

# 薄膜中异常晶粒生长理论及能量各向异性分析<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 17 日收到 2002 年 9 月 9 日收到修改稿)

针对柱状晶薄膜, 建立了异常晶粒生长理论模型. 指出薄膜中的晶粒生长, 除像传统的整体材料中的晶粒生长一样考虑晶界能外, 还应当考虑表面能、界面能和应变能. 对能量的各向异性进行了回顾性分析. 从表面能的最小化考虑, 面心立方和体心立方薄膜的择优取向或织构应分别为(111)和(110); 而从应变能的最小化考虑, 面心立方和体心立方薄膜的择优取向或织构应分别为(110)和(100).

关键词: 薄膜, 异常晶粒生长, 模型, 织构

PACC: 6110, 6114, 6150C

## 1. 引言

薄膜材料已广泛用于机械、电子、能源、信息等各个领域. 在所有这些应用中, 薄膜的物理、化学和力学性能在很大程度上取决于薄膜的微结构, 其中包括膜厚、晶粒尺寸及其分布、缺陷密度和织构. Sun 等人对低能溅射 W 膜的研究发现: 随着沉积温度的升高和膜厚的增加, 晶粒尺寸变大, 电阻率则变低, 认为晶粒尺寸是决定薄膜电阻率的重要因素<sup>[1]</sup>. Cho 等人对宽度为 2.2  $\mu\text{m}$  的 50 条平行的 Al-2% Cu-0.3% Cr 导线的研究表明: 晶粒尺寸对电迁移诱导的中期失效时间 MTTT (median time to failure) 有强烈影响, 认为增加薄膜导体中的晶粒尺寸, 可以减少电迁移短路通道的数目, 因而是一种直接改善电迁移失效的好方法<sup>[2]</sup>. Doerner 等人<sup>[3]</sup>, Li 等人<sup>[4]</sup>, Venkatraman 等人<sup>[5]</sup>的研究结果表明: Al 膜的屈服强度分别与膜厚和晶粒尺寸的倒数成正比. 我们根据位错运动的应力功和应变能间的关系导出了多晶膜的屈服强度公式, 指出多晶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, 成功地解释了他们的实验结果<sup>[6]</sup>.

由于织构的存在将使薄膜材料的性能发生各向异性, 因而引起了人们的极大关注. Young 等人<sup>[7]</sup>和

Chang 等人<sup>[8]</sup>的研究结果表明: 在 Cu 的(100)面上形成氧化物或硅化物的速率比在(111)面上的快得多. Huang 等人<sup>[9]</sup>, Roy 等人<sup>[10]</sup>, Bai 等人<sup>[11]</sup>, Burnett 等人<sup>[12]</sup>和 Kim 等人<sup>[13]</sup>分别对 Ag, Al 和 Cu 膜的研究均发现: 就(200)和(111)两个织构而言(200)织构越强, 残余压应力越大, 电阻率越大. 反之(111)织构越强, 残余张应力越大, 电阻率越小. 最近, Leoni 等人<sup>[14]</sup>对 TiN 和(Ti, Cr)N 的研究也发现了类似关系, 即(h00)织构越强, 残余压应力越大. 我们曾根据弹性理论对以上实验结果进行了理论分析<sup>[15]</sup>.

薄膜材料的织构除与其沉积工艺有关外<sup>[16-21]</sup>, 也可通过退火晶粒生长来改变. 和块体材料一样, 薄膜中的晶粒生长也分为正常晶粒生长和异常晶粒生长两种类型. 当正常晶粒生长由于初始织构、第二相或膜厚效应被塞积时便发生异常晶粒生长. 由于异常晶粒生长是个别取向晶粒的择优生长, 因而使膜的择优取向或织构发生变化. Ohmi 等人在 Si 基体上沉积 Cu 膜, 发现当用低能粒子轰击时 Cu 膜的择优取向为(100)和(111); 但经退火处理后, 起初的(111)取向几乎全部转变为(100)取向, 且形成了直径约为 100  $\mu\text{m}$  的异常大晶粒<sup>[22, 23]</sup>. Tracy 等人曾采用各种不同方法沉积 Cu 膜, 并对膜的织构进行了深入研究, 结果发现: 主要的择优取向为(100)(110), (111)和(511)<sup>[24]</sup>. Longworth 等人对分别用 Mn, Mn 和 Cr, Ag, Ag 和 Cr, Cu 及 W 合金化的 Al 膜进行退火处

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 50271038, 59931010)资助的课题.

理发现膜的织构从起初的(111)转变为(110)和(112)<sup>[25]</sup>.我们曾对 Ag 和 Cu 自由膜和 Si 基体上的 Ag 和 Cu 附着膜经 300℃, 2h 退火后的异常晶粒生长和织构变化进行了实验研究. 结果表明: Ag 和 Cu 自由膜的(111)织构稍有加强. 但 Si 基体上的 Ag 和 Cu 附着膜的(100)和(110)织构明显加强, 并在 Cu 附着膜中观察到了(110)和(211)取向的异常大晶粒<sup>[26]</sup>. 这些实验结果很难用传统的晶粒生长理论解释<sup>[27]</sup>.

本文针对柱状晶薄膜, 从能量角度出发建立了异常晶粒生长理论模型, 导出了异常晶粒生长速率公式. 回顾性地分析了晶界能、(自由)表面能、(膜-基)界面能、应变能的各向异性. 其结果可用于薄膜材料的织构及其相关性能的控制和预报.

## 2. 模 型

如图 1 所示, 假设在膜厚为  $h$ , 平均晶粒尺寸为  $r_n$ , 平均表面能面密度、界面能面密度、应变能体密度分别为  $\bar{\gamma}_s, \bar{\gamma}_i, \bar{w}$  的正常柱状晶粒中生长了一个半径为  $r_s$  的异常大柱状晶粒.

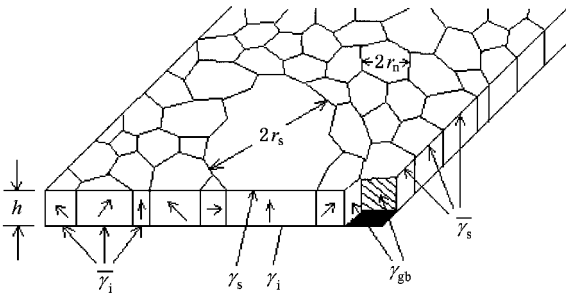


图 1 薄膜中异常晶粒生长模型

若对应该异常大柱状晶粒的表面能面密度、界面能面密度和应变能体密度分别为  $\gamma_s, \gamma_i$  和  $w$ , 那么能量的各向异性可以定义为

$$\Delta\gamma_s = \bar{\gamma}_s - \gamma_s,$$

$$\Delta\gamma_i = \bar{\gamma}_i - \gamma_i,$$

$$\Delta w_i = \bar{w} - w.$$

在异常晶粒生长之前, 对应该区域的总能量密度为

$$F_1 = (\pi r_s^2 \bar{\gamma}_s + \pi r_s^2 \bar{\gamma}_i + \pi r_s^2 h \bar{w} + \pi r_s^2 h N_n A_{gb} \gamma_{gb}) \pi r_s^2 h,$$

其中  $N_n$  表示单位体积内的正常晶粒个数,  $A_{gb}$  是单

个正常晶粒的平均晶界面积,  $\gamma_{gb}$  是平均晶界能面密度. 当该区域转换成一个异常大晶粒后, 对应的总能量密度为

$$F_2 = (\pi r_s^2 \gamma_s + \pi r_s^2 \gamma_i + \pi r_s^2 h w + 2\pi r_s h \gamma_{gb}) \pi r_s^2 h.$$

那么, 能量密度的变化量为

$$\Delta F = F_2 - F_1 = -\frac{\Delta\gamma_s}{h} - \frac{\Delta\gamma_i}{h} - \Delta w - N_n A_{gb} \gamma_{gb} + \frac{2\gamma_{gb}}{r_s} \quad (1)$$

由于正常柱状晶粒的最可几形状为正六棱柱, 因此可以写出

$$N_n = \frac{1}{V_n} = \frac{2}{3\sqrt{3}r_n^2 h},$$

$$A_{gb} = \frac{6r_n h}{2} = 3r_n h.$$

代入(1)式得

$$\Delta F = -\frac{\Delta\gamma_s}{h} - \frac{\Delta\gamma_i}{h} - \Delta w - \frac{2\sqrt{3}}{3} \frac{\gamma_{gb}}{r_n} + \frac{2\gamma_{gb}}{r_s} \quad (2)$$

在异常大晶粒被塞积之前, 它在膜平面内的生长速率(即晶界的迁移速率)可以表示为<sup>[28]</sup>

$$\frac{dr_s}{dt} = -M(T) \cdot \Delta F, \quad (3)$$

其中  $M(T)$  表示晶界的活性(即动力学条件), 它与晶界的扩散系数  $D_g$  有以下关系:

$$M(T) = \frac{D_g}{RT} = \frac{D_0}{RT} \exp\left(-\frac{Q_g}{RT}\right),$$

$D_0$  为与温度无关的常数,  $R$  为气体常数,  $T$  为绝对温度,  $Q_g$  为晶界扩散激活能.  $\Delta F$  是晶界迁移的驱动力(即热力学条件). 前面负号的意义表示在晶粒生长过程中, 伴随着系统总能量的减少.

可见, 晶粒的生长速率取决于两个因素, 一个是晶界迁移的驱动力(即热力学条件), 一个是晶界的活性(即动力学条件). 另外还应当指出, 杂质或第二相在晶界处的偏析及自由表面在晶界处开槽对晶界运动也有一定的阻碍或钉扎作用<sup>[29]</sup>.

把(2)式代入(3)式后得

$$\frac{dr_s}{dt} = M(T) \cdot \left( \frac{\Delta\gamma_s}{h} + \frac{\Delta\gamma_i}{h} + \Delta w + \frac{1.15\gamma_{gb}}{r_n} - \frac{2\gamma_{gb}}{r_s} \right), \quad (4)$$

括号内的前三项反映的是表面能、膜-基界面能、应变能各向异性的影响. 首先说明在薄膜(特别是柱状晶薄膜)中, 表面能、膜-基界面能、应变能的各向异性可以提供异常晶粒生长的附加驱动力. 第二, 异常

大晶粒的取向将使这三个能量之和为最小,或者说使这三个能量之和为最小值的哪几个取向的晶粒将择优生长成为异常大晶粒,据此可以预言或控制退火膜的织构。第三,随着膜厚的减小,表面能和界面能各向异性的影响越明显,这是由于膜厚越小,表面和界面所占的份额越大。第四,对应表面能为最小值的取向所对应的膜-基界面能(或应变能)不一定也为最小。第五,对附着在单晶基体上的薄膜,界面能不仅与晶粒在膜面法线方向的取向有关,还与晶粒在膜平面内的取向有关。此外,上式第四项反映的是正常晶粒的晶界面积(即伴随的晶界能)减小所产生的驱动力。最后一项是随异常大晶粒晶界面积(即伴随的晶界能)的增加所产生的阻力。

(4)式是异常晶粒生长的一般形式,实际上异常晶粒的生长速率随膜所处的状态及异常晶粒生长的阶段而变化。

1) 对块体材料,  $h$  很大, 前两项趋于零, 因此只需考虑晶界能和应变能。

2) 对自由(或三明治)结构的薄膜, 上下表面具有相同的能量, 即  $\Delta\gamma_s = \Delta\gamma_i = \Delta\gamma$  (4)式可表示为

$$\frac{dr_s}{dt} = M(T) \cdot \left( \frac{2\Delta\gamma}{h} + \Delta w + \frac{1.15\gamma_{gb}}{r_n} - \frac{2\gamma_{gb}}{r_s} \right).$$

3) 在异常晶粒生长的初始阶段,  $r_s \approx r_n$  (4)式变为

$$\frac{dr_s}{dt} = M(T) \cdot \left( \frac{\Delta\gamma_s}{h} + \frac{\Delta\gamma_i}{h} + \Delta w - \frac{0.85\gamma_{gb}}{r_n} \right),$$

表明在异常晶粒生长的初期, 存在一定的阻力(见上式第四项), 若没有足够大的能量各向异性, 异常晶粒生长难以进行。因此, 在晶粒生长的实验中, 首先是正常晶粒生长, 直到其由于某种原因(如初始织构、第二相或自由表面在晶界处开槽)被塞积后, 才出现异常晶粒生长。

4) 在异常晶粒生长的后期, 其尺寸比周围的正常晶粒的尺寸大得多,  $r_s \gg r_n$  (4)式中的第五项趋于零,

$$\frac{dr_s}{dt} = M(T) \cdot \left( \frac{\Delta\gamma_s}{h} + \frac{\Delta\gamma_i}{h} + \Delta w + \frac{1.15\gamma_{gb}}{r_n} \right).$$

### 3. 能量各向异性分析

#### 3.1. 晶界能

金属或合金薄膜中的晶体缺陷按其几何特征一般分为三类: 点缺陷(如空位、间隙原子、异类原子

等) 线缺陷(如位错)和面缺陷(如晶界、亚晶界、孪晶界、相界、堆垛层错、自由表面、膜-基界面等)。由于缺陷处原子的排列失去了规则性, 产生点阵畸变, 因而引起能量升高。对应于晶界面上的附加能量称为晶界能。用单位面积的能量(即晶界能面密度)  $\gamma_{gb}$  表示, 其单位为  $J/m^2$ 。在三维情况下, 晶界能的大小与相邻两个晶粒之间的相对取向(需用三个角坐标描述)和晶界面相对于其中一个晶粒的取向(需用两个角坐标描述)有关。在二维情况下, 相邻两个晶粒之间的相对取向可用它们之间的位向差  $\theta$  (一个角坐标)描述, 晶界线的取向也可用一个角坐标描述。如果忽略晶界线取向的影响而仅考虑相邻两个晶粒之间的位向差  $\theta$ , 那么对  $\theta < 15^\circ$  的小角度晶界能  $\gamma_{gb}$  与相邻两个晶粒之间的位向差  $\theta$  间的关系可用 Read-Shockley 公式表示<sup>[30-31]</sup>

$$\gamma_{gb} = \gamma_0 (A - \ln \theta),$$

式中  $\gamma_0 = \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)}$ , 其中  $\mu$ ,  $\nu$  和  $b$  分别为材料的切变模量、泊松比和位错柏氏矢量,  $A$  为积分常数, 取决于位错中心的原子错排能。由上式可以看出, 小角度晶界能随相邻两个晶粒之间位向差  $\theta$  的增大而增加。

大角度晶界能一般在  $0.25 \sim 1.0 J/m^2$  范围内, 可以认为是常数。

#### 3.2. 表面能

晶体的自由表面指其与真空接触的界面。表面原子排列情况与晶体内部的不同。每个原子只是部分地与其他原子相结合, 相邻原子数少于晶体内部, 因而表面层原子间结合键数比晶体内部的少。这样, 表面原子就会偏离其平衡位置, 并影响到邻近的几层原子, 造成表面层的点阵畸变, 使它们的能量比内部原子高。这几层高能量的原子层称为表面。晶体表面单位面积能量的增加称为表面能面密度, 一般用符号  $\gamma_s$  表示, 单位也为  $J/m^2$ 。或用表面张力  $\sigma_s$  (单位为  $N/m$ ) 表示。

薄膜的厚度一般在纳米到微米量级, 表面(或界面)的影响占有相当大的比例。由于表面(或界面)处物质的连续性发生中断, 由此引起薄膜功能特性发生变化, 包括: 由于表面能的影响使熔点降低、干涉效应引起光的选择性透射和反射、表面上由于电子的非弹性散射使电导率发生变化、平面磁各向异性的产生、表面能级的产生、由于量子尺寸效应引起输

运现象的变化等.

晶体的表面能与表面原子的排列情况有关,原子密排面具有最小的表面能(如面心立方金属的(111)面和体心立方金属的(110)面).此外,表面能还与晶体表面曲率有关.当其他条件相同时,曲率愈大,表面能也愈大.

表面能的大小除可以直接测量外<sup>[32]</sup>,尚有多种计算方法.Daw 等人根据密度函数理论发展了镶嵌原子方法(embedded-atom method)<sup>[33,34]</sup>.认为固体中的每个原子可以视为镶嵌在由其他原子组成的基体或主体(host)里的一个“杂质”,固体的总能量可以表示为

$$E_{\text{tot}} = \sum_i E_i,$$

$E_i$  表示第  $i$  个原子对总能量的贡献,它可以进一步表示为

$$E_i = F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(R_{ij}),$$

其中  $F_i$  是在除第  $i$  个原子外的其他原子组成的基(或主)体中再镶嵌第  $i$  个原子所需的能量,它仅是其他原子在第  $i$  个原子所在处产生的电子密度  $\rho_{h,i}$  的函数. $\phi_{ij}$  是第  $i$  个原子和第  $j$  个原子核间的短程排斥双势, $R_{ij}$  是第  $i$  个原子和第  $j$  个原子核间的距离.

对体内原子, $-E_i$  即为该固体的升华能(sublimation energy)  $E_s$ ,但表面上的原子具有较高的能量,把差值  $E_i - (-E_s)$  对所有原子求和后再除以表面面积将会得到表面能面密度.对 Ni 的(111),(100)和(110)三个低指数晶面的表面能面密度的计算结果分别为 1310,1550 和 1740mJ/m<sup>2</sup>,和实际测得的平均表面能面密度(包括其他未考虑的晶面) 1725mJ/m<sup>2</sup><sup>[32]</sup> 非常接近.Pd 的(111),(100)和(110)面的计算结果分别为 1070,1270 和 1390mJ/m<sup>2</sup>.另外,Gao 等人也用镶嵌原子方法计算了 Ag 的(111),(100)和(110)面的表面能面密度,其结果分别为 620,705 和 765mJ/m<sup>2</sup><sup>[35]</sup>.这些计算结果均表明,对面心立方金属,其密排面(111)对应的表面能最小,因此,仅考虑表面能,择优生长的晶粒将是(111)取向的晶粒,即(111)面平行于膜面的晶粒.

另一种估算表面能相对大小的方法是假设某晶面的表面能与沿该晶面解理后的悬挂键密度有关,例如对金刚石结构的薄膜(如 Ge 和 Si)相对表面能的大小如图 2 所示<sup>[36]</sup>.图中给出了晶面法线方向与  $\bar{1}\bar{1}0$  方向垂直的几个晶面的表面能的相对大小,其中横坐标  $\alpha$  为晶面的法线方向与  $\bar{1}\bar{1}0$  方向间的夹

角.和面心立方金属一样,对应(111)面的表面能最小.

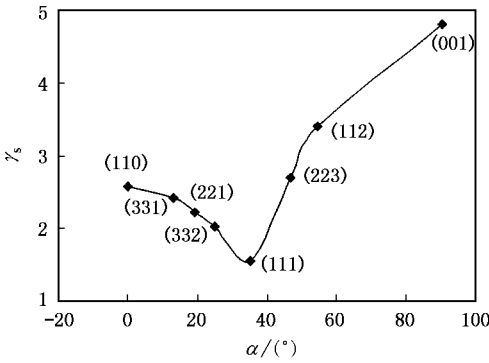


图 2 金刚石结构材料中几个晶面的相对表面能<sup>[36]</sup>

3.3. 膜-基界面能

对附着在非晶基体上的柱状多晶膜,各晶粒与非晶基体间的界面能只取决于该晶粒平行于基体平面的晶面指数,而与该晶面在基体平面内的旋转角  $\beta$  无关.但当柱状多晶膜附着在单晶基体上时,各晶粒与单晶基体间的界面能不仅取决于其平行于基体平面的晶面指数,还与该晶面在基体平面内的旋转角  $\beta$  有关.Gao 等人利用镶嵌原子的方法分别计算了 Ag(001)/N(001)<sup>[37]</sup> 和 Ag(111)/N(001)<sup>[35]</sup> 的界面能,其结果如图 3 所示.

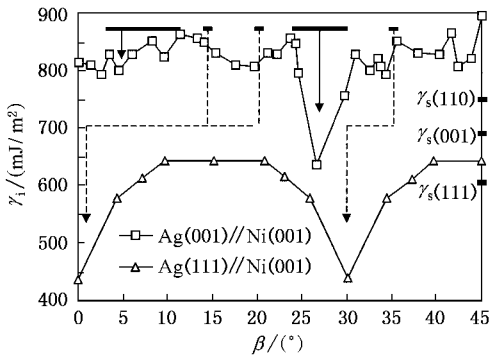


图 3 Ag(001)/N(001) 和 Ag(111)/N(001) 界面能镶嵌原子法的计算结果<sup>[35,37]</sup>

图中的横坐标  $\beta$  为 Ag(001) 或 Ag(111) 晶面绕 N(001) 晶面法线方向的旋转角,即 Ag[110] 方向和 N[110] 方向间的夹角.图中同时给出了 Ag 的(111),(100)和(110)晶面的表面能.对 Ag(001)/N(001) 界面,界面能随两平行晶面的相对旋转角  $\beta$  而变化,大约有 9 个局域最小值.当  $\beta = 26.56^\circ$  时,对应

的界面能最小.又注意到,当  $\beta = 0^\circ$  时,即立方型外延时,对应的界面能为局域最大;对于  $\text{Ag}(111)/\text{Ni}(001)$  界面:只有两个局域最小值,分别对应  $\beta = 0^\circ$  和  $\beta = 30^\circ$ ,且  $\beta = 0^\circ$  时界面能为最小.若同时考虑  $\text{Ag}$  的表面能,可以得出:对所有  $\beta$  角,  $\text{Ag}(111)/\text{Ni}(001)$  对应的表面能和界面能之和小于  $\text{Ag}(001)/\text{Ni}(001)$  对应的表面能和界面能之和.因此若同时考虑表面能和界面能,在  $\text{Ni}(001)$  单晶基体上的  $\text{Ag}$  膜的择优取向或织构应是  $(111)$  并且  $\beta = 0^\circ$ .

Gao 等人用转晶法实验证明了他们的计算结果<sup>[35,37]</sup>,其实验结果一并列在图 3 中,其中,粗横线表示附着在  $\text{Ni}(001)$  单晶基体上的  $\text{Ag}$  单晶的初始取向(范围),箭头表示经退火后  $\text{Ag}$  单晶的取向.

3.4. 应变能

我们根据多晶膜的屈服强度公式,对常用的三种晶体结构(面心立方、体心立方和密排六方)薄膜中相对于膜面不同取向晶粒中的应变能密度进行了计算,得到以下几个结论<sup>[38-42]</sup>:

- 1) 对面心立方金属薄膜,最小应变能密度对应的晶粒取向为  $(110)$ ,其次依次为  $(100)$ ,  $(511)$ ,  $(411)$ ,  $(211)$ .
- 2) 对体心立方金属薄膜,最小应变能密度对应的晶粒取向为  $(100)$ ,其次依次为  $(111)$ ,  $(110)$ ,  $(411)$ ,  $(511)$ .
- 3) 对六方结构薄膜,当  $\frac{c}{a} > 1.633$  时,  $h$  和  $k$  越

小,  $l$  越大,对应晶粒的应变能密度越小.当  $\frac{c}{a} < 1.633$  时,  $h$  和  $k$  越大,  $l$  越小,对应晶粒的应变能密度越小.

若仅考虑应变能,这些取向的晶粒将优先生长.

4. 结 论

由于薄膜材料的特殊结构,使其具有相对大的表面和界面以及双金属片效应.薄膜中的晶粒生长除像传统的块体材料中的晶粒生长一样考虑晶界能外,还应当考虑表面能、界面能和应变能.薄膜的择优取向或织构应使表面能、界面能和应变能之和为最小值的取向.据此可以预言或控制薄膜材料的织构及其相关性能.

表面能、应变能、界面能为最小值的取向一般不同.如面心立方和体心立方金属薄膜,表面能为最小值的取向分别为  $(111)$  和  $(110)$ ,而应变能为最小值的取向分别为  $(110)$  和  $(100)$ .对单晶基体,界面能不仅与平行于基体平面的晶面指数有关,还与该晶面在基体平面内的旋转角  $\beta$  有关.

对自由膜,由于没有界面能和双金属片效应产生的热应变能的影响,表面能的最小化控制着退火织构.对附着膜,可通过选用和薄膜材料具有相近热膨胀系数的材料作为基体或在接近于退火温度的温度下沉积薄膜的方法来减小热应变能对薄膜的异常晶粒生长和织构变化的影响.

[ 1 ] Sun R C , Tisone T C and Cruzan P D 1973 *J. Appl. Phys.* **44** 1009

[ 2 ] Cho J and Thompson C V 1989 *Appl. Phys. Lett.* **54** 2577

[ 3 ] Doerner M F , Gardner D S and Nix W D 1986 *J. Mater. Res.* **1** 845

[ 4 ] Li Z H , Wu G Y , Gu Y , Chen W R and Wang Y Y 1996 *J. Vac. Sci. Technol. A* **14** 2693

[ 5 ] Venkatraman B and Bravman J C 1992 *J. Mater. Res.* **7** 2040

[ 6 ] Zhang J M , Xu K W and Zhang M R 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1234 ( in Chinese ) 张建民、徐可为、张美荣 2003 物理学报 **52** 1234

[ 7 ] Young F W , Cathcart J V and Gwathmey A T 1956 *Acta Metal.* **4** 145

[ 8 ] Chang C A 1990 *J. Appl. Phys.* **67** 566

[ 9 ] Huang T C , Lim G , Parmigiani F and Kay E 1985 *J. Vac. Sci. Technol. A* **3** 2161

[ 10 ] Roy R A , Cuomo J J and Yee D S 1988 *J. Vac. Sci. Technol. A* **6** 1621

[ 11 ] Bai P , Yang G P and Lu T M 1990 *Appl. Phys. Lett.* **56** 198

[ 12 ] Burnett A F and Cech J M 1993 *J. Vac. Sci. Technol. A* **11** 2970

[ 13 ] Kim S P , Choi H M and Choi S K 1998 *Thin Solid Films* **322** 298

[ 14 ] Leoni M , Scardi P , Rossi S , Fedrizzi L and Massiani Y 1999 *Thin Solid Films* **345** 263

[ 15 ] Zhang J M , Xu K W and Ji V 2001 *Appl. Surf. Sci.* **180** 1

[ 16 ] Li X N , Nie D , Dong C , Ma T C , Jin X and Zhang Z 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 115 ( in Chinese ) 李晓娜、聂冬、董闯、马腾才、金星、张泽 2002 物理学报 **51** 115

[ 17 ] Trogolo J A , Roy R A Cuomo J J and Rajan K 1992 *Mater. Sci. Forum* **94-96** 537

[ 18 ] Zeng Y X , Zou Y L and Alford T L 1997 *Thin Solid Films* **307** 89

[ 19 ] Li J F and Ding C X 1998 *J. Mater. Sci. Lett.* **17** 1747

[ 20 ] Lee D N 1999 *J. Mater. Sci.* **34** 2575

[ 21 ] Adamik M , Barna P B and Tomov I 2000 *Thin Solid Films* **359** 33

[ 22 ] Ohmi T , Saito T , Shibata T and Nitta T 1988 *Appl. Phys. Lett.* **52** 2236

- [ 23 ] Ohmi T , Saito T , Otsuki M and Shibata T 1991 *J. Electrochem. Soc.* **138** 1089
- [ 24 ] Tracy D P and Knorr D B 1993 *J. Electronic Mater.* **22** 611
- [ 25 ] Longworth H P and Thompson C V 1991 *J. Appl. Phys.* **69** 3929
- [ 26 ] Zhang J M and Xu K W 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 135 ( in Chinese )  
[ 张建民、徐可为 2002 物理学报 **51** 135 ]
- [ 27 ] Mararka S P 1997 *Mater. Sci. Eng. R* **19** 87
- [ 28 ] Shi D K and Shen L 1995 *Foundation of Materials Science* ( Xi'an Jiaotong University Press , Xi'an ) p180 ( in Chinese ) 石德珂、沈莲 1995 材料科学基础( 西安交通大学出版社 , 西安 )第 180 页 ]
- [ 29 ] Zhang J M and Xu K W 2002 *Appl. Surf. Sci.* submitted
- [ 30 ] Frost H J , Hayashi Y , Thompson C V and Walton D T 1994 *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **317** 485
- [ 31 ] Shi D K and Shen L 1995 *Foundation of Materials Science* ( Xi'an Jiaotong University Press , Xi'an ) p29 ( in Chinese ) 石德珂、沈莲 1995 材料科学基础( 西安交通大学出版社 , 西安 )第 29 页 ]
- [ 32 ] Inman M C and Tipler H R 1963 *Metall. Rev.* **8** 105
- [ 33 ] Daw M S and Baskes M I 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1285
- [ 34 ] Daw M S and Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [ 35 ] Gao Y , Shewmon P G and Dregia S A 1989 *Acta Metall.* **37** 3165
- [ 36 ] Szilagy A 1984 *Ph. D. Thesis*. Massachusetts Institute of Technology
- [ 37 ] Gao Y , Dregia S A and Shewmon P G 1989 *Acta Metall.* **37** 1627
- [ 38 ] Zhang J M , Xu K W and He J W 1999 *J. Mater. Sci. Lett.* **18** 473
- [ 39 ] Zhang J M , Xu K W 1999 *J. Mater. Sci. Lett.* **18** 939
- [ 40 ] Zhang J M , Xu K W 2000 *Prog. Crys. Grow. Character.* **40** 315
- [ 41 ] Zhang J M , Xu K W 2001 *J. Crys. Grow.* **226** 168
- [ 42 ] 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 ]

## Theory of abnormal grain growth in thin films and analysis of energy anisotropy<sup>\*</sup>

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> Library , Shaanxi Normal University , Xi 'an 710062 , China )

( Received 17 July 2002 ; revised manuscript received 9 September 2002 )

### Abstract

A theoretical model is proposed for the abnormal grain growth in thin films of columnar grains. In addition to the grain boundary energy usually considered for the grain growth in bulk materials , the influences of surface energy , interface energy and strain energy are also considered in the model. A reviewed analysis is given out for the anisotropy of energy. For fcc- and bcc-metal films , surface energy minimization generally favours ( 111 ) and ( 110 ) textures , while strain energy minimization generally favours ( 110 ) and ( 100 ) textures.

**Keywords :** thin films , abnormal grain growth , model , texture

**PACC :** 6110 , 6114 , 6150C

<sup>\*</sup> Project supported by the Key Program of the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 50271038 , 59931010 ).