

Наномеханика

Nanomechanics of materials and systems

Lecture 3

Механические напряжения и деформации в тонких пленках.

Mechanical stresses and strains in thin films.

Деформация сплошной среды

Deformation of continuum

Transformation of an object

$$d\mathbf{R} = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = (\mathbf{R}\nabla) \cdot d\mathbf{r} = d\mathbf{r} \cdot (\nabla \mathbf{R})$$

$$d\mathbf{r} = \mathbf{F}^{-1} \cdot d\mathbf{R} = (\mathbf{r}\nabla) \cdot d\mathbf{R} = d\mathbf{R} \cdot (\nabla \mathbf{r})$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}(\mathbf{r})$$

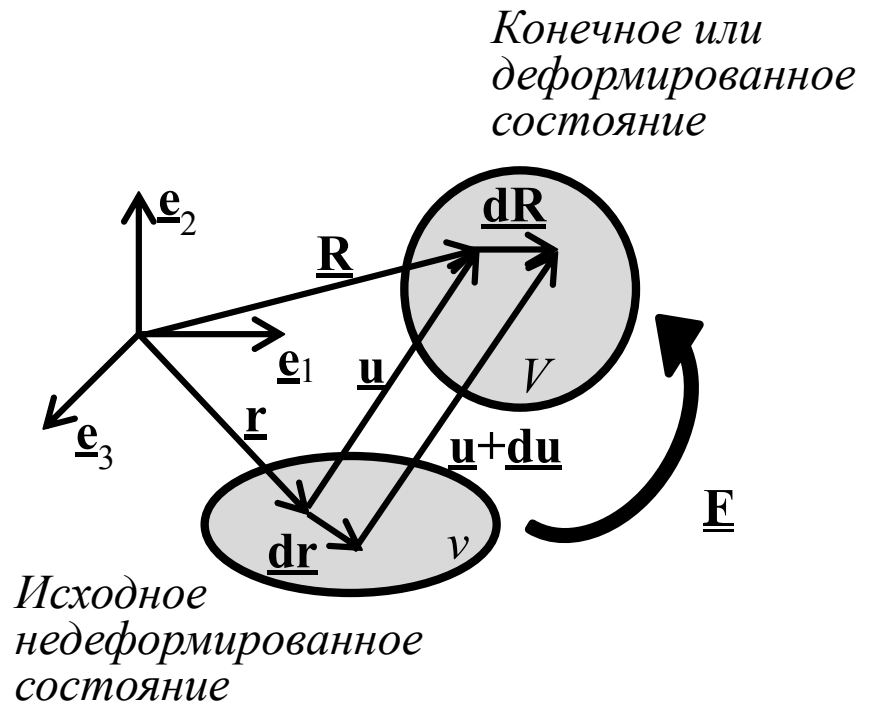
$$\mathbf{F}^T = (\nabla \mathbf{R}) = \mathbf{e}_i \partial / \partial r_i R_j \mathbf{E}_j = \partial R_j(\mathbf{r}) / \partial r_i \mathbf{e}_i$$

$$\mathbf{E}_j$$

$$\mathbf{F} = (\mathbf{R}\nabla) = \partial R_j(\mathbf{r}) / \partial r_i \mathbf{E}_j \mathbf{e}_i = \partial \mathbf{R} / \partial \mathbf{r}$$

Displacement field $\mathbf{u}$

$$\mathbf{R} = \mathbf{r} + \mathbf{u}$$



Все функции однозначны, непрерывны и дифференцируемы нужное число раз

Тензор малой деформации

Infinitesimal strain tensor

$$\left\| \begin{array}{ccc} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_1} + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_1} + \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \right) & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{array} \right\|$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2} (\nabla \underline{u} + \underline{u} \nabla) = (\nabla \underline{u})^s \quad \text{тензор деформации - strain tensor}$$

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right)$$

$$\underline{\underline{\beta}} = \nabla \underline{u} \quad \text{тензор дисторсии - deformation gradient}$$

Физический смысл ε_{ii} – удлинение/укорочение вдоль оси i

Физический смысл ε_{ij} – изменение углов между осями $\theta/2$

Тензор вращений

Rotation tensor

$$\left\| \begin{array}{ccc} 0 & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_1} - \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_1} - \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} - \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) & 0 & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} - \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} - \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_2} - \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \right) & 0 \end{array} \right\|$$

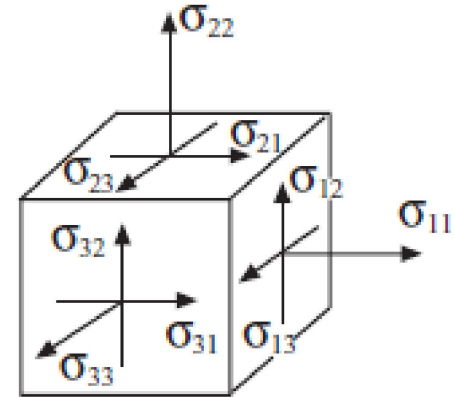
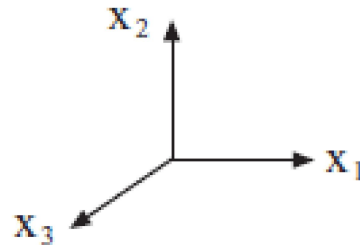
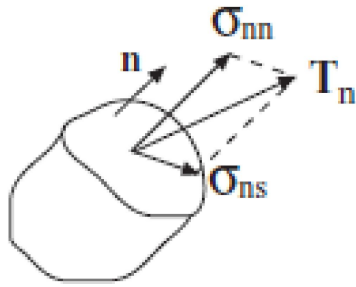
$$\underline{\underline{\Omega}} = \frac{1}{2} (\nabla \underline{u} - \underline{u} \nabla) = \nabla \underline{u}^A$$

$$\Omega_{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_k} - \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right)$$

Физический смысл – вращение вокруг мгновенной оси

$$\nabla \times \underline{u}$$

Тензор напряжений Коши Cauchy stress tensor



$$\underline{t}_n = \underline{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}};$$

нормальные напряжения $\sigma_{nn} = \underline{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n}$; normal stress

касательные напряжения $\sigma_{ns} = \underline{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{s}$; shear stress

$$\underline{\underline{\sigma}} = \sigma_{ij} \underline{e}_i \underline{e}_j = \sum_{i,j} \underline{t}_i \underline{e}_j$$

Закон Гука (Hooke's law)

$$\underline{\underline{\sigma}} = {}^{(4)}\underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}};$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l}$$

тензор упругих констант (stiffness tensor)

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{jilk}$$

- кубическая симметрия – 3 независимых константы: $c_{44} \neq (c_{11} - c_{12})/2$
- гексагональная симметрия - 5 независимых констант: $c_{11}, c_{12}, c_{13}, c_{33}, c_{44}; c_{66} = (c_{11} - c_{12})/2$
- тетрагональная и тригональная симметрии – 9 независимых констант
- ромбическая симметрия – 9 независимых констант
- моноклинная симметрия – 13 независимых констант
- триклинная симметрия – 21 независимая константа

<i>ij</i>	or	<i>kl</i>	11	22	33	23	31	12	32	13	21
<i>m</i>	or	<i>n</i>	1	2	3	4	5	6	7	8	9

Тензор упругих констант изотропного материала (stiffness tensor for isotropic material)

$$c = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{bmatrix}$$

$$c_{44} = (c_{11} - c_{12})/2$$

$$c = \begin{bmatrix} 2\mu + \lambda & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & 2\mu + \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & 2\mu + \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix}$$

$$\lambda = c_{12},$$

$$\mu = c_{44} = (c_{11} - c_{12})/2$$

$$\epsilon_{11} = \frac{1}{E} [\sigma_{11} - \nu(\sigma_{22} + \sigma_{33})] \quad \epsilon_{23} = \frac{1}{2\mu} \sigma_{23}$$

$$\epsilon_{22} = \frac{1}{E} [\sigma_{22} - \nu(\sigma_{11} + \sigma_{33})] \quad \epsilon_{31} = \frac{1}{2\mu} \sigma_{31}$$

$$\epsilon_{33} = \frac{1}{E} [\sigma_{33} - \nu(\sigma_{11} + \sigma_{22})] \quad \epsilon_{12} = \frac{1}{2\mu} \sigma_{12}$$

Модуль Юнга (Young modulus)

$$E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu}$$

Коэффициент Пуассона (Poisson ratio)

$$\nu = \frac{\lambda}{2\lambda + 2\mu}$$

Модуль сдвига (shear modulus)

$$G = \mu$$

Полная система уравнений статической теории упругости

Full system of equations in static elasticity

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \underline{b} = 0 \quad (3)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = (\nabla \underline{u})^S \quad (6)$$

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\underline{C}}}^{(4)} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (6)$$

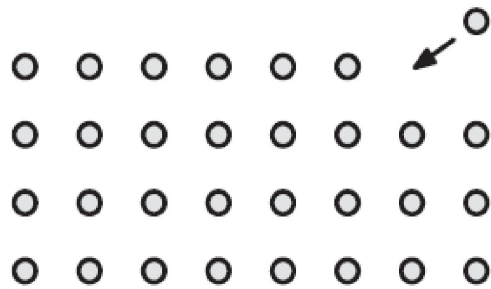
Unknown $\underline{\underline{\sigma}}(6), \underline{\underline{\varepsilon}}(6), \underline{u}(3)$

Boundary conditions $\underline{u}|_S = \underline{u}_0 \quad \text{or} \quad \underline{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}} = \underline{t}_n$

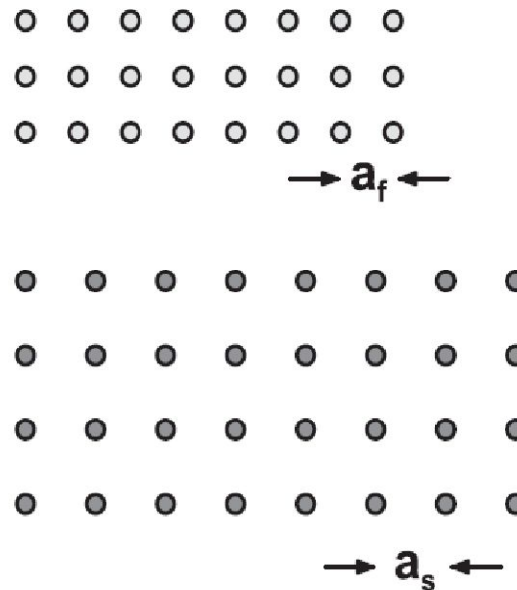
Эпитаксия (Epitaxy)

Гетероэпитаксия

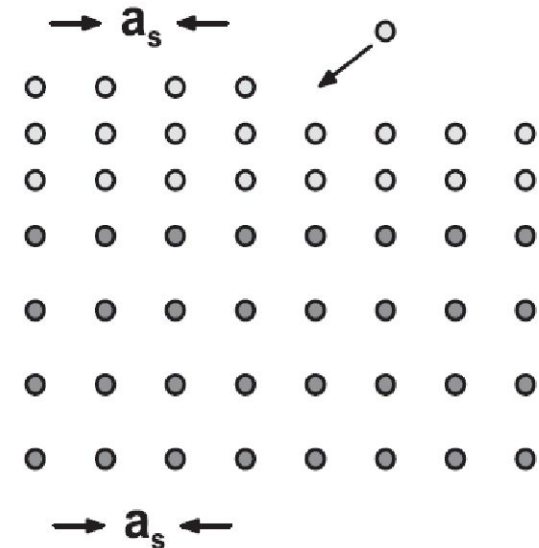
Гомоэпитаксия



homoepitaxy



film and substrate crystals,
each stress free

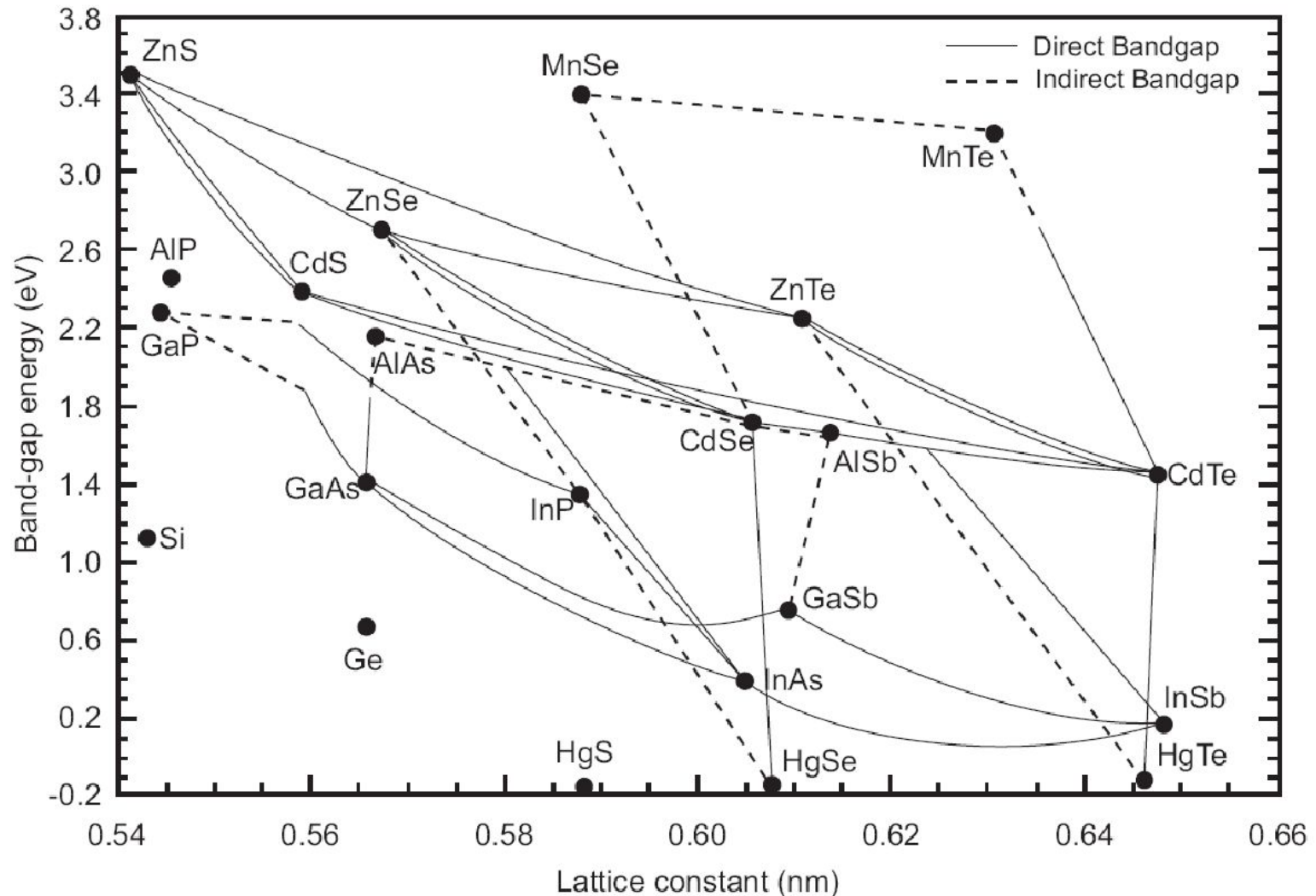


heteroepitaxy with
lattice mismatch

Рассогласование параметров решетки
Lattice mismatch

$$\epsilon_m = \frac{a_s - a_f}{a_f}.$$

Запрещенная зона и параметры решетки полупроводников



Правило Вегарда (Vegard's rule)

Параметр решетки бинарного твердого раствора (сплава) двух материалов с одинаковой структурой решетки может быть найден путем линейной интерполяции между параметрами решетки исходных соединений, например для твердого раствора $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$:

$$a_{\text{SiGe}} = (1 - x) a_{\text{Si}} + x a_{\text{Ge}}.$$

Примеры полупроводниковых гетероструктур

Cube-on-Cube (001)

CdZnTe/ZnTe/GaAs/Si (001)

CdZnTe	$a = 0.646 \text{ nm}$
ZnTe	$a = 0.610 \text{ nm}$
GaAs	$a = 0.565 \text{ nm}$
Si	$a = 0.543 \text{ nm}$

$$\varepsilon_m = 5.6\%$$

$$\varepsilon_m = 7.4\%$$

$$\varepsilon_m = 3.9\%$$

Hex-on-Hex (0001)

GaN/Sapphire (0001)

GaN
$a = 0.318 \text{ nm}$
$c = 0.5166 \text{ nm}$
Sapphire (Al_2O_3)
$a = 0.4759 \text{ nm}$
$a/\sqrt{3} = 0.2748 \text{ nm}$
$c = 1.299 \text{ nm}$

$$\varepsilon_m = 14.5\%$$

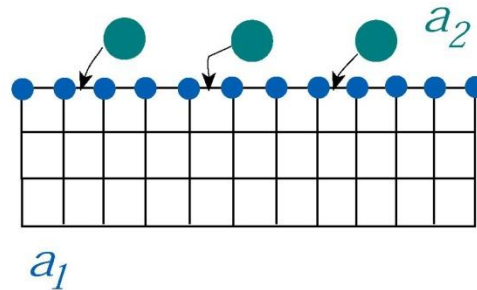
Причины рассогласование параметров решетки пленки и подложки

Misfit parameter definition:

$$\epsilon_m = \frac{a_s - a_f}{a_f}$$

a) difference in chemical composition

$$a_1 \neq a_2$$



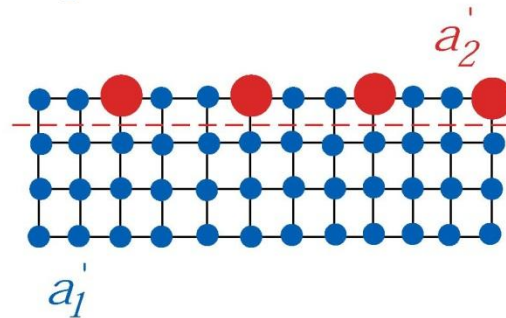
c) difference in thermal expansion

$$\alpha_1 \neq \alpha_2$$



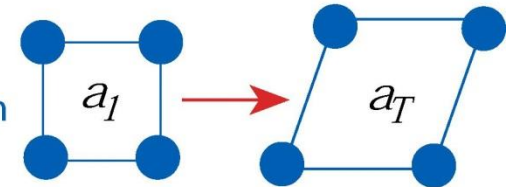
b) impurity misfit

$$a_1' \neq a_2'$$

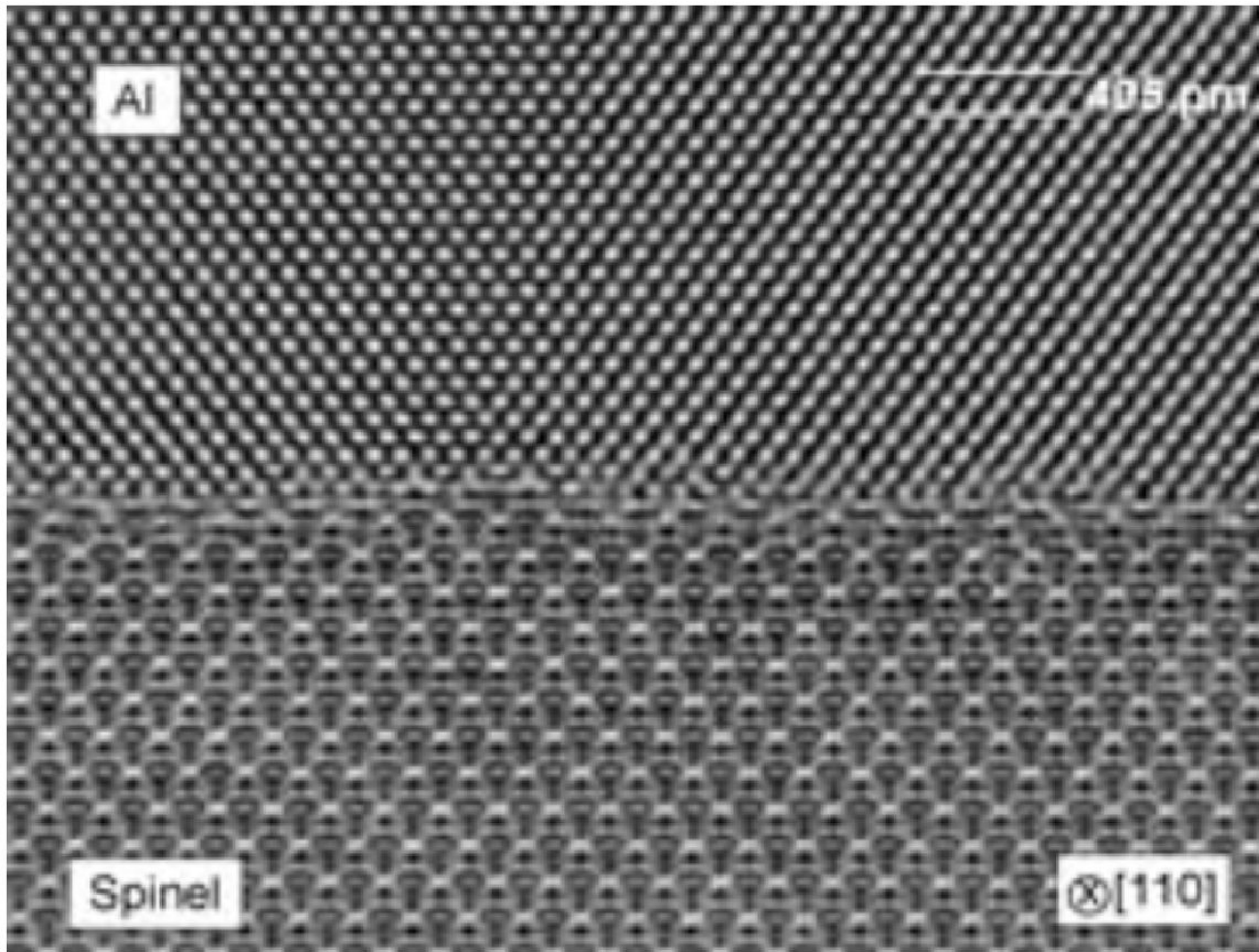


d) phase transformation

$$a_1 \neq a_T$$



Просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения



$$\epsilon_m = \frac{\frac{1}{2}a_{\text{Sp}} - a_{\text{Al}}}{a_{\text{Al}}} = -0.0025$$

A HRTEM [110] cross-sectional view of a coherent interface that develops with no interface defects during the epitaxial growth of an Al film on a $\text{MgAl}_2\text{O}_4(001)$ substrate. (After Ruhle, Max-Planck Institut fur Metallforschung, Germany.)

Собственные и упругие деформации

Eigenstrain and elastic strain

$\underline{\underline{u}} = \underline{\underline{u}} + \underline{\underline{u}}^*$, где $\underline{\underline{u}}^*$ - неупругое (пластическое) смещение
Тензор дисторсии $\underline{\underline{\beta}}$ (distortion tensor)

$$\underline{\underline{\beta}}^t = \nabla(\underline{\underline{u}} + \underline{\underline{u}}^*)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^t = \underline{\underline{\varepsilon}} + \underline{\underline{\varepsilon}}^* = (\nabla \underline{\underline{u}} + \nabla \underline{\underline{u}}^*)^s$$

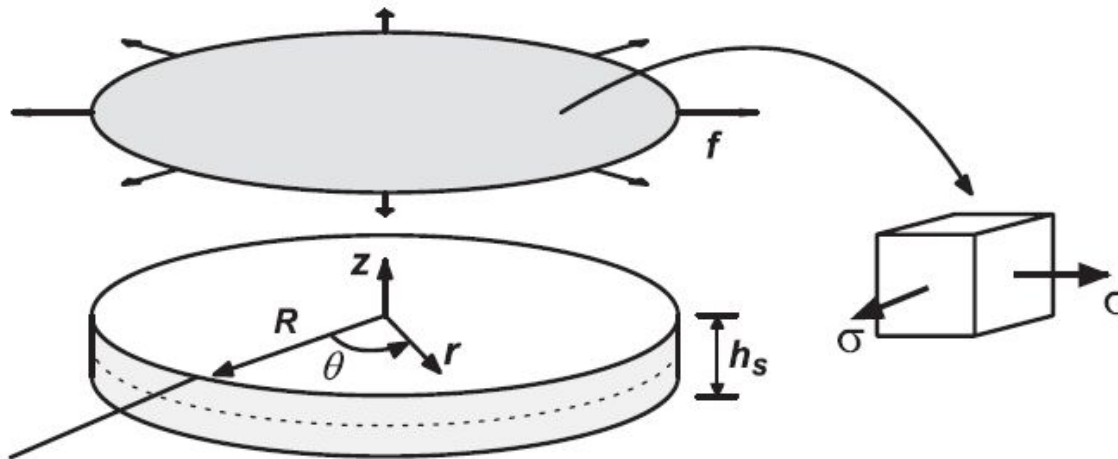
$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}^{(4)} \cdot \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}$$

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{b}} = 0$$

Граничные условия $\underline{\underline{u}}(\underline{\underline{R}})|_S = \underline{\underline{u}}_0(\underline{\underline{R}})$

Boundary conditions $\underline{\underline{n}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{F}}$

Собственные напряжения Eigenstrain



$$\epsilon_m = \frac{a_s - a_f}{a_f}.$$

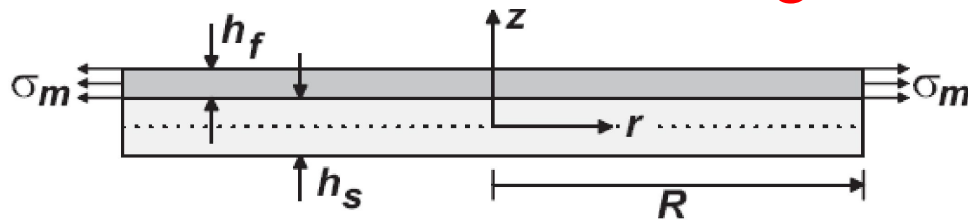
$$\sigma_m = \frac{f}{h_f}$$

$$\epsilon_m = \frac{f}{M_f h_f}$$

Film and substrate separated, but with distributed force f acting on the film edge so that its strain is exactly the mismatch strain. This loading gives rise to an equi-biaxial state of stress at each material point in the film; such a state of stress with magnitude σ is illustrated on the right side.

Пленка на недеформируемой подложке

Film on a rigid substrate



$$\epsilon_m = \frac{a_s - a_f}{a_f} \quad \kappa = 0$$

$$\sigma_{33} = \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0; \quad \epsilon_{11} = \epsilon_{22} = \epsilon_m; \quad \epsilon_{12} = 0;$$

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{32} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{33} \\ 2\epsilon_{32} \\ 2\epsilon_{31} \\ 2\epsilon_{21} \end{pmatrix}$$

Материалы с кубической решеткой и ориентацией (001)

$$\sigma_m = M_f \epsilon_m; \quad M_f = c_{11} + c_{12} - 2c_{12}^2/c_{11}; \quad \epsilon_{33} = -2\epsilon_m c_{12}/c_{11}$$

Изотропный материал Isotropic material

$$\sigma_{zz} = 0; \sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta}; \varepsilon_{rr} = \frac{\sigma_{rr}}{E} - \nu \frac{\sigma_{\theta\theta}}{E} = \frac{\sigma_{rr}(1-\nu)}{E}$$

$$\boxed{M_f = E_f / (1-\nu)}$$

$$E = \frac{1}{s_{11}}, \quad \nu = -\frac{s_{12}}{s_{11}}, \quad s_{12} = -\frac{\nu}{E},$$

$$\lambda = c_{12}, \quad \mu = c_{44} = \frac{1}{s_{44}} = \frac{1}{2} (c_{11} - c_{12}) = \frac{1}{2(s_{11} - s_{12})},$$

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad \lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}.$$

Критерий недеформируемости подложки

Criterion for the rigid substrate assumption

Compatibility of deformation requires

$$\epsilon_f - \epsilon_s = \epsilon_m$$

Equilibrium requires

$$M_f \epsilon_f h_f + M_s \epsilon_s h_s = 0$$

$$\epsilon_f = \epsilon_m \frac{h_s M_s}{h_f M_f + h_s M_s}, \quad \epsilon_s = -\epsilon_m \frac{h_f M_f}{h_f M_f + h_s M_s}$$

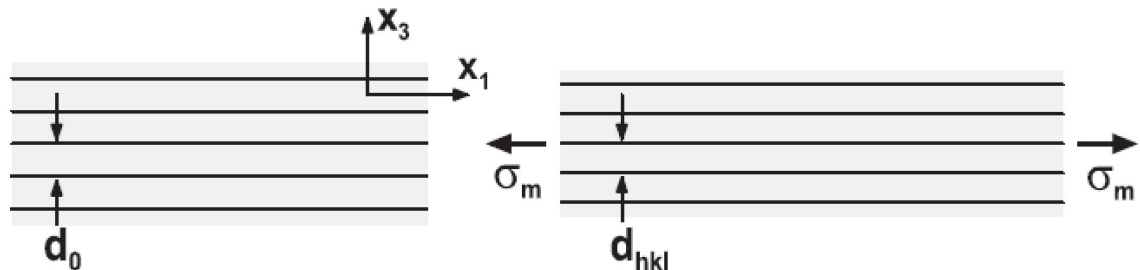
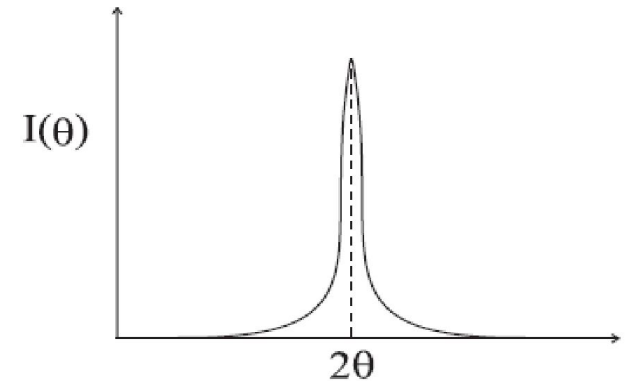
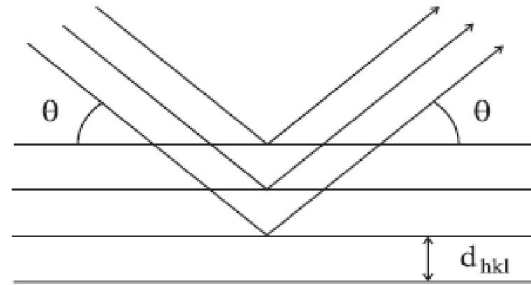
Рентгеновская дифракция на упруго-напряженных пленках

X-ray diffraction in strained films

$$d_{hkl} = \frac{n\lambda_X}{2 \sin \theta}$$

$$\epsilon_{33}^{(m)} = \frac{d_{hkl} - d_0}{d_0}$$

$$\sigma_m = -\frac{E_f}{2\nu_f} \left(\frac{d_{hkl} - d_0}{d_0} \right)$$



$$\epsilon_{11}^{(m)} = \epsilon_{22}^{(m)} = \epsilon_m = \frac{\sigma_m}{M_f}, \quad \epsilon_{33}^{(m)} = -\frac{2\nu_f}{1-\nu_f} \epsilon_m = -\frac{2\nu_f}{E_f} \sigma_m$$

Материалы с кубической решеткой и ориентацией (001)

$$\sigma_m = M_f \epsilon_m; \quad M_f = c_{11} + c_{12} - 2c_{12}^2/c_{11}; \quad \epsilon_{33} = -2\epsilon_m c_{12}/c_{11}$$

Пленка и подложка с кубической симметрией с ориентацией {001}

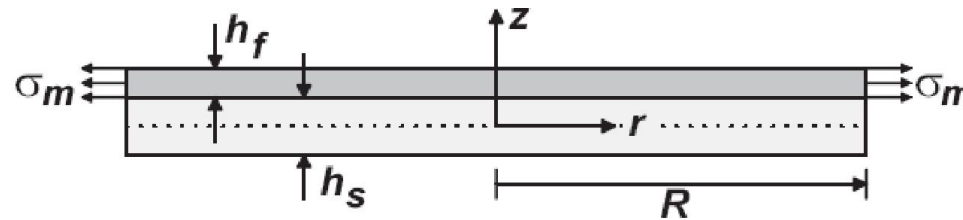
$$M(001) = c_{11} + c_{12} - 2c_{12}^2 / c_{11} = \frac{E}{1-\nu}$$

$$E(100) = \frac{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}{(c_{11} + c_{12})}$$

$$\nu(100) = \frac{c_{12}}{(c_{11} + c_{12})}; 1 - \nu = \frac{c_{11}}{(c_{11} + c_{12})}$$

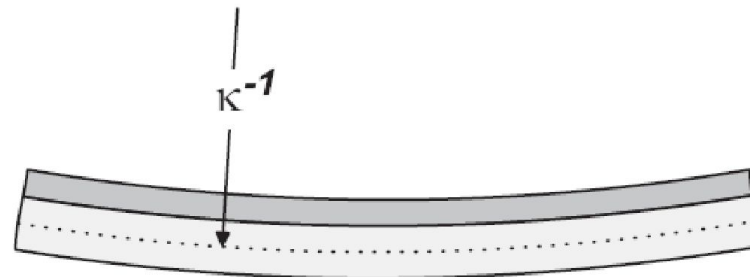
Наряженная пленка на деформируемой подложке

Stressed film on a deformable substrate



$$\sigma_m = \frac{f}{h_f}$$

$$\epsilon_m = \frac{f}{M_f h_f}$$



$$\epsilon_m = \frac{a_s - a_f}{a_f}$$

In the upper diagram, the elastic mismatch is maintained by externally applied traction of magnitude σ_m ; there is no interaction between the film and substrate in this condition and the substrate is unrestrained. If the externally applied traction is relaxed, the mismatch strain in the film induces a curvature in the substrate as shown in the lower diagram.

Деформации в пленке и подложке

Strain in a film/substrate sandwich

Если деформации зависят только от z : $\varepsilon = \varepsilon(z)$

$$\nabla \times \underline{\underline{\varepsilon}}^t \times \nabla = 0$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} (\varepsilon_{ij} + \varepsilon^*_{ij}) = 0; \quad i, j = x, y$$

$$\text{then} \quad \varepsilon_{ij} = -\varepsilon^*_{ij} + a_{ij} + zb_{ij}$$

Для подложки $\varepsilon^*_{ij} = 0$ (*substrate*)

Для пленки $\varepsilon^*_{ij} \neq 0$ (*film*)

$$\epsilon_m = \frac{a_s - a_f}{a_f}.$$

$$\epsilon_m = \frac{f}{M_f h_f}$$

Формула Стони (Stoney formula)

Граничные условия на поверхности $\sigma_{kz}=0$ и условия равенства нулю равнодействующей силы и момента.

Net force and torque must be zero for equilibrium.

Для изотропной среды: $\epsilon_{\theta\theta} = \epsilon_{rr} = \epsilon_0 - \kappa z$

В случае тонкой пленки на толстой подложке

$$\int_{-h_s/2}^{h_s/2} M_s (\epsilon_0 - \kappa z) dz = -f; \Rightarrow M_s \epsilon_0 z \Big|_{-h_s/2}^{h_s/2} = -M_f \epsilon_m h_f; \Rightarrow \epsilon_0 = -\frac{M_f h_f}{M_s h_s} \epsilon_m$$

$$\int_{-h_s/2}^{h_s/2} z M_s (\epsilon_0 - \kappa z) dz = -f h_s / 2; \Rightarrow M_s \kappa \frac{z^3}{3} \Big|_{-h_s/2}^{h_s/2} = M_f \epsilon_m h_f h_s / 2; \Rightarrow \kappa = \frac{6 M_f h_f}{M_s h_s^2} \epsilon_m$$

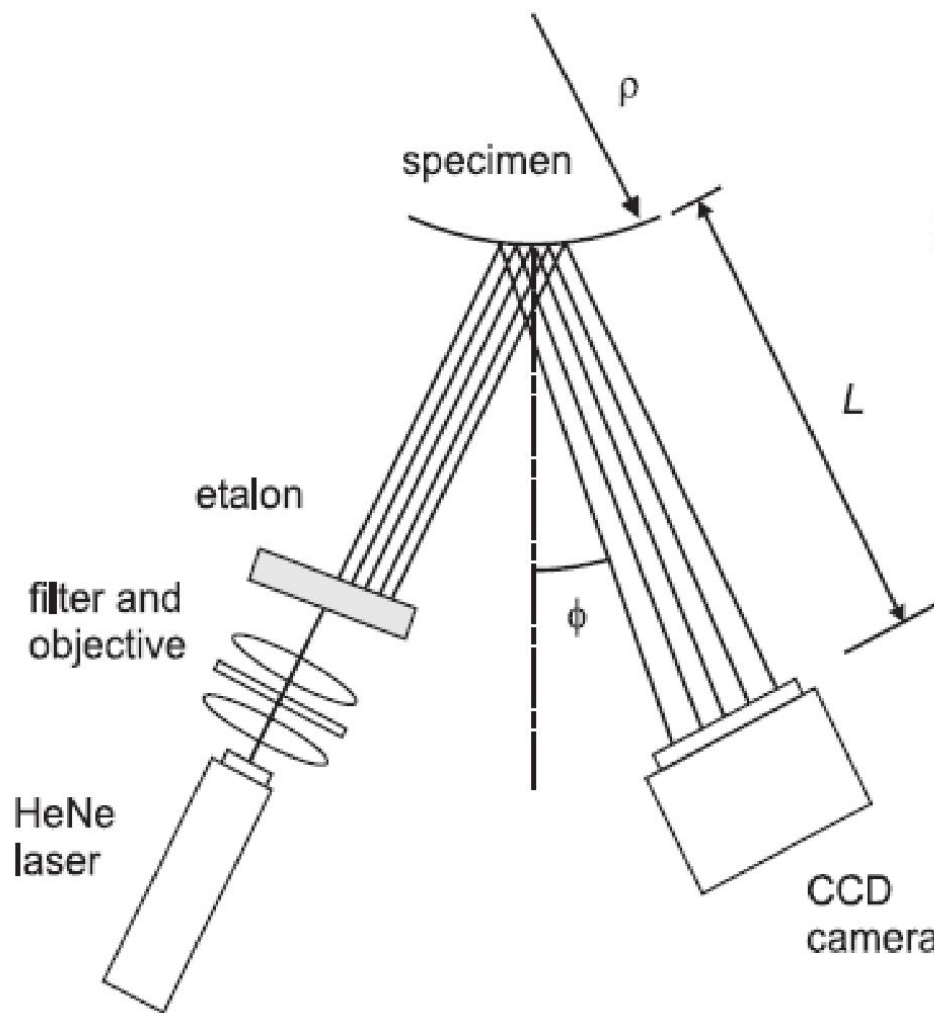
$$\kappa = \frac{6f}{M_s h_s^2}$$

-обратный радиус кривизны структуры
-curvature (Stoney formula)

$$\epsilon_0 = -\frac{f}{M_s h_s} \quad \epsilon_{rr} = \frac{\sigma_{rr}}{E_s} - \nu_s \frac{\sigma_{rr}}{E_s} = \frac{\sigma_{rr}}{M_s}$$

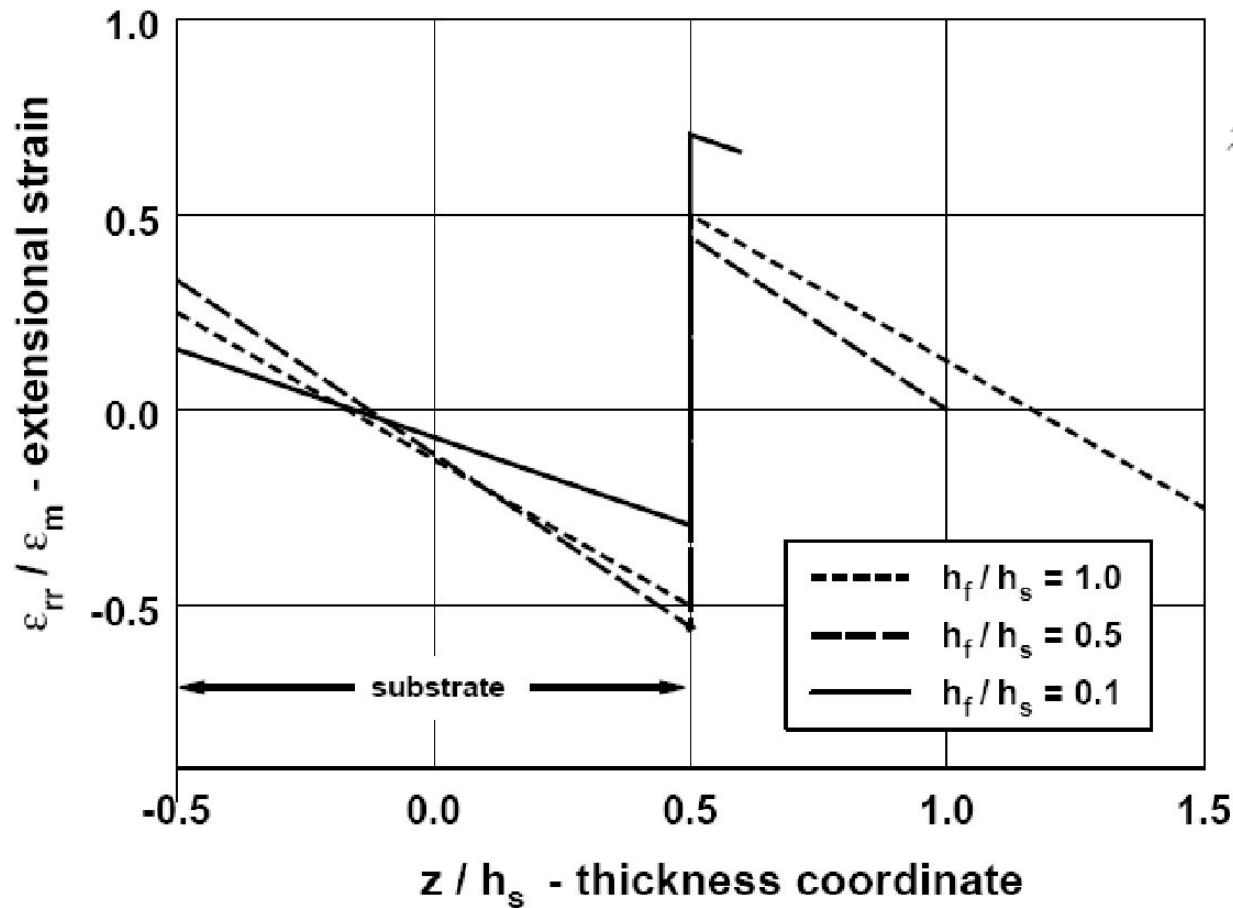
$$\epsilon_{rz} = \epsilon_{\theta z} = 0; \sigma_{zz} = 0 \quad \epsilon_{r\theta} = 0 \quad M_s = E_s / (1 - \nu_s)$$

Multi-beam optical stress sensor



$$\kappa = \frac{1}{\rho} = \frac{\cos \phi}{2L} \left\{ 1 - \left(\frac{D}{D_0} \right) \right\}$$

Упругие деформации в пленке и подложке



$$z_{np} = \frac{\epsilon_o}{\kappa} = -\frac{1}{6}h_s$$

The distribution of normalized strain $\epsilon_{rr} = \epsilon_m$ versus normalized distance z/h_s across the thickness of a substrate-film system for three values of the ratio h_f/h_s . The neutral plane of the substrate is located by the value of z at which $\epsilon_{rr}/\epsilon_m = 0$. The material properties are such that $M_f/M_s = 1$.

Точность формулы Стони

Accuracy of Stoney formula

$$\sigma_{rr} = \begin{cases} M_s(\varepsilon_0 - \kappa z) & \text{for } -\frac{1}{2}h_s < z < \frac{1}{2}h_s \\ M_f(\varepsilon_0 - \kappa z + \varepsilon_m) & \text{for } \frac{1}{2}h_s < z < \frac{1}{2}h_s + h_f \end{cases}$$

$$\frac{\kappa}{\kappa_{St}} = \left(1 + \frac{h_f}{h_s}\right) \left[1 + 4\frac{h_f}{h_s}\frac{M_f}{M_s} + 6\frac{h_f^2}{h_s^2}\frac{M_f}{M_s} + 4\frac{h_f^3}{h_s^3}\frac{M_f}{M_s} + \frac{h_f^4}{h_s^4}\frac{M_f^2}{M_s^2}\right]^{-1},$$

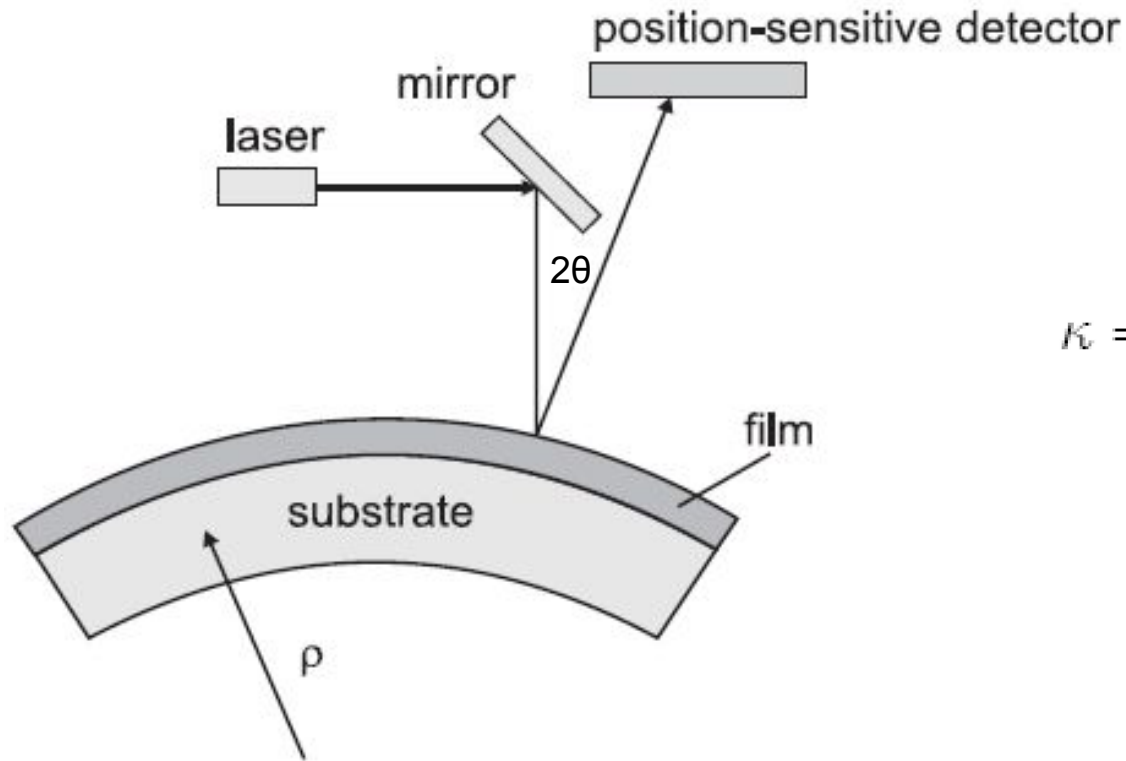
$$\kappa \approx \frac{6\varepsilon_m}{h_s} \frac{M_f}{M_s} \frac{h_f}{h_s} \left[1 + \left(\frac{M_s - 4M_f}{M_s}\right) \frac{h_f}{h_s}\right]$$

Экспериментальное определение кривизны структур

Experimental study of curvature

- Лазерное сканирование поверхности (Laser scanning)
- Многолучевое оптическое отражение (Multibeam optical reflection)
- Отражение изображения светлой сетки (Grid reflection)
- Изменение картины интерференции (Optical interference fringes)

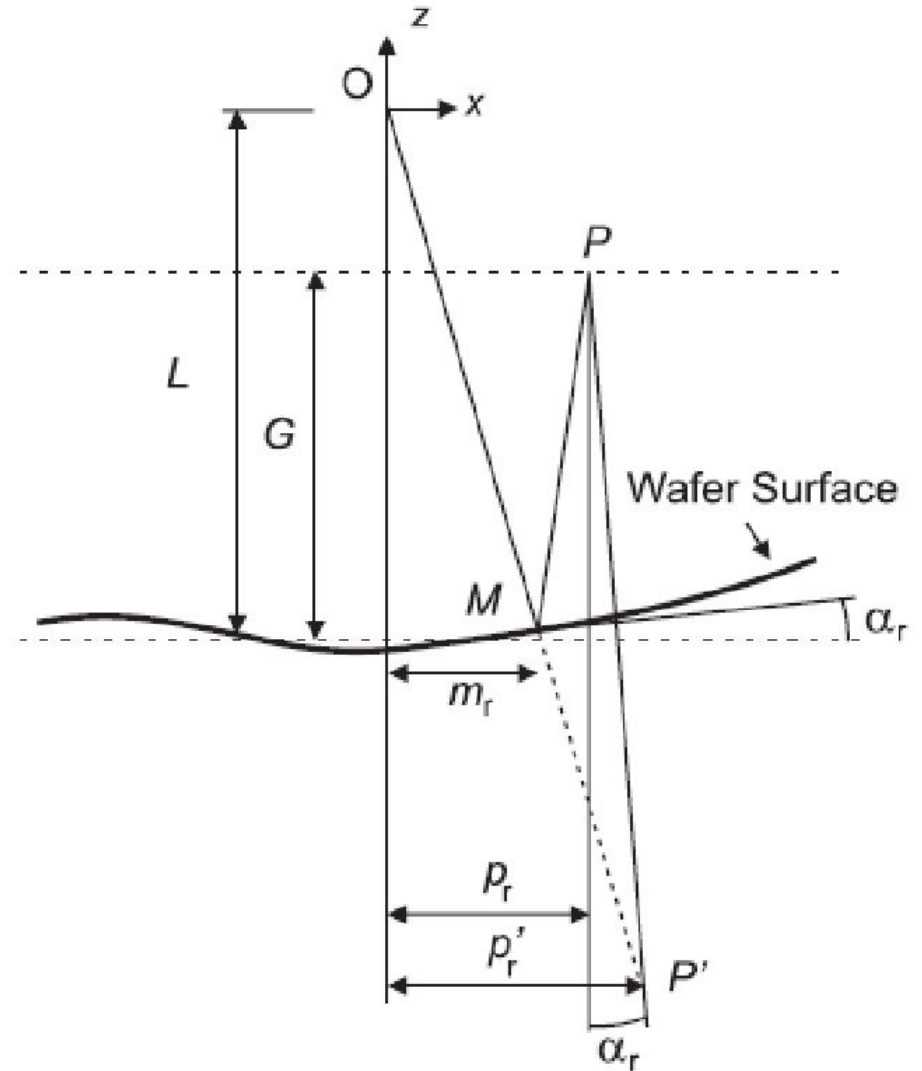
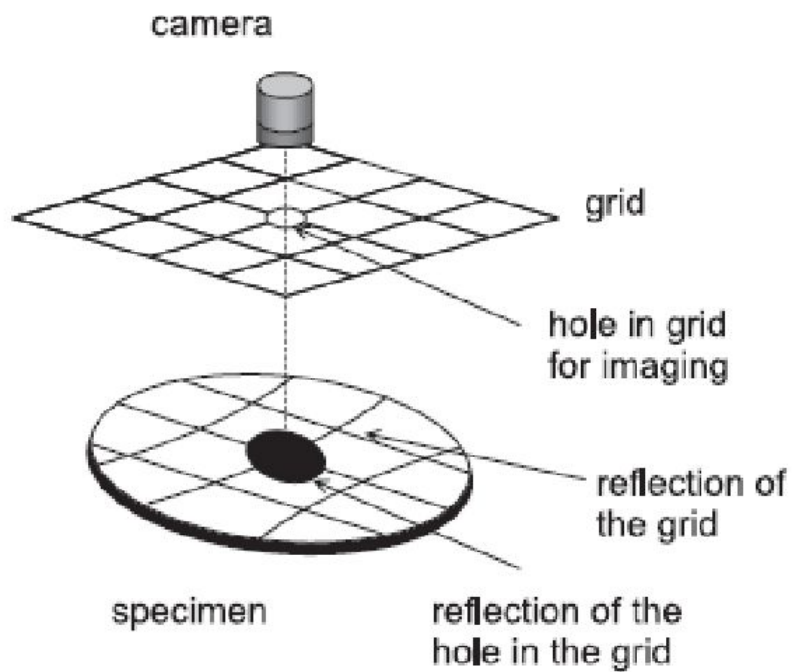
Scanning laser method



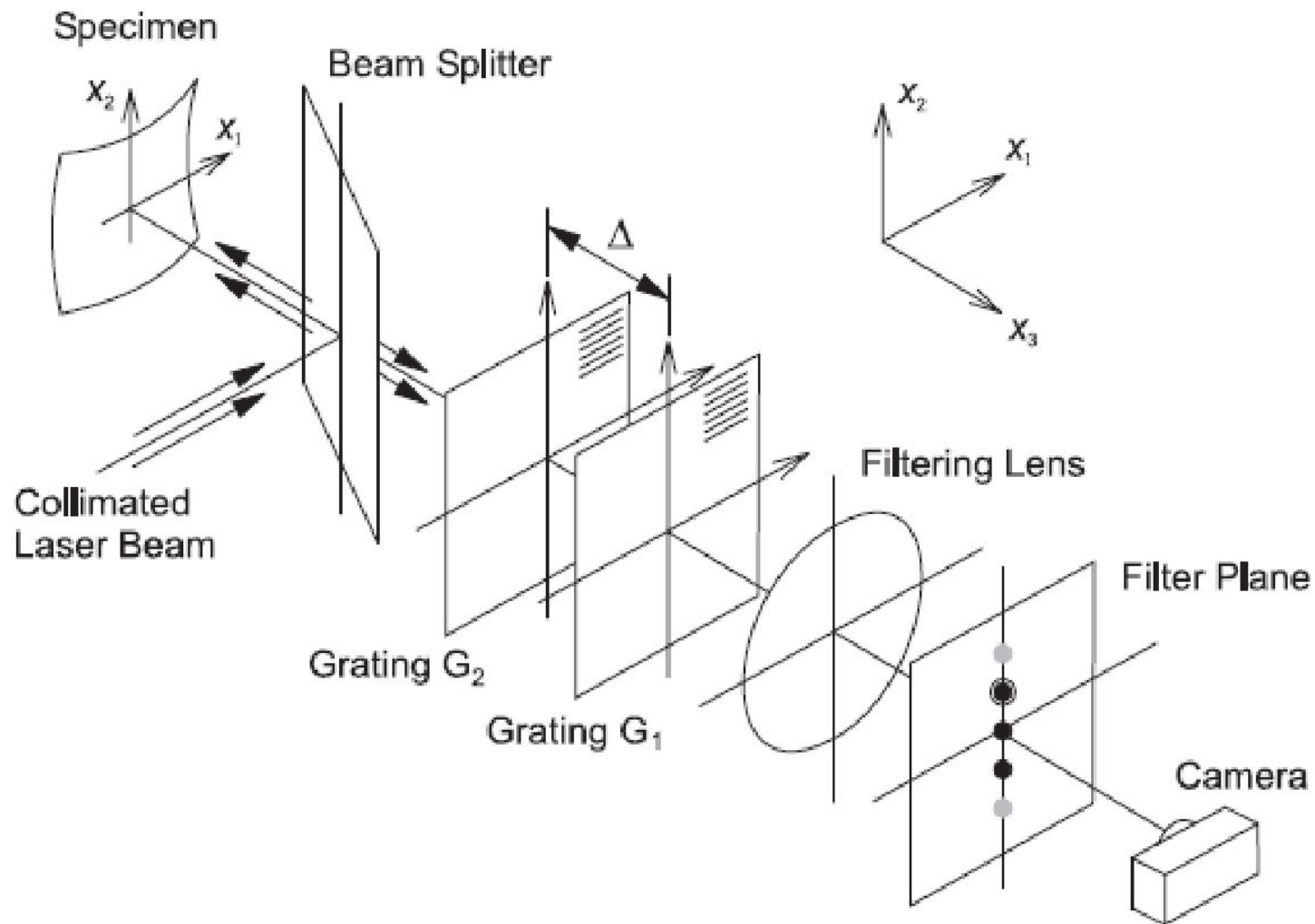
$$\kappa = \frac{1}{\rho} = \frac{d^2 w(r)}{dr^2} = \frac{d\Theta(r)}{dr}$$

Используется для in-situ мониторинга деформаций при наращивании пленок, например, при MBE и MOCVD.

Grid reflection method



Coherent gradient sensor method



По изменению интерференции измеряются *изменения* кривизны

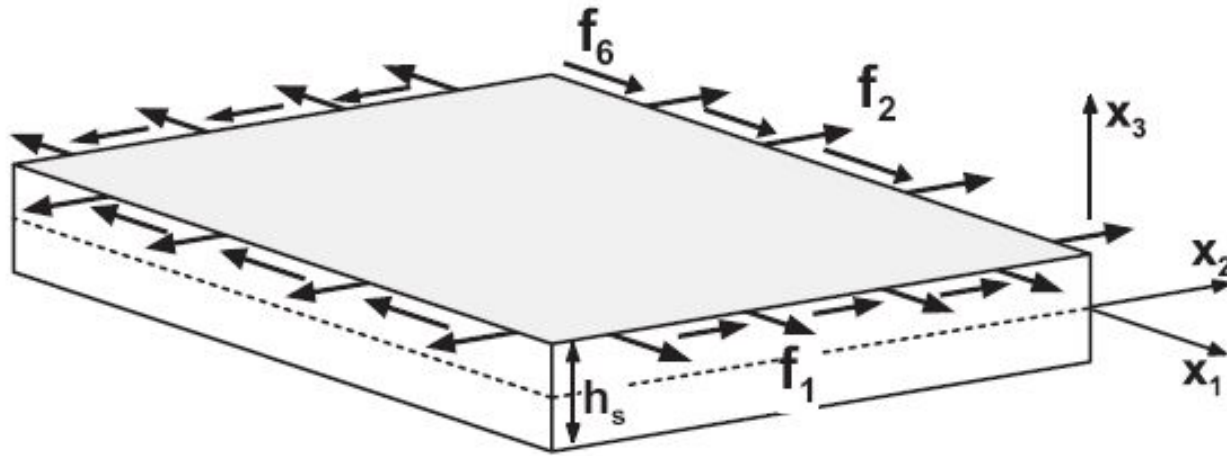
Многослойные структуры Multilayer structures

$$\kappa = \frac{6}{M_s h_s^2} \sum_{i=1}^{N_f} \Delta f_i = \sum_{i=1}^{N_f} \Delta \kappa_{\text{St},i}$$

To 1-rst order in the small parameters h_i/h_s , the total curvature is equal to the simple sum of the curvatures that would be induced if each individual layer would be deposited by itself on the substrate. Each individual curvature $\kappa_{\text{St},i}$ is given by the Stoney formula.

Влияние анизотропии на деформации

Anisotropy in curvature

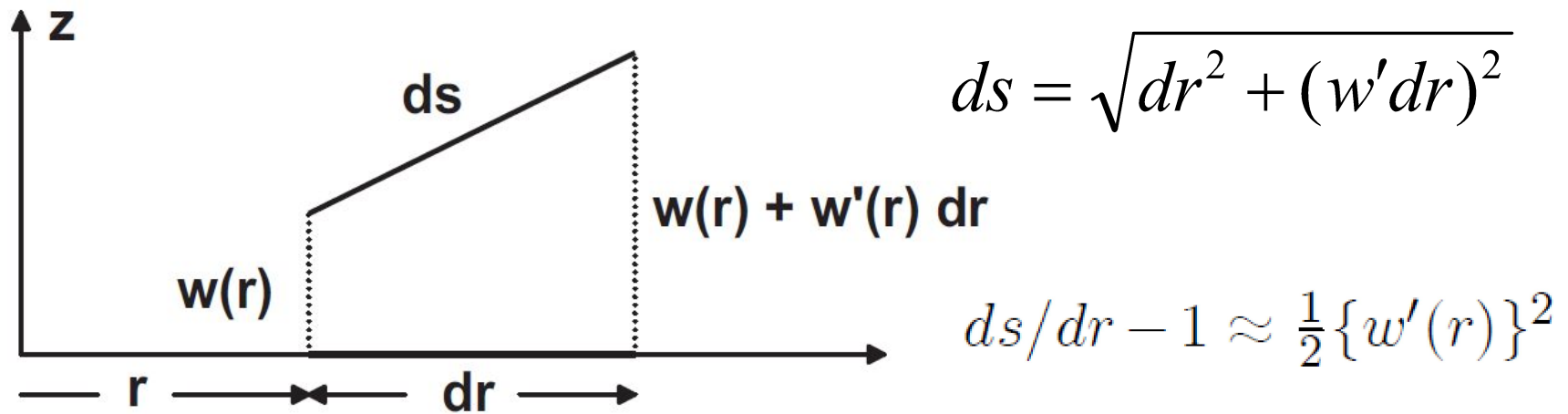


$$\kappa_1 = \frac{6(f_1 - \nu_s f_2)}{E_s h_s^2}, \quad \kappa_2 = \frac{6(f_2 - \nu_s f_1)}{E_s h_s^2},$$

$$\kappa_6 = (1 - \nu_s) \frac{6f_6}{E_s h_s^2}.$$

Область геометрически-нелинейных деформаций

Geometrically nonlinear deformations



Вращения, вызванные изгибом с вертикальным смещением $w(r)$, могут быть не малы, даже если деформации малы.

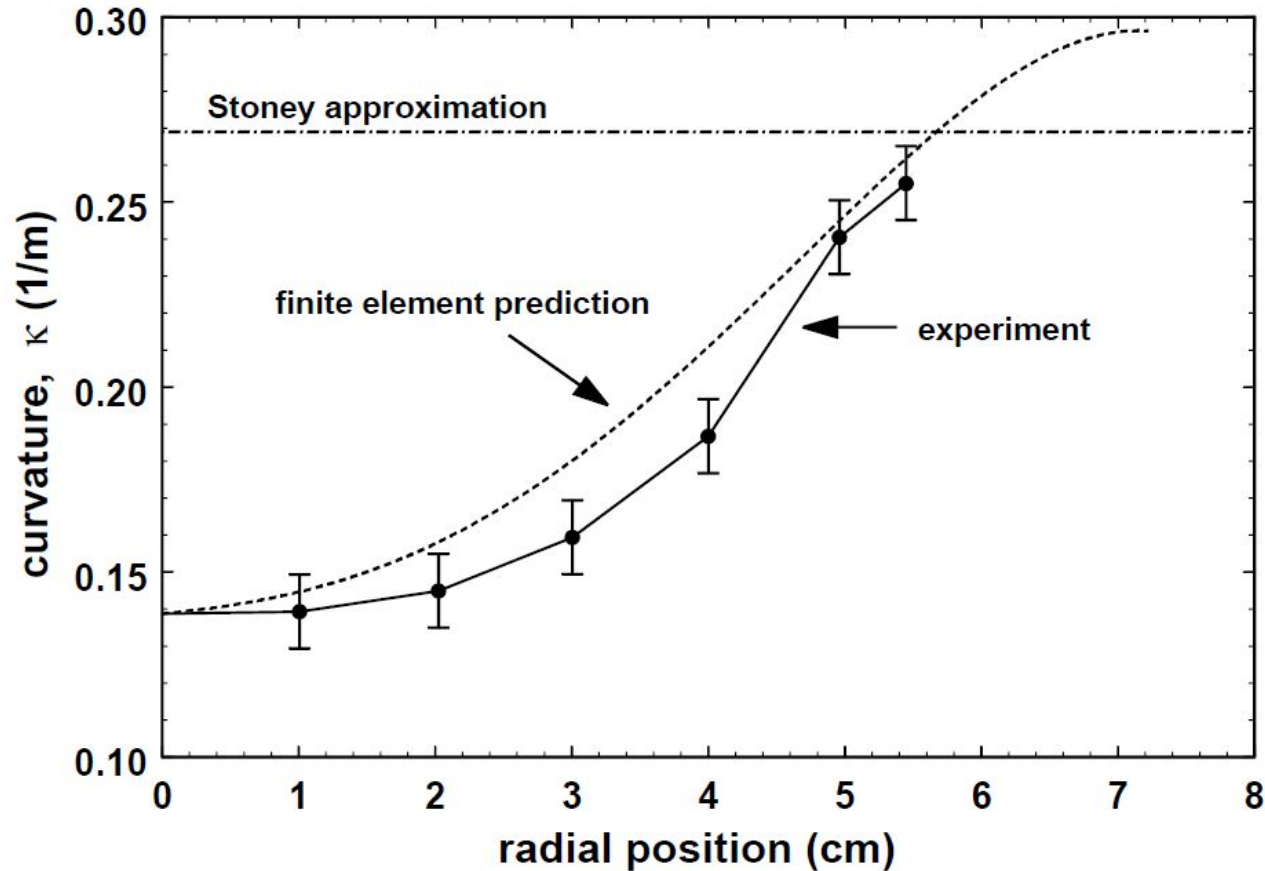
Stoney formula: $w'(R) = \kappa R$ and $\epsilon_o = 1/6 \kappa \cdot h_s$

$$\frac{\{w'(R)\}^2}{2\epsilon_o} = 3\kappa R \frac{R}{h_s} \sim 1$$

В выражение для деформации надо добавить член второго порядка малости, связанный с вращениями. Членами второго порядка малости, связанными с растяжением-сжатием, пренебрегаем.

$$\epsilon_{rr}(r, z) = u'(r) - zw''(r) + \frac{1}{2} \{w'(r)\}^2$$

Изменение кривизны по площади Variation of curvature

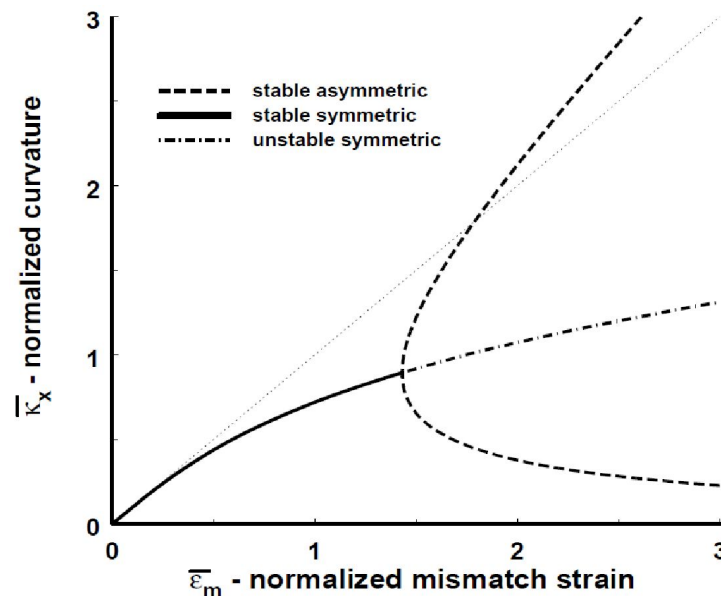
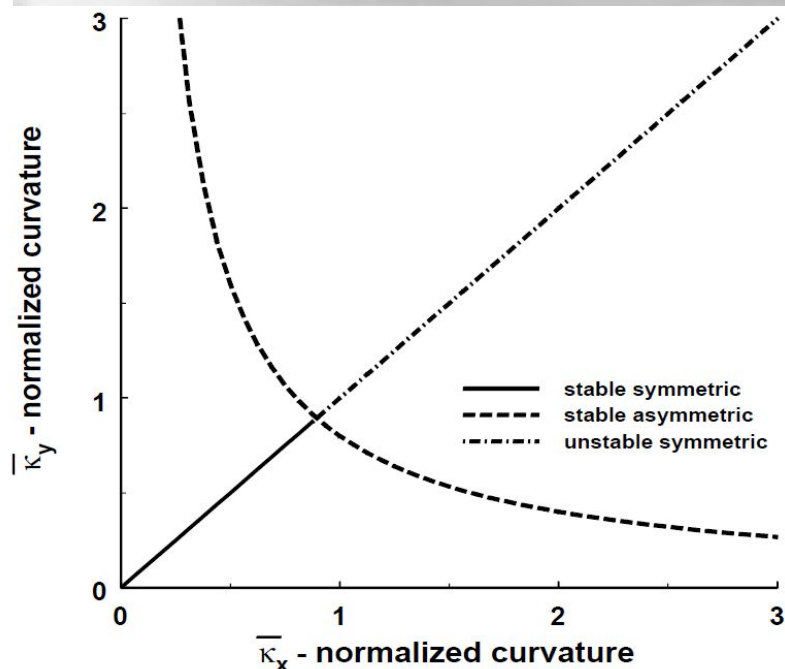


Experimentally observed and numerically estimated variation of curvature as a function of radial position, measured from the center of a Si substrate with a W film deposit. After Finot et al. (1997).

Bifurcation in equilibrium shape



Example:
graphite-polyimide laminate



Требование минимума упругой энергии приводит к

$$(\kappa_x - \kappa_y) \left[\kappa_x \kappa_y R^4 (1 + \nu) - 16(h_s + h_f)^2 \right] = 0, \quad R - \text{radius of the wafer}$$

Экспериментальное определение упругих деформаций в пленках

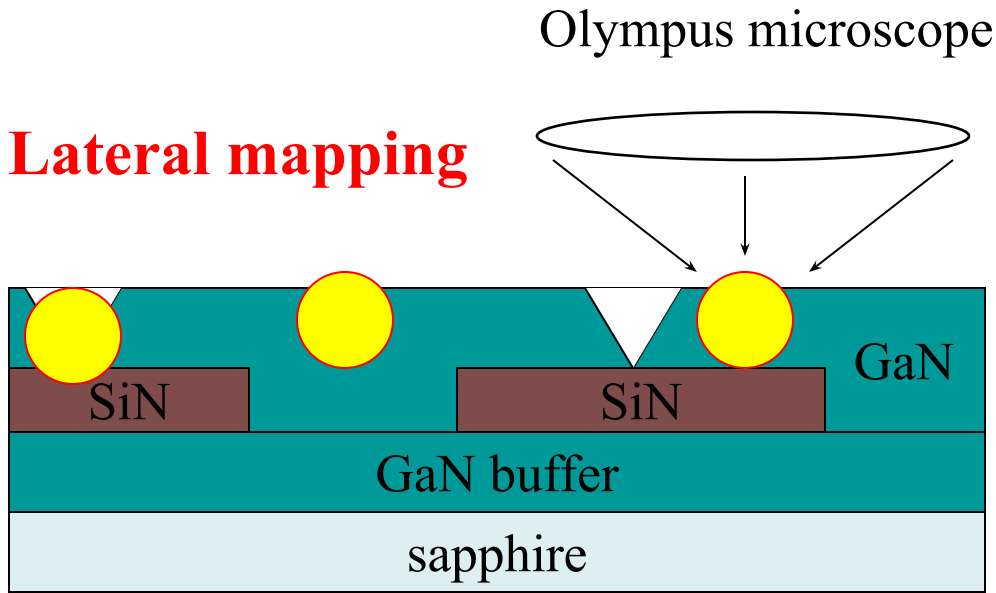
Experimental determination of strain in films

- Измерения параметра решетки пленок по рентгеновской дифракции
X-ray diffraction
- Измерения кривизны структур
Optical measurements of curvature
- Микро-Рамановская спектроскопия
Micro-Raman scattering
- Просвечивающая электронная микроскопия
Transmission electron microscopy
- Изменение энергий электронных состояний
Change in electronic states

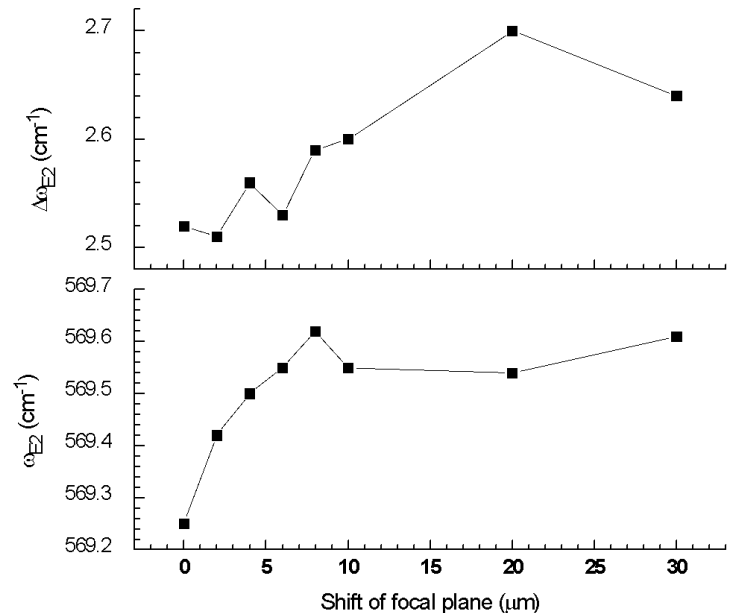
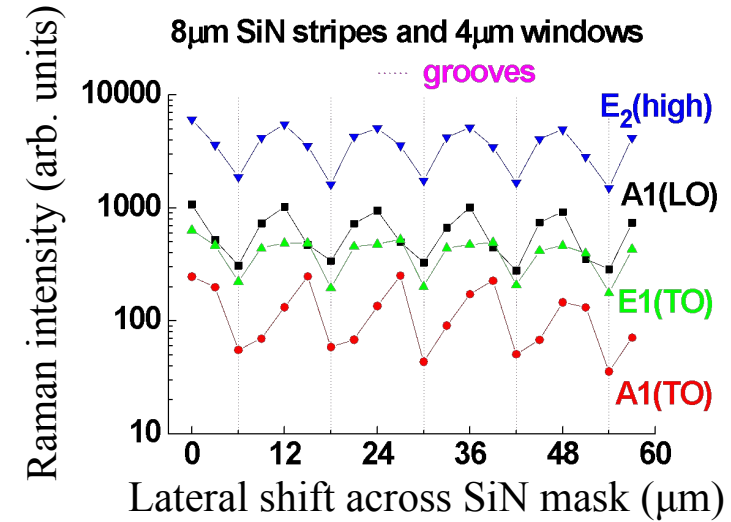
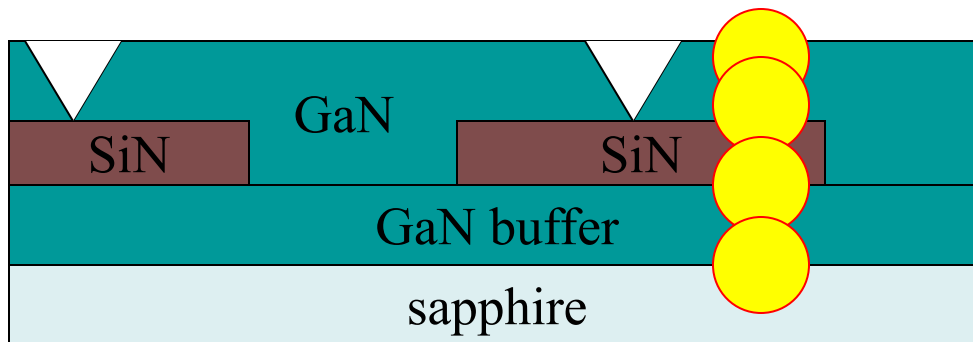
Микро-Рамановская спектроскопия

Micro-Raman scattering

Lateral mapping

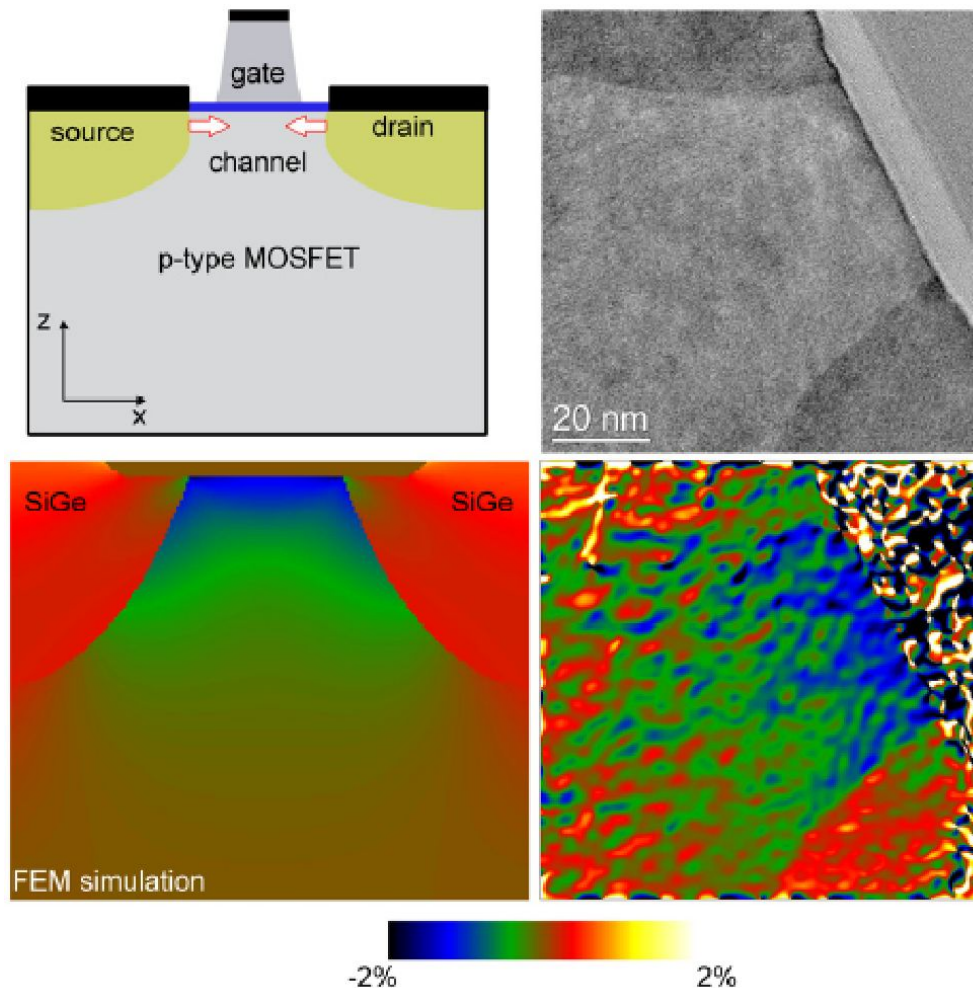


Confocal measurements



Просвечивающая электронная микроскопия

Transmission electron microscopy

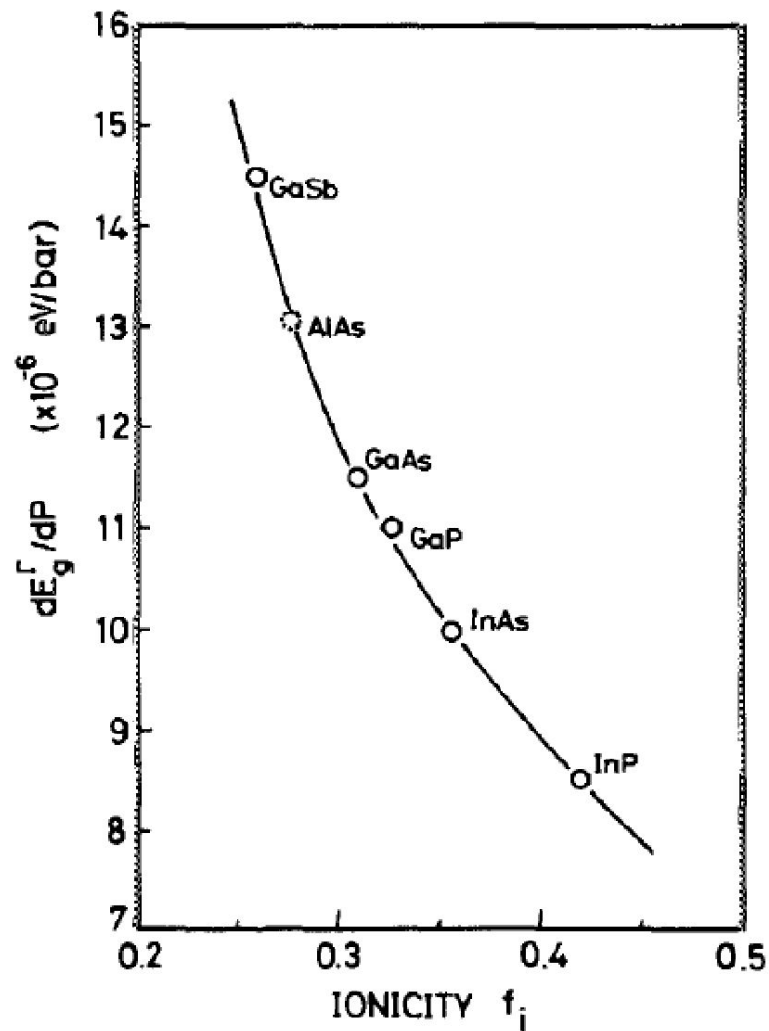


Численный анализ электронно-микроскопических изображений позволяет построить поле смещений.

Strain mapping into a uniaxial 45 nm strained channel pinched between $\text{Si}_{80}\text{Ge}_{20}$ source and drain. Simulation is on the left and experiment on the right. Courtesy of *CEMES-CNRS, Toulouse, France*

Изменение энергий электронных состояний

Change in energy of electronic states



Домашнее задание (Homework) 3

Пленка Ge толщиной 4 нм выращена эпитаксиально на подложке Si толщиной 400 мкм с ориентацией (111).

Epitaxial 4nm Ge film was grown on 400μm Si (111) substrate.

Определить (*determine*):

- 1) Тензоры напряжений и деформаций в пленке в предположении, что подложка не деформируется. $\underline{\underline{\sigma}}$ and $\underline{\underline{\varepsilon}}$, *for rigid substrate*
- 2) Радиус кривизны структуры по формуле Стони. *Stoney curvature.*
- 3) Тензоры напряжений и деформаций в пленке и в подложке с учетом кривизны. *Stress and strain tensors in the structure with curvature.*

Material	a_0 (Å)	ρ (g/cm ³)	c_{11} (GPa)	c_{12} (GPa)	c_{44} (GPa)
Silicon (Si)	5.4307	2.330	165	64	79.2
Germanium (Ge)	5.658	5.323	129	48	67.1
Diamond (C)	3.567	3.515	1040	170	550
