

PZT 薄膜界面分层破坏的内聚力模拟

闫亚宾, 尚福林*

西安交通大学航天航空学院工程力学系, 西安 710049

* E-mail: shangfl@mail.xjtu.edu.cn

收稿日期: 2008-05-05; 接受日期: 2009-04-10

国家自然科学基金(批准号: 90607013)和国家重点基础研究发展计划(编号: 2007CB707702)资助项目

摘要 实验测试表明, 单晶硅基板上磁控溅射沉积的多层薄膜材料 Cr/PZT/PLT/Pt/Ti 容易沿着 Cr/PZT 界面端开裂并发生分层破坏. 我们在实验测试基础上, 通过数值模拟计算与分析研究, 确定了该薄膜界面的结合强度参数. 模拟计算基于连续介质力学的内聚力模型, 采用有限元方法来分析沿 Cr/PZT 界面的裂纹萌生和扩展过程. 首先, 将该界面表征为一个遵从指数或双线性内聚力模型本构关系的薄层. 然后, 通过与实测的断裂载荷、加载点的载荷-位移曲线校准的办法, 确定出界面内聚法则参数. 研究发现, 内聚强度和内聚能是最为关键的内聚参数; 双线性内聚力模型更适合于描述 Cr/PZT 界面破坏; 与毫米量级厚度的薄膜材料相比, 该多层薄膜材料中的 Cr/PZT 界面的内聚能较低, 属于弱结合界面, 沿着该界面的分层破坏为脆性断裂过程. 本研究表明, 宏观力学的内聚力模型同样适用于分析微米厚度薄膜的界面破坏问题.

关键词

界面
分层
内聚力模型
薄膜材料

随着压电薄膜材料被广泛应用于制作功能器件, 多层薄膜结构中的双相材料间界面脱胶、开裂、分层问题日益突出. 其原因在于界面处结合强度一般较弱, 以及界面两侧材料物性不同导致的变形不匹配, 容易造成界面处应力集中等. 材料界面的失效会造成微结构乃至微器件的误动或失效^[1,2], 因此, 界面结合的好坏直接影响其使用寿命. 从保证微器件的结构完整性、可靠性与耐久性考虑, 十分有必要对薄膜界面结合强度进行实验测试、分析评价, 并给出控制界面分离的定量指标.

我们在以前的研究中^[3]采用磁控溅射方法在单晶硅基板上沉积了多层薄膜材料 Cr/PZT/PLT/Pt/Ti, 其中 PZT 薄膜层厚约 2.5 μm , Cr 保护层厚约 0.2 μm , 并运用夹层悬臂梁试样, 进行了薄膜界面破坏试验.

夹层悬臂梁试样如图 1 所示, 其制作过程如下: 将沉积好的薄膜/基板材料切割成小块, 然后用环氧树脂胶将小块的薄膜一侧与不锈钢悬臂梁黏结, 最后将试样在 60 $^{\circ}\text{C}$ 的环境中保持 4 h. 实验载荷施加于悬臂梁的左侧远端面, 运用微小材料实验机即可完成, 实验中实时记录加载点的载荷 P -位移 u 曲线. 图 2 为得到的典型 P - u 实验曲线, 其中试样 D2 (几何尺寸 $L=1.484$ mm, $W=1.725$ mm, $D=10$ mm) 的断裂载荷 P_d 约为 1.576 N. 实验结果表明, 界面分离开始于 PZT 薄层和 Cr 薄层之间界面的自由端, 本文中称之为 Cr/PZT 界面端, 并且, 裂纹一直沿着 Cr/PZT 扩展, 直至发生分层破坏; 该断裂过程非常迅速, 未观察到稳态裂纹扩展, 表现出脆性断裂特征.

上述测试结果给出的是试样的断裂载荷, 但是,

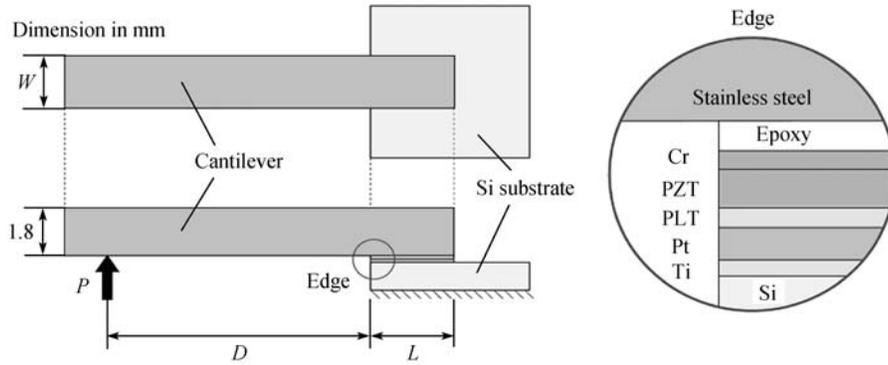


图 1 夹层悬臂梁试样与加载系统示意图

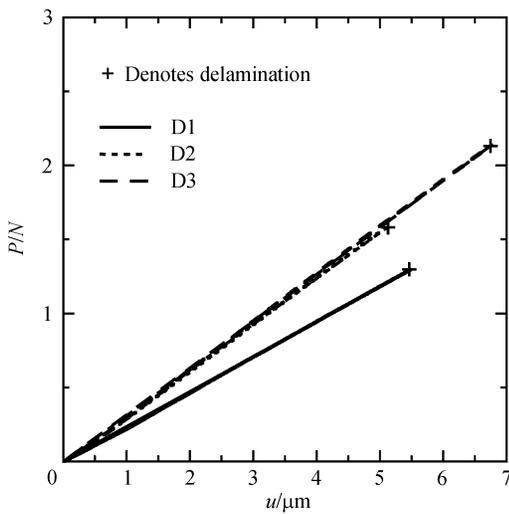


图 2 PZT 薄膜界面破坏实验的典型载荷-位移曲线

它并不能表征薄膜材料界面结合的强弱程度。至于外载荷所作的功，其中一部分转化为应变能储存于试样之中，一部分用于克服裂纹自界面端萌生和沿界面向前扩展的阻力，也即界面断裂能并不等于外力功。采用何种指标来表征和评价薄膜界面的结合力学性能仍然是需要解决的问题。本研究即源于此，期望建立描述薄膜界面破坏的合理力学模型对上述实验结果进行分析，从中提取出表征该薄膜界面强度的特征参数。

如何表征与评价薄膜材料界面结合的力学性能，目前有两种观点^[4]。从应力的观点来看，可以采用界面结合强度(包括界面拉伸强度和剪切强度)、临界应力强度因子或能量释放率等参数来表征，其中后两个参数来源于线弹性断裂力学的有关概念。另一种

观点，即能量学的观点^[5]，可以提供界面韧性和界面断裂韧性指标，它们分别表示界面从产生变形直到断裂的过程中单位面积所需要的能量的大小、或者当界面存在预裂纹时材料抵抗界面裂纹进一步扩展的能力。对于几何构形简单、某一类特定材料组合的界面端而言，采用应力或应力强度因子的观点被证明是有效的^[6]，而且分析简单。但是，它存在明显的不足之处。首先，界面端分层启裂的应力奇异性参数依赖于其几何特征，这样，得到的界面启裂韧性参数是与试样几何有关的；其次，据此得到的控制界面裂纹萌生与裂纹扩展过程的韧性参数并不相同，尽管它们描述了相同的界面材料分离破坏；第三，研究发现，当薄膜厚度变小时，应力强度因子的主导区缩小到距离界面尖端数个微米的范围，甚至更小^[7]。这种情形下，断裂力学概念能否继续适用值得商榷。相对而言，基于热力学能量平衡观点的分析方法更为通用，它可以同时描述界面裂纹萌生和裂纹沿界面扩展全过程，给出的表征界面结合强弱程度的能量指标只取决于薄膜材料本身的特征，与试样几何无关。连续介质力学中的内聚力模型可归为这一类分析方法。这类模型已经被用于描述金属、陶瓷、聚合物及复合材料等众多材料的断裂和失效问题，例如，裂纹尖端的塑性与蠕变、聚合物的银纹、胶合连接、复合材料的裂纹桥联、混凝土的裂纹扩展以及双相材料界面断裂等，在解释实验观测结果方面取得了诸多成功^[8-11]。

本文采用两种常用的内聚力模型，即指数模型^[12]和双线性模型^[13]，对上述夹层悬臂梁实验中的Cr/PZT界面分层破坏过程进行仔细的模拟分析研究，以确定表征该界面结合强度的能量指标。

1 内聚力模型

内聚力模型最初由Barenblatt提出^[14], 它本质上描述的是原子或分子之间的相互作用关系, 对于固体中的裂纹, 假设裂纹尖端区域存在一个很小的原子内聚力区域. Dugdale^[15]将这一概念推广到理想塑性材料, 假设在裂纹尖端处存在一个断裂过程区, 在此区域内采用内聚力(或称为结合力)与张开位移的本构关系, 提出了分析裂纹问题的简化模型. 现有文献中, 内聚力模型常被作为一种宏观唯象模型来使用. 为了简化对复杂的界面材料分离过程的分析, 该模型将界面材料表征为遵从一内聚法则的薄层. 该内聚法则的具体表现形式是内聚力-张开位移曲线, 其基本参数有界面分离能、最大内聚应力(内聚强度)以及形状参数. 其中, 界面分离能为界面材料的特征参数, 与试样无关. 界面材料分离的驱动力必须克服界面分离能和塑性耗散能. 针对不同材料的断裂破坏, 研究人员提出了许多不同形式的内聚力模型. 按照其法向内聚力-张开位移曲线的形状来分, 常见的有矩形、多项式、指数、梯形、双线性等内聚力模型. Needleman^[16,17]最早采用多项式和指数内聚力模型, 模拟研究了金属基体中的颗粒脱黏现象. Xu和Needleman^[12,18]应用这种模型研究了界面处微颗粒和基体之间的空洞聚合以及双相材料界面的动态裂纹扩展等问题. Tvergaard和Hutchinson^[19]提出梯形内聚力模型并计算了弹塑性固体中裂纹的扩展阻力. Camacho和Ortiz^[20]采用线性内聚力模型, 模拟研究了冲击载荷作用下脆性材料中多个裂纹沿任意路径扩展的问题. Geubelle和Baylor^[13]提出双线性内聚力模型, 模拟研究了低速冲击载荷作用下复合材料薄板中基体横向裂纹与分层裂纹萌生和扩展过程. 就大多数内聚力模型而言, 描述材料内聚法则的内聚力-张开位移关系表现为: 随着界面分离位移的不断增大, 界面处内聚力逐渐达到最大值, 然后逐渐减小, 当界面完全分离时内聚力消失. 各种内聚力模型的主要区别在于其内聚力-位移关系曲线的形状以及描述其形状的参数.

本文将选用指数和双线性内聚力模型来开展薄膜界面分层破坏模拟研究, 下面对这两种模型作一简要介绍.

指数内聚力模型通常定义一内聚力势函数^[12]:

$$\phi(\Delta_n, \Delta_t) = \phi_n + \phi_n \exp\left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n}\right) \left\{ \left[1 - r + \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right] \frac{1-q}{r-1} - \left[q + \left(\frac{r-q}{r-1} \right) \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right] \exp\left(-\frac{\Delta_t}{\delta_t}\right) \right\}, \quad (1)$$

其中 $q = \phi_t/\phi_n$, $r = \Delta_n^*/\delta_n$, ϕ_n 和 ϕ_t 分别为界面法向和切向内聚能; Δ_n 和 Δ_t 分别为界面处法向和切向位移间距; δ_n 和 δ_t 分别为界面法向和切向特征长度; Δ_n^* 为界面在纯剪切应力状态下失效时刻的法向位移临界值. 界面法向和切向内聚力由下式确定:

$$T_n = \frac{\partial \phi}{\partial \Delta_n}, \quad T_t = \frac{\partial \phi}{\partial \Delta_t}. \quad (2)$$

它们的具体表达式为

$$T_n = -\left(\frac{\phi_n}{\delta_n}\right) \exp\left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n}\right) \left\{ \frac{\Delta_n}{\delta_n} \exp\left(-\frac{\Delta_t}{\delta_t}\right) + \frac{1-q}{r-1} \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta_t}{\delta_t}\right) \right] \left(r - \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right) \right\}, \quad (3)$$

$$T_t = -\frac{\phi_n}{\delta_n} \left(\frac{2\delta_n}{\delta_t} \right) \frac{\Delta_t}{\delta_t} \left(q + \frac{r-q}{r-1} \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right) \times \exp\left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n}\right) \exp\left(-\frac{\Delta_t}{\delta_t}\right), \quad (4)$$

相应地, 法向和切向内聚能与界面法向强度 σ_{max} 和切向强度 τ_{max} 有关, 分别为

$$\phi_n = \sigma_{max} \delta_n \exp(1), \quad \phi_t = \sqrt{\exp(1)/2} \tau_{max} \delta_t. \quad (5)$$

当 $\Delta_t = 0$ 时, 由(3)式可得到法向内聚力-法向位移关系曲线, 如图 3(a)所示; 当 $\Delta_n = 0$ 时, 可得切向内聚力-切向位移曲线, 示意于图 3(b).

双线性内聚力模型假定界面遵从如下的本构关系^[13]: 当 $\tilde{\Delta}_n > 0$ 时,

$$T_n = \begin{cases} \frac{\tilde{\Delta}_n}{\tilde{\Delta}_{max}} \sigma_{max}, & (\tilde{\Delta} \leq \tilde{\Delta}_{max}), \\ \frac{\tilde{\Delta}_n}{\tilde{\Delta}} \frac{1-\tilde{\Delta}}{1-\tilde{\Delta}_{max}} \sigma_{max}, & (\tilde{\Delta} > \tilde{\Delta}_{max}), \end{cases} \quad (6)$$

$$T_t = \begin{cases} \frac{\tilde{\Delta}_t}{\tilde{\Delta}_{max}} \frac{A_n^c}{A_t^c} \sigma_{max}, & (\tilde{\Delta} \leq \tilde{\Delta}_{max}), \\ \frac{\tilde{\Delta}_t}{\tilde{\Delta}} \frac{1-\tilde{\Delta}}{1-\tilde{\Delta}_{max}} \frac{\Delta_n^c}{\Delta_t^c} \sigma_{max}, & (\tilde{\Delta} > \tilde{\Delta}_{max}); \end{cases} \quad (7)$$

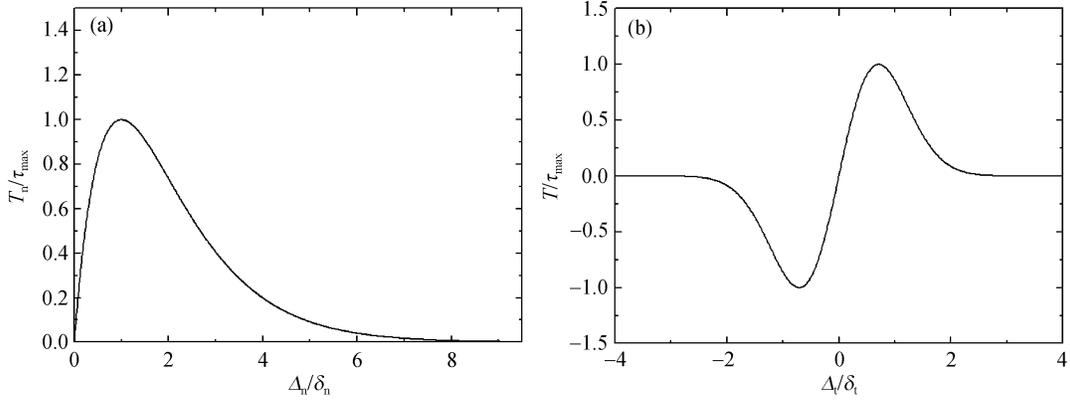


图3 指数内聚力模型的内聚力-位移曲线
(a) 法向内聚力-位移曲线; (b) 切向内聚力-位移曲线

当 $\tilde{\Delta}_n = 0$ 时,

$$T_t = \begin{cases} \frac{\tilde{\Delta}_t}{\tilde{\Delta}_{\max}} \frac{\Delta_n^c}{\Delta_t^c} \sigma_{\max}, & (\tilde{\Delta} \leq \tilde{\Delta}_{\max}), \\ \frac{\tilde{\Delta}_t}{\tilde{\Delta}} \frac{1-\delta}{1-\delta_{\max}} \frac{\Delta_n^c}{\Delta_t^c} \sigma_{\max}, & (\tilde{\Delta} > \tilde{\Delta}_{\max}). \end{cases} \quad (8)$$

这里, σ_{\max} 和 τ_{\max} 分别为界面法向强度和切向强度; Δ_n^c 和 Δ_t^c 分别为界面完全失效时的临界法向和切向

位移; $\tilde{\Delta}_n$, $\tilde{\Delta}_t$ 和 $\tilde{\Delta}$ 分别为经归一化处理后的法向、切向和等效位移间距, 定义如下:

$$\tilde{\Delta}_n = \frac{\Delta_n}{\Delta_n^c}, \quad \tilde{\Delta}_t = \frac{\Delta_t}{\Delta_t^c}, \quad \tilde{\Delta} = \sqrt{\tilde{\Delta}_n^2 + \tilde{\Delta}_t^2}. \quad (9)$$

$\tilde{\Delta}_{\max}$ 为界面法向内聚强度和切向内聚强度的峰值所对应的 $\tilde{\Delta}_n$ 和 $\tilde{\Delta}_t$ 的值(图4).

在纯拉伸 ($\Delta_t = 0$) 和纯剪切 ($\Delta_n = 0$) 情形下, 双

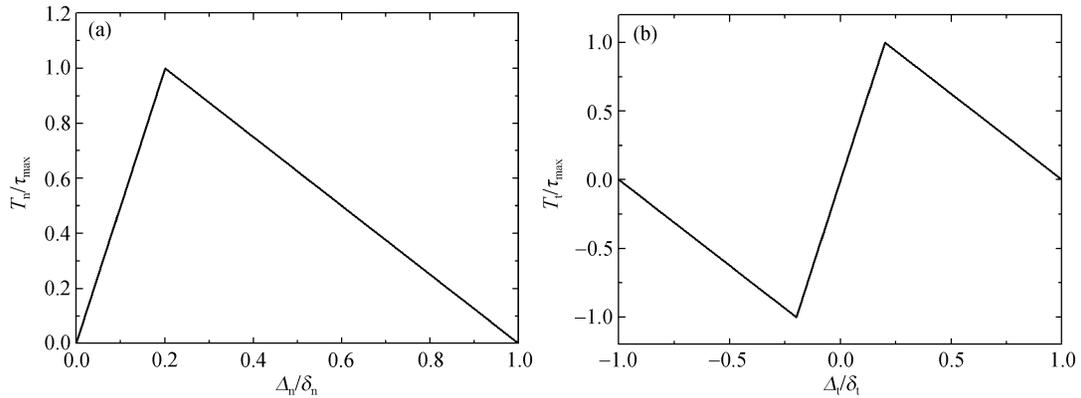


图4 双线性内聚力模型的内聚力-位移曲线
(a) 法向内聚力-位移曲线; (b) 切向内聚力-位移曲线

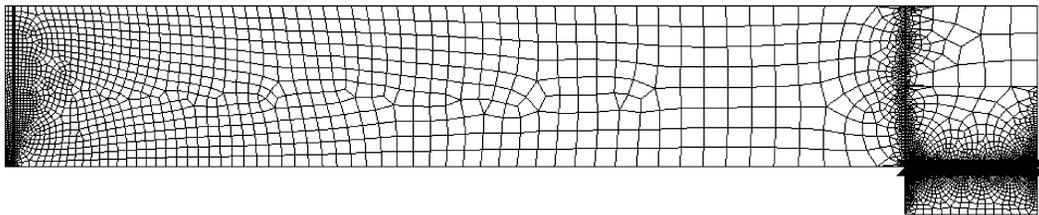


图5 夹层悬臂梁试样 D2 的典型有限元网格

线性内聚力模型的法向内聚力-位移曲线和切向内聚力-位移曲线如图 4 所示. 对应的法向内聚能 ϕ_n 和切向内聚能 ϕ_t 分别为

$$\phi_n = \sigma_{\max} A_n^c / 2, \quad \phi_t = \tau_{\max} A_t^c / 2. \quad (10)$$

2 计算模型与方法

模拟计算采用有限元方法, 在 ABAQUS 软件中实施. 首先将 Cr/PZT 界面作为一个薄层并遵从上述的内聚力模型本构关系, 且规定按照内聚单元来划分网格. 对应的内聚力模型本构关系, 即内聚力-位移关系, 通过 ABAQUS 软件用户子程序 UEL 功能来实现. 试样中的其他区域仍具有各自对应的弹性材料属性. 为了简化计算, 根据夹层悬臂梁试样的几何形状和加载情况, 模拟计算中采取平面应变状态假设, 在垂直薄膜材料厚度方向选取该界面来进行模拟分析.

网格剖分时, 在加载区、界面端部附近等处布置较为密集的单元网格. 悬臂梁试样 D2 模拟计算的典型有限元网格如图 5 所示, 其中, 四节点平面应变单元共 50339 个, 45991 个节点; 平面内聚单元共 2058 个, 4120 个节点.

由上述界面本构关系可知, 内聚力模拟计算本质上属于非线性计算, 因此, 突出的问题是如何保证计算过程的收敛性. 在应用内聚力模型进行模拟时, 由于裂纹启动时刻系统刚度的不连续变化会导致非线性方程的解偏离其平衡解, 从而造成求解过程不收敛. 为了克服启裂时的收敛性困难, 我们对计算模型作了如下改进.

首先, 在内聚力模型的特征方程中引入一个黏性耗散系数 ζ ^[21]. 以指数内聚力模型为例, 在引入黏滞耗散系数之后, 其特征方程为

$$T_n = \sigma_{\max} \exp\left(1 - \frac{A_n}{\delta_n}\right) \left\{ \frac{A_n}{\delta_n} \exp\left(-\frac{A_t^2}{\delta_t^2}\right) + \frac{1-q}{r-1} \left[\exp\left(-\frac{A_t^2}{\delta_t^2}\right) \left(r - \frac{A_n}{\delta_n} \right) \right] \right\} + \zeta_n \frac{d}{dt} \left(\frac{A_n}{\delta_n} \right), \quad (11)$$

$$T_t = 2\sigma_{\max} \left(\frac{\delta_n}{\delta_t} \right) \frac{A_t}{\delta_t} \left(q + \frac{r-q}{r-1} \frac{A_n}{\delta_n} \right) \times \exp\left(1 - \frac{A_n}{\delta_n}\right) \exp\left(-\frac{A_t^2}{\delta_t^2}\right) + \zeta_t \frac{d}{dt} \left(\frac{A_t}{\delta_t} \right), \quad (12)$$

这里, ζ_n 和 ζ_t 分别为当法向载荷和切向载荷作用时控制黏性能量耗散类的黏滞系数. 引入的黏滞系数并不模拟任何真实的能量耗散过程, 而只是为了控制启裂时计算过程的不稳定性. 相关研究表明^[21], 该方法用于内聚力模拟计算十分有效. 本研究中, 在采用双线性指数模型进行模拟计算时均引入了该系数. 其次, 在划分网格时, 将界面及其附近区域尽量划分为足够密集的网格, 且保证单元形状规则. 另外, 设置足够小的时间增量步以实现计算过程收敛性.

3 计算结果与讨论

3.1 指数内聚力模型

内聚力模型的主要特征参数有内聚强度、内聚能及界面特征长度. 在计算中, 通过设定不同的特征参数来调整界面的力学性质, 使模拟计算结果与实验结果尽可能地接近. 试算发现, 计算结果对界面特征长度参数 δ 并不敏感. 在保证计算过程收敛性的前提下, 本研究中将 δ 取为 $0.0015 \mu\text{m}$.

相比较而言, 内聚强度对计算结果有十分显著的影响, 这一点可从图 6 和 7 清楚地看到. 根据内聚强度与材料屈服强度的关系以及大量的试算, 本研究中将法向内聚强度 σ_{\max} 分别设定为 24, 26 和 28 MPa, 由 $q = \phi_t / \phi_n$ 及(5)式知, 相应的切向内聚强度 τ_{\max} 为 27.98, 30.31 和 32.64 MPa. 由第一节知, 内聚力-位移曲线下的面积为内聚能量. 据(5)式, 3 个内聚强度对应的法向内聚能 ϕ_n 分别为 0.0979, 0.1131 和 0.1142 J/m², 切向内聚能 ϕ_t 分别为 0.04895, 0.05655 和 0.0571 J/m². 即设定不同的界面特征长度和内聚强度, 意味着设定了不同的界面内聚能值.

图 6 给出了法向内聚强度分别为 24, 26, 28 MPa 时模拟得到的加载点处载荷-位移曲线. 图中的标记, 如 X24MPa 表示采用 Xu-Needleman 指数模型、 σ_{\max} 等于 24 MPa 时的计算结果, X26MPa 对应的是指数模型、 σ_{\max} 等于 26 MPa 的结果, 余类推; 标记为“Experiment”的曲线为作者们以前得到的夹层悬臂梁界面实验测试结果. 由图 6 可见, 随着内聚强度的增大, 模拟曲线逐渐趋近于实验曲线. 内聚强度等于 24 和 26 MPa 时的计算曲线大部分线段与实验曲线基本重合, 但是在临近断裂时刻, 二者的偏差较大. 模

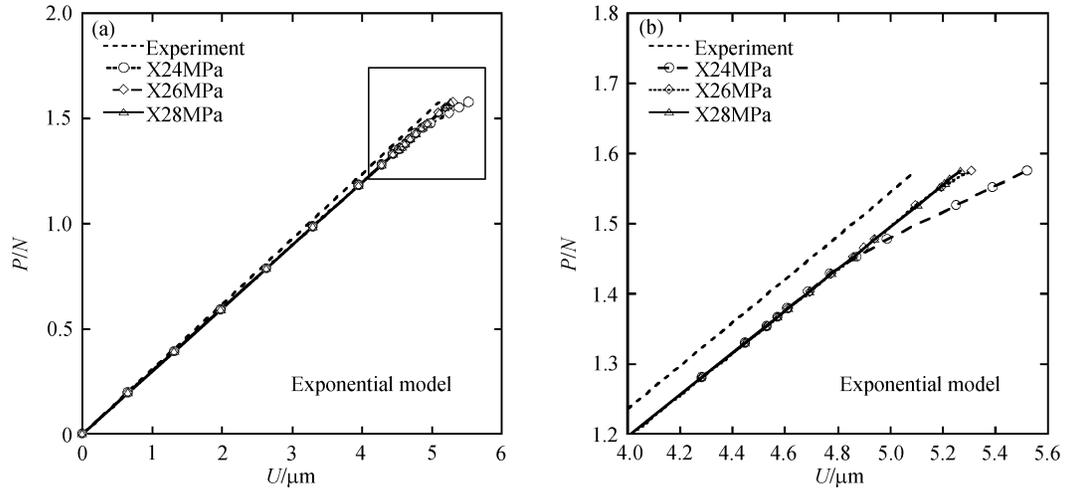


图 6 指数模型中不同内聚强度下的载荷-位移曲线
(b)为(a)图方框区域的放大图

表 1 内聚力参数及计算结果与实测结果之比较

参数组号	界面特征长度/ μm	法向内聚强度/ MPa	法向内聚能/ $\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$		切向内聚能/ $\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$		加载点位移/ μm		
			双线性	指数	双线性	指数	双线性	指数	
1	0.0015	24	0.12	0.0979	0.24	0.04895	6.4316	5.5221	
2	0.0015	26	0.13	0.1131	0.26	0.05655	5.8275	5.3079	
3	0.0015	28	0.14	0.1142	0.28	0.0571	5.2531	5.2671	
加载点位移实验值								5.10	

拟中发现, 计算曲线偏离实验曲线的部分对应于裂纹沿界面扩展的阶段. 相比较而言, 26 MPa 时的曲线与实验曲线更为一致, 给出的加载点位移也更接近实验值(见图 6(b)及表 1). 当 σ_{max} 等于 28 MPa 时, 计算得到的载荷-位移曲线保持良好的直线关系, 直至断裂时刻, 且与实验曲线非常接近. 模拟计算还发现, 当 σ_{max} 超过 28 MPa 时, 虽然模拟曲线会很接近实验曲线, 但是无法实现界面开裂以及沿界面裂纹扩展.

图 7 给出了不同界面特征长度 δ 对加载点位移计算结果的影响. 可以看出, 对于 σ_{max} 等于 24 和 26 MPa 的情形, 当 δ 值较小时, 加载点位移 U 首先随着 δ 的增大而变小; 当 δ 值超过约 0.003 时, U 随着 δ 的增大而增大. 对于 σ_{max} 等于 28 MPa 的情形, 随着 δ 的增大, U 一直保持增加的趋势. 相比较而言, σ_{max} 等于 28 MPa 时的加载点位移与实验值最为接近. 由第二节可知, δ 值增大意味着界面材料变得柔软, 即刚度减小, 相应地, 位移值应该增大. 据此判断, 上述计算结果中 σ_{max} 取 28 MPa 者较为合理.

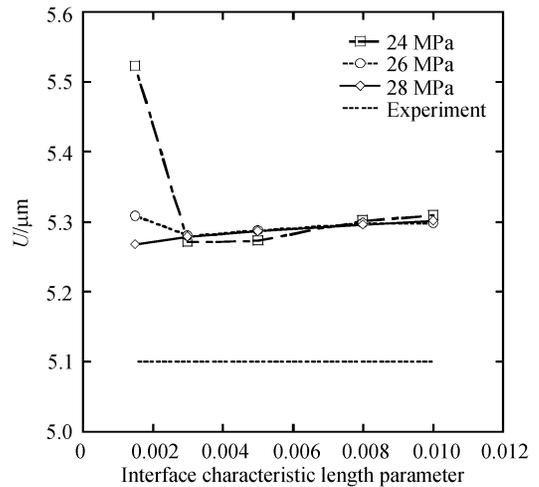


图 7 指数模型中不同界面特征长度下的加载点位移

3.2 双线性内聚力模型

与 Xu-Needleman 指数模型类似, 采用双线性内聚力模型进行模拟时, 计算结果对界面特征长度 δ 也不十分敏感. 有所不同的是, 该双线性模型计算过程的收敛性对 δ 较为敏感. 当 $\delta > 0.03 \mu\text{m}$ 时, 计算

过程通常难以收敛. 为了保证计算收敛以及与指数模型结果相比较, 计算中将 δ 亦取为 $0.0015 \mu\text{m}$. 内聚强度 σ_{max} 亦分别取为 24, 26 和 28 MPa, 相应的剪切内聚强度 τ_{max} 亦为 24, 26 和 28 MPa. 由(10)式知, 上述特征参数对应的界面法向内聚能 ϕ_n 分别为 0.12, 0.13 及 0.14 J/m^2 , 切向内聚能 ϕ_t 分别为 0.24, 0.26 和 0.28 J/m^2 .

图 8 给出了不同内聚强度下的加载点载荷-位移曲线模拟结果. 图中的标记, 如 B24MPa 表示采用双线性(bilinear)模型、 σ_{max} 等于 24 MPa 时的计算结果, 余类推; 标记为“Experiment”者为前述实验结果. 可以看出, 随着内聚强度的增大, 模拟曲线逐渐趋近于实验曲线. σ_{max} 等于 24 和 26 MPa 时的计算曲线大部分线段仍然与实验曲线重合; 只有在临近断裂时刻, 计算曲线有所偏离, 该阶段对应着裂纹沿界面的扩展阶段. 仔细分析发现, 26 MPa 时的加载点位移更为接近实验值(图 8(b)). 当 σ_{max} 等于 28 MPa 时, 模拟曲线保持良好的直线关系直至断裂时刻, 整体上与实验曲线一致, 吻合较好. 计算还发现, 当 σ_{max} 超过 28 MPa 时, 观察不到沿界面端开裂以及沿界面裂纹扩展.

3.3 两种模型的比较

图 9 将指数内聚力模型和双线性内聚力模型的计算结果作一比较. 可以看出, 随着内聚强度的增大,

两种模型下的载荷-位移曲线表现出大体相似的特征, 而且, 当 σ_{max} 等于 28 MPa 时, 两种模型的模拟结果均与实验曲线吻合较好. 仔细分析可知, 双线性模型的计算结果比指数模型更为接近实验结果, 表现在两方面: (i) 双线性模型的载荷-位移曲线比指数模型更为接近实验曲线, 无论是在裂纹萌生之前还是在裂纹扩展阶段; (ii) 双线性模型的加载点位移预测值与实验测量值的误差更小, 见图 9 及表 1.

图 10(a)给出了在界面端裂纹萌生时刻、采用双线性和指数内聚力模型计算得到的界面法向应力分布情况. 可以看出, 随着内聚强度的增大, 两种模型下的界面裂纹长度趋于减小, 即在启裂时刻, 界面上尚未开裂的韧带部分更长. 而且, 在相同的内聚强度下, 双线性模型下的界面裂纹长度远大于指数模型下的裂纹长度. 这表明, 与指数内聚力模型相比, 双线性内聚力模型更为适用于描述本研究中的 Cr/PZT 界面破坏过程. 前述的实验观测表明, 该过程表现出脆性断裂特征. 即对于薄膜脆性断裂情形, 双线性内聚力模型更为合适. 已有的研究文献证实^[18,18,22], 指数与梯形内聚力模型多用于弹塑性断裂、或塑性变形较大的情形, 双线性模型对脆性断裂多用, 本文的研究结果与此是一致的.

图 10(b)给出了在启裂时刻、采用两种内聚力模型计算得到的界面法向位移分布情况. 本研究所采用的夹层悬臂梁试样在弯曲载荷作用下, 界面上法

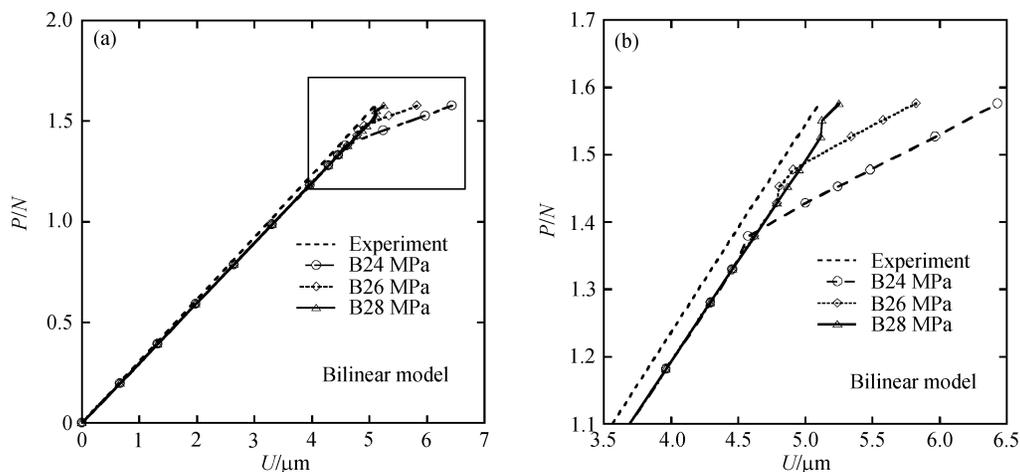


图 8 双线性模型中不同内聚强度下的载荷-位移曲线
(b)为(a)图方框区域的放大图

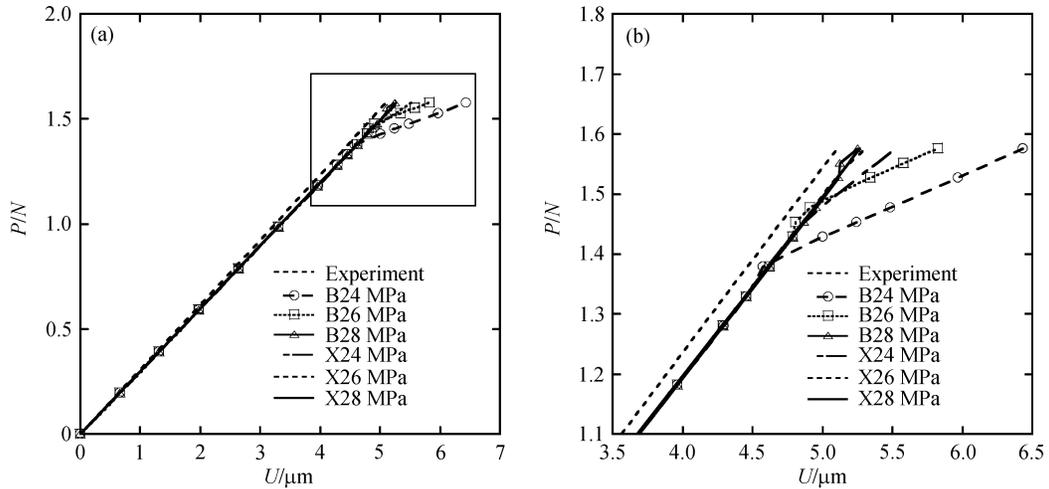


图 9 两种内聚力模型下的载荷-位移曲线比较

(b)为(a)图方框区域的放大图

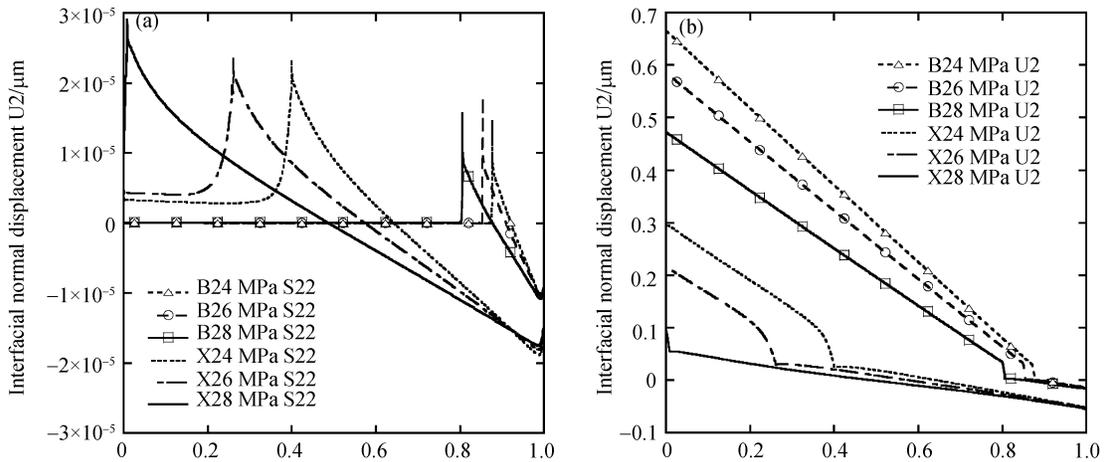


图 10 沿 Cr/PZT 界面的法向应力与法向位移的分布情况

(a) 界面法向应力分布; (b) 界面法向位移分布

向位移为主要位移分量. 由图可见, 随着内聚强度的增大, 对于同一内聚力模型, 界面法向位移趋于减小, 同时裂纹长度也变小, 即开裂的界面段长度更小. 对于指数性模型, 当 σ_{max} 等于 28 MPa 时, 裂纹刚刚在界面端附近萌生; 当 σ_{max} 等于 26 和 24 MPa 时, 大约 25% 和 40% 的界面已经裂开. 对于双线性模型, 在 3 个内聚强度情形下, 裂纹均已经扩展超过 80% 的界面长度, 界面大部分已经发生了材料分离, 即破坏. 这也再次说明了采用双线性内聚力模型的合理性.

表 1 给出了采用两种内聚力模型计算得到的断裂时刻加载点位移值, 以及它们与实测值的比较. 可以

清楚地看出, 第三组参数的计算结果较为理想, 即法向内聚强度等于 28 MPa, 界面特征长度等于 0.0015 μm , 对应的界面法向内聚能为 0.14 J/m^2 , 切向内聚能为 0.28 J/m^2 (双线性模型). 此时, 从加载点位移与实验结果比较来看, 双线性内聚力模型的预测误差仅为 3%, 好于指数模型 (误差值 3.3%).

综合上述结果, 双线性内聚力模型适用于描述本研究涉及的压电薄膜中 Cr/PZT 界面的断裂过程. 采用双线性内聚力模型模拟确定的 Cr/PZT 界面内聚力参数如下: 界面特征长度 $\delta = 0.0015$, 内聚强度等于 28 MPa, 界面法向内聚能 $\phi_n = 0.14 \text{ J}/\text{m}^2$, 切向内

聚能 $\phi_1 = 0.28 \text{ J/m}^2$.

3.4 界面内聚力参数的有效性检验

以上数值模拟针对的是图 2 中的 D2 试样, 因此, 提取出的 Cr/PZT 界面特征内聚力参数, 包括内聚强度、内聚能及界面特征长度等, 也仅仅反映了该 D2 试样的几何尺寸、外加载荷等因素对其界面破坏的影响. 图 2 中的其他试样 D1, D3 与 D2 试样的材料相同, 从实验结果来看, 它们的破坏特征均相同. 因此, 这里就可以方便地对上述界面内聚力参数的正确性进行验证. 程序如下: 将上述获得的界面内聚力参数直接应用于 D1, D3 试样的有限元计算, 然后将给出的模拟计算结果与实验结果进行比较, 从两者的相符

情况即可作出判断. 图 11 和 12 分别给出了采用表 1 中第三组参数的指数模型与双线性模型的计算曲线、以及它们与实验曲线的比较.

由图 11 和 12 可知, 对于试样 D1 与 D3, 指数模型与双线性模型所得的计算曲线大部分线段与实验曲线趋势一致并接近; 只有在临近断裂时刻, 计算曲线与实验曲线开始有所偏离; 并且, 对应于断裂载荷时的加载点位移计算值与实验值误差较小, 如表 2 所示. 这说明, 上述得到的界面内聚力参数是可靠的, 能够对压电薄膜 Cr/PZT 界面的破坏过程做出正确的预测. 双线性模型下的预测误差小于 4%, 而指数模型的预测误差则略大一些, 如 D3 试样的误差超过 10%.

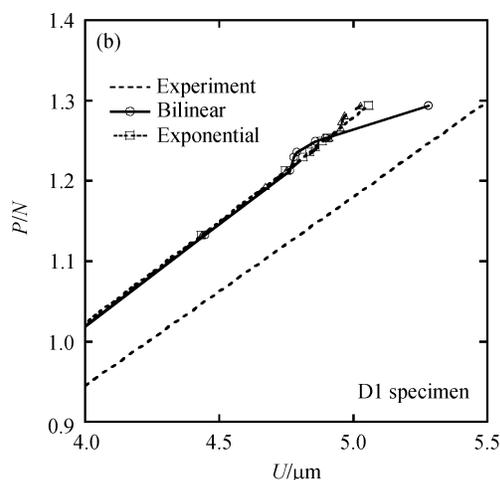
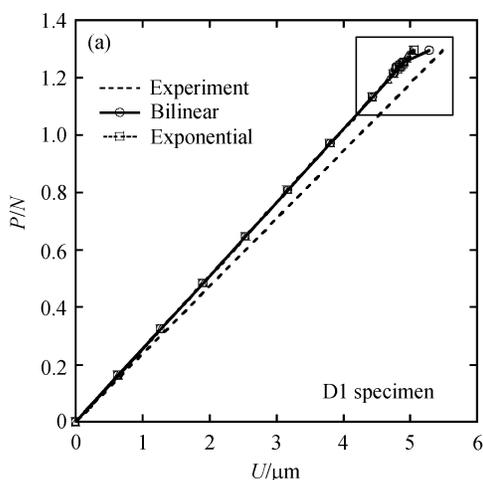


图 11 D1 试样的有限元计算结果与实验结果的比较

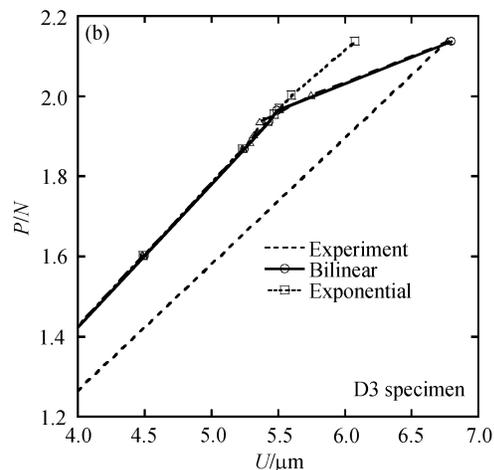
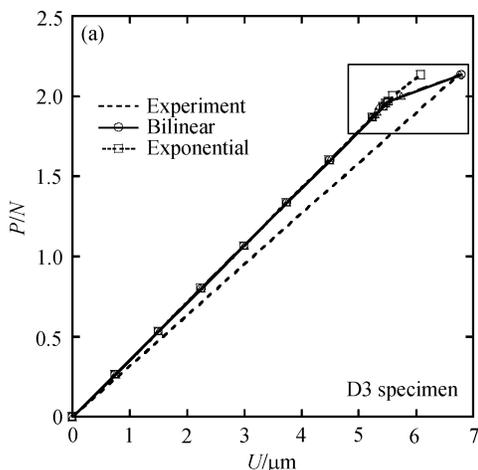


图 12 D3 试样的有限元计算结果与实验结果的比较

表 2 D1 与 D3 试样的计算结果与实测结果之比较

试样编号	断裂载荷 计算值/N	加载点位移计算值/ μm		加载点位移 实验值/ μm	与实验值的误差	
		双线性	指数		双线性	指数
D1	1.294	5.2825	5.0575	5.48	3.60%	7.71%
D3	2.136	6.7964	6.0791	6.76	0.54%	10.07%

3.5 Cr/PZT 界面强度

本节对上述确定的Cr/PZT界面的内聚强度、内聚能量指标作一讨论. 通过以上的模拟计算, 可以给出Cr/PZT界面的特征力学参数: 法向内聚强度 $\sigma_{\max} = 28 \text{ MPa}$, 法向内聚能 $\phi_n = 0.14 \text{ J/m}^2$ 和切向内聚能 $\phi_t = 0.28 \text{ J/m}^2$. 通常, 块体金属Cr材料的断裂强度约为 80 MPa , 典型陶瓷的弯曲强度约为几百个MPa. 与它们相比较, 本研究的Cr/PZT薄膜界面的内聚强度是比较低的. 根据Freund和Suresh的定义^[23], 毫米量级厚度的薄膜或涂层材料中弱结合界面的断裂能量可以低为 0.5 J/m^2 , 强结合界面则可能超过 300 J/m^2 , 典型弱结合界面的断裂能一般处于 $1\sim 10 \text{ J/m}^2$ 范围内. Volinsky等人^[5]较为系统地比较了多种薄膜中界面结合强度的实验测试结果, 他们发现多层结构薄膜中的界面结合强度可能低至 $0.25\sim 0.33 \text{ J/m}^2$; 而且, 对于包含内部层的Al/内部层/SiO₂ 或Al/内部层/Al₂O₃, 只要薄膜内部层的厚度足够小, 当薄膜厚度从 200 nm 增加至 2000 nm 时, 其界面结合强度会明显地增大(从 4 J/m^2 增至 12 J/m^2). 从模拟计算结果(即法向内聚能 0.14 J/m^2 和切向内聚能 0.28 J/m^2) 来看, 本研究所涉及的Cr/PZT/PLT/Pt/Ti/Si多层薄膜系统中Cr/PZT界面的结合强度是比较低的, 它属于

弱结合界面. 值得指出的是, 该薄膜材料中的PZT薄膜层仅厚约 $2.5 \mu\text{m}$, Cr层厚约 $0.2 \mu\text{m}$, 其他薄膜层均比PZT层更薄, 最薄的PLT层和Ti层只有 20 nm 厚. 因此, 该Cr/PZT界面具有如此低的内聚能可能是合理的.

4 结论

本文基于连续介质力学的内聚力模型, 采用有限元方法模拟研究了多层薄膜材料Cr/PZT/PLT/Pt/Ti中沿压电PZT功能层与金属Cr保护层之间界面的断裂过程. 模拟研究发现, 在内聚力模型的诸参数中, 内聚强度与内聚能是影响计算结果的主导参数. 与指数模型相比, 双线性内聚力模型更适合于描述该薄膜材料中Cr/PZT界面端的裂纹萌生以及裂纹沿界面扩展的脆性断裂过程. 通过与实验结果校准的办法, 确定了该Cr/PZT界面的内聚强度和内聚能特征参数, 即内聚强度等于 28 MPa , 界面特征长度 $\delta = 0.0015 \mu\text{m}$, 界面法向内聚能为 0.14 J/m^2 , 切向内聚能为 0.28 J/m^2 . 这些结果表明, Cr/PZT界面结合比较弱, 在薄膜层内应力或外加载荷作用下, 该界面将易于发生分层破坏, 且断裂过程趋向于脆性断裂. 这些均与实验观测结果是一致的.

参考文献

- 1 Evans A G, Hutchinson J W. The thermomechanical integrity of thin films and multilayers. *Acta Metall Mater*, 1995, 43(7): 2507—2530^[DOI]
- 2 孔学东, 恩云飞. 电子元器件失效分析与典型案例. 北京: 国防工业出版社, 2006
- 3 Shang F, Kitamura T, Hirakata H, et al. Experimental and theoretical investigations of delamination at free edge of interface between piezoelectric thin films on a substrate. *Int J Solids Struct*, 2005, 42(5-6): 1729—1741^[DOI]
- 4 杨班权, 陈光南, 张坤, 等. 涂层/基体材料界面结合强度测量方法的形状与展望. *力学进展*, 2007, 37(1): 67—79
- 5 Volinsky A A, Moody N R, Gerberich W W. Interfacial toughness measurements for thin films on substrates. *Acta Mater*, 2002, 50(3): 441—466^[DOI]
- 6 Akisanya A R, Meng C S. Initiation of fracture at the interface corner of bi-material joints. *J Mech Phys Solids*, 2003, 51(1): 27—46^[DOI]
- 7 Becker T L Jr, McNancy J M, Cannon R M, et al. Limitations on the use of the mixed mode delamination beam test specimen: Effect of the size of the region of K-dominance. *Mater Mech*, 1997, 25(4): 291—308^[DOI]

- 8 Wei Y G, Hutchinson J W. Nonlinear delamination mechanics of thin films. *J Mech Phys Solids*, 1997, 45(7): 1137—1159[DOI]
- 9 Mohammed I, Liechti K M. Cohesive zone modeling of crack initiation at biomaterial corners. *J Mech Phys Solids*, 2000, 48: 735—764[DOI]
- 10 Chandra N, Li H, Shet C, et al. Some issues in the application of cohesive zone models for metal-ceramic interfaces. *Int J Solids Struct*, 2002, 39(10): 2827—2855[DOI]
- 11 Feraren P, Jensen H M. Cohesive zone modelling of interface fracture near flaws in adhesive joints. *Eng Fract Mech* 2004, 71(15): 2125—2142[DOI]
- 12 Xu X P, Needleman A. Void nucleation by inclusion debonding in a crystal matrix. *Modell Simul Mater Sci Eng*, 1993, 1(2): 111—132[DOI]
- 13 Geubelle P H, Baylor J. Impact-induced delamination of laminated composites: A 2D simulation. *Composites Part B*, 1998, 29: 589—602[DOI]
- 14 Barenblatt G I. Mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture. *Adv Appl Mech*, 1962, 7: 55—125[DOI]
- 15 Dugdale D S. Yielding of steel sheets containing slits. *J Mech Phys Solids*, 1960, 8(2): 100—104[DOI]
- 16 Needleman A. A continuum model for void nucleation by inclusion debonding. *J Appl Mech*, 1987, 54(3): 525—531
- 17 Needleman A. An analysis of tensile decohesion along an interface. *J Mech Phys Solids*, 1990, 38(3): 289—324[DOI]
- 18 Xu X P, Needleman A. Analysis of ductile crack growth by means of a cohesive damage model. *Int J Fract*, 1996, 81(2): 99—112[DOI]
- 19 Tvergaard V, Hutchinson J W. The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids. *J Mech Phys Solids*, 1992, 40(6): 1377—1397[DOI]
- 20 Camacho G T, Ortiz M. Computational modeling of impact damage in brittle materials. *Int J Solids Struct*, 1996, 33(20-22): 2899—2938[DOI]
- 21 Gao Y F, Bower A F. A simple technique for avoiding convergence problems in finite element simulation of crack nucleation and growth on cohesive interfaces. *Modell Simul Mater Sci Eng*, 2004, 12(3): 453—463[DOI]
- 22 Yamakov V, Saether E, Phillips D R, et al. Molecular-dynamics simulation-based cohesive zone representation of intergranular fracture processes in aluminum. *J Mech Phys Solids*, 2006, 54(9): 1899—1928[DOI]
- 23 Freund L B, Suresh S. *Thin Film Materials*. Cambridge: Cambridge University Press, 2003

Cohesive zone modelling of interfacial delamination in PZT thin films

YAN YaBin & SHANG FuLin*

MOE Key Laboratory for Strength and Vibration, Department of Engineering Mechanics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China

Previous experimental tests have demonstrated that the multilayered Cr/PZT/PLT/Pt/Ti thin films deposited on single crystal Si substrate tend to delaminate along the interface between PZT and Cr layers in a brittle manner. This study starts from modeling based on cohesive zone concept and carries out finite element simulations to check the delamination behavior along the Cr/PZT interface. Two cohesive zone models (CZMs) of exponential type and bilinear type are adopted, and the characteristic CZM parameters are extracted through calibration via the experimental results. The simulation results show that cohesive strength and cohesive energy are the dominating CZM parameters; the bilinear CZM more suitably describes this brittle interfacial delamination; in comparison with typical several mm-thick film/coating materials, the fracture energy of this weak Cr/PZT interface is quite low. Our study demonstrates the applicability of CZM for characterizing the interface fracture behavior of film materials of micrometer thicknesses.

interface, delamination, cohesive zone model, thin film