半导体集成与封装中基于微观组织的多物理场耦合模拟

黄智恒^{①*}, 熊桦^①, 伍智勇^①, CONWAY Paul^②, DAVIES Hugh^③, DINSDALE Alan^③,
恩云飞^④, 曾庆丰^⑤

① 中山大学物理科学与工程技术学院, 广州 510275;

② Wolfson School of Mechanical and Manufacturing Engineering, Loughborough University, Loughborough, LE11 3TU, UK;

③ National Physical Laboratory, Teddington, TW11 0LW, UK;

④ 中国电子产品可靠性与环境试验研究所, 广州 510610;

⑤ 西北工业大学材料学院, 西安 710072

* 联系人, E-mail: hzh29@mail.sysu.edu.cn

2013-04-09 收稿, 2013-06-08 接受, 2013-08-20 网络版发表

国家自然科学基金(51004118)、广州市珠江科技新星专项(2012J2200074)、中央高校基本科研业务费专项(30000-3161451)、教育部留学回国人员科研启动基金(30000-4105346)、中山大学“百人计划”和西北工业大学基础研究基金(JCY20130114)资助

摘要 半导体技术与封装正向系统集成方向加速发展. 在未来的系统集成中, 将会同时设计和制造封装与晶片的制备. 但是, 材料的因素, 尤其是微观组织, 至今还在电子封装的集成产品设计平台考虑之列, 究其原因电子封装使用的材料众多而且发生的材料现象复杂. 在材料基因组计划(MGI)的背景下, 本文综述一系列的研究工作, 旨在建立材料微观组织与其在多物理场作用下的响应关系. 采用热力学计算、突变界面模型、相场法和晶体相场法的手段来预测微观组织. 在预测的微观组织基础上, 对超细电子互连进行线弹性力学分析和电迁移仿真. 提出采用基于奇异值分解的方法来提取微观组织特征, 发现微观组织特征指标随电子互连尺寸的增大而单调递减. 基于人工神经网络的拟合揭示了微观组织指标与超细互连中平均 von Mises 等效应力之间的非线性关系. 本文最后展望了考虑微观组织的随机性以及由此而导致的电子互连可靠性上的离散性的研究工作.

关键词

材料基因组计划
半导体集成与封装
微观组织
可靠性
多物理场耦合模拟

电子封装是指使电子产品的功能得以物理实现的术语, 它在将半导体器件转变为面向终端用户的功能产品的最后制造工艺中最为明显. 封装除了为信号传输提供电的连接、功率输入、电压控制之外, 还为满足产品的可靠性要求提供散热和物理保护(International Technology Roadmap for Semiconductors, <http://www.itrs.net>). 封装在过去一直被认为是一个“必要之恶”, 并且单芯片封装技术的发展一直以来对成本非常敏感, 因此至今发展也非常有限. 随着移动电子器件市场的快速崛起并涌现出像智能手机、平板电脑、便携式器件以及便携娱乐系统等产品, 电子

工业界现在已接近传统 CMOS 尺寸小型化的极限. 工业界的持续增长迫切需要发展新型器件和使用新材料. 在第三个维度上使功能多样化和尺寸小型化的封装技术创新, 即三维电子封装, 提供了电子工业界发展的可行的解决方案. 三维电子封装与传统的封装方法完全不同, 它在性能、成本和可靠性上提供附加值^[1], 并推进了新技术的发展, 例如三维系统级封装(SIPs)、封装体叠层(POP)和更新的三维集成电路和三维硅载板^[2~4]. 这些方法很大程度上改变了现有的封装技术^[1], 例如, 在传统单芯片半导体制造中, 封装是后续考虑的事情, 但在三维封装中为使器件

引用格式: 黄智恒, 熊桦, 伍智勇, 等. 半导体集成与封装中基于微观组织的多物理场耦合模拟. 科学通报, 2013, 58: 3704–3716

Huang Z H, Xiong H, Wu Z Y, et al. Microstructure-based multiphysics modeling for semiconductor integration and packaging (in Chinese). Chin Sci Bull (Chin Ver), 2013, 58: 3704–3716

和封装在性能、成本和可靠性方面协同增效,两者会被同时设计和开发^[1]. 基于硅穿孔(TSV)的三维集成电路技术则更进一步,成为一种全新的技术:器件和封装甚至在后道工序 I/O 形成之前就与晶片制备同时制造,因此可以给半导体公司提供附加值. 任何封装技术的终极目标是通过系统封装产生系统^[1].

即使不考虑技术的进步和演化,电子封装也代表了一个典型的多尺度、多物理场、多组元和多相体系集成的案例. 封装中的尺度从纳米级别(即晶体管的尺寸级别)到厘米级别,在尺度上跨越了 6 个数量级的大小. 在封装中多种材料会被组合起来,包括力学属性从硬和脆的无机材料(例如硅、玻璃和其他介电质)及其性能改良品(例如利用微孔材料来获得低介电常数)到具有与时间和温度相关的非线性材料行为的软材料(例如焊料或者聚合物以及聚合物复合材料). 这导致在封装设计、材料和制造工艺、以及最终产品的特征、性能、成本、以及产品上市时间上都需要有所权衡. 用来优化这些多参数的权衡需要将具有预测能力的模拟工具集成到器件-封装协同设计环境之中. 基于热、电、电磁和力学特性的耦合分析也是必要的(<http://www.itrs.net>).

在电子封装领域,基于模拟与仿真的设计工具被广泛使用,但是现有的设计工具没有充分探究材料微观组织及其与封装性能的关系^[5,6]. 介观尺度是指在介于 10 倍于原子间距的量级到 10~100 μm 的尺寸,这个尺寸正是我们现在研究的封装材料的尺寸,例如铜硅穿孔的直径. 在介观尺度,材料的属性由平均原子密度所决定,而且时间尺度在比纳秒长很多数量级. 赋予封装材料所需属性的微观组织由多种多组元的相及其界面所构成,由于微观组织一般是通过一些与路径相关的非平衡过程所获得,即使材料的成分一样,它们的微观组织也可能截然不同^[7]. 相界面对相之间的交互作用的影响也需要考虑. 此外,制造工艺会引入残余应力、成分梯度、孔隙、夹杂、偏析和粗化^[7],所有这些都会对电子封装的可靠性产生重要影响.

最近发起的材料基因计划(MGI)的目的是要开发使材料学界以至少两倍于今天的速度和几成于今天的成本来设计、开发、制造和利用先进材料的基础设施^[8]. 作为 MGI 计划中一个基本元素,集成计算材料工程(ICME)^[9]是要将材料信息以计算工具的形式集成到工程产品性能分析与制造工艺仿真之中. IC-

ME 的目标是连接制造、材料和产品开发,它可以直接将科学转变为工程应用,从而为工业界提供附加值而且反过来提高对潜在工程应用中的科学原理的理解^[9]. 毫无疑问,电子封装领域可以从 MGI 和 ICME 中获益良多. 随着电子封装稳步向越来越集成的系统封装推进,材料因素也应该会变得越来越重要,从而使推行 MGI 和 ICME 的方法成为必需的发展.

国际半导体技术蓝图(ITRS)预测了自 2012 年起电子组装和封装领域的挑战,如图 1(a)所示(<http://www.itrs.net>). 本文研究内容侧重三维封装中的材料问题,尤其是微观组织及其在多物理场中的响应,并提出了采用 MGI 及 ICME 解决这些挑战的方法. 本方法的总览图以及集成计算工具和平台的方案,如图 1(b)和(c)所示. 图 1(b)列出了本文所讨论的主题及其在文中相应位置(见括号中节号标记). 首先介绍微观组织的基本模拟方法,即热力学模拟、突变界面动力学模拟、相场法和晶体相场法模拟,以及它们在电子封装中的应用;当微观组织信息具备后,接着介绍针对电子封装性能优化的基于微观组织的多物理场耦合模拟,该部分包括微观组织-力学耦合模拟、微观组织演化和力学的全耦合模拟、以及微观组织-电迁移耦合模拟;当产生大量的模拟数据后,还将介绍基于数据挖掘的方法来提取超细连接中最基本的微观组织特征以及建立微观组织与封装性能的关系的方法;最后对本文作了总结并描述了未来的研究工作.

1 热力学模拟

以相图计算(calculation of phase diagram, CALPHAD)为代表的计算热力学已趋成熟^[10]. 使用合适的软件包和经过严格评估的所感兴趣的合金体系热力学数据,非热力学专家现在可以对一个多组元多相体系预测工艺条件、成分和微观组织之间的相互关系. 代表性的软件包括英国国家物理实验室(NPL, Teddington)开发的 MTDATA^[11]和瑞典 Thermo-Calc 公司(Stockholm)开发的 Thermo-Calc^[12]. 在电子封装中,耦合可靠的热力学数据库和热力学方法可以为材料设计周期产生大量的有用信息. 使用 MTDATA 和最新的焊料热力学数据库,图 2 展示了 Sn-3.5Ag-0.7Cu 合金(本文成分统一使用质量百分比)体系中逐步加入 0~5% Ni 的等值线相图. 对于无铅焊接使用

图 1 面向半导体集成与封装的 MGI 和 ICME 方法总览图

(a) ITRS 预测的自 2012 年起在电子封装和封装领域的挑战 (http://www.itrs.net); (b) 面向半导体集成与封装的基于微观组织的多物理耦合模拟流程图; (c) 基于微观组织的多物理耦合模拟的仿真工具和平台的整合方案

图2 Sn-3.5Ag-0.7Cu 合金逐步加入至 5% Ni 的等值线相图
(a) 温度区间为 300~525 K; (b) 温度区间为 300~1000 K

该方法更详细的案例可以在之前已报道的工作^[13]中找到。

CALPHAD 方法的进一步发展是可以预见的。新材料的采用使得热力学数据库总是需要被开发与更新,然而目前我们在热力学数据库开发上的“惰性”还很严重^[10]。积极的一面是已经开始筹划第三代热力学数据库。对于焊料,现在仅有几个数据库可以使用。NPL 维护其中一个焊料数据库^[11],欧盟 COST 531 项目产生另一个焊料数据库^[14],后续的成本项目也产生了一个针对高温焊料的数据库^[15]。另外一个趋势是第一性原理计算将会在热力学模拟中起越来越重要的作用。例如,MTDATA 软件中含有利用统计力学得到的基本分子常数来计算气相物质热力学性质的工具^[16]。在最近发起的 Materials Project 项目^[17]中所开发的相图应用(phase diagram app)^[18,19]也

使用了密度泛函理论来计算得到二至四元体系在 0 K 时的成分和巨势相图。还可以考虑开发和利用最新的全局优化算法来进一步改进目前的吉布斯能最小化算法,例如遗传基因算法及其并行实现。

2 突变界面动力学模拟

设计电子封装时,除了考虑热力学与相平衡因素,考察其动力学过程也很重要。例如,为了设计薄膜金属层的最优厚度,需要研究溶解动力学,这样薄膜金属层才不会在制造工艺和服役中被完全消耗掉。在移动边界问题中,经常采用突变界面模型(SIM)^[20]来直接追踪界面的位置。在薄膜金属层向液相的焊料溶解案例中,突变界面模型可以预测薄膜金属层和液相焊料的界面位置随时间的变化。

在动力学模型中也需要相关的热力学参数,因此热力学与动力学的紧密耦合是必需的。这点不仅仅适用于突变界面模型,对于下节要介绍的扩散界面模型同样如此。在动力学模型中直接连接热力学计算软件的研究已有报道^[21,22]; Thermo-Calc 公司开发的 DICTRA 软件^[23]是热力学与动力学无缝集成的另外一个例子。将任意拉格朗日欧拉(ALE)方法^[24]集成到一个有限元(FE)平台可以用来处理移动界面问题。由于有限元方法在几何方面提供的自由性,在有限元平台上实现的 ALE 方法可以克服有限差分法在几何上的局限性。图 3 给出了用此方法模拟金属层溶解到液相焊料的过程,该模型可以与热力学完全耦合。

在很多研究工作以及 DICTRA 软件中,一般会在移动界面假设热力学局部平衡条件^[23],但是在大量的

图3 薄膜金属层溶解到液相焊料的动力学

(a) 模型的几何形状(绿色区域是焊料、灰色区域是金属层;红色的线代表薄膜金属层的边界); (b) 扩散元素 Cu 在模拟 2 s 时的浓度分布图(除了 X 轴和 Y 轴,黑色封闭的线绘出 $t = 0$ 时刻的模型区域)。系统的对称轴在 $X = 0$

相变过程中存在着偏离局部平衡条件的情形^[25]. Fischer 等人^[26]最近采用具有一般性的方法研究了移动边界问题而且提出了在移动界面的非平衡条件^[27]. 与之相比, 上述提及的在有限元平台实现 ALE 的方法, 则对界面条件没有限制, 即不管是平衡还是非平衡条件, 也不论条件是属于热力学、力学、或者动力学, 只要该条件可以用方程描述即可, 这些方程的形式可以是算术类、微分或者偏微分方程. 图 4 展示了一个采用新的模拟平台实现在较早一篇工作中提出的在非平衡条件下的相变动力学模型的例子^[27]. 与传统的处理非平衡条件的方法相比, 在新平台中仅需要改变扩散的边界条件. 这些边界条件实质上是算术或者微分方程, 在新平台中很容易实现, 从而将处理突变界面模型的困难大大减小. 如图 4(b)所示, 界面的成分达到平衡值需要一段时间, 而且界面的位置在~120 s 处达到一个稳态值.

3 相场动力学模拟

突变界面模型有其局限性, 在很多现象中, 突变界面模型经常是未知的^[28]. 突变界面模型直接追踪界面位置, 因而极难处理拓扑复杂的界面^[28]. 一个相对新的材料模拟的典范是相场法^[29~31]. 相场法又称作扩散界面模型, 在该模型中界面的位置不是被直接跟踪而是通过求解序参数的控制方程而自动获得.

对于电子封装, 如前期工作报告^[32~35], 相场法可以用来模拟超细连接中的微观组织形貌和微观组织演化. 图 5(a)展示了相场法模拟的凝固中形成的枝晶结构. 对于超细连接, 各种相的形貌很重要, 因为整个微连接有时仅含有一种相. 此外, 微连接中界面相的形貌尤其重要, 因为它们控制着电子封装的可

靠性. 对于真实材料的相场微观组织模拟计算量很大, 瞬时自适应网格划分技术是加快微观组织模拟的一个重要手段. 图 5(b)和(c)展示了采用瞬时自适应网格划分技术的相场法微观组织模拟过程中两个不同时间步时的区域网格划分.

4 晶体相场法模拟

相场法通常用来预测材料介观尺度微观组织行为, 近年来出现的晶体相场法(phase field crystal)^[36~40]除了包含传统相场法提供的常规相变动力学之外, 还包含原子尺度弹性力学. 除了相的形貌, 晶体相场模型还能提供原子尺度信息, 如晶体缺陷等. 这种晶体相场模型使在原子分辨率级别模拟材料的弹塑性变形成为可能. 与传统原子尺度模拟方法相比, 晶体相场方法具有多尺度模拟以及高计算效率的优势. 图 6 给出了使用晶体相场法模拟在超细连接中凝固所产生的微观组织.

5 基于微观组织的多物理场耦合模拟

电子封装 ICME 的终极目标是预测其服役性能, 可以是力学的、电学的、或者其他行为. 电子封装的可靠性受材料、制造工艺和微观组织的影响. 因此, 预测电子封装的性能包括基于工艺过程(或者微过程)和微观组织的多物理场耦合模拟. 多物理场或者耦合物理模拟在有限元领域是较新的概念. 在过去 10 年, COMSOL Multiphysics^[41](后文称为 COMSOL)软件在科学与工程领域获得广泛应用, 其本质是用有限元方法求解偏微分方程. COMSOL 的优势在于它是面向方程而不是针对某个物理现象, 因此在模拟与仿真中颇具灵活性. COMSOL 可以作为实现电子

图 4 在非平衡条件下的一维析出相的动力学(界面位置在 $X=0$, 且朝 $X>0$ 方向移动)

(a) 系统中扩散元素在仿真 5, 10, 15, ..., 120 s 时(从左至右)的浓度分布曲线; (b) 界面位置和界面浓度随时间的变化关系

图5 在桶形(仅显示了一半, 对称线在 $X=0$)超细连接凝固的相场法微观组织模拟

(a) 微观组织; (b), (c) 在两个不同仿真时间步时的有限元网格

图6 晶体相场法模拟的超细连接在凝固无量纲化时间 $t = 1000$ 时的微观组织

(a) 桶形超细连接; (b) 沙漏型超细连接, 内插图显示靠近右边界在 $150 < Y < 250$ 之间的原子排列. 长度已无量纲化

封装 ICME 的一个合适平台. 但是从计算效率角度来说, 有时自行开发的程序比商用软件包更高效.

本节提到的多物理场耦合模拟是基于微观组织的性能模拟, 与传统的忽略微观组织特征的可靠性模拟不同, 实现这一目标有以下 4 种途径: 第一个自然的选择是在微观组织模块产生的微观组织上直接进行性能模拟. 下文 5.1 和 5.3 节的结果即采用该方

法获得. 由于采用了相场法模拟微观组织, 不同的相可以由不同的序参数值区分开, 这样不同的相就可以赋予不同的材料属性(如杨氏模量等)来进行线弹性力学分析. 该方法的一个固有缺陷是它忽略了性能模拟过程中微观组织的进一步演化; 第二种方法是将表征性能的参数与微观组织和工艺参数耦合, 使用该方法的例子参见 Müller 研究组^[42]的工作. 下文 5.2 和 5.4 节的结果采用该方法获得. 在耦合了微观组织的力学模型中, 序参数的演化控制方程与线弹性力学通过将弹性能引入作为微观组织演化一种驱动力而耦合. 从而通过求解耦合的方程就可以同时得到微观组织和弹性应力; 第三种方法适用于电子封装力学可靠性的模拟, 该方法需要开发基于物理过程的材料本构. 使用描述微观组织的状态变量(例如位错密度)来替换传统的应变来表征材料的变形. 这样做需要开发新的材料模型来描述位错与微观组织特征, 例如析出相^[43,44]的交互作用; 最后一种方法源于上文提到的最近兴起的晶体相场法, 它可以仿真多尺度的微观组织信息以及材料的力学行为^[38]. 下面详述在超细连接背景下基于微观组织的多物理场耦合模拟的应用.

5.1 凝固微观组织与 von Mises 应力

图 7(a)~(c)显示高度为 $16 \mu\text{m}$ 不同几何形状的焊点在凝固 $2.5 \times 10^{-7} \text{ s}$ 时的微观组织图, 在微观组织演化的初始时刻, 假设在焊点的底部已有 3 个核形成. 从图 7(a)~(c)可以看到焊点的几何形状对凝固枝晶形貌的影响, 尤其是从靠近右边界的核长出的枝晶(下文称之为 3 号枝晶), 表现出的形貌尤其不同. 在

图 7 相场法模拟将 3 个核心放置在焊垫底边界凝固 2.5×10^{-7} s 时的微观组织(a)~(c)和在对应的微观组织上进行力学模拟得到的 von Mises 应力分布图(d)~(f)

沙漏形焊点中的(a)微观组织及其(d)对应的 von Mises 应力分布(单位 Pa, 应力值取了自然对数); 矩形焊点中的(b)微观组织及其(e)对应的 von Mises 应力分布; 对称桶形焊点中的(c)微观组织及其(f)对应的 von Mises 应力分布. 图中只显示了焊点的一半, 对称线在 $X = 0$

沙漏形焊点中的 3 号枝晶由于凹边界的限制而无法长大; 与此对比, 矩形焊点中的 3 号枝晶的生长没有受到竖直边界的明显影响; 在桶形焊点中的 3 号枝晶则沿其竖直的主枝晶呈不对称结构, 即其右侧二次枝晶一直长到凸边界为止.

由于微观组织的不同, 可以合理推断焊点的力学行为也会不同, 因为凝固微观组织中不同的相具有不同的材料属性, 例如金属间化合物(IMC)相具有比 β -Sn 相更高的弹性模量. 尽管图 7(a)~(c)展示的微观组织是真实焊点内凝固微观组织的简化版, 但是微观组织的重要性及微观组织对超细连接力学行为的影响可在图 7(d)~(f)中观察到. 图 7(d)~(f)是在基于图 7(a)~(c)所示微观组织上分别进行线弹性力学模拟所得结果, 在模拟中, 假设凝固微观组织中深色和浅色的两种相分别具有 Cu_6Sn_5 相和 β -Sn 相的弹性模量. 在图 7(d)~(f)所展示的 von Mises 应力分布图中可以明显地观察到微观组织的形貌. 在 3 种几何形状中, 沙漏形焊点中微观组织对 von Mises 应力分布的影响

最为明显, 如图 7(d)所示. 这是由于在本文力学分析所采用边界条件下, 最大 von Mises 应力在沙漏形焊点中最低. 除了微观组织的影响之外, 几何形状的影响也很明显, 即 3 种几何形状的焊点中最大应力所处的位置以及焊点中应力分布的图案与在不考虑微观组织时的力学分析结果一致.

5.2 固态微观组织与 von Mises 应力

不同几何形状的超细 Sn-37Pb 共晶焊点在朝右的剪切应变作用下通过相分离过程得到的固态微观组织, 如图 8(a)和(b)所示. 注意在这一组模拟中, 微观组织与弹性变形完全耦合在一起. 与凝固所得微观组织相似, 在 $1.5 \mu\text{m}$ 焊垫大小的焊点中靠近边界形成的相的形貌也与边界的几何形状保持一致. 焊点中不均匀的 von Mises 应力分布, 如图 8(c)和(d)所示, 该结果表明微观组织对超细连接的力学行为有重要影响.

图 9 展示在 $8 \mu\text{m}$ 焊垫大小的焊点中的微观组织

图8 应变能耦合的相场法模型模拟在 $1.5\ \mu\text{m}$ 焊垫大小的焊点中相分离 $10\ \text{s}$ 时的微观组织(a), (b) 和 von Mises 应力分布(c), (d) 桶形焊点中的(a)微观组织和(c) von Mises 应力分布; 沙漏形焊点中的(b)微观组织和(d) von Mises 应力分布

图9 应变能耦合的相场法模型模拟在 $8\ \mu\text{m}$ 焊垫大小的焊点中相分离 $10\ \text{s}$ 时的微观组织(a), (b) 和 von Mises 应力分布(c), (d) 桶形焊点中的(a)微观组织和(c) von Mises 应力分布; 沙漏形焊点中的(b)微观组织和(d) von Mises 应力分布

和 von Mises 应力分布图。与 $1.5\ \mu\text{m}$ 焊垫大小的焊点相比, $8\ \mu\text{m}$ 焊垫大小的焊点中的微观组织相对均匀。但是, 图 9(c)和(d)中微观组织对 von Mises 应力分布的影响清晰可见。此外, 在外加剪应变的作用下, 在 $8\ \mu\text{m}$ 焊垫大小的焊点中沿焊点边界的几何形状具有

一定厚度的分层结构更加明显, 分层结构沿边界并不连续, 它们在焊点中应力较低的区域断开。

图 10(a)给出在外加剪应变的作用下成分为 Sn-47Pb 的 $3\ \mu\text{m}$ 焊垫大小的焊点在相分离发生 $10\ \text{s}$ 后的微观组织图, 焊点中的微观组织形貌与 Sn-37Pb

图 10 相场法模型模拟在 $3\ \mu\text{m}$ 焊垫大小成分为 Sn-47Pb 的焊点中相分离 10 s 时的微观组织和 von Mises 应力分布
(a) 无外加应变时的微观组织; (b) 有外加应变时的微观组织; (c) 有外加应变时的 von Mises 应力分布

共晶焊点不同. 由于没有应变能的影响, 在该焊点中没有发现沿边界排列的分层结构. 但是在有外加应变作用下同样大小的焊点中可以观察到沿边界定向排列的分层结构, 如图 10(b)所示. 微观组织对 von Mises 应力分布的影响在 $3\ \mu\text{m}$ 焊垫大小的焊点中清晰可见, 如图 10(c)所示.

5.3 三维 Cu-TSV 中的微观组织与 von Mises 应力

图 11 展示 Cu 的微观组织对三维 Cu-TSV 结构中热应力的影响. 在模型中引入了不同取向的铜晶粒, 对 Cu 弹性模量各向异性对 TSV 结构热应力的影响进行了研究, 结果如图 11(a)和(b)所示. 图 11(a)展示了 TSV 中温度的分布, 结果表明在 Cu 硅穿孔中从上到下温度梯度非常小. 但是, Cu 在不同的晶向上弹性模量的差别却可以很大, 导致在 TSV 中有非常不均匀的热应力分布, 如图 11(b)所示. Cu 硅穿孔中有些晶粒的应力水平已接近整个结构中的最大应力, 该结果与传统忽略 Cu 微观组织的模型明显不同.

除了晶粒取向, 我们对晶粒大小分布对 TSV 中热应力的影响也作了进一步研究. 依据 Hall-Petch 关系^[45], 小晶粒有高的屈服应力, 因此具有较高的弹性模量. 图 11(c)展示了一个晶粒大小梯度分布的 TSV 结构中的热应力, 在 Cu 硅穿孔底部的小晶粒处有大的热应力存在. 在研究晶粒大小分布的影响时, 假设晶粒的取向一致.

铜晶粒的形貌是另外一个需要考虑的因素. 大部分现有研究采用 Voronoi 算法产生晶粒结构, 但是这种结构的缺点是它没有考虑晶粒结构形成的物理过程. 本文采用相场法晶粒长大模型来产生硅穿孔中的晶粒, 图 11(d)展示的应力分布应该更接近真实 TSV 结构中的情况. 铜晶粒的形貌对热应力的分布影响较小, 但是铜晶粒的形貌可能在电迁移过程中起作用.

5.4 基于微观组织的电迁移模拟

电迁移^[46]是在电子流的作用下导致的物质迁移,

图 11 基于微观组织的三维 Cu-TSV 结构的热应力模拟

(a) 晶粒取向随机分布时结构中的稳态温度分布; (b) 晶粒取向随机分布时结构中 von Mises 应力分布(单位 MPa, 采用分段线性颜色表); (c) 晶粒尺寸有梯度分布时结构中 von Mises 应力分布; (d) 采用相场法产生的晶粒的结构中 von Mises 应力分布

该效应被普遍认为对电子封装中的互连接不利, 因此大量的研究工作都是围绕抑制电迁移效应. 但是, 电迁移也具有调控超细连接中的微观组织的潜力. 在电迁移中可以形成独特的微观组织, 这种微观组织无法用其他的诸如热处理或者杂质添加的工艺所产生. 电迁移对超细连接中微观组织的影响, 例如相在阳极或者阴极的聚集^[47]、晶粒旋转^[48]、界面 IMC 的厚度和形貌的改变^[49]已被实验观察到. 本节研究电迁移与微观组织的耦合效应, 希望用电迁移调控超细电子互连的微观组织, 尤其是界面 IMC. 基于文献[50,51]的模型, 开发了耦合电迁移的相场法微观组织演化模型, 图 12 展示了在电流应力作用下 SnPb 微焊点内的相重新分布图. 模型预测在电流密度为 $2.9 \times 10^6 \text{ A/cm}^2$ 时, 富 Sn 相(图 12(a)中的红色区域)会在阳极附近溶解, 之后在阴极附近析出, 最终形成如

图 12 相场法模拟在 $2.9 \times 10^6 \text{ A/cm}^2$ 电流密度下相的重新分布
(a) 0 s; (b) 45 s. 图中颜色代表 Sn 的质量分数. 焊垫大小和焊点高度均设为 $1.5 \mu\text{m}$

图 13 相场法模拟在 $1.3 \times 10^6 \text{ A/cm}^2$ 电流密度下界面 IMC 相的形貌演化
(a) 5 s; (b) 100 s; (c) 350 s. 图中颜色代表 Sn 的质量分数, 焊垫大小和焊点高度均设为 $1.5 \mu\text{m}$

图 12(b)所示的微观组织.

此外, 图 13 展示了电迁移导致的界面 IMC 微观组织演化. 图 13(a)显示在微焊点的顶部和底部有 2 层 IMC, 初始 IMC 层是扇贝型形貌. 当焊点在 $1.3 \times 10^5 \text{ A/cm}^2$ 的电流下电迁移 100 s 后, 界面 IMC 层变平整, 如图 13(b)所示. 电迁移模型预测 IMC 层最终在阴极会长厚, 而在阳极会变薄, 如图 13(c)所示.

6 微观组织与性能的关系

前文讨论了微观组织及其对超细连接行为的影响. 事实上, 我们可以从实验或者模拟的手段获得超细连接的微观组织数据. 在实现电子封装 ICME 的道路上, 我们已具有大量的数据, 并且会在未来获得更多的数据^[52]. 材料数据被分为 4V: (1) 体积数据 (volume): 静态的数据, 例如热力学、晶体学、属性等; (2) 速度数据 (velocity): 动态的数据, 例如原位材料动力学、飞行时间数据等; (3) 多种形式的的形式数据 (variety): 例如多尺度材料数据; (4) 可靠性数据 (veracity): 数据置信度, 例如数据中的不确定性.

ICME 方法的终极目标是预测电子封装的性能, 但是性能是多种变量的复杂函数, 即:

$$\text{性能} = F(X_1, X_2, X_3, \dots).$$

现在的问题是应该引入多少变量以及哪些变量是重要的? 因此为了建立微观组织与性能的关系, 微连接中的微观组织必须用其最主要的特征来量化. 为了实现这个目标, 我们提出基于奇异值分解(SVD)^[53]的主元分析(PCA)方法(a tutorial on principle component analysis, <http://www.snl.salk.edu/~shlens/pca.pdf>)来量化超细连接中的微观组织特征. 作为一个例子, 图 14(a)展示了不同焊垫大小和几何形状的微连接内量化的微观组织与基准微观组织的差别与焊垫大小的

图 14 超细连接微观组织与力学性能的关系

(a) 不同大小和几何形状的超细连接内微观组织量化. 纵轴代表微连接内微观组织与一定焊垫大小和几何形状的基准微观组织的差别, 基准微观组织是所有样本微观组织的平均; (b) 超细连接内微观组织与其平均应力关系的人工神经网络拟合

关系, 基准微观组织取所有样本微观组织的平均值. 图中曲线表明微连接中的微观组织与基准微观组织的差别随着焊垫尺寸的减小而增加. 这个结果是合理的, 因为小的微连接中的微观组织更不均匀, 故而更容易发生变化. 此外沙漏形微连接内的微观组织与基准微观组织的差别要比同焊垫尺寸的桶形微连接大, 这表明沙漏形微连接内微观组织更不均匀且更易发生变化.

将微观组织量化之后, 采用基于人工神经网络^[54]的算法来建立微观组织与力平均 von Mises 应力之间的关系, 如图 14(b)所示. 传统的微观组织与性能间的关系是用经验公式来描述的, 在建立面向电子封装的 ICME 过程中, 可以构建基于上述方法产生的数据库并加以维护, 从而加速材料设计以及逆向设计过程.

7 总结及展望

本文综述了在 MGI 背景下实现面向半导体集成

与封装的 ICME 框架的初步工作, 尤其强调了微观组织及其在外力和电载荷下的响应. 提出了超细电子互连微观组织特征的提取方法并建立了微观组织与平均应力间的关系. 根据图 1(c)所示方案, 初步实现了基于微观组织的多物理场耦合模拟技术的无缝集成. 然而, MGI 提出的目标对材料模拟界依然是巨大的挑战, 这项工作需要国际合作. 在 ICME 框架表现出全部功能之前, 还有大量工作亟待完成.

就相场模拟而言, 今后的工作需要在三维封装中考虑真实微观组织多组分和多相的本质. 最近发展的晶体相场模型已可以用来处理多组分体系^[40]. 这些最新的进展也应该反映在未来的 ICME 框架中. 对于数字微观组织的特征提取, 小波多分辨率分析可以用于提取微观组织的多尺度信息. 此外, 随机性是微观组织的另一个重要方面, 微观组织的随机性是由随机过程引起的, 例如在微观组织形成过程中的形核和热噪声. 因此, 微观组织的不确定性及其对可靠性的潜在影响需要进一步研究.

致谢 图 1 由英国国家物理实验室的 Jim Robinson 使用 MTDATA 作计算给出. 感谢中仿科技有限公司王刚博士在 COMSOL Multiphysics 软件方面提供的技术支持.

参考文献

- 1 Tummala R R. The future of packaging. *Chip Scale Rev*, 2012, 16: 9–11
- 2 Tummala R R, Swaminathan M. *Introduction to System-on-Package (SOP): Miniaturization of the Entire System*. New York: McGraw-Hill Companies, 2008
- 3 Papanikolaou A, Soudris D, Radojic R. *Three Dimensional System Integration: IC Stacking Process and Design*. New York: Springer Science+Business Media, LLC, 2011

- 4 Bakir M S, Meindl J D. Integrated Interconnect Technologies for 3D Nanoelectronic Systems. Norwood: Artech House, 2009
- 5 沈骏, 刘永长, 高后秀. 无铅焊料 Sn-Ag 中金属间化合物 Ag₃Sn 的异常长大. 科学通报, 2006, 51: 1225–1228
- 6 Wang X J, Luo X X, Cong F G, et al. Research progress of microstructure control for aluminium solidification process. Chin Sci Bull, 2013, 58: 468–473
- 7 McDowell D L. Critical path issues in ICME. In: Arnold S M, Wong T T, eds. Models, Databases, and Simulation Tools Needed for the Realization of Integrated Computational Materials Engineering. Ohio: ASM International, 2011. 31–37
- 8 Materials Genome Initiative for Global Competitiveness. The National Science and Technology Council, USA, June 2011
- 9 Committee on Integrated Computational Materials Engineering. Integrated Computational Materials Engineering: A Transformational Discipline for Improved Competitiveness and National Security. Washington DC: The National Academies Press, 2008
- 10 Lukas H L, Fries S G, Sundman B. Computational Thermodynamics: The CALPHAD Method. Cambridge: Cambridge University Press, 2007
- 11 Davies R H, Dinsdale A T, Gisby J A, et al. MTDATA—Thermodynamic and phase equilibrium software from the National Physical Laboratory. Calphad-Comput Coupling Ph Diagrams Thermochem, 2002, 26: 229–271
- 12 Sundman B, Jansson B, Andersson J. The Thermo-calc databank system. Calphad-Comput Coupling Ph Diagrams Thermochem, 1985, 9: 153–190
- 13 Huang Z, Conway P P, Liu C, et al. Modeling the interdependence of processing and alloy composition on the evolution of microstructure in Sn-based lead-free solders in fine pitch flip chip. IEEE Trans Compon Pack Technol, 2006, 29: 98–104
- 14 Kroupa A, Dinsdale A T, Watson A, et al. The development of the COST 531 lead-free solders thermodynamic database. JOM, 2007, 59: 20–25
- 15 Kroupa A, Dinsdale A T, Watson A, et al. The thermodynamic database COST MP0602 for materials for high-temperature lead-free soldering. J Min Metall B, 2012, 48: 339–346
- 16 Dinsdale A T, Davies R H, Mucklejohn S A. Thermodynamic data for the (NaI-CeI₃) system in the condensed & gas phases. In: 13th International Symposium on the Science and Technology of Lighting, Troy, USA, 2012. 306
- 17 Jain A, Hautier G, Moore C, et al. A high-throughput infrastructure for density functional theory calculations. Comput Mater Sci, 2011, 50: 2295–2310
- 18 Ong S P, Wang L, Kang B, et al. Li-Fe-P-O₂ phase diagram from first principles calculations. Chem Mater, 2008, 20: 1798–1807
- 19 Jain A, Hautier G, Ong S P, et al. Formation enthalpies by mixing GGA and GGA + U calculations. Phys Rev B, 2011, 84: 045115
- 20 Thornton K, Agren J, Voorhees P W. Modelling the evolution of phase boundaries in solids at the meso- and nano-scales. Acta Mater, 2003, 51: 5675–5710
- 21 Huang Z H, Conway P P, Thomson R C, et al. A computational interface for thermodynamic calculations software MTDATA. Calphad-Comput Coupling Ph Diagrams Thermochem, 2008, 32: 129–134
- 22 Xiong H, Huang Z H, Wu Z Y, et al. A generalized computational interface for combined thermodynamic and kinetic modeling. Calphad-Comput Coupling Ph Diagrams Thermochem, 2011, 35: 391–395
- 23 Borgenstam A, Engstrom A, Hoglund L, et al. DICTRA—A tool for simulation of diffusional transformations in alloys. J Phase Equilib, 2000, 21: 269–280
- 24 Donea J, Huerta A. Finite Element Methods for Flow Problems. Chichester: John Wiley & Sons Ltd, 2003
- 25 Gamsjäger E. A note on the contact conditions at migration interfaces. Acta Mater, 2007, 55: 4823–4833
- 26 Fischer F D, Waitz T, Vollath D, et al. On the role of surface energy and surface stress in phase-transforming nanoparticles. Prog Mater Sci, 2008, 53: 481–527
- 27 Svoboda J, Fischer F D, Fratzl P, et al. Kinetics of interfaces during diffusional transformations. Acta Mater, 2001, 49: 1249–1259
- 28 Provatas N, Elder K. Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH, 2010
- 29 Chen L Q. Phase-field models for microstructure evolution. Annu Rev Mater Res, 2002, 32: 113–140
- 30 罗炳池, 王海鹏, 魏炳波. 液态三元 Ni-Cu-Pb 偏晶合金相分离的相场模拟. 科学通报, 2009, 54: 7–11
- 31 赵彦, 陈铮, 王永欣, 等. 弹性应变能对 Ni₇₅Al₁₇Zn₈ 合金过渡有序行为影响的微观相场研究. 科学通报, 2010, 55: 182–187
- 32 Huh J Y, Hong K K, Kim Y B, et al. Phase field simulations of intermetallic compound growth during soldering reactions. J Electron Mater, 2004, 33: 1161–1170
- 33 Hong K K, Huh J Y. Phase field simulations of morphological evolution and growth kinetics of solder reaction products. J Electron Mater, 2006, 35: 56–64
- 34 Huang Z, Conway P P, Qin R S. Modeling of interfacial intermetallic compounds in the application of very fine lead-free solder interconnections. Microsyst Technol, 2009, 15: 101–107
- 35 Park M S, Arroyave R. Concurrent nucleation, formation and growth of two intermetallic compounds (Cu₆Sn₅ and Cu₃Sn) during the early stages of lead-free soldering. Acta Mater, 2012, 60: 923–934

- 36 Elder K R, Katakowski M, Haataja M, et al. Modeling elasticity in crystal growth. *Phys Rev Lett*, 2002, 88: 245701
- 37 Elder K R, Grant M. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals. *Phys Rev E*, 2004, 70: 051605
- 38 Stefanovic P, Haataja M, Provatas N. Phase-field crystals with elastic interactions. *Phys Rev Lett*, 2006, 96: 225504
- 39 Stefanovic P, Haataja M, Provatas N. Phase field crystal study of deformation and plasticity in nanocrystalline materials. *Phys Rev E*, 2009, 80: 046107
- 40 Ofori-Opoku N, Fallah V, Greenwood M, et al. Multicomponent phase-field crystal model for structural transformations in metal alloys. *Phys Rev B*, 2013, 87: 134105
- 41 COMSOL Multiphysics User's Guide. Version 4.3a. COMSOL AB, Stockholm, 2012
- 42 Bohme T, Muller W H, Weinberg K. Numerical modeling of diffusion induced phase transformations in mechanically stressed lead-free alloys. *Comput Mater Sci*, 2009, 45: 837–844
- 43 Roters F, Raabe D, Gottstein G. Work hardening in heterogeneous alloys—A microstructural approach based on three internal state variables. *Acta Mater*, 2000, 48: 4181–4189
- 44 Roters F, Eisenlohr P, Hantcherli L, et al. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications. *Acta Mater*, 2010, 58: 1152–1211
- 45 Hansen N, Ralph B. The strain and grain size dependence of the flow stress of copper. *Acta Metall*, 1982, 30: 411–417
- 46 Ceric H, Selberherr S. Electromigration in submicron interconnect features of integrated circuits. *Mater Sci Eng R Rep*, 2011, 71: 53–86
- 47 Chou C K, Chen C A, Liang S W, et al. Redistribution of Pb-rich phase during electromigration in eutectic SnPb solder stripes. *J Appl Phys*, 2006, 99: 054502
- 48 Lin H W, Chen C, Kuo J C, et al. Effects of electromigration on grain rotation behavior of SnAg solders. In: IEEE, ed. 4th International Microsystems, Packaging, Assembly and Circuits Technology Conference (IMPACT), Taipei, 2009. 166–168
- 49 Chen L D, Huang M. Effect of electromigration on intermetallic compound formation in Cu/Sn/Cu interconnect. In: IEEE, ed. 2009 International Conference on Electronic Packaging Technology & High Density Packaging (ICEPT-HDP), Beijing, China, 2009. 666–669
- 50 Barrett J W, Garcke H, Nurnberg R. A phase field model for the electromigration of intergranular voids. *Interface Free Bound*, 2007, 9: 171–210
- 51 Kim D. Evolution of micro solder joints under electromigration and elastic field. *J Mech Sci Technol*, 2009, 23: 489–497
- 52 Zikopoulos P C, deRoos D, Parasuraman K, et al. *Harness the Power of Big Data*. New York: McGraw-Hill Companies, 2013
- 53 Golub G H, Van Loan C F. *Matrix Computations*. Baltimore: The John Hopkins University Press, 1996
- 54 Bhadeshia H K D H. Neural networks in materials science. *ISIJ Int*, 1999, 39: 966–979