

# P 型硅纳米板压阻特性的理论研究\*

张加宏 黄庆安<sup>†</sup> 于虹 雷双瑛

(东南大学 MEMS 教育部重点实验室, 南京 210096)

**摘要:** 考虑量子尺寸效应与自旋轨道耦合作用, 从含有应变的  $6 \times 6$  Luttinger-Kohn 哈密顿量出发, 采用有限差分方法建立了 p 型硅纳米板的能带结构模型. 基于硅纳米板压阻特性与其能带结构的相关性, 采用改进的压阻理论定量分析了厚度、杂质浓度与温度对其压阻系数的影响. 研究表明: 量子尺寸效应强烈改变了硅纳米板的能带结构, 是其压阻系数增大的主要因素, 而自旋轨道耦合作用仅对含较高应变的硅纳米板的能带结构有较大影响; 硅纳米板的压阻系数具有尺寸效应, 随厚度减小而增大, 随杂质浓度增加或温度升高而减小. 在高简并条件下, 硅纳米板的压阻系数与温度无关, 完全由杂质浓度的大小控制; 在非简并条件下, 情况刚好相反. 最后, 利用施加应力前后空穴等能面形状的变化定性分析了硅纳米板压阻特性的起源.

**关键词:** 硅; 能带结构; 压阻特性; 尺寸效应; 自旋轨道耦合

**PACC:** 7220F; 7320D; 7320A

**中图分类号:** TP212

**文献标识码:** A

**文章编号:** 0253-4177(2008)05-0970-05

## 1 引言

P 型体硅的压阻效应(力电耦合特性)<sup>[1]</sup>已被广泛应用于微机械传感器<sup>[2,3]</sup>, 例如, 压力传感器、陀螺仪、加速计等. 然而这类机械传感器的低灵敏度限制了它们的进一步应用. 为了提高这类传感器的灵敏度与性能, 同时考虑到不能过高地增加成本与制造工艺的复杂性, 纳米尺寸硅(比如硅纳米板(梁)、硅纳米线)引起了实验和理论工作者的极大兴趣<sup>[4~7]</sup>. 与其他性质相似<sup>[8]</sup>, 当特征尺度变得很小时, 纳米尺寸硅的力电耦合特性偏离了宏观的情况, 这意味着不能再采用宏观性质去描述硅纳米板或者硅纳米线的力电耦合特性. 因此, 在纳米尺度下, 建立一个物理模型去描述压阻效应的尺寸效应是非常重要的且尤为迫切的.

目前, 实验上 Harley 等人<sup>[4]</sup>利用气相外延方法已经构造了厚度小于 100nm 的高灵敏度硅压阻悬臂梁传感器, 这种传感器不仅减少了线宽, 而且提高了力或位移的灵敏度. 而 Toriyama 等人<sup>[5]</sup>通过拉伸实验直接测量了利用电子束直写加工的硅纳米线的压阻系数, 其值约为体硅的 1.5 倍. 此外, 他们还使用体硅的能带结构研究了硅纳米线的压阻特性. 另一方面, 理论上 Pramanik 等人<sup>[7]</sup>利用  $4 \times 4$  的 Luttinger-Kohn 模型简化近似后的解析结果, 研究了载流子浓度和尺寸对硅量子阱线(硅纳米板)压阻效应的影响. 该模型没有考虑能带扭曲和自旋轨道耦合作用对价带结构的影响. 而硅材料中由于重空穴带、轻空穴带以及自旋轨道劈裂带靠得很近, 三者的耦合不应该被忽略.

针对以上问题, 本文首先从含有应变的  $6 \times 6$  Lut-

tinger-Kohn 哈密顿量<sup>[9,10]</sup>出发, 采用有限差分方法建立了 p 型硅纳米板的能带结构模型. 该模型包含了能带扭曲、自旋轨道作用、应变和量子尺寸效应等因素. 然后修正得到了计算 p 型单晶硅纳米板压阻系数的公式. 接着计算并分析了硅纳米板的能带结构, 着重阐明量子尺寸效应和应力如何改变硅纳米板的能带结构, 同时强调重、轻空穴带以及自旋轨道劈裂带之间的耦合作用. 最后在详细研究了硅纳米板厚度、杂质浓度和温度对硅纳米板压阻系数的影响之后, 定性分析了硅纳米板压阻特性的起源. 这些结果对于更好地理解硅纳米板的力电耦合特性将是有益的.

## 2 理论模型

### 2.1 P 型硅纳米板能带结构模型

图 1 是沿 [110] 方向硅纳米板的几何结构示意图. 其上下表面均是 {100} 面, 建立坐标系,  $x, y$  轴在平面内,  $z$  轴沿厚度方向. 考虑到  $z$  方向受到限制, 我们用  $L_z$  表示硅纳米板在  $z$  方向上的有效厚度.

为了获得硅纳米板的能带结构, 需要解如下薛定谔方程:

$$[\hat{H}_h(K, k_z) + IV(z)]\Psi_K(z) = E(K)\Psi_K(z) \quad (1)$$

其中  $I$  代表  $6 \times 6$  的单位矩阵;  $V(z)$  是空穴的限制势能;  $\Psi_K(z)$  是具有 6 个分量的一维本征列向量, 满足边界条件  $\Psi_K(0) = 0$  和  $\Psi_K(L_z) = 0$ . 基于包络函数近似, 含有应变和自旋轨道耦合作用的哈密顿量  $\hat{H}_h(K, k_z)$  在  $k \cdot p$  框架下具有简明的形式<sup>[10]</sup>:

\* 国家重点基础研究发展规划(批准号: 2006CB300404)和国家高技术研究发展计划(批准号: 2007AA64Z301)资助项目

<sup>†</sup> 通信作者. Email: hqa@seu.edu.cn

2007-09-30 收到

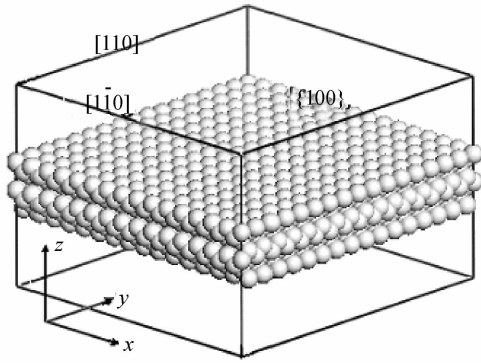


图 1 硅纳米板的 3 维示意图

Fig.1 A 3D schematic diagram of a silicon nanosheet used in the simulation study

$$\begin{bmatrix}
 P + Q & -S & R & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\
 -S^+ & P - Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\
 R^+ & 0 & P - Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q \\
 0 & R^+ & S^+ & P + Q & -\sqrt{2}R^+ & -\frac{1}{\sqrt{2}}S^+ \\
 -\frac{1}{\sqrt{2}}S^+ & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P + \Delta & 0 \\
 \sqrt{2}R^+ & \sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P + \Delta
 \end{bmatrix}$$

(2)

式中

$$\begin{aligned}
 P &= P\kappa + P\epsilon, Q = Q\kappa + Q\epsilon, \\
 R &= R\kappa + R\epsilon, S = S\kappa + S\epsilon \\
 P\kappa &= \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\gamma_1(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \\
 P\epsilon &= -a(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \\
 Q\kappa &= \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\gamma_2(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \\
 Q\epsilon &= -\frac{b}{2}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\epsilon_{zz}) \\
 R\kappa &= \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\sqrt{3}[-\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y], \\
 R\epsilon &= \frac{\sqrt{3}b}{2}(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}) - id\epsilon_{zz} \\
 S\kappa &= \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)2\sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y)k_z, S\epsilon = -d(\epsilon_{zx} - i\epsilon_{zy})
 \end{aligned}$$

(3)

其中  $\hbar$  是普朗克常数;  $m_0$  是自由电子质量;  $k = (k_x, k_y, k_z)$  是波矢;  $\epsilon_{ij}$  是应变张量分量;  $\gamma_i$  是 Luttinger 价带参数;  $a, b, d$  是价带形变势参数;  $\Delta$  是自旋分裂能量. 这些参数值可以参考文献[11]. 当研究[110]方向硅纳米板的压阻特性时, 应变分量需要根据(4)式转化为应力:

$$\epsilon_{\alpha\alpha} = \epsilon_{\beta\beta} = (S_{11} + S_{12})T/2, \epsilon_{\gamma\gamma} = S_{12}T, \epsilon_{\alpha\beta} = S_{44}T/4$$

(4)

式中  $S_{ij}$  是硅的柔度分量;  $T$  为应力. 由于硅纳米板在厚度方向上失去了平移对称性, 波矢  $k_z$  不是一个好量子数, 必须用微分算符  $-i d/dz$  代替, 而微分算符需要离散化, 因此方程(1)要在网格划分的基础上采用有限差分方法进行求解. 最终, 通过数值求解如下  $6N_z \times 6N_z$  三角块矩阵的本征值可以得到硅纳米板的能带结构:

$$\begin{bmatrix}
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 \cdot & \hat{D}_{\text{bot}} & \hat{D}_{l-1} & \hat{D}_{\text{top}} & 0 & 0 & \cdot \\
 \cdot & 0 & \hat{D}_{\text{bot}} & \hat{D}_l & \hat{D}_{\text{top}} & 0 & \cdot \\
 \cdot & 0 & 0 & \hat{D}_{\text{bot}} & \hat{D}_{l+1} & \hat{D}_{\text{top}} & \cdot \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 \cdot \\
 \Psi_{l-1} \\
 \Psi_l \\
 \Psi_{l+1} \\
 \cdot
 \end{bmatrix} = E(K) \begin{bmatrix}
 \cdot \\
 \Psi_{l-1} \\
 \Psi_l \\
 \Psi_{l+1} \\
 \cdot
 \end{bmatrix}$$

(5)

式中  $\Psi_l = \Psi(z_l)$  是具有 6 个分量的一维本征列向量  $\Psi_l(z_l)$ , 下标  $l$  取遍  $k \cdot p$  基函数;  $\hat{D}_l, \hat{D}_{\text{top}}, \hat{D}_{\text{bot}} = \hat{D}_{\text{top}}^+$  都是  $6 \times 6$  块对角微分算符.

## 2.2 P 型硅纳米板压阻

众所周知, 材料的压阻特性可以通过压阻系数来表征. 根据施加应力前后空穴浓度和有效传输质量的改变, 压阻系数可定义为<sup>[12]</sup>:

$$\pi = -\frac{1}{X} \times \frac{\sum_{i=1}^2 \left( \frac{\Delta p_i}{p} \times \frac{1}{m_i} + \frac{p_i}{p} \Delta \left( \frac{1}{m_i} \right) \right)}{\sum_{i=1}^2 \frac{p_i}{p} \times \frac{1}{m_i}}$$

(6)

与体材料不同的是, 纳米板价带单位面积重空穴 ( $i=1$ ) 和轻空穴 ( $i=2$ ) 的浓度  $p_i$  有如下形式:

$$p_i = N_{v(i)} F_0(\eta_F)$$

(7)

$p = \sum p_i$  是价带单位面积的总浓度;  $F_0(\eta_F)$  是 0 阶费米-狄拉克积分;  $N_{v(i)}$  是 2 维有效质量态密度:

$$N_{v(i)} = \frac{m^*}{L_z \pi \hbar^2} \theta(E)$$

(8)

其中  $\theta(E)$  为步函数.

施加应力后, 价带重空穴 (HH) 和轻空穴 (LH) 浓度变化为:

$$\frac{\Delta p_i}{p} = \frac{N_{v(i)} (\Delta E_{v(i)} \sum_{i=1}^2 N_{v(i)} - \sum_{i=1}^2 \Delta E_{v(i)} N_{v(i)})}{k_B T (\sum_{i=1}^2 N_{v(i)})^2} \times \frac{F_{-1}}{F_0}$$

(9)

其中  $\Delta E_{v(i)}$  为空穴带边能量的变化, 可以通过方程(5)求得.  $\Delta(1/m_i)$  为施加应力后有效传输质量的改变. 因为有效传输质量  $m_i$  为价带曲率的倒数:

$$m_i = -\hbar^2 \left[ \frac{\partial^2 E}{\partial K^2} \right]^{-1} \text{ 在 } k = 0 \text{ 处}$$

(10)

所以, 一旦利用上述建立的能带结构模型求得施加应力前后能带的色散关系,  $\Delta(1/m_i)$  就可以利用方程(10)求得.

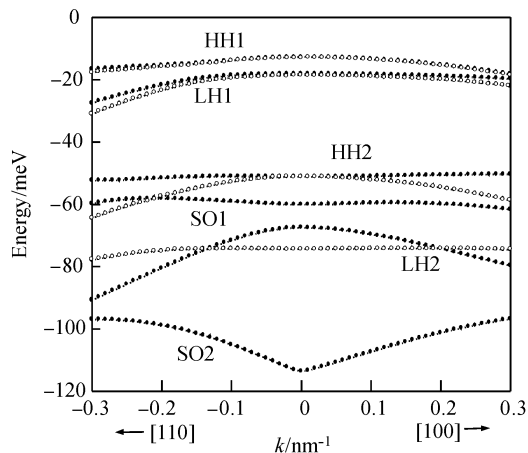


图2 厚度为10nm的硅纳米板的能带结构 实心点包含自旋轨道耦合作用;空心点不包含自旋耦合作用。

Fig.2 Valence-subband structures as a function of  $k$  along both the  $[100]$  and  $[110]$  directions for a 10nm-thick silicon nanoplate Solid curves: including the SO coupling; Hollow curves: ignoring the SO coupling.

### 3 数值计算结果

#### 3.1 P型硅纳米板的能带结构

在施加应力前,10nm厚的硅纳米板的能带结构如图2所示.一方面,由于量子尺寸限制,空穴能带发生分裂,形成若干子带.考虑到空穴的实际占据情况,图中仅给出了靠近价带顶的几条子带.不难发现,在没有施加应力的条件下,重、轻空穴能带的简并已经由于量子尺寸效应而被消除.与体硅相比,硅纳米板能带结构的强烈改变必然导致空穴重新分布,空穴有效质量也可能发生变化.因此,硅纳米板将具有不同于体硅的压阻特性.另一方面,自旋轨道耦合作用影响了硅纳米板的能带结构,较大的波矢处尤为明显,但它基本上没有改变最低的两条子带的带边( $k=0$ 处)能量和带边附近的能带结构.因此,自旋轨道耦合作用不会明显改变硅纳米板压阻特性.此外,考虑了自旋轨道耦合作用后,大部分子带的能量明显偏高.这种趋势不是偶然的现象,而是量子力学能级相互排斥的直接结果,换句话说,自旋轨道劈裂带对它上面的重、轻空穴能带的排斥,直接导致了重、轻空穴能带的上移.

在施加应力后,硅纳米板几何结构发生了变化,其能带结构也会随之变化.图3显示了硅纳米板最低的3条子带的带边能量随应力变化的曲线.在较高的压应力条件下,自旋轨道耦合作用明显影响了重空穴带边能量,而在较高的拉应力条件下,则明显影响了轻空穴带边能量.施加压应力时,HH1和HH2带边能量随应力绝对值增大而增大,LH1带边能量随应力绝对值增大而减小.考虑了自旋轨道耦合作用的HH1带向导带靠拢得更明显,有利于提高HH1带的空穴占据数.在1GPa压应力作用下,相对于LH1带,劈裂能大约为50meV.施加拉应力时,采用 $H_{4N_z \times 4N_z}$ 和 $H_{6N_z \times 6N_z}$ (包含

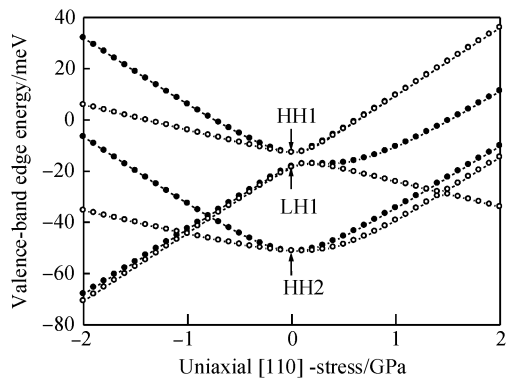


图3 最低的3条子带的带边能量随应力的变化曲线 实心点曲线考虑了自旋轨道耦合作用;空心点不包含自旋耦合作用。

Fig.3 Energy of the valence-band edge under uniaxial stress applied along  $[110]$  for a 10nm-thick silicon nanoplate Solid curves: including the SO coupling; Hollow curves: ignoring the SO coupling

了自旋轨道作用)两种哈密顿量计算的HH1和HH2带边能量随应力的变化趋势基本一致,但是LH1带的变化趋势则完全相反,说明在施加拉应力后,自旋轨道耦合作用在基本上没有影响HH带边能量的同时,强烈改变了LH1的带边能量.显然这会改变空穴在HH1带和LH1带上的分布比例.因此在计算高应变的硅纳米板力电耦合特性时,为了得到更为可靠的结果,自旋轨道耦合作用不应该被忽略.但是需要说明的是,一般在计算压阻系数时,施加的拉应力的大小为0.1GPa,而如图3所示,此时自旋轨道耦合作用对带边能量的影响实际上是可以忽略的.尽管如此,这里我们仅仅计算了厚度为10nm的硅纳米板情况,自旋轨道耦合作用对于其他厚度的硅纳米板能带结构的影响可能会有所不同,因此为了得到较准确的结果,下面的所有计算中均包含了自旋轨道耦合作用.

#### 3.2 P型硅纳米板的压阻效应

基于硅纳米板能带结构模型和改进的压阻理论,下面定量分析厚度、杂质浓度和温度对p型硅纳米板压阻系数的影响.

图4显示了室温下杂质浓度为 $4.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 的硅纳米板压阻系数随厚度变化的曲线.随硅纳米板厚度减小,压阻系数基本上呈线性关系增加,说明进入到纳米尺寸后,硅的压阻特性具有量子尺寸效应.这一结果与文献[7]的计算结果相似.如图4所示,当硅纳米板的厚度从50nm减小到5nm时,压阻系数从 $425 \times 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$ 增大到 $855 \times 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$ .与体硅的压阻系数相比,5nm厚的硅纳米板的压阻系数约为体硅的3.5倍;而50nm厚的硅纳米板的压阻系数约为体硅压阻系数的1.7倍,与实验值[5]相比,该理论计算值是令人满意的.关于压阻系数随着纳米板厚度减小而增大的原因,我们认为:(1)厚度越小,量子尺寸效应越强,硅纳米板 $xy$ 平面内沿 $[110]$ 方向的能带劈裂的间距也就越大,参与运输的重空穴会越来越多,而轻空穴会越来越来少.因此

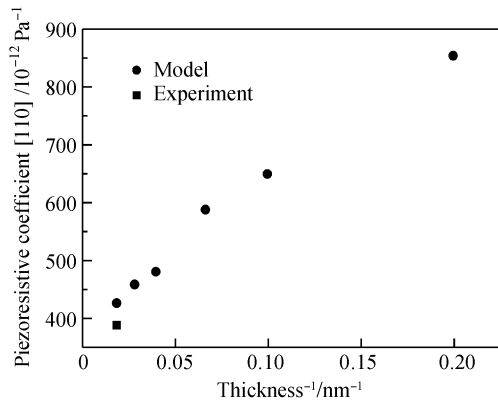


图 4 硅纳米板的压阻系数随厚度的变化

Fig.4 Variation of piezoresistive coefficient with the thickness of a silicon nanoplate. Experimental data by Toriyama et al (square) is also shown.

硅纳米板的压阻系数会越大。(2) 随着厚度的减小,硅纳米板的比表面积变得越来越大,表面效应变得越来越明显,表面处被囚禁的空穴在整个空穴浓度中的比例越来越大.这也是硅纳米板压阻系数随厚度减小而增大的另一原因.当然在我们的模型中第二种因素没有考虑.值得注意的是,第二种因素可能是文献[6]中硅纳米线产生巨压阻效应的原因.

图 5 是室温下 10nm 厚的硅纳米板压阻系数与杂质浓度的关系图.当杂质浓度小于  $10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ,其大小对压阻系数的影响不大;而高浓度注入时,压阻系数随着杂质浓度增加而明显减小.例如,杂质浓度为  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$  时的压阻系数是杂质浓度为  $10^{14} \text{ cm}^{-2}$  时压阻系数的 2.5 倍.这主要归因于载流子在重空穴带和轻空穴带的重新分布.

鉴于典型的 p 型硅传感器工作在 173~373K 的温度条件下,我们研究了此段温度范围内硅纳米板的压阻系数随温度的变化情况.如图 6 所示,在较低的杂质浓度下,硅纳米板的压阻系数与杂质浓度的依赖关系很弱,但压阻系数随温度升高而明显减小,且温度越高,减小的幅度越小,呈现了非线性的关系;在较高的杂质浓度注入情况下,压阻系数与温度的相关性很小,基本上

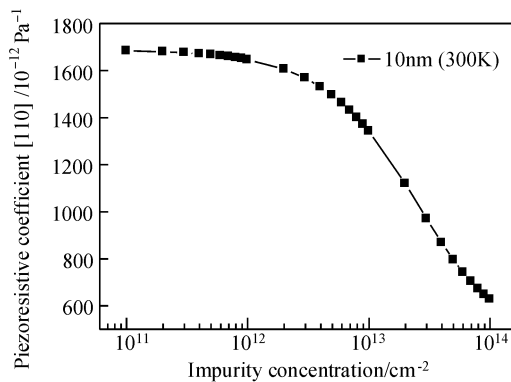


图 5 10nm 厚的硅纳米板的压阻系数随杂质浓度的变化

Fig.5 Variation in piezoresistive coefficient with the impurity concentration for 10nm-thick silicon nanoplate

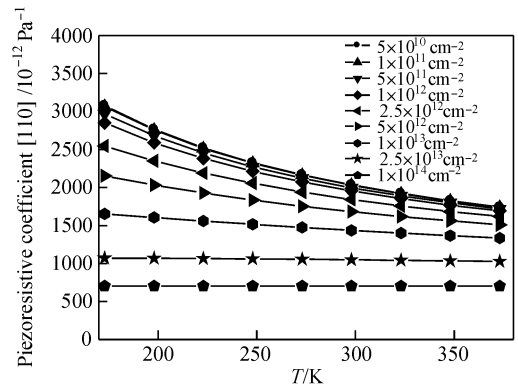


图 6 10nm 厚的硅纳米板的压阻系数随温度和杂质浓度的变化

Fig.6 Variation of piezoresistive coefficient with the temperature for a 10nm-thick silicon nanoplate

由杂质浓度的大小控制,杂质浓度越高,压阻系数越低.硅纳米板压阻系数随温度和杂质浓度的整体变化趋势与体硅的情况类似,但有两点不同之处:(1) 硅纳米板的压阻系数明显比体硅的压阻系数大.例如 10nm 厚的硅纳米板的压阻系数大约是体硅的 2.5 倍.(2) 当压阻系数变得与温度无关时,体硅需要注入的杂质浓度约为  $10^{20} \text{ cm}^{-2}$ ,而硅纳米板需要注入的杂质浓度更低.例如,10nm 厚的硅纳米板需要注入  $2.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2}$  的杂质浓度.众所周知,厚度进入到纳米尺寸前,为了能够在较大的温度范围内应用压阻传感器,应该使用高浓度的压电电阻,通过牺牲一定的灵敏度来换取较小的温度系数以获得设计上的优势.然而,通过上面的分析不难发现,控制硅纳米板压阻器的厚度可以在相对低的杂质浓度下获得较小的温度系数,同时不会牺牲压阻器的灵敏度.换句话说,采用纳米尺寸的硅压阻器将获得更高的灵敏度和更好的稳定性.

## 4 讨论

鉴于材料的压阻特性与施加应力前后空穴等能面的形状改变有关.下面利用等能面的变化定性分析硅纳米板压阻特性的起源.考虑到空穴主要占据在最低的两个子带上,图 7 给出了施加应力前后 HH1 和 LH1 子带的等能面.箭头表示在硅纳米板[110]方向上施加了  $10^8 \text{ Pa}$  的拉应力.首先,与体硅不同,由于量子尺寸效应的影响,施加应力前,LH1 带边附近具有明显的重空穴特性.这种变化会通过提高 LH1 子带上的有效传输质量来增强硅纳米板的压阻系数,这与我们上面计算的结果相吻合.其次,施加应力后,HH1 等能面形状发生了显著变化,而 LH1 等能面只有轻微变化.空穴主要分布在 HH1 子带上,对材料压阻特性贡献最大.我们通过分析 HH1 等能面的变化来分析硅纳米板的压阻特性起源.在沿[110]方向拉应力作用下,HH1 子带的  $k$  空间体积明显减少,导致等能面和布里渊区相交处的能量更高,从而增加了 HH1 子带的重空穴浓度,LH1 子带的轻空穴浓度相应减少,显然这会降低硅纳米板中的迁移率而产生压阻效应.

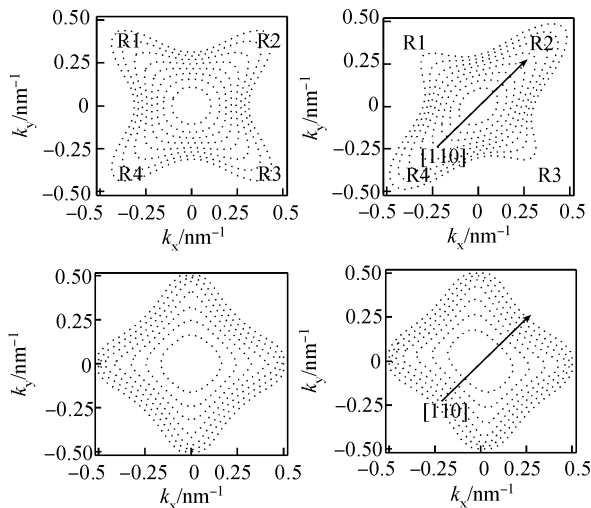


图 7 施加应力前后 HH1 和 LH1 子带的等能面

Fig. 7 Warped constant energy surfaces in-plane, for HH1 and LH1, under no stress and  $10^8$  Pa uniaxial tensile stress along [110]

## 5 结论

为了研究硅纳米板的压阻特性,基于含有应变的 6 能带  $k \cdot p$  哈密顿量,首先建立了硅纳米板的能带结构模型,然后改进得到了硅纳米板的压阻特性.通过硅纳米板能带结构的计算阐明了量子尺寸效应的重要性,同时研究了自旋轨道耦合作用和应力对硅纳米板能带结构的影响.利用施加拉应力前后二维空间等能面的变化定性分析了硅纳米板压阻特性的起源.计算结果表明,硅纳米板的压阻系数具有尺寸效应,随厚度减小而增大.在室温下,当杂质浓度为  $4.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  时,厚度为 5nm 的硅纳米板的压阻系数达到了  $2024 \times 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$ ,约为体硅的 3.5 倍.硅纳米板的压阻系数还随杂质浓度增加、温度升高而减小.尤其在高度简并的条件下,硅纳

米板的压阻系数与温度无关,完全由杂质浓度的大小控制.此外,控制硅纳米板压阻器的厚度可以在相对低的杂质浓度下获得较小的温度系数,同时不会牺牲压阻器的灵敏度.换句话说,采用硅纳米板压阻器将获得更高的灵敏度和更好的稳定性.

## 参考文献

- [1] Smith C S. Piezoresistance effect in germanium and silicon. *Phys Rev*, 1954, 94: 42
- [2] Porter T L, Eastman M P, Pace D L, et al. Sensor based on piezoresistive microcantilever technology. *Sensors and Actuators A*, 2001, 88: 47
- [3] Zhuang Zhiwei, Wang Zheyao, Liu Litian. Design and optimization of SOI piezoresistive microcantilever sensors for use in surface stress measurement. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2006, 27(10): 844 (in Chinese) [庄志伟, 王喆堯, 刘理天. 表面应力测量 SOI 压阻悬臂传感器设计与优化. *半导体学报*, 2006, 27(10): 844]
- [4] Harley J A, Kenny T W. High-sensitivity piezoresistive cantilevers under 1000Å thick. *Appl Phys Lett*, 1999, 75: 289
- [5] Toriyama T, Tanimoto Y, Sugiyama S. Single crystal silicon nanowire piezoresistors for mechanical sensors. *J Microelectromech Syst*, 2002, 11: 605
- [6] He R R, Yang P D. Giant piezoresistance effect in silicon nanowires. *Nature Nanotechnology*, 2006, 1: 42
- [7] Pramanik C, Banerjee S, Saha H, et al. Piezoresistivity of silicon quantum well wire. *Nanotechnology*, 2006, 17: 3209
- [8] Sun C T, Zhang H T. Size-dependent elastic moduli of platelike nanomaterials. *J Appl Phys*, 2003, 93: 1212
- [9] Luttinger M, Kohn W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. *Phys Rev*, 1955, 97: 869
- [10] Chao C Y, Chuang S L. Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells. *Phys Rev B*, 1992, 46: 4110
- [11] Sun Y, Thompson S E, Nishida T. Physics of strain effects in semiconductors and metal-oxide-semiconductor field-effect transistors. *J Appl Phys*, 2007, 101: 104503
- [12] Toriyama T, Sugiyama S. Analysis of piezoresistance in p-type silicon for mechanical sensors. *J Microelectromech Syst*, 2002, 11: 598

## A Theoretical Study of the Piezoresistivity of a p-Type Silicon Nanoplate\*

Zhang Jiahong, Huang Qing'an<sup>†</sup>, Yu Hong, and Lei Shuangying

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

**Abstract:** Based on the  $6 \times 6$  Luttinger-Kohn Hamiltonian, including strain, and taking into account of the quantum-size effect and spin-orbit coupling, a band structure model for p-type silicon nanoplate piezoresistors is established using the finite difference method. The effect of thickness, impurity concentration, and temperature on the piezoresistive coefficient of the silicon nanoplate was quantitatively investigated based on its dependence on the band structure. The results indicate that the effect of the quantum confinement of holes, which dramatically alters the band structure, enhances the piezoresistive coefficient of the p-type silicon nanoplate piezoresistors. The spin-orbit coupling, which changes the band-edge energies, plays a significant role in the high strained silicon nanoplates. The size-dependent piezoresistive coefficient of the p-type silicon nanoplate piezoresistors increases as the thickness decreases. The piezoresistive coefficient was also observed to decrease with increased impurity concentration and temperature. In the extreme degenerate range, the piezoresistive coefficient is controlled only by the impurity concentration and becomes temperature-independent. In the non-degenerate range, the opposite phenomenon occurs. Furthermore, according to the form change of constant energy surfaces for heavy and light holes in the presence of stress, we qualitatively analyze the origin of the longitudinal piezoresistive effect in the silicon nanoplate.

**Key words:** silicon; band structure; piezoresistive; quantum size-effect; spin-orbit coupling

**PACC:** 7220F; 7320D; 7320A

**Article ID:** 0253-4177(2008)05-0970-05

\* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (No. 2006CB300404) and the National High Technology Research and Development Plan of China (No. 2007AA64Z301)

<sup>†</sup> Corresponding author. Email: hqa@seu.edu.cn

Received 30 September 2007