

文章编号: 1000-4750(2013)11-0143-05

电-力耦合效应对三维导电弹性体表面失稳的影响

汪忠明¹, 梁晓东², 沈 鑫³

(1. 合肥工业大学土木与水利工程学院, 安徽, 合肥 230009; 2. 深圳奥意建筑工程设计有限公司, 广东, 深圳 518031;
3. 安徽农业大学工学院, 安徽, 合肥 230036)

摘要: 该文研究了电-力耦合效应对三维弹性导电体表面失稳的影响。利用线性摄动理论, 对扩散调控的弹性固体表面在受到单向均匀远场应力和电场的作用下进行了分析, 给出了摄动增长率随扰动波数的变化曲线。在该文的分析中, 考虑了弹性应变能、表面能和静电能的共同作用。分析结果表明, 表面能总是抑制表面失稳, 弹性应变能总是促进表面失稳, 而静电能也是利于表面失稳。表面失稳的触发与泊松比以及电场强度和与拉应力的相对大小有关。通过这种机械应力和电应力调控的表面自组装可以生成周期性纳米结构, 从而为纳电设备的制造提供模板。

关键词: 纳米结构; 线性摄动理论; 电-力耦合; 表面失稳; 自组装; 表面扩散

中图分类号: O341 文献标志码: A doi: 10.6052/j.issn.1000-4750.2012.06.0447

THE SURFACE INSTABILITY OF A THREE-DIMENSIONAL CONDUCTIVE ELASTIC BODY SUBJECTED TO ELECTRO-MECHANICAL COUPLING FIELD

WANG Zhong-ming¹, LIANG Xiao-dong², SHEN Xin³

(1. School of Civil Engineering, Hefei University of Technology, Hefei, Anhui, 230009, China;
2. Shenzhen A+E Design Co., Ltd, Shenzhen, Guangdong, 518031, China;
3. School of Engineering, Anhui Agricultural University, Hefei, Anhui, 230036, China)

Abstract: This paper studied the effect of electro-mechanical coupling on the surface instability of a three-dimensional elastic conductive body. By adopting the linear perturbation theory, the diffusion-mediated surface instability of the elastic solid subjected to a uniaxial uniform far-field stress in an electric field has been analyzed. The curve of the perturbation growth rate versus the disturbance wavenumber is plotted. The elastic strain energy, the surface energy and the electrostatic energy are considered in the analysis. The results indicate that the surface energy always stabilizes the solid surface, the elastic strain energy always promotes the instability and the electrostatic energy destabilizes the surface. The conditions for the onset of instability depend on the Poisson's ratio, the relative value of the electric field intensity and the pre-stress. The periodic nanostructures can be formed by the mechanical stress and the electric stress-controlled surface self-assembly which is desirable for making the template for nanoelectronic devices.

Key words: nanostructures; the linear perturbation theory; electro-mechanical coupling; surface instability; self-assembly; surface diffusion; pre-stress

收稿日期: 2012-06-24; 修改日期: 2013-01-16

基金项目: 国家自然科学基金项目(51177033)

通讯作者: 汪忠明(1976—), 男, 安徽怀宁人, 讲师, 工学博士, 从事微结构演化模拟和混凝土断裂与损伤研究(E-mail: wzmjj0203@sina.com).

作者简介: 梁晓东(1979—), 男, 山西平遥人, 工程师, 工学博士, 从事微结构演化模拟和建筑结构有限元分析和优化

(E-mail: xdleung@gmail.com);

沈 鑫(1975—), 男, 安徽合肥人, 高工, 工学硕士, 从事水利生态材料研究和结构数值模拟(E-mail: shenxin@vip.163.com).

制造可控形状、尺寸和间距的纳米尺度有序图案在纳米科学和工程中扮演着越来越重要的角色。图案质量直接影响纳米设备的性能和可靠性，由于固体表面形态失稳对纳米结构自组装生长起关键性作用，因此受到了广泛研究^[1-7]。自组装的过程是由于不同类型的能量的相互作用进而使得系统总自由能趋于最小的结果。

近十年中，静电场诱导的表面失稳已经被观察和分析，表面形态改变机制主要分为两类：一类是电介质的体流动^[8-9]，其中高聚物电介质层受到电场的作用，高于玻璃态转化温度时，经历表面失稳进而演化成岛；一类是导电材料的表面扩散^[7,10-11]，其中满足表面扩散方程。利用电场控制纳米岛自组装进而制造纳米结构不仅方便^[10]，而且在调节纳米岛尺寸、形状和位置上卓有成效^[8,12]。前述研究只考虑了静电场的作用，本文考虑导电介质在应力场和静电场联合作用下的表面形态失稳。

当弹性模量的大小与电应力相当时，电应力的影响显得重要。本文中，我们考虑了电-力耦合场下弹性导电体表面的形态失稳，利用线性摄动分析，我们得到了临界失稳波长，解释了电场和泊松比对表面稳定性的影响。

1 基本方程

考虑一受电场力和单向均匀远场拉应力 σ_0 的弹性导电体，电场方向与弹性体初始平表面垂直，如图 1 所示。

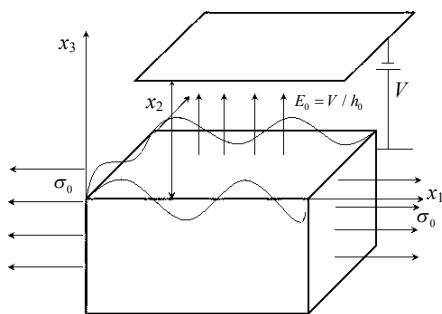


图 1 电场下三维导电应力弹性体示意图

Fig.1 The diagram of 3D conductive stressed elastic body subjected to electric field

导电弹性体，在 x_1 方向无限延伸，在 x_2 方向为有限长度，初始占据 $-\infty \leq x_3 \leq 0$ 区域。弹性体表面固定电势 V ，另一端电极电势为零， h_0 为电极和弹性体初始未扰动表面之间的距离。

弹性体表面和电极之间的区域无自由电荷，电

场强度 \mathbf{E} 满足 Maxwell 方程：

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad \nabla \cdot (\epsilon \mathbf{E}) = 0 \quad (1)$$

其中： $\mathbf{E} = E_1 \hat{x}_1 + E_2 \hat{x}_2 + E_3 \hat{x}_3$ ， E_1 、 E_2 和 E_3 是电场在 x_1 、 x_2 、 x_3 方向的分量； ϵ 为真空电介质常数。在电极处，电场的边界条件为：

$$E_1 = 0, \quad E_2 = 0 \quad \text{在 } x_3 = h_0 \quad (2)$$

真空与固体界面处，电场的切向分量连续要求满足：

$$\mathbf{n} \times \mathbf{E} = 0 \quad \text{在 } x_3 = 0 \quad (3)$$

其中， \mathbf{n} 为固体表面单位外法向向量。

由于弹性平衡的建立比表面扩散快得多，因此可以认为静力平衡时时成立。采用线弹性理论，平衡方程为：

$$\sigma_{ij,j} = 0, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (4)$$

其中：重复下标表示求和； $(,)$ 表示对 x_j 的求导； σ_{ij} 为应力张量分量。对各向同性材料，本构关系为：

$$\sigma_{ij} = \frac{Y}{1+\nu} \left(\epsilon_{ij} + \frac{\nu}{1-2\nu} \delta_{ij} \epsilon_{kk} \right) \quad (5)$$

其中： Y 为弹性模量； ν 为泊松比， δ_{ij} 为 Kronecker's delta； $\epsilon_{ij} = (u_{i,j} + u_{j,i})/2$ 为应变张量分量； u_i 为位移分量。

远场单向均匀拉应力场 σ_0 为：

$$\sigma_{11} = \sigma_0 \quad \text{当 } |x_1| \rightarrow \infty \quad (6)$$

x_3 方向位移边界条件为：

$$u_3(x_1, x_2, -\infty) = 0 \quad (7)$$

固体表面边界条件为：

$$\sigma_{ij} n_j t_i = 0 \quad \text{在 } x_3 = 0 \quad (8)$$

$$\sigma_{ij} n_j n_i = \epsilon |\mathbf{E}|^2 / 2 \quad \text{在 } x_3 = 0 \quad (9)$$

其中： n_i 为单位法向量 \mathbf{n} 的分量； t_i 为单位切向量 \mathbf{t} 的分量。

在无蒸气沉积的情况下，表面扩散方程由表面化学势 μ 控制写为：

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{D_s \Omega \delta}{RT} \nabla_s^2 \mu \quad (10)$$

其中： D_s 为表面扩散系数； Ω 为偏摩尔体积； δ 为表面扩散层厚度； R 为气体常数； T 为绝对温度， ∇_s^2 为表面拉普拉斯算符。电场下固体表面化学势表达为^[13]：

$$\mu = \mu_0 - \gamma \Omega \kappa + \Omega U_e - \Omega U_e \quad (11)$$

其中： μ_0 为无应力平表面的化学势； γ 为固体表面能； κ 为平均曲率； U_e 为弹性应变能密度； U_e 为电场能密度。

2 线性稳定性分析

无扰动平表面时，电场强度和弹性体中的应力为：

$$\begin{aligned}\bar{E}_3 &= E_0 = V / h_0, \quad \bar{\sigma}_{11} = \sigma_0, \\ \bar{\sigma}_{22} &= 0, \quad \bar{\sigma}_{33} = \varepsilon E_0^2 / 2\end{aligned}\quad (12)$$

其中(-)代表基态，现在以下面方式扰动基态解：

$$h = H \exp(ik_1 x_1 + ik_2 x_2 + \omega t), \quad H \ll h_0 \quad (13)$$

$$E_1 = \tilde{E}_1(x_3) \exp(ik_1 x_1 + ik_2 x_2 + \omega t) \quad (14)$$

$$E_2 = \tilde{E}_2(x_3) \exp(ik_1 x_1 + ik_2 x_2 + \omega t) \quad (15)$$

$$E_3 = E_0 + \tilde{E}_3(x_3) \exp(ik_1 x_1 + ik_2 x_2 + \omega t) \quad (16)$$

$$u_1 = U_1(x_3) \exp(ik_1 x_1 + ik_2 x_2 + \omega t) \quad (17)$$

$$u_2 = U_2(x_3) \exp(ik_1 x_1 + ik_2 x_2 + \omega t) \quad (18)$$

$$u_3 = U_3(x_3) \exp(ik_1 x_1 + ik_2 x_2 + \omega t) \quad (19)$$

其中： ω 为增长率； k_1 和 k_2 分别为 x 方向和 y 方向的扰动波数。我们假定扰动幅度远小于空间波长，即 $kH \ll 1$ ，这里 $k = (k_1^2 + k_2^2)^{1/2}$ 。固体表面单位法向量和切向量为：

$$\mathbf{n} = (-h_{,1}, -h_{,2}, 1) / (1 + |\nabla h|^2)^{1/2} \quad (20)$$

$$\mathbf{t}_1 = (1, 0, -n_1), \quad \mathbf{t}_2 = (0, 1, -n_2) \quad (21)$$

将式(14)~式(16)代入式(1)，并结合边界条件式(2)~式(3)，可以得到：

$$E_1 = \frac{ik_1 H E_0}{\sinh kh_0} \sinh k(x_3 - h_0) \exp(ik_1 x_1 + ik_2 x_2 + \omega t),$$

$$E_2 = \frac{ik_2 H E_0}{\sinh kh_0} \sinh k(x_3 - h_0) \exp(ik_1 x_1 + ik_2 x_2 + \omega t), \quad (23)$$

$$E_3 = E_0 + \frac{k H E_0}{\sinh kh_0} \cosh k(x_3 - h_0) \cdot \exp(ik_1 x_1 + ik_2 x_2 + \omega t) \quad (24)$$

此时，固体表面静电能密度近似到一阶为：

$$U_e = \frac{\varepsilon |\mathbf{E}|^2}{2} = \frac{\varepsilon E_0^2}{2} (1 + 2kH \coth kh_0 \exp(ik_1 x_1 + ik_2 x_2 + \omega t)) \quad (25)$$

将式(17)~式(19)代入式(4)，并使用边界条件式(7)~式(9)，可以得到近似到一阶的位移扰动场为：

$$U_1 = (\alpha_1 - ik_1 \beta x_3 / k) \exp(kx_3) \quad (26)$$

$$U_2 = (\alpha_2 - ik_2 \beta x_3 / k) \exp(kx_3) \quad (27)$$

$$U_3 = (\alpha_3 - \beta x_3) \exp(kx_3) \quad (28)$$

$$\alpha_1 = -\frac{2ik_1 H (1+\nu) \operatorname{csch} kh_0}{k^3 Y}$$

$$\left. \begin{aligned} &\left\{ \frac{\varepsilon E_0^2}{2} k^2 (1-2\nu) \cosh kh_0 + \right. \\ &\left. \left[\frac{\varepsilon E_0^2}{2} k^2 (1-\nu) - (k^2 - k_1^2 \nu) \sigma_0 \right] \sinh kh_0 \right\} \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

$$\alpha_2 = -\frac{2ik_2 H (1+\nu) \operatorname{csch} kh_0}{k^3 Y}.$$

$$\left. \begin{aligned} &\left\{ \frac{\varepsilon E_0^2}{2} k^2 (1-2\nu) \cosh kh_0 + \right. \\ &\left. \left[\frac{\varepsilon E_0^2}{2} k^2 (1-\nu + k_1^2 \nu \sigma_0) \right] \sinh kh_0 \right\} \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

$$\alpha_3 = -\frac{H(1+\nu)}{k^2 Y} \left\{ (1-2\nu) \left(k_1^2 \sigma_0 - \frac{\varepsilon E_0^2}{2} k^2 \right) - \right. \\ \left. 2k^2 \varepsilon E_0^2 (1-\nu) \coth kh_0 \right\} \quad (31)$$

$$\beta = (ik_1 \alpha_1 + ik_2 \alpha_2 + k \alpha_3) / (3-4\nu) \quad (32)$$

此时，固体表面应变能密度近似到一阶为：

$$U_e = \frac{4\sigma_0^2 - 4\varepsilon E_0^2 \nu \sigma_0 + (\varepsilon E_0^2)^2}{8Y} + \frac{2(1+\nu)H}{k^3 Y} \cdot \\ \left. \begin{aligned} &\left\{ \frac{\varepsilon E_0^2}{2} k^2 (1-2\nu) \left(\frac{\varepsilon E_0^2}{2} k^2 + k_1^2 \sigma_0 \right) \coth kh_0 + \right. \\ &\left. \left[\frac{\varepsilon E_0^2}{2} \sigma_0 k^2 k_1^2 - \frac{(\varepsilon E_0^2)^2}{4} \nu k^4 + k_1^2 (k_1^2 \nu - k^2) \sigma_0^2 \right] \right\} \cdot \\ &\exp(ik_1 x_1 + ik_2 x_2 + \omega t) \end{aligned} \right\}. \quad (33)$$

对表面扰动方程式(13)，平均曲率为：

$$\kappa = \frac{(1+h_{,1}^2)h_{,22} + (1+h_{,2}^2)h_{,11} - 2h_{,1}h_{,2}h_{,12}}{(1+|\nabla h|^2)^{3/2}} \quad (34)$$

最后，固体表面演化方程式(10)可以整理为：

$$\omega = -\frac{D_s \Omega^2 \delta}{RT} \frac{2(1+\nu)}{kY} \left[\frac{k^5 \gamma Y}{2(1+\nu)} + k_1^2 (k_1^2 \nu - k^2) \sigma_0^2 + \right. \\ \left. \frac{\varepsilon E_0^2}{2} \sigma_0 k^2 k_1^2 \rho - \frac{(\varepsilon E_0^2)^2}{4} k^4 \phi - \right. \\ \left. \frac{\varepsilon E_0^2}{2} \frac{Y}{(1+\nu)} k^4 \coth kh_0 \right] \quad (35)$$

其中：

$$\begin{aligned}\rho &= 1 + (1-2\nu) \coth kh_0, \\ \varphi &= \nu - (1-2\nu) \coth kh_0\end{aligned} \quad (36)$$

3 失稳模式和讨论

引入特征长度尺度 L 和特征时间尺度 τ ，定义为：

$$L = \gamma / \hat{E}, \quad \tau = L^4 \left(\frac{D_s \Omega^2 \delta}{RT} \right) \gamma \quad (37)$$

其中 $\hat{E} = \varepsilon E_0^2 / 2$ 为基态电应力。

采用以下无量纲化方式:

$$\begin{aligned} k_1^* &= k_1 L, \quad k_2^* = k_2 L, \quad k^* = k L, \\ \omega^* &= \omega \tau, \quad h_0^* = h_0 / L \end{aligned} \quad (38)$$

式(35)重新写为:

$$\begin{aligned} \omega^* &= [2k^{*3} L \coth k^* h_0^* / \gamma - \\ &2k_1^{*2} k^* \sigma_0 \rho L (1+\nu) / \gamma Y] \hat{E} + \\ &[2k^{*3} \phi L (1+\nu) / \gamma Y] \hat{E}^2 - k^{*4} + \\ &2k_1^{*2} (k^* - k_1^{*2} / k^*) \sigma_0^2 L (1+\nu) \gamma Y \end{aligned} \quad (39)$$

其中:

$$\begin{aligned} \rho &= 1 + (1-2\nu) \coth k^* h_0^*, \\ \phi &= \nu - (1-2\nu) \coth k^* h_0^* \end{aligned} \quad (40)$$

从式(35)或式(39), 可以看出表面能总是抑制表面失稳。当 $\varepsilon E_0^2 / Y \ll 1$, 进而忽略与此相关的项时, 式(39)退化为:

$$\begin{aligned} \omega^* &= [2k^{*3} L \coth k^* h_0^* / \gamma] \hat{E} - k^{*4} + \\ &2k_1^{*2} (k^* - k_1^{*2} \nu / k^*) \sigma_0^2 L (1+\nu) / \gamma Y \end{aligned} \quad (41)$$

如果 $\sigma_0 = 0$, 那么结果与 Du^[7]吻合, 这表明电场促进固体表面失稳。考虑电应力效应, 式(39)变为:

$$\begin{aligned} \omega^* &= [2k^{*3} L \coth k^* h_0^* / \gamma] \hat{E} + \\ &[2k^{*3} \phi L (1+\nu) / \gamma Y] \hat{E}^2 - k^{*4} \end{aligned} \quad (42)$$

我们给出了 α 单调增长时, 增长率与扰动波数的曲线图, 如图 2 和图 3 所示, 其中 $\alpha = \frac{Y}{2(1+\nu)\hat{E}}$

为剪切弹性模量与电应力之比。从图中看出, 随着 α 的增大, 结果逐渐趋近于不考虑电-力耦合效应时的弹性表面失稳, 此时电场促使表面形成量子点结构, 这验证了对于大多数高弹性模量材料, 忽略电应力对其影响的合理性, 而当 α 较小时, 则电-力耦合效应会比较显著。图 2 和图 3 的区别在于两者从不同的方向趋近于 Du^[7]的结果, 这是由泊松比影响所致。式(42)中 ϕ 的符号能影响最快增长率和相应波长。

如果 $\hat{E} = 0$, 式(39)变为:

$$\omega^* = -k^{*4} + 2k_1^{*2} (k^* - k_1^{*2} \nu / k^*) \sigma_0^2 L (1+\nu) / \gamma Y \quad (43)$$

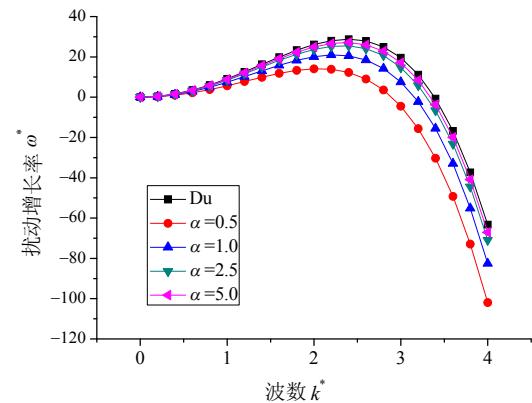


图 2 扰动增长率 ω^* 与波数 k^* 关系, $\nu = 0.3$
($\alpha = Y / (2(1+\nu)\hat{E})$, $\gamma = 1 \text{ J/m}^2$, $\hat{E} = 2.0 \text{ MPa}$,
 $L = \gamma / \hat{E}$, $h_0^* = 0.2$)

Fig.2 The relationship of the disturbance growth rate ω^* versus wave number k^* ($\nu = 0.3$)

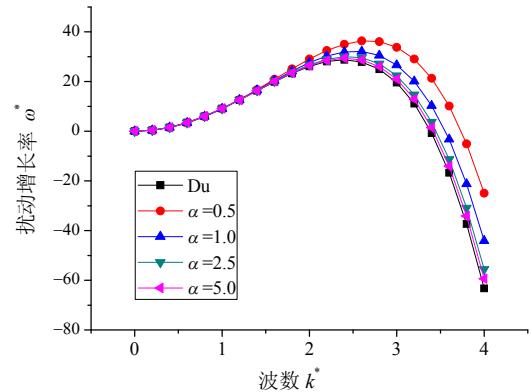


图 3 扰动增长率 ω^* 与波数 k^* 关系, $\nu = 0.45$
($\alpha = Y / (2(1+\nu)\hat{E})$, $\gamma = 1 \text{ J/m}^2$, $\hat{E} = 2.0 \text{ MPa}$,
 $L = \gamma / \hat{E}$, $h_0^* = 0.2$)

Fig.3 The relationship of the disturbance growth rate ω^* versus wave number k^* ($\nu = 0.45$)

这就成为 ATG 失稳^[1-3], 此时应变能促使弹性表面失稳, 在这种情况下, 固体表面优先在 x 方向失稳, 从而形成量子点结构, 这是应力驱动下的结果。从图 4 可以看出, 电场强度越大, 表面失稳越快; 而随着电场强度减小, 结果趋于 ATG 失稳, 这种情况下, 单向均匀拉应力 σ_0 和弹性模量 Y 通常远大于电应力 \hat{E} , 此时不论 ϕ 的符号如何, 电场促进固体表面失稳。应变能和静电能促使弹性体表面失稳, 表面能抑制表面失稳, 当三种能量相互竞争最后趋于能量最低时形成周期性纳米结构, 进而, 利用电场或机械应力场来控制调控弹性体表面微结构的演化形态。

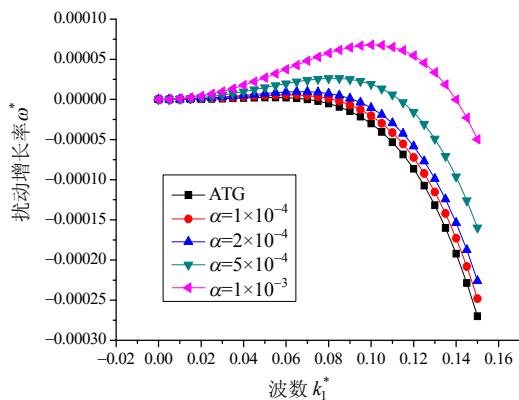


图 4 扰动增长率 ω^* 与波数 k_l^* 关系
($\alpha = \hat{E} / \sigma_0$, $\nu = 0.3$, $\gamma = 1 \text{ J/m}^2$, $\sigma_0 = 10^9 \text{ Pa}$,
 $L = \hat{E} / \sigma_0$, $h_0^* = 0.2$, $Y = 26 \text{ GPa}$)

Fig.4 The relationship of the disturbance growth rate ω^* versus wave number k_l^*

4 结论

本文使用线性摄动理论研究了电场作用下受单向均匀远场拉应力的弹性导电体表面失稳现象。分析中,假定表面原子扩散为表面演化的主要扩散机制。文中考虑了应变能、表面能和静电能的相互作用,得到了电应力对表面形态失稳的影响,同时验证了对于高弹性模量材料可以忽略电应力的合理性。当电应力的量级与弹性模量相当时,电应力的影响是重要的;当电应力远小于弹性模量的大小时,可以忽略电应力的影响。利用这种失稳机制,可以控制生成优先方向周期性自组装图案,为工业应用提供理论指导和参考。

参考文献:

- [1] Asaro R J, Tiller W A. Interface morphology development during stress corrosion cracking: Part I. Via surface diffusion [J]. Metallurgical Transactions, 1972, 3(7): 1789—1796.
- [2] Srolovitz D J. On the stability of surfaces of stressed solids [J]. Acta Metallurgica et Materialia, 1989, 37(2): 621—625.
- [3] Grinfeld M A. Instability of the separation boundary between a non-hydrostatically stressed elastic body and a melt [J]. Soviet Physics - Doklady, 1986, 31: 831—834.
- [4] Spencer B J, Voorhees P W, Davis S H. Morphological instability in epitaxially strained dislocation-free solid films [J]. Physical Review Letters, 1991, 67(26): 3696—3699.
- [5] Chiu C H. The self-assembly of uniform heteroepitaxial islands [J]. Applied Physics Letters, 1999, 75(22): 3473—3475.
- [6] Savina T V, Voorhees P W, Davis S H. The effect of surface stress and wetting layers on morphological instability in epitaxially strained films [J]. Journal of Applied Physics, 2004, 96(6): 3127—3133.
- [7] Du D X, Srolovitz D. Electrostatic field-induced surface instability [J]. Applied Physics Letters, 2004, 85(21): 4917—4919.
- [8] Schaffer E, Thurn-Albrecht T, Russell T P, Steiner U. Electrically induced structure formation and pattern transfer [J]. Nature, 2000, 403: 874—877.
- [9] Kim D, Lu W. Three-dimensional model of electrostatically induced pattern formation in thin polymer films [J]. Physical Review B, 2006, 73(3): 035206.
- [10] Chiu C H, Poh C T, Huang Z. Morphological stability of the Stranski-Krastanow systems under an electric field [J]. Applied Physics Letters, 2006, 88(24): 241906.
- [11] Gill V, Guduru P R, Sheldon B W. Electric field induced surface diffusion and micro/nano-scale island growth [J]. International Journal of Solids and Structures, 2008, 45(3/4): 943—958.
- [12] Chou S Y, Zhuang L, Guo L J. Lithographically induced self-construction of polymer microstructures for resistless patterning [J]. Applied Physics Letters, 1999, 75(7): 1004—1006.
- [13] Nichols F A, Mullins W W. Surface-(interface-) and volume-diffusion contributions to morphological changes driven by capillarity [J]. Transactions of the Metallurgical Society of AIME, 1965, 233: 1840—1848.