

ЕЛЕКТРОНІКА

УДК 612.315.592

DOI <https://doi.org/10.32782/2663-5941/2024.5.2/22>

Палагін В.А.

Кременчуцький національний університет імені Михайла Остроградського

Когдась М.Г.

Кременчуцький національний університет імені Михайла Остроградського

Ситнік В.Ю.

Кременчуцький національний університет імені Михайла Остроградського

Донських О.В.

Кременчуцький національний університет імені Михайла Остроградського

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ВЗАЄМОЗВ'ЯЗКУ СТРУКТУРИ ПОРУВАТОГО КРЕМНІЯ І МОДУЛЯ ЮНГА

Стаття присвячена дослідженню взаємозв'язку між структурою поруватого кремнію та його механічними властивостями, зокрема модулем Юнга. У статті розкрито взаємозв'язок пружних параметрів поруватої кремнієвої матриці як функції поруватості з використанням моделювання методом скінченних елементів (МСЕ). Модель заснована на теорії пружності і враховує такі фактори, як розмір і розподіл пор, товщина стінок між порами та інші структурні характеристики. Кремнієва підкладка, з якої формується поруватий кремній, має кристалографічну орієнтацію (100), а пори мають циліндричну морфологію. Всього було розроблено шість форм пор з метою дослідження впливу морфології пор на пружні параметри. Форми були обрані відповідно до геометрії пор, отриманих методом електрохімічного травлення, і спроектовані як ортотропні структури. Розкрито, що морфологія пор має значний вплив на модулі пружності та визначено, що цьому фактору слід приділяти належну увагу в майбутніх дослідженнях. З'ясовано, що зі збільшенням поруватості пружні параметри ПК змінюються за певними закономірностями. Крім того, форма пор має значний вплив на ці закономірності, особливо для моделі з розгалуженими порами, але все ж таки існують деякі спрощення в моделюванні форми пор, тобто, згідно з результатами МСЕ для циліндричних і синусоїдальних пор, коли є лише невеликі зміни на стінці пори, її геометрична модель може бути спрощена у вигляді циліндра. Тоді як зміни стінки пори занадто великі, щоб їх можна було ігнорувати, як у випадку пори змінного радіусу, її можна розглядати, як дворадіусну модель; тим не менш, коли є відгалуження з боків від основної пори, їх не можна ігнорувати чи спрощувати. Отримані результати моделювання добре узгоджуються з експериментальними даними, наведеними в літературі для модуля Юнга. Крім того, запропоновано степеневі залежності модулів Юнга і модулів зсуву від поруватості та обговорено похибки цих залежностей.

Ключові слова: поруватий кремній, травлення, коефіцієнт Пуассона, модуль Юнга.

Постановка проблеми. Поруватий кремній (ПК) утворюється шляхом електрохімічного травлення в розчині фтористоводневої кислоти. Цей матеріал останнім часом викликає все більший інтерес як з експериментальної, так і з теоретичної точки зору [1]. Загальноприйнята інтерпретація оптичних властивостей ПК базується на квантовому утриманні носіїв у нанокристалітах кремнію [2, 3, 5]. Однак, висока питома поверхня цього

поруватого матеріалу – від 200 до 600 м²/см³, як показали адсорбційні вимірювання [6] також відіграє ключову роль [7]. Варто також зазначити, що ефективна люмінесценція ПК спостерігалася лише на високопоруватих шарах – поруватість яких понад 70%.

Оптичні, електричні та теплові властивості PSi широко вивчалися [7, 8] через їх численні сфери застосування. На відміну від цього, дуже мало

досліджень стосувалося механічних властивостей ПК. Лише зовсім недавно було виміряно модуль Юнга ПК за допомогою акустичних методів [9] в діапазоні низької поруватості – до 47%. Тим не менш, пружні властивості поркаптих кремнієвих шарів – особливо з високою поруватістю, є важливими параметрами. Насправді механічна нестабільність ПК є серйозною проблемою для розробки пристроїв, пов'язаних з ПК. Наприклад, розтріскування високопоруватих кремнієвих шарів спостерігається, коли капілярні напруження занадто великі під час випаровування електроліту [10]. Таким чином, щоб зрозуміти явище розтріскування, необхідно знати пружні властивості кремнієвих матеріалів [11] оскільки вони визначають пружно накопичену енергію у відповідь на капілярні напруження.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Модуль Юнга безпосередньо пов'язаний з константою ґратки і, таким чином, з морфологією пор. Автор [12, 13] використовував акустичну мікроскопію для дослідження акустичних властивостей ПК, виготовленого з кристалічної кремнієвої пластини р+-типу (100). Він описав швидкості поздовжніх і поперечних хвиль, V_L і V_S , як емпіричні функції поруватості, де підрядковий індекс "0" позначає швидкість у кристалічному кремнії, а n – параметр, що залежить від форми пор. Вимірювання показали хороше узгодження з теорією за формулами [14, 15]. Виходячи з цього припущення, автори [16] вивчили механічні властивості спеченого мезопоруватого кремнію за допомогою методу скінченних елементів (МСЕ). Таким чином, вони змоделювали ПК з використанням випадково розподілених сферичних пор і дійшли висновку, що властивості спеченого ПК добре узгоджуються з експериментом. В роботі [5] автори застосували метод наноінденування для дослідження модуля Юнга PSi з поруватістю від 36% до 90% і показали, що рівень легування впливає на модуль Юнга ПК. Крім того, вони вказали, що основна відмінність між р+ і р-типом ПК полягає в морфології пор. Приймаючи коефіцієнт Пуассона ПК за константу ($\nu_p = 0,10$), Беллет дійшов висновку, що модуль Юнга ПК р+ типу (100), відповідає степеневій функції:

$$E_p = A(1 - \phi)^2$$

де $A = 120$ ГПа. Використовуючи підхід дискретної гомогенізації, [17] розглядали PSi як кубічний матеріал і отримали функцію, подібну до функції [5]. Автори [18, 21] запропонували нову функцію для модуля Юнга як:

$$E_p = E_0 (1 - \phi)^2,$$

де E_0 – модуль Юнга кристалічного кремнію.

Постановка завдання. У наведених вище роботах дано пояснення мікроскопічної механіки пружних параметрів ПК, і всі вони згадують, що структура пор є одним з ключових факторів для оцінки пружних властивостей ПК, але їхні дискусії обмежуються припущеннями, такими як постійний коефіцієнт Пуассона, і не згадують про анізотропні властивості ПК. Тому необхідно детально дослідити анізотропні властивості ПК. З цією метою пропонується дослідити вплив на його пружні властивості поправок на порову структуру. Враховуючи, що вплив цих факторів не можна легко вивчити або кількісно оцінити за допомогою експерименту, в цій статті пропонується моделювання за допомогою МСЕ.

Виклад основного матеріалу. Мікроскопічний аналіз пружної хвилі, що поширюється в твердому тілі, починається з визначення залежності між напруженням і деформацією. Закон Гука формулює цю залежність як:

$$\sigma = C e \quad (1)$$

де σ – тензор напружень (стиснення або розтягнення), прикладених до даного середовища, а e – результуючий тензор деформації; C – тензор жорсткості. У випадку кристалів тензори σ та e мають порядок два, тоді як C є тензором четвертого порядку. Кількість незалежних компонент у C залежить від симетрії кристала (до 21 для триклінної). Для ортотропної структури, яка має три взаємно ортогональні подвійні осі симетрії, тензор жорсткості має дев'ять незалежних параметрів, які в матричній формі можна записати як:

$$C = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{bmatrix} \quad (2)$$

У випадку матеріалу з кубічною симетрією, такого як кристалічний кремній, тільки 3 компоненти є незалежними в його C ($c_{12} = c_{13} = c_{23}$, $c_{11} = c_{22} = c_{33}$, $c_{44} = c_{55} = c_{66}$). Використовуючи формули (1) і (2), пружні параметри кристалічного кремнію можуть бути виведені з його тензора жорсткості [2] як:

$$E = \frac{1}{2} \frac{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}{c_{11} + c_{12}}$$

$$\nu_0 = \frac{c_{12}}{c_{11} + c_{12}}$$

$$G_0 = c_{44} \quad (3)$$

$$K_0 = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{3}$$

де E_0 – модуль Юнга, ν_0 – коефіцієнт Пуассона, G_0 – модуль зсуву і K_0 – модуль об'ємної пружності. Оскільки це ортотропний матеріал, його пружні параметри змінюються в різних напрямках. Тому, для уточнення, підрядковий індекс "0" означає основний напрямок об'ємної маси, без пор всередині.

Закон Гука також можна переписати як залежність напруження від деформації:

$$e = S \cdot \sigma \quad (4)$$

де S – тензор податливості, який дорівнює оберненій величині до тензора жорсткості C .

Ця залежність корисна для оцінки пружних параметрів ортотропного середовища, оскільки вона безпосередньо пов'язана з модулем Юнга E_i , модулем зсуву G_j та коефіцієнтом Пуассона ν_{ij} в кожному напрямку, як показано у формулі (5). Тут координати встановлені паралельно основним напрямкам кристала кремнію, тобто вісь x співпадає з $[100]$, вісь y – з $[010]$, а z з $[001]$

$$\begin{bmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} \\ \gamma_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_x} & -\frac{\nu_{yx}}{E_y} & -\frac{\nu_{zx}}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{xy}}{E_x} & \frac{1}{E_y} & -\frac{\nu_{zy}}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{xz}}{E_x} & -\frac{\nu_{yz}}{E_y} & \frac{1}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{yz}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{zx}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{xy}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \\ \tau_{xy} \end{bmatrix} \quad (5)$$

Видно, що ці параметри пружності пов'язують напруження з результуючою деформацією. Як наслідок, пружні параметри можна отримати, прикладаючи різні види напружень і спостерігаючи за деформаціями, що виникають при цьому. Наприклад, прикладаючи нормальне напруження (розтягнення або стиснення) σ_i до i_k – поверхні поруватого середовища, а бічні поверхні залишаються вільними, з формули (5) отримуємо співвідношення $e_i = \sigma_i / E_i$, $e_j = -(\sigma_i \nu_{ij}) / E_i$, $e_k = -(\sigma_i \nu_{ik}) / E_i$. Перетворюючи ці співвідношення, визначаємо параметри пружності:

$$\begin{aligned} E_i &= \frac{\sigma_i}{e_i} \\ \nu_{ij} &= -\frac{e_j}{e_i} \\ G_{ij} &= \frac{\tau_{ij}}{\gamma_{ij}} \end{aligned} \quad (6)$$

Враховуючи осьову симетрію пор, маємо також наступні співвідношення: $E_y = E_z$; $\nu_{xy} = \nu_{xz}$; $\nu_{yx} = \nu_{zx}$; $\nu_{yz} = \nu_{zy}$, таким чином кількість незалежних пружних параметрів для ортотропного матеріалу зменшується.

Прикладаючи статичний тиск на поверхню середовища, тобто $\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = p$, і напруження зсуву $\tau_x = \tau_y = \tau_z = 0$, тоді

$$e_x = \left(\frac{1}{E_x} - \frac{\nu_{yx}}{E_y} - \frac{\nu_{zx}}{E_z}\right)p, e_y = \left(\frac{1}{E_y} - \frac{\nu_{xy}}{E_x} - \frac{\nu_{zy}}{E_z}\right)p, e_z = \left(\frac{1}{E_z} - \frac{\nu_{xz}}{E_x} - \frac{\nu_{yz}}{E_y}\right)p$$

Нарешті, об'ємний модуль для ПК K_b виводиться за співвідношенням:

$$K_b = \frac{p}{e_x + e_y + e_z} \quad (7)$$

що означає, що модуль об'ємної пружності обчислюється за допомогою гідростатичного тиску, поділеного на результуючий декремент об'єму. Згідно з формулами (6) і (7), для обчислення пружних параметрів зручно використовувати симуляції МСЕ.

Згідно з морфологічними характеристиками ПК, розглядається як ортотропний поруватий матеріал. Вважається, що ПК витравлюється з (100) орієнтованої кремнієвої пластини, а геометрична модель, яка використовується для моделювання – з прямими і періодично розподіленими порами, орієнтованими вздовж координати x . Значення констант жорсткості (незалежні компоненти C) для орієнтованого $[100]$ кристала чистого кремнію наведено в табл. 1 [2].

Таблиця 1
Значення констант жорсткості (в ГПа) для кремнію при кімнатній температурі

c_{11}	c_{12}	c_{44}
165,6	63,9	79,5

Використовуючи формулу (3) і значення в табл. 1, відповідні пружні параметри для об'ємного кремнію розраховуються і подаються в табл. 2.

Таблиця 2
Значення пружних параметрів для об'ємного кремнію при кімнатній температурі

E_0	ν_0	G_0	K_0
130Гпа	0,28	79,5Гпа	97,8ГПа

Для того, щоб зменшити обчислювальні витрати, пори задаються рівномірними та осесиметричними, таким чином, кубічний зразок з однією порою в середині є достатньо хорошим для того, щоб бути репрезентативним об'ємним елементом (РОЕ). Просторовий період кубічного

РОЕ встановлюється як $a = 25 \text{ нм}$, як показано на рис. 1. Варто зазначити, що цей просторовий період не впливає на результати моделювання пружних параметрів, і він визначений тут лише для розрахунків МСЕ. Внутрішня частина пори є порожньою, тобто без будь-яких рідин або частинок. Решта твердої частини, або скелет, куба складається з чистого кремнію.

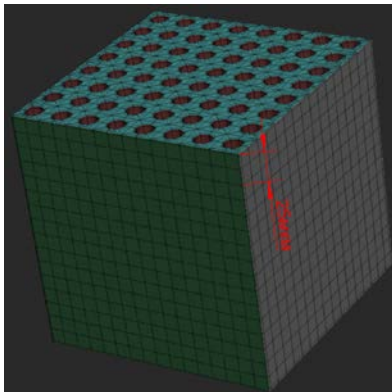


Рис. 1. РОЕ зразка PSi з циліндричними порами, параметр a – просторовий період

Завдяки симетриям задаються періодичні граничні умови для подальшого зменшення обчислень. На рис. 2 показано приклад набору граничних умов для моделювання за модулем Юнга вздовж осі x , де на yz -поверхню МСЕ навантажено розтягуюче напруження, паралельне до напрямку x . Після обчислення МСЕ отримано вектор переміщень $u = (u, v, w)$ та тензор деформацій e_{PE} . Таким чином, на основі формули (6) можна отримати E_p , ν_{ji} та G_{ji} . Відповідно до співвідношення «напруження-деформація» (5) обчислюються компоненти тензора податливості ПК (s_{ij}), а також тензор жорсткості C (шляхом інвертування S).

Насправді, пори в ПК не завжди такі ж ідеальні, як циліндри і мають різну морфологію залежно від умов травлення і властивостей підкладки, таких як тип і рівень легування, кристалічна орієнтація і т.п. Було показано, що пори, витравлені при низькій густині струму, як правило, мають нижчу поруватість і мають розгалужену морфологію [19], як на рис. 3(а) [20, 21]. Навпаки, висока густина струму зазвичай призводить до утворення більших пор з циліндричною морфологією, як на рис. 3(б).

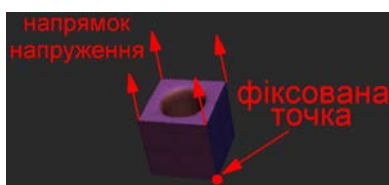


Рис. 2. Опис граничних умов для обчислення модуля Юнга E_x

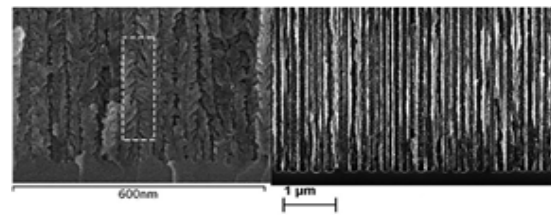


Рис. 3. Поперечні перерізи типових форм пор на SEM зображенні (а) з розгалуженою морфологією, (б) з більшими та циліндричними порами

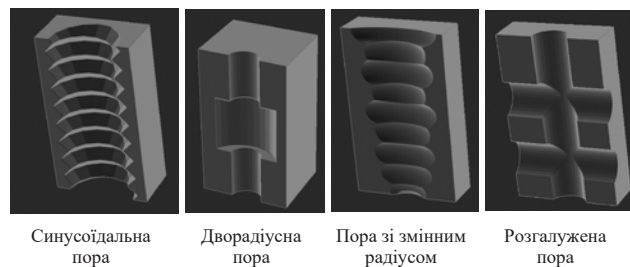


Рис. 4. Різні морфологічні моделі, реалізовані в симуляції МСЕ

Відповідно до результатів роботи [22], для розширення діапазону дослідження та отримання достовірних результатів будуть досліджуватись різні види морфології пор. По-перше, на додаток до циліндричної пори на рис. 1, було спроектовано чотири інші типові форми пор (показані на рис. 4 відповідно до досяжної морфології ПК, і вони відповідно названі: циліндрична, синусоїдальна, дворадіусна, змінно-радіусна і розгалужена моделі. Зокрема, синусоїдальна модель демонструє невеликі варіації радіусів пор, а форма стінки не змінюється зі збільшенням розміру пор; дворадіусна модель має два різні радіуси пор у співвідношенні 1:2; змінно-радіусна модель має велику варіацію радіусів на стінці пор і ця варіація збільшується зі збільшенням розміру пор; розгалужена модель має кілька бічних відгалужень, симетрично розподілених уздовж основної циліндричної пори. Множинна поруватість отримується шляхом зміни розміру пор. Використовуючи ці морфологічні моделі, можна вивчати вплив форми пор на пружні параметри. Варто зазначити, що обчислені результати для пружних параметрів тут є фактично для МСЕ, тому вони розглядаються як ефективні значення для ПК, який є пружним матеріалом.

Крім того, враховуючи морфологію пор, наведену на рис. 4, поруватість обмежена до 63%. Для досягнення більшої поруватості пропонується гібридна модель з вторинними порами та відгалуженнями. Спроекований приклад на рис. 5 розрахований на поруватість 60%. Він близький до розгалуженої моделі при меншій поруватості, тоді як зі збільшенням поруватості він стає більш схожим на комбінацію циліндрів з різними радіусами. Поруватість цієї моделі може досягати 89%.

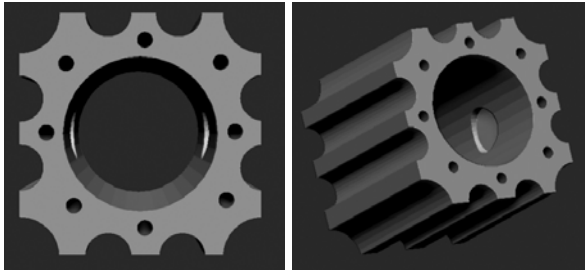


Рис. 5. Гібридна модель (одна головна циліндрична пора з бічними відгалуженнями та вторинними порами)

Результати моделювання представлені, шляхом порівняння з літературними даними, щоб показати їхню достовірність. Шляхом побудови графіків модулів пружності та підбору їх як степеневих законів поруватості, представлено та проаналізовано відмінності в модулях пружності між шістьма моделями.

Результати моделювання за допомогою МСЕ модуля Юнга, об'ємного модуля та модуля зсуву представлені відповідно на рис. 6–8. Таким чином, вплив форми пор та поруватості на пружні властивості ПК можна спостерігати за варіаціями та розбіжностями.

З рис. 6–8 видно, що зміна пружних модулів, як функції поруватості чітко залежить від геометрії пор.

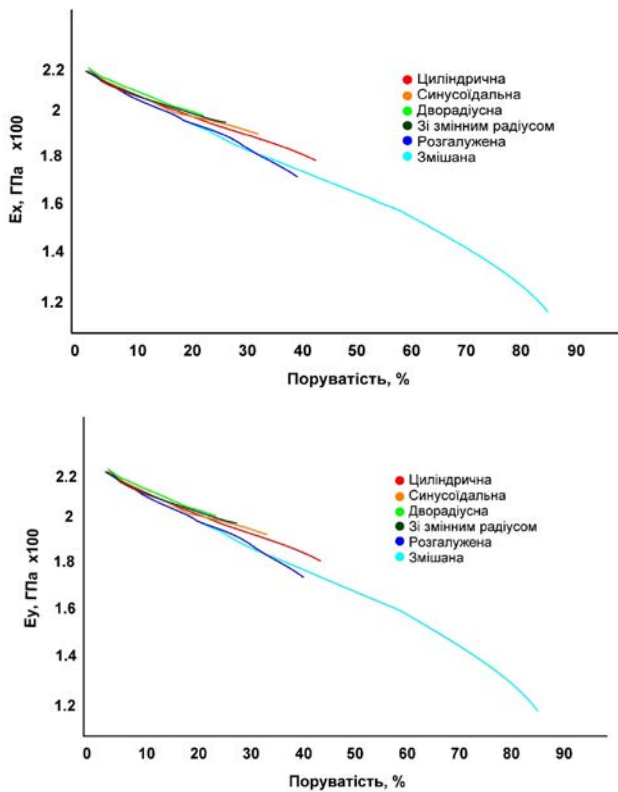


Рис. 6. Залежність модуля Юнга ПК від поруватості з різною формою пор (через симетрію геометричних моделей E_z тотожний E_y)

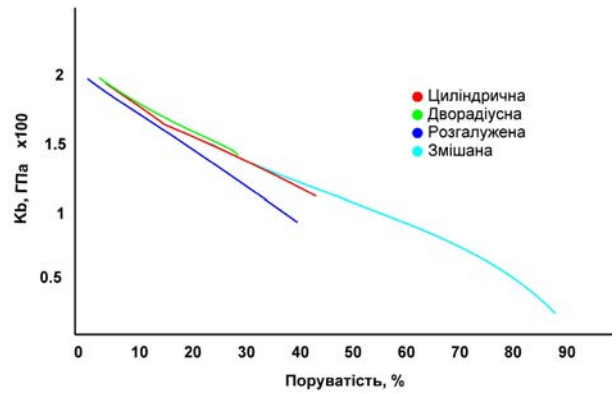


Рис. 7. Залежність модуля об'ємної маси від поруватості з різною формою пор

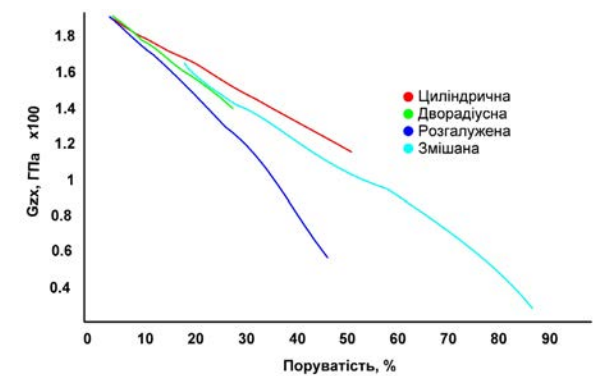
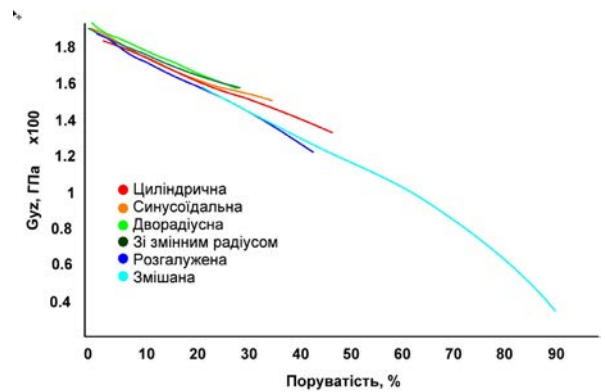
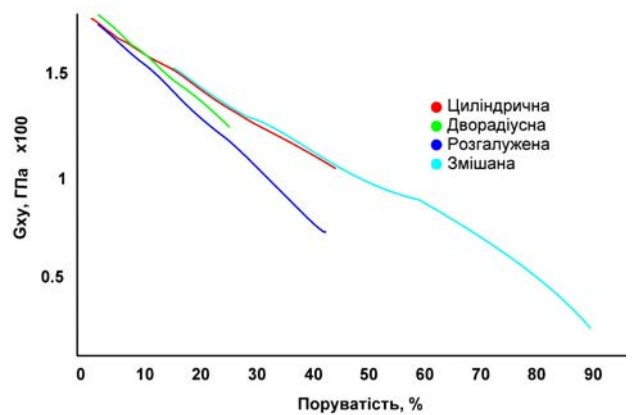


Рис. 8. Залежність модуля зсуву від поруватості з різною формою пор

Вплив форми пор є різним для кожного модуля пружності, спостерігається деяка схожість між цими моделями пор. Наприклад, пружні параметри циліндричної та синусоїдальної геометрії приблизно однакові, так само як і дворадіусної та змінного радіусу. Це пояснюється тим, що радіус пор не сильно змінюється між синусоїдальною і циліндричною геометрією, тоді як дворадіусні пори і геометрія зі змінним радіусом мають величезні варіації радіусу в напрямку осі x . Тому синусоїдальні моделі та моделі зі змінним радіусом не показані на рис. 7 і 8. Тим не менш, модуль об'ємної маси дуже схожий для всіх геометрій, окрім розгалуженої. Невеликі зміни на стінці пори є незначними, але розгалуження суттєво впливають на всі пружні параметри ПК.

Функції підбору модуля Юнга E та модуля зсуву G ПК були запропоновані [16] як степеневий закон поруватості, що визначається за допомогою:

$$\begin{aligned} E &= E_0'(1 - \phi)^m \\ G &= G_0'(1 - \phi)^h \end{aligned} \quad (8)$$

де E_0' і G_0' – масштабні коефіцієнти, які зазвичай дорівнюють відповідно модулю Юнга і модулю зсуву кристалічного кремнію (представлені в рівнянні (3) і таблиці 2). m і h – числа підбору.

Таблиця 3

Підбір параметрів степеневого закону для модулів Юнга та зсуву

Форма	m		h		
	E_x	E_y	G_{xy}	G_{yz}	G_{zx}
Циліндрична	1	1,57	1,75	3,9	1,65
Синусоїдальна	1,04	1,63	1,85	3,8	1,75
Дворадіусна	1,45	1,67	2,25	3,35	2,15
Зі змінним радіусом	1,4	1,65	2,25	3,4	2,13
Розгалужена	1,15	2,,1	2,68	3,75	3,1
Змішана	0,98	2,05	1,56	3,05	1,5

Використовуючи ці формули, m і h були підібрані з числових значень пружних параметрів. Вони наведені в табл. 3 для модулів Юнга та модулів зсуву. Похибки підбору err_i також розраховані на основі формули (9), щоб показати точність підбору, де y_i – змодельований результат, y_i' – результат підбору і i означає позицію даних. err_i представлені у вигляді стовпчиків похибок на рис. 6–8, з яких видно, що підбір за степеневим законом добре узгоджується з змодельованими результатами при меншій поруватості для циліндричної моделі, моделі з двома радіусами і розгалуженої моделі, але похибка стає вищою при

більшій поруватості, як і у випадку з гібридною моделлю. Таким чином, для цього діапазону поруватості фітинги є недостатньо надійними. Крім того, слід зазначити, що масштабні коефіцієнти тут дещо відрізняються від E_0 або G_0 в табл. 2. Степеневі залежності є лише приблизними оцінками зв'язку між модулями пружності та поруватістю.

$$Err_i = y_i y_i' \quad (9)$$

Значення чисел припасування m і h для перших п'яти моделей форми (від циліндричної до розгалуженої) близькі до значень, наведених в [16], за винятком G_{yz} . Розбіжність пояснюється відмінностями моделей, а також тим, що коефіцієнт Пуассона ПК в роботі [16] розглядався як константа. Як показано, коефіцієнт Пуассона змінюється не тільки з поруватістю, але й з формою та орієнтацією пор. Також можна помітити, що значення для циліндричних і синусоїдальних моделей близькі, тоді як для моделей з двома радіусами і модель зі змінним радіусом близькі. Таким чином, їх можна згрупувати у дві родини.

Висновки. Отримала подальший розвиток математичну модель визначення пружних параметрів у поруватому кремнії, що дозволяє визначити механічних властивостей цього матеріалу. Модель здатна враховувати складну порувату структуру кремнію, що дозволяє з більшою точністю визначати модуль Юнга та інші механічні характеристики враховуючи мікроструктурні особливості матеріалу, такі як форма, розмір і розподіл пор. Це дозволяє прогнозувати поведінку матеріалу під навантаженням з набагато вищою точністю, ніж це було можливо раніше. Крім того, модель інтегрує анізотропні властивості поруватого кремнію, що робить її особливо корисною для застосувань, де матеріал піддається складним механічним впливам.

Досліджено вплив форми пор на пружні параметри при різній поруватості на прикладі кількох типових морфологічних моделей ПК. Результати були отримані за допомогою методу скінченних елементів. З аналізу результатів і порівняння з експериментальних даних з літературними можна зробити висновок, що зі збільшенням поруватості пружні параметри ПК зменшуються за певними закономірностями. Крім того, форма пор має значний вплив на ці закономірності, особливо для моделі з розгалуженими порами, але все ж таки існують деякі спрощення в моделюванні форми пор, тобто, згідно з результатами МСЕ для циліндричних і синусоїдальних пор, коли є лише невеликі зміни на стінці пори, її геометрична модель

може бути спрощена у вигляді циліндра. Тоді як зміни стінки пори занадто великі, щоб їх можна було ігнорувати, як у випадку пори змінного радіусу, її можна розглядати, як дворадіусну модель; тим не менш, коли є відгалуження з боків від основної пори, їх не можна ігнорувати чи спрощувати.

Визначено, що коефіцієнт Пуассона залежить не тільки від поруватості, але й від форми та напрямку пор. Також видно, що значення циліндричної та синусоїдальної моделей близькі, так само як і значення дворадіусної моделі та моделі зі змінним радіусом.

Список літератури:

1. R. Herins, W. Lang, and H. Munder Porous silicon: Material, Technology and Devices. *Proc. E-MRS Spring Conference North Holland, Amsterdam*, 1996. 344p.
2. Aliev, G.N., Goller, B., Snow, P.A., Elastic properties of porous silicon studied by acoustic transmission spectroscopy. *J. Appl. Phys.* 2011. 110 (4), P. 1–8. doi: 10.1063/1.3626790.
3. Anglin, E.J., Cheng, L., Freeman, W.R., Sailor, M.J., Porous silicon in drug delivery devices and materials. *Adv. Drug Deliv. Rev.* 2008. 60 (11), P. 1266–1277. doi: 10.1016/j.addr.2008.03.017.
4. O. Belmont; D. Bellet; Y. Bréchet. Study of the cracking of highly porous p+ type silicon during drying. *J. Appl. Phys.* 1996. 79, P. 7586–7591. doi: 10.1063/1.362415.
5. Bellet, D., Lamagnère, P., Vincent, A., Bréchet, Y., 1996. Nanoindentation investigation of the Young's modulus of porous silicon. *J. Appl. Phys.* 80 (7), 3772–3776. doi: 10.1063/1.363305 .
6. Biot, M.A., Theory of propagation of elastic waves in a fluid-saturated porous solid. i. low frequency range. *J. Acoust. Soc. Am.* 1956. 28 (2), P. 168–178. doi: 10.1121/1.1908239.
7. Aouassa, M., Hassayoun, L., Favre, L., Ronda, A., Berbezier, I., Optimization of structural and optical properties of nanoporous silicon substrate for thin layer transfer application. *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.* 2019. 30 (3), P. 2585–2591. doi: 10.1007/s10854-018-0533-8.
8. Canham, L., 2014. Handbook of Porous Silicon, *Springer*. 2018. 1613p. doi: 10.1007/978-3-319-71381-6.
9. Lu, Z., Liu, N., Lee, H.W., Zhao, J., Li, W., Li, Y., Cui, Y., Nonfilling carbon coating of porous silicon micrometer-sized particles for high-performance lithium battery anodes. *ACS Nano.* 2015. 9 (3), P. 2540–2547. doi: 10.1021/nn505410q.
10. Gautier, G., Kouassi, S., Integration of porous silicon in microfuel cells: a review. *Int. J. Energy Res.* 2015. 39 (1), P. 1–25. doi: 10.1002/er.3206.
11. Bustillo, J., Fortineau, J., Gautier, G., Lethiecq, M., Ultrasonic characterization of electrochemically etched porous silicon. *Jpn. J. Appl. Phys.* 2014. 53 (6), 1–4. doi: 10.7567/JJAP.53.060308 .
12. Da Fonseca, R.J.M., Saurel, J.M., Despau, G., Elastic characterization of porous silicon by acoustic microscopy. *Superlattices Microstruct.* 1994. Vol. 16, Iss. 1. P. 21–23. doi: 10.1006/spmi.1994.1102.
13. RR. J. M. Da Fonseca, J. M. Saurel, A. Foucaran, J. Camassel, E. Massone, T. Taliercio & Y. Boumaiza. Acoustic investigation of porous silicon layers. *Journal of Materials Science.* 1995. Volume 30. P. 35–39. doi: 10.1007/BF00352128.
14. Bustillo, J., Fortineau, J., Gautier, G., Lethiecq, M., Ultrasonic characterization of porous silicon using a genetic algorithm to solve the inverse problem. *NDTE.* 2014. Int. 62, P. 93–98. doi: 10.1016/j.ndteint.2013.11.007.
15. Da Fonseca, R.J.M., Saurel, J.M., Despau, G., Elastic characterization of porous silicon by acoustic microscopy. *Superlattices Microstruct.* 1994. P. 21–23. doi: 10.1006/spmi.1994.1102.
16. Martini, R., Depauw, V., Gonzalez, M., Vanstreels, K., Nieuwenhuysen, K.V., Gordon, I., Poortmans, J., Mechanical properties of sintered meso-porous silicon: a numerical model. *Nanoscale Res. Lett.* 2012. 7 (1), 597p. doi: 10.1186/1556-276X-7-597 .
17. Magoaric, H., Danescu, A. Modeling macroscopic elasticity of porous silicon. *Physica Status Solidi (C) Current Topics in Solid State Physics.* 2009. Vol. 6 (7), P. 1680–1684. doi: 10.1002/pssc.200881053 .
18. Populaire, C., Remaki, B., Lysenko, V.I., Barbier, D., Artmann, H., Pannek, T.L., On mechanical properties of nanostructured meso-porous silicon. *Appl. Phys. Lett.* 2003. 83 (7), P. 1370–1372. doi: 10.1063/1.1603336 .
19. Korotchenkov, G.S., Porous Silicon : From Formation to Application. Volume one. Formation and Properties. CRC Press. 2015. 439p. doi: 10.1201/b19342.
20. Melhem, A., De Sousa Meneses, D., Andrezza-Vignolles, C., Defforge, T., Gautier, G., Semmar, N. Structural, optical, and thermal analysis of n-type meso-porous silicon prepared by electrochemical etching. *J. Phys. Chem. C.* 2015. 119 (37), P. 21443–21451. doi: 10.1021/acs.jpcc.5b04984 .
21. Xiaoyue Gong, Julien Bustillo, Laurianne Blanc, Gaël Gautier FEM simulation on elastic parameters of porous silicon with different pore shapes. *International Journal of Solids and Structures.* 2020. Vol. 190. P. 238–243. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2019.11.001.
22. Foll H., Christophersen M., Carstensen J., Hasse G., Formation and application of porous silicon. *Materials Science and Engineering R.* 2002. Vol. 39. P. 93–141. doi: 10.1016/S0927-796X(02)00090-6.

Palahin V.A., Kogdas M.H., Sytnik V.Yu., Donskih O.V. A MATHEMATICAL MODEL IS PRESENTED WHICH ELUCIDATES THE RELATIONSHIP BETWEEN THE STRUCTURE OF POROUS SILICON AND THE YOUNG'S MODULUS

This article is dedicated to the examination of the correlation between the structural characteristics of porous silicon and its mechanical properties, with a particular focus on Young's modulus. The article elucidates the relationship between the elastic parameters of a porous silicon matrix as a function of porosity through the utilisation of finite element modelling (FEM). The model is founded upon the principles of elasticity and considers a range of factors, including pore size and distribution, wall thickness between pores, and other structural characteristics. The silicon substrate from which the porous silicon is formed exhibits a crystallographic orientation (100), and the pores display a cylindrical morphology. A total of six pore shapes were developed for the purpose of studying the effect of pore morphology on elastic parameters. The shapes were selected in accordance with the geometry of the pores obtained by electrochemical etching and designed as orthotropic structures. The results demonstrate that pore morphology has a significant impact on the elastic moduli. Consequently, this factor should be given due attention in future studies. It was observed that as porosity increased, the elastic parameters of PC exhibited a decline in accordance with specific patterns. Furthermore, the pore shape exerts a considerable influence on these patterns, particularly in the case of the model with branched pores. However, there are still some simplifications inherent to the modelling of the pore shape. For instance, according to the FEM results for cylindrical and sinusoidal pores, when there are only minor alterations to the pore wall, its geometric model can be simplified as a cylinder. While the pore wall changes are significant and cannot be ignored, as in the case of a variable radius pore, it can be treated as a two-radius model. However, when there are branches on the sides of the main pore, they cannot be ignored or simplified. The simulation results are in good agreement with the experimental data reported in the literature for the Young's modulus. Furthermore, power-law dependences of the Young's and shear moduli on the porosity are proposed, and the associated errors are discussed.

Key words: porous silicon, etching, Poisson's ratio, Young's modulus.