01;05

О применимости формулы Стони для расчета механических напряжений в толстых пленках и покрытиях

© А.В. Добрынин

Московский институт электронной техники

Поступило в Редакцию 11 февраля 1997 г.

Получены наиболее точные выражения для определения напряжений в покрытиях, например в нитриде алюминия на молибдене. Эпюра напряжений имеет характерную форму, поэтому всю систему предложено назвать "z-система". Показана ограниченность применимости формулы Стони, завышающей или занижающей истинные значения напряжений.

Для расчета напряжений в слоистых структурах часто применяются формулы Стони (Stoney) [1] и Тимошенко [2]. Первый рассматривал случай пренебрежимо малых толщин слоя, второй рассматривал случай равных толщин слоя и подложки. В основе этих методик лежит использование радиуса кривизны ρ структуры, изогнутой за счет разницы коэффициентов термического расширения пленки и подложки $\Delta\alpha$ и разницы между температурой осаждения и комнатной температурой Δt. Для простоты будем считать, что α пленки меньше α подложки, т. е. структура выпуклая. Если толщина пленки H_1, толщина подложки H_2, E_1^* и E_2^* — модифицированные модули Юнга слоя и подложки, где $E_1^* = E_1/(1-\nu_1)$ и $E_2^*/(1-\nu_2)$, а ν_1 и ν_2 — коэффициенты Пуассона, то радиус кривизны можно рассчитать по формуле [2]:

$$\rho = \frac{(H_1+H_2)/2 + (E_1^*H_1^3 + E_2^*H_2^3)(1/E_1^*H_1 + 1/E_2^*H_2)/6(H_1+H_2)}{\Delta\alpha\Delta t}. \tag{1}$$

В изотропном приближении будем считать, что напряжения вдоль осей x и y равны. Исходной точкой для построения эпюры нормальных напряжений σ_z является зависимость

$$\sigma_z = E_i x/\rho, \tag{2}$$

где x — координата относительно нейтрального слоя (начало координат совместим с нейтральным слоем). Если бы слоистая структура была

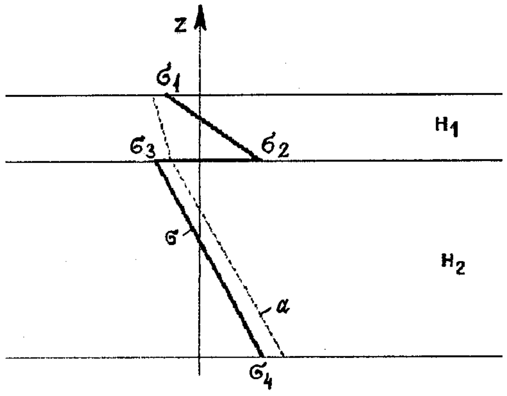

Рис. 1. Эпюра упругих напряжений: *a* — в слоистой структуре, подверженной простому изгибу; *b* — в неоднородной слоистой структуре, подверженной изгибу ($\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$ — главные напряжения, образующие "z-систему").

изогнута только под действием постоянного момента, то эпюра имела бы простой вид (линия *a* на рис. 1). При наличии термической деформации $\Delta\alpha\Delta t$ на поверхности раздела эпюра имеет разрыв (линия *b* на рис. 1). Эпюра принимает характерную форму, поэтому далее эту систему будем называть "z-система". Если $E_1^* \approx E_2^* \approx E$ (как, например, в системе AlN/Mo), то разница между σ_2 и σ_3 равна $E\Delta\alpha\Delta t$. Эта величина делится на правую и левую часть в пропорции $\sigma_2/\sigma_3 = \beta/(1-\beta)$, т.е.

$$\sigma_2 = E\beta\Delta\alpha\Delta t, \tag{3}$$

$$\sigma_3 = E(1-\beta)\Delta\alpha\Delta t. \tag{4}$$

Координаты нейтрального слоя в подложке и слое

$$H_2^* = -\Delta\alpha\Delta t(1-\beta)\rho, \tag{5}$$

$$H_1^* = \Delta\alpha\Delta t\beta\rho. \tag{6}$$

Для нахождения β учтем, что

$$\int_{z_{\min}}^{z_{\max}} \sigma_z = 0. \tag{7}$$

Откуда

$$\beta = H_2/(H_1 + H_2) - (H_2 - H_1)/(2\rho\Delta\alpha\Delta t). \quad (8)$$

Тогда для главных напряжений "z-системы" можно написать:

$$\sigma_1 = E\Delta\alpha\Delta t H_2/(H_1 + H_2) - E(H_2 + H_1)/2\rho, \quad (9)$$

$$\sigma_2 = E\Delta\alpha\Delta t H_2/(H_1 + H_2) - E(H_2 - H_1)/2\rho, \quad (10)$$

$$\sigma_3 = -E\Delta\alpha\Delta t H_1/(H_1 + H_2) - E(H_2 - H_1)/2\rho, \quad (11)$$

$$\sigma_4 = -E\Delta\alpha\Delta t H_1/(H_1 + H_2) + E(H_2 + H_1)/2\rho. \quad (12)$$

В этом случае можно рассчитать среднее напряжение в слое:

$$\bar{\sigma} = E\Delta\alpha\Delta t H_2/(H_1 + H_2) - EH_2/\rho. \quad (13)$$

Сравним представленные выше формулы $(9, 10, 13)$ с формулой Стони [1]:

$$\sigma_s = E_2 H_2^2/6\rho H_1. \quad (14)$$

Если

$$m = H_1/H_2 \;\; \text{и} \;\; n = E_1^*/E_2^* \neq 1, \quad (15)$$

то в "z-системе" аналогично получаются выражения для σ_1, σ_2, $\bar{\sigma}$. С учетом (14) и (15) получим простые выражения:

$$\sigma_1 = \sigma_s\Big[(nm^3 + 1)/(m + 1) - 3nm^2\Big] = K_1\sigma_s, \quad (16)$$

$$\sigma_2 = \sigma_s\Big[(nm^3 + 1)/(m + 1) + 3nm^2\Big] = K_2\sigma_s, \quad (17)$$

$$\bar{\sigma} = \sigma_s(nm^3 + 1)/(m + 1) = \bar{K}\sigma_s. \quad (18)$$

В качестве примера рассмотрим эпюры для структуры AlN/Mo, которую автор исследовал экспериментально для различных соотношений толщин m. Напряжения в слое не меняли свой знак при $m < 0.5$ и снижались с ростом толщины этого покрытия. Такая зависимость обусловлена снижением радиуса кривизны. В структуре AlN/Mo ($n = 1$; $m = 0.8$; $\Delta\alpha\Delta t = 1.85 \cdot 10^{-3}$) найдены следующие напряжения $\sigma_1 = -97.2\,\text{MPa}$, $\sigma_2 = 248\,\text{MPa}$, а по формуле (15) $\sigma_s = 90\,\text{MPa}$. Покрытие из поликристаллического нитрида алюминия разрушалось из-за превышения предела прочности на разрыв, а согласно формуле

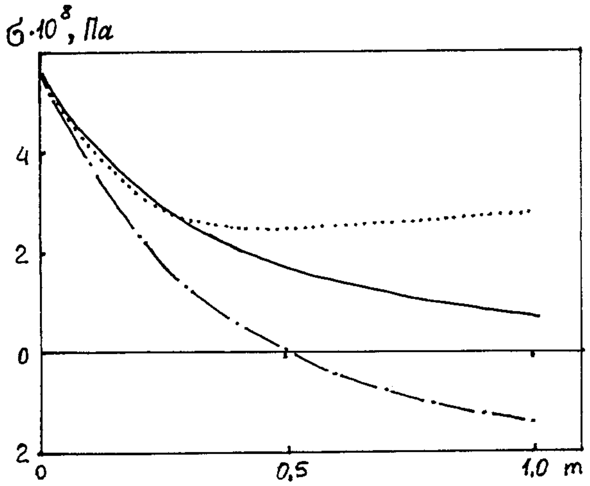

Рис. 2. Зависимость напряжений в покрытии из нитрида алюминия на основе из молибдена от соотношения толщин m (простая линия соответствует σ_s, штриховая линия — σ_1, пунктирная линия — σ_2).

Стони, оно испытывало сжатие, далекое от критического. Расчетные зависимости напряжений продемонстрированы на рис. 2.

Возможен ли случай, когда подложка преимущественно сжата, а слой целиком растянут. Для $\sigma_2 \leqslant 0$ получаем неравенство

$$(1+mn)\Big[m+(1+nm^3)/3nm(1+m)\Big] \leqslant 0, \qquad (19)$$

что не имеет смысла, так как n и m больше нуля. Дальнейший анализ зависимостей показал, что имеет место случай, когда подложка преимущественно растянута, а слой имеет различные напряжения: нижняя часть сжата, а верхняя растянута. Для этого необходимо, чтобы $\sigma_1 < 0$ и $\sigma_2 > 0$. Таким образом, с учетом (16) и (17) получаем:

$$2n^2m^3 + 3nm^2 - 1 > 0. \qquad (20)$$

По выражению (20) легко определить области существования отрицательных значений σ_1 (рис. 3). Очевидно, что толстые ($m > 0.5$) или жесткие слои ($n > 1$) могут частично растягиваться. Анализ

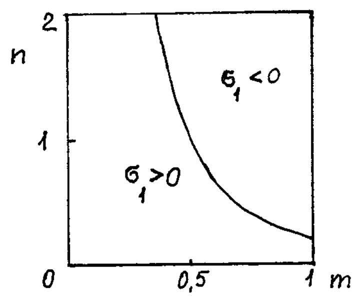

Рис. 3. Область существования отрицательных значений напряжений на поверхности покрытия при положительных значениях напряжений в покрытии возле поверхности раздела.

этих зависимостей показывает, что формулу Стони применять для толстых покрытий некорректно, но даже для относительно тонких слоев формула (15) дает завышенные значения напряжений. Очевидно, что для относительно тонких слоев ($m \leqslant 0.5$) завышение находится в пределах 10–20%. Однако формула Стони совершенно не отражает истинного положения дел в относительно толстых слоях или покрытиях, когда, согласно "z-системе", на верхней поверхности действует растяжение, а у поверхности раздела в слое действуют напряжения сжатия, многократно превышающие σ_s. Например, при $n = 2$ и $m = 1$ — $K_1 = -4.5$; $K_2 = +7.5$; $\bar{K} = 1.5$. Особенно сильны отклонения в том случае, когда материал покрытия более жесткий, чем материал подложки ($n > 1$), как например структуры: нитриды на кремнии, металлы на полиамидных пленках и другие.

Список литературы

[1] *Stoney G.S.* // Proc. Royal Soc. Ser. A. 1990. V. 82. NA553. P. 172–175.
[2] *Timoshenko S.P.* // J. Optical Soc. of America and Reviue of Scientific Instruments. 1925. V. 11. N 3. P. 233–255 (С.П. Тимошенко. Устойчивость стержней, пластин и оболочек. М.: Наука, 1971).