

一种硅纳米梁负载-偏转特性的多尺度模型*

鲍 芳 于 虹 陆清茹 黄庆安†

(东南大学 MEMS 教育部重点实验室, 南京 210096)

摘要: 根据能量法, 提出了一种用于分析硅纳米梁静态弯曲的多尺度模型. 与传统的连续介质模型相比, 该模型考虑了梁厚度方向进入纳米尺度所带来的物理特性, 因此, 可以适用于纳米尺寸到宏观尺寸的硅梁. 计算结果表明, 当梁的尺寸达到纳米量级后表面原子的弛豫效应对梁的弯曲也有很大的影响. 将该模型分析结果与连续介质模型进行了比较, 在宏观尺寸下两种模型趋于一致.

关键词: 纳机电系统; 双端固支梁; 多尺度; 弯曲

EEACC: 2575D

中图分类号: O484.2

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2007)12-1979-04

1 引言

超薄纳米梁已用于超高精度传感器^[1]、超高频混频器^[2]等. 与以往的微米梁相比, 纳米梁在尺寸上进一步缩小, 且性能获得了极大的提高. 但是, 由于器件进入了纳米尺度, 一些以往不曾考虑的效应逐渐变得明显, 如尺寸效应和表面效应. 这些效应不仅可以使梁谐振频率提高、灵敏度变大^[3], 而且还影响到纳机电梁的其他性能, 使纳机电谐振梁表现出不同于微机电梁的特性. 然而, 在研究纳米梁的性能时我们通常沿用传统的宏观连续介质理论模型^[4], 致使模型的结论与实际结论存在一定的偏差. 因此需要针对纳机电梁建立理论模型.

在厚度方向(即 z 方向)上, 与硅的晶格常数 a 相比, 纳米梁的厚度 h 是纳米量级, h/a 是一个有限大小的数值, 描述其状态的物理量的分立特性已经非常明显, 不能继续使用连续函数来表征; 而在其长度(x)方向和宽度(y)方向上, 尺寸还保持微米量级, 连续性假设仍然适用. 针对这种纳米双端固支梁, 本文提出了一种多尺度负载-偏转模型. 在计算纳米薄梁的杨氏模量时, 采用半连续体方法^[5], 计算出纳米梁受力弯曲储存的形变势能, 利用变分理论得出受力时梁的负载-偏转计算公式.

基于这一模型, 本文计算并分析了纳米梁受到外加均布载荷时的弯曲. 结果表明, 纳米梁的负载-偏转受到表面弛豫等效应的影 响, 尺寸越小, 这种影响越明显; 与传统的连续体负载-偏转模型相比, 在纳米尺度下, 该模型得到的偏转更大. 但随着尺寸的

增加, 在宏观尺度下, 与连续体模型趋于一致. 因此, 该模型可以为研究、设计硅梁负载-偏转性能时提供参考.

2 纳米梁的弯曲模型

图 1 是一个长度和宽度分别为 A 和 B ($A \gg B$), 厚度方向有 $2N$ 个晶胞的硅纳米梁的示意图. 笛卡儿坐标 x 和 y 方向平行于梁的中面, z 轴垂直于中面. 图中还给出了一个硅晶格单元内部的原子排列, 晶格常数为 a . 在 z 方向施加均布载荷 q (单位是 N/m^2), 则位于坐标 $(x, y, z^{(i)})$ 处的原子沿三个坐标轴方向的位移分别是 $u_{ij}^i, v_{ij}^i, w_{ij}^i$. 在多尺度模型(也称为半连续体模型)中, 将原子间的作用势等效成弹性系数为 k 的弹簧来考虑^[5]. k 与原子势函数及原子成键结构有关, 在文中弹性系数 $k = 261.4 \text{N}/\text{m}$ ^[6]. 在梁的表面, 由于弛豫现象, 表面若干层的共价键与内层原子不同, 导致晶格常数变化为 $t \times a$ (t 表示弛豫系数)^[7,8]. 本文假设仅上下表面各三层晶胞发生了弛豫效应. 此外在定义每层原

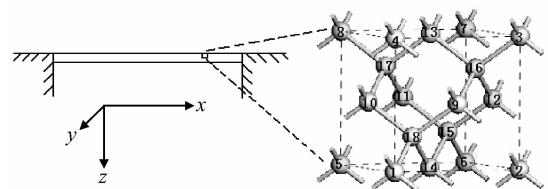


图 1 双端固支梁的示意图

Fig.1 Schematic structure of a double clamped silicon nanobeam and a cell of silicon crystal lattice

* 国家重点基础研究发展计划资助项目(批准号:2006CB300404)

† 通信作者. Email: hqa@seu.edu.cn

2007-04-26 收到, 2007-07-29 定稿

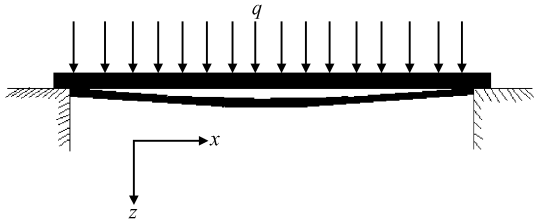


图2 谐振梁受力弯曲及其坐标

Fig.2 Curvature of the silicon nanobeam induced by external force

子厚度时,不同的定义会引起结果的差异^[8~10].这里假定单层原子的厚度为两层原子的间距.基于这种假设,纳米梁在受力弯曲时,其形变势能的体密度(单位是 J/m^3)可以表示成^[11]

$$U = \frac{k}{12Na} \times (2N - 6) [(\epsilon_x + \epsilon_y + \epsilon_z)^2 + \gamma_{xy}^2 + \gamma_{xz}^2 + \gamma_{yz}^2] + \frac{3k}{2Nat(2 + t^2)} \times [(\epsilon_x + \epsilon_y + t\epsilon_z)^2 + \gamma_{xy}^2 + t^2\gamma_{xz}^2 + t^2\gamma_{yz}^2] \quad (1)$$

其中各个应变分量的定义如下:

$$\begin{aligned} \epsilon_x &= \frac{\partial u}{\partial x}, \epsilon_y = \frac{\partial v}{\partial y}, \epsilon_z = \frac{w^{(l+1)} - w^{(l)}}{a}, \\ \gamma_{xy} &= \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}, \gamma_{xz} = \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{u^{(l+1)} - u^{(l)}}{a}, \\ \gamma_{yz} &= \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{v^{(l+1)} - v^{(l)}}{a} \end{aligned} \quad (2)$$

式中 u, v, w 分别表示沿坐标 x, y, z 三个方向的位移.

3 双端固支梁弯曲的模拟结果及分析

如图2所示为双端固支纳米梁受到均匀载荷 q 后发生弯曲的示意图.这里考虑梁发生的是大形变弯曲,其形变不仅包含弯曲,还包含轴向拉伸.梁的轴向应变满足关系 $\epsilon_x = -z \frac{d^2 w}{dx^2} + \frac{1}{A} \times \int_0^A \frac{1}{2} \left(\frac{dw}{dx} \right)^2 dx$. 如果不考虑纳米梁制备过程中的残余应力,则梁的形变势能可以表示为

$$W_s = \sum_{z=-Na}^{Na} \int_0^A \int_0^B U a dx dy \quad (3)$$

式中 z 的取值为整数个晶格常数.在横向载荷 q 的作用下,纳米梁在 x, y 方向的位移 u, v 可以忽略不计,并且在几何尺寸上,满足 $A \gg B$,梁的挠度函数 $w(x, y)$ 可以简化为一个单变量函数 $w(x)$,这里使用余弦形式的试解

$$w(x) = \frac{w_0}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{A} \right), \quad 0 \leq x \leq A \quad (4)$$

将(4)式代入(3)式,并由(1),(2)式可以得到弹性能

$$\begin{aligned} W_s &= \frac{\pi^4 kB}{8A^3} \times \frac{N-3}{3} + \frac{3}{t(2+t^2)} (N-3+3t) w_0^4 + \\ &\frac{\pi^4 kB}{4A^3} \times \frac{N-3}{3} + \frac{3}{t(2+t^2)} (N-3+3t) \times \\ &\frac{1}{N-3+3t} \left\{ \frac{16a^2(N-3)(N-2)(2N-5)}{6} + \right. \\ &\left. 16a^2[3(N-3)^2 + 14t^2 + 12t(N-3)] \right\} w_0^2 \end{aligned} \quad (5)$$

在 $z = -Na$ 处,即纳米梁的上表面受到了均布载荷 q 的作用,这里考虑的是静态过程,固支梁始终保持平衡,没有动能的改变,于是外力势能的减少完全转换为形变势能,以减少固支梁本身的形变势能,在发生弯曲时,该负载力对梁所做的功可以表示为:

$$\begin{aligned} W_q &= \int_0^A qBw(x) dx = \frac{qBw_0}{2} \int_0^A \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{A} \right) dx \\ &= \frac{qABw_0}{2} \end{aligned} \quad (6)$$

弯曲固支梁的总势能是 $W = W_s - W_q$,根据势能最低原理,在所有满足边界条件的挠度曲线中,实际上存在一条曲线使总势能为极值,达到稳定平衡状态^[12],即

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial w_0} &= \frac{\pi^4 k}{A^4} \times \frac{N-3}{3} + \frac{3}{t(2+t^2)} (N-3+3t) w_0^3 + \\ &\frac{\pi^4 k}{A^4} \times \frac{N-3}{3} + \frac{3}{t(2+t^2)} (N-3+3t) \times \\ &\frac{1}{N-3+3t} \left\{ \frac{16a^2(N-3)(N-2)(2N-5)}{6} + \right. \\ &\left. 16a^2[3(N-3)^2 + 14t^2 + 12t(N-3)] \right\} w_0 - q = 0 \end{aligned} \quad (7)$$

上述方程可以记作:

$$cw_0^3 + c \times dw_0 - q = 0 \quad (8)$$

其中,

$$\begin{aligned} c &= \frac{\pi^4 k}{A^4} \times \frac{N-3}{3} + \frac{3}{t(2+t^2)} (N-3+3t) \\ d &= \frac{1}{N-3+3t} \left\{ \frac{16a^2(N-3)(N-2)(2N-5)}{6} + \right. \\ &\left. 16a^2[3(N-3)^2 + 14t^2 + 12t(N-3)] \right\} \end{aligned} \quad (9)$$

解方程(8),求出挠度的极值

$$w_0 = \frac{\sqrt[3]{(108q + 12\sqrt{3} \times \sqrt{27q^2 + 4c^2d^3})^2 \times c^2} - 2cd}{6c} \quad (10)$$

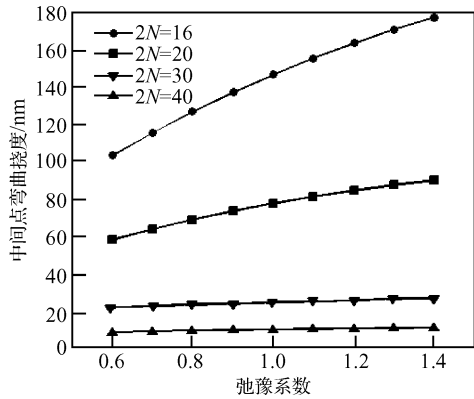


图 3 不同厚度下,表面弛豫系数对梁弯曲挠度的影响
Fig.3 Effect of surface relaxation on deflection of the middle point of the nanobeam

将(8)式代入(4)式,得到纳米梁弯曲时的挠度如下:

$$w(x) = \frac{3qA^4}{16\pi^4 ka^3 N(N+1)(2N+1)} \times \frac{1}{\frac{N-3}{6Na} + \frac{3}{2Nat(2+t^2)}} \times \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{A}\right), \quad 0 \leq x \leq A \quad (11)$$

为了便于比较,选取硅纳米梁的长度 $A = 10\mu\text{m}$,宽度 $B = 150\text{nm}$.当选定一定的厚度 N 以及表面弛豫系数 t 以后,可以得到相应的参数 c 和 d .

根据这些参数,并假定外加负载 $q = 60\text{Pa}$,可以计算出纳米梁相应的位移大小,图 3 即为不同厚度下,弛豫系数 t 对固支梁弯曲挠度的影响.该图表明,弛豫系数 t 越大,固支梁弯曲挠度越大,并且该影响在梁的厚度较小时比较明显,当 $N > 20$ 以后,弛豫效应对梁弯曲的影响可以忽略.

由连续介质力学理论可知,宏观尺度的双端固支薄梁在考虑轴向应力分量即大形变情况下的挠度为^[12]:

$$w(x) = \frac{c}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{A}\right), \quad 0 \leq x \leq A \quad (12)$$

其中 c 由关系式

$$q = \frac{4\pi^4 Y_x (2Na)^3}{3A^4} c + \frac{\pi^4 Y_x (2Na)}{4A^4} c^3 \quad (13)$$

给出.式中, Y_x 为体硅的杨氏模量, $Y_x = 160\text{GPa}$.将该连续介质理论与多尺度模型比较可知,两模型的负载-偏转曲线是不同的,如图 4 所示.该图中梁的厚度 $2Na$ 取为 $20a$,梁的长度仍取为 $10\mu\text{m}$,宽度为 150nm .

从图中可以看出,虽然两个模型的挠度曲线最初有相同的形式,而且边界条件也相同,但是由于考虑了厚度方向上的不连续性,致使纳米梁的载荷-偏

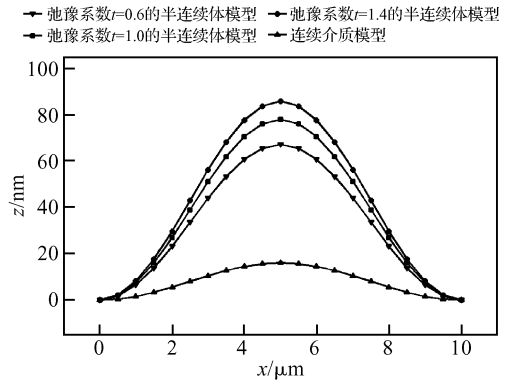


图 4 双端固支梁的挠度曲线
Fig.4 Deflection of the double clamped nanobeam

转特性偏离宏观连续介质模型所得的结果.基于本文的半连续体模型(多尺度模型)的纳米梁负载-偏转变更剧烈,即沿梁上各点的弯曲挠度都比连续介质模型预测的要大.纳米梁表面的弛豫效应也影响到两个模型之间的偏差.弛豫系数小则梁的弯曲挠度也小,与连续体模型的偏差也越小.这可能是由于小的弛豫系数使得梁表面原子的晶格常数变小,材料变“硬”所致.

图 5 显示了梁的厚度不同时基于两种模型所得的梁中点的挠度相对偏差大小.从图中看出,在梁的厚度较小时,两种模型的偏差较大,随着厚度的增加,偏差逐渐减小,直至趋近于零,这说明在宏观尺寸下,该多尺度模型与连续介质理论模型是一致的.同时,由于小尺寸效应的影响,两模型之间也是有所差别的,即在不考虑表面弛豫效应时,多尺度模型与连续体模型并不是完全等同的.当然,这种影响随着厚度的增加而逐渐减小,直至可以忽略.图 5 还说明了表面弛豫效应对梁的弯曲有较大的影响,特别是随着梁的厚度减小,这种影响越来越大.

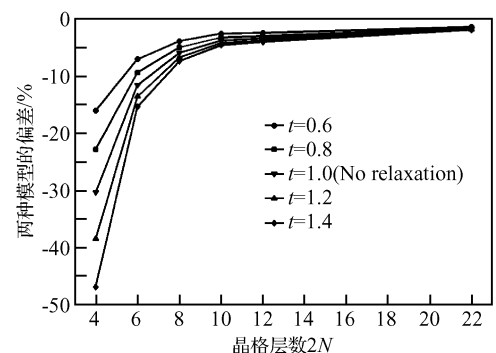


图 5 多尺度模型与连续体模型之间的偏差与梁厚度之间的关系
Fig.5 Difference between the multi-scale model and the continuum theory versus the thickness of the nanobeam

4 结论

本文提出了硅纳米梁负载-偏转的多尺度模型. 计算结果表明, 双端固支梁的厚度和其表面的弛豫效应对梁的弯曲都有影响. 在其他几何尺寸和受力情况不发生改变的情况下, 纳米梁的厚度越小, 其弯曲挠度越大, 当厚度减小至 20nm 时, 由于表面效应所占比重大幅增加, 梁的弯曲挠度急剧增大, 很快进入非线性状态. 在相同的几何尺寸和受力条件下, 多尺度模型模拟得到的纳米梁弯曲挠度要大于传统的连续体模型; 随着尺寸的增大, 两种模型之间的相对偏差逐渐缩小. 在宏观尺度下, 两种模型趋于一致.

参考文献

- [1] Mohanty P, Harrington D A, Ekinici K L, et al. Nanoelectromechanical silicon carbide resonators for ultra high frequency applications. *Appl Phys Lett*, 2002, 81: 2253
- [2] Erbe A, Blick R H. Silicon-on-insulator based nanoresonators for mechanical mixing at radio frequencies. *IEEE Trans Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*, 2002, 49 (8): 1114
- [3] Ekinici K L, Roukes M L. Nanoelectromechanical systems. *Review of Scientific Instruments*, 2005, 76(6): 061101
- [4] Erbe A, Krommer H, Kraus A, et al. Mechanical mixing in nonlinear nanomechanical resonators. *Appl Phys Lett*, 2000, 77(19): 3102
- [5] Sun C T, Zhang H T. Size-dependent elastic moduli of plate-like nanomaterials. *J Appl Phys*, 2003, 93: 1212
- [6] Born M, Huang Kun. *Theory of crystal lattice dynamics*. Beijing: Peking University Press, 1989 (in Chinese) [玻恩, 黄昆. 晶格动力学理论. 北京: 北京大学出版社, 1989]
- [7] Ding Xunmin, Yang Xinju, Wang Xun. *Surface physics and surface analysis*. Shanghai: Fudan University Press, 2004 (in Chinese) [丁训民, 杨新菊, 王迅. 表面物理与表面分析. 上海: 复旦大学出版社, 2004]
- [8] Guo J G, Zhao Y P. The size-dependent elastic properties of nanocrystals with surface effects. *J Appl Phys*, 2005, 98: 074306
- [9] Krivtsov A M, Morozov N F. On mechanical characteristics of nanocrystals. *Phys Solid State*, 2002, 44: 2260
- [10] Krivtsov A M, Morozov N F. Anomalies in mechanical characteristics of nanometer-size objects. *Doklady Physics*, 2001, 46(11): 825
- [11] Bao F, Yu H, Huang Q A. Elastic modulus of nanometer silicon membrane. *IEEE International Conference on Information Acquisition*. Weihai, China, 2006
- [12] Senturia S D. *Microsystems design*. Liu Zewen, Wang Xiaohong, Huang Qing'an Translation. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2004 (in Chinese) [Senturia S D. 微系统设计. 刘泽文, 王晓红, 黄庆安译. 北京: 电子工业出版社, 2004]

A Multi-Scale Model for Load-Deflection of Si Nanobeams*

Bao Fang, Yu Hong, Lu Qingru, and Huang Qing'an[†]

(Key Laboratory of MEMS of the Ministry of Education, Southeast University, Nanjing 210096, China)

Abstract: A new multi-scale model based on the energy conservation law is presented to calculate the static bending of a nanometer double clamped silicon beam. This model accounts for the discrete nature in the thickness of the beam and it can be used in the range of the nanometer scale to the micrometer scale. It is shown that the surface relaxation has a significant effect on the deflection behavior when the beam is scaled down to nanosize. Compared with the continuum theory in the micrometer scale, the multi-scale model agrees with the macro-model in the micrometer scale.

Key words: NEMS; beam; multi-scale; bending

EEACC: 2575D

Article ID: 0253-4177(2007)12-1979-04

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (No. 2006CB300404)

[†] Corresponding author. Email: hqa@seu.edu.cn

Received 26 April 2007, revised manuscript received 29 July 2007