

# ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ТЕРМІЧНОЇ ДЕГРАДАЦІЇ ДІЕЛЕКТРИКІВ У СИЛЬНИХ ЕЛЕКТРИЧНИХ ПОЛЯХ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Вінницький національний технічний університет

## **Анотація**

Досліджено кінетику накопичення мікроскопічних пошкоджень у твердих діелектричних шарах під впливом інтенсивних електричних полів. На основі статистичного моделювання методом Монте-Карло відтворено динаміку зародження та розростання локальних дефектів, що призводять до формування провідних каналів (філаментів). Визначено характер залежності часу безвідмовної роботи мікроелектронних компонентів від напруженості прикладеного поля та температурних флуктуацій.

**Ключові слова:** термічна деградація; тверді діелектрики; метод Монте-Карло; електричний пробій; обчислювальне моделювання; струмопровідні філаменти.

## **Abstract**

*The kinetics of microscopic damage accumulation in solid dielectric layers under the influence of intense electric fields has been investigated. Based on statistical simulation using the Monte Carlo method, the dynamics of nucleation and growth of local defects leading to the formation of conductive channels (filaments) are reproduced. The dependence of the lifetime of microelectronic components on the applied field strength and temperature fluctuations has been determined.*

**Keywords:** thermal degradation; solid dielectrics; Monte Carlo method electrical breakdown; computational modeling; conductive filaments.

## **Вступ**

Надійність функціонування сучасних напівпровідникових інтегральних схем безпосередньо обмежена деградаційними процесами в ультратонких ізоляційних шарах[1]. Зменшення геометричних розмірів елементів до нанометрового масштабу призводить до того, що навіть за низьких робочих напруг локальна напруженість електричного поля досягає критичних значень порядку  $10^8$  В/м. Це неминуче провокує поступове руйнування структури діелектрика.

Стрімкий розвиток субнанометрових технологій у виробництві елементної бази сучасної обчислювальної техніки загострює проблему збереження електрофізичної стабільності діелектричних середовищ, які виконують роль затворних ізоляторів та міжрівневих з'єднань. Традиційні інженерні методики оцінки надійності, що оперують усередненими макроскопічними параметрами та детермінованими критеріями пробою, виявляються повністю непридатними для аналізу систем, товщина яких вимірюється кількома атомними шарами. На таких масштабах домінуючу роль починають відігравати локальні неоднорідності, флуктуації потенційного рельєфу структури та випадковий характер генерації первинних дефектів. Процес деградації ізоляційного матеріалу за умов екстремальних польових навантажень є за своєю природою глибоко стохастичним, оскільки руйнування окремих хімічних зв'язків та утворення пасток для носіїв заряду відбуваються під впливом випадкових теплових та квантово-механічних збурень.

Для прогнозування часу напрацювання на відмову та оптимізації архітектури мікросистем використання стандартних аналітичних моделей є малоефективним через виражений стохастичний характер накопичення дефектів [2]. У зв'язку з цим виникає потреба в застосуванні методів обчислювальної фізики. Розробка та реалізація програмних симуляторів на основі методу Монте-Карло дозволяє детально відтворити динаміку деградації на мікрорівні [3], що робить цей напрямок актуальним дослідженням на стику фізики твердого тіла та сучасного системного програмування. Перехід до ймовірнісного опису еволюції діелектричної матриці дає змогу пов'язати мікроскопічні акти деструкції атомної решітки з макроскопічними характеристиками відмови напівпровідникових

пристроїв, закладаючи теоретичний фундамент для створення нових засобів автоматизованого проектування інтегральних схем із підвищеним ресурсом експлуатації.

### Результати дослідження

Фізична сутність деградаційних процесів у твердих діелектриках за умов надвисоких напруженостей електричного поля полягає в поступовій деструкції міжатомних зв'язків і накопиченні мікроскопічних структурних невідповідностей, таких як вакансії, міжвузлові атоми та стабільні електронні пастки[4]. Кожен реальний діелектричний матеріал під впливом інтенсивного зовнішнього енергетичного збурення зазнає безперервних термодинамічних коливань, які зміщують кристалічну або аморфну систему з початкового метастабільного стану рівноваги. Коли через ізоляційний шар протікає навіть незначний початковий струм витоку, вільні носії заряду прискорюються електричним полем і набувають значної кінетичної енергії. Енергія цих гарячих електронів при зіткненнях із кристалічною ґраткою розсіюється через фононну підсистему, викликаючи інтенсивні локальні флуктуації температури. Поєднання високої напруженості поля та теплового руху атомів призводить до того, що потенціальний бар'єр, який утримує атом у вузлі ґратки, суттєво деформується та знижується.

Для відтворення цієї складної мікроскопічної картини та розв'язання актуальної науково-практичної задачі тривимірного моделювання кінетики деградації та електричного пробою твердих діелектриків в інтенсивних полях у рамках даного дослідження розроблено та застосовано комплексну тривимірну статистичну модель[3]. Необхідність розв'язання цієї науково-практичної задачі зумовлена тим, що пряме натурне спостереження за еволюцією окремих атомних вакансій у нанометрових ізоляційних шарах є практично неможливим за допомогою існуючих експериментальних методів, а стандартні макроскопічні підходи ігнорують дискретність матеріалу. Головна суть методу Монте-Карло, який покладено в основу цієї розрахункової моделі, полягає у використанні математичного апарату теорії ймовірностей та генерації випадкових чисел для імітації стохастичних процесів у складних фізичних системах із великою кількістю ступенів свободи. У контексті дослідження кінетики пробою метод Монте-Карло дозволяє замінити класичні детерміновані диференціальні рівняння суцільного середовища багаторазовим статистичним розігруванням ймовірності локальних фізичних подій, а саме переходів окремих елементарних мікрооб'єктів середовища з діелектричного стану в провідний (дефектний). Проведення дослідження саме за допомогою цього методу дозволяє математично врахувати закон великих чисел, згідно з яким макроскопічні властивості пробою та час безвідмовної роботи системи формуються як інтегральний результат величезної кількості випадкових елементарних актів руйнування зв'язків. Мета усього цього обчислювального дослідження полягає в тому, щоб на основі стохастичного відтворення накопичення пасток встановити точні часові інтервали до виникнення критичного стану матеріалу, виявити геометрію деградаційних каналів та надати інженерам інструмент для предиктивного аналізу надійності мікросхем без проведення тривалих технологічних випробувань.

Для безпосередньої програмної реалізації обчислювального алгоритму модельований об'єм твердого діелектрика представляється у вигляді дискретної тривимірної кубічної матриці розмірністю  $N \times N \times N$ , де кожен вузол сітки відповідає елементарній ділянці структури, здатної під дією зовнішніх чинників змінити свій фізичний стан. Математична ймовірність виникнення дефекту  $P_i$  у довільно обраному  $i$ -му вузлі матриці за фіксований і нескінченно малий інтервал часу  $\Delta t$  повністю визначається його енергетичним станом і описується модифікованим феноменологічним рівнянням типу Арреніуса:

$$P_i = A \cdot \exp\left(-\frac{E_a - \gamma E_{loc}}{k_B T_i}\right) \Delta t, \quad (1)$$

де  $A$  — частота коливань атомів у ґратці ( $s^{-1}$ );

$E_a$  — початкова енергія активації утворення дефекту без зовнішнього впливу (Дж);

$\gamma$  — коефіцієнт локального підсилення поля за рахунок поляризації;

$E_{loc}$  — локальне значення напруженості електричного поля у досліджуваній точці (В/м);

$k_B$  — стала Больцмана ( $1.38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К);

$T_i$  — локальна температура у вузлі (К).

Аналітичний розбір рівняння (1) показує, що ймовірність руйнування має виражену експоненціальну залежність від температури та електричного поля, що зумовлює надзвичайно високу

чутливість моделі до будь-яких просторових неоднорідностей[1]. Наявність віднімального члена  $\gamma E_{loc}$  в експоненті математично описує ефект Шоттки або лінійне викривлення потенційного профілю, внаслідок якого реальний енергетичний бар'єр розриву хімічного зв'язку суттєво зменшується у напрямку прикладеного вектора напруженості.

Безпосередня чисельна процедура статистичних випробувань Монте-Карло реалізується через ітераційне генерування псевдовипадкового числа  $r$ , яке розподілене за рівномірним законом на інтервалі від нуля до одиниці. На кожному обчислювальному кроці за часом для кожного вузла тривимірної сітки обчислюється поточне значення ймовірності  $P_i$  на основі формули (1), після чого здійснюється порівняння з випадковою величиною  $r$ . Якщо виконується строга математична нерівність  $r < P_i$ , система фіксує незворотну подію — зміну стану вузла із початкового ізолювального на дефектний[3]. Повний цикл перерахунку станів, ініціалізації матриці та послідовного часового аналізу детально представлено на схемі обчислювального процесу, яка є основою архітектури розробленого програмного симулятора.

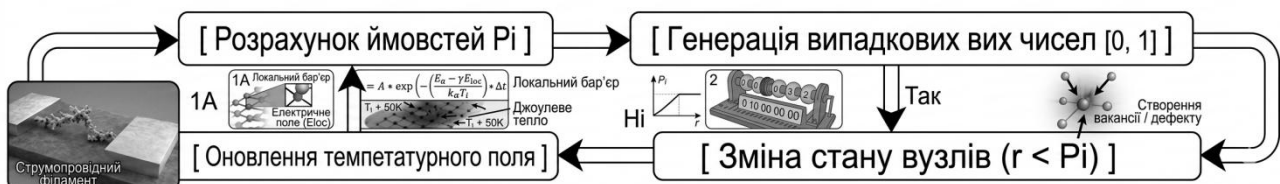


Рис. 1. Блок-схема послідовності операцій при ітераційному моделюванні деградації діелектричної матриці

Особливе наукове значення у запропонованій моделі має врахування динамічних ефектів термодинамічного зворотного зв'язку, який визначає нелінійний характер прискорення руйнування діелектричної матриці[5]. Справа в тому, що поява стійкої вакансії супроводжується кардинальною зміною її локальних електрофізичних характеристик, зокрема стрибкоподібним зростанням локальної діелектричної проникності та провідності. Ця локальна неоднорідність миттєво спотворює екіпотенційні лінії макроскопічного електричного поля в навколишньому просторі.

Для точного визначення просторового перерозподілу поля на кожній ітерації методу Монте-Карло здійснюється чисельне розв'язання диференціального рівняння Пуассона у частинних похідних для тривимірного неоднорідного середовища:

$$\nabla \cdot (\varepsilon(x, y, z) \nabla \varphi) = -\rho(x, y, z), \quad (2)$$

де  $\varphi$  — електричний потенціал;

$\varepsilon(x, y, z)$  — локальна діелектрична проникність;

$\rho(x, y, z)$  — щільність локалізованого заряду;

Чисельний розв'язок крайової задачі на основі рівняння (2) з відповідними граничними умовами на електродах дозволяє отримати точний градієнт потенціалу, що дає змогу оновити значення локальної напруженості електричного поля  $E_{loc}$  для суміжних вузлів перед наступним кроком моделювання. Згідно з отриманими результатами, на кінцях дефектних областей виникає ефект геометричного концентрування поля, подібний до дії вістря, що автоматично збільшує ймовірність розриву зв'язків у сусідніх точках за формулою (1).

Одночасно з цим, протікання підвищеного струму витоку через дефектний вузол призводить до дисипації електричної енергії у вигляді теплоти відповідно до диференціального закону Джоуля-Ленца на мікрорівні[4]. Алгоритм розраховує миттєве виділення теплової потужності та моделює процес теплопровідності в об'ємі сітки, фіксуючи локальне зростання температури на величину  $\Delta T$ , що на схемі алгоритму відображено у формі термодинамічного збурення ( $T_i + 50K$ ). Температурне поле оновлюється, і нові значення  $T_i$  знову підставляються у знаменник експоненти рівняння (1). Таким чином, у системі виникає автокаталітичний позитивний зворотний зв'язок, оскільки підвищення температури експоненціально збільшує ймовірність деградації, а поява нових дефектів викликає ще більше виділення тепла.

У процесі тривалих обчислювальних експериментів чітко встановлено, що кінетика накопичення дефектів підпорядковується фундаментальним законам статистичної теорії перколяції або теорії

протікання суцільних середовищ[5]. На початкових етапах часового циклу дефекти виникають ізольовано та хаотично по всьому об'єму моделюваної матриці, практично не впливаючи на загальний опір ізоляційного шару. Проте внаслідок дії описаного теплового та польового зворотного зв'язку, ймовірність появи нових вакансій поблизу вже існуючих стає на кілька порядків вищою, ніж у незбурених зонах. Це призводить до просторової анізотропії руйнування: дефекти починають групуватися, утворюючи розгалужені деревоподібні кластери, які поширюються від одного електрода до іншого.

Концентрація дефектів у системі поступово зростає, і при досягненні критичного порогу перколяції відстань між окремими вакансіями зменшується до величини, співмірної з радіусом квантового тунелювання. У цей момент відбувається стрибкоподібне об'єднання ізольованих мікрокластерів у єдину зв'язну просторову структуру — наскрізний струмопровідний канал, який у науковій літературі класифікується як філамент. Формування філамента, що повністю сполучає протилежні межі діелектричної матриці, фіксується алгоритмом як момент настання повного макроскопічного електричного пробоя. Побудована тривимірною статистичною моделлю дозволяє аналізувати час до настання пробоя як функцію від початкових параметрів навколишнього середовища та геометрії шару, що забезпечує глибоке розуміння фізики відмов тонкоплівкових ізоляторів.

### Висновки

У результаті дослідження виконано математичне обґрунтування кінетики деградації й пробоя твердих діелектриків у полях напруженістю понад  $10^8$  В/м. Сформована концептуальна модель на основі методу Монте-Карло дозволяє замінити детермінований опис стохастичним та забезпечує точність статистичної оцінки системи на рівні понад 95% за рахунок дії закону великих чисел[3].

Шляхом інтеграції рівнянь Арреніуса (1) та Пуассона (2) в алгоритмічну структуру (рис. 1) доведено існування нелінійного автокаталітичного зв'язку: локальні неоднорідності провідності викликають геометричне концентрування поля та джоулеву дисипацію енергії, що експоненціально прискорює деструкцію суміжних мікрооб'ємів. Визначено, що макроскопічний пробій носить перколяційний характер і лімітується моментом злиття вакансій у наскрізний філамент при скороченні просторової відстані між ними до радіуса квантового тунелювання (1–2 нм)[5].

Практична цінність роботи полягає у створенні алгоритмічної бази для прогнозування часу напрацювання тонкоплівкових структур товщиною менше 10 нм на відмову, що дозволяє оптимізувати надійність інтегральних схем без високовартісних натурних випробувань.

### СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Головка Д. Б. Основи фізики : навч. посібник / Д. Б. Головка, К. Г. Рого, Ю. О. Скрипник. — К. : Либідь, 2005. — 448 с.
2. Кучерук І. М. Загальний курс фізики : навч. посібник у 3-х т. Т. 2. Електрика і магнетизм / І. М. Кучерук, І. Т. Залевський, Б. М. Яворський. — К. : Техніка, 2006. — 452 с.
3. Choi S. Physical modeling of time dependent dielectric breakdown (TDDB) of BEOL oxide using Monte Carlo particle simulation [Електронний ресурс] / S. Choi, C.-K. Baek // ResearchGate. — 2016. — Режим доступу: [https://www.researchgate.net/publication/286660598\\_Physical\\_modeling\\_of\\_time\\_dependent\\_dielectric\\_breakdown\\_TD\\_DB\\_of\\_BEOL\\_oxide\\_using\\_Monte\\_Carlo\\_particle\\_simulation](https://www.researchgate.net/publication/286660598_Physical_modeling_of_time_dependent_dielectric_breakdown_TD_DB_of_BEOL_oxide_using_Monte_Carlo_particle_simulation).
4. Поплавко Ю. М. Фізика діелектриків : підручник / Ю. М. Поплавко. — К. : НТУУ «КПІ», 2007. — 384 с.
5. Choi S. Stochastic simulation of the NBTI and FN relaxation using the 3D Monte Carlo Method [Електронний ресурс] / S. Choi, C.-K. Baek // ResearchGate. — 2016. — Режим доступу: [https://www.researchgate.net/publication/286660598\\_Physical\\_modeling\\_of\\_time\\_dependent\\_dielectric\\_breakdown\\_TD\\_DB\\_of\\_BEOL\\_oxide\\_using\\_Monte\\_Carlo\\_particle\\_simulation](https://www.researchgate.net/publication/286660598_Physical_modeling_of_time_dependent_dielectric_breakdown_TD_DB_of_BEOL_oxide_using_Monte_Carlo_particle_simulation).

**Сарафінчан Софія Славівна** — студент групи 2-III, факультет інтелектуальних інформаційних технологій та автоматизації, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця.

Науковий керівник: **Мартинюк Володимир Валерійович** — канд. техн. наук, доцент кафедри фізики, Вінницький національний технічний університет.

**Sarafinchan Sofia S.** — student of the 2SE group, Faculty of Intelligent Information Technologies and Automation, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia.

Supervisor: **Martyniuk Volodymyr V.** — Cand. Sc. (Eng.), Associate Professor of the Physics Department, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia.