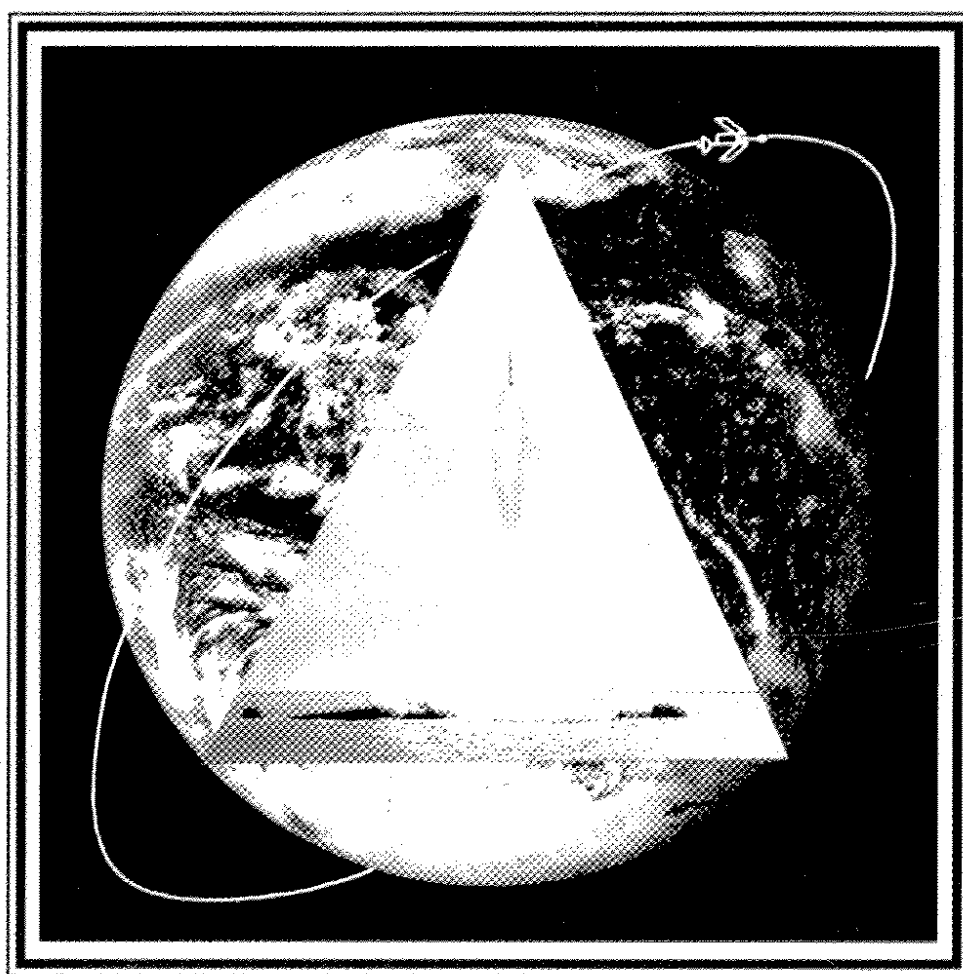


КОНСТРУКЦИИ ИЗ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

2



МОСКВА 2002

Болдунов А. М., Криволицкая И. И., Белов П. А., Лурье С. А. Масштабные эффекты в тонких пленках.....	33
Вайнштейн Э. Ф. Предельные параметры при адсорбции цепных молекул из разбавленных растворов на гладких твердых поверхностях.....	41

Вопросы обеспечения экологической безопасности производства

Андрианов Р. А., Булгаков Б. И., Попова М. Н. Исследование эксплуатационных свойств вторичного поливинилхлорида.....	50
Андрианов Р. А., Булгаков Б. И., Попова М. Н., Баранова Н. В. Снижение пожароопасности пластифицированного ПВХ.....	53

Главный редактор д-р техн. наук **И. И. Величко**

ХИМИЧЕСКОЕ

Редакционная коллегия:

П. И. Болтаев, Э. Ф. Вайнштейн, В. В. Васильев, В. Н. Везиров
 (зам. главного редактора); *М. А. Голуб, В. А. Данилкин, В. Г. Дегтярь*
 (зам. главного редактора); *Г. В. Дюдин, А. С. Жарков, А. Г. Козлов,*
И. И. Криволицкая, И. Ф. Образцов (зам. главного редактора);
Л. И. Огородов, Н. Г. Паничкин, В. М. Пашин, С. П. Половников,
М. И. Соколовский, В. И. Халиманович, В. М. Хрулев

Ответственный секретарь — *Л. А. Жарких*
 Тел. (095) 491-77-67.

Статьи поступили в редакцию в январе 2002 г.

Перепечатка материалов и использование их в любой форме, в том числе электронной, без предварительного письменного разрешения редакции не допускаются.

- © Федеральное государственное унитарное предприятие "Всероссийский научно-исследовательский институт межотраслевой информации — федеральный информационно-аналитический центр оборонной промышленности" (ФГУП "ВИМИ"), 2002;
- © Федеральное государственное унитарное предприятие "Государственный ракетный центр "КБ им. академика В. П. Макеева" (ФГУЦ "КБ им. акад. В. П. Макеева"), 2002;
- © Научно-производственное объединение прикладной механики (НПО-ПМ), 2002

УДК 621.38.01

Масштабные эффекты в тонких пленках

А. М. БОДУНОВ, И. И. КРИВОЛУЦКАЯ
 Московский государственный авиационный институт
 (Технический университет), Россия

П. А. БЕЛОВ, С. А. ЛУРЬЕ
 Институт прикладной механики РАН, Москва, Россия

В работе делается попытка построить вариант линейной модели тонких структур, учитывающей масштабные эффекты. Вводятся кинематические соотношения, устанавливаются определяющие соотношения и формулируется соответствующая краевая задача. В основе исследования лежит модель среды, допускающая упругие взаимодействия между точками среды, аналогичные межатомам взаимодействия, а также упругие взаимодействия на поверхности тела, соответствующие тангенциальным и нормальным смещениям на поверхности среды.

По мере дальнейшей миниатюризации полупроводниковых элементов, например больших интегральных схем, возрастает необходимость выяснения причин возникновения напряжений в микропленках, а также напряжений в тонких пленках, составляющих основу новых материалов. Известно, однако, что с точки зрения классической теории упругости невозможно описать некоторые аспекты поведения тонких пленок [1—3]. Поэтому в данном исследовании для анализа напряжений в пленках привлекается обобщенная модель сплошной среды, характерная для быстроизменяющегося, локального напряженного состояния [4—7]. Размерность дополнительных физических постоянных с точки зрения классической теории определяется величинами $\sim \mu/l_0^2$ и $\sim \mu/l_0$, где μ — модуль сдвига, l_0 — некоторый характерный параметр когезионного поля размерности длины.

Формулировка модели и разрешающие уравнения

Используется алгоритм построения моделей сред, приведенный в работах [4—7]. Для построения определяющих соотношений используется общий вариационный подход, который можно назвать вариационным кинематическим подходом. По заданным кинематическим связям находится вид функционала энергии для линейно упругой среды и устанавливается характер силовых взаимодействий, соответствующих введенным кинематическим связям. В качестве таковых берется выражение для несимметричного тензора-дисторсии

$$\frac{\partial R_i}{\partial x_j} = \gamma_{ij} + \frac{1}{3} \theta \delta_{ij} - \omega_k \varepsilon_{ijk} \quad (1)$$

где R_i — компоненты вектора перемещений;

γ_{ij} и θ — компоненты тензора девиатора деформаций и амплитуды шарового тензора, соответственно;

ω_k — компоненты вектора линейных поворотов;

ε_{ijk} — тензор Леви-Чевиты;

$$\omega_k = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial R_i}{\partial x_j}$$

Используя известные процедуры, можно установить список аргументов в объемной и поверхностной плотностях потенциальной энергии:

$$U = \iiint_V W_V(\gamma_{ij}, \theta, \omega_k, R_k) dV + \iint_F W_F(R_k) dF$$

Полагая физическую линейность исследуемой среды, а, следовательно, и квадратичность плотности потенциальной энергии относительно аргументов γ_{ij} , θ , ω_k , R_i и, учитывая тензорную размерность этих переменных, получаем:

$$W_V = \mu \gamma_{ij} \gamma_{ij} + \frac{1}{6} (2\mu + 3\lambda) \theta^2 + 2\chi \omega_k \omega_k + 2D \omega_k R_k + \frac{1}{2} C R_k R_k,$$

$$W_F = 1/2 A R_i R_j n_i n_j + 1/2 B R_i R_j (\delta_{ij} - n_i n_j) = 1/2 B_{ij} R_i R_j. \quad (2)$$

Поскольку внутренние силовые факторы находятся как производные от потенциальной энергии (2) по обобщенным кинематическим переменным, получаем, что модель сплошной среды, обусловленная соотношениями (1), допускает существование внутри объема внутренних силовых факторов типа напряжений $\sigma_{ij} = \partial W_V / \partial R_{i,j}$ и объемных сил $\sigma_i = \partial W_V / \partial R_i$, а на поверхности — внутренних поверхностных сил

$$f_i = \frac{\partial W_F}{\partial R_i}$$

$$\sigma_{ij} = \mu(R_{i,j} + R_{j,i}) + \lambda R_{k,k} \delta_{ij} + \chi(R_{i,j} - R_{j,i}) - D R_k \varepsilon_{ijk}. \quad (3)$$

$$\sigma_k = C R_k + 2D \omega_k. \quad (4)$$

На поверхности исследуемого тела справедливы следующие физические уравнения:

$$f_i = B_{ij} R_j = [A n_i n_j + B(\delta_{ij} - n_i n_j)] R_j. \quad (5)$$

Естественно считать, что μ и λ равны известным в теории упругости коэффициентам Ламе (μ — модуль сдвига). Постоянные χ , A , B , C , D являются новыми упругими постоянными среды. При этом уравнения (3)–(5) являются определяющими соотношениями для модели среды с упругими внутренними связями типа объемных и поверхностных винклеровских оснований. Усилия, аналогичные усилиям в винклеровских пружинках с жесткостью, равной величине C (новая упругая постоянная), моделируют внутренние взаимодействия когезионных полей. Для них характерны большие амплитудные значения в пределах соответствующих областей взаимодействий и быстрое затухание вне пределов этих областей. Постоянную C мы связываем с описанием внутренних взаимодействий, аналогичных когезионным силам связи. Величина C имеет размерность порядка $\sim \mu / l_0^2$. В дальнейшем можем зафиксировать параметр l_0^2 и принять, что этот параметр является новым физическим параметром, который определяет когезионные взаимодействия.

Непарность касательных напряжений определяется упругими постоянными χ и D . В дальнейшем с целью упрощений полагаем, что $\chi = B = 0$.

По нормали к поверхности и касательной к ней имеет место также анизотропия поверхностных свойств среды. Поверхностные эффекты описываются с помощью соответственно физических постоянных A и B . Определяющие соотношения (3)–(5) позволяют записать конкретное выражение для потенциальной энергии. Для изотропной среды, перемещения в которой подчиняются связям, соответствующим не-

симметричным соотношениям для тензора дисторсии (1), вариационное уравнение имеет вид:

$$\delta L = \iiint_V [(\mu + \chi) \frac{\partial^2 R_i}{\partial x_j \partial x_j} + (\mu + \lambda - \chi) \frac{\partial^2 R_j}{\partial x_i \partial x_i} + 2D \frac{\partial R_n}{\partial x_m} \varepsilon_{nmi} - CR_i + X_i] \delta R_i dV + \iint_S [Y_i - \mu \left(\frac{\partial R_i}{\partial x_j} + \frac{\partial R_j}{\partial x_i} \right) n_j - \lambda \frac{\partial R_k}{\partial x_k} n_i - \chi \left(\frac{\partial R_i}{\partial x_j} - \frac{\partial R_j}{\partial x_i} \right) n_j + DR_k n_j \varepsilon_{kji} - B_{ij} R_j] \delta R_i dF. \quad (6)$$

Уравнениями (6) определяется математическая постановка задачи, заключающаяся в формулировке системы разрешающих дифференциальных уравнений и граничных условий для исследуемой среды. Построенные модели сред с характеристиками, отличающимися по размерности на величину характерного размера, представляют интерес с точки зрения описания когезионных полей в окрестности сингулярных точек, теории тонких пленок и т. п. В соответствии с (6) естественные граничные условия запишутся в виде

$$(D = 0): Y_i = \sigma_{ij} n_j + AR_j n_j n_i + BR_j (\delta_{ij} - n_i n_j).$$

Здесь n_j — координаты вектора нормали \vec{n} к поверхности тела.

С постоянной A связаны поверхностные эффекты, проявляющиеся при нагружении по нормали к поверхности, а постоянная B отвечает за поверхностные эффекты в касательной плоскости в исследуемой точке поверхности.

Рассматриваемая модель среды определяется следующей изменяемостью решения $\sim e^{-Cr/r}$, в то время как классической модели соответствует изменяемость, диктуемая гармоническим оператором $\sim 1/r$. Следовательно, предлагаемая модель отличается от классической модели, если только C не мало. Считаем, что такое решение определяет локальное поле и в общем случае должно дополнять классическое решение. Следует отметить, что предлагаемая модель учитывает масштабные эффекты, если эта модель рассматривается в комбинации с моделью классической теории.

Можно показать, что на основе усложненной модели моментной среды Коссера строится модель среды, разрешающий оператор которой является произведением оператора классической теории упругости и оператора Гельмгольца [оператора разрешающего уравнения модели (6)]. Решение для такой общей модели, которая и является моделью когезионного поля, представляется в виде линейной комбинации решения классической теории упругости и решения, соответствующего модели (6).

Асимптотический анализ решения соответствующей краевой задачи для такой модели, учитывающей масштабные эффекты, позволяет сформулировать решение внутреннего погранслоя и описать масштабный эффект, связанный с параметром l_0 .

$$C = \mu / l_0^2.$$

В первом приближении можно принять, что решение дается соотношением

$$R = R^{кл} - R^{когез}, \quad (7)$$

где $R^{кл}$ — решение задачи по классической теории упругости;

$R^{когез}$ — решение краевой задачи (6) при соответствующих граничных условиях.

Отметим, что использование данной модели среды для задачи о трещине [6] позволило получить несингулярное решение для трещины и тем самым связать постоянную C с размером области межатомных взаимодействий (размером когезионного поля). В данной работе не рассматривается построение указанной выше асимптотики для внутреннего погранслоя, укажем лишь некоторые соображения, приводящие к решению (7).

Полное решение в рамках упомянутой модели Коссера представлено в виде суммы классического и неклассического решений. При этом изменяемость классического решения имеет экспоненциальный характер, определяемый соответствующими характеристическими числами λ_m . Изменяемость решения задачи (6) (будем называть его здесь "когезионным" полем) определяется постоянной C . При этом $C > \min \lambda_m$.

Если в рассматриваемой линейной комбинации предположить, что слагаемые (перемещения) имеют одинаковый порядок в некоторой области, то в этой области уровень напряжений будет определяться решением когезионного поля. Указанную область будем связывать с областью действия когезионных взаимодействий.

В данной работе будут рассматриваться тонкие тела (пленки), для которых толщина меньше либо равна длине зоны когезионного взаимодействия, т. е. пленка вся "погружена" во внутренний погранслои. В этих условиях можно приближенно принять, что решение определяется только "когезионной" частью $R^{\text{когез}}$. Постоянные A и B не изменяют характер рассуждений, а определяют масштабный эффект на поверхности.

Введем теперь тензор модулей классической теории упругости:

$$C_{ijnm} = \mu(\delta_{in}\delta_{jm} + \delta_{im}\delta_{jn}) + \lambda\delta_{nm}\delta_{ij} = C_{nmij}, \quad (8)$$

тогда уравнения равновесия свободного когезионного поля примут вид:

$$C_{ijnm} \frac{\partial^2 R_n}{\partial x_j \partial x_m} - CR_i + X_i = 0. \quad (9)$$

Первый член уравнения (8) будем называть классической упругой силой (или просто классической), а второй — когезионной силой. Рассмотрим некоторую каноническую область. Зафиксируем две координатные поверхности, лежащие на расстоянии l друг от друга. Проведем нормировку операторов классических и когезионных сил в (9) при отсутствии объемных сил: предполагается что тензор модулей упругости нормирован на μ , а координаты — на величину l ($C = \mu/l_0^2$).

$$\bar{C}_{ijnm} \frac{\partial^2 R_n}{\partial \bar{x}_j \partial \bar{x}_m} - \frac{1}{l_0^2} R_i = 0. \quad (10)$$

Оценим размер области, где классические силы больше когезионных,

$$\bar{C}_{ijnm} \frac{\partial^2 R_n}{\partial \bar{x}_j \partial \bar{x}_m} > R_i,$$

с учетом (10) получим:

$$l^2 > l_0^2.$$

Таким образом, при характерном размере $l^2 > l_0^2$ когезионные силы малы по сравнению с классическими силами. Поле перемещений при этом локально, и как следует из (10):

$$R_i = O\left(\frac{l_0^2}{l^2}\right).$$

Напротив, размер области, где классические силы меньше или порядка когезионных:

$$C_{ijmn} \frac{\partial^2 R_n}{\partial x_j \partial x_m} \leq R_i,$$

с учетом (10) даст оценку $l^2 \leq l_0^2$.

Таким образом, при характерном размере $l^2 \leq l_0^2$, когезионные силы порядка и даже больше классических сил, модель свободного когезионного поля описывает локальное поле перемещений в областях, соизмеримых с l_0 и меньше, причем в таких канонических областях когезионные силы порядка и даже превосходят классические. Если в качестве такой канонической области выбрать тонкую пленку с толщиной $h \leq l_0$, напряженно-деформированное состояние в ней будет определяться в основном когезионной, а не классической моделью.

Эти соображения позволили нам сформулировать и построить решение тестовой задачи, объясняющее эффект сверхмодуля тонких пленок [8], который не мог быть объяснен с позиций классической теории упругости.

На основе анализа связанной классической и когезионной моделей сформулирована задача и построено решение задачи о растяжении упругого пространства с полубесконечной трещиной. Решение не обладает сингулярностью в напряжениях и дает формальное обоснование гипотезы Баренблата [6]. В настоящей работе приводится постановка и решение задачи о деформировании пленки под действием индентора. Такая задача актуальна в связи с эффектом "осыпания" при тиснении рельефа на голографических фольгах. Эффект "осыпания" заключается в отслоении чешуек напыленного алюминиевого нанослоя от основы.

Ниже также рассмотрены примеры деформирования пленок на подложке. Показано, что для тонких структур отличие результатов решения от результатов, задаваемых классической теорией, весьма значительно. Удалось качественно объяснить некоторые известные из экспериментов эффекты деформирования тонких пленок (деформирование пленок под действием инденторов и т. п.), не поддающиеся объяснению с точки зрения классической теории.

В качестве примеров далее рассмотрим деформирование тонкой пленки совместно с подложкой, а также деформирование пленки, лежащей на упругом полупространстве и нагруженной индентором.

Предполагается, что тонкая пленка деформируется совместно с упругим основанием. Считается, что основание является абсолютно жестким в отношении поперечной координаты и диктует деформирование пленки в направлении продольной координаты. Таким образом, действие основания в зоне контакта будем моделировать заданием на поверхности контакта следующих граничных условий для пленки:

$$\text{при } y = 0, \quad V = 0, \quad \partial u / \partial x = \varepsilon_0.$$

Верхняя поверхность пленки (при $y = 1$) считается свободной: $\sigma_y = 0$ и $\tau = 0$.

Решение задачи (6) для пленки в общем случае строится в виде разложения в одинарный ряд Фурье в отношении продольной координаты x по системе функций

$$X_n = \sin \lambda_n x, \quad \text{где } \lambda_n = \frac{\pi}{2}(2n-1).$$

В качестве конкретного примера принимается, что деформация изменяется по закону $\varepsilon_0(x) = \sin \frac{\pi x}{2}$. На рис. 1—3 представлены распределения нормальных и касательных напряжений по толщине пленки, взятые при $x = 0$.

Рис. 1. Распределение нормальных напряжений σ_y по толщине, $A = B = 0$:
 ○○○ — $C = 0$; □□□ — $C = 20$;
 +++ — $C = 100$

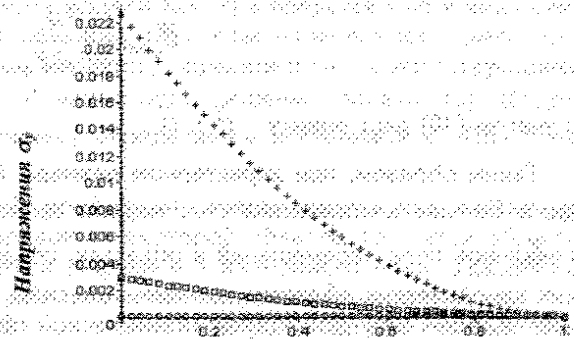


Рис. 2. Распределение нормальных напряжений σ_x по толщине, $A = B = 0$:
 — — $C = 0$; +++ — $C = 10$;
 ○○○ — $C = 50$; □□□ — $C = 100$

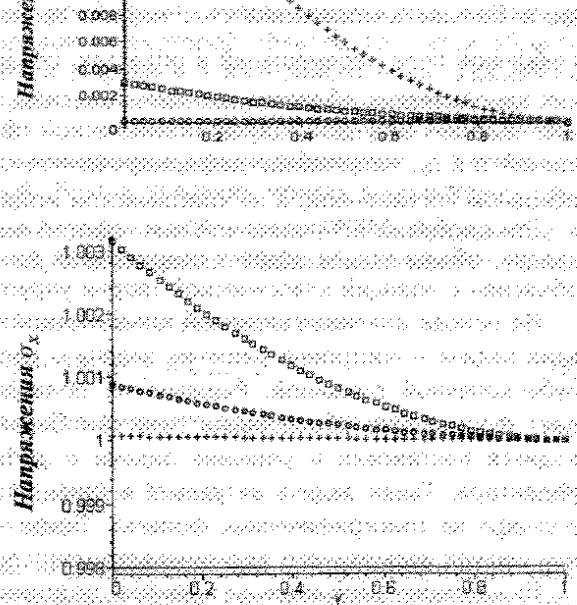
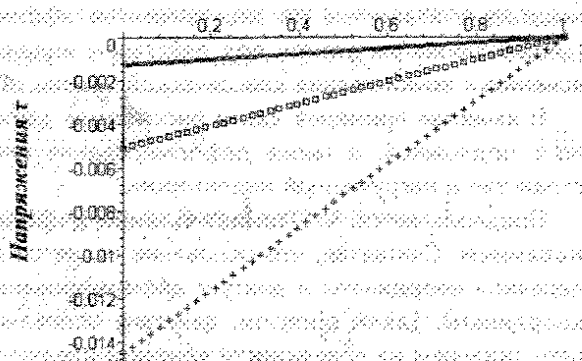


Рис. 3. Распределение касательных напряжений τ по толщине, $A = B = 0$:
 — — $C = 10$; □□□ — $C = 50$;
 +++ — $C = 150$



Характер распределений напряжений, как следует из графиков, существенно зависит от параметра C и значительно отличается от напряжений, полученных по классической теории упругости. Амплитудные значения, полученные по модели "когезионного" поля, значительно превышают амплитуды напряжений по классическому решению. Это косвенно подтверждает изложенные выше положения о том, что внутренний погранслоем является "когезионным" полем.

В качестве второго примера рассматривается задача о давлении индентора на пленку, лежащую на упругом полупространстве. Задача решена при следующих предположениях:

длина зоны давления известна и равна $\frac{1}{2} \leq \delta \leq \frac{1}{2}$

нормальная нагрузка на пленку распределяется по закону косинуса:

В отношении касательных напряжений рассматривается два случая:
 касательные напряжения между индентором и пленкой отсутствуют;
 касательные напряжения в зоне действия индентора меняются по закону синуса:

$$\tau = k_{тр} \sin(2\alpha\pi x), \quad -\frac{1}{2} \leq \delta \leq \frac{1}{2}, \quad k_{тр} \text{ — коэффициент трения.}$$

На рис. 4—5 представлено распределение нормальных напряжений σ_x в окрестности зоны нагружения. Нормальные напряжения рассчитаны для двух случаев: когда жесткость пленки меньше жесткости основания (мягкая пленка $E_{осн}/E_{пл} = 10$), и когда жесткость пленки больше жесткости основания (пленка жесткая $E_{осн}/E_{пл} = 0,1$). На графиках дается сравнение классического решения ($C = 0$) и решения, полученного по модели "когезионного" поля.

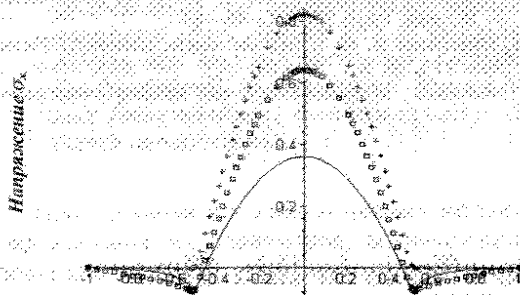


Рис. 4. Распределение нормальных напряжений σ_x для мягкой пленки (без трения), $A = B = 0$:
 +++ — $C = 0$; □□□ — $C = 1$;
 — — — $C = 15$

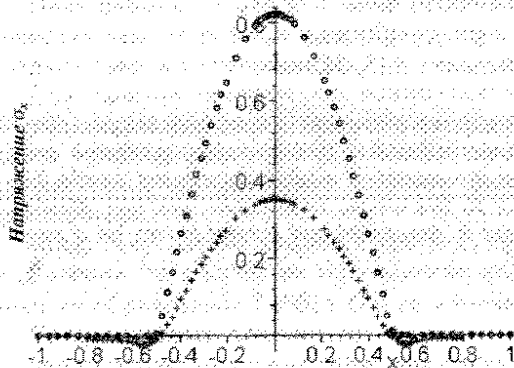


Рис. 5. Распределение нормальных напряжений σ_x для жесткой пленки (с трением), $A = B = 0$:
 ooo — $C = 0$; +++ — $C = 25$

Необходимо отметить, что напряжения, полученные по модели "когезионного" поля, меняют знак в окрестности зоны нагружения даже тогда, когда трение между индентором и пленкой отсутствует. Следовательно, в отличие от классической модели модель "когезионного" поля качественно описывает известное явление возможной потери устойчивости пленки в окрестности действия индентора в случае отслоения пленки [9].

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Грант № 00-01-00393).

ЛИТЕРАТУРА

1. Vilms F., Kerps D. Simple stress formula for multilayered thin films on a thick substrate// Journal of applied Physics, 1982. № 3.
2. Huang N. C. On the size of the cohesive zone at the crack tip// Journal of Applied Mechanics, 1985. № 6.
3. Hardwick D. A. Механические свойства тонких пленок// Обзор. Thin solid films, 1987. № 1—2.
4. Лурье С. А., Белов П. А., Орлов А. П. Модели сплошных сред с обобщенной кинематикой. Свойства и некоторые приложения// Механика композиционных материалов и конструкций. Т. 2. № 2. С. 84—104.
5. Белов П. А., Лурье С. А. Модели деформирования твердых тел и их аналоги в теории поля// Механика твердого тела. Изв. РАН, 1998. № 3. С. 157—166.
6. Лурье С. А., Белов П. А. Математические модели механики сплошной среды и физических полей// Изд. ВЦ РАН, 2000. — 151 с.
7. Лурье С. А., Белов П. А., Яновский Ю. Г. О моделировании когезионных взаимодействий в сплошных средах, Современные проблемы механики гетерогенных сред// Сб. тр. института прикладной механики РАН. К десятилетию основания института. — М.: Изд. РАН, 2000. С. 48—58.
8. Лурье С. А., Белов П. А., Яновский Ю. Г., Образцов И. Ф. К теории тонких пленок// Механика композиционных материалов и конструкций. 1999. Т. 5. № 3. С. 48—60.
9. Evans A. G., Hutchinson Dg. U. On the mechanics of delamination and spalling compressed films// Int. J. of Solid and Structure, 1987. № 5.

On modeling of scale effects in thin films

A. M. BODUNOV, I. I. KRIVOLUTSKAYA
 Moscow State Aviation Institute (Technical University)

P. A. BELOV, S. A. LURIE
 Institute of Applied Mechanics RAS, Moscow

The variant of the linear model of thin structures with scale effects is developed. The kinematic relations are introduced, constitutive equations and boundary problems are formulated. In the basis of this examination the model of medium supposing elastic interactions between points of mediums similar to interatomic interactions, and also elastic interactions on a surface of a bodies relevant to tangential and normal biases on a surface of medium lies.