

ВИГНЕРОВСКАЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ И РЕЗОНАНСНЫЙ МЕХАНИЗМ ОБМЕНА ЭЛЕКТРОНОВ, ЛОКАЛИЗОВАННЫХ В АМОРФНОМ ДИЭЛЕКТРИКЕ С ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ЛОВУШЕК

В.А.Гриценко

*Институт физики полупроводников Сибирского отделения РАН
630090 Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 9 сентября 1996 г.

Обсуждается возможность вигнеровской кристаллизации электронов в аморфном диэлектрике с высокой плотностью ловушек. Предлагается новый механизм обменного взаимодействия, основанный на резонансном туннелировании электронов между незаполненными локализованными электронными состояниями.

PACS: 71.23.-k, 71.30.+h, 71.45.Gm

Система взаимодействующих электронов может выстраиваться в регулярную вигнеровскую решетку, если потенциальная энергия превышает кинетическую [1]. Анализировалась возможность вигнеровской кристаллизации электронов над поверхностью жидкого гелия [2], в инверсионном канале полупроводника [3]. В настоящей работе рассматривается принципиально иная ситуация – кристаллизация электронов на глубоких ловушках в диэлектрике. В случае, когда концентрация ловушек N велика, так, что среднее расстояние между ними $N^{-1/3}$ меньше эффективного радиуса захвата $(\sigma/\pi)^{1/2}$ (σ – сечение захвата) электроны захватываются только на часть ловушек n_t , образуя квазипериодическую решетку. Период такой решетки имеет масштаб порядка характерного радиуса кулоновского отталкивания. Если, кроме того, ловушки имеют одинаковую энергию E , может произойти фазовый переход – антиферромагнитное упорядочивание за счет резонансного обменного взаимодействия.

1. Вигнеровская кристаллизация. Рассмотрим широкозонный диэлектрик, такой, что в нем отсутствуют собственные или примесные подвижные носители заряда. В диэлектрике имеются глубокие нейтральные незаполненные ловушки с большой концентрацией N . Рассмотрим цепочку ловушек, расположенных на среднем расстоянии $a = N^{-1/3}$ (рис.1а). Ловушки могут иметь разную энергию делокализации E . Расстояние между ловушками может быть тоже разным. Рассмотрим захват электронов, инжектированных из контакта в диэлектрик. При захвате электрона на ловушку A на второй (пробный) электрон на расстоянии R действует отталкивающий потенциал $e^2/4\pi\epsilon\epsilon_0 R$ (ϵ – диэлектрическая проницаемость¹). Второй электрон с кинетической энергией E_{ph} может подойти к заряженной ловушке A на расстояние $2R_q$, задаваемое соотношением

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 R_q} = E_{ph}. \quad (1)$$

¹) В качестве ϵ в полярном диэлектрике следует использовать полярную диэлектрическую проницаемость $\epsilon_p^{-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon^{-1}$.

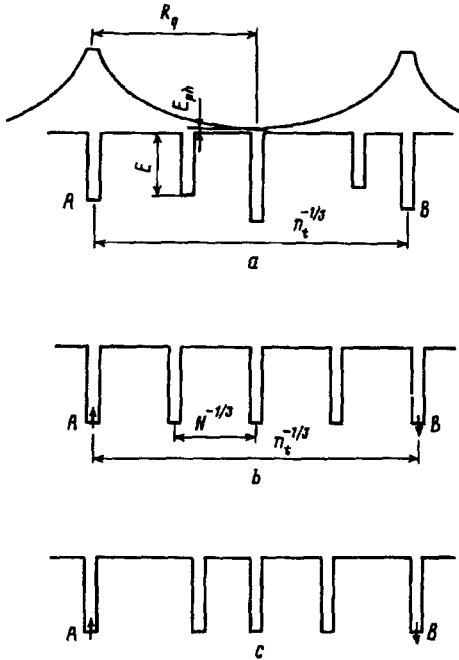


Рис.1. Потенциальная диаграмма, иллюстрирующая образование квазипериодической электронной решетки за счет кулоновского отталкивания (а) и антиферромагнитное упорядочение в периодической решетке за счет резонансного обменного взаимодействия (б). Непериодическая решетка (с)

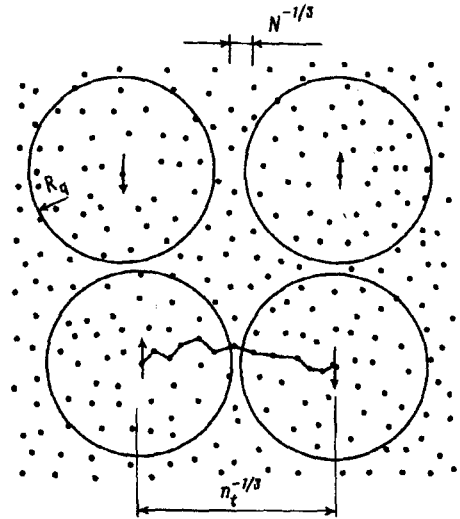


Рис.2. Двумерная схема образования квазипериодической решетки за счет кулоновского отталкивания электронов, локализованных на ловушках, и антиферромагнитное спаривание электронов за счет резонансного обменного взаимодействия. Для нижней пары электронов указана траектория туннельного обмена

Отсюда определяем концентрацию n_t заполненных ловушек $n_t = (2R_q)^{-3}$:

$$n_t = \frac{(4\pi\epsilon\epsilon_0 E_{ph})^3}{e^6}. \quad (2)$$

На рис.2 представлена схема образования двумерной квадратной решетки с периодом $2R_q$. В нашей модели такая решетка образуется твердыми шарами с радиусом R_q . Между шарами может быть зазор величиной $N^{-1/3}$. Эта величина задает характерный масштаб разброса периода решетки.

Плавление вигнеровского кристалла происходит при $\Gamma = r_0/a_B^* \gg 1$, здесь $a_B^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon\hbar^2/m^*e^2$ – эффективный боровский радиус [2]. Для нашего модельного кристалла фазовый переход произойдет, когда энергия кулоновского взаимодействия превысит энергию связи E электрона в ловушке: $e^2 n_t^{1/3} / 4\pi\epsilon_0 \gg E$. Другой очевидный критерий имеет вид $E \gg kT$. Это означает, что вероятность ионизации ловушек мала.

Универсальным параметром модели является характерный радиус кулоновского отталкивания R_q . В нашей модели его величина превышает расстояние между ловушками: $R_q > N^{-1/3}$. Сечение захвата σ определяется не индивидуальными свойствами ловушки, механизм потери энергии, а квадратом

величины R_q :

$$\sigma = \pi R_q^2 = \frac{\pi e^4}{(4\pi\epsilon\epsilon_0 E_{ph})^2}. \quad (3)$$

Таким образом, в нашей модели концентрация заполненных ловушек и сечение захвата связаны соотношением

$$n_i^{-1/3} / 2 = (\sigma/\pi)^{1/2} = R_q. \quad (4)$$

Величина E_q в нашей модели имеет смысл длины свободного пробега по захвату: $R_q \simeq (n_i \sigma)^{-1}$. Вероятность w захвата для электрона в слое толщиной R_q составляет $w = n_i^{2/3} \sigma = \pi$. Рассматриваемый модельный диэлектрик обладает свойствами локализовать все инжектированные в него электроны до тех пор, пока не начнется ионизация ловушек в поле собственного пространственного заряда.

В рассматриваемой модели характерное расстояние R_q между локализованными электронами определяется диэлектрической постоянной и энергией фонона. В нашей квазипериодической решетке период задается так же, как и в периодической решетке Вигнера радиусом кулоновского отталкивания. Особенностью нашей решетки является то, что электроны локализованы на глубоких состояниях. Поскольку ловушки в диэлектрике распределены хаотически, наша решетка является квазипериодической. Отметим, что в рамках простой рассматриваемой модели возможно образование одно-, двух- и трехмерного вигнеровского кристалла. Критерием кристаллизации в нашей модели служит выполнение соотношения (4).

В случае, когда все ловушки в диэлектрике имеют одинаковую энергию E и расположены на одинаковом расстоянии a , имеет место другое физическое явление – антиферромагнитное спаривание локализованных спинов.

2. Антиферромагнитное упорядочение локализованных электронов, обусловленное резонансным обменным взаимодействием. Рассмотрим магнитные свойства электронов в периодической сверхрешетке, образованной ловушками (рис.1б). Обменный интеграл J для электронов 1 и 2 на узлах A и B имеет вид [4].

$$J = \int \int \psi_A(1) \psi_B(2) \frac{e^2}{(r_1 - r_2)} \psi_B(1) \psi_A(2) dr_1 dr_2; \quad (5)$$

здесь r_1 и r_2 отсчитываются соответственно от узлов A и B . Для вычисления обменного интеграла необходимо найти собственные функции для электрона в решетке. Для иллюстрации предлагаемого механизма обменного взаимодействия на будем решать точную задачу о стационарном распределении спиновой плотности в сверхрешетке. Ограничимся рассмотрением ВКБ-приближения. Вероятность P найти электрон 1 ямы A на расстоянии R составляет

$$P = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} R \sqrt{2m^* E}\right); \quad (6)$$

здесь m^* – эффективная масса электрона. Для нашей модели (рис.1б) величина E соответствует энергии основного состояния в яме. Энергия прямого обменного взаимодействия электронов на узлах A и B составляет величину $q^2 P n_i^{1/3} / 4\pi\epsilon\epsilon_0$.

Антиферромагнитное упорядочение произойдет в случае, если энергия обменного взаимодействия превысит энергию зеемановского расщепления уровня локализованного электрона:

$$(e^2 n_t^{1/3} / 4\pi\epsilon\epsilon_0) \exp(-2n_t^{-1/3} / \hbar\sqrt{2m^*E}) > g\mu H; \quad (7)$$

здесь μ – магнетон Бора, H – напряженность магнитного поля. Типичная величина зеемановского расщепления для электронов, локализованных в твердом теле, составляет $g\mu H \simeq 6 \cdot 10^{-5}$ эВ. Для $n_t = 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $\epsilon = 10$ и $E = 1$ эВ получаем вероятность туннелирования $P = 10^{-27}$ и энергию обменного взаимодействия 10^{-29} эВ (для $m^* = 0.4m_e$).

Таким образом, энергия прямого обменного взаимодействия электронов на ловушках мала для переворота спина. Наличие сверхрешетки в рассматриваемой модели приводит к делокализации спиновой плотности. Оценим величину обменного взаимодействия между электроном на узле A и соседней незаполненной ямой. Подставляя в (6) величину $R = N^{-1/3} = 10^{-7}$ см, для вероятности туннелирования получаем $p \simeq 10^{-3}$. Энергия обменного взаимодействия составляет величину $\simeq 10^{-4}$ эВ. Это значение превышает энергию магнитного расщепления. Приведенная оценка показывает, что обменное взаимодействие между электронами, локализованными на ловушках, при наличии незаполненных ловушек с высокой плотностью может приводить к магнитному упорядочению спиновой подсистемы.

В рамках обсуждаемой модели возникает вопрос о том, осуществляется ли полная делокализация электронов на узлах A и B при образовании сверхрешетки. Анализ показывает, что энергия кулоновского взаимодействия электронов, локализованных на узлах A и B , и соответствующая энергия делокализованных электронов равны.

Мы рассмотрели периодическую сверхрешетку. Обменное взаимодействие может иметь место также в случае, когда ловушки распределены неперiodически в пространстве, но имеют одинаковую энергию E (рис.1с). В этом случае вероятность туннелирования электрона из ямы A в яму B не есть произведение вероятностей туннелирования через отдельные барьеры. В случае сильно отличающихся прозрачностей барьеров полная вероятность туннелирования определяется туннелированием между парой самых удаленных ловушек (им соответствует самый широкий барьер). Отметим, что для обменного взаимодействия между парой ловушек электрон может выбирать цепочку ловушек с минимальной шириной барьера (рис.2). В этом случае возникает задача протекания. Как следует из рис.2, более реальной ситуацией является попарное спаривание спинов на соседних заполненных ловушках.

Объектом для обнаружения эффекта вигнеровской кристаллизации и антиферромагнитного упорядочения электронов могут служить аморфные диэлектрики, используемые в МДП(металл – диэлектрик – полупроводник)-структурах (6). В широкозонных аморфных диэлектриках концентрация равновесных собственных и примесных носителей пренебрежимо мала. Поэтому в отличие от легированных полупроводников заряд не может экранироваться свободными подвижными носителями заряда (7). Экранирование электронов и дырок, локализованных на ловушках в диэлектрике МДП-структур осуществляется подвижными носителями полупроводника и металла.

Реальная ситуация для наблюдения вышеуказанных эффектов является более сложной. На рис.3 представлена энергетическая диаграмма МДП-

структуры в режиме плоских зон (а), при приложении поля, стимулирующего инжекцию носителей из полупроводника в диэлектрик (b) и в закороченном состоянии (с). Инжекция носителей в диэлектрик может осуществляться туннельным механизмом, фотоэмиссией, за счет разогрева в обедненном слое полупроводника МДП-структуры [7]. Накопление заряда на ловушках приводит к образованию пространственного заряда $en_t(Z)$, возникновению электрического поля $e \int_0^z n_t(Z) dZ / \epsilon \epsilon_0$ в направлении, нормальном к плоскости МДП-структуры.

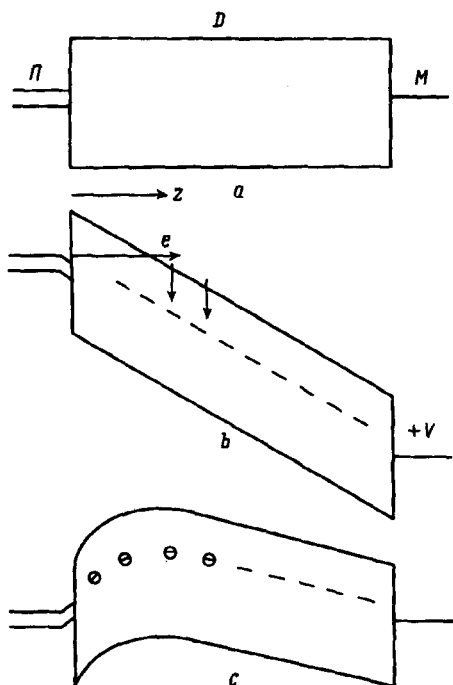


Рис.3. Энергетическая диаграмма МДП-структуры: а - режим плоских зон, b - инжекция электронов из полупроводника и захват на ловушках в диэлектрике, с - закороченное состояние

Вигнеровская кристаллизация в диэлектрике МДП-структуры может соответствовать трехмерному случаю. Антиферромагнитное упорядочение спинов может происходить только в плоскости, параллельной плоскости полупроводника. В направлении нормальном к поверхности ловушки смещается по энергии за счет электрического поля на величину $\Delta\psi = en_t^{-1/3} \int_0^z n_t(Z) dZ / \epsilon \epsilon_0$. Для типичного поля собственного пространственного заряда в диэлектрике $e \int_0^z n_t(Z) dZ / \epsilon \epsilon_0 \simeq 10^6$ В/см и $n_t = 10^{18}$ см⁻³ смещение соседних ловушек в направлении z составляет $\Delta\phi = 1.2$ эВ. Это смещение препятствует туннельному обмену в направлении, нормальном к поверхности. В направлении, параллельном плоскости полупроводника, электрического поля нет из-за экранировки локализованных зарядов полупроводником и металлом.

Критерием резонансного обменного взаимодействия может служить отсутствие ЭПР в системе с локализованными электронами.

В настоящее время известно несколько механизмов обменного взаимодействия. Прямой гейзенберговский механизм обмена объясняет ферромагнитные свойства. Андерсоновский механизм сверхобмена между d -электронами через p -состояния кислорода объясняет ферромагнитные свойства окислов. Непрямое обменное взаимодействие Рудермана – Киттеля описывает взаимодействие между локализованными спинами ионов решетки через электроны проводимости металла [4].

Резонансный механизм обмена, предлагаемый в настоящей работе, может объяснить антиферромагнитное упорядочение, отсутствие ЭПР в материалах с высокой плотностью локализованных состояний.

Приведенное рассмотрение проведено для случая электронов, локализованных в диэлектрике. Эксперимент свидетельствует о том, что аморфные диэлектрики могут локализовать как электроны, так и дырки [8]. Все результаты, полученные в настоящей работе, применимы также для дырок, локализованных в диэлектрике.

Автор благодарит Ю.Н.Морокова, В.И.Белиничера, А.В.Чаплика, М.В.Энтина за полезные обсуждения.

-
1. E.Wigner, *Phys. Rev.* **46**, 1002 (1934).
 2. T.Ando, A.Fowler, and F.Stern, *Electronic Properties of two-dimensional systems, Reviews of Modern Physics* **54**, N2, April 1982.
 3. А.В.Чаплик, *ЖЭТФ* **62**, 746 (1972).
 4. А.О.Е.Animalu, *Intermediate Quantum theory of Crystalline Solids*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1977.
 5. В.А.Гриценко, *Строение и электронная структура аморфных диэлектриков в кремниевых МДП структурах*, Новосибирск, Наука, 1993.
 6. Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос, *Электронные свойства легированных полупроводников*, М.: Наука, 1979.
 7. В.А.Гриценко, С.П.Синица, в кн.: *Свойства структур металл-диэлектрик-полупроводник*, М.: Наука, 1976.
 8. V.A.Gritsenko, *Silicon Nitride in Electronics*, Material Science Monograph, **34**, Elsevier, North Holland, 1988.