

多层膜结构热应力计算¹⁾

刘 星 朱嘉琦²⁾ 韩杰才

(哈尔滨工业大学复合材料与结构研究所, 哈尔滨 150001)

摘要 多层保护膜结构在光学窗口等领域有广泛应用, 其中膜层中的热应力对系统的功能和可靠性有重要影响. 推导了条形多层薄膜结构系统中应力应变的计算方法, 并针对薄膜厚度远小于基底厚度的薄膜结构计算进行了相应的简化, 得到了其一阶近似以及零阶近似应力的计算公式. 采用此公式对 ZnS-Y₂O₃-SiO₂ 双层膜系红外窗口系统进行了求解分析. 计算结果显示, 热应力在两层薄膜上的相对误差分别为 1.54% 和 0.09%, 零阶近似可以很好地满足计算精度要求.

关键词 多层膜, 热应力, 简化计算

中图分类号: O343.6 文献标识码: A doi: 10.6052/1000-0879-14-107

THERMAL STRESSES IN ELASTIC MULTILAYER SYSTEMS¹⁾

LIU Xing ZHU Jiaqi²⁾ HAN Jiecai

(Center for Composite Materials, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

Abstract Multilayer systems are widely used in the infrared window system. Thermal stresses in the thin films are very important to the functions and reliability of the system. In this paper, the strain and stress distributions in an elastic multilayered strip are calculated. The first-order approximation and the zero-order approximation solutions are proposed for the system when the thicknesses of the film layers are much less than the substrate thickness. Specific results are calculated for the elastic thermal stresses in the ZnS-Y₂O₃-SiO₂ infrared window. The results show that the thermal stresses based on the first-order approximation and the zero-order approximation in two film layers have a relative error about 1.54% and 0.09%, respectively. The zero-order approximation solutions can meet the accuracy requirement very well.

Key words multilayers, thermal stress, simplified calculation

在基底表面镀多层膜结构在微电子、光学窗口、保护膜层等众多领域有广泛应用. 膜层中的热应力对多层膜结构的功能和可靠性具有重大影响^[1-4]. 由于基底和膜层材料的热膨胀系数失配, 在高温下镀制薄膜, 当温度降低到室温时, 基底和膜层会产生不同大小的形变, 从而产生热应力^[5-6]. 薄膜中应力的存在不仅影响薄膜-基底系统的牢固性^[7], 对于光学薄膜还会严重影响器件的光学性能^[8]. 研究薄膜的应力行为, 对提高光学薄膜的性能有重要意义^[9-11].

薄膜应力通常分为张应力 (tensile stress) 和压应力 (compressive stress) 两类. 在张应力作用下, 薄膜本身有收缩趋势, 如果膜层的张应力超过薄膜的弹性限度, 薄膜就会破裂, 破裂时薄膜会离开基板而剥落. 在压应力作用下, 薄膜有向表面扩张的趋势, 薄膜向内侧弯曲, 当压应力超过薄膜的弹性限度时, 会导致膜层起皱^[12-13]. 本文采用解析法对多层膜薄膜热应力进行了研究, 并且研究了 ZnS-Y₂O₃-SiO₂ 双层膜系红外窗口系统中气动热力作用下的膜层应力分布情况.

本文于 2014-04-17 收到.

1) 国家自然科学基金优秀青年基金资助项目 (51222205).

2) 朱嘉琦, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为红外窗口膜层材料. E-mail: zhujiacqi@hit234.com

1 模型建立

图1给出了多层薄膜微结构计算模型的示意图。其中图1(a)为多层薄膜结构在未受到热应力时的结构状态,建立如图坐标系,以基底与薄膜的接触面为坐标轴 $z=0$,向上各层薄膜的厚度分别为 h_i ($i=1,2,3,\dots,n$),基底自由表面坐标为 $z=-t_s$, t_s 为基底厚度,下标s表示基底。图1(b)为在温差 ΔT 作用下,各层结构产生一定弯曲的示意图。

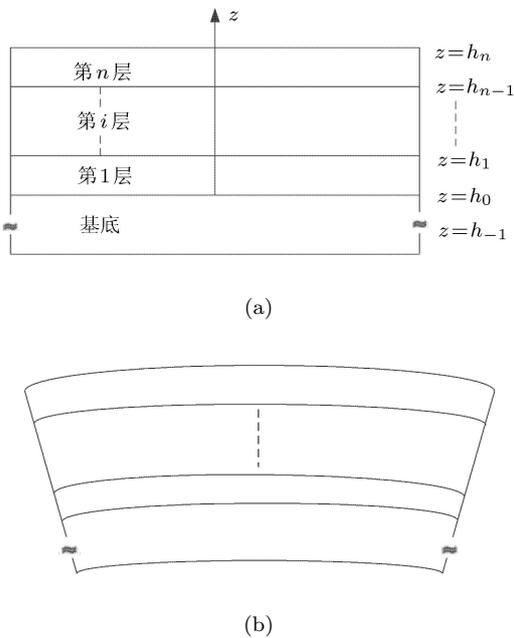


图1 多层薄膜微结构计算模型示意图

根据图1给出的示意图,多层膜结构中由于热应力产生的应变 ε 可以分解为材料受温差影响产生的均匀应变以及由于各种材料膨胀率不同从而导致的弯曲应变两部分。其表达式为

$$\varepsilon = c + \frac{z - t_b}{r}, \quad -t_s \leq z \leq h_n \quad (1)$$

式中, c 是均匀应变, t_b 为中性面(弯曲应变为0的平面)位置, r 为室温下最终 n 层结构的弯曲曲率半径, z 为厚度方向的坐标, h 为厚度坐标。

根据胡克(Hooke)定律,基底以及薄膜材料受到的应力与应变存在以下关系

$$\sigma_s = E_s(\varepsilon - \alpha_s \Delta T), \quad -t_s \leq z \leq 0 \quad (2)$$

$$\sigma_i = E_i(\varepsilon - \alpha_i \Delta T), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3)$$

其中, E 是弹性模量,下标s和*i*分别表示基底与第*i*层薄膜,对于非条状的结构而言,应该用双轴

弹性模量来替换,即 $\frac{E_i}{1 - \nu_i}$, ν_i 是第*i*层材料的泊松比, α 为线性膨胀系数, ε 为应变, ΔT 为温差。

在多层膜系统中,应变以及应力分布受到均匀应变、中性面位置以及曲率半径的影响。首先,由均匀应变产生的残余应力为0,于是存在

$$E_s(c - \alpha_s \Delta T)t_s + \sum_{i=1}^n E_i(c - \alpha_i \Delta T)t_i = 0 \quad (4)$$

因此,均匀应变可以表示为

$$c = \frac{\left(E_s t_s \alpha_s + \sum_{i=1}^n E_i t_i \alpha_i \right) \Delta T}{E_s t_s + \sum_{i=1}^n E_i t_i} \quad (5)$$

其次,弯曲应变产生的残余应力为0,则

$$\int_{-t_s}^0 \frac{E_s(z - t_b)}{r} dz + \sum_{i=1}^n \int_{h_{i-1}}^{h_i} \frac{E_i(z - t_b)}{r} dz = 0 \quad (6)$$

因此,可以得到中性面的位置为

$$t_b = \frac{-E_s t_s^2 + \sum_{i=1}^n E_i t_i (2h_{i-1} + t_i)}{2 \left(E_s t_s + \sum_{i=1}^n E_i t_i \right)} \quad (7)$$

由于系统中对于中性面的弯曲力矩之和为0,可以得到

$$\int_{-t_s}^0 \sigma_s(z - t_b) dz + \sum_{i=1}^n \int_{h_{i-1}}^{h_i} \sigma_i(z - t_b) dz = 0 \quad (8)$$

则弯曲曲率半径的表达式为

$$\frac{1}{r} = 3 \left[E_s(c - \alpha_s \Delta T)t_s^2 - \sum_{i=1}^n E_i t_i (c - \alpha_i \Delta T)(2h_{i-1} + t_i) \right] / \left\{ E_s t_s^2 (2t_s + 3t_b) + \sum_{i=1}^n E_i t_i \left[6h_{i-1}^2 + 6h_{i-1}t_i + 2t_i^2 - 3t_b(2h_{i-1} + t_i) \right] \right\} \quad (9)$$

以上得到的为多层膜系统中应力应变计算的精确解。应该注意到,当薄膜的厚度远小于基底的厚度时,这些解可以进行相应的简化。对方程(5),(7)和(9)取一阶近似,可以得到如下解

$$c = \alpha_s \Delta T + \sum_{i=1}^n \frac{E_i t_i (\alpha_i - \alpha_s) \Delta T}{E_s t_s} \quad (10)$$

$$t_b = -\frac{t_s}{2} \left(1 - \sum_{i=1}^n \frac{E_i t_i}{E_s t_s} \right) \quad (11)$$

$$\frac{1}{r} = 6 \sum_{i=1}^n \frac{E_i t_i (\alpha_i - \alpha_s) \Delta T}{E_s t_s^2} \quad (12)$$

根据上述结果, 对系统中的应力分布取一阶近似, 则有

$$\sigma_s = \frac{2}{t_s^2} \left(3z + 2t_s - \frac{2}{E_s} \sum_{j=1}^n E_j t_j \right) \cdot \quad (13)$$

$$\sum_{i=1}^n E_i t_i (\alpha_i - \alpha_s) \Delta T, \quad -t_s \leq z \leq 0$$

$$\sigma_i = E_i \left[\alpha_s - \alpha_i + 4 \sum_{j=1}^n \frac{E_j t_j (\alpha_j - \alpha_s)}{E_s t_s} \right] \Delta T, \quad (14)$$

$$i = 1, 2, \dots, n$$

对计算进行进一步的简化, 取零阶近似, 可以得到

$$\sigma_s = \frac{2(3z + 2t_s)}{t_s^2} \sum_{i=1}^n E_i t_i (\alpha_i - \alpha_s) \Delta T, \quad (15)$$

$$-t_s \leq z \leq 0$$

$$\sigma_i = E_i (\alpha_s - \alpha_i) \Delta T, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (16)$$

式 (15) 和式 (16) 相当于 Townsend 等^[14] 提出的近似解.

2 结果与讨论

对于典型的红外窗口多层膜结构如图 2 所示, 基底材料为 ZnS, 厚度为 8 mm, 第 1 层保护膜为 Y₂O₃, 厚度为 1 μm, 第 2 层保护膜为 SiO₂, 厚度为 1 μm, 在正常工作情况下, 上下表面的温差为 ΔT = -308 K, 3 种材料的物性参数如表 1 所示.

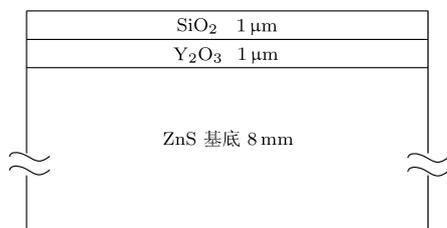


图 2 多层膜红外窗口结构示意图

表 1 材料物性参数^[15]

材料	弹性模量 E/GPa	线性膨胀系数 α/K^{-1}
ZnS	74	7.0×10^{-6}
Y ₂ O ₃	170	6.6×10^{-6}
SiO ₂	128	5.0×10^{-7}

考虑不同膜层具有不同的弹性系数, 计算得到的均匀应变分量 c , 总应变 ε 和弯曲轴, 如图 3 所示.

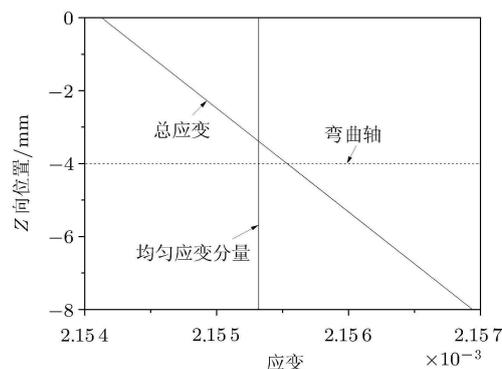


图 3 计算得到的均匀应变分量 c 和总应变 ε

为了比较零阶近似和一阶近似两种情况下的计算精度, 分别用两种近似方法计算了基底和膜层上的应力分布. 图 4 给出了零阶近似和一阶近似情况下基底上应力分布对比, 从图中可以看出, 基底上应力分布在两种近似情况下基本一致, 大图中两条曲线几乎重合, 小图对大图进行了局部放大, 可以看到零阶近似的数值结果比一阶近似的数值结果略小. 从曲线变化趋势可以看出, 基底上应力沿着基底的厚度方向, 从底面向镀膜面呈线性减小. 在基底底部应力值为正, 是拉应力, 基底上部应力值为负, 是压应力.

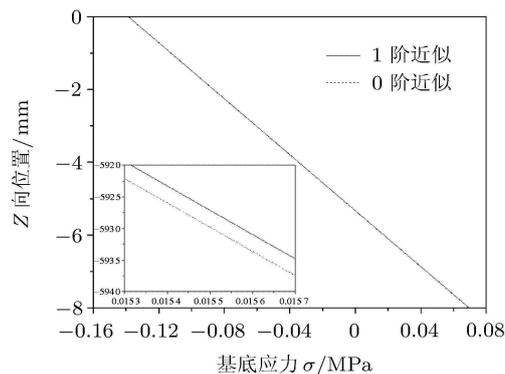
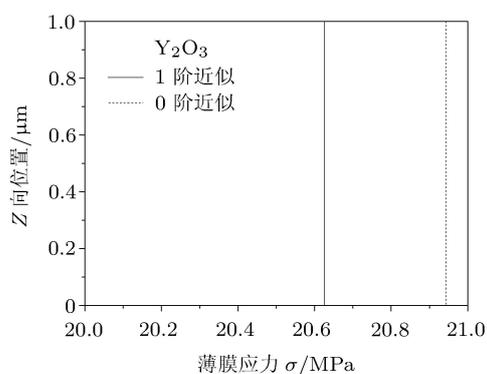
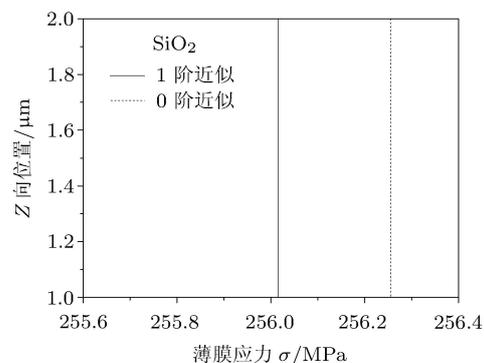


图 4 零阶近似和一阶近似情况下基底上应力分布对比

图5给出了零阶近似和一阶近似情况下 Y_2O_3 膜层和 SiO_2 膜层上应力分布对比, 比较发现, 两种不同近似算法下, 薄膜应力计算差别依然较小, 在 Y_2O_3 膜层和 SiO_2 膜层上应力的相对误差分别为 1.54% 和 0.09%。这表明在薄膜厚度远小于基底厚度的情况下, 采用零阶近似完全可以满足计算的精度要求。保护膜层中应力均为正值, 是拉应力。 SiO_2 膜层中应力比 Y_2O_3 膜层中应力值大。



(a)



(b)

图5 零阶近似和一阶近似情况下 Y_2O_3 膜层和 SiO_2 膜层上应力分布对比

3 结论

多层膜系统中热应力对系统功能和稳定性有重要影响, 本文将应变分布分解为均匀应变分量和弯曲应变分量, 建立了多层膜系统热应力分析模型。为了分析热应力, 膜层间的协调性必须满足一定条件。该模型可适用于任何弹性多层膜结构, 针对任何膜层体系, 一般存在 3 个不确定量和 3 个边界条件。基于零阶近似和一阶近似算法得到了红外窗口多层膜结构体系 $ZnS-Y_2O_3-SiO_2$ 中的热应力分布特性, 结

果显示, 采用零阶近似和一阶近似计算得到的结果相差不大, 在 Y_2O_3 膜层和 SiO_2 膜层上应力的相对误差分别为 1.54% 和 0.09%, 零阶近似可以满足工程上对计算精度的要求。

参考文献

- Gore G. On the properties of electro-deposited antimony. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 1858, 148: 185-197
- Hsueh CH. Thermal stresses in elastic multilayer systems. *Thin Solid Films*, 2002, 418(2): 182-188
- Cao T, Zhang L, Xiao Z, et al. Enhancement and tunability of fano resonance in symmetric multilayer metamaterials at optical regime. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2013, 46(39): 395103
- Rastogi AC, Sharma RN. Interfacial charge trapping in extrinsic Y_2O_3/SiO_2 bilayer gate dielectric based MIS devices on Si(100). *Semiconductor Science and Technology*, 2001, 16(8): 641-650
- Tran MD, Poublan J, Dautzenberg JH. A practical method for the determination of the Young's modulus and residual stresses of PVD thin films. *Thin Solid Films*, 1997, 308: 310-314
- 邵淑英, 范正修, 范瑞瑛等. 薄膜应力研究. *激光与光电子学进展*, 2005, 42(1): 22-27
- He MY, Evans AG, Yehle A. Criterion for the avoidance of edge cracking in layered systems. *Journal of the American Ceramic Society*, 2004, 87(7): 1418-1423
- 陈焱, 罗崇泰, 王多书. TiO_2/Na_3AlF_6 单多层光学薄膜应力的研究. 第九届真空冶金与表面工程学术会议, 沈阳, 2009
- Wang ASD, Crossman FW. Edge effects on thermally induced stresses in composite laminates. *Journal of Composite Materials*, 1977, 11(3): 300-312
- 陈为兰. 光学薄膜应力的研究. [硕士论文]. 杭州: 浙江大学, 2008
- Kinosita K, Maki K, Nakamizo K, et al. Stress in vacuum deposited films of silver. *Japanese Journal of Applied Physics*, 1967, 6(1): 42-50
- 薛孟君, 刘跃进, 杨班权. 膜-基复合材料界面剪应力的三维半解析计算. *力学与实践*, 2002, 24(05): 50-53
- 吴智雄. 红外窗口用蓝宝石晶体 Y_2O_3/SiO_2 增透膜的设计与制备研究. [硕士论文]. 深圳: 哈尔滨工业大学深圳研究生院, 2009
- Townsend PH, Barnett DM, Brunner TA. Elastic relationships in layered composite media with approximation for the case of thin films on a thick substrate. *Journal of Applied Physics*, 1987, 62(11): 4438-4444
- Klein CA, Gentilman RL. Thermal shock resistance of convectively heated infrared windows and domes. SPIE 3060, Orlando, USA, 1997

(责任编辑: 胡漫)