

# 多晶薄膜屈服强度的一个模型<sup>\*</sup>

张建民<sup>1,2)</sup> 徐可为<sup>2)</sup> 张美荣<sup>3)</sup>

<sup>1)</sup> 陕西师范大学物理学与信息技术学院, 西安 710062)

<sup>2)</sup> 西安交通大学金属材料强度国家重点实验室, 西安 710049)

<sup>3)</sup> 陕西师范大学图书馆, 西安 710062)

(2002 年 7 月 19 日收到, 2002 年 9 月 9 日收到修改稿)

从位错运动的应力功和应变能关系导出了附着在基体上并有钝化层薄膜的屈服强度公式. 该式表明多晶薄膜的屈服强度由两个影响因子(晶粒取向和位错类型)和三个强化因子(钝化层强化, 基体强化和晶粒强化)确定. 和已报道的实验结果基本一致表明了该模型的合理性.

关键词: 多晶薄膜, 屈服强度

PACC: 7340, 7360D, 7420

## 1. 引 言

随着大规模和超大规模集成电路的集成度和工作频率的不断提高, 微电子器件的工作条件变得越来越苛刻. 在保证薄膜导线功能特性的前提下, 人们对其力学性能提出了更高的要求. 因为在薄膜的沉积和制备钝化(或绝缘)层以及在以后的服役过程中, 薄膜中将会产生较大的应力. 例如 Flinn 在用热循环基片弯曲法测量硅基体上铜膜应力时发现在加热和冷却过程中铜膜中的压应力和张应力分别高达 200MPa 和 400MPa<sup>[1]</sup>. 如此大的应力完全有可能超过薄膜的屈服强度因而产生不可恢复的塑性变形. 大的张应力可使膜产生孔洞或裂纹<sup>[2,3]</sup>, 压应力可使膜产生小丘形凸起<sup>[4]</sup>. 孔洞或裂纹的扩展会引起内连导线的断路, 金属膜(或导线)的小丘形凸起会穿越层间(或线间)的绝缘层产生短路事故<sup>[5]</sup>. 直接影响集成电路的可靠性和使用寿命. 可见在保证薄膜功能特性的前提下, 对薄膜力学性能的研究显得尤为重要. 人们曾进行了大量的研究工作, 其中包括残余应力的产生机理<sup>[6-8]</sup>, 应力分布<sup>[9-11]</sup>, 应力松弛<sup>[12-14]</sup>. 但用于整体材料的常规测量方法很难适用于薄膜这样一个特殊的结构. 为此, 人们开发了许多用于测量薄膜残余应力和屈服强度的新方法, 其中

主要方法有: 单轴拉伸法(uniaxial tensile testing)<sup>[15,16]</sup>, 鼓胀法(bulge testing)<sup>[17,18]</sup>, 纳米压入法(nano-indentation)<sup>[19,20]</sup>, 微型悬臂梁绕度法(micro-cantilever beam deflection)<sup>[21,22]</sup>, x-射线衍射(x-ray diffraction)<sup>[23,24]</sup>, 热循环基片曲率测量(wafer curvature measurements during thermal cycle)<sup>[1,25]</sup>. 不同方法适用于膜的不同状态. 如前两种方法(自由膜的单轴拉伸和鼓胀法)需要将膜从基体上剥离下来, 其实验难度大, 且由于热应力的松弛而固有应力仍然存在常常使膜弯曲或皱褶, 难以获得理想的拉伸曲线. 更重要的是, 薄膜一旦从基体上剥离下来, 就增加了一个相对大的自由表面, 表面效应可能使膜的性能不同于原附着状态. 事实上, 低维材料附着于整体材料后界面效应也可能使其力学性能发生变异. 后 4 种方法均适用于附着膜, 但由于 x 射线衍射的选择性也可用于有薄的钝化(或绝缘)层的薄膜<sup>[26]</sup>. 因此, 即使对同一种材料的薄膜, 采用不同的方法, 或者说对处于不同状态的薄膜(自由膜、附着膜、附着并有钝化层膜)所测得的屈服强度明显不同. 比如就铝膜来说, Griffin 等人用鼓胀法测得的 1 $\mu$ m 厚的 Al-1% Si 自由膜的屈服强度明显地低于 Doerner 等人用热循环基片弯曲法测得的附着在硅基体上铝膜的屈服强度<sup>[18,19]</sup>. 另外, Doerner 等人的研究也发现, 膜的屈服强度随晶粒尺寸和膜厚的增加而减小. Li 等人用 x 射线衍射方法测量的结果表明, 对硅基体上同一厚

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金重点项目(批准号 59931010)资助的课题.

度的铝膜,有厚度为 640nm 的  $\text{SiO}_2$  钝化层的铝膜的屈服强度比无此钝化层的铝膜的屈服强度高,且二者的屈服强度均随膜厚的增加而减小<sup>[26]</sup>. Kuan 和 Murakami 也用 x 射线衍射方法测量了在 4.2K 时硅基体上不同厚度铅膜的屈服强度,也发现铅膜的屈服强度随膜厚的增加而减小<sup>[27]</sup>. Venkatraman 和 Bravman 的实验研究也发现,金属膜的屈服强度分别与膜厚和晶粒尺寸的倒数成正比<sup>[28]</sup>.

## 2. 薄膜屈服强度理论研究的简单回顾

除实验研究外,人们对薄膜屈服强度的理论也进行了大量的研究工作,下面以时间为序予以简单回顾.

1962 年,Blumberg 等人假设在膜发生塑性变形时,在晶粒内运动位错的两端被钉扎在晶界面或膜的上下表面上,并给出位错滑动的临界分切应力为<sup>[29]</sup>

$$\tau_c = \tau_0 + \frac{\alpha\mu_f b}{l},$$

其中  $\tau_0$  为单晶体的 Peierls 阻力,  $\mu_f$  为膜材的切变模量,  $b$  为位错的柏氏矢量,  $l$  为两个钉扎点间的距离,  $\alpha$  为常数(一般取 0.5—1). 如果取  $l$  等于膜厚,  $\alpha$  取最大值 1, 对 Pb 膜用此式计算的值几乎是他们实际测量值的 1/3.

1979 年,Chaudhari 建立了另一个模型,得到附着在基体上的金属薄膜所能承受的临界弹性应变与膜厚和晶粒尺寸的关系为<sup>[30]</sup>

$$\epsilon_c = \frac{0.42}{h} \left[ \ln\left(\frac{h}{b}\right) + 2.28 \right] + \frac{0.71}{d} \left[ \ln\left(\frac{d}{b}\right) + 1 \right]$$

(无钝化层时),

$$\epsilon_c = \frac{0.42}{h} \left[ \ln\left(\frac{h}{b}\right) + \ln\left(\frac{t}{b}\right) + 3.38 \right] + \frac{0.71}{d} \left[ \ln\left(\frac{d}{b}\right) + 1 \right]$$

(有厚度为  $t$  的钝化层时),

表明临界弹性应变近似与膜厚  $h$  和晶粒尺寸  $d$  的倒数成正比. 且用此式计算的结果和他们的实验结果基本一致. 但这一模型只适用于 [111] 结构的薄膜, 且在计算中要由应变松弛量来确定位错的构形和密度.

1982 年, Kuan 等人考虑了氧化层和基体的影响, 对 Blumberg 等人的模型进行了改进, 给出的临界分切应力公式为<sup>[27]</sup>

$$\tau_c = \frac{\mu_f b}{4\pi h' f} \left( \frac{1 - \nu_f \cos^2 \theta}{1 - \nu_f} \right) \left\{ (k_s + k_0 + 2) \ln \frac{\alpha h}{b} - 2k_s \ln 2 + (1 - k_0^2) \left[ \ln \frac{h' + h_0}{h_0} + (k_0 - 2) \ln \frac{h' + 2h_0}{2h_0} + k_0^2 \ln \frac{h' + 3h_0}{3h_0} + (k_0^3 - 2k_0) \ln \frac{h' + 4h_0}{4h_0} + \dots \right] \right\},$$

其中  $h' = \frac{h}{\sin \varphi}$ ,  $h$  为膜厚,  $\varphi$  为滑移面相对于膜面的

倾角,  $h_0$  为氧化层的厚度,  $\alpha = 2$ ,  $k_s = \frac{\mu_s - \mu_f}{\mu_s + \mu_f}$ ,  $k_0 =$

$\frac{\mu_0 - \mu_f}{\mu_0 + \mu_f}$ , 其中  $\mu_s, \mu_f, \mu_0$  分别为基体、薄膜和氧化层的切变模量,  $\nu_f$  为薄膜材料的泊松比,  $f$  为参数, 一般取 0.6—1. 在计算时, 第三项方括号内要取到第 26 项, 显然在实际应用时十分不便.

1989 年, Nix 给出了附着在基体上并有钝化层单晶膜的屈服强度表达式<sup>[31]</sup>

$$\sigma = \frac{\sin \varphi}{\cos \varphi \cos \lambda} \frac{b}{2\pi(1 - \nu_f)h} \times \left[ \frac{\mu_f \mu_t}{(\mu_f + \mu_t)} \ln\left(\frac{\beta_1 t}{b}\right) + \frac{\mu_f \mu_s}{(\mu_f + \mu_s)} \ln\left(\frac{\beta_s h}{b}\right) \right],$$

其中  $\lambda$  为位错的滑移方向与膜面法线方向间的夹角,  $\beta_s = 2.6$ ,  $\beta_1 = 17.5$  为数值常数, 其他符号的意义同前. 此式也表明薄膜的屈服强度近似与膜厚的倒数成正比. 但该式是针对单晶膜推导出来的, 因此不包括晶粒尺寸的影响.

本文在前人工作的基础上, 从位错运动的应力功和应变能的关系导出了附着在基体上并有钝化层多晶薄膜的屈服强度公式. 和已报道的实验结果基本一致, 表明了该式的合理性.

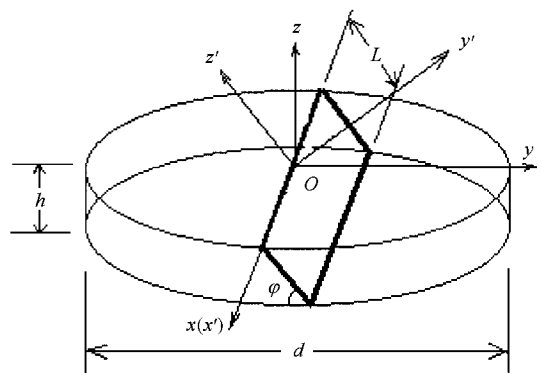


图 1 一个底面直径为  $d$ , 高为  $h$  (等于膜厚) 的圆柱状晶粒

### 3. 模 型

在连续的柱状晶薄膜中,取一直径为  $d$ ,高度等于膜厚  $h$  的圆柱体晶粒,如图 1 所示.考虑晶粒内部的一个位错环的扩展运动,膜应力所做的功为

$$W_{\text{stress}} = \alpha \tau b L d,$$

其中  $\tau$  为沿滑移方向的分切应力, $b$  为位错的柏氏矢量, $L$  为晶界面上位错线的长度,若滑移面(即  $x(x')$ - $z(z')$  面)和膜面(即  $x(x')$ - $y$  面)间的夹角为  $\varphi$ , $L$  和膜厚  $h$  间的关系可近似的表示为  $L = \frac{h}{\sin \varphi}$ . 参数

$\alpha = 0-1$ ,是考虑位错环的初始尺寸和扩展范围的修正因子.对附着在基体上并有钝化层的薄膜来说,由于在柱状晶粒的上、下底面(即界面)和侧面(即晶界面)有附加的能量(即界面能和晶界能)扩展的位错环最终停止(塞积)在这些界面上.当位错环在滑移面内由晶粒中心扩展到这些界面上时, $\alpha$  取最大值 1,则

$$W_{\text{stress}} = \tau b L d. \quad (1)$$

根据施密特(Schmid)定律<sup>[32]</sup>,沿滑移方向的分切应力  $\tau$  可以表示为

$$\tau = \sigma_y \cos \lambda_y \cos \left( \frac{\pi}{2} - \varphi \right) = \sigma_y \cos \lambda_y \sin \varphi, \quad (2)$$

其中  $\sigma_y = \sigma_x = \sigma$ ,为膜面内的二轴应力(设垂直于膜面方向的应力为零), $\lambda_y$  为滑移方向和  $\sigma_y$ (即  $y$  轴方向)间的夹角.为了得到滑移方向和膜面法线方向(取为  $z$  轴)的夹角,使坐标系  $(xyz)$  绕  $x$  轴(滑移面和晶粒上表面的交线)旋转  $\varphi$  角度后得到新坐标系  $(x'y'z')$ ,其中  $x'-z'$  面在滑移面内.那么沿滑移方向的单位向量用其方向余弦在两个坐标系中可分别表示为

$$\cos \lambda_x \mathbf{i} + \cos \lambda_y \mathbf{j} + \cos \lambda_z \mathbf{k},$$

$$\cos \lambda_x \mathbf{i}' - \sin \lambda_x \mathbf{k}' = \cos \lambda_x \mathbf{i} - \sin \lambda_x (-\cos \varphi \mathbf{j} + \sin \varphi \mathbf{k}).$$

比较以上两式可得

$$\cos \lambda_z = -\sin \lambda_x \sin \varphi,$$

$$\cos \lambda_y = \sin \lambda_x \cos \varphi = -\frac{\cos \lambda_z}{\sin \varphi} \cos \varphi.$$

把  $\cos \lambda_y$  的表达式代入(2)式,然后再代入(1)式,得到应力功的大小为

$$W_{\text{stress}} = \frac{\cos \varphi \cos \lambda}{\sin \varphi} \sigma b h d, \quad (3)$$

其中  $\lambda = \lambda_z$ ,为滑移方向和膜面法线方向间的夹角.要使这一扩展过程得以实现,应力所作的功应大于

或等于位错环滑移到这些界面时所对应的应变能(忽略位错的形成能,晶格阻力(即 Peierls 阻力)和第二相的阻力所作的功)

$$W_{\text{strain}} = 2LW_{\text{bound}} + d(W_{\text{top}} + W_{\text{bottom}}) \quad (4)$$

其中  $W_{\text{bound}}$ ,  $W_{\text{top}}$  和  $W_{\text{bottom}}$  分别表示分布在晶界面,上界面和下界面的位错线的能量密度.对混合型位错,可分别表示为<sup>[33]</sup>

$$W_{\text{bound}} = \frac{b^2(1 - \nu_f \cos^2 \beta) \mu_f}{4\pi(1 - \nu_f)} \ln \left( \frac{d}{r_0} \right), \quad (5)$$

$$W_{\text{top}} = \frac{b^2(1 - \nu_f \cos^2 \beta)}{4\pi(1 - \nu_f)} \frac{2\mu_f \mu_t}{(\mu_f + \mu_t)} \ln \left( \frac{\beta_t t}{r_0} \right), \quad (6)$$

$$W_{\text{bottom}} = \frac{b^2(1 - \nu_f \cos^2 \beta)}{4\pi(1 - \nu_f)} \frac{2\mu_f \mu_s}{(\mu_f + \mu_s)} \ln \left( \frac{\beta_s h}{r_0} \right), \quad (7)$$

其中  $\beta$  表示混合型位错柏氏矢量与位错线夹角, $\nu_f$  为薄膜材料的泊松比, $\mu_f$ ,  $\mu_s$  和  $\mu_t$  分别为薄膜、基体和钝化(或绝缘)层的弹性切变模量, $t$  为钝化层的厚度, $r_0 \approx b$  为位错中心区的半径, $\beta_t$  和  $\beta_s$  为由构成上、下界面材料确定的数值常数,把(5)-(7)式代入(4)式得

$$W_{\text{strain}} = \frac{b^2(1 - \nu_f \cos^2 \beta)}{2\pi(1 - \nu_f)} \left[ \frac{\mu_f \mu_t d}{\mu_f + \mu_t} \ln \left( \frac{\beta_t t}{b} \right) + \frac{\mu_f \mu_s d}{\mu_f + \mu_s} \ln \left( \frac{\beta_s t}{b} \right) + \frac{\mu_f h}{\sin \varphi} \ln \left( \frac{d}{b} \right) \right]. \quad (8)$$

根据前面的分析和功能关系,位错环增加的能量应等于位错环扩展过程中应力所作的功.令  $W_{\text{stress}} = W_{\text{strain}}$ ,得到附着在基体上并有钝化层薄膜的最小屈服应力为

$$\sigma_y = \frac{\sin \varphi}{\cos \varphi \cos \lambda} \frac{b(1 - \nu_f \cos^2 \beta)}{2\pi(1 - \nu_f)} \left[ \frac{\mu_f \mu_t}{(\mu_f + \mu_t)h} \ln \left( \frac{\beta_t t}{b} \right) + \frac{\mu_f \mu_s}{(\mu_f + \mu_s)h} \ln \left( \frac{\beta_s h}{b} \right) + \frac{\mu_f}{d \sin \varphi} \ln \left( \frac{d}{b} \right) \right]. \quad (9)$$

### 4. 讨 论

1) 此式是在忽略了位错的形成能,位错运动的阻力功,和位错之间以及位错与点缺陷之间的相互作用的前提下得到的.如果同时考虑这些因素,那么得到的多晶膜的屈服强度应高于(9)式所示的屈服强度.

2) 从(9)式可以看出,多晶膜的屈服强度是由下列两个影响因子和三个强化因子确定:

(a) 晶粒取向的影响:为此定义取向因子,  $r_c(hkl)$

$= \frac{\sin\varphi}{\cos\varphi\cos\lambda}$ , 其中下标 ( $hkl$ ) 表示特定的晶粒取向, 即晶粒的 ( $hkl$ ) 晶面平行于膜面.  $\varphi$  和  $\lambda$  分别为滑移面法线方向和位错的滑移方向与膜面法线方向间的夹角.

(b) 位错类型的影响:  $c_{\text{disl}} = \frac{b(1 - \nu_f \cos^2\beta)}{(1 - \nu_f)}$ ,  $b$  分别对应于混合型, 刃型, 螺型位错.

由于在一般情况下,  $\nu_f < 1$ , 螺型位错首先开动, 换句话说, 晶粒中包含的螺型位错越多, 屈服应力越小.

(c) 钝化层强化:  $c_{\text{top}} = \frac{\mu_f \mu_t}{(\mu_f + \mu_t)h} \ln\left(\frac{\beta_f t}{b}\right)$ , 可见钝化层的切变模量  $\mu_t$  越大 (即越硬), 对膜的强化作用越强.

(d) 基体强化:  $c_{\text{sub}} = \frac{\mu_f \mu_s}{(\mu_f + \mu_s)h} \ln\left(\frac{\beta_s h}{b}\right)$ , 同样基体的切变模量  $\mu_s$  越大 (即越硬), 对膜的强化作用也越强.

(e) 晶粒强化:  $c_{\text{grain}} = \frac{\mu_f}{d \sin\varphi} \ln\left(\frac{d}{b}\right)$ , 若忽略对数项的影响, 此项近似表明, 薄膜的屈服强度与晶粒尺寸的倒数成正比. 和传统的 Hall-Petch 经验关系,  $\sigma_y = \sigma_0 + k_y d^{-1/2}$ , 所表示的整体材料的强度与晶粒尺寸的依赖关系不同, 也常有文献就此进行讨论. 但应当注意到, Hall-Petch 关系所描述的整体材料中的晶粒尺寸远大于薄膜中的晶粒尺寸. 在不同的晶粒尺寸范围, 强度与晶粒尺寸的依赖关系不同是完全可能的. 如在纳米材料中, 晶界所占的体积份额大大增加 (约占 50%), 晶界的作用上升到主要地位, 其中的变形主要是通过晶粒的转动和相对滑动. 因此, 此模型以及给出的强度公式不再适用. 最近的理论和实验研究发现, 纳米材料的屈服强度随晶粒尺寸的减小而减小<sup>[34, 35]</sup>.

3) 对单晶薄膜 ( $d \rightarrow \infty$ ) 和刃型位错 (9) 式变为

$$\sigma_y = \frac{\sin\varphi}{\cos\varphi\cos\lambda} \frac{b}{2\pi(1 - \nu_f)h} \times \left[ \frac{\mu_f \mu_t}{(\mu_f + \mu_t)h} \ln\left(\frac{\beta_f t}{b}\right) + \frac{\mu_f \mu_s}{(\mu_f + \mu_s)h} \ln\left(\frac{\beta_s h}{b}\right) \right],$$

即为 Nix 给出的单晶薄膜的屈服强度公式.

4) 对膜的其他两种存在形式, 附着膜和自由膜, 若对应 ( $hkl$ ) 取向晶粒的自由表面能密度为  $\gamma_{(hkl)}$ , 滑移到自由表面的位错 (ledges) 的线能量密度为  $b\gamma_{(hkl)}$ <sup>[30]</sup>, 乘以柱状晶的直径  $d$  即可得在自由表面

上位错所对应的能量, 那么 (6) 式 (对附着膜), 或 (6) 和 (7) 两式 (对自由膜) 应由  $bd\gamma_{(hkl)}$  代替. 容易导出附着膜和自由膜的屈服强度分别为

$$\sigma_y = \frac{\sin\varphi}{\cos\varphi\cos\lambda} \left\{ \frac{\gamma_{(hkl)}}{h} + \frac{b(1 - \nu_f \cos^2\beta)}{2\pi(1 - \nu_f)} \times \left[ \frac{\mu_f \mu_s}{(\mu_f + \mu_s)h} \ln\left(\frac{\beta_s h}{b}\right) + \frac{\mu_f}{d \sin\varphi} \ln\left(\frac{d}{b}\right) \right] \right\} \quad (\text{附着膜}),$$

$$\sigma_y = \frac{\sin\varphi}{\cos\varphi\cos\lambda} \left\{ \frac{2\gamma_{(hkl)}}{h} + \frac{b(1 - \nu_f \cos^2\beta)}{2\pi(1 - \nu_f)} \times \left[ \frac{\mu_f}{d \sin\varphi} \ln\left(\frac{d}{b}\right) \right] \right\} \quad (\text{自由膜}).$$

由于在自由表面上形成一个位错比在界面上形成同样长度的位错所需能量小<sup>[30]</sup>, 因此由上两式和 (9) 式可知, 对同一种材料和微结构的薄膜, 其屈服强度按自由膜, 附着膜, 附着并有钝化层膜的次序依次增加, 下面给出理论和已报道实验结果的比较.

## 5. 和已报道实验结果比较

Kuan 和 Murakami 用 x 射线衍射方法测量了硅基体上不同厚度铅膜的屈服强度<sup>[27]</sup>, 其结果用三角符号表示在图 2 中, 图中的曲线为用 (9) 式计算的结果.

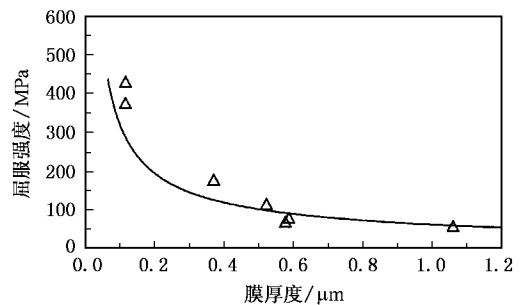


图 2 硅基体上铅膜屈服强度的计算和测量结果比较

可以看出理论和实验结果基本一致. 计算中利用了下列参数,  $\frac{\sin\varphi}{\cos\varphi\cos\lambda} = 3.464$  (因为薄膜为强烈的 [111] 织构, 此值为按面心立方的 12 个滑移系计算的相对于 [111] 取向的取向因子平均值)<sup>[36]</sup>,  $b = 0.349 \text{ nm}$ , 为铅的柏氏矢量,  $\beta \approx \varphi \approx 45^\circ$ ,  $t = 5 \text{ nm}$ ,  $d = 4.5 \mu\text{m}$ <sup>[27]</sup>,  $\nu_f = 0.387$ ,  $\mu_f = 10.1 \text{ GPa}$ ,  $\mu_t = \mu_s = 64.1 \text{ GPa}$ <sup>[37]</sup>,  $\beta_f = 17.5$ ,  $\beta_s = 2.6$ <sup>[31]</sup>.

Doerner 等人用热循环基片弯曲方法测量了硅基体上不同厚度铝膜的屈服强度<sup>[19]</sup>,其结果用圆圈表示在图 3 中. Li 等人用 x 射线衍射方法测量了硅基体上有厚度为 640nm 的 SiO<sub>2</sub> 钝化层和无此钝化层的不同厚度铝膜的屈服强度<sup>[26]</sup>,其结果如图 3 中的菱形(有钝化层)和三角形(无钝化层)所示.

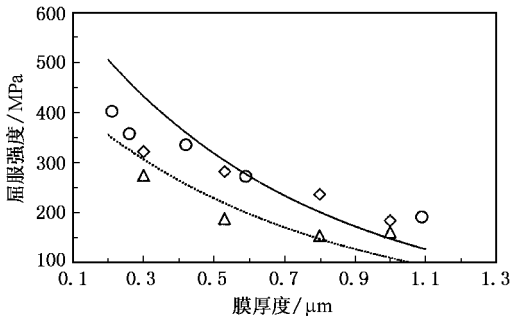


图 3 硅基体上铝膜屈服强度的计算与实验结果的比较

用(9)式计算的有钝化层和无钝化层铝膜的屈服强度分别用实线和虚线所示,计算中所用的参数为: $\frac{\sin\varphi}{\cos\varphi\cos\lambda} = 4.3736$ (因为薄膜为自由取向,取面心立方结构薄膜中取向因子的算术平均值<sup>[38]</sup>), $b = 0.2858\text{nm}$ ,为铝的柏氏矢量, $d \approx h$ , $t = 640\text{nm}$ <sup>[26]</sup>, $\nu_t$

$= 0.347$ , $\mu_t = 26.5\text{GPa}$ , $\mu_s = 64.1\text{GPa}$ <sup>[37]</sup>, $\beta_s = \beta_t = 2.6$ <sup>[31]</sup>.可以看出,计算结果和实验结果基本一致,有钝化层铝膜的强度比无钝化层铝膜的强度高是由于钝化层的附加强化所致.另外,Doerner 等人的实验结果和有钝化层的计算结果以及 Li 等人测量的有钝化层的结果基本一致也许是由于在由室温到 450℃ 的热循环过程中膜表面有氧化层生成.

## 6. 结 论

对薄膜材料,除像整体材料一样具有晶粒强化和第二相强化(本文未考虑)外,由于基体和钝化层对薄膜中位错的运动有一定的阻碍和钉扎作用,因此,对同一种材料和微结构(包括膜厚、晶粒尺寸和织构)的薄膜,其屈服强度按自由膜、附着膜、附着并有钝化层膜的次序依次增加.另外,由于薄膜的上、下界面和晶界面(或者说在这些界面处塞积的位错)对晶粒中心位错运动的阻碍作用与该位错离这些界面的距离有关,距离越小,阻碍作用越强.因此薄膜的屈服强度随膜厚和晶粒尺寸的减小而增加.理论和已报道的实验结果基本一致,证明了本模型的合理性.

- [ 1 ] Flinn P A 1991 *J. Mater. Res.* **6** 1498
- [ 2 ] Vinci R P, Marieb T N and Bravman J C 1993 *Mar. Res. Soc. Symp. Proc.* **308** 297
- [ 3 ] Børgesen P, Lee J K, Gleixner R and Li C Y 1992 *Appl. Phys. Lett.* **60** 1706
- [ 4 ] Chaudhari P 1974 *J. Appl. Phys.* **45** 4339
- [ 5 ] Gardner D S and Flinn P A 1988 *IEEE Trans. Electron Devices* **35** 2160
- [ 6 ] Kamminga J D, Keijser T H, Delhez R and Mittemeijer E J 1998 *Thin Solid Films* **317** 169
- [ 7 ] Hudson C and Somekh R E 1996 *J. Vac. Sci. Technol. A* **14** 2169
- [ 8 ] Nix W D and Clemens B M 1999 *J. Mater. Res.* **14** 3467
- [ 9 ] Röll K 1976 *J. Appl. Phys.* **47** 3224
- [ 10 ] Niwa H, Yagi H, Tsuchikawa H and Kato M 1990 *J. Appl. Phys.* **68** 328
- [ 11 ] Perry A J, Jagner M, Sproul W D and Rudnik P J 1990 *Surf. Coat. Technol.* **42** 49
- [ 12 ] Hershkovitz M, Blech I A and Komem Y 1985 *Thin Solid Films* **130** 87
- [ 13 ] Koleshko V M, Belitsky V F and Kiryushin I V 1986 *Thin Solid Films* **142** 199
- [ 14 ] Witvrouw A, Proost J, Roussel P, Cosmans P and Maex K 1999 *J. Mater. Res.* **14** 1246
- [ 15 ] Ruud J A, Josell D, Spaepen F and Greer A L 1993 *J. Mater. Res.* **8** 112
- [ 16 ] Hommel M, Kraft O and Arzt E 1999 *J. Mater. Res.* **14** 2373
- [ 17 ] Catlin A and Walker W P 1960 *J. Appl. Phys.* **31** 2135
- [ 18 ] Griffin A J, Brotzen F R and Dunn C F 1987 *Thin Solid films* **150** 237
- [ 19 ] Doerner M F, Gardner D S and Nix W D 1986 *J. Mater. Res.* **1** 845
- [ 20 ] Lafontaine W R, Paszkiet C A, Korhonen M A and Li C Y 1991 *J. Mater. Res.* **6** 2084
- [ 21 ] Weihs T P, Hong S, Bravman J C and Nix W D 1988 *J. Mater. Res.* **3** 931
- [ 22 ] Moulard G, Contoux G, Motyl G, Gardet G and Courbon J 1998 *J. Vac. Sci. Technol. A* **16** 736
- [ 23 ] Shute C J and Cohen J B 1991 *J. Mater. Res.* **6** 950
- [ 24 ] Xu K W and He J W 1994 *Surf. Coat. Technol.* **70** 115
- [ 25 ] Flinn P A, Gardner D S and Nix W D 1987 *IEEE Trans. Electron Devices* ED-**34** 689
- [ 26 ] Li Z H, Wu G Y, Gu Y, Chen W R and Wang Y Y 1996 *J. Vac. Sci. Technol. A* **14** 2693

- [ 27 ] Kuan T S and Murakami M 1982 *Metal. Trans. A* **13** 383
- [ 28 ] Venkatraman R and Bravman J C 1992 *J. Mater. Res.* **7** 2040
- [ 29 ] Blumberg R H and Seraphim D P 1962 *J. Appl. Phys.* **33** 163
- [ 30 ] Chaudhari P 1979 *Phil. Mag. A* **39** 507
- [ 31 ] Nix W D 1989 *Metal. Trans. A* **20** 2217
- [ 32 ] Shi D K and Shen L 1995 *Foundation of Materials Science*( Xi 'an Jiaotong University Press ,Xi 'an )p140( in Chinese ) 石德珂、沈莲 1995 材料科学基础( 西安 :西安交通大学出版社 )第 140 页 ]
- [ 33 ] Hirth J P and Lothe J 1968 *Theory of dislocations*( New York : John Wiley Press ) p368
- [ 34 ] Lu K ,Liu X D and Hu Z Q 1994 *J. Mater. Res.* **8** 385( in Chinese ) [ 卢柯、刘学东、胡壮麒 1994 材料研究学报 **8** 385 ]
- [ 35 ] Zhu W H ,Zhou G Q and Cheng J Y 1996 *Acta Metall. Sin.* **32** 959 ( in Chinese ) 朱文辉、周光泉、程经毅 1996 金属学报 **32** 959 ]
- [ 36 ] Zhang J M ,Xu K W and He J W 1999 *J. Mater. Sci. Lett.* **18** 471
- [ 37 ] Zhang J M and Xu K W 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2562 ( in Chinese ) 张建民、徐可为 2002 物理学报 **51** 2562 ]
- [ 38 ] Hirth J P and Lothe J 1968 *Theory of dislocations*( New York : John Wiley Press ) p171

## A model for the yield strength of a thin polycrystalline film \*

Zhang Jian-Min<sup>1,2)</sup> Xu Ke-Wei<sup>2)</sup> Zhang Mei-Rong<sup>3)</sup>

<sup>1)</sup>( College of Physics and Information Technology , Shaanxi Normal University , Xi 'an 710062 , China )

<sup>2)</sup>( State Key Laboratory for Mechanical Behaviour of Materials , Xi 'an Jiaotong University , Xi 'an 710049 , China )

<sup>3)</sup>( Librang , Shaanxi Normal University , Xi 'an 710062 , China )

( Received 19 July 2002 ; revised manuscript received 9 September 2002 )

### Abstract

A simple expression for the yield strength of a thin polycrystalline film attached to a substrate and with a passivated layer has been derived from a relationship between stress work for dislocation moving and strain energy. It is shown that , the yield strength of a polycrystalline film is determined by two affecting factors ( orientation of grains and type of dislocations ) and three strengthening factors ( passivated layer strengthening , substrate strengthening , and grain-size strengthening ). Predictions from the expression are in agreement with reported experimental results. This shows that the model is reasonable.

**Keywords** : thin polycrystalline films , yield strength

**PACC** : 7340 , 7360D , 7420

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 59931010 ).