

表面粗糙度对于微结构粘附的影响分析

王立森, 赵亚溥

(中国科学院力学研究所 非线性力学国家重点实验室, 北京 100080)

摘要: 考虑实际微结构表面粗糙度对粘着特性的影响, 利用表面力以及表征微尺度粘着弹性接触理论的粘着数对微机械中典型的微悬臂梁结构的剥离数(peel number)进行修正。结果表明, 由于表面粗糙度的存在, 微结构中的粘着作用削弱, 而这种作用可以利用粘着参数(adhesion parameter) θ 来定量刻画。

关键词: 粘着; van der waals 力; 粘着数; 剥离数; 表面能; 微尺度粘着接触

中图分类号:

微电子机械系统 (MEMS) 通常采用与传统的 IC 工艺相兼容的表面硅微加工方法, 通过先在牺牲层上形成平板或者梁结构, 然后再腐蚀掉牺牲层而得到所需结构。采用这种工艺加工得到的微构件的侧向尺寸为 10~500 μm , 厚度方向尺寸为 0.1 μm 到几个 μm , 与基底之间的间隙一般为 0.1~2 μm ^[1]。在这种类型的微构件中, 微构件之间彼此非常接近, 并且大的长细比使得结构非常柔软; 另一方面由于其具有很大的比表面积, 表面力的作用变得非常明显, 这样为构件之间发生粘附提供了条件。例如, 对于具有高度柔性的亚微米结构, 克服粘附所需要的撕开力(pull-off force)为 nN, 而在作为汽车防撞气囊的微加速度计中微结构与邻近平面之间的撕开力可以达到几个 μN 。粘附可以发生在微加工工艺的最后一步结构释放过程中, 也可能因过载或环境等因素引起机械失效而发生在封装好的装置内。

粘附的微观机理可以归结为毛细力、静电力、van der waals 力等综合作用的结果。不同情况下, 各种因素的贡献将会不同。对于作为分子间相互作用表现形式的 van der waals 力和短程静电力的研究在微尺度接触力学中已经有了一系列研究结果。本文利用微尺度粘着弹性接触理论讨论表面粗糙度对表征微悬臂梁粘着特性的剥离数的影响, 给出其对于粘着参数的依赖关系, 以便为微电子机械系统和微-纳米摩擦学研究提供参考。

1 微尺度弹性粘着接触理论

Hertz 接触理论(1881 年)在研究接触问题时

并没有考虑表面力的影响。当研究对象特征尺度减小到一定范围时, 将出现很多传统宏观接触理论所无法解释的现象, 究其原因就是两物体间表面力的作用; 而在宏观理论中, 这些表面作用力和弹性力相比很弱, 可以忽略。从众所周知的尺度率关系来看, 随着尺寸的减小, 与特征长度 L 成 2 次方标度的表面力将大于与 L 成 3 次方标度的体积力; 当表面力成为主导因素时, 传统的连续介质力学方法显示出明显的不足; 此时宜将由表面力(或表面能)所引起的粘着与经典接触力学相结合, 构成微尺度粘着接触理论^[2]。

Bradley(1931 年)给出了两个半径分别为 R_1 和 R_2 的刚性球接触时产生的粘着力为 $2\pi R\Delta\gamma$, 其中 R 为等效半径 R_1R_2/R_1+R_2 , $\Delta\gamma$ 为表面能或者称为粘着功。利用 Lennard-Jones 势, Derjaguin 等^[3]给出了考虑接触表面粘着力时的修正 Hertz 关系:

$$\frac{a^3 K}{R} = P + 2\pi R\Delta\gamma, \quad \delta = a^2 / R. \quad (1)$$

式(1)一般被称为 DMT 理论。 P 为作用于两表面上的外力。当无外力作用时, 在表面力作用下将产生半径为 $a_0 = (2\pi R^2\Delta\gamma / K)^{1/3}$ 的接触圆域。

Johnson 等^[4]利用考虑接触的球体之间的弹性变形, 应用 Griffith 能量方法得到的表面力为 $F=3\pi R\Delta\gamma/2$ (JKR 理论)。DMT 理论和 JKR 理论之间的不一致在引入无量纲数——Tabor 数 $\mu = (R\Delta\gamma^2 / E^2\epsilon^3)^{1/3}$ 之后才得到正确的解释。该无量纲数可以理解为由粘着引起弹性变形与表面力的有效作用范围(分子之间的平衡间距 ϵ)之比。当 Tabor 数 μ 很小(小于 0.1)时, Bradley 解非常接近实

基金项目: 国家 973 项目(G1999033103), 国家杰出青年基金(19928205)和中科院方向性项目(KJCX2-SW-L2)资助。

收稿日期: 2002-01-12; **修回日期:** 2002-04-08 /联系人 赵亚溥, e-mail: yzhao@nm.i.mech.ac.cn

作者简介: 赵亚溥, 男, 1963 年生, 博士, 研究员, 博士生导师, 主要从事冲击动力学及微系统力学的研究,

际情况；而当 μ 大于 5 时，JKR 理论和实验结果较为一致^[5]，DMT 理论适用于曲率半径小、粘附能低及弹性模量高的体系；JKR 理论则适用于大半径、高粘附能和低模量体系^[6]。

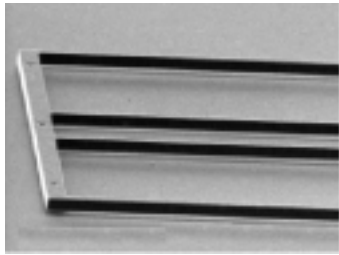
实际表面由于存在一定的粗糙度，对接触难免造成一定的影响，为此 Fuller 等^[7]引入了另 1 个无量纲数——粘着数(adhesion parameter)：

$$\theta = \frac{E\sigma^{3/2}}{R^{1/2}\Delta\gamma} \quad (2)$$

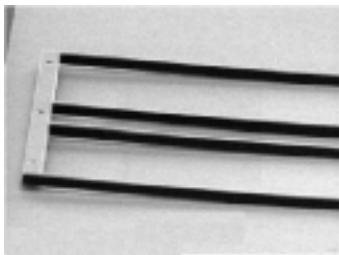
这个无量纲数表征了高的凹凸不平使表面分离的压缩力与较低的凹凸不平使表面连接的粘着力相互作用的统计平均效果。当粘着数 θ 很小时，粘着很大；当表面粗糙度增加时，粘着数 θ 增大，表面粘着减小。

2 剥离数的物理意义及导出

微结构(例如微梁、板)在加工或者工作过程中的粘附是比较常见的一种使微机械失效的模式。图 2 显示了微折叠梁结构在冲击作用下粘附到基底上的情形^[8]。



(a) Undeformed beam



(b) Beam adhered to substrate

Fig.2 Scheme of folded flexure

图 2 折叠梁微结构及其在基底表面粘附示意图

表面之间粘着力的作用将产生粘附能，当粘着作用大于使微结构产生变形的弹性恢复力时，将发生粘附。这种体系中存在结构产生的弹性变形能和使表面粘附到一起的表面粘附能。Mastrangelo 等^[9]在讨论微结构中的粘附现象时，

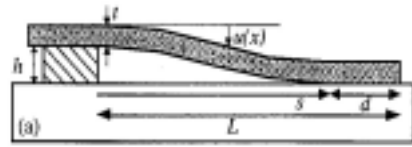
引入了无量纲数剥离数(peel number)，可作为微结构发生粘附的重要判据。

考虑如图 3 所示的悬臂梁在粘着力作用下的 2 种变形情况，对长梁结构，其变形为 S 型，而对于比较短的梁，变形为弧形。在没有其他外力作用下，受粘附作用的悬臂梁结构变形关系为^[10]：

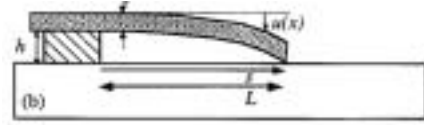
$$u(\eta) = h\eta^2 \{ [m(s) - 2]\eta + [3 - m(s)] \}, \eta = \frac{x}{s} \quad (3)$$

式中： h 为支撑的高度， t 为梁的厚度， L 为梁长，悬臂梁自由端端点处的剪切角为： $\theta = m(h/s)$,

$$m(s) = \frac{\frac{16}{5} \left(\frac{t}{d}\right)^3 \left(\frac{t}{s}\right) \left[1 + \frac{15}{32} \left(\frac{d}{t}\right)^2 \left(\frac{E}{G_s}\right) \right]}{1 + \frac{12}{35} \left(\frac{t}{d}\right)^3 \left(\frac{t}{s}\right) \left[1 + \frac{15}{32} \left(\frac{d}{t}\right)^2 \left(\frac{E}{G_s}\right) \right]} \quad (4)$$



(a) Cantilever beam adhering length d on substrate



(b) Arc-shaped beam adhering on substrate

Fig.3 Scheme of deformation of cantilever beam

图 3 悬臂梁变形示意图

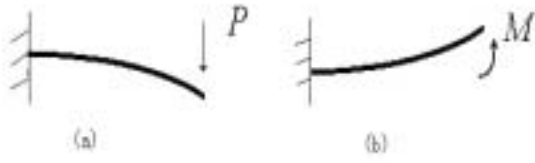
这样得到粘附的梁结构的弹性变形能如式(5)：

$$U_E = \frac{EI}{2} \int_0^s \left(\frac{d^2 u}{dx^2} \right)^2 dx = \frac{6EIh^2}{s^3} \left(1 - m(s) + \frac{m^2(s)}{3} \right)$$

式中： E 为杨氏模量， I 为截面的惯性矩，对于矩形 $I = wt^3/12$ 。通过对 m 的定义以及系统的稳定性进行分析^[10]，得到 m 的取值只能是 0 或者 3/2 附近，即图 3(a 和 b)所示的 2 种形式的变形。

也可以利用简单的分析方法得到与上面结论相一致的结论。对于 S 型悬臂梁，为求解其挠曲方程，可以等效为图 4(a 和 b)所示 2 种作用下变形的叠加，分别求解图 4(a)和图 4(b)，利用边界条件：

$$\begin{cases} u_a(s) + u_b(s) = h \\ u_a'(s) + u_b'(s) = 0 \end{cases} \quad (6)$$



(a) With concentrated force at one end; (b) With moment M at one end

Fig.4 Deformation schematic of cantilever beams

图 4 端部受集中力 P 及端部受力矩 M 作用的悬臂梁变形示意图

得到 S 型悬臂梁的挠曲方程为：

$$u(x) = \frac{3hx^2}{s^2} - \frac{2hx^3}{s^3} \quad (7)$$

弹性应变能为：

$$U_E = \frac{EI}{2} \int_0^s \left(\frac{d^2u}{dx^2} \right)^2 dx = \frac{6EIh^2}{s^3} \quad (8)$$

所得结果同式(4 和 5)中令 $m=0$ 时的结果相同。

对于弧形悬臂梁，挠曲方程为（利用端部受一集中力的悬臂梁的变形等效于此种挠曲形式）：

$$u(x) = \frac{h}{2} \left(\frac{3x^2}{s^2} - \frac{x^3}{s^3} \right) \quad (s \rightarrow L) \quad (9)$$

可见此种情况正好对应于式(6)中 $m=3/2$ 的情形。

考虑系统的总能量构成： $U_T = U_E + U_s$ (10)

U_s 为由粘附作用产生的界面能，并且：

$$U_s = -\Delta\gamma dw = -\Delta\gamma(L-s)w \quad (11)$$

其中 $\Delta\gamma$ 为粘附能。

系统达到平衡状态需满足： $\frac{dU_T}{ds} = 0$ (12)

将式(9 和 11)代入式(12)得到：

$$\frac{3Et^3h^2}{2s^4\Delta\gamma} = 1$$

定义 $N_p = \frac{3Et^3h^2}{2s^4\Delta\gamma}$ ，即为剥离数(peel number)^[9]。

其物理意义为微悬臂梁的挠曲弹性应变能与粘附能的比值，当 $N_p > 1$ ，弹性能大于粘附能，微梁和基底产生剥离；当 $N_p < 1$ ，弹性能小于粘附能，微梁和基底产生粘附。可以看出在微结构中，由于粘

附的存在，对于结构的几何参数造成了一定的限制，如果悬臂梁过长，使得剥离数小于 1 时，将会发生粘着，从而引起结构失效。图 5 示出了过长的悬臂梁粘附到基底上的情形^[11]。

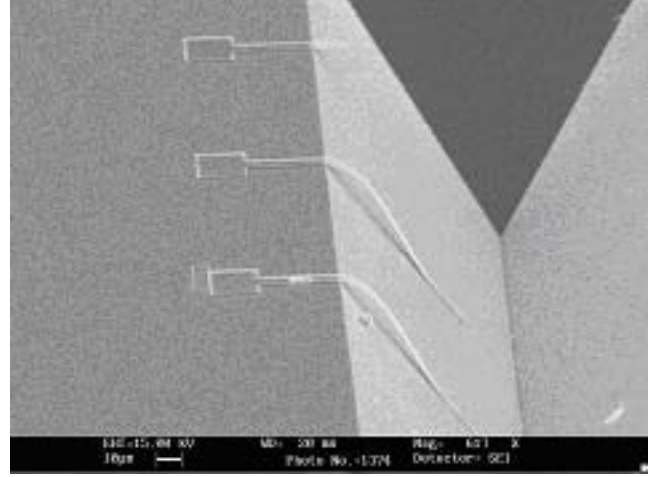


Fig.5 Adhesion of cantilever beam onto adjacent substrate surface

图 5 悬臂梁结构粘附到邻近基底表面的示意图

综合以上分析发现，对于长梁，

$$N_p = \frac{3Et^3h^2}{2s^4\Delta\gamma} \quad (A)$$

对于短梁，

$$N_p = \frac{3Et^3h^2}{8s^4\Delta\gamma} \quad (s \rightarrow L) \quad (B)$$

同样，两端固支梁，以及周边固定的方板和圆板所对应的剥离数分别为^[9]：

$$N_p = \frac{128Et^3h^2}{5L^4\Delta\gamma} \left[1 + \frac{4\sigma_R L^2}{21Et^2} + \frac{256}{2205} \left(\frac{h}{t} \right)^2 \right] \quad (C)$$

(两端固支梁)。

$$N_p = \frac{186Et^3h^2}{(1-\nu^2)w^4\Delta\gamma} \left[1 + \frac{27(1-\nu^2)\sigma_R w^2}{310Et^2} + \frac{12}{31} \left(\frac{h}{t} \right)^2 \right] \quad (D)$$

(宽度为 w 的方板)。

$$N_p = \frac{40Et^3h^2}{3(1-\nu^2)R_p^4\Delta\gamma} \left[1 + \frac{51(1-\nu^2)\sigma_R R_p^2}{160Et^2} \right] \quad (E)$$

(周边固定的圆板)。

其中 σ_R 为结构中的残余应力，可以利用式(A-E)反解出梁长 L 或圆板半径 R_p ，即得到不产生粘附时的结构参数指标。

3 表面粗糙度对于剥离数的影响

上述有关结论是在假定接触面之间光滑这一前提下得到的。实际上表面难免存在一定的粗糙度。这就需要考虑粗糙度的影响。考虑如图 6 所示的模型[12], 设粗糙峰具有相同的曲率半径 R ,

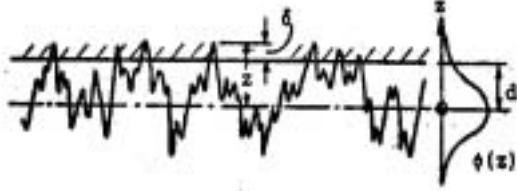


Fig.6 Schematic of contact between randomly rough surface and smooth plane

图 6 随机粗糙表面与光滑平面接触的微观表征示意图

并且其高度满足如下的 Gauss 分布:

$$\varphi(z) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma^2}\right). \quad (13)$$

设单位面积上有 N 个粗糙峰, 即 N 为粗糙峰的密度, 则单位面积上与光滑平面接触的粗糙峰的数量为:

$$n = N \int_d^{\infty} \varphi(z) dz. \quad (14)$$

因为硅具有较高的弹性模量, 并且接触的曲率半径很小(一般为 0.1nm), 所以考虑使用 DMT 模型。利用式(1)可以得到单个粗糙峰接触面积和由弹性接触而产生的压缩应力如式(15)所示:

$$P_i = ER^{\frac{1}{2}} \delta_i^{\frac{3}{2}} - 2\pi R \Delta\gamma = ER^{\frac{1}{2}} (z_i - d)^{\frac{3}{2}} - 2\pi R \Delta\gamma$$

单位面积上总载荷为:

$$P = \frac{ENR^{1/2}}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_d^{\infty} (z-d)^{3/2} \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma^2}\right) dz - \frac{2\pi\Delta\gamma NR}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_d^{\infty} \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma^2}\right) dz. \quad (16)$$

引入 $\delta_c = \frac{1}{3R} \left(\frac{3RP_c}{E}\right)^{\frac{2}{3}}$, 该值为单个粗糙峰尖端发生分离之前的最大伸长, 而粘着数 θ 满足:

$\theta = \frac{E\sigma^{3/2}}{R^{1/2}\Delta\gamma} = \left(\frac{\sigma}{\delta_c}\right)^{\frac{3}{2}}$, 设 $s = d/\sigma$, $x = z/\sigma$, 则式(16)化为:

$$P^* = \frac{P}{\Delta\gamma/\sigma} = RN\sigma \left[\frac{4\theta}{3\sqrt{2\pi}} \int_s^{\infty} (z-s)^{3/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) dx - \sqrt{2\pi} \int_s^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) dx \right]. \quad (17)$$

由 $P^* = 0$, 到在零载荷下接触达到平衡时的间距 s_e 。使两个单位表面从平衡位置分开到无穷远所需要的功为:

$$U_{sp}' = \int_{s_e}^{\infty} P ds. \quad (18)$$

将式(17)以及 s_e 代入到式(18), 到无量纲的分离能:

$$U^* = \frac{U_{sp}'}{\Delta\gamma} = RN\sigma \int_{s_e}^{\infty} \left[\frac{4\theta}{3\sqrt{2\pi}} \int_s^{\infty} (x-s)^{3/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) dx - \sqrt{2\pi} \int_s^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) dx \right] ds. \quad (19)$$

研究表明^[13], 对于真实表面有如下的定量关系:

$$\sigma RN \cong C. \quad (20)$$

式中: C 为介于 0.05 到 0.1 的常数。基于式(20), 由式(17)得到的 s_e 是只依赖于 θ 的函数, 而由式(19)可见 U^* 也是只依赖于 θ 的函数, 设为 $f(\theta)$, 则:

$$W_c' = f(\theta)\Delta\gamma. \quad (21)$$

从能量的观点出发, 利用使 2 个表面分离所需要的分离作用力对应的势能及结构发生弹性变形所存储的应变能构成能量系统。考虑其平衡条

件, 对 S 型梁, 使接触部分分离的总势能为:

$$U_s = w(L-s)W_c' = w(l-s)f(\theta)\Delta\gamma. \quad (22)$$

结合:

$$U_E = \frac{EI}{2} \int_0^s \left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)^2 dx = \frac{6EIh^2}{s^3}, \quad \frac{dU_T}{ds} = 0$$

得到考虑接触面粗糙时的剥离数:

$$\bar{N}_P = N_P \frac{1}{f(\theta)}. \quad (23)$$

其中 $f(\theta)$ 项表示表面粗糙度对剥离数的影响, 其定义见下式。 $f(\theta)$ 与 θ 的对应关系可以利用数值

$$f(\theta) = C \int_{s_c}^{\infty} \left[\frac{4\theta}{3\sqrt{2\pi}} \int_s^{\infty} (x-s)^{3/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) dx - \sqrt{2\pi} \int_s^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) dx \right] ds$$

以认为粘附能即为表面能。随着 θ 的增大, 表面粗糙度的增加, 表面之间的粘着能减少, 此时, $f(\theta)$ 随着 θ 有明显的递减趋势。分析式(23), 第二项中分母减小, 剥离数将增大, 也就是说, 粗糙的影响将会使剥离容易发生。

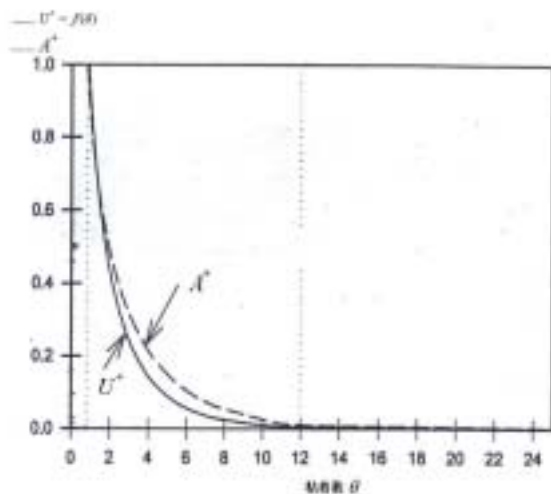


Fig.7 Variation of relative adhesion energy and contact area with adhesion parameter

图 7 相对粘着能及接触面积随着粘着参数变化曲线
(图中 U^* 和 A^* 分别为相对粘着能及接触面积)

4 结论

利用微尺度粘着接触理论模型, 考察了考虑表面粗糙度时的微结构粘附性能, 得到了表征微结构粘附特性的剥离数 N_p 与表征微尺度粘着接触的粘着数 θ 的定量关系; 分析结果表明, 表面粗糙对于结构粘附性能具有明显的削弱作用。

参考文献:

[1] Roya Maboudian, Roger T Howe. Criticle review: adhesion in surface micromechanical structures. J.Vac. Sci.Technol. 1997, 15: 1~20.

计算得到, 见图 7^[12]。其它情况下可以采用类似的分析过程求解。从图(7)可以看出, 在 θ 很小时, 可

[2] Zhao Y P (赵亚溥), Wang L S (王立森), Sun K H (孙克豪). Tabor number, adhesion parameter and elastic theory of micro-scale adhesive contact (Tabor 数、粘着数与微尺度粘着弹性接触理论) [J]. Advances in Mechanics (力学进展) 2000, 30: 529~537.

[3] Derjaguin B V, Muller V M, Toprov Yu P J. Effect of contact deformation on the adhesion of particles. J. Colloid Interface Sci., 1975, 53: 314~326.

[4] Johnson K L, Kendall K, Roberts A D. Surface energy and the contact of elastic solids. Proc. R. Lond, 1971, A324: 301~313.

[5] Johnson K L and Greenwood J A. An adhesion map for contact of elastic spheres. Journal of Colloid and Interface Science, 1997, 192: 326~333.

[6] Bai C L (白春礼), Tian F (田芳), Luo K (罗克). Scanning force microscopy technology (扫描力显微技术) [M]. Beijing (北京): Science Press (科学出版社), 2000.

[7] Fuller KNG, Tabor D. The effect of surface roughness on the adhesion of elastic solids. Proc. R. Soc. Lond, 1975, A345: 327~342.

[8] Miller S L *et al.* Failure modes in surface micro-machined microelectromechanical actuator. Microelectronics Reliability, 1999, 39: 1229-1237.

[9] Mastrangelo C H, Hsu C H. Mechanical stability and adhesion of microstructures under capillary forces-part II: Experiments. Journal of Microelectromechanical Systems. 1993, 2: 44~55.

[10] De Boer M P, Michalske T A. Accurate method for determining adhesion of cantilever beams. Journal of Applied Physics, 1999, 86: 817~827.

[11] Zhao Ya-Pu, Yu T X. Failure modes of MEMS and microscale adhesive contact theory. International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation, 2000, 1: 361~372.

[12] Johnson K L. Adhesion at the contact of solid. In: Theoretical and Applied Mechanics, Proc. 4th IUTAM Congress, Amsterdam, 1976. 133~143.

[13] Gui C, *et al.* The effect of surface roughness on direct wafer bonding [J]. Journal of Applied Physics, 1999, 85: 7448~7454.