

# SiO<sub>2</sub>/Si 异质结构的纳米 SiO<sub>2</sub> 导波层表面效应及弹性理论失效判定\*

明威<sup>1)</sup> 张涛<sup>2)†</sup> 文芷菁<sup>1)</sup> 李乐康<sup>1)</sup> 巩鹏杰<sup>1)</sup> 张广明<sup>3)</sup>

1) (西安科技大学理学院, 西安 710600)

2) (西安科技大学材料科学与工程学院, 西安 710600)

3) (英国利物浦约翰摩尔斯大学工程学院, 利物浦 L3 3AF, 英国)

(2025-04-08; 2025-0-5-28)

随着微纳声学器件的快速发展, 其核心声学结构已进入纳米尺度范畴, 表面效应对薄膜材料性能的影响日益凸显, 经典弹性理论面临挑战。本文基于表面弹性理论, 引入表面能密度研究纳米尺度下的表面效应, 采用傅里叶积分变换法推导出纳米尺度 SiO<sub>2</sub>/Si 异质结构薄膜表面牵引力下应力场与位移场的解析表达式。结果显示, 若以表面应力分布与经典理论相差 3% 作为判断标准, 在激励区域宽度  $2a$  的 5 倍范围内, 材料的微观特性彰显主导地位。随着激励区域不断减小, 在激励区域内及边界附近表面应力分布较经典理论更加集中, 剪切应力于边界处有极大值, 材料表面刚度与抗变形能力增加, 横向与纵向位移较经典理论减小。纳米尺度异质结构存在显著表面效应, 导致应力和位移分布明显偏离弹性理论, 经典弹性假设在相应纳米尺度范围不再适用。以上结果表明, 在纳米尺度固体表面中, 超高频纳米波长声波传播将明显受到尺度效应影响, 经典弹性波理论在纳米尺度存在失效现象, 这对纳米声学理论研究具有参考价值。

**关键词:** 表面弹性理论, 纳米尺度, 表面效应, 失效现象

**PACS:** 62.25.-g, 68.35.Gy, 62.30.+d, 68.60.Bs

\*国家自然科学基金 (批准号: 52174151, 12474468, 12075189)、陕西省联合基金重点项

目(批准号: 2021JML-05)、榆林市科技计划(批准号: 2024-CXY-165)和陕西省教育厅科技计划重点项目(批准号: 24JR112)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: tzhang@xust.edu.cn

明威: m19829822948@163.com

## 1 引言

当材料特征尺寸进入纳米尺度, 比表面积迅速增大, 出现尺寸效应导致材料表面力学行为显著区别于宏观体系 **Error! Reference source not found.**。为了解析纳米材料的表面效应, 学者们提出了不同的理论框架和方法用来描述纳米尺度的力学行为 **Error! Reference source not found.**。Gibbs<sup>[6]</sup>最早介绍了固体中的表/界面应力, 提出了 Gibbs 模型。在此基础上, Gurtin 和 Murdoch<sup>[7]</sup>于 20 世纪 70 年代通过引入表面应力概念, 开创性地建立了系统的表面弹性理论体系, 为后续表面应力相关研究提供了重要的理论基础。2000 年, Miller 和 Shenoy<sup>0</sup>指出纳米结构材料弹性特性的尺寸依赖性可以用 G-M 模型准确描述, 并验证了该模型的准确性。在接下来的几十年里, G-M 理论被广泛用于研究各种纳米材料和纳米结构的尺寸依赖性弹性行为, 包括纳米线 **Error! Reference source not found.**、纳米板 **Error! Reference source not found.**、纳米膜 **Error! Reference source not found.**等。G-M 理论模型取得了巨大成功并为表面弹性力学构筑了坚实的理论基础, 然而, G-M 理论依赖的表面弹性常数存在计算困难和物理意义不明确的问题, 限制了其实际应用。为此, Chen 和 Yao<sup>[12]</sup>在连续介质力学的框架下提出了一种基于表面能密度的弹性理论, 采用一种表面诱导牵引来表征纳米材料的表面效应, 该弹性理论中只需要物理意义明确的体表面能密度和表面弛豫参数, 避免了表面弹性常数的引入, 为表面效应研究提供了新思路。Zhang 等<sup>[13]</sup>基于 Chen 和 Yao<sup>[12]</sup>的表面弹性理论研究了考虑表面效应的 FG-CNTR 弯曲纳米梁的屈

曲行为，结果表明表面效应可以降低纳米梁的非线性弯曲响应。Wang 等<sup>[14]</sup>利用表面能密度弹性理论预测了纳米梁接触问题中的表面效应，建立载荷与接触半宽度之间的解析关系，探究具有表面效应的弹性纳米细梁与刚性圆柱压头的接触行为。他们的研究表明表面能密度理论能够更简便地预测纳米结构的力学行为，验证了该理论在纳米尺度问题中的适用性。但纳米压痕实验表明，表面效应可能导致纳米材料刚性硬化或软化现象<sup>[15-17]</sup>，而现有表面弹性理论尚未完全解析这一现象的物理机制<sup>[18,19]</sup>。此外，关于纳米薄膜材料的表面效应研究，仍缺乏系统性的理论模型来解析其表面应力变化机制与薄膜表面力学性能。因纳米 SiO<sub>2</sub> 固体薄膜具有优异的机械性能和化学稳定性，作为核心功能材料被广泛应用于微声器件领域<sup>[20,21]</sup>，所以亟需建立其表面效应的理论模型以指导材料设计与器件优化。

针对上述问题，本文采用傅里叶积分变换法得出薄膜表面牵引力下应力场与位移场的通解，基于表面能密度弹性理论探究表面效应对纳米尺度 SiO<sub>2</sub> 固体薄膜应力场与位移场的影响。通过数值模拟得到了具有表面效应的 SiO<sub>2</sub> 薄膜法向作用力下应力场与位移场的计算结果，并与经典弹性理论进行详细比较。本研究不仅为经典弹性理论的纳米尺度修正提供定量依据，也为后续建立更精确的 SiO<sub>2</sub>/Si 异质结构模型，探究界面效应的影响机制建立基础。

## 2 异质结构纳米薄膜表面效应问题建模与分析

在弹性半空间模型中，固体 SiO<sub>2</sub> 薄膜（导波层）与半无限大 Si 基底构成典型的硬膜-硬基异质结构，这种经典声导波管异质结构具有高阻抗差、低声学损耗的特点，能够有效反射声波提升能量局域化效率，适用于声学滤波器、谐振器等器件设计。当异质结构尺寸进入纳米量级，除了表面效应外，SiO<sub>2</sub>/Si 异质结构中还存在界面效应，在界面处不同材料的原子排列和化学键合方式存在差异，这种

差异会产生额外的界面应力和应变。为了简化问题深入研究表面效应，将异质结构界面视为光滑接触的理想化模型，暂不考虑界面效应的影响，聚焦面向 SiO<sub>2</sub>/Si 这种经典声导波管异质结构中的 SiO<sub>2</sub> 导波层的表面效应研究，分析模型受力如图 1 所示。在接触面上的宽度为  $2a$ ，笛卡尔坐标系的原点位于接触区域的中心， $x$  轴平行于表面， $z$  轴垂直于表面， $f_1$  与  $f_2$  是作用于激励区域的法向与切向作用力， $h$  为纳米固体 SiO<sub>2</sub> 薄膜的厚度，本模型中其厚度取值为百纳米。

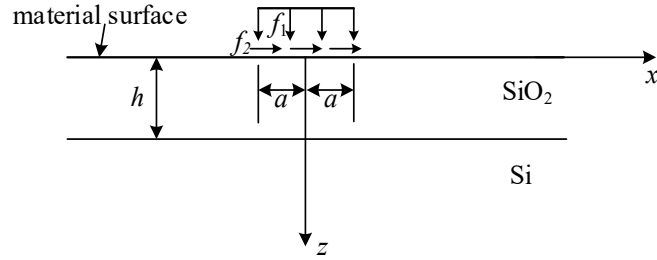


图 1 材料表面承受激励的弹性半平面示意图

Fig. 1. Schematic diagram of the elastic half plane of a material surface subjected to excitation.

## 2.1 基础方程

基于连续介质力学的理论框架，在不计体力的情况下，平衡方程、本构方程和几何关系如下：

$$\begin{aligned}\sigma_{ij,j} &= 0, \\ \sigma_{ij} &= 2G(\varepsilon_{ij} + \frac{\nu}{1-2\nu} \varepsilon_{kk} \delta_{ij}), \\ \varepsilon_{ij} &= \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}),\end{aligned}\tag{1}$$

其中， $G$  和  $\nu$  分别是弹性体的剪切模量和泊松比； $\sigma_{ij}$  和  $\varepsilon_{ij}$  分别是体应力张量和体应变张量， $u_{i,j}$  与  $u_{j,i}$  分别是位移分量，“ $,$ ”表示导数计算， $\delta_{ij}$  是 Kronecker 符号， $i, j$  取值为  $x, z$ 。

在弹性半空间中接触问题的平衡方程表示为

$$\begin{aligned}\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} &= 0, \\ \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} &= 0.\end{aligned}\tag{2}$$

$\tau_{xz}$  与  $\tau_{zx}$  表示应力分量，几何方程可由法向应变  $\varepsilon_x, \varepsilon_z$  和剪切应变  $\gamma_{xz}$  表示：

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x}, \varepsilon_z = \frac{\partial w}{\partial z}, \gamma_{xz} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}, \quad (3)$$

其中， $u$  和  $w$  分别为  $x$  和  $z$  轴方向的位移。弹性半空间中平面应变问题的构成方程表示为

$$\begin{aligned} \varepsilon_x &= \frac{1}{2G} [(1-\nu)\sigma_x - \nu\sigma_z], \\ \varepsilon_z &= \frac{1}{2G} [(1-\nu)\sigma_z - \nu\sigma_x], \\ \gamma_{xz} &= \frac{\tau_{xz}}{G}. \end{aligned} \quad (4)$$

此外，应力分量还需要满足调和函数：

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) (\sigma_x + \sigma_z) = 0. \quad (5)$$

经典弹性理论中引入 Airy 应力函数  $\varphi(x, z)$ ，则应力表达式可表示为

$$\sigma_x = \frac{\partial^2 \varphi(x, z)}{\partial z^2}, \sigma_z = \frac{\partial^2 \varphi(x, z)}{\partial x^2}, \tau_{xz} = -\frac{\partial^2 \varphi(x, z)}{\partial x \partial z}. \quad (6)$$

代入方程 (5) 可得

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \left( \frac{\partial^2 \varphi(x, z)}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \varphi(x, z)}{\partial x^2} \right) = 0. \quad (7)$$

结合方程 (7) 可得到应力的双调和函数。对坐标  $x$  采用傅里叶积分变换 **Error!**

**Reference source not found.** 求解边值问题，结合应力在无穷大时消失的条件，原有的偏微

分方程方程退化为线性微分方程，其一般解为

$$\tilde{\varphi}(\xi, z) = (A + Bz)e^{-|\xi|z}, \quad (8)$$

其中， $A$  和  $B$  是关于  $\xi$  的函数，需通过边界条件求解。Airy 应力函数  $\varphi(x, z)$  及其

傅里叶变换可表示为

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}(\xi, z) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x, z) e^{i\xi x} dx, \\ \varphi(x, z) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\varphi}(\xi, z) e^{-i\xi x} d\xi. \end{aligned} \quad (9)$$

基于傅里叶积分变换可以得出二维平面应力与位移场的积分通解，将 (7) 式

与 (9) 式和应力函数一般解结合, 结果可表示:

$$\begin{aligned}
\sigma_x &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} [\xi^2 A(\xi) - |\xi| 2B(\xi) + \xi^2 B(\xi)z] e^{-|\xi|z - ix\xi} d\xi, \\
\sigma_z &= -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} [A(\xi) + B(\xi)z] \xi^2 e^{-|\xi|z - ix\xi} d\xi, \\
\tau_{xz} &= \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \xi [(1 - |\xi|z)B(\xi) - |\xi| A(\xi)] e^{-|\xi|z - ix\xi} d\xi, \\
u(x, z) &= \frac{i}{2\sqrt{2\pi}G} \int_{-\infty}^{\infty} [(A(\xi) + B(\xi)z)\xi^2 - 2(1 - \nu)B(\xi)|\xi|] \frac{e^{-|\xi|z - ix\xi}}{\xi} d\xi + C_1, \\
w(x, z) &= \frac{1}{2\sqrt{2\pi}G} \int_{-\infty}^{\infty} [A(\xi)|\xi| + (1 - 2\nu + z|\xi|)B(\xi)] e^{-|\xi|z - ix\xi} d\xi + C_2.
\end{aligned} \tag{10}$$

$$\tag{11}$$

## 2.2 边界条件

$\phi_0$  为拉格朗日表面能密度, 反映材料表面原子或分子间的相互作用强度, 其由表面应变能相关的  $\phi_0^{\text{stru}}$  与表面悬键能有关的  $\phi_0^{\text{chem}}$  组成 **Error! Reference source not found.**:

$$\phi_0 = \phi_0^{\text{stru}} + \phi_0^{\text{chem}}, \tag{12}$$

其中,

$$\begin{aligned}
\phi_0^{\text{stru}} &= \frac{E_b}{2} \sum_{i=1}^2 a_{0i} \eta_i \left\{ \left[ 3 + (\lambda_i + \lambda_i \varepsilon_{si})^{-m} - 3(\lambda_i + \lambda_i \varepsilon_{si})^{-m} \right] \times \left[ \lambda_i^2 \varepsilon_{si}^2 + (\lambda_i - 1) \varepsilon_{si} \right] \right\}, \\
\phi_0^{\text{chem}} &= \phi_{0b} \left( 1 - w_1 \frac{D_0}{D} \right), \quad \eta_1 = \frac{a_{01}}{a_{02}}, \quad \eta_2 = \frac{a_{02}}{a_{01}},
\end{aligned} \tag{13}$$

式中,  $E_b$  是体弹性模量;  $\lambda_i = a_{ii}/a_{0i}$  是表面弛豫参数, 用  $a_{ii}$  表示弛豫晶格长度, 用  $a_{0i}$  表示单元格晶体表面的初始晶格长度,  $\varepsilon_{si}$  表示表面应变分量, 坐标系下标  $i=1$  或  $2$ ;  $m$  为结合能随键长变化的特征参数;  $\phi_{0b}$  是体表面能密度;  $w_1$  是与纳米结构类型相关的正参数 **Error! Reference source not found.**;  $D_0$  为临界尺寸, 纳米薄膜为  $D_0 = 2d_0$ ,  $d_0$  表示原子直径;  $D$  是纳米材料或纳米结构的特征长度。相关参数的物理意义与取值范围如表 1 所示。

表 1 纳米薄膜特性相关参数表

Table 1. Table of parameters related to nanofilm properties.

参数	符号	物理意义	取值范围
体弹性模量	$E_b$	材料在弹性范围内抵抗均匀压缩或拉伸的能力	$\text{SiO}_2$ 薄膜弹性模量 75—80 GPa <sup>[15]</sup>
表面弛豫参数	$\lambda_i$	表征表面晶格的弛豫程度	$\lambda_i > 1$ 表示由于膨胀而拉伸的表面 $\lambda_i < 1$ 表示由于收缩而压缩的表面 [12]
结合能随键长变化的特征参数	$m$	体现结合能与键长的关系	纯金属 $m = 1$ 合金或化合物 $m = 4$ <sup>[12]</sup>
与纳米薄膜相关的正参数	$w_1$	用于描述纳米结构对表面能密度的影响	$w_1 = 4$ <sup>[23]</sup>
临界尺寸	$D_0$	纳米薄膜的特征尺寸	$D_0 = 2d_0$ ( $d_0$ 为原子直径) <sup>[24]</sup>

考虑到表面效应，除了外部施加的载荷外，还会在接触表面产生额外的诱导牵引力，接触面处的应力边界条件写为

$$\begin{aligned}\sigma_{zz}|_{z=0} + f_1(x) &= -\frac{\phi_0}{J_s} \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \Big|_{z=0}, \\ \tau_{xz}|_{z=0} + f_2(x) &= \frac{1}{J_s} \frac{\partial \phi_0}{\partial x} - \frac{\phi_0}{J_s^2} \frac{\partial J_s}{\partial x} \Big|_{z=0},\end{aligned}\quad (14)$$

其中， $f_1(x)$ 与 $f_2(x)$ 是作用于激励区域的法向与切向作用力， $J_s$ 是表征表面变形的一个基本行列式。纳米结构特征尺度 $D = h(h \rightarrow \infty)$ ，薄膜的临界尺寸表示为 $D_0 = 2d_0$ <sup>[12]</sup>。正参数 $w_1 = 4$ ，表面应变 $\varepsilon_s$ 在此等于 $\varepsilon_x/2 = \varepsilon^*$  **Error! Reference source not found.**,

因此表面能密度 $\phi_0$ 表示为

$$\phi_0 = \phi_{0b} \left(1 - \frac{d_0}{2h}\right) + E_b a_{0s} \left[3 + \frac{1}{\lambda(1 + \varepsilon_x^*)} - 3\lambda(1 + \varepsilon_x^*)\right] \times \left[ (\lambda \varepsilon_x^*)^2 + 2\lambda(\lambda - 1)\varepsilon_x^* + (\lambda - 1)^2 \right], \quad (15)$$

其中， $\lambda$ 为表面弛豫参数， $a_{0s}$ 为体材料的晶格常数。在小变形假设下法向应变的值远远小于1，结合以上方程，且 $J_s = 1 + 2(\varepsilon^* + \lambda - 1)$ ，忽略高阶项边界条件，(14)

式可简化为

$$\begin{aligned}\sigma_{zz}|_{z=0} + f_1(x) &= -\phi_{0b} \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \Big|_{z=0}, \\ \tau_{xz}|_{z=0} + f_2(x) &= -\phi_{0b} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{z=0}.\end{aligned}\quad (16)$$

### 2.3 问题求解

根据 (10) 式、(11) 式与边界条件 ( (16) 式) 可以分别获得均匀作用力下的系数方程:

$$A\xi^2 + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x) e^{ix\xi} dx = \frac{\phi_{0b}}{2G} [A|\xi| + (1-2\nu)B] \xi^2, \quad (17)$$

$$i\xi(B - A|\xi|) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f_2(x) e^{-i\xi x} dx = \frac{\phi_{0b}i}{2G} [A\xi^2 - 2B|\xi|(1-\nu)] \xi. \quad (18)$$

由 (17) 式与 (18) 式法向作用力下的系数方程可以表示为

$$A = \frac{4\tilde{f}_1(\xi)[(\nu-1)l|\xi|-1]}{\xi^2[-4+(4\nu-3)l^2\xi^2+8(\nu-1)l|\xi|]}, \quad (19)$$

$$B = -\frac{2\tilde{f}_2(\xi)[l\xi^2+2|\xi|]}{\xi^2[-4+(4\nu-3)l^2\xi^2+8(\nu-1)l|\xi|]},$$

其中  $\tilde{f}(\xi)$  是表面牵引力的傅里叶变换 **Error! Reference source not found.**, 定义  $l$  为

$$l = \frac{\phi_{0b}}{G} = \frac{Z_b - Z_s}{Z_b} \frac{U_{coh}^b}{a_{01}a_{02}\sin\beta\tau}, \quad (20)$$

其中, 体表面能密度  $\phi_{0b}$  是薄膜表面单位面积的能量, 反映表面原子的能量状态; 体剪切模量  $G$  表征材料抵抗剪切变形的能力, 反映了体相原子的结合强度;  $Z_b$  是体原子配位数, 代表体相中一个原子周围与之成键的原子数目;  $Z_s$  是表面原子配位数, 即表面上一个原子周围成键的原子数目;  $\frac{Z_b - Z_s}{Z_b}$  是表面原子断键(悬挂键)相对体原子成键的比例;  $U_{coh}^b$  (J) 是每个体原子的结合能, 体现原子间结合作用强弱;  $a_{01}a_{02}\sin\beta$  ( $\text{nm}^2$ ) 表示表面晶胞的面积;  $\gamma$  (GPa) 是剪切应力,  $\tau$  是剪切应变。在纳米材料中表面原子配位数降低, 存在大量悬挂键, 说明单位面积表面原子因断键而具有的能量越多。由定义可知,  $l$  (nm) 是与表面效应相关的固有长度尺度, 反映了单位面积上材料表面受剪切应力作用时, 表面原子不饱和键产生的能量和体相原子结合状态共同抵抗剪切应变的能力。

将法向作用力下的系数方程 ( (19) 式) 代入应力位移通解中, 具体形式如

下:

$$\begin{aligned}
\sigma_x &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \left[ \frac{4(\nu l \xi + 1) - 2(l \xi + 2)\xi z}{-4 + (4\nu - 3)l^2 \xi^2 + 8(\nu - 1)l \xi} \tilde{f}_1(\xi) \cos(\xi x) \right] e^{-z\xi} d\xi, \\
\sigma_z &= -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \left( \frac{2\{2[(\nu - 1)l \xi - 1] - (l \xi + 2)\xi z\}}{-4 + (4\nu - 3)l^2 \xi^2 + 8(\nu - 1)l \xi} \tilde{f}_1(\xi) \cos(\xi x) \right) e^{-z\xi} d\xi, \\
\tau_{xz} &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \left\{ \frac{2[l \xi(1 - 2\nu) + (l \xi + 2)\xi z]}{-4 + (4\nu - 3)l^2 \xi^2 + 8(\nu - 1)l \xi} \tilde{f}_1(\xi) \sin(\xi x) \right\} e^{-z\xi} d\xi, \\
u &= \frac{1}{\sqrt{2\pi G}} \int_0^\infty \left\{ \frac{2[2(1 - 2\nu) - (l \xi + 2)\xi z]}{\xi[-4 + (4\nu - 3)l^2 \xi^2 + 8(\nu - 1)l \xi]} \tilde{f}_1(\xi) \sin(\xi x) \right\} e^{-z\xi} d\xi + C_1, \\
w &= \frac{1}{\sqrt{2\pi G}} \int_0^\infty \left\{ \frac{2[4(\nu - 1) + (4\nu - 3)l \xi - (l \xi + 2)\xi z]}{\xi[-4 + (4\nu - 3)l^2 \xi^2 + 8(\nu - 1)l \xi]} \tilde{f}_1(\xi) \cos(\xi x) \right\} e^{-z\xi} d\xi + C_2.
\end{aligned} \tag{21}$$

其中  $C_1$  与  $C_2$  是两个积分常数。

### 3 数值结果与分析

为了简化计算, 引入无量纲参量令  $\xi = t/a, x = x_1 a, z = z_1 a, l = l_1 a$ 。其中,  $l_1$  是相对长度尺度, 是固有长度尺度  $l$  与激励区域宽度  $a$  的比值 ( $\frac{l}{a}$ ), 引入表面效应对材料表面行为的影响。法向作用力通解方程可由 (23) 式表示:

$$\begin{aligned}
\sigma_x(x_1, z_1) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \left[ \frac{4(\nu l_1 t + 1) - 2(l_1 t + 2)z_1 t}{-4 + (4\nu - 3)l_1^2 t^2 + 8(\nu - 1)l_1 t} \frac{\tilde{f}_1(t/a)}{a} \cos(x_1 t) \right] e^{-z_1 t} dt \\
\sigma_z(x_1, z_1) &= -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \left( \frac{2\{2[(\nu - 1)l_1 t - 1] - (l_1 t + 2)z_1 t\}}{-4 + (4\nu - 3)l_1^2 t^2 + 8(\nu - 1)l_1 t} \frac{\tilde{f}_1(t/a)}{a} \cos(x_1 t) \right) e^{-z_1 t} dt, \\
\tau_{xz}(x_1, z_1) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \left\{ \frac{2[l_1 t(1 - 2\nu) + (l_1 t + 2)z_1 t]}{-4 + (4\nu - 3)l_1^2 t^2 + 8(\nu - 1)l_1 t} \frac{\tilde{f}_1(t/a)}{a} \sin(x_1 t) \right\} e^{-z_1 t} dt, \\
u(x_1, z_1) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi G}} \int_0^\infty \left\{ \frac{2[2(1 - 2\nu) - (l_1 t + 2)z_1 t]}{t[-4 + (4\nu - 3)l_1^2 t^2 + 8(\nu - 1)l_1 t]} \tilde{f}_1(t/a) \sin(x_1 t) \right\} e^{-z_1 t} dt + C_1, \\
w(x_1, z_1) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi G}} \int_0^\infty \left\{ \frac{2[4(\nu - 1) + (4\nu - 3)l_1 t - (l_1 t + 2)z_1 t]}{t[-4 + (4\nu - 3)l_1^2 t^2 + 8(\nu - 1)l_1 t]} \tilde{f}_1(t/a) \cos(x_1 t) \right\} e^{-z_1 t} dt + C_2,
\end{aligned} \tag{23}$$

其中,  $C_1$  和  $C_2$  是两个积分常数。弹性半空间受到均匀压力为  $f_1(x) = f_0$ , 其中  $f_0$  为常数, 则法向作用力傅里叶积分变换可表示为

$$\tilde{f}_1\left(\frac{t}{a}\right) = f_0 a \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(t)}{t}. \quad (24)$$

假定原点沿  $z$  方向的位移为 0，也就是  $u(0, z) = 0$ 。同时，如果剪切位移在距离原点  $sa$  时为 0，即  $w(sa, z) = 0$ ，其中  $s$  是一个有限值 ( $s \geq 5$ )，则表面上的位移为 0。这两个位移边界条件可以用来确定  $C_1$  和  $C_2$ 。将 (24) 式代入方程 (23)，经过化简计算得出作用力在表面处 ( $z = 0$ ) 的应力、剪切应力与位移的解析解，具体形式如公式 (25) 所示：

$$\begin{aligned} \sigma_x(x_1, 0) &= \frac{2f_0}{\pi} \int_0^\infty \left[ \frac{4(\nu l_1 t + 1)}{-4 + (4\nu - 3)l_1^2 t^2 + 8(\nu - 1)l_1 t} \frac{\sin(t)}{t} \cos(x_1 t) \right] dt, \\ \sigma_z(x_1, 0) &= -\frac{2f_0}{\pi} \int_0^\infty \left\{ \frac{4[(\nu - 1)l_1 t - 1]}{-4 + (4\nu - 3)l_1^2 t^2 + 8(\nu - 1)l_1 t} \frac{\sin(t)}{t} \cos(x_1 t) \right\} dt, \\ \tau_{xz}(x_1, 0) &= \frac{2f_0}{\pi} \int_0^\infty \left[ \frac{2l_1 t(1 - 2\nu)}{-4 + (4\nu - 3)l_1^2 t^2 + 8(\nu - 1)l_1 t} \frac{\sin(t)}{t} \sin(x_1 t) \right] dt, \\ u(x_1, 0) &= \frac{2af_0}{\pi G} \int_0^\infty \left[ \frac{2(1 - 2\nu)}{-4 + (4\nu - 3)l_1^2 t^2 + 8(\nu - 1)l_1 t} \frac{\sin(t)}{t^2} \sin(x_1 t) \right] dt, \\ w(x_1, 0) &= \frac{2af_0}{\pi G} \int_0^\infty \left[ \frac{4(\nu - 1) + (4\nu - 3)l_1 t}{-4 + (4\nu - 3)l_1^2 t^2 + 8(\nu - 1)l_1 t} \frac{\sin(t)}{t^2} \left( \cos(x_1 t) - \cos\left(\frac{s}{a} t\right) \right) \right] dt. \end{aligned} \quad (25)$$

根据 (25) 式，可以发现如果不考虑表面能的影响，那么表面效应将消失，用来表征表面效应的特征参数  $l$  变为 0，该模型退化为经典结果<sup>[27]</sup>。

### 3.1 表面效应对表面应力分布的影响规律

基于解析解进行数值计算，模拟受均匀作用力影响的纳米异质结构薄膜表面力学行为。异质结构的基底为单晶硅，纳米固体薄膜为  $\text{SiO}_2$ ，其泊松比为 0.17，体剪切模量为 31 GPa。薄膜表面受到外部激励时，其物理机制相同，因此应力分量  $\sigma_x$  与  $\sigma_z$  的变化特征在趋势上相似。采用相对长度 ( $\frac{x}{a}$ ) 表示  $x$  方向位置参量，

$\sigma_x$  和  $\sigma_z$  与恒力源  $f_0$  的比值 ( $\frac{\sigma(x,0)}{f_0}$ ) 表示表面应力沿  $x$  方向分布情况, 其斜率变化反映表面应力随研究位置的变化快慢, 表面作用力下法向应力  $\sigma_x$  与  $\sigma_z$  的分布情况如图 2 所示。

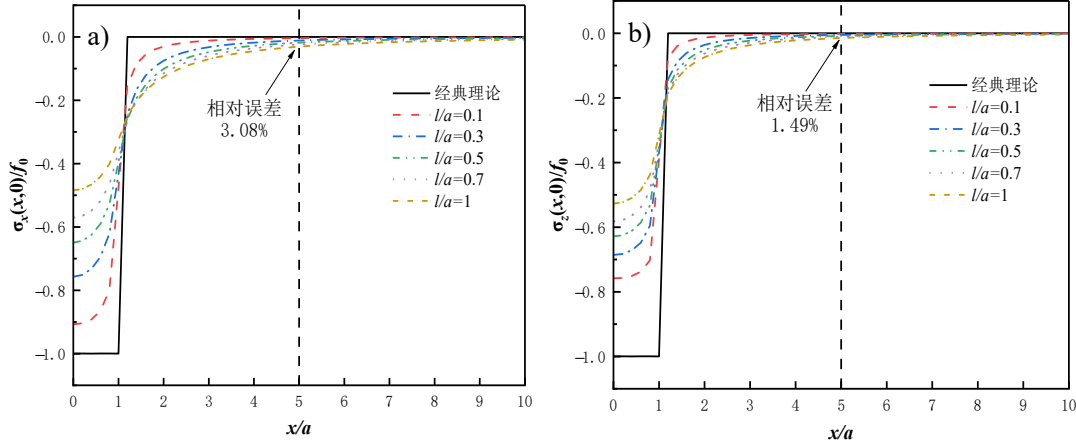


图 2 表面应力分布情况 (a)  $x$  方向应力分量  $\sigma_x$ ; (b)  $z$  方向应力分量

Fig. 2. Surface stress distribution: (a)  $x$ -direction stress component; (b)  $z$ -direction stress component.

如图 2 所示, 经典理论情形下, 由于宏观应力分布处于均匀状态, 在激励区域内  $\frac{\sigma(x,0)}{f_0}$  绝对值始终为 1; 超过激励区域边界时薄膜表面压力消失, 表面应力迅速衰减至 0, 物体完全恢复到原来的状态, 出现明显的跳跃现象, 这与经典弹性理论的自由表面应力边界条件相符。

纳米尺度下, 当  $l$  不变,  $a$  远大于  $l$ , 即  $\frac{l}{a}$  趋于 0 时薄膜表面能低, 表面原子间相互作用力弱, 表面效应影响较弱, 与经典理论结果差异不大。随着  $a$  减小,  $\frac{l}{a}$  增大, 薄膜表面原子配位数减少, 表面能升高且处于非平衡态, 表面原子为降低能量通过调整位置等方式对周围原子产生更强的相互作用, 表面效应影响增强导致激励区域内出现应力集中现象。在激励区域及边界附近表面应力受表面效应影响缓慢衰减, 与经典理论曲线变化差异明显, 表明激励区域越小表面效应越显著。此时, 纳米尺度下经典弹性理论不再适用, 表面效应导致应力分布偏离经典弹性理论。若以  $\frac{l}{a}=1$  的曲线为参考, 当  $\frac{x}{a}=5$  时, 该点表面应力分量与经典理论的误差分别为 3.08% 与 1.49%; 随着  $x$  增大,  $\frac{x}{a} \geq 5$  时, 材料的宏观特性逐渐占据

主导地位，表面效应影响可忽略，经典弹性理论适用。但是，当  $\frac{x}{a} < 5$  时，随着  $x$  减小，表面效应愈加明显，经典弹性理论出现应力误差超过 3%，必须考虑表面效应的影响，经典弹性理论不再适用。

### 3.2 表面效应对表面剪切应力分布的影响规律

剪切应力  $\tau_{xz}(x,0)$  与  $f_0$  的比值表示剪切应力的相对大小，其在表面处的分布如图 3 所示。根据经典弹性理论小变形假设，宏观物体在受力过程中产生的变形可忽略不计。对于  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  宏观异质结构，因仅受均匀分布的表面法向牵引力，其剪切应力应为零。

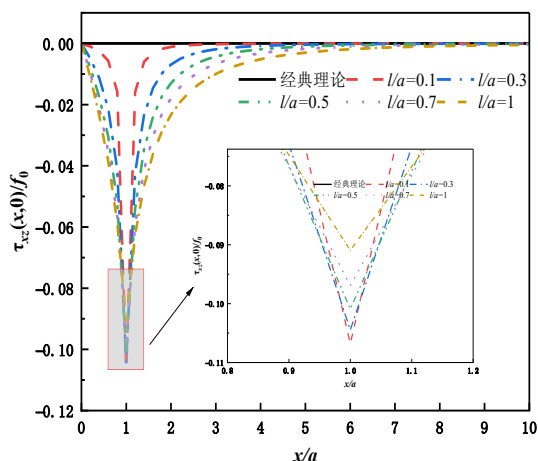


图 3 表面剪切应力  $\tau_{xz}$  的分布情况

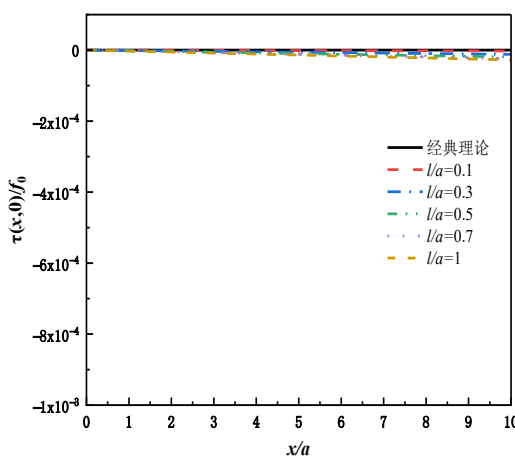


图 4 宏观剪切应力分布图

Fig. 3. Distribution of surface shear stress  $\tau_{xz}$ .

Fig. 4. Macroscopic shear stress distribution.

由图 3 可知，纳米尺度下剪切应力在激励区域内及边界附近不再为零，与经典弹性理论假设不符，经典理论失效。当激励区域宽度  $a$  较大时 ( $\frac{l}{a}$  趋于 0)，随着  $x$  增大，激励区域范围内剪切应力缓慢增大，在边界处  $\frac{\tau_{xz}(x,0)}{f_0}$  迅速增大到极大值，随着远离边界，外部激励消失导致剪切应力迅速减小，并在短距离内趋于经典理论，表面效应影响微弱。当  $a$  较小 ( $\frac{l}{a}$  趋于 1)，随着  $x$  增大，薄膜表面原子间的相互作用力变强，与  $a$  较大时的情形相比，激励区域内剪切应力分布增大速度加快，而在边界处  $\frac{\tau_{xz}(x,0)}{f_0}$  增大到极大值的过程变缓，表面效应影响增强导致激励区域外剪切应力缓慢减小，随  $x$  增大最终趋于经典理论。此外，随着激励

区域减小,  $0 < \frac{x}{a} < 1$  范围内, 表面效应强导致剪切应力由非均匀分布逐渐趋于线性变化。当  $\frac{x}{a} = 1$  时, 剪切应力在激励边界处有极大值, 激励区域越大, 表面效应对薄膜力学性能的影响越弱, 材料宏观特性越明显, 薄膜抗变形能力强; 激励区域越小, 表面原子间结合力变大, 材料微观特征凸显, 表面效应增强使得薄膜表面的抗变形能力较  $\frac{l}{a} = 0.1$  减弱,  $\frac{\tau_{xz}(x,0)}{f_0}$  的值由  $0.106$  ( $\frac{l}{a} = 0.1$ ) 降低至  $0.09$  ( $\frac{l}{a} = 1$ ), 出现奇异点。当  $\frac{x}{a} > 1$  时, 由于  $f_0$  消失, 激励区域外表面效应越强剪切应力衰减越缓慢, 随着  $x$  不断增大, 剪切应力分布趋于经典理论。

为了进一步验证本文理论的正确性以及表面效应在纳米尺度下的不可忽略性, 将激励区域宽度由纳米级扩大到微米级, 探究宏观尺度下剪切应力的变化情况, 如图 4 所示。由剪切应力分布情况可知, 曲线与经典弹性理论几乎重合, 表明宏观尺度下微观结构特征变化可忽略, 表面效应消失, 这与纳米尺度表面作用力下剪切应力  $\tau_{xz}$  的分布情况有显著差异, 可见宏观与微观尺度下剪切应力分布规律迥然不同, 纳米尺度下表面效应对力学振动传播的影响具有尺度特异性, 不可忽略。

### 3.3 表面效应对表面位移分布的影响规律

在恒力源  $f_0$  单次激励至平衡状态, 薄膜表面横向位移  $u$  和纵向位移  $w$  分布曲线如图 5 所示。经典理论情形下, 横向位移受均匀力激励的作用在激励区域内快速线性增加, 在边界处达到最大值, 激励区域外因不受外力保持恒定; 纵向位移在激励中心处产生最大值, 曲线整体呈现下降趋势, 随着  $x$  的增大, 逐渐趋于 0。

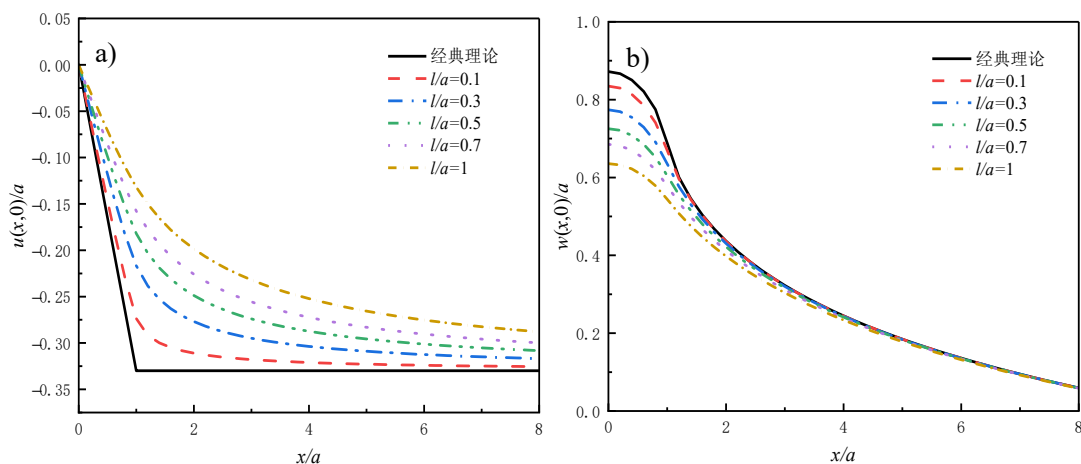


图 5 表面位移分布 (a) 横向位移  $u$ ; (b) 纵向位移  $w$

Fig. 5. Surface displacement distribution: (a) Transverse displacement  $u$ ; (b) longitudinal displacement  $w$ .

由图 5 可知，纳米尺度下，当  $a$  较大 ( $\frac{l}{a}$  趋于 0)，随着  $x$  的增大，横向位移分布在激励区域内快速线性增大，在激励区域边界处横向位移变化较经典理论连续且平滑，激励区域外因  $f_0$  消失快速趋于平衡状态；纵向位移分布在激励中心原点处有最大值，在激励区域内曲线保持下降趋势，在激励区域外与经典理论曲线分布几乎重合，表面效应影响微弱。当  $a$  较小 ( $\frac{l}{a}$  趋于 1)，随着  $x$  的增大，横向位移分布在激励区域内缓慢线性增大，在边界处横向位移变化较经典理论更加平滑，激励区域外横向位移缓慢升高至平衡状态；纵向位移分布于激励中心原点处有极大值，且极值较经典理论不断降低。随着  $x$  增大，在激励区域及边界附近纵向位移较经典理论缓慢衰减，表面效应明显；远离边界区域后，表面效应影响逐渐消失。由以上现象可得，随着激励区域的减小，位移分布与经典理论变化情况有明显差异，表明激励区域越小表面效应越强。随着激励区域减小， $0 \leq \frac{x}{a} < 1$  范围内，表面效应对薄膜表面位移分布的影响不断变强，横向位移与纵向位移分布在相同外力作用下均小于经典理论，薄膜表面硬度提升；当  $\frac{x}{a} = 1$  时，横向位移在激励区域边界处较经典理论更加平缓，纵向位移在边界处较经典理论衰减速率不断减小；当  $\frac{x}{a} > 1$  时，外力消失，随着  $x$  增大，远离激励区域后，横向与纵向位移逐渐达到平衡状态，表面效应可忽略，位移分布趋于经典理论情形。

此外,本研究采用了理想化模型对纳米薄膜材料的表面效应进行了研究,实际上薄膜( $\text{SiO}_2$ )与基底(单晶硅)的模量比小于1,基底对薄膜的表面效应有约束作用,会对薄膜表面产生的应力场与位移场分布产生影响,因此在后续的纳米异质结构薄膜的力学响应研究中需进一步探究膜-基模量比(即薄膜与基底的弹性模量之比)的影响机制。

## 4 结 论

本文基于表面弹性理论引入表面能密度,采用傅里叶积分变换法,分析了表面效应对 $\text{SiO}_2/\text{Si}$ 纳米异质结构表面行为的影响,探究纳米尺度下应力场与位移场的分布特性。结果表明,若以表面应力分布与经典理论相差3%为判断依据,在接触面上宽度 $2a$ 的5倍时,异质结构薄膜表面应力分量( $\sigma_x, \sigma_z$ )与经典理论相差分别为3.08%与1.49%,在此范围内表面效应不可忽略。随着激励区域不断减小,表面效应显著增强,导致激励区域内及边界附近表面应力分布较经典理论更加集中,剪切应力分布在激励区域内及边界附近不再为零,横向与纵向位移较经典理论均减小,异质结构薄膜表面应力与位移分布明显偏离经典理论。研究显示,经典弹性理论在纳米尺度存在失效区域,经典弹性理论假设在相应区域内不再适用,这为经典弹性波理论的修正提供依据,对小尺寸声表面波器件的材料选择和结构设计提供理论支持,也为下一步建立更精确的界面效应模型,引入晶格失配相关参数与膜-基模量比解析界面效应的物理机制奠定理论基础。

## 参考文献

- [1] Hui X P 2024 *Acta Mech. Solida Sin.* **37** 371
- [2] Farajpour A, Ghayesh H M, Farokhi H 2018 *Int. J. Eng. Sci.* **133** 231
- [3] Peddieson J, Buchanan R G, McNitt P R 2003 *Int. J. Eng. Sci.* **41** 305

- [4] Eringen A C 1999 *Theory of Micropolar Elasticity* (New York: Springer)
- [5] Toupin R A 1964 *Arch. Ration. Mech. Anal.* **17** 85
- [6] Gibbs J W 1879 *Trans. Conn. Acad.* **2** 300
- [7] Gurtin M E, Murdoch A I 1975 *Arch. Ration. Mech. Anal.* **59** 389-390
- [8] Miller R E, Shenoy V B 2000 *Nanotechnology* **11** 139
- [9] He J, Lilley C M 2008 *Nano Lett.* **8** 1798
- [10] Tong L H, Lin F, Xiang Y, Shen H S, Lim C W 2021 *Compos. Struct.* **265** 113708
- [11] Zhang S Y, Tang X Y, Ruan H H, Zhu L L 2019 *Appl. Phys. A* **125** 1
- [12] Chen S H, Yao Y 2014 *Appl. Mech.* **81** 121002
- [13] Zhang Y Y, Wang Y X, Zhang X, Shen H M, She G L 2021 *Steel Compos. Struct.* **38** 293
- [14] Wang L Y, Wu H M, Ou Z Y 2024 *Math. Mech. Solids* **29** 401
- [15] George V, Mohammadreza Y 2017 *Crystals* **7** 321
- [16] Saffari S, Hashemian M, Toghraie D 2017 *Physica B* **520** 97
- [17] Chen D Q, Sun D L, Li X F 2017 *Compos. Struct.* **173** 116
- [18] Ye G J, Yin C, Li S Y, Wang X P, Wu J 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 104201 (in Chinese) [叶高杰, 殷澄, 黎思瑜, 俞强, 王贤平, 吴坚 2023 物理学报 **72** 104201]
- [19] Shang S P, Lu Y J, Wang F H 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 033101 (in Chinese) [尚帅朋, 陆勇俊, 王峰会 2022 物理学报 **71** 033101]
- [20] Tian X G, Tao L Q, Liu B, Zhou C J, Ren T L 2016 *IEEE Electron Device Lett.* **37** 1063
- [21] Shen B, Huang Z W, Ji Z, Lin Q, Chen S L, Cui D J, Zhang Z N 2019 *Surf. Coat. Technol.* **380** 125061
- [22] Selvadurai A P S 2000 *Partial Differential Equations in Mechanics* (Berlin: Springer)

- [23] Ouyang G, Wang C X, Yang G W 2009 *Chem. Rev.* **109** 4221
- [24] Zhang C, Yao Y, Chen S H 2014 *Comput. Mater. Sci.* **82** 372
- [25] Yao Y, Chen S H 2016 *Acta Mech.* **227** 1799-
- [26] Gao X, Hao F, Fang D N, Huang Z P 2013 *Int. J. Solids Struct.* **50** 2620
- [27] Wang L Y 2020 *Int. J. Mech. Mater. Des.* **16** 633

Nanoscale surface effects of SiO<sub>2</sub>/Si heterostructures and failure criterion of elasticity theory  
MING Wei<sup>1</sup>, ZHANG Tao<sup>2,†</sup>, WEN Zhijing<sup>1</sup>, LI Lekang<sup>1</sup>, GONG Pengjie<sup>1</sup>, ZHANG Guangming<sup>3</sup>  
*Acta Phys. Sin.*, 2025, 74(15): 156201. DOI: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250456>  
CSTR: 32037.14.aps.74.20250456

## **Nanoscale surface effects of SiO<sub>2</sub>/Si heterostructures and failure criterion of elasticity theory\***

MING Wei<sup>1)</sup> ZHANG Tao<sup>2)†</sup> WEN Zhijing<sup>1)</sup> LI Lekang<sup>1)</sup> GONG Pengjie<sup>1)</sup>  
ZHANG Guangming<sup>3)</sup>

1) (*College of Science, Xi'an University of Science and Technology, Xi'an 710600, China*)

2) (*College of Materials Science and Engineering, Xi'an University of Science and Technology, Xi'an 710600, China*)

3) (*College of Engineering Liverpool John Moores University, Liverpool, L3 3AF, UK*)

### **Abstract**

The rapid advancement of micro-nano acoustic devices has led their core

acoustic structures to shrink to the nanoscale level. The influence of surface effects on the mechanical properties of thin-film materials on a nanoscale becomes increasingly prominent, and the classical elasticity theory struggles to accurately describe their mechanical behavior on this scale. In this paper, a mechanical model of nano-SiO<sub>2</sub>/Si heterostructured thin films that considers surface effects is developed using surface elasticity theory. This model incorporates the key parameter of surface energy density. In this paper, a mechanical model of heterostructured nano-SiO<sub>2</sub>/Si films is developed using the surface elasticity theory, incorporating surface effects through the introduction of surface energy density as a key parameter. Using the Fourier integral transform method, analytical expressions for stress and displacement fields under surface traction are systematically derived, revealing the influence of surface effects on the mechanical behavior of materials on a nanoscale by comparing the analytical solution with that from the classical theory. The results show that when the surface stress distribution deviates by 3% from that predicted by the classical theory, the microscopic properties of the material become significant, and the surface effect cannot be ignored in a range of five times the width of the excitation region  $2a$ . As the size of the excitation region decreases, the surface effect is significantly increases and the stress distribution within the excitation region and near the boundary becomes more concentrated than the counterparts in the classical theory. The shear stress is no longer zero, and an extreme value is observed at the boundary, which is significantly different from that predicted by the classical theory of elasticity. The transverse and longitudinal displacements are reduced compared

with those from the classical theory, and the surface stiffness and deformation resistance of the material are greatly enhanced. Significant surface effects occur on nano-heterostructure thin films, leading to large deviations in stress and displacement distributions from the results of elasticity theory. Therefore, the classical elasticity assumptions are no longer applicable in the corresponding nanoscale range. The results demonstrate that the propagation of ultrahigh-frequency nano-length acoustic waves in nanoscale solid film surfaces is significantly affected by the scale effect. The failure of the classical elastic wave theory on a nanoscale is of great value for the study of nanoscale acoustic theory. Furthermore, these findings provide a theoretical basis for the subsequent development of more precise models of interfacial effects and a more detailed investigation of the influence of the film-substrate modulus ratio.

**Keywords:** surface elasticity theory, nanoscale, surface effects, failure phenomenon

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 52174151, 12474468, 12075189), the Key Joint Fund Programm of Shaanxi Province, China (Grant No. 2021JML-05), the Key Research Fund of Shaanxi Yulin City, China (Grant No. 2024-CXY-165), and the Key Scientific Research Project of Shaanxi Education Department, China (Grant No. 24JR112).