

文章编号: 1000-0887(2003) 10-1012-05

表面应力引起的弹性薄膜形状分叉

闫 琨¹, 何陵辉¹, 刘人怀²

(1. 中国科学技术大学 材料力学行为和设计重点实验室, 合肥 230027;
2. 暨南大学 应用力学研究所, 广州 510632)

(本刊编委刘人怀来稿)

摘要: 此工作致力于无约束各向同性弹性薄膜在表面应力发生变化时几何非线性变形分析。基于能量的考虑, 导出了曲率与表面应力变化量的关系。与有线弹性分析结果的显著区别是, 当薄膜很薄而上下表面应力差足够大时, 薄膜曲率的解不再唯一, 而会发生分叉。

关键词: 弹性薄膜; 曲率; 表面应力; 几何非线性

中图分类号: O344.3 **文献标识码:** A

引 言

表面应力与许多细观层次的材料现象有关因而被广泛研究^[1~5]。目前尽管用实验手段还无法测量出固体表面应力的绝对值, 但测量表面应力改变量的方法已经相对完备。无论薄膜是无约束还是一端夹持的, 当其上下表面之一的应力值由于物理或化学吸附等原因而产生改变时, 上下表面的应力差使得薄膜在弯矩的作用下变形弯曲。只要由弹性力学准确地给出曲率和表面应力变化量的关系式, 便能容易地将测得的曲率转换成要测的表面应力改变量。

关于表面应力导致的变形的最早的研究可以追溯到 Stoney^[6], 其研究对象是承受一维表面应力的弹性各向同性梁。此后人们研究了一些更为切合实际的问题, 如承受二维表面应力的无约束或一端夹持的板^[7~10]。然而它们所局限的仍然是小应变小变形情况。当板挠度大小与板厚度相当, 几何非线性的影响便凸现出来。此时, 小变形分析不仅会得到不正确的应力值, 也难以准确估测出薄膜形状。

本文致力于表面应力变化影响下无约束的弹性各向同性薄膜的几何非线性分析。基于能量最小化方法, 所得结果表明当表面应力较小而膜较厚时, 变形后的形状呈球面; 反之所得解会分叉, 存在 3 种可能的平衡状态: 一种不稳定的球面和两种稳定的椭球面。对不同的情况, 本文推导出了曲率与表面应力改变量之间的解析关系式。

1 运动学假设

考虑直角坐标系 (x_1, x_2, x_3) 中一块厚度为 h 的无约束矩形薄膜, 其中 x_1, x_2 面与薄膜中间层重合。薄膜沿 x_1 和 x_2 方向的侧边尺寸分别给定为 l_1 和 l_2 。为简化起见, 可假设薄膜为弹性各向同性。由此, 上下表面的表面应力也均为各向同性。假想薄膜表面应力为零, 则此无

收稿日期: 2002_08_05; 修订日期: 2003_05_13

作者简介: 闫琨(1979), 女, 湖北人, 硕士研究生(E-mail: kyan@mail.ustc.edu.cn)

应变的薄膜是平展的 我们选择这一状态作为薄膜的参考构型 当考虑到表面应力的影响时,薄膜仍然是平展的,这是由于其上下表面的应力完全相等 进一步地,当某些其他材料的原子或分子被吸附到其中一个表面上,此面上的表面应力势必改变,并造成薄膜的弯曲 这正是本文将要讨论的情况

用 $\bar{\sigma}_{ij}$ 和 $\bar{\epsilon}_{ij}$ 分别表示应力和应变,薄膜的应力-应变关系可表示为:

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{Y}{1+\nu} \left[\bar{\epsilon}_{ij} + \frac{\nu}{1-2\nu} \delta_{ij} \bar{\epsilon}_{kk} \right] + (\sigma_{i1} \delta_{j1} + \sigma_{i2} \delta_{j2}), \quad (1)$$

式中, $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i=j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$ δ_{ij} 为 Kronecker 记号, $\delta(x)$ 为 Dirac 点源函数, σ^+ 、 σ^- 分别为薄膜上下表面的表面应力,下标取值 1、2 或 3,重复的下标表示求和 在 Kirchhoff 几何非线性条件下^[11],应变分量与位移分量 u_i 的关系为:

$$\bar{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{u_i}{x_i} + \frac{u_j}{x_j} + \frac{u_3}{x_i} \frac{u_3}{x_j} \right] \quad (2)$$

由于薄膜厚度很小,因此其位移场可用 Kirchhoff 关系来近似描述^[11]:

$$u_1 = u_1^0 - x_3 \frac{w}{x_1}, \quad u_2 = u_2^0 - x_3 \frac{w}{x_2}, \quad u_3 = w, \quad (3)$$

u_1^0 和 u_2^0 为面内位移, w 为中面挠度 将(3)代入(2)可得到应变场得

$$\bar{\epsilon}_{11} = \frac{0}{11} - x_3 \frac{2w}{x_1^2}, \quad \bar{\epsilon}_{22} = \frac{0}{22} - x_3 \frac{2w}{x_2^2}, \quad \bar{\epsilon}_{12} = \frac{0}{12} - x_3 \frac{2w}{x_1 x_2}, \quad (4)$$

$\frac{0}{11}$, $\frac{0}{22}$ 和 $\frac{0}{12}$ 定义为:

$$\begin{cases} \frac{0}{11} = \frac{u_1^0}{x_1} + \frac{1}{2} \left(\frac{w}{x_1} \right)^2, & \frac{0}{22} = \frac{u_2^0}{x_2} + \frac{1}{2} \left(\frac{w}{x_2} \right)^2, \\ \frac{0}{12} = \frac{1}{2} \left[\frac{u_1^0}{x_2} + \frac{u_2^0}{x_1} + \frac{w}{x_1} \frac{w}{x_2} \right] \end{cases} \quad (5)$$

考虑到薄膜关于 x_1 和 x_2 轴的对称性,其挠度可表示作:

$$w(x, y) = \frac{1}{2} (\frac{0}{11} x_1^2 + \frac{0}{22} x_2^2), \quad (6)$$

$\frac{0}{11}$, $\frac{0}{22}$ 分别表示弯曲的薄膜对于 x_1, x_2 轴的曲率 此形式的位移表达式曾经用于研究复合层压板的热变形^[12, 13] 式(6)包括了4种可能的薄膜形状:球面($\frac{0}{11} = \frac{0}{22}$);鞍状($\frac{0}{11} = -\frac{0}{22}$);以及两种椭球面状($\frac{0}{11} > \frac{0}{22}, \frac{0}{22} > 0$ 与 $\frac{0}{11} < \frac{0}{22}, \frac{0}{11} < 0$) 设应变分量 $\frac{0}{11}, \frac{0}{22}$ 为

$$\frac{0}{11} = a_1 + a_2 x_1^2 + a_3 x_2^2, \quad \frac{0}{22} = b_1 + b_2 x_2^2 + b_3 x_1^2, \quad (7)$$

a_1, a_2, a_3 和 b_1, b_2, b_3 是一组常数 将上式积分并运用对称关系可得到:

$$\begin{cases} u^0 = a_1 x_1 + \frac{a_2}{3} x_1^3 + a_3 x_1 x_2^2 - \frac{\frac{0}{11}}{6} x_1^3, \\ v^0 = b_1 x_2 + \frac{b_2}{3} x_2^3 + b_3 x_2 x_1^2 - \frac{\frac{0}{22}}{6} x_2^3, \end{cases} \quad (8)$$

进而给出

$$u_{xy}^0 = \left(a_3 + b_3 + 0.5 \frac{0}{11} \frac{0}{22} \right) x_1 x_2 \quad (9)$$

2 平衡解

薄膜平衡状态的形状可从系统能量最小化确定 系统能量 U 包含体应变能和表面能,即:

$$U = \int_V e dV + \int_S \sigma dS, \quad (10)$$

$e = \frac{1}{2} \sigma_{ij} \epsilon_{ij}$ 为体积 V 内的单位应变能密度, σ 为表面 S 上的单位表面能. 的大小取决于弹性应变, 一阶近似下可表示为 $\sigma = \sigma_0 + (\sigma_{11} + \sigma_{22}) \epsilon$ 和 ϵ 分别为上下表面的单位表面能, 其在无应变状态下值为 ϵ_0^+ 和 ϵ_0^- .

代入式(1)、(4)和(6)后, 能量表达式(10)可写作在整个中面上的积分形式:

$$U = \int_A \left\{ \frac{Yh}{2(1-\nu^2)} \left[(\epsilon_{11}^0)^2 + (\epsilon_{22}^0)^2 + 2(1+\nu) \epsilon_{11}^0 \epsilon_{22}^0 + 2(1-\nu) (\epsilon_{22}^0)^2 + \frac{h^2}{12} (\epsilon_{11}^2 \epsilon_{22}^2) + \frac{h^2}{12} (1+\nu) \epsilon_{11}^2 \epsilon_{22}^2 \right] + N(\epsilon_{11}^0 + \epsilon_{22}^0) + M(\epsilon_{11}^2 + \epsilon_{22}^2) + \epsilon_0^+ + \epsilon_0^- \right\} dA, \quad (11)$$

$$\text{式中 } N = \sigma_0^+ - \sigma_0^-, \quad M = \frac{h}{2}(\sigma_0^+ - \sigma_0^-) \quad (12)$$

对能量 U 取变分并令其为零可得

$$\frac{\delta U}{\delta a_i} = \frac{\delta U}{\delta b_i} = \frac{\delta U}{\delta \epsilon_{11}} = \frac{\delta U}{\delta \epsilon_{22}} = 0 \quad (13)$$

由此给出一组包含 8 个未知数的 8 个独立方程. 经过数学运算可知曲率应满足如下关系:

$$\begin{cases} (1-\nu) \epsilon_{11}^2 \epsilon_{22}^2 + Q \epsilon_{11}^2 + Q \epsilon_{22}^2 = 2PQM, \\ (1-\nu) \epsilon_{11}^2 \epsilon_{22}^2 + Q \epsilon_{11}^2 + Q \epsilon_{22}^2 = 2PQM, \end{cases} \quad (14)$$

$$\text{式中 } P = \frac{6(1-\nu^2)}{Yh^3}, \quad Q = 12Gh^2, \quad G = \frac{2}{l_1^2 l_2^2} + \frac{5}{1+\nu} \left(\frac{1}{l_1^4} + \frac{1}{l_2^4} \right) \quad (15)$$

可见薄膜曲率仅与表面应力引起的力矩 M 有关, 而与合力 N 无关. 由(14)式, 可推得

$$(\epsilon_{11} - \epsilon_{22})(\epsilon_{11} \epsilon_{22} - Q) = 0 \quad (16)$$

由此得出两个模式的解, 代表两种可能的弯曲形式. 前者是 $\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = \epsilon$, 代表球面的弯曲形状. 此时(14)中两式变为

$$\epsilon^3 + \frac{2(1+\nu)Q}{1-\nu} \epsilon - \frac{2PQM}{1-\nu} = 0, \quad (17)$$

显然, 此一元三次方程至少存在一个实根. 后者对应于 $\epsilon_{11} \epsilon_{22} = Q$ 及 $\epsilon_{11} = \epsilon_{22}$, 代表椭球面的弯曲形状. 此时由(14)式得到

$$\epsilon_{11} = PM \sqrt{P^2 M^2 - Q}, \quad \epsilon_{22} = PM \sqrt{P^2 M^2 - Q} \quad (18)$$

在满足条件 $P^2 M^2 > Q$ 的情况下, 上式表示的曲率存在实数解. 当 $P^2 M^2 < Q$ 时, (18) 式只有虚数解, 薄膜的可能的形状只有由(17) 式给出的一种, $\epsilon_{11} = \epsilon_{22}$. 当 $P^2 M^2 = Q$, (18) 式变成 $\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = PM$, 因此仍是球面形状. 可见, $P^2 M^2 = Q$ 代表了曲率的解由 1 个向 3 个转变的分叉点.

3 实例与讨论

为阐明形状分叉的现象, 现着重考虑正方形薄膜 $l_1 = l_2 = l$ 的情况. 从上一章节的分析可知, 分叉点对应于

$$| \sigma_0^+ - \sigma_0^- | = \frac{2Yh^3}{(1-\nu^2)l^2} \sqrt{\frac{2(6+\nu)}{3(1+\nu)}} \quad (19)$$

这一值由薄膜的弹性模量, 泊松比, 厚度及侧向尺寸决定. 当两表面应力差值小于它, 薄膜的

变形呈球面 若表面应力变化大于此值, 则可能呈现的薄膜形状有 3 种: 一种球面形状和两种椭球面形状

图 1 的曲线表示的是表面为(1 1 1)面的单晶铜薄膜曲率与表面应力变化的关系 薄膜厚度 $h = 10 \text{ nm}$, 正方形侧边尺寸 $l = 1 \text{ cm}$ 弹性模量和泊松比分别取作 $Y = 130 \text{ GPa}$ 和 $\nu = 0.5$ ^[14] 分叉点对应的表面应力差为 $|\Delta\tau| = |\tau^+ - \tau^-| = 5.892 \text{ N/m}$ 当 $|\Delta\tau| < 5.892 \text{ N/m}$, 在表面应力作用下薄膜为球面; 当 $|\Delta\tau| > 5.892 \text{ N/m}$, 可能呈现的形状有 3 种: 一种球面形状和两种椭球面形状 实际中使铜的(1 1 1)面上的表面应力的改变量的绝对值达到 5.892 N/m 是可能的, 比如在单晶铜的(1 1 1)面上吸附单层的铂原子可令其表面应力下降 8.28 N/m , 吸附单层的银原子可令其表面应力下降 15.19 N/m ^[14]

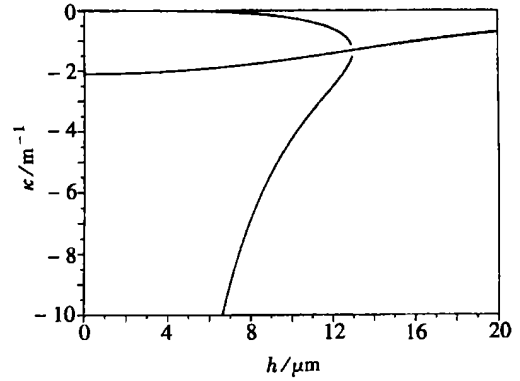
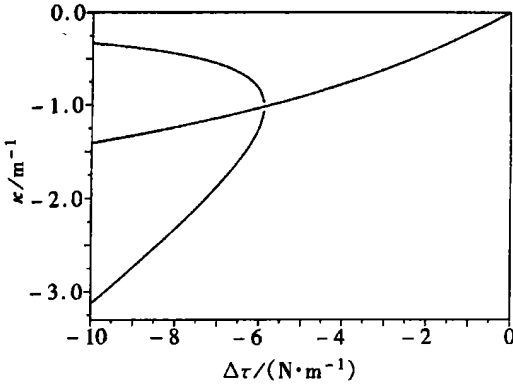


图 1 1 cm 1 cm 10 nm 的铜薄膜曲率随上下表面应力差变化的曲线

图 2 上表面吸附单层金原子的 1 cm 1 cm 10 nm 的铜薄膜曲率随薄膜厚度的变化

图 2 是表面为(1 1 1)的单晶铜薄膜在表面应力差等于 $\Delta\tau = -12.92 \text{ N/m}$ 时曲率随薄膜自身厚度不同的变化曲线 这一表面应力变化对应于其上表面吸附一层金原子后的情况^[15] 当厚度不小于 13 nm 时, 薄膜弯曲呈球面; 反之, 小于 13 nm 的薄膜可能是球面形状, 也可能是另两种椭球面形状

目前以薄膜弯曲为实验手段的测量技术中, 需借助于以下 Stoney 公式将测得曲率转化为表面应力改变量

$$\Delta\tau = Yh^2 / 6(1 - \nu) \kappa \quad (20)$$

此公式是在小变形的线弹性条件下导出的, 变形的膜始终被认为是球面的, 排除了分叉的可能性 事实上, 这一假设只在薄膜的表面应力变化很小时成立 当形状分叉发生后, 测得某个曲率是无法表示薄膜具体的形状, 而由 Stoney 公式所换算出的表面应力变化值必定难以精确, 特别是当两个主曲率差别较显著时 鉴于本文所列举实例表明, 形状分叉对于承受表面应力下的薄膜是极有可能的, 在应用 Stoney 公式来测量表面应力时应尤为小心

[参 考 文 献]

[1] Koch R. The intrinsic stress of polycrystalline and epitaxial thin metal films[J]. J Phys Condens Matter, 1990, 6(48): 9519-9550.
 [2] Cammarata R C. Surface and interface stress effects in thin films[J]. Prog Surf Sci, 1994, 46(1): 1-38.
 [3] Ibach H. The role of surface stress in reconstruction, epitaxial growth and stabilization of mesoscopic structures[J]. Surf Sci Rep, 1997, 29(5/6): 195-263.

- [4] Sander D. The correlation between mechanical stress and magnetic anisotropy in ultrathin films[J]. Rep Prog Phys, 1999, **62**(5): 809–858.
- [5] Spaepen F. Interfaces and stresses in thin films[J]. Acta Mater, 2000, **48**(1): 31–42.
- [6] Stoney G G. The tension of metallic films deposited by electrolysis[J]. Proc Roy Soc Lond, 1909, **A82**: 172–178.
- [7] Dahmen K, Lehwald S, Ibach H. Bending of crystalline plates under the influence of surface stress—a finite element analysis[J]. Sur Sci, 2000, **446**(1/2): 161–173.
- [8] He L H, Lim C W. On the bending of unconstrained thin crystalline plates caused by the change in surface stress[J]. Sur Sci, 2001, **478**(3): 203–210.
- [9] Sader J E. Surface stress induced deflections of cantilever plates with applications to the atomic force microscope: rectangular plates[J]. J Appl Phys, 2001, **89**(5): 2911–2921.
- [10] Sader J E. Surface stress induced deflections of cantilever plates with applications to the atomic force microscope: V-shaped plates[J]. J Appl Phys, 2002, **91**(11): 9354–9361.
- [11] Timoshenko S P, Woinowsky-Krieger S. Theory of Plates and Shells[M]. New York: McGraw-Hill, 1959.
- [12] Hyer M W. The room temperature shape of four-layer unsymmetric cross-ply laminates[J]. J Compos Mater, 1982, **16**: 318–323.
- [13] Masters C B, Salamon N J. Geometrically nonlinear stress-deflection relations for thin film/substrate systems[J]. Int J Engng Sci, 1993, **31**(6): 915–925.
- [14] Haiss W. Surface stress of clean and adsorbate-covered solids[J]. Rep Prog Phys, 2001, **64**(5): 591–648.
- [15] Leiva E P M, Del Popolo M G, Schmickler W. Changes in surface stress caused by the adsorption of an epitaxial metal monolayer[J]. Chem Phys Lett, 2000, **320**(5/6): 393–397.

Shape Bifurcation of an Elastic Wafer Due to Surface Stress

YAN Kun¹, HE Ling_hui¹, LIU Ren_huai²

(1. Key Laboratory of Mechanical Behavior and Design of Materials, CAS,
University of Science and Technology of China, Hefei 230027, P. R. China;

2. Institute of Applied Mechanics, Jinan University,
Guangzhou 510632, P. R. China)

Abstract: A geometrically nonlinear analysis was proposed for the deformation of a free standing elastically isotropic wafer caused by the surface stress change on one surface. The link between the curvature and the change in surface stress was obtained analytically from energetic consideration. In contrast to the existing linear analysis, a remarkable consequence is that, when the wafer is very thin or the surface stress difference between the two major surfaces is large enough, the shape of the wafer will bifurcate.

Key words: elastic wafer; curvature; surface stress; geometric nonlinearity