

[6] Агекян В. Ф., Васильев Н. Н., Малов А. В., Степанов Ю. А. ЖПС, 1984, т. 12, № 3, с. 429—434.

[7] Majumder F. A., Shevel S. G., Lyssenko V. G., Swoboda H. E., Klingshirn C. Z. Physik B, 1987, vol. 66, N 5, p. 409—418.

Институт физики АН УССР  
Киев

Поступило в Редакцию  
30 июня 1987 г.  
В окончательной редакции  
26 октября 1987 г.

УДК 539.89

Физика твердого тела, том 30, в. 4, 1988

Solid State Physics, vol. 30, № 4, 1988

## ИЕРАРХИЯ ДАВЛЕНИЙ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ДИЭЛЕКТРИК—МЕТАЛЛ ЛЕГКИХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Ю. В. Петров

В [1] предсказано аномально высокое давление фазового перехода диэлектрик—металл у кристаллического неона. Ранее предполагалось, что из всех кристаллов инертных газов наибольшее давление такого перехода должен иметь гелий, что вполне соответствует его положению в Периодической системе химических элементов. Так как результат [1]

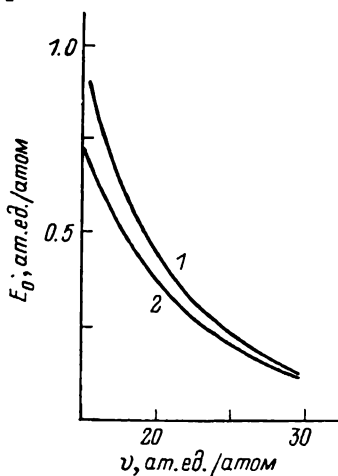


Рис. 1. Энергия твердого неона в зависимости от удельного объема.

1 — в парном приближении, 2 — в трехчастичном приближении.

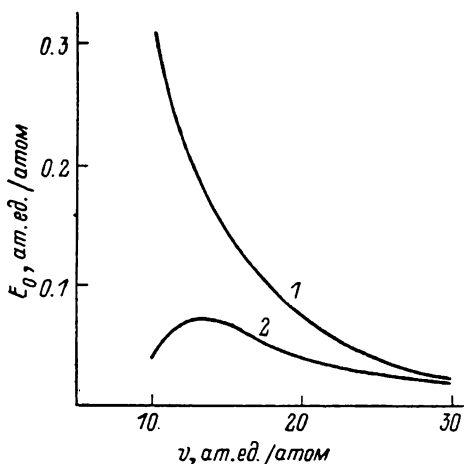


Рис. 2. Зависимость энергии твердого гелия от удельного объема.

1 — в приближении парных взаимодействий, 2 — с учетом трехчастичных взаимодействий.

является в значительной мере неожиданным, мы провели альтернативные вычисления с целью установить иерархию давлений металлизации неона и гелия, а также исследовавшегося нами ранее молекулярного водорода.

Низкотемпературные расчеты термодинамических функций молекулярных кристаллов водорода [2] и неона [3], основанные на кластерном разложении энергии с учетом кластеров, состоящих из трех молекул, показывают существенное качественное различие в поведении кривых зависимости статической энергии  $E_0$  от удельного объема  $v$  в рассматриваемом диапазоне удельного объема. Рассмотренные значения  $v$  для молекулярного кристалла водорода охватывают и область значительного вклада неаддитивных трехчастичных взаимодействий, доходя до области аномального поведения кривой трехчастичного приближения  $E_0(v)$  [2].

Это соответствует давлению  $\approx 1$  Мбар. В то же время для твердого неона в том же диапазоне значений удельного объема трехчастичный вклад в статическую энергию решетки остается еще малым вплоть до самых малых значений  $v \approx 15$  ат. ед./атом, составляя  $\approx 15\%$  от энергии, обусловленной парными взаимодействиями молекул (рис. 1). Давление, соответствующее таким значениям удельного объема, составляет  $\approx 30$  Мбар. При этом аномальной зависимости  $E_0(v)$  не обнаруживается.

Чтобы выяснить характер зависимости  $E_0(v)$  для кристаллического гелия сравнительно с молекулярным водородом и неоном, мы произвели для него расчет  $E_0$  в кластерном приближении того же третьего порядка для той же ГЦК решетки. В нашем приближении энергия, отсчитанная от энергии изолированного атома гелия в расчете на один атом, может быть представлена в виде

$$E_0 = 6\epsilon_2(a, a, 0) + 3\epsilon_2(2a, 0, 0) + 8\epsilon_3[(a, 0, a); (0, a, a)] + \\ + 12\epsilon_3[(a, 0, -a); (a, 0, a)] + 24\epsilon_3[(a, 0, -a); (0, a, a)] + \\ + 6\epsilon_3[(a, 0, -a); (-a, 0, a)]. \quad (1)$$

Здесь  $2a$  — ребро гранецентрированного куба,  $\epsilon_2(x_i, y_i, z_i) = \epsilon_2[(0); (i)]$  — энергия парного взаимодействия атома гелия  $O$ , помещенного в начало координат, с атомом  $i$ , имеющим координаты  $x_i, y_i, z_i$ ;  $\epsilon_3[(x_i, y_i, z_i); (x_j, y_j, z_j)] = \epsilon_3[(0); (i); (j)]$  — энергия неаддитивного трехчастичного взаимодействия атома  $O$  и атома с координатами соответственно  $x_i, y_i, z_i$  и  $x_j, y_j, z_j$ . При этом

$$\epsilon_2[(0); (i)] = E(0, i) - 2E_1; \quad E_1 = \frac{1}{2} \lim_{|R_i - R_j| \rightarrow \infty} E(i, j), \quad (2)$$

$$\epsilon_3[(0); (i); (j)] = E(0, i, j) - \epsilon_2[(0); (i)] - \epsilon_2[(0); (j)] - \epsilon_2[(i); (j)] - 3E_1, \quad (3)$$

где  $E(0, i)$  и  $E(0, i, j)$  — полные энергии кластеров соответственно из двух и трех атомов гелия при закрепленных в положениях равновесия ГЦК решетки ядрах. Выражение (1) для энергии, приходящейся на один атом, учитывает 150 трехчастичных кластеров для каждого такого атома. Эти трехчастичные кластеры, вносящие наибольший вклад в  $E_0$ , представляют собой равнобедренные треугольники с длиной бокового ребра, равной расстоянию между ближайшими соседями и различными основаниями соответственно формам таких равнобедренных треугольников в ГЦК структуре. Для вычисления  $E(0, i)$  и  $E(0, i, j)$  при ядерных конфигурациях ГЦК решетки мы использовали проведенные в [4, 5] методом МО—ССП—ЛКАО расчеты энергии комплексов  $He_3$ , имеющих как раз конфигурацию равнобедренных треугольников, проделав соответствующую интерполяцию.

Статическая энергия  $E_0$  твердого гелия в кластерном парном и трехчастичном приближениях приведена на рис. 2. Рассмотренный нами интервал удельного объема в основном тот же, что и для водорода и неона. В этом интервале гелий так же, как и молекулярный водород, обнаруживает при малых значениях удельного объема аномальное поведение кривой трехчастичного приближения: при давлениях, больших  $\approx 3$  Мбар, становится уже необходимым учет кластеров более высокого порядка. Такая кластеризация молекулярного кристалла за счет перекрытия орбиталей атомов различных узлов решетки предшествует его металлизации. Учитывая, что для неона область аномального поведения кривой трехчастичного приближения  $E_0(v)$  еще далеко не достигнута и при давлении 30 Мбар, мы получаем тем самым, что неон должен иметь значительно более высокое давление металлизации, чем гелий, для которого в свою очередь это давление выше, чем для молекулярного водорода.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Ната J. Phys. Lett., 1984, vol. 105A, N 6, p. 303—306.  
 [2] Анисимов С. И., Петров Ю. В. ЖЭТФ, 1978, т. 74, № 2, с. 778—785.  
 [3] Петров Ю. В. ФТТ, 1983, т. 25, № 8, с. 2399—2403.

Институт теоретической физики  
им. Л. Д. Ландау АН СССР  
Черноголовка  
Московская область

Поступило в Редакцию  
27 октября 1987 г.

УДК 538.935

Физика твердого тела, том 30, в. 4, 1988

Solid State Physics, vol. 30, № 4, 1988

## ГИГАНТСКОЕ ОТРИЦАТЕЛЬНОЕ ПРЫЖКОВОЕ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ

Н. А. Асадуллаев, И. Чирич<sup>1</sup>

1. В сильных электрических полях удается стимулировать протекание заряда в диэлектрических пленках  $\text{SiO}_2$  и  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , широко используемых в твердотельной электронике. Первые исследования диэлектрических пленок  $\text{Si}_3\text{N}_4$  при низких температурах [1] показали необычность поведения проводимости  $\text{Si}_3\text{N}_4$  как функции температуры  $T$ , напряженности электрического  $E$  и магнитного  $H$  полей. Было установлено, что токоперенос в  $\text{Si}_3\text{N}_4$  осуществляется на основе прыжкового механизма проводимости с подбарьерным рассеянием, стимулированного сильным электрическим полем. В [2, 3] было предположено, что знак магнитосопротивления (МС) определяется знаком амплитуды рассеяния, т. е. зависит от того, рассеивается ли электрон на примеси с большей энергией, чем энергия уровня, с которого электрон туннелирует, или, наоборот, — на примеси с меньшей энергией. В первом случае наблюдается положительное магнитосопротивление (ПМС), а во втором — отрицательное (ОМС). Естественно предположить, что величина эффекта МС определяется числом актов рассеяния с доминирующей амплитудой рассеяния. Поскольку число актов рассеяния можно варьировать, изменяя число рассеивающих центров, представляло интерес найти такие способы синтеза образцов, при которых концентрация рассеивающих центров была бы максимальной.

2. В настоящей работе исследовались аморфные диэлектрические пленки  $\text{Si}_3\text{N}_4$  при  $T < 200$  К,  $E > 10^6$  В/см,  $H < 50$  кЭ. Пленки  $\text{Si}_3\text{N}_4$  толщиной 400 Å получались по стандартной технологии пиролиза  $\text{SiH}_4$  и  $\text{NH}_3$  в реакторах с пониженным давлением, однако в отличие от образцов, использованных в [1–3], отжигались в атмосфере водорода в течение 30–35 минут. У таких образцов обнаружено гигантское отрицательное прыжковое магнитосопротивление в сильных электрических полях.

3. Ток  $J$  через пленку  $\text{Si}_3\text{N}_4$  при  $H=0$  падает с понижением температуры до 80 К. В диапазоне  $30 < T < 80$  К проводимость практически не зависит от температуры. При дальнейшем понижении температуры проводимость резко падает, а затем в интервале  $4 < T < 10$  К сохраняет постоянное значение. Влияние магнитного поля на проводимость пленок  $\text{Si}_3\text{N}_4$  проявляется при  $T < 15$  К (рис. 1). В постоянном магнитном поле  $H \approx 20$  кЭ проводимость в этом температурном интервале возрастает на 1.5–2 порядка при понижении температуры.

Зависимости проводимости от  $H$  в сильном электрическом поле имеют следующий вид. При  $T=4.2$  К в слабых магнитных полях  $H \approx 3-4$  кЭ проводимость пленок незначительно уменьшается (слабое ПМС), а с ростом  $H$  ток  $J$  резко возрастает — наблюдается ОМС (рис. 2). Следует отметить, что на начальном участке роста проводимости  $\lg J$  линейно зависит от  $H$ .

<sup>1</sup> Институт физики, Белград, Югославия,