UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA - UDESC

CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS - CCT

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA - PPGF

Formação: Mestrado em Física

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO OBTIDA POR

FÁBIO NERY

MINIMIZAÇÃO DA ENERGIA DE DEFORMAÇÃO DE FILMES FINO COM SUBSTRATOS ESPESSOS

Joinville

2009

Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA - UDESC

CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS - CCT

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA - PPGF

Formação: Mestrado em Física

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO OBTIDA POR

FÁBIO NERY

MINIMIZAÇÃO DA ENERGIA DE DEFORMAÇÃO DE FILMES FINOS COM SUBSTRATOS ESPESSOS

Apresentada em 31/07/2009 Perante a Banca Examinadora:

Dr. Júlio Miranda Pureza - CCT/UDESC - (presidente)

Dra. Mônica de Mesquita Lacerda - CCT/UDESC

Dr. Fábio Mallmann Zimmer - CCT/UDESC

Dr. Ricardo Antonio De Simone Zanon - CCT/UDESC

Dr. Carlos Maurício Lepienski - UFPR

Joinville

2009

UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA - UDESC

CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS - CCT

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA - PPGF

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Mestrando: Fábio Nery

Orientador Prof. Dr. Júlio Miranda Pureza - CCT/UDESC

MINIMIZAÇÃO DA ENERGIA DE DEFORMAÇÃO DE FILMES FINOS COM SUBSTRATOS ESPESSOS

DISSERTAÇÃO APRESENTADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM FÍSICA DA UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA, CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS - CCT, ORIENTADA PELO PROF. DR. JÚLIO MIRANDA PUREZA.

Joinville

2009

FICHA CATALOGRÁFICA

NOME: Fábio Nery
DATA DEFESA: 31/07/2009
LOCAL: Joinville, CCT/UDESC
NÍVEL: Mestrado Número de ordem: **06** - CCT/UDESC
FORMAÇÃO: Física **ÁREA DE CONCENTRAÇÃO:** Física
TÍTULO: Minimização da Energia de Deformação de Filmes Finos com Substratos Espessos **PALAVRAS-CHAVE:** Equação de Stoney. Tensão em Filmes Finos. **NÚMERO DE PÁGINAS:** 53 p.
CENTRO/UNIVERSIDADE: Centro de Ciências Tecnológicas da UDESC
PROGRAMA: Pós-graduação em Física - PPGF
CADASTRO CAPES: 41002016011P-4
PRESIDENTE DA BANCA: Dr. Júlio Miranda Pureza **MEMBROS DA BANCA:** Dr. Carlos Maurício Lepienski, Dra. Mônica de Mesquita Lacerda, Dr Fábio Mallmann Zimmer, Dr Ricardo Antonio De Simone Zanon

Agradecimentos

Faço abaixo um agradecimento especial à algumas pessoas e entidades que tiveram participação neste trabalho

Professor Júlio Miranda Pureza (meu orientador)

CAPES e UDESC (pela bolsa de estudos e infra-estrutura oferecida)

Departamento de Física da UDESC

Minha esposa, filha e meus pais que sempre me apoiaram e foram a força motivadora para o término deste trabalho

Professora Mônica de Mesquita Lacerda que foi uma das pessoas mais importantes para a realização deste trabalho, o Professor Ricardo Antonio De Simone Zanon e a todos do grupo de Optica

Denilso Palaoro e a todos os alunos do mestrado que contribuiram de alguma forma.

Sumário

1 Introdução **11**

2 Revisão Teórica **16**

2.1 Abordagem Tensorial do Problema 16

2.2 Método Variacional e Minimização de Energia 24

2.3 Os Três Regimes de Deformação de uma Amostra 30

3 Aplicações da Metodologia **32**

3.1 Casca Esférica 32

3.2 Casca Cilíndrica 39

4 Conclusão **49**

Bibliografia **51**

Lista de Figuras

1.1 Temos uma delaminação e um descolamento do filme [9]. 13
1.2 Diagrama do experimento que utiliza o desvio de um feixe de laser [1]. . . . 14

2.1 coeficiente de Poisson. 18
2.2 Um elemento do substrato com deposição do filme [20]. 18
2.3 Forças resultantes nas direções x, y e z [21]. 20
2.4 Momentos resultantes em torno do eixo x e y [21]. 20
2.5 Gráfico do erro pela razão da espessura em relação à razão dos módulos biaxiais para a equação de Stoney [17]. 22
2.6 Gráfico do erro pela razão da espessura em relação à razão dos módulos biaxiais para o modelo de Atkinson [17]. 23
2.7 Gráfico do erro para o modelo de Brenner-Senderoff,repare que para este a porcentagem de erros varia de 500% à -1500%! [17]. 24
2.8 (a) Tensões lineares (σ_i) e de cisalhamento (τ_{ij}). (b)Tensões de cisalhamento no plano y-z, onde o primeiro índice indica a direção normal ao plano e o segundo a direção do cisalhamento. (c) Deformação angular causada pela tensão de cisalhamento [30] 26
2.9 (a) substrato não deformado. (b) substrato deformado [1]. 27
2.10 Distribuição das tensões, temos região sob tração e sob compressão [26]. . . 27
2.11 Gráfico mostrando a bifurcação os três regimes de comportamento da deformação, e também compara a simulação (linha continua) a Stoney (linha tracejada) e as medidas experimentais obtidas (circulos) [18]. 30

3.1 Casca esférica [25]. 34

3.2 Gráfico da curvatura (K) em função da $\sigma t_f/t_s^2$ [25]. O modelo desenvolvido concorda com outras formulações [17, 21, 23, 24] no regime I e se aproxima dos resultados por elementos finitos [18] no regime II [25]. 39
3.3 Figuras representando a deformação cilindrica. Figura (a) Visão tridimensional. Figura (b) Visão no plano x-y 40
3.4 Figura representando a deformação no plano ρ - z. 40
3.5 Gráfico da curvatura (K) em função da $\sigma t_f/t_s^2$. Os pontos no regime III para o modelo Casca Cilindrica. 47

Resumo

O objetivo deste trabalho é a obtenção de um modelo tridimensional, que descreva as tensões que surgem em filmes finos depositados em substratos espessos planos. Para isto é utilizado o método da minimização da energia de deformação da amostra (filme fino/substrato), já descrito e utilizado na literatura [1] para uma descrição unidimensional do problema. A vantagem deste método é sua maior simplicidade em relação a uma abordagem tensorial do problema, uma vez que envolve uma grandeza escalar (energia de deformação) de identificação mais simples que as diversas componentes de um tensor de tensões. Após a apresentação do problema físico e da metodologia, é feita a aplicação a duas situações de interesse: para uma amostra submetida a valores de tensão menos elevados, adquirindo uma forma aproximadamente esférica e para uma amostra submetida a valores mais elevados de tensão, adquirindo uma forma aproximadamente cilíndrica. Nestes dois casos se obteve uma fórmula que relaciona a linha de tensão do filme com a curvatura da amostra, que é então comparada com outras formulações.

Palavras-Chave: Equação de Stoney. Tensão em Filmes Finos.

Abstract

This work proposes a three-dimensional system for modelling stress in thin films deposited on plane substrates much thicker than the film itself. The approach is the minimization of the deformation energy of the sample (substrate + film), already described in the literature for a one-dimensional system [1]. The main advantage of this method compared with the tensor analysis is the fact that it is easier to work with a scalar quantity (the deformation energy) than with a set of tensor components. After the presentation of the physical problem and the methodology, it is applied to two situations of interest: a sample subjected to smaller values of stress being deformed as a small spherical surface with large curvature radius and a sample subjected to larger stress being deformed as a cylindrical surface. In both cases, it is obtained a formula that relates the tension line of the film with the curvature of the sample, whose results are then compared with other formulations.

Key Words: Stoney Equation. Tension in Thin Films.

Capítulo 1

Introdução

Em 1959, Richard Feynman apresentou na conferência There is Plenty of Room at the Bottom"[2] várias possibilidades de descobertas científicas e tecnológicas derivadas da exploração das nanoestruturas, estruturas tridimensionais que possuem pelo menos uma de suas dimensões na faixa de 1nm a 100nm (10^{-9}m a 10^{-7}m).

Para tal investigação seria necessário o desenvolvimento de técnicas e ferramentas para manipulação e análise da matéria em escala atômica e molecular. No início dos anos 80, o advento do Microscópio de Tunelamento (Scanning Tunneling Microscope, STM) permitiu a visualização do universo nanoscópico mas, para estudar especificamente as nanoestruturas, diversas técnicas de preparação, microscopia e análise vem sendo desenvolvidas por diversos centros de pesquisa [3].

O estudo de nanoestruturas é de extrema relevância tanto do ponto de vista científico quanto tecnológico. Em especial, a indústria de informática é uma das principais áreas para aplicação de nanoestruturas e devido ao grande dinamismo deste mercado, algumas descobertas científicas são rapidamente implementadas.

Os filmes finos desempenham uma função essencial nos dispositivos eletrônicos e circuitos integrados. São utilizados nas conexões das regiões ativas de um dispositivo, na comunicação entre dispositivos, no acesso externo aos circuitos isolando camadas condutoras, como elemento protetor do dispositivo ao ambiente externo, como fonte de dopante e como barreira para a dopagem. Os filmes finos podem ser condutores, semicondutores ou isolantes, normalmente crescidos termicamente ou depositados a partir da fase vapor

[3].

As expectativas quanto a aplicações para nanoestruturas não se resumem à indústria de informática. Características como tamanho reduzido, padrão de organização complexo e alta densidade de compactação são aplicáveis em outros campos de pesquisa e desenvolvimento tecnológico [4][5].

Filmes de materiais absorvedores de radiação eletromagnética (MARE) têm uma ampla aplicação nas indústrias aeroespacial, militar e na telecomunicação civil. Isto se dá no seu uso corrente em circuitos microeletrônicos, células solares, sensores ópticos, sistemas de controle de ruídos espúrios e de interferência eletromagnética, bem como materiais de camuflagem [4].

Filmes finos de materiais com propriedade mecânicas específicas são amplamente utilizados em várias áreas industriais onde alta resistência a abrasão, baixo coeficiente de fricção, estabilidade a altas temperaturas, e alta dureza são necessárias. Em particular, visando prolongar a vida de ferramentas, filmes de nitreto de Titânio (TiN) são usualmente escolhidos como revestimento protetor, devido a alta resistência a oxidação e corrosão. Filmes a base de Tântalo têm sido atualmente estudados para serem utilizados no interior de tubulações com grandes pressões e que transportam materiais muito reativos [6]. Filmes a base de Zircônia são usados para barreira térmica de componentes metálicos sob efeito de altas temperaturas como ocorre em turbinas de gás e peças de motor a diesel [7].

A aplicação de filmes finos engloba também áreas de desenvolvimento recente, como a optoeletrônica, fotônica e plasmônica. Tais aplicações incluem os diversos tipos de células fotosensíveis, geradores de luz, moduladores, displays, detectores de bolhas em tubulações e materiais nanoporosos utilizados em células combustíveis [8][9][10]. No entanto, várias dessas aplicações dependem de um melhor entendimento mecânico destes materiais [11][12].

Os processos de deposição de filmes finos sobre substratos geram tensões na interface destes dois materiais, devido a uma série de fatores, dos quais pode-se destacar, o descasamento dos parâmetros de rede, reações químicas entre os elementos envolvidos, dopagem por difusão ou implantação, transição de fase e finalmente devido à diferença de coeficientes de dilatação do filme fino e do substrato [13]. Este último deve-se ao fato

da deposição do filme fino ser feita a temperaturas acima da ambiente. Terminado o processo de deposição, os dois materiais têm comportamentos diferentes, gerando assim uma tensão "intrinseca"na interface entre o filme fino e o substato. Esta tensão causa uma deformação na amostra que ganha uma curvatura [5].

As tensões que surgem nas amostras podem provocar defeitos na interface do filme fino/substrato. Falhas, como delaminação ou descolamento do filme, como mostradas na figura 1.1, podem gerar perdas no processo de produção em massa da indústria tecnológica.

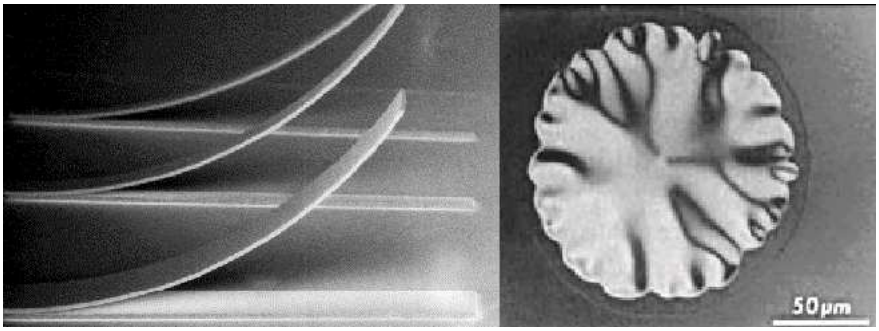


Fig. 1.1: Temos uma delaminação e um descolamento do filme [9].

Deste modo, o estudo das propriedades mecânicas do conjunto filme fino e substrato é de fundamental importância para o desenvolvimento da nanotecnologia na medida que garante a durabilidade e confiabilidade de uma série de produtos.

O primeiro modelo de determinação das tensões em amostra filme fino/substrato foi feita por Stoney [14]. Apesar de extremamente simples, tal modelo é frequentemente utilizado, pois relaciona a tensão que surge no filme fino à curvatura induzida pelo crescimento do filme no substrato. A medida da curvatura pode ser feita através de vários métodos [15], mas destaca-se aqui por ser um método não destrutivo o método por desvio de um feixe de laser, uma maneira rápida, e de fácil interpretação de obtenção de dados, utilizando um arranjo experimental de baixo custo e fácil construção e manutenção. Tem-se um feixe de laser que incide na amostra e reflete o feixe para um fotodiodo, que faz a detecção. Em seguida é feita a incidencia do feixe, mas em outra posição da amostra. Este procedimento é feito várias vezes até que se faça a varredura total da amostra. Para a amostra plana sem deformação, o feixe refletido no fotodiodo incide sempre na mesma posição, mesmo incidindo em posições diferentes da amostra (como mostra a figura 1.2(a)). Para a amostra deformada (com uma curvatura de raio R) o

feixe refletido no fotodiodo incide em posições diferentes ao variar a posição na amostra (como mostra a figura 1.2(b)). O deslocamento do feixe refletido no fotodiodo pode ser relacionado á curvatura da amostra [1].

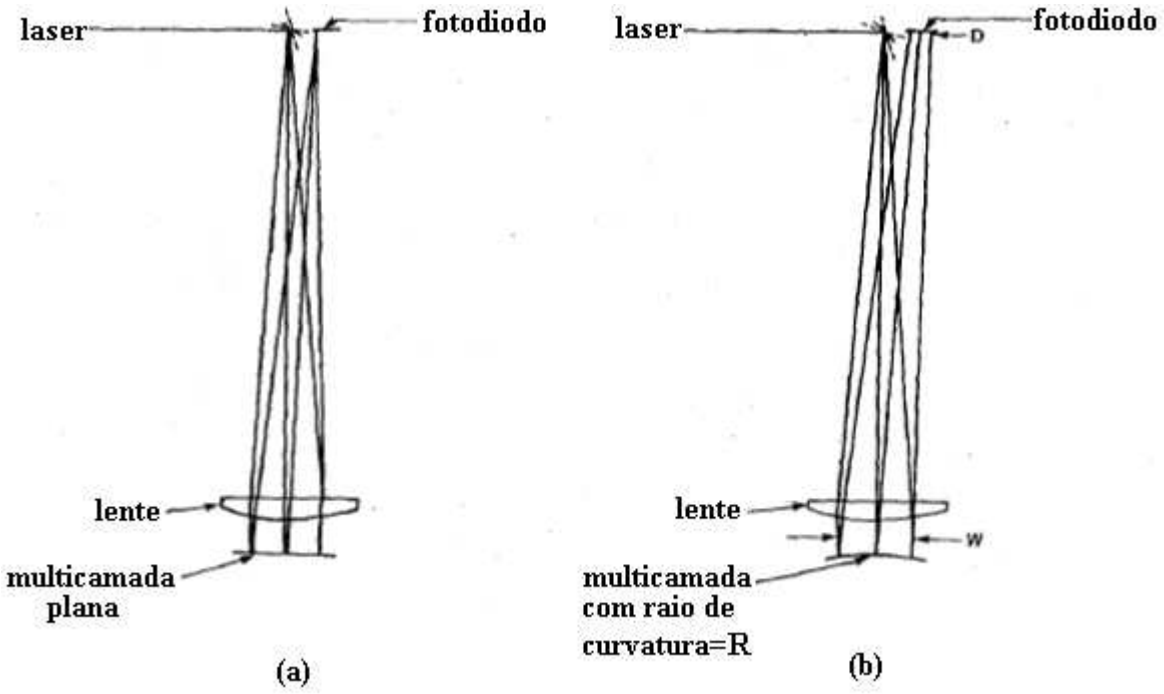


Fig. 1.2: Diagrama do experimento que utiliza o desvio de um feixe de laser [1].

Apesar da simplicidade e de sua ampla utilização, o modelo de Stoney, se resente de uma série de restrições. O modelo descreve bem sistemas que apresentam baixos valores de tensão, isto é, pequenas deformações onde temos curvaturas uniformes. Em geral, a equação de Stoney subestima os valores de tensão para situações de grandes deformações e para multicamadas conforme os artigos de Klein [17] e Finot [18], o que limita sua correta aplicação, ainda mais nas suas aplicações que necessitam de resultados cada vez mais precisos e confiáveis.

Nesta busca de melhores modelos surgiu uma grande quantidade de trabalhos propondo alterações ao modelo de Stoney e novas abordagens. Partindo do trabalho de Timoshenko [19] que faz uma abordagem considerando o caráter bidimensional da deformação e acrescenta um termo de correção à equação de Stoney. Passando pelos trabalhos de Blech [20] e Zhu [21] que partiram do trabalho de Timoshenko e Woinowski-Krieger [19] já considerando o caráter tridimensional da amostra, sendo que a diferença do trabalho de Zhu

em relação ao de Blech é que considerou as tensões tendo componentes nas três dimensões e que a amostra possui multicamadas. Considerando também para multicamadas, Klein [17] partindo do trabalho de Townsend [22] obtém um fator de correção à equação de Stoney, Klein ainda avalia outras duas alterações à equação de Stoney propostas para multicamadas, feitas por Atkinson [23] e por Brenner-Senderoff [24]. Na busca de uma descrição cada vez mais precisa Finot [18] utilizou simulação numérica, método dos elementos finitos, onde consegue incluir espessura variável, curvatura não uniforme, grandes deformações, cálculo de tensões locais e deformações geométricas. Considerações estas que tornariam o problema através de uma abordagem analítica muito complicada. Faz um trabalho muito detalhado sobre as deformações geométricas comparando com dados experimentais. E finalmente Flinn [1], que numa descrição unidimensional utilizando o método variacional, minimização da energia de deformação da amostra, busca um método mais simples, em relação ao cálculo tensorial, e tão eficiente quanto, chegando ao mesmo resultado que temos na literatura. Estes trabalhos apresentados brevemente e que serão abordados mais detalhadamente na revisão teórica, nortearam o trabalho de Pureza et al 2009 [25], que será apresentado no capítulo Casca Esférica, que é a base do presente trabalho.

Objetivo deste trabalho é a construção de uma abordagem analítica e razoavelmente simples para o problema que descreve os termos que surgem nos filmes finos depositados em substratos espessos planos, de forma a obter resultados mais próximos que a equação de Stoney sem a complexidade de uma análise computacional do problema.

Capítulo 2

Revisão Teórica

2.1 Abordagem Tensorial do Problema

O primeiro modelo para a determinação das tensões em amostra filme fino/substrato foi elaborada por Stoney em seu artigo "The Tension of Metallic Films deposited by Electrolyis"[14], que considerou uma fita de aço fino (substrato) de espessura t_s, com uma camada de níquel (filme fino) de pequena espessura t_f. A fita é curvada pelo filme, de forma que b é a profundidade da superfície da fita em relação ao eixo neutro sendo dA um elemento perpendicular a direção x_1 de tal modo que tanto a soma das forças longitudinais quanto os momentos das forças na barra são nulos.

Assim, como todas as abordagens que utilizam análise de tensões, parte das condições de equilíbrio das forças e momentos, associando a tensão que surge à curvatura da amostra ($K = 1/R$) [26]:

$$\sigma t_f = \frac{1}{6} E_s t_s^2 K \tag{2.1}$$

onde E_s é o módulo de Young (módulo de elasticidade) do substrato de $K = 1/R$ é a curvatura da amostra.

Assim a equação de Stoney indica uma relacão linear entre a curvatura da amostra e a tensão, e que as propriedades físicas do filme (módulo de elasticidade) não interferem, havendo apenas contribuição do filme através da sua espessura. Não obstante a equação

de Stoney é uma descrição bastante simplificada do problema, uma vez que assumiu a tensão uniaxial. Além disso, são feitas as seguintes suposições:

- as espessuras do filme (t_f) e do substrato (t_s) são consideradas uniformes,
- vale a condição $t_f \ll t_s \ll$ 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.

Não obstante, a equação de Stoney é amplamente utilizada, devido ao fato de fornecer bons resultados, mesmo quando a amostra apresenta tensões anisotrópicas, espessuras variáveis, multicamadas e quando a espessura do filme não é muito menor do que a espessura do substrato, situações estas que vão além dos limites da proposta de Stoney.

Com a necessidade de uma maior precisão na determinação das tensões, surgiram vários trabalhos fazendo novas considerações. Timoshenko e Woinowski-Krieger [19] propuseram uma abordagem bidimensional para o problema, incorporando o fato da amostra ser uma placa plana. A equação 2.2, por eles obtida, parte da equação de equilibrio dos momentos. Através deste tratamento tensorial há o aparecimento do termo de correção para a equação de Stoney, o chamado de módulo biaxial $(1-\nu)$, que depende do coeficiente de Poisson (ν). Para materiais isotrópicos o coeficiente de Poisson indica que havendo um alongamento do material produzido por uma força agindo em uma dada direção, haverá uma contração nas outras duas direções transversais [30], como mostra a figura 2.1.

$$\sigma = \frac{E_s \cdot {t_s}^2}{6\,(1-\nu_s)\,t_f} K \tag{2.2}$$

Seguindo a mesma abordagem do trabalho de Timoshenko e Woinwski-Krieger, Blech [20] considerou um segmento do substrato com dimensões dx, dy e altura h, como mostra a figura 2.2. A equação de equilibrio para os momentos atuando em tal segmento inclue um termo adicional em relação ao trabalho de Timoshenko. Este termo é resultante das forças tangenciais aplicadas no segmento por uma tensão linear não uniforme, T.

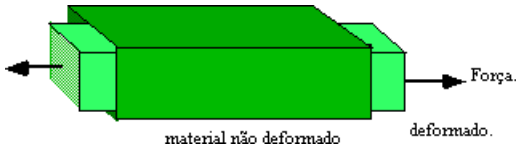


Fig. 2.1: coeficiente de Poisson.

A não uniformidade da tensão linear se manifesta em tração na superfície do substrato, necessária para preservar o equilibrio. Tal tração é considerada paralela à superfície do substrato e é responsável pelo momento que resulta na curvatura da amostra. No caso de tensões isotrópicas $T_{xx} = T_{yy} = T(x, y)$, a figura 2.2 representa uma amostra e o conjunto de forças e momentos envolvidos, estes medidos em relação ao centro da amostra, que gera a curvatura.

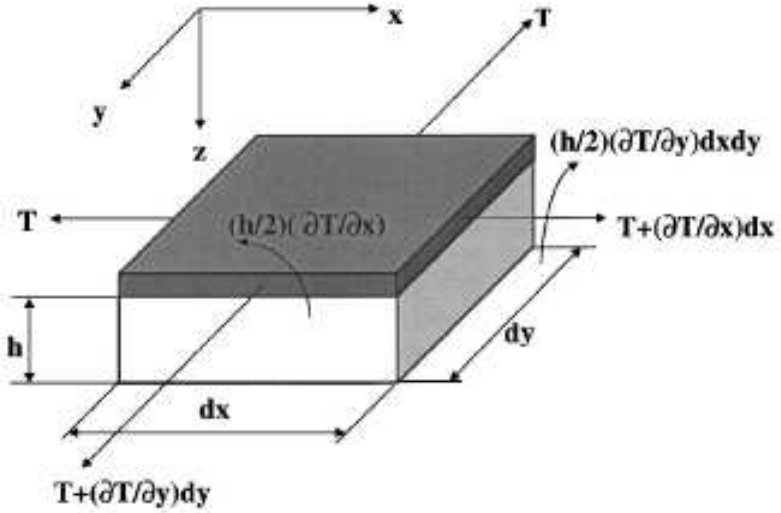


Fig. 2.2: Um elemento do substrato com deposição do filme [20].

Blech obteve uma equação em coordenadas polares, por considerar amostras na forma de disco. A tensão linear na equação 2.3 é descrita em função de D, onde D (equação 2.4) é o termo de rigidez à curvatura do substrato, e em função de w (equação 2.5) que está relacionado ao deslocamento vertical da superfície na direção $\hat{z}$.

$$T(r, \theta) = \frac{2D}{h}\left[\Delta w + A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} A_n r^n cos(n\theta) + B_n sin(n\theta)\right] \tag{2.3}$$

$$D = \frac{Eh^3}{12\left(1-\nu^2\right)} \tag{2.4}$$

$$\Delta w = \Delta\left(k_x + k_y\right), \quad \text{sendo} \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \tag{2.5}$$

Com o objetivo de ilustrar o procedimento, Blech considerou o caso em que a simetria do sistema para qualquer variável é independente de θ e um raio de curvatura uniforme, e obteve a equação de Stoney.

A partir da modelagem do problema, Blech utilizou uma simulação por elementos finitos com a qual fez estimativas de tensão em diferentes regimes. Além disso, verificou que a equação de Stoney pode ser usada em algumas situações, mas em geral subestima os valores de tensão e apresenta grandes erros para tensões elevadas não uniformes.

- Para caso simétrico ($T_x = T_y$), com uma razão da espessura da amostra filme fino/substrato menor que 1/500 (proporções utilizadas em microeletrônica) e para razões de módulo de elasticidade do filme em relação ao substrato iguais ou menores que 1, o erro da equação de Stoney é de aproximadamente 1%;

- Num sistema real temos curvaturas locais. Localmente, a tensão não é proporcional à curvatura. Há curvaturas menores que as esperadas em regiões de grandes tensões, obtendo valores significativamente diferentes dos previstos pela equação de Stoney;

- A precisão na medida da tensão local é inversamente proporcional à espessura do filme e quanto maior a relação t_s/t_f, mais precisa é a tensão calculada.

Seguindo a mesma linha de Timoshenko e Blech, Zhu [21] admite uma placa plana sujeita a tensões não uniformes $T_i\left(x,y\right) = \tau_i t$, onde $\tau_i t$ a tensão no filme fino por unidade de comprimento, t é a espessura do filme, e $i = x, y$, e faz uma descrição tridimensional das forças que estão atuando na amostra. Além disso, a amostra possui camadas de materiais diferentes, sendo $k = 1$ o substrato e $k = 2, ..., n$ as diversas camadas de filmes finos. Não obstante, admite algumas simplificações ao problema:

- a placa tem espessura constante;

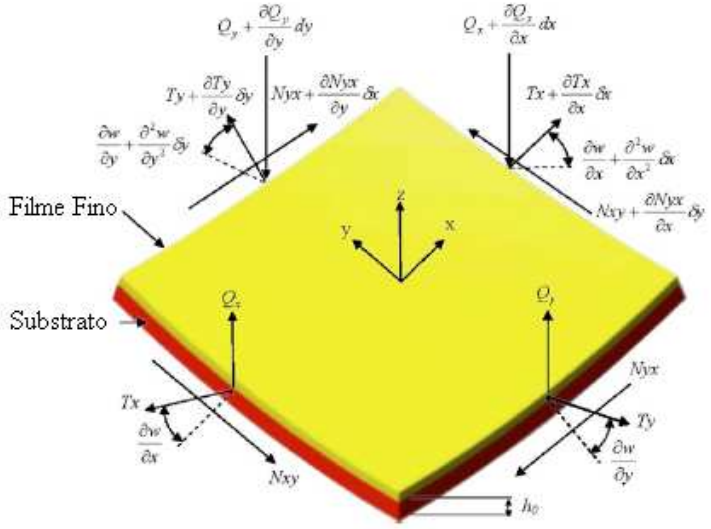


Fig. 2.3: Forças resultantes nas direções x, y e z [21].

- a deformação do substrato é completamente devido à tensão do filme fino.

As forças resultantes nas direções x, y e z e os momentos sob os eixos x, y agindo no plano neutro posicionado em $z = h_0$ são mostrados nas figuras 2.3 e 2.4. Zhu parte da situação de equilíbrio, de forma a satisfazer: a equação 2.6, que representa o equilíbrio das tensões lineares, a equação 2.7, que representa o equilíbrio das forças de cisalhamento e a equação 2.8, que representa o equilíbrio dos momentos:

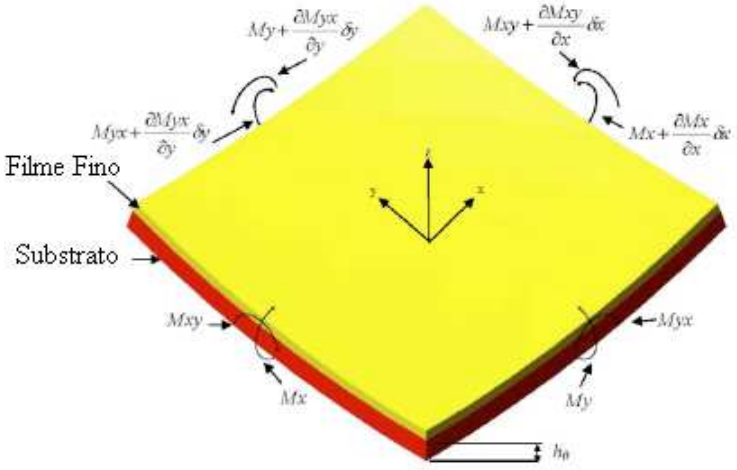


Fig. 2.4: Momentos resultantes em torno do eixo x e y [21].

$$(T_x, T_y, N_{xy}) = \int_{-h_0}^{h+t-h_0} \left(\sigma_x^{(k)}, \sigma_y^{(k)}, \sigma_{xy}^{(k)}\right) dz \tag{2.6}$$

$$(Q_x, Q_y) = \int_{-h_0}^{h+t-h_0} \left(\sigma_{Zx}^{(k)}, \sigma_{yZ}^{(k)}\right) dz \tag{2.7}$$

$$(M_x, M_y, M_{xy}) = \int_{-h_0}^{h+t-h_0} \left(\sigma_x^{(k)}, \sigma_y^{(k)}, \sigma_{xy}^{(k)}\right) dz \tag{2.8}$$

Pode ser notado que neste trabalho o quadro de tensões é anisotrópico , ($T_x \neq T_y$ e $\sigma_x \neq \sigma_y$). Além disso, T_x e T_y não são paralelos depois da deformação do substrato, existem componentes horizontais e verticais destes no plano $x - y$ e na direção z. Estas duas componentes são responsáveis não somente pela deformação, mas também pelo momento que produz curvatura no substrato. Tal análise tem por resultado uma equação relacionando a função tensão Φ (equações 2.10), a deformação do substrato w (equações 2.11) e o termo de dureza da amostra $D_{ij} = \sum_{k=1}^{n} \int_{z_k}^{z_k+h_k} Q_{ij}^{(k)} z^2 dz$.

$$\begin{aligned} &D_{11}\frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + 2\left(D_{12} + 2D_{66}\right)\frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial}{\partial x^2}\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2}\right)\frac{h}{2} \\ &\frac{\partial}{\partial y^2}\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}\right)\frac{h}{2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2}\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}\frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + 2\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y}\frac{\partial^2 w}{\partial y \partial x} \end{aligned} \tag{2.9}$$

$$T_x = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2}, \quad T_y = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}, \quad T_z = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} \tag{2.10}$$

$$k_x = \frac{\partial^2 w\left(x, y\right)}{\partial x^2}, \quad k_y = \frac{\partial^2 w\left(x, y\right)}{\partial y^2}, \quad k_{xy} = -2\frac{\partial^2 w\left(x, y\right)}{\partial x \partial y} \tag{2.11}$$

Resolvendo a equação 2.9, sujeita a condições de contorno e a distribuição de w para uma dada geometria pode-se em princípio obter a distribuição das tensões em todos os pontos da multicamada, porém a maioria dos casos é resolvida apenas numericamente. Com a intenção de situar a equação em relação aos trabalhos já existentes, Zhu considera o caso de uma tensão isotrópica e pequenas deformações, resgatando a solução obtida por Blech, ao passo que, para uma tensão constante recai na solução de Stoney.

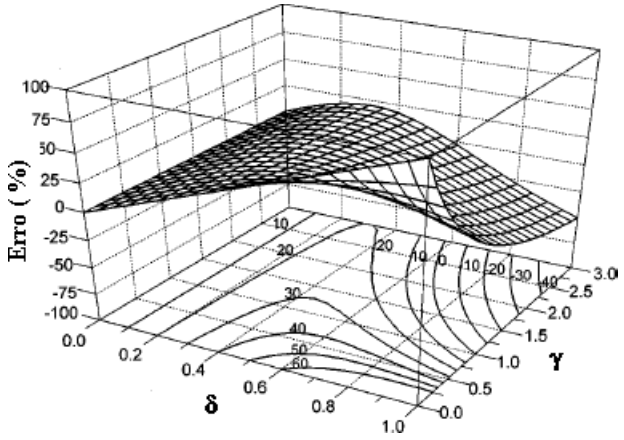


Fig. 2.5: Gráfico do erro pela razão da espessura em relação à razão dos módulos biaxiais para a equação de Stoney [17].

Em seu trabalho de 2000, Klein [17] compara alguns modelos existentes para o cálculo da tensão em filmes finos. Não faz a comparação dos modelos teóricos com valores experimentais, admite um modelo como base e compara os outros em relação à este escolhido.

Klein parte da seguinte equação (eq. 2.12), proposta por Townsend [22]. Reescreve a equação em função dos seguintes termos razão do módulo biaxial $\gamma = E'_f/E'_s$, onde $E' = E/(1-\nu)$ e a razão das espessuras $\delta = t_f/t_s$ de forma que obtêm a equação 2.13, que é caracterizada por uma parte que representa Stoney vezes um fator de correção.

$$\sigma_f(z) = E'_f\left[\frac{E'_s t_s}{E'_s t_s + E'_f t_f}\Delta\varepsilon_0 + \left(\frac{t_s t_f}{2} - \theta - z\right)K\right]. \tag{2.12}$$

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_{ST}} = \frac{1+\gamma\delta^3}{1+\delta} \tag{2.13}$$

Segundo Klein, a equação de Stoney não apresenta grandes erros para situações onde $\delta \leqslant 0,2$, porém quando $\delta \geqslant 0,2$ ela subestima os valores de tensão. Esta dependência entre δ, γ e o erro percentual obtido por Klein para a equação de Stoney é ilustrada na figura 2.5. Vemos três importantes situações:

- para razão de espessuras $\delta \leqslant 0,1$ equação de Stoney apresenta erros que não excedem a 5% um valor muito bom considerando que trata-se de multicamadas.

- para $\delta \geqslant 0,2$ a equação de Stoney subestima os valores de tensão, especialmente para filmes menos elásticos do que o substrato;

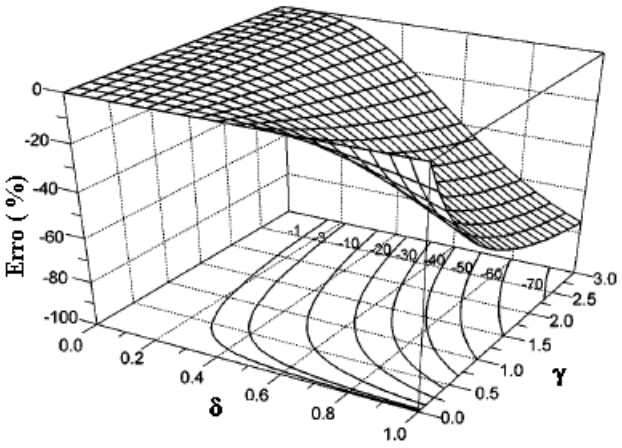


Fig. 2.6: Gráfico do erro pela razão da espessura em relação à razão dos módulos biaxiais para o modelo de Atkinson [17].

- na condição $\gamma\delta^2 \backsimeq 1$ temos bons resultados, mas a equação de Stoney subestima valores de tensão para deposições onde o filme é espesso e menos elástico em relação ao substrato.

Assim utilizando-se do modelo de Townsend, reescrito em função de δ γ, Klein verifica os modelos de Atkinson [23] e de Brenner-Senderoff [24].

Para o modelo de Atkinson a equação (eq. 2.14) inclue um fator de correção à equação de Stoney igual a $1/(1+\delta)$. Na mesma linha de análise da equação de Stoney, Klein obteve a equação 2.15, onde temos que o erro da equação de Atkinson é igual ao erro da equação de Stoney (ε_{ST}) menos um termo que depende de γ e δ:

$$\sigma_{AT} = \frac{E'_s t_s^3 K}{6t_f^2\,(1 + t_s/t_f)}, \tag{2.14}$$

s

$$\varepsilon_{AT} = \varepsilon_{ST} - \frac{\delta}{1+\gamma\delta^3}. \tag{2.15}$$

Segundo Klein, a aproximação de Atkinson sempre subestima a tensão, mas o erro é minimo, menor que 3%, até mesmo para razões de espessuras maiores que 30%. O modelo de Atkinson fornece melhores resultados para o cálculo da tensão em relação à equação de Stoney, como pode ser observado na figura 2.6

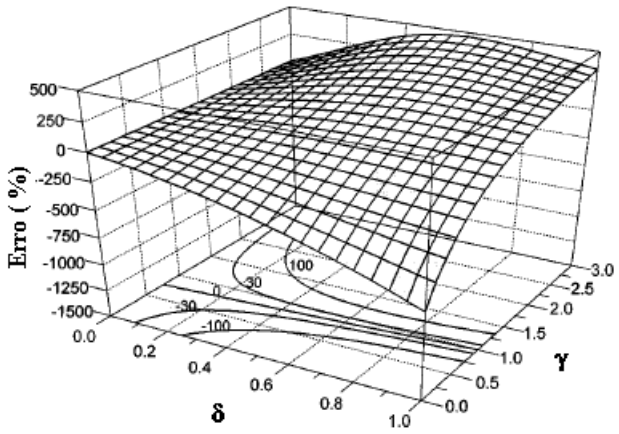


Fig. 2.7: Gráfico do erro para o modelo de Brenner-Senderoff,repare que para este a porcentagem de erros varia de 500% à -1500%! [17].

Isto não é verdade, entretanto, para o modelo proposto por Brenner-Senderoff (equação 2.16 na notação de Klein):

$$\sigma_{BS} = \frac{E'_s t_s^2 K}{6t_c}\left[1 + \frac{4t_c}{t_s}\left(\frac{E'_c}{E'_s} - 1\right)\right] \tag{2.16}$$

o qual ele descreveu o erro do modelo em relação ao de Stoney, da seguinte maneira:

$$\varepsilon_{BS} = \varepsilon_{St} + \frac{4\delta\,(1+\delta)\,(\gamma - 1)}{(1 + \gamma\delta^3)} \tag{2.17}$$

De forma que, Klein afirmou que tal modelo deve ser evitado, pois como mostra a fig 2.7, apresenta uma faixa muito estreita de pequenos erros, só para quando a razão da espessura não excede a 10%, no restante a faixa de erro é elevada.

2.2 Método Variacional e Minimização de Energia

Pelo princípio variacional da teoria da elasticidade são feitos certos teoremas básicos para expressar na forma integral as igualdades conectando tensão, esforço e deslocamento do volume de um corpo, baseado nas propriedades do trabalho da força elástica. O principio variacional é uma prática interessante pois permite a solução efetiva de problemas em muitos casos onde a aproximação clássica da teoria de elasticidade apresenta dificuldades.

Quando uma barra em tração simples é carregada estaticamente, isto é, muito lentamente por uma força P, a barra se alonga e, se o material seguir a lei de Hooke, e não há

deformações plásticas. Durante o carregamento, a força P executa trabalho que é transformado em energia de deformação, que é armazenada na barra. Se a carga for lentamente removida, a barra retorna ao seu comprimento original. Durante este processo de descarregamento, a energia de deformação armazenada na barra pode ser recuperada em forma de trabalho. Assim, a barra trabalha como mola, podendo armazenar e fornecer energia quando a carga é aplicada ou retirada. Durante o carregamento, a carga P se move lentamente através da distância δ e realiza uma certa quantidade de trabalho. Para calcular esse trabalho, lembramos que uma força constante realiza trabalho igual ao produto da força pela distância em que ela se move. Do princípio de conservação de energia, sabemos que essa energia de deformação é igual ao trabalho realizado pela barra desde que nenhuma energia seja adicionada ou subtraída na forma de calor [28].

A equação 2.18 representa a energia de deslocamento por unidade de volume ou o trabalho por unidade de volume.

$$dU = U_0 dxdydz, \tag{2.18}$$

sendo

$$U_0 = \frac{1}{2}\left(\sigma_x\epsilon_x + \sigma_y\epsilon_y + \sigma_z\epsilon_z + \tau_{xy}\gamma_{xy} + \tau_{xz}\gamma_{xz} + \tau_{yz}.\gamma_{yz}\right). \tag{2.19}$$

Os termos σ_i representam as tensões lineares que produzem as deformações (ϵ_i) no sentido a que estão orientadas. Os termos τ_{ij} representam as tensões de cisalhamento ou angulares, e γ_{ij} as deformações angulares. Como mostra a figura 2.8.

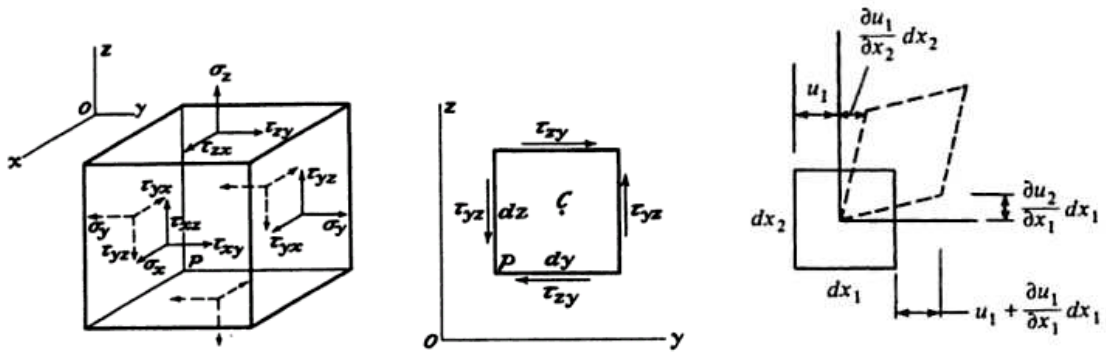
Pode-se escrever a equação 2.18 da seguinte forma:

$$U = \frac{1}{2}\int \Gamma^{ij} E_{ij} dV = \frac{1}{2}\int \left(\sigma_i\epsilon_i + \tau_{ij}\gamma_{ij}\right) dV \tag{2.20}$$

sendo σ_i e τ_{ij} elementos do tensor de tensões Γ_{ij}, enquanto ϵ_i e γ_{ij} são elementos do tensor de deslocamentos E_{ij}.

Para materiais isotrópicos no regime elástico, as tensões e os deslocamentos são relacionados pela equação a seguir:

$$\epsilon_i = \frac{1}{E}\left[\sigma_i - \nu\left(\sigma_j + \sigma_k\right)\right]; \quad \gamma_{ij} = \frac{\tau_{ij}}{G}; \quad i,j,k = x,y,z; \quad G = \frac{E}{2\left(1+\nu\right)} \tag{2.21}$$



(a) (b) (c)

Fig. 2.8: (a) Tensões lineares (σ_i) e de cisalhamento (τ_{ij}). (b)Tensões de cisalhamento no plano y-z, onde o primeiro índice indica a direção normal ao plano e o segundo a direção do cisalhamento. (c) Deformação angular causada pela tensão de cisalhamento [30]

.

onde ν é o coeficiente de Poisson e E é o módulo de Young (módulo de elaticidade).

Na equação 2.18 observa-se que a energia de deformação está relacionada com as deformações e as tensões (lineares e angulares) a que o material está sujeito. Utilizando as equações 2.21 que relaciona as tensões às deformações, é possível escrever a equação da energia só em função das deformações.

Durante o processo de deposição do filme fino, a amostra está sob uma configuração que é a de menor energia. Terminado o processo, a amostra resfria, e esta variação na temperatura cria uma situação em que a amostra tende a se curvar, buscando um novo mínimo de energia na qual cada derivada da equação da energia total do sistema em relação às variáveis de deformação é igual a zero.

$$\frac{\partial U}{\partial \alpha_1} = \frac{\partial U}{\partial \alpha_2} = ... = \frac{\partial U}{\partial \alpha_i} = 0 \tag{2.22}$$

Assim a deformação do filme ligado a um substrato não deformado não representa a condição de minima energia uma vez que a energia do sistema inteiro pode ser diminuida pela deformação do substrato de tal modo que a deformação da amostra possue dois termos, um de compressão/tração uniforme e um de curvamento do substrato em relação a situação original plana.

Deste modo, como alternativa à análise vetorial, Flinn [1], através do método da minimização de energia, considerou o problema unidimensional como mostra a figura 2.9.

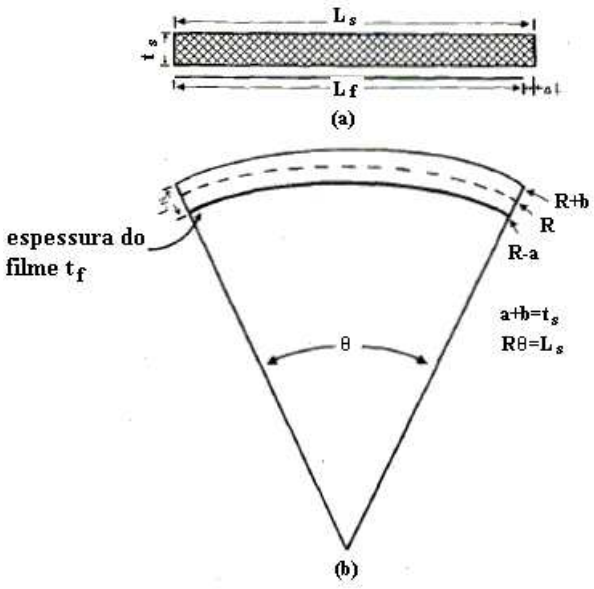


Fig. 2.9: (a) substrato não deformado. (b) substrato deformado [1].

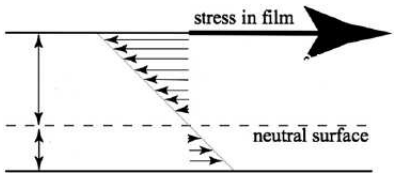


Fig. 2.10: Distribuição das tensões, temos região sob tração e sob compressão [26].

A condição do substrato antes da deposição do filme é mostrada na figura 2.9(a), de forma que, após a deposição os comprimento do substrato e do filme fino tem uma diferença de ΔL. Esta diferença no comprimento é devido aos valores de dilatação térmica serem diferentes. Na figura 2.9(b) observa-se três regiões no substrato uma região neutra (não há tensão) representada por R, uma onde o substrato está tracionado $(R+b)$, e uma onde há a compressão do substrato $(R-a)$(ver figura 2.10). Deste modo $a+b$ é a espessura total do substrato e $R\theta$ é o comprimento L_s do substrato.

Em função da diferença mostrada na figura 2.9, o substrato é deformado de acordo com a fómula 2.23

$$\Delta L = (r - R)\,\theta \tag{2.23}$$

de modo que, a energia de deformação elástica do substrato é descrita por:

$$U = \frac{1}{2}\int (\sigma_i \epsilon_i + \tau_{ij}\gamma_{ij})\, dv \tag{2.24}$$

ao considerar apenas as deformações lineares o termo $\tau_{ij}\gamma_{ij}$ não é considerado.

Utilizou as equações de Hooke que relacionam tensão com as deformações na equação 2.24 e substituiu a deformação obtida na equação 2.23 do arco com espessura dr:

$$dU = \left(\frac{E_s}{2}\right)(r\theta - L_s)\, 2dr \tag{2.25}$$

A energia de deformação do substrato obtida através da integração da equação 2.25 no intervalo de $(R-a)$ até $(R+b)$ e fica da seguinte forma:

$$U = \left(\frac{E_s\theta^2}{6}\right)\left(b^3 + a^3\right) \tag{2.26}$$

Agora procedendo de forma equivalente a feita para o substrato. Considerou que o filme, é extremamente fino em relação ao substrato, pode-se considerar ΔL é para $r = R - a$, de forma que a integração no volume é apenas deformação vezes a espessura do filme:

$$U_f = \left(\frac{E_f}{2}\right)(\Delta L - a\theta)^2\, t_f. \tag{2.27}$$

A energia de deformação elástica total do sistema é descrita somando as equações 2.26 e 2.27 conforme mostrado:

$$U = U_s + U_f = \left(\frac{E_s\theta^2}{6}\right)\left(b^3 + a^3\right) + \left(\frac{E_f}{2}\right)(\Delta L - a\theta)^2\, t_f. \tag{2.28}$$

Neste estágio, Flinn com o objetivo de facilitar o cálculo, faz uma substituição por novas variáveis:

$$x = a - \frac{t_s}{2}, v = x\theta. \tag{2.29}$$

e assim obtém a equação da energia total 2.30 em função de θ que é uma variável que é possivel associar a curvatura do sistema filme fino/substrato, e a v a qual mede a compressão total do substrato.

$$
\begin{aligned}
U &= E_f t_f \frac{(\Delta L)^2}{2} + \frac{E_s t_s^3 \theta^2}{24} - \frac{E_f t_f \Delta L t_s \theta}{2} \\
&- E_f t_f \Delta l v + \frac{E_s t_s v^2}{2} \\
&+ \text{termos de ordem maior,} \quad (t_f/ts < 1)\,; (t_f/ts)^2 \ll 1.
\end{aligned} \tag{2.30}
$$

A seguir são feitas as derivadas da equação da energia 2.30 em relação a θ e a v as duas equações obtidas 2.31 e 2.32 são igualadas a zero, e desta forma obteve os valores das duas variáveis que minimizem a energia total.

$$
\frac{\partial U}{\partial \theta} = \frac{E_s t_s^3 \theta}{12} - \frac{E_f t_f \Delta L t_s}{2} = 0 \tag{2.31}
$$

e

$$
\frac{\partial U}{\partial v} = -E_f t_f \Delta L + E_s t_s v = 0. \tag{2.32}
$$

Como consequência, Flinn obteve a tensão do filme em termos da deformação relativa do substrato e filme, relacionando os valores obtidos de θ e v a curvatura da amostra e substituindo-os na equação de tensão descrita na equação 2.21

$$
\sigma_f = \frac{E_f \Delta L}{L_s} \tag{2.33}
$$

e recupera a equação de Stoney na sua fórmula original

$$
\sigma_f = \frac{E_s t_s^2}{6 t_f R}. \tag{2.34}
$$

Flinn comenta que para vários filmes, pode-se calcular a tensão em cada filme, que é a diferença entre os valores de tensão calculados independente para cada filme, que é independente de outro filme. A curvatura total do filme é simplesmente uma combinação linear das contribuições dos filmes determinadas individualmente. Estendendo o resultado obtido 2.34 para duas dimensões, ele faz substituição do módulo de elasticidade ou módulo de Young (E), pelo módulo apropriado para duas dimensões $[E/\,(1-\nu)]$, sendo ν razão de Poisson , e encontra a relação descrita na equação 2.2, que é a própria equação de Stoney modificada para duas dimensões.

$$
\sigma_f = \frac{E_s t_s^2}{6\,(1-\nu)\,t_f R} \tag{2.35}
$$

2.3 Os Três Regimes de Deformação de uma Amostra

Na busca de uma melhor análise do comportamento da amostra (filme fino/substrato) que apresenta grandes deformações elásticas, curvaturas não uniformes, mudanças de formas e instabilidade geométrica, Finot [18] utiliza o método dos Elementos Finitos [20, 18]. Podendo através deste método simular curvaturas não lineares, tensões anisotrópicas, tensões locais e deformações geométricas. Para validar a simulação numérica Finot comparou este método a resultados experimentais. Identificou o ponto crítico, isto é, o ponto onde a amostra de forma esférica sofre uma bifurcação (ver figura 2.11), com uma 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, em seguida, se deforma em um sentido preferencial, adquirindo assim a forma aproximada de um cilindro.

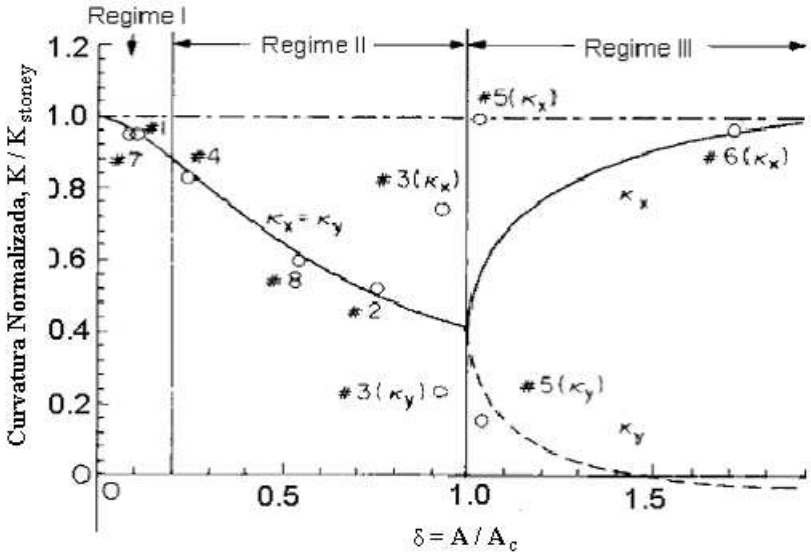


Fig. 2.11: Gráfico mostrando a bifurcação os três regimes de comportamento da deformação, e também compara a simulação (linha continua) a Stoney (linha tracejada) e as medidas experimentais obtidas (circulos) [18].

Tal instabilidade geométrica da amostra circular ocorre para um valor crítico do parâmetro de tensão descrito pela equação:

$$A = \frac{\lambda D^2}{h^3} = \sigma_f t \frac{D^2}{h^3}, \tag{2.36}$$

onde λ é a tensão linear do filme (igual a $\sigma_f t$ para um filme homogêneo de espessura t sob uma tensão uniforme σ_f), D é o diâmetro e h espessura do substrato.

A bifurcação ocorre em situações onde: $D/h \geqslant 50$. No experimento para validar a simulação, Finot [18] utilizou oito amostras de waffers de Si com espessuras diferentes, depositados com filme de tungstênio. O valor crítico de A (A_c) neste caso é igual a 680 GPa, de forma que se identificou três regimes caracterizados pela razão $\delta = A/A_C$.

- Regime I ($\delta \leqslant 0,2$)
  caracterizado por tensões e deformações reduzidas, baixos valores de δ, se observa uma curvatura uniforme e igual nas duas direções ($K_x = K_y$). Neste regime a equação de Stoney é aceitável, apresentando um desvio menor que 10%.

- Regime II ($0.2 \leqslant \delta < 1.0$)
  A forma geométrica permanece esférica ($K_x = K_y$), mas a curvatura não se mantém uniforme (na borda a curvatura é 10% maior que no centro), não se observa mais uma relação linear entre curvatura e tensão, ou seja, a equação de Stoney é inadequada.

- Regime III ($\delta \rightarrow 1$)
  Ocorre bifurcação na curvatura e abrupta mudança de forma circular para forma elipsoidal. Ainda nesse regime, para $\delta \geqslant 1$, há uma orientação preferencial e a amostra se curva apenas em uma direção, adquirindo uma forma cilíndrica (K_x ou K_y), enquanto que na outra direção $K \rightarrow 0$. A direção do eixo de curvatura principal, depende da geometria e das imperfeições durante a deposição do filme [18].

Desta forma, observa-se que o problema ainda carece de uma abordagem definitiva e que será interessante uma abordagem simples que amplie os limites da equação de Stoney, sem chegar aos graus de resolução do trabalho da análise numérica. A abordagem de Flinn é uma possibilidade interessante, na medida que é mais fácil a análise por energia que a tensorial do problema.

Capítulo 3

Aplicações da Metodologia

3.1 Casca Esférica

O trabalho de Finot [18] indicou a existência de dois regimes, I e II, para os quais a amostra se deforma de forma aproximadamente igual em todas as direções do plano do substrato, adquirindo assim a forma de uma casca esférica. Pureza et al [25] utilizando-se da geometria indicada por Finot e também o tratamento por energia indicado por Flinn e desenvolve uma abordagem por minimização da energia de deformação em coordenadas esféricas.

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:

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

que é simplificada na forma

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

Tendo em vista as equações que relacionam as tensões e deformações

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

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

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

então trabalhando o sistema de três equações obtem-se um novo sistema, só que agora nas três equações (eqs. 3.63.7 e 3.8) a tensão é que está escrita em função das deformações que são variáveis que podem ser obtidas do problema:

$$\sigma_\theta = \frac{\left(1-\nu^2\right)E\epsilon_\theta + \left(\nu+\nu^2\right)E\epsilon_r + \left(\nu-\nu^2\right)E\epsilon_\varphi}{1-3\nu^2-2\nu^3}, \tag{3.6}$$

$$\sigma_r = \frac{\left(1-\nu^2\right)E\epsilon_r + \left(\nu+\nu^2\right)E\epsilon_\theta + \left(\nu-\nu^2\right)E\epsilon_\varphi}{1-3\nu^2-2\nu^3}, \tag{3.7}$$

$$\sigma_\varphi = \frac{\left(1-\nu^2\right)E\epsilon_\varphi + \left(\nu+\nu^2\right)E\epsilon_r + \left(\nu-\nu^2\right)E\epsilon_\theta}{1-3\nu^2-2\nu^3}. \tag{3.8}$$

Substituindo 3.6, 3.7 e 3.8 em 3.2, se obtém a energia de deformação escrita em função das deformações:

$$\begin{aligned}\frac{dU}{dV} &= \frac{1}{2}\left[\frac{E}{1-3\nu^2-2\nu^3}\right]. \\ &\left[\left(1-\nu^2\right)\left(\epsilon_r^2+\epsilon_\theta^2+\epsilon_\varphi^2\right)+2\left(\nu+\nu^2\right)\left(\epsilon_r\epsilon_\theta+\epsilon_r\epsilon_\varphi+\epsilon_\theta\epsilon_\varphi\right)\right]\end{aligned} \tag{3.9}$$

Assumindo que o sistema (filme fino/substrato) adquiriu a forma aproximada de uma casca esférica. As espessuras do filme (t_f) e do substrato são iguais a $t_s = a + b$, o diâmetro da amostra é $ls \sim l_f = 2\Omega R$ ao passo que Ω é o ângulo zenite da casca. A distância R representa o ponto neutro da amostra, representa as regiões de compressão e tração, representadas na fig. 3.1 por a e b.

Assim, as deformações lineares são:

$$\epsilon_r = \frac{a+b-t_s}{t_s} \tag{3.10}$$

$$\epsilon_\theta = \epsilon_\varphi = \frac{r-R}{R} \tag{3.11}$$

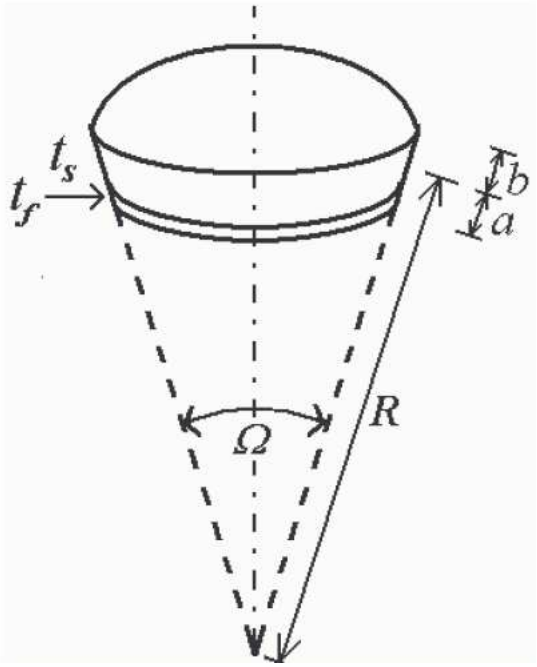


Fig. 3.1: Casca esférica [25].

substituindo 3.10 e 3.11 em 3.9 se obtém a energia deformação do substrato, onde $E = E_s$ (módulo de elasticidade do substrato) e $\nu = \nu_s$(coeficiente de Poisson do substrato):

$$\begin{aligned}\frac{dU_s}{dr} &= \frac{1}{2}\left[\frac{E_s}{1-3\nu_s^2-2\nu_s^3}\right]\left\{\left(1-\nu_s^2\right)\left[\left(\frac{a+b-t_s}{t_s}\right)^2+2\left(\frac{r-R}{R}\right)^2\right]+\right.\\ &+ \left.2\left(\nu_s+\nu_s^2\right)\left[2\left(\frac{a+b-t_s}{t_s}\right)\left(\frac{r-R}{R}\right)+\left(\frac{r-R}{R}\right)^2\right]\right\} \qquad (3.12)\end{aligned}$$

Organizando os termos da equação anterior:

$$\begin{aligned}\frac{dU_s}{dr} &= \frac{1}{2}\left[\frac{E_s}{1-3\nu_s^2-2\nu_s^3}\right]\left\{\left(1-\nu_s^2\right)\left(\frac{a+b-t_s}{t_s}\right)^2+2\left(1+\nu_s\right)\left(\frac{r-R}{R}\right)^2+\right.\\ &+ \left.4\left(\nu_s+\nu_s^2\right)\left(\frac{a+b-t_s}{t_s}\right)\left(\frac{r-R}{R}\right)\right\} \qquad (3.13)\end{aligned}$$

e considerando que

$$2\Omega R = l_s \qquad (3.14)$$

onde l_s é a espessura do substrato, assim:

$$\frac{r-R}{R} = \frac{2\Omega r - l_s}{l_s} \qquad (3.15)$$

similar ao caso [1]. Integrando 3.13 entre $R-a$ e $R+b$ e utilizando 3.14 se obtém:

$$\begin{aligned} U_s &= \frac{1}{2}\left[\frac{E_s}{1-3\nu_s^2-2\nu_s^3}\right]\int_{R-a}^{R+b}\left\{\left(1-\nu_s^2\right)\left(\frac{a+b-t_s}{t_s}\right)^2+2\left(1+\nu_s\right)\left(\frac{2\Omega r-l_s}{l_s}\right)^2+\right. \\ &+ \left. 4\left(\nu_s+\nu_s^2\right)\left(\frac{a+b-t_s}{t_s}\right)\left(\frac{2\Omega r-l_s}{l_s}\right)\right\} \end{aligned} \tag{3.16}$$

de forma que, após a integração, se obtém:

$$\begin{aligned} U_s &= \frac{1}{2}\left[\frac{E_s}{1-3\nu_s^2-2\nu_s^3}\right]\left\{\left(1-\nu_s^2\right)\left(\frac{a+b-t_s}{t_s}\right)^2(R+b-R+a)\right. \\ &+ \frac{2\left(1+\nu_s\right)}{l_s^2}\left[\frac{4}{3}\Omega^2\left[(R+b)^3-(R-a)^3\right]+l_s^2(a+b)+2l_s\Omega\left(R+b\right)^2-\left(R-a\right)^2\right]+ \\ &+ \left.\frac{4\left(\nu+\nu^2\right)}{l_s}\left(\frac{a+b-t_s}{t_s}\right)\left[\Omega\left(R+b\right)^2-\Omega\left(R-a\right)^2-l_s\left(a+b\right)\right]\right\} \end{aligned} \tag{3.17}$$

Os parâmetros do problema são Ω, a e b. Fazendo

$$\begin{cases} a=\frac{t}{2}+x \\ b=\frac{t}{2}-x \end{cases} \tag{3.18}$$

e definindo $v=x\Omega$. Obtem-se desta forma a energia de deformação elástica do substrato:

$$\begin{aligned} U_s &= \frac{1}{2}\left[\frac{E_s\left(1+\nu_s\right)}{1-3\nu_s^2-2\nu_s^3}\right]\left[\left(1-\nu\right)\left(\frac{t}{t_s}-1\right)^2t+8t\right. \\ &- \left.16\frac{tv}{l_s}+\frac{2}{3}\frac{t^3}{l_s^2}\Omega^2+8\frac{tv^2}{l_s^2}-8\nu_s\left(\frac{t}{t_s}-1\right)\frac{tv}{l_s}\right] \end{aligned} \tag{3.19}$$

Agora, para um filme de espessura $t_f << t_s$, $\varepsilon_r \approx 0$ enquanto

$$\varepsilon_\theta=\varepsilon_\varphi=\frac{l}{l_f}-1=\frac{2\Omega\left(R-a\right)}{l_f}-1 \tag{3.20}$$

Tendo em vista que a espessura do filme fino é muito pequena em relação à do substrato, a integração se simplifica

$$U_f=\frac{1}{2}\left(\frac{E_f}{1-3\nu_f^2-2\nu_f^3}\right)2\left(1+\nu_f\right)\left[\frac{2\Omega\left(R-a\right)}{l_f}-1\right]^2t_f \tag{3.21}$$

que pode ser reescrita em termos das variáveis Ω, v e t. Então obtem-se agora, a energia de deformação elástica do filme

$$\begin{aligned} U_f &= \frac{1}{2}\left(\frac{E_f}{1-3\nu_f^2-2\nu_f^3}\right)\left[\frac{2t_f\left(1+\nu_f\right)}{l_f^2}\right]\Bigg[\left(l_f-l_s\right)^2 \\ &+ 2\left(\Omega t+2v\right)\left(l_s-l_f\right)+\underbrace{\Omega^2t^2+4v^2+4\Omega tv}_{\left(\Omega t+2v\right)^2}\Bigg] \end{aligned} \tag{3.22}$$

de modo que a energia de deformação elástica total do sistema é dada por

$$\begin{aligned} U &= U_s+U_f \\ U &= \frac{1}{2}\left[\frac{E_s\left(1+\nu_s\right)}{1-3\nu_s^2-2\nu_s^3}\right]\Bigg[\left(1-\nu\right)\left(\frac{t}{t_s}-1\right)^2t+8t \\ &- 16\frac{tv}{l_s}+\frac{2}{3}\frac{t^3}{l_s^2}\Omega^2+8\frac{tv^2}{l_s^2}-8\nu_s\left(\frac{t}{t_s}-1\right)\frac{tv}{l_s}\Bigg] \\ &+ \frac{1}{2}\left(\frac{E_f\left(1+\nu_f\right)}{1-3\nu_f^2-2\nu_f^3}\right)\left(\frac{2t_f}{l_f^2}\right)\Bigg[\left(l_f-l_s\right)^2 \\ &+ 2\left(\Omega t+2v\right)\left(l_s-l_f\right)+\left(\Omega t+2v\right)^2\Bigg] \end{aligned} \tag{3.23}$$

que, introduzindo variáveis adimensionais a seguir:

$$\Gamma_s = \frac{1}{2}\left[\frac{E_s\left(1+\nu_s\right)}{1-3\nu_s^2-2\nu_s^3}\right]t_s \tag{3.24}$$

$$\delta = \frac{t}{t_s} \tag{3.25}$$

$$\omega = \frac{v}{l_s} \tag{3.26}$$

$$B = \frac{1}{2}\left[\frac{E_f\left(1+\nu_f\right)}{1-3\nu_f^2-2\nu_f^3}\right]\left(\frac{l_s^2}{l_f^2}\right)\left(\frac{2t_f}{\Gamma_s}\right) \tag{3.27}$$

$$\tag{3.28}$$

$$\overline{U} = \frac{U}{\Gamma_s} \tag{3.29}$$

$$\Delta L = \frac{l_f - l_s}{l_s} \quad \text{e} \quad \frac{t_s}{l_s} = A \tag{3.30}$$

assume a forma

$$\begin{aligned} \overline{U} &= (1-\nu_s)\left(\delta^3 - 2\delta^2 + \delta\right) + 8\delta - 16\delta\omega + \frac{2}{3}A^2\delta^3\Omega^2 + 8\delta\omega^2 - 8\nu_s\left(\delta^2 - \delta\right)\omega \\ &+ B\Big[\left(\Delta L\right)^2 + 2\left(\Omega A\delta + 2\omega\right)\Delta L + \left(\Omega A\delta + 2\omega\right)^2\Big] \end{aligned} \tag{3.31}$$

De modo que a minimização da energia de deformação elástica total fornece as equações:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\overline{U}}{\partial\delta} &= 0 \\ &= (1-\nu_s)\left(3\delta^2 - 4\delta + 1\right) + 8 - 16\omega + 2A^2\delta^2\Omega^2 + 8\omega^2 \\ &- 8\nu_s\left(2\delta - 1\right)\omega + B\Big[2\Omega A\Delta L + 2\left(\Omega A\delta + 2\omega\right)A\Omega A\Big] \end{aligned} \tag{3.32}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\overline{U}}{\partial\Omega} &= 0 \\ &= \frac{4}{3}A^2\delta^3\Omega + B\Big[2A\delta\Delta L + 2\left(\Omega A\delta + 2\omega\right)A\delta\Big] \end{aligned} \tag{3.33}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\overline{U}}{\partial\omega} &= 0 \\ &= -16\delta + 16\delta\omega - 8\nu_s\left(\delta^2 - \delta\right) + B\Big[4\Delta L + 2\left(\Omega A\delta + 2\omega\right)2\Big] \end{aligned} \tag{3.34}$$

A solução do sistema de equações indica que variação na espessura do substrato é desprezível $t \sim t_s$, então $\delta = t/t_s \sim 1$, obtendo então

$$\omega = -\frac{6B+4}{8B+4} \tag{3.35}$$

$$\Omega = -\frac{3B}{A}\frac{2\omega}{2+3B} \tag{3.36}$$

É necessário relacionar tais resultados de curvatura da amostra, parâmetro de fácil obtenção presente na equação de Stoney.

$$K = \frac{1}{r_f} = \frac{1}{R-a} \tag{3.37}$$

ou ainda,

$$\frac{1}{K} = \frac{-t_s}{2} + \frac{l_s}{2\Omega}\left(1 - 2\omega\right) \tag{3.38}$$

e considerando 3.38

$$\sigma_\theta = \sigma_\varphi = \left(\frac{E_f}{1-\nu_f^2+2\nu_f^3}\right)\left(1+\nu_f\right)\left(\frac{2\Omega\left(R-a\right)}{l_f} - 1\right) \tag{3.39}$$

se obtém

$$\sigma_\theta = \sigma_\varphi \;\; = \;\; \left(\frac{E_f}{1-\nu_f+2\nu_f^2}\right)\frac{t_s K}{3B - t_s K} \tag{3.40}$$

A equação pode ser simplificada de forma que se identifica um termo semelhante ao de Stoney,

$$\sigma = \frac{E_s}{1-\nu_s+2\nu_s^2}\frac{t_s^2}{t_f}K\left(1 - \frac{t_s K}{3B}\right)^{-1} \tag{3.41}$$

Na maioria dos casos $\left(t_s K\right)/\left(3B\right)$ é muito menor que 1; é aproximadamente $2,0.10^{-3}$ para as amostras da referência [32]. Neste caso, ao primeiro termo da expansão do lado direito da equação 3.41, como na equação de Stoney, preserva a relação linear entre a tensão no filme e sua curvatura. A diferença para a fórmula de Stoney é o termo $2\nu^2$, pode ser negligenciado se muito menor que $1-\nu$. No entanto, a maioria dos metais e materiais cerâmicos têm uma razão de Poisson variando entre $0,2$ e $0,4$ [31], de forma que é importante considerar tal termo para substratos com $\nu_s \geqslant 0,25$.

Além disso, este resultado identifica uma singularidade para $\nu_s = 0,5$; o limite teórico superior da razão de Poisson para materiais isotrópicos [31], não presente em outros modelos que descrevem tensões em filmes finos [14, 20, 17].

Ademais, como mostra a figura, a correção à equação de Stoney indica valores mais próximos aos previstos por simulação utilizando elementos finitos para os regimes I e II, onde se espera que a amostra se deforme como uma casca esférica. Tal situação indicou a possibilidade de melhoria das estimativas teóricas para o regime III, quando a amostra se deforma como elipsóide e cilindro.

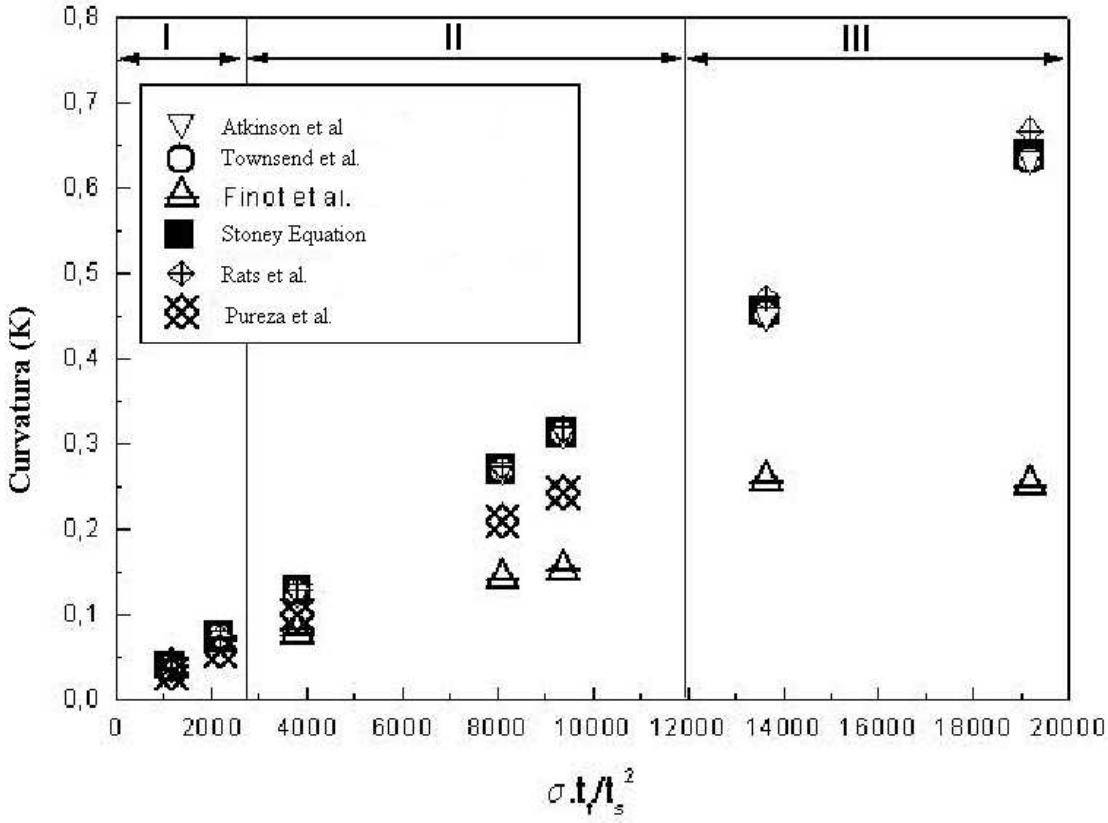


Fig. 3.2: Gráfico da curvatura (K) em função da $\sigma t_f/t_s^2$ [25]. O modelo desenvolvido concorda com outras formulações [17, 21, 23, 24] no regime I e se aproxima dos resultados por elementos finitos [18] no regime II [25].

3.2 Casca Cilíndrica

No capítulo 2, quando se discutiu o comportamento de uma amostra para diferentes valores de tensão, foi identificado o aparecimento de instabilidades geométricas (Regime III da ref [18]) que produzem mudança no formato da amostra. Neste regime, há a escolha de uma direção preferencial e a amostra adquire ao final uma forma aproximadamente cilíndrica.

Neste presente trabalho será desenvolvido como feito por Pureza et al, mas para o regime III indicado por Finot, onde tem-se grandes valores de tensão e consequentemente grandes deformações da amostra. E estas por sua vez são aproximadamente cilindrica,

será desta forma utilizada coordenadas cilindricas para representação do sistema físico. A deformação se realiza nos três eixos, com a mudança na espessura do filme e o encurtamento em θ, semelhantes ao caso de casca esférica, mas também no eixo z, gerado como resposta às tensões no plano x - y (figura 3.3) em função do coeficiente de Poisson do substrato, confome a figura 3.4.

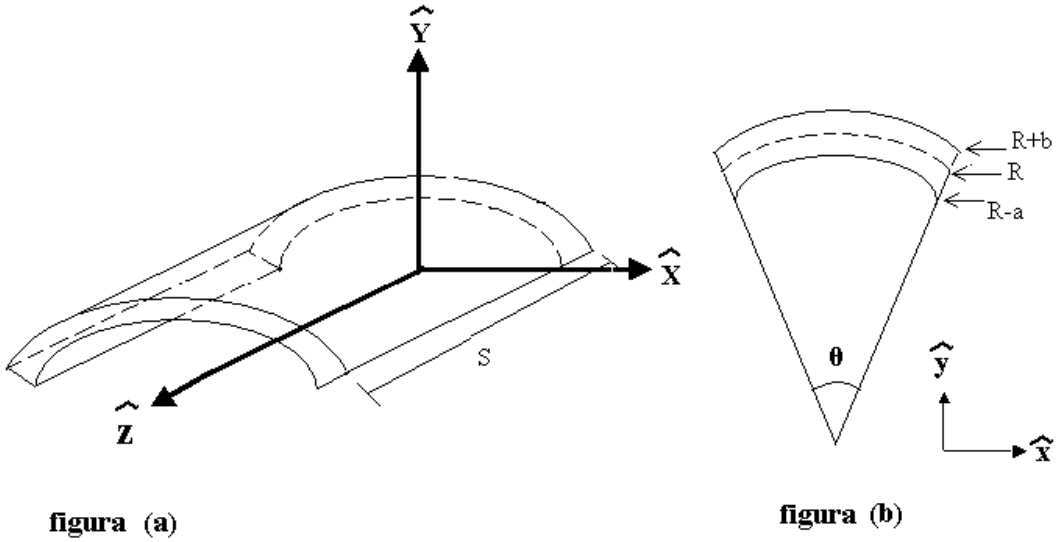


Fig. 3.3: Figuras representando a deformação cilindrica. Figura (a) Visão tridimensional. Figura (b) Visão no plano x-y

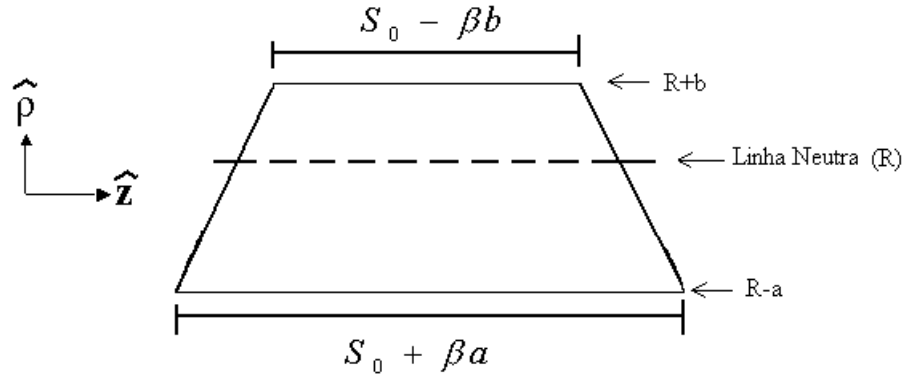


Fig. 3.4: Figura representando a deformação no plano ρ - z.

A energia de deformação em coordenadas cilindricas é dada pela equação:

$$dU = dV\frac{1}{2}\left[\sigma_\rho\epsilon_\rho + \sigma_\theta\epsilon_\theta + \sigma_z\epsilon_z + \tau_{\rho\theta}\gamma_{\rho\theta} + \tau_{\rho z}\gamma_{\rho\varphi} + \tau_{\theta\varphi}\gamma_{\theta\varphi}\right] \tag{3.42}$$

para a qual valem as relações:

$$\epsilon_\rho = \frac{1}{E}\left[\sigma_\rho - \nu\left(\sigma_\theta + \sigma_z\right)\right] \tag{3.43}$$

$$\epsilon_\theta = \frac{1}{E}\left[\sigma_\theta - \nu\left(\sigma_\rho + \sigma_z\right)\right] \tag{3.44}$$

$$\epsilon_z = \frac{1}{E}\left[\sigma_z - \nu\left(\sigma_\rho + \sigma_\theta\right)\right] \tag{3.45}$$

Como feito para a casca esférica podemos reescrever as equações 3.43, 3.44 e 3.45, da seguinte forma:

$$\sigma_\rho = \frac{E}{1-\nu-2\nu^2}\left[\left(1-\nu\right)\epsilon_\rho + \nu\epsilon_\theta + \nu\epsilon_z\right] \tag{3.46}$$

$$\sigma_\theta = \frac{E}{1-\nu-2\nu^2}\left[\left(1-\nu\right)\epsilon_\theta + \nu\epsilon_\rho + \nu\epsilon_z\right] \tag{3.47}$$

$$\sigma_z = \frac{E}{1-\nu-2\nu^2}\left[\left(1-\nu\right)\epsilon_z + \nu\epsilon_\rho + \nu\epsilon_\theta\right] \tag{3.48}$$

e para as deformações angulares temos que:

$$\tau_{\rho\theta} = \frac{E}{2\left(1+\nu\right)}\gamma_{\rho\theta} \tag{3.49}$$

$$\tau_{\rho z} = \frac{E}{2\left(1+\nu\right)}\gamma_{\rho z} \tag{3.50}$$

$$\tau_{\theta z} = \frac{E}{2\left(1+\nu\right)}\gamma_{\theta z} \tag{3.51}$$

De modo que utilizando as relações anteriores equações 3.46 - 3.51 na equação da energia de deformação (equação 3.42) se obtém:

$$\begin{aligned} dU \;=\; dV\frac{E}{2\left(1+\nu\right)}\Bigg\{ & \frac{1}{\left(1-2\nu\right)}\Big[\left(1-\nu\right)\left(\epsilon_\rho^2+\epsilon_\theta^2+\epsilon_z^2\right)+ \\ & +2\nu\left(\epsilon_\rho\epsilon_\theta+\epsilon_\rho\epsilon_z+\epsilon_\theta\epsilon_z\right)\Big]+ \\ & +\frac{1}{2}\left[\gamma_{\rho\theta}^2+\gamma_{\rho z}^2+\gamma_{\theta z}^2\right]\Bigg\} \end{aligned} \tag{3.52}$$

Também de forma semelhante à casca esférica, se identificam os termos não nulos da deformação do substrato:

$$\epsilon_\rho = \frac{t - t_s}{t_s} = (\delta - 1) \tag{3.53}$$

$$\epsilon_\theta = \frac{(r - R)\,\theta}{R\theta} = \frac{\theta}{L_s}(r - R), \quad \text{onde} \quad L_s = R\theta \tag{3.54}$$

$$\epsilon_z = -\frac{(r\theta - R)\,\beta}{R\beta} = -\frac{\beta}{S_0}(r - R) \tag{3.55}$$

$$\gamma_{\rho z} = \frac{\frac{\beta z}{S_0}}{1 - \frac{\beta}{S_0}(r - R)} \tag{3.56}$$

Substituindo as equações 3.53 - 3.56 na equação 3.52 se obtém:

$$\begin{aligned} dU_s = \frac{E_s}{2(1+\nu_s)} \Bigg\{ & \frac{1}{(1-2\nu_s)} \Bigg[(1-\nu_s) \left((\delta-1)^2 + \frac{\theta^2}{L_0^2}(r-R)^2 + \frac{\beta^2}{S_0^2}(r-R)^2 \right) + \\ & + 2\nu_s \Bigg((\delta-1)\frac{\theta}{L_0}(r-R) - (\delta-1)\frac{\beta}{S_0}(r-R) \\ & - \frac{\theta}{L_0}(r-R)\frac{\beta}{S_0}(r-R) \Bigg) \Bigg] + \\ & + \frac{1}{2} \left[\frac{\frac{\beta^2 z^2}{S_0^2}}{\left[1 - \frac{\beta}{S_0}(r-R)\right]^2} \right] \Bigg\} dV \end{aligned} \tag{3.57}$$

que após a integração em z, entre os limites $-\left(\frac{S_0}{2} - \frac{\beta}{2}(r-R)\right)$ e $\left(\frac{S_0}{2} - \frac{\beta}{2}(r-R)\right)$, e em r entre $(R-a)$ até $(R+b)$, se obtém a equação da energia de deformação do substrato, onde se desprezou a mudança na espessura, como já feito no caso esférico,

$$
\begin{aligned}
U_s &= \frac{E_s}{2\left(1+\nu_s\right)} \int_{R-a}^{R+b} \int_{-\frac{S_0}{2}+\frac{\beta}{2}(r-R)}^{\frac{S_0}{2}-\frac{\beta}{2}(r-R)} \left\{ \frac{1}{\left(1-2\nu_s\right)} \right. \Bigg[\\
&\quad \left(1-\nu_s\right)\left(\left(\delta-1\right)^2 + \frac{\theta^2}{L_0^2}\left(r-R\right)^2 + \frac{\beta^2}{S_0^2}\left(r-R\right)^2 \right) + \\
&\quad +2\nu_s \Bigg(\left(\delta-1\right)\frac{\theta}{L_0}\left(r-R\right) - \left(\delta-1\right)\frac{\beta}{S_0}\left(r-R\right) \\
&\quad -\frac{\theta}{L_0}\left(r-R\right)\frac{\beta}{S_0}\left(r-R\right) \Bigg) \Bigg] + \\
&\quad \left. +\frac{1}{2}\left[\frac{\frac{\beta^2 z^2}{S_0^2}}{\left[1-\frac{\beta}{S_0}\left(r-R\right)\right]^2} \right] \right\} dr dz
\end{aligned} \tag{3.58}
$$

de forma que:

$$
\begin{aligned}
U_s &= \frac{E_s S_0}{2\left(1+\nu_s\right)} \left(\frac{1-\nu_s}{\left(1-2\nu_s\right)}\left(\delta-1\right)^2 + \frac{\beta^2}{4} \right)\left(t - \frac{\beta}{S_0}\frac{b^2-a^2}{2} \right) + \\
&+ \frac{1-\nu_s}{\left(1-2\nu_s\right)}\frac{\theta^2}{L_0^2}\left[\frac{b^3-a^3}{3} - \frac{\beta}{S_0}\left(\frac{b^4-a^4}{4} \right) \right] \\
&+ \frac{1-\nu_s}{\left(1-2\nu_s\right)}\frac{\beta^2}{S_0^2}\left[\frac{b^3+a^3}{3} - \frac{\beta}{S_0}\frac{b^4-a^4}{4} \right] \\
&+ \frac{2\nu_s}{\left(1-2\nu_s\right)}\left(\delta-1\right)\frac{\theta}{L_0}\left[\frac{b^2-a^2}{2} - \frac{\beta}{S_0}\left(\frac{b^3+a^3}{3} \right) \right] + \\
&- \frac{2\nu_s}{\left(1-2\nu_s\right)}\left(\delta-1\right)\frac{\beta}{S_0}\left[\frac{b^2-a^2}{2} - \frac{\beta}{S_0}\frac{b^3+a^3}{3} \right] + \\
&- \frac{2\nu_s}{\left(1-2\nu_s\right)}\frac{\theta}{L_0}\frac{\beta}{S_0}\left[\left(\frac{b^3-a^3}{3} \right) - \frac{\beta}{S_0}\left(\frac{b^4-a^4}{4} \right) \right]
\end{aligned} \tag{3.59}
$$

Quanto ao filme, considerando que sua espessura é muito menor que a do substrato, se obtém os seguintes termos:

$$
\epsilon_\theta = \frac{\theta\left(R-a\right)}{L_f} - 1 \tag{3.60}
$$

$$
\epsilon_z = \frac{\beta\left(R-a\right)}{S_f} - 1 \tag{3.61}
$$

Deste modo, a energia de deformação elástica do filme é:

$$U_f = \frac{E_f S_0}{2(1+\nu_f)} \frac{S_0 t_f}{(1-2\nu_f)} \left(1+\frac{\beta a}{S_0}\right) \Bigg\{ (1-\nu_f) \left[\left(\frac{(R-a)}{L_f} - 1 \right)^2 + \left(\frac{\beta(R-a)}{S_f} - 1 \right)^2 \right] + \\ + 2\nu_f \left(\frac{\theta(R-a)}{L_f} - 1 \right) \left(\frac{\beta(R-a)}{S_f} - 1 \right) \Bigg\} \quad (3.62)$$

e a energia total do sistema é dada por:

$$U_t = U_s + U_f \quad (3.63)$$

Introduzindo uma série de variáveis adimensionais:

$$D = \frac{E_f}{E_s} \frac{1+\nu_s}{1-\nu_f-2\nu_f^2} \frac{t_f}{t_s}, \quad (3.64)$$

$$\tau = \frac{t_s}{S_s}, \quad \text{sendo} \quad S_s = R\beta, \quad (3.65)$$

$$a = \frac{t_s}{2} + \frac{S_s}{\beta}\omega \quad \text{e} \quad b = \frac{t_s}{2} - \frac{S_s}{\beta}, \quad (3.66)$$

$$\zeta = \frac{S_s}{L_s} = \frac{S_f}{L_f}, \quad (3.67)$$

$$(\delta l) = \frac{\Delta L}{S_s} = \frac{L_f - L_s}{S_s}. \quad (3.68)$$

A energia de deformação do sistema pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} U &= \frac{U_t}{\tau S_s^3} \\ &= D\left(1+\frac{\tau}{2}\beta+\omega\right) \Bigg\{ (1-\nu_f) \left[\left(\zeta(\delta l) + \frac{\tau}{2}\beta + \omega \right)^2 + \left((\delta l) + \omega + \frac{\tau}{2}\beta \right)^2 \right] + \\ &\quad + 2\nu_f \left(\zeta(\delta l) + \frac{\tau}{2}\beta + \omega \right) \left((\delta l) + \omega\frac{\tau}{2}\beta \right) \Bigg\} + \frac{\beta^2}{4} + \\ &- \omega\left(-\frac{\beta^2}{4} \right) + \left(\frac{\tau^2}{12} + \frac{\omega^2}{\beta^2} \right) \left(\frac{1-\nu_s}{(1-2\nu_s)}\theta^2 + \frac{1-\nu_s}{(1-2\nu_s)}\beta^2 - \frac{2\nu_s}{(1-2\nu_s)}\theta\beta \right) \\ &+ \left(\frac{\tau^2}{4}\omega + \frac{\omega^3}{\beta^2} \right) \left(\frac{1-\nu_s}{(1-2\nu_s)}\theta^2 + \frac{1-\nu_s}{(1-2\nu_s)}\beta^2 \right) \end{aligned} \quad (3.69)$$

A minimização de energia de deformação considera neste caso três variáveis θ, β e ω, o que torna o cáculo bem mais complicado que o caso da casca esférica. No entanto, é possível identificar termos de escalas diferentes, em função dos valores das grandezas envolvidas e proceder a simplificação das equações de mínimo com os termos dominantes.

Deste modo, as três equações de mínimo, a saber.

$$\frac{\partial U}{\partial \theta} = 0 \tag{3.70}$$

$$\frac{\partial U}{\partial \omega} = 0 \tag{3.71}$$

$$\frac{\partial U}{\partial \beta} = 0 \tag{3.72}$$

ao presevar os termos de ordem superior, tomam a forma:

$$0 = \theta\frac{\tau^2}{12}(1-\nu_s) - \frac{\tau^2}{12}\nu_s\beta - \nu_s\frac{\omega^2}{\beta} \tag{3.73}$$

$$\begin{aligned} 0 &= 2D\left[(1+\zeta)(\delta l) + \tau\beta\right] + \frac{\beta^2}{4} + \\ &+ \frac{2\omega}{1-2\nu_s}\left[(1-\nu_s)\frac{\theta^2}{\beta^2} + (1-\nu_s) - 2\nu_s\frac{\theta}{\beta}\right] \end{aligned} \tag{3.74}$$

$$\begin{aligned} 0 &= 2D\left[\frac{\tau}{2}\left((1+\zeta)(\delta l) + \tau\beta\right)\right] + \frac{\omega\beta}{2} \\ &- \frac{\omega^2}{\beta^2}\left(\frac{1-\nu_s}{1-2\nu_s}\theta^2 + \frac{1-\nu_s}{1-2\nu_s}\beta^2 - \frac{-2\nu_s}{1-2\nu_s}\theta\beta\right) + \\ &+ \frac{\tau^2}{12}\left(\frac{2(1-\nu_s)}{1-2\nu_s}\beta - 2\frac{2\nu_s}{1-2\nu_s}\theta\right) \end{aligned} \tag{3.75}$$

A solução deste sistema de equações tem as seguinte solução fisicamente coerente:

$$\theta = \frac{\nu_s}{1-\nu_s}\left[\beta - \frac{12}{\tau^2}\frac{\omega^2}{\beta}\right] \tag{3.76}$$

$$\omega = -(1-\nu_s)\left\{\frac{\beta^2}{8} + D\left[(1+\zeta)(\delta l) + \tau\beta\right]\right\} \tag{3.77}$$

$$(\delta l) = -\frac{-\tau\beta}{1+\zeta}\left(\frac{1}{3D(1-2\nu_s)} - 1\right) \tag{3.78}$$

Como no caso esférico, a curvatura K da amostra pode ser relacionada às variáveis do sistema:

$$\frac{1}{K} = S_s\left(\frac{1}{\beta} - \frac{\tau}{2} + \frac{1-\nu_s}{8}\beta\right) \tag{3.79}$$

de forma que, as componentes θ e z de tensão no filme são dadas por:

$$\sigma_\theta = \frac{E_f}{1-\nu_f-2\nu_f^2}\Big[\,(1-\nu_f)\,\epsilon_\theta + \nu_f\epsilon_z\Big] \tag{3.80}$$

$$\sigma_z = \frac{E_f}{1-\nu_f-2\nu_f^2}\Big[\,(1-\nu_f)\,\epsilon_z + \nu_f\epsilon_\theta\Big] \tag{3.81}$$

enquanto as deformações ϵ_θ e ϵ_z são dadas por:

$$\epsilon_z = \zeta\tau\beta\left(\frac{\zeta}{1+\zeta}\frac{1}{3D}\frac{1}{1-2\nu_s} + \frac{1}{2}\right) \tag{3.82}$$

$$\epsilon_\theta = \zeta\tau\beta\left(\frac{\zeta}{1+\zeta}\frac{1}{3D}\frac{1}{1-2\nu_s} - \frac{1}{2}\frac{\nu_s}{1-\nu_s}\right) \tag{3.83}$$

Tendo em vista as aproximações feitas no processo de minimização da energia do sistema, é identificado o termo dominante de tensão no filme fino em função da curvatura da amostra.

$$\sigma_\theta \simeq \sigma_z \simeq \frac{E_s}{6\,(1-\nu_s-2\nu_s^2)}\frac{t_s^2}{t_f}K \tag{3.84}$$

Que é idêntico aquele obtido para a amostra deformada como uma casca esférica, o qual manteve as características gerais da equação de Stoney: a proporcionalidade entre a linha de tensão do filme e a curvatura da amostra independente das propriedades do filme. O termo extra $2\nu_s^2$ implica em alteração nos resultados numéricos para amostras com $\nu_s \leqslant 0,25$ e a divergência para o valor $\nu_s = 0,5$, que caracteriza o limite teórico de incompressibilidade dos materiais.

No entanto, tendo em vista as aproximações que foram feitas na minimização, é prudente não considerar os termos de correção à esta relação, como foi feito na casca esférica. Ademais, não é de esperar alterações relevantes que justificassem um esforço neste sentido.

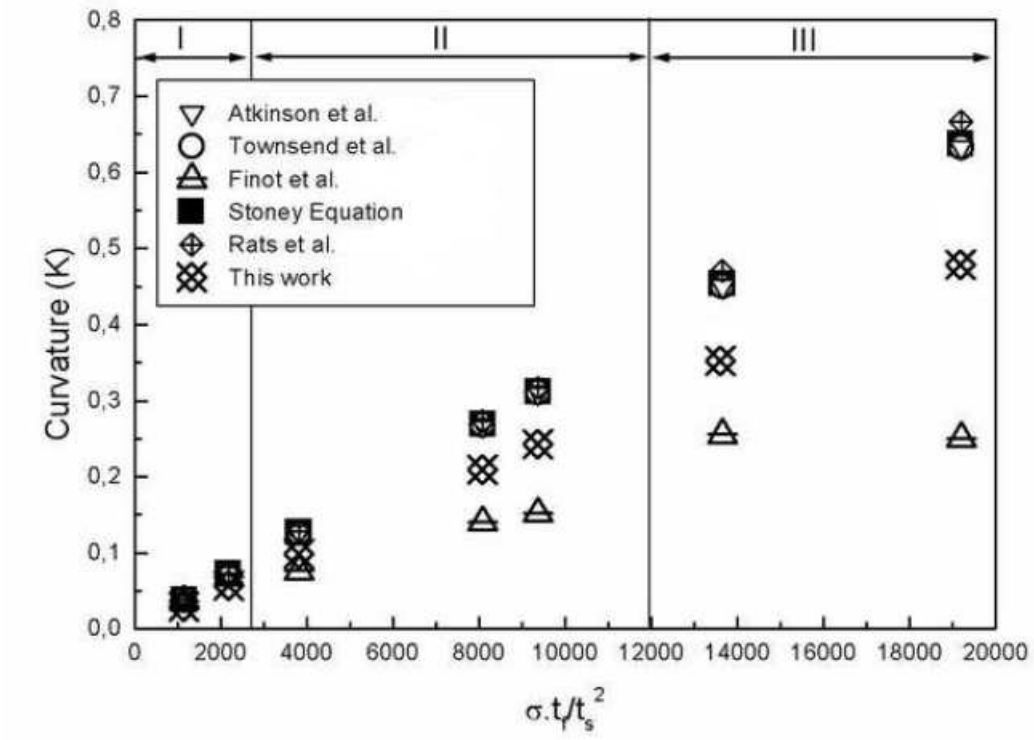


Fig. 3.5: Gráfico da curvatura (K) em função da $\sigma t_f/t_s^2$. Os pontos no regime III para o modelo Casca Cilindrica.

Neste ponto, se faz necessário buscar uma comparação entre os diferentes modelos teóricos e os resultados obtidos por Finot [18] utilizando elementos finitos para amostras no regime III. Isto é apresentado na figura 3.5 que complementa a figura 3.2 com os valores obtidos utilizando a equação 3.84.

Os resultados de Finot indicam uma mudança importante no comportamento da curvatura quando da passagem do regime II para o regime III, que não foi prevista pelos modelos teóricos. Esta questão foi o que motivou o trabalho aqui desenvolvido com a amostra deformada como uma casca cilíndrica, de forma que o resultado frustrou as expectativas de se obter uma alteração relevante na forma da equação obtida para os regimes I e II.

Não obstante, cabem ainda dois questionamentos importantes: É valido considerar as fórmulas referentes a uma deformação elástica (equações 3.49 a 3.51) no regime III, quando já ocorreu a bifurcação, o que poderia caracterizar uma deformação plástica na qual as

relações entre tensões e deformações são não lineares? Por outro lado, que materiais suportariam valores de tensão que caracterizam o regime III sem que ocorresse falhas de coesão e adesão entre as camadas de filme e substrato?

Capítulo 4

Conclusão

Neste trabalho foi feita uma discussão sobre o desenvolvimento de tensões e deformações em amostras compostas por filmes finos em substratos com propriedades físicas diferentes. Um aspecto importante é a existência de diferentes regimes nos quais a amostra deformada assume formas com simetrias específicas. Tal questão foi aplicada no tratamento do problema utilizando a minimização na energia de deformação da amostra em regime elástico. A metodologia foi aplicada para amostras deformadas como uma casca esférica (regimes I e II da ref. [18]), conforme Pureza et al. [25] e para uma amostra deformada como uma casca cilíndrica e se obteve resultados com um termo dominante semelhante a equação de Stoney, mas que apresenta uma correção ao valor original que aproxima os resultados de valores obtidos por simulação com elementos finitos [18].

A abordagem do problema por minimização de energia de deformação pode ser utilizada em algumas situações particularmente importantes: A primeira diz respeito a amostras do tipo multicamadas com materiais de propriedades diferentes, um tema de vivo interesse pela aplicação em nanotecnologia [33]. Neste caso, o tratamento por minimização de energia é certamente muito mais simples que a abordagem tensorial e para o qual a carência de um modelo mais preciso que os existentes [33] que são largamente utilizados apesar das limitações. Tal situação está sendo desenvolvida e provavelmente será a próxima extensão ao trabalho que vem sendo feito.

A segunda situação a ser tratada é o estudo da transição da amostra deformada como uma casca esférica para o formato de um elipsóide, o que ocorre no início do processo de

instabilidade dimensional da amostra, idicado como regime III. Tal abordagem requer no entanto um tratamento matemático em coordenadas específicas, certamente mais complicado que o caso esférico. No entanto, é possível que tal análise permita uma indicação do processo de transição entre os regimes II e III e ainda, dentro do regime III, quando se inicia a transição de uma amostra com formato de elipsóide para o formato cilindrico.

Outra questão fundamental é a validação dos modelos teóricos e das previsões por simulação numérica através de experimentos. A maior parte dos trabalhos experimentais se limita a obter medidas de curvatura de amostras, com as quais se calculam valores de tensão no filme utilizando modelos teóricos, em geral a equação de Stoney. É evidente a necessidade o uso de técnicas experimentais que obtenham a tensão no filme de forma independente da curvatura, permitindo assim a validação das equações. Houve tentativas neste sentido utilizando técnicas de raios X, para as quais se observou discrepância com os modelos teóricos utilizados [34].

Referências Bibliográficas

[1] P. A. Flinn, D. S. Gardner, W. D. Nix; *Measurement and Interpretation of Stress in Aluminum-Based Metalization as a Function of Thermal History*, (IEEE Transactions on Electron Devices, 34, 689, 1987).

[2] R. P. Feynman; *There is Plenty of Room at the Bottom*, Caltech's Engineering and Science, ed Caltech's Eng. and Sci.(1959).

[3] M. L. Munford; *Eletrodeposição de Nanoestruturas Metálicas em Silício Monocristalino*, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, 2002.

[4] E. L., Nohara; *Materiais Absorvedores de Radiação Eletromagnética (8-12 GHz). Obtidos pela Combinação de Compósitos Avançados Dielétricos e Revestimentos Magnéticos*. Tese de Doutorado, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 2003.

[5] Maissel e Glang; *Handbook of thin film technology*, 1970.

[6] S.L Lee, D. Windover; *Phase, residual stress, and texture in triode-sputtered tantalum coatings on steel*, Surface and Coatings Tecnology, 108-109 (1998), 65-67.

[7] V. Teixeira, M. Andritschky, W. Fischer, H.P. Buchkremer, D. Stoéver; *Analysis of residual stresses in thermal barrier coatings*, Journal of Materials Processing Technology 92-93 (1999) 209-216.

[8] M. Ohring; *Materials Science of Thin Films. Deposition and Struture*, Tsinghua University Press, Second Edition, 2002.

[9] Z. Suo; *Fracture in Thin Films, Encyclopedia of Materials: Science and Tecnology*, (Elsevier Science, 2001, 2nd edition, p 3290-3296).

[10] D. Z. de Florio, F. C. Fonseca, E. N. S. Muccillo, R. Muccillo; *Materiais cerâmicos para células a combustível*, Cerâmica 50 (2004) 275-290.

[11] R. Gerhard-Multhaupt; IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul. 9 (2002) 850.

[12] A. Sein, B.J. Melde ; R. C. Schroden ; M. Bjorkqvist; J. Salonen; Sensors and Actuators; A Physics 112 (2004) 244.

[13] L.B. Freund, S. Suresh; *Thin Films Materials Stress, Defect Formation and Surface*, Cambridge, 2003.

[14] G. G. Stoney, ; *The Tension of Metallic Films Deposited by Electrolysis*, (Proceedings of the Royal Society A, 82, 172, 1909).

[15] O. Anderoglu, *Residual Stress Measurement Using X-Ray Difraction*, Tese de Mestrado, Texas A and M University, (2004)

[16] I.C. Noyan, and J.B. Cohen, *Residual Stress: Measurement by Diffraction and Interpretation* Springer-Verlag, New York, New York (1987).

[17] C. A. Klein, *How accurate are Stone equation and recent modifcations*, (Journal of Applied Physics, 88, 5487, 2000).

[18] 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).

[19] S. Timoshenko, S. Woinowski, Krieger; *Theory of Plates and Shells*, (MacGraw-Hill, New York, 1959, p 80).

[20] I. A. Blech, I. Blech, M. Finot, *Determination of thin-film stresses on round substrates*, (Journal of Applied Physics, 97, 113525, 2005).

[21] I. M. Zhu and P. B. Kirby,*Governing equation for the measurement of nonuniform stress distribuition in films using substrate deformation technique*, Applied Physics Letters, 88, 171903, 2006.

[22] P. H. Townsend, D. M. Barnet, T. A. Brunner, ; *Elastic relationships in layer composite media with approximation for the case of thin films on a thick substrate*, Journal of Applied Phsics, 62, 4438, 1987.

[23] A. Atkinson; Br Ceram. Proc. 54,1 (1995).

[24] A. Brenner and S. Senderoff, J. Res. Natl. Bur. Stand. 42, 105 (1949).

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

[26] G. C. A. M. Janssen, M. M. Abdalla, F. van Keulen, B. R. Pujada, B. van Venrooy,*Celebrating the 100th anniversay of the Stoney equation for film stress: Developments from polycrystalline steel strips to single crystal silion waffers*, (Thin Solid Films, 517 (2009)1858-1867),

[27] D. Rats, L. Bimbault, L. Vandenbulcke, R. Herbin, and K. Badawi, *Crystalline quality and residual stresses in diamond layers by Raman and x-ray diffraction analyses*, J. Appl. Phys. 78, 4994 (1995).

[28] S. Timoshenko and J. N. Goodier; *Theory Elasticity*, MacGraw-Hill, New York, 1951.

[29] J. Vilms, and D. Kerps, J. Appl. Phys. 53, 1536 (1982).

[30] Ferdinando P. Beer, JR E. Russel Johnston,*Resistência Dos Materiais*,(Makron Books,3ª Edição).

[31] R. W. Hertzberg, *Deformation and Fracture Mechanics of Engineering Materials*, 4th ed. John Wiley and Sons, Canada (1996).

[32] J. Biener, A. M. Hodge and A. V. Hamza, Appl. Phys. Lett., 87, 121908 (2005).

[33] Yong qing Fu , Hejun Du , Weimin Huang, Sam Zhang, Min Hu; *TiNi-based thin films in MEMS applications: a review*; Sensors and Actuators A 112 (2004) 395-408.

[34] Z. B. Zhao, J. Hershberger, S. M. Yalisove, J.C. Bilello; *Determination of residual stress in thin films: a comparative study of Xray topography versus laser curvature method*; Thin Solid Films 415 (2002) 21-31.

Livros Grátis

(http://www.livrosgratis.com.br)

Milhares de Livros para Download:

Baixar livros de Administração
Baixar livros de Agronomia
Baixar livros de Arquitetura
Baixar livros de Artes
Baixar livros de Astronomia
Baixar livros de Biologia Geral
Baixar livros de Ciência da Computação
Baixar livros de Ciência da Informação
Baixar livros de Ciência Política
Baixar livros de Ciências da Saúde
Baixar livros de Comunicação
Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE
Baixar livros de Defesa civil
Baixar livros de Direito
Baixar livros de Direitos humanos
Baixar livros de Economia
Baixar livros de Economia Doméstica
Baixar livros de Educação
Baixar livros de Educação - Trânsito
Baixar livros de Educação Física
Baixar livros de Engenharia Aeroespacial
Baixar livros de Farmácia
Baixar livros de Filosofia
Baixar livros de Física
Baixar livros de Geociências
Baixar livros de Geografia
Baixar livros de História
Baixar livros de Línguas

Baixar livros de Literatura
Baixar livros de Literatura de Cordel
Baixar livros de Literatura Infantil
Baixar livros de Matemática
Baixar livros de Medicina
Baixar livros de Medicina Veterinária
Baixar livros de Meio Ambiente
Baixar livros de Meteorologia
Baixar Monografias e TCC
Baixar livros Multidisciplinar
Baixar livros de Música
Baixar livros de Psicologia
Baixar livros de Química
Baixar livros de Saúde Coletiva
Baixar livros de Serviço Social
Baixar livros de Sociologia
Baixar livros de Teologia
Baixar livros de Trabalho
Baixar livros de Turismo