

文章编号: 1001-4888(2017)06-0741-10

柔性基底上含过渡层纳米薄膜在双向 拉伸下断裂损伤的实验研究^{*}

陈茜, 李林安, 王世斌, 王志勇, 李传崑, 李荣坚, 李腾

(天津大学 机械工程学院力学系, 天津 300350)

摘要: 含过渡层的柔性基底薄膜的力学性能对现代电子元器件的广泛应用至关重要, 对其力学性能的深入研究变得极为迫切。本文针对其在双向拉伸载荷下的断裂损伤进行了实验研究。对 $125\mu\text{m}$ 聚酰亚胺上沉积的不同薄膜结构进行不同加载比下的双轴拉伸实验, 通过光学显微镜观察裂纹演化过程与饱和裂纹形态。根据最小应变能密度因子理论对裂纹演化的开裂角度进行了理论分析, 用有限元分析了加载比例和过渡层泊松比对结构各层双向应力比传递的影响, 并在不同薄膜结构和加载比下, 对裂纹演化应变进行了比较。研究结果表明, 在双向拉伸载荷作用下, 薄膜裂纹呈现出网状分布, 裂纹演化角度与加载比、裂纹初始角度相关; 一级裂纹萌生的临界应变随着加载比降低而降低, 二级及以上裂纹萌生的临界应变与各级裂纹的饱和应变随加载比降低而升高; 在等双轴拉伸下, 不同薄膜结构的含过渡层柔性基底薄膜一级裂纹的临界应变基本一致, 二级及以上裂纹的临界应变显现明显差异。

关键词: 双向拉伸; 薄膜; 柔性基底; 过渡层; 裂纹

中图分类号: O34 **文献标识码:** A **DOI:** 10.7520/1001-4888-16-233

0 引言

含过渡层的柔性基底薄膜(Soft Substrate Interlayer Film, 以下简称 SSIF)结构由于具有较高的柔性、延展性、高效和制造成本低等特点, 而广泛应用于薄膜晶体管、柔性电子元件等领域。相比于单层薄膜硬基结构, SSIF 结构改善了结构的力学性能, 深刻影响膜基结构的损伤行为。膜基结构在服役过程中承受较复杂的载荷作用, 而双向载荷状态更接近器件的实际受力情况。因此, 对 SSIF 结构双向载荷下断裂损伤形式的研究具有重要意义。

近些年国内外学者针对双轴载荷下膜基结构进行了研究, 在理论、仿真和实验方面取得了一定的成果。理论和仿真计算方面, 2007 年, Xue 和 Hutchinson^[1]通过理论和仿真结合的方法, 研究了在双向载荷下单层薄膜基底结构的颈缩极限, 给出了准静态双向拉伸载荷下, 膜结构的颈缩和能量吸收能力, 研究发现基底减缓了颈缩现象。2013 年, Jia 等人^[2]给出了单层膜基结构在双向应力比不同的情况下的颈缩极限, 推导出临界颈缩应变值和颈缩带方向与材料性质、膜基厚度比的关系。2013 年, Yi 等人^[3]利用数值仿真的方法, 研究了双向载荷和 Dundurs 参数对单层薄膜基底结构的塑性区域尺寸和裂纹尖端张开位移的影响, 表明平行于裂纹的压缩载荷将增加塑性区域尺寸和裂尖张开位移。2015 年, Bettaieb 等人^[4]结合刚塑性流动理论和塑性变形理论模拟金属单层膜, 并且预测出薄膜的局部颈缩行为。

^{*} 收稿日期: 2016-11-04; 修回日期: 2016-11-25

基金项目: 国家自然科学基金(11572218)资助

通讯作者: 李林安(1966—), 男, 博士, 教授。主要从事纳米薄膜与断裂力学研究。Email: lali@tju.edu.cn

实验方面,2009 年,Sun 等人^[5]研究发现,单向拉伸下聚二甲基硅氧烷(Polydimethylsiloxane,简称 PDMS)过渡层的加入,对提高无机薄膜系统的抗拉伸性能有着显著的影响。2011 年,朱晓莹等人^[6]总结了金属纳米多层膜的研究进展,并且给出了晶粒形貌对结构强化机制和塑性变形行为的影响。2013 年,门玉涛等人^[7]针对固体薄膜拉伸分叉行为的研究进展进行了总结和概括,并提出了薄膜基底结构在拉伸载荷下亟待解决的问题,其中包括柔性电子产品在使用中经受多轴拉力作用的力学问题。2013 年,Knorr 等人^[8]通过改变 Cu/Pd/Si 结构薄膜的厚度,观测单向拉伸作用下多层膜形貌,计算出不同厚度下各层膜的应力状态。Djaziri 等人^[9,10]通过研发的双轴拉伸装置^[11,12]结合 X 射线衍射(X-ray diffraction,简称 XRD)和数字图像相关(Digital Image Correlation,简称 DIC)技术,在双向拉伸加载的情况下,确定了单晶薄膜 W/聚酰亚胺(Polyimide,简称 PI)基底的屈服面,并且研究了 W/Cu/PI 薄膜基底结构的弹性行为,利用 XRD 测量得到的 W 层弹性应变与有限元计算结果匹配良好。2014 年,张冠华等人^[13]提出了一种电阻电测法,通过实验手段确定了微纳米尺度金属薄膜拉伸分叉点。2015 年,Marx 等人^[14]通过实验发现单向载荷下,在 Cu/PI 结构中加入脆性过渡膜 Cr 对整体结构的变形有明显影响,Cr 膜的断裂会引起上层铜膜的应力集中,最终导致结构破坏。

尽管目前针对薄膜结构的研究已经取得了较多的成果,但针对双向载荷下断裂损伤行为的研究还不多。所以,本文对 SSIF 结构在双向拉伸载荷作用下的断裂损伤行为进行了实验研究,与单轴拉伸实验中裂纹的形态演化进行对比,理论分析了双向载荷的加载比对裂纹开裂角的影响,并且研究了薄膜结构、加载比对裂纹产生的临界应变、饱和应变的影响。

另外,目前大部分双向拉伸实验采用十字形试件,而试件的测试区域均匀性对实验起着关键的作用。2010 年,Yvette 等人^[15]设计了满足其加载装置尺寸的十字形试件,并且给出了该形状试件的均匀应变区域大小,但没有系统地考虑结构设计中具体参数的变化对均匀应变区域尺寸的影响。2015 年,Liu 等人^[16]设计了带有凹陷过渡弧、划线和中心变薄处理的十字形试件,该试件的设计针对薄片金属材料,对柔性基底材料具有局限性。本文针对实验中的加载装置尺寸,设计了含定位孔结构的 PI 十字形试件,其中,定位孔结构有利于保证实验的对中性,通过引入应变不均匀度的概念,给出了在不同应变不均匀度指标下,过渡弧半径对均匀应变区域大小的影响,同时给出了加载比例对均匀应变区域尺寸的影响,分析了加载比和过渡层泊松比对各层双向应力比传递的影响。

本文通过对 SSIF 结构在双向拉伸载荷作用下的断裂损伤行为进行的实验研究,给出了双向载荷的加载比对裂纹开裂角的影响,以及薄膜结构、加载比对裂纹产生的临界应变、饱和应变的影响,为薄膜基底结构力学性能的认识提供了依据。

1 双向拉伸实验试件优化

1.1 基底有限元模型和应变不均匀度

考虑加载装置和镀膜腔体尺寸,试件基底基本尺寸如图 1 所示。为了保证更换试件时和加载过程中的对中性,本文在试件四个臂上设计了定位孔,用以与试件夹具上的定位销配合。为了提高 PI 基底模具加工精度,试件四臂边缘区域中采用倒角设计,如图 1 中矩形区域。对基底中心 $8\text{mm} \times 8\text{mm}$ 的正方形区域进行镀膜,为了保证实验中观测区域的应变均匀性,对镀膜区域的应变均匀性进行有限元分析。

考虑结构的对称性以及薄膜厚度相比于基底很小的特点,所以只需建立 PI 基底 $1/4$ 简化模型,实际中图 1 所示试件四臂边缘处的矩形区域位置,采用压片固定的方式进行位移加载,所以分析模型中两个方向不同比例的位移载荷 u_x 、 u_y 分别施加于图 1 中矩形区域,如图 2 所示。本文以实验中采用的美国杜邦公司 PI 薄膜为例进行分析,其参数参照文献^[17]泊松比 0.3、弹性模量 0.8GPa 进行设置。利用 ABAQUS 软件模拟,采用平面应力单元 CPS4R 划分网格,中心镀膜区域进行网格细化,计算出中心区域的应变分布,进行均匀性分析。

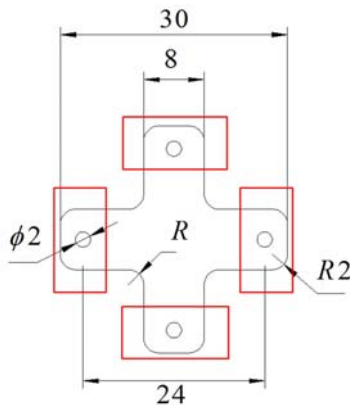


图1 试件基底尺寸

Fig. 1 Geometry size of the substrate

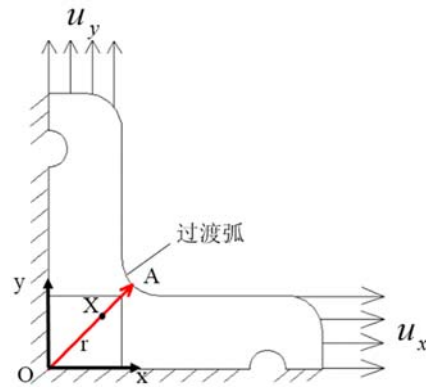


图2 有限元模型分析图

Fig. 2 FEM model

由于过渡弧处应力集中的影响,图2中线段OA的应变变化较大,从而只需保证OA上以原点为起点的一定距离线段上的应变均匀,即认为对应的中心区域应变均匀。 ϵ_0 为O点的应变,取OA上距离原点O为r的某点X,OX线段各节点应变最大值记为 $\epsilon_{\max}$,则定义半径为r的圆形区域的应变不均匀度 $e = \left| \frac{\epsilon_{\max} - \epsilon_0}{\epsilon_0} \right| \times 100\%$ 。利用应变不均匀度来衡量中心区域应变的均匀程度,e越小,中心区域越均匀。

1.2 基于均匀应变区域尺寸分析的试件优化设计

由于应变不均匀度是相对概念,施加载荷只需保证观测区域处于PI基底的弹性阶段,即应变处于4%~5%即可。因此选取施加均布位移载荷 $u_x = u_y = 0.5\text{ mm}$ 的情况进行分析,以下用R表示过渡弧半径大小,用r表示均匀应变区域半径大小。

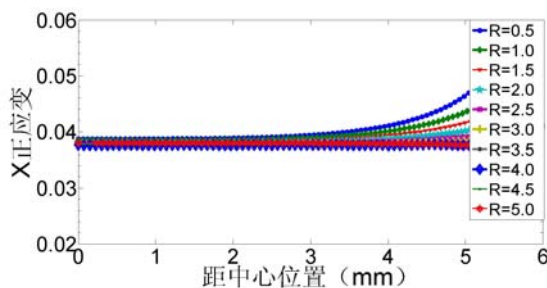
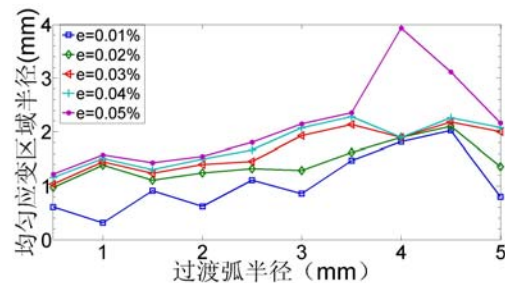
图3 不同过渡弧半径R下, ϵ_{xx} 分布曲线Fig. 3 ϵ_{xx} distribution at the center with different transition arc radii

图4 r随着R的变化曲线

Fig. 4 r as a function of R

中心均匀应变区域尺寸受过渡弧半径R影响较大,分析OA在不同过渡弧半径R下的正应变分布曲线如图3。可以看出,在不同过渡弧半径R下,过渡弧对中心处均匀应变值影响较小,但对均匀应变区域半径影响较大。

针对过渡弧半径R对均匀应变区域半径r的影响进行进一步研究,在不同应变不均匀度指标下,得到图4所示变化曲线。可见当选取 $e = 0.05\%$, $R = 4\text{ mm}$ 时,中心均匀应变区域半径最大,此时,镀膜区域基本处于均匀应变状态,且应变不均匀度0.05%在实验研究误差范围内,所以实验中采取过渡弧半径4mm。

定义位移加载比 $k = u_y / u_x$,双向加载情况下,位移加载比对中心均匀应变区域大小会产生很大的影响。针对实验中选取的过渡弧半径 $R = 4\text{ mm}$,应变不均匀度 $e = 0.05\%$,图5给出了中心均匀应变区域半径r随位移加载比k的变化曲线。可见,随着位移加载比例的减小,中心均匀应变区域会逐渐减

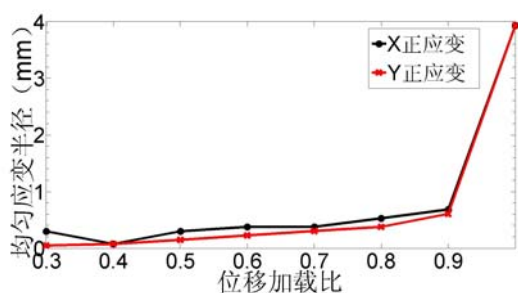
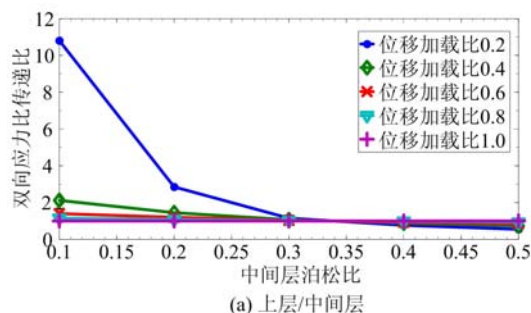


图 5 $R=4\text{mm}$, $e=0.05\%$ 时 r 随加载比变化曲线

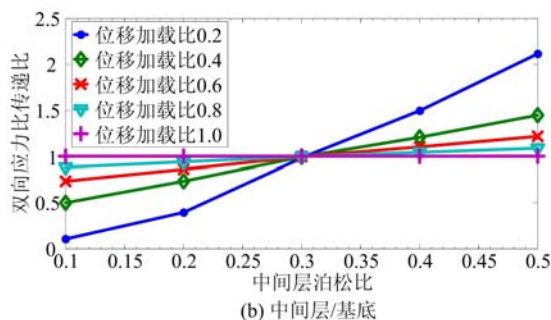
Fig. 5 r as a function of loading ratio,

$R=4\text{mm}$, $e=0.05\%$

层选取 Al 的弹性模量 70GPa , 厚度 100nm , 改变过渡层泊松比。采用八节点六面体单元 C3D8R 划分网格, 双向位移载荷施加于图 2 矩形区域。不同位移加载比下, 得到各层之间双向应力比的比值随着中间层泊松比变化的曲线, 如图 6 所示。其中上层/中间层双向应力比传递比为上层薄膜双向应力比/中间层双向应力比, 同理表述中间层/基底双向应力比传递比、上层/基底双向应力比传递比。



(a) 上层/中间层



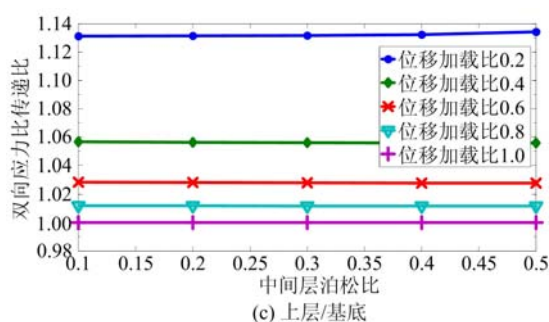
(b) 中间层/基底

可见, 上层薄膜和基底之间双向应力比的传递比随着泊松比增大没有明显变化。位移加载比越趋近等双轴状态, 双向应力比越接近完全传递。当中间层泊松比接近上层和基底的泊松比 0.3 时, 各层之间的双向应力比基本完全传递。因此, 实验中选取 Al 层作为过渡层, 泊松比接近 0.3, 可以很好地满足上层薄膜和基底之间双向应力比完全传递。

2 SSIF 结构的双向拉伸实验

根据前文优化设计的十字形尺寸, 实验选用厚度为 $125\mu\text{m}$ 的美国杜邦公司生产的 PI 基底, 参数如 1.1 所述。在基底中心 $8\text{mm}\times 8\text{mm}$ 正方形区域内, 利用磁控溅射镀膜技术镀膜, 先沉积中间过渡层, 然后沉积上层薄膜, 制造出不同尺寸和结构的 SSIF 试件。

实验装置示意图如图 7 所示, 采用双向拉伸装置对十字形试件进行加载。实验中, 位移通过两个方向夹具位置处的千分表测量, 除以试件有效长度得到等效应变。通过 S 型力传感器测量力, 所测力除以试件基底横截面积定义为应力。实验观测设备选用光学显微镜 (OLYMPUS DP10 型, $2000\times$) 匹配电荷耦合元件 (Charge-coupled Device, 简称 CCD) 技术传输到计算机中进行图像存储, 实验中选择 50 倍物镜观测, 加载速度为 $2\mu\text{m/s}$, 每隔 $10\mu\text{m}$ 进行上层薄膜形貌观测和记录。



(c) 上层/基底

图 6 各层间双向应力比传递比随中间层泊松比变化的曲线

Fig. 6 Transfer ratio of biaxial stress ratio as a function of the Poisson's ratio of middle layer

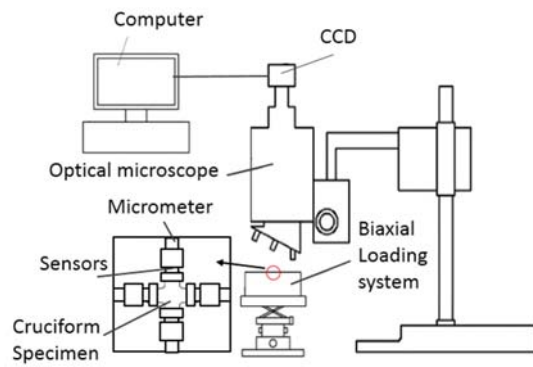


图7 双向拉伸实验加载和观测装置示意图

Fig. 7 Schematic diagram of the biaxial tensile test loading and observing device

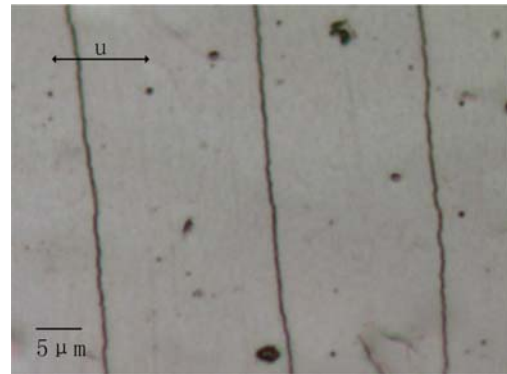


图8 PI/200nm Al/300nm Cu 单轴拉伸的裂纹形貌

Fig. 8 Cracks of PI/200nm Al/300nm Cu under uniaxial tension

残余应力主要产生于镀膜过程,本文镀膜之后对薄膜结构表面进行显微观察,未发现裂纹,即薄膜内部残余应力并未使上层薄膜断裂,加之本文制备试件中的镀膜工艺参数严格控制,所以本文未针对残余应力对裂纹形态的影响进行分析,留待进一步研究。何巍^[18]已经证明薄膜裂纹并不影响薄膜/基底结构的宏观应变传递,所以本文认为上层薄膜应变是通过基底和中间层完全传递的。

单轴拉伸时,含过渡层薄膜基底结构产生垂直于加载方向的裂纹,PI/200nm Al/300nm Cu 单轴拉伸形貌,如图8所示。裂纹饱和之后仍为近似平行的周期裂纹,这与文献^[1,13]中观察的现象一致。而双向拉伸实验过程中,含过渡层的薄膜裂纹饱和形貌发生明显变化,不再是平行的裂纹,而是在此基础上产生类似网状裂纹形貌。

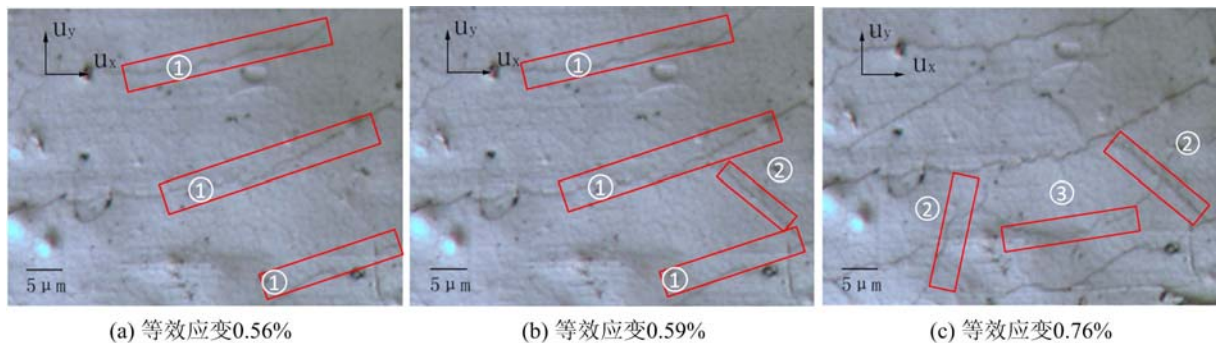


图9 PI/100nm Al/300nm Cu 在等双轴拉伸下的形貌演化

Fig. 9 Evolution of PI/100nm Al/300nm Cu under equi-biaxial tension

双向拉伸载荷下,含过渡层薄膜/基底结构裂纹形貌形成过程大致如图9所示。上层薄膜在最初阶段发生弹性变形,表面基本无变化。随着载荷增大,视野中产生如图9(a)所示的平行裂纹,为便于区分,以下称为一级裂纹,并将产生第一条一级裂纹时的等效应变记为一级临界应变。进一步加载,当视野中一级裂纹的数量不再增加时,认为裂纹达到饱和,以下将此时对应的等效应变记为一级饱和应变。继续加载,如图9(b)所示,上层薄膜两条相邻的平行一级裂纹间的区域,由于中间层变形增大而引起自身应变增大,区域内产生与一级裂纹扩展方向成一定开裂角度的裂纹,以下称为二级裂纹。同理,定义视野中第一条二级裂纹产生时的等效应变为二级临界应变,二级裂纹数目不再增加时对应的等效应变记为二级饱和应变。继续加载,在两条二级裂纹间形成三级裂纹,如图9(c),同理可定义三级临界应变和三级饱和应变。以此类推,最终达到饱和状态,裂纹不再增加。

为了对双向拉伸情况下,裂纹形貌特点进行进一步的研究,在不同双向拉伸加载比、不同薄膜结构(包括单层薄膜/基底结构、不同薄膜调制比的薄膜/基底结构)的工况下进行实验。

工况1:对 PI/100nm Al/300nm Cu 分别进行位移加载比为 0.6、0.75 和 1.0 三种情况下的双向拉

伸实验。在不同加载比下,观察裂纹的形态演化过程,记录各级裂纹临界应变和各级裂纹的饱和应变,对其进行比较分析。

工况 2:对 PI/300nm Cu、PI/100nm Al/300nm Cu 以及 PI/100nm Cu/300nm Al 分别进行位移加载比为 1.0 的等双向拉伸加载。在不同薄膜结构形式下,观察裂纹的形态演化过程,记录视野中各级裂纹的临界应变和饱和应变,进行分析。

3 裂纹形态、临界应变和饱和应变的分析与讨论

3.1 位移加载比对 SSIF 结构裂纹形态、临界应变和饱和应变的影响

通过改变双向加载比例可以更全面地模拟器件的性能。本文调节位移加载比为 0.6、0.75 和 1.0,针对 PI/100nm Al/300nm Cu 的 SSIF 结构进行了实验分析,得到如图 10 所示的 SSIF 结构裂纹饱和和形貌。

观测上层 Cu 膜形态演化过程,在不同双向载荷比下,薄膜基底结构同样形成网状的裂纹。

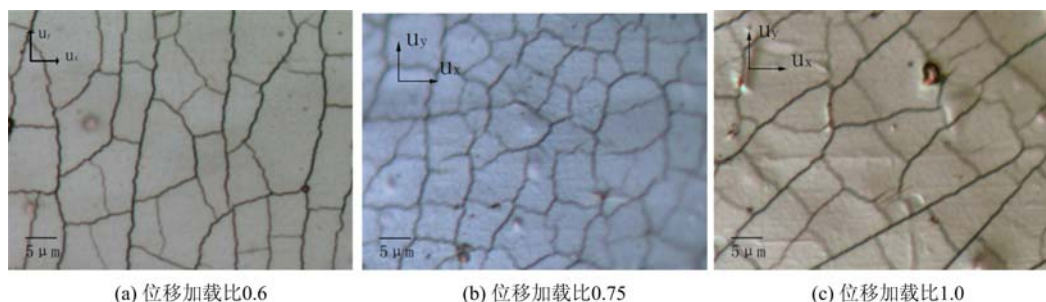


图 10 不同加载比下,PI/100nm Al/300nm Cu 裂纹饱和和形貌

Fig. 10 Crack saturation of at PI/100nm Al/300nm Cu at different loading ratios

针对裂纹的网状结构形态特征,由图 10 还可以明显地看出,在不同加载比下,相同 SSIF 结构的一级裂纹扩展方向相比于加载方向有明显不同,二级裂纹的开裂角度(即二级裂纹在开裂点处相比于一级裂纹扩展方向的角度)也明显不同。

实验中,加载比对各级裂纹萌生的临界应变和饱和应变有明显影响。表 1 给出了不同加载比下,PI/100nm Al/300nm Cu 结构各级裂纹的临界应变和饱和应变。可以明显看出,随着加载比例的降低,一级裂纹产生的临界应变减小。结合图 5 所示有限元分析结果,中心均匀应变区域尺寸随着加载比例的降低而减小,且在非等双轴加载情况下,非均匀区域明显减小。这意味着随着加载比的减小,观察区域周围非均匀区域的面积增大,裂纹从非均匀应变区域产生,并迅速扩展进视野中。

表 1 不同加载比下 PI/100nm Al/300nm Cu 各级裂纹的临界应变和饱和应变

Tab. 1 Critical and saturation strain of PI/100nm Al/300nm Cu under different loading ratios

加载比	一级临界应变	一级饱和应变	二级临界应变	二级饱和应变	三级临界应变	三级饱和应变
1.0	0.50%	0.56%	0.59%	0.72%	0.76%	1.32%
0.75	0.47%	0.70%	0.73%	1.00%	1.30%	1.50%
0.6	0.35%	0.75%	0.82%	1.15%	1.53%	1.65%

表 1 中二级以上裂纹产生的临界应变,随着加载比例减小,呈现增长趋势。以二级裂纹为例,由于一级裂纹达到临界值之后,相当于将上层薄膜分割成若干个相互独立的小矩形区域。当一级裂纹饱和后,继续加载,二级裂纹在小矩形区域产生。随着加载比减小,同等情况下独立矩形区域的主应力减小,而二级裂纹产生方向的抗断能力不变,因此在较高应变下形成裂纹。

3.2 等位移加载比下薄膜结构对 SSIF 结构裂纹形态、临界应变和饱和应变的影响

含过渡层的薄膜结构中过渡层、薄膜结构调制比对裂纹形态和临界应变、饱和应变的影响同样值得深入研究。本文对 PI/单层 300nm Cu 和 PI/100nm Cu/300nm Al 进行了等位移加载比下的双轴拉伸,得到上层薄膜的裂纹饱和和形貌如图 11 所示,并分别与图 10 (c) PI/100nm Al/300nm Cu SSIF 结构在

等位移加载比下的饱和形貌进行对比分析。

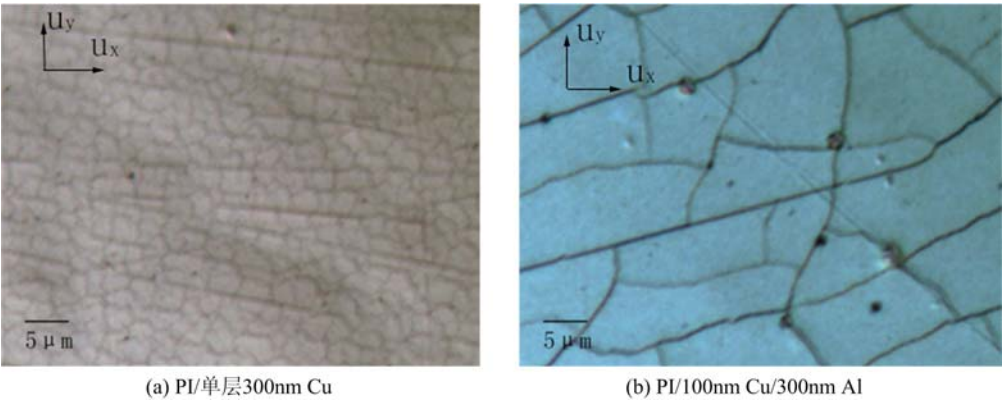


图 11 PI/300nm Cu 和 PI/100nm Cu/300nm Al 在等双轴拉伸下的饱和形貌

Fig. 11 Crack saturation of PI/300nm Cu and PI/100nm Cu/300nm Al under equal-biaxial tension

通过图 11(a)和图 10(c)的对比,可以明显发现,相同上层薄膜结构,中间过渡层 Al 的引入,使得上层薄膜裂纹饱和时裂纹明显变疏,即过渡层 Al 的加入明显地降低了单位面积内裂纹的数量。表 2 给出了图 11 PI/100nm Cu/300nm Al 和图 10(c) PI/100nm Al/300nm Cu 两种不同薄膜结构的各级临界应变和饱和应变。可以明显看出,两种结构的一级临界应变基本一致,主要由于过渡层上下表面均受到约束作用,不易破坏,而两种结构中间层厚度相同,且中间层较上层膜更薄。上层薄膜上表面处于自由状态,而一级裂纹产生是整个薄膜受到过渡层传递而来的变形,上层 Al 膜和上层 Cu 膜延伸率虽然存在差异,但是基本在一个量级,这导致在整个薄膜长度尺寸上产生裂纹的临界应变值相差不大。

表 2 PI/100nm Al/300nm Cu 和 PI/100nm Cu/300nm Al 各级裂纹临界应变和饱和应变
Tab. 2 Critical and cracks saturation strain of PI/100nm Al/300nm Cu and PI/100nm Cu/300nm Al

结构类型	一级临界应变	一级饱和应变	二级临界应变	二级饱和应变	三级临界应变	三级饱和应变
PI/100nm Al/300nm Cu	0.50%	0.56%	0.59%	0.72%	0.76%	1.32%
PI/100nm Cu/300nm Al	0.51%	0.73%	0.82%	1.08%	1.12%	1.56%

而两种结构二级及以上裂纹产生的临界应变存在较大差距,PI/100nm Cu/300nm Al 产生二级及以上裂纹的速度较慢。这主要由于针对一级裂纹分割的小尺寸的矩形区域内,上层薄膜表面处于自由状态,虽然上层薄膜下表面受到从过渡层传来的应变基本一致,但是小矩形区域内二级裂纹产生方向的区域尺寸较小,当上层膜为 Al 时,同样应变情况下,Al 的延展性高,所以产生的裂纹较慢。

3.3 加载比对 SSIF 结构二级开裂角度的影响

通过上述实验现象,可以发现相比于单轴拉伸情况下薄膜形成的平行直线式饱和形貌,在双向拉伸下,裂纹的演化过程呈现出网状分布。由于实验中裂纹扩展速度很快,且没有发现裂尖处形成明显的塑性变形区域,近似认为微纳米级别薄膜结构发生脆性断裂。根据最小应变能密度因子理论^[19],针对双轴载荷下裂纹网状分布特点,对其二级裂纹的开裂角度进行分析。

取整体结构为研究对象,受双向平面应力 σ_x 和 σ_y 如图 12(a)所示。假设一级裂纹出现在与 y 轴加载方向成 α 角度,并且裂纹长度为 $2a$ 。

得到与 y 向成 α 角度的裂纹面上的剪应力 τ_α 和正应力 σ_α 为:

$$\begin{cases} \tau_\alpha = (\sigma_y - \sigma_x) \sin\alpha \cos\alpha \\ \sigma_\alpha = \sigma_x \cos^2 \alpha + \sigma_y \sin^2 \alpha \end{cases}$$

可见,在等双轴应力情况下,只有 I 型裂纹扩展;如果非等双轴应力情况,裂纹扩展则由 I 型和 II 型裂纹扩展共同作用。下面针对结构在非等双轴应力状态下进行分析。

裂纹的应力强度因子

$$\begin{cases} K_I = \sigma_\alpha \sqrt{\pi a} = (\sigma_x \cos^2 \alpha + \sigma_y \sin^2 \alpha) \sqrt{\pi a} \\ K_{II} = \tau_\alpha \sqrt{\pi a} = (\sigma_y - \sigma_x) \sin\alpha \cos\alpha \sqrt{\pi a} \end{cases}$$

应变能密度因子表示裂尖区域应变能密度场的幅值或强度,进而得到表示裂尖区域应变能密度场的幅值或强度的应变能密度因子:

$$S = a_{11} K_I^2 + 2a_{12} K_I K_{II} + a_{22} K_{II}^2 = a_{11} (\sigma_x \cos^2 \alpha + \sigma_y \sin^2 \alpha)^2 \cdot \pi a + 2a_{12} (\sigma_x \cos^2 \alpha + \sigma_y \sin^2 \alpha) (\sigma_y - \sigma_x) \sin \alpha \cos \alpha \cdot \pi a + a_{22} (\sigma_y - \sigma_x)^2 \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha \cdot \pi a$$

其中

$$\begin{cases} a_{11} = \frac{1}{16\pi G} [(1 + \cos \theta) (3 - 4 \frac{\nu}{1 + \nu} - \cos \theta)] \\ a_{12} = \frac{1}{16\pi G} \cdot 2 \sin \theta [(\cos \theta - (1 - 2 \frac{\nu}{1 + \nu}))] \\ a_{22} = \frac{1}{16\pi G} [4(1 - \frac{\nu}{1 + \nu})(1 - \cos \theta) + (1 + \cos \theta)(3 \cos \theta - 1)] \end{cases}$$

根据最小应变能密度因子理论,假设裂纹沿最小应变能密度因子方向扩展,且裂纹扩展是由于最小应变能密度因子达到临界值而产生,则如图 12(a)中的二级裂纹开裂角 θ 必须同时满足以下两个条件 $\frac{\partial S}{\partial \theta} = 0$ 和 $\frac{\partial^2 S}{\partial \theta^2} > 0$ 。通过以上分析,可以得出结论,二级裂纹演化角度与力的加载比例、裂纹初始角度有关,与裂纹长度无关。

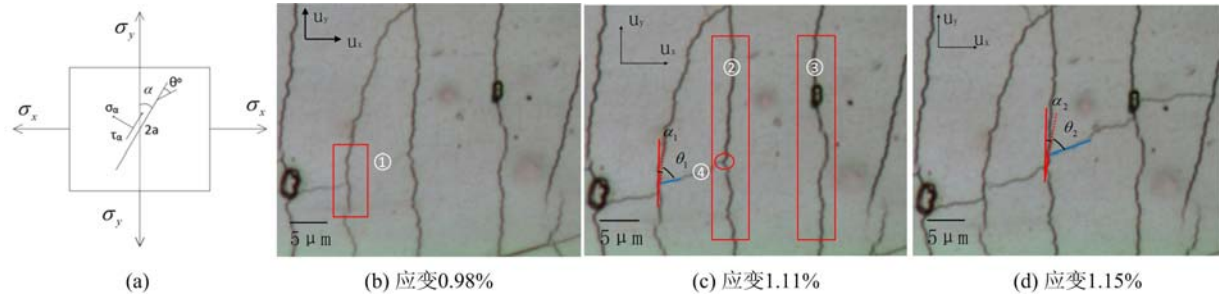


图 12 (a)双向加载薄膜受力图,(b)(c)(d)位移加载比 0.6 过渡层 100nm Al/300nm Cu 的裂纹演化

Fig. 12 (a) Stress analysis of thin film under biaxial tension

(b)(c)(d) Crack saturation of 100nm Al/300nm Cu at displacement loading ratio of 0.6

当加载比不同时,假设 $\sigma_x = \sigma_0$, $\sigma_y = k\sigma_0$,为了验证理论的正确性,选取 PI/100nm Al/300nm Cu 在位移加载比为 0.6 时的一条二级裂纹产生过程进行分析,图 12(b)(c)(d)为该二级裂纹的演化过程。利用上述方法得到应变能密度因子:

$$S = \frac{a\sigma_0^2}{16G} \{ [(1 + \cos \theta) (3 - 4 \frac{\nu}{1 + \nu} - \cos \theta)] (\cos^2 \alpha + k \sin^2 \alpha)^2 + 4 \sin [(\cos \theta - (1 - 2 \frac{\nu}{1 + \nu}))] (\cos^2 \alpha + k \sin^2 \alpha) (k - 1) \sin \alpha \cos \alpha + [4(1 - \frac{\nu}{1 + \nu})(1 - \cos \theta) + (1 + \cos \theta)(3 \cos \theta - 1)] (k - 1)^2 \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha \}$$

PI/100nm Al/300nm Cu 在应变为 0.98% 时双向力加载比为 1.29,即 $k_1 = \sigma_y / \sigma_x \approx 1.29$,如图 12(b)所示,①区域在达到应变 1.11% 时产生二级裂纹,如图 12(c)所示,测得图 12(c)中一级裂纹初始角度 $\alpha_1 \approx 5.0^\circ$,二级开裂角 $\theta_1 = 68.0^\circ$ 。根据最小应变能密度因子理论解得 $\theta_0 = 63.80^\circ$,二者相差不大。

PI/100nm Al/300nm Cu 在应变为 1.11% 时双向力加载比为 1.27,即 $k_2 = \sigma_y / \sigma_x \approx 1.27$,如图 12(c)所示。②、③区域内,两条一级条纹之间的交叉点④处出现裂纹扩展,扩展至应变 1.15% 时形成二级裂纹,如图 12(d)。测得图 12(d)一级裂纹角度, $\alpha_2 \approx 11.5^\circ$,二级裂纹开裂角 $\theta_2 = 61.0^\circ$ 。根据最小应变能密度因子理论解得 $\theta_0 = 62.60^\circ$,二者结果基本一致。

综上,通过此方法可以在给定初始裂纹角度和力加载比的情况下,预测二级及以上裂纹演化角度。

4 结论

本文设计优化了双向拉伸十字形试件,针对双向拉伸下 SSIF 结构的断裂损伤行为进行了实验研

究,得到如下结论:

(1) 本文设计的十字形试件在应变不均匀度为 0.05%、过渡弧半径为 4mm 时,中心均匀应变区域最大。随着加载比例的减小,中心均匀应变区域半径出现明显下降。过渡层泊松比越接近上层和基底泊松比,加载比例越接近等双轴状态,各层双向应力比更接近完全传递。

(2) 双向位移加载情况下,纳米薄膜的裂纹行为有别于单轴加载情况,形成网状裂纹。通过最小应变能密度因子理论预测了二级裂纹演化的开裂角度,其与力的加载比例、裂纹初始角度有关,与裂纹长度无关。

(3) 不同双轴加载比的情况下,一级裂纹临界应变随着加载比的降低而降低,二级及以上裂纹临界应变随着加载比例的增加而降低。过渡层 Al 的引入使得上层 Cu 膜的裂纹明显变疏,且相同薄膜厚度、不同薄膜调制比的薄膜/基底结构的一级临界应变基本一致,二级及以上临界应变相差较大。

本文进行的双向拉伸情况下 SSIF 结构的断裂损伤研究,为 SSIF 结构在双向载荷下力学性能的深入认识提供了新的思路,对其实际性能的了解与掌握具有很好的作用。

参考文献:

- [1] Xue Z, Hutchinson J W. Neck retardation and enhanced energy absorption in metal-elastomer bilayers[J]. *Mechanics of Materials*, 2007, 39(5):473-487.
- [2] Jia Z, Li T. Necking limit of substrate-supported metal layers under biaxial in-plane loading[J]. *International Journal of Plasticity*, 2013(51):65-79.
- [3] Yi D K, Xiao Z, Tan S K, et al. An interface crack under biaxial loading with dugdale plastic zone corrections in layered composite materials[J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2013(109):209-220.
- [4] Bettaieb M B, Abedmeraim F. Investigation of localized necking in substrate-supported metal layers: comparison of bifurcation and imperfection analyses[J]. *International Journal of Plasticity*, 2015(65):168-190.
- [5] Sun J Y, Lu N, Yoon J, et al. Inorganic islands on a highly stretchable polyimide substrate[J]. *Journal of Materials Research*, 2009, 24(11):3338-3342.
- [6] 朱晓莹, 潘峰. 金属纳米多层膜力学性能研究进展[J]. *中国材料进展*, 2011(10):1-13, 48 (ZHU Xiaoying, PAN Feng. Progress in research on the mechanical properties of nanoscale metallic multilayers[J]. *Materials China*, 2011(10):1-13, 48(in Chinese))
- [7] 门玉涛, 王世斌, 李林安, 等. 固体薄膜拉伸分叉行为的研究进展[J]. *实验力学*, 2013, 28(1):36-48 (MEN Yutao, WANG Shibin, LI Linan, et al. Research progress of bifurcation behavior of solid film subjected to stretch [J]. *Experimental Mechanics*, 2013, 28(1):36-48 (in Chinese))
- [8] Knorr I, Cordero N M, Lilleodden E T, et al. Mechanical behavior of nanoscale Cu/PdSi multilayers[J]. *Acta Materialia*, 2013, 61(13):4984-4995.
- [9] Djaziri S, Faurie D, Renault P, et al. Yield surface of polycrystalline thin films as revealed by non-equibiaxial loadings at small deformation[J]. *Acta Materialia*, 2013, 61(13):5067-5077.
- [10] Djaziri S, Thiaudiere D, Geandier G, et al. Controlled biaxial deformation of nanostructured W/Cu thin films studied by X-ray diffraction[J]. *Surface & Coatings Technology*, 2010, 205(5):1420-1425.
- [11] Renault P O, Bourhis E L, Goudeau P, et al. Non-equibiaxial deformation of W/Cu nanocomposite thin films on stretchable substrate: Effect of loading path[J]. *Thin Solid Films*, 2013(549):239-244.
- [12] Faurie D, Renault P, Bourhis E L, et al. Mastering the biaxial stress state in nanometric thin films on flexible substrates[J]. *Applied Surface Science*, 2014(306):70-74.
- [13] 张冠华, 王世斌, 李林安, 等. 确定微纳尺度金属薄膜拉伸分叉点的实验研究[J]. *实验力学*, 2014, 29(2):133-139 (ZHANG Guanhua, WANG Shibin, LI Linan, et al. Experimental investigation on determining the bifurcation of micro-nano scale metallic thin film subjected to tensile loading[J]. *Experimental Mechanics*, 2014, 29(2):133-139 (in Chinese))
- [14] Marx V M, Toth F, Wiesinger A, et al. The influence of a brittle Cr interlayer on the deformation behavior of thin Cu films on flexible substrates: Experiment and model[J]. *Acta Materialia*, 2015, 89:278-289.
- [15] Yvette S S, Villeteuse L U, Thiaudiere D, et al. Development of a synchrotron biaxial tensile device for in situ

- characterization of thin films mechanical response[J]. Review of Scientific Instruments, 2010, 81(10):103903.
- [16] Liu W, Guines D, Leotoing L, et al. Identification of sheet metal hardening for large strains with an in-plane biaxial tensile test and a dedicated cross specimen[J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2015(101): 387—398.
- [17] Li C, Liu Z, Xie H. Novel scanning electron microscope bulge test technique integrated with loading function[J]. Review of Scientific Instruments, 2014, 85(10):103709.
- [18] He W. Mechanical and microstructural properties of thin films on compliant substrates[D]. Université de Poitiers, 2016.
- [19] Sih G C. Mechanics of fracture initiation and propagation: surface and volume energy density applied as failure criterion[M]. Springer Science & Business Media, 2012.

Experimental Study of Fracture Damage of Nanometric Thin Film with Flexible Substrate and Transition Layer Subjected to Biaxial Tension

CHEN Qian, LI Lin-an, WANG Shi-bin, WANG Zhi-yong, LI Chuan-wei, LI Rong-jian, LI Teng
(Mechanics Department, School of Mechanical Engineering, Tianjin University, Tianjin 300350, China)

Abstract: Mechanical properties of Soft Substrate Interlayer Film (SSIF) are very important to the wide application of modern electronic components, and the study of its mechanical properties becomes very urgent. In this paper, fracture damage of SSIF structure subjected to biaxial tensile load is experimentally studied. Biaxial tensile experiment for different film structures deposited on 125 μm polyimide was performed under different loading ratios. Crack evolution process and saturated crack pattern were observed by means of optical microscope. Crack initiation angle in crack evolution was analyzed theoretically based on the minimum strain energy density factor theory; the influence of loading ratio and transition Poisson ratio on biaxial stress transfer ratio of each layer were analyzed by finite element method; under the condition of different film structures and loading ratios, crack evolution strain was compared. Experimental results show that under biaxial tensile load action, cracks of thin film present mesh pattern distribution; crack evolution angle is related to loading ratio and crack initiation angle. Critical strain of first-level crack initiation decreases with the decrease of loading ratio; critical strain of the cracks except of first-level crack and saturated strain of each level crack increase with the decrease of loading ratio. Under equivalent biaxial tension, the critical strain of the first-level cracks in the SSIF structure with the same film thickness but different film structures is basically consistent, however, the critical strain of the cracks except of first-level crack presents significant different.

Keywords: biaxial tension; thin film; flexible substrate; transition layer; crack