

掺杂单晶硅纳米薄膜杨氏模量的多尺度理论模型

吕焕玲 王静

The multi-scale theoretical models of Young's modulus of doped monocrystalline silicon nano-film

Lü Huan-Ling Wang Jing

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 236103 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.236103

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.236103>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I23>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

聚酰亚胺/钽铌酸钾纳米颗粒复合材料结构与机械性能分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation study on the structure and mechanical properties of polyimide/ $\text{KTa}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ nanoparticle composites

物理学报.2015, 64(12): 126202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.126202>

层厚度和应变率对铜-金复合纳米线 ρ 阅读跋澜哪 D 度芯

Effects of layer thickness and strain rate on mechanical properties of copper-gold multilayer nanowires

物理学报.2015, 64(1): 016201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.016201>

铒离子注入绝缘体上 Si 的射程分布研究

Investigation on range distribution of Er ions implanted in silicon-on-insulator

物理学报.2014, 63(17): 176101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.176101>

掺杂对多层 Ge/Si(001) 量子点光致发光的影响

Effect of doping on the photoluminescence of multilayer Ge quantum dots deposited on Si(001) substrate

物理学报.2013, 62(7): 076108 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.076108>

量子阱 Si/SiGe/Sip 型场效应管阈值电压和沟道空穴面密度模型

Threshold-voltage and hole-sheet-density model of quantum well Si/SiGe/Si p field effect transistor

物理学报.2012, 61(16): 166101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.166101>

掺杂单晶硅纳米薄膜杨氏模量的多尺度理论模型*

吕焕玲 王静†

(新疆大学物理科学与技术学院, 乌鲁木齐 830046)

(2015年6月2日收到; 2015年7月27日收到修改稿)

硅纳米材料物理性能的研究对其在半导体技术中的应用是十分重要的. 而掺杂有利于改善硅纳米材料的物理特性, 提高应用价值, 所以本文基于半连续体模型运用 Keating 形变势, 通过模型计算, 研究了不同位置及不同掺杂浓度的单晶硅纳米薄膜 [100] 方向的杨氏模量, 分析了掺杂浓度及掺杂位置不同时硅膜杨氏模量与膜厚关系, 结果表明, 与纯硅膜杨氏模量相比, 不同位置的掺杂对硅膜杨氏模量的影响并不明显, 不同浓度的掺杂对硅膜杨氏模量的影响较小. 而随着硅膜厚度的不断增加, 掺杂硅膜杨氏模量与纯硅膜杨氏模量的变化趋势一致, 特别是较小尺寸时的硅膜杨氏模量变化较大. 说明影响硅膜杨氏模量的主要因素是硅膜厚度. 该计算结果对研究硅纳米材料的其他力学特性有一定的参考价值, 也为进一步研究掺杂对纳米硅材料力学性能的影响提供一种全新思路.

关键词: 硅纳米薄膜, 杨氏模量, 掺杂

PACS: 61.72.uf, 62.25.-g, 81.40.Jj

DOI: 10.7498/aps.64.236103

1 引言

单晶硅纳米材料展现了很多全新优异的性能^[1,2], 这使得其在很多领域都具有广泛的应用, 为科学家们所青睐. 上世纪 50 年代就已经开始了对硅材料机械性能的研究^[3]. 已有的研究表明, 单晶硅纳米材料脆性较高^[4-6], 其杨氏模量较低^[7,8], 影响了它在一些领域的应用价值. 为了改善硅纳米材料的力学性能, 1975 年, Hu 等^[9,10] 就已提出直拉单晶硅中的氧增强了硅片的机械强度, 表明了晶体中的杂质会给单晶硅材料带来意想不到的作用和不可预测的性能, 这给研究人员得以启发, 开启了科学家对杂质影响硅材料性能的大量研究. 近几年来对于单晶硅材料掺杂的研究数不胜数, 2010 年 Zeng 等^[11] 的研究表明, 浓度为 $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 的重掺磷能够少量提高直拉单晶硅压痕断裂韧度; 2011 年 Jing 等^[12] 通过分子动力学模拟方法研究了覆盖

在石墨烯上的单晶硅膜的杨氏模量, 结果表明其随硅膜厚度的增加而增加, 随后又进一步研究了覆盖在有缺陷的石墨烯上的单晶硅膜四个晶向上的杨氏模量和临界应力, 结果表明其随硅膜厚度的增加而增加^[13]; 2012 年 Pi^[14] 通过在硅纳米晶体内部和表面掺杂硼元素和磷元素的研究, 表明掺杂硼、磷元素会改善硅纳米晶体的电学和光学性质; 同年 Ma 等^[15] 研究了轻钴掺杂对硅纳米晶体的光学性质的影响, 并与掺硼、磷元素的影响进行了比较, 表明轻钴掺杂的形成能介于掺硼、磷元素之间, 但不受掺杂剂间距的影响.

目前在理论模型计算方面对有关杂质磷对单晶硅纳米材料杨氏模量影响的研究还较少. 本文基于半连续体模型^[16], 建立多尺度的掺杂硅膜的杨氏模量模型, 运用了 Keating 形变势模型^[17], 研究在硅晶胞两种不同位置处掺杂对单晶硅膜杨氏模量的影响, 以及不同磷元素掺杂浓度对单晶硅膜杨氏模量的影响.

* 国家自然科学基金 (批准号:11064014) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wjxju@163.com

2 杨氏模量的计算与分析

掺杂有助于提高单晶硅纳米材料的力学特性, 本文所讨论的掺杂元素为磷. 如果 VA 主族磷元素存在于硅原子中, 它会取代晶格上的硅原子, VA 主族磷元素周围的五个价电子中的四个电子会同临近的硅原子形成共价键, 剩余一个电子只受到微弱原子实库仑势吸引, 很容易脱离磷原子实作用成为导带电子.

2.1 掺杂单晶硅纳米薄膜杨氏模量的计算

如图 1 所示的一个典型的硅晶胞, 可视为由四个处在不同位置的正四面体组成, 正四面体的中心原子处在硅晶胞的体对角线的四分之一处, 将其中任意一个正四面体平移都可以与其他的正四面体重合. 已有研究表明^[18,19], 由于不同晶面上的硅原子与相邻原子在三维空间的分布不同, 因而这些晶面上原子的硅硅键被替换的难易程度不同. 因此掺杂时考虑在硅晶胞 (100) 晶面上顶角处及四分之一体对角线处进行磷元素掺杂. 本文主要讨论对单

晶硅膜进行重掺杂, 掺杂浓度为 $1 \times 10^{18} - 5 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ 时为重掺杂^[11], 当掺杂浓度最大为 $5 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ 时, 即每 1 nm^3 的硅膜体积中掺杂有 5 个磷原子, 说明 6 个硅晶胞可掺杂的最大浓度为 5 个磷原子.

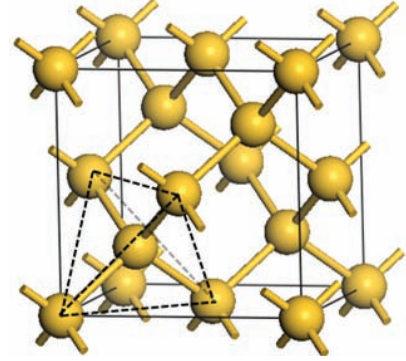


图 1 硅晶胞示意图

Fig. 1. Silicon cell schematic.

本文首先讨论每 8 个硅晶胞中掺杂 1 个磷原子, 即掺杂浓度为 $7.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时单晶硅薄膜的杨氏模量, 分别在硅晶胞的四分之一体对角线及顶角位置处进行掺杂, 如图 2 所示.

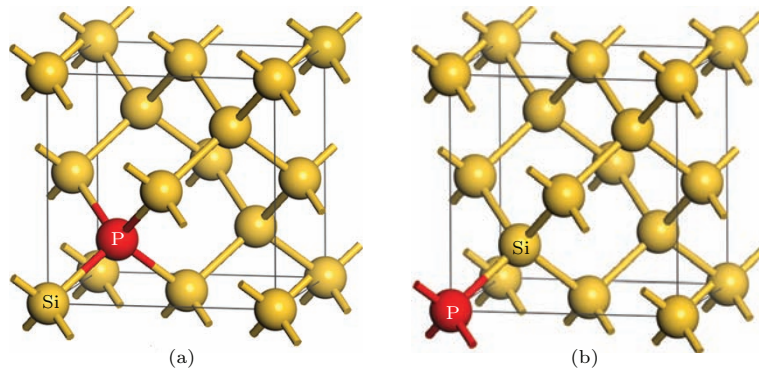


图 2 (a) 硅晶胞四分之一体对角线处掺杂 P 元素示意图; (b) 硅晶胞顶角处掺杂 P 元素示意图

Fig. 2. (a) Doping phosphorus atom at a quarter of body diagonal of the Silicon cell; (b) doping phosphorus atom at vertex of the Silicon cell.

Keating 形变势模型^[17]是一种能够准确描述硅结构的形变势能表述, 被广泛用来研究硅及硅的化合物^[20,21], 它是描述两体势能变化和三体势能变化的模型. 本文采用 Keating 形变势模型计算掺杂硅膜体系的形变能, 形变能可以表示为

$$U = \frac{1}{2} k_b \sum_i (\mathbf{R}_i^2 - \mathbf{r}_i^2)^2 + \frac{1}{2} k_\theta \sum_{i,j} (\mathbf{R}_i \cdot \mathbf{R}_j - \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j)^2, \quad (1)$$

其中, \mathbf{r}_i 和 \mathbf{r}_j 分别为第 i 和第 j 个键平衡状态时的键矢量, \mathbf{R}_i , \mathbf{R}_j 分别为第 i 和第 j 个键变形后的键矢量. k_b 称为键伸缩力常数, k_θ 称为键弯曲力常数.

2.1.1 硅晶胞四分之一体对角线处掺杂磷

用磷原子替换硅晶胞四分之一体对角线处硅原子, 如图 2 (a) 所示, 设硅晶格常数为 $4a (= 5.432 \text{ \AA})$, 硅与硅元素间的键伸缩力常数用 k_b^{Si} 表示, 键弯

曲力常数用 k_{θ}^{si} 表示. 掺杂磷元素后, 磷元素近邻和次近邻的拉伸和弯曲形变的力常数不同, 设磷与硅元素间的拉伸力常数为 k_{b}^{p} , 弯曲力常数为 k_{θ}^{p} .

由 Keating 的形变势模型可以得到一个纯硅晶胞的形变能为

$$\begin{aligned}
 U_{\text{Cell}}^{\text{si}} = & 8k_{\text{b}}^{\text{si}}a^4[(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} + \gamma_{xy} \\
 & + \gamma_{zx} + \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} - \gamma_{xy} + \gamma_{zx} - \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} + \gamma_{xy} - \gamma_{zx} - \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} - \gamma_{xy} - \gamma_{zx} + \gamma_{yz})^2] \\
 & + 8k_{\theta}^{\text{si}}a^4[(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} - \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} + \gamma_{xy})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} + \gamma_{zx})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} - \gamma_{xy})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} + \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} - \gamma_{zx})^2]. \quad (2)
 \end{aligned}$$

形变分量与位移分量的关系表述如下 [22] (以第 l 层原子为例):

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{xx} &= \frac{\partial u}{\partial x}, \\
 \varepsilon_{yy} &= \frac{\partial v}{\partial y}, \\
 \varepsilon_{zz} &= \frac{w^{l+1} - w^l}{a}, \\
 \gamma_{xy} &= \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}, \\
 \gamma_{zx} &= \frac{u^{l+1} - u^l}{a} + \frac{\partial w}{\partial x}, \\
 \gamma_{yz} &= \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{v^{l+1} - v^l}{a}, \quad (3)
 \end{aligned}$$

其中, $\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{zz}, \gamma_{xy}, \gamma_{zx}, \gamma_{yz}$ 为形变分量, u, v, w 为原子沿着坐标轴 x, y, z 方向的位移分量.

则一个掺杂原子的硅晶胞的形变能为

$$\begin{aligned}
 U_{\text{Cell}}^{\text{p}} = & (6k_{\text{b}}^{\text{si}}a^4 + 2k_{\text{b}}^{\text{p}}a^4) \\
 & \times [(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} + \gamma_{xy} + \gamma_{zx} + \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} - \gamma_{xy} + \gamma_{zx} - \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} + \gamma_{xy} - \gamma_{zx} - \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} - \gamma_{xy} - \gamma_{zx} + \gamma_{yz})^2] \\
 & + [(6k_{\theta}^{\text{si}}a^4 + 2k_{\theta}^{\text{p}}a^4) \\
 & \times (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} - \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} + \gamma_{xy})^2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} + \gamma_{zx})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} - \gamma_{xy})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} + \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} - \gamma_{zx})^2]. \quad (4)
 \end{aligned}$$

当硅晶胞掺杂浓度为 $7.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时, 在四分之一体对角线处掺杂, 假设整个硅膜有 N 层硅晶胞, 每层原子厚度为 a , 则根据文献 [23] 可定义硅膜厚度为 $h = (4N + 1)a$. 假设由于硅膜在长宽方向为较大尺寸, 而厚度方向在纳米尺寸, 故可以选择一个晶胞长宽, 高与硅膜厚度相同的单元作为计算单元, 则其体积为 $V = 16(4N + 1)a^3$. 则硅膜计算单元的形变能密度为

$$\begin{aligned}
 f &= \frac{U_{\text{element}}}{V} = \frac{\sum_l^N U_{\text{cell}}}{V} \\
 &= \frac{\frac{1}{8} \sum_l^N U_{\text{cell}}^{\text{p}} + \frac{7}{8} \sum_l^N U_{\text{cell}}^{\text{si}}}{V}. \quad (5)
 \end{aligned}$$

由应力与形变的关系

$$\sigma_x = E\varepsilon_x. \quad (6)$$

且形变能密度是形变的二次函数关系

$$\sigma = \partial f / \partial \varepsilon_{xx}. \quad (7)$$

可求得掺杂单晶硅膜的杨氏模量为

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{Na}{4N + 1} \left(\frac{31}{8} k_{\text{b}}^{\text{si}} + \frac{93}{16} k_{\theta}^{\text{si}} \right) \\
 &+ \frac{Na}{4N + 1} \left(\frac{1}{8} k_{\text{b}}^{\text{p}} + \frac{3}{16} k_{\theta}^{\text{p}} \right). \quad (8)
 \end{aligned}$$

2.1.2 硅晶胞顶角处掺杂

用磷原子替换硅晶胞顶角处的硅原子, 如图 2(b) 所示. 通过计算, 一个掺杂原子晶胞的形变能为

$$\begin{aligned}
 U_{\text{Cell}}^{\text{p}} = & 6k_{\text{b}}^{\text{si}}a^4[(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} + \gamma_{xy} \\
 & + \gamma_{zx} + \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} - \gamma_{xy} + \gamma_{zx} - \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} + \gamma_{xy} - \gamma_{zx} - \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} - \gamma_{xy} - \gamma_{zx} + \gamma_{yz})^2] \\
 & + 2k_{\text{b}}^{\text{p}}a^4(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} + \gamma_{xy} \\
 & + \gamma_{zx} + \gamma_{yz})^2 \\
 & + 2k_{\theta}^{\text{si}}a^4[(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} - \gamma_{xy}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \gamma_{zx} - \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} + \gamma_{xy} - \gamma_{zx} - \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} - \gamma_{xy} - \gamma_{zx} + \gamma_{yz})^2] \\
 & + 8k_{\theta}^{si} a^4 [(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} - \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} + \gamma_{xy})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} + \gamma_{zx})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} - \gamma_{xy})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} + \gamma_{yz})^2 \\
 & + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} - \gamma_{zx})^2]. \quad (9)
 \end{aligned}$$

同理可得, 当硅晶胞掺杂浓度为 $7.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时, 硅膜的杨氏模量为

$$\begin{aligned}
 E = \frac{Na}{4N+1} \left(\frac{127}{32} k_b^{si} + 6k_{\theta}^{si} \right) \\
 + \frac{Na}{32(4N+1)} k_b^p. \quad (10)
 \end{aligned}$$

(8) 和 (10) 式中, 硅硅原子间力常数 $k_{\theta}^p, k_{\theta}^{si}$ 采用文献 [24] 的数值, 即 $k_b^{si} = 6.187 \times 10^{20} \text{ N/m}$, $k_{\theta}^{si} = 1.813 \times 10^{20} \text{ N/m}$, 磷硅原子间力常数 k_b^p, k_{θ}^p 采用文献 [25] 的数值, 即 $k_b^p = 7.897 \times 10^{20} \text{ N/m}$, $k_{\theta}^p = 1.561 \times 10^{20} \text{ N/m}$.

由 (8) 式和 (10) 式可给出不同掺杂位置的杨氏模量, 则掺杂浓度为 $7.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 的单晶硅膜的杨氏模量随尺度的变化曲线, 如图 3 所示.

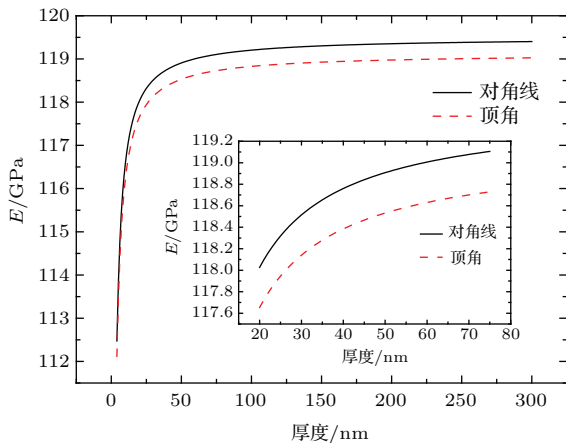


图 3 四分之一体对角线位置处和顶角位置处掺杂 P 原子的硅膜杨氏模量与厚度关系对比图

Fig. 3. Young's modulus of the P-doped Silicon cell schematic at vertex and a quarter of body diagonal vertex as a function of thickness.

由图 3 可看出, 掺杂后硅膜的杨氏模量随厚度的减小而减小, 其杨氏模量与厚度的变化趋势和纯硅膜的变化趋势相同 [23,26], 这个结果与 Li 等 [26]

通过测量不同厚度硅梁谐振频率, 进而得到杨氏模量随厚度变化的趋势相同. 说明掺杂后硅膜的杨氏模量与纯硅膜一样也具有尺寸效应. 当硅膜厚度在 4—50 nm 间, 杨氏模量随膜厚增加而增加的趋势十分明显, 当膜厚继续增加到 50 nm 以后, 杨氏模量值继续缓慢增加, 最后趋于定值. 当硅膜厚度逐渐增大时, 我们可以看出, 不同位置掺杂的杨氏模量基本都趋于一个定值, 杨氏模量值大概为 119 GPa. 不同掺杂位置处硅膜杨氏模量之间的差别很小, 由图 3 的放大图可以明显看出, 在四分之一体对角线处掺杂的杨氏模量与顶角处掺杂的杨氏模量, 差值在 0.4 GPa 左右. 同时, 掺杂后硅膜的杨氏模量与纯硅膜的杨氏模量相比, 差别也很小, 这是由于磷硅原子间力常数与硅硅原子间力常数的区别不大. 由此可知, 掺杂位置不同对硅膜杨氏模量的影响并不明显, 而影响硅膜杨氏模量的主要因素是硅膜厚度.

2.2 不同掺杂浓度对硅膜杨氏模量的影响

在讨论了不同位置掺杂对硅膜杨氏模量的影响基础上, 我们继续讨论不同位置掺杂不同浓度对硅膜杨氏模量的影响. 假设分别在 2 个、4 个、6 个、8 个、10 个、12 个硅晶胞中掺入一个磷原子, 其掺杂浓度分别为 $30 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $15 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $10 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $7.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $6 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

下面给出在单晶硅膜晶胞中不同位置处掺杂不同浓度磷原子的杨氏模量与膜厚关系, 如图 4 所示.

由图 4 可以看出, 当掺杂浓度变化时, 掺杂硅膜的杨氏模量与纯硅膜具有一致的尺寸效应 [26]; 当随着磷元素掺杂浓度的增加, 不同厚度处硅膜的杨氏模量值都有逐渐增大的趋势, 掺杂浓度越大, 则磷原子与硅原子间的作用力就越大, 硅膜杨氏模量的变化趋势就越明显, 然而掺杂浓度的影响相对于薄膜厚度对杨氏模量的影响还是微弱的; 此外当掺杂浓度为 $30 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 和 $15 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时, 四分之一体对角线位置处掺杂的杨氏模量变化显然要比顶角处掺杂的变化大, 当掺杂浓度逐渐减小时, 杨氏模量变化逐渐减小, 整体来看, 四分之一体对角线处掺杂的杨氏模量变化要比顶角处掺杂的变化明显, 这是由于晶胞内原子间的相互作用要比晶胞间原子的相互作用要大, 所以四分之一体对角

线处掺杂的磷原子对硅膜杨氏模量的影响会稍明显一些. 因此, 可以得出结论, 硅晶胞不同位置 and 不同浓度的掺杂都会影响硅膜的杨氏模量, 但是这些因素的影响都较小, 而影响硅膜杨氏模量的主要因素还是硅膜的厚度.

以上结果表明重掺杂对硅膜杨氏模量的影响较小, 因此, 对于单晶硅膜材料的轻掺杂的影响较重掺杂就更微弱了, 影响掺杂单晶硅膜杨氏模量的主要因素是其厚度方向的尺度.

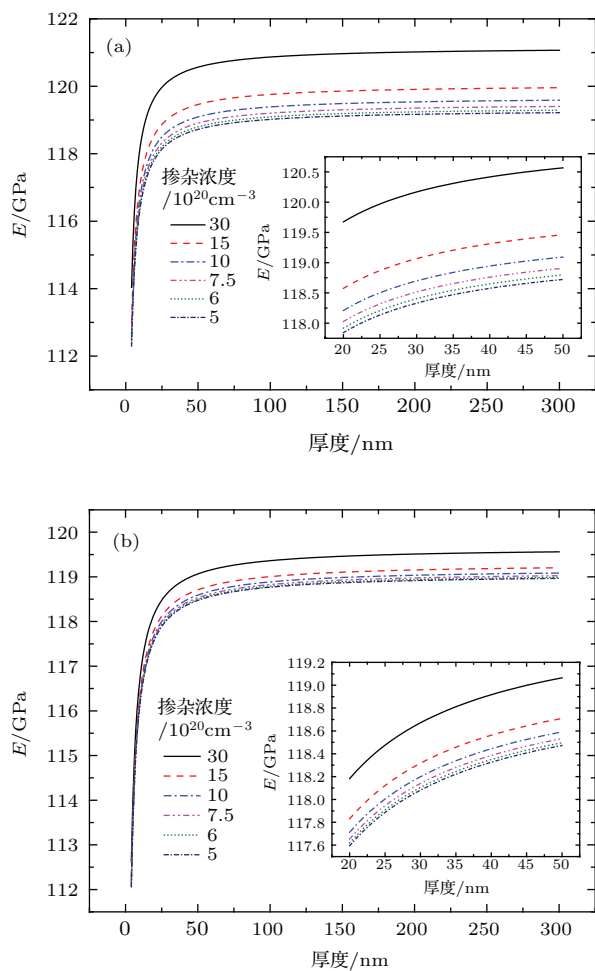


图4 (a) 四分之一体对角线位置处不同掺杂浓度的硅膜杨氏模量与厚度关系对比图; (b) 顶角处位置处不同掺杂浓度的硅膜杨氏模量与厚度关系对比图

Fig. 4. (a) Young's modulus of the Silicon cell with different doping concentration at a quarter of body diagonal vertex as a function of thickness; (b) Young's modulus of the Silicon cell with different doping concentration at vertex as a function of thickness.

3 结 论

本文运用了半连续体模型, 通过建立多尺度的掺杂硅膜的杨氏模量模型, 研究在硅晶胞四分之一

体对角线位置处及顶角位置处掺杂磷原子对单晶硅膜杨氏模量的影响, 以及掺杂不同浓度磷元素对单晶硅膜杨氏模量的影响, 并进行了分析和讨论. 得到结论如下: 在硅晶胞不同位置处掺杂, 掺杂浓度为 $7.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, 掺杂硅膜的杨氏模量与纯硅膜的杨氏模量具有一致的尺寸效应, 并且在四分之一体对角线处掺杂的杨氏模量略大于顶角处掺杂的杨氏模量, 说明掺杂位置的不同对硅膜杨氏模量的影响并不明显, 而影响硅膜杨氏模量的主要因素是硅膜厚度; 在硅晶胞不同位置处掺杂不同浓度的磷元素, 随着掺杂浓度的增加, 硅膜的杨氏模量有增大的趋势, 掺杂浓度越大, 变化趋势越明显, 说明了掺杂磷元素有利于改善硅膜的杨氏模量, 但效果并不明显, 而影响硅膜杨氏模量的主要因素是硅膜的膜厚而不是掺杂浓度. 该计算结果对研究掺杂硅纳米材料的力学特性具有一定的参考价值.

参考文献

- [1] Li D S, Yang D R, Que D L 2000 *Mater. Sci. Eng.* **18** 100104 (in Chinese) [李东升, 杨德仁, 阙端麟 2000 材料科学与工程 **18** 100104]
- [2] Jiang R H, Xiao S Z 2002 *Semiconductor Technology* **27** 36 (in Chinese) [蒋荣华, 肖顺珍 2002 半导体技术 **27** 36]
- [3] Felthamand P, Banerjee R 1992 *J. Mater. Sci.* **27** 1626
- [4] Fetterman G P, Greg S 2000 *Lubricants World* **10** 1517
- [5] Lawn B R, Hockey B, Wiederhorn S 1980 *J. Mater. Sci.* **15** 1207
- [6] Hauch J A, Holland D, Marder M P, Swinney H L 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 3823
- [7] Broughton J Q, Meli C A, Vashishta P, Kalia R 1997 *Phys. Rev. B* **56** 1618
- [8] Li X X, Takahito O, Lin R M 2003 *Microelectron. Eng.* **65** 0112
- [9] Hu S M, Patrick W J 1975 *J. Appl. Phys.* **46** 18691874
- [10] Hu S M 1977 *Appl. Phys. Lett.* **31** 53
- [11] Zeng Z D, Ma X Y, Chen J H, Zeng Y H, Yang D R, Liu Y G 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 15
- [12] Jing Y H, Aluru N R 2011 *Comp Mater Sci.* **50** 3063
- [13] Jing Y H, Guo L H, Sun Y, Shen J, Aluru N R 2013 *Surf Sci.* **611** 80
- [14] Pi X D 2012 *J. Nanomater* **2012** 903912
- [15] Ma Y S, Chen X B, Pi X D, Yang D R 2012 *J. Nanopart Res.* **14** 0208
- [16] Sun C T, Zhang H T 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 1212
- [17] Keating P N 1966 *Phys. Rev.* **145** 637
- [18] Kang J C, Han Q J, Yin B L 2001 *Computer Engineering and Application* **18** 141 (in Chinese) [康建初, 韩秋菊, 尹宝林 2001 计算机工程与应用 **18** 141]

- [19] Huang Q A 1996 *Silicon Micromachining Technology* (Beijing: Science Press) p259 (in Chinese) [黄庆安 1996 硅微机械加工技术 (北京: 科学出版社) 第 259 页]
- [20] Burlakov V M, Briggs G A D, Sutton A P 2001 *Appl. Phys. Lett.* **86** 3052
- [21] Alfthan S V, Kuronen A, Kaski K 2003 *Phys. Rev. B* **68** 073203
- [22] Huang Z L 1998 *Elastic Mechanics Introductory Tutorial* (Volume 2) (Beijing: Higher Education Press) pp8–10 (in Chinese) [徐芝纶 1998 弹性力学简明教程 (北京: 高等教育出版社) 第 8—10 页]
- [23] Wang J 2008 *Ph. D. Dissertation* (Nanjing: Southeast University) (in Chinese) [王静 2008 博士学位论文 (南京: 东南大学)]
- [24] Rucker H, Methfessel M 1995 *Phys. Rev. B* **52** 11059
- [25] Wang J 2012 *The Sixth Asia-Pacific Conference on Transducers and Micro/Nano Technologies, Nanjing, China, July 8–11, 2012* ac12000109
- [26] Li X X, Takahito O, Wang Y L, Masayoshi E 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 3180

The multi-scale theoretical models of Young's modulus of doped monocrystalline silicon nano-film*

Lü Huan-Ling Wang Jing[†]

(College of Physical Science and Technology, XinJiang University, Urumqi 830046, China)

(Received 2 June 2015; revised manuscript received 27 July 2015)

Abstract

The study of physical properties of silicon nano-materials is very important for its application in semiconductor technology. Doping is beneficial to improving the physical properties of silicon nano-materials, it can improve the application value as well. Young's modulus of the crystal in the direction of [100] of the doped silicon nano-film is studied by an analytical model, which is based on the semi-continuum approach. In the model, the strain energy is obtained from the Keating strain energy model. The relationship between the Young's modulus and film thickness are also discussed. Results show that the Young's modulus decreases with the increase of the thickness of the silicon film, especially with the small size; the variation tendency of the Young's modulus of doped silicon films is similar to the pure silicon film. And the Young's modulus decreases as the doping concentration decreases for different doping position. Neither the doping concentration nor the doping position, it is the thickness that shows the most important effect on the Young's modulus of the doped silicon nano-film. Findings in this paper may serve as a reference for similar study, and can offer a totally new idea of the doped monocrystalline silicon materials as well.

Keywords: silicon nano-film, Young's modulus, Doping

PACS: 61.72.uf, 62.25.-g, 81.40.Jj

DOI: 10.7498/aps.64.236103

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11064014).

† Corresponding author. E-mail: wjxju@163.com