

UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA – UDESC

CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS – CCT

PROGRAMA DE PÓS –GRADUAÇÃO EM FÍSICA – PPGF

ALEX KRAISCH

“FILMES EM MULTICAMADAS, MODELAMENTO ALÉM DOS LIMITES DA
EQUAÇÃO DE STONEY”

JOINVILLE

2013

ALEX KRAISCH

“FILMES EM MULTICAMADAS, MODELAMENTO ALÉM DOS LIMITES DA
EQUAÇÃO DE STONEY”

DISSERTAÇÃO APRESENTADA PARA
OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE
EM FÍSICA DA UNIVERSIDADE DO ESTADO
DE SANTA CATARINA, CENTRO DE
CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS – CCT

Orientador: Prof. Dr. Júlio Miranda Pureza.

Joinville

2013

N244d

Kraisch, Alex.

Filmes em multicamadas, modelamento além dos limites da equação de Stoney / Alex Kraisch; orientador: Júlio Miranda Pureza. – Joinville, 2013.

56 f.:il; 30 cm.

Incluem referências.

Dissertação (mestrado) – Universidade do Estado de Santa Catarina, Centro de Ciências Tecnológicas, Mestrado em Física, 2013.

1. Física Atômica e Molecular. 2. Óptica. Pureza, Júlio Miranda.

CDD 530.4

**“FILMES EM MULTICAMADAS, MODELAMENTO ALÉM DOS LIMITES
DA EQUAÇÃO DE STONEY”**

por

ALEX KRAISCH

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de

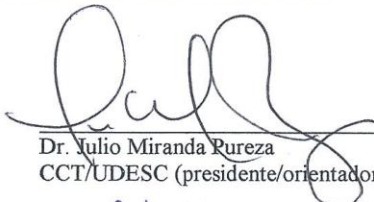
MESTRE EM FÍSICA

área de concentração em “Física”, e aprovada em sua forma final pelo

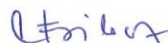
**CURSO DE MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS DA
UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA.**

Banca Examinadora:

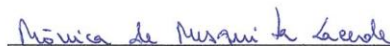
Joinville, 21 de março de 2013.



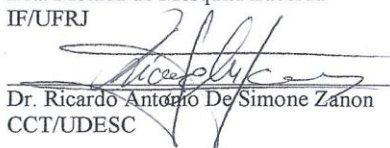
Dr. Julio Miranda Poreza
CCT/UDESC (presidente/orientador)



Dr. César Edil da Costa
CCT/UDESC



Dra. Mônica de Mesquita Lacerda
IF/UFRJ



Dr. Ricardo Antonio De Simone Zanón
CCT/UDESC

Agradecimentos

- ✓ Em primeiro lugar a Deus, pela vida;
- ✓ Ao professor Júlio Pureza, orientador;
- ✓ A professora Mônica de Mesquita Lacerda, por me incentivar a fazer o Mestrado;
- ✓ A UDESC e a PROMOP, pela infraestrutura e pelo financiamento de 70,84% do mestrado;
- ✓ A CAPES pelo financiamento dos outros 29,16%;
- ✓ A minha esposa Kléubia Capêlo Corrêa, pela dedicação, paciência e todo o amor incondicional;
- ✓ Aos meus pais pela força e apoio sempre na hora que mais precisei;
- ✓ Aos meus sogros pela paciência e compreensão;
- ✓ Ao departamento de Física da UDESC;
- ✓ Aos meus amigos do mestrado: Amilson, Anderson, Anne, Claudia, Denilson, Douglas, Flávio, Iara, João Norberto (*in memoriam*), Jorge Leonardo, José Carlos, Juliana, Júlio D'Amore, Marsal, Karla, Kelaine, Paulo Michel, Rafael, Taline, Thiago e Willian;
- ✓ As secretárias Aline, Fernanda e Susele;
- ✓ Em especial ao coordenador do Programa de Pós-Graduação em Física da UDESC o Professor Holokx Abreu Albuquerque;

Resumo

Filmes compostos por múltiplas camadas de diferentes materiais possuem um potencial considerável para aplicações de interesse tecnológico, na medida em que a combinação dos materiais pode produzir coberturas com propriedades mecânicas, ópticas ou magnéticas superiores às obtidas com uma única camada de um único material. Também é evidente que sua produção envolve questões importantes como a compatibilidade cristalográfica e química, bem como uma correta caracterização das tensões e deformações em cada camada, evitando assim fissuras e delaminação entre as camadas.

O objetivo desse trabalho é a construção de um modelo tridimensional que descreva a relação entre tensões e deformações em filmes finos depositados em multicamadas sobre substratos espessos. O método utilizado é o da minimização de energia de deformação da amostra em regime elástico. Esse método possui como vantagem significativa sua maior simplicidade em relação a abordagem tensorial, o que reduz a complexidade dos cálculos e permite uma mais fácil identificação dos termos envolvidos.

Após a apresentação da motivação ao estudo do problema, bem como das diversas questões que envolvem a análise experimental e teórica do mesmo, é feita uma descrição mais completa da metodologia utilizada e do modelo teórico que é o foco deste trabalho. A seguir, é feita aplicação do modelo para amostras que se deformam como uma casca esférica e cilíndrica, com a identificação dos termos de correção à equação de Stoney. Finalmente, é feita uma comparação entre os valores obtidos pelo modelo e outros modelos teóricos, tomando-se como padrão os valores obtidos segundo uma simulação por elementos finitos, com um resultado favorável ao modelo proposto neste trabalho.

Palavras-chaves: Equação de Stoney, Minimização de energia, Filmes em Multicamadas.

Abstract

There is a relevant potential for multilayered films in many areas of technological interest once they may combine in just one sample convenient mechanical, optical, electrical and magnetic properties, resulting in an upgrade of the original monolayer films. However, it is quite important to take into account that its production evolves chemical and crystallographic compatibility of the materials and a correct understanding of the stresses and deformations that result from the contact between different materials with quite different characteristics.

The objective of this work is to build a three-dimensional model that may describe the relation between the stress in a multilayered film deposited on a thick substrate and the curvature of the sample. It is used the minimization of the deformation energy of the sample in elastic regime. This method is quite simple which is a advantage when compared with tensor procedures, allowing an easier identification of the terms as well as the reduction of the complexity of the calculations.

The work starts by the motivation for the study of the stress in monolayer and multilayered films, followed by a presentation of the theoretical and experimental implications of the theme. Then, a more complete description of the methodology used and of the model itself is presented, including the identification of the corrections terms for the well-known Stoney equation. Finally, it is presented a validation of the model, by means of a comparison between its results and the values obtained by other theoretical models, taking as standard results obtained by finite element simulation that favors the model presented in this work.

Key words: Stoney equation, Minimization of energy, multilayered films.

Lista de Figuras

Figura 1.1 – Em A, temos uma tensão que deforma o filme de forma cônica e em B uma tensão que deforma o filme de forma convexa [11]	13
Figura – 1.2: Temos uma delaminação e um descolamento do filme [13]	14
Figura 2.1 – Quadro de deformações em um objeto [24]	19
Figura 2.2: Um elemento de um substrato coberto com uma película de linha não uniforme de tensão $(\partial T/\partial x)dx$, e $(\partial T/\partial y)dy$ produzindo momentos, $(h/2)(\partial T/\partial x)dxdy$ e $(h/2)(\partial T/\partial y)dxdy$. A tensão da linha positiva como uma tensão de linha devido a um esforço de tensão na película [19].....	20
Figura 2.3 – Ilustração das forças resultantes nas direções \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} [20].....	22
Figura 2.4 – Gráfico que exhibe o erro porcentual envolvido em fazer uso de Equação de Stoney para avaliar o estresse biaxial agindo no revestimento depositado sobre um substrato de espessura. Igual erro nos contornos mostra que o erro permanece aceitável para relações de espessura $< 0,1$, de forma independente entre os módulos de elasticidade [16].....	24
Figura 2.5 – Sólido tridimensional do plano cartesiano [25]	25
Figura 2.6 – Estado de tensão de um ponto [25]	28
Figura 2.7 – Em (a) temos as tensões lineares (σ_i) e de cisalhamento (τ_{ij}) . Em (b) as tensões de cisalhamento no plano $y - z$, onde o primeiro índice indica a direção normal ao plano e o segundo a direção do cisalhamento. E em (c) há a deformação angular causada pela tensão de cisalhamento. [26]	31
Figura 2.8 – (a) Substrato não deformado, (b) Substrato deformado [15]	32
Figura 2.9 – Distribuição das tensões, temos regiões sob tensão e sob compressão [25]...	33

Figura 2.10- Gráfico mostrando a bifurcação os três regimes de comportamento da deformação, e também compara a simulação (linha contínua) a Stoney (linha tracejada) e as medidas experimentais obtidas (círculos) [17]	36
Figura 3.1: Amostra deformada com camada esférica [29]	40
Figure 3.2 – Comparação dos resultados obtidos por diferentes modelos, incluindo o proposto (3D-2lays), com os valores obtidos na simulação por elementos finitos.	49
Figure 3.3 – Detalhe da comparação dos modelos para resultados no Regime I e II.	50
Figura 3.4 – Comparação dos resultados obtidos na simulação por elementos finitos (Miller) com os modelos de Stoney e o desenvolvido neste trabalho.....	50

Sumário

1 - Introdução	11
2 –Revisão Teórica	
2.1 – Abordagem Tensorial do Problema	17
2.2 – Método Variacional e Minimização de Energia	24
2.2.1 – Deslocamentos e Deformações	25
2.2.2– Tensões e Equações de Equilíbrio	28
2.3– Os Três Regimes de Deformação de uma Amostra	35
3 –Aplicação da Metodologia	
3.1 – Modelamento de Sistemas em Multicamadas	38
4 – Conclusão	52
Referências Bibliográficas	54

Capítulo 1

Introdução

Nas últimas décadas, o avanço de inúmeras técnicas experimentais e teóricas favoreceu o rápido desenvolvimento da Física de superfícies e especialmente no estudo de filmes finos, impulsionado pelas demandas da indústria, principalmente nas áreas de eletroeletrônica, optoeletrônica, informática, tratamento de superfícies para os mais diversos fins.

Na conferência “There is Plenty of Room at the Bottom”, em 1959, Richard Feynman falou das possíveis descobertas científicas e tecnológicas do estudo de nanoestruturas [1], que são estruturas tridimensionais que possuem pelo menos uma de suas dimensões na faixa de 1nm a 100nm (10^{-9}m a 10^{-7}m). No entanto, um entendimento mais completo do universo nonoscópico só foi possível com o advento, no início dos anos 80, da Microscopia Eletrônica, que abriu as portas para o desenvolvimento de diversas técnicas de preparação, visualização e análise de amostras, que vem sendo desenvolvidas por diversos centros de pesquisa [2].

A indústria eletroeletrônica – em especial a informática – é o principal ramo de aplicações de nanoestruturas, como o mercado dessa área é muito ágil e dinâmico, de forma que as descobertas científicas são rapidamente usadas e até devido a esse dinamismo, muitas vezes descartadas, fazendo com que o estudo em filmes finos, seja cada vez mais pesquisado e aprofundado [2].

Os filmes finos exercem uma gama muito grande de funções especialmente em dispositivos eletrônicos e em circuitos integrados, pois são usados em conexões das regiões ativas de um dispositivo, no acesso externo ao circuito, isolando camadas condutoras, na comunicação entre dispositivos, como fonte dopante e como barreira de dopagem como elemento protetor do dispositivo ao ambiente externo. Este conjunto diferenciado de aplicações implica em uma demanda por filmes com as mais diversas características, podendo eles ser condutores, semicondutores ou isolantes [2].

Também tem aplicação em outros campos de desenvolvimento tecnológico. Por exemplo, filmes de materiais absorvedores de radiação eletromagnética (MARE) possuem aplicações na indústria aeroespacial, militar e na telecomunicação civil. São usados em células solares, sensores ópticos, sistemas de controle de ruídos espúrios e de interferência eletromagnética, assim como materiais de camuflagem [3].

Há ainda os filmes finos de materiais com propriedades mecânicas que são amplamente utilizados em várias áreas da indústria. As propriedades mecânicas que mais ficam evidenciadas são a alta resistência a abrasão, baixo coeficiente de fricção, alta dureza e são estáveis a altas temperaturas. Um exemplo particularmente importante são os filmes de nitreto de Titânio (TiN), que usualmente se usa como revestimento protetor, pois esses filmes são altamente resistentes a corrosão e a oxidação. Outros filmes, como os com base de Tântalo estão sendo estudados para serem utilizados no interior de tubulações com grandes pressões e para transportar materiais muito reativos [4]. Também podemos citar os filmes a base de Zircônia que são usados para baterias de componentes metálicos sob efeito a altas temperaturas, como em peças de motor a diesel e em turbinas de gás [5].

Existem muitas outras aplicações para os filmes finos, em áreas como optoeletrônica, fotônica e plasmônica em que esses materiais começam a ser utilizados em larga escala. Essas aplicações mais remanescentes incluem diversos tipos de células fotossensíveis, geradores de luz, moduladores, detectores de bolhas em tubulações, displays e materiais nanoporosos que são usados em células combustíveis. [6,7,8] Todavia, diversas aplicações ainda dependem de uma série de melhoramentos e do entendimento das propriedades mecânicas desses materiais. [9,10]

Normalmente os filmes são formados por grãos monocristalinos dispostos em várias direções cristalográficas, de forma que as condições de deposição são determinantes para as características e propriedades estruturais do filme. Por exemplo, o aumento da temperatura de deposição geralmente implica em grãos de maior tamanho e filmes menos rugosos [11]. Por outro lado, a adesão de um filme às camadas inferiores do recobrimento e ao substrato é uma característica fundamental na produção de uma amostra. Um descolamento pode acarretar em comportamento falho dos dispositivos, essa aderência depende bastante dos procedimentos de limpeza e da rugosidade do substrato [11].

As tensões internas de um filme podem expandir paralelamente à superfície do substrato e, no caso extremo, podem ocorrer protuberâncias na superfície e, também podem contrair paralelamente ao substrato, gerando fissuras no coeficiente de elasticidade do material. Em média, as tensões em um filme variam entre $10^3 N$ e $10^5 N/cm^2$.

A tensão total de um filme resulta da soma de três fatores [11]:

- i) Tensão térmica, que resulta dos diferentes coeficientes de dilatação do filme e do substrato;
- ii) Tensão externa, que provém de um agente externo, por exemplo, de outro filme;
- iii) Tensão intrínseca, que está relacionada com a estrutura do filme e, portanto é fortemente dependente de parâmetros como temperatura de deposição, espessura, taxa de deposição, pressão de processo e tipo de substrato.

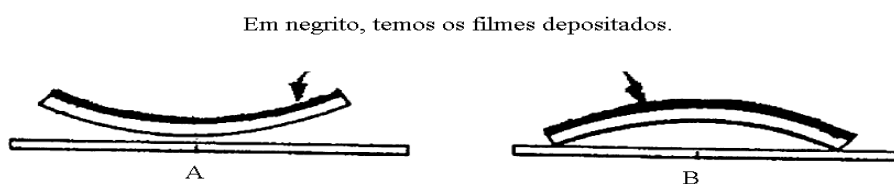


Figura 1.1 – Em A, temos uma tensão que deforma o filme de forma côncava e em B uma tensão que deforma o filme de forma convexa [11].

A deposição de filmes finos sobre os substratos gera tensões na interface destes materiais que são causadas pelos seguintes fatores: reações químicas entre os elementos envolvidos, descasamento dos parâmetros de rede, dopagem por difusão ou então por implantação, transição de fase e, por último, devido à diferença dos coeficientes de dilatação do filme fino e do substrato [12]. Essas tensões podem como já foi comentado, causar defeitos potencialmente importantes na interface do filme/substrato.

Tais defeitos (falhas) podem ser a delaminação ou descolamento do filme, como mostrado na figura 1.2 que, ao ocorrer, gera um enorme prejuízo numa linha de produção da indústria tecnológica.

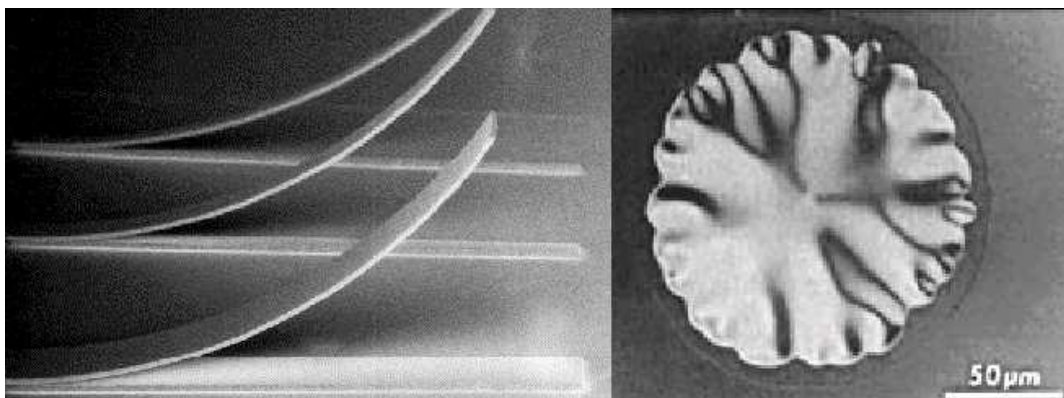


Figura – 1.2: Temos uma delaminação e um descolamento do filme [13].

Por isso, é de fundamental importância que haja um estudo das propriedades mecânicas do conjunto filme-substrato, para garantir o desenvolvimento tecnológico e a miniaturização de componentes com durabilidade e confiabilidade dos produtos fabricados.

Tal situação produz uma demanda importante por conhecimento dos processos e construção de modelos que relacionem as características físicas do sistema físico filme-substrato com as tensões observadas. O primeiro modelo de determinação das tensões em uma amostra filme fino/substrato foi desenvolvido por Stoney [14]. Mesmo sendo um modelo bem simples, é usado com muita frequência, pois relaciona a tensão que surge no filme fino à curvatura induzida pelo crescimento do filme no substrato.

A metodologia para medir essa curvatura é variada e existem diversas técnicas com este fim, se destacando o desvio de um feixe de laser, rápido e de fácil interpretação dos resultados [15].

A equação de Stoney é muito simples e de muita utilização, mas ela se recente de uma série de restrições. Esse modelo é bom para sistemas que apresentam baixos valores de tensão, com pequenas deformações e curvaturas uniformes. Em geral, a equação de Stoney subestima os valores de tensão para situações de grandes deformações e para multicamadas, conforme afirmam Klein [16] e Finot [17], o que torna a otimização do modelo uma questão muito relevante, uma vez que a cada dia se requer resultados mais precisos e confiáveis.

Tal situação estimulou o desenvolvimento de pesquisas científicas que propuseram alterações ao modelo de Stoney. Timoshenko [18] acrescentou um termo de correção à equação de Stoney ao considerar o caráter bidimensional da deformação.

Townsend [21] e Klein [16] propõem correções a partir de análises razoavelmente simples do problema. Em seu artigo, Klein [16] também avalia as propostas Atkinson [22] e por Brenner-Senderoff [23] à equação de Stoney.

Com base dos fundamentos apresentados por Timoshenko e Woinowski-Krieger [18], Blech [19] e Zhu [20] em seus trabalhos, com uma pequena diferença do trabalho de Zhu [20] em relação ao de Blech [19], pois Zhu descreve o comportamento tridimensional da amostra em multicamadas, mas como esse trabalho é muito complexo e de difícil entendimento por parte de seus fundamentos teóricos, esse trabalho não é muito utilizado em estudos.

Em uma pesquisa particularmente interessante Finot [17] realizou uma simulação por elementos finitos, considerando uma amostra de espessura e curvatura não uniformes e com grandes deformações, obtendo tensões locais e deformações geométricas.

Outra pesquisa muito interessante foi a de Flinn [15], que realizou a descrição do problema unidimensional por minimização da energia de deformação da amostra, um método mais simples em relação à abordagem tensorial e obtendo os mesmos resultados.

No capítulo 2, é feita uma revisão teórica dos trabalhos que foram citados, em especial da abordagem por minimização de energia, todos os métodos matemáticos utilizados para se obter os resultados.

No capítulo 3 é apresentada abordagem analítica e simples para os filmes em multicamadas por minimização de energia para substratos espessos, bem como é feita a comparação do modelo desenvolvido com outros modelos e com resultados disponíveis na literatura por simulação de elementos finitos.

Nesse capítulo foram obtidos três novos resultados que ainda não se conhece na literatura, tanto para a deformação esférica quanto para a deformação cilíndrica. Esses resultados serão discutidos com possíveis propostas futuras no capítulo 4, que é o

capítulo de conclusão, onde se faz uma comparação com os resultados conhecidos na literatura com os resultados obtidos na pesquisa.

Capítulo 2

Revisão Teórica

2.1 Abordagem Tensorial do Problema

Em 1909, com o artigo “The Tension of Metallic deposited by electrolysis” [14], Stoney propôs o modelo que é ainda hoje padrão para a determinação das tensões em uma amostra de filme fino/substrato. Para isso, foi usado um substrato de aço fino de espessura t_s com um filme extremamente fino de níquel de espessura t_f . A fita é curvada pelo filme fino de modo que b é a profundidade da superfície da fita em relação ao eixo neutro e dA é um elemento infinitesimal ortogonal a direção x_1 , ocasionando o equilíbrio de forças longitudinais $\sum_{i=1}^n \vec{F}_{n_{longitudinais}} = \vec{0}$ e de momentos das forças $\sum_{i=1}^n \vec{r}_{n_{das\ forças}} = \vec{0}$ na barra.

Todos os trabalhos que usam análises de tensões se apropriam das condições de equilíbrio citadas, ou seja, equilíbrio dinâmico [24]. O equilíbrio dinâmico está relacionado com as seguintes equações:

$$F_1 = \int \sigma_{11} dA = 0 \quad 2.1$$

e

$$M_1 = \int \sigma_{11} x_3 dA = 0 \quad 2.2$$

Logo a equação da soma dos momentos fica:

$$\int_d^0 \frac{E_s}{R} (b - x) x dx = 0 \text{ de modo que } b = \frac{2}{3} t_s \quad 2.3,$$

onde: E_s é o módulo de Young, que é o módulo de elasticidade do substrato, F_1 é a Força Aplicada na superfície, M_1 é momento da Força, σ_{ij} componente i da tensão aplicada em um elemento de área normal à direção j e x_k é a componente k da deformação da amostra.

O módulo de Young é uma grandeza característica do material que corresponde a constante de proporcionalidade entre a deformação longitudinal em regime elástico de uma amostra submetida a um esforço de tração ou compressão sobre o eixo em questão.

A aplicação das equações sobre o sistema fornece a tensão por unidade de área da secção do filme, que é:

$$\sigma t_f = \int_d^0 \frac{E_s}{R} (b - x) dx = 0 \Rightarrow \sigma t_f = \frac{E_s}{R} \left(bd - \frac{d^2}{2} \right) \quad 2.4$$

$$\sigma = \frac{1}{6} \frac{E_s t_s^2}{t_f} \quad 2.5,$$

onde $K = 1/R$ é a curvatura da amostra.

Timoshenko e Woinowski-Krieger [18] deduziram a versão da equação de Stoney para uma placa plana. Neste caso, a aplicação de uma solicitação ao longo de um eixo provoca deformações nos outros eixos da amostra; ao esticar um pedaço de borracha maleável, se observa a contração da peça nas outras direções.

Tal deformação é proporcional à deformação longitudinal aplicada e o coeficiente de Poisson é uma relação definida experimentalmente entre a deformação longitudinal e a transversal [24], $\nu = -\frac{\varepsilon_t}{\varepsilon_l}$, onde ε_t e ε_l são respectivamente a deformação transversal e longitudinal da amostra. Como se pode ver na figura 2.1, para uma deformação longitudinal positiva ($\Delta L/L$) a deformação transversal ($\Delta A/A$) é negativa, justificando o sinal negativo na definição do coeficiente de Poisson, de modo a obter um coeficiente positivo. Na teoria da elasticidade de meios isotrópicos o valor de ν varia entre -1 e $1/2$ [24].

Para materiais isotrópicos, quando há um alongamento do material produzido por uma força agindo em uma dada direção, ocasionará uma contração nas outras duas direções transversais do material.

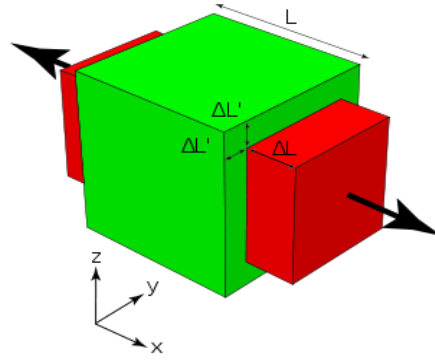


Figura 2.1 – Quadro de deformações em um objeto [24].

Como resultado se obtém:

$$\sigma = \frac{E_s \cdot t_s^2}{6(1-\nu) \cdot t_f} K \quad 2.6$$

Tais equações indicam uma relação linear entre curvatura K amostra e a tensão σ no filme que não inclui as propriedades físicas do filme, apenas sua espessura. De fato, a equação leva em conta algumas condições:

- As espessuras do filme (t_f) e do substrato (t_s) são consideradas uniformes;
- Considerando que $t_f \ll t_s \ll$ dimensões características da amostra;
- O filme e o substrato são homogêneos, isotrópicos e elasticamente lineares;
- O estado de tensões é isotrópico;
- A curvatura da amostra é constante.

Porém, mesmo em situações em que a amostra apresenta tensões anisotrópicas, espessuras variáveis, várias camadas e quando a espessura do filme não é muito menor do que a espessura do substrato, a equação de Stoney vem sendo amplamente utilizada, pois se acredita que os desvios sejam irrelevantes por uma provável compensação dos efeitos adversos.

Seguindo a mesma linha de abordagem de Timoshenko e Woinwsky-Krieger [18], Blech [19] considerou um segmento do substrato com dimensões dx , dy e altura h , como mostra a figura 2.2 a seguir, incluindo um novo termo resultante das forças tangenciais aplicadas no segmento por uma tensão linear não uniforme T . Como é necessário manter o equilíbrio, essa tensão linear ela se manifesta na superfície do substrato apresentando a não uniformidade. Pela figura se observa que essa tensão é

paralela à superfície do substrato e é responsável pelo momento que resulta na curvatura da amostra. Para tensões anisotrópicas, $T(x, y) \neq T_{xx} \neq T_{yy}$ enquanto para tensões isotrópicas $T(x, y) = T_{xx} = T_{yy}$. Pela figura 2.2 a seguir é possível ver o conjunto de forças e momentos envolvidos, medidos em relação ao centro da amostra, gerando assim, a curvatura.

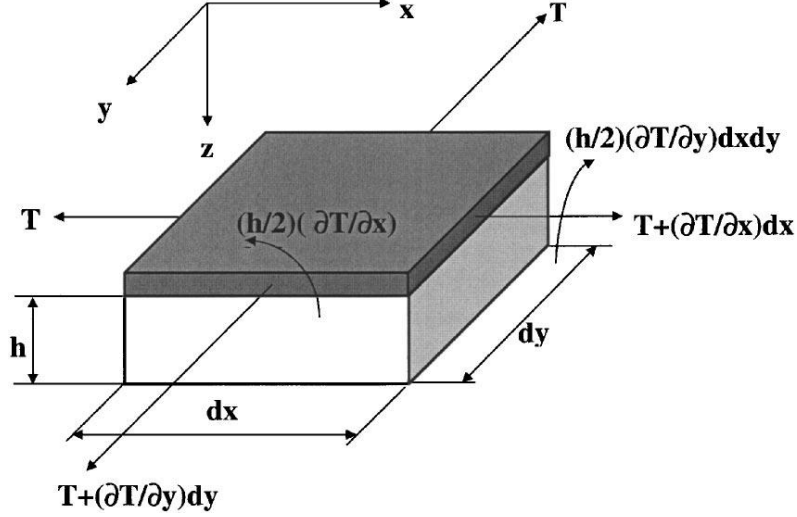


Figura 2.2: Um elemento de um substrato coberto com uma película de linha não uniforme de tensão $(\partial T/\partial x)dx$, e $(\partial T/\partial y)dy$ produzindo momentos, $(h/2)(\partial T/\partial x)dx$ e $(h/2)(\partial T/\partial y)dy$. A tensão da linha positiva como uma tensão de linha devido a um esforço de tensão na película [19].

Tomando uma amostra no formato de disco, Blech obteve a equação a seguir

$$T(r, \theta) = \frac{2D}{h} \left[\Delta w + A_0 + \sum_{i=1}^n A_n r^n \cos(n\theta) + B_n \sin(n\theta) \right] \quad 2.7$$

A equação 2.7 descreve a tensão linear em função de D , onde $D = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)}$ é o termo de rigidez à curvatura do substrato e em relação ao termo w relacionado ao deslocamento vertical da superfície na direção z mostrando o quão é difícil entortar a amostra e valendo $\nabla^2 \Delta w = \Delta(k_x + k_y)$, onde ∇^2 é o Laplaciano do sistema dado por $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$.

Ao considerar a uma solicitação independente de θ e raio de curvatura uniforme, se obtém a equação de Stoney. Tal solução permitiu a realização uma simulação

numérica por elementos finitos, a fim de se estimar diferentes valores de tensão para diferentes regimes. Com isso foi possível averiguar que a equação de Stoney, também pode ser utilizada em algumas situações, conquanto, subestimam-se os valores de tensão e apresenta grandes erros para tensões elevadas desuniformes. Os resultados da simulação por elementos finitos são destacados a seguir:

- Sendo simétrico, ou seja, $T_x = T_y$, como uma razão da espessura da amostra do filme fino/substrato (t_f/t_s), menor que 1/500 (razão de proporção utilizada em larga escala na microeletrônica) e para razões de módulo de elasticidade do filme fino (E_f/E_s) em relação ao substrato iguais ou menores que 1, usando a equação de Stoney, estima-se um erro de aproximadamente 1%;
- Na realidade há diversas curvaturas locais e, nessa situação temos que a tensão não é proporcional à curvatura da amostra. Tendo curvaturas menores que as esperadas em regiões de grandes tensões, ou seja, divergindo dos valores previstos pela equação de Stoney;
- A medida da tensão local é inversamente proporcional à espessura do filme e, quanto maior a relação (t_s/t_f), maior é a precisão e teremos uma tensão calculada também com maior precisão.

Zhu [20], por sua vez, admite uma placa plana sujeita a linha de tensão do filme, dado da forma $T_i(x,y) = \tau_i t$, onde τ_i é a tensão no filme fino por unidade de comprimento, t é a espessura do filme e $i = x, y$, fazendo uma descrição tridimensional das forças que atuam na amostra. Além disso, consideram-se camadas de materiais diferentes, denotando para isso uma nomenclatura própria, sendo $k = 1$ para o substrato e $k = 2, 3, \dots, n$ para as várias camadas de filmes finos. No entanto, Zhu faz algumas considerações simplificando o problema:

- A placa possui uma espessura constante e é muito menor se for comparada com outras dimensões;
- A deformação do substrato tem origem apenas na tensão a que é submetido.

A figura 2.3 a seguir descreve as forças resultantes nas direções \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} e os momentos sob os eixos x e y agindo no plano neutro posicionado em $z = h_0$. Zhu considerou a condição de equilíbrio das tensões lineares, o equilíbrio das forças de cisalhamento e o equilíbrio dos momentos, representada nas três equações a seguir.

$$(T_x, T_y, N_{xy}) = \int_{-h_0}^{h+t-h_0} (\sigma_x^{(k)}, \sigma_y^{(k)}, \sigma_{xy}^{(k)}) dz \quad 2.8$$

$$(Q_x, Q_y) = \int_{-h_0}^{h+t-h_0} (\sigma_{zx}^{(k)}, \sigma_{yz}^{(k)}) dz \quad 2.9$$

$$(M_x, M_y, M_{xy}) = \int_{-h_0}^{h+t-h_0} (\sigma_x^{(k)}, \sigma_y^{(k)}, \sigma_{xy}^{(k)}) dz \quad 2.10$$

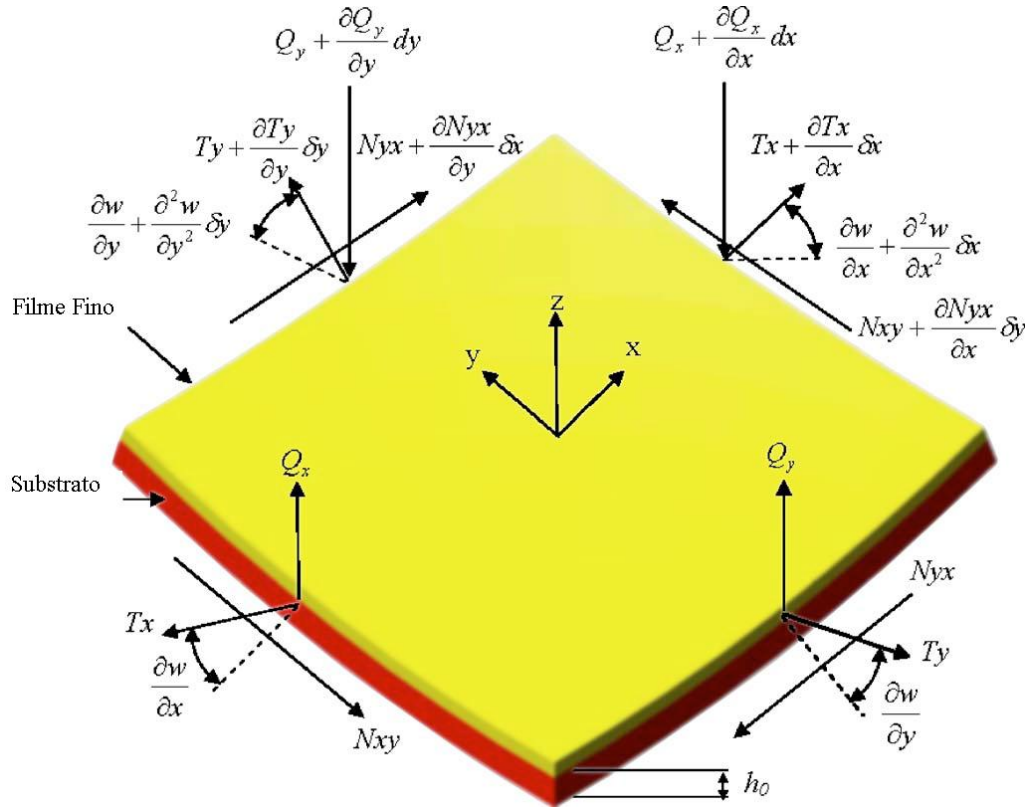


Figura 2.3 – Ilustração das forças resultantes nas direções \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} [20].

Na situação descrita por Zhu, às tensões lineares e de cisalhamento são anisotrópicas e, são representadas respectivamente por, $T_x \neq T_y$ e $\sigma_x \neq \sigma_y$. Como mostra a figura 2.3 que T_x e T_y não são paralelos depois da deformação do substrato, uma vez que existem componentes verticais e horizontais nos plano xy e na direção \hat{z} . Estas duas componentes são responsáveis também pelo momento que produz curvatura no substrato, além de causarem a deformação na amostra.

Assim, se obteve uma equação que relaciona o termo de dureza D do filme fino à deformação w do substrato e a função tensão Φ . A equação 2.11 relaciona D , w e Φ .

$$D_{11} \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + 2(D_{12} + 2D_{66}) \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial}{\partial x^2} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \right) \frac{h}{2} \frac{\partial}{\partial y^2} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \right) \frac{h}{2} + \dots +$$

$$+ \underbrace{\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} \frac{\partial^2 w}{\partial y \partial x}}_{\text{Efeito no plano}} \quad 2.11.$$

A resolução da equação 2.11 mediante condições de contorno apropriadas a partir da distribuição w para uma dada geometria pode-se, *a priori*, obter a distribuição das tensões em todos os pontos das multicamadas.

Buscando uma abordagem mais simples para o problema, Klein [16] tomou como ponto de partida o trabalho de Townsend [21],

$$\sigma_f(z) = E_f' \left[\frac{E_s' t_s}{E_s' t_s + E_f' t_f} \Delta \varepsilon_0 + \left(\frac{t_s t_f}{2} - \theta - z \right) K \right] \quad 2.12.$$

Reescrevendo em termos do módulo biaxial $\gamma = E_f'/E_s'$, onde $E' = E/(1 - \nu)$ e a razão das espessuras $\delta = t_f/t_s$. Deste modo, obteve-se uma equação semelhante à de Stoney, apenas com um fator de correção, a seguir

$$\sigma_K = \sigma_{ST} \left(\frac{1 + \gamma \delta^3}{1 + \delta} \right) \quad 2.13.$$

Para situações em que $\delta \leq 0,1$, a equação de Stoney não apresenta grandes erros, no entanto, para situações $\delta \geq 0,2$ ela subestima os valores de tensão. Na figura 2.4 a seguir é mostrado o erro percentual que Klein obteve para a equação de Stoney e, também a dependência entre δ e γ .

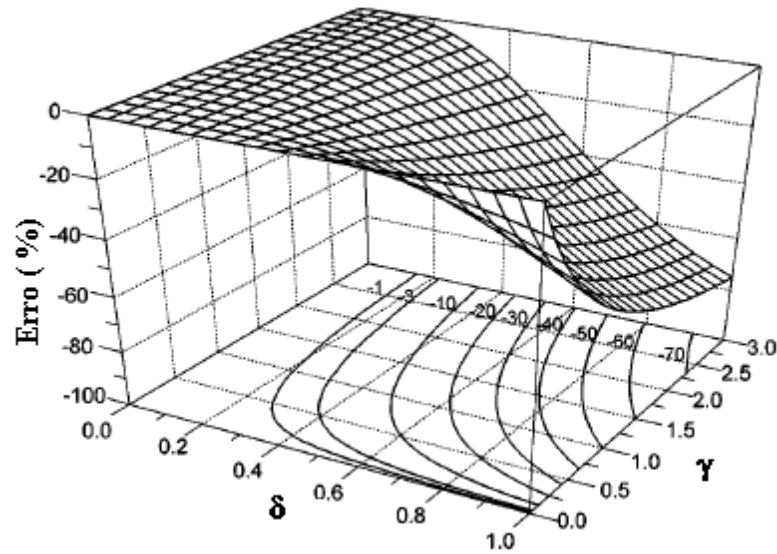


Figura 2.4 – Gráfico que exhibe o erro porcentual envolvido em fazer uso de Equação de Stoney para avaliar o estresse biaxial agindo no revestimento depositado sobre um substrato de espessura. Igual erro nos contornos mostra que o erro permanece aceitável para relações de espessura $< 0,1$, de forma independente entre os módulos de elasticidade [16].

Podemos analisar o gráfico anterior por três pontos importantes:

- Para razões de espessuras $\delta \leq 0,1$ a equação de Stoney apresenta erros que não passam de 5%.
- Para $\delta \geq 0,2$ a equação de Stoney subestima os valores de tensão, no caso especial, para situações em que os filmes finos são menos elásticos que os substratos;
- Levando-se em conta a condição $\gamma\delta^2 \sim 1$, a equação de Stoney é plenamente aceitável, uma vez que subestima valores de tensão para deposições onde o filme fino é espesso e menos elástico em relação ao substrato.

Além disso, Klein averiguou mais duas propostas de alterações a equação de Stoney feitas por Atkinson [22] e Brenner-Senderoff [23], respectivamente. O modelo de Atkinson é até aceitável, mas o modelo de Brenner-Senderoff deve ser totalmente descartado, segundo Klein.

2.2 Método Variacional e Minimização de Energia

Um sólido deformável sob a ação de forças externas se deformará e nele se desenvolverão esforços internos. Geralmente esses esforços são determinados a partir de tensões que se especificam num ponto ou num elemento do sólido. Os sólidos formados por placas e cascas são tridimensionais e limitados por duas superfícies, cuja distância entre elas é a espessura, muito menor que as outras dimensões da amostra. Placas são limitadas por superfícies planas, enquanto que cascas por superfícies de curvatura variável. Como as espessuras possuem dimensões muito reduzidas é possível fazer uma simplificação na formulação dos problemas que envolvam tais sólidos. No caso de materiais homogêneos e elásticos, as relações entre tensões e deformações são regidas pela Lei de Hooke [18] e descritas por alguns conceitos de Elasticidade [18] e Mecânica dos Sólidos [25].

2.2.1 – Deslocamentos e Deformações

No âmbito de pequenas deformações, a deformação de corpo sólido é caracterizada pela extensão dos elementos lineares definidos pelo domínio do sólido e pela distorção entre os elementos lineares. Considere o sólido da figura 2.5 a seguir, na forma inicial e deformada e no interior desse sólido não deformado, considere dois pontos, o ponto P definido pelo vetor de posição $x = \overline{OP}$ com componentes, sendo $i = 1, \dots, 3$ ao qual corresponde na configuração deformada o ponto P' cujo vetor de posição $x' = \overline{OP'}$, tem componentes x'_i com $i = 1, \dots, 3$ e o ponto Q definido pelo vetor de posição $x + dx = \overline{OQ}$ cujas componentes são $x_i + dx_i$ com $i = 1, \dots, 3$ ao qual corresponde o ponto Q' na configuração deformada cujo vetor de posição $x' + dx' = \overline{OQ'}$ com componentes $x'_i + dx'_i$ com $i = 1, \dots, 3$ no sólido deformado.

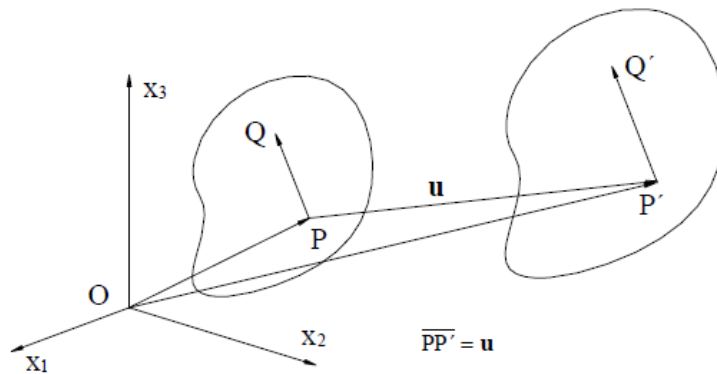


Figura 2.5 – Sólido tridimensional do plano cartesiano [25].

Pelo sistema de eixos cartesianos, para efeitos de identificação dos vetores de posição dos pontos materiais do sólido, que na figura 2.5 o vetor linear considerado é o vetor \overline{PQ} .

Como mostra a figura 2.5, o vetor deslocamento sofrido pelo ponto P é o vetor $\overline{PP'}$ o qual é designado por u e cujas componentes são u_i com $i = 1, \dots, 3$. Assim, o vetor u representa a distância percorrida pelo ponto material entre a posição inicial e a posição instantânea subsequente no processo de deformação correspondente à configuração dita deformada. Com isso, podem-se escrever as coordenadas do ponto P' na configuração deformada em função das coordenadas do ponto P na sua configuração inicial e dos vetores deslocamentos u da seguinte maneira:

$$x'_1 = x_1 + u_i \quad \text{com } i = 1, \dots, 3 \quad 2.14.$$

O comprimento do vetor \overline{PQ} é designado por ds e é tal que:

$$(ds)^2 = dx_i \cdot dx_i \quad 2.15,$$

sendo a repetição dos índices i sinônimo de somatório das parcelas dx_1^2 , dx_2^2 e dx_3^2 . O comprimento do vetor $\overline{P'Q'}$ no sólido deformado que corresponde ao vetor \overline{PQ} no sólido não deformado, designa-se por ds' , sendo:

$$(ds')^2 = dx'_i \cdot dx'_i \quad 2.16.$$

A diferença $(ds')^2 - (ds)^2$ está relacionada às deformações. Esta diferença pode ser calculada a partir das expressões 2.14, 2.15 e 2.16 tendo em conta a formulação de Lagrange para a qual as coordenadas x_1 , x_2 e x_3 são independentes e identificam a posição do ponto na configuração inicial do sólido. Àquela diferença mencionada acima, pode ser mostrada da seguinte maneira:

$$(ds')^2 - (ds)^2 = 2 E_{ij} dx_i dx_j \quad 2.17,$$

sendo:

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \frac{\partial x_k}{\partial x_j} \right) \quad 2.18$$

o tensor E_{ij} é chamado por tensor das deformações de Green-Lagrange, conforme a formulação de Green e St. Venant. As deformações se referem à configuração inicial do

sólido e medidas no sistema de eixos inicial. É possível ainda proceder à definição Euleriana das deformações referindo as deformações do sólido deformada, ou seja:

$$(ds')^2 - (ds)^2 = 2 E'_{ij} dx'_i dx'_j \quad 2.19,$$

onde:

$$E'_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x'_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x'_i} - \frac{\partial u_k}{\partial x'_i} \frac{\partial x_k}{\partial x'_j} \right) \quad 2.20$$

este tensor é designado por tensor das deformações de Almansi ou componentes “Eulerianas” das deformações e foi introduzido por Cauchy e Almansi.

No contexto das grandes deformações são utilizados com frequência tanto o tensor das deformações de Green quanto o tensor das deformações Almansi. No contexto das pequenas deformações os termos de segunda ordem são eliminados tornando-se desnecessário distinguir entre as deformações de Almansi e de Green, sendo então definidas as deformações lineares do seguinte modo:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad 2.21$$

O tensor das deformações lineares, ε_{ij} é em Elasticidade linear tridimensional [23] um tensor com nove componentes como se depreende da equação 2.21 de significado geométrico bem definido, sendo possível estabelecê-lo por considerações geométricas simples tendo em conta que as deformações são pequenas. Este tensor também pode ser representado através de uma matriz 3x3, do seguinte modo:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{bmatrix} \quad 2.22$$

para $i = j$, as três componentes da deformação são ε_{11} , ε_{22} e ε_{33} e correspondem a extensões nas três direções dos eixos coordenados. Para $i \neq j$, as outras seis componentes da deformação são ε_{12} , ε_{13} , ε_{21} , ε_{23} , ε_{31} e ε_{32} e correspondem a uma medida das distorções e são chamadas de deformações de corte. Como medida da distorção é por vezes usual considerar-se o dobro do valor definido para as deformações

ε_{ij} com $i \neq j$, representado na equação 2.22 e as outras componentes da deformação assim definidas por distorções [25].

2.2.2 – Tensões e Equações de Equilíbrio

Para pequenas deformações há coincidência entre as deformações de Green e Almansi, de modo que não se distinguem as tensões na configuração inicial e as tensões na configuração deformada do sólido. Considerando um elemento no formato de paralelepípedo de dimensões infinitesimais e com as superfícies paralelas aos eixos coordenados, como representado na figura 2.6, as tensões atuando em três faces ortogonais do objeto constituem o chamado tensor das tensões que é representado sobre a forma matricial do seguinte modo:

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad 2.23$$

onde o primeiro índice diz respeito à direção da normal ao plano que está a ser considerado e o segundo índice diz respeito à direção da tensão. Como visto anteriormente temos as tensões σ_{11} , σ_{22} e σ_{33} são as tensões normais, enquanto que as tensões σ_{12} , σ_{13} , σ_{21} , σ_{23} , σ_{31} e σ_{32} são as chamadas tensões de corte ou então de tensões tangenciais [18].

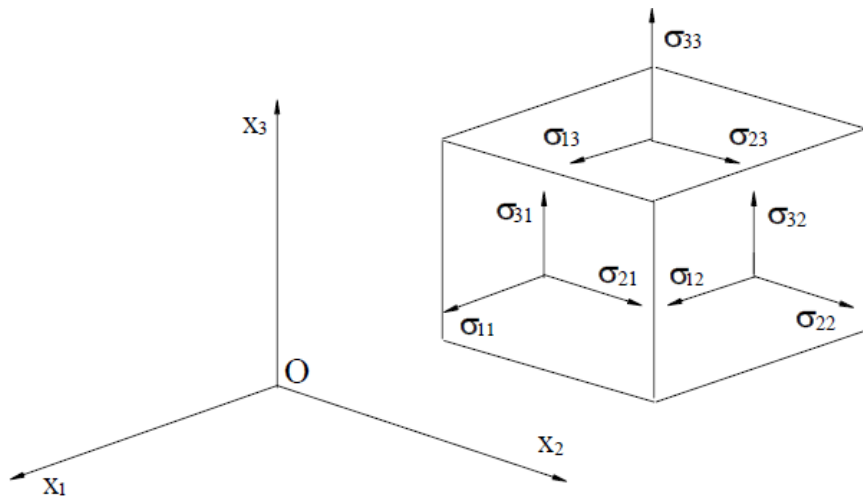


Figura 2.6 – Estado de tensão de um ponto [25].

Considerando as forças aplicadas às seis faces do paralelepípedo, sendo estas forças resultantes das tensões incluídas no tensor das tensões e das forças de massa que possam considerar-se a atuar sobre um elemento do paralelepípedo representado na figura 2.6. Essas forças de massa atuam segundo os eixos coordenados $0x_1$, $0x_2$ e $0x_3$, respectivamente por X , Y e Z e impondo as condições de equilíbrio de forças nas três direções coordenadas, obtém-se o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial x_3} + X = 0 \\ \frac{\partial \sigma_{21}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial x_3} + Y = 0 \\ \frac{\partial \sigma_{31}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{32}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{33}}{\partial x_3} + Z = 0 \end{cases} \quad 2.24$$

que traduz as condições de equilíbrio das forças atuantes num paralelepípedo elementar em termos das tensões na vizinhança do ponto [25].

Além do equilíbrio de forças é possível considerar o equilíbrio dos momentos. Às tensões incluídas no tensor das tensões σ_{ij} correspondem esforços que devem estar em equilíbrio com os momentos de massa que possam se considerar a atuar sobre um elemento do paralelepípedo. No caso dos momentos de massa ser nulos as equações de equilíbrio de momentos conduz às seguintes equações:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad \text{para } i \neq j \quad 2.25$$

As equações de equilíbrio usadas para efeitos de análise elástica de componentes sólidos são adaptadas ao tipo de esforços que têm de ser considerados em equilíbrio e que vão aparecer como relevantes na análise dos referidos sólidos [25].

Tudo o que foi revisto anteriormente faz parte para a aplicação do princípio variacional, pois, ele permite a solução efetiva de problemas em muitos casos onde a aproximação clássica da teoria de elasticidade apresenta dificuldades.

Suponha uma barra em tração simples, sendo carregada estaticamente, ou seja, lentamente por uma força P , a barra se alonga e, sabendo que o material está sujeito a Lei de Hooke, e não havendo deformações plásticas. Durante o carregamento, a força P realiza trabalho, sendo transformado em energia de deformação e, essa energia é armazenada na barra. Ao removermos a carga muito lentamente, a barra retornará ao

seu comprimento inicial. Na realização do processo de remoção da carga, ou seja, no descarregamento, a energia de deformação armazenada na barra pode ser recuperada em forma de trabalho. Logo, é possível concluir que a barra funciona como uma mola, ou seja, armazena e fornece energia quando a carga é aplicada ou retirada, respectivamente. Durante o processo de carregamento, barra move-se através da distância δ e realiza trabalho. Para calcular o valor do trabalho, sabendo que uma força constante realiza trabalho igual ao produto da força pela distância em que ela se move e que pelo princípio de conservação de energia, temos que essa energia de deformação é igual ao trabalho realizado pela barra, desde que nenhum tipo de energia seja adicionada ou subtraída da amostra na forma de calor [18].

A equação 2.26 a seguir representa a energia de um volume infinitesimal sendo U_0 a densidade de energia e dV o elemento de volume infinitesimal em três dimensões, ou seja, $dV = dxdydz$, assim:

$$dU = U_0 dV \quad 2.26,$$

com

$$U_0 = \frac{1}{2} (\sigma_x \varepsilon_x + \sigma_y \varepsilon_y + \sigma_z \varepsilon_z + \tau_{xy} \gamma_{xy} + \tau_{xz} \gamma_{xz} + \tau_{yz} \gamma_{yz}) \quad 2.27.$$

Os termos σ_i representam as tensões lineares e são essas tensões que causam as deformações ε_i no sentido a que estão sendo orientadas. Os termos τ_{ij} representam às tensões de cisalhamento e os termos γ_{ij} às deformações angulares. Como mostra a figura 2.7 a seguir.

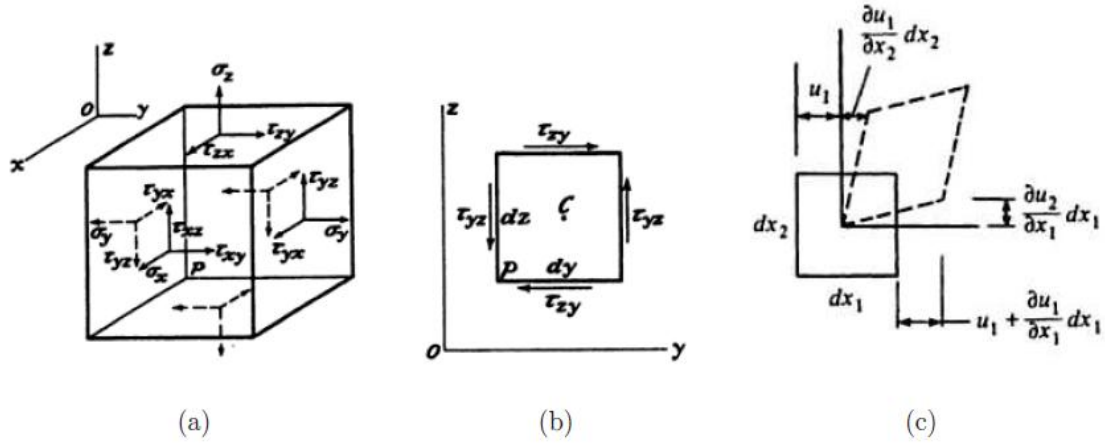


Figura 2.7 – Em (a) temos as tensões lineares (σ_i) e de cisalhamento (τ_{ij}). Em (b) as tensões de cisalhamento no plano $y - z$, onde o primeiro índice indica a direção normal ao plano e o segundo a direção do cisalhamento. E em (c) há a deformação angular causada pela tensão de cisalhamento. [26].

A equação 2.26 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$U = \frac{1}{2} \int \Gamma^{ij} E_{ij} dV \quad 2.28,$$

onde $\Gamma^{ij} E_{ij} = \sigma_i \varepsilon_i + \tau_{ij} \gamma_{ij}$ sendo σ_i e τ_{ij} elementos do tensor de tensões Γ^{ij} enquanto que ε_i e γ_{ij} são elementos do tensor de deslocamento E_{ij} .

Para o regime elástico, as tensões e deslocamentos são relacionados conforme o que fora descrito anteriormente, ou seja, como Timoshenko explicou em seu livro, logo:

$$\varepsilon_i = \frac{1}{E} [\sigma_i - \nu(\sigma_j + \sigma_k)]; \gamma_{ij} = \frac{2(1+\nu)\tau_{ij}}{E} \quad 2.29,$$

onde ν é o coeficiente de Poisson e E é o módulo de elasticidade, mais conhecido como módulo de Young e $i, j, k \equiv x, y, z$, respectivamente.

Como mostra a equação 2.26, a energia de deformação é definida pelas deformações e tensões, lineares e angulares a que o material está sujeito. Usando a equação 2.29 que relaciona as tensões às deformações, é possível escrever a equação da energia apenas em função das deformações.

Agora, quando o filme está sendo depositado, a amostra está sob uma configuração de menor energia a uma dada temperatura de deposição. Ao acabar o processo, há uma mudança na sua temperatura a amostra que busca uma nova

configuração que minimize sua energia, que em geral provoca uma curvatura na amostra.

$$\frac{\partial U}{\partial \alpha_1} = \frac{\partial U}{\partial \alpha_2} = \dots = \frac{\partial U}{\partial \alpha_i} = 0 \quad 2.30.$$

Onde as variáveis α_j descrevem os parâmetros livres do sistema. A energia de deformação da amostra possui dois termos, um devido à compressão/tração do filme e outro de curvamento do substrato em relação a situação original plana.

Assim, contrapondo a alternativa vetorial, Flinn [15], utilizando a minimização de energia, considerou o problema unidimensional como ilustra a figura 2.8 a seguir. Na parte da figura 2.8 (a), há a condição do substrato antes da deposição do filme, de forma que após a deposição os comprimentos do substrato e do filme fino tem uma diferença ΔL . Isso ocorre, porque existe uma diferença nas dilatações térmicas. Na figura 2.8 (b), observa-se claramente, três regiões no substrato, uma em que não há tensão, chamada de região neutra, representada por R , outra onde o substrato está tracionado, representado por $R + b$ e uma onde há a compressão do substrato, representada por $R + a$, como mostra a figura 2.9 a seguir.

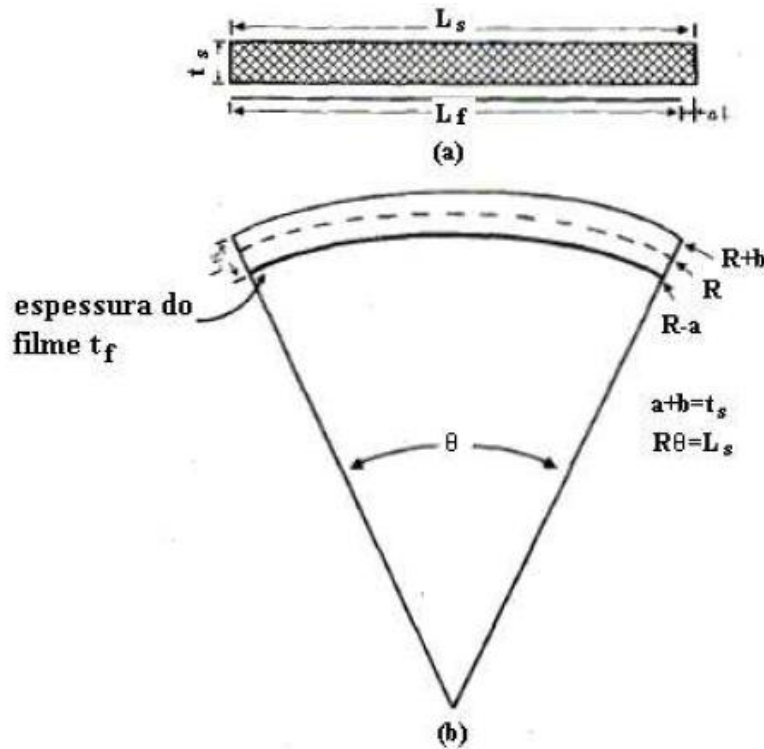


Figura 2.8 – (a) Substrato não deformado, (b) Substrato deformado [15].

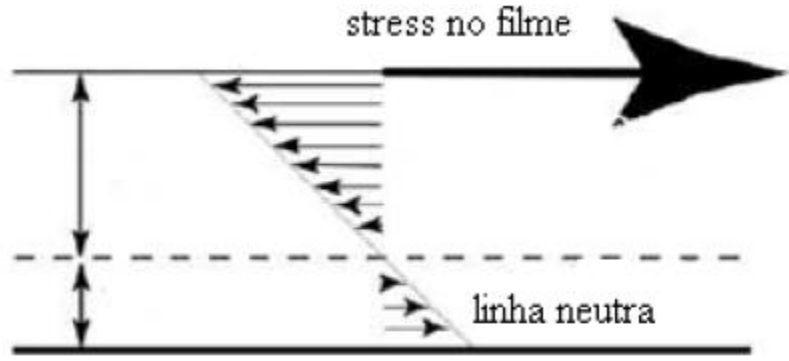


Figura 2.9 – Distribuição das tensões, temos regiões sob tensão e sob compressão [25].

Como mostram as figuras 2.8 e 2.9, a espessura total do substrato é $a + b$, $R\theta$ é o comprimento L_s do substrato e $(R-a)\theta$ é comprimento L_f do filme.

Matematicamente, pela figura 2.8, em função da diferença ΔL , obtém-se a deformação do substrato pela seguinte equação:

$$\Delta L = (R - r)\theta \quad 2.31,$$

enquanto a energia de deformação elástica do substrato é dada por:

$$U = \frac{1}{2} \int (\sigma_i \varepsilon_i + \tau_{ij} \gamma_{ij}) dv \quad 2.32,$$

onde o termo $\tau_{ij} \gamma_{ij}$ é desconsiderado, devido a simetria a que a amostra está submetida.

Baseado nas equações de Hooke que relacionam tensão com as deformações da equação 2.32 e substituindo a deformação obtida na equação 2.31 do arco com espessura dr , obteve-se a seguinte equação:

$$dU = \left(\frac{E_s}{2} \right) (r\theta - L_s) 2dr \quad 2.33,$$

Integrando a equação 2.33 entre os limites $(R - a)$ até $(R + a)$, encontra-se a energia de deformação do substrato, representado a seguir, pela equação 2.34.

$$U_s = \left(\frac{E_s \theta^2}{6} \right) (b^3 + a^3) \quad 2.34,$$

sendo U_s a energia potencial elástica do substrato.

Do mesmo modo, para o filme, considerando-o extramamente fino em relação ao substrato, tem-se que ΔL é para $r = R - a$ e que a integração no volume é apenas deformação vezes a espessura do filme, têm-se:

$$U_f = \left(\frac{E_f}{2}\right) (\Delta L - a\theta)^2 t_f \quad 2.35,$$

sendo U_f a energia potencial elástica do filme.

Somando as equações 2.34 e 2.35, temos a energia de deformação total do sistema, dado pela equação 2.41 a seguir:

$$U_t = U_s + U_f = \left(\frac{E_s \theta^2}{6}\right) (b^3 + a^3) + \left(\frac{E_f}{2}\right) (\Delta L - a\theta)^2 t_f \quad 2.36.$$

Mediante uma mudança de variáveis, $x = a - \frac{t_s}{2}$ e $v = x\theta$, se obtém a equação da energia total 2.36 a seguir em função de θ que é uma variável associada a curvatura da amostra, ou seja, do sistema filme fino/substrato e v que mede a compressão total do substrato.

$$U = E_f t_f \frac{(\Delta L)^2}{2} + \frac{E_s t_s^3 \theta^2}{24} - \frac{E_f t_f \Delta L t_s \theta}{2} - E_f t_f \Delta L v + \frac{E_s t_s v^2}{2} \\ + \text{termos de ordem superior, } (t_f/t_s) < 1; (t_f/t_s)^2 \ll 1 \quad 2.37.$$

Para se obter a minimização de energia, deriva-se a equação 2.37 em relação a θ e a v e se iguala a zero, assim:

$$\frac{\partial U}{\partial \theta} = 0 \Rightarrow \frac{E_s t_s^3 \theta}{12} - \frac{E_f t_f \Delta L t_s}{2} = 0 \quad 2.38,$$

e

$$\frac{\partial U}{\partial v} = 0 \Rightarrow -E_f t_f \Delta L + E_s t_s v = 0 \quad 2.39.$$

Em consequência disso, Flinn [14] obteve a tensão do filme em função da deformação relativa so substrato e do filme:

$$\sigma_f = \frac{E_f \Delta L}{L_s} \quad 2.40,$$

e então é possível recuperar a equação de Stoney:

$$\sigma_f = \frac{E_s t_s^2}{6 t_f R} \quad 2.41.$$

Usando o resultado da equação 2.41, agora para duas dimensões, Flinn [14], substituiu o módulo de Young (E), pelo módulo apropriado para as duas dimensões $[E/(1 - \nu)]$, sendo ν o coeficiente de Poisson e, então, encontra-se a equação 2.6, ou seja, a equação de Stoney bidimensional.

2.3 – Os Três Regimes de Deformação de uma Amostra

Com o objetivo de cada vez mais buscar um entendimento maior no comportamento da amostra filme fino/substrato, pois se sabe que a amostra apresenta grandes deformações elásticas, curvaturas não uniformes, mudanças de formas e instabilidade geométrica muito acentuada, Finot [17], usou o método dos Elementos Finitos [17,19] para curvaturas não lineares, tensões anisotrópicas, tensões locais e deformações geométricas.

Finot [17] usou resultados experimentais para validar sua simulação, identificou um ponto crítico, ou seja, o ponto onde a amostra de forma esférica sofre uma bifurcação, com instabilidade geométrica que faz com que a amostra perca o formato esférico ($K_x = K_y$) passando a ter formato elíptico ($K_x \neq K_y$) e, logo a seguir, deforma-se em um sentido preferencial, aproximando-se da forma cilíndrica. A figura 2.10 a seguir identifica e explana o trabalho de Finot [17].

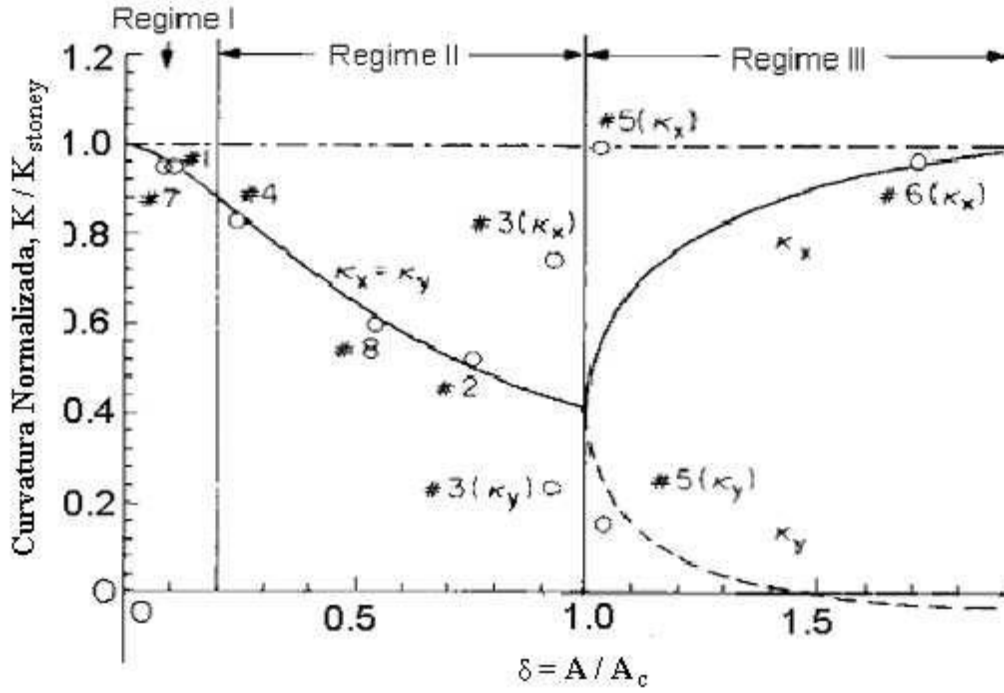


Figura 2.10- Gráfico mostrando a bifurcação os três regimes de comportamento da deformação, e também compara a simulação (linha contínua) a Stoney (linha tracejada) e as medidas experimentais obtidas (círculos) [17].

A equação a seguir descreve a instabilidade geométrica da amostra circular para o ponto crítico do parâmetro de tensão:

$$A = \frac{\lambda D^2}{h^3} = \sigma_f t \frac{D^2}{h^3} \quad 2.42,$$

Onde λ é a tensão linear do filme, ou seja, é igual a $\sigma_f t$ para um filme homogêneo e espessura t sob uma tensão uniforme σ_f , D é o diâmetro da amostra e h é a espessura do substrato.

Finot [17] usou 8 (oito) amostras de filmes de *Si* (Silício) com espessuras diferentes, depositados com filme de *W* (Tungstênio). A bifurcação ocorre em situações onde $(D/h) \geq 50$ e o valor crítico de $A(A_c)$ para esse caso é de $680 GPa$, formando a razão $\delta = A/A_c$ que tem haver com a instabilidade geométrica da amostra, identificando-se três regimes que tem por característica a razão δ , conforme a figura 2.10.

- Regime I ($\delta \leq 0,2$): caracterizado por tensões e deformações reduzidas, pequenos valores de δ , observa-se uma curvatura uniforme nas duas direções ($K_x = K_y$). Para esse regime a equação de Stoney é plenamente aceitável, e apresenta um desvio menor que 10%;
- Regime II ($0,2 \leq \delta < 1,0$): nesse regime a amostra mantém a forma esférica ($K_x = K_y$), mas a curvatura não se mantém uniforme, ou seja, na borda a curvatura é cerca de 10% maior que no centro e, com isso não ocorre mais uma relação linear entre a curvatura e a tensão, isto é, a equação de Stoney, para esse regime, é inapropriada.
- Regime III ($\delta \rightarrow 1$): na curvatura da amostra ocorre a bifurcação e uma mudança violenta, até meio abrupta, da forma circular para a forma elipsoidal. Dentro desse regime, para $\delta \geq 1$, há uma preferência na orientação e a amostra se curva apenas em uma direção, aproximando-se de uma forma cilíndrica, ou ela se orienta para K_x ou para K_y , enquanto que na outra direção $K \rightarrow 0$, a direção do eixo de curvatura principal, depende da geometria e das imperfeições durante o processo de deposição do filme [17].

Observa-se então, que o problema ainda necessita de uma abordagem definitiva e que será interessante uma abordagem simples que amplie os limites da equação de Stoney, contudo, sem ter resolvidos os trabalhos com graus de dificuldade de análise numérica. Sendo assim, percebe-se que a abordagem utilizada por Flinn [15] é uma possibilidade muito interessante, uma vez que a análise por energia é mais fácil que a tensorial do problema envolvido.

Capítulo 3

Aplicação da Metodologia

3.1 – Modelamento de Sistemas em Multicamadas

Neste capítulo é proposto o modelamento de amostras em multicamadas finas sobre um substrato espesso. Não há em princípio restrições quanto ao número de camadas e à espessura de cada uma. No entanto, se considera que a amostra é composta por materiais isotrópicos e está deformada em regime elástico como uma casca esférica ou cilíndrica, correspondendo assim aos regimes I, II e III descritos por Finot [17]. A abordagem é a de minimização da energia de deformação do conjunto substrato e filmes.

Tal simetria conduz a uma representação do sistema por coordenadas esféricas e desprezando as deformações angulares para manter uma geometria o mais próxima possível de uma casca esférica. A equação da energia de deformação em coordenadas esféricas é:

$$dU_0 = dV \left(\frac{1}{2} [\sigma_r \epsilon_r + \sigma_\theta \epsilon_\theta + \sigma_\varphi \epsilon_\varphi + \gamma_{r\theta} \gamma_{r\theta} + \gamma_{r\varphi} \gamma_{r\varphi} + \gamma_{\theta\varphi} \gamma_{\theta\varphi}] \right) \quad 3.1$$

que é simplificada na forma:

$$dU_0 = dV \left(\frac{1}{2} [\sigma_r \epsilon_r + \sigma_\theta \epsilon_\theta + \sigma_\varphi \epsilon_\varphi] \right) \quad 3.2.$$

Tendo em vista as equações que relacionam as tensões e deformações

$$\epsilon_r = \frac{1}{E} [\sigma_r - \nu(\sigma_\theta + \sigma_\varphi)] \quad 3.3$$

$$\epsilon_{\theta} = \frac{1}{E} [\sigma_{\theta} - \nu(\sigma_r + \sigma_{\varphi})] \quad 3.4$$

$$\epsilon_{\varphi} = \frac{1}{E} [\sigma_{\varphi} - \nu(\sigma_r + \sigma_{\theta})] \quad 3.5.$$

Isolando a tensão (σ_{φ}) na equação 3.5, obtém-se:

$$E\epsilon_{\varphi} = \sigma_{\varphi} - \nu(\sigma_r + \sigma_{\theta}) \quad 3.6$$

$$\sigma_{\varphi} = E\epsilon_{\varphi} + \nu(\sigma_r + \sigma_{\theta}) \quad 3.7,$$

agora substituindo a equação 3.7 na equação 3.3, temos:

$$E\epsilon_r = \sigma_r - \nu\sigma_{\theta} - \nu[E\epsilon_{\varphi} - \nu(\sigma_r + \sigma_{\theta}) + \sigma_{\theta}] \quad 3.8.$$

Isolando σ_r da equação 3.8, teremos σ_r em função apenas de σ_{φ} . Utilizando a equação 3.7 e substituindo σ_r obtido, teremos, assim σ_{φ} apenas em função de σ_{θ} e, finalizando, usando a equação 3.4 e usando nela σ_{φ} que está em função de σ_{θ} e também σ_r da equação 3.8, chegamos a seguinte equação, onde obtemos σ_{θ} estando em função apenas das deformações. Assim usando 3.3 e 3.8, obtém-se:

$$\sigma_r = \frac{E\epsilon_r + \nu E\epsilon_{\varphi} + (\nu + \nu^2)\sigma_{\theta}}{1 - \nu^2} \quad 3.9.$$

O passo seguinte é usar 3.9 em 3.7, logo:

$$\sigma_{\varphi} = E\epsilon_{\varphi} + \nu\sigma_{\theta} + \frac{\nu E\epsilon_r + \nu^2 E\epsilon_{\varphi} + (\nu^2 + \nu^3)\sigma_{\theta}}{1 - \nu^2} \quad 3.10,$$

agora fazendo um pouco de algebrismo, chega-se ao seguinte resultado:

$$\sigma_{\theta} = \frac{(1 - \nu^2)E\epsilon_r + (\nu + \nu^2)E\epsilon_r + (\nu + \nu^2)E\epsilon_{\varphi}}{1 - 3\nu^2 - 2\nu^3} \quad 3.11.$$

De forma análoga, descobrimos σ_r e σ_{φ} , assim:

$$\sigma_r = \frac{(1 - \nu^2)E\epsilon_r + (\nu + \nu^2)E\epsilon_{\theta} + (\nu + \nu^2)E\epsilon_{\varphi}}{1 - 3\nu^2 - 2\nu^3} \quad 3.12$$

e

$$\sigma_\phi = \frac{(1 - \nu^2)E\epsilon_\phi + (\nu + \nu^2)E\epsilon_r + (\nu + \nu^2)E\epsilon_\theta}{1 - 3\nu^2 - 2\nu^3} \quad 3.13.$$

Isso ocorre em 3.11, 3.12 e 3.13 para as deformações de uma casca esférica para um único filme, mas como o nosso objetivo é para múltiplos filmes, temos então um sistema que é composto por um número arbitrário $N - l$ de amostras de espessuras arbitrárias depositadas sobre um substrato plano. Como resultado do processo de deposição e a variação de temperatura entre o momento de deposição e o de medida, a amostra se deforma como uma casca esférica, como mostrado na Figura 3.1. Tal configuração permite considerar o quadro de tensões isotrópico [27,28]. Deste modo, para cada camada (substrato = 1 e filmes $k = 2, 3 \dots N$), assim vamos mostrar a as deformações da amostra em 3D para múltiplos filmes.

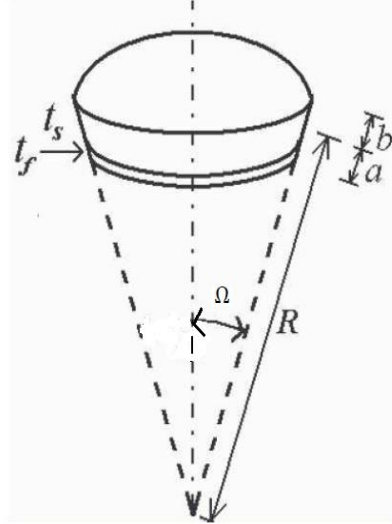


Figura 3.1: Amostra deformada com camada esférica [29].

Pela figura 3.1 podemos escrever $S = 2\pi g(r)$, onde $g(r) = \sin \theta$, sendo $S_0 = 2\pi g_0(r)$, onde $g_0(r) = \sin \Omega$, sendo r variável e temos que $l = 2\pi \sin \theta$ e $l_0 = 2\pi \sin \Omega$ onde R é o plano neutro. Para o eixo ϕ , onde R é o raio do plano neutro sem deformação, então temos: $\Delta l_\phi = \Delta l_\phi(\theta) = 2\pi(r - R) \sin \theta$, onde $0 < \theta < \Omega$. Para o eixo θ , onde R é o raio do plano neutro sem deformação, logo: $\Delta l_\theta = \Delta l_\theta(\theta) = 2\pi(r - R) \theta$, $0 < \theta < \Omega$ e para o plano r temos, $\Delta l_r = t - t_0$ e $\Delta l_\theta = (r - R)\theta$. Agora calculando a energia de deformação sem a variação de espessura, temos:

$$\sigma_\theta = E \frac{\Delta l}{l} \Rightarrow \sigma_\theta = E \frac{(r-R)\theta}{r\theta} \Rightarrow \sigma_\theta = E \frac{(r-R)}{r} \quad 3.14.$$

Agora a energia pode ser calculada por:

$$U = \int \sigma \Delta L dA = E \iint_0^\Omega \frac{(r-R)}{r} r dr d\theta \quad 3.15,$$

assim a energia é dada por:

$$U = \frac{1}{2} E \Omega^2 \int (r-R)^2 dr \quad 3.16.$$

A equação 3.16 é o mesmo resultado obtido por Flinn [15].

Para o cálculo em 3D, temos:

$$\sigma_i = \int F_i \delta x_i dV \quad 3.17,$$

onde F_i é a força por unidade de volume e x_i é deslocamento.

A equação 3.17 pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\sigma_i = \int \tau^{ji} (\delta x_i)_j dV \quad 3.18,$$

onde τ^{ji} elemento do tensor de tensões, que é força por unidade de área e j é a derivada direcional da componente j .

Os termos do integrando para a casca esférica, não há termos de cisalhamento a considerar de modo que os termos são: $\tau^{ji} (\delta x_i)_j = \tau^{jj} (\delta x_j)_j$, sendo que $x_j = \frac{\Delta l_j}{l_j}$, então para o nosso caso em coordenadas esféricas o termo $\frac{\Delta l_j}{l_j}$ pode ser escrito para o eixo \emptyset como $\frac{\Delta l_\emptyset}{l_\emptyset} = \frac{2\pi(r-R) \sin \theta}{2\pi r \sin \theta} = \frac{(r-R)}{r}$ onde esse é o resultado para ϵ_\emptyset , já para o eixo θ temos $\frac{\Delta l_\theta}{l_\theta} = \frac{(r-R) \theta}{r\theta} = \frac{(r-R)}{r}$ que é o resultado para ϵ_θ e para o eixo r temos $\frac{\Delta l_r}{l_r} = \frac{t-t_0}{t}$ que é o resultado de ϵ_r .

Considerando que $U = \int dV (\sigma_\theta \sigma_\theta + \sigma_\phi \sigma_\phi + \sigma_r \sigma_r)$ e o elemento da integração $dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$, onde $\theta \in (0, \Omega)$ e $\phi \in (0, 2\pi)$ e substituindo σ_j em função de ϵ_j , assim teremos:

$$U = \frac{E}{(1+\nu) \cdot (1-2\nu)} \int r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$$

$$[(1-\nu)(\epsilon_\theta^2 + \epsilon_\phi^2 + \epsilon_r^2) + \underbrace{\nu(\epsilon_\theta\epsilon_r + \epsilon_\theta\epsilon_\phi + \epsilon_\phi\epsilon_\theta + \epsilon_\phi\epsilon_r + \epsilon_r\epsilon_\theta + \epsilon_r\epsilon_\phi)}_{2\nu(\epsilon_\theta\epsilon_\phi + \epsilon_\phi\epsilon_r + \epsilon_\phi\epsilon_\theta)}] \quad 3.19,$$

assim, integrando a equação 3.19 em ϕ e θ dos quais ϵ_j não dependem, obtém-se para o nosso caso,

$$U = \frac{E}{(1+\nu).(1-2\nu)} \pi \Omega^2 \int (1-\nu)(\epsilon_\theta^2 + \epsilon_\phi^2 + \epsilon_r^2) + 2\nu(\epsilon_\theta\epsilon_\phi + \epsilon_\phi\epsilon_r + \epsilon_\phi\epsilon_\theta) \quad 3.20,$$

considerando as equações obtidas anteriormente $\epsilon_\theta = \epsilon_\phi = \frac{r-R}{r}$ e $\epsilon_r = \frac{t-t_0}{t}$, assim obtemos:

$$U = \frac{E}{(1+\nu).(1-2\nu)} \pi \Omega^2 \left\{ \int dr (r-R)^2 2[(1+\nu) + 2\nu] \right. \\ \left. + \int dr \frac{r}{t} (r-R)(t-t_0) 4\nu + \int dr \frac{r^2}{t^2} (t-t_0)^2 (1-\nu) \right\} \quad 3.21$$

Que pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$U = \frac{\pi E}{(1+\nu).(1-2\nu)} \Omega^2 \left\{ 2 \int dr (r-R)^2 + 4\nu \frac{t-t_0}{t} \int dr (r-R) \right. \\ \left. + (1-\nu) \frac{(t-t_0)^2}{t^2} \int dr r^2 \right\} \quad 3.22$$

Como para o primeiro caso, em que as espessuras dos filmes não são alterados para o problema, assim,

$$U = \frac{\pi E}{(1+\nu).(1-2\nu)} \Omega^2 \int dr (r-R)^2 \quad 3.23,$$

onde o termo $\int dr (r-R)^2$ corresponde apenas a equação do substrato, quando a componente não deformada corresponde à linha neutra. Para os outros filmes em estudo, deve-se acrescentar termos do tipo ΔL , que é a variação do comprimento após a deformação.

A integral $\int dr (r-R)^2$ já foi resolvida para o caso em uma dimensão, ou seja, $\int_{R-a}^{R+b} (r-R)^2 dr = \frac{1}{3}(b^3 + a^3)$, sabendo que anteriormente vimos que $b^3 + a^3 = t_1 \left(\frac{1}{4} t_1^2 + 3x^2 \right)$ e que $u = x\Omega$, assim a equação 3.23 se torna:

$$U_1 = \frac{\pi E_1}{(1 + \nu_1) \cdot (1 - 2\nu_1)} t_2 \left(\frac{1}{6} t_1^2 \Omega^2 + 2u_1^2 \right) \quad 3.24.$$

Agora para o caso em que a deformação não corresponde a linha neutra do substrato de raio R , sabendo que $L_1 = \Omega R$ e para cada filme teremos, então, L_2, L_3, \dots, L_n , tal que podemos escrever $L_j = L_1 - \Delta L$, como $L_1 = \Omega R$, então substituímos os termos ΩR por $\Omega R - \Delta L_j$ e mudando os limites de integração em r , calculamos a energia U_2 da seguinte forma:

$$U_2 = \frac{2\pi E_2}{(1 + \nu_2) \cdot (1 - 2\nu_2)} \int_{R-a-t_2}^{R-a} dr (r\Omega - R\Omega + \Delta L_2)^2 \quad 3.25,$$

com um pouco de algebrismo chegamos ao seguinte resultado:

$$U_2 = \frac{2\pi E_2}{(1 + \nu_1) \cdot (1 - 2\nu_1)} \left\{ t_2 \left[u^2 + [(t_1 + t_2)\Omega - 2\Delta L_2]u - \Delta L_2(t_1 + t_2)\Omega + \frac{\Omega^2}{3} \left(\frac{3}{4} t_1^2 + \frac{3}{2} t_1 t_2 + t_2^2 \right) \right] \right\} \quad 3.26.$$

Para um sistema com um único filme devemos fazer $U = U_1 + U_2$, assim teremos a energia total do sistema.

Dando prosseguimento ao processo, vamos calcular a tensão para o ângulo azimutal Ω , logo:

$$\sigma_\Omega = \frac{E_f}{(1 + \nu_f) \cdot (1 - 2\nu_f)} \frac{1}{t_2} \int_{R-a-t_2}^{R-a} dr [(1 - u_f)\epsilon_\Omega + \nu_f(\epsilon_r + \epsilon_\phi)] \quad 3.27,$$

sabendo que $\epsilon_\Omega = \epsilon_\phi = r\Omega - L_2 = (r - R)\Omega + \Delta L_2$ e que $\epsilon_r = t - t_0$, agora usando esses valores em 3.27, teremos:

$$\sigma_\Omega = \frac{E_f}{(1 + \nu_f) \cdot (1 - 2\nu_f)} \frac{1}{t_2} \int_{R-a-t_2}^{R-a} dr [(r - R)\Omega + \Delta L_2] \quad 3.28,$$

sendo que teremos como resultado:

$$\sigma_\Omega = \frac{E_f}{(1 + \nu_f) \cdot (1 - 2\nu_f)} \left[(\Delta L_2 + u) - \frac{1}{2} (t_1 + t_2)\Omega \right] \quad 3.29.$$

Dando prosseguimento, ou seja, calculando o mínimo de energia através de $\frac{\partial U}{\partial \Omega} = 0$ e $\frac{\partial U}{\partial u} = 0$ e, para simplificar a notação devemos dividir ambas as equações por π e sobretudo fazer uma troca de variável da seguinte maneira $E'_j = \frac{E_j}{(1+\nu_j).(1-2\nu_j)}$, então:

$$U = \frac{E'_1}{2} t_1 \left(\frac{1}{12} t_1^2 \Omega^2 + u^2 \right) + \frac{E'_2}{2} t_2 \left(\frac{\Omega^2}{3} \left(\frac{3}{4} t_1^2 + \frac{3}{2} t_1 t_2 + t_2^2 \right) + [(t_1 + t_2)\Omega - 2\Delta L_2]\nu + u^2 - \Delta L_2(t_1 + t_2)\Omega + \Delta L_2^2 \right) \quad 3.30,$$

$$u = \left(\frac{1}{6} \frac{t_1^2}{t_1 + t_2} + \frac{1}{6} \frac{E'_2 t_2}{E'_1 t_1} \frac{t_2^2}{t_2 + t_2} \right) \Omega \quad 3.31,$$

$$\Delta L_2 = \left(\frac{1}{6} \frac{E'_1 t_1 + E'_2 t_2}{E'_2 t_2} \frac{t_1^2}{t_1 + t_2} + \frac{1}{6} \frac{E'_1 t_1 + E'_2 t_2}{E'_1 t_1} \frac{t_1^2}{t_1 + t_2} + \frac{1}{2} (t_1 + t_2) \right) \Omega \quad 3.32.$$

De certa forma as equações 3.30, 3.31 e 3.32 já foram obtidas na literatura, então a tensão média se torna com esses resultados:

$$\sigma_2 = E'_2 \left[\Delta L_2 - \frac{1}{2} (t_1 + t_2) \Omega - u \right] \quad 3.33,$$

$$\sigma_2 = \frac{E'_2 \Omega}{6} \left[\frac{E'_1 t_1 + E'_2 t_2}{E'_1 t_2} \frac{t_1^2}{t_1 + t_2} - \frac{E'_1 t_1 + E'_2 t_2}{E'_1 t_1} \frac{t_1^2}{t_1 + t_2} + \frac{t_1^2}{t_1 + t_2} - \frac{E'_2 t_2}{E'_1 t_1} \frac{t_1^2}{t_1 + t_2} \right] \quad 3.34,$$

assim, fazendo as devidas simplificações, a equação 3.34 pode ser reescrita da forma:

$$\sigma_2 = \frac{1}{6} \frac{E'_1 t_1^2}{t_2} \Omega - \frac{1}{6} \Omega \frac{E'_1 t_1^2 - E'_2 t_2^2}{t_1 + t_2} \quad 3.35.$$

A equação 3.35 é de suma importância, pois é um resultado novo na literatura, na verdade é a equação de Stoney com uma correção.

O passo seguinte é introduzir as multicamadas dos filmes, ou seja, nesse caso a integral tem a forma análoga, porém com acréscimos de alguns termos, logo:

$$U_j = E'_j 2\pi \int_{(R-a)-T_j-t_j}^{(R-a)-T_j} \left((r - R)\Omega + \Delta L_j \right)^2 dr \quad 3.36,$$

onde: $T_j = \sum_{k=2}^{j-1} t_k$, sendo que T_j é o termo que envolve a soma das espessuras das camadas e $E'_j = \frac{E_j}{(1+\nu_j)(1-2\nu_j)}$, essa integral de 3.36 já foi calculada anteriormente, assim temos:

$$U_j = E'_j 2\pi \left[\frac{\Omega^2}{3} (3A_j^2 t_j + 3A_j t_j^2 + t_j^3) - (\Delta L_j \Omega) (2A_j t_j + t_j^2) + \Delta L_j^2 t_j \right] \quad 3.37,$$

onde: $A_j = \sum_{k=2}^{j-1} t_k + a$ e substituiindo a por u , fazendo a troca de variáveis, sendo $a = x + \frac{t_1}{2}$ e $u = x\Omega$, temos:

$$U_j = E'_j 2\pi \{ t_j [u^2 + (t_j + 2\tau_j)\Omega u + (\tau_j^2 + \tau_j t_j + t_j^2/3)\Omega^2 - 2\Delta L_j u - \Delta L_j (t_j + 2\tau_j)\Omega + \Delta L_j^2] \} \quad 3.38,$$

onde em 3.38 $\tau_j = \sum_{k=2}^{j-1} t_k + \frac{t_1}{2}$. Assim a energia total do sistema será $U = U_1 + \sum_{j=2}^N U_j$, sendo que $U_1 = E'_1 2\pi \left[t_1 \left(\frac{1}{12} t_1^2 \Omega^2 + u^2 \right) \right]$. Como feito anteriormente, vamos calular os mínimos de energia por $\frac{\partial U}{\partial \Omega} = 0$ e $\frac{\partial U}{\partial u} = 0$, assim temos:

$$\frac{\partial U}{\partial u} = 4\pi \left[E'_1 t_1 u + \sum_{j=2}^N E'_j t_j \left(u + \frac{t_j + 2\tau_j}{2} \Omega - \Delta L_j \right) \right] = 0 \quad 3.39,$$

assim isolando u , obtém-se:

$$u = \frac{\sum_{j=2}^N E'_j t_j \left(\Delta L_j - \frac{t_j + 2\tau_j}{2} \Omega \right)}{E'_1 t_1 + \sum_{j=2}^N E'_j t_j} \quad 3.40.$$

Agora fazendo o mesmo procedimento, só que com relação a Ω , temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial \Omega} &= 4\pi \left[\frac{E'_1 t_1^3}{12} \Omega + \sum_{j=2}^N E'_j t_j \left\{ \frac{t_j + 2\tau_j}{2} u + (\tau_j^2 + \tau_j t_j + t_j^2/3)\Omega - \Delta L_j \frac{t_j + 2\tau_j}{2} \right\} \right] \\ &= 0 \quad 3.41, \end{aligned}$$

assim isolando u , obtém-se:

$$u = \frac{\sum_{j=2}^N E'_j t_j \left(\Delta L_j \frac{t_j + 2\tau_j}{2} - (\tau_j^2 + \tau_j t_j + t_j^2/3)\Omega \right) - \frac{E'_1 t_1^3}{12}\Omega}{\sum_{j=2}^N E'_j t_j \frac{t_j + 2\tau_j}{2}} \quad 3.42,$$

As equações 3.40 e 3.42 tem a mesma intensidade, no entanto na equação 3.40 a descrição é mais bem definida, ou seja, possui uma melhor descrição.

Vamos, agora, substituir a equação 3.40 em 3.42 e agrupar os termos, então:

$$\begin{aligned} \frac{E'_1 t_1^3}{12}\Omega + \sum_{j=2}^N E'_j t_j \left(\Delta L_j \frac{t_j + 2\tau_j}{2} - (\tau_j^2 + \tau_j t_j + t_j^2/3)\Omega \right) - \Delta L_j \frac{t_j + 2\tau_j}{2} \\ + \frac{\sum_{j=2}^N E'_j t_j \left(\Delta L_j - \frac{t_j + 2\tau_j}{2}\Omega \right)}{E'_1 t_1 + \sum_{j=2}^N E'_j t_j} \sum_{j=2}^N E'_j t_j \frac{t_j + 2\tau_j}{2} = 0 \end{aligned} \quad 3.43,$$

com isso podemos escrever uma equação para ΔL_j e para a tensão, mas antes de mais nada vamos simplificar nossa notação, então:

$$B = E'_1 t_1 + \sum_{j=2}^N E'_j t_j \quad 3.44,$$

$$C = \sum_{j=2}^N E'_j t_j \frac{t_j + 2\tau_j}{2} \quad 3.45,$$

$$D = \sum_{j=2}^N E'_j t_j (\tau_j^2 + \tau_j t_j + t_j^2/3) \quad 3.46.$$

Agora usando B , C e D em 3.43, temos:

$$\Omega \left[\frac{E'_1 t_1^3}{12} + D - \frac{C^2}{B} \right] + \frac{C}{B} \sum_{j=2}^N E'_j t_j \Delta L_j - \sum_{j=2}^N E'_j t_j \frac{t_j + 2\tau_j}{2} \Delta L_j = 0 \quad 3.47.$$

Agora, passando a simplificação de ΔL_j , sabendo que $\Delta L_j = \left(\frac{\alpha_j - \alpha_1}{\alpha_N - \alpha_1} \right) \Delta L_N = A_j \Delta L_N$, e, introduzindo os termos B , C e D , temos:

$$\sum_{j=2}^N E'_j t_j \Delta L_j = \Delta L_N \underbrace{\sum_{j=2}^N E'_j t_j A_j}_{\bar{B}} = \Delta L_N \bar{B} \quad 3.48,$$

e

$$\sum_{j=2}^N E'_j t_j \frac{t_j + 2\tau_j}{2} \Delta L_j = \Delta L_N \underbrace{\sum_{j=2}^N E'_j t_j \frac{t_j + 2\tau_j}{2} A_j}_{\bar{C}} = \Delta L_N \bar{C} \quad 3.49.$$

Como consequência disso temos:

$$\Omega \left[\frac{E'_1 t_1^3}{12} + D - \frac{C^2}{B} \right] + \Delta L_N \left[\frac{\bar{C}\bar{B}}{B} - \bar{C} \right] = 0 \quad 3.50.$$

Pela equação 3.40, podemos escrever:

$$u = \frac{1}{B} \left[\Delta L_N \underbrace{\sum_{j=2}^N E'_j t_j A_j}_{\bar{B}} - C\Omega \right] \Rightarrow u = \frac{1}{B} [\bar{B}\Delta L_N - C\Omega] \quad 3.51.$$

Deste modo podemos calcular a linha de tensão dos filmes, ou seja:

$$\lambda_N = \sum_{j=2}^N \int_{R-a-T_j-t_j}^{R-a-T_j} \sigma_j dr = \sum_{j=2}^N E'_j \int_{R-a-T_j-t_j}^{R-a-T_j} [(r-R)\Omega + \Delta L_j] dr \quad 3.52,$$

assim:

$$\lambda_N = \sum_{j=2}^N E'_j \left[(\Delta L_j - u) - \frac{(t_j + 2\tau_j)}{2} t_j \Omega \right] \quad 3.53.$$

Agora usando a forma simplificada para ΔL_N , obtém-se:

$$\lambda_N = \Delta L_N \sum_{j=2}^N E'_j t_j A_j - u \sum_{j=2}^N E'_j t_j - \Omega \sum_{j=2}^N E'_j t_j \frac{t_j + 2\tau_j}{2} \quad 3.54.$$

Usando a equação 3.51 em 3.53, temos:

$$\lambda_N = \Delta L_N \bar{B} - \sum_{j=2}^N E'_j t_j \frac{\bar{B}\Delta L_N - \Omega C}{B} - \Omega C \quad 3.55,$$

$$\lambda_N = \Delta L_N \bar{B} \left[1 - \frac{\sum_{j=2}^N E'_j t_j}{B} \right] - \Omega C \left[1 - \frac{\sum_{j=2}^N E'_j t_j}{B} \right] \quad 3.56.$$

Assim a equação 3.56 pode ser reescrita, obtendo:

$$\lambda_N = \frac{E'_1 t_1}{B} (\Delta L_N \bar{B}) - \Omega C \quad 3.57.$$

Agora isolando ΔL_N da equação 3.50 e substituindo em 3.57, temos:

$$\lambda_N = \frac{E'_1 t_1}{B} \left(-\bar{B} \frac{\left(\frac{E'_1 t_1^3}{12} + D - \frac{C^2}{B} \right)}{\frac{C\bar{B}}{B} - \bar{C}} - C \right) \Omega \quad 3.58,$$

fazendo as simplificações na equação 3.58, obtemos:

$$\lambda_N = E'_1 t_1 \frac{\bar{B}}{\bar{C}B - C\bar{B}} \left[\frac{E'_1 t_1^3}{12} + D - \frac{C\bar{C}}{\bar{B}} \right] \Omega \quad 3.59.$$

A equação 3.59 há o predomínio do termo de Stoney, a primordial diferença em relação aos resultados encontrados na literatura para $1D$ é o fator $E'_j = \frac{E_j}{(1+\nu_j)(1-2\nu_j)}$ como fator de correção.

Ainda com relação a equação 5.59, é importante salientar que esse resultado também é novo na literatura e que foi feito também para a casca cilíndrica o mesmo procedimento feito para a esférica, sendo que o fator de correção passaria a ser $E'_j = \frac{E_j}{1-\nu_j}$. Então podemos dizer que a pesquisa realizada obteve três novos resultados na literatura, que é a equação 3.35 e a equação 3.59 para a casca esférica com correção $E'_j = \frac{E_j}{(1+\nu_j)(1-2\nu_j)}$ e para a casca cilíndrica com correção $E'_j = \frac{E_j}{1-\nu_j}$.

Foi feita uma avaliação das equações obtidas para amostras deformadas como casca esférica e cilíndrica. Para isso foram considerados os resultados obtidos por simulação por elementos finitos para a deposição de uma bicamada fina de titânio e alumínio sobre um substrato espesso de silício obtido por Finot [17], único fonte de dados disponível na literatura, posto que todos os trabalhos experimentais encontrados após uma extensa busca fazem uso da equação de Stoney na “medida” das tensões nas amostras.

Tais resultados foram comparados com outros modelos [16, 22, 30, 31]. Como mostra a Figura 3.2, no caso das medidas na amostra deformada como uma casca cilíndrica, que corresponde ao regime III da descrição de Finot [17], os resultados

obtidos por nossa abordagem produziram alguma melhoria em relação aos outros modelos, que já se aproximavam bastante dos valores obtidos nessa simulação numérica.

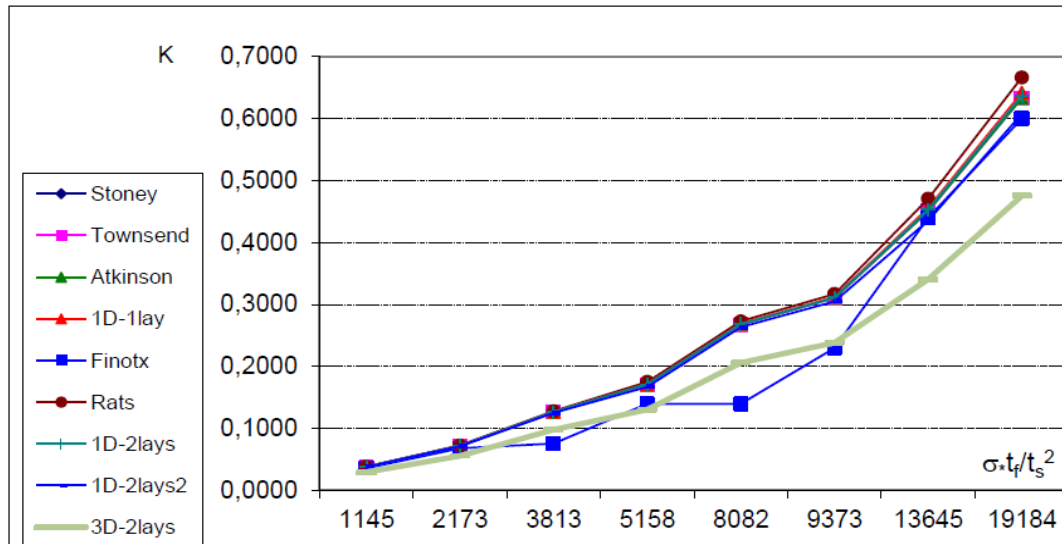


Figure 3.2 – Comparação dos resultados obtidos por diferentes modelos, incluindo o proposto (3D-2lays), com os valores obtidos na simulação por elementos finitos.

Por outro lado, a Figura 3.3 apresenta os valores obtidos para uma amostra deformada como uma casca esférica, que corresponde aos regimes I e II da descrição deFinot [17]. Como era de se esperar, os resultados obtidos por nossa abordagem confirmam os limites da equação de Stoney aos valores obtidos para amostras do regime I. No entanto, para o regime II, a nossa abordagem foi a que mais se aproximou dos valores obtidos por simulação utilizando elementos finitos.

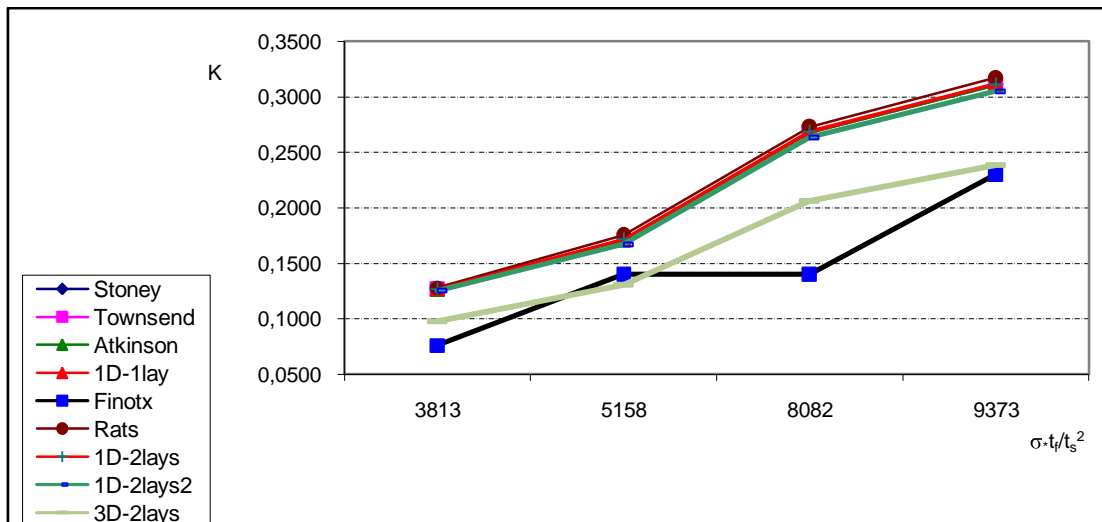


Figure 3.3 – Detalhe da comparação dos modelos para resultados no Regime I e II.

A seguir temos a figura 3.4 a seguir, mostra a comparação do modelo achado para a casca cilíndrica com o modelo de Miller [32] e com Stoney [14]. Pelo gráfico percebemos que o modelo do trabalho é melhor até que o modelo de Stoney, resultado novo na literatura que deve ser levado em conta.

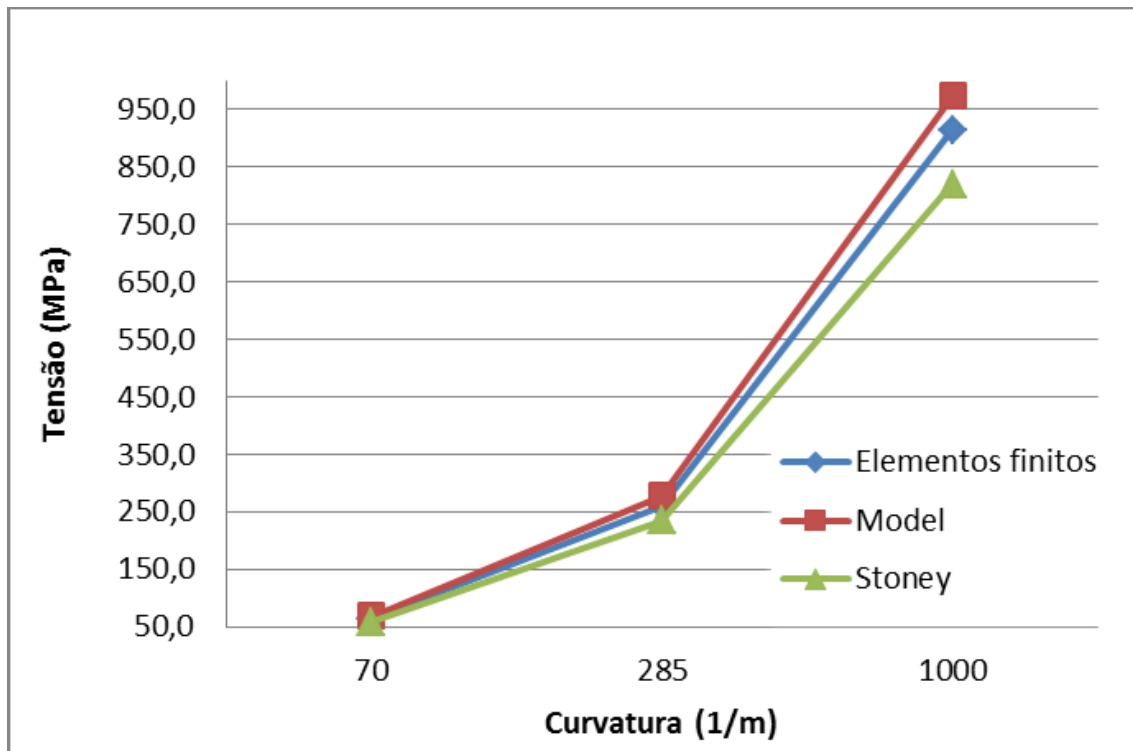


Figura 3.4 – Comparação dos resultados obtidos na simulação por elementos finitos (Miller) com os modelos de Stoney e o desenvolvido neste trabalho.

Vale ainda ressaltar que os termos B , C , D , \bar{B} e \bar{C} , são os termos de soma que envolvem a contribuição de todas as camadas individualmente, tanto com as espessuras de cada uma, mas também com as propriedades envolvidas de Young e Poisson. É de suma importância esse resultado, porque, *a priori*, é um resultado novo na literatura, pois essa contribuição será importante conforme as espessuras das camadas mais próximas do substrato, uma vez que comparando com o sistema em 1D, o fator de Poisson não é alterado, algo que é diferente para o nosso caso num sistema 3D com duas camadas.

Capítulo 4

Conclusão

A pesquisa sobre filmes multicamadas é um tema de grande relevância. A combinação de materiais diferentes pode gerar estruturas com propriedades superiores em relação aos materiais de camada única, o que permite a sua aplicação em diversas áreas da ciência relacionadas com o avanço tecnológico, o que justifica a investigação teórica e experimental sobre as características mecânicas das estruturas, a fim de obter uma melhor previsão para o desempenho e confiabilidade de materiais de revestimento.

Depois de muitos cálculos, discussão sobre o desenvolvimento de tensões e deformações em amostras compostas por múltiplas camadas de filmes finos em substratos com propriedades físicas diferenciada levando em consideração que há um aspecto de muita importância que é a existência de diferentes regimes nos quais a amostra deformada assume diferentes formas geométricas, formas estas que são específicas para cada regime. Para se ter essa análise por completa, foi aplicado no desenvolver do problema à técnica de minimização de energia de deformação da amostra no regime elástico. O resultado obtido pela equação 3.35 possui a predominância do termo de Stoney, contudo no sistema em 1D o termo corrigido é um resultado novo na literatura.

É importante salientar que a abordagem do problema por minimização de energia de deformação pode ser utilizada em algumas situações particularmente importantes. Primeiramente, vamos ao caso de amostras com multicamadas de substratos e filmes finos com propriedades diferentes para qual a abordagem tensorial é certamente muito mais complicado que a abordagem escalar. Como o nosso principal foco foi em relação a multicamadas, essa abordagem tem sua importância em estudos uma vez que as áreas de aplicações de multicamadas são muito diversificadas em nanotecnologias devido às funções integradas (resistência, mecânica, elétrica, térmica, magnética e óptica), no entanto, os modelos que trabalham em multicamadas são

carentes e, o nosso modelo proposto encontrou relações importantes para a contribuição das multicamadas, quando foi levada em consideração a soma das espessuras das camadas.

A segunda situação a ser tratada é o estado da transição a amostra deformada como uma casca esférica para o formato de um elipsóide, o que ocorre do regime III, segundo Finot [17]. Claro que para essa situação precisamos de um tratamento matemático elaborado e bem específico bem mais complicado que o nosso caso esférico.

Para que esse modelo seja usado e ter efeito na prática, faz-se necessário a validação do mesmo, com resultados experimentais, haja vista que numericamente os resultados são satisfatórios. Também é possível fazer um estudo no sentido de se colocar uma quantidade maior de camadas (50, 100, 150) e, então fazer a análise numérica e comparar com os outros resultados obtidos nesse trabalho. Isso tudo deve ser feito num possível trabalho futuro obtendo outros resultados para a equação 3.51 para a casca esférica e cilíndrica, respectivamente.

Em suma, é necessária a comparação de valores obtidos pelos diferentes modelos teóricos e por simulação numérica, as medidas independentes de deformação e tensão do filmes ou dos filmes, provavelmente obtidas por desvio de feixe de laser, que se mede a curvatura da amostra com difração de raios-X [33], que é uma medida independente da curvatura, onde se mede a tensão através da mudança de espaçamento da rede. Isso geraria uma série de interpretações que permitirá uma análise comparável dos modelos, incluindo o limite de aplicabilidade dos métodos de simulação numérica que, em todos os casos, apenas se levam em conta as deformações em regime elástico, visto que nos regimes I e II de Finot [17] ocorre uma bifurcação, que poderia caracterizar uma possível deformação plástica.

Referências Bibliográficas

- [1] R. P. Feynman, *There is Plenty of Room at the Bottom*, Caltech's Engineering and Science, ed Caltech's Eng. and Sci (1959).
- [2] F. Nery; *Minimização da Energia de Deformação de Filmes Finos com Substratos Espessos*. Dissertação de Mestrado, Universidade do Estado de Santa Catarina, 2009.
- [3] E. L. Nohara; *Materiais Absorventes de Radiação Eletromagnética (8-12 GHz). Obtidos pela combinação de Compósitos Avançados Dielétricos e Revestimentos Magnéticos*. Tese de Doutorado, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 2003.
- [4] S. L. Lee, D. Windover, *Phase, residual stress, and texture in triode-sputtered tantalum coatings on steel*, Surface and Coatings Technology, 108-109 (1998), 65-67.
- [5] V. Teixeira, M. Andritschky, W. Fischer, H. P. Buchkremer, D. StoËver; *Analysis of residual stresses in thermal barrier coatings*, Journal of Materials Processing Technology 92-93 (1999) 209-216.
- [6] M. Ohring; *Materials Science of Thin Films. Deposition and Structure*, Tsinghua University Press, Second Edition, 2002.
- [7] Z. Suo; *Fracture in Thin Films*, *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*, (Elsevier Science, 2001, 2nd edition, p 3290-3296).
- [8] D. Z. de Florio, F. C. Fonseca, E. N. S. Muccillo, R. Muccillo; *Materiais cerâmicos para células a combustível*, Cerâmica 50 (2004) 275-290.
- [9] R. Gerhard-Multhaupt; IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul. 9 (2002) 850.
- [10] A. Sein, B. J. Melde; R. C. Schroden; M. Bjorkqvist; J. Salonen; *Sensors and Actuators; A Physics* 112 (2004) 244.
- [11] Maissel e Glang, ed., *Handbook of thin film technology*, 1970.

- [12] L. B. Freund, S. Suresh; *Thin Films Materials Stress, Defect Formation and Surface*, Cambridge, 2003.
- [13] Z. Suo; *Fracture in Thin Films*, *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*, (Elsevier Science, 2001, 2nd edition, p 3290-3296).
- [14] G. G. Stoney, *The Tension of Metallic Films Deposited by Electrolysis*, (Proceedings of the Royal Society A, 82, 172, 1909).
- [15] P. A. Flinn, D. S. Gardner, W. D. Nix, *Measurement and Interpretation of Stress in Aluminum-Based Metallization as a Function of Thermal History*, (IEEE Transactions on Electron Devices, 34, 689, 1987).
- [16] C. A. Klein, *How accurate are Stone equation and recent modifications* (Journal of Applied Physics, 88, 5487, 2000).
- [17] M. Finot, I. A. Blech, S. Suresh, E. H. Fujimoto, *Large deformation and geometric instability of substrates with thin-film deposits*, (Journal of Applied Physics, 81, 3457, 1997).
- [18] S. Timoshenko, S. Woinowski, Krieger; *Theory of Plates and Shells*, (McGraw-Hill, New York, 1959, p 80).
- [19] I. A. Blech, I. Blech, M. Finot, *Determination of thin-film stresses on round substrates*, (Journal of Applied Physics, 97, 113525, 2005).
- [20] I. M. Zhu and P. B. Kirby, *Governing equation for the measurement of nonuniform stress distribution in films using substrate deformation technique*, Applied Physics Letters, 88 171903, 2006.
- [21] P. H. Townsend, D. M. Barnet, T. A. Brunner; *Elastic relationships in layer composite media approximation for the case of thin films on a thick substrate*, Journal of Applied Physics, 62, 4438, 1987.
- [22] A. Atkinson; Br Ceram. Proc. 54,1 (1995).
- [23] A. Brenner and S. Senderoff, J. Res. Natl. Bur. Stand. 42, 105 (1949).
- [24] G. C. A. M. Janssen, M. M. Abdalla, F. van Keulen, B. R. Pujada, B. van Venrooy, *Celebrating the 100th anniversary of the Stoney equation for film stress: Developments*

from polycrystalline steel strips to single crystal silicon wafers, (Thin Solid Films, 517 (2009) 1858-1867).

[25] Callister Jr., W. D. Materials Science and Engineering, 7^a Ed, New York: John Wiley & Sons, INC, 2007.

[26] Fung, Y. C., Foundations of Solid Mechanics, Prentice – Hall.

[27] Ferdinando P. Beer, JR E. Russel Johnston, Resistência dos Materiais (Makron Books, 3^a Edição).

[28] J. D. Finegan e R. W. Hoffman, Transaction of the 8th. Vac. Symp. And 2nd.Int. Congress 2, 935 (1961).

[29] Lacerda, M.M., Chen, Y.H., Chung, Y.W., Guruz, M.U. and B. Zhou.J. Vac. Sci. Tech. A, 17, 2915 - 2919 (1999).

[30] Y. F. Li, B. Yao, Y. M. Lu, C. X. Cong, Z. Z. Zhang, Y. Q. Gai, C. J. Zheng, B. H. Li, Z. P. Wei, D. Z. Shen, and X. W. Fan, L. Xiao, S. C. Xu, and Y. Liu. App. Phys. Lett. 91, 021915 (2007).

[31] J. M. Pureza, M. M. Lacerda. A. L. Oliveira, J. F. Fragalli, R. A. S. Zanon, *Enhancing accuracy to Stoney Equation*, Applied Surface Science (2009).

[32] D. C. Miller, C. F. Herrmann, H. J. Maier, S. M. George, C. R. Stold and Ken Gall, Thin Solid Films 515 (2007) 3208.

[33] Rats, D., Bimbault, L., Vandenbulcke, L., Herbin, R. and Badawi, K. J. Appl. Phys. 78, 4994 (1995) and Brenner, A. and Senderoff, S. J. Res. Natl. Bur. Stand. 42, 105 (1949).