

# 单轴、双轴应变 Si 拉曼谱应力模型\*

王程<sup>†</sup> 王冠宇 张鹤鸣 宋建军 杨晨东 毛逸飞 李永茂 胡辉勇 宣荣誉

(西安电子科技大学微电子学院, 宽禁带半导体材料与器件重点实验室, 西安 710071)

(2011年5月13日收到; 2011年6月15日收到修改稿)

本文依据拉曼光谱原理, 基于 Secular 方程及拉曼选择定则分别获得了单轴、双轴(001), (101), (111) 应变 Si 材料应变张量与拉曼谱线移动的定量关系, 并在此基础上, 基于广义胡克定律最终建立了单轴、双轴(001), (101), (111) 应变 Si 材料拉曼谱峰与应力的理论关系模型. 该模型建立过程详细、系统, 所得结果全面、量化, 可为应变 Si 材料应力的测试分析提供重要理论参考.

**关键词:** 应变 Si, 拉曼, 应力

**PACS:** 72.80.Jc, 71.18.+y, 72.10.-d

## 1 引言

应变 Si 材料载流子迁移率高, 已成为当前国内外研究发展重点<sup>[1,2]</sup>, 在高速/高性能 CMOS 器件和电路, 以及光电子器件中有广阔的应用前景<sup>[3,4]</sup>. 应变 Si 可分为单轴应变和双轴应变<sup>[5]</sup>. 单轴应变是 Si 在一维方向受力, 双轴应变是 Si 在二维方向受力. 应变可分为张应变和压应变. 目前, 双轴应变 Si 主要应用于大尺寸 CMOS 器件和 HBT<sup>[6]</sup>, 而纳米级 CMOS 器件一般采用单轴应变 Si<sup>[7]</sup>.

无论是单轴应变还是双轴应变 Si, 其可提高 CMOS 器件和电路性能源于应力的引入致使载流子迁移率增强. 因此, 应力的量化分析是应变 Si 材料表征的重要方面. 应变 Si 材料应力表征可通过拉曼光谱仪测试实现<sup>[8]</sup>, 通过分析拉曼谱峰波数位置可获得应变 Si 材料的应力强度. 而值得注意的是应变 Si 材料应力类型(张/压, 单/双)不同, 受力晶面不同, 拉曼谱峰波数位置与应力强度的关系也不相同. 就作者所知, 文献仅报道<sup>[9,10]</sup>了单轴[110]/(100), 双轴(100)应变 Si 拉曼谱峰与应力强度的关系模型, 其他应力类型及晶面的情况仍然缺乏. 此外, 以上模型建立的过程缺乏系统性.

为此, 本文依据拉曼光谱原理, 基于 Secular 方程及拉曼选择定则分别获得了单轴, 双轴(001), (101), (111) 应变 Si 材料应变张量与拉曼谱线移动的定量关系, 并在此基础上, 基于广义胡克定律最终建立了单轴, 双轴(001), (101), (111) 应变 Si 材料拉曼谱峰与应力的理论关系模型. 本文模型建立过程详细、系统, 所得结果全面、量化, 可为应变 Si 材料应力的测试分析提供重要理论参考.

## 2 模型建立

### 2.1 Secular 方程与选择定则

应力状态下材料原子间距与未应变时不同<sup>[11]</sup>, 拉曼光谱频移可反映出这一变化, 此即为拉曼光谱可测量应变的微观物理基础. 未应变 Si 材料拉曼谱线的波数为  $\omega_0$ (约为  $520 \text{ cm}^{-1}$ ), 应变可导致 Si 材料拉曼谱线频率的移动, 其频移量  $\Delta\omega$  有如下关系:

$$\Delta\omega = \omega - \omega_0 \approx \frac{\lambda}{2\omega_0}, \quad (1)$$

式中,  $\omega$  为应力状态下 Si 材料拉曼谱线的波数,  $\lambda$  为 Si 基类金刚石结构材料 Secular 方程(见下式)的本征值<sup>[12,13]</sup>:

\* 国家部委资助项目(批准号: 51308040203, 6139801), 中央高校基本科研业务费(批准号: 72105499, 72104089) 和陕西省自然科学基础研究计划项目(批准号: 2010JQ8008) 资助的课题.

† E-mail: cheng0514@sina.com

$$\begin{vmatrix} p\varepsilon_{xx} + q(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - \lambda & 2r\varepsilon_{xy} & 2r\varepsilon_{zx} \\ 2r\varepsilon_{xy} & p\varepsilon_{yy} + q(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) - \lambda & 2r\varepsilon_{yz} \\ 2r\varepsilon_{zx} & 2r\varepsilon_{yz} & p\varepsilon_{zz} + q(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xx}) - \lambda \end{vmatrix} = 0, \quad (2)$$

式中,  $\varepsilon_{ij}$  为应变张量分量;  $p, q, r$  为光子材料常数<sup>[14]</sup>, 分别为  $-1.85, -2.32, -0.71$ .

由以上表述可知, 测量所得  $\Delta\omega$  与 Secular 方程本征值  $\lambda$  存在对应关系, 而  $\lambda$  为  $\varepsilon_{ij}$  表征(材料应力)的函数. 这样, 对于不同应变材料, 只要测得其  $\Delta\omega$ , 并通过 Secular 方程计算出该应变材料的  $\lambda$ , 即可表征其应力大小. 值得注意的是, Secular 方程为  $3 \times 3$  行列式, 有 3 个本征值. 这就意味着, 对于某一应变材料可能有多个拉曼谱峰, 并有多个本征值与之相对应. 下面重点介绍拉曼选择定则, 将对此问题予以说明.

拉曼光谱散射效率  $I$  的表达式为<sup>[15]</sup>

$$I = C \sum_j |e_i \cdot R_j \cdot e_s|^2 \quad (3)$$

式中  $C$  为常数,  $e_i$  和  $e_s$  分别是入射光和散射光的偏振方向,  $R_j$  是材料的拉曼张量, 根据文献[9], Si 材料有三个拉曼张量. 在晶格坐标系  $x = [100]$ ,  $y = [010]$ ,  $z = [001]$  中分别为

$$\begin{aligned} R_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \\ 0 & d & 0 \end{pmatrix}, \\ R_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ R_3 &= \begin{pmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4)$$

式中,  $d$  为一非零元素.

由(3)式可知, 通过选择合适的入射偏振光和散射光方向, 可观察到不同的光学声子振动模式(即其散射效率非零), 每种振动模式与相应的本征值  $\lambda$  对应, 此即为拉曼选择定则. 依据(3)式, 应变 Si 拉曼选择定则具体见表 1(√ 表示有该模式散射效率).

## 2.2 应变张量

由(2)式可知, Secular 方程本征值  $\lambda$  是应变张

量的函数. 故欲获得拉曼光谱频移与应力的理论模型, 需首先求解典型晶面张/压、单/双应变 Si 材料的应变张量. 同时, 应变张量与应力强度密切相关. 本文基于应变张量原理及广义胡克定律, 获得了以应力为自变量的 (001), (101), (111) 晶面双轴张应变、单轴张/压应变 Si 材料应变张量. 有关该求解过程, 本文这里只强调指出两点. 对于单/双轴应变 Si, 模型建立过程中需要注意样品坐标系和晶胞坐标系之间的坐标变换(见示意例图 1); 单轴应变 Si 应变张量表达式中  $\theta$  为样品坐标  $x'$  轴与施加单轴应力  $T$  之间的夹角, 其可反映晶面内任意方向单轴应力(见示意例图 2).

表 1 (001), (101) 和 (111) 应变 Si 背散射选择定则

偏振方向		振动模式		
$e_i$	$e_s$	$R_1$	$R_2$	$R_3$
(001) 晶面背散射				
[100]	[100]	—	—	—
[100]	[010]	—	—	√
[110]	[110]	—	—	√
[110]	[110]	—	—	—
(101) 晶面背散射				
[101]	[101]	—	√	—
[101]	[010]	√	—	√
[010]	[010]	—	—	—
(111) 晶面背散射				
[111]	[111]	√	√	√
[111]	[111]	√	√	—
[110]	[110]	—	—	√

(001) 双轴应变 Si 应变张量为

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \frac{c_{11} + c_{12}}{2c_{11}c_{12} + c_{11}^2} T, \\ \varepsilon_{yy} &= \frac{c_{11} + c_{12}}{2c_{11}c_{12} + c_{11}^2} T, \\ \varepsilon_{zz} &= \frac{-c_{12}}{2c_{11}c_{12} + c_{11}^2} T, \\ \varepsilon_{xy} &= \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0; \end{aligned} \quad (5)$$

(101) 双轴应变 Si 应变张量为

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \varepsilon_{zz} = \frac{c_{11} - 2c_{12}}{2c_{11}^2 + 2c_{11}c_{12} - 4c_{12}^2} T, \\ \varepsilon_{yy} &= \frac{c_{11}}{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2} T, \\ \varepsilon_{xz} &= -\frac{1}{2c_{44}} T, \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = 0; \end{aligned} \quad (6)$$

(111) 双轴应变 Si 应变张量为

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx} &= \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \frac{2}{3(c_{11} + 2c_{12})}T, \\ \varepsilon_{xy} &= \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = -\frac{1}{3c_{44}}T;\end{aligned}\quad (7)$$

(001) 单轴应变 Si 应变张量为 (应力  $T$  为正对应张应力, 负时为压应力)

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx} &= \frac{\cos^2 \theta c_{11} + \cos 2\theta c_{12}}{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2}T, \\ \varepsilon_{yy} &= \frac{\sin^2 \theta c_{11} - \cos 2\theta c_{12}}{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2}T, \\ \varepsilon_{zz} &= -\frac{c_{12}}{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2}T, \\ \varepsilon_{xy} &= \frac{\sin 2\theta}{2c_{44}}T, \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0;\end{aligned}\quad (8)$$

(101) 单轴应变 Si 应变张量为

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx} &= \frac{\cos^2 \theta c_{11} - 2\sin^2 \theta c_{12}}{2(c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2)}T, \\ \varepsilon_{yy} &= \frac{\sin^2 \theta c_{11} - 2\cos^2 \theta c_{12}}{2(c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2)}T, \\ \varepsilon_{zz} &= \frac{c_{11}}{2(c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2)}T, \\ \varepsilon_{xy} &= \frac{\sin 2\theta}{4c_{44}}T, \\ \varepsilon_{xz} &= -\frac{\cos \theta}{2c_{44}}T, \\ \varepsilon_{yz} &= -\frac{\sin \theta}{2c_{44}}T;\end{aligned}\quad (9)$$

(111) 单轴应变 Si 应变张量为

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx} &= \frac{2\cos^2 \theta c_{11} + (1 - 4\sin^2 \theta)c_{12}}{3(c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2)}T, \\ \varepsilon_{yy} &= \frac{2\sin^2 \theta c_{11} - (3 - 4\sin^2 \theta)c_{12}}{3(c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2)}T, \\ \varepsilon_{zz} &= \frac{1}{3(c_{11} + 2c_{12})}T, \\ \varepsilon_{xy} &= \frac{1}{3}\frac{\sin 2\theta}{c_{44}}T, \varepsilon_{xz} = -\frac{\sqrt{2}}{3}\frac{\cos \theta}{c_{44}}T, \\ \varepsilon_{yz} &= -\frac{\sqrt{2}}{3}\frac{\sin \theta}{c_{44}}T.\end{aligned}\quad (10)$$

### 2.3 拉曼谱应力模型

求解 Secular 方程本征值  $\lambda$ , 代入 (5)–(10) 式各应变张量, 即可获得应变 Si 材料拉曼谱与应力的理论关系模型。值得注意的是, 依据表 1 拉曼选择定则, (001) Si 片只能观测到  $R_3$  振动模式, 即只需求解 Secular 方程本征值  $\lambda_3$  即可。对于 (101) Si 片,

若入射光偏振方向和散射光偏振方向均为  $[10\bar{1}]$  时, 只能观测到  $R_2$  一种模式; 若入射光偏振方向为  $[10\bar{1}]$ , 散射光偏振方向为  $[010]$  时,  $R_1$  和  $R_3$  被选择; 如果入射光偏振方向和散射光偏振方向均为  $[010]$  时, 则观测不到光学声子。这就意味着, 对于 (101) Si 片, 需要求解 Secular 方程全部本征值  $\lambda$ 。(111) Si 片的情况与 (101) Si 片类似, 如果入射光偏振方向和散射光偏振方向均为  $[11\bar{2}]$  时, 三种振动模式均被选择。而对于双轴应变 Si 材料, 由于 (111) 晶面的高对称性, 两个横向光学声子振动模式重叠, 故实际上仅有两个大小不同的本征值; 若入射光偏振方向为  $[1\bar{1}0]$ , 散射光偏振方向为  $[11\bar{2}]$  时, 两个横向光学声子模式被选择; 如果入射光偏振方向和散射光偏振方向均为  $[1\bar{1}0]$  时, 只能观测到纵向光学声子一种模式。

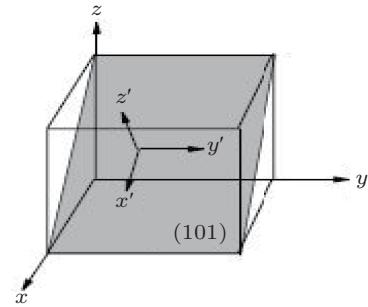


图 1 样品坐标系与晶胞坐标系

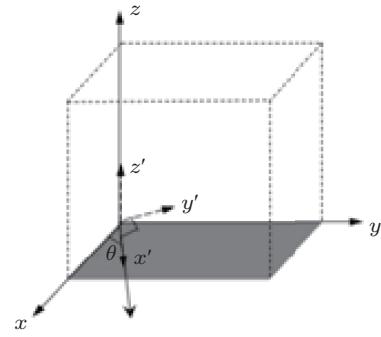


图 2 单轴应力  $\theta$  示意图

依据以上原理, (001), (101), (111) 晶面双轴应变 Si Secular 方程的本征值分别为

(011) 面为

$$\begin{aligned}\lambda_{1,2} &= p\varepsilon_{xx} + q(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}), \\ \lambda_3 &= p\varepsilon_{zz} + 2q\varepsilon_{xx};\end{aligned}$$

(101) 面为

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= p\varepsilon_{yy} + 2q\varepsilon_{xx}, \\ \lambda_2 &= p\varepsilon_{xx} + q(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + 2r\varepsilon_{xz},\end{aligned}$$

$$\lambda_3 = p\varepsilon_{xx} + q(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) - 2r\varepsilon_{xz};$$

(111) 面为

$$\lambda_{1,2} = (p + 2q)\varepsilon_{xx} - 2r\varepsilon_{xy},$$

$$\lambda_3 = (p + 2q)\varepsilon_{xx} + 4r\varepsilon_{xy}.$$

将(5), (6), (7)式及相关参数代入上式, 可得(001), (101), (111)面双轴应变Si拉曼谱线与应力的理论模型。(001)面为

$$\Delta\omega_3 = -5.07280224929709T;$$

(101)面为

$$\Delta\omega_1 = -3.46298766929452T,$$

$$\Delta\omega_2 = -1.71550743826406T,$$

$$\Delta\omega_3 = -6.38301691993283T;$$

(111)面为

$$\Delta\omega_{1,2} = -5.40967383638673T,$$

$$\Delta\omega_3 = -0.74216435471795T.$$

与双轴情况类似, (001)面张/压单轴应变Si Secular方程的本征值为(由于(101), (111)面本征值表达式十分复杂, 故未给出)

$$\lambda_1 = p\varepsilon_{zz} + q(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}),$$

$$\begin{aligned} \lambda_2 &= \frac{1}{2}\left((p+q)(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + 2q\varepsilon_{zz} \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{(p-q)^2(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + 16r^2\varepsilon_{xy}^2}\right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \lambda_3 &= \frac{1}{2}\left((p+q)(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + 2q\varepsilon_{zz} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{(p-q)^2(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + 16r^2\varepsilon_{xy}^2}\right). \end{aligned} \quad (11)$$

相应的拉曼谱应力理论模型为

$$\begin{aligned} \Delta\omega_3 &= -1.7315T \\ &\quad + 13\sqrt{(0.0171 - 0.0151 \cos 4\theta)T^2}. \end{aligned}$$

## 2.4 结果与讨论

图3为(001), (101), (111)面双轴张应变Si拉曼谱线移动 $\Delta\omega$ 与应力 $T$ 之间的关系曲线。对于(001)Si片, 根据拉曼选择定则, 仅有[001]晶向纵向振动模式对拉曼谱线的移动有贡献, 所以拉曼光谱仪只能观察到一个谱线移动, 对应一个波峰频移。当应力 $T = 1$  GPa时, 由图3可知, 波峰频移 $\Delta\omega$ 为 $-5.073 \text{ cm}^{-1}$ , 这与文献[16]中的实验结果相一致。对于其他晶面双轴张应变Si, 亦可依据下图获得实测拉曼谱线所对应的应力强度。

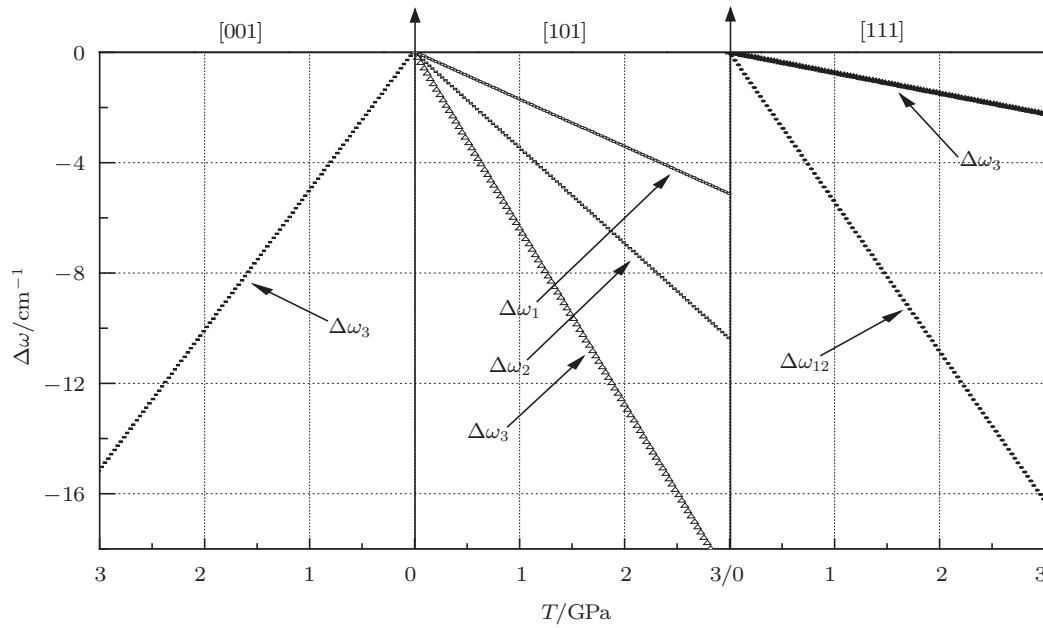


图3 双轴张应变Si拉曼谱应力模型

图4—6分别为(001), (101), (111)面单轴张/压应变Si拉曼谱线移动 $\Delta\omega$ 与应力 $T$ 及夹角 $\theta$ 之间的关系曲线。如图4所示, 对于(001)Si片沿[100]方向引入单轴压应力( $\theta = 0$ )时, 其结

果与文献[17]中的相同。对于(101)Si片, 如果入射光偏振方向和散射光偏振方向均为[10̄1]时, 拉曼光谱仪只能观察到一个谱线移动 $\Delta\omega_2$ , 其与应力对应关系见图5(b); 如果入射光偏振方

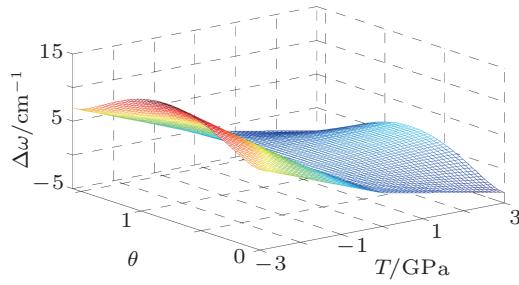


图 4 (001) 单轴张/压应变 Si 拉曼谱应力模型

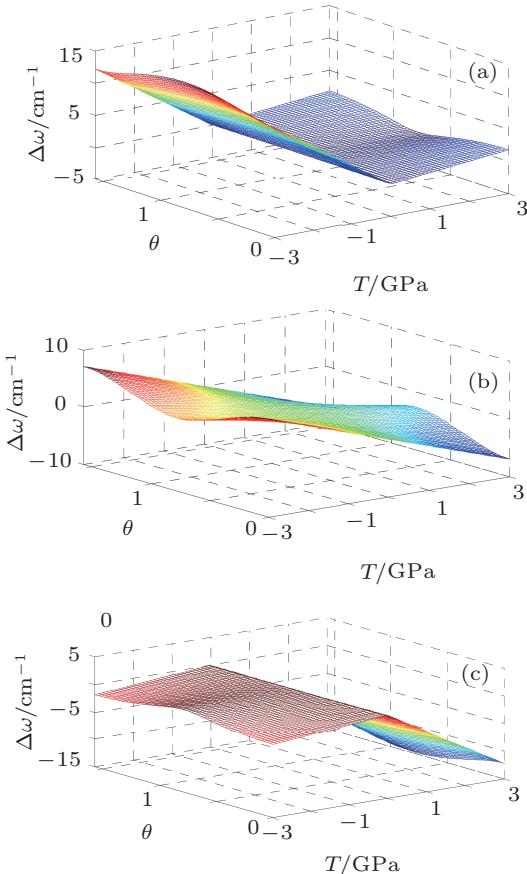


图 5 (101) 单轴张/压应变 Si 拉曼谱应力模型

向为  $[10\bar{1}]$ , 散射光偏振方向为  $[010]$  时, 会观测到两个波峰频移  $\Delta\omega_1, \Delta\omega_3$ , 其与应力对应关系见图 5(a), (c). 对于 (111) Si 片, 如果入射光偏振方向和散射光偏振方向均为  $[11\bar{2}]$  时, 三种振动模式均对拉曼谱线的移动有贡献, 可观察到三个波峰频移, 其与应力对应关系见图 6(a), (b), (c); 如果入射光偏振方向为  $[1\bar{1}0]$ , 散射光偏振方向为  $[11\bar{2}]$  或入射光

偏振方向和散射光偏振方向均为  $[1\bar{1}0]$  时, 都只能观测到一个波峰频移.

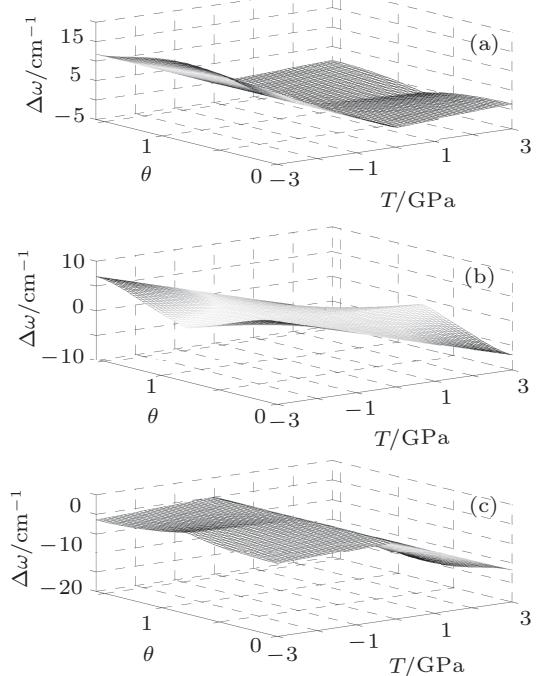


图 6 (111) 单轴张/压应变 Si 拉曼谱应力模型

### 3 结 论

本文基于应变张量原理及广义胡克定律, 获得了以应力为自变量的 (001), (101), (111) 晶面双轴张应变、单轴张/压应变 Si 材料应变张量. 依据拉曼光谱原理, 基于 Secular 方程及拉曼选择定则进一步获得了应变张量与拉曼谱线移动的定量关系, 并最终建立了单轴、双轴 (001), (101), (111) 应变 Si 材料拉曼谱峰与应力的理论关系模型 (详见本文图 3—6). 例如, 对于 (001) Si 片, 根据拉曼选择定则, 仅有 [001] 晶向纵向振动模式对拉曼谱线的移动有贡献, 拉曼光谱仪只能观察到一个谱线移动. 当应力  $T = 1$  GPa 时, 由模型 (图 3) 可知, 波峰频移  $\Delta\omega$  为  $-5.073 \text{ cm}^{-1}$ . 该结果与文献实验结果相一致, 证明了本文模型的准确性. 因此, 只要测出应变材料的拉曼谱峰, 对照本文模型即可获得该应变材料所受应力强度. 总之, 本文量化模型可为应变 Si 材料应力的测试分析提供重要理论参考.

- [1] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dai X Y, Xuan R X 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2064 (in Chinese) [宋建军, 张鹤鸣, 胡辉勇, 戴显英, 宣荣喜 2010 物理学报 **59** 2064]
- [2] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dai X Y, Xuan R X 2010 *Science in China* **53** 454
- [3] Zhang J H, Gu F, Liu Q Q, Gu B, Li M 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4226 (in Chinese) [张加宏, 顾芳, 刘清惓, 顾斌, 李敏 2010 物理学报 **59** 4226]
- [4] Gao H, Ikeda K, Hata S, Nakashima H, Wang D, Nakashima H 2011 *Acta Materialia* **59** 2882
- [5] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Fu Q 2009 *Science in China* **52** 546
- [6] Haugerud B M, Nayeem M B, Krishnaswamy R, Lu Y, Zhu C D, Cressler J D, Belford R E, Joseph A J 2005 *Solid-State Electronics* **49** 986
- [7] Olsen S H, Dobrosz P, Agaiby M B, Tsang Y L, Alatise O, Bull S J, O'Neill A G, Moselund K E, Ionescu A M, Majhi P, Buca D, Mantl S, Coulson H 2008 *Materials Science in Semiconductor Processing* **11**(5-6) 271
- [8] Mermoux M, Crisci A, Baillet F, Destefanis V, Rouchon D, Papon A M, Hartmann J M 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 013512
- [9] Qian J 2003 *MS Thesis* (Beijing: The Chinese Academy of Sciences) (in Chinese) [钱劲 2003 硕士论文 (北京: 中国科学院研究生院)]
- [10] Narayanan S, Kalidindi S R, Schadler L S 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 2595
- [11] Qiu Y, Lei Z K, Kang Y L, Hu M, Xu H, Niu H P 2004 *Journal of Mechanical Strength* **26** 389
- [12] Anastassakis E, Pinczuk A, Burstein E 1970 *Solid State Communications* **8** 133
- [13] Anastassakis E, Cantarere A, Cardona M 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7529
- [14] Brantley W A 1973 *J. Appl. Phys.* **44** 534
- [15] Loudon R 1964 *Adv. Phys.* **13** 423
- [16] Song J J, Mao Y F, Shan H S, Yang C D, Li Y M, Zhang H M, Hu H Y 2010 *IEEE International Asia Conference on Optical Instrument and Measurement* Shenzhen 120—122
- [17] Wolf I D 1996 *Semicond. Sci. Technol.* **11** 139

# Stress models relevant to Raman spectrum in uniaxial/biaxial strained Si\*

Wang Cheng<sup>†</sup> Wang Guan-Yu Zhang He-Ming Song Jian-Jun Yang Chen-Dong  
Mao Yi-Fei Li Yong-Mao Hu Hui-Yong Xuan Rong-Xi

(Key Lab of Wide Band-Gap Semiconductor Materials and Devices, School of Microelectronics, Xidian University, Xi'an 710071, China)

(Received 13 May 2011; revised manuscript received 15 June 2011)

## Abstract

Performance enhancement of strained Si material originates from the stress on it, which can be measured by Raman spectroscopy. A study of the theoretical model of strain-induced Raman spectrum frequency shift in strained Si material is of profound theoretical and practical significance. The Raman frequency shift of strained Si is significantly correlated with the stress intensity, the stress type and the crystal plane. However, the corresponding reports republished are lacking in integrality and systematization in the process of modeling. In this paper, according to the theory of Raman spectroscopy, based on Secular equation and Raman selection rules, quantitative relationships between strain tensor and Raman frequency shift for uniaxial and biaxial strained Si grown on (001), (101), and (111) SiGe substrates are achieved. On this basis, theoretical models of mechanical stress and Raman spectrum for uniaxial and biaxial strained Si materials grown on (001), (101), and (111) SiGe substrates are obtained using Hooke's law, respectively. The procedure for settling up these models is elaborate and systematic and the results obtained are comprehensive and quantificational, which can provide an important reference for the stress analysis in strained Si material.

**Keywords:** strained Si, Raman spectroscopy, stress

**PACS:** 72.80.Jc, 71.18.+y, 72.10.-d

\* Project supported by the National Ministries and Commissions (Grant Nos. 51308040203, 6139801), the Fundamental Research Funds for the Central Universities (Grant Nos. 72105499, 72104089), and the Natural Science Basic Research Plan in Shaanxi Province of China (Grant No. 2010JQ8008).

† E-mail: cheng0514@sina.com