

## 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  $\text{Si}_3\text{N}_4$  концентра-

ция нейтральных ловушек в нем составляет величину  $N_t \sim (10^{19} - 10^{20}) \text{ см}^{-3}$  [7–11], в то время как концентрация заполненных ловушек — существенно меньшую величину,  $n_t \sim (2 - 6) \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  [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  $i$ -й 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 ( $\mu$  — 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 ловушек,

\*E-mail: shaimееv@isp.nsc.ru

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  $i$ -го 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 ординат и абсцисс для  $i$ -го и  $j$ -го 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  $\Delta t$  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 — заряженной.

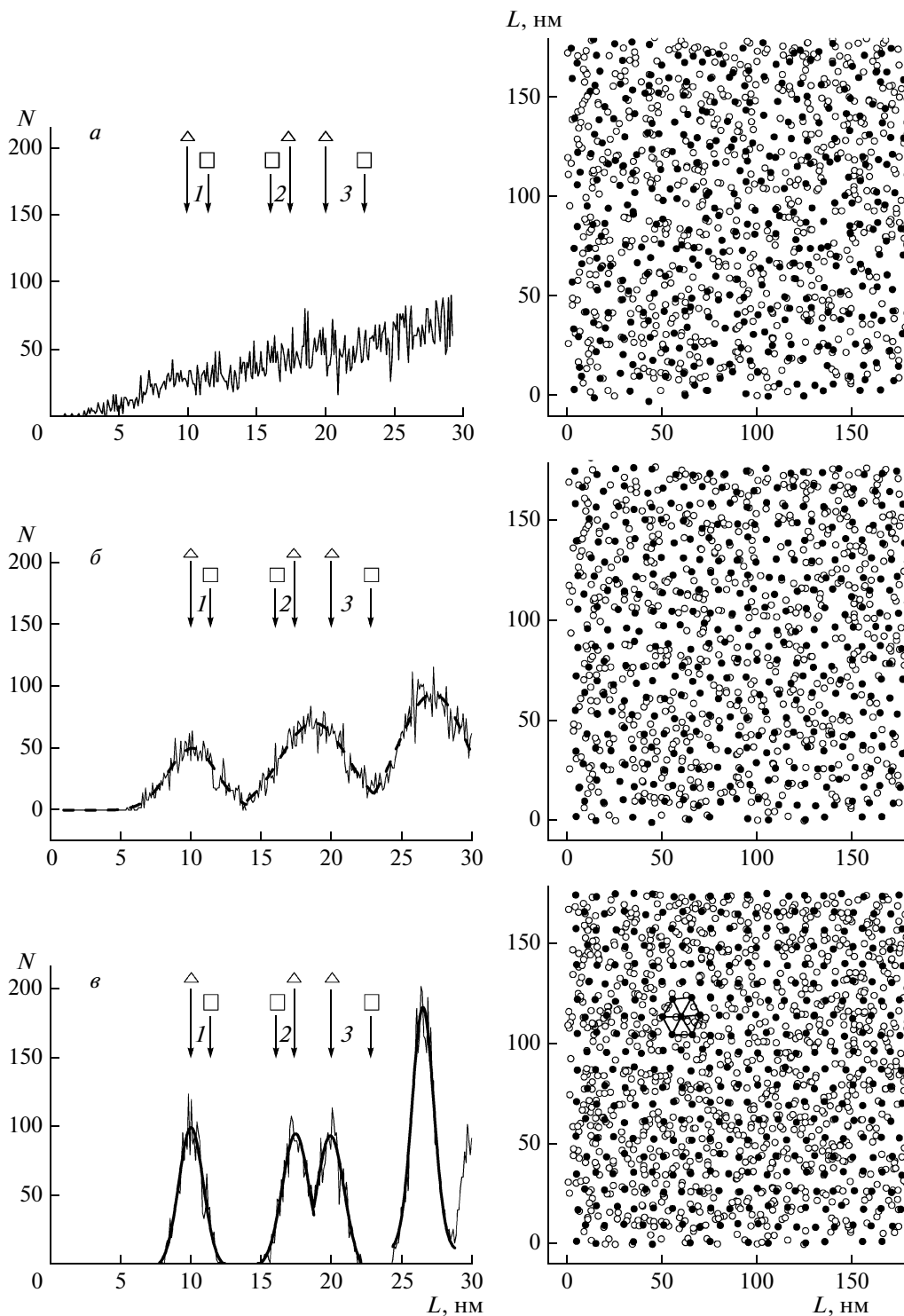
Все процедуры повторялись, пока все электроны не оказывались захваченными и, как следствие,  $n_s = n$  ловушек оказывались заряженными. После окончания процедуры зарядки ловушек проводился подсчет количества заряженных ловушек  $n_s(r)$  в зависимости от расстояния  $r$  между каждой парой ловушек.

Результаты расчетов приведены на рисунке (параметры  $P$  и  $\mu$  считались безразмерными и принимались равным соответственно 0.01 и 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, характерных 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 следующее условие: полуширина пика  $\Delta r_1$  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  $10^{21} \text{ см}^{-3}$ . Следовательно, слоевая концентрация не превышает величину  $10^{14} \text{ см}^{-2}$ . Как показано в данной работе, эффект кристаллизации возникает при



Радиальное распределение заполненных ловушек (слева) при различных соотношениях  $n_s/N_s$ : *a* —  $n_s/N_s = 0.5$ , *б* —  $n_s/N_s = 0.01$ , *в* —  $n_s/N_s = 0.001$ . Штриховые линии — аппроксимация распределения с помощью функции Гаусса. Справа приведены расчетные картиннки распределения свободных ( $\circ$ ) и заполненных ( $\bullet$ ) ловушек. Значками  $\Delta$  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  $10^{12} \text{ см}^{-2}$ , т. е. среднее расстояние между электронами не будет превышать величину  $10^{-6} \text{ см}$ . 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**, 437 (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. Samoilova et al., *Sol. St. Comm.* **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. Electron.* **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).