \times 28,6 \text{ nm}$.

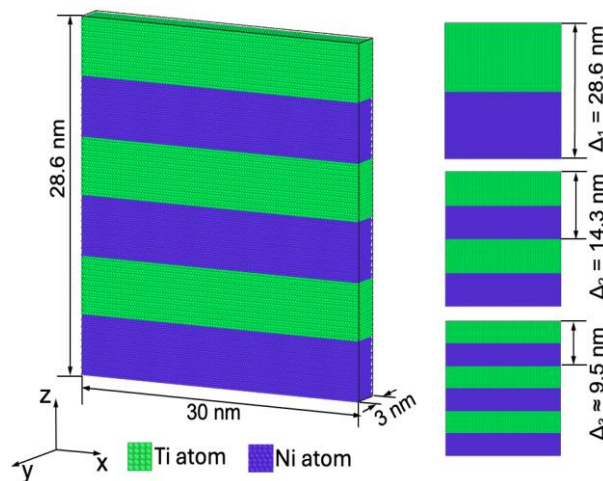


Рис. 1. Розрахункові моделі багатошарових плівок Ni/Ti з різними періодами модуляції Δ : 28,6 нм, 14,3 нм та 9,5 нм.

Для систематичного дослідження впливу густини міжфазних меж було створено три конфігурації: двошарову, чотиришарову та шестишарову плівки. У всіх моделях загальна товщина залишалася сталою та становила 28,6 нм, а кількість атомів – 193 680. Відповідні періоди модуляції (Δ), визначені як товщина одного бішару Ni/Ti, становили $\Delta_1 = 28,6 \text{ nm}$ (двошарова система), $\Delta_2 = 14,3 \text{ nm}$ (чотиришарова система) та $\Delta_3 = 9,5 \text{ nm}$ (шестишарова система).

Усі розрахунки методом молекулярної динаміки (МД) виконували за допомогою програмного пакета з

відкритим вихідним кодом LAMMPS [17]. Міжатомні взаємодії в системі Ni-Ti описували за допомогою потенціалу модифікованого методу зануреного атома з урахуванням других найближчих сусідів (2NN-MEAM), розробленого Kim et al. [18]. Цей потенціал було обрано завдяки його підтвердженій точності у відтворенні структурних, пружних і термодинамічних властивостей системи Ni-Ti, а також здатності коректно описувати фазову стабільність за скінченних температур.

Оскільки об'єктом дослідження є вільна тонка плівка, періодичні граничні умови задавали вздовж напрямків x та y у площині плівки, тоді як уздовж осі z (напрямку росту плівки) застосовували неперіодичні граничні умови зі стягуванням розрахункової комірки (shrink-wrapped). Перед механічними випробуваннями кожна модель проходила процедуру врівноваження для релаксації початкових деформацій структурної невідповідності на міжфазних межах та досягнення стабільного термодинамічного стану. Спочатку виконували статичну мінімізацію енергії за допомогою алгоритму спряжених градієнтів. Після цього проводили динамічне врівноваження зразка протягом 100 пс за температури 300 K в ізотермічно-ізобаричному NPT ансамблі. Під час цієї стадії релаксації баростат тиску Нозе-Гувера налаштовували для підтримання нульового тиску в обох періодичних напрямках у площині плівки (вздовж осей x та y). Крок за часом для всіх динамічних розрахунків становив 2 фс [10–11, 19].

Після врівноваження моделювали випробування на одновісний розтяг шляхом прикладання неперервної афінної деформації вздовж осі x зі сталими швидкостями деформації 10^8 s^{-1} , $5 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$, 10^9 s^{-1} , $5 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$ та 10^{10} s^{-1} . Під час розтягу підтримували NPT-ансамбль за температури 300 K, однак баростат тиску був пов'язаний виключно з поперечною віссю y для підтримання нульового напруження, що забезпечувало коректне врахування ефекту Пуассона, тоді як уздовж осі z плівка вільно деформувалася у вакуумі. Інженерну деформацію розраховували як $\Delta L_x/L_{x0}$, а відповідне інженерне напруження визначали безпосередньо за компонентою глобального тензора тиску P_{xx} , яка враховує фактичний об'єм плівки завдяки щільному стягуванню меж розрахункової комірки вздовж осі z .

Для візуалізації еволюції атомної структури та

аналізу механізмів деформування використовували програмне забезпечення OVITO [20]. Локальну кристалічну структуру та фазові перетворення на міжфазних межах ідентифікували за допомогою методу аналізу спільних сусідів (Common Neighbor Analysis, CNA), тоді як алгоритм виділення дислокацій (Dislocation Extraction Algorithm, DXA) застосовували для визначення густини дислокацій у процесі деформування розтягом.

II. Результати та обговорення

На рис. 2 узагальнено результати дослідження деформування розтягом багатопшарових систем Ni/Ti з різними періодами модуляції за швидкості деформації 10^9 s^{-1} . На рис. 2(a) наведено відповідні діаграми «напруження–деформація», які мають подібний характер і можуть бути розділені на три характерні стадії: пружна деформація (стадія I), різке зниження напруження (стадія II) та деформування після досягнення границі плинності (стадія III).

На стадії I напруження зростає приблизно лінійно зі збільшенням деформації та досягає максимального значення за деформації близько 0,08. Модуль Юнга, визначений за лінійною ділянкою діаграм «напруження–деформація», практично не залежить від періоду модуляції та становить $140 \pm 4 \text{ ГПа}$. Після досягнення максимального значення напруження різко знижується на стадії II. На стадії III напруження частково відновлюється, після чого зі збільшенням деформації спостерігаються його флуктуації. Як показано на рис. 2(b), міцність при розтязі (визначена як максимальне напруження, досягнуте на стадії I) зменшується зі зменшенням періоду модуляції: від приблизно 10,28 ГПа для Δ_1 до 9,76 ГПа для Δ_2 та 9,49 ГПа для Δ_3 . Таким чином, зменшення періоду модуляції від 28,6 нм (Δ_1) до 9,5 нм (Δ_2) призводить до зниження міцності при розтязі приблизно на 7,7%.

На рис. 3 показано структурну еволюцію багатопшарових систем Ni/Ti з різними періодами модуляції Δ за вибраних значень деформації, що відповідають характерним ділянкам діаграм «напруження–деформація» на рис. 2(a). За деформації 6% (стадія I) вихідні ГЦП-структура Ti та ГЦК-структура Ni переважно зберігаються для

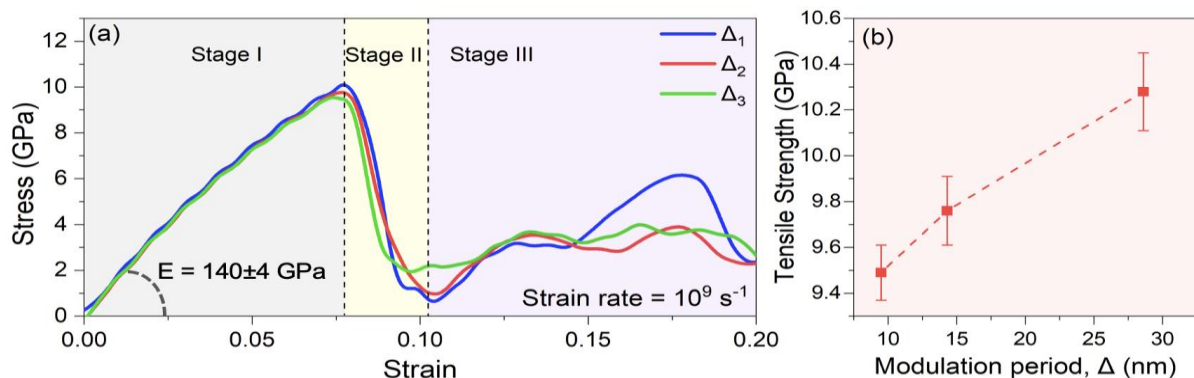


Рис. 2. (a) Діаграми «напруження–деформація» для багатопшарових систем Ni/Ti за швидкості деформації 10^9 s^{-1} ; (b) залежність міцності при розтязі від періоду модуляції.

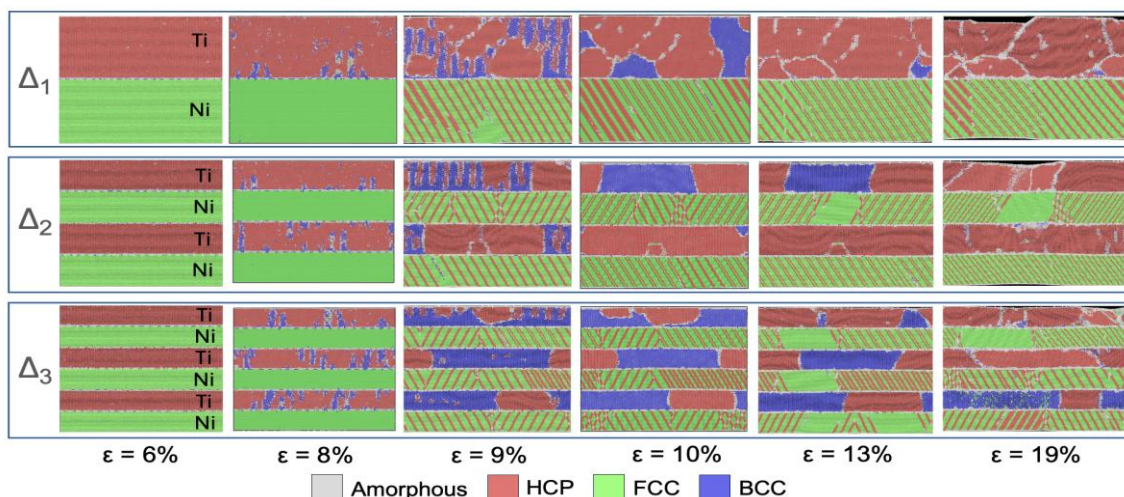


Рис. 3. Структурна еволюція багатошарових систем Ni/Ti за деформацій розтягу 6%, 8%, 9%, 10%, 13% та 19% за швидкості деформації 10^9 s^{-1} .

всіх трьох періодів модуляції. Початок структурних перетворень спостерігається за деформації 8%, безпосередньо після переходу від *стадії I* до *стадії II*, коли в початково ГЦП-шарах Ti з'являються ОЦК-області, а в початково ГЦК-шарах Ni – ГЦП-області. За деформації 9% ці перетворення стають вираженими: у Ti формуються значні ОЦК-області, а в ГЦК-шарах Ni – нахилені дефекти пакування. За подальшого деформування структурна еволюція дедалі більше залежить від періоду модуляції. Для Δ_1 шари Ti залишаються переважно ГЦП, а ОЦК-області виникають лише локально, тоді як зменшення Δ сприяє формуванню більш протяжних і стабільних ОЦК-областей, особливо для Δ_3 . Ця відмінність зберігається і за більших деформацій: за 19% шари Ti мають переважно ГЦП-структуру для Δ_1 і Δ_2 , тоді як для Δ_3 зберігаються значні ОЦК-області. Така поведінка може бути пов'язана зі зростанням внеску міжфазних меж за менших періодів модуляції, оскільки було показано, що зменшення товщини шару Ti сприяє стабілізації метастабільного Ti з ОЦК-структурою в нанорозмірних багатошарових системах [12–13], тоді як деформаційно-індукований ОЦК-Ti за подальшого деформування може зворотно перетворюватися на ГЦП-Ti [14]. На відміну від Ti, шари Ni демонструють загалом подібну структурну еволюцію для всіх трьох періодів модуляції, що характеризується співіснуванням ГЦК- та деформаційно-індукованих ГЦП-областей на більш пізніх стадіях деформування. Окрім цих структурних перетворень, за деформації 19% у верхньому шарі Ni для Δ_1 формується виражена поверхнева сходи́нка, що свідчить про локалізовану пластичну деформацію, яка виходить на вільну поверхню.

Кількісну оцінку цих структурних перетворень наведено у вигляді залежностей часток ГЦК-, ГЦП-, ОЦК- та аморфної фаз від деформації розтягу (рис. 4). Для всіх періодів модуляції частки фаз поступово змінюються на початковій стадії навантаження, після чого за деформації приблизно 8–9% відбувається їх суттєвий перерозподіл, що збігається з різким зниженням напруження на *стадії II* (рис. 2(a)). Для Δ_1 частка ОЦК-фази різко зростає приблизно до 25% за

деформації ~9%, а потім поступово зменшується, наближаючись до нуля за ~13%, тоді як частка ГЦП-фази одночасно зростає до понад 40%. Для Δ_2 частка ОЦК-фази досягає значно меншого максимального значення – приблизно 12% – і залишається нижчою за 10% упродовж більшої частини подальшого діапазону деформацій, після чого зникає за ~16%. Інший характер еволюції спостерігається для Δ_3 , де частка ОЦК-фази швидко зростає приблизно до 30% за деформації ~9% і залишається близькою до цього рівня до ~13%, після чого поступово зменшується майже до нуля за ~17%. Це зменшення супроводжується вираженим відновленням частки ГЦП-фази, що узгоджується зі структурним перетворенням ОЦК→ГЦП, яке спостерігається в атомістичних конфігураціях. Частка аморфної фази також змінюється в процесі деформування та для Δ_3 є систематично вищою впродовж більшої частини дослідженого діапазону деформацій, досягаючи приблизно 20–25% перед початком *стадії II* та залишаючись вищою за ~15% за більших деформацій. Таким чином, кількісний фазовий аналіз виявляє різні шляхи структурних перетворень для трьох періодів модуляції, особливо щодо величини та тривалості збереження деформаційно-індукованої ОЦК-фази, а також частки структурно неупорядкованих атомів.

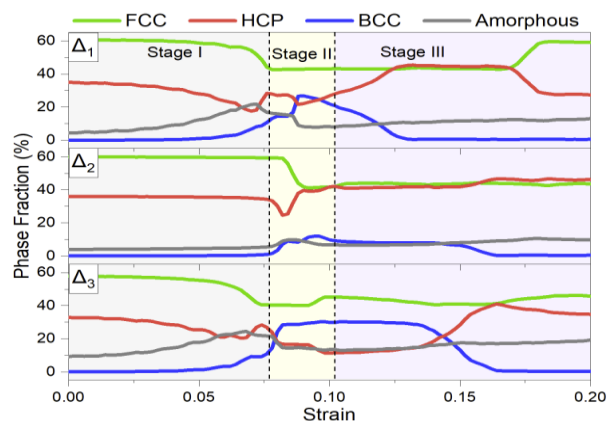


Рис. 4. Зміна часток атомів із різною локальною структурою (ГЦК, ГЦП, ОЦК та аморфною) залежно від деформації розтягу багатошарових систем Ni/Ti.

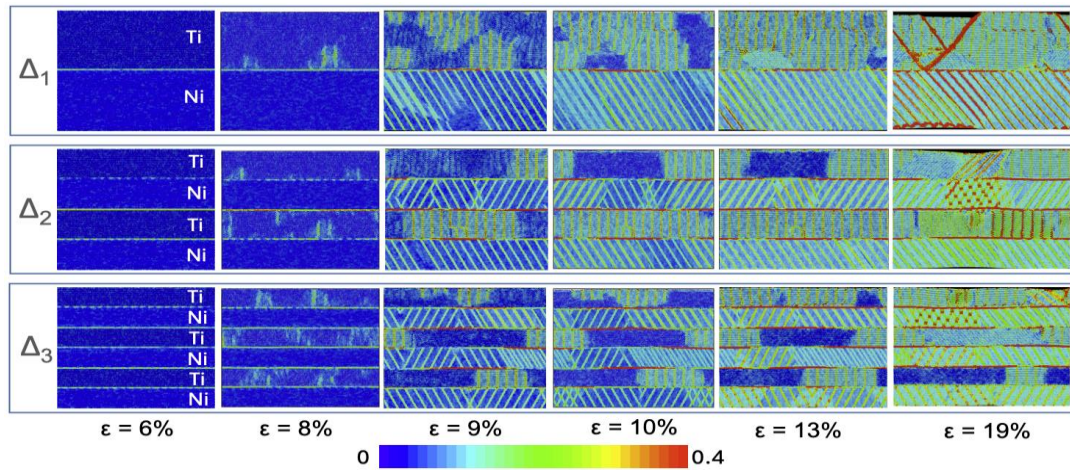


Рис. 5. Розподіл локальної зсувної деформації за фон Мізесом у багатошарових системах Ni/Ti за деформацій розтягу 6%, 8%, 9%, 10%, 13% та 19% за швидкості деформації 10^9 c^{-1} .

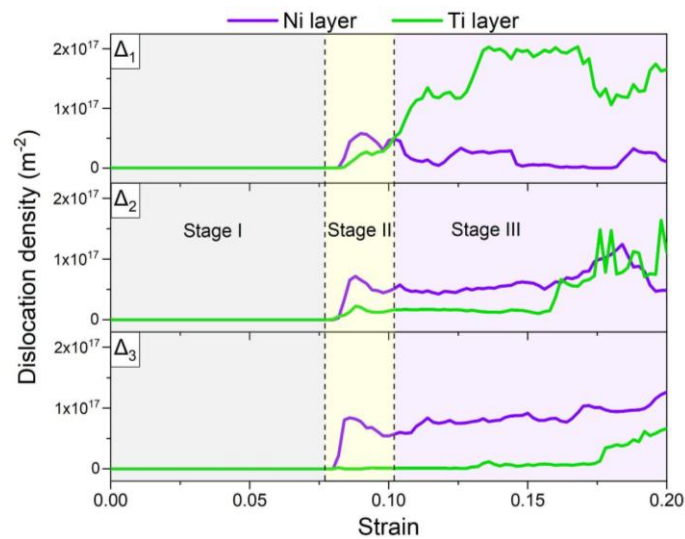


Рис. 6. Залежність густини дислокацій від деформації в окремих шарах Ni і Ti багатошарових систем Ni/Ti за швидкості деформації 10^9 c^{-1} .

Просторовий розподіл локальної зсувної деформації за фон Мізесом дає змогу детальніше проаналізувати механізми деформування, що лежать в основі описаних вище структурних змін (рис. 5). За деформації 6% локальна зсувна деформація залишається відносно низькою у внутрішніх областях шарів Ni і Ti ($\sim 0,02\text{--}0,04$), тоді як поблизу міжфазних меж Ni/Ti вже спостерігаються області підвищеної деформації ($\sim 0,06\text{--}0,08$). За деформації 8% локалізація деформації стає більш вираженою, при цьому локальна зсувна деформація досягає $\sim 0,10\text{--}0,15$ в областях, що поширюються від міжфазних меж у прилеглі шари. За деформації 9–10% у шарах Ni формуються нахилені смуги з локальною зсувною деформацією $\sim 0,15\text{--}0,25$, просторове розташування яких корелює з дефектами пакування, виявленими за результатами структурного аналізу (рис. 3). Подібну поведінку було описано для багатошарових систем Ni/Co, в яких дефекти пакування зароджувалися на міжфазних межах і надалі поширювалися в шари Ni [11]. За подальшого деформування локалізовані області з високими значеннями деформації поширюються через шари Ni і Ti, що призводить до дедалі більш неоднорідного розподілу деформації.

Вплив періоду модуляції стає особливо вираженим за більших деформацій. За деформації 19% для Δ_1 спостерігається виражена локалізація деформації в декількох інтенсивних смугах, що проходять через багатошарову систему, узгоджуючись із поверхневою сходиною, виявленою у відповідній атомістичній конфігурації, тоді як для Δ_2 і Δ_3 спостерігається більша кількість локалізованих областей із високими значеннями деформації, розподілених по всій багатошаровій системі. Загалом карти деформації свідчать, що міжфазні межі Ni/Ti є переважними областями розвитку локальної деформації, а подальший характер її локалізації залежить від періоду модуляції.

Для детальнішого з'ясування механізмів, що лежать в основі локалізації деформації, показаної на рис. 5, еволюцію густини дислокацій окремо проаналізовано в шарах Ni і Ti (рис. 6).

На *стадії I* для всіх трьох періодів модуляції помітна дислокаційна активність не спостерігається в жодному з компонентів. На початку *стадії II* густина дислокацій у шарах Ni різко зростає для всіх трьох значень Δ , досягаючи значень, приблизно у 3–5 разів вищих, ніж у шарах Ti. Початок цього зростання

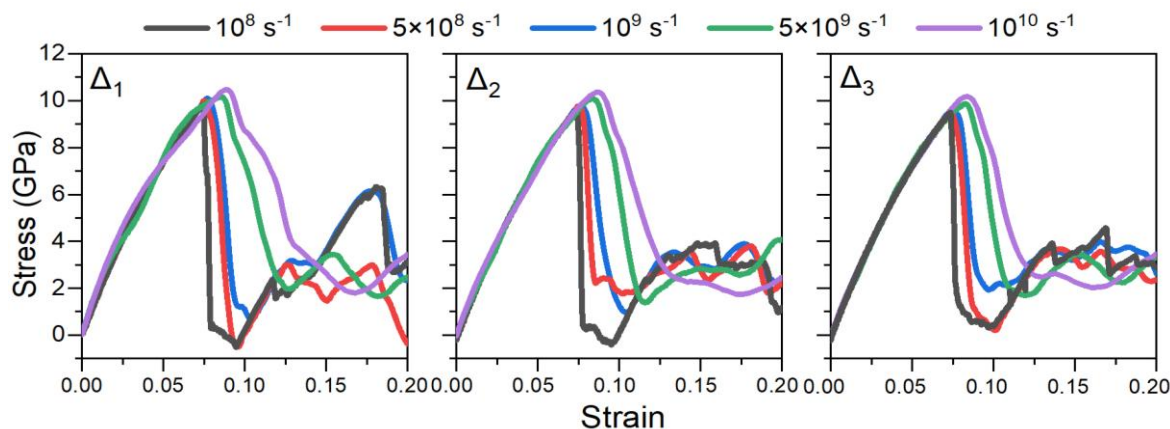


Рис. 7. Діаграми «напруження–деформація» багат шарових систем Ni/Ti за різних швидкостей деформації.

збігається з формуванням нахилених дефектів пакування в Ni (рис. 3) та відповідних областей підвищеної локальної зсувної деформації (рис. 5), що свідчить про те, що початковий пластичний відгук переважно пов'язаний із дислокаційною активністю в шарах Ni. На стадії III еволюція густини дислокацій суттєво відрізняється для трьох періодів модуляції. Для Δ_1 густина дислокацій у Ni зменшується від початкового максимального значення $\sim 4 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-2}$, тоді як у Ti вона швидко зростає і протягом більшої частини стадії III залишається приблизно у 3–4 рази вищою, ніж у Ni. Для Δ_2 густини дислокацій у Ni і Ti залишаються порівнянними протягом першої частини стадії III, після чого за деформації понад $\sim 0,16$ одночасно зростають, досягаючи значень, приблизно у 2–3 рази вищих, ніж на початку цієї стадії. На відміну від цього, для Δ_3 густина дислокацій у Ni протягом більшої частини стадії III залишається на рівні приблизно $2\text{--}4 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-2}$, тоді як дислокаційна активність у Ti значно пригнічена і до деформації $\sim 0,17$ залишається щонайменше приблизно у 3 рази нижчою, після чого за більших деформацій різко зростає.

Таким чином, аналіз дислокацій виявляє залежний від періоду модуляції розподіл пластичної деформації між окремими шарами: для Δ_1 дислокаційна активність переважає в Ti, для Δ_2 за великих деформацій значну роль відіграють обидва компоненти, а для Δ_3 протягом більшої частини стадії III основна дислокаційна активність зосереджена в Ni. Такий перерозподіл може бути пов'язаний із подвійною роллю міжфазних меж як переважних місць зародження дислокацій та бар'єрів для їх поширення, тоді як зміни товщини шарів і відстані між міжфазними межами впливають на дислокаційну активність та відносний внесок окремих шарів у пластичну деформацію [9; 11].

Після встановлення відмінностей у механізмах деформування, пов'язаних із періодом модуляції, за швидкості деформації 10^9 с^{-1} далі розглянуто, як змінюється механічний відгук багат шарових систем Ni/Ti у ширшому діапазоні швидкостей деформації (рис. 7). Для всіх трьох періодів модуляції початкові ділянки діаграм «напруження–деформація» залишаються подібними в дослідженому діапазоні

швидкостей деформації, тоді як максимальне напруження при розтязі лише помірно зростає зі збільшенням швидкості деформації (від $\sim 9,5\text{--}9,9 \text{ ГПа}$ за 10^8 с^{-1} до $\sim 10,2\text{--}10,5 \text{ ГПа}$ за 10^{10} с^{-1}). Значно сильніша залежність від швидкості деформації спостерігається для положення максимуму напруження та подальшого різкого його зниження, які зі збільшенням швидкості деформації від 10^8 с^{-1} до 10^{10} с^{-1} систематично зміщуються в область більших деформацій. За швидкості деформації 10^8 с^{-1} під час стадії швидкої релаксації напруження для всіх трьох значень Δ знижується до значень, близьких до нуля; однак глибина мінімуму напруження не демонструє простої монотонної залежності від швидкості деформації. Основним ефектом збільшення швидкості деформації є зміщення максимуму напруження та подальше різке його зниження в область більших деформацій. Натомість міцність при розтязі змінюється лише помірно, а в області після досягнення границі плинності чіткої залежності від швидкості деформації не спостерігається.

Для оцінювання впливу швидкості деформації на структурну еволюцію результати для двох граничних швидкостей деформації – 10^8 с^{-1} та 10^{10} с^{-1} – порівняно з результатами, отриманими за 10^9 с^{-1} (рис. 3). За швидкості деформації 10^8 с^{-1} (рис. 8) структурні перетворення стають більш розвиненими вже на ранній стадії деформування. За деформації 8% ОЦК-області в шарах Ti уже добре сформовані, тоді як за 10^9 с^{-1} (рис. 3) спостерігається лише початкове формування цієї фази. Ще виразніший вплив швидкості деформації спостерігається в Ni: за швидкості 10^8 с^{-1} дефекти пакування вже чітко виражені за деформації 8%, тоді як за 10^9 с^{-1} вони стають чітко сформованими лише за деформації $\sim 9\%$. За більших деформацій (13–19%) вплив періоду модуляції має такий самий загальний характер, як і за 10^9 с^{-1} : ОЦК-Ti значною мірою заміщується ГЦП-Ti для Δ_1 і Δ_2 , тоді як для Δ_3 значні ОЦК-області зберігаються до деформації 19%.

За найвищої швидкості деформації 10^{10} с^{-1} (рис. 9) структурні перетворення помітно затримуються порівняно з нижчими швидкостями (рис. 8, рис. 3). Шари Ni залишаються переважно ГЦК до деформації $\sim 10\%$, а виражені дефекти пакування з'являються

лише за $\sim 13\%$ порівняно з $\sim 8\%$ за швидкості 10^8 c^{-1} (рис. 8) та $\sim 9\%$ за 10^9 c^{-1} (рис. 3). Подібна затримка спостерігається і в Ti: ГЦП-структура залишається домінуючою до більших значень деформації, після чого відбувається різке перетворення ГЦП $\rightarrow$ ОЦК, унаслідок якого ОЦК-області швидко займають значну частину шарів Ti. Слід зазначити, що ці ОЦК-області є значно дрібнішими та більш дисперсно розподіленими, ніж ті, що формуються за нижчих швидкостей деформації, що свідчить про інтенсивне зародкоутворення за обмеженого подальшого росту. Така затримка, зумовлена швидкістю деформації, узгоджується з попередніми МД-дослідженнями багатошарових систем Ni/Co та Cu/Ta, у яких збільшення швидкості деформації зміщувало початок дислокаційних процесів і фазових перетворень в область більших деформацій та скорочувало час, доступний для атомних перебудов і релаксації напружень [10–11]. Таким чином, за швидкості 10^{10} c^{-1} деформування наближається до режиму надвисоких швидкостей, у якому структурна релаксація суттєво обмежена, що призводить до затриманого, але більш різкого перетворення та

формування високодисперсної ОЦК-структури Ti.

Загалом, отримані результати демонструють виражену чутливість характеру деформування багатошарових систем Ni/Ti як до періоду модуляції, так і до швидкості деформації. Період модуляції впливає на розподіл пластичної деформації між окремими шарами та стабільність деформаційно-індукованого ОЦК-Ti, тоді як збільшення швидкості деформації затримує структурні перетворення, а за найвищої швидкості змінює їх характер у напрямку більш різкого та просторово дисперсного відгуку. Порівняння з попередніми атомістичними дослідженнями показує, що такі ефекти значною мірою залежать від конкретної системи матеріалів. Затримку початку дефектоутворення зі збільшенням швидкості деформації також було виявлено для багатошарових систем Ni/Co та Cu/Ta [10–11]; однак подальший відгук варіюється від суттєвих змін еволюції дефектів і механізмів деформування [10; 15] до механізмів деформування, які залишаються переважно незмінними в тому самому діапазоні швидкостей деформації [21]. Аналогічно, попередні дослідження показали, що зміни періоду модуляції

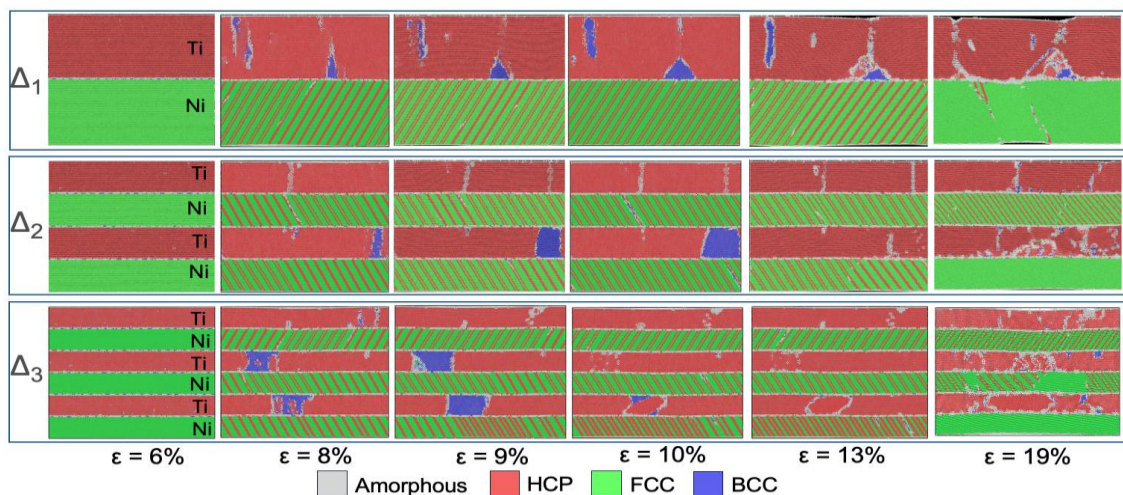


Рис. 8. Структурна еволюція багатошарових плівок Ni/Ti з різними значеннями Δ за деформацій розтягу 6%, 9%, 13% та 19% за швидкості деформації 10^8 c^{-1} .

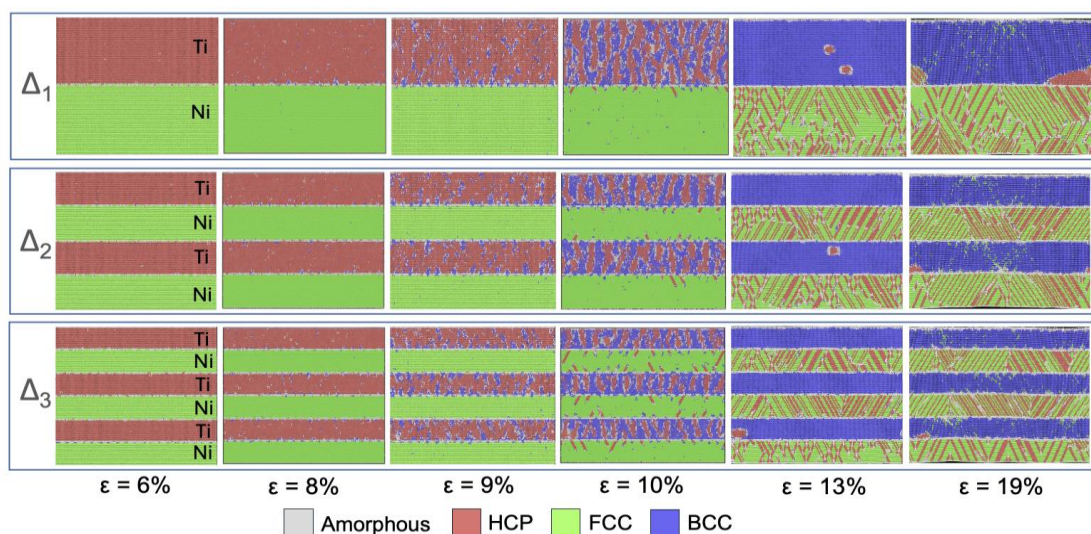


Рис. 9. Структурна еволюція багатошарових плівок Ni/Ti з різними значеннями Δ за деформацій розтягу 6%, 9%, 13% та 19% за швидкості деформації 10^{10} c^{-1} .

або товщини шарів можуть суттєво змінювати механічний відгук і механізми деформування металевих багатошарових систем [9; 11]. Ці відмінності свідчать про те, що вплив архітектури багатошарової системи та швидкості навантаження не можна узагальнювати для різних систем матеріалів і його необхідно встановлювати окремо для кожної конкретної багатошарової системи.

Висновки

Моделювання методом молекулярної динаміки виявило різний вплив періоду модуляції та швидкості деформації на деформування розтягом планарних багатошарових систем Ni/Ti. Зменшення періоду модуляції від 28,6 нм до 9,5 нм майже не впливає на модуль Юнга (140 ± 4 ГПа), проте знижує міцність при розтязі від $\sim 10,28$ ГПа до $\sim 9,49$ ГПа. Пластична деформація супроводжується утворенням дефектів пакування в ГЦК-Ni та деформаційно-індукованим перетворенням ГЦП→ОЦК у Ti. Зменшення періоду модуляції сприяє формуванню та збереженню ОЦК-Ti і змінює розподіл дислокаційної активності між окремими шарами: за найбільшого періоду модуляції протягом більшої частини деформування після досягнення границі плинності дислокаційна активність переважає в Ti, тоді як за найменшого періоду основна дислокаційна активність зосереджена

в Ni. Збільшення швидкості деформації від 10^8 с⁻¹ до 10^{10} с⁻¹ призводить лише до помірного зростання міцності при розтязі (від $\sim 9,5$ ГПа до $\sim 10,5$ ГПа), проте систематично затримує структурні перетворення. Виражені дефекти пакування в Ni формуються за деформацій $\sim 8\%$, $\sim 9\%$ та $\sim 13\%$ за швидкостей деформації 10^8 с⁻¹, 10^9 с⁻¹ та 10^{10} с⁻¹ відповідно. За швидкості 10^8 с⁻¹ перетворення ГЦП→ОЦК у Ti також затримується та стає більш різким, що призводить до формування дрібніших і більш дисперсно розподілених ОЦК-областей. Таким чином, у багатошарових системах Ni/Ti період модуляції переважно визначає механізм деформування та розподіл пластичної деформації між окремими шарами, тоді як швидкість деформації переважно контролює початок і кінетику цих деформаційних процесів.

Acknowledgments

Ця робота була підтримана Міністерством освіти і науки України (проект № 0124U001266).

Пальчєковський О. – магістрант;
Орлов А. – кандидат наук, доцент;
Яворський Ю. – кандидат наук, доцент;
Круглов І. – кандидат наук, доцент.

- [1] Y. Fu et al., *TiNi-based thin films in MEMS applications: a review*, Sensors and Actuators A: Physical, 112, 395 (2004); <https://doi.org/10.1016/j.sna.2004.02.019>.
- [2] T. Lehnert et al., *A new fabrication process for Ni–Ti shape memory thin films*, Materials Science and Engineering: A, 273, 713 (1999); [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(99\)00402-5](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(99)00402-5).
- [3] H. Cho et al., *Fabrication and characterization of Ti–Ni shape memory thin film using Ti/Ni multilayer technique*, Science and Technology of Advanced Materials, 6(6), 678 (2005); <https://doi.org/10.1016/j.stam.2005.05.006>.
- [4] I. Kruhlov et al., *Structural phase transitions in Ni/Ag/Ti and Ni/Cu/Ti tri-layered thin films*, Vacuum, 233, 11399 (2025); <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2024.113999>.
- [5] M.A. Hollanders et al., *Amorphization along interfaces and grain boundaries in polycrystalline multilayers: an X-ray-diffraction study of Ni/Ti multilayers*, Physical Review B, 42(9), 5481 (1990); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.42.5481>.
- [6] O. Palchekovskyi et al., *The effect of Ni/Ti layered stack thickness on the interface amorphization behavior*, Physica Scripta, 100, 075994 (2025); <https://doi.org/10.1088/1402-4896/adeafb>.
- [7] A. Biswas et al., *Early recrystallization of Ni/Ti multilayer due to disorder in the Ni layer*, Journal of Applied Physics, 127, 165304 (2020); <https://doi.org/10.1063/5.0008177>.
- [8] S. I. Konorev et al., *Molecular Dynamics Study Of The Interface Amorphization In Ni/Ti Bi-Layered System*, 2024 IEEE 42nd International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO) (2024); <https://doi.org/10.1109/ELNANO63394.2024.10756916>.
- [9] L. Lu et al., *Molecular dynamics simulation of effects of interface imperfections and modulation periods on Cu/Ta multilayers*, Computational Materials Science, 143, 63 (2018); <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.10.034>.
- [10] A.-S. Tran, *Phase transformation and interface fracture of Cu/Ta multilayers: A molecular dynamics study*, Engineering Fracture Mechanics, 239, 107292 (2020); <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2020.107292>.
- [11] T.-N. Vu et al., *Interfacial strength and deformation mechanism of Ni/Co multilayers under uniaxial tension using molecular dynamics simulation*, Materials Today Communications, 30, 103088 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2021.103088>.
- [12] L. Wan et al., *BCC stabilization and growth stress behavior in Ti/V multilayers*, Thin Solid Films, 616, 555 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2016.09.017>.
- [13] Z.Q. Hou et al., *Phase transformation-induced strength softening in Ti/Ta nanostructured multilayers: Coherent interface vs phase boundary*, Materials Science and Engineering: A, 684, 78 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.msea.2016.12.040>.

- [14] H. Zhang et al., *Strain direction dependency of deformation mechanisms in an HCP-Ti crystalline by molecular dynamics simulations*, Computational Materials Science, 172, 109328 (2020); <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109328>.
- [15] M.-J. Su et al., *Molecular dynamics study of coupled layer thickness and strain rate effect on tensile behaviors of Ti/Ni multilayered nanowires*, Chinese Physics B, 30, 096201 (2021); <https://doi.org/10.1088/1674-1056/abf10a>.
- [16] P. Hirel, *Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files*, Computer Physics Communications, 197, 212 (2015); <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.07.012>.
- [17] S. Plimpton, *Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics*, Journal of computational physics, 117(1), 1 (1995); <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>.
- [18] Y.-K. Kim et al., *Development and application of Ni-Ti and Ni-Al-Ti 2NN-MEAM interatomic potentials for Ni-base superalloys*, Computational Materials Science, 139, 225 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.08.002>.
- [19] B. Liu et al., *Molecular dynamics simulation of the porosity effect on transformation mechanism of nanocrystalline porous NiTi shape memory alloy*, Materials Today Communications, 34, 105320 (2023); <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.105320>.
- [20] A. Stukowski, *Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool*, Modelling and simulation in materials science and engineering, 18(1), 015012 (2010); <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>.
- [21] Y. Zhang et al., *Tensile and compressive behavior of TiN/Cu layered composites: A molecular dynamics study*, Computational Materials Science, 271, 114817 (2026); <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2026.114817>.

O. Palchekovskyi, A. Orlov, Yu. Yavorskyi, I. Kruhlov

Tensile Deformation of Ni/Ti Multilayers: Coupled Effects of Modulation Period and Strain Rate from Molecular Dynamics Simulations

National Technical University of Ukraine “Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute”, Kyiv, Ukraine, yu.yavorskyi@kpi.ua

The mechanical response of Ni/Ti multilayers is governed by the interplay between interface-mediated deformation and structural transformations in the constituent layers. Here, molecular dynamics simulations are used to investigate the tensile deformation of planar Ni/Ti multilayers with modulation periods of 28.6 nm – 9.5 nm over strain rates of 10^8 s^{-1} – 10^{10} s^{-1} . Decreasing the modulation period reduces the tensile strength by ~8% and substantially modifies the post-yield deformation, including the partitioning of dislocation activity between the Ni and Ti layers and the formation and persistence of deformation-induced BCC Ti. Increasing the strain rate has a comparatively weak effect on tensile strength but systematically delays the structural transformations. Pronounced stacking faults in Ni develop at ~8% strain at 10^8 s^{-1} but only at ~13% at 10^{10} s^{-1} . At the highest strain rate, the HCP-to-BCC transformation in Ti is also delayed and becomes more abrupt, producing finer and more dispersed BCC regions. Overall, the results show that the modulation period primarily determines the deformation pathway and distribution of plasticity between the constituent layers, whereas the strain rate primarily controls the onset and kinetics of the deformation processes.

Keywords: Molecular Dynamics, Modulation Periods, Uniaxial Tension, Mechanical Properties, Ni/Ti Multilayers, Dislocation Density.