

ВИГНЕРОВСКАЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ, ЛОКАЛИЗОВАННЫХ НА ГЛУБОКИХ ЛОВУШКАХ В ДВУМЕРНОМ ДИЭЛЕКТРИКЕ

*С. С. Шаймеев**, *В. А. Гриценко*

*Институт физики полупроводников
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 8 июля 2010 г.

С использованием двумерной модели изучалось пространственное распределение электронов, локализованных на глубоких ловушках в двумерном диэлектрике. При концентрации ловушек, существенно превышающей концентрацию локализованных электронов, последние за счет кулоновского отталкивания образуют двумерную квазипериодическую гексагональную решетку (вигнеровское стекло).

Кулоновское отталкивание свободных электронов приводит к их пространственному упорядочиванию, вигнеровской кристаллизации. Вигнеровская кристаллизация свободных электронов наблюдалась на поверхности жидкого гелия [1]. В работах [2–4] была высказана гипотеза о возможности вигнеровской кристаллизации электронов и дырок, локализованных в диэлектрике с высокой концентрацией нейтральных ловушек. Вигнеровская кристаллизация локализованных носителей, как предполагается, осуществляется, как и в оригинальной модели Вигнера, за счет кулоновского отталкивания. В работе [2] предполагалось, что дырки, локализованные в нитриде кремния, образуют квадратную квазипериодическую решетку.

Модельным диэлектриком для исследования эффекта вигнеровской кристаллизации электронов и (или) дырок, локализованных на ловушках, является аморфный нитрид кремния. Нитрид кремния обладает эффектом памяти, способностью локализовать электроны и дырки на ловушках с гигантским временем удержания в локализованном состоянии, около 10 лет, при $T = 450$ К [5]. Практический интерес к исследованиям локализации электронов и дырок в аморфном нитриде кремния связан с разработкой терабитной флэш-памяти на нитриде кремния [6]. В этом соединении имеются глубокие (около 1.5 эВ) электронные и дырочные ловушки. Согласно данным по переносу заряда в Si_3N_4 кон-

центрация нейтральных ловушек в нем составляет величину ($N_t \sim 10^{19}\text{--}10^{20}$ см⁻³) [7–11], в то время как концентрация заполненных ловушек существенно меньшую величину, $n_t \sim (2\text{--}6) \cdot 10^{18}$ см⁻³ [12, 13]. В работе [14] наблюдалось растекание электронов в нитриде кремния в собственном электрическом поле за счет кулоновского отталкивания.

Целью настоящей работы является изучение (методами численного моделирования) эффекта вигнеровской кристаллизации электронов в диэлектрике с глубокими ловушками на основе двумерной модели.

Рассматривается модель двумерного диэлектрика с поверхностной концентрацией N_s нейтральных случайно разбросанных ловушек. Таким образом, аморфная неупорядоченная структура реального диэлектрика моделировалась путем случайного пространственного распределения ловушек. В таком диэлектрике часть ловушек случайно заполнялась электронами с поверхностной концентрацией n_s . Захваченный электрон имеет возможность покинуть ловушку с некоторой вероятностью P за счет термической ионизации. Каждый свободный i электрон перемещается по плоскости с дрейфовой скоростью $V_i = \mu F_i$, обусловленной величиной и направлением электрического поля F_i , созданного другими электронами как свободными, так и связанными (μ — подвижность электрона). Если электрон проходит мимо нейтральной ловушки на расстоянии менее некоторого l_s , то он захватывается в ловушку.

Поскольку при численном моделировании можно использовать только конечное количество лову-

*E-mail: shaimееv@isp.nsc.ru

шек, важным пунктом моделирования является выбор граничных условий. При решении поставленной задачи предполагалось, что исследуемая система имеет форму квадрата со стороной L , а для исключения искажений значений электрических полей вблизи границ квадрата — граничные условия зацикливались, т. е. с формальной точки зрения расчеты проводились на бесконечной плоскости с множеством идентичных квадратов.

На выбранный квадрат случайным образом размещались ловушки со слоевой концентрацией N_s . Далее на этот же квадрат размещались n электронов. Проводился расчет величины электрического поля в точках размещения электронов. Выражение для поля в месте расположения i электрона имеет вид

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j \neq i}^{n_e} \frac{e(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{3/2}} + \mathbf{F}_l + \mathbf{F}_k, \quad (1)$$

где первый член определяет поле, создаваемое всеми электронами в центральном квадрате, \mathbf{r}_i , \mathbf{r}_j — радиус-векторы, x_i , x_j , y_i , y_j — значения координат по осям ординаты и абсцисс для i и j электронов (отсчет координат ведется от центра квадрата), \mathbf{F}_l , \mathbf{F}_k — поля, создаваемые пограничными квадратами по осям ординат и абсцисс, \mathbf{l} , \mathbf{k} — соответствующие единичные векторы:

$$\mathbf{F}_l = \sum_{j=1}^{n_e} \frac{e(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + (L - 2x_j)\mathbf{l}}{[(x_i - L + x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{3/2}} + \sum_{j=1}^{n_e} \frac{e(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + (L + 2x_j)\mathbf{l}}{[(x_i + L + x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{3/2}}, \quad (2)$$

$$\mathbf{F}_k = \sum_{j=1}^{n_e} \frac{e(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + (L - 2y_j)\mathbf{k}}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - L + y_j)^2]^{3/2}} + \sum_{j=1}^{n_e} \frac{e(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + (L + 2y_j)\mathbf{k}}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i + L + y_j)^2]^{3/2}}. \quad (3)$$

Далее выполнялись следующие процедуры:

- 1) для каждого электрона рассчитывалось поле по формуле (1);
- 2) для каждого электрона рассчитывалась дрейфовая скорость, равная $V_i = \mu F_i$;
- 3) для каждого электрона рассчитывалось элементарное перемещение, равное $\Delta \mathbf{h} = \mathbf{V}_i \Delta t$. Величина Δt выбиралась такой, чтобы выполнялось условие $|\Delta \mathbf{h}| \approx l_s/2$ при максимальном F_i ;
- 4) пересчитывались новые значения координат для электронов и вычислялось расстояние

до ближайшей ловушки. Если оказывалось, что $((x_i - x_g)^2 + (y_i - y_g)^2)^{1/2} < l_s$, то i -й электрон считался захваченным, а g -я ловушка заряжена.

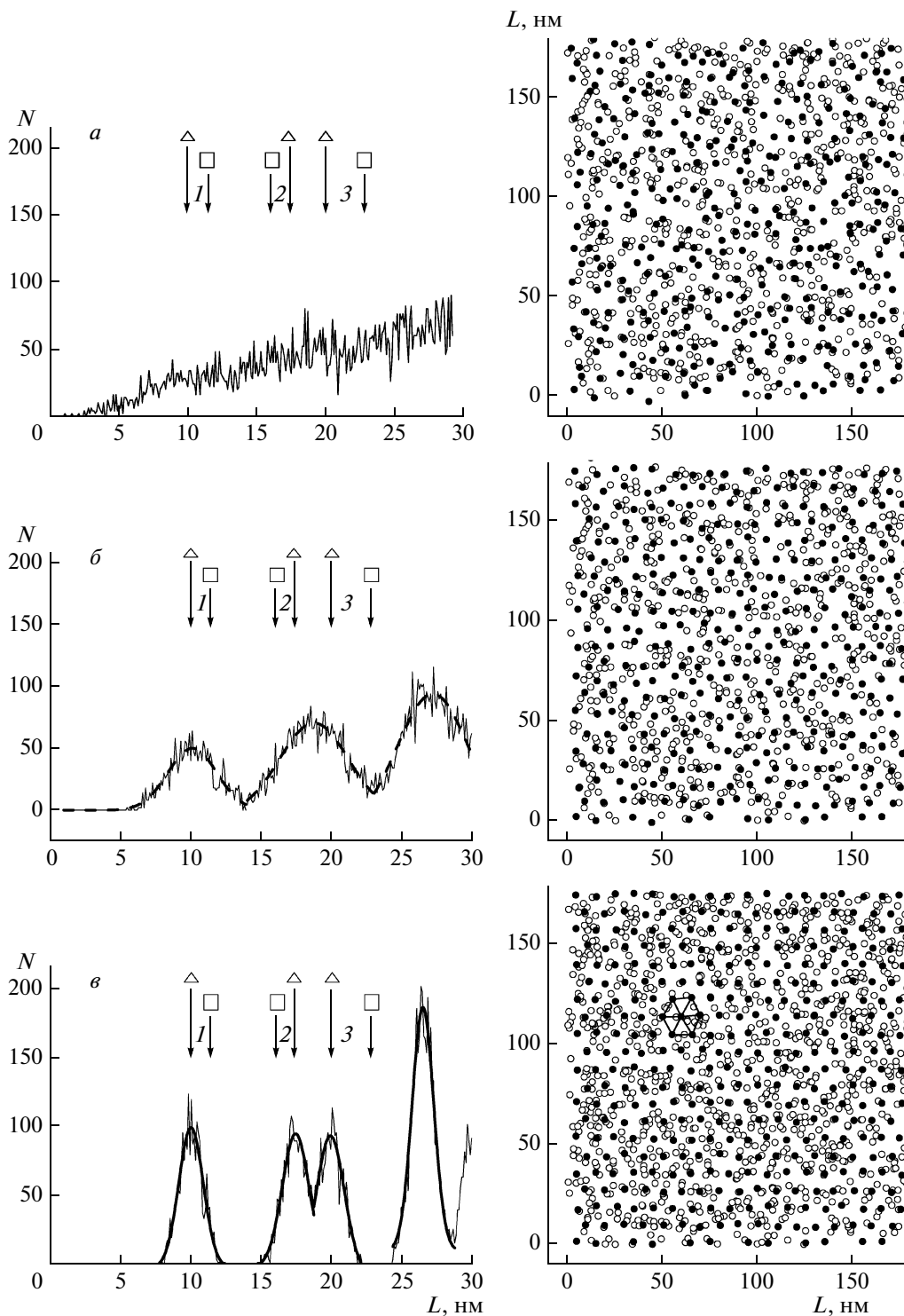
Все процедуры повторялись, пока все электроны не оказывались захваченными и, как следствие, $n_s = n$ ловушек оказались заряженными. После окончания процедуры зарядки ловушек проводился подсчет количества заряженных ловушек $n_s(r)$ от расстояния r между каждой парой ловушек.

Результаты расчетов приведены на рисунке (параметры P и μ считались безразмерными и принимался равным соответственно 0.01 и $\mu = 1$). Из полученных данных следует, что когда концентрация ловушек N_s сравнима с концентрацией вброшенных электронов и захваченных на ловушках n_s , то зависимость $n_s(r)$ не имеет каких-либо особенностей и соответствует случайному распределению ловушек (см. рис. а, при $n_s/N_s = 0.5$). При соотношении $n_s/N_s = 0.01$ хорошо просматривается определенная структура, причем максимумы зависимости $n_s(r)$ расположены вблизи расстояний между заряженными ловушками, характерными для трехкратной координированной сетки (см. рис. б). При дальнейшем уменьшении отношения $n_s/N_s = 0.001$ пики сужаются, а структура прорисовывается более отчетливо (рис. в). Таким образом, в плоскости, случайно заполненной нейтральными ловушками, заряженные ловушки образуют двумерный кристалл (точнее говоря, стекло) с гексагональной решеткой. В качестве критерия существования стекла можно принять условие: полуширина пика Δr_1 первой координационной окружности меньше половины расстояния $r_2 - r_1$ между первой и второй сферами, т. е.

$$\Delta r_1 < r_2 - r_1. \quad (4)$$

Таким образом, показано, что при определенном соотношении n_s/N_s в плоскости, заполненной нейтральными ловушками, распределенными случайным образом, может формироваться упорядоченная гексагональная решетка из заряженных ловушек. Ранее аналогичные результаты были получены для двумерного газа свободных электронов [1].

Естественно встает вопрос о применимости изложенной выше модели к реальным системам, в частности, как скажется эффект квантования электронных состояний на нейтральных ловушках. Как известно [3], объемная концентрация нейтральных ловушек не превышает величину 10^{21} см^{-3} . Следовательно, слоевая концентрация не превышает величину 10^{14} см^{-2} . Как показано в данной работе, эффект кристаллизации возникает при



Радиальное распределение заполненных ловушек (слева) при различных соотношениях n_s/N_s : $a - n_s/N_s = 0.5$, $b - n_s/N_s = 0.01$, $c - n_s/N_s = 0.001$. Штриховые линии — аппроксимация распределения с помощью функции Гаусса. Справа приведены расчетные картиннки распределения свободных (\circ) и заполненных (\bullet) ловушек. Значками Δ и \square показаны положения 1, 2 и 3 координационных сфер для треугольной и квадратной решеток

отношении $n_s/N_s < 0.01$. Таким образом, слоевая концентрация заряженных ловушек не превышает величину 10^{12} см^{-2} , т. е. среднее расстояние между электронами не будет превышать величину 10^{-6} см . Очевидно, на таких расстояниях эффект квантования будет сказываться слабо.

Работа выполнена при финансовой поддержке СО РАН в рамках интеграционного проекта № 70.

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Ando, A. Fowler, and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, N2 (1982).
2. В. А. Гриценко, Письма в ЖЭТФ **64**, 483 (1996).
3. В. А. Гриценко, А. Д. Милов, Письма в ЖЭТФ **64**, 489 (1996).
4. A. I. Shames, V. A. Gritsenko, R. I. Samoiloa et al., *Sol. St. Commun.* **118**, 129 (2001).
5. V. A. Gritsenko, in: *Silicon Nitride in Electronics*, Elsevier, New York (1988).
6. S.-C. Lia, H.-T. Lue, J.-Y. Hsuen et al., *IEEE Electron Dev. Lett.* **28**, 643 (2007).
7. К. А. Насыров, Ю. Н. Новиков, В. А. Гриценко, С. Ю. Юн, Ч. В. Ким, Письма в ЖЭТФ **77**, 455 (2003).
8. K. A. Nasyrov, V. A. Gritsenko, Yu. N. Novikov et al., *J. Appl. Phys.* **96**, 4293 (2004).
9. К. А. Насыров, С. С. Шаймеев, В. А. Гриценко и др., ЖЭТФ **102**, 810 (2006).
10. K. A. Nasyrov, S. S. Shaimeev, V. A. Gritsenko, and J. H. Han, *J. Appl. Phys.* **105**, 123709 (2009).
11. A. V. Vishnyakov, Yu. N. Novikov, V. A. Gritsenko, and K. A. Nasyrov, *Sol. St. Electr.* **53**, 251 (2009).
12. P. C. Arnett and B. Yun, *J. Appl. Phys. Lett.* **27**, 256 (1975).
13. H. Maes and R. Van Overstraeten, *J. Appl. Phys.* **47**, 667 (1976).
14. D. Fuks, A. Kiv, T. Maximova et al., *J. Computer-Aided Mater. Design* **9**, 21 (2002).