




ADVERTIMENT. L'accés als continguts d'aquesta tesi queda condicionat a l'acceptació de les condicions d'ús establertes per la següent llicència Creative Commons:  http://cat.creativecommons.org/?page_id=184

ADVERTENCIA. El acceso a los contenidos de esta tesis queda condicionado a la aceptación de las condiciones de uso establecidas por la siguiente licencia Creative Commons:  <http://es.creativecommons.org/blog/licencias/>

WARNING. The access to the contents of this doctoral thesis it is limited to the acceptance of the use conditions set by the following Creative Commons license:  <https://creativecommons.org/licenses/?lang=en>



Universitat Autònoma de Barcelona

Escola d'Enginyeries

Departament d'Enginyeria Electrònica

TESIS DOCTORAL

DEGRADACIÓN Y CONDUCCIÓN MULTIFILAMENTARIA EN
ESTRUCTURAS MIS/MIM BASADAS EN HFO₂

Autor:

Jordi Muñoz Gorriz

Supervisor:

Dr. Enrique Miranda Castellano

*Una tesis presentada en cumplimiento de los requisitos para el Grado de
Doctor en Ingeniería Electrónica y de Telecomunicación*

Diciembre 2020



Universitat Autònoma de Barcelona

Escola d'Enginyeries

Departament d'Enginyeria Electrònica

El Dr. Enrique Miranda Castellano, Profesor Agregado del Departamento de Ingeniería Electrónica de la Escuela de Ingeniería de la Universidad Autónoma de Barcelona,

CERTIFICA:

que la Tesis titulada “Degradación y conducción multifilamentaria en estructuras MIS/MIM basadas en HfO_2 ” ha sido escrita por el Sr. **Jordi Muñoz Gorriz** bajo su supervisión, en cumplimiento de los requisitos del Programa de Doctorado en Ingeniería Electrónica y de Telecomunicación.

Y para certificarlo, firma la presente.

Dr. Enrique Miranda Castellano

Jordi Muñoz Gorriz

Bellaterra, diciembre de 2020

“Dale fuego a un hombre y estará caliente un día, pero préndele fuego y estará caliente el resto de su vida”

Terry Pratchett – ¡Voto a Bríos! (1997)

Agradecimientos

QUIEN hubiese dicho que mi largo viaje a través de la vida universitaria, que empezó hace ya más de 10 años, acabaría transformándose en la realización y presentación de una tesis doctoral para optar al título de doctor. Valorándolo, me parece increíble que aquello que solo escuchaba en películas y series de televisión sea algo al alcance de mi mano y creo que, pese a las dificultades que hemos sufrido todos y todas las estudiantes de doctorado a lo largo de este camino, deberíamos estar orgullosos del hito que hemos realizado. En este pequeño espacio que me habilita esta tesis para ser yo mismo, me gustaría agradecer, desde lo más profundo de mi ser, a todas las personas que me han apoyado o han hecho posible realizar esta tesis.

Haciendo retrospectiva, creo que todo empezó cuando el Dr. Javier Martín, en su momento y aún profesor de la Escuela de Ingeniería de la Universidad Autónoma de Barcelona (UAB), me puso en contacto con la Dra. Francesca Campabadal y la Dra. Mireia Bargalló, ambas del *Institut de Microelectrònica de Barcelona (IMB–CNM)*, al final de mi etapa de estudiante de grado en la UAB. Se podría decir que ellas fueron las que realmente me introdujeron en el mundo de la investigación. Con ellas realice mi trabajo de fin de máster y fueron las que me presentaron las convocatorias de personal investigador en formación. No solo eso, sino que además me ayudaron a redactar y presentar la documentación requerida para optar a estas convocatorias.

Podría escribir un buen número de líneas describiendo la cantidad de veces que me han apoyado y ayudado, no solo en mi etapa de estudiante de máster, sino también durante el desarrollo de esta tesis, a través de las diferentes colaboraciones que hemos realizado y a los dispositivos que me han facilitado. La verdad, me faltan palabras para agradecer todo lo que me han llegado a aportar, tanto personalmente como profesionalmente.

Hoy no podría estar presentando mi tesis de no ser por el Dr. Enrique Miranda y el Dr. Jordi Suñé, quienes confiaron en mí y me han brindado la oportunidad de desarrollarme como investigador y realizar mi tesis doctoral. Especialmente, me gustaría agradecer el seguimiento del Dr. Enrique como mi tutor de tesis. Pese a su atareada agenda y estancias en otras universidades, siempre estaba disponible y trataba de hacer un hueco cuando yo picaba a la puerta de su despacho. Quizás no seamos la pareja tutor-estudiante más organizada, pero, sinceramente, amo de todo corazón el acercamiento de tú a tú que he podido tener con él. También, agradecer la cantidad de formaciones y colaboraciones que me ha presentado y que hemos conseguido. De corazón Enrique, muchas gracias por todo.

A lo largo de mis 4 años de estudiante de doctorado he podido conocer y colaborar con un sinfín de investigadores e investigadoras, tanto nacionales como internacionales, que agradezco muchísimo haber conocido y haber aprendido de ellos. También mencionar especialmente a todos y a todas mis compañeras estudiantes de doctorado del departamento de ingeniería electrónica, por todos esos momentos de desconexión y de risas en los despachos, y de compartir nuestras dificultades. La verdad, se agradece el no sentirse solo y saber que no eres el único que puede llegar a encontrarse con complicaciones; el saber que es normal frustrarse y darse varias veces con una misma pared. Si bien hay muchos nombres que podría mencionar, quiero destacar al, actualmente, Dr. Alberto Rodríguez, excompañero de mí mismo grupo de investigación. Gracias por ser tan buen referente y por siempre estar dispuesto a echar una mano.

Profesionalmente, me gustaría agradecer todas las colaboraciones realizadas que me han ayudado a construir esta investigación: al grupo de la Dra. Francesca Campabadal del IMB-CNM (España) y al grupo del Dr. Paul Hurley del *Tyndall National Institute* (Irlanda), por los dispositivos proporcionados; y al grupo del Dr. Gilles Reimbold del *Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives – Laboratoire d'électronique des technologies de l'information* (CEA-Leti) (Francia), por permitirme realizar caracterizaciones térmicas. También mencionar al Dr. Felix Palumbo, de la Universidad Tecnológica Nacional (Facultad Regional Buenos Aires), por su disponibilidad a la hora de proponer una estancia en su grupo,

pese a que al final no pudo realizarse. Y también agradecer la colaboración realizada en este último mes de noviembre con la Dra. Maria Toledano Luque y el Dr. Fernando Guarín de GLOBALFOUNDRIES que me ha permitido trabajar, por primera vez, con datos que provienen de dispositivos FinFETs avanzados.

También agradecer tanto al personal administrativo de la UAB como a la actual coordinadora del programa de doctorado, Dr. Maria Aránzazu Uranga del Monte, por ayudarme a subsanar los errores y problemas que han ido surgiendo en estos últimos meses. Especialmente, Arantxa, muchas gracias por la rapidez y el seguimiento realizado en el poco tiempo que te he tenido como coordinadora.

Como ya he dicho, el desarrollo de la tesis no es un camino de rosas y el pilar fundamental que me ha permitido seguir hacia delante en los peores momentos ha sido mi equipo de revisión de vida de la Joventut Obrera Cristiana. No sé qué habría sido de mí sin estas preciosas personas en mi vida. Ellos y ellas han sido las que han soportado semana a semana mi baches e inquietudes, mis dudas y desánimos. Recuperando el capítulo 13 de la primera carta a los Corintios: *“Si tingúes el do de profecia i penetrés tots els misteris amagats de Déu i tot el coneixement, si tingúes tanta fe que fos capaç de moure les muntanyes, però no estimes, no seria res... L’amor és pacient, és bondadós...tot ho espera, tot ho suporta”*, muchas gracias por ser y repartir amor: Josep Amigo, Carmen Espinosa, Carolina Montoya, Daniel López y Josep M^a Romaguera; sin olvidarme de Nuria Pastor, Laura Rubio y María Alonso.

Por otro lado, no podría olvidarme jamás de mi otro grupo de locos, los Kantsmareros, un conjunto de personas que también me han acompañado en este largo viaje. Muchas gracias por todas esas noches de diversión y liberación del día a día y de la rutina. Y también por esas conversaciones hasta bien entrada la madrugada contándonos nuestras preocupaciones y ayudándonos desde la distancia. De corazón, me alegro mucho de que forméis parte de mi vida: Albert, Adrián, Borja y Frederick; sin olvidarme tampoco de Tamara.

Finalmente, mencionar a las personas que siempre han estado allí en los buenos y malos momentos, que siempre han confiado en mí y que sin ellos no sería quien soy actualmente. Se que lo digo poco, pero: papa, mama, os quiero mucho. Gracias por todo lo que habéis tenido que soportar y aguantar. Muchas gracias por permitirme ser quien soy y siempre estar dispuestos a ayudar, incluso aunque no fuerais capaces de llegar a entender en que estaba trabajando. Y a ti también, Judit, no por ser una hermana perfecta, sino por ser la mejor que podría tener. A los tres, gracias por permitirme estar en vuestras vidas. Este hito, en parte, es por vosotros.

Resumen

EN esta tesis doctoral se realiza una extensa investigación sobre el fenómeno de la ruptura dieléctrica en dispositivos metal-aislante-semiconductor (MIS) y metal-aislante-metal (MIM) basados en HfO_2 . Más específicamente, se han estudiado dispositivos MIS/MIM con HfO_2 como dieléctrico y dispositivos MIS cuyo dieléctrico es un penta-nanolaminado compuesto por capas interpuestas de HfO_2 y de Al_2O_3 . A lo largo de los cuatro extensos capítulos que conforman esta tesis, más un último capítulo conclusivo, se ha realizado un exhaustivo estudio de la ruptura dieléctrica desde puntos de vista completamente diferentes. Empezando por un capítulo introductorio al fenómeno de la ruptura dieléctrica, en el que se exponen los aspectos generales a tener en consideración, cada uno de los tres capítulos experimentales posteriores giran en torno a un efecto particular de este fenómeno. A su vez, solo se evalúa un tipo de dispositivo en cada capítulo. Inicialmente, utilizando las estructuras MIS basadas en HfO_2 , se realiza un análisis en profundidad de los cambios estructurales inducidos en la intercara metal-aislante de los dispositivos debido a la ruptura dieléctrica. Para ello, en este capítulo se recurren a poderosas técnicas de caracterización física como el microscopio electrónico de barrido, el microscopio de fuerzas atómicas o la espectrometría de dispersión de energía de rayos X. A su vez, se realiza un estudio sobre los efectos de la conmutación resistiva en los cambios inducidos en los dispositivos. En el siguiente capítulo, utilizando las estructuras MIS basadas en $\text{HfO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$, se realiza un análisis de la estadística de la

ruptura dieléctrica dependiente del tiempo, así como de los eventos de ruptura sucesivos. Utilizando un gran arsenal de modelos y técnicas estadísticas, se consigue reproducir las tendencias experimentales las cuales no son reproducibles con el modelo de Weibull, indicación de una ruptura dieléctrica no homogénea. Seguidamente, en el último capítulo experimental, se realiza un análisis exhaustivo y extenso de la estadística espacial de los eventos de ruptura a través de los dispositivos MIM basados en HfO_2 . Utilizando estas técnicas, se consigue evaluar la correlación entre los eventos de ruptura, así como la que hay entre la localización y el tamaño de los eventos. Finalmente, en el capítulo conclusivo se presentan tanto las conclusiones más relevantes de la investigación realizada como una valoración de los posibles nuevos estudios que se originan de este trabajo.

Contenido

<i>Agradecimientos</i>	<i>vii</i>
<i>Resumen</i>	<i>xi</i>
<i>Contenido</i>	<i>xiii</i>
<i>Acrónimos</i>	<i>xvii</i>
<i>Publicaciones</i>	<i>1</i>
Compendio de publicaciones incluidas en esta tesis.....	<i>1</i>
Otras publicaciones	<i>2</i>
Contribuciones a conferencias	<i>3</i>
<i>Presentación</i>	<i>5</i>
<i>Capítulo 1 Degradación y ruptura dieléctrica</i>	<i>9</i>
<i>1.1. Introducción</i>	<i>11</i>
1.1.1. Dispositivo MOSFET.....	<i>11</i>
1.1.2. Escalado y dieléctricos <i>high-K</i>	<i>14</i>
1.1.3. Estructuras MIS/MIM	<i>17</i>

1.2. Dinámica de la degradación y de la ruptura	18
1.2.1. Generación de defectos y trampas.....	19
1.2.2. Formación del filamento conductivo.....	20
1.2.3. Modos de ruptura en óxidos delgados.....	21
1.3. Caracterización de la ruptura dieléctrica	22
1.3.1. Estrés a tensión constante	24
1.3.2. Estrés con rampa de tensión	24
1.3.3. Estrés con límite de corriente.....	25
1.4. Consideraciones estadísticas	25
1.4.1. Distribución de Weibull	26
1.4.2. Modelo percolativo	27
1.5. Leyes de aceleración de la ruptura.....	30
1.5.1. Modelo termoquímico: <i>E-model</i>	31
1.5.2. Modelo de inyección anódica de huecos: <i>1/E-model</i>	32
1.5.3. Modelo de liberación de hidrógeno: <i>V-model</i>	32
1.6. Daño en el dieléctrico asociado a la ruptura	33
1.7. Conclusiones	35
<i>Capítulo 2 Ruptura dieléctrica reversible</i>	<i>37</i>
2.1. Fenómeno de conmutación resistiva	38
2.1.1. Características del fenómeno.....	39
2.1.2. Mecanismos de la conmutación resistiva.....	42
2.2. Descripción de los dispositivos	47
2.3. Estudio experimental.....	48
2.3.1. Medidas eléctricas.....	48
2.3.2. Medidas físicas	50
2.4. Caracterización eléctrica.....	51
2.4.1. Distribución de V_{BD}	51
2.4.2. Evaluación de la conmutación resistiva.....	53
2.5. Caracterización física	54
2.5.1. Consideraciones iniciales.....	54
2.5.2. Impacto de la ruptura dieléctrica	55
2.5.3. Degradación inducida por los ciclos de conmutación resistiva	59
2.5.4. Degradación incontrolada durante la conmutación resistiva.....	61

2.6. Conclusiones	63
Capítulo 3 Estadística temporal de eventos de ruptura.....	65
3.1. Ruptura dieléctrica no homogénea	67
3.1.1. Modelo de <i>clustering</i>	68
3.1.2. Distribución de Burr tipo XII	70
3.2. Teoría de eventos de ruptura sucesivos	72
3.2.1. Eventos no correlacionados	74
3.2.2. Eventos correlacionados	76
3.3. Descripción de los dispositivos	77
3.4. Proceso experimental.....	79
3.5. Análisis de la ruptura dieléctrica dependiente del tiempo.....	80
3.5.1. Estudio exploratorio de la primera ruptura.....	80
3.5.2. Estadística de los eventos sucesivos.....	82
3.5.3. Ajuste semiempírico de los eventos no correlacionados	87
3.6. Conclusiones	88
Capítulo 4 Estadística espacial de eventos de ruptura	91
4.1. Estadística espacial.....	93
4.1.1. Definición de la distribución.....	96
4.1.2. Características generales de una distribución puntual	98
4.1.3. Estimadores para procesos puntuales.....	99
4.1.4. Correlación entre puntos y atributos	106
4.2. Definición de los dispositivos.....	109
4.3. Proceso experimental.....	110
4.3.1. Generación de los eventos de ruptura	110
4.3.2. Tratamiento de las imágenes y análisis de los datos.....	112
4.4. Caracterización espacial de eventos de ruptura múltiple	113
4.4.1. Estudio exploratorio de la estadística espacial.....	113
4.4.2. Simulación de la distribución espacial de eventos de ruptura	116
4.5. Caracterización del área y la velocidad de generación.....	121
4.5.1. Correlación entre la localización y el daño producido	121
4.5.2. Concentración del daño inducido por las rupturas dieléctricas	124
4.5.3. Velocidad de generación de los eventos	126

4.6. Fenómenos observados en dispositivos quemados	128
4.6.1. Localización de la punta de estrés.....	131
4.6.2. Caracterización de efectos de inhibición.....	135
4.7. Conclusiones	139
Capítulo 5 Conclusiones	141
Bibliografía	145
Anexo I Compendio de publicaciones incluidas en esta tesis	155
JAP 2017	157
JEM 2018	171
ME 2019	179
TDMR 2019	187
TSF 2020	199
MR 2020	209
EDL 2020.....	217

Acrónimos

ACRÓNIMO	ORIGEN	TRADUCCIÓN
AFM	Atomic Force Microscope	Microscopio de fuerzas atómicas
AHI	Anode Hole Injection	Inyección anódica de huecos
AHR	Anode Hydrogen Release	Liberación anódica de hidrógeno
ALD	Atomic Layer Deposition	Deposición de capa atómica
ATDF	Advanced Thin Dielectric Films	Capas delgadas de dieléctricos avanzados
BD	BreakDown	Ruptura
CAFM	Conductive Atomic Force Microscope	Microscopio conductivo de fuerzas atómicas
CDF	Cumulative Distribution Function	Función de distribución acumulada

ACRÓNIMOS

ACRÓNIMO	ORIGEN	TRADUCCIÓN
CEA-Leti	Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives – Laboratoire d'électronique des technologies de l'information	Comisión de la energía atómica y energías alternativas – Laboratorio de electrónica de tecnología de la información
CF	Conductive Filament	Filamento conductor
CMOS	Complementary Metal Oxide Semiconductor	Semiconductor complementario metal-óxido
CSR	Complete Spatial Randomness	Espacial completamente aleatorio
CVS	Constant Voltage Stress	Estrés a tensión constante
DBIE	Dielectric Breakdown Induced Epitaxy	Epitaxia inducida por la ruptura dieléctrica
ECM	ElectroChemical Mechanism	Mecanismo electroquímico
EDX	Energy Dispersive X-ray spectroscopy	Espectrometría de dispersión de energía de rayos X
EELS	Electron Energy Loss Spectroscopy	Espectrometría de pérdida de energía de electrones
F-N	Fowler-Nordeheim	Fowler-Nordeheim
FTH	French Top Hat	Sombrero de copa francés
HBD	Hard BreakDown	Ruptura fuerte
HRS	High Resistance State	Estado de alta resistencia
HRTEM	High Resolution Transmission Electron Microscope	Microscopio electrónico de transmisión de alta resolución
IMB-CNM	Institut de Microelectrònica de Barcelona	Instituto de microelectrónica de Barcelona
I-t	Current-Time	Corriente-tiempo
I-V	Current-Voltage	Corriente-tensión
K-M	Kaplan-Meier	Kaplan-Meier

ACRÓNIMO	ORIGEN	TRADUCCIÓN
LRS	Low Resistance State	Estado de baja resistencia
MC	Monte Carlo	Monte Carlo
MIM	Metal-Insulator-Metal	Metal-Aislante-Metal
MIS	Metal-Insulator-Semiconductor	Metal-Aislante-Semiconductor
MOS	Metal-Oxide-Semiconductor	Metal-Oxido-Semiconductor
MOSFET	Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor	Transistor de efecto de campo metal-óxido-semiconductor
NB	Negative Binomial	Binominal negativa
NM	Nelder-Mead	Nelder-Mead
PBD	Progressive BreakDown	Ruptura progresiva
PDF	Probability Distribution Function	Función de distribución de probabilidad
ReRAM	Resistive Random Access Memory	Memoria resistiva de acceso aleatorio
RR	Ramp Rate	Velocidad de rampa
RS	Resistive Switching	Conmutación resistiva
RVS	Ramped Voltage Stress	Estrés con rampa de tensión
SBD	Soft BreakDown	Ruptura suave
SEM	Scanning Electron Microscope	Microscopio electrónico de barrido
SILC	Stress Induced Leakage Current	Estrés inducido por corrientes de fuga
SMU	Source Measurement Unit	Unidades de medición de fuente
SPA	Semiconductor Parameter Analyzer	Analizador de parámetros de semiconductores
TCM	TermoChemical Mechanism	Mecanismo termoquímico
TDCM	Time Dependent Clustering Model	Modelo de agrupación dependiente del tiempo

ACRÓNIMOS

ACRÓNIMO	ORIGEN	TRADUCCIÓN
TDDB	Time Dependent Dielectric Breakdown	Ruptura dieléctrica dependiente del tiempo
TEM	Transmission Electron Microscope	Microscopio electrónico de transmisión
UAB	Universitat Autònoma de Barcelona	Universidad autónoma de Barcelona
VCM	Valence Change Mechanism	Mecanismo de cambio de valencia

Publicaciones

Compendio de publicaciones incluidas en esta tesis

- i. **J. Muñoz-Gorriz**, S. Monaghan, K. Cherkaoui, J. Suñé, P. K. Hurley, E. Miranda, “Exploratory study and application of the angular wavelet analysis for assessing the spatial distribution of breakdown spots in Pt/HfO₂/Pt structures”, *J. App. Phys.*, vol. 122, no. 21, p. 215304, 2017.
- ii. **J. Muñoz-Gorriz**, S. Monaghan, K. Cherkaoui, J. Suñé, P. K. Hurley, E. Miranda, “Characterization of the failure site distribution in MIM devices using zoomed wavelet analysis”, *J. Electron. Mater.*, vol. 47, no. 9, pp. 5033-5038, 2018.
- iii. **J. Muñoz-Gorriz**, D. Blachier, G. Reibold, F. Campabadal, J. Suñé, S. Monaghan, K. Cherkaoui, P. K. Hurley, E. Miranda, “Assessing the correlation between location and size of catastrophic breakdown events in high-K MIM capacitors”, *IEEE Trans. Device Mater. Rel.*, vol. 19, no. 2, pp. 452-460, 2019.
- iv. **J. Muñoz-Gorriz**, S. Monaghan, K. Cherkaoui, J. Suñé, P. K. Hurley, E. Miranda, “Detection of inhibitory effects in the generation of breakdown spots in HfO₂-based MIM devices”, *Microelectron. Eng.*, vol. 215, p. 111023, 2019.
- v. **J. Muñoz-Gorriz**, M. B. González, E. Miranda, J. Suñé, F. Campabadal, “Impact of the forming and cycling processes on the electrical and physical

degradation characteristics of HfO₂-based resistive switching devices”, *Thin Solid Films*, vol. 706, p. 138027, 2020.

- vi. **J. Muñoz-Gorriz**, M. B. González, F. Campabadal, J. Suñé, E. Miranda, “Analysis of the successive breakdown statistics of multilayer Al₂O₃/HfO₂ gate stacks using the time-dependent clustering model”, *Microelectron. Reliab.*, vol. 114, p. 113748, 2020.
- vii. **J. Muñoz-Gorriz**, M. B. González, F. Campabadal, J. Suñé, E. Miranda, “Application of the clustering model to time-correlated oxide breakdown events in multilevel antifuse memory cells”, *IEEE Electr Device L.*, vol. 41, no. 12, pp. 1770-1773, 2020.

Otras publicaciones

- i. **J. Muñoz-Gorriz**, M. C. Acero, M. B. Gonzalez, F. Campabadal, “Top electrode dependence of the resistive switching behavior in HfO₂/n⁺Si-based devices.”, IEEE Conference Proceedings in 11th *Spanish Conference on electron devices (CDE)*, 2017.
- ii. **J. Muñoz-Gorriz**, S. Monaghan, K. Cherkaoui, J. Suñé, P. K. Hurley, E. Miranda, “Spatial analysis of failure in large area MIM capacitors using wavelets”, *Microelectron. Eng.*, vol. 178, pp. 10-16, 2017.
- iii. A. Rodriguez-Fernandez, **J. Muñoz-Gorriz**, J. Suñé, E. Miranda, “A new method for estimating the conductive filament temperature in OxRAM devices based on escape theory”, *Microelectron. Reliab.*, vol. 88, pp. 142-146, 2018.
- iv. S. Petzold, E. Miranda, S. U. Sharath, **J. Muñoz-Gorriz**, T. Vogel, E. Piro, N. Kaiser, R. Elihardt, A. Zintler, L. Molina-Luna, J. Suñé, L. Alff, “Analysis and simulation of the multiple resistive switching modes occurring in HfO_x-based resistive switching random access memories using memdiodes”, *J. App. Phys.*, vol. 125, no. 23, p. 234503, 2019.
- v. E. Miranda, **J. Muñoz-Gorriz**, J. Suñé, K. Fröhlich, “SPICE model for the current-voltage characteristic of resistive switching devices including the snapback effect”, *Microelectron. Eng.*, vol. 215, p. 110998, 2019.
- vi. E. Miranda, A. Morell, **J. Muñoz-Gorriz**, J. Suñé, “Simple method for monitoring the switching activity in memristive cross-point arrays with line resistance effects”, *Microelectron. Reliab.*, vol. 100, p. 113327, 2019.

Contribuciones a conferencias

- i. **J. Muñoz-Gorriz**, M. C. Acero, M. B. Gonzalez, F. Campabadal, “Top electrode dependence of the resistive switching behavior in $\text{HfO}_2/\text{n}^+\text{Si}$ -based devices.”, 11th Spanish Conference on Electron Devices (CDE 2017), Barcelona, Spain, February 2017.
- ii. **J. Muñoz-Gorriz**, S. Monaghan, K. Cherkaoui, J. Suñé, P. K. Hurley, E. Miranda, “Spatial analysis of failure in large area MIM capacitors”, 20th Conference on Insulating Films on Semiconductors (INFOS 2017), Potsdam, Germany, June 2017.
- iii. **J. Muñoz-Gorriz**, J. Suñé, E. Miranda, S. Monaghan, K. Cherkaoui, P. K. Hurley, “Exploring the breakdown spot spatial distribution in metal-insulator-metal capacitors using the wavelets method”, 17th Conference on Defects-Recognition, Imaging and Physics in Semiconductors (DRIP 2017), Valladolid, Spain, October 2017.
- iv. **J. Muñoz-Gorriz**, M. C. Acero, M. B. Gonzalez, F. Campabadal, E. Miranda, J. Suñé, “Effect of the resistive switching cycling on the physical characteristics of $\text{Ni}/\text{HfO}_2/\text{n}^+\text{Si}$ RRAM devices”, First International Conference on Microelectronic Devices and Technologies (MicDAT 2018), Castelldefels, Spain, June 2018.
- v. A. Rodriguez-Fernandez, **J. Muñoz-Gorriz**, J. Suñé, E. Miranda, “A new method for estimating the conductive filament temperature in OxRRAM devices based on escape rate theory”, 29th European Symposium on Reliability of electron Devices, Failure Physics and Analysis (ESREF 2018), Aalborg, Denmark. October 2018.
- vi. **J. Muñoz-Gorriz**, M. C. Acero, M. B. Gonzalez, E. Miranda, J. Suñé, F. Campabadal, “Physical degradation of $\text{Ni}/\text{HfO}_2/\text{n}^+\text{Si}$ resistive switching devices caused by unipolar cycling effects”, 12th Spanish Conference on Electron Devices (CDE 2018), Salamanca, Spain, November 2018.
- vii. **J. Muñoz-Gorriz**, S. Monaghan, K. Cherkaoui, J. Suñé, P. K. Hurley, E. Miranda, “Detection of inhibitory effects in the generation of breakdown spots in HfO_2 -based MIM devices”, 21th Conference on Insulating Films on Semiconductors (INFOS2019), Cambridge, UK, July 2019.
- viii. E. Miranda, **J. Muñoz-Gorriz**, M. B. Gonzalez, F. Campabadal, J. Suñé, “A thorough investigation of the breakdown time statistics of $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2$ -based nanolaminate MIS structures”, 27th IEEE International Symposium on the

Physical and Failure Analysis of Integrated Circuits (IPFA 2020), Singapore, July 2020. *E-proceedings*.

- ix. **J. Muñoz-Gorriz**, M. B. Gonzalez, F. Campabadal, J. Suñé, E. Miranda, “Analysis of the successive breakdown statistics of multilayer Al₂O₃/HfO₂ gate stacks using the time-dependent clustering model”, 31th European Symposium on Reliability of electron Devices, Failure Physics and Analysis (ESREF 2020), Athens, Greece, October 2020. *Online conference*.

Presentación

EL objetivo principal de esta tesis doctoral es, tal y como indica su título, estudiar la generación de filamentos conductores (CF) en dispositivos metal-aislante-semiconductor (MIS) y metal-aislante-metal (MIM) basados en HfO_2 . Es decir, consiste en evaluar el fenómeno de la ruptura dieléctrica en estos dispositivos. Como su propio nombre sugiere, la ruptura dieléctrica, supone la pérdida de las propiedades conductivas de estos materiales y, su aparición, se debe a la generación de un CF en el interior del dieléctrico después de estar sometido a un estrés eléctrico excesivamente elevado o prolongado en el tiempo. Si bien este fenómeno no es deseado, su estudio nos permite conocer las propiedades y límites de nuestros materiales dieléctricos y, a su vez, nos puede indicar el camino a seguir para evitar su aparición en dispositivos electrónicos. Por ello, el estudio de la fiabilidad de los dispositivos y del origen de la ruptura dieléctrica es muy importante tanto desde el punto de vista de la industria, para fabricar dispositivos de mayor calidad, como el de la investigación.

La ruptura dieléctrica y la generación de CF ha sido, y sigue siendo hoy en día, un tema de alta importancia en el mundo de la ciencia y de la industria, no solo por sus repercusiones (degradación de los dispositivos, pérdida de las propiedades originales...), sino por las posibles aplicaciones que surgen de ella (conmutación resistiva, memorias multinivel...). Por ello, en esta tesis se ha evaluado este fenómeno

en HfO₂, el cual es uno de los óxidos de alta permitividad (*high-K*) más prometedores –utilizado actualmente en la industria– para la fabricación de dispositivos electrónicos.

Esta tesis doctoral está escrita por compendio de publicaciones, es decir, que gran parte de la investigación realizada y de los resultados obtenidos se encuentran recogidos en los artículos expuestos en el [Anexo I](#). Básicamente, esta tesis recoge parte de los resultados publicados y se complementan con análisis y datos que no han sido mostrados ni discutidos en ninguna revista. Con el fin estructurar de manera lógica el trabajo y la discusión de los resultados, la tesis está dividida en los siguientes capítulos:

Capítulo 1. En este capítulo se realiza una introducción extensa y general sobre la ruptura dieléctrica. Se describe la importancia del fenómeno y de su estudio, así como los conceptos más comunes que se utilizan a la hora de analizarlo. Se introduce el modelo de Weibull y de Poisson, y se describe su vinculación con el fenómeno a través del modelo percolativo. A su vez, también se exponen los cambios físicos y eléctricos que supone la generación del CF en los dispositivos.

Capítulo 2. Este primer capítulo experimental se centra en el estudio de los cambios físicos que produce tanto la ruptura dieléctrica como la RS en estructuras Ni/HfO₂/n⁺Si. Se evalúa el impacto que tiene tanto la polaridad, el límite de corriente, el número de ciclos y el espesor del dieléctrico en el daño inducido por la ruptura en la intercara de Ni/HfO₂. En este capítulo, se expanden los resultados y conclusiones discutidas en [\[TSF 2020\]](#) agregando nuevos datos que no fueron publicados.

Capítulo 3. En este capítulo se presenta el análisis estadístico de los eventos de ruptura sucesivas, así como su modelado, en dispositivos multicapa basados en HfO₂/Al₂O₃ (Ni/penta-nanolaminado/p⁺Si). Estos dispositivos presentan una ruptura dieléctrica no homogénea, es decir, que las distribuciones de sus tiempos de ruptura no siguen la tendencia descrita por el modelo de Weibull. Inicialmente se busca el mejor modelo y se consigue reproducir los eventos sucesivos con el modelo de *clustering* considerando que los eventos están no correlacionados [\[MR 2020\]](#). Posteriormente se analiza el retraso observado entre el modelo y las distribuciones experimentales a partir de la 10.^a ruptura, y se consigue reproducir el retraso utilizando un ajuste semiempírico [\[EDL 2020\]](#).

Capítulo 4. En este capítulo se realiza un análisis estadístico de la distribución espacial de los eventos de ruptura, así como de la correlación de la localización con el daño inducido en dispositivos Pt/HfO₂/Pt que presentan múltiples eventos

de ruptura. Parte de los resultados de este capítulo están presentados en los artículos [JAP 2017, JEM 2018, ME 2019, TDMR 2019]. Además, se amplían las conclusiones de los artículos con nuevos análisis y se discuten nuevos resultados que no están tratados en las publicaciones. El capítulo se divide en tres secciones. Primero se evalúa la localización de los eventos y se trata de simular su distribución; posteriormente se caracteriza efectos de correlación y la velocidad de generación de los eventos; y, finalmente, se analizan los efectos espaciales observados en dispositivos quemados.

Capítulo 5. En este último capítulo se realiza una reflexión final de la investigación realizada y se recogen las conclusiones más relevantes. Además, también se discute, muy brevemente, las posibles nuevas líneas de investigación que pueden partir del trabajo realizado.

Hay que destacar que, si bien ya hay un capítulo introductorio (**Capítulo 1**), dado que todos los capítulos experimentales (**Capítulo 2**, **Capítulo 3** y **Capítulo 4**) se focalizan en un aspecto muy concreto de la ruptura dieléctrica, cada uno de ellos presenta una introducción específica al tema que tratan, lo que permite no abordarlos en profundidad en el capítulo introductorio.

Este trabajo de investigación se ha realizado en el grupo de investigación de *Nanoelectrónica Computacional* del Departamento de ingeniería electrónica de la Universidad Autónoma de Barcelona (UAB) en colaboración con otros centros de investigación como el *Institut de Microelectrónica de Barcelona (IMB-CNM)*, el *Tyndall National Institute* (Irlanda) y el *Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives – Laboratoire d'électronique des technologies de l'information (CEA-Leti)* (Francia). A su vez, la realización de esta tesis ha sido posible gracias a la financiación, tanto directa como indirecta, de diferentes proyectos tanto nacionales como internacionales. En algunos casos esta financiación era principalmente económica mientras que en otros casos permitió la colaboración con los grupos previamente mencionados, habilitando el acceso a sus laboratorios:

PANACHE [*Pilot line for Advanced Nonvolatile memory technologies for Automotive microControllers, High security applications and general Electronica*]. Comisión Europea. 2013 – 2017.

WAKeMeUP [*Wafers for Automotive and other Key applications using Memories, embedded in ULSI Processors*]. Electronic components and systems for European leadership joint undertaking – European Union. 2017.

Fabrication, characterization, simulation, modelling and applications of resistive switching devices (TEC2017-84321-C4-1-R y TEC2017-84321-C4-4-

-R). Ministerio de ciencia, innovación y universidades (España) y Fondo Europeo de desarrollo regional. 2017-2020.

EU ASCENT *project* (Referencia nº 30 y nº 134). Unión Europea.

- **Ref. 30** (Acceso a los laboratorios del *Tyndall National Institute*, Dr. Enrique Miranda) → Caracterización eléctrica de los dispositivos MIM, así como la caracterización óptica de la generación de eventos de ruptura en el electrodo superior de estos dispositivos.
- **Ref. 134** (Acceso a los laboratorios de CEA-Leti, Estudiante Jordi Muñoz Gorriz) → Caracterización de la generación de los eventos de ruptura en los dispositivos MIM utilizando una cámara térmica de rayos infrarrojos.

Capítulo 1

Degradación y ruptura dieléctrica

CUANDO se habla de la degradación y de la ruptura (BD) dieléctrica de un material, uno puede fácilmente deducir que ambos fenómenos no suponen algo positivo para el correcto funcionamiento del dispositivo electrónico en el que suceden. Mientras que la degradación implica una alteración de las características eléctricas iniciales de los dispositivos, la ruptura dieléctrica supone una destrucción parcial o completa de las propiedades conductoras de los mismos [1]–[5]. Sin ir más lejos, la ruptura no es más que la fase final de un proceso de degradación. El interés que hay en investigar y entender los procesos de degradación y, especialmente, el fenómeno de la ruptura dieléctrica está intrínsecamente vinculado al auge de los transistores de efecto de campo metal-óxido-semiconductor, más comúnmente conocidos como MOSFETs. Estos dispositivos son el corazón de la industria microelectrónica y la columna vertebral en la fabricación de microprocesadores, por lo que asegurar su buen funcionamiento es altamente prioritario. Precisamente por ello, la ruptura dieléctrica es un tema de alto interés científico y técnico, ya que es el mecanismo de fallo más común que pueden presentar los MOSFETs. No solo comprometiéndolos sus características eléctricas, sino que incluso puede llegar a suponer la pérdida completa de alguna de las funcionalidades de un microprocesador.

La ruptura dieléctrica no es más que un fenómeno que tiene lugar cuando un material dieléctrico o aislante es sometido a un campo eléctrico. Ya sea, o porque el

campo es muy elevado o porque ha estado aplicado durante mucho tiempo, el material pierde por completo sus propiedades conductoras iniciales. Un buen ejemplo de este fenómeno serían los relámpagos eléctricos, ya que estos aparecen cuando se produce la ruptura dieléctrica del aire [2]. Tal y como se muestra en la **Fig. 1.1**, se puede considerar que las nubes, el aire y la tierra forman una estructura electrónica en donde el aire es el material dieléctrico mientras que las nubes y la tierra actúan como electrodos conductivos. Durante las tormentas eléctricas, las nubes van acumulando, poco a poco, una carga eléctrica que no pueden liberar debido a que están rodeadas de aire (aislante). Esta carga genera una diferencia de potencial entre las nubes y la tierra que va aumentando a medida que las nubes se van cargando. En el momento en el que esta diferencia alcanza un valor crítico, se produce la ruptura dieléctrica del aire. Esto genera una descarga eléctrica de las nubes hacia la tierra, o viceversa, que se manifiesta como un destello de luz que dura un instante y que puede presentar múltiples ramificaciones. En este caso, y a diferencia de lo que ocurre con los dispositivos electrónicos, al tratarse de un gas, una vez producida la ruptura el aire es capaz de recuperar sus propiedades aislantes.

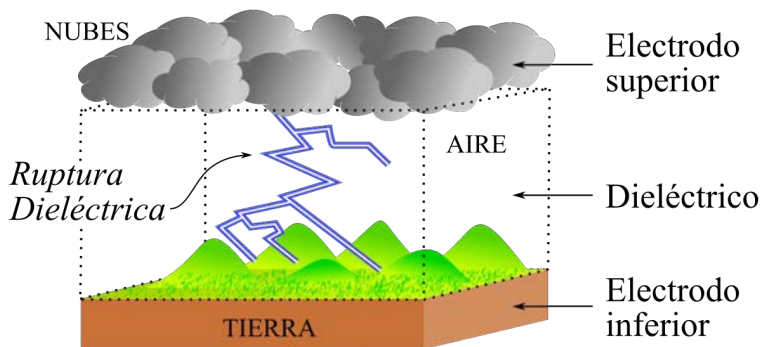


Fig. 1.1: Representación esquemática de la generación de un relámpago. Durante este proceso, se forma el sistema nubes/aire/tierra en donde las nubes y la tierra actúan como electrodos conductivos y el aire como material dieléctrico.

En el contexto de esta tesis, la ruptura dieléctrica juega un papel central y protagonista. Es decir, todos y cada uno de los procesos que se han estudiado giran en torno a este fenómeno. Por ello, en este capítulo, se introducirán todos los elementos básicos para entender la importancia que tiene el estudio la ruptura dieléctrica. Empezando por una breve explicación del dispositivo MOSFET, se dará una definición acerca de en qué consiste la degradación y la ruptura dieléctrica, se expondrán los métodos que se utilizan para caracterizarla y analizarla, y se enseñarán varios de los cambios físicos que este fenómeno puede ocasionar en los dispositivos.

1.1. Introducción

Para poder centrarnos en mayor detalle en las estructuras analizadas a lo largo de toda esta tesis, es necesario discutir y comprender algunos conceptos fundamentales relacionados con la tecnología MOSFET. Principalmente hay que entender las dificultades y limitaciones físicas que han ido surgiendo a lo largo de los años, así como las soluciones que la industria ha ido proponiendo para poder seguir escalándolos a dimensiones más pequeñas. A su vez, hay que tener en cuenta que, pese a que no evaluamos MOSFETs, el estudio de la ruptura dieléctrica en estructuras capacitivas es perfectamente válido para conocer la fiabilidad y características de los materiales dieléctricos.

1.1.1. Dispositivo MOSFET

Es muy importante entender que, sin el transistor MOSFET, no se comprendería la sociedad tan sumamente digitalizada en la que vivimos. Hoy en día, cualquier dispositivo electrónico que se precie tiene, en mayor o menor medida, un conjunto de estos transistores que permiten que el dispositivo desarrolle su función. Este pequeño dispositivo, tan ampliamente investigado desde su creación en el 1960, no es más que un interruptor controlado por tensión y, por muy sencillo que parezca su concepto, es el corazón y cerebro de la industria de la microelectrónica.

El MOSFET es un dispositivo basado en una estructura metal-óxido-semiconductor (MOS) cuyo semiconductor está dopado, ya sea con impurezas donadoras (tipo n) o aceptoras (tipo p). Además, dos regiones del semiconductor que se encuentran cerca del óxido presentan un dopaje muy elevado de impurezas del tipo opuesto a las que hay en el semiconductor, tal y como se ilustra en la [Fig. 1.2a](#). El MOSFET consta de cuatro terminales, cada uno con una tensión característica:

Puerta (V_G) → Electrodo superior de la estructura MOS.

Sustrato (V_B) → Terminal conectado al semiconductor.

Fuente (V_S) → Uno de los terminales conectado a una de las regiones de alto dopaje del semiconductor. Es el proporciona las cargas (huecos o electrones) que producen la corriente cuando se genera el camino conductor.

Drenador (V_D) → Terminal que se conecta a la otra región de alto dopaje. Recoge las cargas administradas por la fuente.

La principal característica del MOSFET es que la corriente entre la fuente y el drenador (I_{DS}) está directamente controlada por la diferencia de tensión entre la puerta y el sustrato (V_{GB}), debido a la formación de una región conductora en la intercara del

sustrato con el óxido. Este camino conductor está formado por las cargas minoritarias del sustrato y, por ello, se pueden diferenciar dos tipos de MOSFETs:

Transistores tipo n (Fig. 1.2b) → Los electrones son la carga minoritaria y son los que forman el camino conductor.

Transistores tipo p (Fig. 1.2c) → Los huecos son la carga minoritaria y son los que forman el camino conductor.

Nótese que, en ambos tipos de transistor, hace falta aplicar una V_{GB} mínima, denominada tensión umbral (V_{th}), para así atraer a la intercara la cantidad de portadores necesaria para formar este camino conductor. Una vez formado el camino, al aplicar una diferencia de tensión entre el drenador y la fuente, es posible obtener un valor de I_{DS} (Fig. 1.3). Como se puede observar, en el régimen de saturación, I_{DS} se vuelve constante y su valor está determinado por V_{GB} . Esta característica hace que los MOSFET actúen como limitadores de corriente, permitiendo la integración de esta funcionalidad en cualquier tipo de circuito.

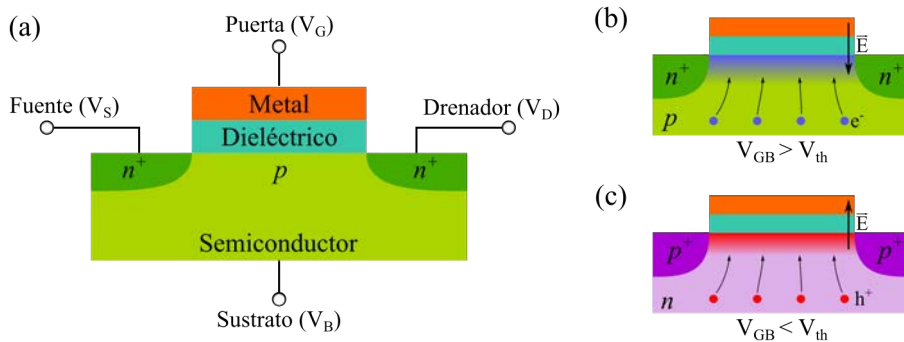


Fig. 1.2: (a) Representación de la estructura de un dispositivo MOSFET con un sustrato tipo p y regiones con una alta concentración de impurezas tipo n (n^+). Formación del camino conductor entre la fuente y el drenador en un MOSFET (b) tipo n y (c) tipo p .

En el MOSFET, el óxido de puerta actúa como un material aislante, haciendo de barrera entre el semiconductor y el metal, evitando que las cargas minoritarias viajen desde el sustrato hasta el electrodo metálico. La ruptura dieléctrica de este material permite que las cargas puedan viajar hacia dicho electrodo, alterando la formación del camino conductor entre fuente y drenador, es decir, afectando a la principal característica del MOSFET. Es por este motivo que la ruptura dieléctrica es uno de los mecanismos de fallo más estudiados en estos dispositivos, no solo por lo que supone sino porque a su vez es uno de los más comunes. Con el fin de reducir la degradación, mediante la limitación de las corrientes de fuga; y la aparición de la ruptura, el óxido tiene que ser lo suficientemente robusto como para soportar campos

eléctricos durante largos periodos de tiempo. Por ello interesa el uso de óxidos de espesor considerable. Sin embargo, por otro lado, es necesario asegurar un efecto capacitivo elevado para evitar el uso de tensiones excesivamente elevadas, lo que implica utilizar óxidos de grosor reducido:

$$C_{ox} = K \cdot \epsilon_0 \cdot \frac{A_{ox}}{T_{ox}} \quad (1.1)$$

en donde C_{ox} es la capacidad del óxido, K es su constante dieléctrica, ϵ_0 es la permitividad del vacío, A_{ox} es el área de la capacidad y T_{ox} el espesor del óxido.

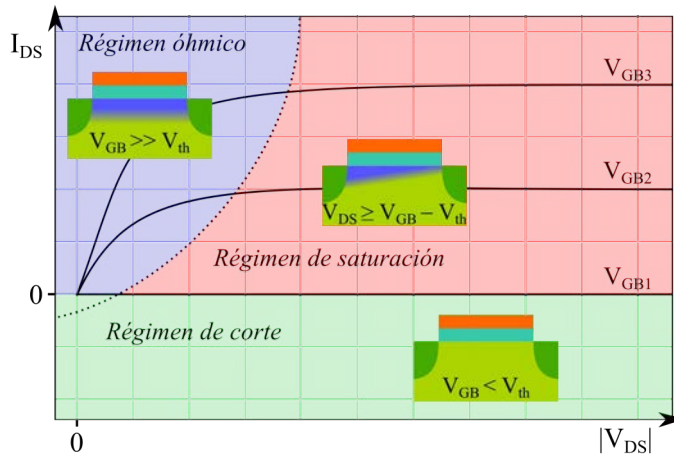


Fig. 1.3: Representación esquemática de la característica $V_{DS} - I_{DS}$ de un MOSFET tipo n para diferentes tensiones de puerta ($V_{GB1} < V_{th} < V_{GB2} < V_{GB3}$). Las estructuras representan el estado del MOSFET para cada uno de los tres modos de comportamiento del MOSFET: régimen de corte, el transistor actúa como un interrupto abierto; régimen óhmico, se comporta como una resistencia; y régimen de saturación, actúa como un limitador.

Desde el primer momento en que la industria comenzó a trabajar con este dispositivo, el silicio (Si) sigue siendo el semiconductor estándar para la fabricación de transistores. Por otro lado, el material utilizado tanto para el electrodo superior como para el óxido han ido evolucionando y cambiando debido a la necesidad, por parte de la sociedad, de dispositivos más rápidos y eficientes, tal y como se trata en la Secc. 1.1.2. Desde los orígenes de la industria de microelectrónica basada en Si a principios de los años 70 y hasta los primeros compases del siglo XXI, el óxido de puerta por excelencia para la fabricación de los MOSFETs ha sido el óxido de silicio (SiO_2) [2]. No solo por sus excelentes características como aislante sino además por su alta compatibilidad con el Si y su fácil fabricación. Sin embargo, cómo se ha mencionado, el continuo escalado de los dispositivos ha supuesto que este óxido deje de ser viable cómo barrera entre el electrodo metálico y el sustrato.

1.1.2. Escalado y dieléctricos *high-K*

En 1965, el cofundador de Intel, Gordon E. Moore, evaluó la evolución del número de transistores en ICs y predijo que la tendencia observada se mantendría durante al menos 10 años más: *“Over the longer term, the rate of increase is a bit more uncertain, although there is no reason to believe it will not remain nearly constant for at least 10 years”* [6]. Sorprendentemente, no solo no se equivocó en su predicción, sino que la industria ha seguido la misma tendencia durante más de medio siglo. A esta tendencia, que no deja de ser una extrapolación de datos empíricos, se le conoce como ley de Moore, según la cual la cantidad de transistores que se definen en un área determinada se duplica cada 24 meses. Si bien esta regla no siempre se cumple, la ley de Moore refleja la evolución tan sorprendente y agresiva que ha sufrido la industria de la microelectrónica en su corta vida (Fig. 1.4).

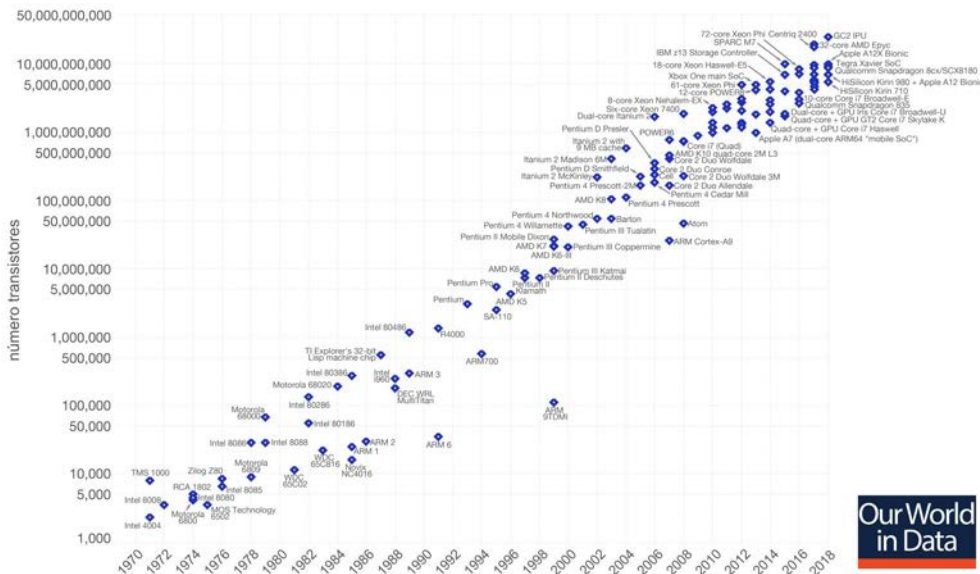


Fig. 1.4: Representación de la evolución del número de transistores presentes en un microprocesador desde el 1971 hasta el 2018 [7]. La tendencia que se observa es que, aproximadamente, cada 2 años se dobla el número de transistores, en acuerdo con la ley de Moore.

El auge de la microelectrónica, sumado a la demanda de la sociedad por dispositivos más pequeños y con una mayor capacidad de procesamiento, así como el afán de la industria de seguir la tendencia descrita por la ley de Moore ha hecho que el tamaño de los dispositivos se reduzca a un ritmo fuera de lo común. Considerando únicamente el MOSFET, su escalado solo tiene que suponer una reducción de sus dimensiones a la vez que se mantienen sus propiedades conductoras lo más intactas

posible. En la **Fig. 1.5** se muestra el impacto que tiene el escalado de la área del óxido en las dimensiones de una estructura MOS.

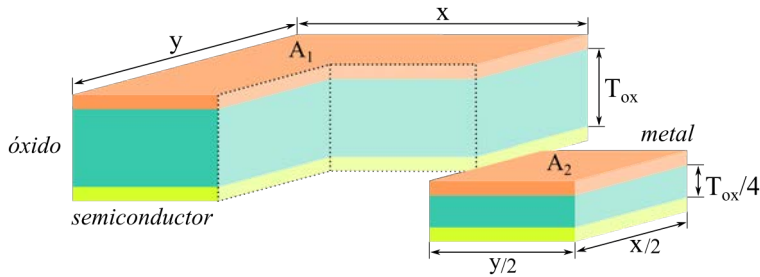


Fig. 1.5: Efecto del escalado de un dispositivo al mantener su valor capacitivo. Al reducir las dimensiones laterales (x, y) a la mitad, T_{ox} se tiene que reducir un cuarto para mantener constante el valor de C_{ox} .

Uno de los mayores problemas derivados del escalado es la aparición de corrientes de fuga a través del dieléctrico debido al efecto túnel. Al reducir el grosor del óxido, hay un momento en que los electrones, dada a su naturaleza cuántica, son capaces de superar la barrera que este representa entre el sustrato y la puerta, a pesar de que la energía de estos no sea la suficiente como para que esto ocurra. A este fenómeno se le conoce como efecto túnel y permite la generación de una corriente entre el semiconductor y el metal de la estructura MOS que acelera el proceso de degradación del óxido. La principal característica de esta corriente es que su valor se incrementa exponencialmente al disminuir el espesor del óxido. Si bien esta característica ha permitido desarrollar poderosísimas técnicas de caracterización, como la microscopía de efecto túnel, en el caso del escalado de los MOSFET supone un problema muy serio, ya que fácilmente puede impedir la formación del canal conductor.

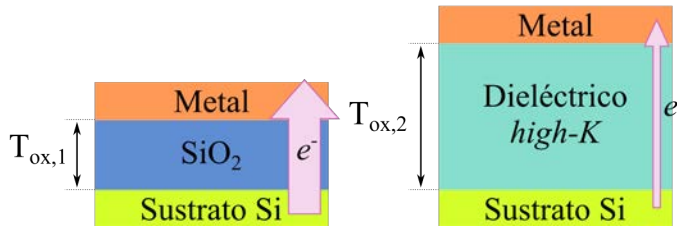


Fig. 1.6: Representación de cómo el uso de un dieléctrico *high-K* permite obtener el mismo valor de C_{ox} que cuando se utiliza SiO_2 para un mayor valor de T_{ox} . Al incrementar T_{ox} se consigue reducir considerablemente las corrientes de fuga, representado por e^- .

Pese a los esfuerzos de los investigadores y de la propia industria microelectrónica por mantener el SiO_2 como óxido de puerta, al llegar a espesores por debajo de los nanómetros, el efecto túnel es tan elevado que la corriente a través del SiO_2 es prácticamente incontrolable, haciendo inviable este material como óxido de puerta. Esta situación forzó la búsqueda de nuevos materiales que pudiesen substituir el SiO_2

y que, a su vez, redujeran la corriente de fuga a través del óxido. La solución fue la introducción de materiales dieléctricos con una constante dieléctrica elevada, denominados materiales *high-K* (Fig. 1.6). Debido a que la K está dividida por T_{ox} en la expresión de C_{ox} ((1.1)), el incremento de K supone un aumento del valor de T_{ox} si se quiere mantener constante el valor de C_{ox} . A su vez, al incrementar T_{ox} , se consigue reducir la corriente de fuga a través del óxido ya que, como se ha mencionado, el efecto túnel depende exponencialmente de T_{ox} .

Pese a que el concepto es sencillo, la incorporación de los materiales *high-K* en los transistores no fue sencilla. A diferencia del SiO_2 , que es químicamente estable con el sustrato de Si y la puerta de poli-Si, los dieléctricos *high-K* son más inestables con estos materiales, pudiendo reaccionar fácilmente con estos, generando enlaces defectuosos en las intercaras. De entre las diferentes mejoras que se introdujeron para la incorporación de dieléctricos y estabilizar la capa de material *high-K* destacan [2]:

Incorporación de un electrodo metálico → Como puerta del transistor, sustituyendo al poli-Si.

Crecimiento de una capa delgada de SiO_2 → Entre el sustrato de Si y el dieléctrico *high-K*.

Pese a estos cambios, no cualquier dieléctrico *high-K* se puede utilizar en la fabricación de dispositivos MOSFETs. A parte de que tiene que ser un material estable, también es necesario que sea compatible con los procesos CMOS utilizados para la fabricación de los transistores. El mayor obstáculo son los procesos térmicos, en donde se pueden alcanzar temperaturas de hasta 1000 °C, que fácilmente pueden deformar la estructura cristalina de un material, haciendo que pierda su homogeneidad y, por ende, generándose defectos en su interior.

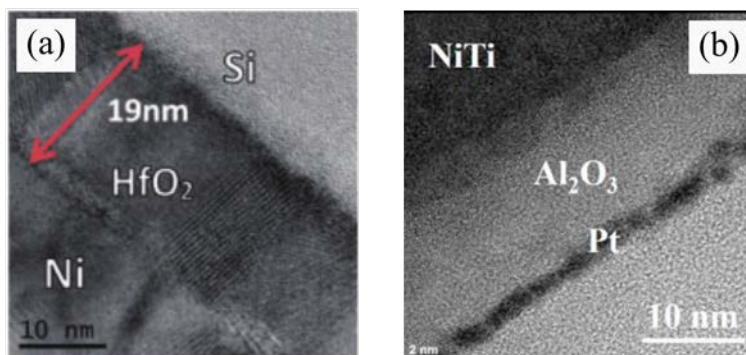


Fig. 1.7: Imágenes TEM de estructuras basadas (a) en HfO_2 [8] y (b) en Al_2O_3 [9].

Entre todos los materiales *high-K* investigados para definir el óxido de puerta, hoy en día los óxidos más prometedores son el óxido de hafnio (HfO_2) (**Fig. 1.7a**) y la alúmina (Al_2O_3) (**Fig. 1.7b**), ambos con sus respectivas cualidades, ventajas y desventajas. En lo que respecta a esta tesis, el HfO_2 es el que despierta más interés, no solo por sus propiedades como dieléctrico *high-K* –factor que lo postula como un óptimo material para la fabricación de transistores– sino porque a su vez es uno de los mejores para la fabricación de memorias no volátiles basadas en el fenómeno de la conmutación resistiva (RS) [**TSF 2020**] (ver **Capítulo 2**). Entre sus cualidades destacan:

Elevada temperatura de fusión → Permite que el HfO_2 sea compatible con los procesos CMOS.

Valor elevado de K → Puede oscilar entre 2 y 25, según la estructura cristalina del HfO_2 .

Estable químicamente con el Si → Reduce la formación de defectos en la intercara.

Buenas características eléctricas → Ideal para la fabricación de dispositivos eléctricos.

Si bien lo usual en la fabricación de los MOSFETs es el uso de un único material como óxido de puerta, también se están realizando esfuerzos en el desarrollo y en la investigación de materiales multicapa –aislantes formados por un conjunto de capas de diferentes materiales superpuestas una encima de la otra–. La idea tras estos es la obtención de óxidos de puerta que combinen las mejores características de los diferentes materiales que los forman. Uno de estos materiales multicapa se evalúa en los artículos [**MR 2020**, **EDL 2020**], en donde el óxido está formado por capas de HfO_2 y Al_2O_3 (ver **Capítulo 3**).

1.1.3. Estructuras MIS/MIM

El análisis de la ruptura dieléctrica se suele realizar en unas estructuras que permiten evaluar de manera directa este fenómeno sin la necesidad de fabricar un MOSFET completo. Como se ha ido explicando, este fenómeno, afecta al óxido ubicado entre la capa metálica y el semiconductor, es decir, se produce en la estructura MOS del transistor. Si bien el movimiento de cargas entre el drenador y la fuente pueden llegar a afectar a la degradación del óxido [2], el campo eléctrico que se genera entre el sustrato y la puerta es que el más defectos produce en el interior del óxido –obviando cuestiones de electrones calientes–. Por ello, las estructuras de prueba no son más que capacidades compuestas por electrodos metálicos o semiconductores entre los cuales

se sitúa el dieléctrico que se quiere analizar. Las más estudiadas son la estructura metal-aislante-semiconductor (MIS) (**Fig. 1.8a**) y la metal-aislante-metal (MIM) (**Fig. 1.8b**). Las principales ventajas de estas estructuras son:

Fácil fabricación → Están formadas solo por tres materiales superpuestos uno encima del otro. La única complejidad es la definición de las áreas activas.

Baja dimensión → El espacio que ocupan es menor que el que requiere la fabricación de un MOSFET.

Bajo coste → Al ser más fáciles de fabricar y poder definir más dispositivos MIS/MIM que MOSFETs en una misma oblea, su coste unitario es mucho menor.

Pese a estas ventajas, hay que tener presente que solo podemos evaluar la degradación producida por el campo eléctrico inducido entre los electrodos. En el hipotético caso de que se quisiera evaluar la degradación asociada a la formación del camino conductor y al movimiento de cargas entre la fuente y el drenador, sería necesario la fabricación del MOSFET en cuestión. Es importante remarcar que las estructuras MIS, al incluir un semiconductor, permiten tener en cuenta el efecto que tiene el dopaje en la degradación. En contraposición, las estructuras MIM permiten analizar la ruptura sin tener en cuenta el sustrato semiconductor.

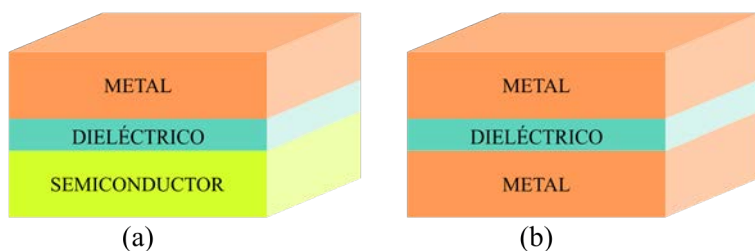


Fig. 1.8: Representación esquemática de una estructura (a) MIS y (b) MIM.

1.2. Dinámica de la degradación y de la ruptura

El proceso que hace que un dispositivo se degrade y que acabe alcanzado la ruptura dieléctrica es, conceptualmente, muy sencillo de entender. Tal y como se muestra en el diagrama (**Fig. 1.9**), la degradación en óxidos delgados comienza en el momento en el que se aplica un estrés eléctrico en el dieléctrico. Debido al grosor del material y la tensión aplicada, se genera una conducción por efecto túnel a través del óxido que poco a poco va produciendo diferentes defectos tanto en el interior como en las intercaras del óxido con los electrodos. A todo este proceso se le denomina fase de desgaste, ya que estos defectos van desmejorando, lentamente, las características del

dieléctrico y, en consecuencia, las del dispositivo. Finalmente, llega un momento en el que la acumulación de defectos produce un cortocircuito entre los dos electrodos que desencadena la ruptura dieléctrica. En este instante se detecta un incremento abrupto de la corriente que circula a través del dispositivo que indica la pérdida de las propiedades aislantes del material dieléctrico.

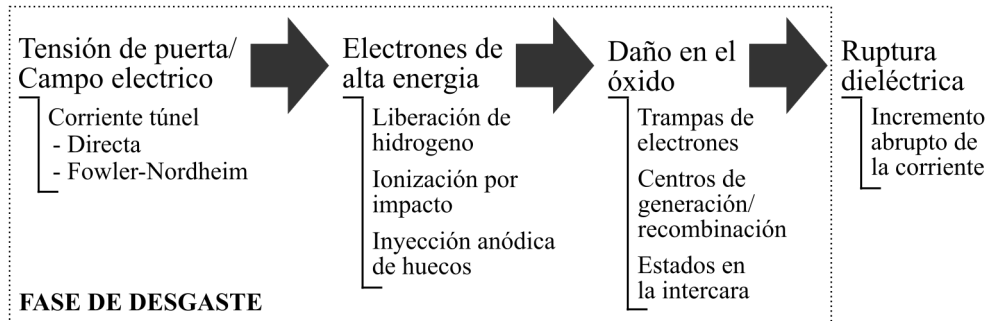


Fig. 1.9: Proceso de generación de defectos en el interior de un óxido delgado que acaba desencadenando la ruptura dieléctrica [1].

1.2.1. Generación de defectos y trampas

Al inicio de la fase de desgaste, la conducción del dispositivo está determinada por la conducción túnel de los electrones a través del dieléctrico (**Fig. 1.10a**), dando lugar a la corriente de fuga. El paso de estas cargas daña poco a poco el dieléctrico hasta que se empiezan a formar defectos conductivos tanto en su interior como en las intercaras. A partir de este momento, los electrones no solo atraviesan directamente el dieléctrico, sino que también lo hacen utilizando los defectos como plataformas de salto (**Fig. 1.10b**), dando lugar a la conducción túnel asistida por trampas [10]. Esta conducción, al ser más sencilla, es mucho mayor que la conducción túnel directa a través del óxido y, como es lógico, a mayor número de defectos, mayor es la corriente de fuga.

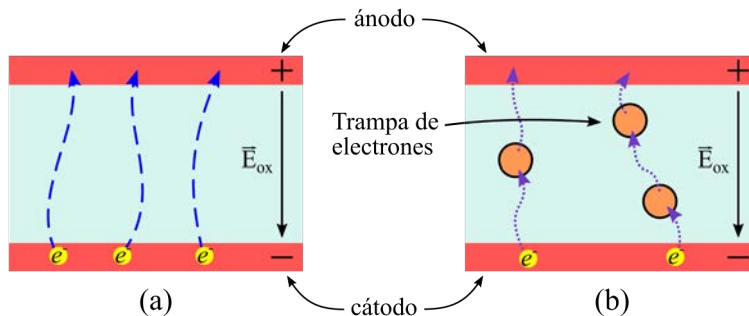


Fig. 1.10: Representación esquemática (a) de la conducción por efecto túnel a través del óxido y (b) de la conducción túnel asistida por trampas. Tanto en (a) como en (b) la conducción se da por igual en toda el área del dispositivo, siendo mayor en (b) que en (a).

A nivel eléctrico, lo que se observa durante esta fase es que la corriente va aumentando ligeramente mientras se aplica un campo eléctrico al dispositivo. A este proceso de degradación ocasionada por la conducción túnel y por la conducción asistida por trampas se le conoce como estrés inducido por corrientes de fuga (SILC). El análisis de la corriente SILC es muy importante ya que proporciona información sobre los mecanismos de degradación, así como de la naturaleza de los defectos en el interior del óxido. Sin embargo, hay que tener presente que estas técnicas solamente proporcionan datos cualitativos sobre los defectos. Una de las principales características de la corriente SILC, que diferencia la degradación de la ruptura dieléctrica, es su dependencia con el área del dispositivo ya que tanto la conducción túnel como la asistida por trampas se dan de manera homogénea en todo el dispositivo.

1.2.2. Formación del filamento conductor

A medida que se van generando más y más defectos en el óxido, las propiedades del dispositivo van empeorando hasta que llega un momento en que se alcanza una densidad crítica de defectos [11], momento en el que sucede la ruptura dieléctrica. Según el modelo percolativo [12], mundialmente aceptado como la mejor explicación de la ruptura dieléctrica, lo que realmente ocurre en este momento es que se forma un filamento conductor (CF) de defectos en el interior del óxido, el cual permite la circulación directa de electrones entre ambos electrodos (Fig. 1.11a). Debido al incremento abrupto de la corriente a través del CF (I_{CF}) y al efecto Joule,

$$P = \Delta V_{ox} \cdot I_{CF} \quad (1.2)$$

donde P es la potencia generada y ΔV_{ox} la diferencia de tensión aplicada al óxido, en el momento que se genera el CF, se produce la liberación de una alta cantidad de energía térmica que es capaz de fundir e incluso evaporar el óxido y los electrodos (Fig. 1.11a). Este proceso es tan agresivo que destruye localmente el dispositivo, formando una aleación de materiales que actúa como una resistencia y que modifica la conducción del óxido (Fig. 1.11b) [TSF 2020, EDL 2020].

Tanto en el instante en el que se genera el CF como después de que el dispositivo haya sido destruido por el proceso térmico, la conducción está completamente gobernada por este evento localizado, lo que significa que es independiente del área del óxido. Sin embargo, hay que tener en cuenta que muchas veces, especialmente para áreas pequeñas ($A_{ox} < 15 \times 15 \mu\text{m}^2$), este proceso afecta a todo el dispositivo. Finalmente, es importante destacar que, pese a que la ruptura dieléctrica se asocia a un proceso destructivo, no siempre supone un fallo absoluto. En algunos casos, solo modifica ligeramente las características conductivas del dispositivo sin llegar a

comprometer su función, motivo por el cual, la ruptura dieléctrica, sigue siendo un tema bajo discusión [MR 2020, EDL 2020].

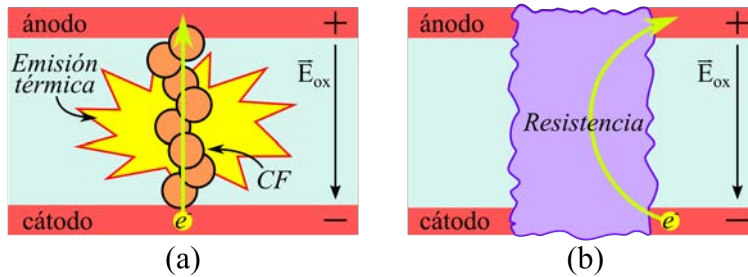


Fig. 1.11: Representación esquemática (a) de la formación de un filamento conductivo en el interior del óxido y (b) de la destrucción producida debido a una gran emisión de energía térmica por efecto Joule. La zona dañada en el óxido (b) actúa como una resistencia metálica de gran calor que es capaz de aguantar el flujo de electrones sin fundirse.

1.2.3. Modos de ruptura en óxidos delgados

Al investigar la ruptura dieléctrica en óxidos delgados se pueden discernir tres tipos de eventos:

La ruptura fuerte (HBD) → Incremento muy abrupto de la corriente. Induce un daño elevado en el dispositivo.

La ruptura suave (SBD) → Incremento abrupto de la corriente. Induce un daño moderado en el dispositivo.

La ruptura progresiva (PBD) → Incremento progresivo de la corriente. Se induce daño lentamente en el interior del dispositivo.

La principal diferencia entre estos tres modos es el daño que inducen en el dieléctrico y, por tanto, se suelen clasificar en base a la conducción que presenta el dispositivo después de la ruptura. La aparición de cualquiera de estos tipos de ruptura suele estar condicionado por las características del dispositivo —siendo T_{ox} la más determinante— y por el estrés eléctrico utilizado para producir la ruptura. Mientras que es habitual observar la HBD y la SBD en óxidos delgados, la PBD suele observarse más en óxidos ultradelgados [1]–[3], [5].

En la Fig. 1.12a se muestra la evolución de la corriente de fuga en un dispositivo mientras se aplica un estrés constante y puede observarse los tres modos de ruptura. Nótese que, tanto la HBD como la SBD manifiestan un incremento abrupto de la corriente, mientras que la PBD, como su propio nombre indica, se caracteriza por mostrar un incremento progresivo de la corriente. Hay que tener en cuenta que, tal y

como se indica en la **Fig. 1.12a**, la fase de desgaste (degradación asociada a la corriente SILC) es diferente a la PBD. Normalmente es sencillo distinguirlas debido a que muestran tendencias bastante diferenciadas. Por otro lado, la HBD se diferencia de la SBD por ser un evento mucho más agresivo (**Fig. 1.12a**) y por presentar una conducción lineal después de la ruptura (**Fig. 1.12b**); dado que la SBD suele exponer una conducción postBD con una tendencia exponencial (**Fig. 1.12b**). Es importante remarcar que, pese a lo mencionado, no existe un criterio universal que permita discernir una HBD y una SBD, por lo que la diferenciación entre estos dos modos puede resultar ser un proceso muy subjetivo. Finalmente, es importante destacar y dejar constancia que, centrándonos únicamente en la física detrás de estos eventos, tanto la HBD como la SBD se pueden considerar como diferentes manifestaciones de una PBD que, debido a su velocidad, no se puede registrar su carácter progresivo [2].

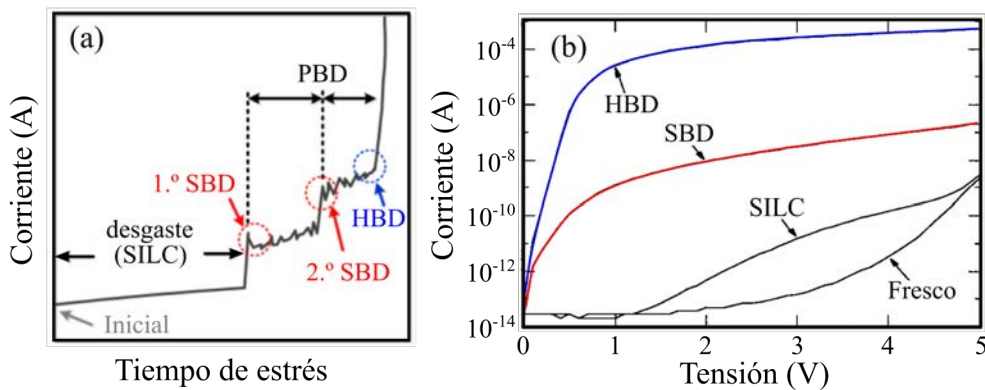


Fig. 1.12: Comportamiento típico de la corriente de fuga (en función del tiempo de estrés y (b) típica característica corriente-tensión de un condensador con un dieléctrico de 4.5 nm de grosor [3]. En (b) se realiza una comparación entre la corriente medida en el dispositivo sin estresar (fresco), después de estresar (SILC), después de una ruptura suave (SBD) y después de una ruptura fuerte (HBD) [5].

1.3. Caracterización de la ruptura dieléctrica

La caracterización de la ruptura dieléctrica pasa por ser capaces de someter al dispositivo a un estrés eléctrico a la vez que se mide su respuesta. Dado las bajas dimensiones de las estructuras MIS/MIM estudiadas –dispositivos con $A_{ox} < 1 \text{ mm}^2$ – el contacto eléctrico se tiene que realizar utilizando una mesa de puntas (**Fig. 1.13**). Como su propio nombre indica, esta mesa tiene una serie de puntas conductoras de dimensiones micrométricas que permiten conectar eléctricamente los dispositivos con los equipos de medida. A su vez, estas están unidas a unos microcontroladores que permiten desplazarlas tanto verticalmente como horizontalmente con una gran precisión. La mesa dispone de un microscopio óptico, que permite visualizar las

1.3. CARACTERIZACIÓN DE LA RUPTURA DIELÉCTRICA

puntas mientras se controlan, y de un soporte metálico (*chuck*), sobre el cual se deposita la oblea o la muestra que contiene los dispositivos que se quieren analizar. El *chuck*, al ser metálico, habilita una conexión eléctrica con el sustrato y, además, tiene una serie de orificios que permiten fijar la posición de la oblea/muestra durante toda la caracterización utilizando una bomba de vacío.

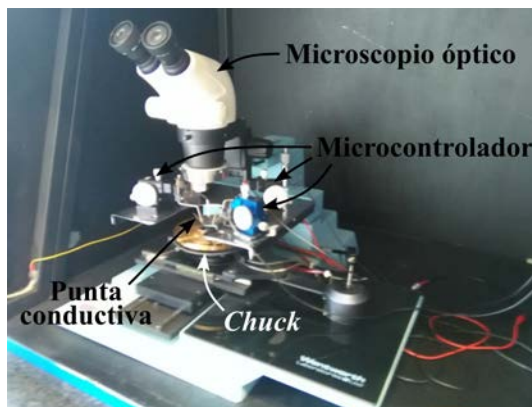


Fig. 1.13: Mesa de puntas que permite realizar los contactos eléctricos en los dispositivos.

Lo más típico para realizar la caracterización eléctrica de los dispositivos es utilizar un analizador de parámetros de semiconductores (SPA) con unidades de medición de fuente (SMUs) integrados (**Fig. 1.14a**). Estos permiten aplicar un estrés eléctrico a la vez que miden, simultáneamente, la tensión y la corriente del circuito. Para ser más específicos, en la **Fig. 1.14b** se muestra la configuración general utilizada para caracterizar las estructuras MIS/MIM estudiadas. Mientras que en el electrodo superior se aplica el estrés eléctrico deseado y se mide la respuesta del dispositivo; en el inferior (metal o semiconductor), se aplica 0 V, es decir, se deja fijo a tierra.

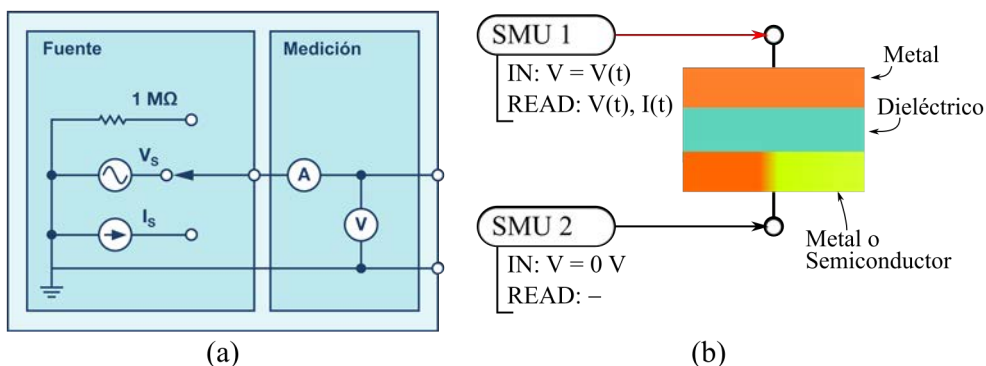


Fig. 1.14: (a) Diagrama de bloques de un canal SMU ADALM1000 [13]. (b) Representación de la configuración utilizada para caracterizar eléctricamente los dispositivos MIS/MIM. El estrés y la lectura se realiza en el electrodo superior mientras que el inferior está sometido a 0 V constantes.

Existen diferentes tipos de estreses eléctricos que se pueden utilizar para estudiar la ruptura dieléctrica, siendo los más típicos la rampa de tensión (RVS), la tensión constante (CVS), la corriente constante y la tensión pulsada. Cada tipo de estrés aporta información diferente sobre la ruptura y sobre otros fenómenos presentes en los dispositivos. A continuación, solo se detallarán aquellos que se han utilizado a lo largo de esta tesis.

1.3.1. Estrés a tensión constante

Como su propio nombre indica, este tipo de estrés consiste en mantener constante la tensión aplicada en el dispositivo a lo largo de toda la caracterización (Fig. 1.15a), para así mantener constante el campo eléctrico. Utilizando este estrés, se obtiene la característica corriente-tiempo ($I-t$), que permite visualizar la ruptura dieléctrica dependiente del tiempo (TDDB). Como se puede ver en la Fig. 1.15b, de la característica $I-t$ se puede adquirir tanto el tiempo necesario para que el dieléctrico alcance la ruptura (t_{BD}), como la carga eléctrica acumulada en el momento de la ruptura (Q_{BD}).

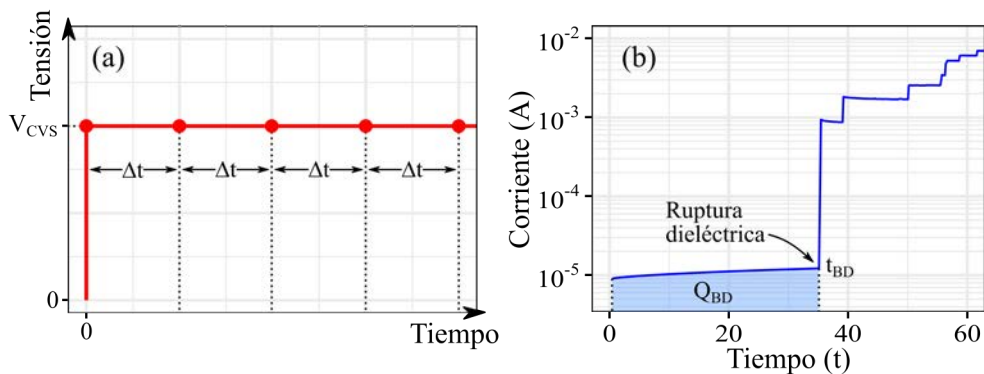


Fig. 1.15: (a) Evolución de la tensión en una caracterización CVS. (b) Característica $I-t$ de un penta-nanolaminado de Al_2O_3/HfO_2 de ≈ 10 nm de grosor utilizando un CVS de -7 V que presenta múltiples eventos de ruptura. En el gráfico solo está indicada la primera ruptura.

1.3.2. Estrés con rampa de tensión

Tal y como se muestra en la Fig. 1.16a, en el RVS, la tensión aplicada va aumentando de manera progresiva hasta alcanzar un valor previamente establecido. Utilizando este tipo de estrés, se obtiene la característica corriente-tensión ($I-V$) que permite conocer el valor de la tensión de ruptura (V_{BD}) (Fig. 1.16b). Pese a que no ha sido un elemento de estudio, es importante mencionar que la velocidad del barrido o de rampa (RR), es un factor que también influye en la ruptura dieléctrica y en la RS [14], [15].

1.3.3. Estrés con límite de corriente

Este tipo de estrés es complementario a los otros dos mencionados (CVS y RVS), y consiste en imponer un límite de corriente (I_{CC}) durante la caracterización eléctrica que evita que la corriente experimental sea superior a un valor determinado (Fig. 1.16b). El valor de I_{CC} se puede definir en el propio SPA, metodología utilizada en esta tesis; o utilizando un transistor, método mucho más preciso y que se puede incorporar en el propio dispositivo. Hay que tener presente que cuando la corriente alcanza el valor de I_{CC} el valor de ΔV_{ox} se ve modificado de acuerdo con las leyes de conducción, es decir, se ve reducido. Utilizando el I_{CC} , se puede controlar el daño que la ruptura dieléctrica produce en el dispositivo, lo que permite la caracterización física del CF [2], [4], [16]–[18]. A su vez, en algunos casos, el dieléctrico es capaz de recuperar parte de sus propiedades conductivas al aplicar un nuevo estrés eléctrico, dando lugar a lo que se conoce como ruptura dieléctrica reversible.

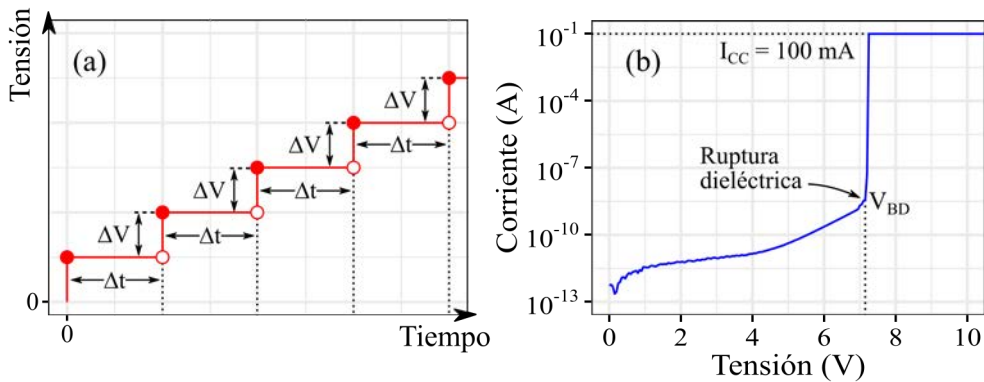


Fig. 1.16: (a) Evolución de la tensión en una caracterización RVS. (b) Característica I-V para 10 nm de HfO_2 utilizando un RVS. El equipo utilizado (Agilent 4156C) requiere que se defina un límite de corriente, siendo el máximo permitido 100 mA.

1.4. Consideraciones estadísticas

El estudio de la ruptura dieléctrica implica el estudio de un conjunto de datos que pueden provenir de diferentes o de un mismo dispositivo. La naturaleza estocástica de la ruptura hace que el análisis de este fenómeno se realice siempre en términos estadísticos, siendo las distribuciones TDDDB la más estudiadas. El procedimiento para evaluar la distribución de tiempos es similar al que se realiza cuando se analiza la supervivencia de una población en un estudio clínico, solo que, en este caso, estamos hablando de dispositivos en lugar de pacientes. A la hora de realizar la evaluación de un conjunto de t_{BD} se recurre a calcular la función de distribución acumulada (CDF), normalmente representada como F . En este contexto, al analizar los t_{BD} , la CDF nos

proporciona información sobre el porcentaje de dispositivos que han fallado al cabo de un tiempo t . La forma estándar de calcular su valor experimental es:

$$F(t) = \frac{n_t}{n} \quad (1.3)$$

en donde n es el número total de t_{BD} , que no deja de ser el total de dispositivos analizados, y la n_t es el número de t_{BD} inferiores o iguales a t . Una vez obtenida la distribución experimental, normalmente representada con una dispersión de puntos, se utilizan modelos teóricos paramétricos para tratar de reproducir el comportamiento de los dispositivos y evaluar la ruptura.

1.4.1. Distribución de Weibull

La distribución de Weibull es uno de los modelos estadísticos más utilizados en el análisis de cualquier tipo de distribución de valores, ya que es un modelo muy flexible. Dada la aleatoriedad del fenómeno de ruptura, la estadística de Weibull es la más utilizada para analizar las distribuciones de las TDDB y evaluar la fiabilidad de los dispositivos [2], [19]. Considerando t , la CDF según Weibull es

$$F_w(t) = 1 - \exp \left[- \left(\frac{t}{\eta} \right)^\beta \right] \quad (1.4)$$

en donde la β y η son, respectivamente, el factor de forma y el factor de escala. Para facilitar la visualización de esta distribución, se realiza la denominada representación de Weibull en donde la escala de los ejes se modifica para ajustarla a una recta:

$$Wb(t) \equiv \ln\{-\ln[1 - F_w(t)]\} = \beta \cdot \ln(t) - \beta \cdot \ln(\eta) \quad (1.5)$$

en donde la $Wb(t)$ se le denomina Weibit. Nótese que la pendiente de la recta está definida por β y la línea corta el eje y en $-\beta \cdot \ln(\eta)$. Generalmente, la representación de Weibull se hace con el eje x en escala logarítmica, permitiendo observar los valores del tiempo. En la **Fig. 1.17** se enseñan diferentes distribuciones de Weibull para diferentes valores de β y η . En esta representación se encuentra indicado el $t_{(63\%)}$, que se define como el tiempo para el cual la $Wb(t)$ vale 0 y que equivale al factor de escala, es decir, que $t_{(63\%)} = \eta$.

Al realizar el ajuste de la estadística de Weibull con datos experimentales de t_{BD} se observa que η es dependiente de A_{ox} y ΔV_{ox} mientras que β varía con T_{ox} [19]–[21]. A su vez, el dieléctrico y, en menor medida, el material de los electrodos, determinan el valor de los factores de Weibull. En la **Fig. 1.18a** se muestra una distribución experimental de t_{BD} en donde claramente se puede observar cómo al reducir el valor de T_{ox} , la dispersión de los datos se incrementa (se reduce β). Para mostrar la

dependencia de los factores con el material del dieléctrico, en la Fig. 1.18b están representadas las β de las distribuciones de t_{BD} obtenidas para SiO₂ [12], [22], HfO₂ [23], [24] y Al₂O₃ [25]. Nótese que, independientemente del material, todos muestran que a mayor T_{ox} , mayor es β .

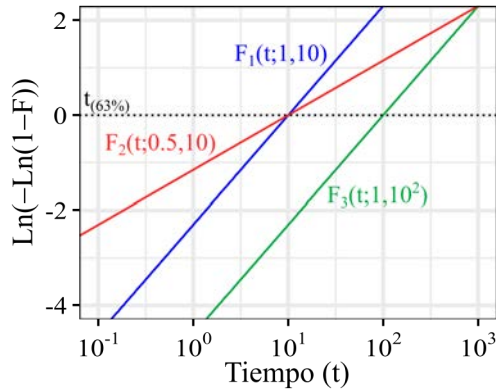


Fig. 1.17: Representación de Weibull de tres distribuciones de Weibull diferentes ($F(t; \beta, \eta)$). Como se puede observar, la pendiente está determinada por β mientras que $Wb(\eta) = 0$.

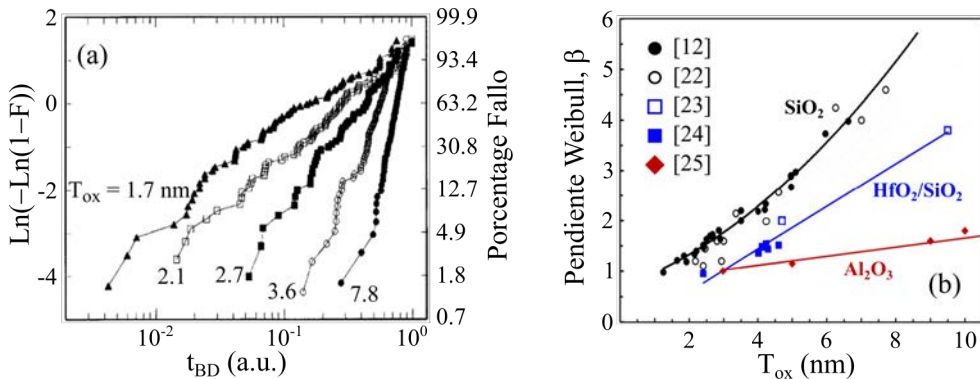


Fig. 1.18: (a) Representación de Weibull de distribuciones experimentales de t_{BD} para grosores de dieléctricos desde 1.7 nm hasta 7.8 nm [26]. En esta representación, los valores de t_{BD} están normalizados. (b) Dependencia del factor de forma de Weibull (β) para el SiO₂ y dieléctricos high-K [19].

1.4.2. Modelo percolativo

El uso de modelos para intentar reproducir el comportamiento de un fenómeno permite no solo entender su funcionamiento, sino que además aportan elementos y explicaciones sobre los procesos que lo provocan. Pese a que la estadística de Weibull es capaz de reproducir perfectamente los datos experimentales, lo único que nos proporciona es información sobre cómo las distribuciones se ven afectadas por las características del dispositivo y por el estrés aplicado. Pero no nos define el porqué de

estos cambios. Esto es lógico, ya que no deja de ser una ecuación matemática que permite definir cualquier conjunto de datos aleatorios. Por ello, es necesario un modelo capaz de dar una explicación a la ruptura dieléctrica y que, a su vez, sea capaz de correlacionarse con la distribución de Weibull y las observaciones experimentales.

En el 1990 se demostró que la ruptura dieléctrica se alcanza cuando la densidad de defectos en el interior del dieléctrico alcanza un valor crítico [11], denominado N_{BD} . Utilizando esta idea, unos años más tarde se propuso el modelo percolativo [12], cuyo concepto se sigue utilizando hoy en día para explicar la ruptura. Básicamente, lo que dice el modelo es que el valor de N_{BD} se alcanza de manera localizada en el área del dieléctrico, generándose un CF de defectos que permite el flujo de electrones entre los electrodos del dispositivo (**Fig. 1.19a**). Si bien este modelo ha sufrido muchos cambios y revisiones desde su origen, siempre ha mantenido como núcleo la formación del CF. En la **Fig. 1.19b** se muestra una de estas revisiones la cual es una versión más simplificada del modelo percolativo y que, a su vez, permite obtener una solución analítica para N_{BD} y β [27]. Sin entrar al detalle, dado que en esta tesis no se ha tratado el modelo percolativo, es interesante mostrar que esta revisión es capaz de predecir que la β es proporcional a T_{ox}

$$\beta = \theta \cdot \frac{T_{ox}}{a_o} \tag{1.6}$$

en donde se podría considerar a_o como el diámetro de los defectos (**Fig. 1.19b**), y θ es un parámetro que depende de las características del dieléctrico.

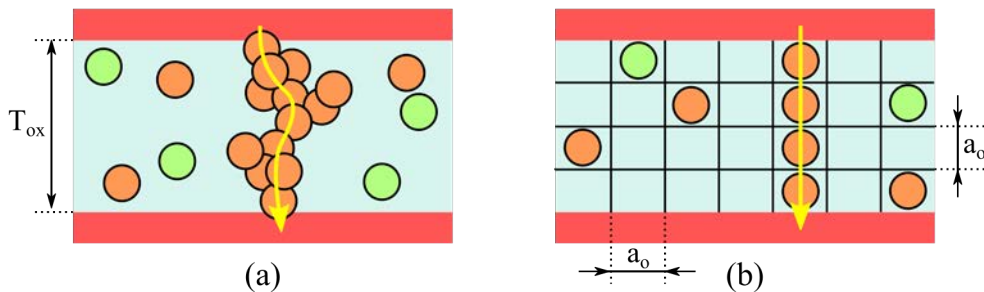


Fig. 1.19: (a) Representación del modelo percolativo y (b) modelo analítico equivalente al modelo percolativo [27].

Es importante destacar que en el modelo percolativo, y sus sucedáneos/revisiones, se considera que la generación de defectos en el interior del dieléctrico es completamente aleatoria –motivo por el cual anteriormente se ha obtenido una expresión analítica para β –. Esto quiere decir que su distribución tiene que poder describirse utilizando el modelo de Poisson:

$$F_p = 1 - \exp(-\langle D \rangle \cdot A_{ox}) \quad (1.7)$$

siendo F_p la CDF en base al modelo de Poisson y $\langle D \rangle$ la densidad media de defectos, cuyo valor depende de T_{ox} y del material dieléctrico. Partiendo de esta expresión ((1.7)), se puede deducir que dos distribuciones con diferente A_{ox} y misma $\langle D \rangle$ (T_{ox} constante), se relacionan con

$$1 - F_1 = (1 - F_2)^{\frac{A_{ox,1}}{A_{ox,2}}} \quad (1.8)$$

en donde $A_{ox,1}$ y $A_{ox,2}$ son las áreas de las distribuciones F_1 y F_2 , respectivamente. A esta relación se la conoce como la regla del escalado de Poisson, y permite saber si dos distribuciones provienen de este tipo de proceso.

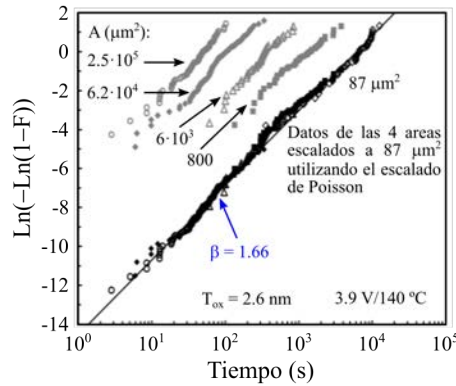


Fig. 1.20: Distribuciones de t_{BD} para SiO_2 con 2.6 nm de grosor y diferente valor de área (símbolos grises) y su normalización a un área de $87 \mu\text{m}^2$ (símbolos negros) utilizando el escalado de Poisson [19].

Considerando que $\langle D \rangle \cdot A_{ox} = (t/\eta)^\beta$, se obtiene que la expresión del modelo de Poisson ((1.7)) es idéntica a la de Weibull ((1.4)). Introduciendo la expresión de Weibull ((1.4)) en la (1.8) y suponiendo que β no depende de A_{ox} , se acaba obteniendo la regla del escalado para el factor de forma

$$\frac{\eta_1}{\eta_2} = \left(\frac{A_{ox,2}}{A_{ox,1}} \right)^{1/\beta} \quad (1.9)$$

también denominada ley potencial del escalado del área, en donde η_1 y η_2 son los factores de forma de las distribuciones F_1 y F_2 , respectivamente. Si se tiene en cuenta la expresión lineal de la estadística de Weibull ((1.5)) y que β es constante, la (1.9) se puede generalizar para cualquier valor de t

$$\frac{t_1}{t_2} = \frac{\eta_1}{\eta_2} \quad (1.10)$$

de tal manera que $F_1(t_1; \beta, \eta_1) = F_2(t_2; \beta, \eta_2)$. Utilizando la (1.9) y la (1.10), se puede normalizar el valor de las distribuciones de t_{BD} a cualquier valor de A_{ox} , tal y como se muestra en la Fig. 1.20 –válido también para las distribuciones de Q_{BD} –. El cumplimiento de esta regla confirma que la generación de defectos en el interior del dieléctrico sigue el modelo de Poisson, lo que, a su vez, valida el modelo percolativo.

1.5. Leyes de aceleración de la ruptura

Pese a que el modelo percolativo es capaz de explicar la dependencia de t_{BD} con las características del dieléctrico (A_{ox} y T_{ox}), este es independiente del estrés aplicado para inducir la ruptura (ΔV_{ox}). Por ello, no es capaz de predecir la correlación que existe entre la aceleración del proceso de degradación y ΔV_{ox} (Fig. 1.21a). Como es de esperar, la correlación entre estos dos parámetros es que a mayor estrés menor es el tiempo requerido para producir la ruptura. Con el fin de reproducir este comportamiento, se han desarrollado diferentes modelos físicos que son capaces de dar una explicación a la evolución de t_{BD} con ΔV_{ox} . Estos modelos son muy importantes en el estudio de la fiabilidad de los dispositivos. Dado que el análisis de la TDDB se realiza utilizando tensiones muy superiores al rango de trabajo, con el fin de obtener t_{BD} experimentales razonables, los modelos permiten predecir la durabilidad de los dispositivos bajo sus condiciones de trabajo.

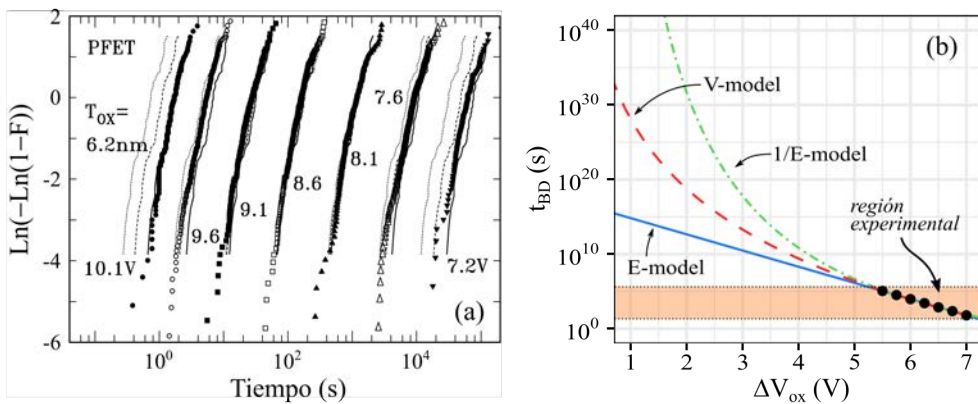


Fig. 1.21: (a) Distribución de los t_{BD} experimentales de dispositivo MOSFET tipo p con un óxido de puerta de 6.2 nm de grosor para diferentes ΔV_{ox} . Las líneas representan ajustes con diferentes modelos de aceleración [28]. (b) Representación de diferentes modelos de aceleración ajustados al mismo conjunto de datos TDDB.

Existen muchos modelos físicos que explican la TDDB, uno cuantos se basan en el campo eléctrico, otros se basan en la corriente y algunos otros combinan el campo eléctrico y la corriente. En general, se discuten tres modelos para el TDDB:

El modelo electroquímico (*E-model*) → Basado en la teoría electroquímica según la cual la ruptura de los enlaces moleculares depende del campo eléctrico aplicado.

El modelo de inyección anódica de huecos (*I/E-model*) → Primer modelo basado en la corriente en tener éxito. Degradación asociada a la conducción túnel de Fowler–Nordheim (F–N).

El modelo de liberación de hidrogeno (*V-model*) → Ruptura y generación de iones de hidrogeno (H) en el interior del dieléctrico.

Los tres modelos se basan en fenómenos físicos y químicos que ocurren en el interior de los dispositivos. Por tanto, la obtención de sus parámetros no solo se puede hacer de manera empírica, ajustando el modelo a los datos (**Fig. 1.21b**), sino que también se podrían calcular a través de las características y propiedades físicas y químicas del dispositivo (distancias moleculares, energía de activación...). Como se puede ver en la **Fig. 1.21b**, la selección del modelo correcto es crucial a la hora de evaluar la fiabilidad de los dispositivos ya que, si bien los tres pueden ajustar bien los datos experimentales, su tendencia a tensiones muy bajas es completamente diferente.

Mencionar que, en esta tesis, dado la dificultad de poder medir de manera precisa el espesor de la capa de óxido (ver **Capítulo 3**) [**MR 2020, EDL 2020**], se ha considerado la ΔV_{ox} en lugar del campo eléctrico aplicado en el óxido (E_{ox}) en los modelos evaluados, teniendo en cuenta que

$$E_{ox} \equiv \frac{\Delta V_{ox}}{T_{ox}} \quad (1.11)$$

1.5.1. Modelo termoquímico: *E-model*

El modelo termoquímico, más conocido como *E-model*, fue propuesto por McPherson y Baglee [29] en el 1985 y es un modelo basado en el campo eléctrico. En este, se considera que la ruptura dieléctrica se alcanza debido a la división de los enlaces débiles presentes en el interior del dieléctrico. Estos enlaces rotos actúan como defectos conductivos que, al acumularse, forman el CF que desata la ruptura. Según la teoría electroquímica, la energía requerida para romper estos enlaces se reduce al aplicar un campo eléctrico, por lo que el *E-model* se describe como

$$t_{BD} \propto \exp(-\gamma \cdot E_{ox}) \rightarrow t_{BD} \propto \exp\left(-\gamma \cdot \frac{\Delta V_{ox}}{T_{ox}}\right) \quad (1.12)$$

en donde el t_{BD} es exponencialmente dependiente de E_{ox} , y γ es el parámetro de aceleración de campo. Este modelo considera la formación de un dipolo en los enlaces moleculares cuando se aplica el campo eléctrico [20], el cual es el responsable de la

debilitación de los enlaces moleculares. A mayor campo eléctrico, mayor es el momento dipolar y, por tanto, menor es la energía de activación necesaria para romper los enlaces. Esto permite explicar porque los dieléctricos que no pueden generar dipolos, conocidos como dieléctricos no-polares, no muestran la ruptura dieléctrica.

1.5.2. Modelo de inyección anódica de huecos: *I/E-model*

El modelo de inyección anódica de huecos (AHI) es un modelo basado en la corriente, más concretamente en la generada por la conducción túnel de F-N, y que fue presentado por Schuegraf *et al.* [30] en el 1994. Según esta conducción, al aplicar una diferencia de tensión elevada, los electrones son capaces de saltar desde el cátodo hasta la banda de conducción del dieléctrico. Una vez allí, estos son acelerados por el campo eléctrico hasta que impactan con el ánodo, generando cierta degradación en la intercara ánodo/dieléctrico. En este momento, parte de la energía liberada por los electrones puede generar huecos en el ánodo que, debido al campo eléctrico, saltan al interior del dieléctrico por conducción F-N [20]. Dado que tanto los electrones como los huecos son inyectados a través de la conducción F-N, se espera que la t_{BD} siga una dependencia recíproca con E_{ox}

$$t_{BD} \propto \exp\left(\frac{\xi}{E_{ox}}\right) \rightarrow t_{BD} \propto \exp\left(\xi \cdot \frac{T_{ox}}{\Delta V_{ox}}\right) \quad (1.13)$$

en donde ξ es el parámetro de aceleración de campo. Por este motivo, el modelo AHI se denomina *I/E-model*.

1.5.3. Modelo de liberación de hidrógeno: *V-model*

El modelo de liberación anódica de hidrógeno (AHR), conocido como *V-model*, fue reportado por DiMaria *et al.* [31], [32] en los años noventa y considera la generación de especies de hidrógeno en la intercara ánodo/dieléctrico. Durante el paso final de la fabricación, con el fin de pasivar los átomos de Si, la oblea es sometida a un proceso térmico de hidrógeno para generar enlaces Si-H. Sin embargo, estos enlaces son débiles y los electrones que llegan al ánodo por conducción F-N son capaces de romperlos, generando tanto moléculas como iones de H. Estos se introducen en el interior del dieléctrico, reaccionando con los enlaces débiles de este, generando los defectos conductivos [20]. Según el modelo AHR,

$$t_{BD} \propto (\Delta V_{ox})^{-\zeta} \quad (1.14)$$

el t_{BD} sigue una relación potencial con ΔV_{ox} en donde ζ es el parámetro de aceleración de campo. El *V-model* está principalmente definido para dieléctricos extremadamente delgados [26], en donde predomina la conducción balística, motivo por el cual el

modelo depende directamente de ΔV_{ox} . Generalmente, para este tipo de dieléctricos, se suele observar un exponente $\zeta = 40-48$ y, dado que está definido para dieléctricos ultradelgados, su uso en dieléctricos gruesos está bastante discutido [20].

1.6. Daño en el dieléctrico asociado a la ruptura

Como se ha mencionado, la ruptura dieléctrica es un proceso altamente destructivo que modifica por completo la estructura de los dispositivos. Esto se debe a la formación de un CF en el interior del óxido que permite un flujo incontrolado de electrones el cual, por efecto Joule, genera una alta cantidad de energía térmica. Esta energía disipada es tan elevada que se capaz de fundir localmente el dispositivo, dejando una marca claramente visible en el electrodo superior.

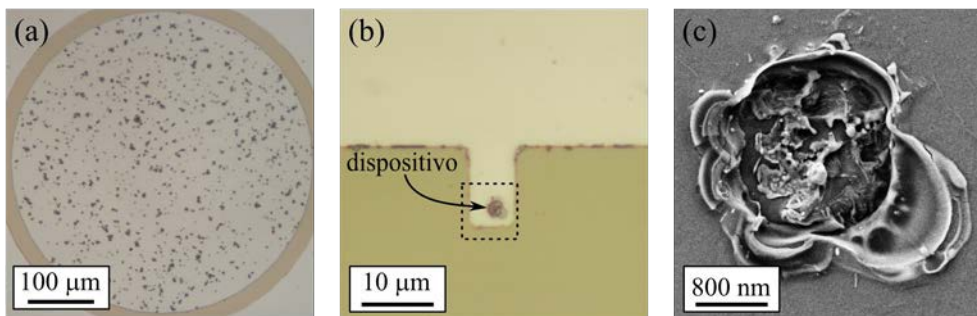


Fig. 1.22: Imagen de microscopía óptica del electrodo metálico superior de una estructura (a) Pt/HfO₂/Pt y (b) Ni/HfO₂/n⁺-Si después de un proceso de ruptura dieléctrica. La estructura (a) tiene un área circular de diámetro 450 μm y la (b) un área cuadrada de 2 × 2 μm². (c) Imagen SEM de la estructura mostrada en (b) después de un proceso de ataque químico húmedo para remover específicamente el Ni.

En la **Fig. 1.22** se muestran algunos de los dispositivos estudiados durante esta tesis después de un proceso de ruptura, donde claramente se pueden observar las marcas y el daño producido por la ruptura dieléctrica. Nótese que las consecuencias de este proceso no son las mismas, mientras que para óxidos de área grande es posible observar más de un solo evento de ruptura (**Fig. 1.22a**), en áreas pequeñas supone la destrucción completa del dispositivo (**Fig. 1.22b-c**). Si bien es de interés la generación de ningún evento de ruptura, dado que uno solo ya puede suponer el fallo del dispositivo, el estudio de la localización de múltiples eventos de ruptura puede resultar de interés a la hora de analizar y evaluar la fiabilidad de la capa dieléctrica [**JAP 2017**, **JEM 2018**, **ME 2019**, **TDMR 2019**] (ver **Capítulo 4**).

Se ha demostrado en numerosas ocasiones, utilizando técnicas de caracterización física, que en los puntos de ruptura existe un material que conecta el cátodo con el ánodo [16], [17], [33]–[39], confirmando la generación del CF. En algunos casos

incluso se ha observado que los electrodos se encuentran completamente desconectados, atribuido a la evaporación del electrodo superior debido a las altas temperaturas alcanzadas. Como se puede ver, se han realizado muchos esfuerzos para tratar de analizar y entender la formación del CF, así como su composición química. Con el fin de simplificar y generalizar, se podría decir que existen tres tipos de mecanismos o defectos que pueden formar un CF:

Epitaxia inducida por la ruptura dieléctrica (DBIE) → Típico en estructuras MIS con Si como semiconductor. En este mecanismo los átomos de Si se introducen poco a poco en el interior del óxido desde el sustrato, generando una estructura que va avanzando hasta formar el CF. La DBIE es altamente dependiente del campo eléctrico y aparece cuando el Si es el cátodo.

Vacantes de oxígeno → Regiones del óxido que presentan especies con una menor proporción de átomos de oxígeno que actúan como defectos conductivos. Suelen ayudar en los pasos iniciales de la ruptura y en la generación del CF, facilitando la movilidad de otros elementos en el interior del óxido. En el caso de estructuras MIM con electrodos que puedan actuar como intercambiadores de oxígeno, es posible que el CF este formado principalmente de estas vacantes.

Migración metálica → Observada tanto en estructuras MIS como en MIM. En este caso, los átomos de los electrodos metálicos son capaces de difundir dentro del dieléctrico, dando lugar al CF. Esta difusión puede ser tanto térmica como electroquímica, según los materiales del dispositivo.

Estos mecanismos están intrínsecamente vinculados al RS y por ello, en el **Capítulo 2**, se dan más detalles sobre estos. Es importante recalcar que la aparición de uno de estos mecanismos o defectos no es excluyente para el resto. Es usual que en la ruptura participen varios: unos actuando como precursores y que uno sea el que lidere la generación del CF. Un ejemplo de ello lo tenemos en estructuras NiSi/HfO₂/SiO₂/Si, reportado por Wu *et al.* [39], las cuales fueron caracterizadas mediante un microscopio electrónico de transmisión de alta resolución (HRTEM) después de ser sometidas a una ruptura dieléctrica controlada de 1 μ A (**Fig. 1.23a**) y 2 μ A (**Fig. 1.23b**). En estas imágenes (**Fig. 1.23a,b**) se puede observar que, en ambos casos, la ruptura genera una protuberancia de Si debido a la DBIE. A su vez, en el caso de 2 μ A (**Fig. 1.23b**) se puede detectar que el CF está formado por Ni, indicando que este material ha difundido desde el electrodo superior hasta el sustrato. En base a trabajos previos con espectrometría de pérdida de energía de electrones (EELS) [38], [40], los cuales mostraron que existe una deficiencia de oxígeno en las regiones cercanas a las protuberancias de DBIE, Wu *et al.* [39] propuso la formación de un camino percolativo de vacantes de oxígeno en estas estructuras previo a la difusión de Ni y

concluyó que la generación del CF en las estructuras NiSi/HfO₂/SiO₂/Si se daba en dos fases:

1.ª fase (Fig. 1.23c) → Parte del Si difunde hacia el interior del óxido por DBIE y las vacantes de oxígeno son las responsables de la generación del camino percolativo (Fig. 1.23a).

2.ª fase (Fig. 1.23d) → Los átomos metálicos de Ni difunden a través del camino deficiente de oxígeno, formando el CF en el interior del óxido que se encuentra rodeado de vacantes de oxígeno (Fig. 1.23b).

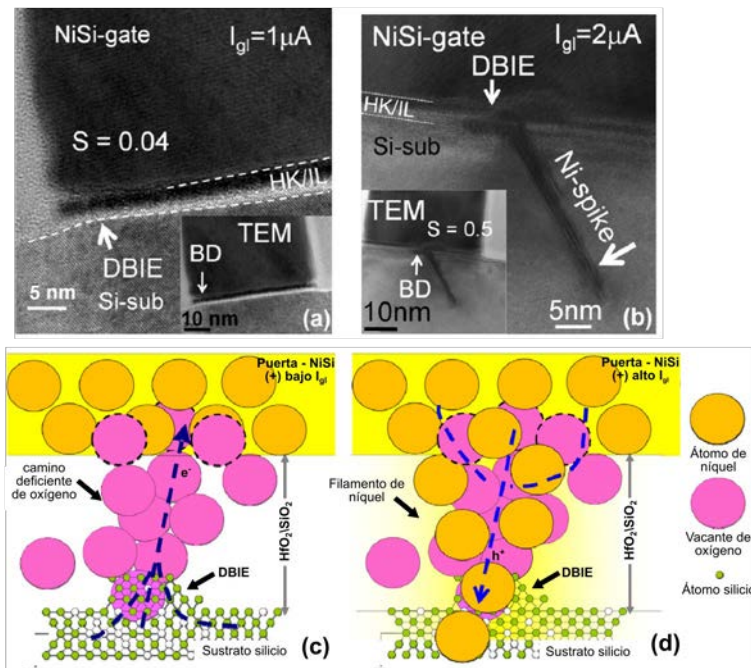


Fig. 1.23: Imágenes HRTEM de secciones verticales de estructuras NiSi/HfO₂/SiO₂/Si después de una ruptura dieléctrica controlada con (a) $I_{cc} = 1 \mu\text{A}$ y (b) $I_{cc} = 2 \mu\text{A}$. Las imágenes insertadas muestran el mismo dispositivo a menores aumentos. Representación esquemática (c) del camino percolativo de vacantes de oxígeno formado en (a), y (d) de la formación del filamento metálico observado en (b) [39].

1.7. Conclusiones

Para recapitular, en estas conclusiones exponemos los puntos más importantes que hay que tener en cuenta sobre la ruptura dieléctrica y que son claves a lo largo del desarrollo de esta tesis.

- ❖ La ruptura dieléctrica es el mecanismo de fallo más común de los dispositivos electrónicos y que supone, en el caso de no estar controlada, la pérdida de sus características eléctricas iniciales.
- ❖ El modelo más aceptado y demostrado para explicar la ruptura dieléctrica es el modelo percolativo, según el cual, este fenómeno ocurre debido a la generación de un CF en el interior del dieléctrico.
- ❖ A medida que el dieléctrico es sometido a un estrés, diferentes tipos de defectos conductivos se van generando en el interior del material. Llega un momento que estos defectos acaban formando el CF entre los dos extremos del dieléctrico que permite el flujo directo de electrones. En este mismo instante, debido al efecto Joule, se produce una inmensa emisión de energía térmica que modifica las características del dispositivo, dando lugar a la ruptura dieléctrica. A su vez, el proceso deja una marca perfectamente visible en el electrodo superior.
- ❖ La generación de defectos y, en consecuencia, la ruptura dieléctrica son procesos completamente aleatorios que siguen la distribución de Poisson y son perfectamente reproducibles con la estadística de Weibull.
- ❖ Según si se controla la ruptura o no, se pueden producir dos tipos de CF
 - **CF irreversibles:** se generan cuando no se limita la corriente durante la ruptura dieléctrica. El daño producido en el dispositivo es irreparable.
 - **CF reversible:** se generan cuando se limita la corriente durante la ruptura dieléctrica. Se modifican las propiedades del dispositivo, pero el daño es reparable. Aplicando un nuevo estrés eléctrico se recuperan parte de las características conductivas del dieléctrico. Da lugar al fenómeno de RS.

Capítulo 2

Ruptura dieléctrica reversible

LA ruptura dieléctrica es, en primera instancia, un proceso irreversible que supone la pérdida de las características conductivas de un dispositivo y, en muchos casos, provoca un daño irreparable (**Fig. 2.1**). Sin embargo, si se controla este evento, es posible obtener un dispositivo que, después de ver su resistencia mermada, puede recuperar parte de sus propiedades resistivas al ser sometido de nuevo a un campo eléctrico, dando lugar a la ruptura dieléctrica reversible, mejor conocida como RS (**Fig. 2.1**). El motivo por el cual se habla de este tipo de ruptura es sencillo: esta intrínsecamente vinculada al estudio de la generación del CF en el interior de la capa de óxido. Al controlar el proceso de ruptura, se habilita el estudio de los procesos iniciales que dan lugar a la formación del CF, así como la caracterización física de los elementos que lo conforman. A su vez, la aparición de esta reversibilidad permite que estos dispositivos puedan ser utilizados como memorias no volátiles y, de hecho, son una de las alternativas más prometedoras para sustituir las actuales memorias *flash*.

Este primer capítulo experimental está principalmente centrado en la evaluación de los cambios físicos que se producen en las estructuras MIS basadas en HfO_2 como consecuencia de una ruptura dieléctrica controlada y del proceso de RS [**TSF 2020**]. Además, se realiza una caracterización de las propiedades eléctricas de la RS. Comenzaremos con una breve introducción al fenómeno de RS en donde se explicará cómo surge y cuáles son sus principales características y mecanismos. Es importante

destacar que estos mecanismos describen como se genera el CF en el interior del óxido durante la ruptura dieléctrica, ya sea reversible o irreversible. La única diferencia entre un proceso y el otro es el control del daño que se induce por efecto Joule. A continuación, se describirán los dispositivos analizados y se discutirá el proceso experimental llevado a cabo para su caracterización. Finalmente se expondrán los resultados experimentales siguiendo un esquema similar al presentado en [TSF 2020].

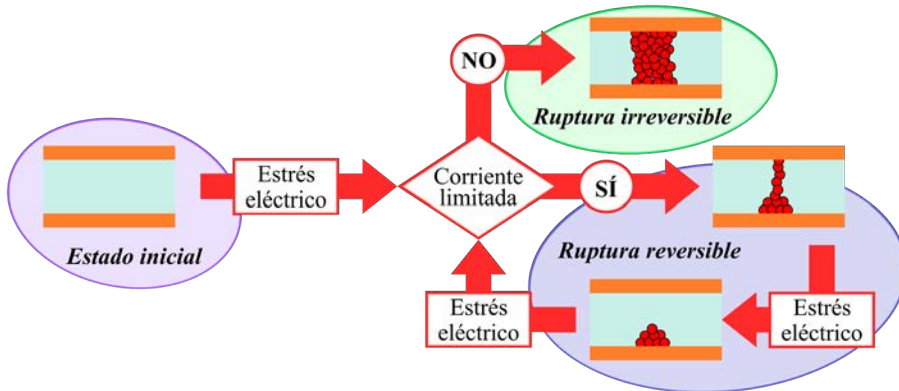


Fig. 2.1: Representación esquemática de los tipos de CF.

2.1. Fenómeno de conmutación resistiva

Brevemente, el fenómeno de RS se define como la capacidad que tiene un material de alterar y recuperar su resistencia eléctrica mediante un estímulo externo. Este fenómeno es detectable tanto en estructuras MIS como en MIM y, a su vez, se puede realizar un número muy elevado de veces. Normalmente, los estados resistivos definidos en el dieléctrico son no volátiles, es decir, la resistencia permanece inalterada hasta que no se aplica un nuevo estrés eléctrico. Es importante remarcar que, pese a que el estudio de la RS se realiza principalmente en óxidos, este fenómeno también ha sido observado en materiales orgánicos [41]–[43].

El fenómeno de RS se observó por primera vez en los años sesenta, cuando Hickmoot [44] realizó la caracterización eléctrica de una estructura MIM basada en Al_2O_3 . Ya por aquel entonces se sugirió su posible aplicación en la fabricación de memorias no volátiles, pero el auge de la microelectrónica basada en Si sumado a que no se comprendía el funcionamiento de la RS hicieron que el estudio de este fenómeno quedase relegado a un segundo plano. No fue hasta años más tarde que realmente se empezó a investigar este fenómeno en profundidad. Principalmente porque se demostró que la RS podía definir estados claramente diferenciados y estables; y también porque surgió la necesidad de buscar sustitutos de las memorias *flash*. Ya en

su momento se consideró que las memorias basadas en la RS, hoy en día también conocidas como memorias resistivas de acceso aleatorio (ReRAM), podían ser el perfecto candidato para sustituir a las memorias *flash*. Por ello, y desde entonces, una gran variedad de estructuras MIS y MIM compuestas por diferentes materiales han sido estudiadas para comprender el funcionamiento de la RS. De la misma manera, varios modelos físicos han sido propuestos para tratar de ofrecer una explicación acerca del origen físico de este fenómeno. De entre todos los diferentes óxidos estudiados para la fabricación de ReRAMs funcionales, el HfO_2 parece ser el más prometedor, no solo por sus características de RS sino también por su compatibilidad con los procesos de fabricación CMOS.

2.1.1. Características del fenómeno

La RS se suele distinguir por la aparición de dos estados resistivos muy diferenciados denominados:

Estado de alta resistencia (HRS) → Es el estado que presenta una conductividad baja. Representa el “0” binario en las ReRAM.

Estado de baja resistencia (LRS) → Es el estado que muestra una conductividad alta. Representa el estado lógico “1” en las ReRAM.

Utilizando un campo eléctrico, la resistencia del dieléctrico puede conmutar entre estos dos estados de manera indefinida. Por este motivo y por la estabilidad de los estados, este fenómeno es ideal para el desarrollo de memorias no volátiles. Es importante destacar que en algunos dieléctricos es posible definir más de dos estados resistivos. En estos casos, ya no se habla de HRS y LRS, sino de estado 1, estado 2, estado 3..., y permitirían el desarrollo de memorias con una mayor densidad de almacenamiento al disponer de múltiples estados para almacenar información.

En la **Fig. 2.2** se muestra una representación esquemática del funcionamiento de la RS en un dispositivo. Como puede observarse, la RS se basa en la generación de un CF reversible en el interior del óxido el cual puede ser destruido y reconstruido para definir los dos estados conductivos. En el LRS, el CF está completamente formado mientras que, en el HRS, está parcialmente destruido. Es importante remarcar que existen otras maneras en las que la RS puede manifestarse, es decir, no siempre se debe a la formación de un CF reversible. En algunos casos, los cambios se dan en la intercara electrodo/óxido del dispositivo, mientras que, en otros, se producen en una región concreta del material [4], [45]. Evidentemente, la aparición de un tipo de mecanismo u otro depende de los materiales y de la estructura del dispositivo. Existen tres procesos diferentes que aparecen durante la caracterización de la RS (**Fig. 2.2**):

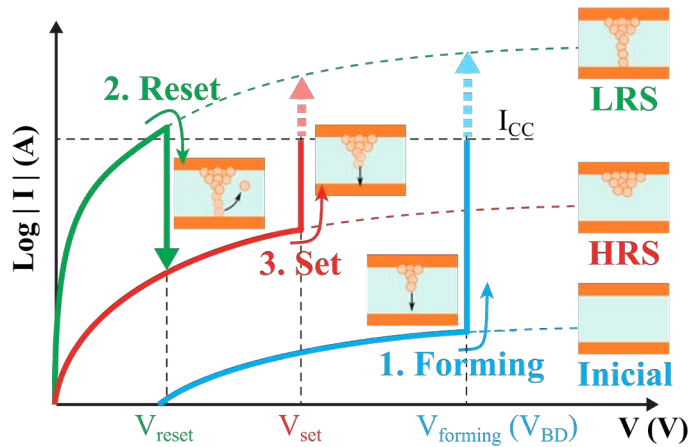


Fig. 2.2: Representación esquemática de la RS y de los estados del dispositivo, considerando la formación y parcial destrucción de un CF. Inicialmente, mediante el *forming*, se genera el CF en el interior del dieléctrico, reduciendo la resistencia al LRS y activando el RS. La conmutación del HRS \rightarrow LRS o del LRS \rightarrow HRS se realiza aplicando V_{set} o V_{reset} , respectivamente [4].

Forming ($V_{forming}$) \rightarrow Activa la RS en los dispositivos y genera el CF reversible, dejando el dispositivo en el LRS. En algunos casos, especialmente en óxidos delgados, no es necesario este proceso para empezar a observar la RS.

Set (V_{set}) \rightarrow Conmutación del valor de la resistencia desde el HRS al LRS. Supone la regeneración del CF.

Reset (V_{reset}) \rightarrow Contraparte del *set*. Conmutación del LRS al HRS. Supone la disolución parcial o completa del CF.

De esta manera, el procedimiento estándar de la caracterización de la RS consiste en primero realizar el *forming* para luego ir conmutando el estado del dispositivo con los procesos de *set/reset*. Como puede observarse (Fig. 2.2), durante el *forming/set* se establece un I_{CC} para controlar el daño inducido durante estos procesos y evitar así una HBD. Por otro lado, dado la energía requerida para destruir el CF, no es usual limitar la corriente durante el *reset*. Normalmente el dieléctrico vuelve al LRS antes de alcanzar unos niveles de corriente lo suficientemente elevados como para producir daños irreparables. Es muy importante destacar/aclarar que el proceso de *forming* no deja de ser una ruptura dieléctrica que está controlada y, por tanto, se puede considerar que $V_{forming} = V_{BD}$ para cualquier estructura estudiada.

Existen un total de tres modos de RS en función de la polaridad a la que ocurren los eventos de *set* y *reset*, y en función de la estabilidad de los estados. Estos modos están intrínsecamente relacionados con los mecanismos que dan lugar a la RS. Es

decir, la aparición de un modo u otro depende de los materiales de los que esté formada la estructura MIS/MIM estudiada.

RS bipolar (Fig. 2.3a,b) → En este modo los procesos de *set* y *reset* ocurren a polaridades opuestas, pudiendo ser o $V_{set} > 0 V$ y $V_{reset} < 0 V$ (Fig. 2.3a); o $V_{set} < 0 V$ y $V_{reset} > 0 V$ (Fig. 2.3b). Indica que la RS depende del campo eléctrico aplicado al dispositivo. Por tanto, suele implicar que la formación del CF está determinada por la migración electroquímica de los defectos en el interior del óxido.

RS unipolar (Fig. 2.3c) → En este modo, la RS es independiente de la polaridad –el *set* y el *reset* pueden ocurrir tanto a tensiones positivas como negativas–. Si ambos procesos se realizan a la misma polaridad, se puede distinguir entre el modo unipolar positivo (V_{set} y $V_{reset} > 0 V$), o el negativo (V_{set} y $V_{reset} < 0 V$). La aparición de este modo indica que la formación del CF esta principalmente dominada por efectos térmicos.

RS threshold (Fig. 2.3d) → Este modo define una RS en el cual el LRS no es estable. Igual que sucede en los dispositivos unipolares, la aparición de este modo se asocia a procesos térmicos y, pese a que no pueden utilizarse para la fabricación de memorias no volátiles, siguen teniendo otra gama de aplicaciones.

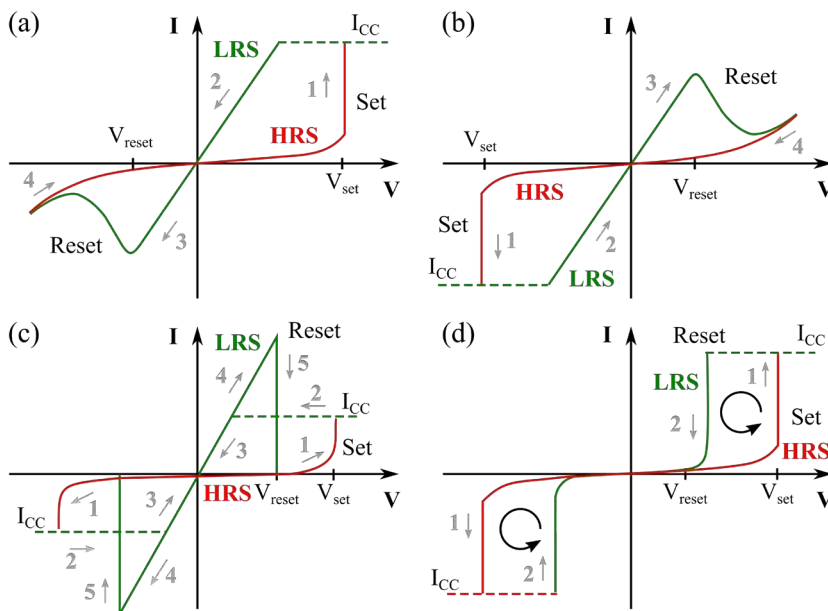


Fig. 2.3: Características I - V para los diferentes modos de la RS: RS bipolar con (a) V_{set} positivo y V_{reset} negativo, y (b) V_{set} negativo y V_{reset} positivo; (c) RS unipolar; y (d) RS *threshold*. Mientras que en el modo bipolar (a,b) los procesos de *set* y *reset* ocurren a una polaridad concreta, en el modo unipolar (c) y *threshold* (d) los procesos pueden ocurrir en cualquiera de la dos polaridades [46].

2.1.2. Mecanismos de la conmutación resistiva

Existen una gran variedad de mecanismos y procesos físicos que dan lugar a la aparición de la RS en los dispositivos ReRAM. Desde cambios controlados en la estructura cristalina de uno de los materiales que conforman el dispositivo (memorias de cambio de fase), hasta cambios moleculares que dan lugar a diferentes estados resistivos en la unión entre dos moléculas (memorias moleculares). En la **Fig. 2.4** se muestra un diagrama donde aparecen todos los diferentes procesos físicos que explican la RS. Como puede verse, existen tres que se basan en reacciones de reducción y oxidación, más comúnmente denominadas reacciones RedOx:

Mecanismo electroquímico (ECM) → Consiste en la difusión del electrodo metálico en el interior del óxido para formar un CF metálico. El proceso está controlado por el campo eléctrico.

Mecanismo de cambio de valencia (VCM) → Implica la generación de vacantes de oxígeno en el interior del óxido que acaban formando especies conductivas dentro del dieléctrico.

Mecanismo termoquímico (TCM) → Similar al ECM, pero el proceso RedOx y la difusión de los átomos/iones está dirigida por efectos térmicos. La RS se produce por la fundición del CF.

Estos mecanismos son los que mayoritariamente se observan en los dispositivos ReRAM y, a su vez, son los que se han reportado en las estructuras MIS/MIM basadas en HfO₂.

La característica principal de los mecanismos basados en las reacciones RedOx es que la RS se manifiesta a través de la generación/destrucción de un CF en el seno del dieléctrico. La formación y reversibilidad del CF está vinculada a la presencia y movimiento de iones en el interior del dieléctrico. Mediante las reacciones RedOx, estos iones, normalmente vacantes de oxígeno ($V_O^{\bullet\bullet}$ según la anotación de Kröger y Vink [47]) o cationes metálicos, se pueden depositar o diluir en el dieléctrico permitiendo la formación y destrucción del CF. La diferencia entre los tres mecanismos es el tipo de ion que acaba formando el CF y el proceso físico que induce la reacción RedOx. Mientras que el TCM muestra una RS unipolar, indicando que la formación del filamento está inducida por procesos térmicos; el ECM y el VCM muestran una RS bipolar, indicando procesos inducidos por el campo eléctrico. Es importante mencionar que para una misma estructura y combinación de materiales es posible que coexistan dos, o incluso los tres, mecanismos a la vez. Un ejemplo de ello son el TiO₂ [48] y el HfO₂ [49], [50], en los cuales se ha demostrado la coexistencia del TCM y el VCM. Por ello, la RS puede llegar a ser en un proceso muy complejo

en el que las características de los materiales, su interacción y las condiciones eléctricas utilizadas determinan el mecanismo que lidera la conmutación del CF.

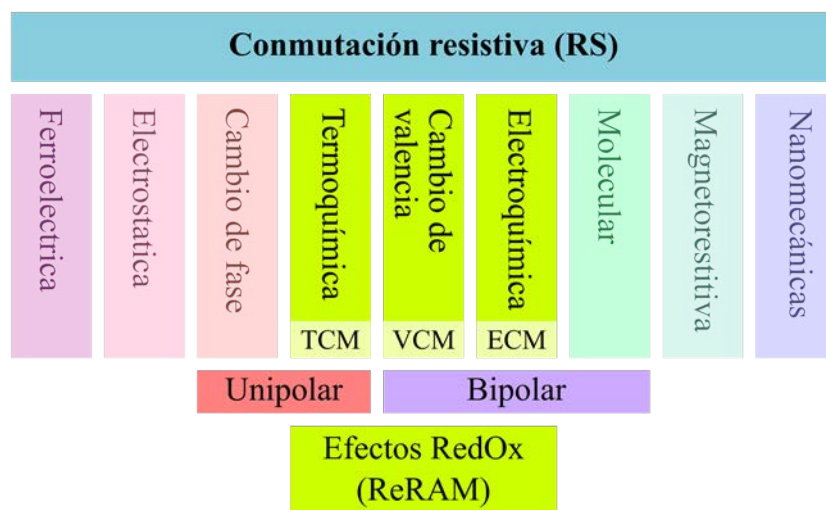


Fig. 2.4: Clasificación de los diferentes mecanismos físicos y químicos que dan lugar a la RS. En el centro se destacan los mecanismos basados en reacciones RedOx.

2.1.2.1. Memorias de metalización electroquímica

En el ECM, el dispositivo actúa como una celda electroquímica en donde el aislante actúa como un electrolito y uno de los electrodos está formado por un metal activo (Ni, Cu, Ti, Ag...) mientras el otro está compuesto por un material inerte (Pt, W, TiN...). En la **Fig. 2.5** se muestra el funcionamiento de este mecanismo en una estructura MIM formada por Cu/HfO₂/Pt [51]. Básicamente, se basa en la migración de los cationes del metal activo que se depositan en el interior de dieléctrico, formando el CF. Utilizando las estructuras de Cu/HfO₂/Pt como ejemplo ilustrativo (**Fig. 2.5**), durante el *forming* y el *set*, al aplicar una tensión positiva, los átomos de Cu se oxidan, formando cationes Cu⁺. Debido al campo eléctrico presente en el HfO₂, los cationes viajan desde el electrodo de Cu hasta el de Pt. Una vez allí, los iones se reducen, volviendo a ser átomos de Cu. Este proceso RedOx continúa hasta que en el interior del HfO₂ se forma un CF de Cu que cortocircuita ambos electrodos, reduciendo la resistencia al LRS. En el *reset*, ocurre exactamente el mismo proceso, pero en sentido opuesto: la reducción ocurre en el Cu y la oxidación se produce en el CF, en las regiones cercanas al electrodo de Pt. De esta manera, al formarse los cationes de Cu⁺, parte del CF se diluye en el interior del HfO₂ y la resistencia cambia del LRS al HRS. Una de las principales características del ECM es que el CF generado en el interior del dieléctrico es metálico. Es importante mencionar que durante la operación de este

mecanismo también hay participación del efecto Joule ((1.2)), que facilita los procesos de oxidación.

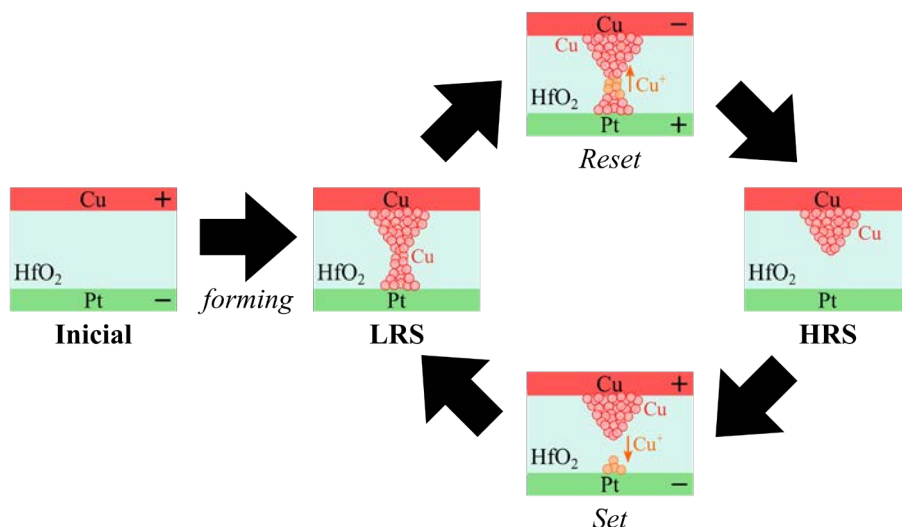


Fig. 2.5: Representación esquemática de la formación y disolución del CF de Cu generado en estructuras Cu/HfO₂/Pt durante la RS. La caracterización TEM de estos dispositivos revela que el filamento tiene una forma cónica. A su vez, la forma de este cono sugiere que el filamento crece desde el electrodo de Cu hacia el de Pt, y que la RS se da en la región cercana al electrodo de Pt [51].

2.1.2.2. Memorias de cambio de valencia

El VCM es el homónimo del ECM solo que, en este caso, en lugar de ser cationes metálicos, los iones que definen el CF son las $V_0^{\bullet\bullet}$. Este mecanismo se observa principalmente en óxidos con metales de transición (HfO_x, NiO_x, TiO_x...) y cuando los electrodos están formados por metales que dificultan la aparición del TCM, ya sea porque su oxidación es muy complicada o porque es difícil recuperar la forma metálica del catión. En este mecanismo, al aplicar un campo eléctrico en el dispositivo, los aniones de oxígeno (O^{2-}) son arrancados de su posición cristalina, dando lugar a las $V_0^{\bullet\bullet}$. Teniendo en cuenta el campo eléctrico aplicado y la carga eléctrica de estos iones, las $V_0^{\bullet\bullet}$ son arrastradas hacia el cátodo (electrodo negativo) mientras que los O^{2-} viajan hasta el ánodo (electrodo positivo). Normalmente, el ánodo está formado por un material que puede actuar como intercambiador y reserva de oxígeno, de tal manera que estos aniones se pueden acumular en su interior. A su vez, también es posible que los O^{2-} sean oxidados, formando O_2 , lo que hace que en algunos casos se observen burbujas en el electrodo superior después del *forming*. A medida que las $V_0^{\bullet\bullet}$ se depositan en el cátodo, estas acaban formando un CF que conecta ambos electrodos, reduciendo la resistencia del dispositivo al LRS. Es importante mencionar

que las V_0^{**} provocan, por un lado, una reordenación de la estructura cristalina del óxido, el cual trata de adaptarse a esta ausencia de oxígeno. Por otro lado, más importante aún, inducen una reducción del metal presente en el óxido, que reduce las V_0^{**} (carga +2) a V_0 (carga 0), y que permite compensar la falta de oxígeno. Este es el efecto que da nombre al mecanismo, ya que la reducción implica un cambio de valencia de los átomos metálicos.

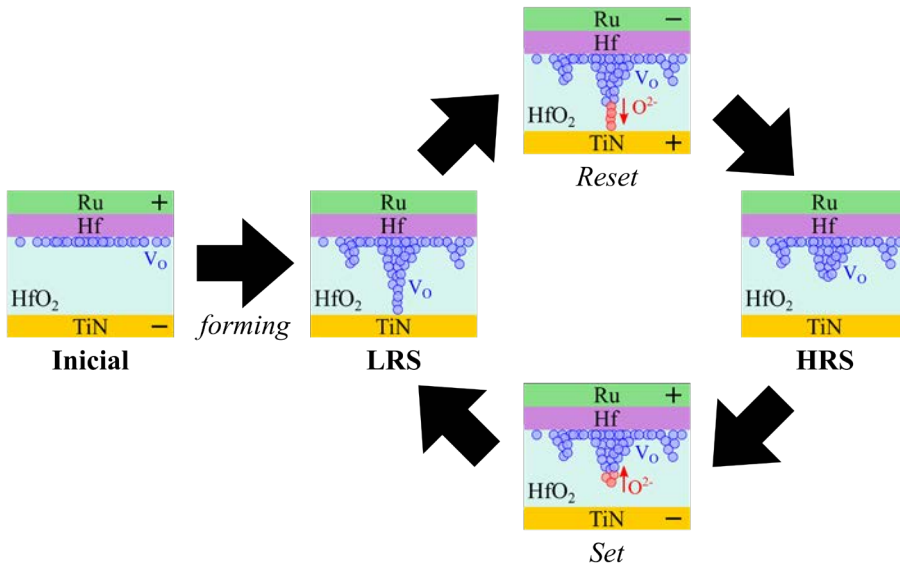


Fig. 2.6: Representación esquemática del VCM en una estructura Ru/Hf/HfO_x/TiN. El Ru sirve para realizar el contacto con el Hf. La capa de Hf permite generar una deficiencia de oxígeno en la intercara con el HfO_x, formando una capa HfO_{x-y} que facilita la formación de V_0^{**} . En este caso V_0 representa la posición de las vacantes después de ser reducidas.

En la **Fig. 2.6** se muestra una representación esquemática del funcionamiento del VCM en una estructura de Ru/Hf/HfO_x/TiN [17]. Es importante mencionar que la capa de Hf permite generar una región HfO_{x-y} en la intercara entre el Hf y el HfO_x que facilita la formación de V_0^{**} . En el *forming*, debido al campo eléctrico y a la ausencia de oxígeno en la intercara, los átomos de oxígeno son arrastrados hasta el ánodo, generando un camino de alta conducción que acaba conectando ambos electrodos y deja el dispositivo en el LRS. Una vez en este estado, al aplicar un campo eléctrico de sentido opuesto, los O^{2-} pueden volver hacia el interior del óxido donde se recombinan con las vacantes, eliminando parte del CF. Es en este momento cuando ocurre el *reset* y la resistencia del dispositivo aumenta al HRS. Al aplicar una tensión de polaridad opuesta se realiza el *set*, volviendo a formar el CF y dejando otra vez la resistencia en el LRS.

2.1.2.3. Memorias termoquímicas

El TCM no es más que una combinación de los dos mecanismos anteriores (ECM y VCM) con una crucial diferencia: la migración de los cationes metálicos y de las $V_0^{\bullet\bullet}$, así como las reacciones RedOx, están inducidas por efectos térmicos debido al efecto Joule ((1.2)). Esta particularidad es la que hace que en las memorias de TCM se observe un comportamiento unipolar de la RS, en lugar del bipolar que presentan las memorias de ECM y de VCM. Es importante mencionar que, aunque el principal causante del TCM es el efecto térmico, el campo eléctrico sigue teniendo cierta relevancia a la hora de determinar la naturaleza y la formación del CF, favoreciendo el movimiento o de los cationes metálicos o de las $V_0^{\bullet\bullet}$. Esto se puede observar en las estructuras analizadas en este capítulo (Ni/HfO₂/n⁺Si) las cuales solo presentan efecto rectificador, indicación de la formación de un CF metálico de Ni, cuando el proceso de *forming* induce la electromigración del Ni, es decir, cuando el campo eléctrico se dirige desde el electrodo de Ni hacia el electrodo de Si [50].

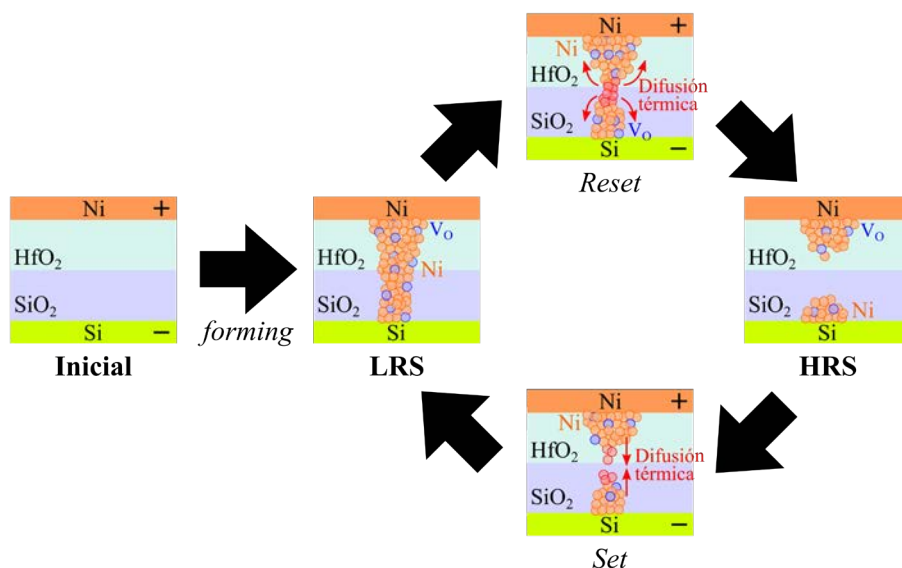


Fig. 2.7: Representación esquemática de la migración térmica de Ni en estructuras Ni/HfO₂/SiO₂/n⁺Si que da lugar al modo RS unipolar. En el TCM, tanto la destrucción como regeneración del CF esta principalmente controlado por la energía térmica liberada por efecto Joule en el interior del óxido. Durante el proceso de *forming* se pueden generar V_0 que facilitan la migración térmica del Ni.

En la **Fig. 2.7** se muestra una representación del funcionamiento del TCM en estructuras de Ni/HfO₂/SiO₂/n⁺Si [33]. En este caso la formación del CF se debe a la migración térmica del Ni en el interior del óxido. Durante el proceso de *reset* y *set* el CF de Ni es parcialmente destruido o regenerado, respectivamente, dando lugar al HRS y al LRS. En el TCM se suele considerar que la destrucción del CF se da en su

región más débil, lo que supone que, en este caso, en el HRS se establezcan dos protuberancias de Ni. Pero no hay consenso al respecto, ya que también se observan casos en los que el CF se diluye en la región cercana al contraelectrodo [33]. La presencia de V_0 en el filamento se debe a que, normalmente, durante el *forming* se crea un camino percolativo de estos defectos que facilita el movimiento de los iones de Ni y la formación del CF metálico.

Es importante destacar el hecho de que el CF también puede estar formado exclusivamente por V_0 y que los átomos de los electrodos no participen en su generación. Este es el caso de documentado por Kwon *et al.* [34] en estructuras Pt/TiO₂/Pt, donde se observó la formación de un CF de Ti₄O₇ debido a la generación térmica de $V_0^{\bullet\bullet}$ en el interior de la capa de TiO₂. En algunos casos es incluso posible que, debido a la reducción del óxido, se genere un CF metálico, como ocurre en estructuras Pt/ZnO/Pt [52] en las cuales se reporta la formación de un filamento de Zn.

2.2. Descripción de los dispositivos

Los dispositivos analizados en este capítulo son estructuras Ni/HfO₂/n⁺Si con tres espesores diferentes de HfO₂: 20 nm, 10 nm y 5 nm. Además, presentan dos áreas cuadradas diferentes: $2 \times 2 \mu\text{m}^2$ ($4 \mu\text{m}^2$) y $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ ($25 \mu\text{m}^2$). En la **Fig. 2.8a** se muestra una representación esquemática de una sección transversal de estos dispositivos. Nótese que, el área activa, está definida en las regiones donde no hay presencia de SiO₂. Es importante tener esto presente para entender el proceso de fabricación.

Estos dispositivos fueron fabricados en el IMB–CNM utilizando obleas de Si (100) tipo *n* con una resistividad de 7 – 13 mΩ·cm y producidas con el método Czochralski. El proceso de fabricación es el siguiente [53]:

- i. Limpieza estándar de las obleas y crecimiento de una capa de SiO₂ de 200 nm utilizando un proceso de oxidación térmica húmeda a 1100 °C.
- ii. Grabado de las áreas de los dispositivos en el SiO₂ utilizando un proceso de fotolitografía junto a un ataque químico húmedo.
- iii. Limpieza con H₂O₂/H₂SO₄ y sumergiendo en HF(5%).
- iv. Depósito de la capa de HfO₂ mediante la técnica de deposición de capa atómica (ALD) a 200 °C utilizando TDMAH y H₂O como precursores oxidantes, y N₂ como portador y gas de purga. El número de ciclos determina el grosor de esta capa ya sea 5 nm, 10nm o 20 nm.

- v. Proceso de *lift-off* para definir los electrodos de Ni. La capa de Ni de 200 nm se deposita utilizando la técnica de pulverización de magnetrón.

Dado este proceso, en una misma oblea no es posible obtener dispositivos con diferente espesor de HfO₂. Es por ello por lo que hay un total de tres obleas, cada una de ellas con los mismos diseños y estructuras, pero con una capa de HfO₂ de diferente grosor. En la Fig. 2.8b se muestra una imagen óptica del electrodo de Ni de un dispositivo con un área de 4 μm². Como se puede observar, este presenta una región con un área muy superior al área activa del dispositivo (Fig. 2.8c) que permite realizar el contacto eléctrico sin dañar la estructura que se quiere analizar.

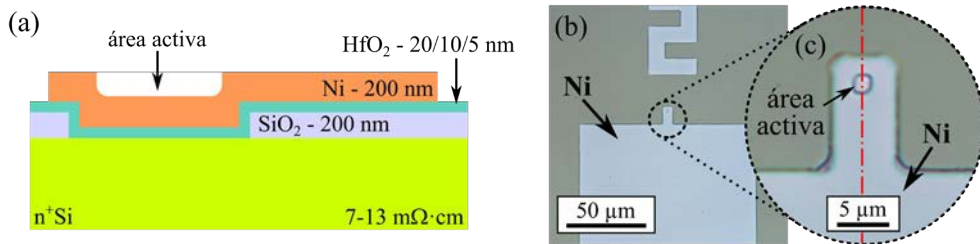


Fig. 2.8: (a) Representación esquemática de una sección transversal de los dispositivos Ni/HfO₂/n⁺Si estudiados. (b) Imagen óptica superior de un dispositivo antes de ser estresado eléctricamente. (c) Imagen ampliada de (b) en donde se observa el área activa del dispositivo (4 μm²).

2.3. Estudio experimental

2.3.1. Medidas eléctricas

En estos dispositivos se utilizaron RVS con diferentes I_{CC} para producir la ruptura dieléctrica. Igualmente, aplicando un único valor de I_{CC} , se emplearon RVS para elaborar los ciclos de RS. La caracterización de la $I-V$ de los dispositivos fue realizada a temperatura ambiente, utilizando un SPA HP 4155B y fijando el sustrato a 0 V mientras que el RVS se aplicaba al electrodo de Ni. Hay que mencionar que, no solo se estableció el valor de I_{CC} a través del SPA, sino que, además, se programó para que detuviera el estrés una vez se alcanzado dicho valor.

Condición	Polaridad	I_{CC}	Condición	Polaridad	I_{CC}
1	+	10 mA	4	-	10 mA
2	+	1 mA	5	-	1 mA
3	+	100 μA	6	-	100 μA

Tabla 2.1: Conjunto de condiciones eléctricas utilizadas para evaluar el impacto que tiene la ruptura dieléctrica en la intercara Ni/HfO₂. La polaridad indica si la tensión del electrodo superior es (+) positiva o (-) negativa.

Para evaluar el impacto de la ruptura dieléctrica en los dispositivos, tanto a tensiones positivas como negativas, se utilizaron tres valores diferentes de $I_{CC} = [10 \text{ mA}; 1 \text{ mA}; 100 \text{ }\mu\text{A}]$. En la **Tabla 2.1** se muestra un listado de todas las condiciones utilizadas. Con el fin de considerar la variabilidad, la misma condición fue utilizada en tres dispositivos idénticos (misma área y espesor). Esto supone que, en total, se evaluaron los cambios físicos producidos por la ruptura dieléctrica en 108 dispositivos. En las **Fig. 2.9a,b**, se muestran ejemplos representativos de las rupturas producidas en las diferentes estructuras a tensiones negativas (**Fig. 2.9a**) y positivas (**Fig. 2.9b**). Nótese que $I_{CC} = 100 \text{ }\mu\text{A}$ para los ejemplos mostrados.

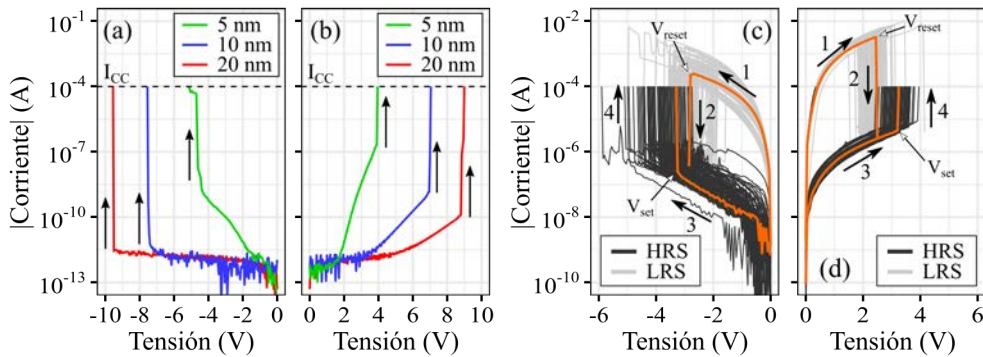


Fig. 2.9: Característica I - V típica de los dispositivos de $25 \text{ }\mu\text{m}^2$ para tensiones (a) negativas y (b) positivas. Característica I - V de una secuencia de 100 ciclos de RS unipolares (c) negativos y (d) positivo, para dispositivos $\text{Ni}/(20 \text{ nm})\text{HfO}_2/\text{n}^+\text{Si}$ con $25 \text{ }\mu\text{m}^2$ de área. Los procesos de *forming* (no mostrado) y set fueron limitados a $I_{CC} = 100 \text{ }\mu\text{A}$. En (c) y en (d) se resalta uno de ciclos de RS realizados.

RS	<i>forming</i>	set	reset	I_{CC}
Positivo	+	+	+	$100 \text{ }\mu\text{A}$
Negativo	-	-	-	$100 \text{ }\mu\text{A}$

Tabla 2.2: Condiciones eléctricas utilizadas para realizar los ciclos de RS. Los signos indican la polaridad de la tensión aplicada al proceso: (+) positiva, (-) negativa. El valor de I_{CC} es el aplicado durante el *forming* y el set.

Para evaluar la RS, se realizaron tanto ciclos unipolares a tensión negativa (**Fig. 2.9c**) como a tensión positiva (**Fig. 2.9d**). a su vez, el proceso de *forming* se realizó en la misma polaridad que los ciclos de RS (**Tabla 2.2**). Además, solo se estableció un único valor de I_{CC} para el *forming* y el set ($I_{CC} = 100 \text{ }\mu\text{A}$) y se realizaron 5 y 100 ciclos de RS. Si bien en todos los dispositivos fue posible realizar los 5 ciclos de RS, permitiendo el análisis de los cambios inducidos por este número de ciclos, no en todos se llegó a alcanzar los 100 ciclos. Es importante remarcar que, tal y como se discute en la sección experimental (Sec. 2.4), algunos dispositivos no son capaces de mostrar la RS para ciertas condiciones eléctricas.

Como ya se ha mencionado, la caracterización eléctrica de los dispositivos se realizó utilizando un SPA HP 4155B. Sin embargo, el equipo no fue controlado manualmente, sino mediante un programa de MATLAB, el cual permitió realizar la caracterización de los ciclos RS de manera automática. Es importante mencionar que este programa está basado en uno anterior desarrollado en el grupo de capas delgadas de dieléctricos avanzados (ATDF) del IMB–CNM. La clave de este es que es capaz de detectar, después de un proceso de calibración, el *reset* del dispositivo, permitiendo parar la medición en ese instante. Si recordamos, para que ocurra el *reset* no se establece un valor de I_{CC} –a nivel experimental se introduce el máximo valor que permite el equipo–. Dada esta condición, si se sigue aplicando un estrés después del *reset*, llegaría un momento en el que se produciría una ruptura dieléctrica del tipo HBD en el dispositivo. Por este motivo, es clave asegurar que el programa detecta correctamente el evento de *reset*, para así poder aplicar un nuevo estrés eléctrico con las condiciones adecuadas para inducir el *set*. El proceso de calibración supuso realizar varias pruebas de ciclos RS en varios dispositivos para así definir correctamente la detección. Finalmente, las características I - V de los dispositivos, tanto de la ruptura como de los ciclos RS, fueron analizados con MATLAB.

2.3.2. Medidas físicas

Hay que tener presente que el objetivo principal de este capítulo es evaluar y caracterizar los cambios físicos que se producen en la intercara Ni/HfO₂ después de una ruptura dieléctrica controlada y después de un cierto número de ciclos de RS. En la **Fig. 2.10** se muestra en detalle el procedimiento que se ha seguido para realizar dicha caracterización:

- i. **Aplicar estrés eléctrico (Fig. 2.10a)** → Inducimos el daño en el dispositivo, ya sea con la ruptura dieléctrica o con los ciclos RS.
- ii. **Retirar electrodo de Ni (Fig. 2.10b)** → Una vez el dispositivo ha sido dañado, se realiza un ataque químico húmedo con H₂O:HNO₃ (4:1) para remover el Ni de manera específica.
- iii. **Microscopio electrónico de barrido (SEM) (Fig. 2.10c)** → Sin la capa de Ni, se puede realizar una inspección SEM del área activa del dispositivo. La caracterización se realizó con un Carl Zeiss Auriga 40 SEM–EDX aplicando un haz de electrones de 3 KeV. Este proceso nos permite obtener una primera imagen del daño inducido.
- iv. **Microscopio de fuerzas atómicas (AFM) (Fig. 2.10d)** → Adquirimos la topografía de las regiones dañadas. Esta caracterización se realiza en modo *tapping*, utilizando un Veeco Dimension 3100 AFM con un controlador

Nanoscope IV. Gracias a la caracterización SEM sabemos dónde están situadas estas regiones, facilitando este proceso de caracterización.

- v. **Espectrometría de dispersión de energía de rayos X (EDX) (Fig. 2.10e)** → Permite, utilizando un haz de electrones concentrado, analizar la composición química de la región dañada. Es importante señalar que esta técnica es muy cualitativa y solo permite conocer las proporciones de los elementos químicos. El EDX es un PentaFET Precision INCAx-act Oxford Instrument, el cual está incorporado en el SEM Auriga mencionado anteriormente. Con el fin de reducir la señal del Si lo máximo posible, el análisis se realizó utilizando un haz de electrones de 3 KeV. Dado que el haz está muy focalizado, esta técnica puede llegar a inducir cambios topográficos en la región analizada, por ello la caracterización AFM se realizó antes que el EDX.

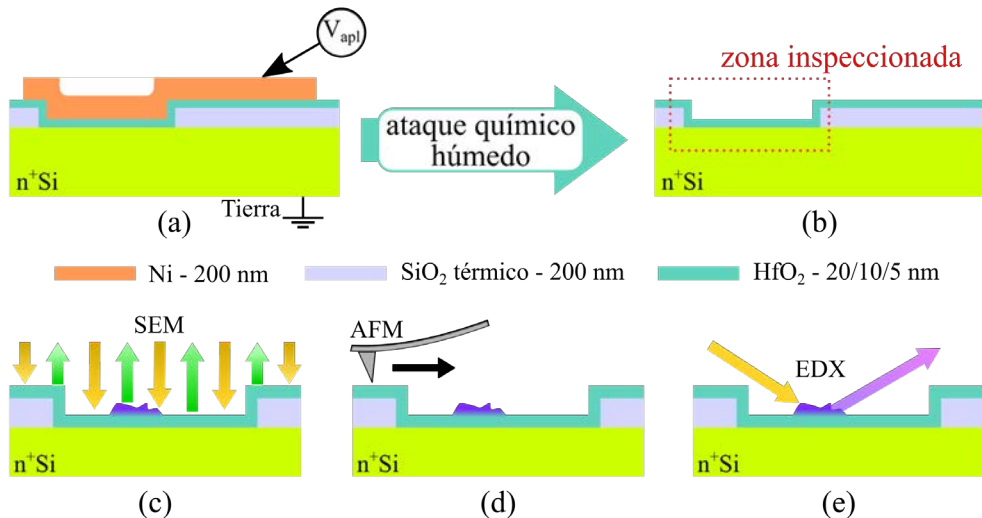


Fig. 2.10: Descripción del proceso experimental realizado: (a) aplicar un estrés eléctrico, (b) dispositivo después de retirar el Ni con un ataque químico húmedo, (c) caracterización SEM del área activa, (d) caracterización AFM de la región dañada y (e) análisis EDX de la estructura generada sobre el HfO_2 .

2.4. Caracterización eléctrica

2.4.1. Distribución de V_{BD}

Dada la naturaleza estocástica de la ruptura dieléctrica, se espera que, al igual que con los t_{BD} , los valores de V_{BD} sigan una distribución de Weibull ((1.4)). En la Fig. 2.11 se muestran las distribuciones de V_{BD} reportadas en [TSF 2020] incorporando los datos correspondientes a los dispositivos con una capa de HfO_2 de 5 nm de espesor. A su

vez, en la **Fig. 2.11** se representa el ajuste de los datos experimentales con la distribución de Weibull. Los valores de los parámetros η y β se encuentran recogidos en la **Tabla 2.3**. Nótese que en este caso $\eta = V_{BD(63\%)}$, tal y como se indica en la **Fig. 2.11**. Como es de esperar, a mayor espesor de la capa de HfO_2 , mayor es el valor de V_{BD} ; y cuanto más grande es el área del dispositivo, menores son los valores de V_{BD} [54]. Respecto a los efectos de la polaridad, se aprecia que los valores de V_{BD} son mayores a tensiones negativas que a positivas, coincidiendo con resultados previamente documentados [50]. Esta diferencia se puede atribuir a que, al estar trabajando con un semiconductor dopado con impurezas tipo n , el dispositivo se encuentra en acumulación al aplicar tensiones positivas mientras que con negativas está en inversión. Esto implica que, para obtener el mismo campo eléctrico en ambas polaridades, la tensión que hay que aplicar, en valor absoluto, es mayor a negativa que a positiva.

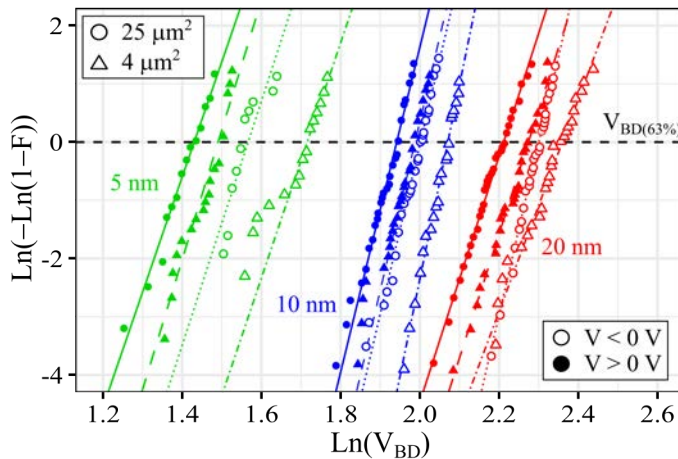


Fig. 2.11: Representación de Weibull de las tensiones de ruptura (V_{BD} en V) para los diferentes tipos de dispositivos y polaridades. $V_{BD(63\%)}$ representa el valor para el cual la distribución equivale a $F = 63\%$.

Espesor HfO_2 (nm)	Área (μm^2)	Unipolar Negativa		Unipolar Positiva	
		η (V)	β	η (V)	β
20	25	9.98	29.5	9.13	21.1
	4	10.59	18.2	9.72	21.3
10	25	7.40	29.1	6.97	27.9
	4	7.93	33.3	7.30	29.0
5	25	4.79	20.94	4.18	19.77
	4	5.56	20.18	4.44	22.28

Tabla 2.3: Parámetros del ajuste de los datos experimentales mostrados en la **Fig. 2.11** con la estadística de Weibull.

2.4.2. Evaluación de la conmutación resistiva

Como era de esperar, los 5 ciclos de RS se pudieron realizar correctamente en ambas polaridades en los dispositivos de 20 nm y 10 nm de HfO₂. Sin embargo, para 5 nm, solo fueron posible en el modo unipolar positivo [50]. En el caso de 100 ciclos, únicamente los dispositivos de 20 nm los alcanzaron en ambos modos; para 10 nm, solo en el modo unipolar negativo; mientras que, para 5 nm, no se llegaron a obtener en ningún modo. En la Fig. 2.12 se muestra el análisis estadístico de los parámetros de RS correspondientes a los de 20 nm para los dos métodos utilizados (Fig. 2.9c,d). En las Fig. 2.12a,b están representadas, respectivamente, las distribuciones de V_{set} y V_{reset} , mientras que en las Fig. 2.12c,d se muestran los valores de las corrientes medidas en el HRS (I_{HRS}) y en el LRS (I_{LRS}), a $V = \pm 0.5$ V (según corresponda). Como puede observarse, al comparar las distribuciones de $|V_{set}|$ (Fig. 2.12a) y $|V_{reset}|$ (Fig. 2.12b) para un área y polaridad concreta, el proceso de *reset* ocurre a tensiones menores que el proceso de *set*. A su vez, $|V_{set}|$ y $|V_{reset}|$ son inferiores para polaridades positivas que para negativas en las dos áreas activas estudiadas. Esto concuerda con que las corrientes I_{HRS} y I_{LRS} son mayores en el modo unipolar positivo que en el modo unipolar negativo ya que, a mayor corriente, mayor es la energía disipada por efecto Joule en el CF. Este incremento de energía facilitaría la difusión térmica del Ni y, por ende, reduciría la tensión requerida para conmutar el estado resistivo del CF. Finalmente, como es de esperar, no se observa una correlación entre I_{LRS} y el área del dispositivo, ya que la conducción en el LRS está completamente dominada por el CF.

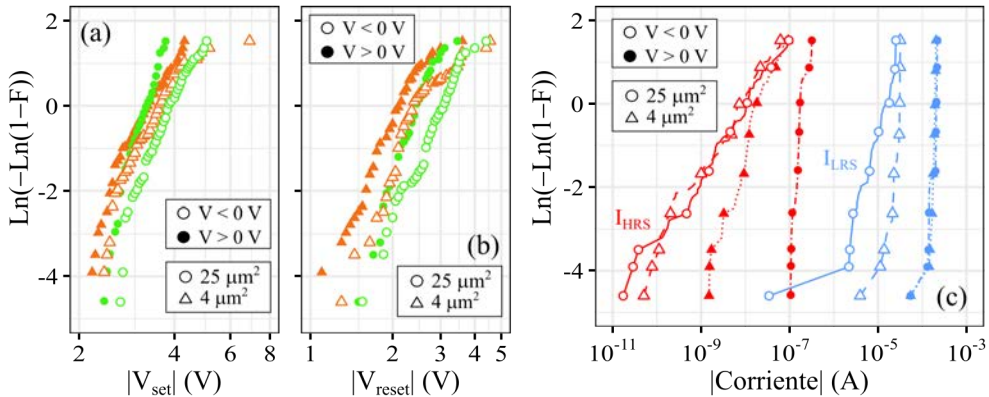


Fig. 2.12: CDF para 100 ciclos RS de los valores de (a) V_{set} , (b) V_{reset} y de (c) I_{HRS} y I_{LRS} medidas a $|V| = 0.5$ V. Los resultados provienen de dispositivos Ni/(20 nm)HfO₂/Si⁺-n para las polaridades y áreas estudiadas (Fig. 2.9c,d).

2.5. Caracterización física

2.5.1. Consideraciones iniciales

La ruptura dieléctrica controlada de los dispositivos estudiados genera un defecto o protuberancia encima de la capa del dieléctrico que fácilmente se puede observar en las inspecciones SEM (**Fig. 2.13a**) una vez el Ni superior ha sido retirado. Independientemente de las condiciones eléctricas y de las características del dispositivo, siempre se observa la formación de una protuberancia. Sin embargo, sus características, tales como su altura o forma, sí que dependen de las condiciones eléctricas utilizadas, pero son independientes del área del dispositivo (Sec. 2.5.2). En un trabajo anterior [55] ya se demostró que, después de un proceso de RS, se genera una protuberancia en la capa de HfO₂. Utilizando un AFM conductivo (CAFM) se confirmó que en esta estaba localizado el CF que daba lugar al fenómeno de RS. Considerando estos resultados previos y que no se detecta una protuberancia en los dispositivos que no fueron estresados, podemos asegurar que se origina durante la ruptura dieléctrica. Además, sabemos, por los resultados de EDX [**TSF 2020**], que la protuberancia es una aleación/compuesto que contiene Ni en su estructura cristalina. Esto concuerda con los resultados reportados en [8], en el cual se demostró que, para polaridad negativa, la protuberancia es un compuesto de Ni-Si y que el CF es un compuesto de Ni-HfO₂-Si. A su vez, estos resultados indican que no solo existe la migración del Ni, sino que también hay que tener en cuenta el DBIE durante la ruptura dieléctrica.

Antes de discutir los resultados obtenidos, hay que mencionar la principal razón por la que los dispositivos de 5 nm de HfO₂ no fueron documentados en [**TSF 2020**], ya que, a su vez, afectó a buena parte de los resultados experimentales. Al realizar la inspección SEM de los dispositivos estresados se observó que, en algunos casos, sobre la capa de HfO₂ había una gran multitud de estructuras esféricas (**Fig. 2.13b**). Estas estructuras fueron identificadas en los tres trozos estudiados. Es decir, que aparecen en los tres espesores de HfO₂ analizados. Su cantidad varía de dispositivo a dispositivo y, en los casos con poca cantidad, es fácil identificar la protuberancia generada por el estrés eléctrico. Evidentemente, la generación de estas esferas no era esperada y, con el fin de encontrar alguna explicación, se realizó una inspección SEM en detalle de todos los dispositivos, tanto de los estresados como de los que no. Esto reveló que, estas esferas, también aparecían en dispositivos no estresados (**Fig. 2.13b**), por lo que su generación no puede estar atribuida a la ruptura dieléctrica. Analizando en detalle la cantidad de estas esferas en los dispositivos, así como la localización de los dispositivos con estas estructuras, se identificó el mismo comportamiento en los tres trozos de oblea analizados: a medida que nos desplazábamos en una dirección

concreta en la superficie de la oblea, la densidad de esferas aumentaba. Dado que estas estructuras no son consecuencia de la ruptura, no afectan directamente a los resultados obtenidos. Sin embargo, sí que pueden suponer una complicación a la hora de caracterizar la protuberancia, ya que hay casos en los que la cantidad de esferas es tan elevada que no permiten identificar el daño producido. En el caso concreto de los dispositivos con 5 nm de espesor de HfO_2 , sucede que estas esferas han impedido reconocer la generación de la protuberancia en condiciones eléctricas concretas. Por este motivo, y para evitar la discusión de estas estructuras, los resultados de 5 nm no fueron discutidos en [TSF 2020]. Finalmente, es importante remarcar que realizaron algunos análisis de EDX con el fin de identificar estas estructuras esféricas. Sin embargo, no se obtuvieron resultados concluyentes.

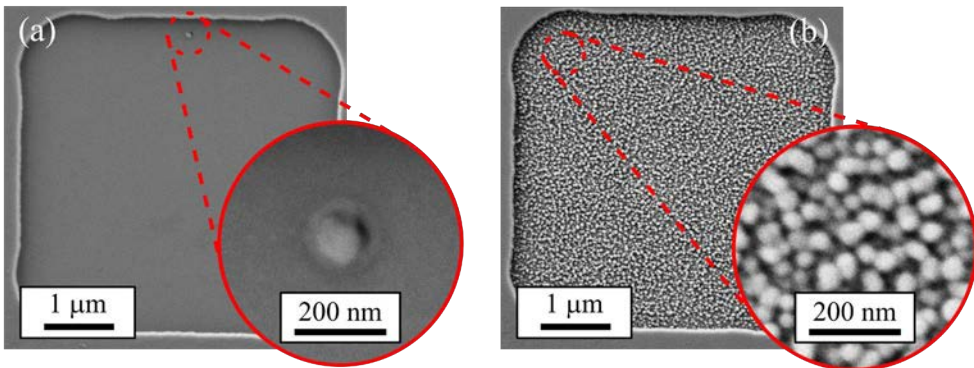


Fig. 2.13: Imágenes SEM de dispositivos $\text{Ni}/(20\text{nm})\text{HfO}_2/\text{n}^+\text{Si}$ de $25\ \mu\text{m}^2$ después de retirar el Ni. Imagen SEM y ampliación (a) del defecto formado en el dispositivo después de la ruptura dieléctrica y (b) de las estructuras esféricas observadas en un dispositivo sin estresar eléctricamente.

2.5.2. Impacto de la ruptura dieléctrica

A continuación, se realiza el análisis del daño producido en la intercara Ni/HfO_2 de los dispositivos después de aplicar una ruptura dieléctrica controlada. A su vez, se evalúa el impacto que las diferentes variables (espesor del HfO_2 , polaridad y I_{CC}) tienen en el daño producido.

En la Fig. 2.14 se muestran las protuberancias observadas en dispositivos con 20 nm de grosor de HfO_2 después de sufrir una ruptura dieléctrica controlada a tensiones positivas (Fig. 2.14a-c) y a tensiones negativas (Fig. 2.14d-f). Es importante matizar que estos resultados son representativos del daño observado en dispositivos con 10 nm de grosor de HfO_2 , tal y como se discute en [TSF 2020]. En la Tabla 2.4 se describen las características más destacables de las protuberancias generadas según la polaridad y el valor de I_{CC} . Como puede observarse, las formadas a tensiones positivas son completamente diferenciables de las producidas a tensiones negativas,

independientemente del valor de I_{CC} . Además, en ambas polaridades, el daño producido a $I_{CC} = 100 \mu\text{A}$ (Fig. 2.14b,e) y $I_{CC} = 1\text{mA}$ (Fig. 2.14c,f) es muy similar, mientras que el producido a $I_{CC} = 10\text{mA}$ (Fig. 2.14a,d) es completamente diferente. De entre las diferentes formas identificadas, creemos que merece la pena destacar la estructura en forma de anillo que se forma alrededor de las protuberancias generadas a tensión positiva para $I_{CC} = 1\text{mA}$ y $I_{CC} = 100 \mu\text{A}$ (Fig. 2.14b,c). Coincidentemente, en el estudio de la distribución de eventos de ruptura realizado en [MR 2020] se observa que, alrededor de las marcas de ruptura, existe una región de inhibición donde la aparición de nuevos eventos es menos probable de lo esperado. Esta inhibición se atribuye a que, debido al efecto Joule, en las regiones cercanas al CF se producen cambios microestructurales que modifican las características del dieléctrico. Estos mismos cambios alrededor del CF podrían llegar a explicar la formación de esta estructura en forma de anillo (Fig. 2.14b,c).

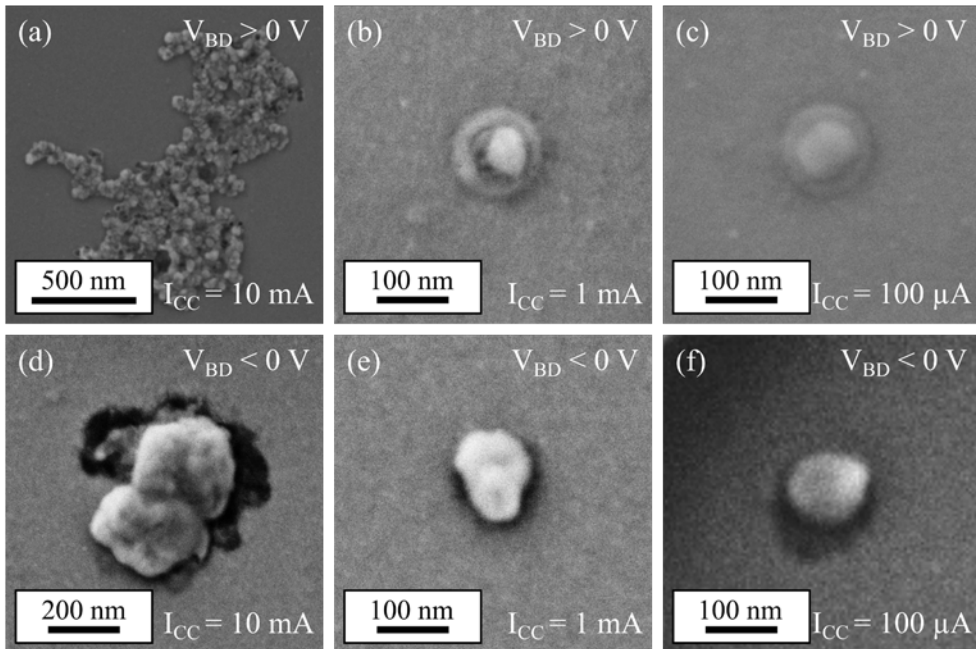


Fig. 2.14: Imagen SEM de las estructuras generadas en la superficie del dieléctrico de dispositivos $\text{Ni}/(20\text{nm})\text{HfO}_2/\text{n}^+\text{Si}$ después de una ruptura dieléctrica (a,b,c) positiva y (d,e,f) negativa. La I_{CC} aplicada es (a,d) 10 mA, (b,e) 1 mA y (c,f) 100 μA .

En la Fig. 2.15 se muestran las inspecciones realizadas con SEM de los dispositivos con 5 nm de espesor de HfO_2 después de sufrir una ruptura dieléctrica controlada. En una primera comparación de estos resultados con los obtenidos para 20 nm y 10 nm (Fig. 2.14) ya se puede concluir que son completamente diferentes (Tabla 2.4). En este caso, solo la ruptura generada a tensión positiva con $I_{CC} = 1\text{mA}$

(Fig. 2.15b) muestra un daño localizado, mientras que, en el resto, el daño está completamente distribuido por toda el área activa del dispositivo. Nótese que, pese a que se identifica una protuberancia localizada a tensión positiva e $I_{CC} = 1\text{ mA}$, la estructura con forma de anillo observada para 20 y 10 nm (Fig. 2.14b,c) desaparece. Analizando el resto de las condiciones eléctricas, a tensión positiva con $I_{CC} = 10\text{ mA}$ (Fig. 2.15a), se identifican varias protuberancias a la vez que unas estructuras con forma de hilo. Por otro lado, a tensión negativa se forma una distribución de defectos cuya cantidad aumenta con el valor de I_{CC} (Fig. 2.15d-f). Es importante destacar que, lamentablemente, todos los dispositivos sometidos a una ruptura dieléctrica positiva con $I_{CC} = 100\text{ }\mu\text{A}$ resultaron estar localizados en una región con alta densidad de estructuras esféricas (Fig. 2.15c), impidiendo saber si esta ruptura induce algún tipo de daño en la intercara. Pese a ello, dado los resultados obtenidos para 20 nm y 10 nm (Tabla 2.4), no es descartable la posibilidad de que se haya generado un defecto y que sea muy similar al observado a $I_{CC} = 1\text{ mA}$ (Fig. 2.15b).

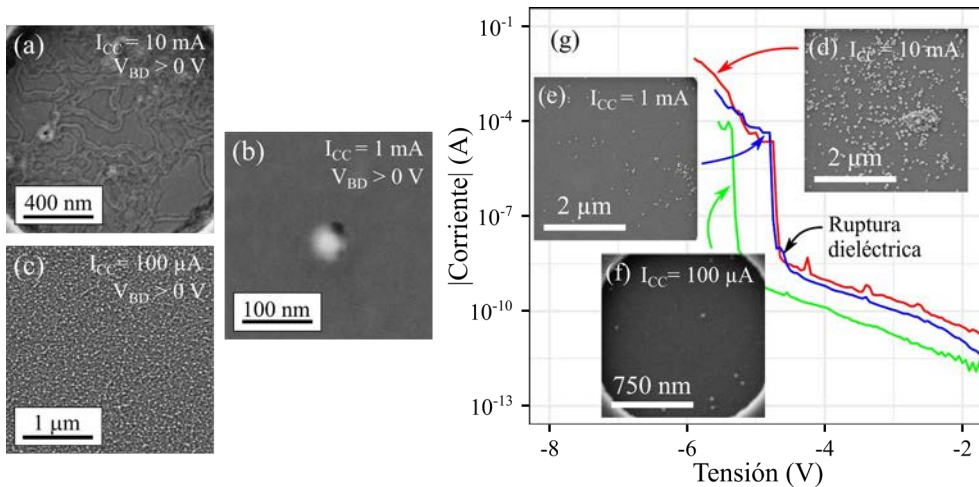


Fig. 2.15: Imagen SEM de las estructuras generadas en la superficie del dieléctrico de dispositivos Ni/(5nm)HfO₂/n⁺Si después de una ruptura dieléctrica (a,b,c) positiva y (d,e,f) negativa. (g) Características I - V de los dispositivos (d-f). La I_{CC} aplicada es (a,d) 10 mA, (b,e) 1 mA y (c,f) 100 μ A.

El daño observado en los dispositivos con una capa de HfO₂ de 5 nm de espesor después de una ruptura dieléctrica a tensión negativa (Fig. 2.15d-f) se puede explicar al analizar las características I - V de los mismos (Fig. 2.15g). Como puede observarse, la ruptura supone un incremento abrupto de la corriente. Sin embargo, no alcanza el valor de I_{CC} , sino que se queda por debajo ($I < 100\text{ }\mu\text{A}$). Debido a esto, el estrés no se detiene, y la corriente continúa aumentando progresivamente hasta alcanzar el valor de I_{CC} establecido. Este ligero incremento estaría asociado a la generación de nuevos

eventos de ruptura y, por ello, se identifican más protuberancias al incrementar I_{CC} (Fig. 2.15d-f).

		I _{CC} (A)	Espesor HfO ₂	
			20/10 nm	5 nm
Polaridad	Positiva	10 ⁻²	Área elevada	Ocupa toda el área activa
			Formada por granos muy pequeños	Estructuras con forma de hilo
		10 ⁻³	Área pequeña	Área pequeña
	La protuberancia está rodeada por una estructura en forma de anillo		Daño localizado	
	Negativa	10 ⁻²	Área media	Generación de una gran cantidad de defectos en toda el área activa
			Formada por esferas grandes	
10 ⁻³		Área pequeña	El número de defectos	
	Más alto que el daño producido a tensión positiva	aumenta con el valor de I_{CC}		

Tabla 2.4: Características del daño inducido en los dispositivos después de una ruptura dieléctrica.

Analizando los resultados presentados en general y, especialmente, los correspondientes a los dispositivos con 20 nm y 10 nm de HfO₂, se puede concluir que existe una dependencia del daño producido con la polaridad de la tensión aplicada. Como se ha insistido (Sec. 1.6 y 2.1.2) la formación de un CF es un proceso complejo que suele implicar la concurrencia de varios mecanismos. En un estudio previo sobre estos mismos dispositivos [50], se analizó su característica $I-V$ después de aplicarles una ruptura dieléctrica controlada en ambas polaridades. Al hacerlo, se reportó que, en los sometidos a una ruptura positiva, aparecía el efecto autorectificador, el cual indica la formación de una barrera Schottky entre un metal y un semiconductor [56]. Por ello, se dedujo que el CF generado a tensión positiva tenía que estar formado principalmente por Ni. Tal y como se discute en el trabajo [50], mientras que en ambas polaridades se induce la formación de V_0^{**} [33], solo a polaridad positiva se refuerza la migración de cationes de Ni [57]–[60], facilitando la generación de un CF de Ni. Por tanto, la dependencia del daño generado en la capa a de HfO₂ con la polaridad de la ruptura (Tabla 2.4) podría ser un reflejo de esta diferencia en la formación del CF.

Con el fin de completar el estudio de los defectos, en la Fig. 2.16 se muestra la caracterización AFM realizada de las protuberancias generadas a $I_{CC}=1$ mA. Las Fig. 2.16a,b muestran un ejemplo representativo del daño inducido en capas de HfO₂ de 20nm y 10 nm de espesor, mientras que el producido en 5 nm de HfO₂ está representado en las Fig. 2.16c,d. Nótese que estas caracterizaciones AFM corresponden a las protuberancias mostradas en las Fig. 2.14b,e y Fig. 2.15b,e. Lo primero, y más importante, es que estas imágenes AFM confirman que la

protuberancia está situada encima de la capa del dieléctrico, indicando, a su vez, que su formación se produce en el interior del electrodo de Ni [8]. Además, esta caracterización confirma la existencia de la estructura en forma de anillo alrededor de la protuberancia que se genera a tensiones positivas en 20 nm y 10 nm de HfO_2 (Fig. 2.16a) [TSF 2020]. Adicionalmente, también se revela que, para estos espesores, el daño inducido a tensión positiva tiene una altura menor que el producido a tensiones negativas (Fig. 2.16b). Analizando las protuberancias generadas en 5 nm, no se observa ninguna diferencia aparente entre la formada a tensión positiva (Fig. 2.16c) y las generadas a tensión negativa (Fig. 2.16d). Además, en estas últimas (Fig. 2.16d), no se aprecia ninguna diferencia entre ellas. Por tanto, se refuerza la hipótesis de que, a tensión negativa, después de la primera ruptura, hay varios eventos sucesivos hasta alcanzar el valor de I_{CC} . Interesantemente, la Fig. 2.16c desmiente la existencia del agujero que parece apreciarse en la inspección SEM (Fig. 2.15b). Finalmente, comparando los resultados de 20 nm y 10 nm (Fig. 2.16a,b) con los de 5 nm (Fig. 2.16c,d) se puede apreciar que las protuberancias generadas en la capa más fina son más pequeñas.

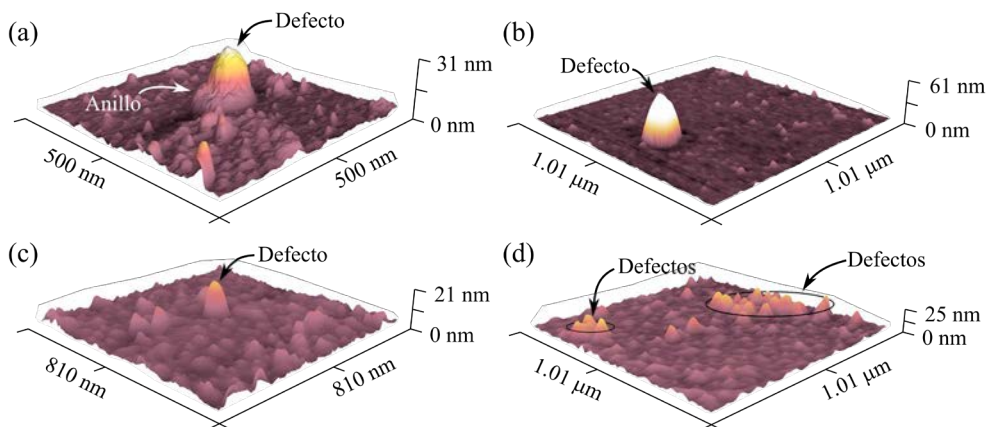


Fig. 2.16: Imagen AFM de la topografía de las protuberancias generadas a $I_{CC} = 1\text{mA}$ mostradas (a) en la Fig. 2.14b, (b) en la Fig. 2.14e, (c) en la Fig. 2.15b y (d) en la Fig. 2.15e. La polaridad de la ruptura es positiva para (a,c) y negativa para (b,d).

2.5.3. Degradación inducida por los ciclos de conmutación resistiva

Una vez analizado el efecto de la ruptura dieléctrica, podemos pasar a evaluar el daño inducido por los ciclos de RS, es decir, analizar como la protuberancia generada por la ruptura cambia debido a este proceso. Es importante recordar que la RS es un fenómeno localizado en el CF y que, por tanto, la posición de la protuberancia identificada después de los ciclos está determinada por la ruptura dieléctrica controlada (proceso de *forming*). En la Fig. 2.17 se muestran las protuberancias

reconocidas después de 5 ciclos de RS en modo unipolar con $I_{CC} = 100 \mu A$. Nótese que, para 20 nm, los dos dispositivos muestran, debido a su localización, una gran cantidad de estructuras esféricas (Fig. 2.17a,d). Además, es importante remarcar que en este caso sí que se puede observar el daño producido en 5 nm a tensión positiva (Fig. 2.17c). Como se puede observar, tanto la forma como el tamaño de la protuberancia es diferente a la generada después de una ruptura dieléctrica con $I_{CC} = 100 \mu A$ (Tabla 2.4). A su vez, sus características parecen depender tanto de la polaridad como del grosor del dieléctrico. En general, a mayor espesor, mayor es el área de la zona dañada. Es interesante remarcar que, mientras que la ruptura dieléctrica produce una protuberancia similar en 20 nm y 10 nm –una protuberancia con anillo a tensión positiva y una protuberancia elevada a negativa–, los cambios inducidos por los ciclos no son iguales en los dos espesores (Fig. 2.17a,b,d,e).

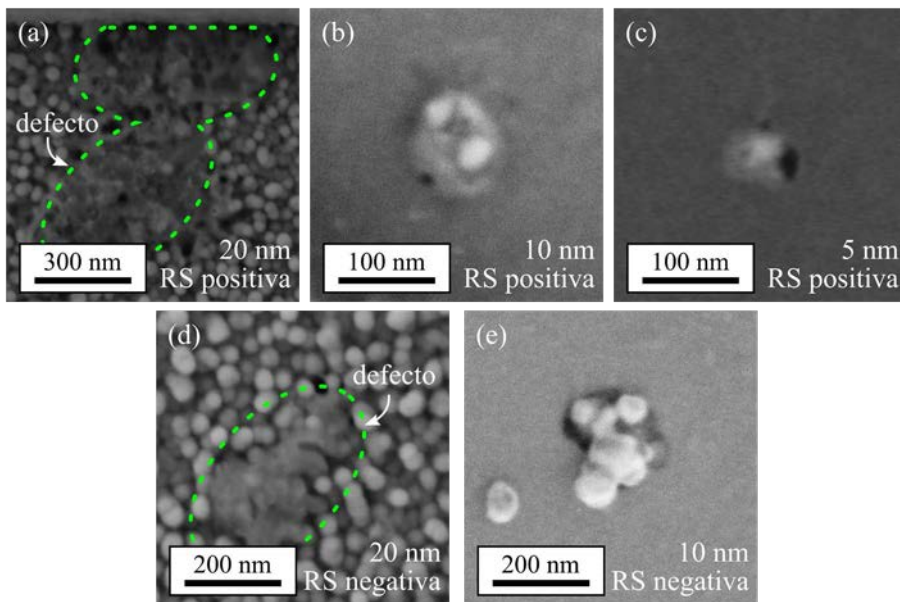


Fig. 2.17: Imagen SEM de las estructuras generadas en la superficie del dieléctrico de los dispositivos estudiados después de (a,b,c) 5 ciclos RS unipolares positivos y (d,e) 5 ciclos RS unipolares negativos, con $I_{CC} = 100 \mu A$. El grosor de la capa de HfO_2 es de (a,d) 20 nm, (b,e) 10 nm y (c) 5 nm.

Los cambios observados debido a los ciclos de RS se pueden atribuir a que, durante estos ciclos, hay una continua difusión de los materiales que definen el CF (Ni, Si, Hf y O). Es decir, el movimiento de los materiales no se da exclusivamente durante la ruptura, sino que durante la RS también existe esta migración de átomos e iones hacia el interior del electrodo de Ni. Por este motivo, la protuberancia observada después de los ciclos no solo tiene una forma diferente, sino que también es mayor que la percibida después de la ruptura dieléctrica.

2.5.4. Degradación incontrolada durante la conmutación resistiva

Si bien el comportamiento general es que después de los ciclos de RS se observa una protuberancia encima de la capa de HfO_2 (Fig. 2.17), en algunos dispositivos se puede ver que el área activa está completamente degradada (Fig. 2.18a,d). Este fenómeno se observa independientemente de las características del dispositivo y de las condiciones eléctricas de la RS. Es decir, aparece en todas las áreas y espesores analizados, siendo más frecuente en las áreas de $4 \mu\text{m}^2$ que en las de $25 \mu\text{m}^2$; y en los dos modos utilizados para realizar la RS, siendo la degradación dependiente de la polaridad empleada. Para el modo unipolar positivo (Fig. 2.18a), el daño es tan elevado que no solo afecta al área activa del dispositivo, sino que además se expande hasta alcanzar al contacto metálico. Por otro lado, para el modo unipolar negativo (Fig. 2.18d), se observa una estructura en forma de cráter que ocupa toda el área activa del dispositivo. Es importante mencionar que este daño aparece en dispositivos que han sido capaces de completar los 5 o 100 ciclos de RS de manera satisfactoria (Fig. 2.18b,e), por lo que, en un primer momento, se podría concluir erróneamente que esta degradación ocurre en el último RVS aplicado.

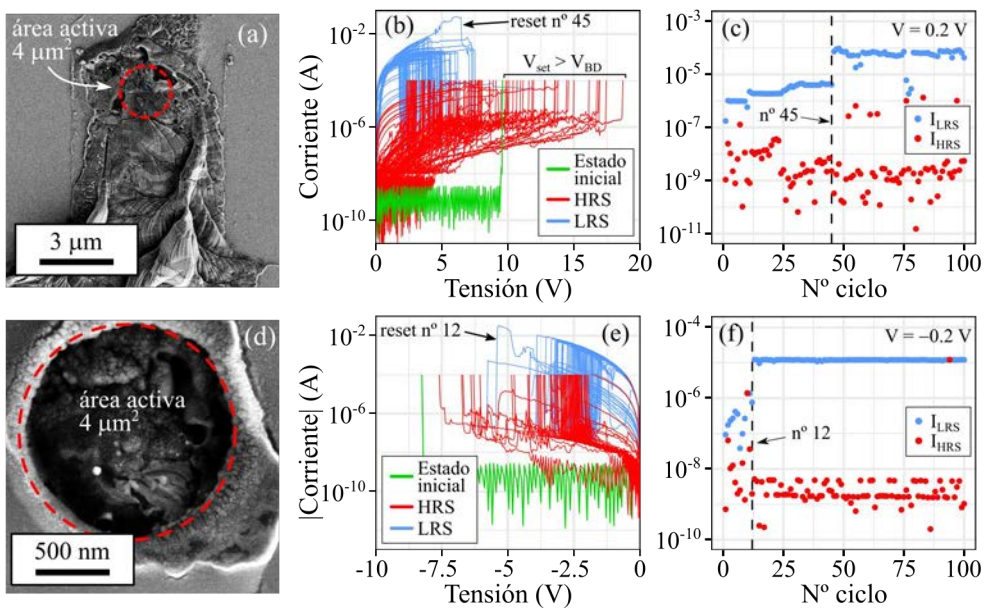


Fig. 2.18: Imagen SEM de un dispositivo después de ciclos RS unipolares (a) positivos y (d) negativos. Los dispositivos tienen un área de $4 \mu\text{m}^2$, con una capa de HfO_2 de (a) 20 nm y (d) 10 nm de espesor. (b,e) Características I - V de los ciclos RS realizados en los dispositivos. (c,f) Evolución de los valores de I_{LRS} y I_{HRS} medidos a $V = \pm 0.2$ V. Los datos mostrados en (b,c) pertenecen a (a) mientras que los mostrados en (e,f) pertenecen a (d).

Con el fin de discutir los resultados y explicar correctamente la causa de esta degradación, se analizó la evolución del estado del dispositivo (I_{HRS} y I_{LRS}) en función del número de ciclos (**Fig. 2.18c,f**). Nótese que, tanto para el modo unipolar positivo (**Fig. 2.18c**) como para el modo unipolar negativo (**Fig. 2.18f**), hay un *reset* después del cual las características del dispositivo cambian completamente [TSF 2020]. Al analizar la característica I - V de los dispositivos durante estos *resets*, indicados en las mismas representaciones, se observa que, tanto en el modo unipolar positivo (**Fig. 2.18b**) como en el negativo (**Fig. 2.18e**), la corriente alcanza valores muy elevados antes de que se produzca la conmutación del CF. Esto no es exclusivo de los dispositivos que estamos mostrando, sino que todos los que manifiestan esta degradación presentan un evento de *reset* similar. En general, todos estos alcanzan valores de corriente superiores a 10 mA. Tal y como se explica en detalle en [TSF 2020], la degradación se atribuye a este evento de *reset* –alta disipación de energía térmica por efecto Joule debido a los altos niveles de corriente alcanzados–. Analizando la tendencia de la corriente durante estos *resets* se puede observar que, a tensión positiva (**Fig. 2.18b**), aumenta de manera progresiva mientras que, a tensión negativa (**Fig. 2.18e**), alcanza valores superiores a 10 mA después de un incremento abrupto. Estas tendencias pueden explicar perfectamente la degradación producida. El incremento progresivo permitiría que la degradación se fuera extendiendo poco a poco por todo el dispositivo, produciendo la estructura que ocupa finalmente toda el área activa y que alcanza el contacto metálico (**Fig. 2.18a**). Por otra parte, el incremento abrupto, produciría una liberación repentina de energía térmica, generando una explosión en el dispositivo, dando lugar a la estructura con forma de cráter (**Fig. 2.18d**).

Finalmente merece la pena remarcar el hecho que los dispositivos siguen mostrando ciclos de RS después de la degradación (**Fig. 2.18b,e**). Es decir, la degradación no ha destruido el dispositivo completamente, sino que ha supuesto un cambio en sus características eléctricas. Analizando estas alteraciones, en el modo unipolar positivo se observa, después de la degradación, que los valores de V_{set} son superiores a V_{BD} (**Fig. 2.18b**, ver [TSF 2020]). Una explicación razonable sería que la estructura generada estuviese actuando como una resistencia en serie con el dispositivo, produciendo que la tensión aplicada al CF fuese diferente a la aplicada con el SPA. Por otro lado, la degradación producida en el modo unipolar negativo parece que mejora las propiedades de RS del dispositivo, ya que aumenta el valor de I_{LRS}/I_{HRS} . Sin embargo, los valores de I_{HRS} son tan pequeños que su lectura sería muy difícil en aplicaciones reales. Por tanto, en ninguno de los casos, la aparición de esta degradación es deseada desde el punto de vista de la fiabilidad. No solo por los

cambios que produce en las características eléctricas de los dispositivos, sino porque, en aplicaciones reales, el daño se podría extender fácilmente a otros dispositivos.

2.6. Conclusiones

Las principales conclusiones de este capítulo experimental son:

- ❖ Después de retirar el electrodo metálico de Ni utilizando un ataque químico húmedo, se ha demostrado, mediante técnicas de caracterización física y EDX, que en el interior del electrodo se forma un compuesto que contiene Ni durante una ruptura dieléctrica controlada. La formación de este compuesto indica tanto la difusión del Ni hacia el electrodo inferior como la difusión del Si y del HfO₂ hacia el electrodo superior.
- ❖ La investigación de la forma y el tamaño del compuesto generado después de la ruptura dieléctrica en función de las diferentes variables consideradas (espesor de la capa de HfO₂, polaridad, I_{CC}) ha puesto de manifiesto:
 - Que sus características son dependientes de la polaridad utilizada para producir la ruptura dieléctrica, posiblemente debido a que los mecanismos implicados en la generación del CF son diferentes.
 - Que los generados a bajos límites de corrientes son muy similares ($I_{CC} = 1$ mA y $I_{CC} = 100$ μ A) y que su tamaño se incrementa cuando se permite el paso de corrientes elevadas ($I_{CC} = 10$ mA).
 - Que el daño producido en los dispositivos con 20 nm y 10 nm de espesor de HfO₂ es muy similar mientras que el generado en los de 5 nm es muy diferente. Es muy probable que estas diferencias puedan estar atribuidas a que las capas más finas empiezan a estar en el régimen de capas ultradelgadas y, por tanto, muestran comportamientos físicos y eléctricos que no se observan en capas de mayor grosor.
- ❖ Al realizar ciclos de RS se modifica tanto la forma como el tamaño del compuesto generado durante el proceso de *forming*, de tal manera que el daño ya no es solo dependiente de la polaridad, sino que también del espesor del óxido. Estos cambios físicos se atribuyen a un incremento de la difusión de los átomos que participan del proceso de RS (Ni, Hf, O, Si), a través del CF.
- ❖ Se ha observado que durante los ciclos de RS es posible alcanzar valores de corriente muy elevados que producen una degradación irreversible e incontrolable en el electrodo superior de los dispositivos. A su vez, también se inducen cambios muy severos en las características de RS de los dispositivos.

- ❖ La degradación incontrolada durante la RS es un proceso no deseado desde el punto de vista de la fiabilidad, pese que los dispositivos siguen mostrando la RS. El daño es tan elevado que fácilmente se extendería a dispositivos vecinos en una configuración *cross-bar*. Por ello, se sugiere limitar la corriente durante el *reset*, para evitar la degradación física del electrodo superior durante la RS debido al flujo de corrientes elevadas ($I_{CC} < 10$ mA).

Capítulo 3

Estadística temporal de eventos de ruptura

NORMALMENTE, el primer evento de ruptura, es el más importante e interesante de estudiar desde el punto de vista de la fiabilidad de un aislante delgado, dado que suele suponer la destrucción del dispositivo. Sin embargo, en algunas ocasiones, este primer evento no produce un fallo total y, por ende, no impide el correcto funcionamiento del dieléctrico. Es decir, el dispositivo continúa funcionando pese a haber sufrido un deterioro de sus propiedades iniciales. Evidentemente, si esta primera ruptura no supone un fallo total, el dieléctrico puede volver a mostrar un nuevo evento que, como el primero, puede implicar, o no, la completa pérdida de sus propiedades aislantes. En este contexto, la primera ruptura deja de ser relevante y empieza adquirir importancia el análisis estadístico de los eventos de ruptura sucesivos. Al igual que con la primera ruptura, los eventos sucesivos pueden ser descritos mediante diferentes modelos, siendo el más utilizado el modelo de Weibull. A partir de este modelo y ciertas consideraciones estadísticas –discutidas en detalle en la Sec. 3.2–, es posible reproducir las distribuciones de t_{BD} de eventos sucesivos (Fig. 3.1). Es importante remarcar que el modelo utilizado no es independiente para cada evento, sino que debe ser consistente con la distribución asociada a la primera ruptura.

En este capítulo, se analiza en profundidad la estadística de la TDDB en una estructura MIS, cuyo aislante está compuesto por capas de Al_2O_3 y HfO_2 de tamaño

nanométrico. Esta combinación de óxidos tiene el objetivo de definir un material que posea las características aislantes de la Al_2O_3 (elevada diferencia entre su banda de conducción y la del Si, $\phi \approx 2.8 - 3.3$ eV) junto con las buenas propiedades capacitivas del HfO_2 (alta permitividad, $K \approx 22$). El análisis de t_{BD} muestra que estos dispositivos siguen una distribución de rupturas que se aparta del modelo de Weibull convencional. Por tanto, es necesario buscar otros modelos que permitan no solo reproducir la primera ruptura, sino que también sean consistentes con los eventos sucesivos. En este caso, se ha optado por el modelo de *clustering*, propuesto por Wu *et al.* [61], dado su simpleza y compatibilidad con la estadística de Weibull a bajos percentiles.

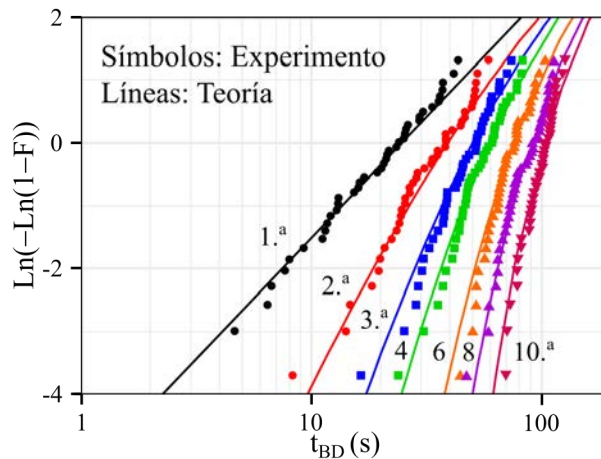


Fig. 3.1: Distribuciones experimentales y teóricas de los tiempos de ruptura de eventos sucesivos [62]. Las distribuciones teóricas están basadas en el modelo de Weibull y los parámetros se obtienen del ajuste con los tiempos de la primera ruptura.

En primer lugar, se realizará una breve introducción de la ruptura dieléctrica no homogénea en la que discutiremos como surge y que repercusiones tiene en la estadística de t_{BD} . A su vez, se explicará en detalle el modelo de *clustering* así como sus principales ventajas y características. Posteriormente, se definirá la estadística de los eventos de ruptura sucesivos teniendo en consideración el modelo de Weibull y el de *clustering*. Una vez introducidos estos dos conceptos, así como las características de los dispositivos estudiados, se procederá a discutir los resultados experimentales. Primero, se realiza un estudio para determinar el modelo óptimo que permite reproducir los datos experimentales. Se demuestra, utilizando el modelo de *clustering*, que los primeros diez eventos sucesivos no están prácticamente correlacionados. Sin embargo, para los eventos posteriores, se comienza a observar que los tiempos experimentales resultan mayores que los teóricos, lo que podría indicar una correlación en la generación de los eventos. Utilizando un circuito equivalente para

reproducir las características $I-t$ de los dispositivos, se asocia el retraso con la presencia de una resistencia serie en el circuito de medición. Finalmente, se propone un cambio semiempírico en el modelo de *clustering* que permite ajustar las distribuciones teóricas de los eventos sucesivos con los datos experimentales.

3.1. Ruptura dieléctrica no homogénea

El modelo de Weibull es la piedra angular en el análisis de la fiabilidad de los dispositivos electrónicos [19], dado que es el que proporciona la mejor descripción de la naturaleza aleatoria de la ruptura dieléctrica. Sin embargo, debido al avance de la industria y a la necesidad de fabricar dispositivos más funcionales y diminutos, empieza a ser inevitable que exista una variabilidad evidente entre dispositivos fabricados en oblea. Es decir, estructuras que en diseño son iguales, acaban mostrando propiedades y características un tanto diferentes. La fabricación de los dispositivos electrónicos implica una gran multitud de procesos en la cual cada uno supone una nueva fuente de variabilidad. Si bien estas variaciones son mínimas, la reducción de las dimensiones del dispositivo supone que cualquier pequeña variación induce un gran cambio en sus características finales. La falta de homogeneidad de la capa de óxido es una de las fuentes de variabilidad más destacables y de las que más preocupa en las tecnologías de fabricación avanzada [2], [63], [64]. Esta, introduce una desviación en las distribuciones experimentales de t_{BD} a percentiles elevados que impiden describir los datos con el modelo de Weibull. A su vez, esto supone, que no se puede normalizar los t_{BD} para diferentes áreas utilizando la regla de escalado de Poisson (Fig. 3.2). Por tanto, estamos ante un proceso estocástico con variabilidad extrínseca.

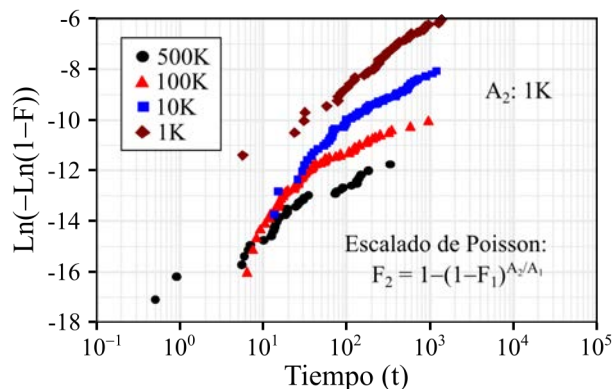


Fig. 3.2: Uso de la regla de escalado de Poisson para tratar de normalizar distribuciones de t_{BD} . Los resultados muestran que las distribuciones no se ajustan al modelo de Weibull [65].

Con el fin de explicar y reproducir estas nuevas distribuciones de t_{BD} , se han propuestos numerosos modelos que tratan de incorporar esta variabilidad entre dispositivos. Sin embargo, muchos de los modelos propuestos involucran una gran cantidad de parámetros, dificultando su interpretación. Por este motivo, el modelo desarrollado por Wu *et al.* [61] destaca por su simpleza y fácil interpretación, ya que depende únicamente de tres parámetros, dos de los cuales están directamente relacionados con la estadística de Weibull. A su vez, es importante mencionar, que el modelo propuesto por Wu *et al.* [61] también es capaz de ajustar las distribuciones de eventos sucesivos [66]–[68] (más detalles en la Sec. 3.2).

3.1.1. Modelo de *clustering*

En el año 2013, en Wu *et al.* [61], se propuso una expresión para la distribución de t_{BD} capaz de reproducir la desviación exhibida por los percentiles elevados, atribuida a la variabilidad entre dispositivos. Este modelo, denominado modelo de *clustering* o modelo de *clustering* dependiente del tiempo (TDCM), tiene la particularidad de corresponderse matemáticamente con la familia de distribuciones llamadas Burr tipo XII [69]. Por ello, comparte todas sus propiedades y características (Sec. 3.1.2).

Brevemente, el TDCM parte de la distribución binomial negativa (NB) [70]

$$F_{NB} = 1 - \left(1 + \frac{\langle D \rangle \cdot A_{ox}}{\alpha} \right)^{-\alpha} \quad (3.1)$$

la cual considera la probabilidad de que los defectos tiendan a agruparse en lugar de generarse aleatoriamente por toda el área del dispositivo. En F_{NB} , $\langle D \rangle$ es la densidad media de defectos, A_{ox} es el área del dispositivo y α es el factor de agrupación (en inglés, *clustering*). Este factor de *clustering* es el que controla la homogeneidad de la generación de defectos. Es decir, es el que especifica si los defectos tienden a agruparse ($\alpha \ll 1$) o si tienden a seguir una distribución aleatoria ($\alpha \gg 1$). La distribución NB ((3.1)) tiene la particularidad de transformarse en la distribución de Poisson ((1.7)) cuando $\alpha \rightarrow \infty$. Considerando que $\langle D \rangle \cdot A_{ox} = (t/\tau)^\beta$, Wu *et al.* introdujo la dependencia con el tiempo en la (3.1), obteniendo la expresión del TDCM

$$F_C = 1 - \left(1 + \frac{1}{\alpha} \cdot \left(\frac{t}{\tau} \right)^\beta \right)^{-\alpha} \quad (3.2)$$

en donde β y τ son, respectivamente, los factores de forma y escala para bajos percentiles, α sigue siendo el factor de *clustering* y t es el tiempo. Para facilitar la comprensión de esta expresión, en la Fig. 3.3 se representan diferentes distribuciones del TDCM en donde se muestra el efecto que cada parámetro ejerce sobre la distribución. Como se puede ver, α controla la desviación a percentiles elevados (Fig.

3.3a); β , el valor de la pendiente a bajos percentiles (Fig. 3.3b); y τ , el desplazamiento horizontal de la distribución (Fig. 3.3c). Como es de esperar, el TDCM se aproxima a la distribución de Weibull a medida que se incrementa el valor de α , transformándose en ella cuando

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} (F_C) = F_W = 1 - \exp \left[- \left(\frac{t}{\tau} \right)^\beta \right] \quad (3.3)$$

Nótese que, β y τ ((3.3)) coinciden, respectivamente, con los factores de forma y escala de la distribución de Weibull. Teniéndolo en consideración, podríamos definir el TDCM como una distribución de Weibull con pendiente β y con $\eta = \tau$ en la que los valores a percentiles elevados son controlados por α . Es importante matizar que, en el momento que se induce un desvío con α , $\tau \neq t_{BD(63\%)} (Fig. 3.3b,c)$.

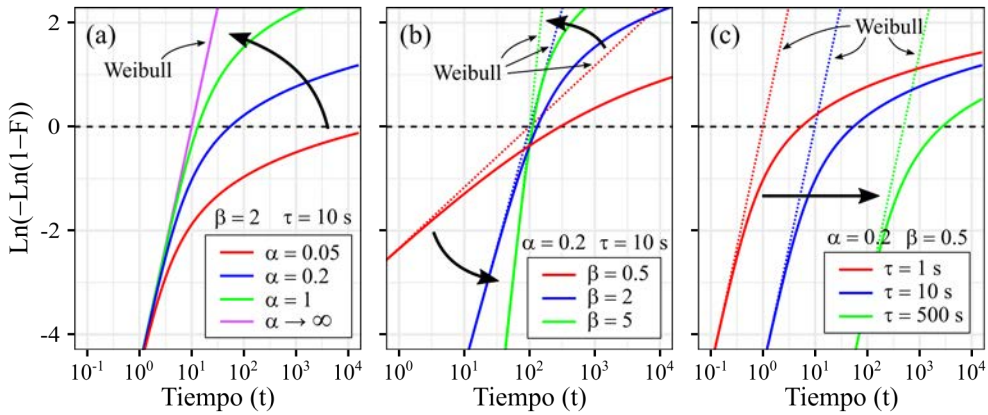


Fig. 3.3: Representación del impacto del (a) factor de *clustering* (α), del (b) factor de forma (β) y del (c) factor de escala (τ) en el TDCM. A su vez, en (b) y (c) se muestra la distribución de Weibull obtenida al utilizar los mismos valores de β y de τ , teniendo en cuenta que $\tau = \eta$.

El TDCM no solo es interesante porque permite reproducir la desviación de las distribuciones experimentales utilizando únicamente tres parámetros; sino que además incorpora la ley de escalado en área de Poisson. Considerando dos dispositivos idénticos cuya única diferencia es A_{ox} -tienen el mismo valor de $\langle D \rangle$ y de α -, se deduce, a partir de la (3.1), que

$$1 - F_2 = \left\{ 1 + \frac{A_{ox,2}}{A_{ox,1}} \left[(1 - F_1)^{-1/\alpha} - 1 \right] \right\}^{-\alpha} \quad (3.4)$$

en donde $A_{ox,1}$ y $A_{ox,2}$ son las áreas para las distribuciones F_1 y F_2 , respectivamente. Evidentemente, si $\alpha \rightarrow \infty$, la regla de escalado del TDCM ((3.4)) se vuelve la regla de escalado de Poisson ((1.8)). En la Fig. 3.4 se muestra como al tratar con distribuciones

estocásticas con variabilidad, el escalado de Poisson ((1.8)) no permite superponer los datos experimentales de los t_{BD} para diferentes áreas, mientras que el escalado del TDCM ((3.4)) sí que es capaz de representar apropiadamente los datos.

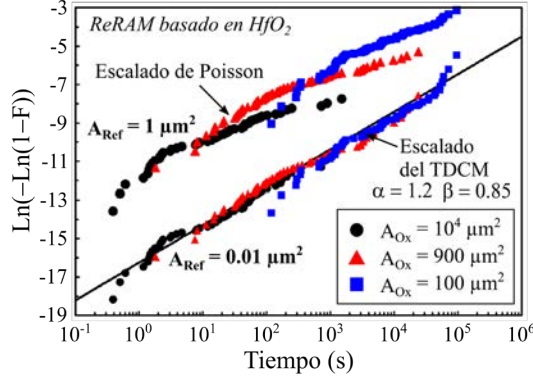


Fig. 3.4: Escalado del área en base al TDCM y usando la regla de Poisson de los tiempos de *forming* de un conjunto de dispositivos ReRAM basados en HfO₂ [67].

Finalmente, como el TDCM coincide con la distribución de Weibull a bajos percentiles, la relación entre factores de escala de dispositivos de diferente área, se puede hallar utilizando la (1.9), de tal manera que

$$\frac{\tau_1}{\tau_2} = \left(\frac{A_{Ox,2}}{A_{Ox,1}} \right)^{1/\beta} \quad (3.5)$$

en donde τ_1 y τ_2 son los factores de forma de las distribuciones F_1 y F_2 , respectivamente.

3.1.2. Distribución de Burr tipo XII

En el 1942, Burr propuso un total de 12 distribuciones estadísticas, todas ellas definidas por dos parámetros independientes, dando lugar a una familia de distribuciones que hoy en día se conocen como las distribuciones de Burr [69]. Entre ellas, se encuentra la distribución de Burr tipo XII (BXII) cuya CDF se expresa como

$$F_{BXII}(x) = 1 - (1 + x^A)^{-B} \quad (3.6)$$

en donde A y B son números reales, positivos y constantes. En 1980, Tadikamalla introdujo un parámetro de escala en esta distribución [71], C , dando lugar a la distribución de BXII de tres parámetros

$$F_{BXII}(x) = 1 - \left(1 + \left(\frac{x}{C} \right)^A \right)^{-B} \quad (3.7)$$

en donde C , al igual que A y B , es un número real, positivo y constante. Hoy en día cuando se habla de la distribución BXII se hace referencia a la (3.7), la cual permite reproducir una gran variedad de distribuciones. Posteriormente, Shao *et al.* [72], generalizó la (3.7) definiendo $C = D \cdot B^{1/A}$

$$F_{BXII}(x) = 1 - \left(1 + \frac{1}{B} \cdot \left(\frac{x}{D}\right)^A\right)^{-B} \quad (3.8)$$

Nótese que esta nueva expresión ((3.8)) es matemáticamente idéntica al TDCM, siendo $A = \beta$, $B = \alpha$ y $D = \tau$, por lo que el TDCM comparte todas las propiedades y características de la BXII.

Una de las primeras características ya ha sido mostrada (Sec. 3.1.1), y es el hecho de que la BXII tiende a una distribución de Weibull a percentiles bajos. De hecho, Shao *et al.* [72] también demostró que, cuando $B \rightarrow \infty$, la (3.8) corresponde a la distribución de Weibull, siendo $\beta = A$ y $\eta = D$. Otra de las características de la BXII, discutida por Rodríguez [73], es que puede ser definida como una superposición de distribuciones de Weibull con diferente valor de η . Esto también fue demostrado para el TDCM por Shimizu *et al.* [68],

$$F_C(t; \alpha, \beta, \tau) = \int F_W(t; \beta, \eta) \cdot p(\eta; \alpha, \beta, \tau) \cdot d\eta \quad (3.9)$$

en donde $p(\eta)$ es la función de distribución de probabilidad (PDF) de η . Esta define la contribución de las diferentes distribuciones de Weibull, con diferente valor de η , y cuya expresión es

$$p(\eta; \alpha, \beta, \tau) = \frac{\alpha^\alpha}{\Gamma(\alpha)} \cdot \frac{\beta}{\eta} \cdot \left(\frac{\tau}{\eta}\right)^{\alpha \cdot \beta} \cdot \exp\left[-\alpha \cdot \left(\frac{\tau}{\eta}\right)^\beta\right] \quad (3.10)$$

en donde Γ es la función gamma. Además, de acuerdo con la (3.10), la expresión η^β de la distribución de Weibull sigue una distribución gamma inversa. El hecho de poder expresar el TDCM como una superposición de distribuciones de Weibull, corrobora su uso en la definición de las TDDB, ya que implica que en cada dispositivo la generación de defectos en su interior sigue el modelo de Weibull. A su vez, también indica que la desviación observada en las CDF experimentales se debe a una variabilidad de las características de los dispositivos. Con el fin de exponer esta característica, en la Fig. 3.5a se muestra la representación de varias distribuciones de Weibull con diferente valor de η junto al valor de $p(\eta)$ correspondiente a las dos distribuciones que se quieren obtener; mientras que en la Fig. 3.5b se encuentran representadas dichas distribuciones. Nótese que el único parámetro que se modifica es el factor de *clustering*, β y τ son constantes. Como se ha mencionado anteriormente,

$p(\eta)$ indica el peso que tiene cada una de las distribuciones de Weibull. Como puede observarse, al incrementar el valor de α , $p(\eta)$ aumenta la contribución de las Weibull con valores de η próximos a τ . De hecho, a medida que $\alpha \rightarrow \infty$, $p(\eta)$ se va convirtiendo en una función delta de Dirac centrada en $\eta = \tau$. Además, $p(\eta)$ no es simétrica, mostrando una mayor contribución de las distribuciones de Weibull con $\eta > \tau$, factor que genera la desviación a percentiles elevados.

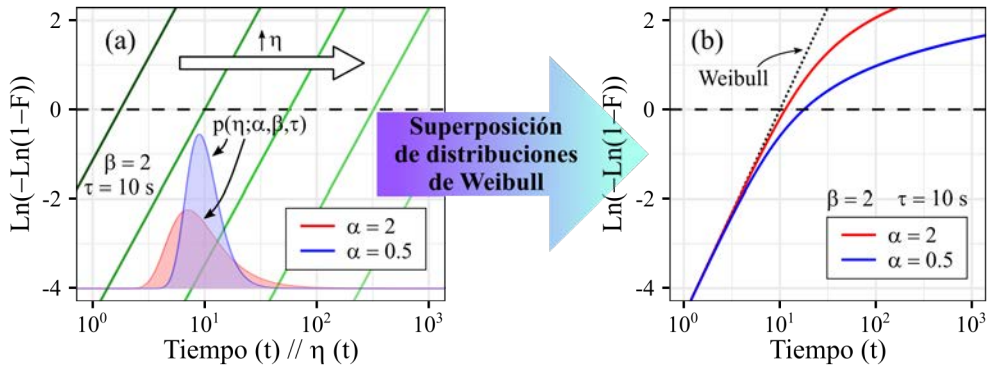


Fig. 3.5: Representación esquemática de que el TDCM se puede expresar como una superposición de distribuciones de Weibull con diferente factor de escala. (a) Representación de distribuciones de Weibull con diferente valor de η y (b) representación de los TDCM obtenidos utilizando la (3.9). En (a) se encuentran representadas de manera esquemática el valor de $p(\eta)$ para cada las diferentes α . La Figura es una adaptación de [68]

3.2. Teoría de eventos de ruptura sucesivos

Antes de iniciar la discusión sobre el cálculo teórico de la estadística de eventos sucesivos, es necesario introducir un par de conceptos estadísticos que ayudaran a comprender las expresiones utilizadas. Para facilitar su explicación y uso práctico en esta tesis, los conceptos se explicarán en base a la ruptura dieléctrica de los dispositivos, es decir, utilizando t como variable independiente.

Tal y como se definió en la Sec. 1.4, $F(t)$ describe el porcentaje de dispositivos que han fallado al cabo de un cierto tiempo t . A su vez, también se puede considerar como la probabilidad de que un dispositivo falle a un tiempo t . Manteniendo este último concepto presente, introducimos la función de fiabilidad,

$$R = 1 - F \tag{3.11}$$

que no es más que la contraparte de F . Es decir, $R(t)$ describe la probabilidad de que un dispositivo no muestre la ruptura dieléctrica pasado un tiempo t . Considerando k el número de rupturas dieléctricas, definiremos F_k como la probabilidad de que un

dispositivo muestre k eventos de ruptura y R_k como la probabilidad de que no, de tal manera que la (3.11) queda como

$$F_k(t) = 1 - R_k(t) \tag{3.12}$$

Siguiendo esta misma notación, los tiempos teóricos y experimentales a los que se observan las diferentes rupturas se denominaran t_k . De esta manera, el valor experimental de $F_1(t)$ se realiza utilizando los valores t_1 medidos en todos los dispositivos, el valor de $F_2(t)$ con todos los t_2 , el de $F_3(t)$ con todos los t_3 ...

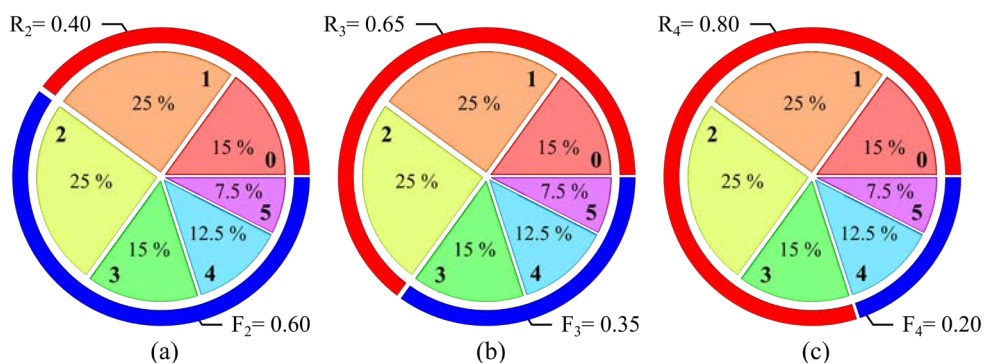


Fig. 3.6: Diagrama circular de los datos de la **Tabla 3.1** representando el cálculo del valor de R_k y F_k , para (a) $k = 2$, (b) $k = 3$ y (c) $k = 4$. Cada sección tiene escrito el valor de k y P_k que le corresponde.

Tiempo = t	$k = 0$	$k = 1$	$k = 2$	$k = 3$	$k = 4$	$k = 5$	Total
Nº dispositivos	30	50	50	30	25	15	200
P_k	0.15	0.25	0.25	0.15	0.125	0.075	1

Tabla 3.1: Caso hipotético del número de dispositivos que presentan un total de 0 – 5 eventos de ruptura a un valor de tiempo t . El valor teórico de P_k no es más que la proporción de dispositivos que presentan k eventos de ruptura respecto el total.

El último concepto que hay que introducir es P_k , es decir la probabilidad de que un dispositivo haya sufrido un total de k eventos de ruptura. Este es el más importante, ya que es el que podemos calcular con los modelos estadísticos (modelo de Weibull y TDCM) y que nos permite obtener el valor de F_k y R_k . Para facilitar la definición de la relación de F_k y R_k con P_k , en la **Tabla 3.1** se muestra un caso hipotético de 200 dispositivos donde a tiempo t se calcula el valor experimental de P_k , y en la **Fig. 3.6** se representa el valor de F_k y R_k de este caso hipotético para diferentes valores de k . Considerando $k = 2$ (**Fig. 3.6a**), R_2 es la probabilidad de que un dispositivo no muestre 2 eventos de ruptura. Por tanto, su valor, tiene que ser la probabilidad de que no tenga ninguno evento (P_0) más la de que solo tenga un único evento (P_1). Analizando el resto de los ejemplos (**Fig. 3.6b,c**) se puede deducir que la expresión general de R_k es:

$$R_k(t) = \sum_{i=0}^{k-1} P_i(t) \quad (3.13)$$

Continuando con el ejemplo para $k = 2$, F_2 es la probabilidad de que un dispositivo presente 2 eventos de ruptura. Teniendo en cuenta que los dispositivos con $k > 2$ tienen 2 eventos de ruptura, el valor de F_2 es la suma de las probabilidades de que un dispositivo tenga un total de 2 o más eventos. Es decir, que F_k se define como

$$F_k(t) = \sum_{i=k}^{\infty} P_i(t) \quad (3.14)$$

Si bien en el caso propuesto (**Tabla 3.1**) es posible calcular directamente el valor de F_k (**Fig. 3.6**), dado que hay un máximo de número de eventos ($k = 5$), a nivel teórico no es posible calcular F_k mediante la (3.14), debido a que no es posible calcular P_{∞} . Sin embargo, utilizando la (3.12) y la (3.13) se puede reescribir la (3.14) como

$$F_k(t) = 1 - \sum_{i=0}^{k-1} P_i(t) \quad (3.15)$$

la cual sí que nos permite obtener el valor de F_k para calcular distribución teórica. La (3.15) es la expresión básica de la estadística de eventos de ruptura sucesivos [74] que se utiliza para evaluar este tipo de fenomenología. A continuación, se definirán los valores de P_k , el cual no depende solo del modelo estadístico que se quiera utilizar, Weibull o TDCM, sino que también depende de si se tiene en consideración la correlación o no correlación de los eventos.

3.2.1. Eventos no correlacionados

Para los eventos no correlacionados, como indica su nombre, la probabilidad generar un nuevo evento en un dispositivo con k eventos es independiente del valor de k . Este es el comportamiento que se suele considerar cuando se evalúa la estadística de eventos sucesivos.

La expresión de P_k para eventos de ruptura no correlacionados en base a la distribución de Weibull y al TDCM son, respectivamente [62], [66], [67], [74],

$$P_{W,k}(t) = \frac{\left(\frac{t}{\eta}\right)^{\beta \cdot k} \cdot \exp\left[-\left(\frac{t}{\eta}\right)^{\beta}\right]}{k!} \quad (3.16)$$

$$P_{C,k}(t) = \frac{\Gamma(k + \alpha)}{k! \cdot \Gamma(\alpha)} \cdot \frac{\left[\frac{1}{\alpha} \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^\beta\right]^k}{\left[1 + \frac{1}{\alpha} \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^\beta\right]^{k+\alpha}} \quad (3.17)$$

Al introducir estas expresiones en la (3.15), se obtiene la CDF para eventos sucesivos no correlacionados según Weibull ($F_{W,k}(t)$) y según el TDCM ($F_{C,k}(t)$):

$$F_{W,k}(t) = 1 - \sum_{i=0}^{k-1} \frac{\left(\frac{t}{\eta}\right)^{\beta \cdot i} \cdot \exp\left[-\left(\frac{t}{\eta}\right)^\beta\right]}{i!} \quad (3.18)$$

$$F_{C,k}(t) = 1 - \sum_{i=0}^{k-1} \frac{\Gamma(i + \alpha)}{i! \cdot \Gamma(\alpha)} \cdot \frac{\left[\frac{1}{\alpha} \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^\beta\right]^i}{\left[1 + \frac{1}{\alpha} \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^\beta\right]^{i+\alpha}} \quad (3.19)$$

Nótese que, en ambos casos, para $k = 1$ se obtiene la expresión base de sus correspondientes modelos. Es decir, $F_{W,1} = F_W$ ((1.4)) y $F_{C,1} = F_C$ ((3.2)). Es importante remarcar que tanto en $F_{W,k}$ ((3.18)) como en $F_{C,k}$ ((3.19)), los parámetros α , β , η y τ son constantes, esto es, son independientes de k . El valor de estas constantes suele obtenerse a través del ajuste de los modelos a las distribuciones experimentales de t_I .

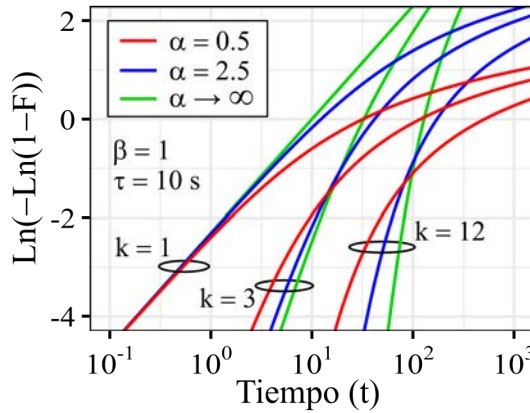


Fig. 3.7: Comparación de los valores teóricos de $F_{C,k}$ para eventos no correlacionados. Cuando $\alpha \rightarrow \infty$, el valor de $F_{C,k}$ coincide con el de $F_{W,k}$, siendo $\eta = \tau$.

En la Fig. 3.7 se muestra una comparación de los valores de $F_{W,k}$ y de $F_{C,k}$ para eventos no correlacionados –al igual que ocurre para $k = 1$, cuando $\alpha \rightarrow \infty$, $F_{C,k}$ ((3.19)) se transforma en $F_{W,k}$ ((3.18))–. Nótese que las tendencias de las distribuciones para eventos sucesivos ($k > 1$) son completamente diferentes de la

obtenida para el primer evento ($k = 1$). Esto puede observarse más detalladamente en las distribuciones basadas en Weibull ($\alpha \rightarrow \infty$), en donde se distingue cómo dejan de ser una recta y empiezan a mostrar ligeras desviaciones a percentiles elevados.

3.2.2. Eventos correlacionados

En cuanto al cálculo de las distribuciones teóricas de eventos correlacionados, Alam *et al.* [75] desarrolló una teoría más general de la estadística de múltiples eventos de ruptura. Concretamente, propuso una nueva definición para P_k , la cual permite considerar la correlación para $k \geq 1$

$$P_k(\lambda, \varphi) = \mu_k \cdot \int_0^\lambda P_{k-1}(x, \varphi) \cdot \exp[-\mu_k(\lambda - x)] \cdot dx \quad (3.20)$$

en donde λ es un cambio de variable que depende del modelo considerado

$$\lambda_W = \left(\frac{t}{\eta}\right)^\beta \quad (3.21)$$

$$\lambda_C = \left(\frac{t}{\tau}\right)^\beta \quad (3.22)$$

y en donde la μ_k es

$$\mu_k = 1 + k \cdot \varphi \quad (3.23)$$

En la (3.23), la φ es el factor de correlación que permite tener en cuenta estos efectos. El valor de P_0 viene determinado por la expresión base del modelo considerado:

$$P_{W,0}(t) = P_W(t) = \exp\left[-\left(\frac{t}{\eta}\right)^\beta\right] \quad (3.24)$$

$$P_{C,0}(t) = P_C(t) = \left[1 + \frac{1}{\alpha} \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^\beta\right]^{-\alpha} \quad (3.25)$$

Nótese que su expresión coincide con la que se obtiene de la (3.16) (Weibull) y de la (3.17) (TDCM) cuando $k = 0$.

Como es de esperar, si $\varphi = 0$, la (3.20) se transforma en la expresión para eventos no correlacionados. Es decir, la (3.20) se transforma en la (3.16) cuando consideramos la distribución de Weibull; mientras que se convierte en la (3.17) cuando evaluamos el TDCM. Desafortunadamente, la expresión generalizada ((3.20)) no tiene solución analítica para $\varphi \neq 0$ para ninguno de los dos modelos analizados, por lo que el valor de $F_{W,k}$ y $F_{C,k}$ para eventos correlacionados solo se puede resolver mediante cálculo numérico.

En la Fig. 3.8 se muestra el efecto que tiene el factor de correlación en el cálculo de las distribuciones de eventos sucesivos junto a unas distribuciones experimentales. En este caso, el modelo considerado es el TDCM. Al usar valores positivos (Fig. 3.8a), la distribución se desplaza hacia valores de tiempo inferiores mientras que el uso de valores negativos (Fig. 3.8b) traslada la distribución a valores de tiempo superiores. Es decir, si $\varphi > 0$, la ruptura se adelanta; y si $\varphi < 0$, la ruptura se retrasa. Como puede observarse, solo si se considera la correlación entre los eventos de ruptura se consigue ajustar $F_{C,k}$ a las distribuciones experimentales (Fig. 3.8b).

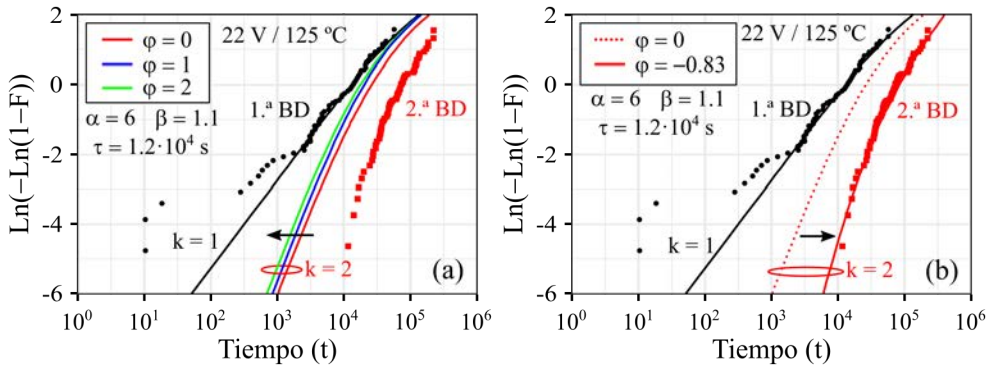


Fig. 3.8: Comparación de un conjunto de datos experimentales de rupturas sucesivas con $F_{C,k}$ considerando una correlación (a) positiva y (b) negativa [66].

3.3. Descripción de los dispositivos

Los dispositivos analizados en este capítulo son estructuras MIS, cuya capa aislante está compuesta por cinco láminas de tamaño nanométrico de ≈ 2 nm de espesor. Es decir, que la capa aislante es un penta-nanolaminado que tiene un espesor de ≈ 10 nm. Tal y como se muestra en la Fig. 3.9a, la capa está formada por tres láminas de Al_2O_3 y dos láminas de HfO_2 ($\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$). Por otro lado, el electrodo superior está formado por una capa de Al de 500 nm de grosor, y el sustrato de Si está altamente dopado con impurezas positivas ($p^+\text{Si}$), lo que le confiere una resistividad de $0.1 - 1.4 \Omega \cdot \text{cm}$. Como se puede observar en la Fig. 3.9a, debajo del sustrato hay una pequeña capa de Al, que se deposita al final de proceso de fabricación y que sirve para facilitar el contacto eléctrico del sustrato con el equipo de medición.

Estos dispositivos, al igual que los estudiados en el anterior capítulo (Sec. 2.2), también fueron fabricados en la sala blanca del IMB-CNM. De hecho, el sustrato vuelve a ser una oblea de Si (100) producida con el método de Czochralski. Cabe destacar que, en este caso, el dopaje de la oblea es tipo p en lugar de tipo n . El proceso de fabricación es el siguiente [76]:

- i. Limpieza estándar de las obleas y crecimiento de una capa de SiO_2 de 400 nm utilizando un proceso de oxidación térmica seca a 1100 °C.
- ii. Grabado de las áreas de los dispositivos en el SiO_2 utilizando un proceso de fotolitografía junto a un ataque químico húmedo.
- iii. Limpieza de la oblea con $\text{H}_2\text{O}_2/\text{H}_2\text{SO}_4$ y sumergiendo en $\text{HF}(5\%)$.
- iv. Proceso de ALD a 225 °C para depositar las capas de Al_2O_3 y de HfO_2 . Como precursores oxidantes se utilizan TMA y H_2O para el Al_2O_3 , y TDMAH y H_2O para el HfO_2 . La purga en ambos casos se realiza con N_2 y cada capa de ≈ 2 nm se deposita realizando 20 ciclos de ALD. En total se depositan 3 capas de Al_2O_3 y 2 de HfO_2 , alternándose entre ellas.
- v. Depósito de una capa de 500 nm de $\text{Al} - 0.5\% \text{Cu}$ sobre la última capa de Al_2O_3 .
- vi. Grabado de los electrodos superiores en el $\text{Al} - 0.5\% \text{Cu}$ utilizando un proceso de fotolitografía y de ataque químico húmedo.
- vii. Depósito de $\text{Al} - 0.5\% \text{Cu}$ en debajo del sustrato de Si.

En la **Fig. 3.9b** se muestra una imagen HRTEM de los dispositivos donde se puede ver claramente su estructura y se verifica que la capa aislante tiene, efectivamente, un espesor de ≈ 10 nm.

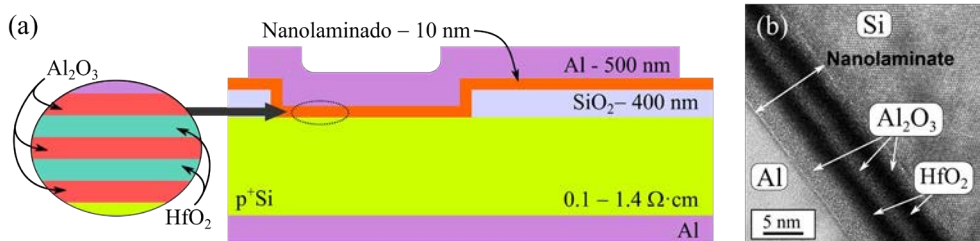


Fig. 3.9: (a) Representación esquemática de una sección transversal de los dispositivos $\text{Al}/\text{penta-nanolaminado}/\text{p}^+\text{Si}$ estudiados cuyo aislante es $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$. (b) Imagen HRTEM de una sección transversal del dispositivo [14].

Los dispositivos fabricados tienen un área activa de geometría cuadrada de diferentes dimensiones. Durante la fabricación, se definen 5 áreas diferentes: $980 \times 980 \mu\text{m}^2$ ($9.6 \cdot 10^5 \mu\text{m}^2$), $480 \times 480 \mu\text{m}^2$ ($2.3 \cdot 10^5 \mu\text{m}^2$), $180 \times 180 \mu\text{m}^2$ ($3.24 \cdot 10^4 \mu\text{m}^2$), $120 \times 120 \mu\text{m}^2$ ($1.44 \cdot 10^3 \mu\text{m}^2$), $80 \times 80 \mu\text{m}^2$ ($6.4 \cdot 10^3 \mu\text{m}^2$). A nivel experimental, todo el estudio que se realiza a continuación está centrado exclusivamente en la evaluación de los tiempos de ruptura observados en los dispositivos con el área más pequeña ($6.4 \cdot 10^3 \mu\text{m}^2$).

3.4. Proceso experimental

La caracterización de la TDDB en los dispositivos previamente descritos se realizó utilizando un SPA HP 4155B, aplicando un CVS de -7 V durante 530 s al electrodo superior con el sustrato conectado a tierra. Con el fin de obtener una buena evaluación estadística de los tiempos de ruptura, se caracterizaron un total de 41 dispositivos. Como ya se ha mencionado, todos ellos con $A_{ox} = 6.4 \cdot 10^3 \mu\text{m}^2$.

En la **Fig. 3.10a** se muestra la característica I - t medida en estos dispositivos. Como se puede observar, después del primer evento de ruptura, la corriente sigue mostrando incrementos abruptos; cada uno corresponde a un nuevo evento de ruptura y, por tanto, indican la formación de nuevos CF en el seno del penta-nanolaminado. La aparición de estos múltiples eventos es lo que nos permite evaluar tanto la estadística de la ruptura dieléctrica ($k = 1$) como la distribución de eventos sucesivos ($k > 1$).

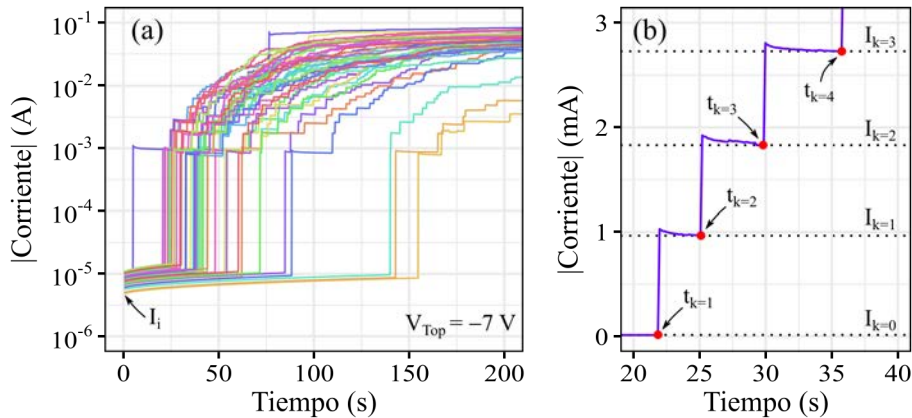


Fig. 3.10: (a) Características I - t de los 41 dispositivos analizados. (b) Característica I - t de uno de los dispositivos mostrados en (a) en donde se indican los valores de t_k y I_k .

Antes de continuar con los resultados experimentales, es necesario explicar: cómo se han analizado los datos experimentales, qué parámetros son los que se han extraído y aclarar ciertas consideraciones realizadas. Tal y como se ha mencionado, k hace referencia al número de rupturas que se están evaluando y, teniendo esto en cuenta, definimos t_k como el tiempo al que se produce la ruptura número k . El tiempo no es la única variable que nos puede interesar a la hora de analizar estos datos. Por ello, y siguiendo la misma anotación, llamaremos I_k al nivel de corriente alcanzado después de producirse la ruptura número k . Por otro lado, tal y como se indica en la **Fig. 3.10a**, a la corriente inicial la llamamos I_i . En la **Fig. 3.10b** se muestra, en escala lineal, una de las características I - t representadas en la **Fig. 3.10a**. Nótese que se han ajustado los límites para visualizar correctamente los cuatro primeros eventos de ruptura ($k = 1 -$

4). A su vez, se indican los valores experimentales de t_k e I_k . Nótese que el valor de I_k no está medido justo después de la ruptura, sino justo antes de que se produzca una nueva. Esto se debe a que, tal y como se puede apreciar (**Fig. 3.10b**), en los primeros eventos ($k \leq 5$) la corriente, en lugar de ser constante, disminuye ligeramente después de la ruptura hasta estabilizarse. Por ello, se considera que el valor de I_k corresponde al estado estable del dispositivo después del evento k .

Finalmente, el análisis de las características $I-t$ así como el cálculo de los valores de $F_{W,k}$ y $F_{C,k}$ se realizó utilizando MATLAB. También fue empleado MATLAB para realizar el ajuste semiempírico de las distribuciones experimentales con $F_{C,k}$. La extracción de parámetros así como el análisis de las distribuciones experimentales se realizó utilizando el paquete *fitdistrplus* para el lenguaje de programación R [77].

3.5. Análisis de la ruptura dieléctrica dependiente del tiempo

A continuación, se expondrán los resultados experimentales obtenidos con los dispositivos previamente mencionados. Para facilitar la lectura, dado que $F_{W,k}$ y $F_{C,k}$ ya hacen referencia a las distribuciones teóricas para eventos sucesivos, independientemente de que estén o no correlacionados; F_k hará referencia a las distribuciones experimentales.

3.5.1. Estudio exploratorio de la primera ruptura

Para evaluar la estadística de los eventos sucesivos es requisito indispensable saber cuál es el modelo estadístico que mejor define los datos experimentales. Dado que tanto en $F_{W,k}$ como en $F_{C,k}$ los parámetros de ajuste no dependen de k , podemos conocer cuál es la estadística que mejor define los datos experimentales solo con analizar en detalle la distribución de t_l [MR 2020]. En la **Fig. 3.11** se muestra la bondad de ajuste de las distribuciones teóricas consideradas con los datos experimentales utilizando diferentes comparaciones y pruebas de ajuste. En la **Fig. 3.11a** se muestra el ajuste de las PDF de los modelos con los datos experimentales; en la **Fig. 3.11b** se evalúan las CDF; en la **Fig. 3.11c** se representa el gráfico cuantil-cuantil (Q-Q); y en la **Fig. 3.11d** el gráfico percentil-percentil (P-P). Básicamente, estas representaciones nos sirven para saber cuál es el mejor modelo para describir la tendencia estadística de t_l . En el caso de los gráficos Q-Q y P-P, el análisis tiene que seguir la línea recta representada si las distribuciones comparadas, en este caso modelo y datos experimentales, coinciden. Como puede observarse, en todas y cada una de estas comparaciones gráficas, el TDCM es el que mejor ajusta la distribución de t_l . Es importante mencionar que en [MR 2020] se utilizan más métodos de evaluación, concretamente métodos numéricos, de los cuales también se puede

3.5. ANÁLISIS DE LA RUPTURA DIELECTRICA DEPENDIENTE DEL TIEMPO

concluir que el mejor modelo para describir la distribución de t_l y, por ende, reproducir la estadística de los eventos sucesivos, es el TDCM.

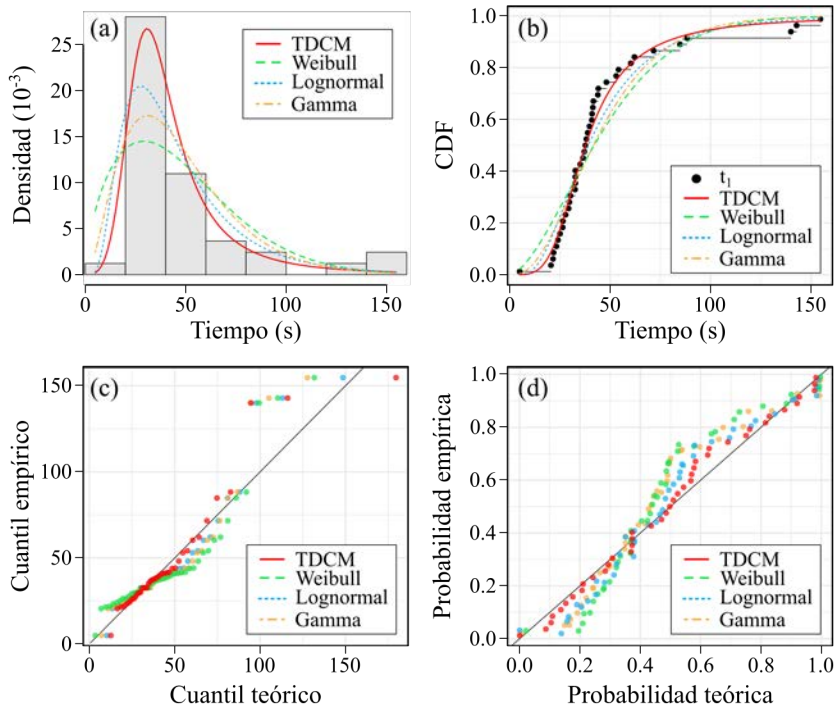


Fig. 3.11: Evaluación estadística de t_l con diferentes modelos estadísticos. (a) Histograma de t_l y densidades teóricas. (b) CDF empírica y teóricas. (c) Gráfico Q-Q. (d) Gráfico P-P.

Una vez hallado el mejor modelo para el ajuste de los datos experimentales, se puede determinar el valor de sus parámetros –en este caso α , β y τ –, los cuales se obtienen utilizando el método Nelder–Mead (NM) y ajustando el TDCM a F_l (Fig. 3.12a). Nótese que en la Fig. 3.12a, también se muestra la distribución de Weibull correspondiente a la tendencia a bajos percentiles del TDCM. Además, a cada valor experimental de t_l se le atribuye un color que viene determinado por el valor de I_i . Como puede observarse, los datos experimentales siguen perfectamente una distribución de Weibull a percentiles bajos, sin embargo, a elevados, muestran una desviación que el TDCM reproduce perfectamente. Analizando los valores de I_i , parecería que existe una cierta correlación entre este valor y el tiempo al que se produce el primer evento de ruptura. Concretamente, se sugiere que a menor I_i , mayor es la t_l . Además, se puede definir claramente que la desviación de la distribución aparece debido a los dispositivos con baja I_i . Adicionalmente, la dispersión de los valores de I_i sugieren que puede existir una variabilidad considerable en el espesor de la capa aislante (penta-nanolaminado) de los dispositivos estudiados. Estas dos

observaciones parecen indicar que la desviación observada a altos percentiles puede estar asociada a la presencia de dispositivos con un T_{ox} mayor de lo esperado [78]. Sin embargo, tal y como se discute en [MR 2020], el rol de la carga inyectada (Q_{BD}) no puede ser obviada. Retomando el ajuste del TDCM con los datos experimentales, la Fig. 3.12b muestra la $p(\eta)$ ((3.10)) que permite definir la $F_{C,I}$ mostrada en la Fig. 3.12a como una superposición de funciones de Weibull. La existencia de esta superposición refuerza la hipótesis de que la desviación a percentiles elevados puede deberse a una variabilidad elevada del espesor de la capa dieléctrica.

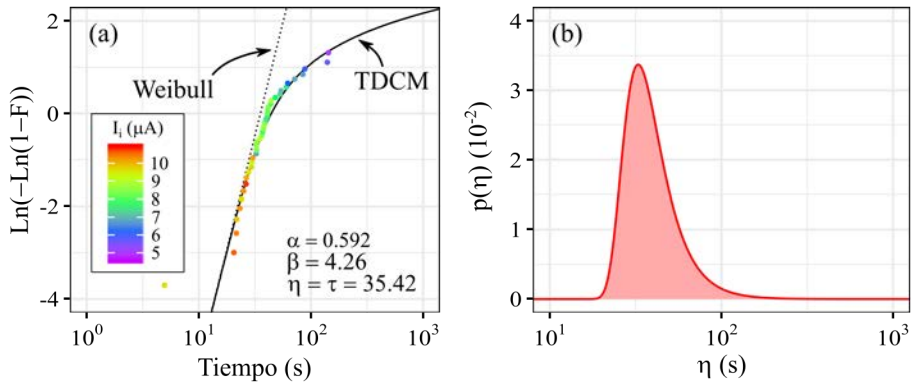


Fig. 3.12: (a) CDF experimental (símbolos) para t_l y distribuciones de $F_{C,I}$ y de $F_{W,I}$ utilizando los parámetros indicados en el gráfico. (b) PDF de η que permite definir el $F_{C,I}$ mostrado en (a) como una superposición de distribuciones de Weibull.

3.5.2. Estadística de los eventos sucesivos

Utilizando los parámetros obtenidos del ajuste del TDCM con la distribución de t_l (Fig. 3.12a), se calcula el valor de $F_{C,k}$ desde $k = 1$ hasta $k = 15$ considerando que no existe correlación ((3.19)) (Fig. 3.13). Como puede observarse, el modelo estadístico para eventos no correlacionados ajusta perfectamente las F_k desde $k = 1$ hasta $k = 10$. Sin embargo, a partir de la 10.^a ruptura, se empieza a observar que los tiempos experimentales son superiores a los predichos por $F_{C,k}$, especialmente a bajos percentiles. Este desajuste, pese a no ser muy elevado, puede suponer un problema a la hora de predecir los tiempos de ruptura a muy bajos percentiles ($Wb \ll -4$) [66]. Un estudio previo ya demostró que la TDDB de estos dispositivos sigue la teoría de eventos no correlacionados para las diez primeras rupturas [78]. Sin embargo, esta demostración se realizó utilizando la distribución Weibull y, más importante aún, después de filtrar los tiempos correspondientes a dispositivos con baja I_i , es decir, después de eliminar la desviación que aparece a altos percentiles. En este caso, se están obteniendo las mismas conclusiones, pero con la diferencia de que, gracias al

TDCM, no es necesario filtrar los datos. Por tanto, reforzamos las conclusiones presentadas en el trabajo anterior [78].

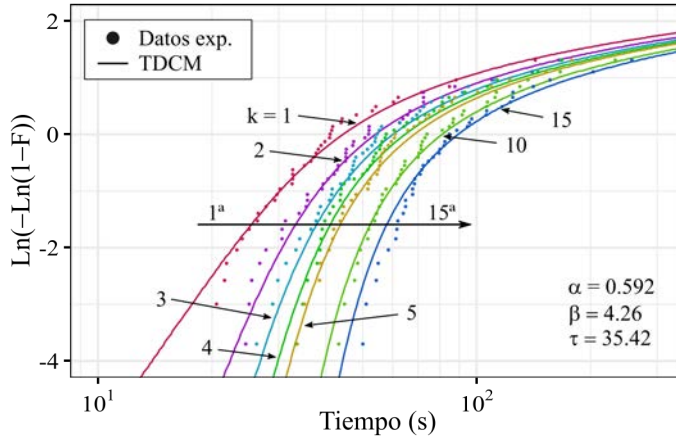


Fig. 3.13: (a) CDF experimental para los 15 primeros eventos de ruptura y sus correspondientes $F_{c,k}$ considerando que los eventos no están correlacionados. Por claridad, solo se han representado las rupturas $k = 1 - 5, 10$ y 15 . La versión completa está en [MR 2020].

Con el fin de evaluar en más detalle este desajuste, se modifica el método utilizado para calcular el valor experimental de $F(t)$. Adicionalmente se incrementa el número de eventos evaluados de 15 a 20 [EDL 2020]. El principal problema con el método estándar ((1.3)) para calcular F_k es que se pierde el valor máximo de t_k al realizar la representación de Weibull –para este tiempo $F = 1$ y, en consecuencia, $Wb = \infty$. Existen una gran multitud de alternativas para calcular la CDF que, en parte, tratan de solucionar este problema. En nuestro caso, hemos optado por utilizar el método de Kaplan–Meier (K–M) modificado

$$F(t) = 1 - \left(\frac{n + 0.7}{n + 0.4} \cdot \prod_{i=1}^{n_t} \frac{n - i + 0.7}{n - i + 1.7} \right) \quad (3.26)$$

En la Fig. 3.14a se muestran los valores experimentales de F_l utilizando ambos métodos, el estándar ((1.3)) y el de K–M modificado ((3.26)). Como puede observarse, si bien el K–M modificado induce una reducción del valor de Wb en comparación con el estándar, permite representar el tiempo más elevado. En la Tabla 3.2 se recogen los parámetros de ajuste del TDCM con ambas representaciones utilizando el método de NM. Es importante remarcar que, pese a que son prácticamente idénticos, las ligeras variaciones son más que suficientes para inducir divergencias en el valor de $F_{c,k}$ a medida que se incrementa k .

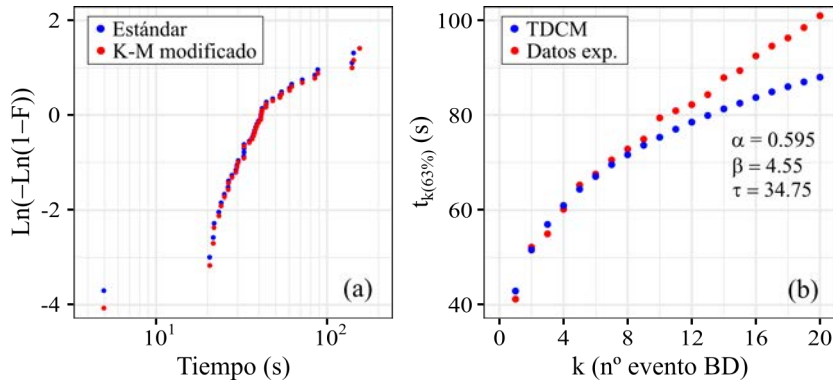


Fig. 3.14: (a) Valor de la F_I utilizando el método estándar y el método de K–M modificado. (b) Representación del valor de $t_{k(63\%)}$ para las F_k obtenidas con el método de K–M modificado y para $F_{C,k}$ para eventos no correlacionados.

CDF experimental	α	β	τ
Estándar	0.592	4.26	35.42
K–M modificado	0.595	4.55	34.75

Tabla 3.2: Valor del factor de *clustering*, de forma y de escala del TDCM según el método utilizado para calcular F_I . El ajuste se realiza utilizando el método de NM.

A partir de este momento, las F_k que se mostraran están calculadas utilizando el método de K–M modificado. Por tanto, los parámetros de ajuste para $F_{C,k}$ son los mostrados en la (Tabla 3.2). Este cambio nos permite identificar más detenidamente el retraso de los datos experimentales respecto al valor de $F_{C,k}$ para eventos no correlacionados [EDL 2020]. Para evaluar más sencillamente el retraso, en la Fig. 3.14b se muestra el valor de $t_{k(63\%)}$ según F_k y $F_{C,k}$. Remarcar que seguimos considerando que los eventos no están correlacionados. En esta representación puede observarse claramente como para $k > 9$ existe un retraso de los datos experimentales respecto a la tendencia predicha por el modelo.

Con el fin de obtener una explicación que nos permita entender este retraso temporal, se evalúa en más detalle las características I - t de los dispositivos utilizando un modelo previamente desarrollado en el grupo [14] y cuya capacidad para reproducir estas características I - t ya ha sido demostrada [79], [80]. En este modelo, que denominaremos modelo circuital, se considera que los dispositivos se comportan como el circuito mostrado en la Fig. 3.15. Este nos permite definir I_k como

$$I_k = \left[R_s + \left(\frac{k}{R_F} + \frac{1}{R_P} \right)^{-1} \right]^{-1} \cdot \Delta V \quad (3.27)$$

en donde ΔV es la diferencia de tensión entre el electrodo superior y el inferior (tensión aplicada con el SPA); R_p es la resistencia paralela y representa la resistencia inicial del dispositivo; R_s es la resistencia serie y es la asociada a las pérdidas del sistema; y R_f es la resistencia de los CF generados en el interior del dispositivo. Nótese que en el modelo circuital (**Fig. 3.15**), cada vez que ocurre un evento de ruptura, se añade una R_f en paralelo a R_p . A su vez, se considera que los CF son idénticos, es decir, que la R_f es la misma para todos los eventos. Adicionalmente, es importante remarcar, que esta expresión inicial del modelo circuital ((3.27)) es independiente del tiempo, aunque es posible incorporar dicha dependencia obteniendo una expresión para $k(t)$.

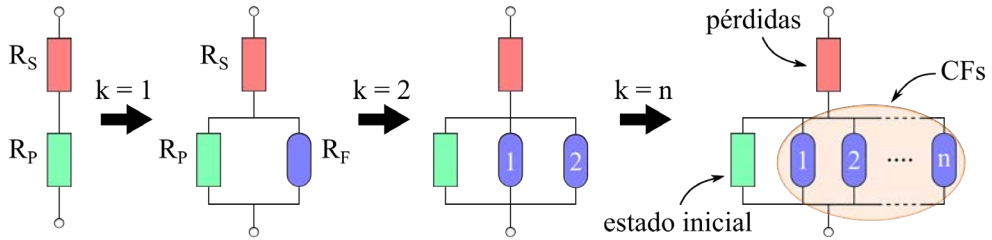


Fig. 3.15: Circuito equivalente que representa la generación de eventos sucesivos en los dispositivos. R_s y R_p son la resistencia serie y paralela, respectivamente; y la R_f es la resistencia de un único CF.

En la **Fig. 3.16a** se muestra el ajuste del modelo circuital atemporal ((3.27)) con el valor medio de I_k ($\langle I_k \rangle$) desde $k = 1$ hasta $k = 20$. Nótese que se obvian los signos de I_k y ΔV , y que los parámetros obtenidos son: $\langle R_s \rangle = 29 \Omega$, $\langle R_p \rangle = 8.4 \cdot 10^5 \Omega$, $\langle R_f \rangle = 8 \cdot 10^3 \Omega$. A su vez, para evaluar el efecto de la resistencia serie, se representa la tendencia del modelo para $\langle R_s \rangle = 0 \Omega$, sin modificar el valor de $\langle R_p \rangle$ y de $\langle R_f \rangle$. Como puede observarse, pese a que la $\langle R_s \rangle$ es pequeña, su valor empieza a afectar al comportamiento de los dispositivos a partir de $k \approx 10$, reduciendo el valor de I_k . Considerando que la R_s no dependa del dispositivo, es decir, que sea una resistencia externa; debido a la caída de tensión que produce, la diferencia de tensión en el dispositivo (ΔV_k) no sería constante

$$\Delta V_k = \Delta V - I_k \cdot R_s \quad (3.28)$$

sino que se iría reduciendo a medida que se incrementa k . Por tanto, la desviación de los valores experimentales de I_k respecto del modelo circuital cuando consideramos $\langle R_s \rangle = 0 \Omega$ indicaría cuando empieza a ser considerable la diferencia entre ΔV (tensión aplicada, -7 V) y ΔV_k (tensión en el dispositivo). Esta disminución de la diferencia de tensión en el dispositivo, debido a la existencia de una resistencia serie, podría explicar perfectamente el retraso observado en los tiempos de ruptura ya que, según las leyes de aceleración de la ruptura (Sec. 1.5), a menor tensión, mayor es el tiempo que se requiere para producir el evento.

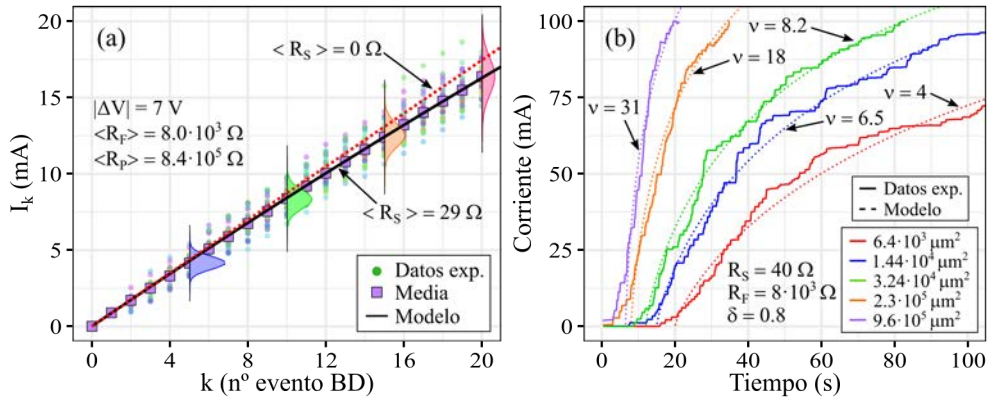


Fig. 3.16: (a) Valor medio y experimental de I_k para todos los dispositivos analizados. El modelo se ajusta con $\langle I_k \rangle$ y se representa tanto el resultado del ajuste como la tendencia esperada si $\langle R_s \rangle = 0 \Omega$. (b) Características $I-t$ para dispositivos con diferente área y sus correspondientes valores simulados considerando (3.30). La tensión aplicada al electrodo superior es -7.25 V .

Si se considera que la generación de eventos sigue un proceso de Poisson no homogéneo, se puede definir $k(t)$ como

$$k(t) = \nu \cdot (t - t')^\delta \quad (3.29)$$

en donde ν y δ son constantes ajuste, y t' representa el tiempo que pasa antes de aparezca el primer evento (tiempo muerto). Introduciendo la (3.29) en la (3.27), y obviando el valor de R_p , se puede reescribir el modelo circuital como [79]

$$I_k(t) = \left[R_s + \left(\frac{\nu \cdot (t - t')^\delta}{R_F} \right)^{-1} \right]^{-1} \cdot \Delta V \quad (3.30)$$

de tal manera que la velocidad de generación de eventos está definida por

$$\frac{dk(t)}{dt} = \nu \cdot \delta \cdot (t - t')^{\delta-1} \quad (3.31)$$

Utilizando el modelo circuital temporal ((3.30)), en la Fig. 3.16b se muestra el ajuste de este modelo con las características $I-t$ de los dispositivos estudiados. Nótese que en este caso se están evaluando las diferentes áreas disponibles. Con el fin de simplificar, todos los parámetros del modelo temporal han sido considerados constantes a excepción de ν y t' . Como puede observarse, el modelo ajusta perfectamente las tendencias mostradas independientemente del área del dispositivo. Dado que $\delta < 1$, la velocidad de generación de eventos, dk/dt ((3.31)) disminuye en función del tiempo. Este resultado, por un lado, coincide con las observaciones

experimentales [80] y, por el otro, apoya la hipótesis planteada de que existe una reducción de la tensión aplicada en el dispositivo a medida que aumenta k .

3.5.3. Ajuste semiempírico de los eventos no correlacionados

Teniendo en cuenta los resultados obtenidos en la sección anterior (Sec. 3.5.2), es difícil justificar que el retraso de las distribuciones de los t_k sea debido a que existe una correlación entre eventos. Por ello, en lugar de recurrir a la teoría de eventos correlacionados ((3.20)), se opta por inducir un retraso en la expresión de $F_{C,k}$ para eventos no correlacionados ((3.19)) para ajustar las distribuciones teóricas a las experimentales. Teniendo en cuenta los parámetros previamente encontrados (K–M modificado, Tabla 3.2), el retraso se induce considerando un valor de τ para cada orden de ruptura, de tal manera que deja de ser constante y pasa a depender de k ($\tau \rightarrow \tau_k$). Para facilitar el ajuste, el valor de τ_k se define como

$$F_k(t_{k(63\%)}) = F_{C,k}(t_{k(63\%)}; \alpha, \beta, \tau_k) \quad (3.32)$$

es decir, es el valor que hace coincidir el valor teórico de $t_{k(63\%)}$ con el experimental [EDL 2020]. A partir de esta definición ((3.32)), se obtiene el valor experimental de τ_k para las rupturas evaluadas ($k = 1 - 20$).

Considerando los resultados obtenidos con el modelo atemporal (Fig. 3.16a) y la definición de la diferencia de tensión aplicada en el dispositivo ((3.28)), es posible ajustar los valores experimentales de τ_k con las leyes de aceleración de la ruptura (Fig. 3.17a). Nótese que, con el fin de mantener una coherencia entre las leyes y los valores de τ_k , estos se grafican respecto ΔV_{k-1} , ya que es la tensión aplicada en el dispositivo antes de que se produzca la ruptura número k . Como se puede ver, las tres leyes de aceleración utilizadas (*E-model*, *1/E-model* y *V-model*) definen perfectamente la tendencia experimental, y solo difieren a valores de tensión muy bajos. En [EDL 2020] se discute como las características eléctricas de los dispositivos muestran tendencias que pueden ser fácilmente explicadas si se considera el *E-model* para definir t_j . Por ello, de entre los tres, se selecciona el *E-model* para describir τ_k

$$\tau_k = \tau_0' \cdot \exp(-\gamma \cdot V_{k-1}) \quad (3.33)$$

donde τ_0' y γ son parámetros de ajuste constantes. En base a la estimación con los valores experimentales de τ_k (Fig. 3.17a), $\tau_0' = 4.20 \cdot 10^2$ s y $\gamma = 6.31 \cdot 10^{-1}$ V⁻¹.

Introduciendo la (3.33) en la expresión de $F_{C,k}$ para eventos no correlacionados (3.19), y utilizando los parámetros de ajustes obtenidos para los dispositivos estudiados, se consigue que todas las distribuciones teóricas encajen perfectamente con las experimentales (Fig. 3.17b). El valor de todos estos parámetros se recoge en

la **Tabla 3.3**. Nótese que, en el cálculo de $F_{C,k}$, se está incluyendo el modelo atemporal ((3.27)) para obtener el valor de ΔV_{k-1} . Básicamente, se ha vinculado el retraso temporal de F_k con la reducción de la tensión aplicada en el dispositivo a través del modelo circuital atemporal.

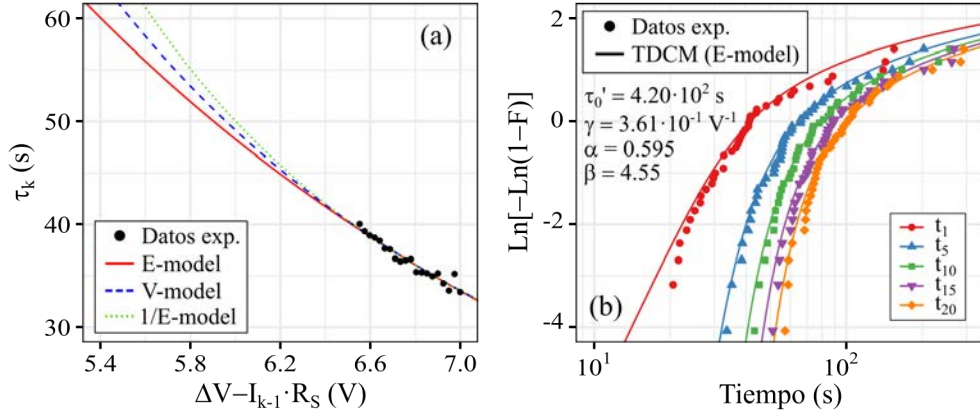


Fig. 3.17: (a) Evaluación de diferentes leyes de aceleración para ajustar los valores ideales de τ_k . (b) valor de F_k (método de K-M) para los eventos seleccionados y sus correspondientes $F_{C,k}$ para eventos no correlacionados, modificadas con los valores de τ_k obtenidos con el ajuste con el *E-model*.

$F_{C,k}(t; \alpha, \beta, \tau_k)$		$\tau_k(\Delta V_{k-1}; \tau_0', \gamma)$		$\Delta V_k(k; \Delta V, R_S, R_P, R_F)$			
α	β	$\tau_0' \text{ (s)}$	$\gamma \text{ (V}^{-1}\text{)}$	$\Delta V \text{ (V)}$	$R_S \text{ (}\Omega\text{)}$	$R_P \text{ (}\Omega\text{)}$	$R_F \text{ (}\Omega\text{)}$
0.595	4.55	$4.20 \cdot 10^2$	$6.31 \cdot 10^{-1}$	7	29	$8 \cdot 10^3$	$8.4 \cdot 10^5$

Tabla 3.3: Funciones y parámetros de ajuste para inducir el retraso temporal en las $F_{C,k}$ para eventos no correlacionados.

3.6. Conclusiones

A lo largo de este segundo capítulo experimental se ha realizado un estudio exhaustivo de la TDDB en estructuras $\text{Al}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{p}^+\text{Si}$ de área cuadrada de $6.4 \cdot 10^3 \mu\text{m}^2$. Las principales conclusiones del estudio son:

- ❖ El análisis exploratorio de la distribución de t_l ha demostrado que el mejor modelo para reproducir tanto la primera ruptura como los eventos sucesivos es el TDCM.
- ❖ La desviación que se observa en las distribuciones de t_k a altos percentiles respecto el modelo de Weibull se atribuye a una elevada dispersión en el valor I_i . A su vez, esta variabilidad, podría indicar que existe una variación en el espesor de la capa penta-nanolaminada de los dispositivos.

- ❖ El TDCM permite demostrar que los diez primeros eventos de ruptura están no correlacionados sin tener que eliminar las desviaciones a altos percentiles [78].
- ❖ A partir del 10.^o evento, las distribuciones teóricas para eventos no correlacionados en base al TDCM empiezan a mostrar tiempos inferiores a las distribuciones experimentales. Es decir, los tiempos experimentales se retrasan respecto a lo predicho por el modelo. El retraso se atribuye a la presencia de una resistencia serie en el circuito que provoca que la tensión aplicada en el dispositivo se vea reducida a medida que se van generando eventos de ruptura. Es importante mencionar que esto no deja de ser una hipótesis, ya que no se puede descartar que este efecto de resistencia serie sea algo propio del dispositivo.
- ❖ Se ha realizado un ajuste semiempírico de la estadística de eventos no correlacionados en base al TDCM con los datos experimentales definiendo un factor de escala efectivo (τ_k) para cada evento de ruptura. A su vez, utilizando el *E-model* se han relacionado los valores de τ_k con la reducción de la tensión aplicada debido a la hipotética resistencia serie.

Capítulo 4

Estadística espacial de eventos de ruptura

DURANTE la caracterización de la ruptura dieléctrica es muy común que se produzcan cambios visibles en los dispositivos debido a la generación de defectos en el interior del dieléctrico, así como a las reacciones físicas y químicas que se inducen durante la formación del CF. En el caso de no controlar la ruptura dieléctrica, la energía térmica que se libera por efecto Joule cuando se forma el CF es tan elevada que fácilmente induce la fusión del electrodo superior, dejando una marca que es perfectamente visible en la superficie del electrodo. Normalmente, estas marcas tienen una estructura similar a las de un cráter debido a que el proceso térmico es tan agresivo y repentino que produce una explosión localizada en el dispositivo. Si bien este evento puede suponer la destrucción de dispositivos pequeños, en áreas grandes es posible tener múltiples eventos de ruptura. En estos casos, las marcas pueden ser tratadas, desde el punto de vista matemático, como una distribución espacial de puntos que puede ser evaluada y descrita utilizando los métodos de la estadística espacial ([Fig. 4.1](#)).

Generalmente, el análisis de la distribución de los eventos de ruptura en estructuras MIS/MIM se realiza caracterizando la localización del primer evento de ruptura en una gran cantidad de dispositivos. Por otro lado, este mismo estudio, se puede realizar utilizando un único dispositivo que muestre múltiples eventos de ruptura aprovechando todas las herramientas que proporciona la estadística espacial [81]. Pese

a ello, debido a que no siempre es posible aplicarla, esta perspectiva no está muy explotada. El análisis de la distribución de eventos de ruptura en un único dispositivo no solo permite reducir el número de dispositivos requeridos para el estudio, sino que también abre la puerta a la exploración de nuevas interacciones que no se pueden evaluar con el método clásico. Por ejemplo, se facilita el estudio de la correlación que puede existir entre los eventos, tanto a nivel espacial como temporal. Es decir, permite evaluar la influencia que un evento puede tener en la generación de nuevos eventos.

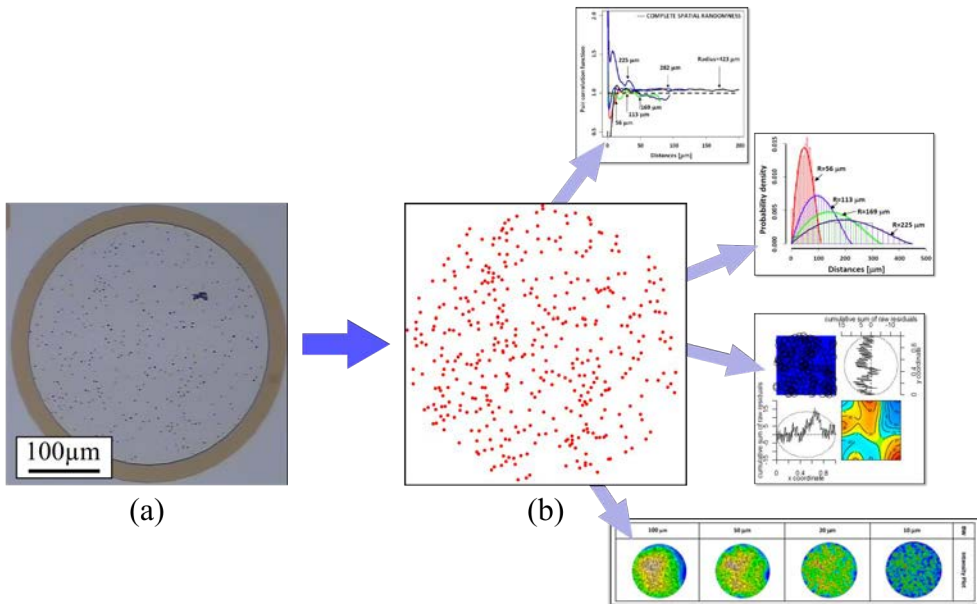


Fig. 4.1: Representación del estudio de una distribución espacial de eventos de ruptura utilizando técnicas de estadística espacial. (a) Imagen óptica de una distribución de múltiples eventos de ruptura en un dispositivo circular con radio de 169 μm . (b) Localización de los 423 puntos de BD presentes en (a) representados en una ventana de análisis cuadrada de 338 $\mu\text{m} \times 338 \mu\text{m}$.

Dado que la generación de defectos en el interior del dispositivo es completamente aleatoria (Sec. 1.4.2), se espera que no exista ningún tipo de correlación, ni temporal ni espacial, entre los eventos o puntos de ruptura [21]. Sin embargo, hay un sinfín de elementos relacionados con la fabricación de los dispositivos (no homogeneidad de la capa de óxido, efectos de borde, variaciones locales de la permitividad...) que pueden hacer que las distribuciones experimentales se desvíen de un proceso espacial completamente aleatorio (CSR). El análisis espacial de estas distribuciones permite identificar y, en muchos casos, cuantificar estas desviaciones, lo que en definitiva proporciona información sobre la calidad de los dispositivos.

En este capítulo se explora el uso de diferentes técnicas y métodos de la estadística espacial para el estudio y análisis de las distribuciones experimentales de puntos de ruptura en dispositivos Pt/HfO₂/Pt. Estos dispositivos fueron fabricados en el *Tyndall National Institute* en Cork (Irlanda), mientras que la caracterización experimental se realizó tanto en el *Tyndall National Institute* como en el *Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives – Laboratoire d'électronique des technologies de l'information* (CEA–Leti) (Francia). Inicialmente se presentará una introducción general sobre qué es la estadística espacial, así como una explicación sobre las diferentes técnicas y métodos que se han utilizado para definir y analizar las distribuciones experimentales. A continuación, se realizará una descripción más detallada de los dispositivos estudiados, así como de los procesos de caracterización utilizados. Luego se procederá a exponer los resultados experimentales obtenidos en donde se analiza la localización de los eventos de ruptura; se evalúa la correlación entre el área de los puntos y su localización; y se caracteriza la existencia de efectos de inhibición. Finalmente se expondrán las conclusiones obtenidas del trabajo realizado en relación a las publicaciones detalladas en el anexo [JAP 2017, JEM 2018, ME 2019, TDMR 2019].

4.1. Estadística espacial

La estadística espacial de procesos puntuales es la rama de la estadística que se ocupa de analizar la estructura geométrica de los patrones formados por un conjunto de objetos que se encuentran distribuidos aleatoriamente en un espacio de 1, 2 o 3 dimensiones [82]. Estos objetos pueden ser muy variados: árboles dentro de un bosque, galaxias dispersas en el universo, focos de terremotos en una región, impurezas en un semiconductor... En nuestro caso, estos objetos son los eventos de ruptura en la superficie de un electrodo. Con el fin de abstraer los datos, la localización de los objetos es representada por puntos (x_i) mientras que sus características (tamaño, color, tiempo...) son recogidas aparte. En estadística espacial, esta información adicional está vinculada a cada punto y se les denomina etiquetas o atributos (m_i). La abstracción permite el uso de cualquier método de análisis estadístico en cualquier patrón de puntos, independientemente de su origen. Las técnicas de análisis estadístico son universales y cualquier técnica desarrollada en un campo científico particular puede ser útil en otro campo completamente diferente. Sin ir más lejos, esta tesis es una prueba de ello. Gran parte de la literatura recolectada para el desarrollo experimental de este capítulo proviene de campos tan diferentes de la microelectrónica como la geografía o la biología.

La principal función de la estadística espacial es evaluar una serie de características de un patrón de puntos que permiten conocer qué tipo de interacción existe entre ellos. A nivel general, se pueden describir tres tipos de distribuciones según la relación entre los puntos:

Distribución aleatoria (Fig. 4.2a) → Se dice de aquel patrón en donde los puntos no muestran ningún tipo de interacción. Los puntos están distribuidos siguiendo la estadística de Poisson.

Distribución regular (Fig. 4.2b) → Es aquel patrón en donde se observa una separación fija entre los puntos. También se habla de que hay inhibición o repulsión de los puntos.

Distribución agrupada (Fig. 4.2c) → Patrón en donde los puntos están muy próximos. Se puede dar en forma de pequeñas agrupaciones de puntos o como una gran acumulación de todos los puntos en una región del patrón.

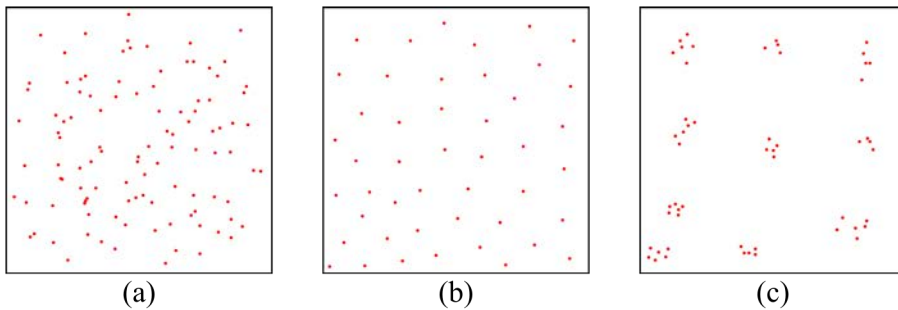


Fig. 4.2: Ejemplo de una distribución (a) aleatoria, (b) regular, y (c) agrupada.

La gran mayoría de métodos y técnicas de estadística espacial se centran en evaluar las interacciones a corta distancia para discernir qué tipo de distribución muestra el patrón estudiado. Sin embargo, no hay que dejar de lado otras cualidades del patrón como la existencia de anisotropía o la existencia de los atributos. Si bien el estudio de la localización de los objetos es interesante, la verdadera utilidad de las técnicas de estadística espacial aparece cuando se explora la correlación entre los puntos y sus características: La correlación entre la localización y el tamaño, el tiempo de aparición o de generación, la selección y filtro de tipos de puntos... todo esto son elementos de los que también se ocupa la estadística espacial y que añaden complejidad y riqueza al estudio de las distribuciones estadísticas.

La descripción estadística de un patrón de puntos no consiste en aplicarle un método de análisis para discernir el tipo de distribución. Los estimadores utilizados no tienen esa capacidad por sí mismos. Para ello, junto al análisis empírico, se aplican

modelos estadísticos cuyos resultados se comparan a los del patrón para así poder conocer cuál es el que mejor describe la distribución estudiada. El modelo por excelencia, como no podía ser de otra manera, es el modelo de Poisson, el cual considera que los puntos están aleatoriamente distribuidos en el espacio analizado. En este contexto también se dice que los puntos siguen un proceso CSR. Existen dos propiedades fundamentales que definen una distribución de puntos que sigue un proceso de Poisson:

Distribución de Poisson de la suma de puntos → Cualquier número de puntos definidos en una región o subconjunto A sigue la distribución de Poisson (**Fig. 4.3a**).

Dispersión independiente → Los puntos presentes en un subconjunto A del patrón de puntos son independientes de los puntos contenidos dentro de un subconjunto B (**Fig. 4.3b**).

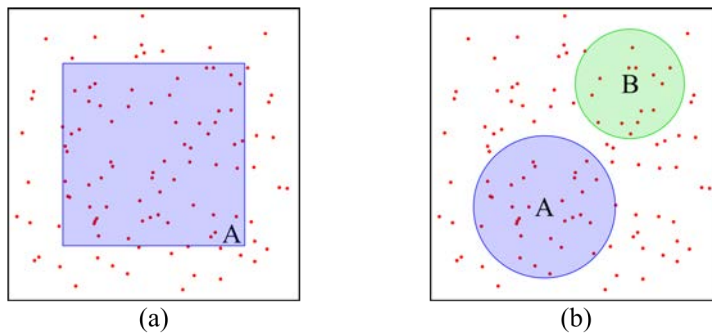


Fig. 4.3: Representación de un patrón de puntos CSR. (a) Delimitación de un subconjunto A cuyos puntos deben seguir la distribución de Poisson. (b) Delimitación de dos subconjuntos A y B independientes, en donde los puntos de A deben de ser independientes de B y viceversa.

Llegados a este punto es necesario realizar una aclaración respecto a la comparación que se está realizando. En este contexto, al comparar un patrón con un modelo, se está planteando la hipótesis de que ambas distribuciones son iguales. En el caso de que el modelo sea el de Poisson, a esta hipótesis se le conoce como la hipótesis nula. Es muy importante tener presente que, cuando se realiza la comparación, solo es posible afirmar que dos distribuciones no son iguales. Es decir, solo podemos negar la hipótesis planteada. Si bien puede sonar complejo, es muy sencillo. Dado un conjunto de análisis estadísticos en el que se compara el patrón con el modelo de Poisson, es más que suficiente que uno rechace la hipótesis nula para no tener dudas de que el patrón no sigue un proceso CSR. Esto ocurre, en parte, porque los parámetros estadísticos solo analizan una característica muy concreta de la distribución. Por ello, para poder considerar que un patrón sigue un modelo en

concreto, se requiere de la comparación de varios estimadores y parámetros estadísticos.

A continuación, se realiza una descripción de los aspectos más relevantes que se deben tener en cuenta en el estudio de patrones de puntos, así como de los estimadores más utilizados para estudiarlos. Es importante mencionar que los estimadores serán descritos en detalle, tanto su deducción como la interpretación de los resultados. Aun así, para entender los resultados experimentales, es más que suficiente con conocer su interpretación

4.1.1. Definición de la distribución

4.1.1.1. Ventana de análisis

La ventana de análisis o ventana de observación es el primer elemento que hay que definir cuando se quiere realizar el análisis de un patrón de puntos. Básicamente, es el espacio geométrico en donde se encuentran contenidos los puntos y, a su vez, determina los límites del análisis. Es muy importante definirla correctamente, ya que puede llegar a afectar a las conclusiones extraídas. Un ejemplo de ello se muestra en la Fig. 4.4a, en donde el mismo patrón está definido en dos ventanas de observación diferentes. Como puede observarse, al incrementar la ventana, el patrón pasa a estar agrupado en el centro de la región analizada. Dado que los eventos de ruptura ocurren dentro de un espacio ya delimitado, la ventana de análisis utilizada suele coincidir con el área del dispositivo.

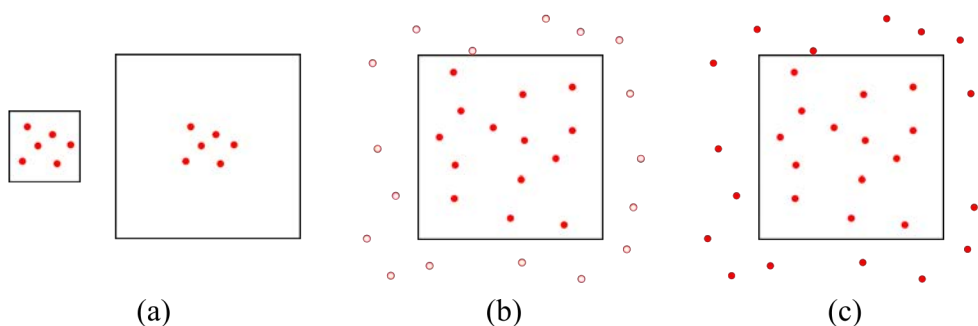


Fig. 4.4: Representación (a) de una misma distribución con dos ventanas de observación diferentes y (b,c) de los puntos disponibles cuando se realiza un muestreo (b) negativo o (c) positivo. Los puntos analizados son los que se encuentran dentro de la ventana de observación.

4.1.1.2. Tipo de muestreo

El tipo de muestreo hace referencia a la información que se tiene disponible una vez definida la ventana de observación. Existen dos tipos de muestreo

Muestreo negativo (Fig. 4.4b) → Solo se considera la información contenida dentro de la ventana de análisis. Un buen ejemplo de este tipo de muestreo sería una fotografía: sabemos qué hay dentro pero no lo que había fuera de sus límites.

Muestreo positivo (Fig. 4.4c) → Se tiene acceso a la información situada fuera de la ventana de análisis. El análisis de los estimadores se sigue realizando en los puntos internos, pero se cuenta con la información externa.

Es muy importante definir cuál de los dos se quiere adoptar, ya que pueden afectar a los resultados obtenidos. El muestreo negativo da lugar a lo que se conoce como efectos de borde. Básicamente, al eliminar la información externa a la ventana, los puntos cercanos al borde ven modificadas sus distancias y el número de puntos que tienen a su alrededor. Un ejemplo sería que un punto, x_i , tuviese su punto más cercano, x_j , situado fuera de la ventana. Al eliminar x_j , x_i pasaría a tener otro punto como evento cercano que estaría a una distancia mayor que su evento vecino real. Es por estos efectos de borde que, en el cálculo de los estimadores, se aplican correcciones para tratar de tenerlos en cuenta.

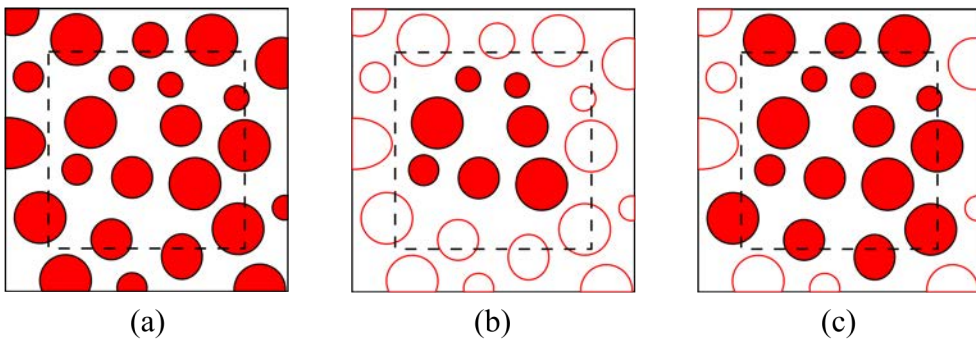


Fig. 4.5: Representación (a) de una imagen que contiene un conjunto de objetos con diferentes áreas y (b,c) de los objetos analizados utilizando un muestreo negativo (b) o uno positivo (c). la ventana de observación es el cuadrado discontinuo.

Los puntos no dejan de ser elementos unidimensionales y, en consecuencia, solo pueden presentar dos estados respecto a la ventana de observación: o están dentro o están fuera. Si se considera la dimensión de los objetos, se incorpora la posibilidad de que estos sean cortados por la ventana (Fig. 4.5a). Teniendo en cuenta este nuevo estado, la definición de los muestreos se ve modificada [83]:

Muestreo negativo (Fig. 4.5b) → Solo se consideran los objetos que están completamente contenidos dentro de la ventana de observación. Prioriza o favorece la presencia de objetos pequeños.

Muestreo positivo (Fig. 4.5c) → Se consideran tanto los objetos contenidos dentro de la ventana como los que son cortados por esta. Prioriza o favorece la presencia de objetos grandes.

Este tipo de muestreo es interesante realizarlo cuando, tal y como se ve en la Fig. 4.5a, hay objetos cortados por la imagen. Es decir, que no es posible conocer ni su tamaño ni su posición real. Por este motivo, en este tipo de muestreo no se consideran los objetos situados fuera de la ventana de análisis. Con el fin de simplificar los cálculos y seguir un mismo procedimiento, el tipo de muestreo realizado siempre ha sido negativo, tanto si solo se consideraba la posición de los objetos como si se tenía en cuenta su dimensión.

4.1.2. Características generales de una distribución puntual

4.1.2.1. Intensidad

La intensidad (λ) es la principal característica de una distribución de puntos, y se define como el número de puntos por unidad de área. Este valor se suele definir utilizando el área de la ventana de observación

$$\lambda = \frac{n^{\circ} \text{ puntos dentro de la ventana}}{\text{área ventana}} \quad (4.1)$$

lo que proporciona un valor constante. Si bien λ permite definir el resto de las propiedades de una distribución, no nos permite saber con qué tipo de patrón estamos trabajando. Para ello, se recurre a evaluar los cambios de λ dentro de la ventana de análisis: primero se divide la ventana en un número de regiones de igual área y, en cada una, se calcula λ . Posteriormente, se recurre a funciones de suavizado que permiten representar estos valores más nítidamente. Normalmente se utiliza la función Gaussiana, en la cual el área de las regiones se define a través de la desviación estándar —a mayor desviación, mayor es el área—. La representación de estos resultados se denomina gráfica de intensidad (Fig. 4.6a), y permite realizar un primer análisis subjetivo de la distribución. Como puede observarse en el ejemplo mostrado en la Fig. 4.6a, los puntos parecen estar acumulados hacia el centro de la ventana. Aun así, hay que volver a remarcar que estos resultados son completamente subjetivos y, por tanto, siempre es necesario realizar otro tipo de análisis para extraer conclusiones determinantes. Esta representación permite tener un primer acercamiento a los datos, proporcionando una impresión general de la distribución.

4.1.2.2. Distancias entre puntos

Como se ha mencionado, la gran mayoría de análisis que se realizan en un patrón de puntos parten de evaluar las distancias entre los puntos. Por lo general, se puede considerar que existen tres tipos de distancias

Distancias entre pares ($d_{ij} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|$) → Son las distancias (d_{ij}) entre dos puntos cualesquiera de la distribución ($\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j; i \neq j$).

Distancia entre eventos vecinos ($d_i = \min_{j \neq i} d_{ij}$) → No es más que la distancia desde el punto \mathbf{x}_i hasta su punto más cercano.

Distancia de espacio vacío ($d(\mathbf{u}) = \min_j \|\mathbf{u} - \mathbf{x}_j\|$) → Similar a la distancia entre eventos vecinos, es la distancia desde una posición cualesquiera de la ventana de análisis (\mathbf{u}) hasta su punto más cercano.

Estos valores pueden ser evaluados directamente utilizando simples histogramas o representaciones algo más complejas como las CDF o las PDF. En el caso de las distancias vacías, se suele recurrir a una representación similar a la gráfica de intensidad, que se conoce como mapa de distancias vacías (Fig. 4.6b). Al igual que con la gráfica de intensidad, es una representación que suele ser muy subjetiva.

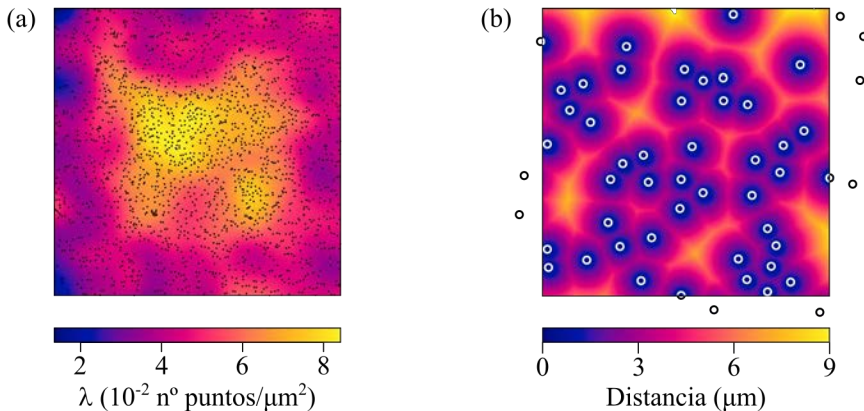


Fig. 4.6: (a) Gráfica de intensidad de una distribución espacial de 2042 puntos con una ventana de análisis cuadrada de $200 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m}$. El valor de la desviación para el ajuste es de 10. (b) Mapa de distancias vacías de una región de $25 \mu\text{m} \times 25 \mu\text{m}$ dentro de un patrón de puntos. Solo se han representado los puntos cercanos a esta región y que afectan al cálculo de las distancias.

4.1.3. Estimadores para procesos puntuales

La definición estadística de una distribución de puntos se hace a través del cálculo de una serie de parámetros que son capaces de describirla numéricamente. A su vez, se realizan comparaciones con los resultados proporcionados por un modelo con el fin

de discernir si la distribución estudiada sigue el modelo planteado. Normalmente, se compara con una distribución CSR, lo que permite saber si el patrón sigue el modelo de Poisson. En la Fig. 4.7a se muestra el valor experimental del estimador K de Ripley junto a su valor teórico según el modelo de Poisson. Como puede observarse, la distribución experimental se desvía por completo del valor esperado para un proceso CSR. Sin embargo, esta representación no está considerando los posibles errores y variaciones que pueden existir tanto en el cálculo experimental como en las distribuciones CSR. La distribución experimental puede presentar regiones que coinciden con el modelo de Poisson y una distribución generada de manera aleatoria nunca coincidirá a la perfección con el valor teórico. Hay dos maneras de contemplar estos errores/variabilidad.

Intervalo de confianza (Fig. 4.7b) → Error del patrón de puntos. Para calcular su valor, primero se divide la ventana de análisis en regiones iguales para obtener la media, la varianza y la desviación estándar del parámetro evaluado. Luego, utilizando estos valores, se obtiene el intervalo de confianza. Se considera que el patrón puede seguir el modelo si el valor teórico está incluido dentro de la región definida por el intervalo.

Límites del valor teórico (Fig. 4.7c) → Variabilidad del modelo. Estos se obtienen realizando simulaciones del tipo Monte Carlo (MC). Básicamente se simulan distribuciones CSR que tienen las mismas características que el patrón experimental: mismo número de puntos y atributos. En cada una de estas se calcula el valor del estimador y, utilizando estos valores, se definen los límites del valor esperado para un proceso CSR. En este caso, se considera que la distribución experimental sigue el modelo propuesto si el valor experimental se encuentra dentro de los límites del valor teórico.

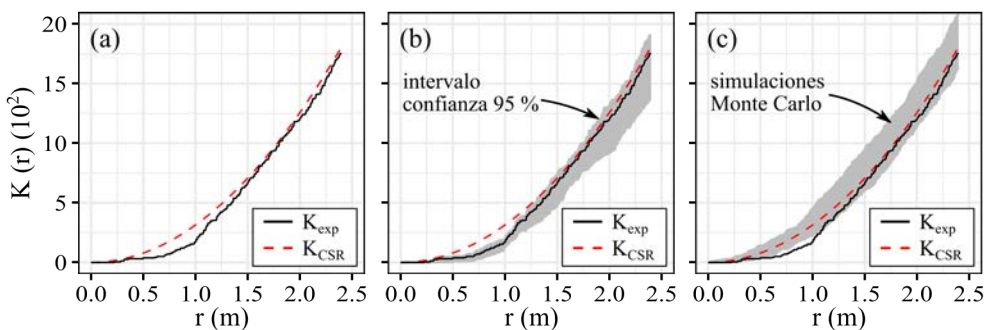


Fig. 4.7: Representación de la función K para una distribución de 71 puntos con una ventana de observación rectangular de $9.6 \text{ m} \times 10 \text{ m}$. En (b) se encuentra representado el intervalo de confianza al 95 % del valor experimental, mientras que en (c) se representa los límites del valor teórico después de 50 simulaciones de MC. Los datos corresponden al conjunto *swedishpines* incorporado en *spatstat*.

En ambos casos, las regiones definidas por estos métodos sirven para saber con mayor seguridad si el modelo propuesto se ajusta a los datos experimentales. En los ejemplos mostrados (Fig. 4.7b,c) se pone de manifiesto cómo la desviación observada entre el valor experimental y el teórico (Fig. 4.7a) puede no ser tan considerable como parecía en un principio.

4.1.3.1. Función de distancia entre eventos vecinos – $G(r)$

La función G no es más que la CDF de la distancia entre eventos vecinos, es decir, define la probabilidad de que el punto x_j más cercano al punto x_i este situado a una distancia igual o menor que r . Teniendo en cuenta su definición, es fácil definir el valor esperado de G para un proceso CSR con intensidad λ como

$$G_{CSR}(r) = 1 - \exp(-\lambda \cdot \pi r^2) \tag{4.2}$$

en donde $\exp(-\lambda \cdot \pi r^2)$ es la probabilidad de que en un disco de radio r centrado en un punto x_i no haya ningún otro punto x_j (Fig. 4.8a). Para entender esta deducción hay que tener presente varios elementos:

- i. En un proceso CSR o de Poisson, los eventos son independientes entre sí.
- ii. No se considera la probabilidad de generar el evento central. Ya está formado.
- iii. La probabilidad de que no haya un punto en el disco de radio r ($\exp(-\lambda \cdot \pi r^2)$), es equivalente a la probabilidad de que el punto x_j más cercano al punto x_i este situado a una distancia mayor que r .

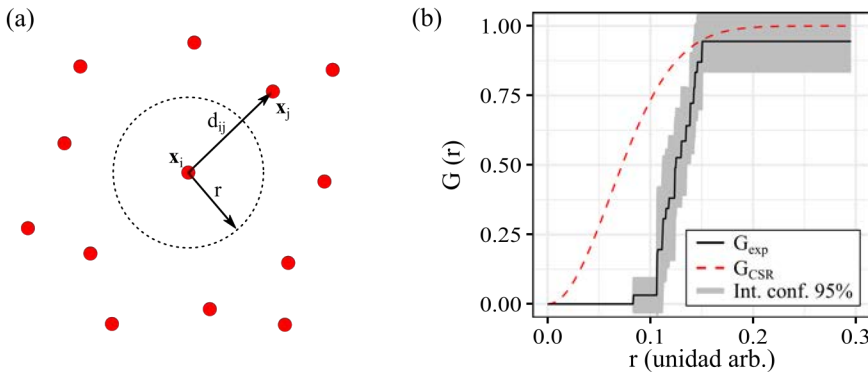


Fig. 4.8: (a) Esquema para el cálculo de la función G . La r es el radio del círculo centrado en un punto arbitrario del patrón y d representa la distancia desde este punto hasta su punto más cercano. (b) Representación de la función G para un patrón de 42 puntos dentro de una ventana de análisis cuadrada normalizada (1×1 unidad arb.). Los datos corresponden al conjunto *cells* incorporado en *spatstat*.

La interpretación de los resultados de la función G se realiza comparando el valor experimental (G_{exp}) con el esperado para un proceso CSR (G_{CSR}).

$G_{exp} > G_{CSR} \rightarrow$ Indica una agrupación de puntos en el patrón analizado. Los eventos vecinos tienen distancias menores que las esperadas para un proceso CSR.

$G_{exp} < G_{CSR} \rightarrow$ Indica una repulsión de puntos en el patrón analizado. Las distancias entre eventos vecinos son mayores que las observadas en una distribución CSR.

En la **Fig. 4.8b** se muestra un ejemplo del uso de este estimador para estudiar un patrón de puntos determinado. Como se puede observar, los resultados muestran que existe una clara inhibición en la distribución de los puntos, dado que $G_{exp} < G_{CSR}$. De hecho, se puede ver que G_{exp} es nulo para $r \leq 0.07$, lo que indica que no existen eventos vecinos a una distancia menor que 0.07. A su vez, el intervalo de confianza parece indicar que, para $r > 0.15$, el patrón se adapta a una distribución CSR.

4.1.3.2. Estimador K de Ripley – $K(r)$

Uno de los métodos más populares para analizar la correlación espacial en patrones de puntos es la función K definida por Ripley en 1977 [84]. Esta función se denomina característica de segundo orden, al igual que la L y la g , y se considera que estas características son las más completas para proporcionar información de distribuciones espaciales de puntos [85].

La función K es un método que evalúa directamente las distancias d_{ij} entre todos los pares de puntos que forman un patrón de puntos [82]. Considerando un patrón con intensidad λ y un total de n puntos, si se define un disco de radio r alrededor de todos los puntos x_i que forman el patrón, el número medio de puntos x_j en este disco serían, sin contar el punto x_i ,

$$\langle n(r) \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n n_i(r) \quad (4.3)$$

donde n_i indica el número de puntos x_j situados a una distancia r o menor del punto x_i . Teniendo en cuenta este valor, la función K se define como

$$K_{exp}(r) = \frac{\langle n(r) \rangle}{\lambda} \quad (4.4)$$

es decir, es el número medio de puntos generados en un círculo de radio r normalizado por la intensidad del proceso. En el caso de un proceso CSR, debido a la independencia intrínseca de los puntos, el número de puntos que hay en un disco de radio r es independiente de que en el centro de este exista un punto o no (**Fig. 4.9a**). Teniendo esto en cuenta, la función K para un proceso CSR se define como

$$K_{CSR}(r) = \frac{\lambda \cdot \pi r^2}{\lambda} = \pi r^2 \quad (4.5)$$

dado que $\lambda \cdot \pi r^2$ es el número medio de puntos que hay dentro de un disco de radio r definido en un patrón que sigue una distribución CSR. La interpretación de los resultados es similar que para la función G .

$K_{exp} > K_{CSR} \rightarrow$ Indica una agrupación de puntos en el patrón analizado. Hay más puntos situados dentro del círculo de radio r que la cantidad observada si la distribución sigue el modelo de Poisson.

$K_{exp} < K_{CSR} \rightarrow$ Indica una repulsión de puntos en el patrón analizado. Las distancias entre puntos son mayores de las que se esperaría para una distribución CSR.

En la **Fig. 4.9b** se muestra un ejemplo del cálculo de la función K para un patrón que muestra una ligera ausencia de puntos a distancias cortas. Como puede observarse, el intervalo de confianza no incluye el valor teórico para $r < 100 \mu\text{m}$. A medida que el círculo crece, la distribución experimental se parece más a una distribución CSR.

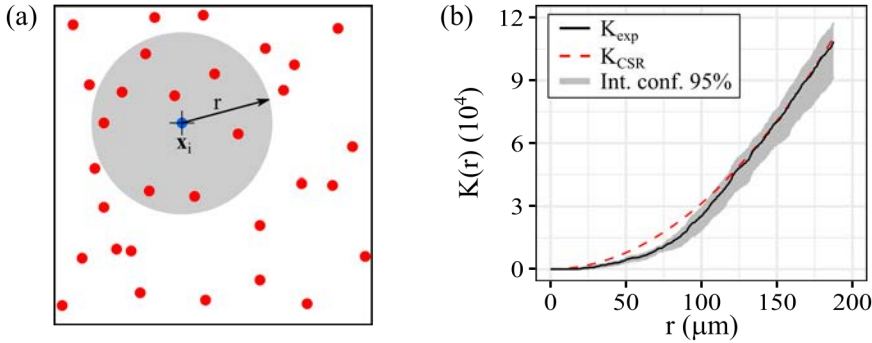


Fig. 4.9: (a) Esquema para el cálculo de la función K . (b) Representación de la función K para un patrón de 135 puntos dentro de una ventana de análisis rectangular de $750 \mu\text{m} \times 990.82 \mu\text{m}$ correspondiente al conjunto *betacells* incorporado en *spatstat*.

4.1.3.3. Función de correlación entre pares – $g(r)$

La función g es considerada la mejor de las tres funciones características de segundo orden, pese a que su estimación estadística puede ser compleja [85]. Básicamente, es la media experimental de puntos situados a una distancia r de un punto x_i dividida por la media de puntos esperada de un proceso CSR. Tal y como se muestra en la **Fig. 4.10a**, considerando dos círculos de radios r y $r + \Delta r$, la función g valdría

$$g_{exp}(r) = \frac{\lambda \cdot K(r + \Delta r) - \lambda \cdot K(r)}{\lambda \cdot \pi (r + \Delta r)^2 - \lambda \cdot \pi r^2} = \frac{K(r + \Delta r) - K(r)}{2\pi r \Delta r + \pi \Delta r^2} \quad (4.6)$$

Al tender Δr a un valor infinitesimal, $\pi\Delta r^2$ se vuelve despreciable y la (4.6) se convierte en la expresión de la función g

$$g_{exp}(r) = \frac{dK(r)/dr}{2\pi r} \quad (4.7)$$

Debido a la normalización realizada respecto una distribución de Poisson, el valor de la función g define la correlación del patrón estudiado con un proceso CSR.

$g_{exp} = 1 \rightarrow$ Ausencia de correlación entre los puntos. Sigue una distribución CSR.

$g_{exp} > 1 \rightarrow$ Indica que existe una agrupación de puntos en la distribución estudiada.

$g_{exp} < 1 \rightarrow$ Indica una separación regular entre los puntos analizados.

Además, es importante mencionar que g_{exp} puede valer entre 0 y ∞ , pero nunca puede ser negativa. Para mostrar la relación entre la función K y la g , en la Fig. 4.10b se muestra el valor de g para la distribución analizada en la Fig. 4.9b. Como puede observarse, en esta representación, es más fácil detectar que existe una ausencia de puntos para $r < 80 \mu\text{m}$.

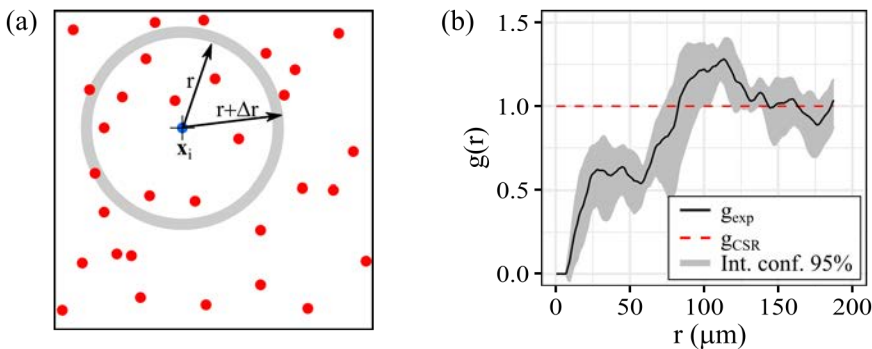


Fig. 4.10: (a) Esquema para el cálculo de la función g . (b) Representación de la función g para un patrón de 135 puntos dentro de una ventana de análisis rectangular de $750 \mu\text{m} \times 990.82 \mu\text{m}$ correspondiente al conjunto *betacells* incorporado en *spatstat*.

4.1.3.4. Wavelets angulares

El método de wavelets angulares es un método alternativo desarrollado por Rosenberg [86] para evaluar la anisotropía en los patrones de puntos, es decir, para saber si los puntos están agrupados siguiendo una dirección angular concreta. Este método utiliza la transformada de wavelet, una herramienta matemática comúnmente utilizada para el análisis de señales y la compresión de datos [87]. Esta transformada se basa en las funciones wavelets: funciones con forma de onda en cuyos extremos e integral valen 0. Existen diferentes tipos de wavelets, siendo las más utilizadas la Haar y la *French*

top hat (FTH) [88]. Precisamente, estas dos, tal y como se detalla en [JAP 2017], son las idóneas para analizar la distribución de eventos de ruptura dieléctrica.

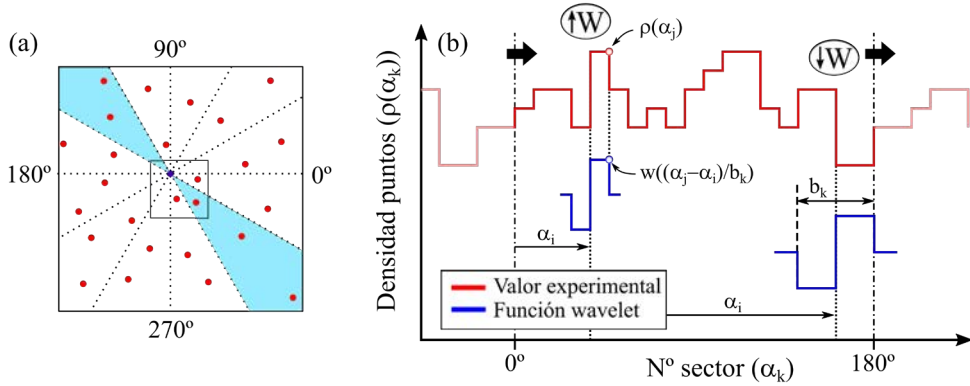


Fig. 4.11: (a) Selección de los puntos para realizar el análisis con wavelets angulares y división del espacio alrededor de uno de estos puntos en sectores angulares. (b) Representación esquemática de la transformación de wavelet aplicada a una secuencia de datos experimentales ($\rho(\alpha_k)$). La naturaleza circular de los datos experimentales también se encuentra representada. La α_i es la posición donde se aplica la transformada de wavelet y la b_k es la escala de la función utilizada.

Brevemente, el método funciona de la siguiente manera. Primero se define una región central en la ventana de observación, denominada ventana focal, que determina los puntos que se utilizarán para realizar el análisis. En cada uno de estos puntos, denominados puntos focales (\mathbf{x}_i), se divide el espacio a su alrededor en sectores angulares de 1° y se calcula la densidad de puntos en cada sector. Tal y como se muestra en la Fig. 4.11a, los sectores opuestos se fusionan en un solo calculo, de tal manera que lo que se obtiene es la densidad de puntos en función de la dirección angular ($\rho(\alpha_i)$). Es importante mencionar que en $\rho(\alpha_i)$ se considera que el primer y último sector están adyacentes. Una vez calculadas las densidades, se aplica la transformada de Wavelet

$$W_l(\alpha_i, b_k) = \frac{1}{b_k} \sum_{j=1}^n \rho_l(\alpha_j) \cdot w\left(\frac{\alpha_j - \alpha_i}{b_k}\right) \quad (4.8)$$

en donde w es la función wavelet que se está utilizando, α_i es la posición donde se está comparando la wavelet, b_k controla el ancho de la wavelet y n es el total de sectores alrededor de α_i que pueden afectar a la transformada. La particularidad de la (4.8) es, tal y como se muestra en Fig. 4.11b, que si la forma de w coincide con la de $\rho(\alpha_i)$, la $W_l(\alpha_i)$ es elevada; mientras que si hay una coincidencia pobre, la $W_l(\alpha_i)$ es baja. Nótese que en la (4.8), solo se está evaluando un punto focal y una dirección angular,

para evaluar el valor de la transformada en todos los puntos focales (x_i) así como el uso de diferentes anchos para la wavelet (b_k), se procede a computar la varianza

$$P_{exp}(\alpha_i) = \frac{1}{f} \sum_{l=1}^f \frac{1}{m} \sum_{l=1}^f W_l^2(\alpha_i, b_k) \quad (4.9)$$

en donde f es el total de puntos focales y m el total de escalas b_k utilizadas.

Al igual que para el resto de los parámetros, la interpretación de los resultados consiste en comparar los resultados experimentales con los valores esperados para una distribución CSR. Sin embargo, en este caso, no hay una definición teórica de P según el modelo de Poisson, así que se recurre a realizar simulaciones del tipo MC para obtener el intervalo de confianza del modelo. Básicamente, si existe anisotropía en una dirección determinada, P_{exp} mostrará un pico que supere el intervalo de confianza en esa dirección. En la Fig. 4.12a se muestra un patrón de 100 puntos en donde 15 han sido generados en la diagonal de la ventana de análisis situada a 135° y en la Fig. 4.12b se puede observar el análisis de wavelets angulares. Nótese que el método es capaz de detectar, en la dirección correcta, la anisotropía inducida en el patrón.

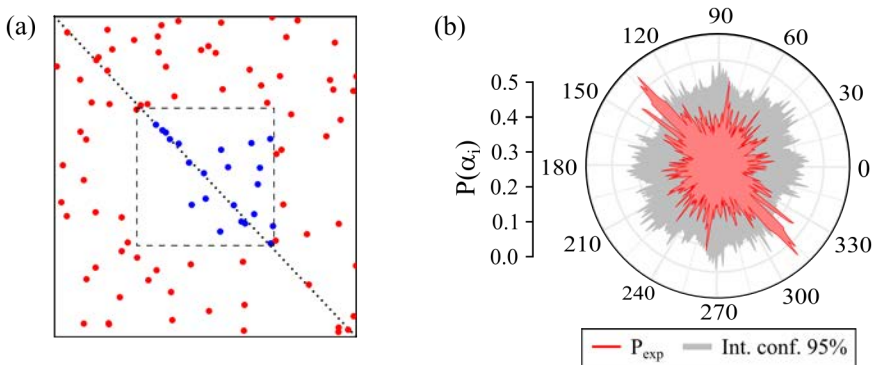


Fig. 4.12: (a) Representación de un patrón de 100 puntos en el que 85 han sido generados siguiendo un proceso CSR y 15 han sido distribuidos formando una anisotropía a 135° . La ventana de análisis es de 1×1 unidades arb. y en azul se muestran los puntos focales. (b) Análisis del patrón (a) utilizando el método de wavelets angulares. La ventana focal es del 20 % y se utiliza la wavelet Haar. El intervalo de confianza se construye después de 50 simulaciones MC.

4.1.4. Correlación entre puntos y atributos

Como se ha mencionado, los puntos (x_i) son representaciones abstractas de la localización de los objetos mientras que los atributos (m_i) representan sus características. El estudio de la correlación entre los puntos y los atributos proporciona una gran información sobre la distribución de los objetos analizados y permite conocer la interacción que puede existir entre estos. Los atributos pueden ser de dos tipos, o

cualitativos (especie, color, categoría...) o cuantitativos (peso, tamaño, tiempo...) y, según el tipo, los métodos y estimadores que se pueden utilizar para evaluar la correlación son diferentes. Dado que el problema evaluado en esta tesis trata con atributos continuos, concretamente el tamaño de los eventos de ruptura, solo se mostrarán métodos que evalúan este tipo de atributos. De la misma manera que con la localización de los puntos, se considera que la distribución espacial de los atributos debe de seguir una distribución de Poisson.

4.1.4.1. Función de correlación entre atributos – $k_{mm}(r)$

La función k_{mm} se parece a la función g en tanto que ambas evalúan la correlación de los puntos situados a una distancia r del punto x_i , solo que en este caso no se cuenta el número de puntos sino el valor medio del atributo evaluado [82], [85], [89]–[91]

$$k_{mm,exp}(r) = \frac{\mathbb{E}[f(m_i, m_j)|d_{ij} = r]}{\mathbb{E}[f(M_i, M_j)|d_{ij} = r]} \quad (4.10)$$

Esta ecuación es la expresión general para la k_{mm} en donde $f(m_i, m_j)$ es una función de test que describe la interacción de los atributos de los puntos x_i y x_j , respectivamente, y la \mathbb{E} es la media condicional del valor de $f(m_i, m_j)$. Como se puede ver, la condición para contabilizar la función es que la distancia entre los puntos x_i y x_j (d_{ij}) sea igual a r . Mientras que en el numerador aparece la media condicional para los valores experimentales (m_i, m_j), en el denominador está el valor esperado para una distribución de Poisson (M_i, M_j), tal y como ocurría con la g ((4.6)).

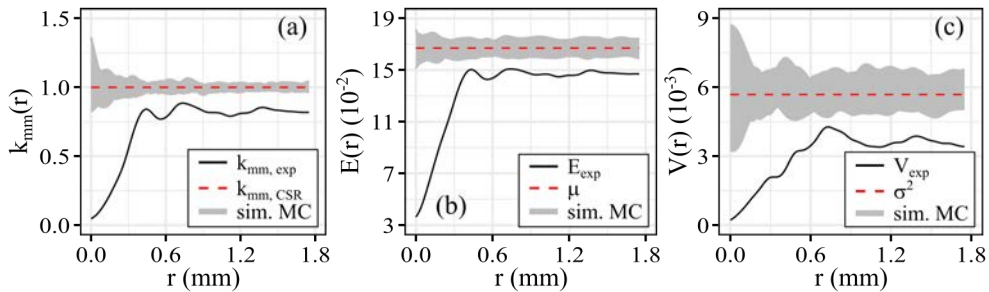


Fig. 4.13: Representación de la función (a) K_{mm} , (b) E y (c) V para evaluar el diámetro de 678 partículas de bronce definidas en una ventana de observación rectangular de 18 mm × 7 mm. Los datos corresponden al set *bronzefilter* disponible en *spatstat*. La región gris corresponde a los límites del valor teórico obtenidos después de generar 50 simulaciones de MC utilizando los valores experimentales.

Existen diferentes funciones de test que se pueden utilizar para evaluar la K_{mm} , siendo la más típica $f(m_i, m_j) = m_i \cdot m_j$ [82]. Considerando esta función en la expresión anterior ((4.10)), se obtiene

$$k_{mm,exp}(r) = \frac{\mathbb{E}[m_i \cdot m_j | d_{ij} = r]}{\mathbb{E}[f(M_i \cdot M_j) | d_{ij} = r]} = \frac{\mathbb{E}[m_i \cdot m_j | d_{ij} = r]}{\mu^2} \quad (4.11)$$

conocida como la k_{mm} clásica en donde μ es el valor medio del atributo evaluado. Esta expresión ((4.11)) es la que se ha utilizado para analizar las distribuciones experimentales. Aunque la K_{mm} , al igual que la g , indica la existencia o no de correlación, su interpretación depende de la función de test utilizada. En el caso de la K_{mm} clásica [91].

$K_{mm} = 1 \rightarrow$ Ausencia de correlación. La distribución de los atributos sigue el modelo de Poisson.

$K_{mm} > 1 \rightarrow$ El valor de los atributos a una distancia r es mayor de lo esperado. Agrupación de atributos de valor elevado.

$K_{mm} < 1 \rightarrow$ El valor de los atributos a una distancia r es menor de lo esperado. Puede indicar una agrupación de atributos de valor pequeño.

Es importante remarcar que, para interpretar de manera correcta estos resultados, normalmente se requiere del uso de otros estimadores. Es decir, podemos saber que existe correlación, pero es fácil llegar a describirla incorrectamente. En la Fig. 4.13a se muestra el análisis del diámetro de una distribución de partículas de bronce utilizando la K_{mm} clásica en donde se puede observar que las partículas cercanas tienden a tener tamaños más pequeños de lo esperado.

4.1.4.2. Momentos condicionales inversos – E y V

Conociendo la definición de la k_{mm} , es sencillo definir las funciones E y V introducidas por Schlather *et al.* [92]. Estas dos funciones no son más que la media condicional (E) y la varianza condicional (V) del valor del atributo de un punto x_i (m_i) dada la condición de que a una distancia r existe un punto x_j

$$E_{exp}(r) = \mathbb{E}[m_i | d_{ij} = r] \quad (4.12)$$

$$V_{exp}(r) = \mathbb{E}[(m_i - E_{exp}(r))^2 | d_{ij} = r] \quad (4.13)$$

Nótese que la función E ((4.12)) no es más que el valor de la k_{mm} cuando se utiliza la función de test $f(m_i, m_j) = m_i$ [89] y sin normalizar respecto a una distribución de Poisson. Al igual que las anteriores funciones, tanto la E como la V tienen que igualarse al valor esperado para una distribución de Poisson. En este caso, esto quiere decir que la E tiene que ser igual a μ ; mientras que la V tiene que ser igual a la varianza experimental del valor de los atributos (σ^2)

Para interpretar los análisis realizados con las funciones E y V , es necesario evaluar ambas funciones a la vez. A nivel general, la E permite saber si un punto rodeado por otros muestra un atributo más pequeño ($E_{exp} < \mu$) o más grande ($E_{exp} > \mu$) de lo esperado; mientras que la V no deja de ser la varianza de la E , por lo que permite saber la dispersión de los resultados obtenidos en E . A modo de ejemplo, en las Fig. 4.13b,c se muestran, respectivamente, las funciones E y V de la distribución de puntos previamente analizada en la Fig. 4.13a. Recordemos que se analizó el diámetro de un conjunto de partículas de bronce repartidas por el espacio. Analizando conjuntamente los resultados (Fig. 4.13b,c) se puede concluir que las partículas que están muy próximas entre sí tienen diámetros muy pequeños ya que tanto la E como la V son inferiores a sus respectivos valores esperados (μ y σ^2). Es decir, la E nos indica que una partícula rodeada por otras tiende a tener un diámetro inferior a la media, y la V nos indica que apenas hay variación en el tamaño de estas partículas. Suponiendo el caso de que $V > \sigma^2$, la conclusión extraída sería completamente diferente. En este caso hipotético, dada la elevada variación de tamaños, los resultados indicarían que las partículas de bronce de diámetro elevado se encuentran rodeadas de partículas mucho más pequeñas.

4.2. Definición de los dispositivos

La distribución espacial de eventos de ruptura se ha estudiado en dispositivos MIM con estructura Pt/HfO₂/Pt, fabricados sobre una capa de SiO₂ térmica crecida en una oblea de Si (100) tipo n con una resistividad de 1 – 4 $\Omega \cdot \text{cm}$. A diferencia de los dispositivos presentados en el Cap. 2 (Sec. 2.2) y en el Cap. 3 (Sec. 3.3), estos fueron fabricados en el *Tyndall National Institute*, de acuerdo al siguiente proceso de fabricación [81], [93], [94]

- i. Crecimiento de una capa de 200 nm SiO₂ sobre el sustrato nSi (100) utilizando procesos térmicos.
- ii. Depósito de 200 nm de Pt utilizando la técnica de evaporación por haz de electrones.
- iii. Crecimiento de una capa de HfO₂ con 30 nm de espesor mediante ALD utilizando un Cambridge NanoTech Fiji. Los precursores eran TEMAHf y H₂O.
- iv. Proceso de *lift off* para depositar 200 nm de Pt sobre el HfO₂ y definir la geometría y área del electrodo superior.

- v. Grabado seco del HfO_2 para liberar la capa de Pt inferior. Utilizando una resina se protege tanto el Pt superior como las regiones de la capa de HfO_2 cercanas al electrodo superior.

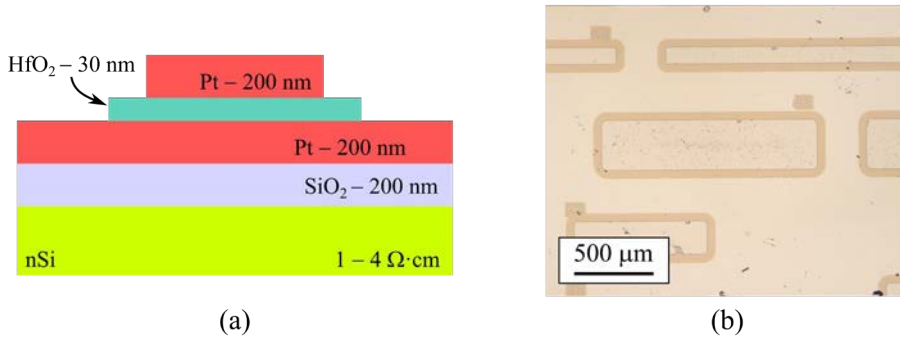


Fig. 4.14: (a) Representación esquemática de una sección transversal de los dispositivos Pt/ HfO_2 /Pt. (b) Imagen óptica de una región de la oblea en donde se observan dispositivos con diferente área.

En la **Fig. 4.14a** se muestra una representación esquemática de estos dispositivos y, como puede observarse, el área activa del dispositivo está definida por el electrodo superior de Pt. En la **Fig. 4.14b** se muestra una imagen óptica superior de los dispositivos en la que se pueden observar dispositivos con diferentes geometrías. Durante el proceso de fabricación se definen electrodos superiores con diferente geometría (cuadrada, rectangular y circular) y área ($9.85 \cdot 10^3 - 1 \cdot 10^6 \mu\text{m}^2$). En lo que respecta a esta tesis, se han estudiado dispositivos con todas las geometrías posibles y con áreas mayores a $4 \cdot 10^4 \mu\text{m}^2$.

4.3. Proceso experimental

4.3.1. Generación de los eventos de ruptura

La caracterización eléctrica de los dispositivos fue realizada en el *Tyndall National Institute*, aplicando un estrés al electrodo superior de Pt mientras que el inferior estaba fijo a tierra. Inicialmente se realizaron varias pruebas utilizando tanto CVS como RVS para encontrar las mejores condiciones para la generación de múltiples eventos de ruptura. La principal diferencia entre los dos modos es la velocidad de degradación que se observa en el electrodo superior. Mientras que para los CVS la generación de los eventos es más lenta y progresiva (**Fig. 4.15a**), para los RVS es mucho más agresiva y repentina (**Fig. 4.15b**). Al final, los dispositivos fueron estresados o utilizando un CVS de -9 V durante 70 s o aplicando un RVS desde 0 V hasta -12 V. Utilizando una cámara óptica, incorporada en la propia mesa de puntas, se registró todo el proceso de degradación de los dispositivos debido al estrés eléctrico aplicado

(Fig. 4.15). Para ambos tipos de estrés, CVS y RVS, se pudo observar que la degradación alcanzaba un estado de saturación, es decir, que se dejaban de generar eventos.

Posteriormente al estrés, el estado del electrodo superior fue caracterizado utilizando un microscopio óptico, permitiendo obtener imágenes de mayor resolución que las proporcionadas por la cámara óptica. Adicionalmente, los eventos de ruptura fueron caracterizados utilizando un SEM y un AFM. Tal y como se discute en [TDMR 2019], las marcas dejadas por los eventos de ruptura (Fig. 4.15) no son circulares, sino que presentan una gran variedad de formas –solo los eventos más pequeños parecen mostrar formas más circulares–. Además, como era de esperar, los puntos de ruptura tienen estructuras similares a un cráter, indicando la generación de una explosión, y su topografía indica la desaparición de buena parte de la capa de Pt situada encima del HfO_2 . Es decir, sugiere que el evento de ruptura es altamente energético.

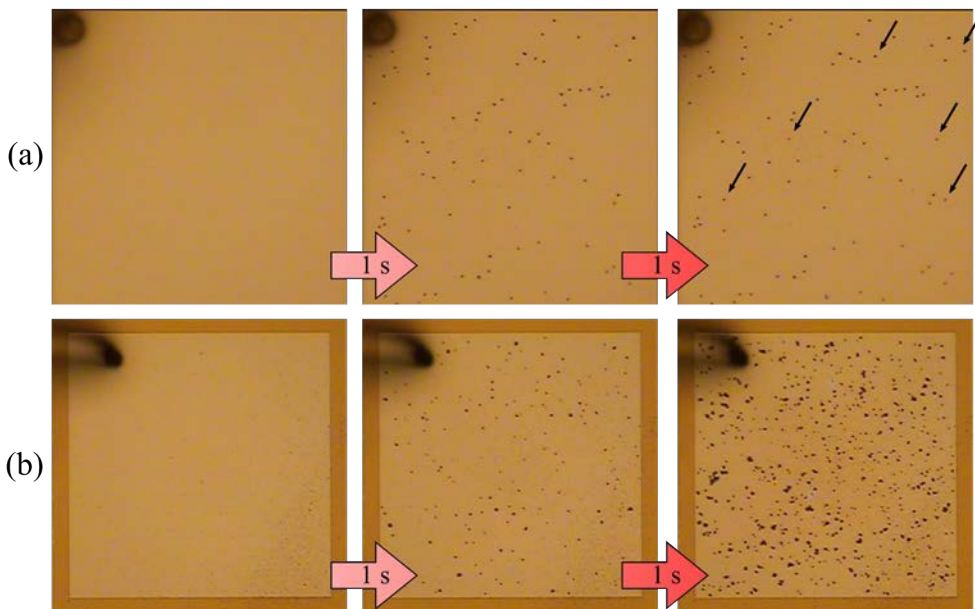


Fig. 4.15: Degradación del electrodo superior de Pt al utilizar (a) CVS y (b) RVS. La primera imagen para ambos estreses corresponde al estado del dispositivo antes de que empiece a mostrar efectos de degradación. Los nuevos eventos generados para (a) CVS se encuentran indicados.

Gracias al proyecto ASCENT (EU) se pudo acceder a los laboratorios del CEA–Leti, en donde se realizó la degradación de más dispositivos, utilizando condiciones eléctricas similares, pero con una diferencia importante; en lugar de grabar la evolución de los dispositivos con una cámara óptica, se utilizó una cámara térmica para el espectro infrarrojo. Es importante mencionar que, debido a que cada

material tiene una emisión térmica característica, es necesario calibrar la cámara para poder conocer con precisión cual es la temperatura del dispositivo. Esto supone un reto para medir correctamente la temperatura de los puntos de ruptura, ya que sería necesario realizar una nueva calibración cada vez que se generara un evento de ruptura. Dado el tiempo que supondría caracterizar un único dispositivo siguiendo este procedimiento (una calibración supone ≈ 2 h), se optó por realizar una única calibración de un dispositivo sin estresar de área elevada. Utilizando esta calibración, se registra la degradación de áreas más pequeñas. Si bien esto supone que las temperaturas medidas no serán correctas –los puntos de ruptura tienen una emisión térmica diferente al Pt–, sí que permite detectar regiones cuya temperatura es muy elevada. En la Fig. 4.16 se muestra una sucesión de tres fotogramas obtenidos con la cámara térmica utilizando la calibración mencionada. Nótese que, debido a la calibración, la temperatura del punto de ruptura parece ser mayor que la del electrodo. Por otro lado, es posible detectar la explosión que se produce durante la ruptura, la cual aparece como un incremento abrupto de temperatura que dura un único fotograma. Es importante remarcar que, pese a ser resultados más cualitativos que cuantitativos, estas mediciones térmicas nos permiten reconocer la conducción de CF (ver Sec. 4.6, Fig. 4.38).

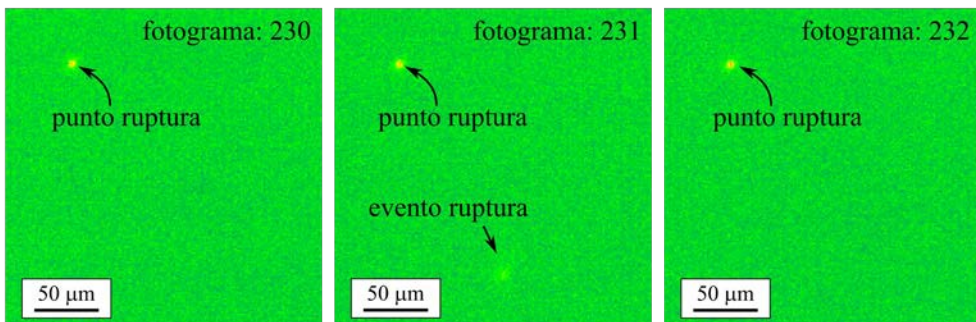


Fig. 4.16: Imágenes térmicas ampliadas obtenidas de un dispositivo circular de radio 225 μm.

4.3.2. Tratamiento de las imágenes y análisis de los datos

Para detectar correcta y sistemáticamente tanto la localización como el tamaño de los eventos de ruptura, se desarrolló un programa en MATLAB aprovechando las herramientas de las que dispone para análisis y tratamiento de imágenes. Evidentemente, es importante remarcar, que la resolución de la imagen afecta directamente a la precisión de la detección [TDMR 2019]. El programa diseñado tiene la siguiente función:

- i. **Transformar la imagen de escala RGB a escala binaria (Fig. 4.17)** → Primero convertimos la imagen a escala de grises y luego aplicamos un filtro

que determina, en base a un valor umbral, que es blanco y que es negro. En blanco quedan los puntos que queremos detectar.

- ii. **Detectar las regiones blancas de la imagen binaria** → Obtenemos la localización y el área de los puntos. Los datos están en píxeles, por lo que en base a la escala de la imagen se obtiene una aproximación de sus valores reales.

El primer paso es el más delicado de la detección, ya que hay seleccionar un valor umbral correcto para asegura una buena detección. Un valor pequeño implica una mayor restricción, evitando la detección de algunos puntos y pudiendo reducir el área de algunos de los detectados (**Fig. 4.17b**). En contraposición, un valor elevado implica una mayor sensibilidad, pudiendo suponer la detección de puntos en regiones donde no hay (**Fig. 4.17c**). Al final se tiene que realizar a un compromiso entre la sensibilidad y la precisión de la detección. Más detalles sobre esta detección en [**TDMR 2019**].

El análisis de las distribuciones experimentales así como la correlación entre los puntos y sus atributos, fue realizado utilizando el paquete *spatstat* [95] para el lenguaje de programación R, el cual incluye una gran multitud de herramientas y técnicas y métodos de estadística espacial [85], [89]. A su vez, se utilizó el programa de análisis espacial PASSAGE2 [88] para aplicar el método de wavelets angulares a los patrones experimentales.

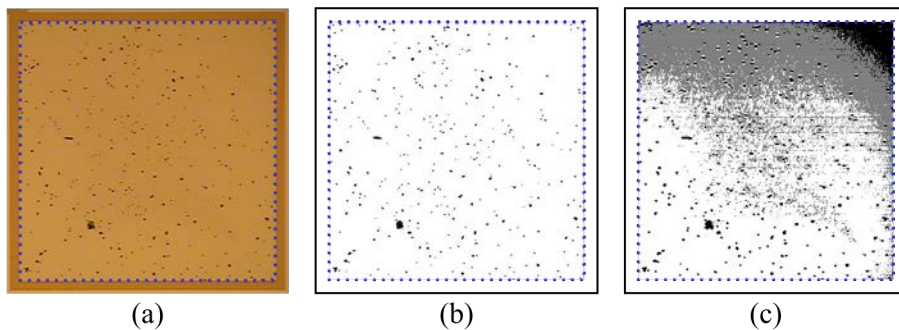


Fig. 4.17: (a) Imagen óptica de un patrón de puntos de ruptura. Imagen en blanco y negro de la imagen mostrada en (a) después de utilizar un valor umbral de (b) 0.4 y de (c) 0.55. Para facilitar la visualización, los colores están invertidos después del filtro: los puntos están en negro y el fondo en blanco.

4.4. Caracterización espacial de eventos de ruptura múltiple

4.4.1. Estudio exploratorio de la estadística espacial

Antes de considerar el tamaño de los eventos de ruptura o de analizar efectos externos que puedan afectar a la distribución de los puntos, la primera pregunta que puede surgir es si la geometría del electrodo superior puede llegar a afectar a localización de

los puntos. Con este fin, a continuación se realiza el análisis de la distribución espacial de los eventos de ruptura generados en un dispositivo cuadrado (**Fig. 4.18a**), rectangular (**Fig. 4.18b**) y circular (**Fig. 4.18c**).

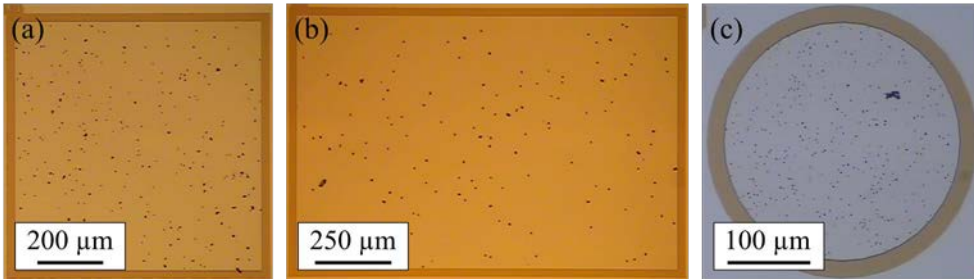


Fig. 4.18: Imagen óptica del patrón de puntos de ruptura generado en un dispositivo (a) cuadrado de área $750 \mu\text{m} \times 750 \mu\text{m}$, (b) rectangular de área $1250 \mu\text{m} \times 800 \mu\text{m}$ y (c) circular de radio $169 \mu\text{m}$.

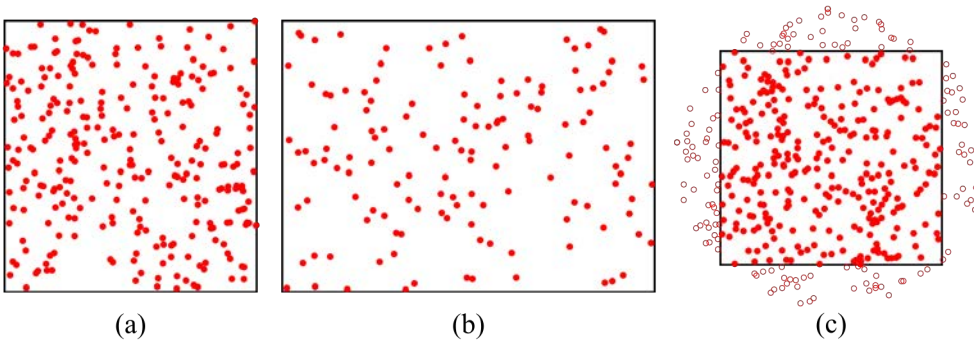


Fig. 4.19: (a-c) Localización de los puntos de ruptura mostrados en las **Fig. 4.18a-c**, respectivamente. Las ventanas de observación son de (a) $750 \mu\text{m} \times 750 \mu\text{m}$, (b) $1250 \mu\text{m} \times 800 \mu\text{m}$ y (c) $239 \mu\text{m} \times 239 \mu\text{m}$. En total hay (a) 275, (b) 138 y (c) 423 puntos de ruptura. En (c) hay 137 puntos situados fuera de la ventana (círculo vacío) y 286 dentro (círculo rojo).

Siguiendo una coherencia en los subíndices de las imágenes, en las **Fig. 4.19a-c** se muestra la localización de los puntos detectados, así como la ventana de análisis definida para evaluar cada dispositivo. La ventana es de $750 \mu\text{m} \times 750 \mu\text{m}$ para el dispositivo cuadrado (**Fig. 4.19a**), de $1250 \mu\text{m} \times 800 \mu\text{m}$ para el rectangular (**Fig. 4.19b**) y de $239 \mu\text{m} \times 239 \mu\text{m}$ para el circular (**Fig. 4.19c**). Nótese que el centro y el área de la ventana coincide con los del dispositivo excepto para el circular (**Fig. 4.19c**), donde se define una ventana cuadrada cuya diagonal coincide con el diámetro del dispositivo. Esto se realiza para que el patrón evaluado con el método de wavelets angulares coincida con el analizado con el resto de estimadores sin perder gran parte de la información estadística del patrón original [JAP 2017]. Considerando que se realiza un muestreo negativo, el dispositivo cuadrado (**Fig. 4.19a**) tiene una intensidad de $\lambda = 4.89 \cdot 10^{-4}$ puntos/ μm^2 (275 puntos), el rectangular (**Fig. 4.19b**) de $\lambda = 1.38 \cdot 10^{-4}$

puntos/ μm^2 (138 puntos), y el circular (Fig. 4.19c) de $\lambda = 5.01 \cdot 10^{-3}$ puntos/ μm^2 (286 puntos).

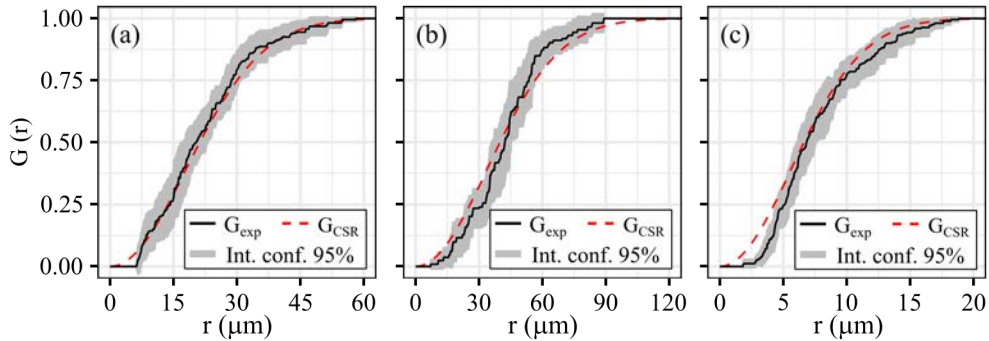


Fig. 4.20: Función de distancias entre eventos vecinos G para el patrón de puntos mostrado (a) en la Fig. 4.19a, (b) en la Fig. 4.19b y (c) en la Fig. 4.19c. A su vez, se muestra el resultado esperado para un proceso CSR.

Respetando los subíndices de las imágenes, en las Fig. 4.20a-c se muestra la función G para los tres patrones previamente mencionados (Fig. 4.19a-c). Todos los patrones, incluido el generado en el dispositivo rectangular (Fig. 4.20b), muestran un valor nulo de G a distancias cortas. Específicamente, en el área cuadrada (Fig. 4.20a), $G(r) = 0$ para $r < 6 \mu\text{m}$; en el rectangular (Fig. 4.20b), $G(r) = 0$ para $r < 7 \mu\text{m}$; y en el circular (Fig. 4.20c), $G(r) = 0$ para $r < 1 \mu\text{m}$. Nótese que las distancias son menores cuanto menor es el área del dispositivo. Además, en el circular, se puede apreciar una ligera inhibición para los eventos situados a $r < 5 \mu\text{m}$. Sin embargo, dado que la desviación no es muy elevada, es difícil justificar que el patrón no sigue el modelo CSR. Por otro lado, los valores de G para el área cuadrada y la rectangular coinciden perfectamente con un proceso CSR.

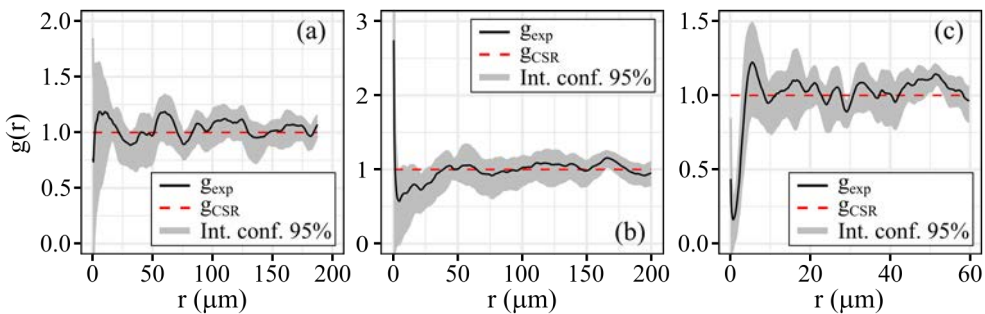


Fig. 4.21: Función de correlación entre pares g para para el patrón de puntos mostrado (a) en la Fig. 4.19a, (b) en la Fig. 4.19b y (c) en la Fig. 4.19c. A su vez, se muestra el resultado esperado para un proceso CSR.

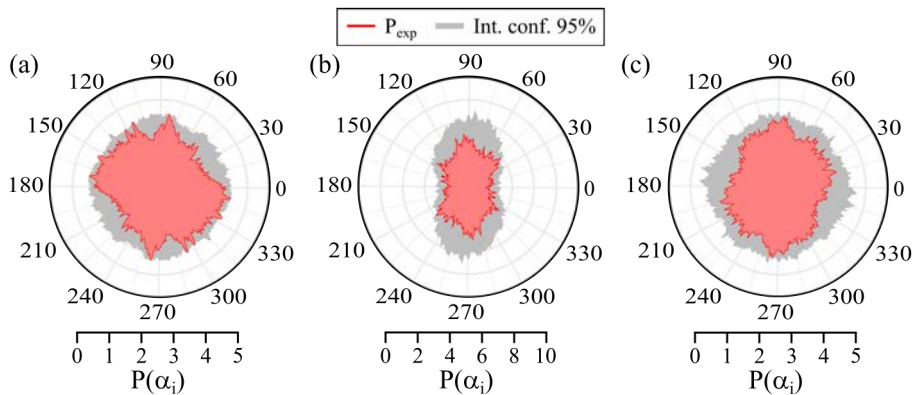


Fig. 4.22: Método de wavelets angulares P utilizando una ventana focal del 20% y la wavelet FTH para el patrón de puntos mostrado (a) en la Fig. 4.19a, (b) en la Fig. 4.19b y (c) en la Fig. 4.19c. El intervalo de confianza al 95 % se obtiene después de realizar 50 simulaciones de MC de los datos experimentales.

Como se ha estado insistiendo, es necesario evaluar diferentes parámetros antes de poder extraer unas conclusiones sobre la estadística de una distribución. Por ello, en las Fig. 4.21a-c se muestra la función g para los tres patrones (Fig. 4.19a-c). Como se puede observar, ninguna de las tres áreas estudiadas rechaza la hipótesis nula, dado que $g_{CSR} = 1$ está incluido dentro de los intervalos de confianza. En sintonía con estos resultados, el método de las wavelets angulares (Fig. 4.22a-c) indica que los tres patrones estudiados (Fig. 4.19a-c) son isotrópicos, es decir, que no poseen ningún tipo de anisotropía. Como puede observarse, ninguna de las P_{exp} supera el intervalo de confianza del modelo CSR. Por tanto, en base a los resultados obtenidos con la función G , la función g y el método de wavelets angulares, se puede concluir que las distribuciones siguen un proceso CSR y que, como era de esperar, la geometría del dispositivo no parece afectar a la generación de los eventos de ruptura.

4.4.2. Simulación de la distribución espacial de eventos de ruptura

Con el fin de reproducir la localización de los eventos de ruptura en estos dispositivos, se está desarrollando, en la actualidad, un programa que combina un modelo circuital de los dispositivos con el *E-model*. Es importante remarcar que este programa aún está en fase exploratoria y que, por tanto, aún no ha sido publicado.

4.4.2.1. Modelo de los dispositivos

Considerando el dispositivo como un conjunto discreto de resistencias interconectadas (Fig. 4.23a), es posible obtener, de manera cualitativa, la distribución de la tensión aplicada tanto en superficie como en profundidad del dispositivo. A su vez, podemos simular el impacto de la generación de los CF en la distribución de

4.4. CARACTERIZACIÓN ESPACIAL DE EVENTOS DE RUPTURA MÚLTIPLE

tensión superficial, modificando el valor de las resistencias que representan el dieléctrico. Considerando que el circuito que representa al dispositivo está formado por un total de N nodos, la tensión aplicada se define fijando el valor la tensión en un conjunto de nodos. Con tal de respetar el proceso de caracterización, un nodo del electrodo inferior se fija a 0 V mientras que otro del superior se fija al valor aplicado. Utilizando la segunda ley de Kirchhoff en el resto de los nodos

$$(4G_M + G_D)V_3 - (G_M V_1 + G_M V_2 + G_M V_4 + G_M V_5 + G_D V_9) = 0 \quad (4.14)$$

en donde G_M y G_D son, respectivamente, la conductancia del electrodo metálico y del dieléctrico (Fig. 4.23b) ($G_M \gg G_D$). En el caso de que hubiese un CF, utilizaríamos su valor de conductancia (G_{CF}) en lugar de G_D ($G_M > G_{CF} \gg G_D$). Al final, lo que obtenemos es un conjunto de $N-2$ ecuaciones e incógnitas, lo que nos permite reescribir el problema como

$$\mathbf{C} \cdot \mathbf{V} = \mathbf{Ind} \quad (4.15)$$

en donde \mathbf{C} es una matriz cuadrada de dimensión $N-2$ que contiene los coeficientes del problema; \mathbf{V} contiene las incógnitas del problema, es decir, las tensiones que queremos encontrar; e \mathbf{Ind} es la matriz de términos independientes. Resolviendo este sistema, podemos hallar el valor de tensión en cada uno de los nodos.

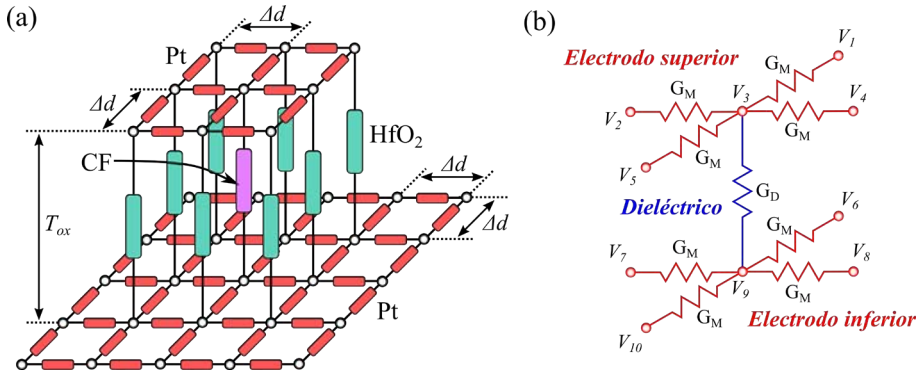


Fig. 4.23: (a) Circuito equivalente de las estructuras MIM estudiadas. (b) Visualización en detalle de las conexiones que existen entre un nodo del electrodo superior y del inferior.

El número de nodos definidos en el sistema y, en consecuencia, las dimensiones de las resistencias que los conectan, está determinado por Δd el cual es la distancia entre dos nodos adyacentes en el plano horizontal (Fig. 4.23a). Teniendo en cuenta este valor, la conductancia de las resistencias de los electrodos es

$$G_M = \sigma_{Pt} \cdot \frac{\Delta d \cdot T_{elec}}{\Delta d} = \sigma_{Pt} \cdot T_{elec} \quad (4.16)$$

en donde σ_{Pt} es la conductividad del Pt ($9.5 \text{ S} \cdot \mu\text{m}^{-1}$) y T_{elec} es el espesor de los electrodos. De forma similar, la conductividad de las resistencias que definen el dieléctrico es

$$G_D = \sigma_{HfO_2} \cdot \frac{\Delta d^2}{T_{ox}} \quad (4.17)$$

en donde σ_{HfO_2} es la conductividad del HfO₂ ($1.1 \cdot 10^{-8} \text{ S} \cdot \mu\text{m}^{-1}$). Nótese que para calcular G_{CF} también se utiliza la (4.17), modificando σ_{HfO_2} por σ_{CF} . En este caso, se ha considerado $\sigma_{CF} = 1 \cdot 10^{-5} \text{ S} \cdot \mu\text{m}^{-1}$.

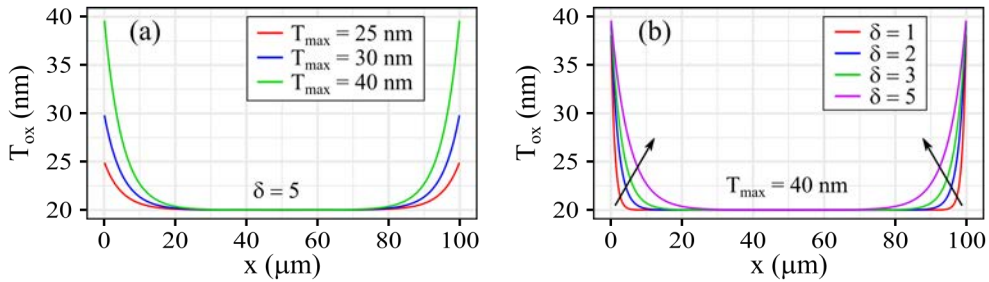


Fig. 4.24: Representación del perfil definido por $T_{ox}(x, 50 \mu\text{m}; 20 \text{ nm}, T_{max}, \delta)$ para un dispositivo de $100 \times 100 \mu\text{m}^2$. (a) Perfiles para diferentes T_{max} . (b) Perfiles para diferentes δ .

Adicionalmente, dado que es posible, debido al proceso de fabricación, que T_{ox} no sea constante; se ha definido una función que permite definir un dieléctrico cuyo espesor sea mayor hacia los bordes que en el centro del dispositivo ($(T_{ox}(x,y; T_{min}, T_{max}, \delta))$). En esta función, T_{min} es el espesor en el centro del dispositivo mientras que T_{max} es el espesor en los bordes, y δ es el parámetro que controla la transición entre T_{min} y T_{max} (Fig. 4.24).

4.4.2.2. Proceso de simulación

El procedimiento que sigue el programa para realizar la simulación de los eventos de ruptura se encuentra detallado en la Fig. 4.25. Brevemente, primero se definen las características del dispositivo y se calcula la distribución inicial de la tensión. Considerando el *E-model* ((1.12)), en cada nodo del electrodo superior se calcula t_{BD}

$$t_{BD} = a \cdot \exp\left(-b \cdot \frac{\Delta V}{T_{ox}}\right) \quad (4.18)$$

en donde ΔV es la caída de tensión en la resistencia del dieléctrico/CF, y a y b son parámetros de ajuste. En este caso, se ha considerado $a = b = 1$. Una vez calculado el valor de t_{BD} para todos los nodos superiores, se determina la localización del evento de ruptura. Para ello, se considera que la probabilidad de generación es inversamente

4.4. CARACTERIZACIÓN ESPACIAL DE EVENTOS DE RUPTURA MÚLTIPLE

proporcional a t_{BD} , de tal manera que cuanto menor sea t_{BD} en un nodo, mayor es la probabilidad de que se genere un evento en él. Una vez se determina en que nodos se produce el evento, se modifica la conductividad del dieléctrico por la del CF y se calcula los nuevos valores de tensión para volver a generar un nuevo evento (Fig. 4.25). Es importante destacar que, una vez se ha generado un evento, el nodo queda descartado como opción cuando se determina la localización de un nuevo CF.

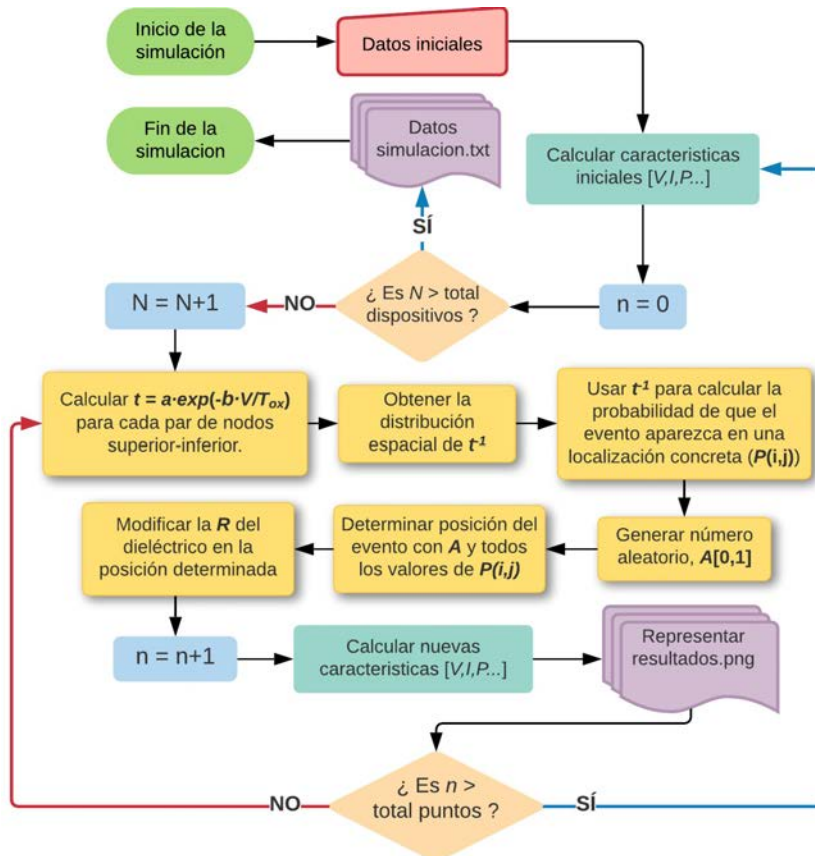


Fig. 4.25: Diagrama de flujo de la simulación.

4.4.2.3. Distribuciones simuladas

En la Fig. 4.26 se muestran los patrones de 100 puntos simulados en dispositivos MIM cuya única diferencia es el espesor de la capa dieléctrica definida. Ambos electrodos son de Pt con $T_{ele} = 200$ nm; y el área activa es de $50 \mu\text{m} \times 50 \mu\text{m}$. En estos patrones, ya se puede observar que los eventos tienden a concentrarse hacia el centro del dispositivo cuando se incrementa T_{ox} en los bordes. Sin embargo, para confirmar estas observaciones, es necesario realizar un análisis de estadística espacial que corroboren la ocurrencia de esta acumulación.

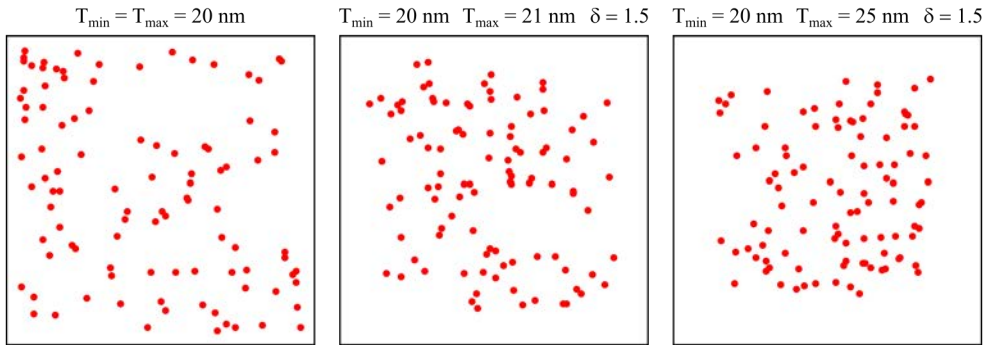


Fig. 4.26: Patrones de 100 eventos de ruptura simulados un área de $50 \mu\text{m} \times 50 \mu\text{m}$ para diferentes espesores de HfO_2 . En los tres patrones, la ventana de observación coincide con el área activa. El espesor de la capa está determinado por $T_{ox}(x,y; T_{min}, T_{max}, \delta)$.

En la **Fig. 4.27** se muestra el valor de la función g para diferentes valores de T_{max} (**Fig. 4.27a**) y δ (**Fig. 4.27b**). Mencionar que, los patrones mostrados en la **Fig. 4.26** están evaluados en la **Fig. 4.27a**. Analizando en primer lugar el impacto de T_{max} (**Fig. 4.27a**), la acumulación previamente observada (**Fig. 4.26**) parece ser no relevante. Si bien todas las g_{exp} , a excepción del caso homogéneo ($T_{max} = 20 \text{ nm}$), muestran, en mayor o menor medida, valores ligeramente superiores al límite teórico, ninguno de los casos mostrados ($\delta = 1.5$) indica una clara acumulación de puntos que rechace rotundamente la estadística de Poisson. Nótese que, en acuerdo con lo indicado anteriormente, parece que a mayor T_{max} , mayores son los valores de g . Por otro lado, evaluando el impacto de δ (**Fig. 4.27b**), sí que se pueden observar casos en los que g rechaza tajantemente la hipótesis nula. Muy probablemente esto se deba a que este parámetro es el que, en mayor medida, determina el tamaño de la región del dieléctrico con $T_{ox} = T_{min}$ —cuanto mayor es δ , menor es la región homogénea—. Esto explicaría porque es más sencillo observar la acumulación al incrementar δ que cuando se aumenta T_{max} . En definitiva, las conclusiones que podemos extraer de la **Fig. 4.27** es que existe una acumulación de puntos cuando el espesor del dieléctrico no es homogéneo, lo que es evidente cuando la región del dieléctrico de espesor constante es lo suficientemente pequeña.

Finalmente, es importante destacar que estos resultados solo tienen carácter cualitativo y que están basados en una hipótesis de trabajo. Resultados preliminares parecen indicar que existe una acumulación de los puntos hacia el centro del dispositivo (Sec. 4.5.1) [**TDMR 2019**]. Por otro lado, en la caracterización AFM de los electrodos superiores no se llegó a apreciar una diferencia notable entre los bordes y el centro del dispositivo, por lo que no se puede descartar que la acumulación este provocada por otro factor que no sea el espesor del óxido.

4.5. CARACTERIZACIÓN DEL ÁREA Y LA VELOCIDAD DE GENERACIÓN

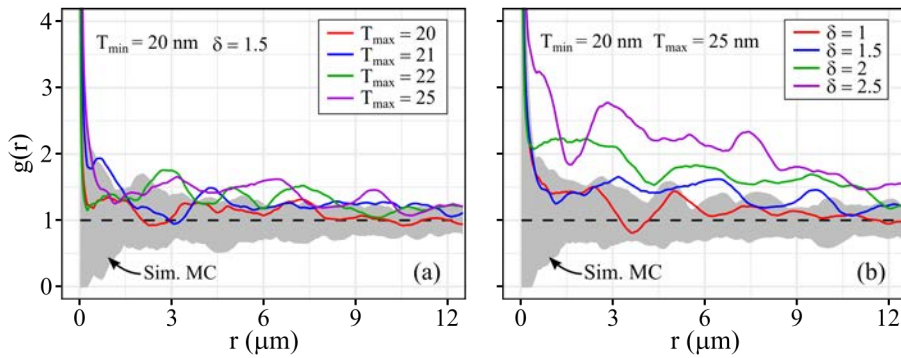


Fig. 4.27: Función g para patrones de 100 eventos de ruptura simulados en dieléctricos con diferente (a) de T_{max} y (b) δ . La ventana de observación en todos los casos es de $50 \mu\text{m} \times 50 \mu\text{m}$ y los límites teóricos se obtienen después de 100 simulaciones de MC.

4.5. Caracterización del área y la velocidad de generación

4.5.1. Correlación entre la localización y el daño producido

El uso de las técnicas de caracterización espacial no solo permite evaluar la localización de los eventos de ruptura, sino que también permiten hacer alguna interferencia acerca de las relaciones que pueden existir entre los puntos y sus características. Teniendo en cuenta que de las imágenes ópticas es posible obtener una aproximación del daño inducido por la ruptura dieléctrica (área del punto, A_{BD}), la pregunta inmediata que surge es si existe una correlación entre este daño inducido y la localización de los eventos en los dispositivos estudiados.

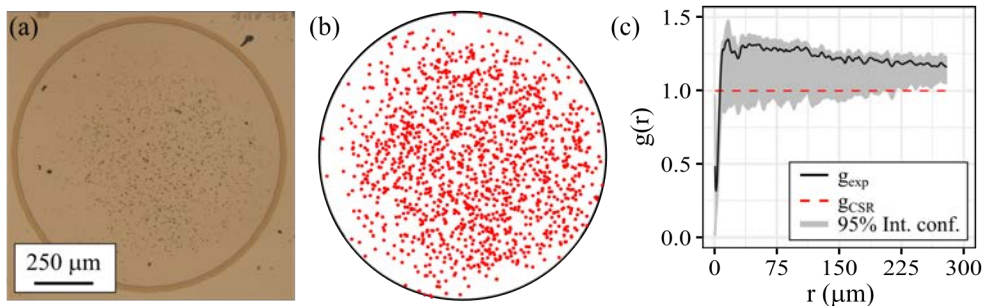


Fig. 4.28: Imagen óptica del patrón de puntos de ruptura generado en un dispositivo circular de radio $565 \mu\text{m}$. (b) Localización de los puntos de ruptura definidos en una ventana de observación circular de radio $560 \mu\text{m}$. (c) función de correlación entre pares g para el patrón experimental y un proceso CSR.

En la **Fig. 4.28a** se muestra la imagen de un dispositivo circular con radio $565 \mu\text{m}$ que fue captada utilizando un microscopio óptico de alta resolución. En este caso, se define una ventana de observación circular ligeramente inferior al área activa del

dispositivo ($r = 560 \mu\text{m}$) y se realiza un muestreo negativo considerando la dimensión de los puntos (**Fig. 4.28b**). En total hay 1389 puntos de ruptura en la ventana de observación, lo que implica que el patrón tiene una intensidad $\lambda = 1.41 \cdot 10^{-3}$ puntos/ μm^2 . Además, considerando la escala y resolución de imagen, la precisión de la detección es de $0.6 \mu\text{m}$ ($1 \text{ px}^2 = 0.36 \mu\text{m}^2$). En la **Fig. 4.28c** se muestra la función g para el patrón mostrado en la **Fig. 4.28b** en donde parece ser que la localización de los eventos es coherente con un proceso CSR, dado que el intervalo de confianza incluye el valor unitario. Sin embargo, merece la pena destacar el elevado g_{exp} que se observa, lo cual indica una clara acumulación de puntos. Este elevado valor se debe a que existe una concentración de puntos en el centro del dispositivo, claramente visible en la imagen óptica (**Fig. 4.28a**). Por tanto, los resultados exponen tanto la existencia de esta acumulación como que la distribución de los puntos en el centro del dispositivo es completamente aleatoria. A diferencia de los casos expuestos anteriormente (Sec. 4.4.1), al trabajar con un dispositivo con una gran cantidad de puntos es posible observar los efectos de borde que dificultan la generación de eventos de ruptura en las regiones próximas al perímetro del área activa del dispositivo.

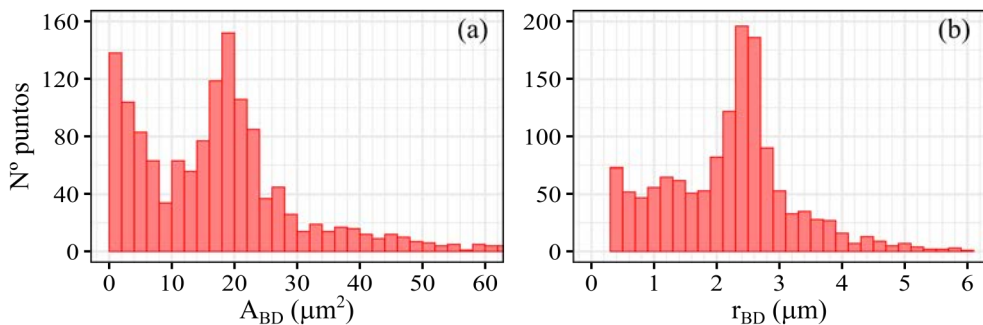


Fig. 4.29: Histogramas del tamaño de los puntos de ruptura según su el valor de su (a) área o de su (b) radio. Los datos corresponden al patrón mostrado en la **Fig. 4.28b**.

Una vez se tiene una idea general de la distribución de los puntos, se puede analizar el daño inducido por el proceso de ruptura dieléctrica. Para simplificar el estudio, se considera que A_{BD} es circular, con radio = r_{BD} . Mientras que en la **Fig. 4.29a** se muestra el histograma para A_{BD} , en la **Fig. 4.29b** se representa la distribución de r_{BD} . Analizando A_{BD} (**Fig. 4.29a**) se puede observar que hay una gran acumulación de puntos pequeños que va disminuyendo hasta llegar a $10 \mu\text{m}^2$ en donde se empieza observar una nueva acumulación que va de $10 \mu\text{m}^2 - 26 \mu\text{m}^2$ con un pico bien definido, localizado a $19 \mu\text{m}^2$. Al considerar el valor de r_{BD} (**Fig. 4.29b**), se puede observar que el primer pico se distribuye más homogéneamente mientras que el segundo se vuelve más pronunciado. En este caso, la acumulación se observa para valores de r_{BD} de $1.5 \mu\text{m} - 3.3 \mu\text{m}$ con un pico centrado en $2.4 \mu\text{m}$.

4.5. CARACTERIZACIÓN DEL ÁREA Y LA VELOCIDAD DE GENERACIÓN

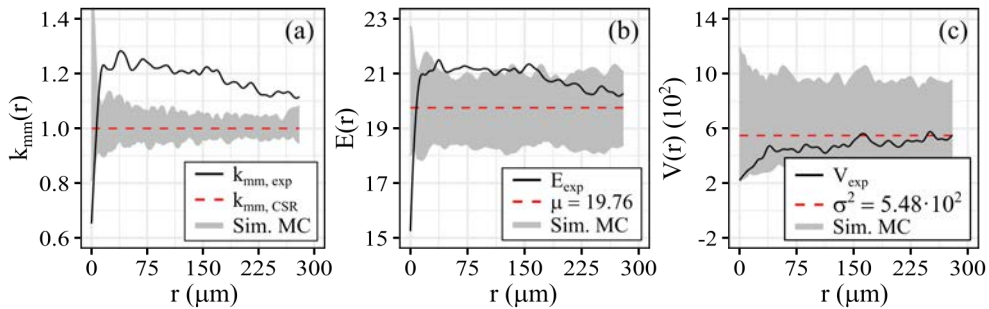


Fig. 4.30: Representación de la (a) función K_{mm} , (b) la función E y (c) la función V considerando el área de los puntos de ruptura (Fig. 4.29a). Los límites del valor teórico se obtienen después de generar 50 distribuciones aleatorias con los datos experimentales utilizando simulaciones de MC.

En la Fig. 4.30 y la Fig. 4.31 se muestra el análisis de la correlación entre la localización de los puntos con el daño inducido por la ruptura dieléctrica considerando, respectivamente, A_{BD} y r_{BD} . Empezando por A_{BD} (Fig. 4.30), la función K_{mm} (Fig. 4.30a) muestra que existe una clara correlación entre la localización de los puntos y su área. Específicamente, se indica una correlación positiva, dado que el valor experimental está por encima de los límites encontrados con las simulaciones. Esto quiere decir que los puntos con A_{BD} elevada están más agrupados de lo esperado para un proceso CSR. Por otro lado, tanto E (Fig. 4.30b) como V (Fig. 4.30c) no son capaces de mostrar la existencia de una correlación, ya que sus valores están dentro de los límites de confianza. Aun así, hay que destacar que E tiene valores un poco por encima de la banda para algunas distancias, pero no son lo suficientemente elevados como para justificar una correlación. Curiosamente, los efectos de correlación se acentúan más cuando consideramos r_{BD} (Fig. 4.31). Como cabía esperar, la función K_{mm} (Fig. 4.31a) muestra que existe una correlación positiva entre el valor de r_{BD} y la localización de los eventos de ruptura. En este caso, la función E (Fig. 4.31b) sí que es capaz de mostrar una correlación entre el daño de la ruptura y su posición ya que el valor experimental está muy por encima de los límites obtenidos mediante simulaciones de MC. Considerando los resultados obtenidos de la función V (Fig. 4.31c), la cual no muestra desviaciones respecto a un proceso CSR, la función E está indicando que dado un punto cual quiera de la distribución este suele estar rodeado de puntos de tamaño muy por encima de la media ($\langle r_{BD} \rangle = 2.24 \mu\text{m}$), lo cual no entra en contradicción con los resultados obtenidos con la función K_{mm} (Fig. 4.30a y Fig. 4.31a). Por tanto, no solo se muestra la existencia de una correlación entre el daño y la localización –muy probablemente hacia el centro del dispositivo– sino que además se demuestra la importancia de considerar el valor de r_{BD} en lugar del de A_{BD} para evaluar esta correlación. Tal y como se muestra en [TDMR 2019], y como ocurre con

los efectos de borde, esta correlación se empieza a observar en dispositivos muy degradados y de área grande.

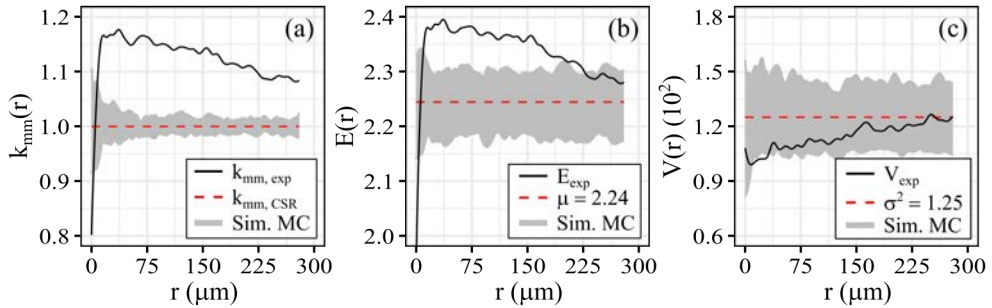


Fig. 4.31: Representación de la (a) función K_{mm} , (b) la función E y (c) la función V considerando el radio de los puntos de ruptura (Fig. 4.29b). Los límites del valor teórico se obtienen después de generar 50 distribuciones aleatorias con los datos experimentales utilizando simulaciones de MC.

4.5.2. Concentración del daño inducido por las rupturas dieléctricas

Con el fin de seguir evaluando esta correlación entre las dimensiones de los puntos y su localización, se separa el patrón experimental en dos según A_{BD} . Considerando los dos grupos observados en la Fig. 4.29, se establece $10 \mu\text{m}^2$ como criterio para diferenciar entre puntos pequeños ($A_{BD} = [0, 10) \mu\text{m}^2$) y grandes ($A_{BD} = [10, \infty) \mu\text{m}^2$). Manteniendo la ventana de observación, en la Fig. 4.32a se muestra la localización de los puntos con áreas pequeñas (422 puntos) mientras que en la Fig. 4.32d la de los puntos grandes (967 puntos). Ya en esta representación parece que los puntos grandes están concentrados en el centro del dispositivo mientras que los pequeños parecen más distribuidos. Esto se observa mucho mejor en el gráfico de la intensidad (Fig. 4.32b,e). Claramente los pequeños están situados más hacia los bordes del dispositivo (Fig. 4.32b) mientras que los grandes se acumulan hacia el centro de la ventana (Fig. 4.32e). Dado que la interpretación de esta representación puede ser muy subjetiva, en las Fig. 4.32c,f se muestran las funciones g para cada patrón. Tal y como se puede observar, ambos análisis muestran indicios de que existe una acumulación de puntos, siendo mucho mayor para los puntos grandes (Fig. 4.32f) que para los pequeños (Fig. 4.32c). De hecho, mientras que los pequeños son coherentes con una distribución CSR, la distribución de los grandes prácticamente no puede considerarse que lo sea dado que el intervalo de confianza apenas incorpora el valor unitario. Muy probablemente esto indique que los puntos grandes se concentran en una región y que, dentro de esta, siguen una distribución de Poisson. Además, es importante recordar que la ventana de observación es ligeramente inferior al área real del dispositivo, por lo que los efectos de acumulación en realidad son algo más elevados.

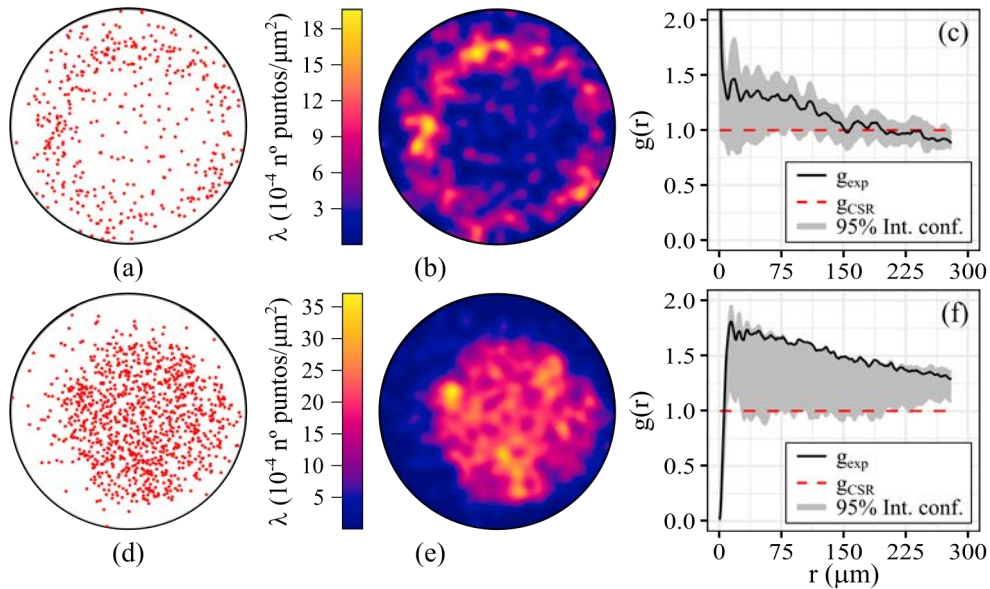


Fig. 4.32: Separación del patrón de la Fig. 4.28b en dos patrones en función de ABD : (a-c) $0 \mu\text{m}^2 - 10 \mu\text{m}^2$ y (d-f) $10 \mu\text{m}^2 - \infty \mu\text{m}^2$. (a, d) Localización de los puntos definidos en una ventana de observación circular de radio $560 \mu\text{m}$. (b, d) Gráfica de intensidad de la distribución con una desviación de 25 para el ajuste. (c, f) Función de correlación entre pares g para el patrón experimental y un proceso CSR.

Finalmente, con la idea de empezar a explorar técnicas de análisis utilizando redes neuronales, se analiza el patrón experimental (Fig. 4.28b) utilizando un software gratuito de redes neuronales, *Sharky Neuronal Network*. Básicamente, el programa analiza distribuciones que poseen dos clases de puntos y determina, utilizando la red neuronal, las regiones en donde hay una clara acumulación de un tipo de punto. Para más información sobre las redes neuronales se recomienda leer [96]. Es importante remarcar que este programa solo analiza distribuciones de puntos en donde solo existen de dos clases, ya que todas las estructuras neuronales disponibles tienen dos entradas (coordenadas) y dos salidas (clases). Partiendo de la clasificación previamente realizada, puntos grandes y pequeños, en la Fig. 4.33 se muestra el aprendizaje de dos estructuras diferentes después de 5000 iteraciones. Mientras que la primera tiene una capa oculta de tres neuronas (Fig. 4.33a), la segunda es más compleja (Fig. 4.33b) tal y como se observa en la representación. En ambos casos la estructura detecta una clara acumulación de puntos grandes hacia el centro de la distribución mientras que los pequeños se sitúan a su alrededor, reforzando las conclusiones extraídas anteriormente. Es decir, este método nos está diciendo que la región más dañada es el centro del dispositivo. Dado los buenos resultados obtenidos, un siguiente paso sería aumentar el número de salidas para ver si a media que nos acercamos al centro del dispositivo existe un incremento del tamaño de los puntos.

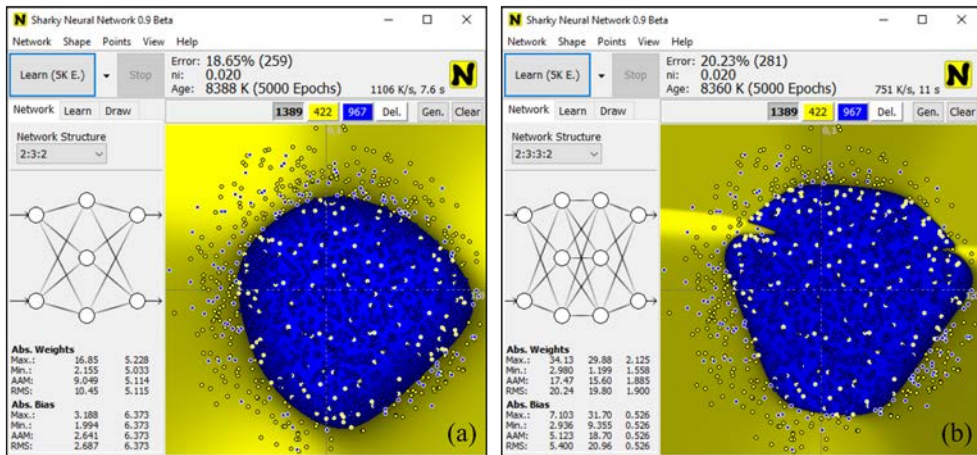


Fig. 4.33: Análisis del patrón de la Fig. 4.28b utilizando un programa de redes neuronales considerando una estructura (a) 2:3:2 y (b) 2:3:3:2. Los puntos son los datos experimentales y el área pintada es el resultado obtenido después de 5000 iteraciones con la red neuronal. El amarillo representa áreas pequeñas ($0 \mu\text{m}^2 - 10 \mu\text{m}^2$) y el azul áreas grandes ($10 \mu\text{m}^2 - \infty \mu\text{m}^2$).

4.5.3. Velocidad de generación de los eventos

Una vez evaluada el área de los puntos de ruptura, procedemos a analizar la degradación que sufren los dispositivos durante un CVS. Como se ha mencionado, al visualizar las grabaciones realizadas, se observa que al aplicar un CVS los puntos van apareciendo poco a poco hasta que se llega a un estado de saturación –en este momento dejan de generarse nuevos eventos de ruptura–. Con el fin de mostrar un análisis más profundo, se utiliza el programa de detección para evaluar la evolución del número total de eventos de ruptura a medida que el dispositivo se ve sometido al estrés.

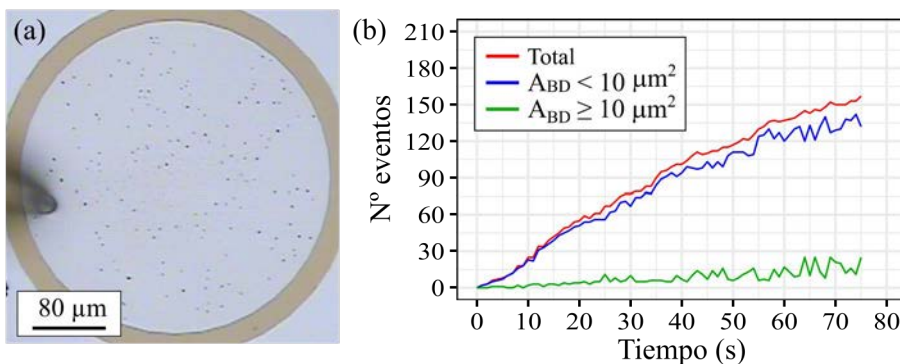


Fig. 4.34: (a) Imagen óptica del patrón de puntos de ruptura generado en un dispositivo circular de radio $169 \mu\text{m}$ después de estar sometido a un CVS durante 75 s. (b) Evolución del número total de puntos de ruptura detectados en el dispositivo (a) a lo largo de todo el estrés.

4.5. CARACTERIZACIÓN DEL ÁREA Y LA VELOCIDAD DE GENERACIÓN

En la **Fig. 4.34a** se muestra la imagen óptica de un dispositivo de área circular con un radio de $169\ \mu\text{m}$ después de estar sometido a un CVS mientras que en la **Fig. 4.34b** se representa la evolución del número total de puntos detectados en su electrodo superior a lo largo de los 75 s que dura el estrés. De la misma manera, en la **Fig. 4.35b** se muestra la evolución del número de puntos detectados en el dispositivo mostrado en la **Fig. 4.35a**. En este segundo caso, el área activa vuelve a ser circular, pero con un radio de $225\ \mu\text{m}$. Dado el número de píxeles de la cámara óptica ($640\ \text{px} \times 480\ \text{px}$) y las dimensiones de los dispositivos, la resolución de las imágenes es de $1\ \text{px}^2 = 0.73\ \mu\text{m}^2$ (**Fig. 4.34a**) y de $1\ \text{px}^2 = 1.07\ \mu\text{m}^2$ (**Fig. 4.35a**). Manteniendo el criterio utilizado en la sección anterior (Sec. 4.5.2), también se ha evaluado la generación de puntos pequeños ($A_{BD} < 10\ \mu\text{m}^2$) y grandes ($A_{BD} \geq 10\ \mu\text{m}^2$). Lo primero que hay que destacar es que en ambos dispositivos se observan dos comportamientos erróneos que se deben, principalmente, al proceso de grabación. Si se analiza la evolución del número de eventos y del número de puntos grandes, se puede ver que hay momentos en los que estos números se reducen. Esto, en un principio, parecería indicar que hay puntos que desaparecen o que reducen su tamaño. Sin embargo, esto no tiene ningún sentido a nivel experimental. Analizando las grabaciones, rápidamente se puede ver que la iluminación no es constante y esto fácilmente puede provocar que algunos píxeles dejen de detectarse, produciendo este efecto de desaparición y de reducción de área

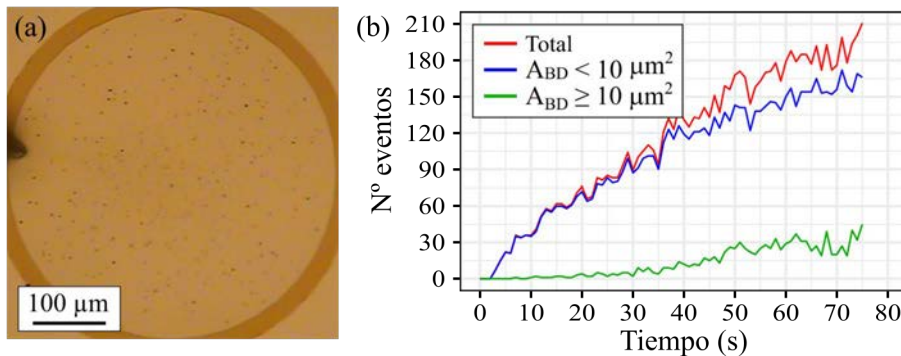


Fig. 4.35: (a) Imagen óptica del patrón de puntos de ruptura generado en un dispositivo circular de radio $225\ \mu\text{m}$ después de estar sometido a un CSV durante 75 s. (b) Evolución del número total de puntos de ruptura detectados en el dispositivo (a) a lo largo de todo el estrés.

Teniendo en consideración el error mencionado, se puede observar que, como es de esperar, cuanto mayor es la dimensión del dispositivo, mayor es la velocidad de generación de eventos. A su vez, en ambos casos, la velocidad de degradación (**Fig. 4.34b** y **Fig. 4.35b**) no es constante y disminuye con el tiempo, lo que coincidiría con la existencia de una saturación en la generación de eventos al final del estrés. En estos casos, debido a los tiempos analizados, no se llega a observar esta saturación.

Analizando la evolución de los puntos según su área, se observa, como cabría esperar, que la generación de eventos de área grande es mayor en el dispositivo con el área más elevada (**Fig. 4.35**). A mayor A_{ox} , mayor es probabilidad de generación de defectos.

La aparición de una saturación en la generación de eventos podría estar atribuida al efecto de resistencia serie discutido en el **Capítulo 3** (Sec. 3.5.2). Al incrementarse el número de CF en el dieléctrico, llegaría un momento en que la caída de tensión producida por la hipotética resistencia serie sería tan elevada que los tiempos requeridos para observar nuevas rupturas serían excesivamente elevados, induciendo este efecto de saturación.

4.6. Fenómenos observados en dispositivos quemados

Una vez alcanzada la saturación en los dispositivos, si no se detiene el estrés, estos se siguen degradando y la superficie de su electrodo comienza a quemarse (**Fig. 4.36**). Como puede observarse en las **Fig. 4.36b,c**, la quemadura parte del origen de la punta de estrés y se dirige hacia el centro del dispositivo. Además, se vuelve cada vez más grande y oscura a medida que aumenta el tiempo de degradación. Esta dependencia de la región quemada con la localización de la punta sugiere que quizás pueda existir una correlación entre esta y la distribución de eventos de ruptura.

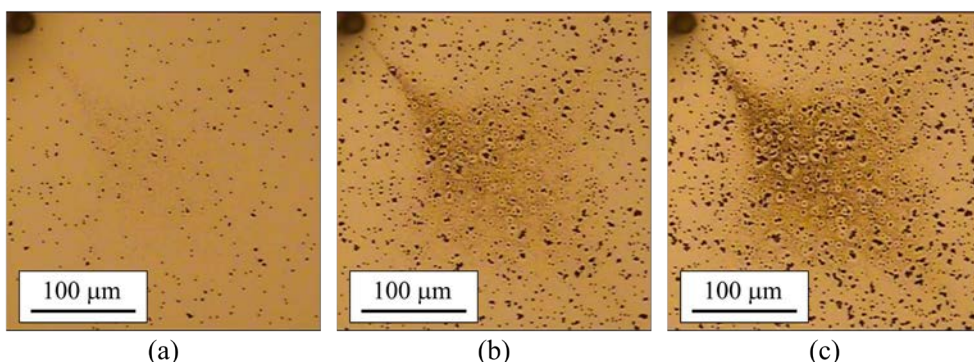


Fig. 4.36: Imagen óptica de un dispositivo con área de $300\ \mu\text{m} \times 300\ \mu\text{m}$ sometido a un CVS durante (a) 5 s, (b) 30 s y (c) 60 s.

Analizando las imágenes ópticas (**Fig. 4.36b,c**) y las imágenes SEM obtenidas de dispositivos que presentan signos de quemadura (**Fig. 4.37a**) se puede observar que alrededor de muchos puntos se forma una especie de anillo en donde el electrodo no está quemado. La formación de este anillo se ve mucho mejor en la **Fig. 4.37b**, donde se muestra una imagen SEM ampliada de una región completamente quemada. Por un

lado, se puede observar que la región quemada está formada por pequeños defectos que se generan en el electrodo superior; y, por el otro, se puede ver como alrededor de los eventos de ruptura hay una clara inhibición en la generación de estos defectos. Si se analiza en detalle la evolución de la región quemada (Fig. 4.36), se llega a la conclusión que este anillo no aparece cuando se genera un evento de ruptura en una región quemada, sino que se empieza a visualizar a medida que los alrededores del punto comienzan a quemarse. Es decir, al generarse el evento de ruptura también se produce una región alrededor del punto que evita que el electrodo se queme y solo se puede observar en el momento en el que sus alrededores se queman. Esto sugiere, que en las regiones cercanas a los puntos de ruptura tiene que haber sucedido un cambio estructural en el interior del dispositivo que evita la degradación del electrodo superior; lo que significa que el proceso térmico de la ruptura dieléctrica no solo destruye el electrodo superior, sino que el daño se extiende más allá del punto observado.

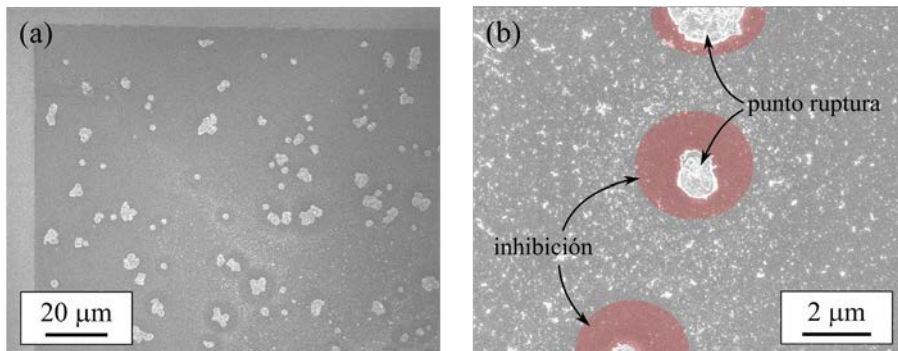


Fig. 4.37: Imagen SEM (a) de un dispositivo quemado y (b) de una región quemada.

Una primera hipótesis sería que la ruptura induce un cambio físico en los alrededores del punto, incrementando el espesor del óxido. Sin embargo, esta queda descartada dado que la caracterización AFM no muestra la existencia de una protuberancia en el electrodo superior en la localización de los eventos [TDMR 2019]. Por tanto, los cambios inducidos en el dispositivo tienen que haberse producido en el interior del dieléctrico. Una posible hipótesis es que estos cambios modifican las propiedades conductivas de las regiones cercanas al CF, reduciendo las corrientes superficiales responsables de quemar el electrodo superior. Trabajos previos de otros grupos de investigación muestran resultados experimentales que apoyan esta hipótesis. Cester *et al.* [97] demostró que alrededor de los CF generados en un transistor MOS se producía una región en forma de anillo en donde la conducción era considerablemente menor. Esta reducción de la conducción se atribuye a la generación de defectos de óxido y a la captura de cargas negativas. Según se explica en el artículo,

al atraparse las cargas se reduce el número de electrones en las regiones cercanas al CF y se reduce la movilidad de los electrones dado que estos defectos cargados actúan como centros de dispersión de Coulomb. En artículos más recientes, Kumar *et al.* reportó, en estructuras Pt/Hf/HfO_x/Pt [98] y Pt/TiN/HfO₂/Pt [99], la generación de una región rica en oxígeno alrededor de los CF que dificulta el movimiento de cargas debido a que se reduce el número de V_0^{**} en esa región. En la misma línea, Hoskins *et al.* documentó efectos similares para los CF generados en estructuras MIM basadas en TiO₂ con electrodos de Pt [100].

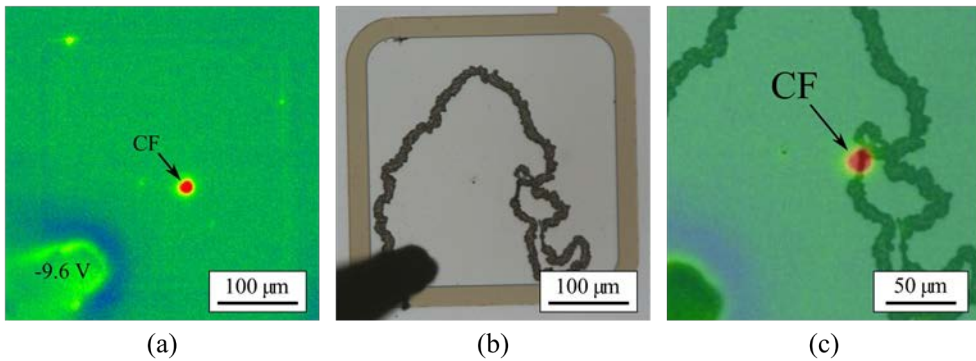


Fig. 4.38: (a) Imagen térmica de un dispositivo de área cuadrada de $300 \mu\text{m} \times 300 \mu\text{m}$ que muestra la conducción de un CF. (b) Imagen óptica del dispositivo después del estrés. (c) Superposición de las imágenes (a) y (b) donde se observa que el punto caliente se expande a regiones del electrodo que no están dañadas.

Para finalizar con la caracterización física de esta región de inhibición, en la [Fig. 4.38a](#) se muestra una imagen térmica de uno de los dispositivos estudiados. Este dispositivo está sometido a un CVS de -9.6 V , aplicado con la punta que se visualiza en la imagen, mientras que el sustrato está conectado a tierra. Como se ha mencionado, debido a que la calibración se realiza con el dispositivo virgen, la temperatura que muestran los puntos de ruptura no es correcta ya que las características de emisión térmica de estas regiones no son las mismas que el electrodo de Pt. Sin embargo, en esta imagen se observa un punto caliente cuyas dimensiones exceden las de un punto de ruptura. Esto nos indica tanto la presencia de un CF que está conduciendo, como un incremento de la temperatura que afecta a las regiones cercanas al punto de ruptura. En la [Fig. 4.38b](#) se muestra el estado del dispositivo después del estrés. Como se puede ver, la degradación en este electrodo formó una enorme estructura lineal que parte desde la punta hacia la localización de este punto caliente y que se esparce por todo el electrodo superior. La formación de esta estructura también se pudo observar en las imágenes térmicas, a la vez que desaparecía el punto caliente, indicando que el CF había dejado de conducir. Aunque las [Fig. 4.38a-b](#) corresponden a estados

diferentes del dispositivo, si se superponen (**Fig. 4.38c**) se puede observar que, si bien la estructura es más grande, el punto caliente afecta a regiones que no están dañadas. Por tanto, se confirma que el punto caliente es, efectivamente, resultado de la conducción de un CF.

En base a estas imágenes (**Fig. 4.38**) y a las simulaciones térmicas realizadas por el método de elementos finitos [**TDMR 2019**] se propone que, en el momento de la ruptura, debido a que la temperatura en las regiones cercanas al CF es lo suficientemente elevada, se producen cambios estructurales en la capa de HfO_2 . A su vez, la diferencia entre el daño de la capa de HfO_2 y el del electrodo superior de Pt se debe a que la conductividad térmica del Pt es mucho mayor que la del HfO_2 [101]. Al ser la conductividad mayor, la temperatura penetra menos en la capa metálica en comparación con el óxido, produciendo, en consecuencia, daños estructurales de tamaño inferior a los inducidos en el óxido.

4.6.1. Localización de la punta de estrés

Una de las preguntas que puede surgir durante la caracterización espacial de los eventos de ruptura es si la punta de medición puede tener algún tipo de influencia en la generación de los eventos. Idealmente se supone que, al estar trabajando con electrodos metálicos, la tensión aplicada tiene que ser la misma en todo el dispositivo por lo que no debería existir ningún tipo de correlación entre ambos. Sin embargo, se ha podido observar que la región quemada claramente depende de la posición de la punta, por lo que quizás no es descabellado considerar que la distribución de puntos también depende de la misma. Este tema fue tratado en detalle en [**JAP 2017**].

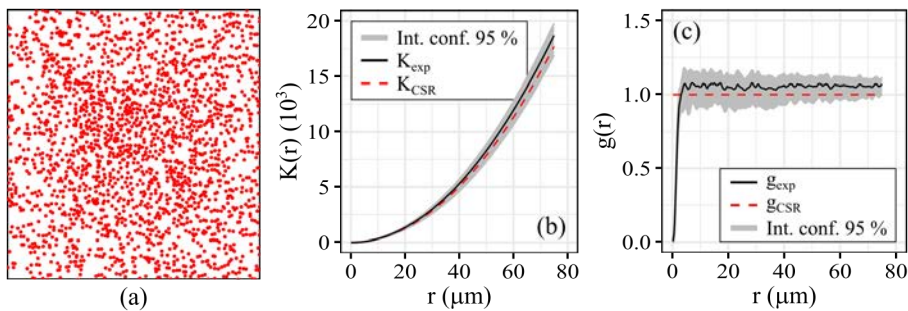


Fig. 4.39: (a) Localización de los puntos de ruptura detectados en la **Fig. 4.36c** definidos en una ventana de observación cuadrada de $300 \mu\text{m} \times 300 \mu\text{m}$. (b) función K y (c) función de correlación entre pares para el patrón (a) y para un proceso CSR.

Recuperando el dispositivo mostrado en la **Fig. 4.36c**, el cual mostraba claramente la direccionalidad de la región quemada, en la **Fig. 4.39a** se muestra la localización de todos sus puntos de ruptura. En este caso, para asegurar que no se detectaban

regiones quemadas como eventos, la detección de los puntos fue realizada manualmente. En total, se detectan 2055 eventos de ruptura que se definen en una ventana de observación cuadrada de $300 \mu\text{m} \times 300 \mu\text{m}$ (Fig. 4.39a), lo que representa un proceso con intensidad $\lambda = 2.28 \cdot 10^{-2}$ puntos/ μm^2 . En las Fig. 4.39b,c se muestra el análisis espacial del patrón (Fig. 4.39a) utilizando la función K y la función g , respectivamente. Como se puede observar, ambas funciones indican que existe una ligera acumulación de puntos, ya que el valor experimental de ambas es mayor que el valor esperado para un proceso CSR. Sin embargo, tal y como nos indica el intervalo de confianza, esta acumulación no nos faculta para la rechazar hipótesis nula.

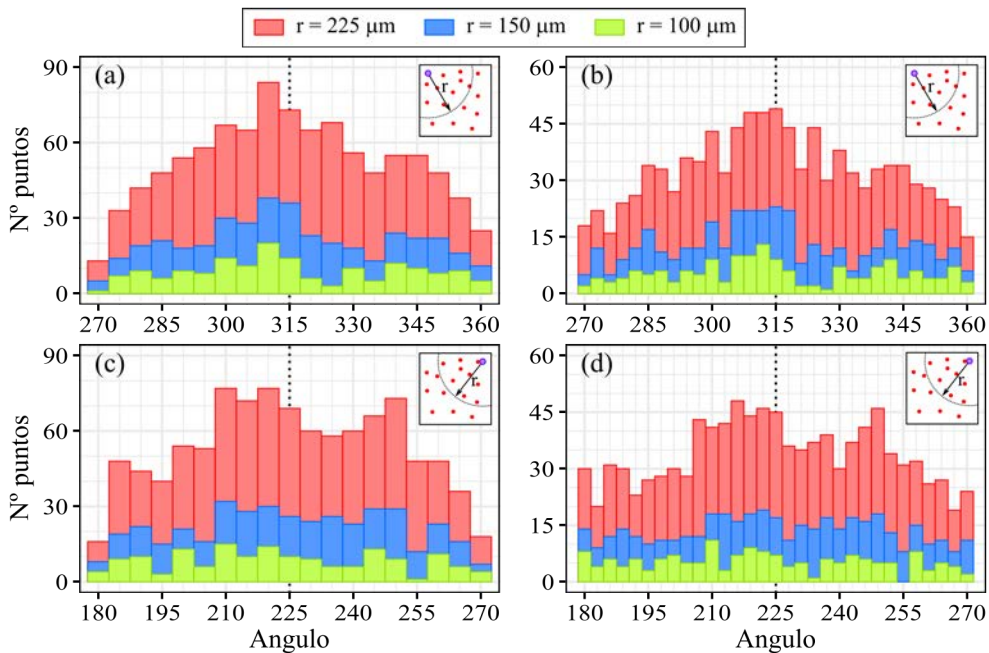


Fig. 4.40: Histogramas del número de puntos de ruptura situados dentro de un círculo de radio r centrado en (a,b) c_1 y en (c,d) c_2 . En cada histograma hay una figura representativa de la localización de este círculo y la dirección hacia el centro del dispositivo se encuentra indicada (línea de puntos). El ancho de las columnas es (a,c) 5° y (b,d) 3° .

Un análisis más directo que se puede realizar para estudiar si realmente la punta influye en la distribución de los eventos de ruptura, consiste en considerar histogramas angulares respecto a la localización de la punta ($c_1 = [15; 290] \mu\text{m}$), a la diagonal adyacente a la punta ($c_2 = [285; 290] \mu\text{m}$) –con fines comparativos–, y al centro del dispositivo ($c_3 = [150; 150] \mu\text{m}$). Para evitar efectos de borde, en lugar de contar todos los puntos para cada sector angular, solo se consideran aquellos situados dentro de un círculo de radio r (Fig. 4.40 y Fig. 4.41). Nótese que, mientras que para c_1 y c_2 (Fig. 4.40) el histograma cuenta el número de puntos situados en cada sector; para c_3 (Fig.

4.41), dado que lo que interesa es conocer si hay una direccionalidad en la generación de los eventos de ruptura, se suman en un mismo sector los puntos situados en sectores opuestos. Básicamente se hace un procedimiento similar al que se realiza con el método de wavelets angulares (Fig. 4.11a) pero respecto a un único punto focal (c_2).

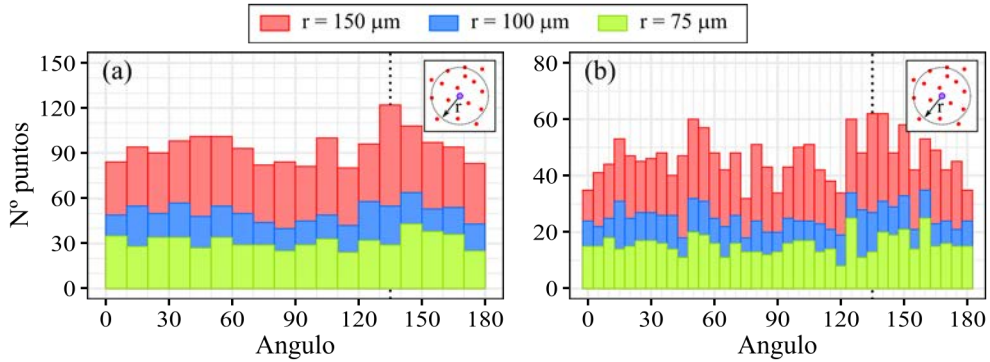


Fig. 4.41: Histogramas del número de puntos de ruptura situados dentro de un círculo de radio r centrado en c_3 . El número de puntos en sectores opuestos se ha sumado en uno solo. En cada histograma hay una figura representativa de la localización de este círculo y la dirección hacia la punta se encuentra indicada (línea de puntos). El ancho de las columnas es (a) 10° y (b) 5° .

Analizando detenidamente los resultados obtenidos, el histograma correspondiente a la localización de la punta (Fig. 4.40a) muestra que existe una dirección en la que hay un mayor número de puntos, lo que podría indicar una direccionalidad en la generación de los puntos. Esta direccionalidad se ve más claramente al disminuir el tamaño del sector de 5° a 3° (Fig. 4.40b), en donde se observa esta acumulación preferente hacia el centro del dispositivo incluso para los puntos más cercanos a la punta ($r = 100 \mu\text{m}$). Esta direccionalidad podría ser consecuencia de una acumulación de puntos en el centro del dispositivo. Sin embargo, el análisis desde c_2 (Fig. 4.40c,d) parece rechazar esa posibilidad, dado que los resultados no coinciden con los obtenidos desde c_1 . Nótese que, desde c_2 (Fig. 4.40c,d), los sectores con una mayor cantidad de puntos cuando $r = 225 \mu\text{m}$ son los situados cerca al centro del dispositivo, indicando una acumulación de puntos. No obstante, no hay indicios de una direccionalidad. Además, a distancias cortas ($r = 100 \mu\text{m}$), no se observa ninguna acumulación de puntos, especialmente si se analiza los resultados para sectores de 3° (Fig. 4.40d). Estos resultados contrastan con los obtenidos desde c_1 (Fig. 4.40b) y, por tanto, la acumulación observada desde la localización de la punta de estrés (Fig. 4.40a,b) podría deberse a una direccionalidad en la generación de los eventos. En conclusión, si bien los resultados (Fig. 4.40) muestran que existe una acumulación de puntos hacia el centro del dispositivo, también sugieren que existe una dirección favorable para la generación de puntos que parte desde la punta de estrés.

Analizando los histogramas desde el centro del dispositivo, c_3 (Fig. 4.41), y teniendo en consideración los resultados previamente discutidos (Fig. 4.40); no se observa una acumulación evidente en la dirección de la punta (135°). Es decir, los histogramas no muestran una cantidad de puntos lo suficientemente elevada o pronunciada que permita justificar la existencia de una direccionalidad en la localización de los puntos. Por tanto, el análisis desde el centro del dispositivo no permite determinar con seguridad en qué dirección está situada la punta, pese a que sabemos que hay una ligera direccionalidad en la generación de los eventos (Fig. 4.40).

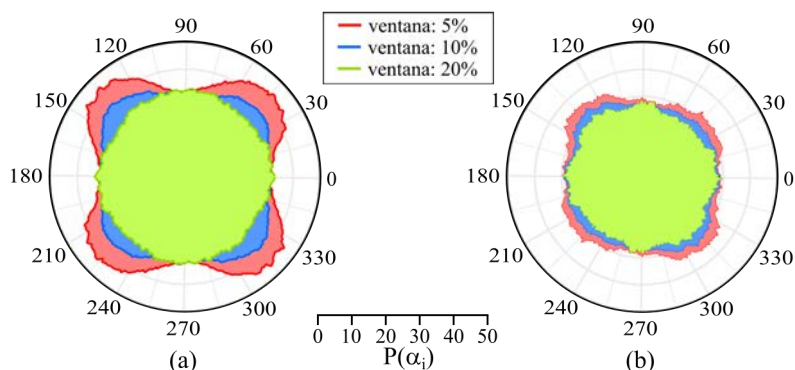


Fig. 4.42: (a) Intervalo de confianza al 95% y (b) método de wavelets angulares P para el patrón experimental (Fig. 4.39a) utilizando ventanas focales de diferentes tamaños. El intervalo de confianza al 95% se obtiene después de realizar 50 simulaciones de MC de los datos experimentales. El análisis se realiza utilizando la wavelet FTH.

En el artículo publicado, [JAP 2017], se muestra cómo, utilizando el método de las wavelets angulares con ventanas focales de diferente tamaño, es posible detectar una ligera anisotropía en la dirección de la punta. Pese a ello, la anisotropía no es lo suficientemente elevada como para justificar que en esa dirección está localizada la punta de estrés. Con el fin de evaluar si es posible observar algún efecto en un dispositivo con una mayor cantidad de puntos, en la Fig. 4.42 se realiza el mismo análisis para el patrón de la Fig. 4.39a. En la Fig. 4.42a se muestra el intervalo de confianza para un proceso CSR, obtenido a través de simulaciones de MC, mientras que en la Fig. 4.42b se representan los P_{exp} . Comparando la evolución de ambas representaciones se observa una tendencia similar a la reportada en [JAP 2017]: al reducir la ventana focal, el valor del intervalo de confianza crece hacia las diagonales del dispositivo y P_{exp} parece crecer más hacia la diagonal en donde está situada la punta que hacia la otra. Sin embargo, estos valores vuelven a no ser lo suficientemente elevados como para justificar una anisotropía y, por tanto, no confirman que la localización de la punta afecte a la distribución de puntos.

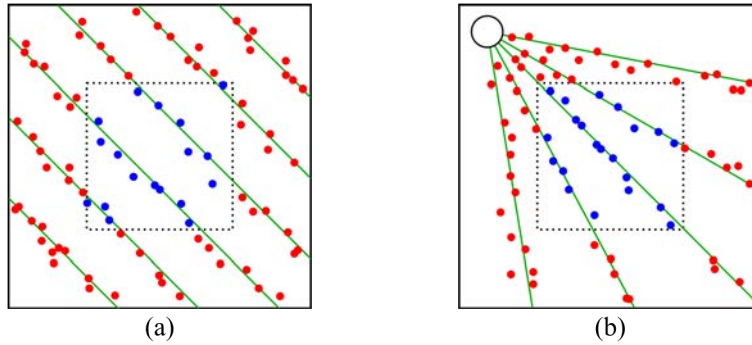


Fig. 4.43: Representación de (a) un patrón de puntos con anisotropía a 135° y de (b) la direccionalidad producida por la punta de estrés. Los puntos azules representan los puntos focales que se utilizarían para realizar el análisis de wavelets angulares.

Muy probablemente, el motivo por el cual no se detecta la dirección de la punta con el método de wavelets angulares (Fig. 4.42), se deba a que gran parte de los puntos focales definidos influyen en la medición. Para ilustrar esta idea, en la Fig. 4.43 se muestran dos patrones con distribuciones diferentes en donde se define una ventana focal. En la primera (Fig. 4.43a), el patrón tiene una clara anisotropía a 135° ; mientras que la segunda (Fig. 4.43b), representa una generación de puntos que parten desde la punta de estrés. Como se puede observar, en el primer caso (Fig. 4.43a), todos los puntos focales analizados presentan una acumulación de puntos en la dirección de la anisotropía. En cambio, para el caso que se está estudiando (Fig. 4.43b), los puntos focales presentan acumulaciones de puntos en diferentes direcciones, impidiendo detectar la acumulación de puntos en dirección a la punta. Esto explicaría porque al reducir la ventana se empieza a observar una asimetría en P_{exp} en dirección a la punta (Fig. 4.42). A su vez, también describiría por qué se observa mejor esta asimetría en patrones con menos puntos [JAP 2017], dado que se reducirían las interferencias.

4.6.2. Caracterización de efectos de inhibición

Al inicio de esta sección se ha discutido la posibilidad de que alrededor de los CF se genere un cambio estructural en la capa de HfO_2 y que, por tanto, el daño producido por la ruptura dieléctrica sea mayor de lo que se observa con un simple microscopio óptico. Este proceso de degradación se representa en la Fig. 4.44a. La hipótesis principal es que la energía térmica que se libera por efecto Joule en el momento que se produce el CF se difunde más en el HfO_2 que en el electrodo de Pt, produciendo un cambio estructural en el HfO_2 que rodea a la marca que se observa en el electrodo superior. Si bien es evidente que existe un cambio estructural, dado que se observa la formación de un anillo alrededor de los puntos en donde el electrodo no se quema, la pregunta es si esta región influye en la generación de los eventos de ruptura. Para ello,

se realiza el análisis estadístico de la distribución de los puntos a la vez que se evalúa el tamaño de las marcas y de los anillos [ME 2019, TDMR 2019]. En la Fig. 4.44b se muestra una representación esquemática del problema que se encara en esta sección. Como se puede observar, cada punto (x_i) tiene asociado dos radios diferentes que representan el tamaño del punto (r_{BD}) y el del anillo (r_{anillo}).

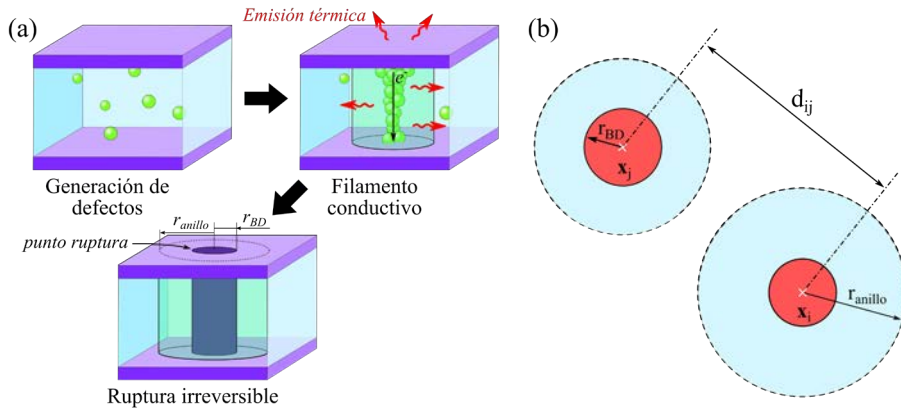


Fig. 4.44: Representación esquemática (a) de la generación de los puntos de ruptura considerando la formación de una región de inhibición alrededor del CF y (b) de las distancias estudiadas en donde r_{BD} es el radio de la marca que deja tras de sí la ruptura dieléctrica y r_{anillo} es el radio de la región no quemada.

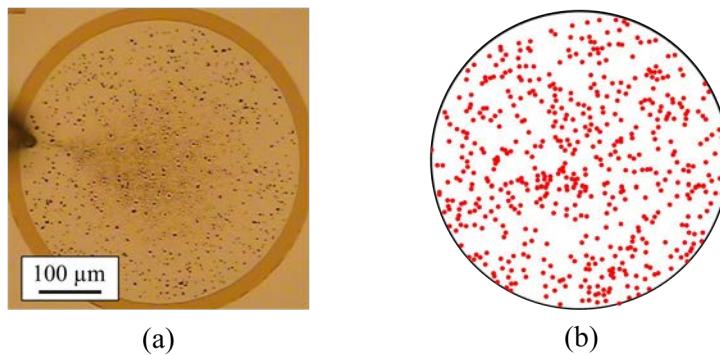


Fig. 4.45: (a) Imagen óptica de la distribución de puntos generado en un dispositivo circular de radio 225 μm . (b) Localización de los eventos de ruptura detectados en (a) definidos en una ventana de observación circular de radio 225 μm .

En la Fig. 4.45a se muestra la imagen óptica de un dispositivo circular de radio 225 μm que presenta ligeros signos de quemadura. En la Fig. 4.45b se muestran los 544 puntos de ruptura detectados, definidos en una ventana de observación igual al área del dispositivo. Esto define un proceso con intensidad $\lambda=3.42 \cdot 10^{-3}$ puntos/ μm^2 . Es importante destacar que, por razones obvias, el patrón de puntos solo tiene como atributo r_{BD} , ya que el anillo no se observa en todos los puntos. El tamaño de los anillos

fue obtenido analizando varias imágenes SEM, definiendo un círculo en cada uno de los eventos de ruptura. En [ME 2019] se reporta $\langle r_{\text{anillo}} \rangle = 3.5 \mu\text{m}$, con un valor mínimo de $2.3 \mu\text{m}$ y un máximo de $6.1 \mu\text{m}$, dependiendo del tamaño del punto de ruptura.

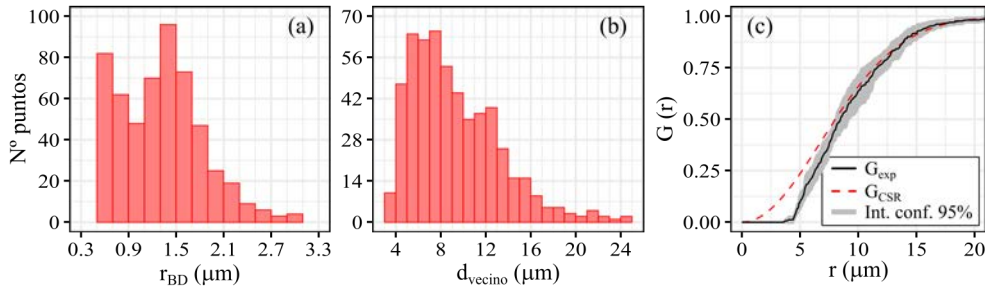


Fig. 4.46: Histograma para (a) el radio de los eventos de ruptura y (b) la distancia entre eventos vecinos. (c) Función de eventos vecinos G para el patrón experimental y un proceso CSR. (d) función de correlación entre pares g para el patrón experimental y un proceso CSR. Los análisis corresponden al patrón mostrado en la Fig. 4.45b.

El análisis de la localización de los eventos de ruptura, así como de su tamaño se muestra en la Fig. 4.46. Como se puede observar (Fig. 4.46a), el radio de los puntos de ruptura va desde los $0.4 \mu\text{m}$ hasta los $2.9 \mu\text{m}$, y la gran mayoría de puntos presentan tamaños entre $0.5 - 0.7 \mu\text{m}$ y entre $1.1 - 1.7 \mu\text{m}$, siendo este segundo rango el de mayor acumulación. Analizando la distancia entre eventos vecinos (Fig. 4.46b) se destaca la ausencia de puntos situados a menos de $3 \mu\text{m}$ de distancia. Estudiando en detalle estas distancias con la función G (Fig. 4.46c), se puede ver fácilmente que la distancia mínima entre puntos es igual a $3.6 \mu\text{m}$ dado que para $r < 3.6 \mu\text{m}$ el valor de G_{exp} es nulo. Esta ausencia de puntos, por sí sola, no implica una inhibición en la generación de eventos de ruptura ya que se debe tener en cuenta la resolución de la imagen analizada, en este caso $1 \text{ px}^2 = 1.07 \mu\text{m}^2$. Considerando dos puntos de $1.4 \mu\text{m}$ de radio (Fig. 4.46a) separados por un único píxel, la distancia entre estos sería de $3.83 \mu\text{m}$. Nótese que, este valor, es ligeramente superior a la distancia a partir de la cual $G_{\text{exp}} \neq 0$, por lo que la ausencia de puntos mostrada por G (Fig. 4.46c) muy probablemente se debe a la resolución de la imagen. Sin embargo, esto no niega la existencia de efectos de inhibición. Tal y como se discute en [ME 2019], existe un rango en el que tanto G como el intervalo de confianza muestran valores inferiores a los esperados de un proceso CSR. En este caso se puede ver que el valor es menor para distancias entre $3.6 - 8 \mu\text{m}$. Estadísticamente, esto quiere decir que, dado un punto, es menos probable que se genere un evento vecino en este rango en comparación con una distribución de Poisson. Por lo tanto, el dispositivo estudiado (Fig. 4.45) muestra claros signos de inhibición en la generación de eventos cercanos

situados a menos de $8 \mu\text{m}$. Nótese que las dimensiones del anillo son inferiores a esta región de inhibición; lo que apoya la idea de que dentro del anillo la probabilidad de generar una ruptura dieléctrica es menor a lo esperado. A su vez, estos resultados refuerzan la existencia de un cambio estructural en la capa de HfO_2 en las zonas cercanas al CF que modifica las propiedades conductivas del material y que reduce su velocidad de degradación. Es importante señalar que este efecto se ha observado tanto en dispositivos quemados como en no quemados [ME 2019] y que por simplicidad en esta sección se ha mostrado un ejemplo reportado en [TDMR 2019].

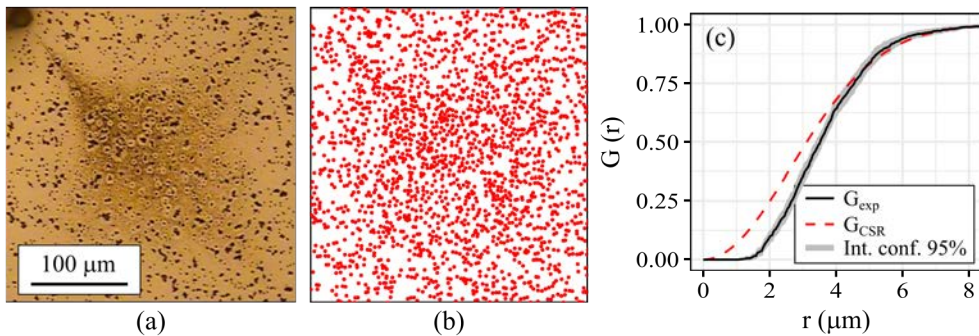


Fig. 4.47: (a) Imagen óptica de un dispositivo con área de $300 \mu\text{m} \times 300 \mu\text{m}$ sometido a un CVS durante 60 s. (b) Localización de los puntos definidos en una ventana de observación cuadrada de $300 \mu\text{m} \times 300 \mu\text{m}$. (c) Función de eventos vecinos G para el patrón experimental y un proceso CSR.

Anteriormente (Sec. 4.4.1) se ha mostrado como en algunos dispositivos se observaban ligeros indicios de la existencia de esta inhibición (Fig. 4.20a,c) mientras que en otros patrones no se observaban (Fig. 4.20b). Al igual que con los efectos de borde observados en la Sec. 4.5.1, esto se debe a que se requiere un número elevado de puntos para que ciertos efectos de la distribución se manifiesten y puedan ser caracterizados sin ningún problema. Una prueba de ello es el cálculo de la función G para el patrón de la Fig. 4.39c (Fig. 4.47c), previamente discutido en la Sec. 4.6.1 —para facilitar la lectura, en las Fig. 4.47a,b se vuelven a representar tanto el dispositivo como la localización de los eventos de ruptura—. En total, este parón tiene 2055 puntos de ruptura (Fig. 4.47b). Como se puede observar (Fig. 4.47c), el valor de G_{exp} de esta distribución de puntos muestra más nítidamente la existencia de los efectos de inhibición, los cuales aparecen a distancias menores que $4 \mu\text{m}$. Nótese que gracias al tamaño del dispositivo y a la resolución, la distancia de inhibición concuerda perfectamente con las dimensiones del anillo ($\langle r_{anillo} \rangle \approx 3.5 \mu\text{m}$).

4.7. Conclusiones

A lo largo de este extenso capítulo se ha ido demostrando el potencial que tienen las técnicas de estadística espacial para analizar y estudiar la distribución espacial de eventos de ruptura.

- ❖ Se ha demostrado que, independientemente de la geometría del área activa, los eventos de ruptura parecen seguir una distribución CSR. Sin embargo, si se analiza una distribución con una cantidad de puntos elevada, ya sea o porque el área es muy grande o porque el estrés aplicado es muy elevado, se empiezan a detectar desviaciones de la estadística de Poisson.
 - Aparecen efectos de borde en el dispositivo que reducen la cantidad de eventos generados en los extremos. Es decir, hay más eventos en el centro del dispositivo que hacia los bordes.
 - Se observan efectos de inhibición alrededor de los eventos de ruptura. Es decir, que la probabilidad de generar un CF muy cerca de otro ya formado es menor de lo esperado para un proceso CSR.
- ❖ Se ha desarrollado un modelo para simular, cualitativamente, la generación de los CF en los dispositivos y su distribución espacial. En el modelo, los electrodos se consideran como un conjunto de resistencias entrecruzadas en un plano horizontal. Por otro lado, el dieléctrico se representa por las resistencias que conectan los nodos de un electrodo con el otro.
 - La simulación calcula la diferencia de tensión aplicada en las resistencias que representan el dieléctrico para determinar, en base el *E-model*, la probabilidad de generar un evento de ruptura.
 - Al considerar un dieléctrico de espesor constante, la distribución de los eventos de ruptura no muestra ninguna desviación respecto a la estadística de Poisson.
 - Si se considera un dieléctrico con más espesor a los bordes que en el centro, se obtiene una distribución de eventos concentrada en el centro del dispositivo.
- ❖ Se ha demostrado, utilizando diferentes tipos de análisis espacial y un programa de redes neuronales, que existe una clara correlación entre la localización de los eventos y su área. Mientras que los eventos de área elevada se concentran en el centro del dispositivo, los de área pequeña siguen perfectamente un proceso CSR. El daño se concentra en el centro del dispositivo.

- ❖ La aparición de efectos de quemadura en los dispositivos demuestra tanto la existencia de una direccionalidad de la corriente respecto la punta, así como los efectos de inhibición alrededor de los eventos de ruptura.
 - Si bien es fácil demostrar que la localización de la punta puede llegar a tener una ligera influencia en la generación de los eventos, no ha sido posible detectarla utilizando técnicas de análisis generales. Esto supone, a nivel general, que es probable que esta influencia sea tan baja que, respecto al análisis del patrón, es como si no existiera. A su vez, implica que, dado un patrón de puntos de ruptura, no podemos saber, con las técnicas utilizadas, donde estaba posicionada la punta.
 - Al irse quemando el dispositivo se observa que, al generarse un evento, la región del electrodo próxima a este deja de quemarse. De la misma manera, las regiones próximas a eventos generados antes de estos efectos no se queman. Al no detectarse una elevación del electrodo en estas regiones, la inhibición se atribuye a que ha habido un cambio estructural en el dieléctrico en las regiones próximas al CF debido al efecto Joule.

Capítulo 5

Conclusiones

A lo largo de esta tesis doctoral se ha realizado una investigación en detalle sobre el fenómeno de la ruptura dieléctrica en dispositivos MIS/MIM desde puntos de vista completamente diferentes. Brevemente, hemos evaluado los cambios físicos que produce este fenómeno en el interior de los electrodos (**Capítulo 2**); hemos estudiado y modelizado la distribución de los tiempos de ruptura, así como de los eventos sucesivos (**Capítulo 3**); y, finalmente, hemos mostrado la utilidad de la estadística espacial en el estudio de la generación de los eventos de ruptura (**Capítulo 4**). Dado que cada uno de los capítulos presentados ya incluye un apartado que engloba las conclusiones, a continuación, se presentan las conclusiones más relevantes de todo el trabajo realizado y que, en cierta manera, describen todo el trabajo realizado.

- ❖ El fenómeno de la ruptura dieléctrica no solo afecta al interior del dieléctrico, generando el CF; sino que también afecta a los electrodos que forman parte del dispositivo, produciendo nuevas estructuras en su interior. El daño que se induce en el electrodo superior depende tanto de las características del estrés eléctrico (I_{CC} , polaridad, ciclos de RS) como del espesor del dieléctrico, siendo alguna de estas variables más determinantes que otras. Interesantemente, la dependencia con la polaridad podría ser un indicativo de los diferentes mecanismos implicados en el proceso de formación del CF.

- ❖ Si bien no es usual el uso de un limitador de corriente durante el *reset* en ReRAMs, es aconsejable su uso para evitar la posible degradación de los dispositivos debido a incrementos de corriente inesperados.
- ❖ El TDCM es ideal para reproducir distribuciones de tiempos de ruptura que, respecto al modelo de Weibull, presentan una desviación a percentiles elevados. A su vez, permite demostrar, en los dispositivos penta-nanolaminados estudiados, que los primeros diez eventos sucesivos no están correlacionados sin la necesidad de filtrar datos.
- ❖ Es posible atribuir el retraso de los eventos sucesivos a la presencia de una resistencia serie y realizar un ajuste del TDCM con los tiempos experimentales, correlacionando el factor de escala (τ) con esta resistencia y las leyes de aceleración de la ruptura.
- ❖ La técnicas y herramientas de estadística espacial son ideales para estudiar y analizar la localización de los eventos de ruptura en dispositivos que presentan la generación de múltiples CF.
- ❖ La estadística espacial nos permite demostrar diferentes efectos en dispositivos altamente degradados, entre los que destacan: la existencia de una acumulación de eventos hacia el centro de los dispositivos; la correlación entre el área de los eventos y su localización; y la inhibición de la generación de nuevos eventos en regiones cercanas a un evento ya formado. Remarcar que esta inhibición parece indicar que la ruptura dieléctrica no solo modifica los electrodos y genera el CF en el interior del dieléctrico, sino que también induce un cambio estructural en el dieléctrico en las regiones cercanas al CF.

Finalmente, a modo de reflexión y valoración final de la investigación realizada, a continuación, exponemos las posibles investigaciones que surgen a partir de esta tesis doctoral:

- ⊙ Realizar la caracterización física de los cambios inducidos en la capa de HfO_2 después de la ruptura dieléctrica. En el caso de los dispositivos de $\text{Ni}/\text{HfO}_2/\text{n}^+\text{Si}$, analizar el CF y el daño inducido en la intercara Ni/HfO_2 con un HRTEM y un EELS para verificar si la dependencia con la polaridad se debe a que los átomos/defectos involucrados en la ruptura son diferentes. Podríamos analizar la estructura de la protuberancia y estudiar en mayor profundidad el impacto de la polaridad y de I_{CC} . En el caso de los dispositivos de $\text{Pt}/\text{HfO}_2/\text{Pt}$, analizar la región cercana a los eventos de ruptura para verificar si han ocurrido cambios estructurales que justifiquen la inhibición detectada.

-
- ⊙ Analizar el TDDDB en estructuras Al/penta-nanolaminado/p⁺Si para áreas diferentes a las estudiadas con el fin de poder verificar el escalado del TDCM con el área y estudiar la dependencia de la estadística de eventos sucesivos con el área. Además, incrementar el número de eventos sucesivos considerados y verificar si el ajuste semiempírico es capaz de predecir los tiempos de ruptura para $k > 20$.
 - ⊙ Mejorar el programa de detección para obtener el tiempo de generación de cada punto de ruptura. Esto nos permitiría añadir el tiempo como atributo, es decir, podríamos analizar si existe una correlación entre la localización de los eventos y su aparición.
 - ⊙ Seguir trabajando y explorando las técnicas de análisis espacial para encontrar nuevas técnicas de análisis que nos permitan obtener más información sobre la distribución espacial de los eventos de ruptura. Entre las diferentes técnicas, destacar el uso de redes neuronales e inteligencias artificiales para el análisis de la correlación entre el daño inducido y la localización de los eventos.

Bibliografía

- [1] J. H. Stathis, “Physical and predictive models of ultrathin oxide reliability in CMOS devices and circuits,” *IEEE Trans. Device Mater. Reliab.*, vol. 1, no. 1, pp. 43–59, 2001.
- [2] F. Palumbo *et al.*, “A review on dielectric breakdown in thin dielectrics: silicon dioxide, high-k, and layered dielectrics,” *Adv. Funct. Mater.*, vol. 30, no. 18, p. 1900657, 2020.
- [3] C.-H. Ho *et al.*, “Ultra-thin dielectric breakdown in devices and circuits: a brief review,” *Microelectron. Reliab.*, vol. 55, no. 2, pp. 308–317, 2015.
- [4] J. S. Lee *et al.*, “Resistive switching phenomena: a review of statistical physics approaches,” *Appl. Phys. Rev.*, vol. 2, no. 3, p. 031303, 2015.
- [5] R. Degraeve *et al.*, “Degradation and breakdown in thin oxide layers: mechanisms, models and reliability prediction,” *Microelectron. Reliab.*, vol. 39, no. 10, pp. 1445–1460, 1999.
- [6] G. E. Moore, “Cramming more components onto integrated circuits, Reprinted from *Electronics*, vol. 38, no. 8, Apr. 19, 1965, pp. 114 ff.,” *IEEE Solid-State Circuits Soc. Newsl.*, vol. 11, no. 3, pp. 33–35, 2006.

- [7] M. Roser and H. Ritchie, “Technological Progress,” *Our World in Data*, 2013. Available: <https://ourworldindata.org/technological-progress>.
- [8] G. Martín *et al.*, “Transmission electron microscopy assessment of conductive-filament formation in Ni-HfO₂-Si resistive-switching operational devices,” *Appl. Phys. Express*, vol. 11, no. 1, p. 014101, 2018.
- [9] H.-C. Lin *et al.*, “Atomic layer deposited Al₂O₃ films on NiTi shape memory alloys for biomedical applications,” *Procedia Manuf.*, vol. 37, pp. 431–437, 2019.
- [10] R. Degraeve *et al.*, “New insights in the relation between electron trap generation and the statistical properties of oxide breakdown,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 45, no. 4, pp. 904–911, 1998.
- [11] J. Suñé *et al.*, “On the breakdown statistics of very thin SiO₂ films,” *Thin Solid Films*, vol. 185, no. 2, pp. 347–362, 1990.
- [12] R. Degraeve *et al.*, “A consistent model for the thickness dependence of intrinsic breakdown in ultra-thin oxides,” in *Proceedings of International Electron Devices Meeting (IEDM)*, pp. 863–866, 1995.
- [13] D. Mercer, “What is a Source Measurement Unit or SMU?,” *Analog Dialogue*, 2017. Available: <https://www.analog.com/en/analogdialogue/studentzone/studentzone-december-2017.html>.
- [14] A. Rodríguez-Fernández, “Analysis and modelling of filamentary conduction in HfO₂-based structures,” *PhD dissertation*, Universitat Autònoma de Barcelona, Cerdanyola del Vallès, 2018.
- [15] A. Rodriguez-Fernandez *et al.*, “Effect of the voltage ramp rate on the set and reset voltages of ReRAM devices,” *Microelectron. Eng.*, vol. 178, no. 25, pp. 61–65, 2017.
- [16] U. Celano *et al.*, “Three-dimensional observation of the conductive filament in nanoscaled resistive memory devices,” *Nano Lett.*, vol. 14, no. 5, pp. 2401–2406, 2014.
- [17] U. Celano *et al.*, “Imaging the three-dimensional conductive channel in filamentary-based oxide resistive switching memory,” *Nano Lett.*, vol. 15, no. 12, pp. 7970–7975, 2015.
- [18] I. Valov, “Redox-based resistive switching memories (ReRAMs): electrochemical systems at the atomic scale,” *ChemElectroChem*, vol. 1, no. 1, pp. 26–36, 2014.

-
- [19] E. Y. Wu, “Facts and myths of dielectric breakdown processes—part I: statistics, experimental, and physical acceleration models,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 66, no. 11, pp. 4523–4534, 2019.
- [20] J. W. McPherson, “Time dependent dielectric breakdown physics – models revisited,” *Microelectron. Reliab.*, vol. 52, no. 9–10, pp. 1753–1760, 2012.
- [21] E. Y. Wu *et al.*, “Ultra-thin oxide reliability for ULSI applications,” *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 15, no. 5, pp. 425–435, 2000.
- [22] E. Y. Wu *et al.*, “On the Weibull shape factor of intrinsic breakdown of dielectric films and its accurate experimental determination—part II: experimental results and the effects of stress conditions,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 49, no. 12, pp. 2141–2150, 2002.
- [23] Y. H. Kim *et al.*, “Thickness dependence of Weibull slopes of HfO₂ gate dielectrics,” *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 24, no. 1, pp. 40–42, 2003.
- [24] E. Y. Wu, “A new formulation of breakdown model for high- κ /SiO₂ stack dielectrics,” in *IEEE International Reliability Physics Symposium (IRPS)*, pp. 5A.4.1–5A.4.7, 2013.
- [25] T. Kauerauf *et al.*, “Low Weibull slope of breakdown distributions in high-k layers,” *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 23, no. 4, pp. 215–217, 2002.
- [26] E. Y. Wu and J. Suñé, “Power-law voltage acceleration: a key element for ultra-thin gate oxide reliability,” *Microelectron. Reliab.*, vol. 45, no. 12, pp. 1809–1834, 2005.
- [27] J. Suñé, “New physics-based analytic approach to the thin-oxide breakdown statistics,” *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 22, no. 6, pp. 296–298, 2001.
- [28] E. Y. Wu and J. Suñé, “On voltage acceleration models of time to breakdown—Part I: experimental and analysis methodologies,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 56, no. 7, pp. 1433–1441, 2009.
- [29] J. W. McPherson and D. A. Baglee, “Acceleration factors for thin gate oxide stressing,” in *International Reliability Physics Symposium (IRPS)*, pp. 1–5, 1985.
- [30] K. F. Schuegraf and Chenming Hu, “Hole injection SiO₂ breakdown model for very low voltage lifetime extrapolation,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 41, no. 5, pp. 761–767, 1994.

- [31] D. J. DiMaria and E. Cartier, "Mechanism for stress-induced leakage currents in thin silicon dioxide films," *J. Appl. Phys.*, vol. 78, no. 6, pp. 3883–3894, 1995.
- [32] D. J. DiMaria *et al.*, "Impact ionization, trap creation, degradation, and breakdown in silicon dioxide films on silicon," *J. Appl. Phys.*, vol. 73, no. 7, pp. 3367–3384, 1993.
- [33] X. Wu *et al.*, "Intrinsic nanofilamentation in resistive switching," *J. Appl. Phys.*, vol. 113, no. 11, p. 114503, 2013.
- [34] D.-H. Kwon *et al.*, "Atomic structure of conducting nanofilaments in TiO₂ resistive switching memory," *Nat. Nanotechnol.*, vol. 5, no. 2, pp. 148–153, 2010.
- [35] F. Miao *et al.*, "Anatomy of a nanoscale conduction channel reveals the mechanism of a high-performance memristor," *Adv. Mater.*, vol. 23, no. 47, pp. 5633–5640, 2011.
- [36] S. Privitera *et al.*, "Conductive filament structure in HfO₂ resistive switching memory devices," *Solid. State. Electron.*, vol. 111, pp. 161–165, 2015.
- [37] S. Privitera *et al.*, "Microscopy study of the conductive filament in HfO₂ resistive switching memory devices," *Microelectron. Eng.*, vol. 109, pp. 75–78, 2013.
- [38] X. Li *et al.*, "The nature of dielectric breakdown," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 93, no. 7, p. 072903, 2008.
- [39] X. Wu *et al.*, "Using post-breakdown conduction study in a MIS structure to better understand the resistive switching mechanism in an MIM stack," *Nanotechnology*, vol. 22, no. 45, p. 455702, 2011.
- [40] X. Li *et al.*, "The radial distribution of defects in a percolation path," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 93, no. 26, p. 262902, 2008.
- [41] C.-C. Wu *et al.*, "Effects of the molecular chain length of polyimide on the characteristics of organic resistive random access memories," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 67, no. 1, pp. 277–282, 2020.
- [42] A. A. Sivkov *et al.*, "Investigation of honey thin film as a resistive switching material for nonvolatile memories," *Mater. Lett.*, vol. 271, p. 127796, 2020.

-
- [43] B. Sun *et al.*, “An organic nonvolatile resistive switching memory device fabricated with natural pectin from fruit peel,” *Org. Electron.*, vol. 42, pp. 181–186, 2017.
- [44] T. W. Hickmott, “Low-frequency negative resistance in thin anodic oxide films,” *J. Appl. Phys.*, vol. 33, no. 9, pp. 2669–2682, 1962.
- [45] D. J. Wouters *et al.*, “Phase-change and redox-based resistive switching memories,” *Proc. IEEE*, vol. 103, no. 8, pp. 1274–1288, 2015.
- [46] M. Lanza *et al.*, “Recommended methods to study resistive switching devices,” *Adv. Electron. Mater.*, vol. 5, no. 1, p. 1800143, 2019.
- [47] F. A. Kröger and H. J. Vink, “Relations between the concentrations of imperfections in solids,” *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 5, no. 3, pp. 208–223, 1958.
- [48] D. S. Jeong *et al.*, “Coexistence of bipolar and unipolar resistive switching behaviors in a Pt/TiO₂/Pt stack,” *Electrochem. Solid-State Lett.*, vol. 10, no. 8, p. G51, 2007.
- [49] S. Balatti *et al.*, “Set variability and failure induced by complementary switching in bipolar RRAM,” *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 34, no. 7, pp. 861–863, 2013.
- [50] A. Rodriguez-Fernandez *et al.*, “Resistive switching with self-rectifying tunability and influence of the oxide layer thickness in Ni/HfO₂/n⁺-Si RRAM devices,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 64, no. 8, pp. 3159–3166, 2017.
- [51] H. Lv *et al.*, “Evolution of conductive filament and its impact on reliability issues in oxide-electrolyte based resistive random access memory,” *Sci. Rep.*, vol. 5, no. 1, p. 7764, 2015.
- [52] J.-Y. Chen *et al.*, “Dynamic evolution of conducting nanofilament in resistive switching memories,” *Nano Lett.*, vol. 13, no. 8, pp. 3671–3677, 2013.
- [53] M. B. Gonzalez *et al.*, “Analysis of the switching variability in Ni/HfO₂-based RRAM devices,” *IEEE Trans. Device Mater. Reliab.*, vol. 14, no. 2, pp. 769–771, 2014.
- [54] A. Chen, “Area and thickness scaling of forming voltage of resistive switching memories,” *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 35, no. 1, pp. 57–59, 2014.

- [55] S. Claramunt *et al.*, “Non-homogeneous conduction of conductive filaments in Ni/HfO₂/Si resistive switching structures observed with CAFM,” *Microelectron. Eng.*, vol. 147, no. 1, pp. 335–338, 2015.
- [56] M. J. Wang *et al.*, “Unipolar resistive switching with forming-free and self-rectifying effects in Cu/HfO₂/n-Si devices,” *AIP Adv.*, vol. 6, no. 2, p. 025007, 2016.
- [57] Y. Y. Chen *et al.*, “Switching by Ni filaments in a HfO₂ matrix: a new pathway to improved unipolar switching RRAM,” in *IEEE International Memory Workshop (IMW)*, pp. 1–4, 2011.
- [58] Y. Yang *et al.*, “Electrochemical dynamics of nanoscale metallic inclusions in dielectrics,” *Nat. Commun.*, vol. 5, p. 4232, 2014.
- [59] Z. X. Chen *et al.*, “Impact of Ni concentration on the performance of Ni silicide/HfO₂/TiN resistive RAM (RRAM) cells,” *J. Electron. Mater.*, vol. 43, no. 11, pp. 4193–4198, 2014.
- [60] K.-L. Lin *et al.*, “Electrode dependence of filament formation in HfO₂ resistive-switching memory,” *J. Appl. Phys.*, vol. 109, no. 8, p. 084104, 2011.
- [61] E. Y. Wu *et al.*, “Modeling of time-dependent non-uniform dielectric breakdown using a clustering statistical approach,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 103, no. 15, p. 152907, 2013.
- [62] J. Suñé and E. Y. Wu, “Statistics of successive breakdown events in gate oxides,” *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 24, no. 4, pp. 272–274, 2003.
- [63] R. S. Rathore *et al.*, “Line edge roughness induced threshold voltage variability in nano-scale FinFETs,” *Superlattices Microstruct.*, vol. 103, pp. 304–313, 2017.
- [64] S. Markov *et al.*, “Direct tunnelling gate leakage variability in nano-CMOS transistors,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 57, no. 11, pp. 3106–3114, 2010.
- [65] R. Achanta *et al.*, “Analysis of applying time-dependent clustering model to BEOL TDDDB,” in *IEEE International Interconnect Technology Conference (IITC)*, pp. 219–222, 2014.
- [66] E. Wu *et al.*, “Multiple breakdown phenomena and modeling for non-uniform dielectric systems,” in *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, pp. 34.7.1–34.7.4, 2014.

-
- [67] E. Y. Wu, “Facts and myths of dielectric breakdown processes—part II: post-breakdown and variability,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 66, no. 11, pp. 4535–4545, 2019.
- [68] T. Shimizu *et al.*, “A new aspect of time-dependent clustering model for non-uniform dielectric TDDB,” in *IEEE International Reliability Physics Symposium (IRPS)*, pp. 3A-4-1–3A-4-10, 2016.
- [69] I. W. Burr, “Cumulative frequency functions,” *Ann. Math. Stat.*, vol. 13, no. 2, pp. 215–232, 1942.
- [70] N. Kumar *et al.*, “A review of yield modelling techniques for semiconductor manufacturing,” *Int. J. Prod. Res.*, vol. 44, no. 23, pp. 5019–5036, 2006.
- [71] P. R. Tadikamalla, “A Look at the Burr and Related Distributions,” *Int. Stat. Rev.*, vol. 48, no. 3, pp. 337–344, 1980.
- [72] Q. Shao *et al.*, “Models for extremes using the extended three-parameter Burr XII system with application to flood frequency analysis,” *Hydrol. Sci. J.*, vol. 49, no. 4, pp. 685–702, 2004.
- [73] R. N. Rodriguez, “A guide to the Burr type XII distributions,” *Biometrika*, vol. 64, no. 1, pp. 129–134, 1977.
- [74] J. Suñé *et al.*, “Successive oxide breakdown statistics: correlation effects, reliability methodologies, and their limits,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 51, no. 10, pp. 1584–1592, 2004.
- [75] M. A. Alam and R. K. Smith, “A phenomenological theory of correlated multiple soft-breakdown events in ultra-thin gate dielectrics,” in *IEEE International Reliability Physics Symposium (IRPS)*, pp. 406–411, 2003.
- [76] F. Campabadal *et al.*, “Electrical characteristics of metal-insulator-semiconductor structures with atomic layer deposited Al₂O₃, HfO₂, and nanolaminates on different silicon substrates,” *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 29, no. 1, p. 01AA07, 2011.
- [77] M. L. Delignette-Muller and C. Dutang, “Fitdistrplus: an R package for fitting distributions,” *J. Stat. Softw.*, vol. 64, no. 4, pp. 1–34, 2015.
- [78] C. Martínez-Domingo *et al.*, “Initial leakage current related to extrinsic breakdown in HfO₂/Al₂O₃ nanolaminate ALD dielectrics,” *Microelectron. Eng.*, vol. 88, no. 7, pp. 1380–1383, 2011.

- [79] A. Rodríguez-Fernández *et al.*, “Function-fit model for the rate of conducting filament generation in constant voltage-stressed multilayer oxide stacks,” *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 35, no. 1, p. 01A108, 2017.
- [80] A. Rodríguez *et al.*, “Electrical characterization of multiple leakage current paths in HfO₂/Al₂O₃-based nanolaminates,” *Microelectron. Reliab.*, vol. 55, no. 9–10, pp. 1442–1445, 2015.
- [81] X. S. Mas *et al.*, “Failure analysis of MIM and MIS structures using point-to-event distance and angular probability distributions,” *IEEE Trans. Device Mater. Reliab.*, vol. 14, no. 4, pp. 1080–1090, 2014.
- [82] J. Illian *et al.*, *Statistical analysis and modelling of spatial point patterns*, Chichester, UK (John Wiley & Sons, Ltd), 2008.
- [83] A. Baddeley, “Spatial sampling and censoring,” in *Stochastic geometry: likelihood and computation*, London (Chapman and Hall/CRC), pp. 37–78, 1998.
- [84] B. D. Ripley, “Modelling spatial patterns,” *J. R. Stat. Soc. Ser. B (Statistical Methodol.)*, vol. 39, no. 2, pp. 172–212, 1977.
- [85] A. Baddeley, “Analysing spatial point patterns in R,” *Technical report, CSIRO*, Ver. 4.1, 2010, Available: <https://n9.cl/48nve>.
- [86] M. S. Rosenberg, “Wavelet analysis for detecting anisotropy in point patterns,” *J. Veg. Sci.*, vol. 15, no. 2, pp. 277–284, 2004.
- [87] F. Abramovich *et al.*, “Wavelet analysis and its statistical applications,” *J. R. Stat. Soc. Ser. D (The Stat.)*, vol. 49, no. 1, pp. 1–29, 2000.
- [88] M. S. Rosenberg and C. D. Anderson, “PASSaGE: Pattern Analysis, Spatial Statistics and Geographic Exegesis. Version 2,” *Methods Ecol. Evol.*, vol. 2, no. 3, pp. 229–232, 2011.
- [89] A. Baddeley *et al.*, *Spatial point patterns: methodology and applications with R*, New York (Chapman and Hall/CRC), 2015.
- [90] D. Stoyan and H. Stoyan, *Fractals, random shapes, and point fields: methods of geometrical statistics*, Chichester, UK (John Wiley & Sons, Ltd), 1994.
- [91] K. Wälder and O. Wälder, “Analysing interaction effects in forests using the mark correlation function,” *iForest - Biogeosciences For.*, vol. 1, no. 1, pp. 34–38, 2008.

-
- [92] M. Schlather *et al.*, “Detecting dependence between marks and locations of marked point processes,” *J. R. Stat. Soc. Ser. B (Statistical Methodol.)*, vol. 66, no. 1, pp. 79–93, 2004.
- [93] X. Saura *et al.*, “Direct observation of the generation of breakdown spots in MIM structures under constant voltage stress,” *Microelectron. Reliab.*, vol. 53, no. 9–11, pp. 1257–1260, 2013.
- [94] X. Saura *et al.*, “Analysis of the breakdown spot spatial distribution in Pt/HfO₂/Pt capacitors using nearest neighbor statistics,” *J. Appl. Phys.*, vol. 114, no. 15, p. 154112, 2013.
- [95] A. Baddeley and R. Turner, “Spatstat: an R package for analyzing spatial point patterns,” *J. Stat. Softw.*, vol. 12, no. 6, pp. 1–42, 2005.
- [96] M. P. Puig, “Implementation of unsupervised learning mechanisms on OxRAM devices for neuromorphic computing applications,” *PhD dissertation*, Universitat Autònoma de Barcelona, Cerdanyola del Vallès, 2019.
- [97] A. Cester *et al.*, “Collapse of MOSFET drain current after soft breakdown,” *IEEE Trans. Device Mater. Reliab.*, vol. 4, no. 1, pp. 63–72, 2004.
- [98] S. Kumar *et al.*, “Conduction channel formation and dissolution due to oxygen thermophoresis/diffusion in hafnium oxide memristors,” *ACS Nano*, vol. 10, no. 12, pp. 11205–11210, 2016.
- [99] S. Kumar *et al.*, “Oxygen migration during resistance switching and failure of hafnium oxide memristors,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 110, no. 10, p. 103503, 2017.
- [100] B. D. Hoskins *et al.*, “Stateful characterization of resistive switching TiO₂ with electron beam induced currents,” *Nat. Commun.*, vol. 8, p. 1972, 2017.
- [101] M. A. Panzer *et al.*, “Thermal properties of ultrathin hafnium oxide gate dielectric films,” *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 30, no. 12, pp. 1269–1271, 2009.

Anexo I

Compendio de

publicaciones incluidas

en esta tesis

JAP 2017

**EXPLORATORY STUDY AND APPLICATION OF THE
ANGULAR WAVELET ANALYSIS FOR ASSESSING
THE SPATIAL DISTRIBUTION OF BREAKDOWN
SPOTS IN Pt/HfO₂/Pt STRUCTURES**

Exploratory study and application of the angular wavelet analysis for assessing the spatial distribution of breakdown spots in Pt/HfO₂/Pt structures

J. Muñoz-Gorri^{1,a)}, S. Monaghan,² K. Cherkaoui,² J. Suñé,¹ P. K. Hurley,² and E. Miranda¹

¹Departament d'Enginyeria Electrònica, Universitat Autònoma de Barcelona, Cerdanyola del Vallès, Spain

²Tyndall National Institute, University College Cork, Cork, Ireland

(Received 12 August 2017; accepted 11 November 2017; published online 5 December 2017)

The angular wavelet analysis is applied for assessing the spatial distribution of breakdown spots in Pt/HfO₂/Pt capacitors with areas ranging from 10⁴ to 10⁵ μm². The breakdown spot lateral sizes are in the range from 1 to 3 μm, and they appear distributed on the top metal electrode as a point pattern. The spots are generated by ramped and constant voltage stresses and are the consequence of microexplosions caused by the formation of shorts spanning the dielectric film. This kind of pattern was analyzed in the past using the conventional spatial analysis tools such as intensity plots, distance histograms, pair correlation function, and nearest neighbours. Here, we show that the wavelet analysis offers an alternative and complementary method for testing whether or not the failure site distribution departs from a complete spatial randomness process in the angular domain. The effect of using different wavelet functions, such as the Haar, Sine, French top hat, Mexican hat, and Morlet, as well as the roles played by the process intensity, the location of the voltage probe, and the aspect ratio of the device, are all discussed. *Published by AIP Publishing.*

<https://doi.org/10.1063/1.5000004>

I. INTRODUCTION

One of the most studied issues in connection with the reliability of metal-insulator-metal (MIM) and metal-insulator-semiconductor (MIS) structures is the breakdown (BD) phenomenon of the oxide layer as it implies a fundamental change of the electrical properties of the devices.¹ Physically, this process consists of the generation of a defect percolation path inside the insulator and the formation of a short connecting the top and bottom electrodes, allowing the unrestricted circulation of electrons.² If this process is not controlled, i.e., if the voltage or current is not limited by a series resistance or by the compliance of the experimental setup, the damage associated with the BD event is catastrophic and irreversible. The sudden flow of electrons through the formed conducting filament (CF) generates a huge increase in temperature due to Joule heating effects, which ends with the local melting of the top metal layer.³ The damage can extend to the bottom metal electrode as well. While for small area devices, this highly energetic process completely destroys the top electrode, for large area devices, it is possible to electrically detect a sequential BD process associated with the generation of distributed CFs over the whole device area.⁴ As explained, each BD event leaves its mark on the top electrode due to the high thermal energy released, which can be confirmed by simple visual inspection through an optical microscope. The BD spots are crater-like structures so that they are referred to as hard BDs with lateral propagation.⁵ If the size of the BD spots is neglected, the set of failure sites can

be regarded from a mathematical perspective as a point pattern within an observation window.

In general, the study of the failure site distribution in MIS and MIM structures relies on electrical measurements such as ramped or constant current/voltage stresses applied to a large number of devices (with one BD event per device). Alternatively, it has been demonstrated that the methods of spatial statistics are also appropriate for investigating the distribution of BD spots in the case of multi-CF generation.⁶ The core of this research is assessing whether or not temporal or spatial correlations among the BD events occur. Experimental observations point out that the BD process in MIS and MIM devices is uncorrelated both in time and space.² The nearest neighbor distance histogram, the pair correlation function, and the Ripley's *K* function are frequently used as the first and second order estimators that provide information in that context. In spatial statistics, data estimators are often compared with the corresponding theoretical values for a Poisson or complete spatial randomness (CSR) process.⁷ Although deviations can indicate that the studied distribution departs from CSR, the analysis is sometimes far from being conclusive. There is no single estimator able to provide the definitive solution to this problem since each estimator highlights a particular feature of the point pattern distribution. To overcome this limitation, a number of methods are often applied to the same data and the obtained results are compared. As the generation of defects in an oxide layer is in principle a completely random process, an isotropic distribution of BD spots in the top metal electrode is expected to occur. However, deviations from CSR can happen as a consequence of some underlying properties of the generation process linked to the device fabrication method,

^{a)}Author to whom correspondence should be addressed: jordi.munoz.gorri@uab.cat

oxide thickness nonuniformity, local variations of the permittivity value, edge effects, etc.^{6,8,9} The analysis of the distribution of BD spots gives insight into the quality of the oxide layer, i.e., it can help to detect the weak regions of the device. It is worth recalling also that, as in any statistical study, estimators can simply provide a summarized description of the observed data or, alternatively, they can be used for inferential purposes. In this latter case, a confidence band represents the uncertainty in an estimate of a curve based on limited data.

The angular wavelet analysis was developed by Rosenberg,¹⁰ and it is used to investigate the angular distribution of points in the plane from a global perspective, i.e., taking into account multiple focal points. The method is based on the wavelet transform, a mathematical tool frequently used for signal processing and data compression.¹¹ With this transform, data are weighted according to scaled and shifted wavelet functions. A wavelet is a wave-like shaped function with an integral over all x -values that yields zero. There are many of these kinds of functions with different properties: continuous/discrete, orthogonal/biorthogonal, smooth/abrupt, etc. The wavelet transform and the angular wavelet analysis are mainly used for investigating geographical and ecological spatial data.^{11,12} In this paper, the suitability of the angular wavelet analysis for assessing the BD spot distributions in MIM devices with a high- k dielectric is explored. A preliminary study showed the adequacy of the method but did not delve into the many factors that can affect the final outcome.¹³ This paper is organized as follows: In Sec. II, the steps followed for the fabrication of the devices are described. The degradation conditions and the methodology used to analyze the results are reported. In Sec. III, the main mathematical features of the wavelet analysis are presented. The role played by the selected wavelet function is analyzed in Sec. IV. The method requires the definition of a focal window, a region located at the center of the observation window (device area) whose inner points are used as focal points. It is shown that increasing or decreasing this area can significantly affect the obtained results. The computation time is also linked to this choice as well as with the selected wavelet function. This exploratory study of the method is fundamental to establishing standard conditions for analyzing BD spot patterns. In Sec. V, different case studies are presented and discussed. First, devices with different numbers of BD spots are investigated. Second, the possible correlation between the location of the stress source and the spatial distribution of BD spots is investigated. Finally, the role played by the aspect ratio of the devices in the profile of the angular variance plot is reported.

II. EXPERIMENTAL DETAILS

The devices investigated in this work are Pt/HfO₂/Pt capacitors fabricated on top of n-type Si(100) substrates. First, a 200 nm thick thermal SiO₂ layer was grown on the Si substrate and a 200 nm thick Pt layer was deposited over the SiO₂ layer by electron-beam evaporation. A 30 nm-thick HfO₂ layer was then deposited by a Cambridge NanoTech Fiji atomic layer deposition (ALD) system using TEMAHF

precursor and H₂O. After this, a 200 nm-thick Pt layer was deposited on top of the HfO₂ layer. Lithography and lift-off processes were used to form arrays of capacitors with different geometries. The access to the bottom Pt electrode was enabled via the dry etching technique using a mask/resist process that removes the HfO₂ to the bottom Pt metal while at the same time protects the top Pt electrode of the patterned devices. The oxide layer extends 25 μ m beyond the perimeter edge of the top metal electrode. The BD spots were generated using constant (9 V for a maximum of 120 s) and ramped voltage stresses (from 0 V to 12 V). The bottom electrode was always grounded and the voltage was applied to the top electrode. The number of spots that can be generated depends both on the magnitude of the applied stress and the duration of the stress. There is always a limit in the number of spots that can be generated because of the increase of the potential drop across the series resistance as the degradation proceeds. Figures 1(a) and 1(b) show photographs of a pristine device and of an identical device after degradation, respectively. The BD spots appear as a point pattern distributed over the whole device area. Figure 1(c) is a SEM image and shows a particular region of the top metal electrode of

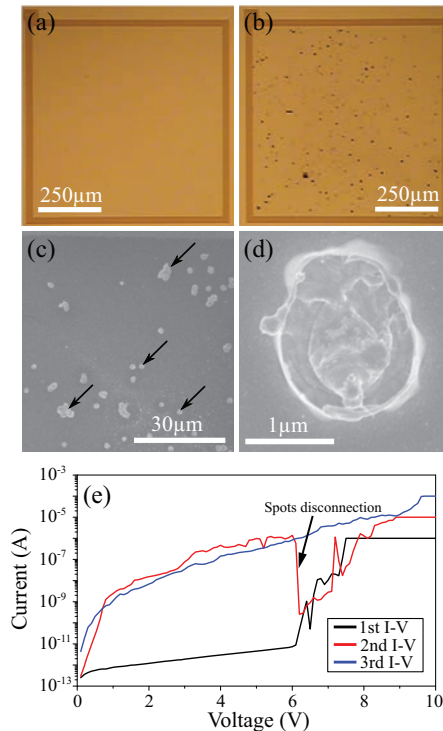


FIG. 1. Photograph of (a) a pristine device and (b) a stressed device. (c) SEM image of the top electrode after degradation. (d) Detailed SEM image of a typical BD spot. (e) Serial of voltage sweeps applied to a Pt/HfO₂/Pt pristine device to produce BD spots. A $I_C = 10^{-5}$ A is set in the first sweep and the arrow points out the moment when some spots are disconnected by the disappearance of the top electrode in the second sweep.

the device. The image shows that the size of the spots ranges from 1 to 3 μm . Figure 1(d) corresponds to a detailed view of a particular failure site. Notice the crater-like structure with the top metal layer upraised. Since the size of the spots is neglected, the only information required for the analysis is the location of the spots referred to the center of the structure (any other location can be accepted). In what follows, BD spot patterns will be analyzed using the Spatstat¹⁴ package for the R language and the PASSAGE2 software.¹⁵

III. BRIEF INTRODUCTION TO THE ANGULAR WAVELET METHOD

In this section, a general description of the angular wavelet method is presented and the best conditions for assessing the failure site distribution in MIM devices are established. The angular wavelet analysis is a method for analyzing anisotropy in point patterns. The focal window is defined as the region in which the focal points used for global analysis are located [see Fig. 2(a)]. The region around every focal point is divided into 1° angular sectors or quadrats, producing a total of 360 quadrats. As illustrated in Fig. 2(b), points in opposite quadrats are considered as a single data for calculating the density of points in a sector, making a total of 180 sector counts. This density is calculated as

$$\rho(\alpha) = \frac{N(\alpha) + N(\alpha + 180^\circ)}{A(\alpha) + A(\alpha + 180^\circ)}, \quad (1)$$

where α is the angular direction of a merged sector, and N and A are the number of points and area of a 1° sector, respectively. Notice that α ranges from 0° to 180° . As shown in Fig. 2(c), these sectors form a circular transect, and the last and the first sectors are assumed to be adjacent. The wavelet transform is then applied to this transect $\rho(\alpha)$. In the wavelet transform, a wavelet function (w) is shifted to a given location of the experimental data (α_i) and scaled to a given size (b_k) (see Fig. 3). This scaling process determines the range of the data sequence that will be accounted for by

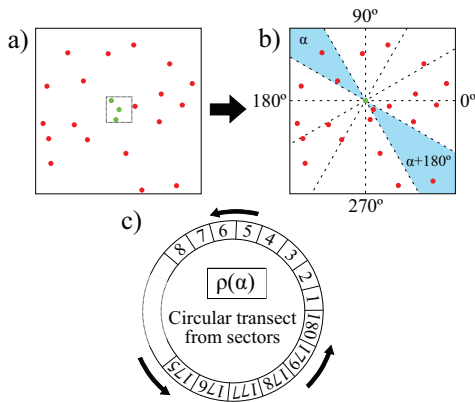


FIG. 2. (a) Selection of focal points in a point pattern in the center of the distribution. (b) Distribution of angular sectors for a given focal point. (c) Transect generated from sectors indicating circularity.

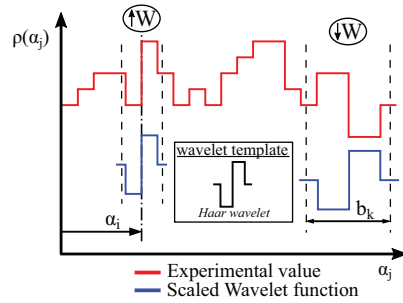


FIG. 3. Schematic of a sequence of experimental data ($\rho(\alpha_j)$) and corresponding wavelet matching process. α_i is the position where the transform is applied and b_k is the scale of the wavelet template. When the wavelet function matches the data sequence, a high wavelet transform value is obtained (e.g., left window). For a poor match, a small value of wavelet transform is obtained (e.g., right window).

the transform. The wavelet transform (W) at the position α_i for scale b_k is expressed as

$$W(b_k, \alpha_i) = \frac{1}{b_k} \sum_{j=1}^n \rho(\alpha_j) \times w\left(\frac{\alpha_j - \alpha_i}{b_k}\right), \quad (2)$$

where $\rho(\alpha_i)$ is the data value at the location α_i and n is the number of observations along the transect. When good matching between the experimental value and the scaled wavelet function is achieved, the wavelet transform at that position is high. Otherwise, for a poor matching, a low value is obtained (Fig. 3). Notice that (2) yields a single value for each position and scale. In this method, the variance for a given sector α_i evaluated at different scales (b_k) is calculated as

$$P_i(\alpha_i) = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m W^2(b_k, \alpha_i). \quad (3)$$

Expression (3) corresponds to the average of the squared wavelet transform over all possible scales (m is the total number of considered scales). In the angular wavelet method, the scale (b_k) ranges from 1° to 45° in steps of 1° . Taking into account all the focal points within the focal window, the average variance reads

$$P_t(\alpha_i) = \frac{1}{f} \sum_{l=1}^f P_l(\alpha_i), \quad (4)$$

where f is the number of focal points. In order to assess the angular distribution of points, a comparison is made between the experimental variance and the prediction corresponding to a CSR process (ideally a circle centered at the origin of coordinates). In practice, the CSR variance plot is obtained by randomizing the location of all the data points in the observation window r times. These r Poisson distributions are analyzed using the wavelet analysis and the confidence band calculated. The confidence band is used to evaluate to what extent the experimental data shows anisotropy. In case that the point pattern does not follow a Poisson distribution, the experimental variance can exhibit one or several peaks

exceeding the confidence band limit. The presence of such peaks might indicate an accumulation of spots in a particular direction of the pattern. Here, we have considered a 95% confidence band which is obtained after randomizing the experimental data 50 times.

An alternative approach to the wavelet method consists in calculating the angular variance of the experimental data taking into account solely the density of points at each angular position (angular bins) using a central focal point. This method can be used to detect accumulation of spots in particular directions. However, despite this approach appearing simpler and more straightforward than the angular wavelet analysis described above, it only involves a single focal point, i.e., the center of the structure. This is at variance with the spirit of spatial methods which does not rely on a particular point location but on a global analysis. However, a focal window could be defined for obtaining an angular histogram but in this case the results would still be limited to a single bin size. Recall that the wavelet method is a multiscale approach.

IV. EXPLORATORY ANALYSIS

In this section, the angular wavelet analysis is applied to different case studies and the obtained results are discussed. A number of issues such as the effects of the wavelet type, focal window, and computational time are investigated. This exploratory analysis is an essential prerequisite to the application of the method since it provides the clues for the understanding of the particular features of the estimates. This section is also intended to serve as a guide for similar studies other than the one reported here. Distances are normalized to the nominal lateral sizes of the devices and angles are measured with respect to the horizontal. For the sake of completeness, the Kolmogorov-Smirnov (*K-S*) test and the pair correlation function (*g*) are also investigated. The *K-S* test is a statistical method in which the empirical cumulative distribution function (CDF) is compared with a reference CDF in order to assess or reject the null hypothesis. In spatial statistics, the empirical CDF for the location of the spots along an axis (*x* or *y* coordinate) is compared with the CDF for a CSR distribution. The null hypothesis (CSR distribution) is rejected when the *p-value* ≤ 0.05 . The *g(r)* function is related to the probability of finding a point at a distance *r* from another point. The expected value for a CSR process is $g(r) = 1$. This result is compared with the experimental $g(r)$.

A. Application of conventional tests

The BD spot distribution in a square capacitor with area $750\ \mu\text{m} \times 750\ \mu\text{m}$ [Fig. 4(a)] will be studied first. 343 BD spots were generated by means of a constant voltage stress (9 V for 120 s). The process intensity is $\lambda = 6.1 \times 10^{-4}$ spots/ μm^2 . Figure 4(b) shows the locations of the BD spots used for computation. Figures 4(c) and 4(d) show the pair correlation function *g* as a function of the generic distance *r* and the results of the Kolmogorov-Smirnov (*K-S*) test for the *x* and *y* coordinates of the points, respectively. These are conventional tools of spatial statistics. Figure 4(c) shows that the experimental *g* value fluctuates around the unity which corresponds to a CSR process. The plot also includes the 95% confidence band (shaded

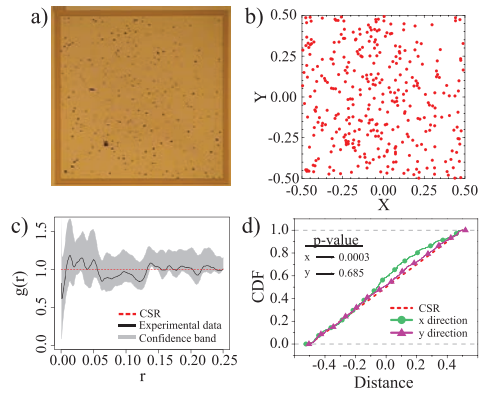


FIG. 4. (a) Photograph of a multiple BD spot distribution in a square area capacitor with size $750\ \mu\text{m} \times 750\ \mu\text{m}$. (b) Location of points in the capacitor area. (c) Pair correlation function *g* for the experimental data and for a CSR process. (d) Kolmogorov-Smirnov (*K-S*) test for the *x* and *y* directions and for a CSR process. The *p-value* obtained from the *K-S* test for each direction is indicated.

region). The obtained result indicates that the distribution of points is compatible with a homogenous Poisson process for interpoint distances in the range $r < 0.25$. Nevertheless, the *K-S* test [see Fig. 4(d)] exhibits a remarkable deviation from CSR in the *x* direction. A good matching with a Poisson process is just observed in the *y* direction as demonstrated by the high *p-value* obtained. For the *x* direction, the null hypothesis can be rejected (low *p-value*) as a large mismatch between the experimental and the theoretical cumulative distribution functions (CDF) is detected. This case study illustrates the difficulties associated with considering a single estimator for the analysis of point patterns.

B. Role played by the wavelet function

The PASSAGE2 software offers five types of wavelets for angular analysis. The Haar and the French top hat are discrete wavelets, whereas the Sine and the Mexican hat are their continuous forms, respectively. Additionally, a more complex wavelet form, the Morlet, is also available. The different wavelet bases and their mathematical expressions are described in Fig. 5. Figures 6(a)–6(e) show the results of applying the angular wavelet analysis to the device shown in Fig. 4(a). Each figure corresponds to a different wavelet basis (see the insets). The 95% confidence bands are also included in the plots. For most wavelet basis [Figs. 6(a)–6(c)], a peak in the experimental variance curve is observed at approximately 90° . The peak is somewhat above the confidence band which suggests certain degree of anisotropy. Notice that just in the case of the Morlet wavelet basis [Fig. 6(e)], the experimental variance curve is below the confidence band for all possible directions. The appearance of this peak can be ascribed to the accumulation of points in the *x* direction [Fig. 4(d)]. This feature was already detected by the *K-S* test. It is worth pointing out that despite the fact that the accumulation of spots is detected by the angular wavelet analysis, the observed peaks

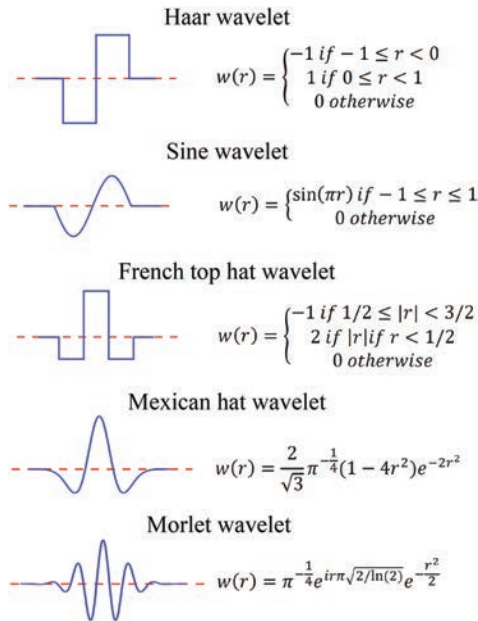


FIG. 5. Available wavelet functions in PASSAGE2 to perform the angular wavelet analysis. The scheme shows their mathematical definitions as well as their schematic representations.

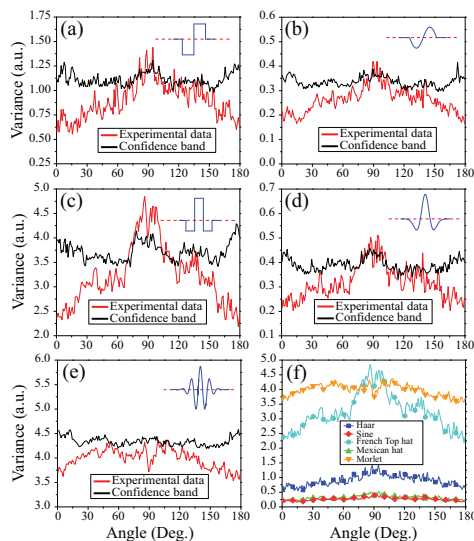


FIG. 6. Angular wavelet analysis results obtained from the point pattern shown in Fig. 4(b) with a 20% focal window and using (a) Haar, (b) Sine, (c) French top hat, (d) Mexican hat, and (e) Morlet wavelet function. The 95% confidence band is obtained after randomizing the experimental data 50 times. (f) Representation of all the experimental data results shown in Figs. 6(a)–6(e).

are not high enough to fully reject the *null* hypothesis. In order to better show the effect of each wavelet basis, the experimental variances are represented all together in a single plot [see Fig. 6(f)]. It can be observed that the Sine and the Mexican hat wavelets show the lowest variance values and that these values increase when their discrete form of the wavelet is used. Not only does the variance increase but also the sensitivity for detecting an accumulation of spots, the French top hat being the wavelet showing the highest contrast in the whole angular range. On the other hand, despite the Morlet wavelet displaying the lower contrast, it also shows the higher variance value in all directions.

C. Effect of the analysis window

In the angular wavelet analysis, the angular density of points is calculated by dividing the space into regular angular sectors around specific points. The selection of these focal points follows a criterion which consists in defining a small square area in the center of the structure with the edges as far as possible from the whole observation window (area of the device). This is necessary to avoid corner effects in the angular distributions.¹⁰ The focal window is calculated in PASSAGE2 as a percentage of the observation window. For instance, a 20% focal window corresponds to a square area 5 times smaller than the total area covered by the point pattern. In order to study the effect of the focal point locations, the point pattern illustrated in Fig. 4(b) was analyzed using different focal window sizes. Figures 7(a)–7(e) show the different angular wavelet analysis results with their corresponding 95% confidence bands. Because of its high contrast, the French top hat wavelet was used for computation. It can be seen that the shape of the confidence band strongly depends on the size of the focal window. For small focal windows [Figs. 7(a) and 7(b)], high variance peaks appear along their diagonals. As the focal window size is increased, the peaks disappear, after which new ones develop perpendicularly to the device sides [Figs. 7(d) and 7(e)]. This modification of the confidence band is attributed to the sensitivity of the analysis as a function of the focal window size in comparison with the total observation window. Importantly, for the 20% focal window [Fig. 7(c)], the confidence band is almost isotropic which discards any edge effect. Now, if we pay attention to the experimental angular distribution, a small peak rises above the confidence band around 90° which closely agrees with the results discussed earlier. Notice that the shape of the experimental variance is also affected by the size of the focal window as it happens for the confidence band [Fig. 7(f)]. However, it can be seen that the experimental variance does not increase in the 0°/180° direction as could be expected. The variance increases in the direction where the peak appears in the 90°/270° direction. This suggests that a comparison between the variances associated with the confidence band and experimental data is fundamental to assess the isotropy of the point pattern. However, in these case studies [Figs. 7(a)–7(e)], the *null* hypothesis cannot be completely rejected since the differences between the experimental variances and the confidence bands are relatively small.

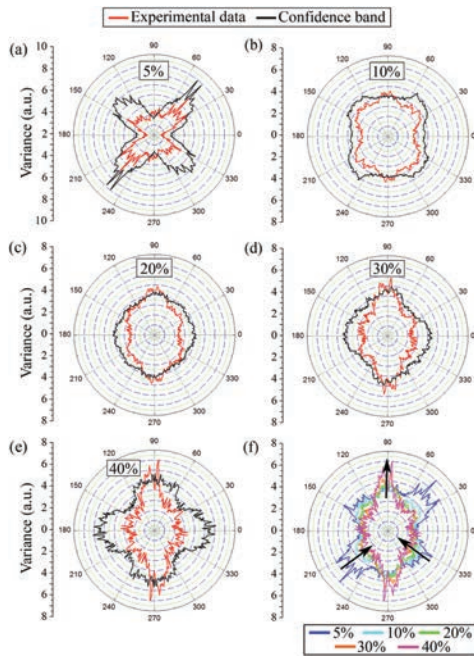


FIG. 7. Angular wavelet analysis results obtained from the point pattern shown in Fig. 4(b) using the French top hat wavelet function with (a) a 5%, (b) a 10%, (c) a 20%, (d) a 30%, and (e) a 40% focal window. The 95% confidence band is obtained after randomizing the experimental data 50 times. (f) Representation of all the experimental data results shown in Figs. 7(a)–7(e). The arrows point out the changes observed in the experimental curves when the focal window is increased.

D. Computation time

In the field of data analysis, it is not only important to have accurate estimators but it is also imperative to know the time required to achieve such results. Normally the time involved is not significant when a few points are considered. On the contrary, for a large point pattern, the computational time can be a key factor for deciding which method will be used to treat data. In the angular wavelet analysis, it is obvious that the higher the density of points, the higher the time required to perform calculations, essentially because of the increased number of focal points. Importantly, the analysis time also depends on the wavelet function considered. In order to study the time consumption as a function of the number of points and wavelet basis, point distributions were mathematically generated in a 1×1 area according to a random process. For a fixed number of points (binomial point pattern), a single distribution was generated and analyzed with the different wavelet functions. A 20% focal window was used to carry out this mathematical experiment. Figure 8 shows the normalized time required to complete the analysis. The reference time is computed for a Haar wavelet and a realization with 100 points ($t_0 = 1.4$ s). The Haar wavelet exhibits the lowest computation time. As expected, the time does not follow a linear progression with the number of

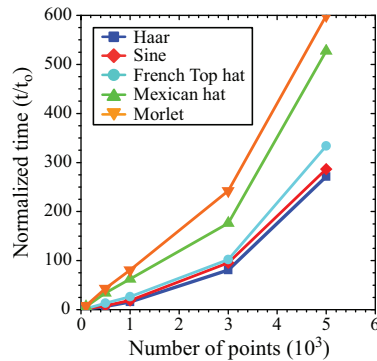


FIG. 8. Normalized time required to complete a wavelet analysis as a function of the number of total points in a 1×1 area. The computation does not include the calculus of the confidence band. The points have been mathematically generated following a binomial distribution (fixed number of points). The time required for different wavelet functions are shown. A 20% focal window was used in all the cases. The reference time ($t_0 = 1.4$ s) is the time required by the fastest analysis performed (Haar wavelet and 100 points).

points. This happens because the number of focal points also increases with the number of points. Interestingly, the time required for the analysis also increases with the complexity of the wavelet considered. Discrete wavelets, such as the Haar and French top hat, are less time consuming than their continuous counterparts, the Sine and the Mexican hat, respectively, with the Sine being faster than the French top hat. A wide time gap is also observed between the French and the Mexican hat due to the increase in complexity. In addition, and as expected, the Morlet wavelet requires the highest computational time.

V. FURTHER EXPERIMENTAL RESULTS AND DISCUSSION

Once the exploratory analysis is carried out, the next step is applying the method to different distributions of BD spots and interpreting the results. In this section, three case studies are reported. In the first case, the devices under investigation show multi-CF generation (different number of spots) obtained after applying medium to severe electrical stress. In the second case, a severely damaged device is investigated but, in this case, the location of the source of degradation (voltage probe) is taken into account. In the third case study, the effect of the aspect ratio of the device on the angular variance profile obtained by PASSAGE2 is investigated. According to what was discussed in Section IV, the angular wavelet analysis will be performed using a 20% focal window and the French top hat wavelet. As before, the 95% confidence band is calculated from the complete randomization of the spot locations.

A. Role played by the process intensity

Figure 9(a) shows a photograph of a square capacitor with area $750 \mu\text{m} \times 750 \mu\text{m}$. 275 BD spots were counted [see Fig. 9(b)] which corresponds to an intensity $\lambda = 4.89 \times 10^{-4}$ spots/ μm^2 . The pair correlation function g fluctuates around the unity

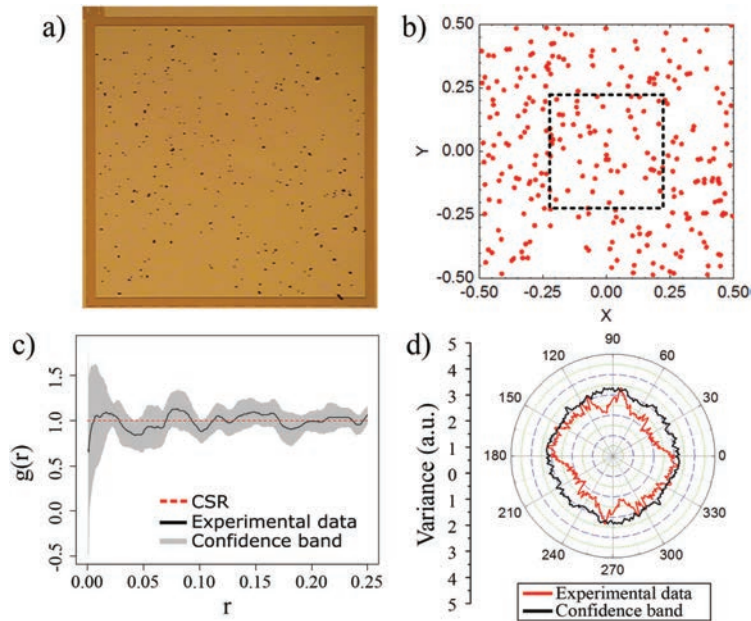


FIG. 9. (a) Photograph of a multiple BD spot distribution in a square area capacitor with size $750\ \mu\text{m} \times 750\ \mu\text{m}$. (b) Location of the spots in the capacitor area. The dotted square indicates the 20% focal window used to determine the focal points. (c) Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process. (d) Angular wavelet analysis using a 20% focal window and the French top hat wavelet function. The 95% confidence band is obtained after randomizing the experimental data 50 times.

value which indicates that the point pattern is consistent with a CSR process [see Fig. 9(c)]. As shown in Fig. 9(d), this observation is also supported by the angular wavelet method. Although some deviations from isotropy are detected, the 95% confidence band is always above the experimental variance curve for all possible directions. Figure 10 shows an example in which the number of BD spots is remarkably large. In this case, 3603 BD spots were counted, which for a device with area $500\ \mu\text{m} \times 500\ \mu\text{m}$ yields a process with intensity $\lambda = 1.44 \times 10^{-2}$ spots/ μm^2 . This is two orders of magnitude higher than the previous example. The location of all the failure sites analyzed is depicted in Fig. 10(b). A preliminary analysis using g [see Fig. 10(c)] supports the hypothesis of a CSR process for distances in the range $r < 0.25$. Notice that the confidence band is narrower than in the previous case as expected for a larger number of observations. Again, the angular wavelet analysis clearly supports the isotropy of the point distribution [Fig. 10(d)]. In this case, both the 95% confidence band and the experimental variance are almost circular and well separated.

B. Presence of the voltage probe

A question one can ask is whether it is possible to correlate the damage distribution over the structure with the location of the source of degradation, i.e., the voltage probe. This is different from the previous cases, in which the location of the probe was *a priori* unknown. The analysis is still global so that the voltage probe will not be used as a focal point. A local analysis of this problem can be found in Ref. 6. In the

experiments studied in this section, the devices have an area of $200\ \mu\text{m} \times 200\ \mu\text{m}$. However, the number of BD spots considered is radically different. In Fig. 11(a), a device with 124 BD spots and a process intensity $\lambda = 3.1 \times 10^{-3}$ spots/ μm^2 is shown. The locations of the failure sites are illustrated in Fig. 11(b). A preliminary analysis reveals that the generation of spots is consistent with a Poisson process as the $g = 1$ value is within the confidence band limits [see Fig. 11(c)]. However, a slight deviation from a CSR process is detected in the x direction of the angular variance plot [Fig. 11(d)]. This is consistent with the distribution of points illustrated in Fig. 11(b). Notice also that there is a small peak pointing out toward the voltage probe location but the peak is so close to the confidence band that the result is not conclusive. In a second example [see Fig. 12(a)], the device exhibits 456 BD spots corresponding to a process intensity $\lambda = 11.4 \times 10^{-3}$ spots/ μm^2 . Figure 12(b) shows the locations of all the failure sites analyzed. The pair correlation function g [Fig. 12(c)] suggests that the generation of BD spots is consistent with a homogenous Poisson process (shaded area). Nevertheless, the experimental g curve is slightly above unity which indicates a larger density of points than that expected for a CSR process. In this case, the angular wavelet analysis [Fig. 12(d)] reveals an accumulation of spots in the 160° direction. This result neither supports the CSR hypothesis nor the connection of the point pattern anisotropy with the voltage probe location. These two examples demonstrate the difficulties involved in trying to establish any link with the source of degradation when the number of spots is

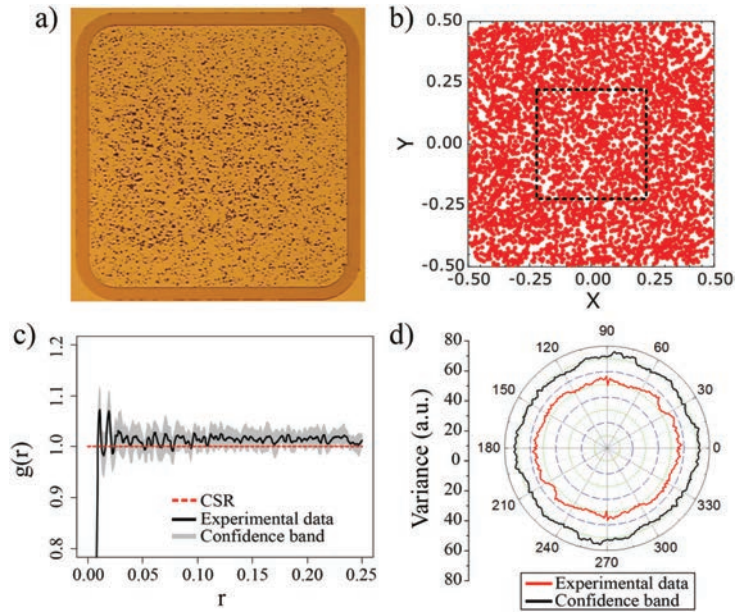


FIG. 10. (a) Photograph of a multiple BD spot distribution in square area capacitor with size $500\ \mu\text{m} \times 500\ \mu\text{m}$. (b) Location of the spots in the capacitor area. The dotted square indicates the 20% focal window used to determine the focal points. (c) Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process. (d) Angular wavelet analysis using a 20% focal window and the French top hat wavelet function.

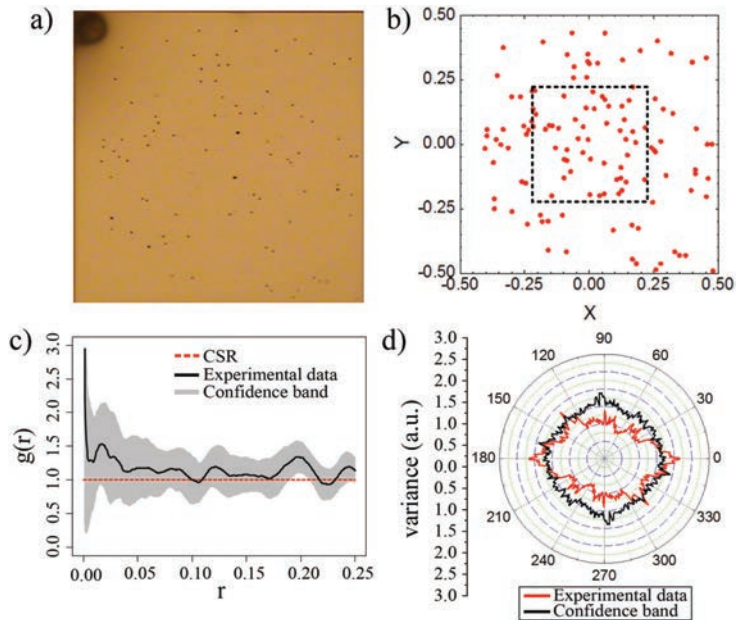


FIG. 11. (a) Photograph of a multiple BD spot distribution in a square area capacitor with size $200\ \mu\text{m} \times 200\ \mu\text{m}$. The position of the voltage probe is known (dark area at the corner of the device). (b) Location of all 124 BD spots in the capacitor area. The dotted square indicates the 20% focal window used to determine the focal points. (c) Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process. (d) Angular wavelet analysis using a 20% focal window and the French top hat wavelet function.

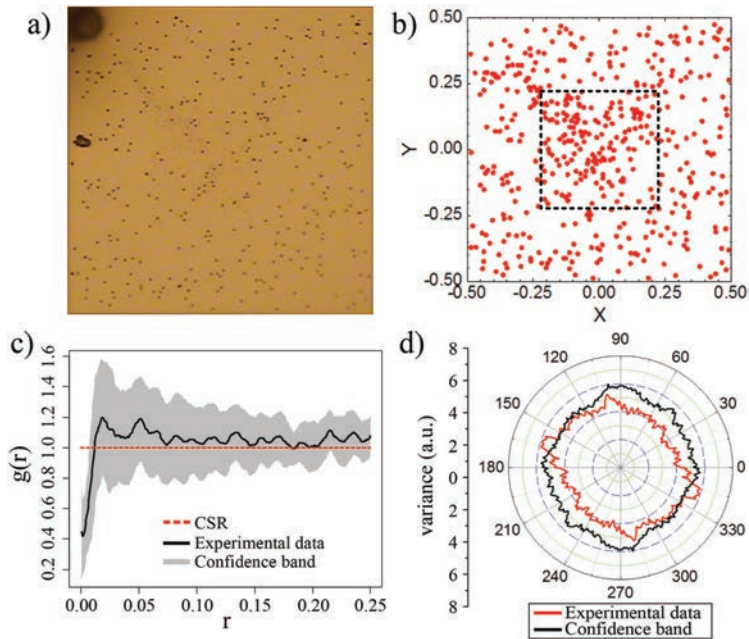


FIG. 12. (a) Photograph of a multiple BD spot distribution in a square area capacitor with size $200\ \mu\text{m} \times 200\ \mu\text{m}$. (b) Location of all 456 BD spots in the capacitor. The dotted square indicates the 20% focal window used to determine the focal points. (c) Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process. (d) Angular wavelet analysis using a 20% focal window and the French top hat wavelet function.

relatively low. In a third example, a device with a much higher number of BD spots (2055) and with severe signs of degradation is investigated [Fig. 13(a)]. The corresponding process intensity is $\lambda = 51.37 \times 10^{-3}$ spots/ μm^2 . The spots were generated using constant voltage stress (9 V for 180 s). Notice that a dark region coming out from the voltage probe and pointing out toward the center of the device is clearly visible [Fig. 13(a)]. This burned area is a consequence of the current flow distribution over the top electrode. This dark region seems to indicate that the voltage probe could have some influence on the spot generation that should be detected by the angular wavelet method. Figure 13(b) illustrates the locations of the BD spots. Figure 13(c) shows the experimental pair correlation function g and the expected value for a CSR distribution. According to these results, the BD spot distribution seems to be consistent with a Poisson process, yet some deviation can be observed. The angular plot [Fig. 13(d)] confirms that the distribution is isotropic, rejecting again the possible implication of the probe location in the distribution of the BD spots. These results are *a priori* at variance with what is observed in Fig. 13(a). The SEM image in Fig. 14 illustrates the origin of this discrepancy. Beyond the kind of spots that are under investigation (crater-like), a large amount of small defects or product debris associated with the microexplosions are detected on the top metal electrode (see the arrows). The size of these small points is in the range from 10 nm to $1\ \mu\text{m}$, and they form the darker region [Fig. 13(a)]. In all the previous examples, only the large BD spots, i.e., those strictly related to the

microexplosions were counted. This is the reason why no influence of the voltage probe is detected in the final distribution of failure sites using the standard analysis.

Nevertheless, it is worth investigating whether any kind of anisotropy can be detected by modifying the original focal window. The results are reported in Fig. 15. The confidence bands and the experimental results are illustrated in Figs. 15(a) and 15(b), respectively. As can be seen, lobes in the 45° and 135° directions appear as the size of the focal window is reduced. Despite the fact that the experimental angular variance is below the confidence band for focal windows smaller than 20%, it can be observed that the profile of the experimental curve becomes asymmetric. A slight anisotropy is detected by the angular wavelet method in the direction of the voltage probe when the focal window is reduced to 5%. In this case, not only is the *null* hypothesis rejected, as has previously been discussed, but it also indicates that the voltage probe should have some influence on the generation of BD spots. This happens because the voltage probe is located in the same direction in which the sensitivity of the method increases, making it easier for the detection of effects associated with the voltage probe location. Once again, the method reveals its usefulness, but at the same time we are reminded that a fine tuning of the analysis parameters is very important.

C. Effect of the aspect ratio of the MIM structure

In Sections V A and V B, the distribution of failure sites in square area devices was investigated. Here, the role played

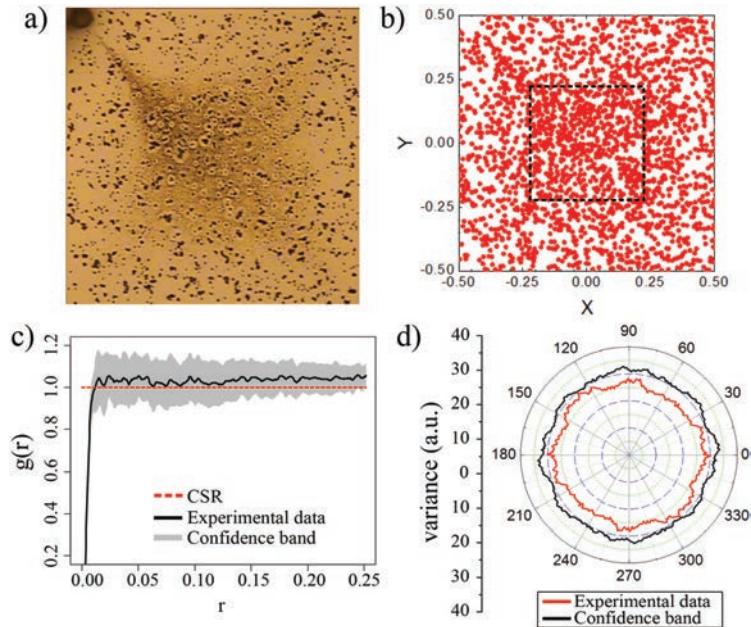


FIG. 13. (a) Photograph of a multiple BD spot distribution in a square area capacitor with size $200 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m}$ dimensions. (b) Location of all 2055 BD spots in the capacitor area. The dotted square indicates the 20% focal window used to determine the focal points. (c) Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process. (d) Angular wavelet analysis using a 20% focal window and the French top hat wavelet function.

by the aspect ratio of the structures in the angular plot will be discussed. For that purpose, two devices with different area and shape will be studied. As in the previous examples, a 20% focal window, the French top hat wavelet, and 50 iterations for the 95% confidence band are assumed. Figure 16(a) shows a photograph of the device. 138 BD spots were counted in an area of $1250 \mu\text{m} \times 800 \mu\text{m}$ which corresponds to a process with intensity $\lambda = 1.38 \times 10^{-4}$ spots/ μm^2 . The

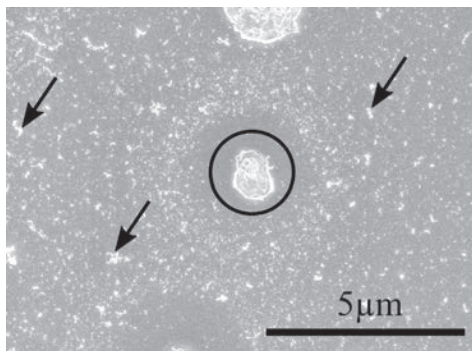


FIG. 14. SEM image of the sample shown in Fig. 13(a). A typical BD spot can be observed in the center of the image and smaller defects are pointed out with arrows. These defects are observed in the optical image [Fig. 13(a)] as a dark region coming out from the voltage probe position. The locations of these defects were not taken into account in the angular wavelet analysis.

locations of the BD spots after normalization are illustrated in Fig. 16(b). The pair correlation function g is represented in Fig. 16(c) together with its 95% confidence band. Notice that the experimental g curve fluctuates around the unity value indicating a CSR process. This is in agreement with the results obtained by the angular wavelet analysis [Fig. 16(d)] as the experimental variance does not exceed the confidence band. Notice that both curves exhibit higher variance values as the angle of analysis approaches 90° . Notice that the overall variance plot is radically different from what was observed in previous cases for square area devices. In the second example, the area of the device is $650 \mu\text{m} \times 150 \mu\text{m}$ [Fig. 17(a)]. A total of 583 BD spots were counted [Fig. 17(b)] corresponding to a process intensity of

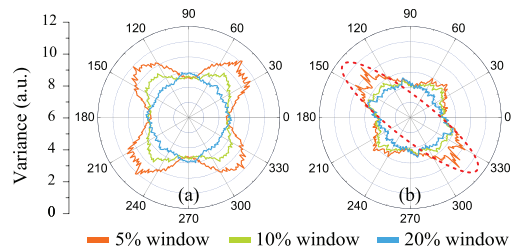


FIG. 15. (a) 95% confidence band and (b) angular wavelet analysis for the point pattern shown in Fig. 12(b) using different focal window sizes. The 95% confidence band is obtained after randomizing the experimental data 50 times.

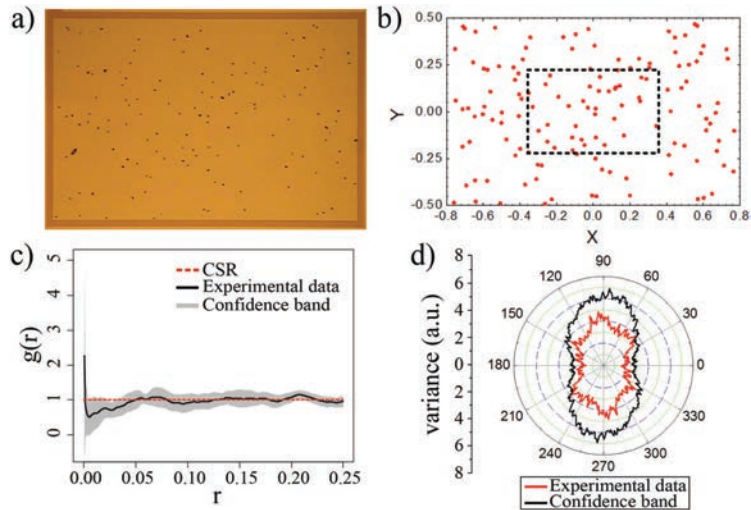


FIG. 16. (a) Photograph of a multiple BD spot distribution in a rectangular area capacitor with size $1250 \mu\text{m} \times 800 \mu\text{m}$. (b) Location of the spots in the capacitor area. The dotted rectangle indicates the 20% focal window. (c) Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process. (d) Angular wavelet analysis using a 20% focal window and the French top hat wavelet function.

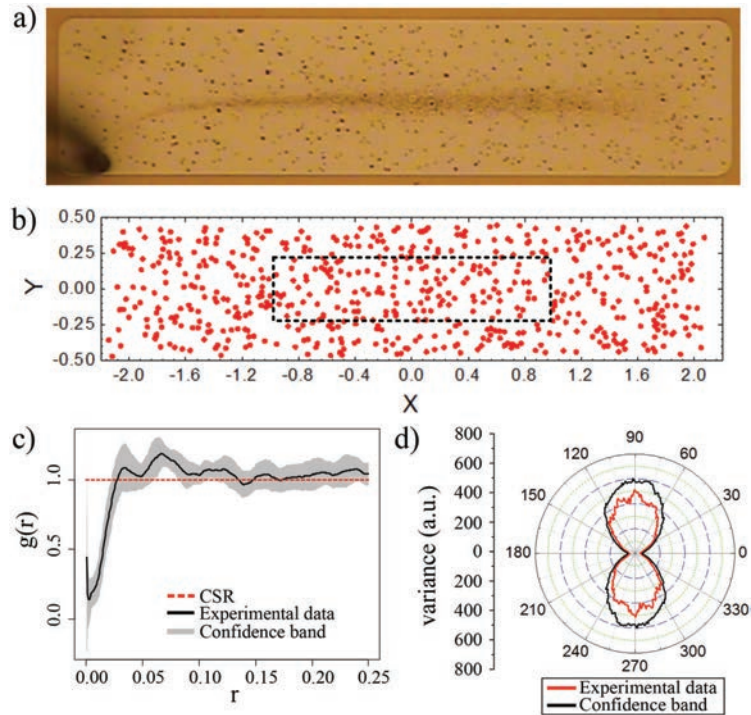


FIG. 17. (a) Multiple BD spot distribution in a rectangular area capacitor with size $650 \mu\text{m} \times 150 \mu\text{m}$. (b) Location of the spots in the capacitor area. The dotted rectangle indicates the 20% focal window. (c) Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process. (d) Angular wavelet analysis using a 20% focal window and the French top hat wavelet function.

$\lambda = 5.98 \times 10^{-3}$ spots/ μm^2 . Notice that this device is larger than the previous one and that the aspect ratio is also different. Again the experimental g value fluctuates around unity as expected for a CSR process [Fig. 17(c)]. Moreover, the angular wavelet method [Fig. 17(d)] shows no accumulation effect of spots in any particular direction. It is observed that the experimental variance curve as well as the confidence band curve shrinks at 0° and 180° . However, the narrowing effect in this case is stronger than that observed previously [Fig. 16(d)]. It is clear that the main changes in the variance occur in the direction in which the lateral dimension of the device increases. Importantly, the dimensions of the observation window also affect the values and shape of the angular variance plot. This reinforces the importance of calculating and comparing the confidence band in order to make inferences about the BD spot distribution in MIM devices.

VI. CONCLUSIONS

In this paper, the application of the angular wavelet method for assessing the generation of BD spots on the top metal electrode of large area MIM devices was investigated. The main characteristics of the method were reported as well as how the results are affected by the chosen wavelet function, focal window, number of points, etc. From this study, it was found that not only is it important to consider the values of experimental angular variance plot but it is also important to consider the associated confidence band. The French top hat wavelet and a 20% focal window were found to be the optimal combination for achieving the best outcome from the method though some variations may be required in particular situations. Using these values, BD spot distributions obtained under different conditions were investigated. The analysis performed on square devices revealed isotropic distributions of BD spots as expected for Poisson point processes. Although in most of the cases CSR was found, the angular wavelet method needs to be complemented with other second order estimates such as the pair correlation function. It was shown that under standard conditions the method is not capable of detecting the effect of the voltage probe location on the failure site distribution. However, it was possible to detect a correlation between the voltage

probe and the generation of BD spots when small focal windows were taken into account. From the analysis of rectangular area devices, it was observed how their aspect ratios significantly modify the angular plot. Finally, it is worth mentioning that the angular wavelet analysis could be particularly relevant for the reliability assessment of other large area electron devices with similar marks or point defects scattered over their surfaces.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported in part by the ENIAC Joint Undertaking under the PANACHE EU Project and the DURSI through the Generalitat de Catalunya under Grant No. 2014SGR384. E. Miranda acknowledges the support from the EU ASCENT Project (Tyndall National Institute-Ref.030).

¹A. Oates, in IEEE International Electron Devices Meeting 2003, Washington, DC, 8–10 December 2003, (IEEE, 2003), pp. 923–926.

²E. Y. Wu, J. H. Stathis, and L.-K. Han, *Semicond. Sci. Technol.* **15**(5), 425 (2000).

³E. Miranda, M. Ricio, G. De Falco, J. Blasco, J. Suñé, and A. Irace, *J. Appl. Phys.* **115**, 174502 (2014).

⁴S. Lombardo, J. H. Stathis, B. P. Linder, K. L. Pey, F. Palumbo, and C. H. Tung, *J. Appl. Phys.* **98**(12), 121301 (2005).

⁵S. Chatterjee, S. Chatterjee, Y. Kuo, J. Lu, J.-Y. Tewg, and P. Majhi, *Microelectron. Reliab.* **46**, 69–76 (2006).

⁶X. S. Mas, S. Monaghan, P. K. Hurley, J. Suñé, and E. Miranda, *IEEE Trans. Device Mater. Reliab.* **14**(4), 1080–1090 (2014).

⁷J. Illian, A. Penttinen, H. Stoyan, and D. Stoyan, in *The Homogenous Poisson Point Process in Statistical Analysis and Modelling of Spatial Point Patterns*, edited by S. Senn, M. Scott, and V. Barnett (John Wiley & Sons, England, 2008), pp. 57–97.

⁸Y.-L. Li, Z. Tökei, P. Rousset, G. Groeseneken, and K. Maex, *Microelectron. Reliab.* **45**, 1299–1304 (2005).

⁹E. Miranda, D. Jiménez, J. Suñé, E. O'Connor, S. Monaghan, I. Povey, K. Cherkaoui, and P. K. Hurley, *J. Vac. Sci. Technol., B: Microelectron. Nanometer Struct.-Process., Meas., Phenom.* **31**(1), 01A107 (2013).

¹⁰M. S. Rosenberg, *J. Veg. Sci.* **15**, 277–284 (2004).

¹¹C. K. Chui, *Wavelet Analysis and Its Applications* (Academic Press, 1992), Vol. 1.

¹²M. R. T. Dale and M. Mah, *J. Veg. Sci.* **9**, 805–814 (1998).

¹³J. Muñoz-Gorritz, S. Monaghan, K. Cherkaoui, J. Suñé, P. K. Hurley, and E. Miranda, *Microelectron. Eng.* **178**, 10–16 (2017).

¹⁴A. Baddeley and R. Turner, *J. Stat. Software* **12**, 1–42 (2005).

¹⁵M. S. Rosenberg and C. D. Anderson, *Methods Ecol. Evol.* **2**(3), 229–232 (2011).

JEM 2018

CHARACTERIZATION OF THE FAILURE SITE DISTRIBUTION IN MIM DEVICES USING ZOOMED WAVELET ANALYSIS

Characterization of the Failure Site Distribution in MIM Devices Using Zoomed Wavelet Analysis

J. MUÑOZ-GORRIZ ^{1,3}, S. MONAGHAN,² K. CHERKAOUI,² J. SUÑÉ,¹
P.K. HURLEY,² and E. MIRANDA¹

1.—Departament d'Enginyeria Electrònica, Universitat Autònoma de Barcelona, Bellaterra, Spain. 2.—Tyndall National Institute, University College Cork, Cork, Ireland. 3.—e-mail: jordi.munoz.gorriz@uab.cat

The angular wavelet analysis is applied to the study of the spatial distribution of breakdown (BD) spots in Pt/HfO₂/Pt capacitors with square and circular areas. The method is originally developed for rectangular areas, so a zoomed approach needs to be considered when the observation window does not coincide with the device area. The BD spots appear as a consequence of the application of electrical stress to the device. The stress generates defects within the dielectric film, a process that ends with the formation of a percolation path between the electrodes and the melting of the top metal layer because of the high release of energy. The BD spots have lateral sizes ranging from 1 μm to 3 μm and they appear as a point pattern that can be studied using spatial statistics methods. In this paper, we report the application of the angular wavelet method as a complementary tool for the analysis of the distribution of failure sites in large-area metal–insulator–metal (MIM) devices. The differences between considering a continuous or a discrete wavelet and the role played by the number of BD spots are also investigated.

Key words: Oxide breakdown, high-*k*, spatial statistics, wavelet analysis

INTRODUCTION

The complete dielectric breakdown (BD) of the insulating layer in a metal–insulator–metal (MIM) structure is not a desirable event since it leads to the loss of its original electrical characteristics. The phenomenon is often investigated from a reliability viewpoint.¹ This kind of analysis provides information about the quality of the materials, and in some cases can reveal the presence of weak points or areas in the devices. The BD process basically consists in the generation of a single or multiple conducting filaments (CF) spanning the oxide layer connecting the bottom and top electrodes of the device.² The application of electrical stress generates defects inside the dielectric film that accumulate until a critical point is reached. Because of the Joule heating effects involved, the top metal

electrode is locally melted,³ leading the device into the hard BD conduction regime. If energetic enough, the occurrence of this event leaves a mark on the top electrode. In large-area devices, it is possible to have multiple BD spots distributed over the entire device area.^{4,5} In order to study this phenomenon, electrical stresses such as ramped voltages for the BD strength or constant voltages for the time to BD are applied. It has been demonstrated that the methods of spatial statistics are also appropriate for investigating the distribution of BD spots in the case of multi-CF generation.⁶ The location of all the BD spots can be regarded as a point pattern that can be analyzed by means of spatial statistics techniques. A central point in this type of analysis is the comparison of estimators obtained from experimental results and those corresponding to a theoretical Poisson or complete spatial randomness (CSR) distribution with the aim of rejecting the hypothesis that both distributions are equal.⁷ This is called the null hypothesis. In principle, the generation of

(Received November 20, 2017; accepted April 10, 2018; published online May 16, 2018)

defects inside the dielectric film is completely random so that an isotropic distribution of the BD spots is expected to occur. It is possible to have an anomalous distribution of BD spots due to some hidden property related to the device fabrication method, oxide thickness nonuniformity, local variation of the dielectric permittivity value, edge effects, etc.^{6,8,9} For the analysis of the experimental distribution, different data estimators can be considered: nearest neighbor distance histogram, pair correlation function, Ripley's K function, density plots, etc. Each estimator highlights some particular feature of the point pattern. Very often several estimators are applied to the same dataset in order to elucidate whether the point pattern follows a CSR distribution or not. In this regard, there is a large interest in the statistical community in having a battery of estimators able to complementarily analyze point distributions, in our case, BD spots in MIM devices.

The angular wavelet analysis was originally proposed by Rosenberg¹⁰ and is based on the wavelet transform, a mathematical tool frequently used for signal processing and data compression.¹¹ In this method, the transform is used for analyzing the angular distribution of points with respect to a set of points chosen far from the edges of the observation window (focal points). The angular wavelet method has been used in the past for investigating geographical and ecological data.^{11,12} The method is aimed at detecting the possible accumulation of points in a specific direction and its main feature is that it is a multi-scale approach, providing alternative information than that coming from a simple angular histogram. In this paper, the angular wavelet method has been used for the analysis of two different capacitor geometries, circular and square, with strong emphasis on the former one. In a previous paper, we showed the adequacy of the method for this type of study,¹³ but the impact of a circular geometry was not thoroughly investigated. In this case, the observation window does not coincide with the device area. For circular areas, the method needs to be combined with a zoomed analysis because the software was originally developed for rectangular areas. The use of two different wavelet functions is also explored here: Haar and sine.

SAMPLES AND EXPERIMENTAL DETAILS

The devices investigated in this work are Pt/HfO₂/Pt capacitors fabricated on top of n -type Si(100) substrates. First, a 200-nm-thick thermal SiO₂ layer was grown on the Si substrate and a 200-nm-thick Pt layer was deposited over the SiO₂ layer by electron beam evaporation. A 30-nm-thick HfO₂ layer was then grown by atomic layer deposition (ALD) using TEMA₂Hf precursor and H₂O. After this, a 200-nm-thick Pt layer was deposited on top of the HfO₂ layer. Lithography and lift-off processes

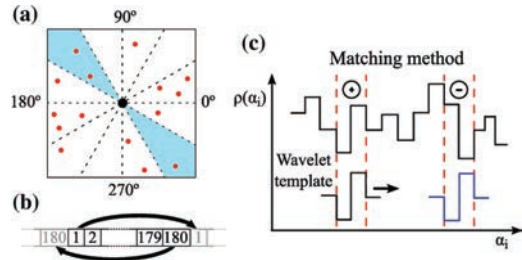


Fig. 1. (a) Division of the space around a point into angular sectors. (b) Circular transect obtained from the angular divisions in which the first and last sectors are adjacent. (c) Schematic representation of a sequence of experimental data $[\rho(\alpha_i)]$ and their corresponding wavelet matching process. The positive sign corresponds to a good matching, whereas the negative sign means a poor matching.

were used to form arrays of capacitors with different geometries. The access to the bottom Pt electrode was enabled via dry etching technique using a mask/resist process that removes the HfO₂ from the bottom Pt metal while at the same time protects the top Pt electrode of the patterned devices. The oxide layer extends 25 μm beyond the perimeter edge of the top metal electrode. The BD spots were generated using constant (9 V for a maximum of 120 s) and ramped voltage stresses (from 0 V to 12 V). The bottom electrode was always grounded and the voltage was applied to the top electrode. The BD spot patterns have been analyzed using the Spatstat¹⁴ package for the R language and the PAS-SAGE2 software.¹⁵

THE ANGULAR WAVELET METHOD

Angular wavelet analysis is a method for investigating anisotropy in point patterns.¹⁰ In this method, focal points are selected within a central square area (focal window). For each focal point, the space around it is divided into 1° sectors (see Fig. 1a). Then, the density of points $\rho(\alpha)$ in each sector is calculated and the densities from opposite sectors are merged into a single count (180 sector counts). As it can be observed in Fig. 1b, first and last sectors are considered adjacent (circular transect). Then the wavelet transform is applied to this transect. The wavelet transform consists of matching a wavelet function w to the observed data distribution $\rho(\alpha)$. Wavelets are wave-like functions that can be scaled to a given size and shifted and whose integral over all x values yields zero. In this paper a discrete function (Haar wavelet) and its continuous form (sine wavelet) are considered (Fig. 2). When good matching between the experimental value and the scaled wavelet function is achieved, the wavelet transform at that position is high (Fig. 1c). Otherwise, for a poor matching, a low value is obtained. The wavelet transform W at the position α_i for the scale b_k is expressed as:

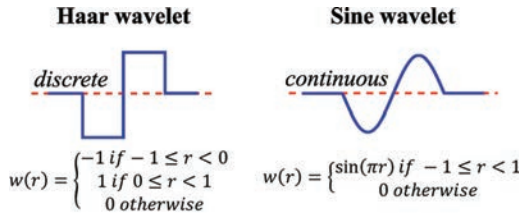


Fig. 2. Schematic representation and mathematical definitions of the Haar and sine wavelets.

$$W(b_k, \alpha_i) = \frac{1}{b_k} \sum_{j=1}^n \rho(\alpha_j) \times w\left(\frac{\alpha_j - \alpha_i}{b_k}\right) \quad (1)$$

where $\rho(\alpha)$ is the data value at the location α and n is the number of observations along the transect. Notice that 1 yields a single value for each position and scale. Then the overall variance for a given sector α_i is evaluated at different scales (b_k):

$$P(\alpha_i) = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m W^2(b_k, \alpha_i) \quad (2)$$

Expression 2 corresponds to the average of the squared wavelet transform over all possible scales (m is the total number of considered scales). In the angular wavelet method, b_k ranges from 1° to 45° in steps of 1° . $P(\alpha_i)$ is maximum when the wavelet template centered at the location α_i fits the data better than at other locations. Finally, from all the variances obtained for each focal point, the mean variance is calculated. For calculating the expected variance value for a CSR distribution, the locations of all data points are randomized N times without modifying the focal window. Each generated distribution is analyzed using the wavelet analysis and a confidence band is calculated. A point pattern with an accumulation of spots in a particular direction would exhibit a peak exceeding the confidence band limit. In this work, a 20% focal window with respect to the edges of the observation window is considered. The 95% confidence band is calculated after $N = 50$ iterations. In the supplementary information, an example which describes how the method works is presented (see Fig. S1).

EXPERIMENTAL RESULTS AND DISCUSSION

In this paper, the angular wavelet method for different capacitor geometries (square and circular) is explored. In all the samples, distances are normalized to the nominal lateral sizes of the devices and angles are measured with respect to the horizontal in the usual way. For assessing the results obtained from the angular wavelet method, two well-known estimators have been taken into

account: Ripley's K function and the pair correlation function $g(r)$. Briefly, the K function gives the average number of other points found within the distance r from a point.⁷ The experimental K value is then compared with the value corresponding to the null hypothesis [$K(r) \approx \lambda \pi r^2$], where λ is the intensity of the point pattern. $g(r)$ is related to the probability of finding a point at a distance r from another point.⁷ The expected value for a CSR process is $g(r) = 1$. This result is then compared with the experimental $g(r)$ value. It is worth pointing out that $g(r)$ is related to the derivative of the $K(r)$ function. For this reason, g is more sensitive than the K function itself.

Case Study: Square Capacitor

In Fig. 3a, the location of 271 BD spots in a square capacitor with area $1000 \mu\text{m} \times 1000 \mu\text{m}$ is shown. Notice that the area under analysis is delimited by the dotted square (device area) and that the intensity of the distribution is $\lambda = 2.71 \times 10^{-4}$ spots/ μm^2 . It can be observed that the experimental K function perfectly coincides with the expected value for a CSR process (Fig. 3b). For the pair correlation function $g(r)$, as in Fig. 3c, the experimental value takes small values for very small distances and it starts to fluctuate around the unity value for distances higher than 0.03. This indicates that the point pattern is consistent with a CSR process. Then, the angular wavelet method is applied to this distribution. To test the differences between a discrete and a continuous wavelet, the Haar and the sine wavelets (Fig. 2) are used for the analysis. Notice that the shaded region in Fig. 3a corresponds to the focal window. In Fig. 3d and e, experimental results using the Haar and sine wavelets are shown, respectively. Both angular plots indicate that the BD spot distribution is compatible with a CSR process as the variance values are within the confidence band. However, notice that that for the sine wavelet (Fig. 3e), the overall variance is significantly lower. This points out that the sine analysis is much more conservative than the Haar analysis.¹⁰ Since this device is square, a zoomed analysis is not required.

Case Study: Circular Capacitor

In Fig. 4a, a photograph of a circular capacitor with radius of $169 \mu\text{m}$ is shown. A total of 423 BD spots are counted (see Fig. 4b) which corresponds to an intensity $\lambda = 4.71 \times 10^{-3}$ spots/ μm^2 . Notice that the area under analysis (square area) differs from the device area. As a consequence of the chosen observation window, the distribution of points does not follow a CSR distribution. $K(r)$ and $g(r)$ functions (Fig. 4c and d, respectively) notably deviate from a CSR process. An aggregation of points is seemingly observed, $g(r) > 1$, which is unrealistic. Now, if the sample is analyzed using a circular observation window (Fig. 5a), $g(r)$ does not reject

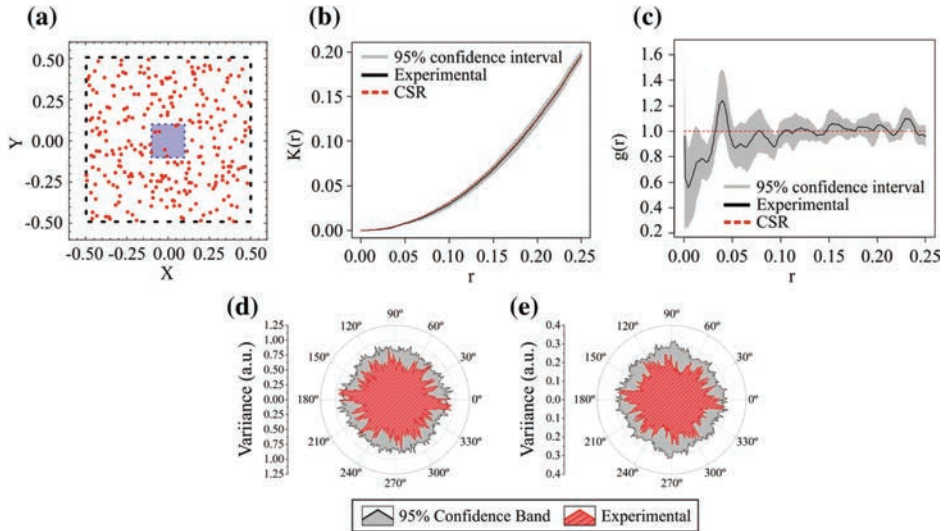


Fig. 3. (a) Location of the 271 BD points in a square area capacitor with size $1000 \mu\text{m} \times 1000 \mu\text{m}$. The dotted area is the region of analysis and the shaded region is the 20% focal window. (b) Ripley's K estimator calculated from the experimental data and theoretical curve for a CSR process. (c) Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process. (c, d) Angular wavelet analysis using a 20% focal window along with the (d) Haar wavelet and (e) sine wavelet functions. The 95% confidence band is obtained after randomizing the experimental data 50 times.

the null hypothesis (see Fig. 5b). This result illustrates the importance of considering an appropriate observation window. The outcome of using the angular wavelet analysis for the external square area is also shown in Fig. 5a. The wavelet analysis with the Haar wavelet (Fig. 5c) shows four peaks that indicate accumulation of spots. However, these results do not correspond to the actual distribution of spots as discussed before. In order to overcome this problem, a zoomed analysis needs to be performed using an inscribed square area. In Fig. 5d, e, f, g, h, i, j, k, and l, different zoomed areas have been considered. As it can be seen, for each area (Fig. 5d, g, j), the $g(r)$ function (Fig. 5e, h, and k) and the angular wavelet analysis (Fig. 5f, i, and l) were calculated. For the largest area, $g(r)$ in Fig. 5e and the angular wavelet analysis (Fig. 5f) do not reject the null hypothesis. However, as the analysis area is reduced, the overall variance of the wavelet analysis is reduced, but with higher peaks in the experimental values. $g(r)$ also exhibits a higher dispersion with larger fluctuations around the unity value. Since we are particularly interested in investigating the distribution of failure sites in circular capacitors, it is clear that the largest zoomed area is the most convenient for performing the angular wavelet analysis. Remarkably, in a previous study,⁶ it was shown that for severely damaged devices, the

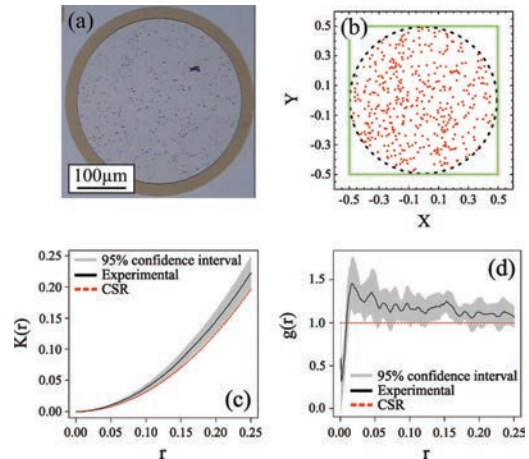


Fig. 4. (a) Photograph of multiple BD spot distribution in a circular area capacitor with a radius of $169 \mu\text{m}$. (b) Location of the 423 BD spots in the capacitor area. The squared area is the region of analysis determined by the PASSAGE2 software. The circular area is the capacitor area. (c) Ripley's K estimator calculated from the experimental data and theoretical curve for a CSR process. (d) Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process. Notice that in (c) and (d), the area analyzed is the squared area in (b).

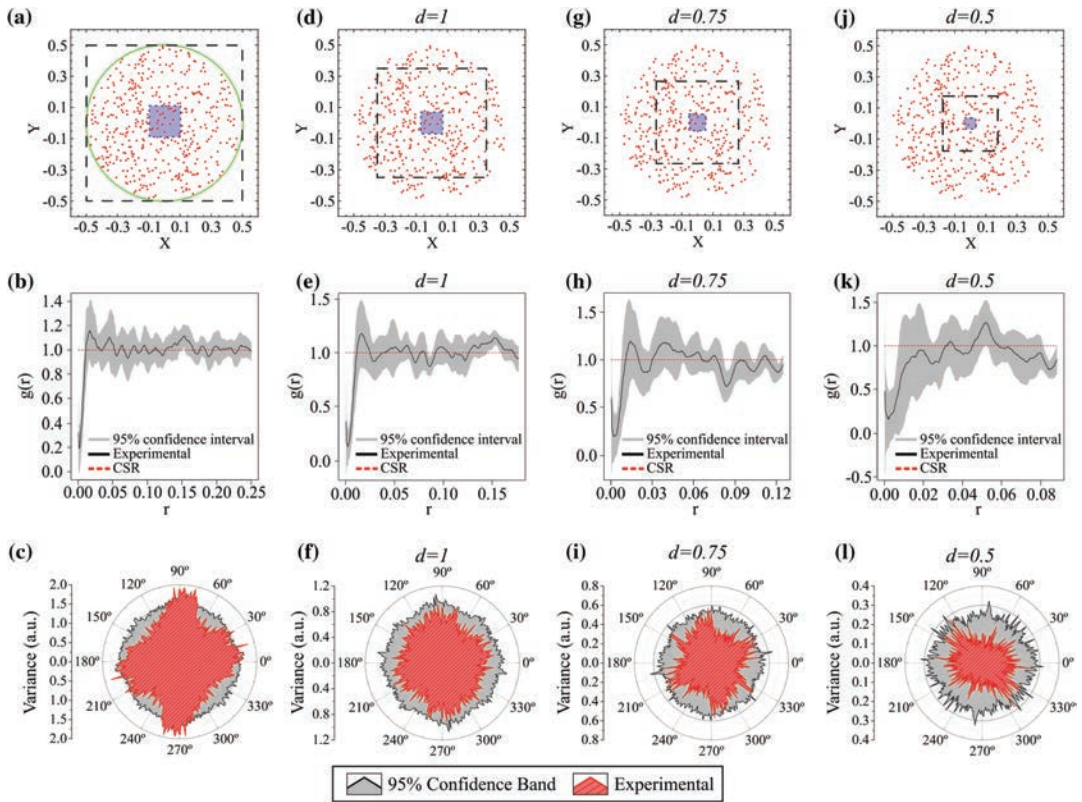


Fig. 5. (a) Location of points for the device shown in Fig. 4a. The circular area is the region studied with the pair correlation function and the squared area is the region studied with the angular wavelet analysis (c). The shaded region is the 20% focal window. (b) Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process. (c) Angular wavelet analysis using a 20% focal window and the Haar wavelet function. Area of analysis when a zoomed study is applied to the BD spots distribution shown in (a) with a zoomed area with diagonal (d) equal to (d) $d = 1$, (g) $d = 0.75$, (j) $d = 0.5$. Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process in the zoomed area when (e) $d = 1$, (h) $d = 0.75$, (k) $d = 0.5$. Angular wavelet analysis using a 20% focal window and the Haar wavelet function in the zoomed area when (f) $d = 1$, (i) $d = 0.75$, (l) $d = 0.5$. The 95% confidence band is obtained after randomizing the experimental data 50 times.

CSR hypothesis could be rejected. Using a zoomed analysis, it is possible to avoid the edge of the device and characterize the distribution of the failure sites in a region closer to the center of the structure. At the end, and as expected, the geometry of the device has no influence in the evaluation of the distribution of BD spots when the analysis is performed far from the critical regions.

To conclude, Fig. 6a illustrates a case with a larger number of BD spots. The radius of the top electrode is $169 \mu\text{m}$ and 1205 BD spots were generated (intensity $\lambda = 1.34 \times 10^{-2}$; see Fig. 6b). This is one order of magnitude higher than what was discussed before. In this device, the zoomed analysis is straightforwardly applied. In Fig. 6c, the experimental results for the angular wavelet analysis using the Haar wavelet are shown. As it can be seen, the empirical variance is within the confidence band and it is almost circular, which indicates the

distribution of points is isotropic. Notice how an increase in the number of spots yields in general a simultaneous increase of the variance plot and confidence band. This indicates that the method becomes more accurate as the number of points increases. For completeness, the experimental $g(r)$ values are shown in Fig. 6d. It can be seen that the BD spot distribution perfectly matches a Poisson distribution. As expected, the 95% confidence band is also narrower for a larger number of observations.

CONCLUSIONS

The application of the angular wavelet method for assessing the generation of BD spots on the top metal electrode of large-area MIM devices with different geometries was investigated. Also pointed out was the importance of taking into account the results of the angular method in combination with

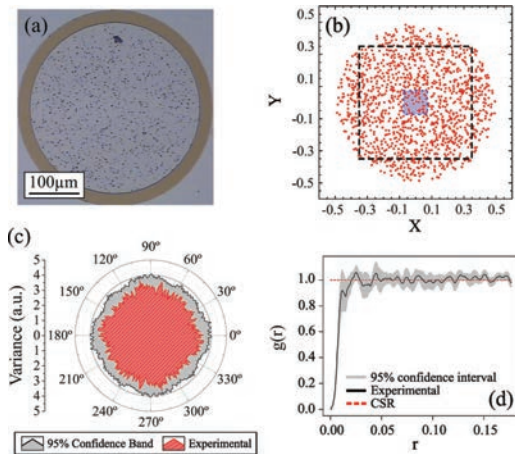


Fig. 6. (a) Photograph of the BD spot distribution in a circular area capacitor with a radius of $169 \mu\text{m}$. (b) Location of 1205 BD points in the capacitor area. The dotted area is the region of analysis applying the zoomed approach. The diagonal of the area is $\sigma = 1$ and the shaded region is the 20% focal window. (c) Angular wavelet analysis using a 20% focal window and the Haar wavelet function. The 95% confidence band is obtained after randomizing the experimental data 50 times. (d) Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process.

other second-order estimates such as the Ripley's K function or the pair correlation function. The superiority of the Haar wavelet for performing the analysis in front of its continuous form, the sine wavelet, was also demonstrated. Despite the method being directly applied in square capacitors, a zoomed analysis was considered for studying circular capacitors. The importance of the shape of the observation window with respect to the device geometry was also emphasized. Finally, it was shown that the accuracy of the obtained results is also affected by the total number of breakdown spots considered.

ACKNOWLEDGEMENTS

This work was supported by project TEC2017-84321-C4-4-R from the Ministerio de Economía, Industria y Competitividad, Spain. E. Miranda acknowledges the support from the EU ASCENT Project (Tyndall National Institute, Ref. 030).

ELECTRONIC SUPPLEMENTARY MATERIAL

The online version of this article (<https://doi.org/10.1007/s11664-018-6298-2>) contains supplementary material, which is available to authorized users.

REFERENCES

1. A. Oates, in IEDM Tech. Dig. 923 (2003).
2. E.Y. Wu, J.H. Stathis, and L.-K. Han, *Semicond. Sci. Technol.* 15, 425 (2000).
3. E. Miranda, M. Ricio, G. De Falco, J. Blasco, J. Suñé, and A. Irace, *J. Appl. Phys.* 115, 174502 (2014).
4. S. Lombardo, J.H. Stathis, B.P. Linder, K.L. Pey, F. Palumbo, and C.H. Tung, *J. Appl. Phys.* 98, 121301 (2005).
5. S. Chatterjee, S. Chatterjee, Y. Kuo, J. Lu, J.-Y. Tewg, and P. Majhi, *Microelectron. Reliab.* 46, 69 (2006).
6. X.S. Mas, S. Monaghan, P.K. Hurley, J. Suñé, and E. Miranda, *IEEE Trans. Device Mater. Reliab.* 14, 1080 (2014).
7. J. Illian, A. Penttinen, H. Stoyan, and D. Stoyan, *Statistical Analysis and Modelling of Spatial Point Patterns* (Chichester: Wiley, 2008).
8. Y.-L. Li, Zs Tökei, Ph Roussel, G. Groeseneken, and K. Maex, *Microelectron. Reliab.* 45, 1299 (2005).
9. E. Miranda, D. Jiménez, J. Suñé, E. O'Connor, S. Monaghan, I. Povey, K. Cherkaoui, and P.K. Hurley, *J. Vac. Sci. Technol. B* 31, 01A107 (2013).
10. M.S. Rosenberg, *J. Veg. Sci.* 15, 277 (2004).
11. C.K. Chui, *Wavelet Analysis and Its Applications*, Vol. 1 (San Diego: Academic Press, 1992).
12. M.R.T. Dale and M. Mah, *J. Veg. Sci.* 9, 805 (1998).
13. J. Muñoz-Gorritz, S. Monaghan, K. Cherkaoui, J. Suñé, P.K. Hurley, and E. Miranda, *Microelectron. Eng.* 178, 10 (2017).
14. A. Baddeley and R. Turner, *J. Stat. Softw.* 12, 1 (2005).
15. M.S. Rosenberg and C.D. Anderson, *Methods Ecol. Evol.* 2, 229 (2011).

ME 2019

**DETECTION OF INHIBITORY EFFECTS IN THE
GENERATION OF BREAKDOWN SPOTS IN HfO₂-
BASED MIM DEVICES**



Research paper

Detection of inhibitory effects in the generation of breakdown spots in HfO₂-based MIM devices



J. Muñoz-Gorri^{a,*}, S. Monaghan^b, K. Cherkaoui^b, J. Suñé^a, P.K. Hurley^b, E. Miranda^a

^a Departament d'Enginyeria Electrònica, Universitat Autònoma de Barcelona, Spain

^b Tyndall National Institute, University College Cork, Cork, Ireland

ARTICLE INFO

Keywords:
Oxide breakdown
Reliability
MIM
Spatial statistics

ABSTRACT

In this work, the connection between the generation of catastrophic breakdown (BD) spots in metal-insulator-metal capacitors with a high-permittivity dielectric film (HfO₂) and their spatial distribution was investigated. To gain insight into this issue, large area devices (10⁴ μm²) were constant voltage stressed at high electric fields (3.5 MV/cm) with the aim of generating a large number of spots in a single device. The set of BD spots was analysed as a point pattern with attributes (their sizes) using the methods of spatial statistics. Our study reveals that beyond the visible damage on the top metal electrode, the spots exhibit soft inhibitory regions around them where the creation of new spots is less likely. The origin of these inhibitory regions is ascribed to structural modifications of the dielectric layer in the vicinity of the spots caused by the huge thermal effects occurring at the very moment of the BD event.

1. Introduction

When electrically stressed, defects are randomly generated within the insulating layer of capacitor-like devices such as metal-insulator-metal (MIM) and metal-insulator-semiconductor (MIS) structures. This generation of defects ultimately leads to the destruction of the device because of the formation of a short across the dielectric that enables an uncontrolled flow of electrons between the top and the bottom electrodes (see Fig. 1). Since this process is associated with Joule heating effects, a huge amount of thermal energy is dissipated in a very tiny area, producing a local microexplosion with the consequent evaporation of the electrodes. This event is often referred to as hard or catastrophic breakdown (BD) and is linked to irreversible changes in the physical and electrical properties of the devices [1]. The final result is the appearance of a mark on the top metal layer visible by means of an optical microscope [2]. The study of this kind of phenomenon (time-to-BD, localization of failure sites, etc.) is crucial for a given technology since it provides valuable information about its reliability aspects [3].

The study of the BD phenomenon in oxide films usually involves electrical measurements exclusively and relies on the analysis of the occurrence of single BD events in a large set of devices. However, in previous works we showed that when multiple events are observed in a single device, spatial statistics provides suitable methods for characterizing the spatial distribution of the damage occurring both in MIM

and MIS structures [2,4,5]. In the case of large area devices, it is possible to have a large number of BD spots per device so that the set of marks can be collectively treated as a point pattern (position) with attributes (size). The connection between the location and the attribute can also be explored using the methods of spatial statistics [6]. Very often a Poisson or complete spatial randomness (CSR) model is assumed for the distribution of marks over the structure area. This is consistent with the Weibull-type time-to-failure distribution obtained from a large number of small area devices. In this work, we have investigated up to what extent the hypothesis of CSR holds for severely damaged devices. To this end, devices with large area (10⁴ μm²) and high electric fields (3.5 MV/cm), like the ones used in this work are imperatively required. Deviations from a CSR distribution would indicate that the generation of BD spots is not completely random for such levels of degradation [7]. Recall that this is a problem related to the observation area (in general the device area) and to the density of spots in that area as well. In addition, not only the location of the spots was investigated in this work but also their sizes. This kind of analysis requires high accuracy both in the determination of the location of the BD event and also in the estimation of its area which may be affected by censoring effects related to the size of the observation window (this issue is not discussed here). Here, we report a remarkable feature of the BD spot pattern in MIM devices. We have observed that catastrophic BD events generate regions around them that statistically prevent the appearance of new BD spots

* Corresponding author.

E-mail address: jordi.munoz.gorri@uab.cat (J. Muñoz-Gorri).

<https://doi.org/10.1016/j.mee.2019.111023>

Received 21 May 2019; Accepted 28 May 2019

Available online 29 May 2019

0167-9317/ © 2019 Elsevier B.V. All rights reserved.

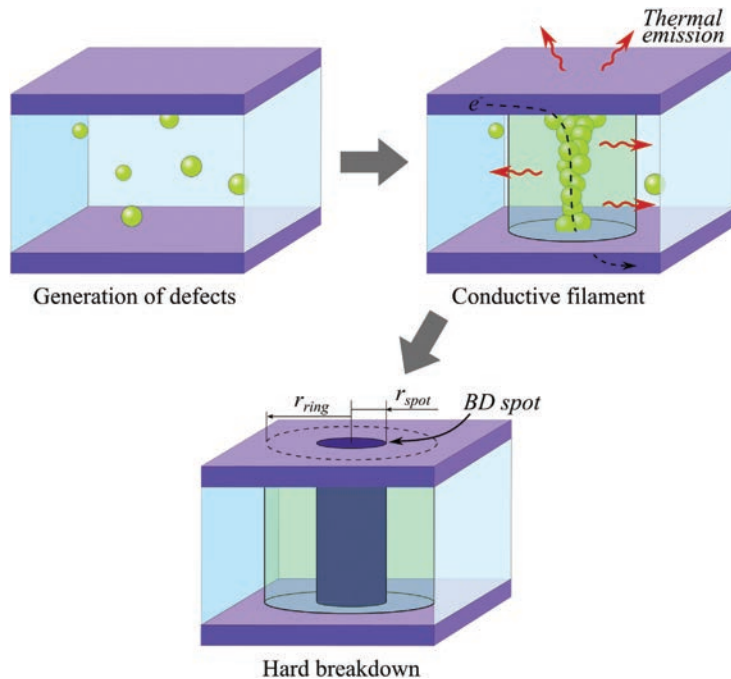


Fig. 1. Schematic representation of the BD spot generation. First, defects are randomly generated within the dielectric layer. Then a percolation path is formed, and a high thermal energy is released. Finally, the top electrode melts leaving a mark on the top metal electrode.

in their vicinity. This inhibitory effect seriously questioned the hypothesis of a CSR model in case of severely damaged devices.

2. Devices and experimental setup

The MIM devices investigated in this work are square area Pt/HfO₂/Pt structures with a 30 nm-thick insulator layer. These capacitors were fabricated on n-type Si (100) substrates with resistivity of 1–4 Ω·cm. Detailed steps about the fabrication process can be found in [2]. For measurements, the bottom electrode was grounded while a constant negative voltage was applied to the top electrode. Constant voltage stress (CVS) at -10 V was applied to the device for $t = 65$ s and its progressive degradation image (generation of spots) was recorded using an optical microscope. After the degradation phase, the top electrode surface was inspected by means of a scanning electron microscope (SEM) and by an atomic force microscope (AFM) in order to capture the details of the BD spots. The location and size of the spots were obtained from the videos recorded during the stress using MATLAB routines for image analysis. Subsequently, this information was processed using the Spatstat package for the R language [8].

3. Results and discussion

Fig. 2 shows a sequence of photographs ($150\ \mu\text{m} \times 150\ \mu\text{m}$) corresponding to the degradation process of the top metal layer of a device during the application of a CVS. These images were extracted from a video (see Supplementary Information: video 1). At the beginning, the BD spots appear distributed over the whole device area. However, as the degradation proceeds, burning effects appear on the already damaged electrode. The burned area increases with the stress time. During this phase, a kind of ring is generated around the previously generated spots. These rings are not evident before the burning stage and become

visible as the burning effects take place (see arrows 1 and 2). Notice that the size of the ring does not increase with the stress but it remains constant. This indicates that some structural modification occurred in the regions around the spots that reduce the surface current density in their vicinity, reducing in turn the burning effects. Similar effects around BD spots were also reported by Cester *et al* [9]. We postulate that the high temperatures reached previously or at the very moment of the local evaporation of the electrode are responsible for remarkable and irreversible structural changes in the dielectric layer [10], probably a crystallization of the material. In order to quantify this observation, a statistical characterization of the BD sites using different estimators was carried out. For the sake of simplicity, the spots and their associated rings are considered as circles with radius r_{spot} and r_{ring} , respectively. The distance between the centers of the spots is also considered and it is referred to as d_{CC} (center-to-center) (see Fig. 3a). In case of spot inhibition in the ring region, the number of spots generated in that region should be much lower than the number of spots generated in its surroundings (see Fig. 3b).

Fig. 4a shows the distribution of spots for the device illustrated in Fig. 2 after a 15 s stress. The location of the failure sites is shown in Fig. 4b. Notice that the spots which are not completely inside the observation window in Fig. 2a were not considered for the analysis. In Fig. 4c, the empty-space distance map for the region enclosed by the dashed line in Fig. 4b is represented. In this plot, the distance from a given pixel to its nearest spot is represented in a color scale. A small gap between the spots can be observed. The nearest neighbour function $G(r)$ (see Fig. 4d) evaluates the distance between nearest spots, i.e. it gives the cumulative distribution of the distance from a typical point of the distribution to its nearest other point. When compared with a CSR process, the experimental $G(r)$ exhibits lower values than what is theoretically expected for distances shorter than $6\ \mu\text{m}$. Statistically speaking, this means that the generation of spots in this region is less

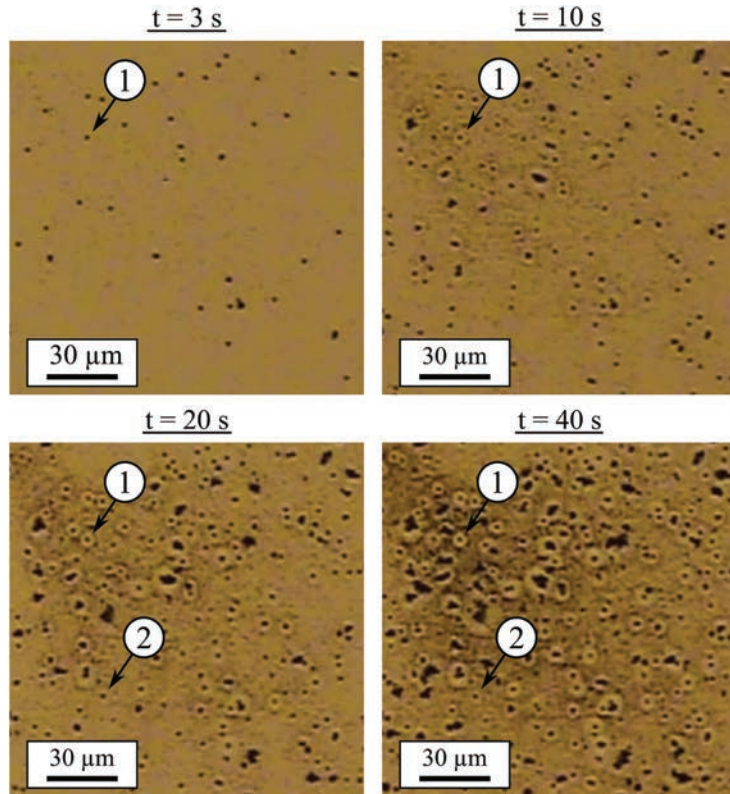


Fig. 2. Optical zoom-in images of the top electrode of a Pt/HfO₂/Pt device during the application of -10 V for different degradation times. The size of the images is $150 \mu\text{m} \times 150 \mu\text{m}$.

likely than for a Poisson distribution. In fact, $G(r)$ is zero for distances shorter than $2.7 \mu\text{m}$ meaning that there are no spots closer than that distance. This is confirmed by the histogram plot for the distance between nearest neighbour spots (Fig. 4e) as there are no spots in a distance shorter than $2.5 \mu\text{m}$. Importantly, the histogram for the size of the spots is shown in Fig. 4f. As can be seen, the size of the spots ranges between $0.5 \mu\text{m}$ and $1.5 \mu\text{m}$.

In order to compare the inhibition region detected by statistical techniques and the ring structures generated when the device is burned, the size of the rings were measured. In Fig. 5a, a SEM image of the distribution of BD spots is shown. As can be seen in the SEM image the burned region observed in the optical images (Fig. 2) is formed by small defects that are not present in the ring structure close to the spots. From the SEM image, the size of the rings is estimated by defining a circle in the image (see Fig. 5b) around each spot where the ring is clearly visible. According to our observations, r_{ring} ranges from $2.3 \mu\text{m}$ to $6.1 \mu\text{m}$ with an average value of $3.5 \mu\text{m}$. Notice that this value is within the range where the distribution in Fig. 4d shows a deficient number of spots ($6 \mu\text{m}$), supporting the idea that the generation of spots in the ring region is less likely than for a Poisson distribution. This means that some physical modification of the structure occurs around the BD spots when they are generated. In order to identify whether this modification is associated or not with a deformation of the top metal layer, a topographic AFM characterization of the spots was performed (see Fig. 5c). As can be seen, there is no alteration of the metal layer outside the crater-like region, meaning that the origin of the inhibition ring might

be a consequence of a process that occurred in the dielectric layer and the interaction with the current lines in the top metal layer responsible for the burning effects.

In order to elucidate if the results reported above are only valid for burned devices, a statistical characterization of a BD spot distribution obtained from a non-burned capacitor was carried out (see Fig. 6). In this case, a CVS at -9.5 V was applied. Fig. 6a shows the distribution of spots obtained on the top electrode after a 65 s stress (see Supplementary information: video 2). In order to compare the results, the same image dimensions were considered ($150 \mu\text{m} \times 150 \mu\text{m}$). The location of the spots shown in Fig. 6a is represented in Fig. 6b. As in the previous case (Fig. 3), incomplete spots were removed from the analysis. If we pay attention to $G(r)$ (Fig. 6c), we observe that there are no BD spots closer than $2.2 \mu\text{m}$ and that for distances up to $7.2 \mu\text{m}$ the generation of spots is lower than expected for a CSR distribution. In this case also the inhibition distance is found to be in the range of the ring size. Notice that the ring cannot be visually detected as the device do not exhibit burning effects. Finally, in Fig. 6d the histogram for the size of the spots is illustrated. The size of the spots ranges from $0.5 \mu\text{m}$ to $0.8 \mu\text{m}$, which is a range lower than previously found (Fig. 4f). We believe that this is a consequence of using a lower stress voltage.

4. Conclusions

In this paper, the generation of soft-inhibition regions around catastrophic BD spots is reported for Pt/HfO₂/Pt devices. This observation

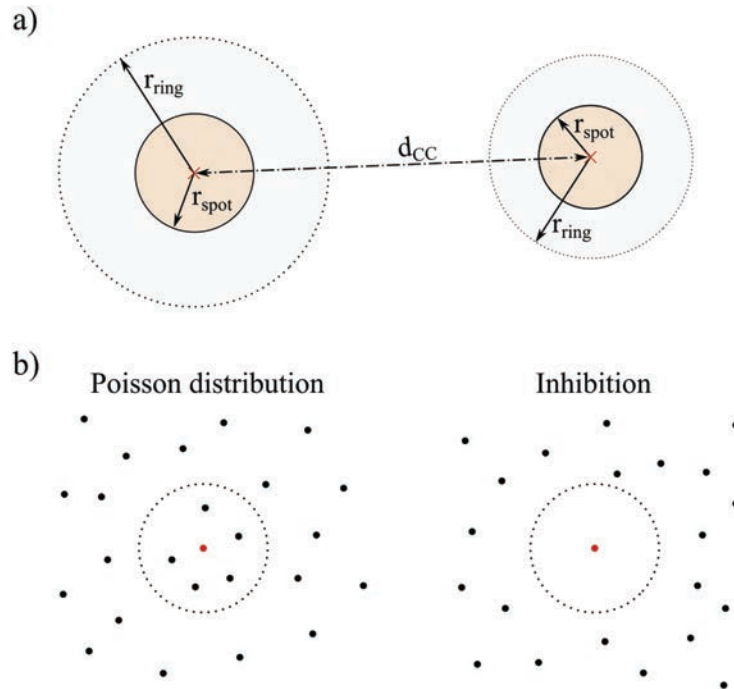


Fig. 3. Schematic representation of (a) the distances investigated and (b) the meaning of the inhibitory effect.

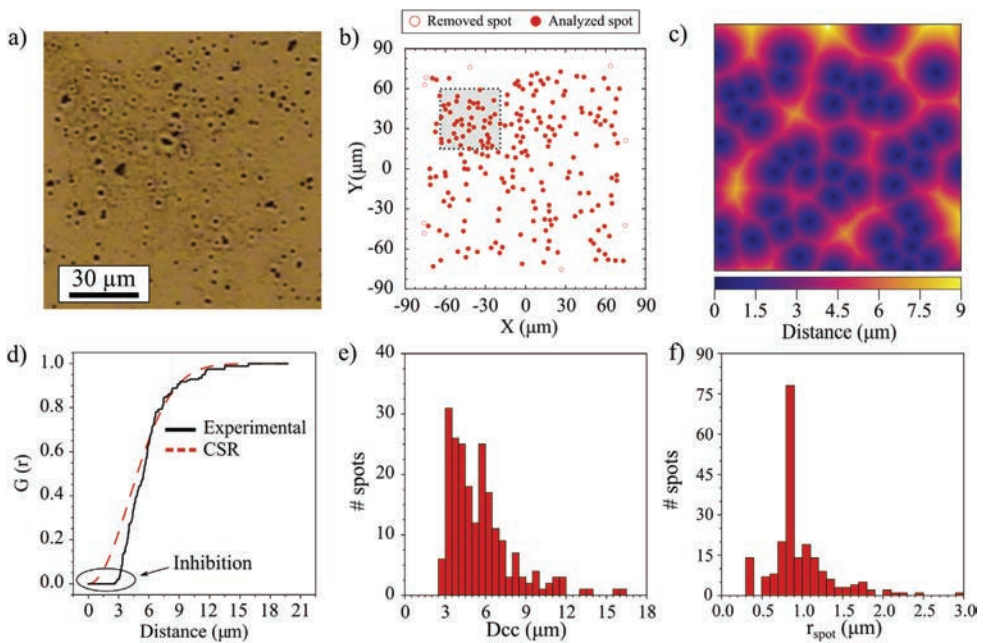


Fig. 4. (a) Optical image of the device shown in Fig. 2 after a CVS of 15 s. (b) Location of the spots shown in (a). The spots that are outside the observation window are not considered in the analysis. (c) Empty-space distance map for the region marked in (b). (d) Nearest-neighbour function G for the experimental data and for a CSR process. Histogram for (e), the distance between nearest neighbours and (f), the radius of the spots.

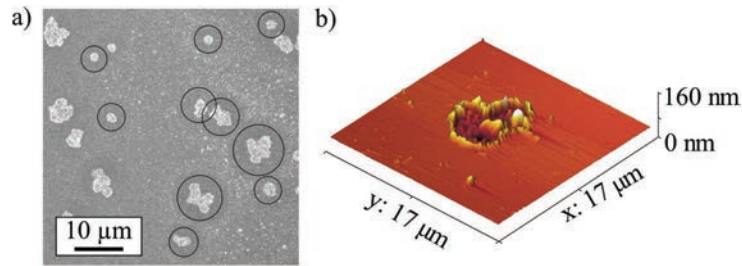


Fig. 5. (a) SEM image of the top electrode after the application of a CVS. (b) AFM image of the BD spots showing no alteration of the metal layer outside the crater-like region.

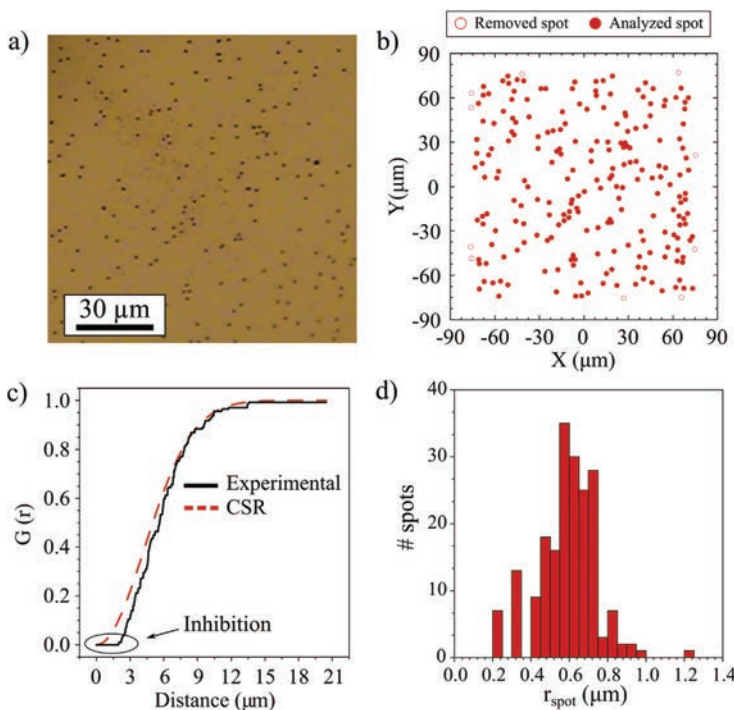


Fig. 6. (a) Optical zoom-in image of a device after a CVS of 65 s. The size of the image is $150 \mu\text{m} \times 150 \mu\text{m}$. (b) Location of the spots shown in (a). The spots that are outside the observation window are not considered in the analysis. (c) Nearest-neighbour function G for the experimental data and for a CSR process. (d) Histogram for the radius of the spots.

seriously questions the CSR hypothesis for the generation of multiple spots in a single area, at least for severely damaged devices. It seems that the inhibitory effect arises from the structural modification of the dielectric film in the vicinity of the spot caused by the huge thermal effects. The effect only becomes observable when burning effects take place in the degraded metal electrode.

Supplementary data to this article can be found online at <https://doi.org/10.1016/j.mee.2019.111023>.

Acknowledgements

The authors acknowledge project TEC2017-84321-C4-4-R, Ministerio de Economía, Industria y Competitividad, Spain.

Conflict of interests

There are no conflict of interests.

References

- [1] A.S. Oates, Reliability issues for high-k gate dielectrics, *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 2003, pp. 923–926.
- [2] J. Muñoz-Gorri, S. Monaghan, K. Cherkaoui, J. Suñé, P.K. Hurley, E. Miranda, Exploratory study and application of the angular wavelet analysis for assessing the spatial distribution of breakdown spots in Pt/HfO₂/Pt structures, *J. Appl. Phys.* 122 (21) (2017) 215304, <https://doi.org/10.1063/1.5000004>.
- [3] E.Y. Wu, J.H. Stathis, L.-K.K. Han, Ultra-thin oxide reliability for ULSI applications, *Semicond. Sci. Technol.* 15 (5) (2000) 425–435, <https://doi.org/10.1088/0268-1242/15/5/301>.
- [4] J. Muñoz-Gorri, S. Monaghan, K. Cherkaoui, J. Suñé, P.K. Hurley, E. Miranda, Characterization of the failure site distribution in MIM devices using zoomed wavelet analysis, *J. Electron. Mater.* 47 (9) (2018) 5033–5038, <https://doi.org/10.1007/s11664-018-6298-2>.
- [5] X.S. Mas, S. Monaghan, P.K. Hurley, J. Suñé, E. Miranda, Failure analysis of MIM and MIS structures using point-to-event distance and angular probability distributions, *IEEE Trans. Device Mater. Rel.* 14 (4) (2014) 1080–1090, <https://doi.org/10.1109/TDMR.2014.2369377>.
- [6] A. Baddeley, E. Rubak, R. Turner, *Spatial Point Patterns: Methodology and Applications with R*, Chapman and Hall/CRC, 2015.

- [7] J. Illian, A. Penttinen, H. Stoyan, D. Stoyan, *Statistical Analysis and Modelling of Spatial Point Patterns* 47 (4) (2005) John Wiley & Sons, Ltd; Chichester, UK.
- [8] A. Baddeley, R. Turner, spatstat: an R package for analyzing spatial point patterns, *J. Stat. Softw.* 12 (6) (2005), <https://doi.org/10.18637/jss.v012.i06>.
- [9] A. Cester, A. Paccagnella, G. Ghidini, S. Deleonibus, G. Guegan, Collapse of MOSFET drain current after soft breakdown, *IEEE Trans. Device Mater. Reliab.* 4 (1) (2004) 63–72, <https://doi.org/10.1109/TDMR.2003.820296>.
- [10] S. Kumar, Z. Wang, X. Huang, N. Kumari, N. Davila, J.P. Strachan, D. Vine, A.L.D. Kilcoyne, Y. Nishi, R.S. Williams, Oxygen migration during resistance switching and failure of hafnium oxide memristors, *Appl. Phys. Lett.* 110 (10) (2017) 103503, , <https://doi.org/10.1063/1.4974535>.

TDMR 2019

ASSESSING THE CORRELATION BETWEEN LOCATION AND SIZE OF CATASTROPHIC BREAKDOWN EVENTS IN HIGH-K MIM CAPACITORS

Assessing the Correlation Between Location and Size of Catastrophic Breakdown Events in High-K MIM Capacitors

J. Muñoz-Gorriz¹, D. Blachier, G. Reibold, F. Campabadal¹, J. Suñé, S. Monaghan², K. Cherkaoui, P. K. Hurley, and E. Miranda¹

Abstract—The connection between the spatial location of catastrophic breakdown spots occurring in metal-insulator-metal capacitors with a high-permittivity dielectric film (HfO_2) and their respective sizes is investigated. Large area structures (10^4 – $10^5 \mu\text{m}^2$) are used for this correlation assessment since, for statistical considerations, a large number of spots in the same device is imperatively required. The application of ramped or constant voltage stress across the capacitor generates defects inside the dielectric that result in the formation of multiple failure sites. High power dissipation takes place locally, leaving a permanent mark on the top electrode of the device. The set of marks constitutes a point pattern with attributes that can be analyzed from a statistical viewpoint. The correlation between the spot locations and their sizes is assessed through the mark correlation function and the method of reverse conditional moments. The study reveals that for severely damaged devices, there exists a link between the spot location and size that leads to a short range departure from a complete spatial randomness (CSR) process. It is shown that the affected region around each failure site is actually larger than the visible area of the spot. A structural modification of the dielectric layer in the vicinity of the spot caused by the huge thermal effects occurring just before the microexplosion might be the reason behind this extension of the damage.

Index Terms—High-K, reliability, oxide breakdown, spatial statistics.

I. INTRODUCTION

THE BREAKDOWN (BD) of the oxide layer in metal-insulator-metal (MIM) and metal-insulator-semiconductor (MIS) structures is an unwanted event that, depending on its magnitude, can affect the electrical properties of the devices to different extents [1]. In the vast majority of the studies devoted to this issue, the origin and consequences

associated with the occurrence of a single failure event per device is investigated. Very often, the study of single BD events in MIS and MIM structures exclusively relies on electrical measurements. Depending on the magnitude of the BD event, the failure mode is classified as soft or hard breakdown [2], [3]. By applying ramped or constant current/voltage stress to a large number of devices it is possible to obtain statistical information on the BD strength or the time/injected charge-to-BD, which is frequently used in reliability analysis to qualify a given technology [4]. However, generation of multiple BD events ($N > 10$) in the same device is seldom investigated because, as the total leakage current increases, the actual potential drop across the device considerably decreases because of the series resistance effect. As a consequence, although the electrical stress becomes less effective in what concerns with the generation of new failure sites, the already created defects can evolve because of the thermal effects. In some cases, correlation effects among the BD spots were demonstrated to impact on the lifetime projection of MIS devices [5]. Here, we are interested in elucidating whether the location and size of the BD spots are to some extent interrelated. The BD phenomenon basically consists in the formation of a short or conductive filament (CF) across the dielectric film that allows an uncontrolled flow of electrons between the top and bottom electrodes. According to the percolation theory of dielectric BD, the CF arises as the result of a critical density of defects accumulated at certain regions of the oxide film [6], [7]. Once the CF is established, a huge amount of thermal energy is released due to Joule heating effects occurring in a tiny area. Under this circumstance, the temperature increase can be so large that the top metal electrode blows up producing an irreversible damage to the structure. This is sometimes called hard BD with lateral propagation [8]. The ultimate consequence of this process is a mark on the top electrode that can be easily detected through an optical microscope [9]. In large area devices, such as the ones investigated in this work, several BD spots of this kind appear, and which can be collectively treated as a point pattern.

In previous works, we showed that the methods of spatial statistics are suitable for investigating the distribution of BD spots in MIM and MIS structures [10]–[12]. In spatial statistics, estimators are directly calculated from the experimental data and are compared with the corresponding theoretical

Manuscript received March 19, 2019; accepted May 10, 2019. Date of publication May 15, 2019; date of current version June 5, 2019. This work was supported by MINECO, Spain, under Project TEC2017-84321-C4-4-R. (Corresponding author: J. Muñoz-Gorriz.)

J. Muñoz-Gorriz, J. Suñé, and E. Miranda are with the Departament d'Enginyeria Electrònica, Universitat Autònoma de Barcelona, 08193 Cerdanyola del Vallès, Spain (e-mail: jordi.munoz.gorriz@uab.cat).

D. Blachier and G. Reibold are with Silicon Components Division, CEA-LETI, 38054 Grenoble, France.

F. Campabadal is with the Institut de Microelectrònica de Barcelona IMB-CNM, CSIC, 08193 Cerdanyola del Vallès, Spain.

S. Monaghan, K. Cherkaoui, and P. K. Hurley are with Micro/Nano Systems Centre, Tyndall National Institute, Cork, T12R5CP Ireland.

Color versions of one or more of the figures in this paper are available online at <http://ieeexplore.ieee.org>.

Digital Object Identifier 10.1109/TDMR.2019.2917138

values for a Poisson or complete spatial randomness (CSR) process [13]. In principle, the distribution of BD spots on the top electrode of a device is expected to follow a Poisson process since the generation of defects inside the dielectric is completely random. However, deviations arising from the particularities of the fabrication process, local variations of the oxide permittivity value, or edge effects can occur. In general, each statistical estimator highlights some specific feature of the point distribution. Thus a complete understanding of the problem under investigation can only be achieved by assessing and comparing the results obtained with different estimators [10]. In the field of spatial analysis not only the location of the points is of interest but also the value of one or more attributes attached to each point of the pattern. In our case, the attribute to be analyzed is the size of the spots (a continuous attribute). To the best of our knowledge, the correlation between the BD spot locations in MIM devices and their sizes is explored for the first time. This requires the characterization of many failure events occurring in a single device with a high optical resolution. In a first approach, the location of the spots is analyzed using a second order statistical estimator such as the pair correlation function with the objective of testing the CSR hypothesis. In a second approach, the connection between the location and size of the spots is investigated through more sophisticated tools of spatial statistics analysis such as the mark correlation function and the method of reverse conditional moments. We also focus the attention on the regions around the spots since they exhibit remarkable features. This is investigated combining SEM, CAFM and infrared images of the generated spots. This paper is organized as follows: in Section II, the fabrication process of the devices under study is presented. The experimental conditions used for generating the spots are described as well as the equipment and methods considered for analyzing the damaged devices. In Section III, the procedure used for extracting the location and area of the spots from the optical images and videos is explained. The correlation between the size and location of the BD spots for square and circular area capacitors is investigated in Section IV. The long term consequences of the degradation process in our devices is also discussed. Finally, in Section V, the damage generated around the crater-like structure of a single spot is explored by combining finite-element simulations with thermal images. It is shown that the device region around the visible spot also experiments some kind of modification which in turn affects the occurrence of the new generated failure sites. In Section VI, the conclusions of this work are presented.

II. EXPERIMENTAL DETAILS

Circular and square Pt/HfO₂/Pt capacitors with areas ranging from $4 \cdot 10^4$ to $10^6 \mu\text{m}^2$ were investigated. The devices were fabricated on top of an n-type Si (100) substrate. First, a 200 nm thick SiO₂ layer was grown to electrically isolate the substrate from the devices. Then, a 200 nm thick Pt layer was deposited by electron-beam evaporation and a 30 nm thick HfO₂ layer was grown by Atomic Layer

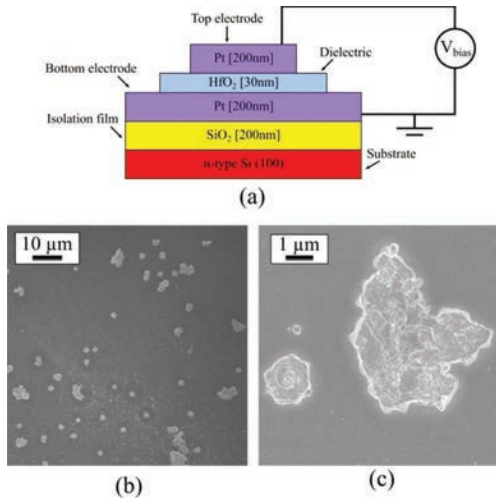


Fig. 1. (a) Schematic representation of the device structure and measurement setup. (b) SEM image of the BD spots generated over the top metal electrode after a voltage stress. (c) Zoomed-in SEM image of some BD spots.

Deposition (ALD) technique using TEMAHf and H₂O as precursors. The equipment used to apply the ALD technique was a Cambridge NanoTech Fiji ALD system. Afterwards, a 200 nm thick Pt layer was deposited on the HfO₂ layer using the lift-off technique allowing the definition of different top electrode geometries. Finally, the access to the bottom Pt electrode was enabled via the dry etching technique. A mask/resistor process was used to protect the top Pt electrode while the HfO₂ layer was removed. After the etching, the oxide layer extends 25 μm beyond the perimeter edge of the top electrode. During stress the bottom electrode was always grounded while the voltage was applied to the top electrode (see Fig. 1a). For the generation of BD spots, two different approaches were followed: constant voltage stress (CVS) at -9V for a maximum of 70 seconds and ramped voltage stress starting at 0V and ending at -12V . In the former mode, movies showing the evolution of the degradation process were recorded. In the second case, a picture with the final distribution of spots was taken. Depending on the magnitude, duration, kind of the stress (ramped or constant), and device area, different BD spot patterns can be obtained. Recall that this paper is not aimed at characterizing this particular technology but to provide a framework for the correlation analysis of multiple failure events in MIM and MIS devices. The location and size of the spots were obtained from videos and images recorded through the optical microscope. The information was subsequently processed with MATLAB and statistically treated using the Spatstat package for the R language [14].

Figure 1b shows a scanning electron microscope (SEM) image of several BD spots generated on the top metal electrode of a device. Notice that the spots have a typical size ranging from 1 to 5 μm and that their shape is not always

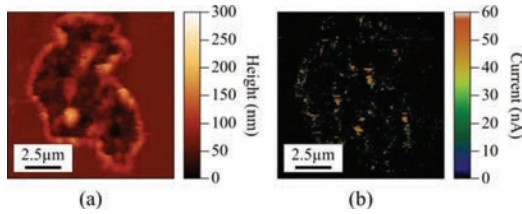


Fig. 2. (a) AFM image of a spot generated on the top electrode and (b) its corresponding conductive image.

circular. Circular shapes are mostly observed for the smallest spots. The image reveals that some of the spots exhibit a kind of ring around them. This will be further discussed in Section VI in connection with the thermal effects. In Fig. 1c, a zoomed-in SEM image of nearby BD spots is shown. As can be seen, the spots have a crater-like structure in which the top metal layer has practically disappeared. In order to get better insight whether the bottom metal electrode is accessible through the crater or not, topographic (Fig. 2a) and conductive (Fig. 2b) scanings were performed using a conductive atomic force microscope (CAFM). The conductive-type image (Fig. 2a) reveals that the current does not flow uniformly distributed and that the edges as well as some particular points inside the crater seem to exhibit a higher leakage current. It is worth mentioning that the current measured this way might be affected by the extreme topographic variations. According with a previous thermal study, some failure sites are true shorts while others do not exhibit any sign of electron transport [15]. In this paper, new infrared images are presented which indicate the magnitude of the power dissipation that takes place locally in the CF and the extension of the thermal damage around the BD spot.

III. DETECTION OF SPOTS AND IMAGE TREATMENT

In order to achieve accurate information about the spatial location and area of each failure site, a MATLAB program was developed for this aim. MATLAB has the capability to deal with images and counts with a large number of commands for data transformation, visualization, and analysis. When MATLAB opens an image file, three matrices with a number of rows and columns equal to the image resolution are created. Each matrix is associated with one of the basic colors. Some commands are specifically oriented to the determination of the spatial location and size of objects in the image (in our case the BD spots). In Fig. 3, the mathematical treatment performed on a typical image is recreated. Figure 3a shows the original optical image. The RGB image is represented in a single grey scale matrix (Fig. 3b). Then a filter is applied to digitalize the image into black and white pixels (Fig. 3c). This is performed by setting a threshold level that defines which binary color is assigned. In Fig. 3d, a graphical representation of the BD spot locations and their areas is displayed in a window of size $438 \mu\text{m} \times 365 \mu\text{m}$. Notice that the area of the circles represented in Fig. 3d is proportional to the discretized area of the spots. It is worth pointing out

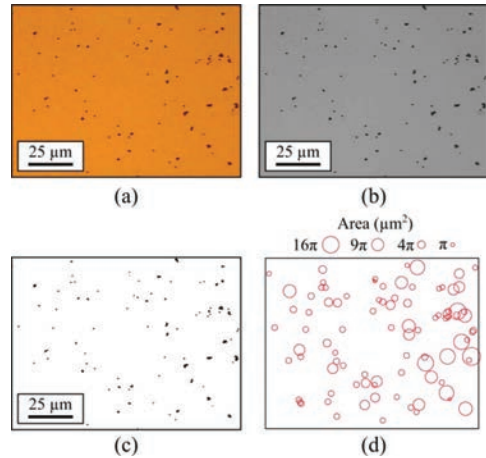


Fig. 3. (a) Optical image of a BD spot pattern. (b) Gray scale image of the image shown in (a). (c) Black and white image obtained after applying a binary filter. (d) Representation of the location and area of the black points shown in (c). The window dimension is $438 \mu\text{m} \times 365 \mu\text{m}$ and the size of the spots is proportional to the actual physical area.

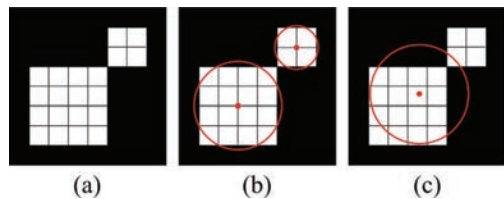


Fig. 4. (a) Schematic representation of a binary image. Spots obtained from the analysis using (b) 4-connected or (c) 8-connected pixels approach.

that the accuracy in the detection process is directly related to the resolution of the image, *i.e.*, the smallest area we can detect is the area of a single marked pixel. For example, an image with dimensions $1920 \text{ px} \times 1080 \text{ px}$ with a real width of $200 \mu\text{m}$ have a scale of $0.104 \mu\text{m}/\text{px}$, which means that the size of a single pixel is $1.08 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}^2$ being the smallest area detectable in such image. In addition, in the analysis of a binary image, the superposition or connection of spots is a factor that needs to be considered [16]. For 2D images, pixels can be 4-connected, meaning that the pixels are connected if their edges touch, or 8-connected, meaning that pixels are connected if their edges or corners touch. In Fig. 4, a schematic representation of a binary image (Fig. 4a) considering both pixel arrangements (Fig. 4b-c) is illustrated. As can be seen, when the 4-connected approach is used (Fig. 4b), a total of 2 spots are detected as the pixels that only share a corner are considered as individual spots. However, when the 8-connected approach is applied (Fig. 4c), those pixels are connected which results in the detection of a single structure. Notice that the location of the spots is the center of mass of the different regions detected as individual objects and that the total area of the objects is the same in both cases in spite of being the

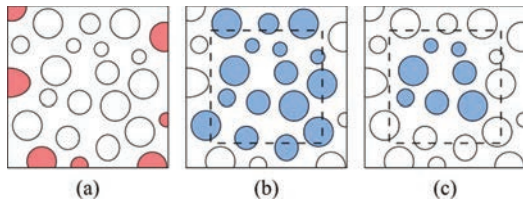


Fig. 5. (a) Schematic representation for the distribution of spots. The observation window performs as a kind of censoring effect. Spots analyzed using (b) a plus-sampling or (c) a minus-sampling approach.

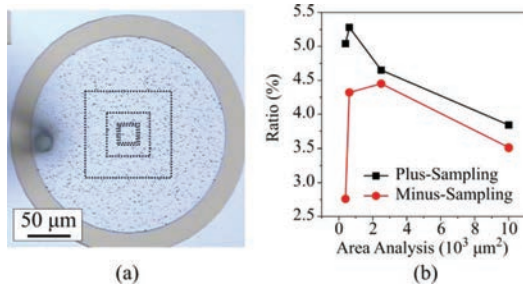


Fig. 6. (a) Optical image of a device showing multiple BD spots. (b) Ratio between the damaged area and the area of analysis for the different sampling approaches.

number of objects detected different as the spots that are separated in the 4-connected approach (Fig. 4b) appear merged into a single spot in the 8-connected approach (Fig. 4c). For the analysis performed in this work, the 8-connected approach was considered. Once the pixels are counted, the area of each spot is calculated using the direct expression:

$$\text{Spot size} = n \times \text{pixel size} \quad (1)$$

where n is the number of pixels and *pixel size* is the actual size of a single pixel. After obtaining the location and area of every BD spot, it is also important to correctly assess the possible edge effects associated with the size of the considered observation window (if different from the device area). This is a classical problem of spatial statistics that deserves a brief explanation [17]. Figure 5a shows a schematic representation of several objects with different areas distributed within the observation window (dashed square). As can be seen, some of the objects are affected by the window edge which performs like a kind of censoring effect. Two approaches can be followed: plus-sampling (Fig. 5b) or minus-sampling (Fig. 5c) [18] depending on whether the object is considered or not for the computation of areas, locations, and estimators. Plus-sampling introduces bias in favor of the largest objects while minus-sampling favors the smallest objects. As an example, in Fig. 6, both sampling approaches with different observation windows were considered for an experimental BD spot distribution. Figure 6a corresponds to the optical image of the damaged device. The location and areas of the spots are obtained and then the plus-sampling and minus-sampling approaches are applied using square observation windows with

different areas. From this exercise, the ratio between the total damaged area (the total area of the spots) and the damaged area within the observation window can be compared (Fig. 6b). As expected, the ratio obtained for minus-sampling is smaller than for plus-sampling. The discrepancy between both methods is remarkable for small windows but reduces as the observation window increases. This means that the analysis of a failure site distribution using a very small observation window can be affected by the chosen counting method. This issue in combination with the minus-sampling approach was considered in this work.

IV. CORRELATION ANALYSIS

In this Section, the summary statistics on the spatial distribution and size of multiple BD spots on the top Pt electrode and the correlation analysis between their locations and areas are discussed. As mentioned in Section II, the devices were ramped (RVS) or constant (CVS) voltage stressed. In case of a ramped voltage stress, all the spots are generated almost instantaneously. On the contrary, for CVS, the spots are generated progressively so that the time evolution of the degradation process can be recorded. For this reason, for RVS an optical image corresponding to the final situation can only be analyzed, whereas for CVS, a video showing the generation of spots is also available. In either case, final or intermediate state, the resulting distribution of BD spots can be analyzed using the methods of spatial statistics.

The spatial characterization of the spots is carried out using first (average intensity) and second order estimators (functional estimators). These estimators indicate whether the statistical distribution of spots agrees with a CSR process or not. The pair correlation function $g(r)$ is first used to investigate the BD point pattern. In this case, the distances between spots were normalized to the nominal lateral size of the device. $g(r)$ is related to the probability of finding a point at a distance r from another point of the pattern [19]. The expected value for a CSR process is $g(r) = 1$. Deviations from the unity value indicate accumulation ($g(r) > 1$) or inhibition ($g(r) < 1$) effects. In order to evaluate the connection between the spot locations and sizes, the mark correlation function $K(r)$ (not to be confused with Ripley's K function) and the reverse conditional moments $E(r)$ and $V(r)$ are used [19]. For the computation of these latest estimators, distances are not normalized. The mark correlation function is a measure of the dependence between the locations of two points that are separated by a distance r and the marks (or attributes) of these spots, in our case their areas. Following Stoyan [20], the mark correlation function $K(r)$ for a point process with numeric marks can be expressed as:

$$K(r) = \frac{\mathbb{E}_{ij}[m_i \cdot m_j]}{\mu^2} \quad (2)$$

where \mathbb{E}_{ij} denotes the conditional expectation given that there are a point i and a point j of the process separated by a distance r . m_i and m_j are the values of the marks attached to these two points. In the denominator of (2), μ is the mean value of the marks in the point process and it is used for normalizing the value of the function. In case of the mark correlation

function, it is also possible to interpret the results in terms of accumulation or inhibition effects. If the areas of the spots are spatially uncorrelated, then $K(r) = 1$. For positive correlation $K(r) < 1$, which means that the spots separated by a distance r have smaller area than expected, while a negative correlation $K(r) > 1$ means the opposite [21]. $E(r)$ and $V(r)$ are the conditional mean and variance of the mark attached to a point that is located a distance r from another point, respectively [22]. They can be expressed as:

$$E(r) = \mathbb{E}_{ij}[m_i] \quad (3)$$

$$V(r) = \mathbb{E}_{ij}[(m_i - E(r))^2] \quad (4)$$

\mathbb{E}_{ij} has the same meaning as before and m_i denotes the mark attached to the point i . In this work, the attribute under analysis is always the area of the spot. Functions (3) and (4) also contribute to provide insight into the interrelationship between the spot locations and marks. If the points and marks are independent, then $E(r)$ and $V(r)$ should be constant (independent of r). In what follows, we apply this summary functions to different case studies.

A. Square Area Capacitor

In this first example, the case of a square area capacitor with an area of $750 \mu\text{m} \times 750 \mu\text{m}$ is investigated (see Fig. 7a). The spot pattern was generated using an RVS. In Fig. 7b, a graphical representation of the location of all the detected spots is shown. A total of 316 spots were counted which corresponds to an average intensity $\lambda = 5.62 \cdot 10^{-4}$ spots/ μm^2 . The size of a single pixel is $3.04 \mu\text{m}^2$. In Fig. 7c, a histogram for the radius of the spots is reported. It can be observed that the distribution exhibits a marked positive skewness with radius values ranging up to $5 \mu\text{m}$. The experimental and theoretical $g(r)$ values are represented in Fig. 7d. Notice that the plot also includes the 95% confidence band (shaded region). As can be seen, the experimental $g(r)$ fluctuates around the unity value which indicates that the distribution of failure sites is in principle compatible with a CSR process. Figure 7e shows the experimental curve for the mark correlation function $K(r)$. Again, the shaded region corresponds to 50 Monte Carlo (MC) simulations. In this case, $K(r)$ indicates independence between positions and areas of the spots. In Fig. 7f, the experimental $E(r)$ and $V(r)$ curves are shown. Notice that $E(r)$ fluctuates around the unity value, meaning that the spot locations and their areas are not connected. This agrees with the previous observations. However, $V(r)$ exhibits some peaks which might be indicative of a correlation between the location of the spots and their areas at certain scales. This example illustrates the importance of considering different estimators to assess a point pattern distribution and configure a better picture of what is going on. Since only $V(r)$ shows large deviations, it is hard to justify the existence of a correlation location/area for the BD spots. Both g , K , and E functions seem to confirm that the point pattern follows a CSR process.

B. Circular Area Capacitor

In this second example, a circular area capacitor, in which a higher number of spots were generated, is analyzed. In

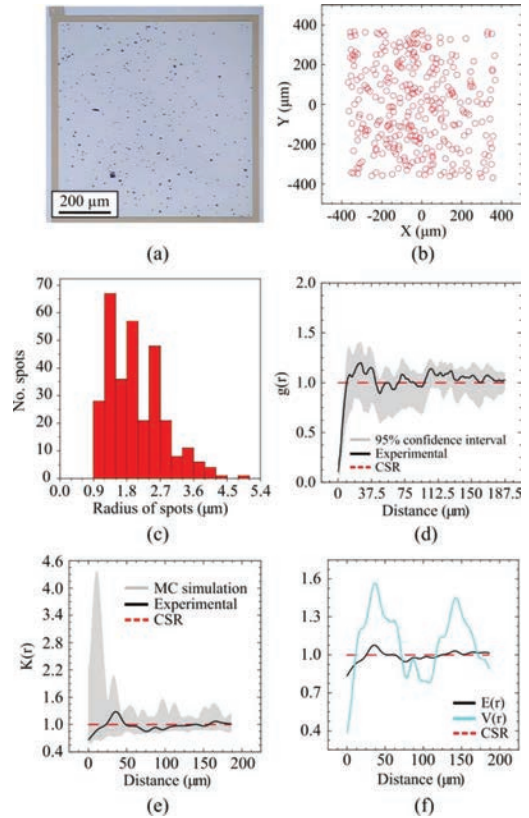


Fig. 7. (a) Photograph of a multiple BD spot distribution in a square area capacitor with size $750 \times 750 \mu\text{m}$. (b) Location of points in the capacitor area. (c) Histogram plot of the spot area distribution. (d) Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process. (e) Mark correlation function K for the distribution of BD spots in the sample. (f) Experimental E and V functions and expected results for a CSR process.

Fig. 8a, the final distribution of BD spots obtained after an RVS is shown. The diameter of the device area is $1130 \mu\text{m}$. A total of 1389 failure sites were detected which corresponds to an average intensity $\lambda = 1.38 \cdot 10^{-3}$ spots/ μm^2 . The location of the detected spots is shown in Fig. 8b. In this case, the size of a pixel is $0.36 \mu\text{m}^2$. In Fig. 8c, the histogram for the radius of the spots is reported. Notice that an accumulation of radius is observed for values ranging from $1.6 \mu\text{m}$ to $3.2 \mu\text{m}$ with a well-defined peak centered at $2.5 \mu\text{m}$. In Fig. 8d, the experimental $g(r)$ function is shown. It is clearly above the unity value. This behavior is typical of some kind of accumulation effect. The origin of this deviation is clearly visible in the photograph of Fig. 8a, in which the largest area spots seem to concentrate in the central region of the device. If we now pay attention to the mark correlation function $K(r)$ in Fig. 8e, we can observe a correlation effect between the area and location of the spots as the experimental value exceeds the confidence band obtained after 50 MC simulations. Again, this

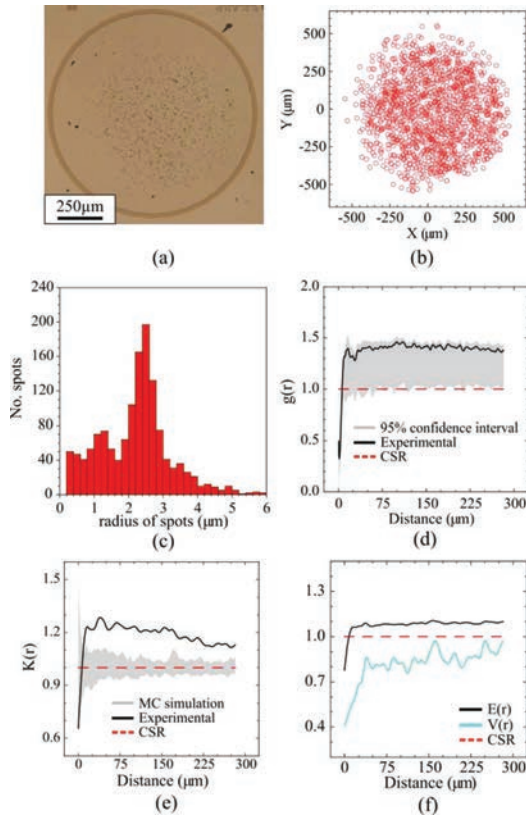


Fig. 8. (a) Photograph of a multiple BD spot distribution in a circular area capacitor with diameter of 1130 μm. (b) Location of points in the capacitor area. (c) Histogram for the spot radius. (d) Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process. (e) Mark correlation function K for the distribution of BD spots in the sample. (f) Experimental E and V functions and expected results for a CSR process.

is consistent with the previous observation. Figure 8f shows the estimated $E(r)$ and $V(r)$. Again, both curves depart from a CSR process. Large deviations are observed close to the origin of coordinates but in this case the estimators are strongly influenced by the size of the spots and the anomalous short distance involved.

V. EFFECTS OF SEVERE ELECTRICAL STRESS

In the previous Section, it was shown that correlation effects between the location of the failure sites and their sizes can occur in large area MIM devices. This correlation can only be noticed if the number of spots is sufficiently large, which occurs after a long exposure to the degradation conditions. In this Section, we explore what happens if the device is further stressed and power dissipation effects become observable in the top metal electrode. We essentially focus the attention on the magnitude of the damage generated around the visible crater-like structure of the spots. In general, because of the

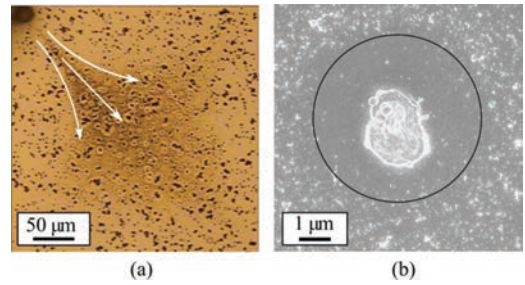


Fig. 9. (a) Photograph of a burned sample due to the application a CVS. (b) Detail of a SEM image corresponding to a single spot.

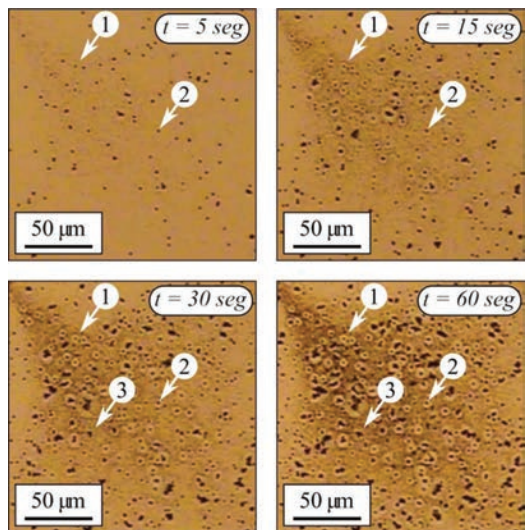


Fig. 10. Optical images of the top metal electrode of the sample shown in Fig. 9a for different degradation times.

series resistance effect, the pace at which the device degrades decreases with the number of spots, but at some point, a different kind of damage appears if the stress is not halted. Burning effects become evident in the surface of the device. In Fig. 9a, an optical image of a device that displays a burned region (darker area) is shown. This burning effect clearly arises from the voltage probe and directs toward the central region of the device. Around some BD spots, a small ring where the metal electrode is not burned is also visible. This is shown in Fig. 9b as well where a zoomed SEM image illustrates this situation. Figure 10 shows some specific frames of a video corresponding to the degradation of the device shown in Fig. 9a. The frames reveal that the rings are not visible until the area of the device around them starts burning. In other words, the rings were generated at the beginning of the stress (see arrows 1 and 2) but can only be observed in the last phase of degradation. This indicates that some structural modification occurred in the region close to the spot that reduces the surface current

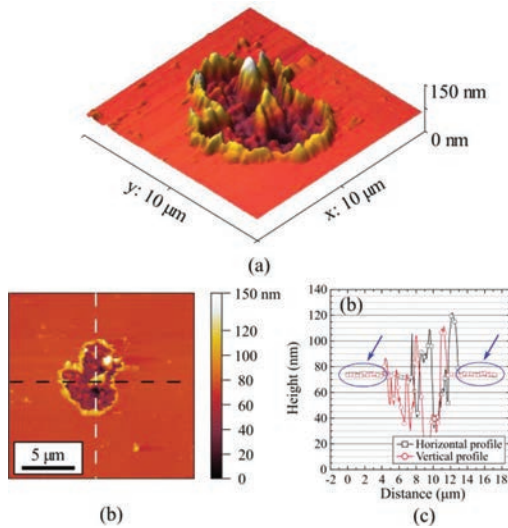


Fig. 11. AFM image of a spot generated in the top metal electrode in (a) 3D representation and (b) 2D representation. (c) Graphical representation of the profiles shown in (b).

density around it preventing the appearance of the burned area. Something similar occurs for the spots that are generated in the already burned area (see arrow 3). Therefore, the thermal process associated with the generation of a BD site not only leaves a mark on the top metal electrode but also originates a damage beyond the spot itself.

In Figs. 11a-b, a CAFM image of a typical BD spot generated in the top metal electrode is shown. As can be observed, the spot has the usual crater-like structure. In order to analyze in detail if there is any kind of deformation of the metal layer around the spot, vertical and horizontal scanning profiles were defined in the image (Fig. 11b) and represented (Fig. 11c). The plot reveals that outside the spot (see the arrows), the Pt electrode remains completely flat meaning that the spot generation did not produce a hillock in the metal layer. The circular shape of the ring also discards a connection with the particular direction of the surface current lines responsible for the burning effects. A plausible hypothesis is that the physical changes in the dielectric region around the CF affect the current distribution in the vicinity of the spot. In this regard, Cester *et al.* reported a remarkable reduction of the conductance in a ring around the CF in the gate oxide of MOS transistors. The effect was ascribed to negative charge trapping and generation of oxide defects around the CF [23]. In more recent papers, Kumar *et al.* reported modifications of the region surrounding the CFs generated in Pt/Hf/HfO_x/Pt [24] and Pt/TiN/HfO₂/Pt [25] devices as well. Similar effects were described in Hoskins *et al.* for CFs in TiO₂-based MIM devices with Pt electrodes [26]. Experimental results seem to indicate a permanent change of the oxide properties in the vicinity of the failure site which does not generate a deformation of the metal electrode [27].

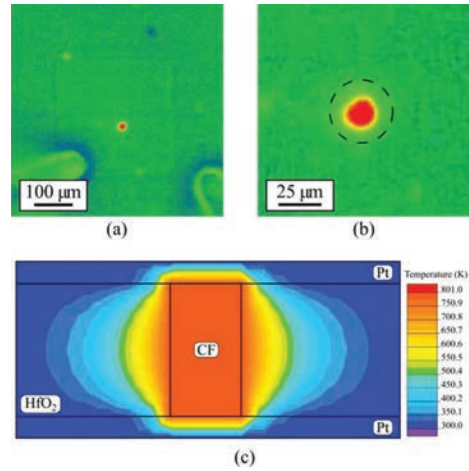


Fig. 12. (a) Thermal image of a square area capacitor with size $300 \mu\text{m} \times 300 \mu\text{m}$. (b) Zoom in thermal image of the hot spot detected in (a). (c) Thermal simulation of the distribution of temperature in a Pt/HfO₂/Pt capacitor with a CF generated in the dielectric. The thermal conductivity considered are $\lambda_{\text{Pt}} = 71 \text{ W}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$ and $\lambda_{\text{HfO}_2} = 0.95 \text{ W}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$. The external temperature is set to 300K and the temperature of the CF is set to 800K.

Figures 12a and 12b show thermal images of a CF. In this case, a constant voltage was applied to the device and the power dissipated was registered using an infrared camera. While Fig. 12a shows the active BD spot and the voltage probes, Fig. 12b shows a detail of the damaged region. Notice that, although the area of the hot spot does not correspond to the real area of the failure site, it is clear that the temperature excess goes beyond the core region of the CF. In order to evaluate the relative distribution of temperature produced by an active CF, finite-element simulations were carried out. Figure 12c shows a cross-section of the device assuming a filament temperature of 800 K and thermal conductivities $\lambda_{\text{Pt}} = 71 \text{ W}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$ and $\lambda_{\text{HfO}_2} = 0.95 \text{ W}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$ [28]. This plot can represent a situation previous to the occurrence of the microexplosion. As expected, the temperature increase extends farther into the dielectric than into the metal. This dissimilar temperature excess might be the reason behind the structural changes in the oxide layer and the reduced extension of the crater with respect to the surrounding ring. Interestingly, further information about the consequences of these anomalous regions can be achieved by analyzing the spatial distribution of the failure sites in severely damaged devices. In this regard, Fig. 13 shows the case of a device with burning effects. In Fig. 13a the optical image of the capacitor with a diameter of $450 \mu\text{m}$ is shown. The size of a pixel is $1.07 \mu\text{m}^2$. Figure 13b shows the location of 641 BD spots, which corresponds to an average intensity $\lambda = 4.03 \cdot 10^{-3}$ spots/ μm^2 . The summary statistics for this point pattern is illustrated in Figs. 13c-f. In Fig. 13c, the histogram for the size of the spots considered in the distribution is shown. Figure 13d shows the cumulative distribution function for the nearest-neighbour distance estimator $G(r)$ corresponding to

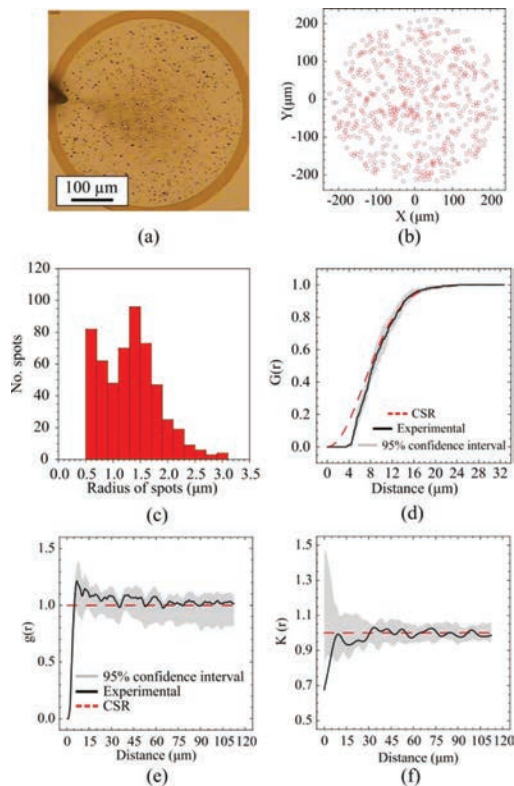


Fig. 13. (a) Photograph of a multiple BD spot distribution in a circular area capacitor with diameter of 450 μm . (b) Location of points in the capacitor area. (c) Histogram plot for the spot radius distribution. (d) Nearest-neighbour function G for the experimental data and for a CSR process. (e) Pair correlation function g for the experimental data and for a CSR process. (f) Mark correlation function K for the distribution of BD spots in the sample.

the experimental distribution [9], [19]. The dashed line corresponds to a CSR process. The 95 % confidence band is also included in the plot (shaded region). In order to analyze this result in detail it is important to consider the radius of the spots (Fig. 13c). In the G function plot (Fig. 13d) an inhibition distance up to 8 μm is observed as the experimental $G(r)$ takes values lower than those expected for a CSR distribution. This means that the generation of a spot in this region is less likely than for a Poisson distribution. In fact, $G(r)$ is zero for distances lower than 4 μm meaning that there are no spots closer than 4 μm . Looking at the distribution of radius (Fig. 13c) and considering the accumulation of spots sizes ranging in between 1.1 μm and 1.7 μm , the expected inhibition distance would be 3.83 μm which correspond to two spots with radius 1.4 μm separated one pixel apart. Notice that the region where the inhibition is observed (Fig. 13d) is higher than the corresponding expected value. This confirms that there is an inhibition region around the spots where the generation of new failure sites is less likely. In Fig. 13e, the experimental and

theoretical $g(r)$ functions are illustrated. As can be seen, the location of all the spots is consistent with a CSR process as the unity value is inside the 95% confidence band. Similarly, $K(r)$ in Fig. 13f shows results compatible with independent location/area distributions. It seems that these estimators are not sensible enough to detect the inhibition region which is only observable in the short distance scale. This clearly indicates that caution should be exercised with a straightforward interpretation of the functional estimators.

VI. CONCLUSION

In this paper, spatial statistical methods were applied to investigate the correlation between the location and size of catastrophic breakdown spots in MIM capacitors with high- K dielectric. The analysis revealed that for a low number of spots the distribution is consistent with a complete spatial randomness process. However, as the number of spots increases, correlation effects between the location and area become observable. The largest spots seem to concentrate in the central region of the device perhaps as a consequence of some kind of feedback effect resulting from the thermal effects and the current distribution over the top electrode. Inhibitory effects in the generation of spots were also detected in the last phase of degradation. To reveal these features, the separation between spots was investigated using specific estimators such as the nearest neighbour function. The observation of such inhibitory effects questions the hypothesis of complete randomness distribution in severely damaged devices.

ACKNOWLEDGMENT

JMG acknowledges the participation in the ASCENT project at CEA-Leti, France.

REFERENCES

- [1] A. S. Oates, "Reliability issues for high-k gate dielectrics," in *Proc. IEEE IEDM*, Whashington, DC, USA, 2003, pp. 923–926. doi: 10.1109/IEDM.2003.1269429.
- [2] S. Lombardo, J. H. Stathis, B. P. Linder, K. L. Pey, F. Palumbo, and C. H. Tung, "Dielectric breakdown mechanisms in gate oxides," *J. Appl. Phys.*, vol. 98, no. 12, 2005, Art. no. 121301. doi: 10.1063/1.2147714.
- [3] T. Pompl, C. Engel, H. Wurzer, and M. Kerber, "Soft breakdown and hard breakdown in ultra-thin oxides," *Microelectron. Rel.*, vol. 41, no. 4, pp. 543–551, 2001. doi: 10.1016/S0026-2714(00)00253-5.
- [4] E. Y. Wu, J. H. Stathis, and L.-K. Han, "Ultra-thin oxide reliability for ULSI applications," *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 15, no. 5, pp. 425–435, 2000. doi: 10.1088/0268-1242/15/5/301.
- [5] M. A. Alam and R. K. Smith, "A phenomenological theory of correlated multiple soft-breakdown events in ultra-thin gate dielectrics," in *Proc. IEEE IRPS*, Dallas, TX, USA, 2003, pp. 406–411. doi: 10.1109/RELPHY.2003.1197782.
- [6] K. L. Pey, C. H. Tung, L. J. Tang, W. H. Lin, and M. K. Radhakrishnan, "Size difference in dielectric-breakdown-induced epitaxy in narrow n - and p -metal oxide semiconductor field effect transistors," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 83, no. 14, pp. 2940–2942, 2003. doi: 10.1063/1.1616195.
- [7] R. Ranjan *et al.*, "A comprehensive model for breakdown mechanism in $\text{HfO}_2/\text{high-}\kappa$ gate stacks," in *Proc. IEEE IEDM*, San Francisco, CA, USA, 2004, pp. 725–728. doi: 10.1109/IEDM.2004.1419273.
- [8] S. Chatterjee, Y. Kuo, J. Lu, J.-Y. Tewg, and P. Majhi, "Electrical reliability aspects of HfO_2 high-k gate dielectrics with TaN metal gate electrodes under constant voltage stress," *Microelectron. Rel.*, vol. 46, no. 1, pp. 69–76, 2006. doi: 10.1016/j.microrel.2005.02.004.
- [9] X. Saura, J. Suñé, S. Monaghan, P. K. Hurley, and E. Miranda, "Analysis of the breakdown spot spatial distribution in Pt/ HfO_2 /Pt capacitors using nearest neighbor statistics," *J. Appl. Phys.*, vol. 114, no. 15, 2013, Art. no. 154112. doi: 10.1063/1.4825321.

- [10] J. Muñoz-Gorrioz, S. Monaghan, K. Cherkaoui, J. Suñé, P. K. Hurley, and E. Miranda, "Exploratory study and application of the angular wavelet analysis for assessing the spatial distribution of breakdown spots in Pt/HfO₂/Pt structures," *J. Appl. Phys.*, vol. 122, no. 21, 2017, Art. no. 215304. doi: [10.1063/1.5000004](https://doi.org/10.1063/1.5000004).
- [11] J. Muñoz-Gorrioz, S. Monaghan, K. Cherkaoui, J. Suñé, P. K. Hurley, and E. Miranda, "Characterization of the failure site distribution in MIM devices using zoomed wavelet analysis," *J. Electron. Mater.*, vol. 47, no. 9, pp. 5033–5038, 2018. doi: [10.1007/s11664-018-6298-2](https://doi.org/10.1007/s11664-018-6298-2).
- [12] E. Miranda *et al.*, "Nonhomogeneous spatial distribution of filamentary leakage current paths in circular area Pt/HfO₂/Pt capacitors," *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanometer Struct.*, vol. 31, no. 1, 2013, Art. no. 01A107. doi: [10.1116/1.4768681](https://doi.org/10.1116/1.4768681).
- [13] D. Illian, J. Penttinen, A. Stoyan, and H. Stoyan, "The homogenous Poisson process," in *Statistical Analysis and Modelling of Spatial Point Patterns*. Chichester, U.K.: Wiley, 2008, pp. 57–98.
- [14] A. Baddeley and R. Turner, "Spatstat: An R package for analyzing spatial point patterns," *J. Stat. Softw.*, vol. 12, no. 6, 2005. doi: [10.18637/jss.v012.i06](https://doi.org/10.18637/jss.v012.i06).
- [15] E. Miranda, M. Riccio, G. De Falco, J. Blasco, J. Suñé, and A. Irace, "Assessing the spatial correlation and conduction state of breakdown spot patterns in Pt/HfO₂/Pt structures using transient infrared thermography," *J. Appl. Phys.*, vol. 115, no. 17, 2014, Art. no. 174502. doi: [10.1063/1.4874740](https://doi.org/10.1063/1.4874740).
- [16] L. He, X. Ren, Q. Gao, X. Zhao, B. Yao, and Y. Chao, "The connected-component labeling problem: A review of state-of-the-art algorithms," *Pattern Recognit.*, vol. 70, pp. 25–43, Oct. 2017. doi: [10.1016/j.patcog.2017.04.018](https://doi.org/10.1016/j.patcog.2017.04.018).
- [17] D. A. Griffith, "Correcting for edge effects in spatial statistical analyses," in *Advanced Spatial Statistics (Advanced Studies in Theoretical and Applied Econometrics)*, vol. 12. Dordrecht, The Netherlands: Springer, 1988, pp. 175–199. doi: [10.1007/978-94-009-2758-2_7](https://doi.org/10.1007/978-94-009-2758-2_7).
- [18] O. Barndorff-Nielsen *et al.*, "Spatial sampling and censoring," in *Stochastic Geometry: Likelihood and Computation*. London, U.K.: Chapman and Hall, 1999, pp. 37–78.
- [19] A. Baddeley, E. Rubak, and R. Turner, *Spatial Point Patterns: Methodology and Applications With R*. Boca Raton, FL, USA: CRC Press, 2015.
- [20] D. Stoyan and H. Stoyan, *Fractals, Random Shapes, and Point Fields: Methods of Geometrical Statistics*. Chichester, U.K.: Wiley, 1994.
- [21] K. Wälder and O. Wälder, "Analysing interaction effects in forests using the mark correlation function," *iForest Biogeosci. Forestry*, vol. 1, no. 1, pp. 34–38, 2008. doi: [10.3832/ifor0449-0010034](https://doi.org/10.3832/ifor0449-0010034).
- [22] M. Schlather, P. J. Ribeiro, and P. J. Diggle, "Detecting dependence between marks and locations of marked point processes," *J. Roy. Stat. Soc. Stat. Methodol. B*, vol. 66, no. 1, pp. 79–93, 2004. doi: [10.1046/j.1369-7412.2003.05343.x](https://doi.org/10.1046/j.1369-7412.2003.05343.x).
- [23] A. Cester, A. Paccagnella, G. Ghidini, S. Deleonibus, and G. Guegan, "Collapse of MOSFET drain current after soft breakdown," *IEEE Trans. Device Mater. Rel.*, vol. 4, no. 1, pp. 63–72, Mar. 2004. doi: [10.1109/TDMR.2003.820296](https://doi.org/10.1109/TDMR.2003.820296).
- [24] S. Kumar *et al.*, "Conduction channel formation and dissolution due to oxygen thermophoresis/diffusion in hafnium oxide memristors," *ACS Nano*, vol. 10, no. 12, pp. 11205–11210, 2016. doi: [10.1021/acsnano.6b06275](https://doi.org/10.1021/acsnano.6b06275).
- [25] S. Kumar *et al.*, "Oxygen migration during resistance switching and failure of hafnium oxide memristors," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 110, no. 10, 2017, Art. no. 103503. doi: [10.1063/1.4974535](https://doi.org/10.1063/1.4974535).
- [26] B. D. Hoskins *et al.*, "Stateful characterization of resistive switching TiO₂ with electron beam induced currents," *Nat. Commun.*, vol. 8, no. 1, p. 1972, 2017. doi: [10.1038/s41467-017-02116-9](https://doi.org/10.1038/s41467-017-02116-9).
- [27] C. H. Tung *et al.*, "Percolation path and dielectric-breakdown-induced-epitaxy evolution during ultrathin gate dielectric breakdown transient," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 83, no. 11, pp. 2223–2225, 2003. doi: [10.1063/1.1611649](https://doi.org/10.1063/1.1611649).
- [28] M. A. Panzer *et al.*, "Thermal properties of ultrathin hafnium oxide gate dielectric films," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 30, no. 12, pp. 1269–1271, Dec. 2009. doi: [10.1109/LED.2009.2032937](https://doi.org/10.1109/LED.2009.2032937).

TSF 2020

**IMPACT OF THE FORMING AND CYCLING
PROCESSES ON THE ELECTRICAL AND PHYSICAL
DEGRADATION CHARACTERISTICS OF HFO₂-
BASED RESISTIVE SWITCHING DEVICES**



Impact of the forming and cycling processes on the electrical and physical degradation characteristics of HfO₂-based resistive switching devices



J. Muñoz-Gorri^{a,*}, M.B. González^b, E. Miranda^a, J. Suñé^a, F. Campabadal^b

^a Departament d'Enginyeria Electrònica, Universitat Autònoma de Barcelona, 08193 Bellaterra, Spain

^b Institut de Microelectrònica de Barcelona, IMB-CNM, CSIC. Campus UAB, 08193 Bellaterra, Spain

ARTICLE INFO

Keywords:

Nickel
Hafnium dioxide
Degradation
Metal-insulator-semiconductor
Resistive switching

ABSTRACT

In this work, electrical and physical analysis of filamentary-type Ni/HfO₂/n⁺-Si resistive random access memory devices were carried out with the aim of evaluating the microstructural changes occurring in the oxide layer and metal electrode after the initial forming step and subsequent switching cycles. To this end, Scanning Electron Microscopy analysis of the top oxide surface after Ni removal was performed. The obtained images show the generation of small hillocks and defects in the active area of the device caused by current-induced Joule heating effects. Material analysis of these hillocks reveals that they are a Ni-based compound. The size and morphology of the generated damage is shown to depend both on the switching polarity and compliance used to limit the current flow during the formation of the conductive filament. In addition, the damage induced in the structure not only depends on the current magnitude reached in the set process, but also on the maximum current reached during the reset phase, with both current levels severely affecting the long-term switching capability of the devices.

1. Introduction

Oxide degradation and breakdown (BD) in metal-insulator-metal and metal-insulator-semiconductor devices are serious concerns for the long-term operation performance of many electron devices [1,2]. Reliability studies of these core structures are essential to understand the physical mechanisms responsible for the dielectric wear out. The ultimate goal is to optimize the device fabrication process in order to extend the oxide layer useful lifetime. The oxide BD is the last phase of degradation and, in general, is associated with the formation of a conductive filament (CF) spanning the insulating film [3]. This CF, in the form of a percolation path [4], presents low resistivity allowing the electron flow from one electrode to the opposite. The magnitude of the damage induced in the dielectric layer can to some extent be controlled by limiting the maximum allowed current or voltage either by the experimental setup or by adding a series component in the characterization circuit such as a transistor or a resistance. If the energy released locally at the very moment of the BD event is not controlled, the high temperature which arises from Joule heating effects can produce severe damage to the device [5]. This process is often referred to as hard dielectric breakdown (HBD). On the other hand, when the BD process is somehow controlled, the thermal energy involved is much smaller than in the HBD case. The formation of a CF in the pristine device by using a

controlled BD is called forming process. Under this circumstance, and for some metal/dielectric material combinations, the CF can reversibly change its conducting state, giving rise to the so-called resistive switching (RS) phenomenon. The RS mechanism consists in the ability of the device to switch its resistance value between at least two distinctive states: the high (HRS) and the low (LRS) resistance states. These changes are associated with the creation and partial dissolution of a CF connecting the top and bottom electrodes under the action of an applied electric field [6]. While the transition from HRS to LRS is referred to as the set process, the opposite one is referred to as the reset process. The existence of these two stable states and the possibility of switching in between them allow the use of these devices as memory elements. Memories based on the RS mechanism are known as resistive random access memories (RRAM) and are promising candidates for the next generation of non-volatile memories because of their scalability properties, simple configuration, low cost, low power consumption, and compatibility with complementary metal-oxide-semiconductor technology [7].

The nature of the defects that constitute the CF and the key charge transport mechanisms associated with the reversible CF formation are currently subjects of intense research. These features are strongly linked to the material properties of the devices [6,8,9]. The three main physical mechanisms responsible for the filamentary formation in RS

* Corresponding author.

E-mail address: jordi.munoz.gorri@uab.cat (J. Muñoz-Gorri).

<https://doi.org/10.1016/j.tsf.2020.138027>

Received 20 November 2019; Received in revised form 11 February 2020; Accepted 12 April 2020

Available online 21 April 2020

0040-6090/ © 2020 Elsevier B.V. All rights reserved.

devices are the electrochemical metallization (ECM), the thermochemical (TCM) process and the valence change mechanism (VCM). In ECM devices, the CF formation is due to the metallic cation migration from the top electrode into the dielectric under the application of an electric field [8,10–12]. Lv and Xu et al. [13] analyzed the generation of a Cu protrusion in ECM Cu/HfO₂/Pt devices shorting both metallic electrodes due to field assisted Cu ion transport inside HfO₂ by using a transmission electron microscopy (TEM) and energy dispersive X-ray spectroscopy (EDX) inspections. In the case of unipolar TCM devices, i.e. the set and reset processes occur at the same voltage polarity, the CF dissolution process is a result of thermal diffusion induced by Joule heating [14]. On the other hand, in the case of VCM-based devices, the RS phenomenon is associated with the reversible formation of oxygen deficient sites in the dielectric film [15,16]. Recently, Celano et al. [17] reported the generation of a 3D percolation path in VCM Ru/Hf/HfO₂/TiN devices due to the formation of a substoichiometric HfO_x region inside the HfO₂ using conductive atomic force microscopy (CAFM).

Among the different materials used for the fabrication of RRAMs, HfO₂-based structures have demonstrated good RS performance [18–20]. In this work, we focus on unipolar Ni/HfO₂/Si devices. In these devices, resistive switching is attributed to the generation of oxygen vacancies and the subsequent diffusion/migration of Ni towards the bottom electrode. ECM and TCM mechanisms [21–24] may contribute to the metallic nature of the CF through metal cation migration caused by the presence of an electric field and temperature enhanced metal diffusion. Between both mechanisms, TCM has been reported to be the most dominant in these devices [22,25,26], especially for the reset process. Experimental results support that HRS is achieved once a critical temperature is reached at one point of the conductive filament [27]. Moreover, previous CAFM studies performed in similar devices [28] have revealed the formation of a highly conductive hillock region on the dielectric surface after Ni removal in devices that were previously subjected to RS cycling. In this regard, Martín et al. [25], using TEM and electron energy loss spectroscopy (EELS) analysis, confirmed the presence of a Ni-based CF in the hillock region by analyzing lamellae prepared at the hillock sites. The obtained results were consistent with Ni migration into the silicon substrate as well as with Si migration towards the top electrode, generating a Ni-Si-HfO₂ compound as the CF.

In this paper, a thorough analysis of the electrical and physical damage generated in Ni/HfO₂/n⁺-Si RRAM devices as a function of the current limitation, forming polarity and switching cycling was carried out. To this end, scanning electron microscopy (SEM) and EDX studies were performed in a complete set of electrical conditions. The paper is organized as follows: in Section 2, the fabricated Ni/HfO₂/Si devices and the experimental procedures/conditions are described. Then, the electrical characteristics of the samples and their RS performance are analyzed in Section 3. This Section also includes an in-depth physical characterization by AFM, SEM and EDX of the Ni-based structures generated on the HfO₂ dielectric after the application of a forming process step and unipolar RS cycling. The role played by the current limitation, forming polarity, and RS cycling on the structure degradation is discussed in this Section. Finally, the conclusions of this work are presented in Section 4.

2. Devices and measurement setup

The investigated devices are field-oxide isolated Ni/HfO₂/n⁺-Si structures with active areas of 5 × 5 μm² and 2 × 2 μm² and with two HfO₂ thicknesses, 10 nm and 20 nm. The devices were fabricated on (100) n-type CZ silicon wafers with resistivity 7–13 mΩ·cm following the process flow described in [22]. A top-view optical image of a 2 × 2 μm² device and a schematic cross-section of the final structure are shown in Fig. 1. Current–voltage (*I*–*V*) characteristics of the devices were measured at room temperature using a HP-4155B semiconductor parameter analyzer. The voltage was applied to the top Ni electrode,

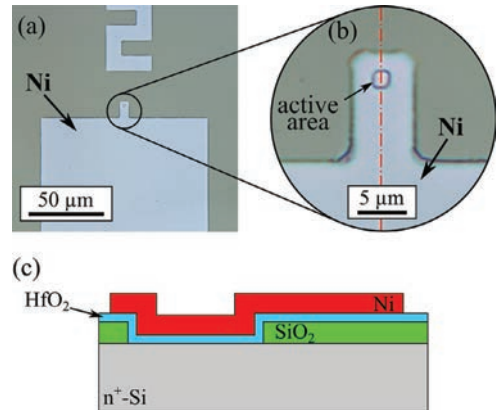


Fig. 1. (a) Top-view optical image of a pristine Ni/HfO₂/n⁺-Si device. (b) Zoom-in image of the active area. (c) Schematic cross-section of the device structure.

while the Si substrate was grounded. For the assessment of unipolar RS devices, both positive and negative polarities were considered. The characterization process started with the forming process by applying a voltage sweep to activate the RS phenomenon, and to lead the device to the LRS. Then, by applying successive voltage sweeps with the same polarity, the device was switched from the LRS to the HRS (reset process) and, in the next sweep, from the HRS to the LRS (set process). In order to avoid an irreversible oxide BD, in the forming and set processes the current was limited to *I*_{CC}, so that the voltage sweep halts when *I*_{CC} is reached. For the devices inspected after the forming process, *I*_{CC} values ranging from 100 μA to 10 mA were considered, while for the devices subjected to RS cycling, *I*_{CC} was fixed to 100 μA both for the forming and set processes. In Fig. 2, typical *I*–*V* curves corresponding to the forming and first RS cycle are shown for both polarities. The characteristic voltages in the RS processes are also indicated: *V*_{forming}, *V*_{set} and *V*_{reset}. For the physical inspections, and in order to analyze the effect of the electrical stress on the dielectric layer after the electrical measurements, the Ni layer was etched off using (H₂O:HNO₃) (4:1). The HfO₂ surface was subsequently exposed and physically characterized by AFM, SEM and EDX. AFM measurements were done operating in tapping mode with a Veeco Dimension 3100 AFM system with a Nanoscope IV controller. SEM inspections were performed with a 3 KeV e-beam excitation with a Carl Zeiss Auriga 40 SEM-EDX workstation. The

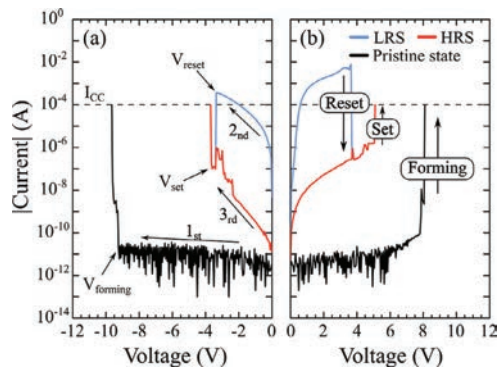


Fig. 2. Typical *I*–*V* characteristics of the forming process and the first RS cycle for (a) negative and (b) positive unipolar RS.

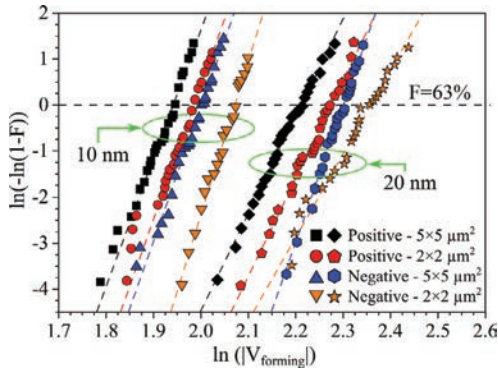


Fig. 3. Weibull plot of the forming voltages (V_{forming} in V) for the different types of devices and polarities. F is the cumulative probability function.

EDX model is PentaFET Precision INCAx-act Oxford Instrument. The EDX inspections were performed in punctual scanning mode using an aperture of 30 μm at 5 mm working distance with a 3 KeV e-beam excitation.

3. Experimental results and discussion

3.1. Electrical characterization

In this Section, the forming voltage statistics for different devices and measurement conditions are reported. Since the forming voltage is the voltage at which the dielectric BD occurs, the cumulative distribution function (F) can be described using the Weibull distribution. In Fig. 3, Weibull plots for the measured V_{forming} corresponding to the devices investigated are represented, where at least 33 devices were measured for each condition. In Table 1 the obtained shape (Weibull slope) and scale ($|V_{\text{forming}}|$ at $F = 63\%$) parameters for the Weibull distributions in Fig. 3 are indicated. As expected, a thicker oxide layer exhibits a higher forming voltage, and a larger active area exhibits a lower forming voltage [29]. With respect to the stress polarity, lower forming voltages are obtained for positive than for negative biases, in agreement with previous results [22]. The difference can be attributed to the potential drop in the n-type Si electrode. After the forming process, series of sequential RS cycles were applied at both polarities. In Fig. 4, experimental $I-V$ curves corresponding to 100 unipolar RS cycles performed at negative (Fig. 4a) and positive (Fig. 4b) polarities are shown for the Ni/20 nm-HfO₂/n⁺-Si devices. In order to further analyze the RS characteristics of the devices, a statistical analysis of the RS parameters was carried out. In Fig. 5, F distributions for V_{set} and V_{reset} are plotted, and in Fig. 6, F distributions for the LRS (I_{LRS}) and HRS (I_{HRS}) currents at $V = \pm 0.5$ V (depending on the polarity of the RS process) are represented. Notice that $|V_{\text{set}}|$ is higher than the voltage needed to reset the device resistance for a given device area and

Table 1
Fitting parameters of the Weibull plot represented in Fig. 3.

HfO ₂ thickness (nm)	Polarity	Area (μm^2)	$ V_{\text{forming}} $ at $F = 63\%$ (V)	Slope
10	Positive	5 × 5	6.97	27.9
		2 × 2	7.30	29.0
	Negative	5 × 5	7.40	29.1
		2 × 2	7.93	33.3
20	Positive	5 × 5	9.13	21.1
		2 × 2	9.72	21.3
	Negative	5 × 5	9.98	29.5
		2 × 2	10.59	18.2

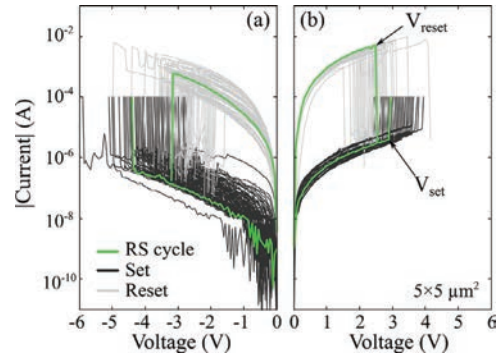


Fig. 4. $I-V$ characteristics of a sequence of 100 RS cycles for (a) positive and (b) negative unipolar RS in Ni/20 nm-HfO₂/n⁺-Si devices. Forming and set processes were limited to a maximum current of $I_{\text{CC}} = 100 \mu\text{A}$. Device area is $5 \times 5 \mu\text{m}^2$.

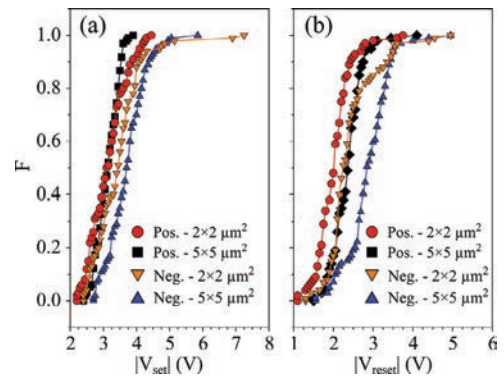


Fig. 5. Cumulative distribution function of (a) the set and (b) the reset voltages for 100 unipolar RS cycles for both polarities and the two device areas of Ni/20 nm-HfO₂/n⁺-Si devices.

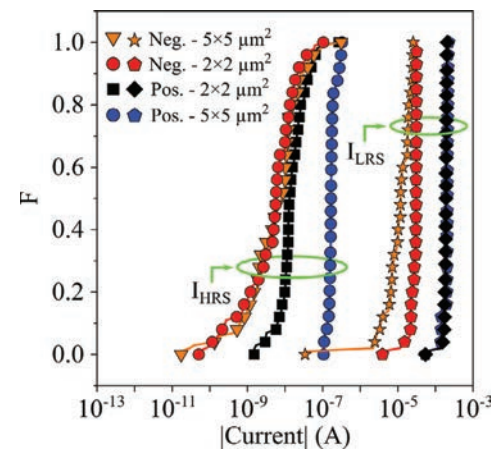


Fig. 6. Cumulative distribution function of the current measured at $|V| = 0.5$ V at the HRS (I_{HRS}) and the LRS (I_{LRS}) for 100 RS cycles for both polarities and the two device areas of Ni/20nm-HfO₂/n⁺-Si devices.

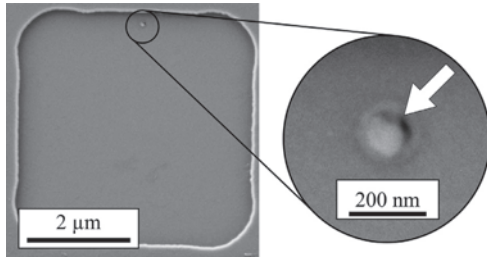


Fig. 7. SEM image of a Ni/20 nm-HfO₂/n⁺-Si device with 5 × 5 μm² active area after Ni etching and zoom in image of the structure generated due to the forming process.

polarity. Moreover, $|V_{set}|$ and $|V_{reset}|$ are lower for positive than for negative voltages for both active areas. This agrees with the observed larger I_{LRS} and I_{HRS} currents (Fig. 6) for positive polarity than for negative. Higher currents lead to larger energy dissipation by Joule heating in the CF enhancing the thermal diffusion of Ni, and thus reducing the voltage required for switching. Again, this is consistent with previously reported results for Ni/HfO₂/n⁺-Si devices [22]. Finally, no clear correlation is found between the LRS current and the device area, which is an indication of the filamentary nature of electron transport in this kind of devices.

3.2. Physical characterization

After the device electrical characterization and the removal of the top Ni electrode, a small defect on the oxide surface was systematically revealed (see Fig. 7). No defect was observed in the pristine samples. According to previous analysis, these hillocks are a consequence of the CF formation [28]. Despite the differences in the investigated electrical conditions, a hillock is always generated after the electrical stress, irrespective of the device area and oxide thickness. Moreover, the characteristics of the hillocks, in terms of size and shape, depend on the electrical conditions of the forming process and on the RS cycling, and do not depend on the area of the studied devices.

The impact of the different electrical parameters such as the current compliance and bias polarity on the forming process was evaluated first. In Fig. 8, typical SEM images of the hillocks created after the forming process in 20 nm-based HfO₂ devices are shown, both for positive (Fig. 8a,c,e) and negative polarities (Fig. 8b,d,f). Notice that the defects generated using positive forming are completely different from those generated under negative forming. In the case of defects created with large current compliances, $I_{CC} = 10$ mA, for positive forming (Fig. 8a) the protuberance is formed by very small grains and has a large size. However, for negative forming (Fig. 8b), the observed damage is formed by spheres bigger than those seen in the previous case but covering a smaller area. Examining the defects formed at lower current limits (Fig. 8c,d and Fig. 8e,f, with 1 mA and 100 μA, respectively) structures of similar size are observed irrespective of the current limit. Notice that for positive forming (Fig. 8c,e), the defect looks like a spot surrounded by a ring structure. This ring was related to microstructural changes in the dielectric film in the vicinity of the BD spot caused by Joule heating effects [30]. On the other hand, for negative forming (Fig. 8d,f), the observed structure is just a localized defect. The clear differences between the damage induced at negative and positive forming could be attributed to the different contributions of the physical mechanisms involved in the generation of the CF. In a previous study, a self-rectifying effect was observed in Ni/HfO₂/n⁺-Si devices only after positive forming indicating the formation of a Schottky-like barrier between the CF and the semiconductor electrode [22]. The appearance of this barrier suggested the impact of cation migration on the Ni-based CF formation for positive bias. In addition, the hillocks

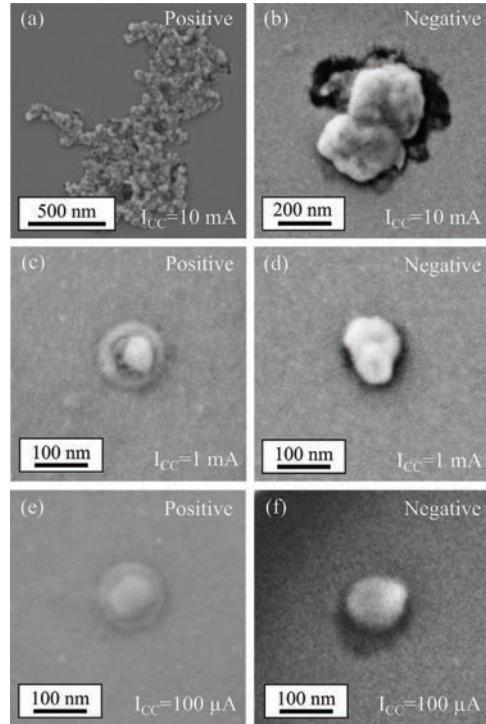


Fig. 8. SEM image of the structures generated on the dielectric surface of Ni/20 nm-HfO₂/n⁺-Si after (a, c, e) a positive breakdown and (b, d, f) a negative breakdown. The I_{CC} applied was (a, b) 10 mA, (c, d) 1 mA and (e, f) 100 μA. The area of the devices is 5 × 5 μm². The structures were revealed after Ni removal.

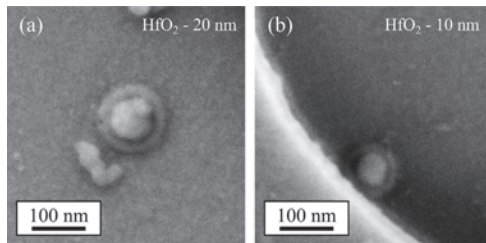


Fig. 9. SEM image of the structures generated after a positive breakdown with $I_{CC} = 1$ mA on the dielectric surface of (a) Ni/20 nm-HfO₂/n⁺-Si and (b) Ni/10 nm-HfO₂/n⁺-Si devices. The structures were revealed after Ni removal.

observed in the 20 nm- and 10 nm-based HfO₂ devices look similar for a given forming polarity and I_{CC} value. In Fig. 9, representative SEM images of the defects observed in devices with different dielectric thickness after a positive forming and $I_{CC} = 1$ mA are shown. As can be seen, the generated defects are very similar for the investigated dielectric thicknesses.

In Fig. 10, the AFM characterization of the defect structure presented in Fig. 8c after positive forming is shown. The AFM image confirms that the structure is formed by a central defect surrounded by a ring as previously detected in the SEM image (Fig. 8c). This is shown in the graphical representations of the horizontal (Fig. 10b) and vertical (Fig. 10c) topographic profiles defined in the AFM image (Fig. 10a).

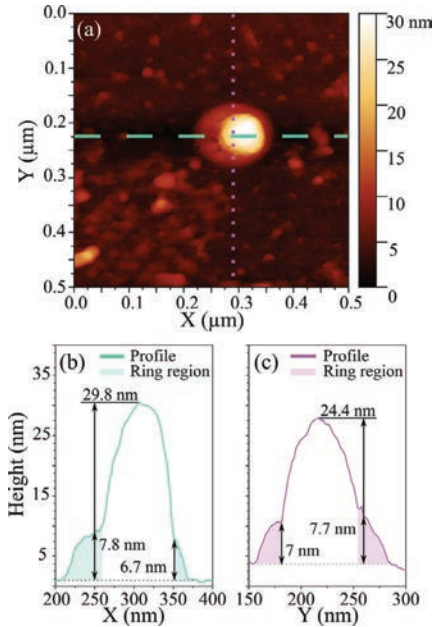


Fig. 10. (a) Topographic AFM image of the structure shown in Fig. 8c created due to positive breakdown with $I_{CC} = 1$ mA. Graphical representation of the (b) dashed line profile and (c) dotted line profile defined in (a).

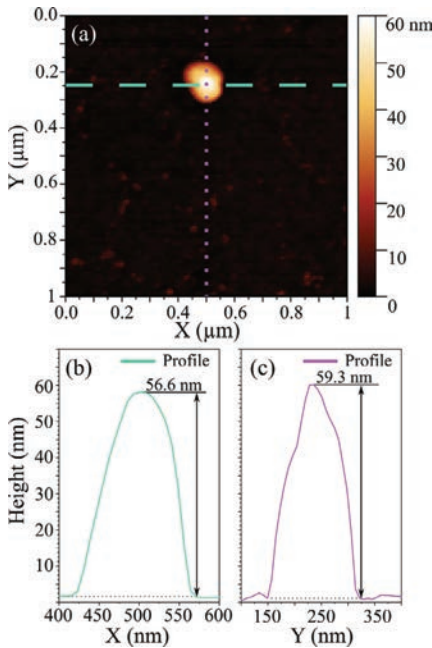


Fig. 11. (a) Topographic AFM image of the structure shown in Fig. 8d created due to negative breakdown with $I_{CC} = 1$ mA. Graphical representation of the (b) dashed line profile and (c) dotted line profile defined in (a).

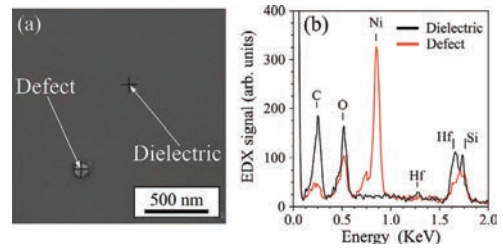


Fig. 12. (a) SEM image of a 20 nm- $\text{HfO}_2/\text{n}^+\text{-Si}$ device after negative dielectric breakdown with $I_{CC} = 100 \mu\text{A}$. (b) EDX analysis of the sample shown in (a) for the defect and dielectric regions.

Notice that in both representations the profile of the ring is marked by a shaded region. The inspection reveals that the ring is not uniform and has a height of 7–8 nm approximately. Moreover, the defect surrounded by the ring has ~ 30 nm-height. In Fig. 11a, the AFM topographic image of the defect shown in Fig. 8d after negative forming is presented. These results confirm that the defects generated at negative polarities with small I_{CC} are isolated and localized defects with a height of ~ 60 nm (Fig. 11b,c). Notice that the defects formed at negative bias are taller than those generated at positive forming polarities, while the size of the defects are very similar for both forming polarities when low current limits are used. In both cases, the defects are located above the dielectric surface, indicating that the structure was in the top electrode before the chemical etching.

After the AFM inspections, the EDX analysis of the active area surface was performed. Fig. 12a and 12b show a SEM image of a 20 nm- $\text{HfO}_2/\text{n}^+\text{-Si}$ device after forming at negative polarity with $I_{CC} = 100 \mu\text{A}$ and its corresponding EDX analysis. The obtained EDX spectra of the dielectric layer (Fig. 12b) confirms that the chemical etching correctly removed the top electrode as no Ni is detected. However, when the defect site is analyzed, a significant peak at the Ni energy position is detected. This peak is observed in the electrically generated structure of all the investigated cases regardless the forming polarity, the current compliance and the dielectric thickness. This result suggests the generation of a Ni-based compound on the dielectric surface during the forming process resistant to the Ni etching process. The formation of a crystalline conductive channel composed of a Ni-Si- HfO_2 compound and the generation of a Ni-Si compound resistant to the Ni etching process in the top electrode of Ni/ $\text{HfO}_2/\text{n}^+\text{-Si}$ devices after a negative forming process was also discussed in [25].

After analyzing the effect of the forming process, the impact of RS cycling on the forming-induced defect was evaluated. After unipolar RS cycling and chemical removal of the Ni layer, a hillock was observed in most of the devices. A SEM image of a typical defect in a 10 nm-thick HfO_2 device after five positive unipolar RS cycles is shown in Fig. 13. It is important to point out that RS changes the conducting properties of the CF located at the defect position [28]. Therefore, the location of the damaged region observed after RS is determined by the forming process. As can be seen, the cycling modifies the shape and size of the damaged region generated during the forming process as a consequence of the increased diffusion of the materials (Ni, Si, Hf and O) that form the CF inside the dielectric and the defect in the top electrode as previously discussed. Although this is the typical behavior observed, in some devices a large physical degradation of the active area occurred due to cycling, completely affecting the top electrode. This was observed for both positive and negative unipolar RS (see Fig. 14a and Fig. 15a). In order to determine the reason behind this large degradation, the evolution of the I - V characteristic was analyzed in detail. Trying to understand the generation of this large degradation is of utmost importance from a reliability point of view as it could help avoiding this phenomenon in real applications.

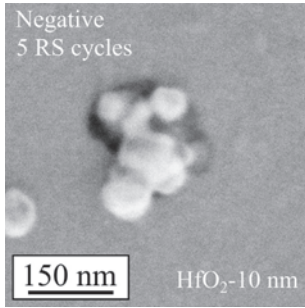


Fig. 13. SEM image of a 10 nm-HfO₂/n⁺-Si device after 5 negative unipolar RS cycles with $I_{CC} = 100 \mu\text{A}$.

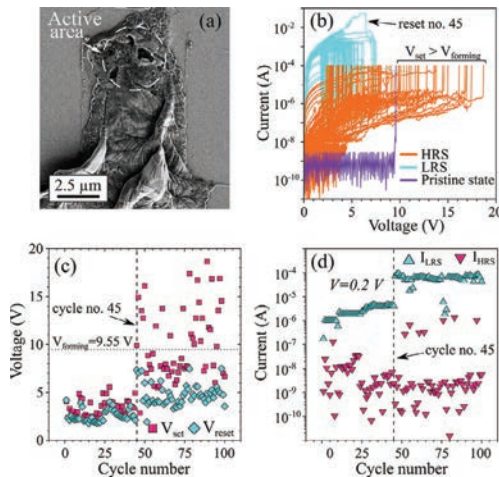


Fig. 14. (a) SEM image of a device after positive unipolar RS cycling showing a large degraded region. Device area is $2 \times 2 \mu\text{m}^2$. (b) Current–Voltage characteristics of the RS cycling measurements. (c) V_{set} and V_{reset} values, and (d) I_{LRS} and I_{HRS} at $V = 0.2 \text{ V}$ as a function of cycle number.

In Fig. 14, the results obtained in the case of positive unipolar RS are shown. After removing the Ni layer, SEM inspections (Fig. 14a) reveal that the metal layer has been severely damaged, with a large structure extending not only over the active area but also over the contact pad. This degradation of the top electrode is observed for both dielectric thicknesses, being mostly observed in devices with an area of $2 \times 2 \mu\text{m}^2$. In Fig. 14b, the corresponding I – V characteristics for the stressed device are shown. At some point during cycling, an anomalous $V_{\text{set}} > V_{\text{forming}}$ trend is observed which is contrary to what is expected for an optimal RS performance [6]. In Fig. 14c, the evolutions of V_{set} and V_{reset} are shown. The evolutions of I_{LRS} and I_{HRS} measured at a voltage of 0.2 V are represented in Fig. 14d. When analyzing the V_{set} cycle-to-cycle variability (Fig. 14c), it is observed that the unexpected behavior starts from a particular cycle (#45), and it is indeed at this cycle that the LRS current reaches values higher than 10 mA (see Fig. 14b). After the reset event #45, V_{set} (Fig. 14c) starts exhibiting higher values than V_{forming} with a sudden variance increase. In addition, V_{reset} as well as its variance increase but they are not as large as in the case of V_{set} . Notice that I_{LRS} increases more than one decade after reset #45 (see Fig. 14d). After analyzing several samples, it is concluded that if the current before the reset process reaches values higher than 10 mA , an irreversible physical damage occurs in the device likely because of

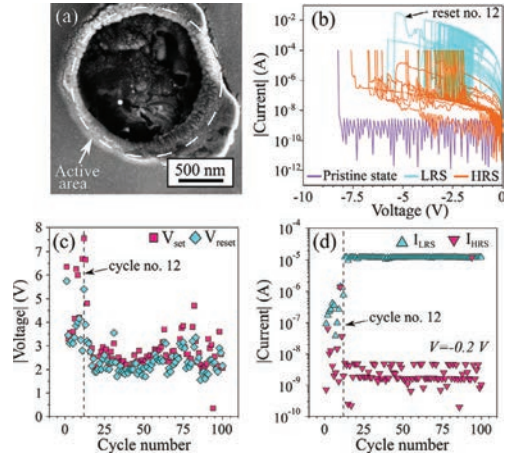


Fig. 15. (a) SEM image of a device after negative unipolar RS cycling showing a crater-like structure. Device area is $2 \times 2 \mu\text{m}^2$. (b) Current–Voltage characteristics of the RS cycling measurements. (c) V_{set} and V_{reset} values, and (d) I_{LRS} and I_{HRS} at $V = -0.2 \text{ V}$ as a function of cycle number.

Joule heating effects. Remarkably, the current increase is not abrupt but progressive (Fig. 14b) so that the extension of the damaged area might be the result of this dissipation process taking place during the reset operation. Notice that even in the most severely damaged device, RS cycles are still observable. This indicates that the device is not completely burned but only part of its structure has been altered. This degradation effect likely acts as a series resistor so that the high V_{set} values measured do not reveal the actual voltage applied to the CF.

In Fig. 15, the analysis of an uncontrolled degradation produced after a negative unipolar RS is shown. Following the same procedure as in the case of positive unipolar RS, SEM inspections of the destruction process observed in the top electrode were first carried out (Fig. 15a). Here, the active area of the device is completely destroyed showing a crater-like structure. This uncontrolled damage of the top electrode is observed for both dielectric thicknesses but only for devices with the smallest active area ($2 \times 2 \mu\text{m}^2$). As can be seen, the typical structures generated on the top electrode are different for positive and negative RS cycling: while the damage extends all over the top electrode for positive stress, in the case of negative cycling the damage is localized in the active area of the device. In Fig. 15b, the RS cycles measured in the device presented in Fig. 15a are shown. As in positive cycling, notice that from a particular cycle number (reset #12) a sudden current increase above 10 mA is shown. This electrical behavior is observed in all the severely damaged samples. The analysis of the I – V characteristics (Fig. 15c,d) confirms that after this event, the properties of the device changed because of the degradation of the top electrode. Fig. 15c shows $|V_{\text{set}}|$ and $|V_{\text{reset}}|$ as a function of the cycle number, and Fig. 15d shows the evolution of $|I_{\text{LRS}}|$ and $|I_{\text{HRS}}|$ measured at a voltage of -0.2 V . The analysis of the results shows that, after the current overshoot, $|V_{\text{set}}|$ and $|V_{\text{reset}}|$ progressively decrease with the cycle number (Fig. 15c). Moreover, the current evolution at the different resistance states (Fig. 15d) clearly indicates that $|I_{\text{LRS}}|$ increases and $|I_{\text{HRS}}|$ decreases after the reset event #12. In addition, the cycle-to-cycle variability is reduced and the memory window increases. After analyzing several devices, it can be concluded that the uncontrolled degradation of the top electrode is a consequence of a sudden increase of the current above 10 mA during a reset process associated with Joule heating effects. Notice that the current increment is abrupt, so the crater-like structure might be the result of a microexplosion due to a sudden dissipation of high thermal energies [30]. Finally, it is worth emphasizing that the

device still shows RS cycling after degradation with an increased resistance window. This is not a real improvement since as $|I_{HRS}|$ becomes very low, it would make the reading process hard for practical applications.

4. Conclusions

In this work, the degradation of the Ni/HfO₂ interface in Ni/HfO₂/n⁺-Si resistive switching devices caused by the forming step and the subsequent cycling were investigated. After etching the top metal electrode, a localized Ni-based compound on the dielectric surface associated with the forming process was evidenced by SEM-EDX, indicating the diffusion of Ni towards the bottom electrode during the forming process. Furthermore, an in-depth investigation of the impact of the forming polarity and current limitation on the shape and size of the generated defects, showed that the shape of the damaged region depends on the stressing conditions and that its size increases when high current values ($I_{CC} = 10$ mA) are allowed. In addition, the damaged region was shown to change in shape and size when performing RS cycling, an effect that can be attributed to the increased diffusion of materials through the CF. Finally, an uncontrolled degradation of the top electrode was observed which can be related to a current overshoot during RS operation. This aggressive physical degradation modifies the switching performance of the devices. Under these circumstances, despite the devices are still switching, the large damaged area could extend to adjacent devices when placed in a cross-bar configuration which could be a serious reliability concern. In addition, our results suggest that the current should also be limited in the reset processes to prevent physical degradation of the metal electrode due to current overshoots.

CRedit authorship contribution statement

J. Muñoz-Gorri: Conceptualization, Methodology, Formal analysis, Investigation, Writing - original draft, Writing - review & editing, Visualization. **M.B. González:** Conceptualization, Methodology, Software, Writing - original draft, Writing - review & editing. **E. Miranda:** Writing - original draft, Writing - review & editing, Supervision. **J. Suñé:** Writing - original draft, Writing - review & editing, Supervision, Funding acquisition. **F. Campabadal:** Conceptualization, Methodology, Validation, Resources, Writing - original draft, Writing - review & editing, Supervision, Funding acquisition.

Declaration of Competing Interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Acknowledgments

This work has been partially supported by the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities and the FEDER program through projects TEC2017-84321-C4-1-R and TEC2017-84321-C4-4-R. Also it has made use of the Spanish ICTS Network MICRONANOFABS.

References

- [1] A.S. Oates, Reliability issues for high-k gate dielectrics, *IEEE Int. Electron Devices Meet.* 2003, Washington, DC, USA, IEEE, 2003, pp. 923–926 December 8–10.
- [2] G. Ribes, J. Mitard, M. Denais, S. Bruyere, F. Monsieure, C. Parthasarathy, E. Vincent, G. Ghibaudo, Review on high-k dielectrics reliability issues, *IEEE Trans. Device Mater. Reliab.* 5 (2005) 5–19.
- [3] E.Y. Wu, J.H. Stathis, L.-K. Han, Ultra-thin oxide reliability for ULSI applications, *Semicond. Sci. Technol.* 15 (2000) 425–435.

- [4] J. Suñé, New physics-based analytic approach to the thin-oxide breakdown statistics, *IEEE Electron Device Lett.* 22 (2001) 296–298.
- [5] J. Muñoz-Gorri, S. Monaghan, K. Cherkaoui, J. Suñé, P.K. Hurley, E. Miranda, Spatial analysis of failure sites in large area MIM capacitors using wavelets, *Microelectron. Eng.* 178 (2017) 10–16.
- [6] J.S. Lee, S. Lee, T.W. Noh, Resistive switching phenomena: a review of statistical physics approaches, *Appl. Phys. Rev.* 2 (2015) 031303.
- [7] J. Meena, S. Sze, U. Chand, T.-Y. Tseng, Overview of emerging nonvolatile memory technologies, *Nanoscale Res. Lett.* 9 (2014) 526.
- [8] L. Goux, I. Valov, Electrochemical processes and device improvement in conductive bridge RAM cells, *Phys. Status Solidi A.* 213 (2016) 274–288.
- [9] M. Lübber, I. Valov, Active electrode redox reactions and device behavior in ECM type resistive switching memories, *Adv. Electron. Mater.* 5 (2019) 1800933.
- [10] M. Arita, A. Takahashi, Y. Ohno, A. Nakane, A. Tsurumaki-Fukuchi, Y. Takahashi, Switching operation and degradation of resistive random access memory composed of tungsten oxide and copper investigated using in-situ TEM, *Sci. Rep.* 5 (2015) 17103.
- [11] Y. Yang, P. Gao, L. Li, X. Pan, S. Tappertzhofen, S. Choi, R. Waser, I. Valov, W.D. Lu, Electrochemical dynamics of nanoscale metallic inclusions in dielectrics, *Nat. Commun.* 5 (2014) 4232.
- [12] U. Celano, L. Goux, A. Belmonte, K. Opsomer, A. Franquet, A. Schulze, C. Detavernier, O. Richard, H. Bender, M. Jurczak, W. Vandervorst, Three-dimensional observation of the conductive filament in nanoscaled resistive memory devices, *Nano Lett.* 14 (2014) 2401–2406.
- [13] H. Lv, X. Xu, H. Liu, R. Liu, Q. Liu, W. Banerjee, H. Sun, S. Long, L. Li, M. Liu, Evolution of conductive filament and its impact on reliability issues in oxide-electrolyte based resistive random access memory, *Sci. Rep.* 5 (2015) 7764.
- [14] M.J. Wang, S. Gao, F. Zeng, C. Song, F. Pan, Unipolar resistive switching with forming-free and self-rectifying effects in Cu/HfO₂/n-Si devices, *AIP Adv.* 6 (2016) 025007.
- [15] J.-Y. Chen, C.-L. Hsin, C.-W. Huang, C.-H. Chiu, Y.-T. Huang, S.-J. Lin, W.-W. Wu, L.-J. Chen, Dynamic evolution of conducting nanofilament in resistive switching memories, *Nano Lett.* 13 (2013) 3671–3677.
- [16] F.-Y. Yuan, N. Deng, C.-C. Shih, Y.-T. Tseng, T.-C. Chang, K.-C. Chang, M.-H. Wang, W.-C. Chen, H.-X. Zheng, H. Wu, H. Qian, S.M. Sze, Conduction mechanism and improved endurance in HfO₂-based RRAM with nitridation treatment, *Nanoscale Res. Lett.* 12 (2017) 574.
- [17] U. Celano, L. Goux, R. Degraeve, A. Fantini, O. Richard, H. Bender, M. Jurczak, W. Vandervorst, Imaging the three-dimensional conductive channel in filamentary-based oxide resistive switching memory, *Nano Lett.* 15 (2015) 7970–7975.
- [18] B. Ku, Y. Abbas, A.S. Sokolov, C. Choi, Interface engineering of ALD HfO₂-based RRAM with Ar plasma treatment for reliable and uniform switching behaviors, *J. Alloys Compd.* 735 (2018) 1181–1188.
- [19] G. Piccolboni, G. Molas, D. Garbin, E. Vianello, O. Cueto, C. Cagli, B. Traore, B. De Salvo, G. Ghibaudo, L. Perniola, Investigation of cycle-to-cycle variability in HfO₂-based OxRAM, *IEEE Electron Device Lett.* 37 (2016) 721–723.
- [20] T. Tan, Y. Du, A. Cao, Y. Sun, G. Zha, H. Lei, X. Zheng, The resistive switching characteristics of Ni-doped HfO₂ film and its application as a synapse, *J. Alloys Compd.* 766 (2018) 918–924.
- [21] Y. Yin Chen, G. Pourtois, C. Adelman, L. Goux, B. Govoreanu, R. Degraeve, M. Jurczak, J.A. Kittl, G. Groeseneken, D.J. Wouters, Insights into Ni-filament formation in unipolar-switching Ni/HfO₂/TiN resistive random access memory device, *Appl. Phys. Lett.* 100 (2012) 113513.
- [22] A. Rodriguez-Fernandez, S. Aldana, F. Campabadal, J. Suñé, E. Miranda, F. Jimenez-Molinos, J.B. Roldan, M.B. Gonzalez, Resistive switching with self-rectifying tunability and influence of the oxide layer thickness in Ni/HfO₂/n⁺-Si RRAM devices, *IEEE Trans. Electron Devices* 64 (2017) 3159–3166.
- [23] X. Wu, S. Mei, M. Bosman, N. Raghavan, X. Zhang, D. Cha, K. Li, K.L. Pey, Evolution of filament formation in Ni/HfO₂/SiO₂/Si-based RRAM devices, *Adv. Electron. Mater.* 1 (2015) 1500130.
- [24] M.B. Gonzalez, J.M. Raff, O. Beldarrain, M. Zabala, F. Campabadal, Analysis of the switching variability in Ni/HfO₂-based RRAM devices, *IEEE Trans. Device Mater. Reliab.* 14 (2014) 769–771.
- [25] G. Martín, M.B. González, F. Campabadal, F. Peiró, A. Cornet, S. Estradé, Transmission electron microscopy assessment of conductive-filament formation in Ni-HfO₂-Si resistive-switching operational devices, *Appl. Phys. Express.* 11 (2018) 01401.
- [26] X. Wu, D. Cha, M. Bosman, N. Raghavan, D.B. Migas, V.E. Borisenko, X.-X. Zhang, K. Li, K.-L. Pey, Intrinsic nanofilamentation in resistive switching, *J. Appl. Phys.* 113 (2013) 114503.
- [27] A. Rodriguez, M.B. Gonzalez, E. Miranda, F. Campabadal, J. Suñé, Temperature and polarity dependence of the switching behavior of Ni/HfO₂-based RRAM devices, *Microelectron. Eng.* 147 (2015) 75–78.
- [28] S. Claramunt, Q. Wu, M. Maestro, M. Porti, M.B. Gonzalez, J. Martin-Martinez, F. Campabadal, M. Nafria, Non-homogeneous conduction of conductive filaments in Ni/HfO₂/Si resistive switching structures observed with CAFM, *Microelectron. Eng.* 147 (2015) 335–338.
- [29] A. Chen, Area and thickness scaling of forming voltage of resistive switching memories, *IEEE Electron Device Lett.* 35 (2014) 57–59.
- [30] J. Muñoz-Gorri, D. Blachier, G. Reimbold, F. Campabadal, J. Sune, S. Monaghan, K. Cherkaoui, P.K. Hurley, E. Miranda, Assessing the correlation between location and size of catastrophic breakdown events in high-k MIM capacitors, *IEEE Trans. Device Mater. Reliab.* 19 (2019) 452–460.

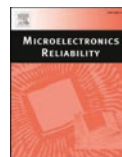
MR 2020

ANALYSIS OF THE SUCCESSIVE BREAKDOWN STATISTICS OF MULTILAYER $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2$ GATE STACKS USING THE TIME-DEPENDENT CLUSTERING MODEL



Contents lists available at ScienceDirect

Microelectronics Reliability

journal homepage: www.elsevier.com/locate/microrel

Analysis of the successive breakdown statistics of multilayer $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2$ gate stacks using the time-dependent clustering model

J. Muñoz-Gorri^{a,*}, M.B. Gonzalez^b, F. Campabadal^b, J. Suñé^a, E. Miranda^a

^a Departament d'Enginyeria Electrònica, Universitat Autònoma de Barcelona, 08193 Cerdanyola del Vallès, Spain

^b Institut de Microelectrònica de Barcelona, IMB-CNM, CSIC, Campus UAB, 08193 Cerdanyola del Vallès, Spain

ABSTRACT

The successive oxide failure statistics theory that arises from the clustering model is used for investigating the time-to-breakdown distributions of $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2$ -based nanolaminates. These gate dielectrics in metal-insulator-semiconductor structures are intended to combine a high injection barrier material (Al_2O_3) with a high- K material (HfO_2). When a constant voltage is applied to the structures, the current-time characteristics exhibit stepwise changes that correspond to the sequential opening of multiple conducting channels across the dielectric film. This study demonstrates that a clustering-based approach successfully describes the ordered breakdown statistics associated with the appearance of these conducting channels. Deviations of the experimental data from the expected Weibull statistics at the high percentiles are accounted for by introducing the so-called clustering factor. The origin of the deviations is attributed to the high dispersion of the initial leakage current value and consequently to the initial conducting properties of the oxide film.

1. Introduction

The continuous miniaturization of metal-insulator-semiconductor (MIS) devices has promoted the investigation of alternative materials with high dielectric permittivity (high- K) with the aim of replacing the more conventional SiO_2 and SiON gate insulators. Among the high- K dielectrics, HfO_2 and Al_2O_3 are two of the most investigated and used ones. $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2$ -based stacks were explored in the past both from the material and reliability viewpoints [1,2]. It was demonstrated that these structures share the properties of both Al_2O_3 (high conduction band offset from Si, $\phi \approx 2.8$ – 3.3 eV [3,4]) and HfO_2 (high K value, $K \approx 22$ [3]). In a previous paper [5], the time-dependent dielectric breakdown (TDDB) statistics of these stacks was shown to depart from the Weibull distribution. However, by appropriate screening of the lifetime data, the failure statistics turned out to be Weibull-distributed. Under this consideration, the theory of uncorrelated successive breakdown (BD) events could be successfully applied to the first 10 failure events ($k \leq 10$).

As it is well known, the Weibull model plays a central role in oxide reliability analysis [6]. However, as the feature size of MIS devices reduces and/or more steps are introduced in the fabrication process, spatial variability across the wafer seems to be inevitable. As a consequence, the device lifetime distribution exhibits a large deviation from the expected behavior inherent to the stochastic nature of the BD process. A number of non-Weibull models have been proposed for

dealing with the oxide time-to-BD statistics with variability. In this regard, some years ago, Wu et al. [7] proposed a simple approach called the time-dependent clustering (TDC) model that accounts for the deviation of the TDDB data at the high percentiles. According to the TDC model, defects or defective cells tend to cluster instead of following a complete spatial randomness process. The TDC model has been shown to successfully describe not only the time-to-first BD statistics of SiO_2 -based MIS devices with variability but also the successive BD statistics [8].

In this work, we focus the attention on the ordered breakdown statistics of multilayer $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2$ -based stacks used as gate dielectrics in MIS structures. First, we thoroughly investigate the failure distribution corresponding to the 1st BD event, showing the superiority of the clustering approach over other parametric models. Selection of the model parameters at this stage is critical for the rest of the analysis. Second, we apply the clustering model to evaluate the time-to-BD distributions of the nanolaminates for successive BD events. It is worth mentioning that a previous study on this subject was reported in [8] but with limited available data. Our work demonstrates that up to the order 15th ($k = 15$) the successive BD events can be considered to be uncorrelated. We pay special attention to the strong correlation observed between the deviation of the BD data at the highest percentiles (longest BD times) and the initial leakage current value of our devices. This connection is suggested to be a key issue for understanding the nanolaminate BD statistics with variability.

* Corresponding author.

E-mail address: jordi.munoz.gorri@uab.cat (J. Muñoz-Gorri).

<https://doi.org/10.1016/j.microrel.2020.113748>

Received 29 May 2020; Accepted 2 July 2020

0026-2714/© 2020 Elsevier Ltd. All rights reserved.

2. Device and experimental setup

In this work, MIS capacitors with a 5-layer nanolaminate high- K stack ($\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$) and square area of $980 \times 980 \mu\text{m}^2$ were investigated. The devices were fabricated on p^+ -Si (100) substrates with resistivity of $0.1\text{--}1.4 \Omega \times \text{cm}$ following the process flow detailed in [1]. The top electrode is a 500 nm-thick Al/0.5%Cu layer and the nanolaminate is a ~ 10 nm-thick layer where each Al_2O_3 and HfO_2 film is a ~ 2 nm-thick layer grown by atomic layer deposition. The bottom of the p^+ -Si substrate was Al metallized. Electric measurements were performed by grounding the bottom contact and applying the voltage to the top electrode. Due to the p-type nature of the Si substrate, negative voltages were used for stressing the devices, i.e. electron injection from the top electrode. A typical current-voltage (I - V) characteristic for the devices investigated in this paper is illustrated in Fig. 1. The inset shows the schematic cross-section of the device. A few steps can be observed in the I - V curve which indicates the formation of multiple conducting filaments. This is better observed in the current-time (I - t) curves. In order to study the time-to-BD distributions, a constant voltage of -7 V was applied to the top electrode of the structures during a maximum of 530 s. The I - t characteristics of 41 devices were measured. The results are illustrated in Fig. 2. The generation of several BD events in each I - t curve is clearly observed. Each step is associated with the appearance of a new percolation path across the oxide film. Initially, the current measured in the devices is very small ($4 \cdot 10^{-6}$ – 10^{-5} A), however, as the stress proceeds, it slowly

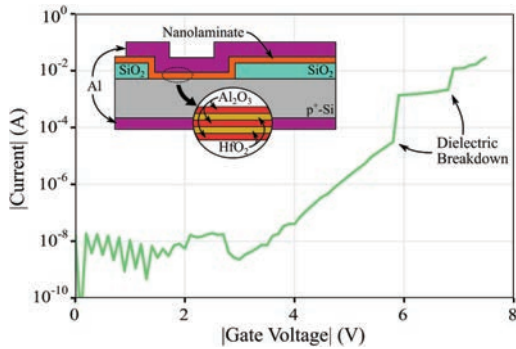


Fig. 1. Typical I - V characteristics of the investigated devices. The steps indicate the generation of BD events. The inset is a cross-sectional sketch of the device.

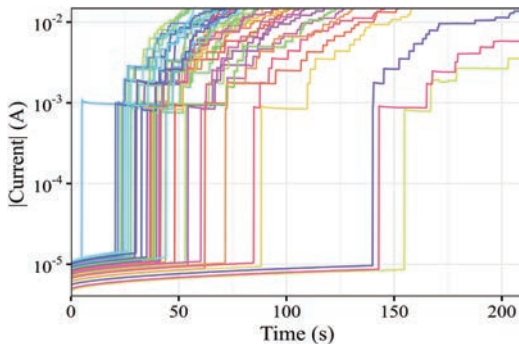


Fig. 2. I - t characteristics corresponding to 41 devices. The stress voltage is -7 V.

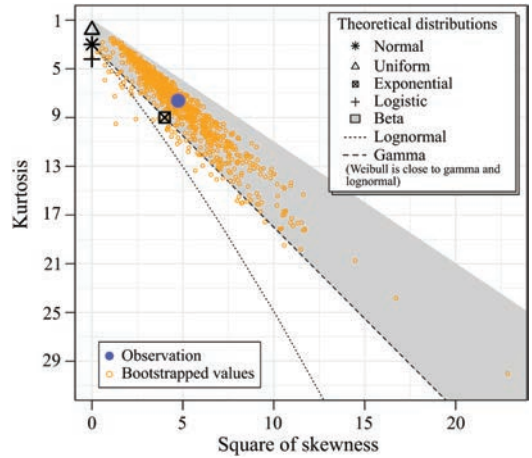


Fig. 3. Culley and Frey SK plot for candidate distributions. Yellow circles are bootstrapped data. Blue dot is the observed value. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

increases until the occurrence of the 1st BD event which corresponds to a current jump of two orders of magnitude. The analysis of the first and subsequent failure data was performed using MATLAB and the *fitdistrplus* package for the R language [9].

3. Exploratory analysis of the time-to-1st BD event

In order to assess which model better represents the generation of BD events in the nanolaminate, the distribution of the time-to-1st BD (t_f) was thoroughly examined. Fig. 3 shows a Culley and Frey skewness-kurtosis (SK) plot. In this plot, several distributions are compared with the available data (blue dot). The SK plot serves as an indication of possible candidate distributions. It is worth pointing out that this plot represents a basic summary of the properties of a distribution, therefore other features of the experimental and candidate distributions need to be examined before concluding which one suits better. Looking at the results in Fig. 3, our data are compatible with the beta distribution family and are close to the Weibull, lognormal and gamma distributions. The exponential distribution is disregarded because of the shape of the experimental probability density function (PDF). In Fig. 4, four goodness-of-fit plots are shown that graphically compare the experimental distribution with the parametric models (including clustering). The models were also evaluated using the goodness-of-fit statistics and criteria applying different tests (see Table 1). In Fig. 4, PDF (Fig. 4a), cumulative distribution function (CDF) (Fig. 4b), quantile-quantile (Q-Q) plot (Fig. 4c) and percentile-percentile (P-P) plot (Fig. 4d) for the t_f experimental data and theoretical distributions are shown. As can be seen in the histogram plot (Fig. 4a), though the majority of the 1st BD events occur at times shorter than 50 s, the tail of the distribution is still important. This is confirmed by the experimental CDF shown in Fig. 4b. While the Q-Q plot (Fig. 4c) is good for evaluating the tails of the distributions, the P-P plot (Fig. 4d) emphasizes the deviations at the centres of the distributions [9]. In this representation, coincident distributions must follow a straight line. In all four plots, the TDC (clustering) model shows the best results among all the different parametric models. This is also confirmed by the goodness-of-fit statistics and criteria values shown in Table 1 as the TDC is the theoretical distribution showing the lowest values for all the tests applied. Notice that we paid special attention to the determination of the distribution model corresponding to the time-to-1st BD since this selection as well as the

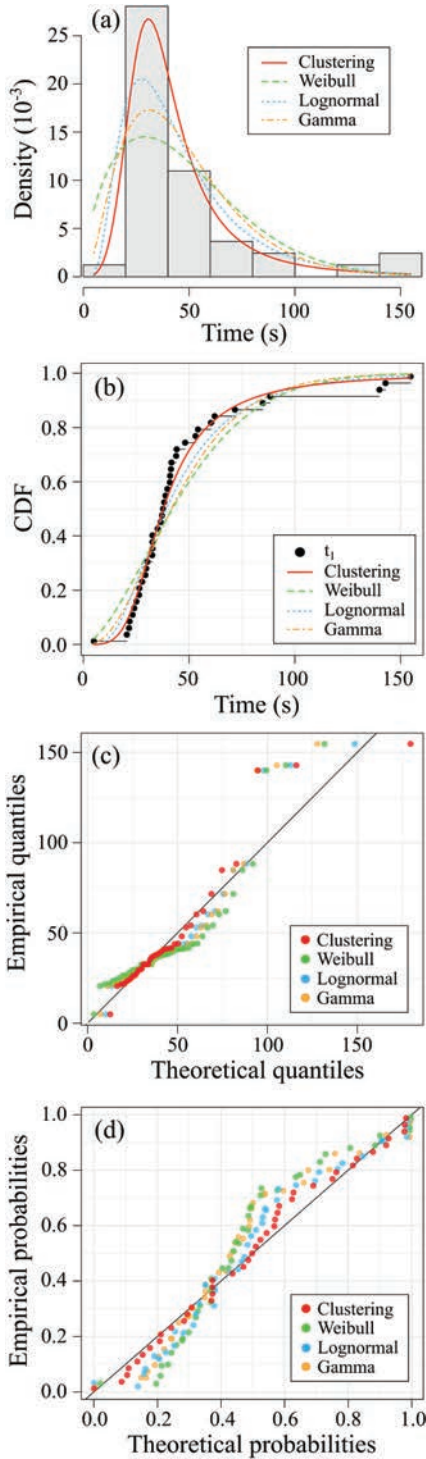


Fig. 4. Four-panel plot for time-to-1st BD. (a) Histogram and theoretical densities, (b) empirical and theoretical CDF, (c) Q-Q plot, and (d) P-P plot.

Table 1

Goodness-of-fit statistics (Kolmogorov-Smirnov, Cramer-von Mises, Anderson-Darling) and criteria (Akaike's and Bayesian).

	Method	Weibull	Lognormal	Gamma	Clustering
Stat.	K-S	0.2043	0.1515	0.1932	0.1037
	C-vM	0.4138	0.1796	0.2987	0.0521
	A-D	2.3671	1.1677	1.7664	0.4291
Cri.	AIC	386.73	378.13	381.13	373.35
	BIC	390.15	381.56	384.56	378.49

In bold is indicated best result for each Goodness-of-fit.

determination of its parameters have a notable effect in the successive BD distributions.

4. Time-dependent clustering model

As already mentioned in Section 1, the TDC model was proposed by Wu et al. [7] as an extension of the Weibull model for non-uniform dielectric BD. This model uses three parameters in the CDF:

$$F_C(t) = 1 - \left[1 + \frac{1}{\alpha} \left(\frac{t}{\tau} \right)^\beta \right]^{-\alpha} \quad (1)$$

α is the clustering factor (a measure of variability), τ the scale factor, and β the shape factor. For high percentiles the distribution is mainly controlled by α whereas at low percentiles, TDC coincides with the Weibull distribution being β the slope of the distribution and τ the time-to-failure at 63% ($t_{63\%}$). When $\alpha \rightarrow \infty$ in Eq. (1), the Weibull distribution is recovered:

$$F_W(t) = 1 - e^{-(t/\tau)^\beta} \equiv 1 - e^{-(t/t_{63\%})^\beta} \quad (2)$$

In order to get the clustering model parameters (α, β, τ) for the experimental distribution corresponding to t_1 , the maximum likelihood estimation (MLE) method was applied. In Table 2, the parameters obtained with the different optimization methods considered are shown. As can be seen, similar parameters are found regardless of the method used. For the sake of simplicity, we assume the parameters found by the Nelder-Mead (NM) method.

In Fig. 5, the experimental and TDC model CDFs for t_1 are compared. As can be seen, for low percentiles the experimental data clearly follow a Weibull-type distribution. However, at high percentiles a deviation in the distribution towards longer times is observed. The TDC model nicely agrees with the whole experimental curve. Interestingly, the TDC model (Eq. (1)) can be regarded as a compound Weibull process with a distribution of scale parameters η [10], that is:

$$F_C(t; \alpha, \beta, \tau) = \int F_W(t; \beta, \eta) p(\eta; \alpha, \beta, \tau) d\eta \quad (3)$$

where $p(\eta) = p(\eta; \alpha, \beta, \tau)$ denotes the PDF for η , which expresses as:

$$p(\eta) = \frac{\alpha^\alpha}{\Gamma(\alpha)} \frac{\beta}{\eta} \left(\frac{\tau}{\eta} \right)^{\alpha\beta} \cdot \exp \left[-\alpha \left(\frac{\tau}{\eta} \right)^\beta \right] \quad (4)$$

Table 2

Model parameters for clustering model (Nelder-Mead, Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno, simulated annealing, conjugate gradients).

Parameters	NM	BFGS	SANN	CG
α	0.592	0.593	0.6	0.593
β	4.258	4.259	4.24	4.259
τ	35.416	35.415	35.63	35.415

In bold are indicated the values used for computing the clustering model.

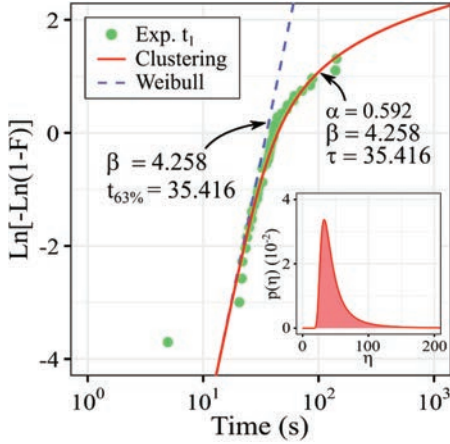


Fig. 5. Experimental CDF for the 1st BD event; and Weibull and clustering distributions with NM parameters (Table 2). The inset shows the PDF $p(\eta)$.

where α , β , τ are the TDC model parameters and Γ the gamma function. According to Eq. (4), η^β follows an inverse gamma distribution. The inset in Fig. 5 shows $p(\eta)$ for the NM model parameters listed in Table 2. $p(\eta)$ is a measure of the weight of each Weibull component contributing to the TDC model represented in Fig. 5. The tail of $p(\eta)$ at high η values defines the bending of the CDF at the high percentiles. The fact that the TDC model can be regarded as a superposition of Weibull distributions with different scale factors indicates that the generation of BD events in our samples still follows a Weibull model but with varying characteristics. From the I - t curves of the investigated devices shown in Fig. 2, it is clear that there is a correlation between the BD time t_1 and the initial leakage current I_0 , which also suggests a connection of the 1st BD event with the injected charge-to-breakdown (Q_{BD}). In order to investigate the role played by the injected charge, Q_{BD} was computed for each device as the integral of the current. In Fig. 6a, the relationship of Q_{BD} - I_0 is plotted. The experimental trend can be fitted to a power-law model $Q_{BD} \sim I_0^{-1.83}$. In a first approach, the variability in I_0 can be associated with variability of the film thickness. According to this idea, the deviation at the high percentiles is likely a consequence of the inclusion of devices with an anomalous oxide thickness [5]. To help with the analysis, the Q_{BD} distribution is shown in Fig. 6b. Notice that the colour of each point is determined by the value of I_0 . As can be seen, the distribution also follows a clustering model (Eq. (1)) with the charge as the random variable instead of the time. Comparing the t_1 and Q_{BD} clustering parameters, Figs. 5a and 6b, respectively, higher values for β and α are observed for Q_{BD} than for t_1 , i.e. Q_{BD} distribution exhibits a lower dispersion and is closer to a Weibull distribution than t_1 . Therefore, although variability of the oxide thickness seems to be behind the dispersion in the leakage current, the role played by the injected charge in the BD time cannot be ruled out. In the end, all the investigated variables are interrelated.

5. Successive breakdown statistics

So far, the time-to-1st BD distribution has been analysed in detail. For the analysis of the successive BD statistics, the CDF corresponding to the TDC model with uncorrelated events is considered [8]:

$$F_k(t) = 1 - \sum_{i=0}^{k-1} \frac{\Gamma(\alpha + i)}{i! \Gamma(\alpha)} \frac{\left[\frac{1}{\alpha} \left(\frac{t}{\tau} \right)^\beta \right]^i}{\left[1 + \frac{1}{\alpha} \left(\frac{t}{\tau} \right)^\beta \right]^{\alpha+i}} \quad (5)$$

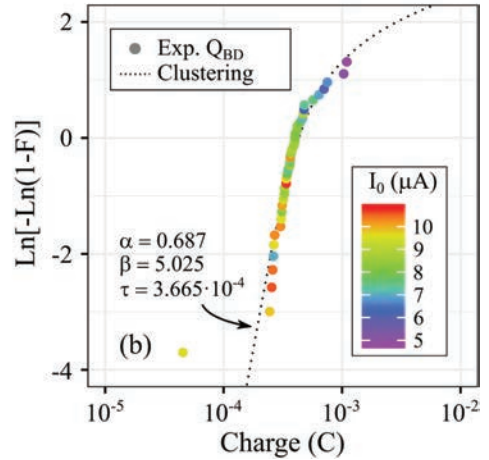
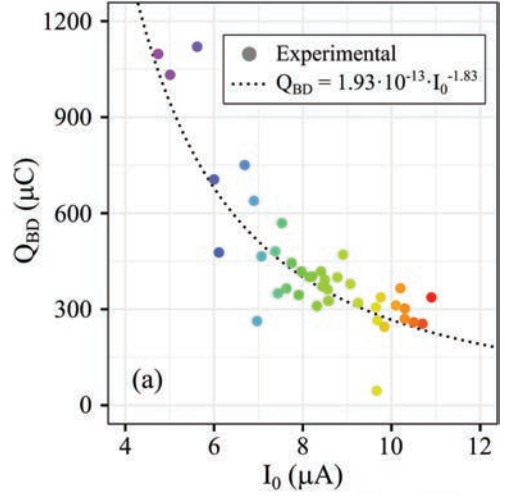


Fig. 6. (a) Correlation between the initial current and injected charge-to-breakdown. (b) Experimental CDF for the charge through the nanolaminate until the 1st BD event and clustering distribution with NM parameters. The colour map indicates the I_0 value that corresponds to each charge value. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

where α , β and τ are the TDC model parameters corresponding to the first event (t_1); k is the number of the BD event and Γ the gamma function. Notice that, for $k = 1$, Eq. (5) becomes Eq. (1). The experimental F_k from $k = 1$ to $k = 15$ were evaluated and compared with the results provided by Eq. (5) using the TDC parameters obtained in Section 4. As can be seen in Fig. 7, the successive TDC model distributions (solid lines) exhibit an acceptable agreement with the experimental data (symbols) for both the high and low percentiles. In a previous paper [5], we showed that these experimental data followed the theory of uncorrelated BD events obtained with the Weibull distribution after a data screening for the high percentiles. Here we show that with the TDC model no data screening is required. It is worth emphasizing the importance of selecting the correct model parameters for the first distribution. In Section 4 we showed that the TDC model becomes the Weibull model at low percentiles, however this is only

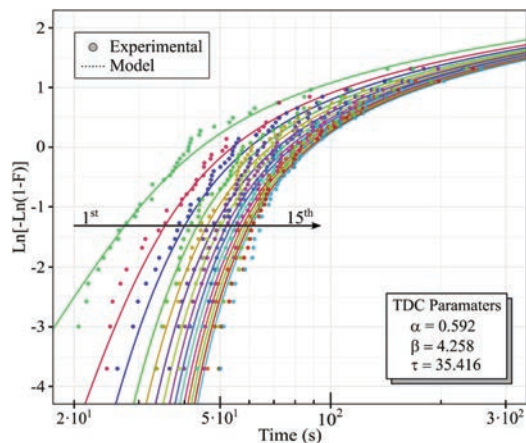


Fig. 7. Experimental and model Weibits for the first 15 successive BD events.

valid for the 1st BD event. For successive BD events the values obtained from TDC and Weibull models with the same parameters diverge [11] leading to large deviations in the BD times at the low percentiles. Despite the successive BD theory with TDC model nicely fits the experimental data from $k = 1$ to $k = 10$, for higher order BD events ($k > 10$) the model exhibits a slight deviation from the experimental data at the low percentiles. This deviation progressively increases as k increases and despite it is negligible for the curves shown in Fig. 7, this could be a problem for fitting the distributions corresponding to higher BD orders and can be a serious concern for extrapolating the BD times to the very low percentiles [11].

6. Conclusions

The breakdown statistics of $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2$ -based nanolaminates was investigated using the TDC model. The exploratory study of the time-to-1st BD showed the superiority of the TDC model over a number of parametric distributions. The deviations at the high percentiles was ascribed to the variability of the initial leakage current and as a possible cause, the variability of the nanolaminate thickness was suggested. The good agreement between theory of successive BD events based on the TDC model and the corresponding experiments is a clear indication of non-uniform BD distribution in our devices [7,8].

Declaration of competing interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Acknowledgements

This work has been supported by the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities and the FEDER program through projects TEC2017-84321-C4-1-R and TEC2017-84321-C4-4-R.

References

- [1] F. Campabadal, J.M. Rafi, M. Zabala, O. Beldarrain, A. Faigón, H. Castán, A. Gómez, H. García, S. Dueñas, Electrical characteristics of metal-insulator-semiconductor structures with atomic layer deposited Al_2O_3 , HfO_2 , and nanolaminates on different silicon substrates, *J. Vac. Sci. Technol. B, Nanotechnol. Microelectron. Mater. Process. Meas. Phenom.* 29 (2011) 01AA07, <https://doi.org/10.1116/1.3532544>.
- [2] A. Rodríguez, M.B. González, F. Campabadal, J. Suñé, E. Miranda, Breakdown time statistics of successive failure events in constant voltage-stressed $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2$ nanolaminates, *Microelectron. Eng.* 147 (2015) 85–88, <https://doi.org/10.1016/j.mee.2015.04.048>.
- [3] J.D. Casperson, L.D. Bell, H.A. Atwater, Materials issues for layered tunnel barrier structures, *J. Appl. Phys.* 92 (2002) 261–267, <https://doi.org/10.1063/1.1479747>.
- [4] J.C. Brewer, R.J. Walters, L.D. Bell, D.B. Farmer, R.G. Gordon, H.A. Atwater, Determination of energy barrier profiles for high-k dielectric materials utilizing bias-dependent internal photoemission, *Appl. Phys. Lett.* 85 (2004) 4133–4135, <https://doi.org/10.1063/1.1812831>.
- [5] C. Martínez-Domingo, X. Saura, A. Conde, D. Jiménez, E. Miranda, J.M. Rafi, F. Campabadal, J. Suñé, Initial leakage current related to extrinsic breakdown in $\text{HfO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ nanolaminate ALD dielectrics, *Microelectron. Eng.* 88 (2011) 1380–1383, <https://doi.org/10.1016/j.mee.2011.03.132>.
- [6] E.Y. Wu, R.-P. Vollertsen, On the weibull shape factor of intrinsic breakdown of dielectric films and its accurate experimental determination—part II: experimental results and the effects of stress conditions, *IEEE Trans. Electron Devices* 49 (2002) 2141–2150, <https://doi.org/10.1109/TED.2002.805603>.
- [7] E.Y. Wu, B. Li, J.H. Stathis, Modeling of time-dependent non-uniform dielectric breakdown using a clustering statistical approach, *Appl. Phys. Lett.* 103 (2013) 152907, <https://doi.org/10.1063/1.4824035>.
- [8] E.Y. Wu, Facts and myths of dielectric breakdown processes—part II: post-breakdown and variability, *IEEE Trans. Electron Devices* 66 (2019) 4535–4545, <https://doi.org/10.1109/TED.2019.2933615>.
- [9] M.L. Delignette-Muller, C. Dutang, Fitdistplus : an R package for fitting distributions, *J. Stat. Softw.* 64 (2015) 1–34, <https://doi.org/10.18637/jss.v064.i04>.
- [10] T. Shimizu, N. Suzumura, K. Ohgata, H. Tsuchiya, H. Aono, M. Ogasawara, A new aspect of time-dependent clustering model for non-uniform dielectric TDDB, 2016 IEEE Int. Reliab. Phys. Symp., Pasadena, CA, 2016, <https://doi.org/10.1109/IRPS.2016.7574513> 3A-4-1-3A-4-10.
- [11] E. Wu, Baozhen Li, J.H. Stathis, R. Achanta, Multiple breakdown phenomena and modeling for non-uniform dielectric systems, 2014 IEEE Int. Electron Devices Meet., San Francisco, CA, 2014, pp. 34.7.1–34.7.4, <https://doi.org/10.1109/IEDM.2014.7047171>.

EDL 2020

APPLICATION OF THE CLUSTERING MODEL TO TIME-CORRELATED OXIDE BREAKDOWN EVENTS IN MULTILEVEL ANTIFUSE MEMORY CELLS

Application of the clustering model to time-correlated oxide breakdown events in multilevel antifuse memory cells

J. Muñoz-Gorri, M. B. Gonzalez, F. Campabadal, J. Suñé, E. Miranda

Abstract— Time statistics for successive breakdown (BD) events in $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2$ -based nanolaminates aimed to the development of multilevel one-time programmable (OTP) memory cells is investigated. The clustering model is shown to account for the departure of the experimental data from the standard Weibull model attributed to the initial leakage current dispersion. An equivalent electrical circuit model is used to represent the stepwise current increase triggered by the appearance of multiple BD sites. Correlation effects in the order statistics are ascribed to a reduction of the effective stress voltage caused by the presence of a series resistance. It is shown that the *E*-model acceleration law for dielectric BD is consistent with the data obtained from our antifuse cells.

Index Terms—clustering model, oxide breakdown, memory, OTP, one-time-programmable

I. INTRODUCTION

DESPITE the huge demand for faster, cheaper, and lower power consumption reprogrammable nonvolatile memories [1], there is still room for alternative technologies aimed to the development of advanced one-time programmable (OTP) memories. OTPs are central components in applications such as field programmable gate arrays, in equipments requiring security keys or data encryption, and in systems where the user needs to save the information just once [2], [3]. These devices are often classified as fuse [4] or antifuse [5]–[7], depending on the stored logic value: “0” (fuse), “1” (antifuse). In the antifuse case, a bit is stored by inducing the irreversible dielectric breakdown (BD) of a thin oxide film in a metal-insulator-metal or in a metal-insulator-semiconductor structure. The change of state can be achieved by applying a high constant voltage stress (CVS) to the device for a very short time. In OTPs, an access transistor in series with the device is often used to control the read and write operations. The possibility of inducing several BD events in the same device opens the door to multilevel OTPs, thereby to the increment of storage capacity as demonstrated in [8]–[11]. However, because of the incorporation of new materials and fabrication processes,

This work was supported by the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities and the FEDER program through projects TEC2017-84321-C4-1-R and TEC2017-84321-C4-4-R. J. Muñoz-Gorri, J. Suñé and E. Miranda are with the Departament d’Enginyeria Electrònica, Universitat Autònoma de Barcelona, 08193 Cerdanyola del

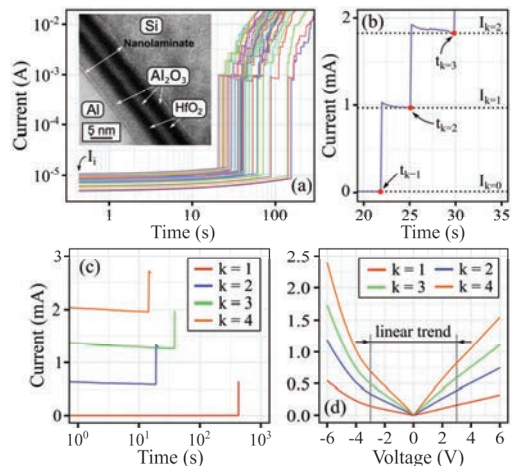


Fig. 1. (a) Experimental *I-t* characteristics ($A=6.4 \cdot 10^3 \mu\text{m}^2$) for $V=-7 \text{ V}$. I_i is the initial leakage current. The inset shows a high resolution cross-sectional TEM image of the investigated devices. (b) Detail of the *I-t* curve. t_k is the BD time for the k -th event. The dotted lines indicate the current level I_k . (c) *I-t* characteristics for a device stressed at -6.5 V with $A=6.4 \cdot 10^3 \mu\text{m}^2$. Each time a BD event is observed, the measurement is stopped. (d) *I-V* characteristics of the device after each BD event detected in (c). The asymmetry of the *I-V* curves reflects the nature of the electron injecting electrode.

spatial variability of the devices across the silicon wafer is a matter to consider [12], [13]. In particular, non-uniform growth of the oxide film has been pointed out as a serious concern for advanced fabrication technologies [14]–[16]. The main consequence of this variability is a deviation at the high percentiles of the time-to-BD statistics when compared to the standard Weibull model. In order to reproduce this feature, Wu *et al.* [17] proposed the time-dependent clustering model (TDCM), a member of the Burr’s family of distributions [18], which includes the Weibull distribution as a limit case. Starting from the original expression for the TDCM, the theory for

Vallès, Spain (e-mail corresponding author: jordi.munoz.gorri@uab.cat). M. B. Gonzalez and F. Campabadal are with the Institut de Microelectrònica de Barcelona, IMB-CNM, CSIC, Cerdanyola del Vallès, Spain.

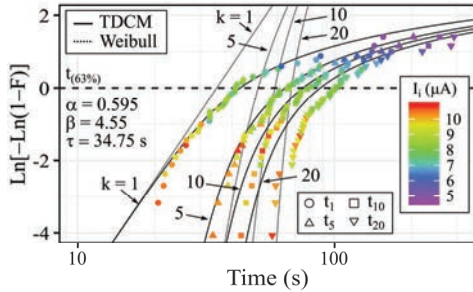


Fig. 2. Weibit plot for selected experimental data (symbols) shown in Fig. 1(a) and uncorrelated theoretical distributions (dotted and solid lines). The parameter values were obtained from the fitting of the TDCM to the $k=1-5$ distributions.

successive uncorrelated BD events can be developed [19], [20]. Alam *et al* [21] have also greatly contributed to this field by introducing a correlation factor in the BD event generation rate. However, the resulting phenomenological approach for the order statistics requires a complex iterative approach that limits its applicability [20]. In this letter, a simple method that incorporates correlation effects into the TDCM for successive BDs is proposed. The method considers a reduction of the effective stress voltage caused by the presence of a series resistance. This study provides relevant information on the multilevel programming capability of high- K nanolaminate-based OTPs and its connection with device-to-device (D2D) variability.

II. DEVICES AND EXPERIMENTAL DETAILS

In this work, Al/nanolaminate/ p^+ Si devices with square areas $A=6.4 \cdot 10^3$, $1.44 \cdot 10^3$, $3.24 \cdot 10^4$, $2.3 \cdot 10^5$, and $9.6 \cdot 10^5 \mu\text{m}^2$ were investigated [22]. Large areas were considered in order to allow the generation of a large number of BD events. The nanolaminates consist in five ~ 2 nm-thick insulating layers ($\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{HfO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$) as shown in the inset of Fig. 1(a). CVS measurements were performed with -7 V applied to the metal electrode and with the Si substrate grounded. Fig. 1(a) shows a set of experimental current-time ($I-t$) characteristics for the investigated devices. Each jump in the $I-t$ curves corresponds to the generation of a new BD event. I_i is the initial leakage current value. Fig. 1(b) shows the notation used in this letter: t_k refers to the time at which the k -th BD event occurs and I_k is the stationary current level reached after this event. Fig. 1(c) and Fig. 1(d) show successive CVSs performed at -6.5 V and the corresponding nonvolatile resistive states, respectively. Notice the linearity of the $I-V$ characteristics in the range $[-3$ V, 3 V] obtained after each BD event. The slight asymmetry is caused by the different injecting electrode. Electrons are minority carriers in the p^+ -type substrate.

III. SUCCESSIVE BD STATISTICS AND CIRCUITAL MODEL

From the TDCM, the cumulative distribution function F_k for uncorrelated successive failure events reads [20]:

$$F_k(t) = 1 - \sum_{i=0}^{k-1} \frac{\Gamma(\alpha+i)}{i! \Gamma(\alpha)} \cdot \left[\frac{t}{\tau} \right]^\alpha \cdot \left[1 + \frac{1}{\alpha} \left(\frac{t}{\tau} \right)^\beta \right]^{-(\alpha+i)} \quad (1)$$

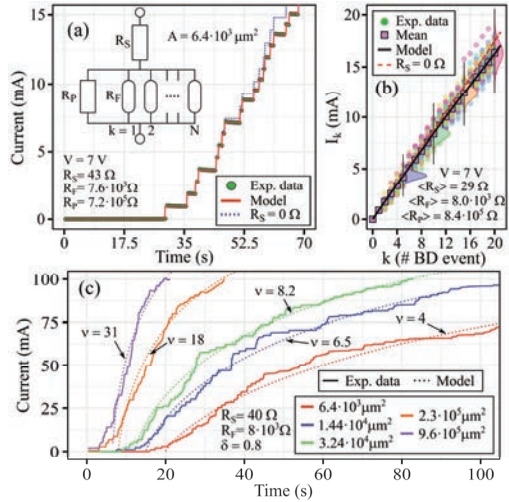


Fig. 3. (a) Experimental and simulated $I-t$ characteristics. The inset is the equivalent circuit model with sequentially generated BD paths. (b) Experimental and mean value of I_k for all the devices investigated ($A=6.4 \cdot 10^3 \mu\text{m}^2$). (c) Experimental $I-t$ characteristics for different areas measured at -7.25 V and their corresponding simulated curves using (2).

where k is the number of BD events, t the time-to-BD, Γ the gamma function, α the clustering factor (a measure of the variability), τ the scale factor, and β the shape factor. The Weibull model can be recovered by taking $\alpha \rightarrow \infty$ in (1) [19], [20], [23]–[25]. Fig. 2 shows the experimental and model Weibits corresponding to $k=1, 5, 10$, and 20 . Notice that for $k=1$ both the Weibull and TDCM models agree at the lowest percentiles, whereas they largely differ at the highest ones. As can be seen, the deviation exhibited by the experimental data is nicely captured by the TDCM and can be linked to those devices with the lowest initial leakage current values. Despite the TDCM accurately fits the order statistics up to $k=8$, the model curves depart from the experimental distributions for higher k values. In order to gain insight into the origin of this deviation, the device under test is represented by the equivalent electrical circuit shown in Fig. 3(a) [26], [27]. In this case, the post-BD $I-V$ characteristic can be expressed as:

$$I_k = \left[R_S + \left[\frac{k(t)}{R_F} + \frac{1}{R_P} \right]^{-1} \right]^{-1} \cdot V \quad (2)$$

where R_S and R_P are series and parallel resistances, respectively, R_F is the resistance of a single BD site (filament), V the applied voltage and $k(t)$ is the number of BD events at time t . While R_P simulates the resistance of the fresh device, R_S accounts for a voltage drop in the structure. Fig. 3(b) shows the experimental I_k-k curves for all the devices shown in Fig. 1(a). In this way, average values for R_S , R_F , and R_P can be obtained. Remarkably, notice that $\langle R_P \rangle^{-1} \approx 1.6 G_0$, where $G_0 = 7.75 \times 10^{-5}$ S is the quantum conductance unit [28], which is an indication of the localized nature of electron transport in these devices [29], [30]. Although the series resistor is relatively small ($\langle R_S \rangle \approx 29 \Omega$), it generates a noticeable current lowering at the highest k values compatible with a voltage drop reduction across the array of

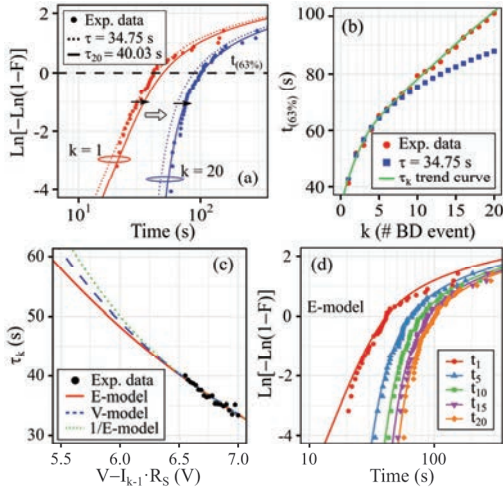


Fig. 4. (a) Comparison of uncorrelated TDCM fitting with τ and τ_k for $k=1$ and $k=20$. t_1 is also shown for clarity as the scale factor always refers to the first BD event. (b) $t_{(63\%)}$ plot for the experimental and uncorrelated TDCM t_k distributions. The line is a guide to the eye. (c) Evaluation of different acceleration laws for the experimental τ_k values. (d) Weibit plots for selected experimental (symbols) and uncorrelated TDCM distributions (lines) with corrected scale factor. The data correspond to devices with $A=6.4 \cdot 10^3 \mu\text{m}^2$ stressed with -7 V (Fig. 1(a)).

filaments (see Figs. 3(a) and 3(b)). This effect will be used for simulating the delay in the BD-time order statistics. Particular measurements carried out in devices with different areas give strong support to the proposed model (2). Dotted lines in Fig. 3(c) were obtained assuming a non-homogeneous Poisson process $k(t) \approx \nu(t-t')^\delta$ in (2), where ν and δ are fitting constants and t' a dead time [27]. For the sake of simplicity, identical values for the model parameters were considered, except for ν and t' . Preliminary results indicate that a power-law relationship holds between ν and the area of the device A ($\nu \approx 53.65 \cdot A^{0.19}$). Since $\delta < 1$, the arrival rate dk/dt decreases as a function of time as experimentally observed [26]. Notice that this simple approach does not include variability which introduces a new dimension to the modelling problem.

IV. EXTENSION OF THE CLUSTERING MODEL

Since, to the best of our knowledge, an analytic expression for correlated BD events is not available yet, a semiempirical approach is proposed next. As shown in Fig. 4(a), by considering a corrected time scale factor τ_k instead of τ in all the terms of the series (1), the uncorrelated TDCM can be extended to deal with the target distribution F_k . For calibration purposes, τ_k is taken as the value that simultaneously fits the experimental and TDCM $t_{(63\%)}$ -BD time (dotted line in Fig. 2) for each k value. Fig. 4(b) shows that for $k > 8$, experimental and model curves follow different trends when no correlation effects are taken into account. The required value for τ_k can be found considering the effective voltage:

$$V_k = V - I_k \cdot R_S \quad (3)$$

in combination with the E -model acceleration law for dielectric

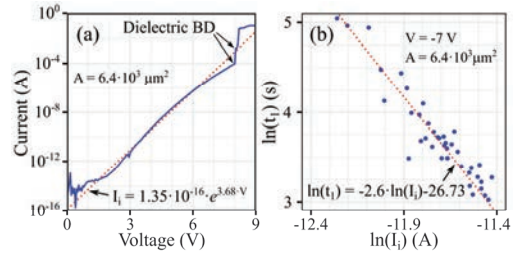


Fig. 5. (a) Typical I - V characteristic of the investigated devices when the metal electrode is negatively biased. (b) Correlation plot between initial leakage current and time-to-first BD event (Fig. 1(a)).

BD [31]. Then, the BD time as a function of the voltage drop across the array of filaments can be expressed as:

$$\tau_k = \tau_0' \cdot \exp(-\gamma \cdot V_{k-1}) \quad (4)$$

where $\gamma = 3.61 \cdot 10^{-1} \text{ V}^{-1}$ and $\tau_0' = 4.20 \cdot 10^2 \text{ s}$ are fitting constants. For the sake of completeness, we have also compared the predictions of (4) with the $1/E$ - and V^n -acceleration models [31]. As shown in Fig. 4(c), it is not possible to discriminate which model better estimates the time scale factor: all three models agree with the experimental data in the voltage range experimentally accessible. However, if the E -model (4) is assumed, (1) can be used to accurately fit all the experimental distributions ($k \leq 20$) (see Fig. 4(d)). Now, concerning the appropriateness of the E -model, Fig. 5(a) shows a typical I - V characteristic measured in one of our devices. Since the experimental curve follows an exponential law of the form:

$$I_l \approx a \cdot \exp(b \cdot E), \quad (5)$$

and considering the E -model for the time-to-first BD event:

$$t_1 \approx c \cdot \exp(-d \cdot E), \quad (6)$$

it is easy to demonstrate that:

$$\ln(t_1) \approx -m \cdot \ln(I_l) + n \quad (7)$$

where a , b , c , d , m , and n are constants. As shown in Fig. 5(b), our experimental data fully agree with (7) assuming that the electric field does not change significantly during the oxide degradation phase. Since $E \approx V/t_{ox}$, the large dispersion of I_l can be interpreted as a variability of the oxide thickness (t_{ox}) across the wafer. In this regard, the deviations observed in F_k at the high percentiles (Fig. 2) likely stems from the inclusion in the analysis of devices with anomalously thicker oxide layers as proposed in [32]. Moreover, the above analysis supports the E -model as the best acceleration law for describing the effective time scale factor in our nanolaminates and the D2D variability.

V. CONCLUSIONS

In this work, multilevel memory cells with correlated breakdown events aimed to the development of OTP devices were investigated. It was shown that time correlation effects can be introduced into the clustering model by means of a corrected time scale parameter. This requires considering the E -model as the acceleration model for dielectric breakdown in combination with an equivalent circuit representation of the investigated structure.

REFERENCES

- [1] J. S. Lee, S. Lee, and T. W. Noh, "Resistive switching phenomena: A review of statistical physics approaches," *Appl. Phys. Rev.*, vol. 2, no. 3, p. 031303, Sep. 2015, doi: 10.1063/1.4929512.
- [2] A. Vijayakumar, V. C. Patil, and S. Kundu, "On improving reliability of SRAM-based physically unclonable functions," *J. Low Power Electron. Appl.*, vol. 7, no. 1, p. 2, Jan. 2017, doi: 10.3390/jlpea7010002.
- [3] K. H. Chuang, E. Bury, R. Degraeve, B. Kaczer, D. Linten, and I. Verbauwhede, "A physically unclonable function using soft oxide breakdown featuring 0% native BER and 51.8 fJ/bit in 40nm CMOS," *IEEE J. Solid-State Circuits*, vol. 54, no. 10, pp. 2765–2776, Oct. 2019, doi: 10.1109/JSSC.2019.2920714.
- [4] M. Shi, J. He, L. Zhang, C. Ma, X. Zhou, H. Lou, H. Zhuang, R. Wang, Y. Li, Y. Ma, W. Wu, W. Wang, and M. Chan, "Zero-mask contact fuse for one-time-programmable memory in standard CMOS processes," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 32, no. 7, pp. 955–957, Jul. 2011, doi: 10.1109/LED.2011.2147754.
- [5] R.-J. Kuo, F.-C. Chang, Y.-C. King, and C.-J. Lin, "Antifuse OTP cell in a cross-point array by advanced CMOS FinFET process," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 66, no. 4, pp. 1729–1733, Apr. 2019, doi: 10.1109/TED.2019.2900282.
- [6] I. V. Ermakov, A. Y. Losevsky, A. V. Nuykin, N. A. Shelepin, and A. S. Kravtsov, "Design and study of a 65 Kb antiFuse OTP ROM in a standard 0.18 um CMOS process," in *2020 IEEE Conference of Russian Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering (EIConRus)*, Jan. 2020, pp. 112–115, doi: 10.1109/EIConRus49466.2020.9038926.
- [7] M. Arosio, C. Boffino, S. Morini, D. Priefert, O. Albayrak, V. Boguszewicz, and A. Baschiroto, "A read/write front-end for an antifuse one-time-programmable memory in high voltage silicon-on-insulator technology," in *2019 IEEE International Conference on Electronics, Circuits and Systems (ICECS)*, Nov. 2019, pp. 606–609, doi: 10.1109/ICECS46596.2019.8964741.
- [8] K. H. Kim, B. S. Kang, M. J. Lee, S. E. Ahn, C. B. Lee, G. Stefanovich, W. X. Xianyu, C. J. Kim, and Y. Park, "Multilevel programmable oxide diode for cross-point memory by electrical-pulse-induced resistance change," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 30, no. 10, pp. 1036–1038, Oct. 2009, doi: 10.1109/LED.2009.2029247.
- [9] Y.-Z. Chen, J. E. Yuan, C. J. Lin, and Y.-C. King, "Multilevel anti-fuse cells by progressive rupturing of the high-k gate dielectric in FinFET technologies," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 37, no. 9, pp. 1120–1122, Sep. 2016, doi: 10.1109/LED.2016.2591581.
- [10] M. Deloge, "Analysis of ultrathin gate-oxide breakdown mechanisms and applications to antifuse memories fabricated in advanced CMOS processes," Ph.D. dissertation, Institut national des sciences appliquées, Lyon, 2011.
- [11] J. Z. Peng, "Semiconductor memory cell and memory array using a breakdown phenomena in an ultra-thin dielectric," U.S. Patent US-6667902-B2, Dec. 23, 2003.
- [12] J. R. Lloyd, X.-H. Liu, G. Bonilla, T. M. Shaw, E. Liniger, and A. Lisi, "On the contribution of line-edge roughness to intralevel TDDB lifetime in low-k dielectrics," in *2009 IEEE International Reliability Physics Symposium (IRPS)*, Apr. 2009, pp. 602–605, doi: 10.1109/IRPS.2009.5173317.
- [13] S. C. Lee, A. S. Oates, and K. M. Chang, "Geometric variability of nanoscale interconnects and its impact on the time-dependent breakdown of Cu/low-k dielectrics," *IEEE Trans. Device Mater. Reliab.*, vol. 10, no. 3, pp. 307–316, Sep. 2010, doi: 10.1109/TDMR.2010.2048031.
- [14] R. S. Rathore, R. Sharma, and A. K. Rana, "Line edge roughness induced threshold voltage variability in nano-scale FinFETs," *Superlattices Microstruct.*, vol. 103, pp. 304–313, Mar. 2017, doi: 10.1016/j.spmi.2017.01.036.
- [15] S. Markov, S. Roy, and A. Asenov, "Direct tunnelling gate leakage variability in nano-CMOS transistors," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 57, no. 11, pp. 3106–3114, Nov. 2010, doi: 10.1109/TED.2010.2075932.
- [16] F. Palumbo, C. Wen, S. Lombardo, S. Pazos, F. Aguirre, M. Eizenberg, F. Hui, and M. Lanza, "A review on dielectric breakdown in thin dielectrics: silicon dioxide, high-k, and layered dielectrics," *Adv. Funct. Mater.*, vol. 30, no. 18, p. 1900657, May 2020, doi: 10.1002/adfm.201900657.
- [17] E. Y. Wu, B. Li, and J. H. Stathis, "Modeling of time-dependent non-uniform dielectric breakdown using a clustering statistical approach," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 103, no. 15, p. 152907, Oct. 2013, doi: 10.1063/1.4824035.
- [18] I. W. Burr, "Cumulative frequency functions," *Ann. Math. Stat.*, vol. 13, no. 2, pp. 215–232, Jun. 1942, doi: 10.1214/aoms/117731607.
- [19] J. Muñoz-Gorri, M. B. Gonzalez, F. Campabadal, J. Suñé, and E. Miranda, "Analysis of the successive breakdown statistics of multilayer Al₂O₃/HfO₂ gate stacks using the time-dependent clustering model," *Microelectron. Reliab.*, to be published, doi: 10.1016/j.microrel.2020.113748.
- [20] E. Wu, B. Li, J. H. Stathis, and R. Achanta, "Multiple breakdown phenomena and modeling for non-uniform dielectric systems," in *2014 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, Dec. 2014, pp. 34.7.1–34.7.4, doi: 10.1109/IEDM.2014.7047171.
- [21] M. A. Alam and R. K. Smith, "A phenomenological theory of correlated multiple soft-breakdown events in ultra-thin gate dielectrics," in *2003 IEEE International Reliability Physics Symposium (IRPS)*, Apr. 2003, pp. 406–411, doi: 10.1109/RELPHY.2003.1197782.
- [22] F. Campabadal, J. M. Rafi, M. Zabala, O. Beldarrain, A. Faigón, H. Castán, A. Gómez, H. García, and S. Dueñas, "Electrical characteristics of metal-insulator-semiconductor structures with atomic layer deposited Al₂O₃, HfO₂, and nanolaminates on different silicon substrates," *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 29, no. 1, p. 01AA07, Dec. 2011, doi: 10.1116/1.3532544.
- [23] E. Y. Wu and R.-P. Vollertsen, "On the weibull shape factor of intrinsic breakdown of dielectric films and its accurate experimental determination-part I: theory, methodology, experimental techniques," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 49, no. 12, pp. 2131–2140, Dec. 2002, doi: 10.1109/TED.2002.805612.
- [24] J. Suñé and E. Y. Wu, "Statistics of successive breakdown events in gate oxides," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 24, no. 4, pp. 272–274, Apr. 2003, doi: 10.1109/LED.2003.812139.
- [25] J. Suñé, E. Y. Wu, and W. L. Lai, "Successive oxide breakdown statistics: correlation effects, reliability methodologies, and their limits," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 51, no. 10, pp. 1584–1592, Oct. 2004, doi: 10.1109/TED.2004.835986.
- [26] A. Rodríguez, M. B. Gonzalez, F. Campabadal, J. Suñé, and E. Miranda, "Electrical characterization of multiple leakage current paths in HfO₂/Al₂O₃-based nanolaminates," *Microelectron. Reliab.*, vol. 55, no. 9–10, pp. 1442–1445, Aug. 2015, doi: 10.1016/j.microrel.2015.05.018.
- [27] A. Rodríguez-Fernández, J. Suñé, E. Miranda, M. B. Gonzalez, and F. Campabadal, "Function-fit model for the rate of conducting filament generation in constant voltage-stressed multilayer oxide stacks," *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 35, no. 1, p. 01A108, Jan. 2017, doi: 10.1116/1.4972873.
- [28] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge University Press, 1995.
- [29] E. Miranda and J. Suñé, "Electron transport through broken down ultra-thin SiO₂ layers in MOS devices," *Microelectron. Reliab.*, vol. 44, no. 1, pp. 1–23, Jan. 2004, doi: 10.1016/j.microrel.2003.08.005.
- [30] S. Long, X. Lian, C. Cagli, X. Cartoixa, R. Rurali, E. Miranda, D. Jiménez, L. Perniola, M. Liu, and J. Suñé, "Quantum-size effects in hafnium-oxide resistive switching," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 102, no. 18, p. 183505, May 2013, doi: 10.1063/1.4802265.
- [31] J. W. McPherson, "Time dependent dielectric breakdown physics – Models revisited," *Microelectron. Reliab.*, vol. 52, no. 9–10, pp. 1753–1760, Sep. 2012, doi: 10.1016/j.microrel.2012.06.007.
- [32] C. Martínez-Domingo, X. Saura, A. Conde, D. Jiménez, E. Miranda, J. M. Rafi, F. Campabadal, and J. Suñé, "Initial leakage current related to extrinsic breakdown in HfO₂/Al₂O₃ nanolaminate ALD dielectrics," *Microelectron. Eng.*, vol. 88, no. 7, pp. 1380–1383, Jul. 2011, doi: 10.1016/j.mee.2011.03.132.

