

密级:_____



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

博士学位论文

3D IC 封装中铜柱凸点和硅通孔互连的可靠性

作者姓名: _____ 马会财 _____

指导教师: _____ 尚建库 研究员 中国科学院金属研究所 _____

_____ 郭敬东 副研究员 中国科学院金属研究所 _____

学位类别: _____ 工学博士 _____

学科专业: _____ 材料学 _____

培养单位: _____ 中国科学院金属研究所 _____

2017 年 4 月

The reliability of copper pillar and TSV in 3D IC

By

Huicai Ma

A Dissertation Submitted to

University of Chinese Academy of Sciences

In partial fulfillment of the requirement

For the degree of

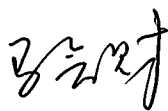
Doctor of Philosophy

Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences

April, 2017

声 明

本人声明所呈交的学位论文是在导师指导下进行研究工作所取得的成果，相关知识产权属中国科学院金属研究所所有，本人保证不以其它单位的名义发表或使用本论文的研究内容。除已注明部分外，论文中不包含其他人已经发表过的研究成果，也不包含本人为获得其它学位而使用过的内容。对本文的研究工作提供过重要帮助的个人和集体，均已在论文中明确说明并致谢。

作者签名: 

日期: 2017年5月24日

摘 要

在 3D 微电子封装过程中,铜柱凸点和硅通孔互连(TSV)是两项关键的技术,本文旨在研究这两项技术在电场、热场、热循环和电热耦合场下的寿命以及界面可靠性。

设计了正交电迁移实验组,测得了铜柱凸点的寿命数据,并基于 Black 方程给出了寿命预测方程的相关参数,其中电迁移激活能和电流密度指数分别为 0.88eV 和 1.64。通过观察界面化合物随电流作用的演变,发现在铜柱凸点失效前焊料 Sn 全部转化为了金属间化合物,形成了 Cu/Cu₃Sn/Cu₆Sn₅/Cu₃Sn/Cu 化合物互连结构。统计分析发现铜柱凸点的电迁移失效模式可以分为三类:阴极侧 Cu/Cu₃Sn 界面开裂失效;阳极侧 Cu/Cu₃Sn 界面开裂失效和金属间化合物脆性断裂失效。三种失效模式所占比例分别为 55%、24%和 21%。计算了各界面和各相内的原子扩散和电迁移通量,揭示了孔洞形成机理和化合物演变原理。结合有限元分析电流密度和应力分布,阐释了铜柱凸点的三种电迁移失效模式。

研究了铜柱凸点在-40 到 125℃热循环下的寿命和失效方式。研究发现热循环后铜柱凸点互连界面化合物由回流态的扇贝状转变为层状,其厚度随热循环时间增加而增加。统计分析发现铜柱凸点热循环有两种失效模式:焊料中间开裂和芯片侧与铜柱凸点相连处的铜线断裂。通过 EBSD 分析焊料的晶粒组织和有限元分析相应的应力状态,发现焊料中间开裂失效多发生在双层 Sn 晶粒的铜柱凸点中,而铜布线断裂失效多发生在单层 Sn 焊料的铜柱凸点中。

研究了铜柱凸点在电流和热循环耦合加载下的多场寿命和可靠性。根据累积损伤原则,将电迁移、热循环和二者的耦合引起的损伤考虑进去,建立了多场下的寿命预测模型,并使用多场实验寿命数据给出了寿命预测模型的具体形式。电流密度比热循环温度对铜柱凸点多场寿命的影响更大。其化合物生长具有极性效应,并且在阴极上生成电迁移孔洞,具有电迁移特征;同时在化合物和焊料中形成裂纹,表现出热循环的特征。电迁移和热循环耦合作用,形成了铜柱凸点在多场下的三种失效模式:电迁移形成的界面孔洞和热循环耦合作用造成的微裂纹共同作用造成阴极 Cu₆Sn₅/Sn 界面的开裂失效;电迁移引起阳极 Cu/Cu₃Sn 界面形成大量柯肯达尔孔洞与热循环引起的微裂纹共同作用导致界面开裂失效;热循环下焊料疲劳导致其中间开裂失效。

研究了 TSV 结构在 400°C 热时效下的可靠性。发现热时效后, Cu 挤出表面, 挤出高度随热时效时间增加而增加, 并在一定时间后达到稳定。挤出高度也与热时效加热速率有关: 加热速率越大, 挤出高度越大。热时效后 TSV 表面晶界显现清晰, 表面晶界上和结构内部出现孔洞。研究还发现 Cu 晶粒为柱状晶时, 表面孔洞和裂纹较多且集中分布在 TSV 中心, Cu 晶粒为等轴晶时, 孔洞和裂纹较少, 且均匀分布。我们认为其挤出机制为界面滑移和晶界滑移共同作用。利用 ANSYS 软件用户可编程特性, 建立了将界面滑移和晶界滑移统一的材料模型, 模拟了 TSV 结构的热时效过程中界面和内部的应力状态和挤出形貌, 模拟结果与实验结果高度吻合。

研究了 TSV 在 -40—125°C 热循环下的可靠性。研究发现热循环后 Cu 倾入表面。倾入深度随热循环周次增加而增加, 在 210 周次后达到稳定。界面处倾入深度大于中间部分, 倾入机制为界面滑移。使用有限元对 TSV 在热循环过程中的应力状态进行了分析。

研究了复合填充 Cu-ZrW₂O₈ TSV 的工艺和性能。通过调控电镀中电流密度大小成功制备了 ZrW₂O₈ 粉末含量为 3.7%—30.7% 的 Cu-ZrW₂O₈ TSV 样品。复合电镀粉末含量随电流密度增大而增加。研究复合填充 TSV 的热时效可靠性, 发现 TSV 只有界面部分发生了挤出, 挤出高度随粉末含量增加而降低。粉末的添加抑制了晶界滑移, 使得挤出高度降低。

关键词: 铜柱凸点, TSV, 电迁移, 热循环, 热时效

ABSTRACT**The reliability of TSV and copper pillar in 3D IC**

Huicai ma (Material Science)

Supervised by Prof. Jianku Shang and Jingdong Guo

Under the trend of 3D microelectronic packaging, copper pillar and TSV(through silicon via) spring up as the key techniques. In the present work, the lifetime and failure mechanisms of copper pillar interconnects and TSV were investigated under electric current stressing, annealing, thermal cycling and the coupled field of electric current and thermal cycling.

Orthogonal tests were designed in order to measure the electromigration lifetime and shed light on the failure mechanisms of copper pillar under electric current stressing. According to the Black's mean-time-to-failure (MTTF) equation, the activation energy and exponent of current density were calculated to be 0.88eV and 1.64, respectively. The microstructure evolution of the joints under current stressing was observed. It was found that the Sn solder was usually depleted before the joint failed, which means the joint was only composed of Cu_6Sn_5 and Cu_3Sn phases as a $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}/\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Cu}_3\text{Sn}/\text{Cu}$ structure after a period of EM test. Three failure modes were observed: failure along the $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ interface at the cathode side, failure along the $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ interface at the anode side and brittle fracture through the IMCs. The percentage of these three failure modes are 55%, 24% and 21%, respectively. The atomic fluxes in each interface and phase were calculated in order to reveal the formation of Kirkendall voids and IMCs. Finite element method(FEM) was used to calculate the electric current and stress distribution.

The lifetime and failure of copper pillar was studied under thermal cycling. After thermal cycling, the morphology of IMC turned to layer type from scallop type of as-reflow state, and its thickness grows with thermal cycling time. The failure of the samples can be categorized into two groups: cracks in the middle of solder and cracks in the Cu lines connected with copper pillar. Cracking of solder tended to occur in two-layer Sn grains while cracking of Cu lines tended to occur in one-layer Sn grains after investigating grain structure with EBSD and stress status with

finite element method.

The lifetime and failure mechanisms of copper pillar were studied under the coupled condition of electric current and thermal cycling. Based on the cumulative damage rule, the lifetime prediction model was constructed incorporating electromigration damage, fatigue-creep damage and the coupled damage. The lifetime prediction model was specified and verified using experimental lifetime data. It was found that the lifetime decreased with the increase of electric current density and the maximum temperature of thermal cycling, but the effect of electric current density on lifetime is larger than that of thermal cycling. The electromigration characterization, i.e., the polarity effect of IMCs and electromigration voids were found during the coupled tests. At the same time, thermal cycling characterization, i.e., cracks were found in solder and IMCs. The electromigration and thermal cycling effects interacted and resulted in three failure modes: cracks at $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ interface on the cathode resulting from the combination of electromigration voids and micro-cracks; cracks at $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ interface on anode resulting from the combination of kirkendall voids and micro-cracks; fatigue-creep crack in the middle of solder.

The reliability of TSV was studied under 400°C annealing. It was found that Cu protruded after annealing. The protrusion height increased with annealing time and heating rate. Other wise Grain boundaries of Cu loomed after annealing, and voids appeared at the grain boundaries. When Cu grains were columnar, the voids and cracks distributed at the center of TSV with large number and size. However, when Cu grains were equiaxed, the voids and cracks distributed randomly with small size. The protrusion mechanisms of through silicon via (TSV) were grain boundary diffusion assisted interfacial sliding occurred at interface and grain boundary sliding occurred at center region. A united model of interface sliding and grain boundary sliding was constructed with ANSYS UPFs to calculate the stress status and protrusion during annealing. The calculated result was in excellent agreement with the experimental results.

The reliability of TSV was investigated under -40°C to 125°C temperature cycling. It was found that Cu intruded inside the Si die during the test, and the intrusion height increased with cycle time but leveled off after 210 cycles. Besides, the Cu intrusion height at the Cu/Si interface is greater than that in the middle of Cu bar. It suggests that diffusional creep of the interface was the key for Cu via intrusion. FEM was used to calculate the stress status during thermal cycling.

The process and annealing reliability of Cu-ZrW₂O₈ TSV were studied. Cu-ZrW₂O₈ TSV samples were successfully achieved with the content of ZrW₂O₈ from 3.7% to 30.7%. The content of ZrW₂O₈ in TSV increased with electric current density. After 400°C, 30min annealing, only the interface part protruded out of Si. The average protrusion height decreased with the increase content of ZrW₂O₈. ZrW₂O₈ powder scattered on grain boundaries and retarded grain boundary sliding during annealing.

KEY WORDS: copper pillar, TSV, electromigration, thermal cycling, annealing

目 录

第一章 绪 论	1
1.1 电子封装技术的发展	1
1.2 铜柱凸点	3
1.3 电迁移	4
1.3.1 传统焊球电迁移研究	7
1.3.2 铜柱凸点电迁移研究	11
1.4 热循环	15
1.4.1 焊球热循环研究	16
1.5 多场（热循环和电迁移）可靠性研究	19
1.6 TSV 的研究进展	20
1.6.1 TSV 工艺研究	21
1.6.2 TSV 可靠性研究	22
1.7 有限元原理	29
1.7.1 有限元方法原理	29
1.7.2 有限元软件介绍	30
1.7.3 UPFs 用户可编程特性	31
1.7.3 焊料力学行为本构方程	31
1.8 本文主要研究内容及意义	32
第二章 铜柱凸点的电迁移	33
2.1 引言	33
2.2 实验方法	33
2.2.1 电迁移实验	34
2.3 实验结果	37
2.3.1 铜柱凸点寿命	37
2.3.2 铜柱凸点界面失效	40

2.4 讨论分析.....	44
2.4.1 有限元分析电流密度和应力分布.....	45
2.4.2 电迁移原子流方程计算.....	47
2.5 本章小结.....	53
第三章 铜柱凸点热循环可靠性.....	55
3.1 引言.....	55
3.2 实验方法.....	55
3.3 实验结果.....	56
3.3.1 热循环寿命.....	56
3.3.2 热循环失效模式.....	56
3.4 讨论.....	60
3.5 本章小结.....	63
第四章 铜柱凸点多场可靠性.....	65
4.1 引言.....	65
4.2 电迁移-热循环耦合服役寿命预测模型.....	66
4.3 多场实验.....	70
4.4 实验结果.....	72
4.4.1 多场实验寿命统计.....	72
4.4.2 失效模式.....	76
4.5 分析讨论.....	81
4.6 本章小结.....	87
第五章 TSV 热时效可靠性.....	89
5.1 引言.....	89
5.2 实验设计.....	90
5.2.1 TSV 样品制备.....	90
5.2.3 TSV 热时效.....	92
5.3 实验结果.....	93
5.3.1 微观结构的变化.....	93
5.3.2 挤出形貌.....	94

5.3.3 挤出高度.....	95
5.3.4 组织结构对挤出形貌的影响.....	99
5.4 分析与讨论.....	101
5.4.1 挤出机制.....	101
5.4.2 晶粒大小对 TSV 热时效可靠性的影响.....	104
5.4.3 组织结构对挤出的影响.....	105
5.4.1 有限元分析.....	106
5.5 本章小结.....	108
第六章 TSV 热循环可靠性	111
6.1 引言.....	111
6.2 实验流程.....	111
6.3 实验结果.....	111
6.4 倾入机理.....	117
6.5 本章小结.....	119
第七章 复合填充 TSV 的研究.....	121
7.1 引言.....	121
7.2 实验设计.....	121
7.3 实验结果.....	123
7.4 本章小结.....	128
第八章 全文总结.....	129
参考文献.....	131
攻读博士学位期间发表论文.....	151
致 谢.....	153
作者简介.....	155

第一章 绪 论

1.1 电子封装技术的发展

微电子封装是指把制造完成的集成电路与其他电子元件共同组装于一个线路结构中形成电子产品的过程。它不仅起着安放、固定、密封、保护芯片和增强电热性能的作用,而且还是沟通芯片内部与外接电路的桥梁。

微电子封装技术在现代电子信息技术的飞速发展中占有十分重要的地位。从一定意义上说,先进微电子封装技术的发展推动着电子产品的不断更新完善和现代电子信息技术的飞越式发展。微电子封装领域相继发展了多种多样的封装技术[1,2]。从上世纪 60 年代开始兴起的插孔原件封装,历经表面贴装,发展到了当下的面积阵列封装。随着芯片功能不断增强,芯片上集成的晶体管数量已经从 10^3 爆炸式的增长到了 10^9 数量级。电子信息技术的发展一直遵循着“摩尔定律”,但随着 2015 年 IBM 成功开发出首个制程为 7 纳米的测试芯片,人们认识到在单一芯片上实现更高密度的集成电路已经变得几乎不可能。因为这一尺寸的芯片制作成本非常高;另一方面,这一突破已经接近了物理极限,即当传统硅材料制作的晶体管尺寸小于 5nm 之后,会产生所谓的“量子隧穿”效应。此外,在高集成度条件下,单个芯片内的互连引线过长和过多,使其工作速度降低,并且引发信号传输延迟,这使得平面结构的芯片研发和生产都遇到了难以克服的技术瓶颈,于是业界出现了超越摩尔定律的呼声。为了满足以上要求,必然要求突破现有封装技术,在面积有限的前提下,电子封装必然在二维的基础上向 z 方向发展,这就是所谓的三维(3D)封装技术。三维(3D)封装技术目前被认为是超越摩尔定律,实现器件小型化、高密度、多功能的有效解决方案。这里的 3D 封装并不是指现在已经成熟应用于商业化的基于引线键和技术的芯片堆叠和封装堆叠(POP),而是指摩尔晶圆/芯片在垂直于晶圆/芯片方向上进行堆叠^[1,2]。其中最关键、最核心的技术是硅通孔互连技术^[3]。在 3D 封装中,硅通孔的主要作用是实现芯片在垂直方向互连,信号导通和传热。

3D 封装也相继发展了在各类基板内或多层布线介质层中“埋置”电阻(R)、

电容 (C) 或集成电路 (IC) 等元器件的埋置型 3D, 在 Si 圆片规模集成后的有源基板上再实行多层布线的有源基板型 3D, 在 2D 基础上将每一层封装上下叠装起来的叠层型 3D 以及通过贯穿硅的通孔技术 (Through Silicon Via, 简称 TSV) 实现裸片到裸片互连的 3D IC (IC 的 3D 集成) 等。传统的三维器件互连技术也就是“埋置型”3D、有源基板 3D 和叠层型 3D 都是采用引线键合或者倒装芯片技术将硅圆片或裸片集成在一起。引线键合是利用多晶硅或者金属引线实现芯片到衬底或引线框架之间的互连。倒装芯片是利用共晶焊料、导电聚合物和微焊球 (金属凸点) 实现芯片互连。这两种技术的缺点是不易进行更多裸片和异构芯片的集成。而 Si 通孔互连技术是在硅圆片或裸片上适当的位置采用垂直通孔, 通孔内部填充导电物质来实现不同圆片或裸片之间的连接, 如图 1 所示。这种垂直方向的互连技术能够减少芯片之间互连线的长度, 从而可以解决集成电路的延时问题、降低功耗和提高集成密度。同时可以获得更好的电性能、低噪声、更小的封装尺寸、低成本和多功能化。因此 TSV 技术逐渐成为最具代表性也是最有前途的 3D 封装技术之一。

另一方面, 随着高密度 3D 集成化的发展, I/O 数急剧增加, 使得互连技术不断高微细化。这种微细化体现在连接 Si 圆片或裸片的 TSV 直径及其间距的微细化, 连接 Si 片和 PCB 的焊球的微细化, 以及有些 2.5D 封装中的转接板的连接中^[3]。这种微细化使得传统焊球达到了其尺寸极限, 不再实用。因为间距减小到一定尺寸后, 球形倒装焊球难免会发生桥连以及产生其他可靠性问题。针对这些问题现在已经开发出了一种新的技术来代替倒装焊球, 这就是铜柱凸点, 如图 2 所示。这种新的技术逐渐取代引线键合, 成为新一代超高密度的倒装封装技术。因此铜柱凸点也是 3D 封装中另一种必不可少的技术。

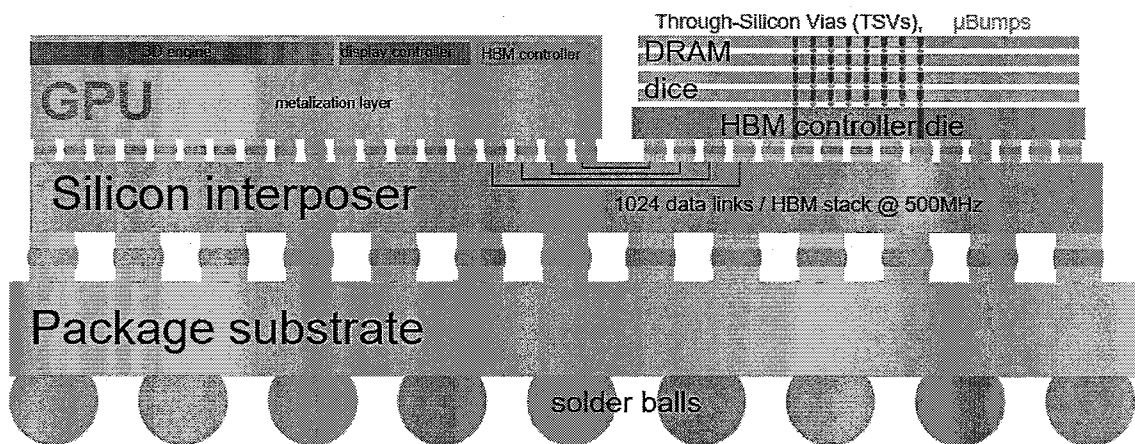


图 1 3D-TSV 互连结构

Fig.1 A 3D IC interconnect with TSV

1.2 铜柱凸点

在倒装焊封装体回流过程中，为了实现与线路板上的焊盘自对准，传统焊球会由球形坍塌成鼓形。传统焊球一般尺寸较大，使得焊球之间的间距不能无限小，从而限制了微电子器件 I/O 总数量，尤其是 2.5D/3D 封装和 IC 的设计的发展。因此，为了实现小间距，高密度的封装，并且综合考虑到制造成本和工艺难度，业界提出了柱形铜凸点互连结构，如图 2 所示。铜柱凸点由铜柱和焊料帽构成，通过焊料帽与基板互连。相比于传统焊球，铜柱凸点结构中铜取代了大部分焊料。因此其具有良好的电性能，Yeo^[4]指出其电阻远低于传统焊球凸点。同时焊料较少和减轻了电流拥挤效应使得其具有优越的抗电迁移性能。Jiang 报道铜柱凸点的电迁移中值失效时间是传统焊球的 2.3 倍^[5, 6]。它还具有良好的抗热疲劳性能^[7-9]。此外，铜柱凸点的焊料部分比较少，可以实现焊点间距较小且不发生桥连^[10-14]。然而，相对于球形焊料凸点而言，柱形铜凸点结构使用了大量的比焊料硬度高的铜，从而会引入较大的应力^[10, 14, 15]。在互连界面会产生大量的金属间化合物并且引入大量柯肯达尔孔洞，这些都可能降低封装结构的力学性能，影响其可靠性。

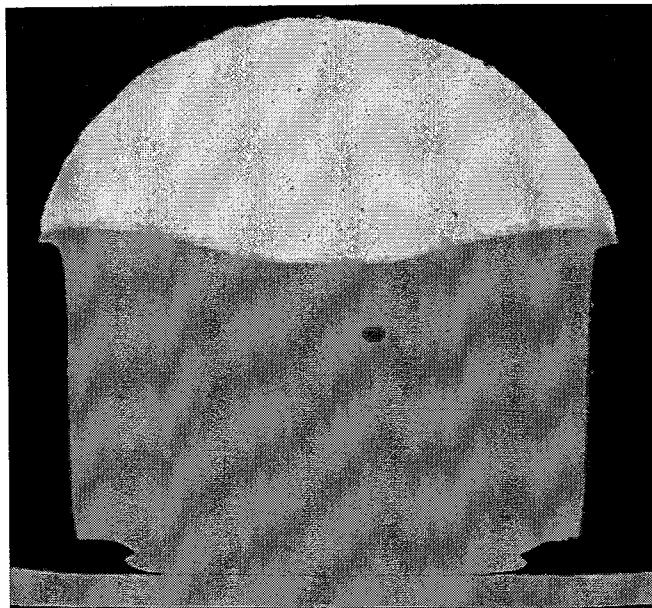


图 2 柱形铜凸点结构截面图

Fig. 2 cross-section of copper pillar

1.3 电迁移

3D 封装发展趋势下, 封装体尺寸的不断减小, 使得焊球直径及间距不断缩小, 单个焊点所承担的应力强度、电流密度和温度梯度大幅度增加, 从而带来了一系列可靠性问题, 其中电迁移带来的失效尤为突出。那么什么是电迁移呢?

电迁移是指金属中的原子在电流作用下发生定向运动现象, 是原子在电流作用下的一种受迫扩散运动。其驱动力来源于电子与原子的碰撞冲量, 如图 3 所示。电子对原子的碰撞作用称为电子风力 (F_{wd}), 此外原子还受到外电场施加的与电子风力方向相反的作用力 (F_{el})。根据 Huntington 和 Grone 的研究^[16], 其驱动力 F_{em} 可以表示为:

$$F_{em} = F_{el} + F_{wd} = Z^* e \rho j \quad (1.1)$$

其中 e 为电子电荷, ρ 为电阻率, j 为电流密度, Z^* 为有效电荷数, 它可以等效为金属中扩散离子的名义价电子数, 由两部分构成, 一部分来源于静电力, 另一部分来源于电子风力, 即

$$Z^* = Z_{el} + Z_{wd} \quad (1.2)$$

其中 Z_{el} 为来自静电力部分的有效电荷数, Z_{wd} 为与电子风力有关的电荷数。

Z^* 可用来表征原子电迁移作用的强度，其正负代表电迁移的方向。一般情况下，对于优良导体，电子风力远远大于电场力，是电场力的 10 倍左右。因此电迁移中原子的扩散的方向一般与电子流方向相同。但是也有特殊的情况，比如在 Sn-9Zn 中 Zn 原子向着阴极运动^[17]。

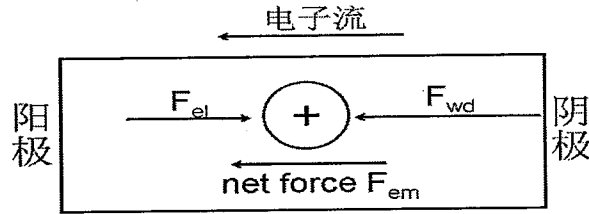


图 3 电迁移驱动力示意图

Fig. 3 the sketch of electromigration drive force

根据早期的研究发现，短的铝线在电流作用下，阴极出现孔洞而阳极出现凸起，这是因为铝原子在电子不断冲击下从阴极向阳极迁移，如图 4 所示^[18, 19]。在电流密度为 10^6 A/cm^2 ，温度为 225°C 时，宽 $10\mu\text{m}$ ，厚 100nm 的铝线通电 24 小时后，阴极处明显的可以发现由于铝原子迁移而引起的孔洞，与此同时在阳极上相应的形成了铝凸起。可见电迁移效应也是金属中原子的迁移现象，可以使用类扩散的方式对其进行研究。其扩散通量 J_{em} 可以表示为：

$$J_{em} = C \frac{D}{kT} Z^* e \rho j \quad (1.3)$$

其中 C 为浓度梯度， D 为扩散系数， k 为玻尔兹曼常数， T 为温度。随着大量原子在电子流作用下从阴极迁移至阳极，迁移的金属在阴极和阳极之间存在浓度梯度，由此化学势梯度引起的原子扩散流为：

$$J_{chem} = D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (1.4)$$



图 4 铝线的电迁移现象

Fig. 4 electromigration in aluminum line under current density of 10^6 A/cm^2

此外，当原子从阴极迁移向阳极时，阴极上会产生拉应力而阳极产生压应力，由此建立起一个从阳极向阴极的反向应力，称为背应力^[20]。如图 5 所示，由阳极处的压应力向阴极处的拉应力形成应力梯度。根据 Nabarro-Herring 理论，受拉应力区域平衡空位浓度高，而压应力区的空位浓度低。因此从阴极到阳极形成了空位浓度梯度。这一浓度梯度使得金属原子从阳极向阴极扩散，此扩散流与电迁移引起的扩散流方向相反。空位浓度梯度大小与阴极到阳极的距离大小有关，距离越小，浓度梯度越大，当达到某一距离时，从阳极向阴极扩散的原子流可以抵消电迁移引起的从阴极到阳极的扩散流，从而阴极上不发生原子的流失，电迁移也不再发生。此时称这一距离为临界长度。

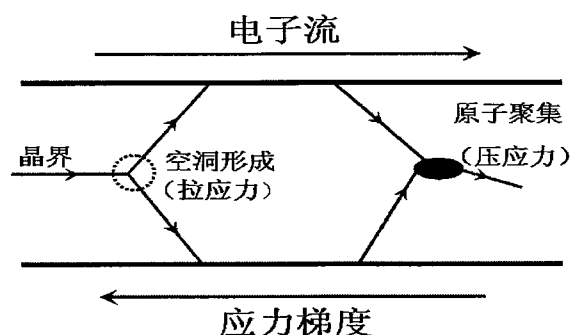


图 5 背应力产生示意图

Fig. 5 the sketch of back stress

背应力可以认为是金属在上述作用力下的化学势梯度，因此可以表示为：

$$F_{me} = \Delta\mu = -\frac{\partial\sigma\Omega}{\partial x} \quad (1.6)$$

式中， F_{me} 为背应力， σ 为静水应力， Ω 为原子体积。此应力驱动下的原子扩散实质上是一个蠕变过程，其原子流可以表示为：

$$J_{me} = -C \frac{D}{kT} \frac{\partial\sigma\Omega}{\partial x} \quad (1.7)$$

因此在电流作用下，金属中总原子流可以表示为：

$$J = -C \frac{D}{kT} \frac{\partial\sigma\Omega}{\partial x} + C \frac{D}{kT} Z^* e \rho j \quad (1.8)$$

根据以上论述，当达到临界长度时金属中不发生电迁移现象，也就是其中总的原子流为0，即 $J = 0$ ，由此可以导出临界长度：

$$\Delta x = -\frac{\Delta\sigma\Omega}{Z^* e \rho j} \quad (1.9)$$

温度一定时，金属的电阻率为常数，因此一般情况下采用临界积来代替临界长度，即：

$$j\Delta x = -\frac{\Delta\sigma\Omega}{Z^* e \rho} \quad (1.10)$$

等式的右边是一个常数，因此当电流密度恒定时，临界积越大，临界长度越大。当有效电荷数和应力梯度已知时，可以得出金属的临界积；在恒定的电流密度下，也可以得出临界长度。对于给定尺寸的金属线或者焊球，根据上式也可以给出发生电迁移所需要的电流密度，比如 Cu 线和 Al 线中发生电迁移电流密度一般在 10^6 A/cm^2 以上，而焊球中发生电迁移电流密度仅需要 10^4 A/cm^2 。

1.3.1 传统焊球电迁移研究

两相共晶焊料如 Sn37Pb 和 Sn58Bi，电迁移下最主要的特点是两相分离。这是因为焊料中的两种元素在电流作用下的扩散系数不同所致。根据大量研究报道^[21-25]，Sn37Pb 共晶焊料中，室温下 Sn 是主要扩散元素，而当温度高于 100°C 时 Pb 是主要扩散元素。Sn58Bi 成分比例和组织结构与 Sn37Pb 相似，因此在电流

作用下呈现出相似的相分离现象，如图 6 所示。电迁移作用下 Bi 原子快速迁移到阳极形成偏聚，而留下 Sn 在阴极聚集，产生相分离现象。

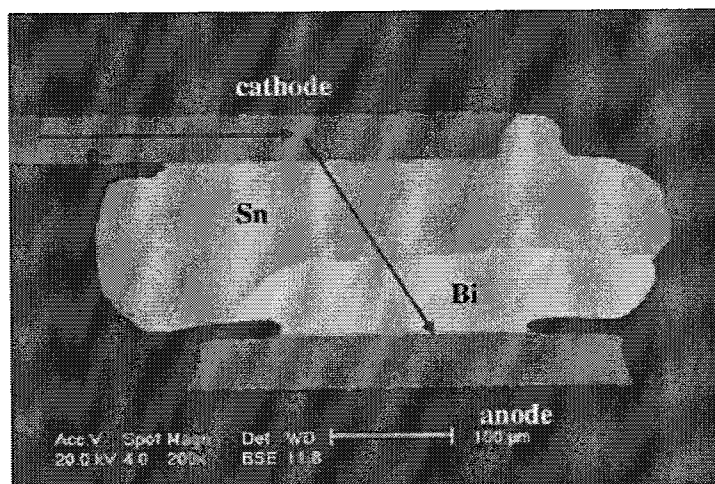


图 6 Sn58Bi 电迁移相分离

Fig. 6 phase segregation of Sn58Bi under electromigration

对于大多数无铅焊料，比如 Sn3.5Ag、Sn0.7Cu 和 Sn4Ag0.5Cu 等，Sn 是其主要成分，其他元素相比于 Sn37Pb 和 Sn58Bi 中的 Pb 和 Bi 含量很少，其迁移相对于 Sn 的自扩散量较小，因此几乎不再出现相分离现象。然而 Cu、Ni 和 Ag 等贵金属原子在焊料中通过快速的间隙扩散导致的 UMB 消耗和 IMC 分解成了关键失效因素。

倒装焊球凸点结构在电流作用下，除了焊料发生相分离和组织粗化外，界面空位的产生及其相互联结形成裂纹并扩展也是导致其失效的主要因素。在线-凸点结构中，电流容易发生拥挤效应，如图 7 所示^[26]。芯片端铝线的横截面尺寸比焊球至少小两个数量级，而流过铝线和焊球的电流大小相同，因此界面连接处铝线和焊球中的电流密度变化巨大，引起了电流拥挤效应。此处电流拥挤一方面发生在电流涌入焊球部分的铝线部分，另一方面发生在连接铝线的焊球部分，此处的电流密度近 10^5 A/cm^2 ，而焊球的平均电流密度为 10^4 A/cm^2 。在芯片端阴极上焊球的电流拥挤部分首先会形成孔洞，然后孔洞沿着界面在焊料中向另一端扩展，直至整个界面开裂失效。

另一方面，线-凸点结构在电迁移下阴极上的 UBM 和金属间化合物的金属原子在电子流的作用下向阳极迁移，不但造成 UBM 的消耗而且使得金属间化合

物不断分解，在阴极上几乎不复存在。与此同时，阳极上原子不断聚集并与焊料发生反应形成大量的金属间化合物。这一阴极和阳极化合厚度巨大的不对称现象称为电迁移极性效应。阴极原子向阳极迁移的同时空位向阴极迁移，不断在阴极侧聚集，最后导致阴极上形成裂纹并扩展而失效，如图 8 所示^[27]。

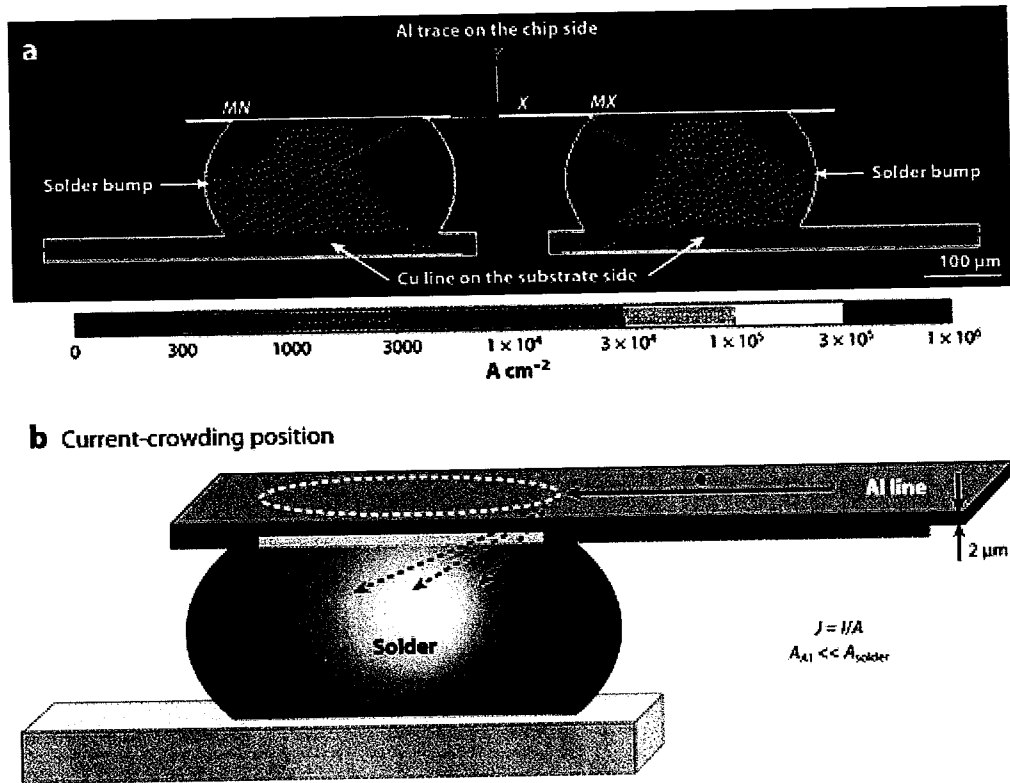


图 7 倒装凸点中的电流拥挤效应^[26]

Fig. 7 current crowding in solder bumps: (a) current density distribution in flip chip bumps, (b) current crowding position in solder bumps

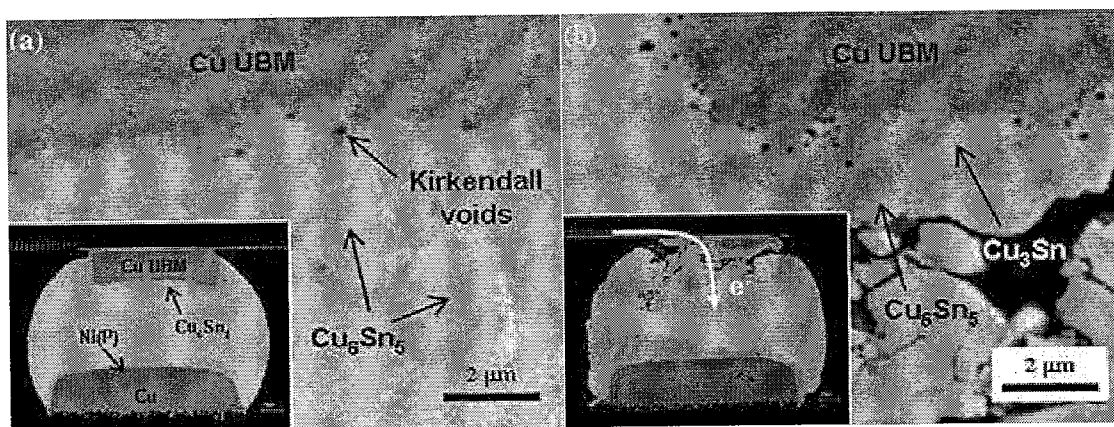


图 8 电迁移失效 (a) 通电前, (b) 通电失效, UBM 消耗和裂纹扩展^[27]

Fig. 8 electromigration failure of solder bumps: (a) before electromigration, (b) UBM dissolution and crack extension

从工程领域来看, 对于微电子产品的可靠性评估和寿命预测至关重要。电子工业中一般使用电迁移中值失效时间 MTF (Mean time to failure) 来描述电迁移引起的失效。中值失效时间是指同样的直流电流试验条件下, 50%的互连结构失效所用的时间, 失效判据为电阻增加 100%^[28, 29]。对于 Al 线和 Cu 线互连, 其电迁移寿命大多数服从对数正态分布。而焊球的电迁移寿命数据大多服从韦伯分布, 其寿命预测模型经常使用 Black 方程来描述:

$$MTF = \frac{A}{j^n} \exp(E_a/kT)$$

式中:

A 为导电材料相关的常数,

n 为电流密度指数,

E_a 为电迁移激活能,

k 为玻尔兹曼常数,

T 为样品温度。

MTF 值越大, 表示发生电迁移失效所需时间就越长。显然, 电迁移中值失效时间与电流密度和温度相关。对于不同互连结构其电流密度指数并不相同, 但是对于多数结构 n 的值接近于 2。而其电迁移激活能则与材料相关。因此针对不同的互连结构需要根据实验来测定寿命预测模型中的相关参数。

1.3.2 铜柱凸点电迁移研究

传统焊球的电迁移失效过程中，线-凸点结构连接处的电流拥挤起到了很大作用。而铜柱凸点结构极大的改善了电流拥挤效应。电流通过传统线-凸点结构时，由于导线和焊点的横截面积相差很大，电流不会均匀分布在焊点内部，并且由于焊料的电阻率较大，因此电流拥挤效应会带来局部焦耳热较大，温度升高，加速电迁移失效。柱形铜凸点结构在电流作用下，电流拥挤同样发生在线-凸点连接处，也就是导线和铜柱连接处。然而相比于焊球，由于铜柱取代大部分的焊料使得铜柱上的焊料帽远离电流拥挤区域，其内部电流几乎是均匀分布。此外柱形铜凸点结构中使用了大量的铜，其电阻率($1.7\text{m}\Omega\cdot\text{cm}$)相对焊料($10\sim 15\text{m}\Omega\cdot\text{cm}$)较小，降低了局部焦耳热。在电迁移的整个过程中，焊料的熔点也是影响主要因素之一。铜的熔点为 1084.4°C ，焊料的熔点一般在 $150\sim 200^\circ\text{C}$ ，铜的熔点远比焊料的熔点高，扩散率相对较小，增强了它的抗电迁移能力。

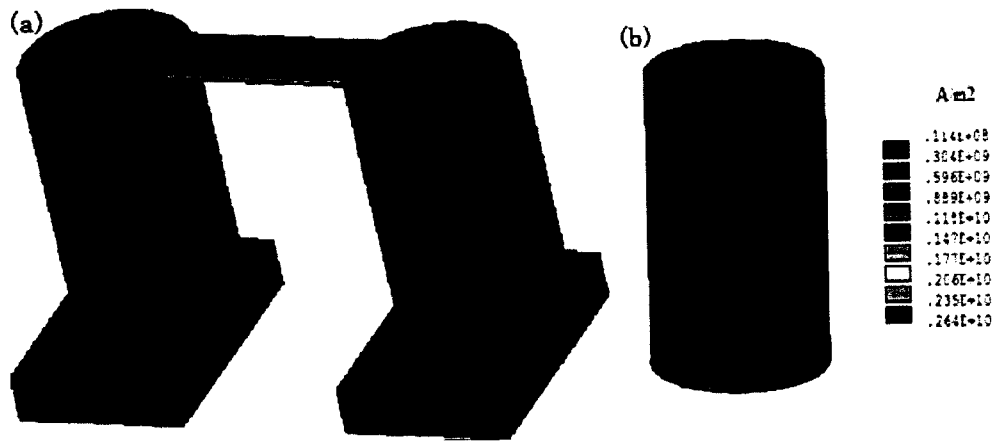


图 9 柱形铜凸点在电流下的电流密度分布示意图：(a) 两个互连铜柱中的电流密度分布，(b) 右边铜柱凸点中电流密度分布图^[30]

Fig. 9 the current density distribution in copper pillar: (a) current density in two copper pillars interconnect, (b) current density distribution in the right copper pillar

Nah 等^[30]研究了铜柱凸点的电迁移性能，发现当施加平均电流密度为 $10^4 \text{ A}/\text{cm}^2$ 时，电流拥挤发生在导线-铜柱连接处，如图 9 所示，此处最大电流密度为 $6.75 \times 10^4 \text{ A}/\text{cm}^2$ ；而焊料帽上的最大电流密度只有 $1.25 \times 10^4 \text{ A}/\text{cm}^2$ ^[31]。并且在 100°C ， $10^4 \text{ A}/\text{cm}^2$ 电流密度下铜柱凸点经历 720h 不发生失效，相比传统线-焊球

结构电迁移寿命得到了极大的提高。Jiang 等^[32]通过研究估算铜柱凸点的电迁移平均寿命是传统线-凸点结构的 2.3 倍。铜柱凸点电迁移过程中界面化合物的变化也不同于传统焊球。由于铜柱上焊料帽较小,在其较长的电迁移寿命期间会全部转化为金属间化合物 Cu_6Sn_5 和 Cu_3Sn , 如图 10e 中所示, 然后 Cu_6Sn_5 进一步转化为 Cu_3Sn 。总的化合物厚度随时间线性增长, 充分说明电迁移加快了化合物的生长^[33]。失效机制也不再是传统焊球中的 UBM 的分解, 取而代之的是 (a) 焊料耗尽, 原来焊料中间部分开裂, 如图 10e 和图 10f 所示^[33]; (b) $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Cu}_3\text{Sn}$ 和 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面孔洞生成和裂纹扩展失效, 如图 11 所示^[8]; (c) $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ 界面 Cu 的消耗失效以及柯肯达尔孔洞联结成裂纹并扩展失效, 如图 12 所示^[8, 10, 30, 34, 35]。但是这些失效模式都是在特定的实验条件下出现, 影响因素有铜柱凸点尺寸, 焊料高度, 焊料成分, 实验电流密度和温度等。目前尚缺乏统一成系统的失效机制研究。

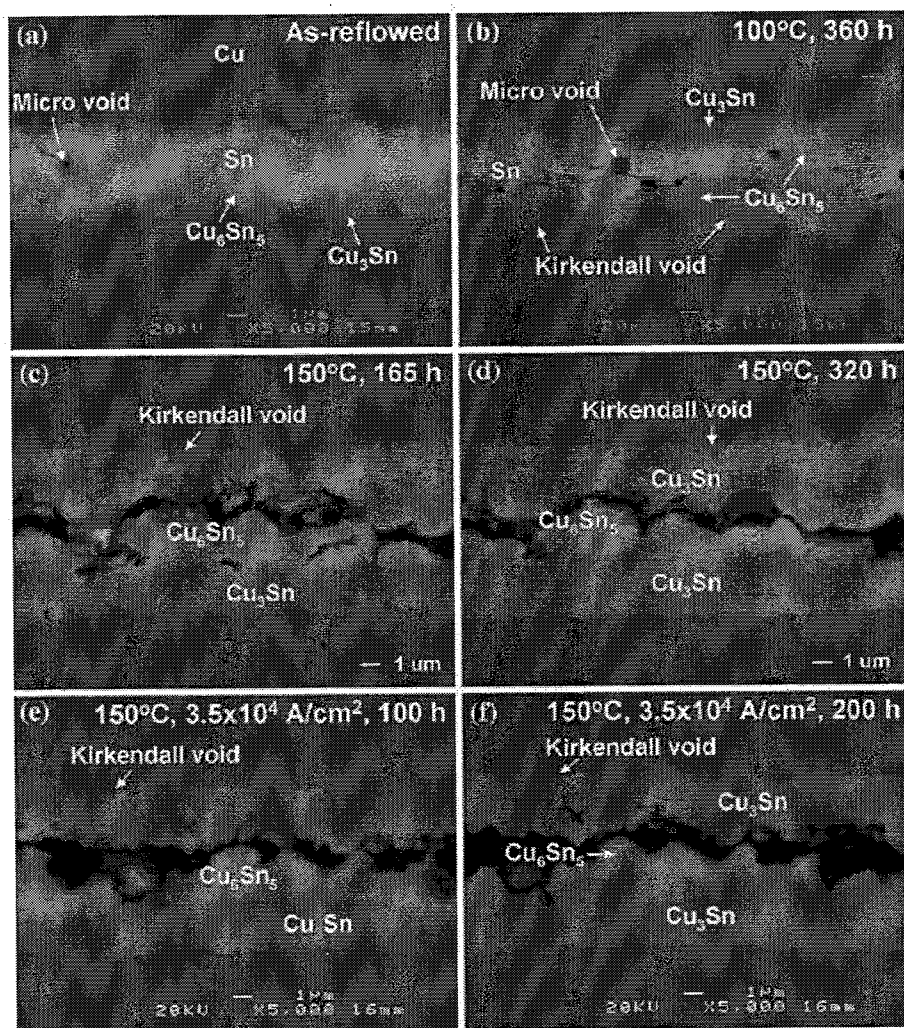


图 10 铜柱凸点电迁移和热时效失效: (a) 回流后, (b) 100°C 360h, (c) 150°C 165h, (d) 150°C 320h, (e) 电流密度 $3.5 \times 10^4 \text{ A/cm}^2$, 150°C, 100h 后, (f) 电流密度 $3.5 \times 10^4 \text{ A/cm}^2$, 150°C, 200h 后^[33]

Fig. 10 electromigration and annealing failure of copper pillar: (a) as reflow state, (b) 100°C, 360h, (c) 150°C, 165h, (d) 150°C, 320h, (e) $3.5 \times 10^4 \text{ A/cm}^2$, 150°C, 100h, (f) $3.5 \times 10^4 \text{ A/cm}^2$, 150°C, 200h

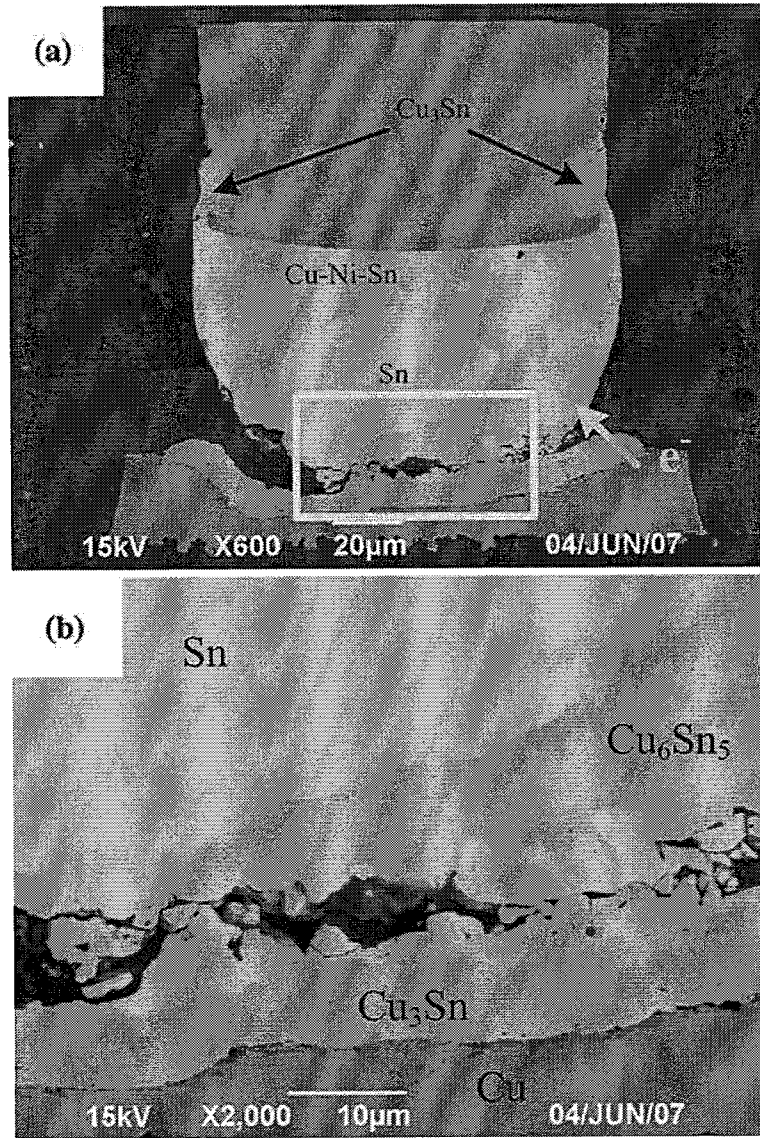


图 11 铜柱凸点 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Cu}_3\text{Sn}$ 界面电迁移失效：(a) 电流密度 $1 \times 10^4 \text{ A/cm}^2$, 150°C , 4898h 后, (b) a 图界面放大图^[8]

Fig. 11 cracking of $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Cu}_3\text{Sn}$ interface under electromigration: (a) $1 \times 10^4 \text{ A/cm}^2$, 150°C , 4898h, (b) the close-up view of figure (a)

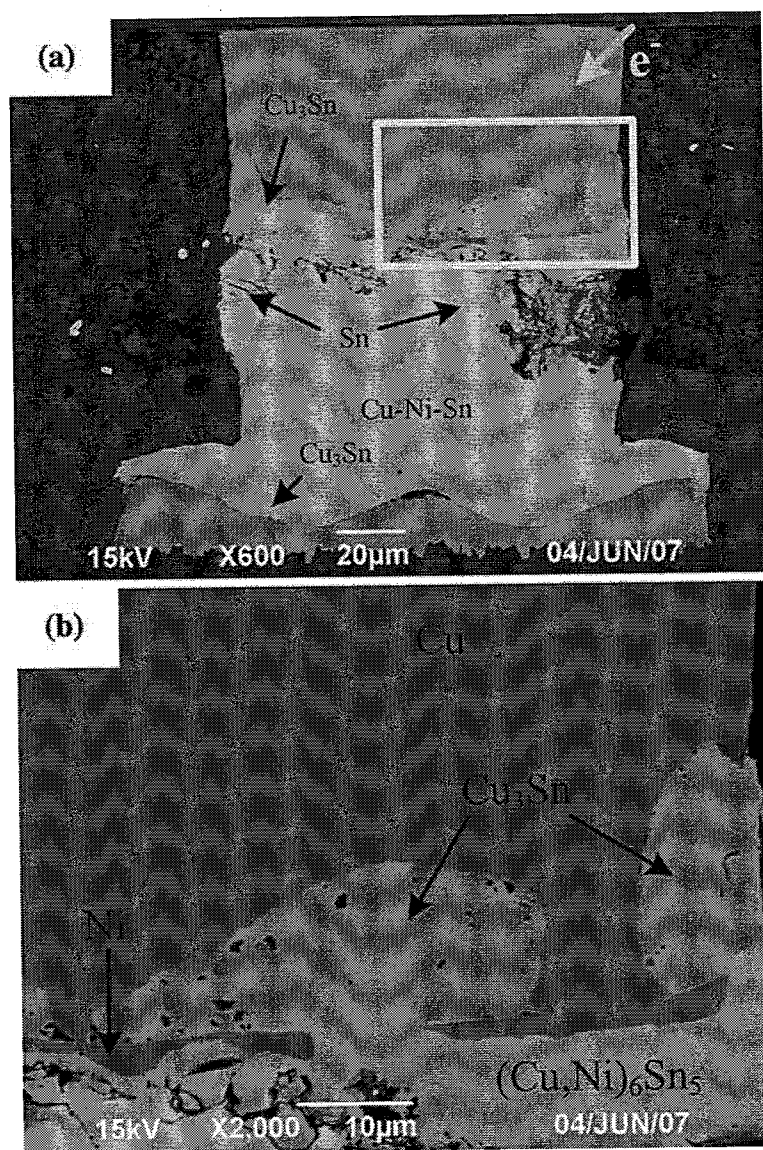


图 12 铜柱凸点界面 Cu 消耗以及柯肯达尔孔洞联结成裂纹并扩展失效：(a) 电流密度 $1 \times 10^4 \text{ A/cm}^2$, 150°C , 4898h, (b) 图 a 局部放大图

Fig. 12 consumption of copper pillar and Kirkendall voids formation: (a) $1 \times 10^4 \text{ A/cm}^2, 150^\circ\text{C}$, 4898h, (b) close-up view of figure (a)

1.4 热循环

微电子器件在使用过程中受到环境温度以及电路周期性通断导致的温度变化的影响，内部会产生热应力和应变，对其可靠性和寿命会产生一定的影响。封装体内一般包含焊料、铜、硅片、PCB 和其他一些材料，由于这些材料的热膨胀系数不匹配，封装体在温度周期性变化的时候会产生较大的交变应力和应变。而

且封装体中某些部位受到热梯度和几何形状的限制，往往会产生热应力集中，造成裂纹萌生和扩展，从而加剧这一部位的失效。

为了研究温度变化对封装体的可靠性影响，业界和研究者往往通过模拟真实的使用环境来设计加速寿命实验，并且已经形成相应的加速寿命实验标准，比如 22-A104D 号 JEDEC 标准。实验设计都是将测试样品放入高低温度循环箱中，其温度变化曲线一般如图 13 所示。各个标准的差异主要是高低极限温度、高低温保温时间和升降温速率的不同。从图 13 的温度曲线中可以得知，一个热循环周期中包括温度的高低温循环和高温存储。温度循环所带来的是封装体机械疲劳，而高温存储会带来封装体中某些材料的蠕变，比如焊料因其熔点较低就非常容易发生蠕变。因此热循环的研究主要关注封装体中的焊料组织的晶粒大小、金属间化合物厚度和其形貌在温度循环作用下的演变，以及焊料在交变应力作用的疲劳损伤和高温保温时造成的蠕变损伤。基于此损伤过程，焊料的热循环寿命研究也得以展开，各个影响其寿命的因素也得到了充分的研究，并且给出了不同情况下的寿命预测模型。

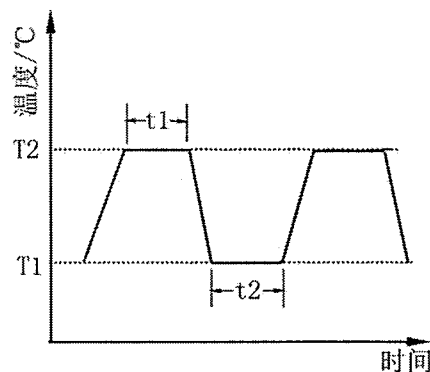


图 13 热循环温度曲线示意图

Fig. 13 the sketch of thermal cycling load

1.4.1 焊球热循环研究

对含铅焊球的热循环的早期研究发现，热循环后焊球的微观组织发生了很大的变化。Pang 等^[36]发现在升降温速率为 $12.7^{\circ}\text{C}/\text{min}$ ，温度为 $-40\sim 125^{\circ}\text{C}$ 的循环条件下，Sn63Pb37 焊点经历 2000 次循环后其原来的细小共晶层状组织转变成了粗

大的球状组织，并且随着热循环的进行组织粗化会不断加剧，如图 14 所示，金属间化合物 Cu_6Sn_5 也会变厚。随着热循环周次的增加，裂纹会在焊盘和焊球界面处萌生，进而在剪切力的作用下在焊料中扩展，最终导致焊点与焊盘剥离而失效^[37]。通过分析焊球在热循环下的组织演变及其失效模式，含铅焊球的失效机制也得到了清晰的认识。目前主流的观点认为焊点热循环失效是机械疲劳与蠕变损伤的结合。焊料通过原子扩散和晶格滑移实现蠕变，塑性变形逐渐累积，直至出现裂纹，同时继续在温度循环的作用下扩展直至断裂。

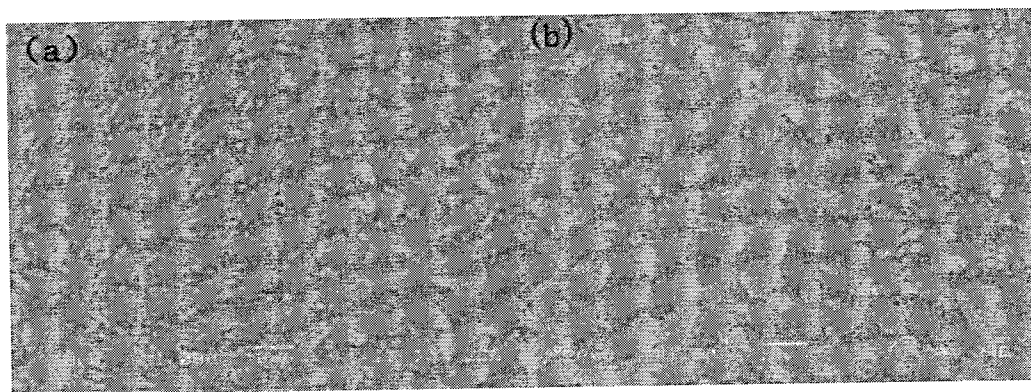


图 14 Sn63Pb37 焊点热循环前后组织演变：(a) 热循环前，(b) 热循环 2000 周后

Fig. 14 microstructure evolution of Sn63Pb37 under thermal cycling: (a) before thermal cycling, (b) after 2000 thermal cycles

由于 Pb 对人体和环境有害，业界转向了无铅焊料的开发，其中研究最多的当属 Sn-Ag-Cu 系列焊料。那么无铅焊料在热循环下的可靠性会有什么不同吗？Henderson 等^[38, 39]等发现在热循环中 SnAgCu 焊球中的 Sn 会发生再结晶，如图 15 所示。热应变和较高的温度使得再结晶发生在焊球中的应力集中区，Sn 在高能态驱动下在晶界等原子束缚能小的地方重新形核，逐渐消耗原来有晶格缺陷的晶粒而生成没有缺陷的新晶粒。这些再结晶晶粒间的晶界会形成连续的晶界网格，有利于裂纹沿着其扩展。因此无铅焊料在热循环下裂纹的扩展也发生在焊料中间，并且靠近焊料和焊盘的界面。但是值得注意的是，这里的裂纹萌生可以先于再结晶的发生^[40]。除了封装体几何因素和热膨胀系数对焊球中的热应力分布有影响以外，Mattila^[40]等还发现 Sn 的各项异性对焊球的应力应变的分布也有一定的影

响。SnAgCu 焊球回流后一般只包含几个大的晶粒，有时候甚至形成单晶焊球，因此晶体取向的影响也值得关注。Sn 在 a 轴和 b 轴方向，即[100]和[010]方向上的热膨胀系数为 $15.4 \times 10^{-6} \text{m}/^\circ\text{C}$ ，杨氏模量为 23GPa；而在 c 轴方向[001]上的热膨胀系数为 $30.5 \times 10^{-6} \text{m}/^\circ\text{C}$ ，杨氏模量为 70GPa^[41-43]。可见 Sn 在不同的取向上热膨胀系数和杨氏模量差异较大，因此在热循环作用下不同取向的晶粒之间会产生较大的热应力和应变，不同晶粒之间的应变差异总是会伴随着晶界的滑移或者塑性功的累积。

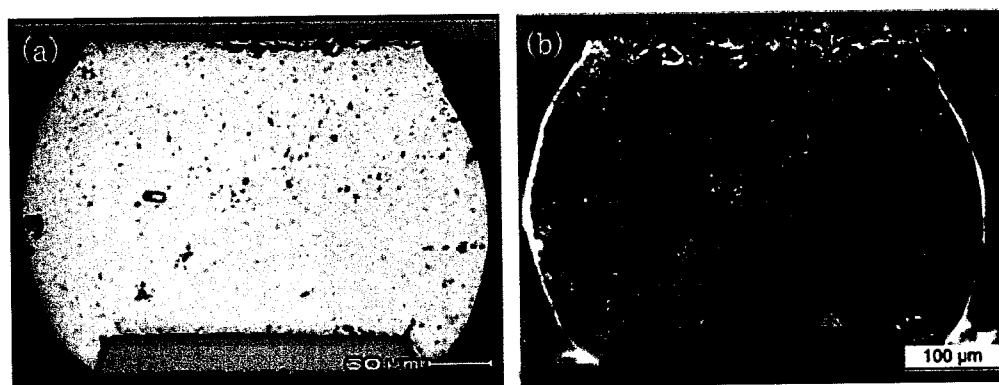


图 15 (a) SAC305 焊球热循环下疲劳裂纹的扩展，(b) 热循环下焊料再结晶的发生^[39]

Fig. 15 (a)fatigue crack in SAC305 solder bump under thermal cycling,
(b)recrystallization of solder bump

除了焊点的失效模式和机理的研究，其寿命研究也是微电子器件研究中一件十分有意义的事情。精确的寿命预测模型可以用于指导器件的可靠性和寿命设计，优化电子设备的生产工艺，为实际应用提供信息支持。目前焊点寿命预测一般是通过实验或者理论计算的方法。通过实验方法来获得寿命数据是在热循环箱里放入几组测试样品，同时监测测试样品的电阻变化，当电阻变化超过一定值时即认为样品失效，记录其失效循环周期，然后将各组实验样品寿命数据用特定统计方法给出其特征寿命或者平均寿命。但是通过实验的方法来直接获得实验寿命非常耗时，而且实验工作量非常大，成本较高。因此通过计算机辅助进行寿命预测因为其成本较低而且高效得到了广泛的关注。计算机寿命预测一般是通过基于对焊点在热循环下失效模式和失效机制的分析，选择一个恰当的材料连续方程，然后通过有限元模拟热循环环境，求解得出主控力学参量，这些参量常用的有应力、

应变和能量密度；最后根据不同的结构选择其合适的寿命预测模型，带入主控力学参量计算出寿命。针对不同的失效机制、主控力学参量和结构，现在已经发展出了基于应力、塑性应变、蠕变应变、能量和累计损伤的 14 种寿命预测模型^[44]。基于应变的寿命预测模型是根据给器件施加力或者应力而产生相应的应变。一般这种模型用于构建受振动或者物理冲击的情况。基于应变的模型则是根据构件承受一定的应变而产生相应的应力，热疲劳引起的应变失配就属于这种情况。基于能量的模型是一种比较新的方法，它的主控力学参量是计算构件或焊球应力-应变回线下的总能量。而基于损伤累积的模型是将裂纹扩展造成的累积损伤作为主控力学参量的一种断裂力学方法。

Jinhua Yu 等^[45]通过实验发现铜柱凸点结构在 0—100℃循环下，3000 周后铜柱和 Cu_3Sn 界面出现了孔洞，但是没有发生剥离失效。Lau Kee Kwang 等研究了铜柱凸点在 -55—125℃下的可靠性，结果发现热循环后界面 Sn 转变成了 Cu_6Sn_5 和 Cu_3Sn ，化合物的厚度随着热循环周次的增加而增加，并且发现铜柱凸点结构甚至可以经受 5000 周次循环而不发生失效。可见铜柱凸点互连结构具有较长的寿命。但是目前 Cu 柱凸点的寿命都是通过实验测得，而且不同的研究者使用的铜柱凸点的几何参数以及结构不同，所以测得的寿命也各不相同，对电子产品寿命设计帮助有限，因此建立其相应的寿命预测模型是十分必要的。

1.5 多场（热循环和电迁移）可靠性研究

电子产品在实际服役过程中往往经受多物理场的考验，比如一部手机在日常使用当中处于电流和温度循环作用下，即同时处于电场和热场当中；还有些电子产品会同时受到电流、温度和应力的影响。一般情况下由于电子产品中不同材料的热膨胀系数不同，导致焊料产生热应力，从而会引起疲劳和蠕变的发生。同时电流的作用会引起电迁移的发生^[46,47]。实际上，电迁移和疲劳蠕变过程是相互影响的，二者对焊料的影响往往处于耦合状态。电迁移作用会在焊料的阴极产生电迁移孔洞，热效应会在化合物界面产生柯肯达尔孔洞，这些孔洞会降低焊料强度^[48, 49]，降低蠕变激活能，加速蠕变和疲劳过程。Zhao 等^[50]人研究发现焦耳热作用导致的局部晶粒旋转和晶界滑移使得最小蠕变速率随电流密度的平方增加。另

一方面, 应力也会影响电迁移过程, 拉应力会加速电迁移过程中化合物的生长速率, 而压应力会降低化合物的生长速率^[51]。此外, 随着电子产品的小型化, 这种耦合作用更明显, 耦合作用对焊球可靠性的影响也越来越重要。但是, 目前关于焊球的可靠性的研究集中在单一服役条件下, 如电迁移、热循环和高温存储等, 对于多场条件下耦合效应对可靠性的影响仍很少涉及。

Zuo 和 Ma 等人^[52, 53]研究了 Sn58Bi 和 SnAgCu 焊料在热循环和高电流密度耦合作用下的可靠性, 结果发现裂纹比相分离对电阻的影响更大。对于 SnAgCu 焊料, 其失效机制可以分为四个阶段, 裂纹倾向于在 IMC 和焊料界面生成并扩展; 而对于 Sn58Bi 焊料失效机制可以分为三个阶段, 微裂纹倾向于在晶界形成。并且他们发现在电迁移开始阶段, 高电流密度通过焦耳热效应的补偿可以减轻焊料性能的恶化。Laurila 等人^[54, 55]研究了功率循环下焊球的失效机制, 但是他们指出其失效机制和热循环下失效机制相同。

李艳等^[31]研究了柱形铜凸点在电热耦合场中原子迁移失效的过程; Byoung-Joon Kim^[56]等研究了在热时效和电流作用下的铜柱凸点界面变化过程; Jinhua Yu^[57]等指出铜柱凸点在热循环下 Si 端填充物发生剥离, 并且分别在电流和热循环下研究了铜柱结构的界面结构可靠性。此外使用有限元对铜柱凸点的热循环可靠性以及寿命预测也有大量研究报道。然而针对 Cu 柱凸点在电场、热场和力场以及他们之间相互作用的多场下的可靠性研究仍然缺乏。

1.6 TSV 的研究进展

硅通孔互连技术 (TSV, Through Silicon Via) 是通过在芯片和芯片之间、晶圆和晶圆之间制作垂直导通, 通孔内部填充导电物质来实现不同芯片之间的互连的一种最新技术。由于它是直接穿过芯片来连接不同芯片, 所以它缩短了互连线的长度、减小了信号延迟, 降低了芯片功耗, 减小了封装体积, 同时可以大幅提高信号的传输速度和集成密度。

硅通孔互连主要用于 3D IC 中^[58-64], 包括存储芯片堆叠、宽 I/O 存储器、宽 I/O DRAM 和宽 I/O 接口; 以及用于 2.5D 转接板中, 包括中间基板^[59, 62, 64, 65]、应力释放 (可靠性) 缓冲区^[66, 67]、载板^[68]和热管理工具^[58]。硅通孔互连技术是这些应用中的关键技术^[69-71]。

1.6.1 TSV 工艺研究

TSV 工艺主要包括 6 个关键工艺:

- 1) 在 Si 晶体中成孔, 成孔方式一般有深反应离子刻蚀 (DRIE) 和激光熔化烧蚀。激光打孔一般是单点操作, 因此其成孔效率较低, 适用于当芯片上孔的数量较少的情况。而且激光打孔制作的 TSV 孔的直径和深度受到激光光源的限制: 对于 CO₂ 激光, 孔的直径为顶部 65 μm , 底部 25 μm , 节距为 90 μm ; 对于紫外激光, 孔的直径可达到顶部 50 μm , 底部 25 μm , 节距 125 μm ; 而对于准分子激光, 孔的直径顶部可达到 18 μm , 底部 12 μm , 节距也可减小到 35 μm 。而 TSV 大部分应用的尺寸要求孔径小于 20 μm , 孔节距大于 20 μm 。因此, 激光打孔在有些情况下不能满足更小 TSV 孔的直径和节距的工艺要求。从制作效率来看, DRIE 工艺可以实现对整片晶圆进行刻蚀成孔, 具有较高效率和低成本, 比较适合制作高密度的 TSV 孔。而另一方面, DRIE 工艺可使 TSV 孔直径和节距分别达到 1 μm 和 5 μm 。因此 DRIE 打孔工艺应用范围更广。DRIE 工艺大多数采用博世 (Bosch) 工艺^[68, 72, 73]。
- 2) 在孔壁上氧化或者沉积绝缘层 SiO₂。为了防止 TSV 漏电以及 TSV 之间串扰, 必须在 TSV 孔壁上制作厚度不小于 0.1 μm 的介电层。通常采用热氧化工艺或等离子增强化学气相沉积 (PECVD) 工艺在 Si 通孔侧壁制作 SiO₂。热氧化法得到的介电层比较均匀, 但是其工艺温度较高(>1000 $^{\circ}\text{C}$), 只能适用于不包含诸如晶体管之类的任何器件的转接板^[68, 72, 73]。而对于含有器件的晶圆/转接板, 由于其能够承受的最高温度小于 450 $^{\circ}\text{C}$, 因此不能使用热氧化法而只能采用 PECVD 法。PECVD 法一般通过几个步骤可以使工艺温度小于 250 $^{\circ}\text{C}$ ^[74, 75]。
- 3) 制作阻挡层和种子层。为了防止 TSV 中填充导电金属向 Si 中扩散, 需要在介电层上制作一层扩散阻挡层, 常用的材料为钛和钽。为了方便后续 TSV 的填充, 通常需要在阻挡层上制作一层种子层, 常用材料为金和铜。阻挡层和种子层的制作一般都是通过物理气相沉积 (PVD) 或溅射等工艺沉积。

- 4) 填充 TSV 孔。填充材料有 Cu^[69, 76-82], W^[83-85], 焊料^[86-90]和导电聚合物^[91-93], 最近还有填充碳纳米管^[94-96]的研究报道。目前应用最广泛的 TSV 填充材料为 Cu, 常用的填充方法有反向脉冲电镀和直流电镀。目前的大多数研究工作都旨在实现无孔洞填充, 避免孔洞可能引起潜在的电性能和热-机械性能方面的问题。TSV 填充研究的另一个重点是如何实现快速填充, 降低工艺成本。
- 5) 去除残留的电镀 Cu。填充 TSV 时, 为了实现无孔填充, 电镀时间较长, 在晶圆表面上会覆盖一层多余的 Cu。这层 Cu 具有较高的应力, 会导致晶圆弯曲, 需要去除。去除残留 Cu 一般采用化学机械抛光 (CMP) 的方法。
- 6) TSV 背面 Cu 外漏。为了实现 TSV 互连, 对于晶圆正面 CMP 工艺, 需要对晶圆背面氧化层进行 CMP 处理将 TSV Cu 外漏。

TSV 在后端工艺和叠层封装过程中一般要经历热处理过程, 这一过程中由于 Si 和 Cu 的热膨胀失配会在 TSV 中产生应力。TSV 在机械-热载荷作用下的可靠性受到广泛的关注和研究。

1.6.2 TSV 可靠性研究

制作工艺过程中会有温度变化和机械载荷, 由于不同的材料之间热膨胀系数不同, 器件中会产生温度变化引起的热应力。比如在温度升高的过程中, Cu 的膨胀量为 Si 的 5 倍, SiO₂ 的 10 倍, 由此会在 Cu/Si 界面和 Si/SiO₂ 界面产生较大应力, 可能对相应界面产生分层和开裂等破坏, 严重影响器件的可靠性^[61, 66, 72, 97, 98]。

关于机械-热载荷作用下的 TSV 可靠性问题一般包括 Si 和 TSV 中填充 Cu 的界面可靠性^[99-101]、填充 Cu 中的孔洞和裂纹问题^[102, 103]和填充 Cu 的挤出问题^[102, 104-107]。

Lu, K.H. 等通过理论分析 TSV 结构在热处理过程中受力状态, 使用能量释放率判断其可能的界面失效位置。如图 16^[100]所示, TSV 经受温度升高时, 由于 Cu 的热膨胀系数较大, Cu 倾向于膨胀出 Si 表面, 界面产生应力; 而当降温时 Cu 收缩量大于 Si 使得其应变和应力状态与加热时相反, 故而使得界面承受交变应

力。这一应力状态使用有限元分析得到验证,如图 17 所示,垂直界面处靠近表面部位处于高应力应变状态。计算能量释放率进一步说明此处容易发生开裂,如图 18 所示^[100]。这一结论得到了 Shin, hae-A 等^[103]的实验验证,如图 19 所示,TSV 在 400°C 热时效 150s 后垂直 Si/Cu 界面产生了裂纹,发生剥离,严重影响了 TSV 的可靠性。

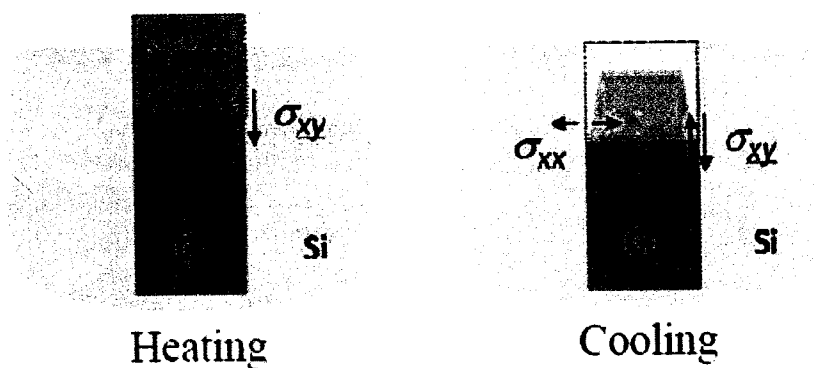


图 16 TSV 经受温度变化时的应力应变状态示意图^[100]

Fig. 16 the sketch diagrams of stress and strain of TSV under temperature cycling

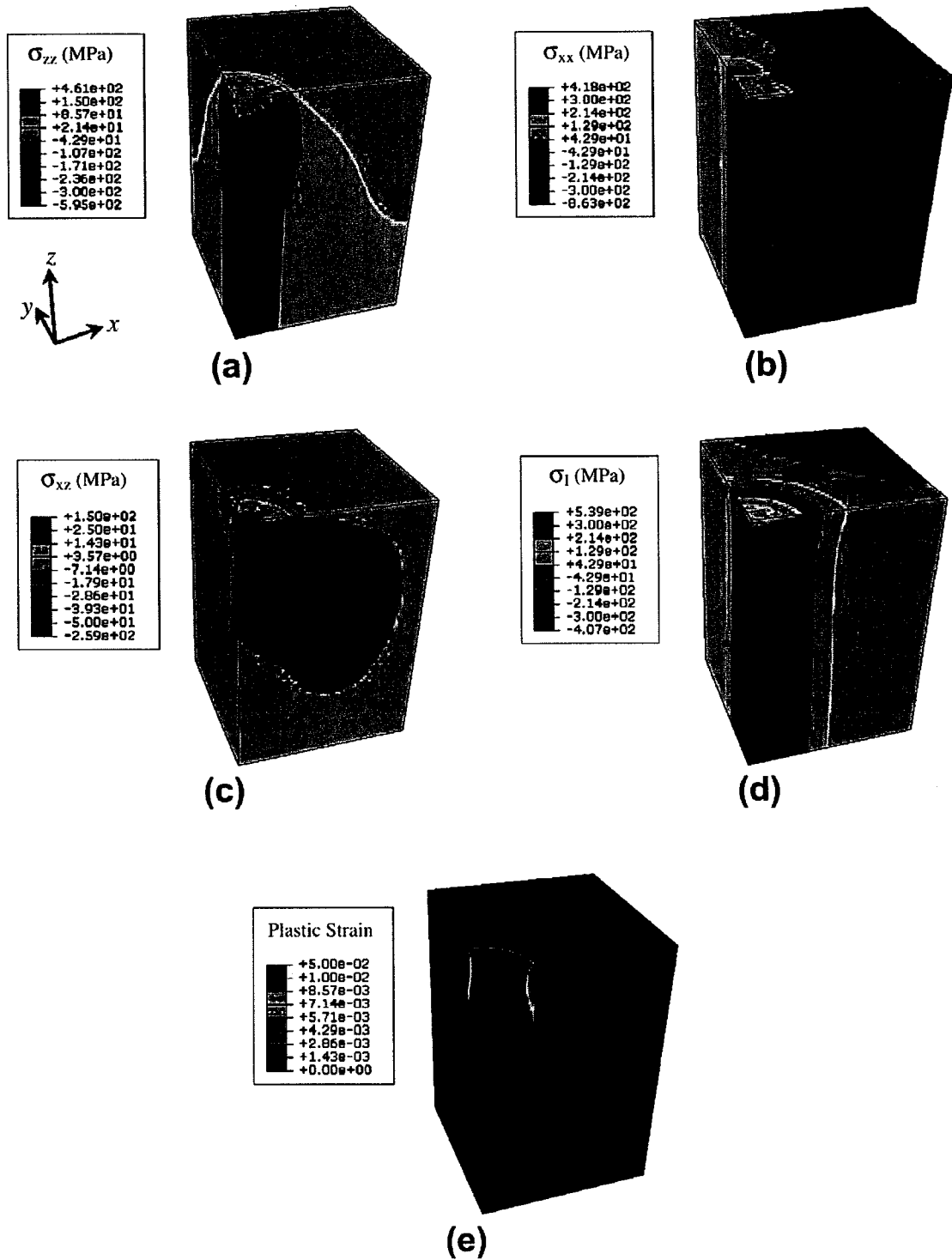


图 17 TSV 经受温度循环时应力应变状态 (a) 轴向应力, (b) 径向应力, (c) 剪切应力, (d) 最大主应力, (e) 等效塑性应变^[106]

Fig. 17 finite element analysis of stress and strain of TSV under thermal cycling: (a) axial stress, (b) σ_{xx} , (c) σ_{xz} , (d) the maximum principle stress, (e) the equivalent strain

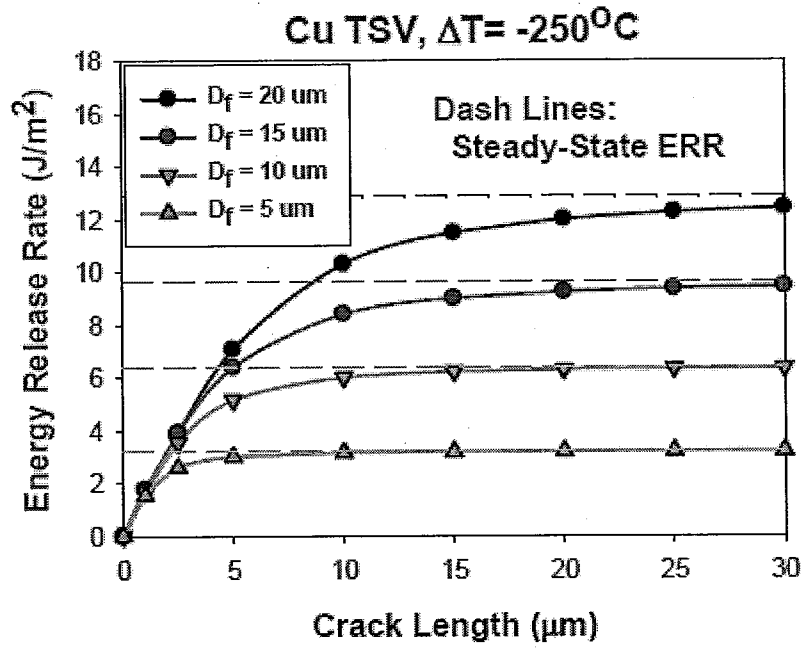
图 18 TSV 界面裂纹能量释放率^[100]

Fig. 18 the energy release rate of crack in TSV

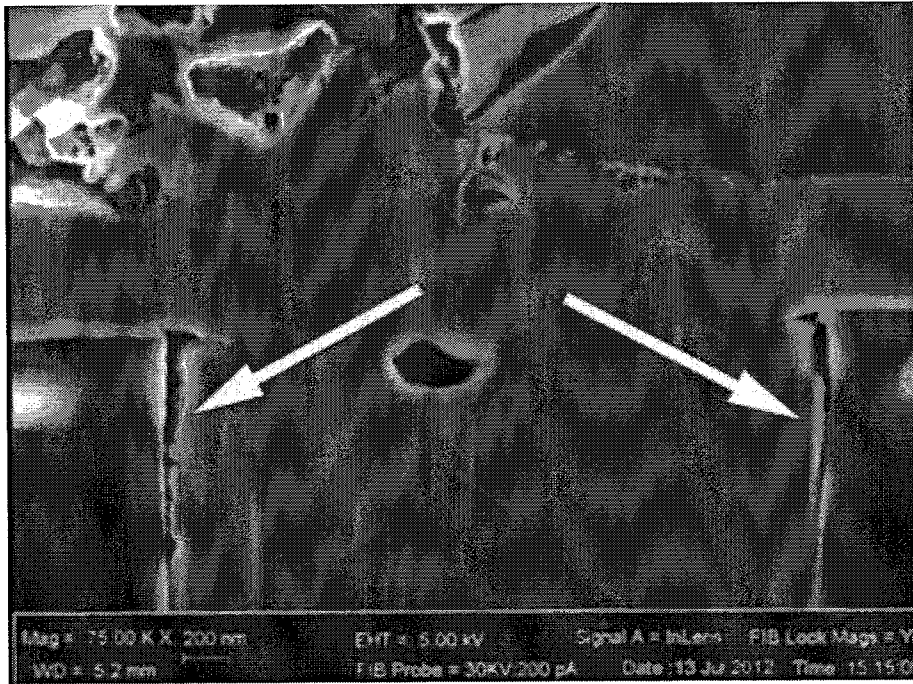
图 19 TSV 界面裂纹^[102]

Fig. 19 cracking of interface in TSV

zhang^[102]等在 400°C 热时效 150s 后发现 TSV 填充 Cu 的晶界上出现较多孔

洞,如图 20 所示。孔洞的形成的原因是位错在 Cu 再结晶温度以下向晶界移动,而当温度高于再结晶温度时, Cu 晶粒开始长大^[71],使得位错在晶界聚集形成孔洞。Shin, hac-A 等^[103]在 200°C 下热时效 TSV 一小时后也在 TSV 的 Cu 中发现了孔洞和裂纹,如图 21 所示,裂纹和孔洞随机分布于整个 TSV 中,但是他们认为孔洞和裂纹的形成原因是 TSV 中 Cu 晶粒大小非均匀分布,导致晶粒间产生较大局部应力,造成局部变形而形成了孔洞和裂纹。

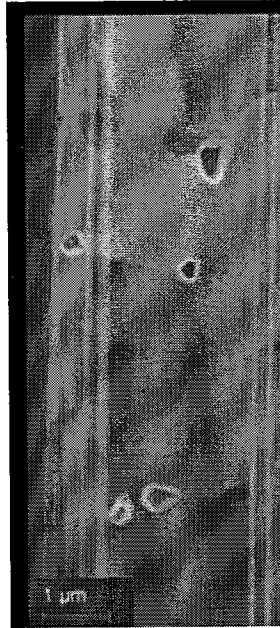


图 20 TSV 热时效后晶界出现孔洞^[71]

Fig. 20 voids at grain boundaries of TSV after annealing

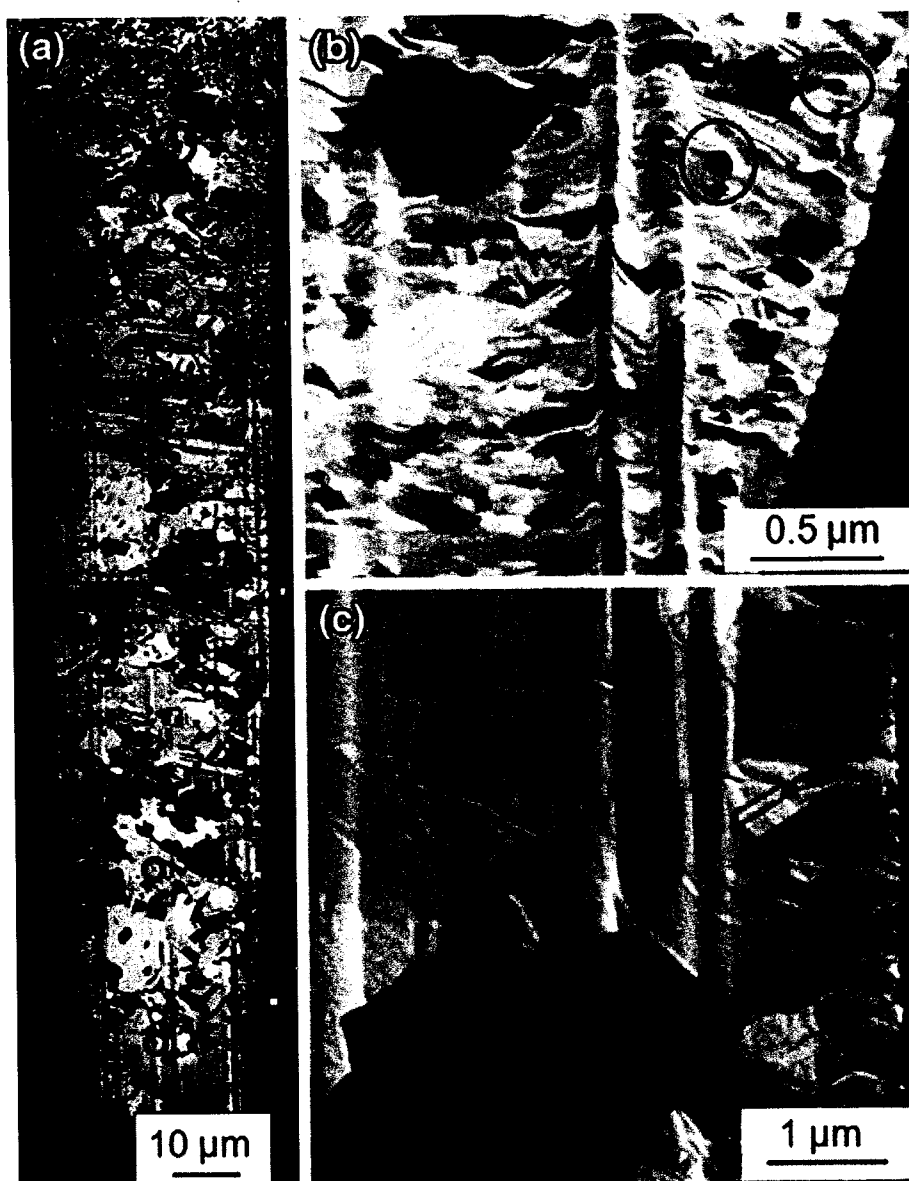


图 21 TSV 热时效孔洞和裂纹 (a) TSV 整体中红色标记为孔洞，黄色标记为裂纹，(b) TSV 上部中的孔洞放大图，(c) 裂纹放大图^[103]

Fig. 21 voids and cracks in TSV after annealing: (a) voids marked in red circles and cracks marked in yellow circles, (b) close-up view of voids at upper of TSV, (c) close-up view of crack

TSV 可靠性问题中得到研究者关注最多的是 TSV 热时效时的挤出问题，由于 Cu 的热膨胀系数 ($16.5 \times 10^{-6} \text{m}/^\circ\text{C}$) 和 Si 的热膨胀系数 ($2.6 \times 10^{-6} \text{m}/^\circ\text{C}$) 不匹配，当加热时 Cu 膨胀量大于 Si，Cu 倾向于挤出 Si 表面；而当降温时，Cu 收缩量大于 Si，Cu 倾向于倾入 Si 表面。若这一过程是弹性变形，那么当温度冷却时，Cu 和 Si 应无相对变形。但是研究发现 TSV 在加热过程中 Cu 内部产生应

力, 如图 22^[99]所示, 当温度高于 100°C 时, Cu 中的应力就足以使得 Cu 发生塑性变形。在高温保温时, Cu 中应力释放发生蠕变变形, 当降温到室温时, Cu 在加热和保温过程中所发生的变形都是不可恢复的塑性变形, 因此 Cu 和 Si 发生了相对变形, 造成了 Cu 挤出 Si 表面现象, 如图 23^[108, 109]所示。

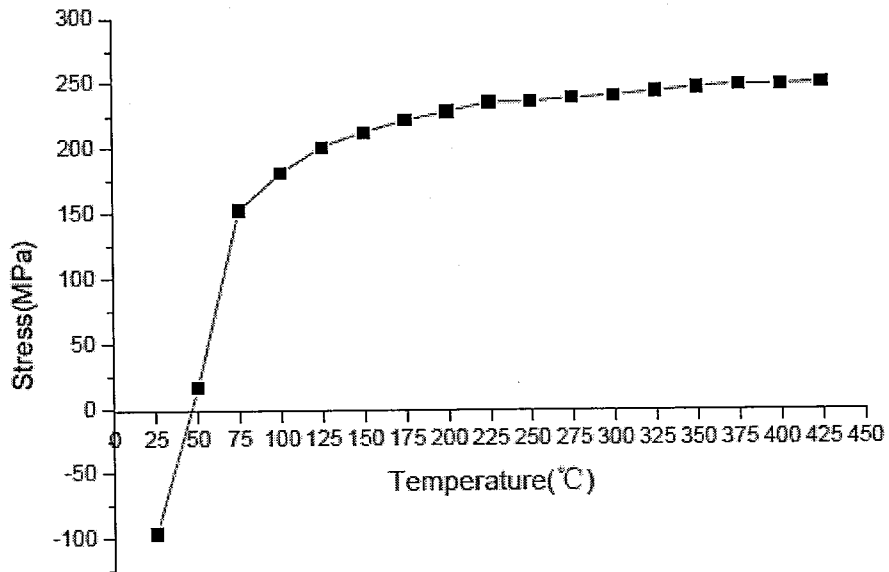


图 22 TSV 在不同温度下的应力^[99]

Fig. 22 the stress of TSV under different temperatures

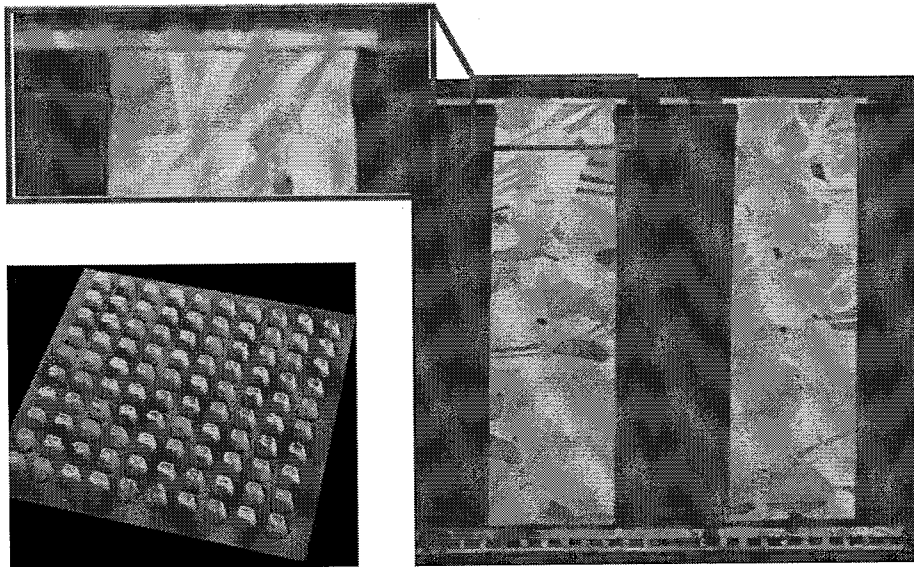


图 23 TSV 挤出现象^{[108] [109]}

Fig. 23 protrusion phenomenon of TSV

要研究清楚这些可靠性问题,就必须首先知道 TSV 中及其周围应力场的分布状态。关于 TSV 的应力研究常见的方法有有限元模拟^[101, 108]、拉曼光谱测定^[110]、弯曲梁法^[111]和 X 射线法^[103, 112]。除了测定应力外,一些研究者还探讨了热处理工艺^{[102] [107] [108] [113]}和电镀 Cu 的组织结构^[114]的影响。

研究者给出了 TSV 的以上三种可靠性问题的几种可能的机理。对于电镀 Cu 中的孔洞,其生成机理可能是晶粒大小不同形成应力而发生局部变形^[103],另一种说法是孔洞的形成可能是由于空位扩散聚集造成。而对于 Si/Cu 界面的裂纹,其形成机理一般认为是界面不同材料之间的热失配^[102],而 Cu 柱里面的裂纹与局部塑性变形有关。电镀 Cu 柱的挤出机理则比较复杂,Ryu 等^[108, 111]认为是 TSV 中 Cu 柱头部即靠近上表面的部分的局部塑性变形造成 Cu 挤出,而张等^[102]认为 Cu 晶粒扩散是最主要的挤出机理,不过 Dutta^[113]认为界面滑移才是造成挤出的真正原因。针对 Cu 柱的挤出现象甚至还存在实验现象上的不一致。有研究者发现挤出高度随着热时效温度线性增加^[108],还有研究者发现挤出高度与热时效温度呈指数增加^[102],然而另外有研究者发现挤出高度随热时效温度的增加而减小^[107]。可见对 TSV 的可靠性还需要详细的研究,来确定其可靠性现象和机理。

1.7 有限元原理

1.7.1 有限元方法原理

有限元方法是一种数值近似计算分析方法,它是通过对连续问题进行有限数目的单元离散来近似的,是分析复杂结构和复杂问题的一种强有力的分析工具。目前,有限元法在许多科学技术领域得到广泛的应用。近年来,有限元法也成功应用于微电子封装领域,包括电子产品寿命预测,热管理和可靠性分析等,极大的提高了产品设计效率和降低成本。

有限单元法的基本思想是将连续的求解区域离散为一组有限个,且按一定方式相互联结在一起的单元组合体。然后根据最小能量法或者其他方法,利用变分法将整个求解域的平衡微分方程、几何方程和物理方程建立在结构离散化的各个单元上,从而得到各个单元的位移、应力、应变和温度等,进而求出结构内部各

待求解物理量。有限元分析一般包含以下 7 个步骤：

- (1) 建立求解域，并将其离散化为有限个单元体，并在单元体的指定点设置节点，使相邻单元的有关参数具有一定的连续性，并构成一个单元的集合体，以它来代替原来的结构；
- (2) 选择位移模式：假定位移是坐标的某种简单的函数（位移模式或插值函数），即用一个连续函数近似描述每个单元的解，通常采用多项式作为位移模式，但是同时要保证多项式项数应该等于单元的自由度数，另外多项式阶次应该包含常数项和线性项。为了使有限元计算结构在单元尺寸逐步取小时能够收敛于正确的结果，要求位移模式（a）必须能反映单元的刚体位移；（b）能反映单元的常量应变，也就是与坐标位置无关单元内所有点都具有相同的应变；（c）尽可能反映位移连续性。
- (3) 分析单元的力学性能，建立单元方程；
- (4) 构造总刚度矩阵，结合所有单元的平衡方程，建立总体平衡方程组；
- (5) 应用边界条件和初始条件，并施加载荷；
- (6) 求解线性或非线性方程组获得节点值；
- (7) 求解其他重要信息，比如主应力，热通量等。

1.7.2 有限元软件介绍

本文使用大型通用有限元分析软件 ANSYS14.0。能够分析领域包括结构、热力学、声学、流体、电磁场等。广泛应用于多种工业制造，如铁道、土木工程、航空航天、电子和水利等。它不仅可以对多种物理场单场分析，还可以实现多场及多场耦合分析，例如本文中使用的电-热耦合，热-结构耦合等。软件主要由三个模块构成：前处理、计算分析和后处理。通常一个 ANSYS 工程分析步骤也是按照前处理-计算分析-后处理的步骤进行。前处理模块中提供了用户材料参数和其他参数定义，实体建模和网格划分以及边界条件设定功能。计算分析中用户可以实现各种物理场的分析，包括结构分析、电磁学分析，声学分析，流体动力学分析等以及他们之间的耦合场分析。后处理中用户可以输出待求解的结果，有些结果比如应力应变等可以直接以彩色等值线、梯度显示或矢量显示等图形显示方式输出，有些结果需要在后处理中计算然后输出，比如累积塑性变形功。软件的

具体操作可以参考相关书籍。

1.7.3 UPFs 用户可编程特性

ANSYS 中材料库模型提供了较多的常用的材料模型比如线弹性材料模型, 双向强化塑性模型, 等向强化塑性模型, Anand 弹塑性模型, 以及材料在声学、光学、电磁学和热力学等等其他邻域的常用的材料模型。但是, 对于一些不常见的材料模型, ANSYS 材料库中没有内置的模型。如果要模拟计算此类材料的性能, 则需要用户二次开发 ANSYS, 来建立用户自己需要的特定的材料模型。ANSYS 二次开发工具大致有 4 个, 分别是 APDL, UPFs、UIDL 和 Tcl/Tk, 其中后面两个用于 ANSYS 交互界面开发。本文中使用 APDL 和 UPFs 进行有限元分析。APDL 参数化设计语言是最常用的一种解释性文本, 这里不作详细介绍。接下里主要介绍 UPFs 二次开发工具。

UPFs 是 User Programmable Features (用户可编程特性) 的简称, 用户可以根据需要利用 UPFs 重新编译连接生成用户定制版本的 ANSYS 软件, 例如创建新单元、定义新的材料属性、定义用户失效准则等, 用户还可以编写自己的优化设计算法, 甚至可以将整个 ANSYS 程序作为子程序调用。UPFs 是用户在 ANSYS 提供的 FORTRAN 源代码的基础上, 修改其用户可编程子程序和函数 (称为用户子程序), 从源代码层次上对 ANSYS 进行二次开发的工具。用户需要在相应的 FORTRAN 语言编译器 (ANSYS 同样支持非 FORTRAN 语言的编译器, 如 C 语言, 但需要 FORTRAN 语言外壳, 且需要格外小心, 不建议这种方式) 的支持下, 将编译修改后的源代码与 ANSYS 库相连形成用户版本的 ANSYS 可执行文件, 另外还可以创建自己的外部命令。

1.7.3 焊料力学行为本构方程

无铅焊料的熔点较低, 在加载条件下, 比如热循环 -40—125℃, 焊料中会产生弹性、塑性和蠕变变形同时存在的情况。对封装体中的互连焊点进行应力应变有限元分析, 以及基于应力、应变和能量的寿命预测计算时, 焊料的本构模型的合理选择会影响到相关计算的精度。本文采用 Anand 统一型粘塑性本构方程。该理论可以反映粘塑性材料与应变速率、温度相关的变形行为, 以及应变率历史效

应、应变硬化和动态回复等特征，近年来在焊料力学性能的研究方面得到了广泛的应用。Anand 模型在 Ansys 材料模型库里可以获得，用户只需要调用输入相关参数即可。一般常用的 Anand 稳态应变率关系中包含温度、应力和状态相关的变量，其表达式为：

$$\frac{d\varepsilon_p}{dt} = A \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) [\sinh(\xi\sigma)]^{1/m}$$

式中：

A 是前幂指数因子

Q 是激活能

R 是玻尔兹曼常数

T 是绝对温度

ξ 是应力乘子

σ 是稳态应力

m 是应变率敏感系数。

1.8 本文主要研究内容及意义

3D 封装发展趋势下封装体尺寸的不断减小使得焊球直径及间距不断缩小，单个焊点所承担的应力强度、电流密度和温度梯度大幅度增加，使焊点在服役过程中的可靠性面临更加严峻的挑战。在这种情况下，一个微封装结构将会非常“脆弱”，不堪重负，原子迁移相关的性能很快衰退，甚至失效。Cu 柱凸点和 TSV 作为 3D 封装中两个有前途的技术的代表，也将面临这一典型的可靠性物理难题，亟待解决。本课题选择 3D 封装中的 Cu 柱凸点和 TSV 为研究对象，旨在澄清其在热场，电场，力场以及它们相互耦合场作用下的可靠性问题。对 3D 封装技术的应用提供理论依据和技术支持，

对提高我国 IC 封装技术有重要意义。这也符合 2020 年中长期规划纲要中的“集成电路—新型高密度集成电路封装、测试技术”这一重点发展要求。

第二章 铜柱凸点的电迁移

2.1 引言

随着微电子封装向小型化和高密度方向的发展,封装体需要在一定芯片面积上实现更多 I/O 以及更高的带宽,并且具有良好的散热性能。传统倒装焊封装由于焊球尺寸较大导致小间距下容易发生坍塌桥连,且散热系数较低,抗电迁移性能较差而逐渐不能满足封装发展的需要。而拥有平整侧面和高深宽比的铜柱凸点和尺寸更小的微铜柱凸点与圆形焊锡凸点相比,更能满足封装小间距的要求。铜柱之间较大的空间使信号的噪声减小。铜柱凸点结构中大量的使用了具有较高散热系数和导电系数的铜,与焊锡膏相比提高了封装的散热性能和导电性能。目前,微电子封装产业已开始广泛采用铜柱凸点。

但是铜柱凸点的可靠性尚未得到系统的评估。铜柱凸点体积相对传统焊球较小,尺寸的减小会导致铜柱凸点中的电流密度大幅增加。例如,当直径为 $20\mu\text{m}$ 的铜柱凸点中通入 0.05A 的电流时,电流密度高达 $10^4\text{A}/\text{cm}^2$,该值远大于直径为 $100\mu\text{m}$ 传统焊球中通入相同电流所产生的电流密度。此外,随着铜柱凸点尺寸的减小,原子在电流的作用下迁移距离变短,焊料相变过程加剧,并伴随大量的柯肯达尔孔洞产生。而且铜柱凸点中焊料体积较小,更容易在服役期间全部转化为金属间化合物,导致微凸点结构改变,性能退化^[115]。本章节将从电迁移寿命和界面失效模式出发来研究铜柱凸点的电迁移可靠性。

2.2 实验方法

本实验测试样品中使用的 PCB 板尺寸为 $9.2\text{mm}\times 6.4\text{mm}\times 1\text{mm}$,板上布线厚度 $17\mu\text{m}$; PCB 板电路图如图 24 所示。角上 4 个方形焊盘用于连接提供测试电流以及检测样品电压、电阻变化的导线,尺寸为 $0.8\times 0.8\text{mm}$;中间四个小的圆形焊盘用于回流焊时连接芯片上的铜柱凸点,其半径为 $100\mu\text{m}$,稍大于铜柱凸点的尺寸,有助于回流时更准确的对准。Si 芯片尺寸为 $2\text{mm}\times 0.96\text{mm}\times 0.35\text{mm}$,芯片

上布线厚度为 $10\mu\text{m}$ 。如图 25 所示,芯片上有 4 个铜柱凸点,铜柱直径为 $160\mu\text{m}$,高度为 $100\mu\text{m}$;焊料帽为纯 Sn,焊料帽高 $30\mu\text{m}$ 。样品制备:将凸点蘸上助焊剂,在体式显微镜下放在 PCB 板上并与焊盘对准,随后将对准后的样品放入回流炉中进行回流,回流温度最高为 260°C ,回流曲线如图 26 所示。本实验中使用的回流炉是北京科亚迪电子科技有限公司生产的电脑控制无铅回流炉,有四个温区,可分别对样品进行预热、活化焊剂、回流、冷却。本实验采用上下温区共同加热方式,将样品依次置于设备导轨上,匀速通过四个温区。图 27 是回流后的样品截面图,回流后样品焊料均匀分布,并且在铜柱凸点侧壁对称均匀润湿,保证了样品较高的结合力。回流后 4 个铜柱凸点两两并联。

2.2.1 电迁移实验

本实验采用电流密度和环境温度正交实验组,如表 1 所示。电流密度分别为 $27.4\text{kA}/\text{cm}^2$, $29.8\text{kA}/\text{cm}^2$ 和 $32.3\text{kA}/\text{cm}^2$,分别置于 30°C , 60°C 和 90°C 的环境温度下,共 9 组实验。每组实验由 30 个样品串联而成。每组样品串联组装前,对每个样品进行初始电阻值测试,然后筛选样品,保证所有的样品初始电阻值基本相同。实验过程中,为了便于样品散热并使温度均匀分布,样品均匀浸没于导热硅油中。实验过程中采用 HIOKI 株式会社生产的 LR8401-21MEMORY HILOGGER 数据记录仪对每个样品进行电阻和温度实时监测。温度监测是将热电偶贴于芯片背面,用数据记录仪每隔 2 分钟记录温度变化。为了同步分析铜柱凸点焊接界面在电流作用下随时间的变化以及判断其失效模式,在电迁移实验过程中,我们采取等时取样观察方法,即每隔固定时间取下未失效的电迁移样品进行界面观察并进行相关分析。

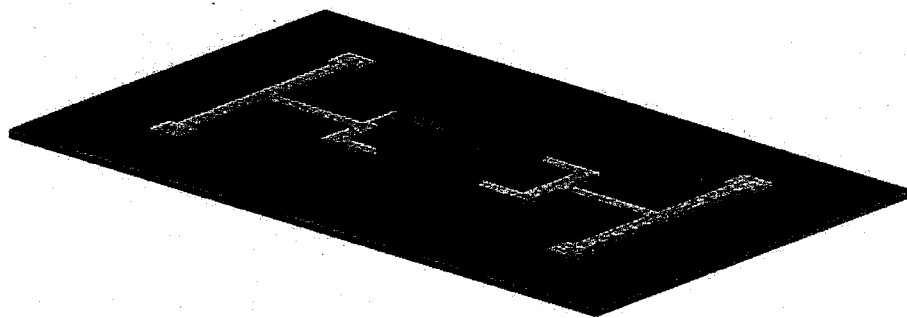


图 24 铜柱凸点样品电路图

Fig. 24 circuit of copper pillar test structure

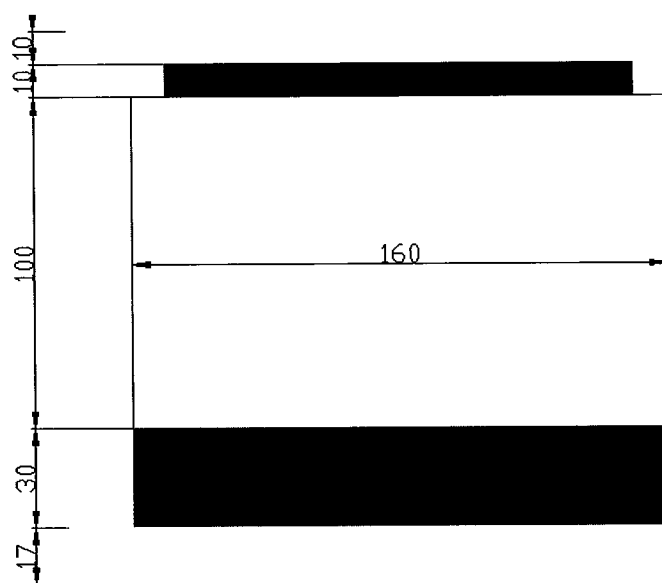


图 25 铜柱凸点样品结构示意图

Fig. 25 the sketch of copper pillar

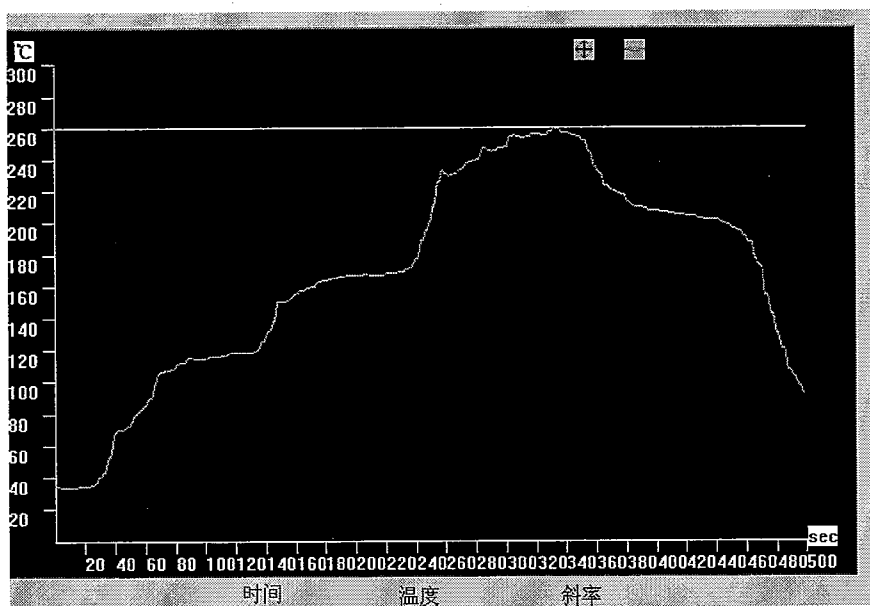


图 26 铜柱凸点样品的回流温度曲线

Fig. 26 the flow curve of copper pillar

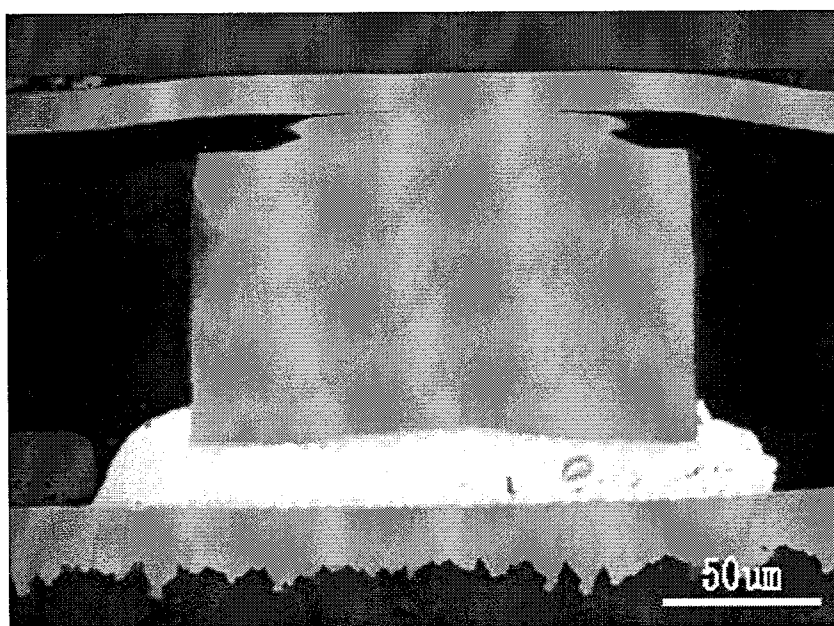


图 27 回流后铜柱凸点截面的扫描电镜照片

Fig. 27 Cross-sectional view of an as-assembled Cu pillar solder joint

表 1 电迁移正交实验组

Table 1 EM Test Matrix			
S.T. / A.T. / j / $^{\circ}\text{C}$ / $(\text{kA} \cdot \text{cm}^{-2})$	50	70	90
27.4	138	169	186
29.8	160	178	197
32.3	180	190	211

2.3 实验结果

2.3.1 铜柱凸点寿命

电迁移过程中铜柱凸点电阻随通电时间的变化如图 28 所示,电阻变化曲线分为四个阶段。第一阶段是实验开始后短时期的电阻波动阶段,具体表现为电阻从实验开始上升然后下降,这一波动应与样品中的缺陷有关。在电流作用下,样品中的缺陷,比如微小的孔洞等缺陷会发生回复使得样品电阻下降。第二阶段为平稳阶段,这一阶段电阻变化小,经历时间长,也称为孕育期。第三阶段为电阻开始快速增加,在这一阶段,样品中形成裂纹,逐渐开始失效。第四阶段为样品失效阶段,电阻急剧增加,直至发生开路失效。

电迁移实验过程中铜柱凸点温度随时间的变化如图 29 所示,温度变化曲线趋势和电阻变化曲线相似,同样也可以分为四个阶段,分别为波动期,孕育期,升温阶段和断裂阶段。由于样品的温度变化和焦耳热相关,即电阻的变化影响着温度的变化,同时温度升高电阻也相应的升高,因此二者具有相同的变化趋势。样品断裂前电阻急剧变化的时间,即第三阶段相比于整个寿命时间是很短暂的,因此本文中以样品发生断裂作为其失效判据。

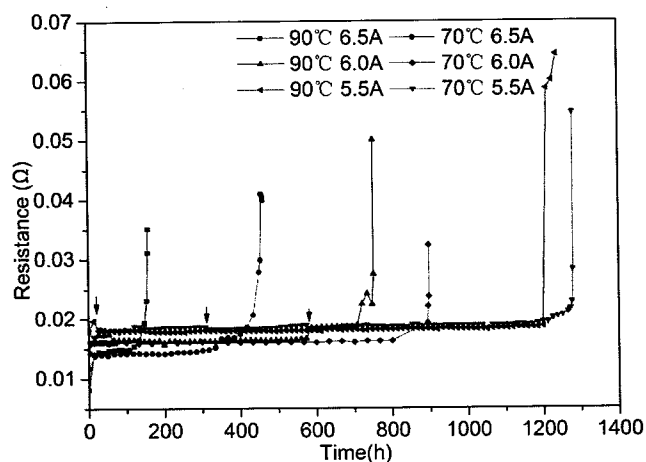


图 28 铜柱凸点电迁移中电阻变化曲线

Fig. 28 The resistance curve of interconnects

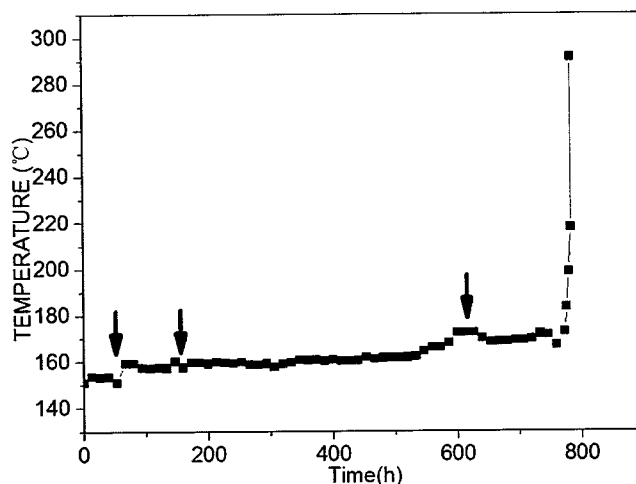


图 29 铜柱凸点温度变化曲线

Fig. 29 The temperature of interconnects

以每个样品开路为失效判据,统计各组所有样品的失效时间,并使用 weibull 分布对数据进行分析,统计出各组样品的电迁移寿命。图 30 是铜柱凸点的寿命 weibull 分布函数,每组寿命分布都近似直线,符合 weibull 分布。根据 weibull 分布的特征寿命和形状因子计算出每组的平均寿命,如表 2 所示,在相同环境温度下铜柱凸点寿命随着电流密度的增加而下降;同样地在相同电流密度下,其寿命随着环境温度的增加而下降。铜柱凸点平均寿命 (MTTF) 和电流密度以及温度之间的关系遵循 Black^[116]经验方程。

$$MTTF = A \frac{1}{j^m} \exp\left(\frac{Q}{kT}\right) \quad (2.1)$$

式中:

A 是常数

j 是电流密度

m 是电流密度指数

Q 是电迁移激活能

k 是玻尔兹曼常数

T 是平均温度

以测得的平均寿命对温度做半对数曲线如图 31 所示, 平均寿命的对数与温度的倒数呈线性关系, 拟合三组数据得到电迁移激活能为 0.88eV。利用相同的方法也可获得电流密度指数, 但是由于试验中 9 种不同的测试条件下焦耳热的产生, 很难保证不同组的样品温度相同, 因此利用上述类似于获得电迁移激活能的拟合方法来得到电流密度指数是不可行的。为了解决这一问题, 本文中使 MATLAB 软件, 采用最小二乘法双参数数值拟合 Black 方程来获得电流密度指数, 通过代入实验寿命、电流密度以及环境温度计算出铜柱凸点电流密度指数为 1.64。

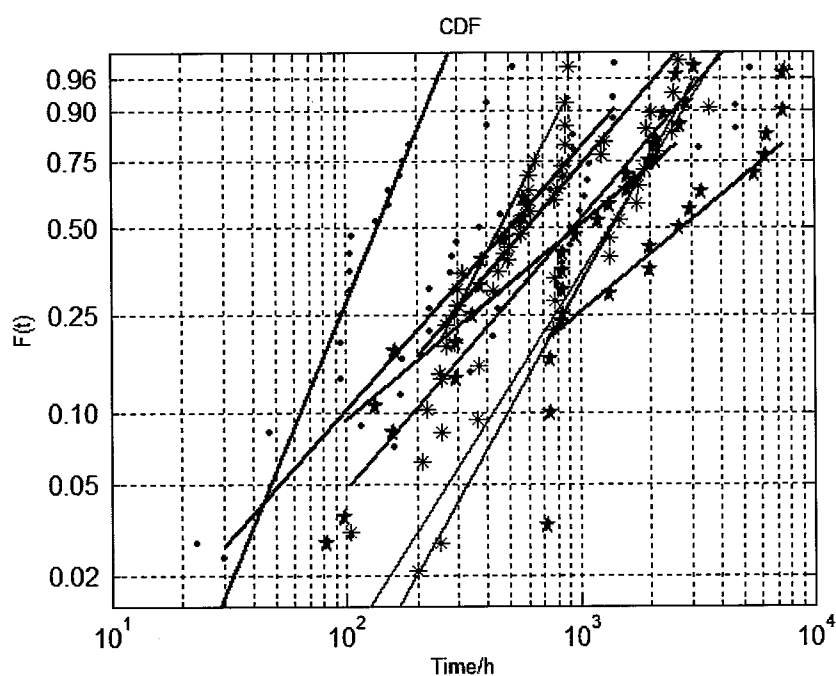


图 30 铜柱凸点各组寿命 weibull 分布曲线

Fig. 30 Weibull cumulative distribution

表 2 铜柱凸点每组实验寿命表

Table 2 lifetime data of copper pillars

MTT A.T. (h) j(kA · cm ²)	50°C	70°C	90°C
27.4	4070	1509	1027
29.8	1770	806	606
32.3	1410	636	156

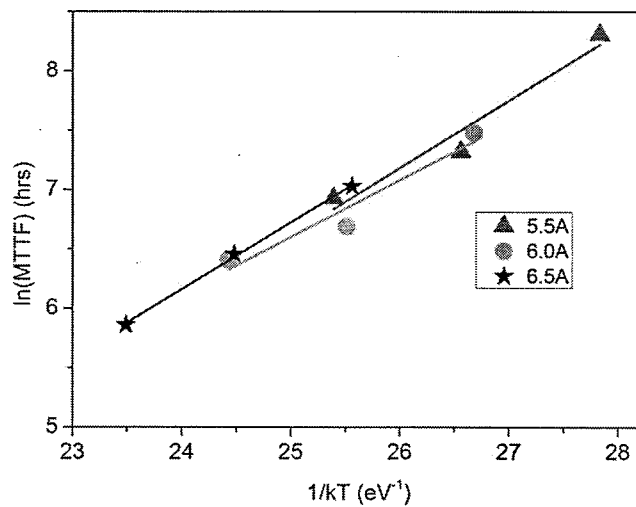


图 31 平均寿命与温度曲线

Fig. 31 Plots of MTTF against 1/kT

2.3.2 铜柱凸点界面失效

图 32 是典型的铜柱凸点电迁移过程中等间隔时间取样的界面演变过程，电子流从芯片侧流向 PCB 侧，因此铜柱侧为阴极，PCB 板侧为阳极。如图 32a 所示，界面 Sn 在电流作用下不断地转变为金属间化合物 Cu_6Sn_5 和 Cu_3Sn ，阳极上 Cu_3Sn 和 Cu_6Sn_5 的厚度分别为 $2\mu\text{m}$ 和 $7\mu\text{m}$ ，而在阴极侧 Cu_3Sn 和 Cu_6Sn_5 的厚度

仅为 $0.79\mu\text{m}$ 和 $0.75\mu\text{m}$, 呈现出强烈的极性效应; 并且在 $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ 界面和 Cu_3Sn 内出现了很多微小的柯肯达尔孔洞。如图 32b 所示, 随着电流作用时间的增加, 尽管焊点未失效, 但是 Sn 已经全部耗尽并转变为金属间化合物, 互连界面演变成 $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}/\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Cu}_3\text{Sn}/\text{Cu}$ 结构, 由此表明金属间化合物对铜柱凸点互连的可靠性至关重要。图 32b 中 Cu_6Sn_5 的厚度为 $15\mu\text{m}$, 阴极和阳极上的 Cu_3Sn 厚度分别为 $4.94\mu\text{m}$ 和 $5.35\mu\text{m}$; 与 360h 时相比, 阴极和阳极的 Cu_3Sn 厚度差减小。同时, 随着电流作用时间的增加, 柯肯达尔孔洞数量增加, 尺寸变大。甚至在局部区域, 柯肯达尔孔洞已经开始联结形成裂纹。

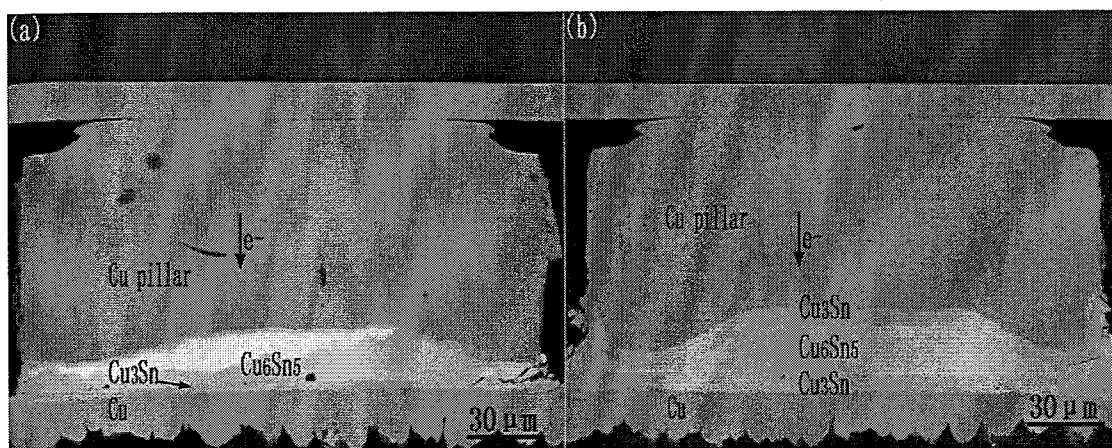


图 32 $27.4\text{kA}/\text{cm}^2$, 186°C 下铜柱凸点失效前界面形貌; (a) 360h (b) 600h

Fig. 32 interfacial morphology before failure occurs. (a) after 360h with a current density of $27.4\text{kA}/\text{cm}^2$ at 186°C , (b) after 600h

本文对所有失效样品的截面进行扫描观察, 统计并归类, 得到铜柱凸点在电流作用下的失效模式分为三种类型。第一种失效模式为阴极侧 $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ 界面的开裂失效, 如图 33 所示。图中电子流从 PCB 板侧流向铜柱一侧, PCB 板侧为阴极, 铜柱凸点侧为阳极。图中焊料 Sn 已经全部转化为金属间化合物 Cu_6Sn_5 和 Cu_3Sn , 在阴极和阳极的 $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ 界面以及 Cu_3Sn 里面出现了大量的柯肯达尔孔洞, 且阳极处的 Cu_3Sn 层厚度大于阴极处的 Cu_3Sn 厚度。柯肯达尔孔洞的形成和 Cu_3Sn 的形成相关, 生成的 Cu_3Sn 越多, 相应伴随出现的柯肯达尔孔洞也越多, 因此柯肯达尔孔洞理论上在阳极侧比阴极侧多。但是, 很明显地在阴极 $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ 界面上出现了裂纹。这是因为柯肯达尔孔洞的出现使得阴极 $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$

界面强度弱化，而阴极处的热应力较大，这一点将在下文讨论，因此这一弱化的界面在热应力作用下，孔洞连接形成裂纹并沿着界面扩展直至整个界面开裂发生断裂，造成铜柱凸点互连失效。根据统计这一类型的失效占全部电迁移失效的 55%。

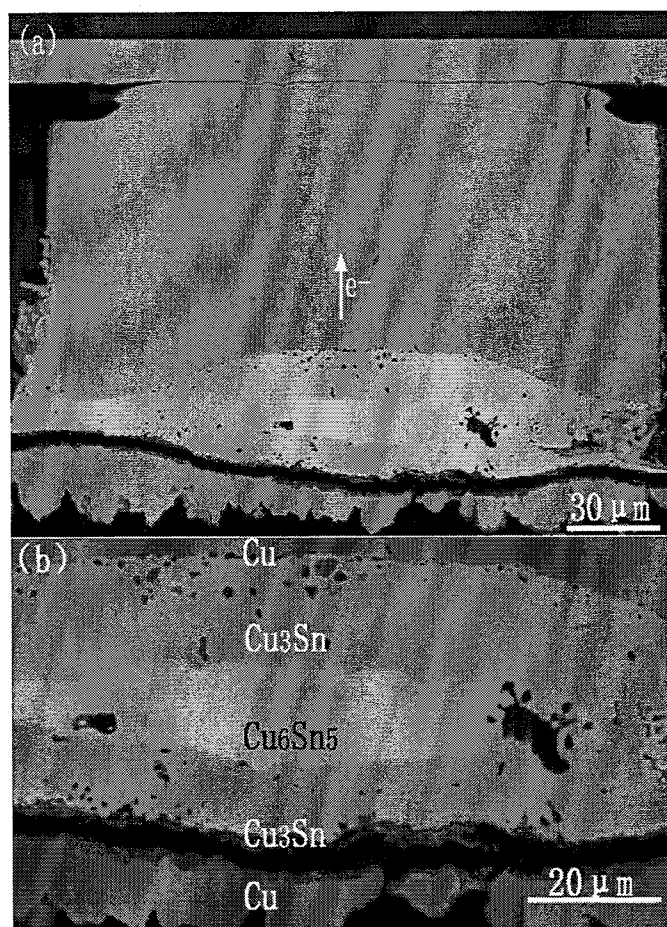


图 33 阴极 Cu/Cu₃Sn 界面开裂失效，29.8kA/cm²,197°C下：(a) 500h 后；(b) a 图的局部放大图

Fig. 33 SEM images of the cross-sectioned flip chip joints of Cu pillar bumps with Sn solder bumps: (a) after 500 hours with a current density of 29.8kA/cm² at 197°C, (c) the enlarge view of the interfaces of figure (a)

第二种失效模式是阳极侧 Cu/Cu₃Sn 界面的开裂失效，如图 34 所示。图中电子流从铜柱凸点侧流向 PCB 板侧，铜柱凸点侧为阴极，PCB 侧为阳极。图中焊料已经全部转化为金属间化合物 Cu₆Sn₅ 和 Cu₃Sn，在阴极 Cu/Cu₃Sn 界面出现

了大量的柯肯达尔孔洞，从放大图 34b 中发现这些孔洞几乎相互联结形成裂纹，同时在 Cu_3Sn 内部也有大量的随机分布的柯肯达尔孔洞。而在阳极侧， $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ 界面的柯肯达尔孔洞已经相互联结沿着界面形成了裂纹。柯肯达尔孔洞的形成主要是 Cu 原子和 Sn 原子的扩散导致的。这一类型的失效模式占全部电迁移失效的 24%。

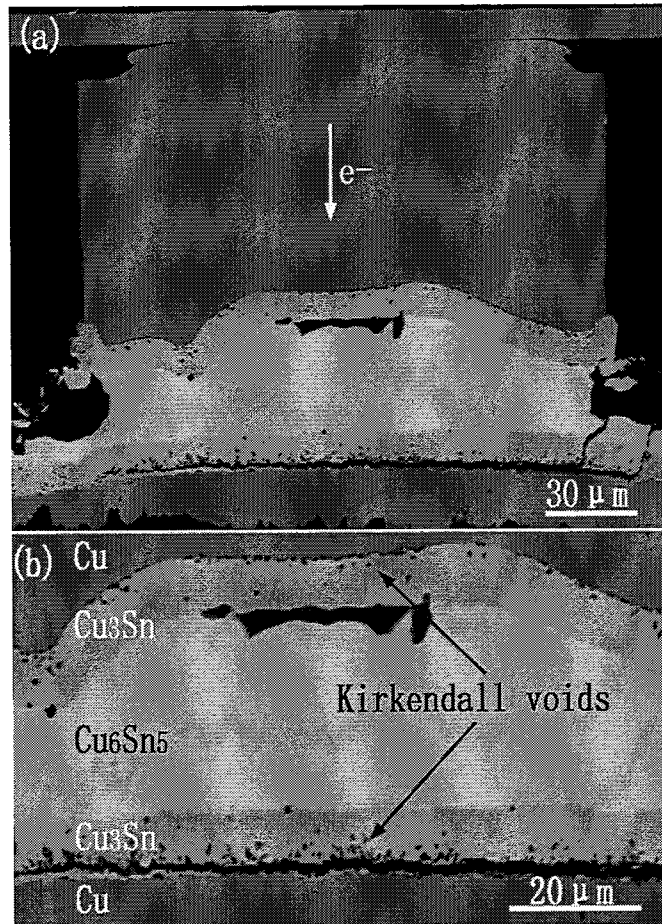


图 34 阳极侧界面开裂失效， $29.8\text{kA}/\text{cm}^2$ ， 197°C 下：(a) 500h 后；(b) a 图的局部放大图

Fig. 34 SEM images of the cross-sectioned flip chip joints of Cu pillar bumps with Sn solder bumps: (a) another Cu pillar with opposite electron flow direction, (b) close-up of figure(a)

第三种失效模式是金属间化合物的脆性断裂，如图 35 所示。铜柱凸点中的焊料 Sn 尚未全部耗尽转化为金属间化合物，由于电迁移效应，阴极侧 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面出现了一些电迁移孔洞，随着电迁移时间的增加，这些孔洞逐渐长大但并未

形成裂纹造成失效，这一现象与传统焊球互连中的电迁移失效不同^[117]。铜柱凸点中的焊料 Sn 比较少，在其全部转化为金属间化合物后形成的电迁移孔洞较少，并不足以布满整个界面造成失效，但使得铜柱凸点互连的力学性能下降。由于 Cu 和 PCB 材料之间的热膨胀系数相差较大，互连结构在电迁移过程中会形成较大的热应力，因此含有尺寸较大电迁移孔洞和数量较多的柯肯达尔孔洞的金属间化合物互连结构极易发生脆性断裂。这一断裂失效模式占整个电迁移失效的 21%。

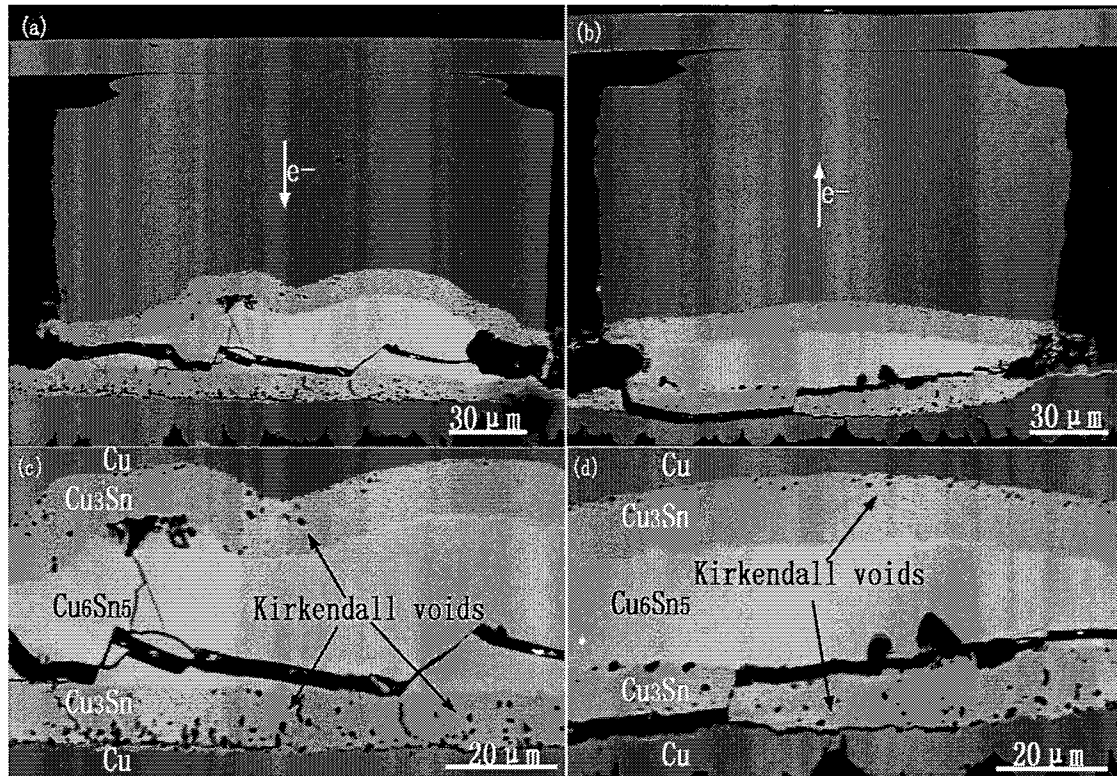


图 35 铜柱凸点中金属间化合物的脆性断裂， $29.8\text{kA}/\text{cm}^2$ ， 197°C 下：(a) 870h 后，(b) 电子流方向相反的铜柱凸点，(c) a 图的局部放大，(d) b 图的局部放大图

Fig. 35 brittle fracture of IMC in copper pillars: (a) after 870 hours with a current density of $29.8\text{kA}/\text{cm}^2$ at 197°C , (b) another Cu pillar with opposite electron flow direction, and (c) the enlarge view of the interfaces of figure (a), (d) close-up of figure (b)

2.4 讨论分析

铜柱以及焊料中的电流密度的分布与线-凸点结构类似。电流从导线流入凸

点或焊球时使得电流密度分布不均匀,进而引起焦耳热分布不均匀,在铜柱凸点互连结构中产生温度梯度。此外,互连结构中不同材料之间的热膨胀系数不同,导致温度梯度下形成热应力,对结构的可靠性造成影响。因此以下从电流密度,应力和原子流的角度来讨论分析铜柱凸点的失效模式。

2.4.1 有限元分析电流密度和应力分布

为了分析电流密度分布和应力对铜柱凸点失效机理的影响,采用有限元分析的方法对铜柱凸点在电流加载条件的电热力场进行模拟。为了与实际情况相符,我们构建了与实验样品结构和尺寸相同的 3D 有限元模型,如图 36 所示。模拟所采用的材料参数见表 3。模拟使用 ANSYS 软件。电热耦合模拟采用直接耦合方法。导电材料采用 solid69 单元,导热材料采用 solid70 单元。实体模型建立完后,对其划分网格,获得有限元模型。然后对有限元模型施加边界条件及加载。模型的初始温度设为 25°C ,各表面加载空气对流系数,基板底部由于散热良好,设定温度为恒温 25°C 。最后求解就可以得出铜柱凸点的电热场分布结果。

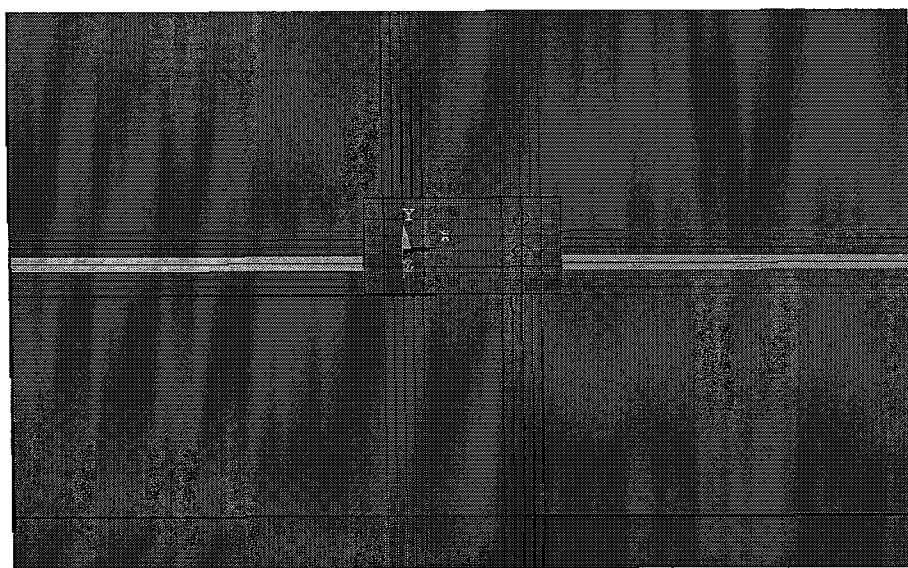


图 36 铜柱凸点 3D 有限元模型

Fig. 36 3D finite element model of copper pillar interconnect

表 3 有限元模拟材料参数

Table 3 diffusion coefficients, effective charge number and resistivity

材料	导热系数 (W/m·K)	电阻率 (mΩ· cm)
Si	147	
Cu	403	1.7
Sn	67	12.85
Cu6Sn5	34.10	17.5
BT	0.7	

当加载平均电流密度为 $3 \times 10^4 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 时, 得到的电流密度分布图如图 37 所示。从图 37a 中可以看出最大电流密度仍然位于电流从铜线流入铜柱凸点的部位, 其最大值为 $5.7 \times 10^5 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$, 而焊料中的最大电流密度为 $3.8 \times 10^4 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 。可见铜柱凸点结构使得电流密度拥挤区域远离了焊料, 而位于铜柱中。由于铜的熔点较高, 抗电迁移性强, 从而提高了铜柱凸点的电迁移寿命。另一方面, 由于铜柱凸点结构中焊料部位没有显著的电流拥挤效应, 因此使得其电迁移失效方式与传统焊球不同。传统焊球中由于电流拥挤的作用, 电流拥挤部位产生大量焦耳热, 温度升高, 原子扩散加快, 最后导致此部位金属间化合物分解, 裂纹萌生并扩展导致失效; 而铜柱凸点中的电流拥挤部位不在焊料部位, 因此焊料不容易发生电迁移失效, 而是失效前耗尽并全部转变为金属间化合物, 由此铜柱凸点的可靠性转变为金属间化合物互连结构的可靠性。金属间化合物是比较脆的相, 因此互连结构中的应力状态对其可靠性影响至关重要。图 38 给出了铜柱凸点有限元模拟应力分布。可以看出, 最大剪应力位于焊料中部的边缘位置, 这一位置靠近 PCB 板侧, 这是由于 PCB 板和 Cu 以及 Sn 的热膨胀系数相差较大。因此在 PCB 板一侧较大的应力作用下, PCB 板侧 Cu/Cu₃Sn 界面由于其含有较多的柯肯达尔孔洞而极易发生孔洞连接成裂纹并沿着界面扩展导致失效, 形成铜柱凸点第一种和第二种失效模式。此外, 由于焊料 Sn 在电流作用下转变为金属间化合物的同时在阴极 Cu₆Sn₅/Sn 界面形成了较大的电迁移孔洞, 而且 Cu₃Sn 内部也形成了大量柯肯达尔孔洞, 这些孔洞的存在使得脆性的金属间化合物在较大的应力下更容易发

生脆性断裂，因此形成了铜柱凸点的第三种失效模式。

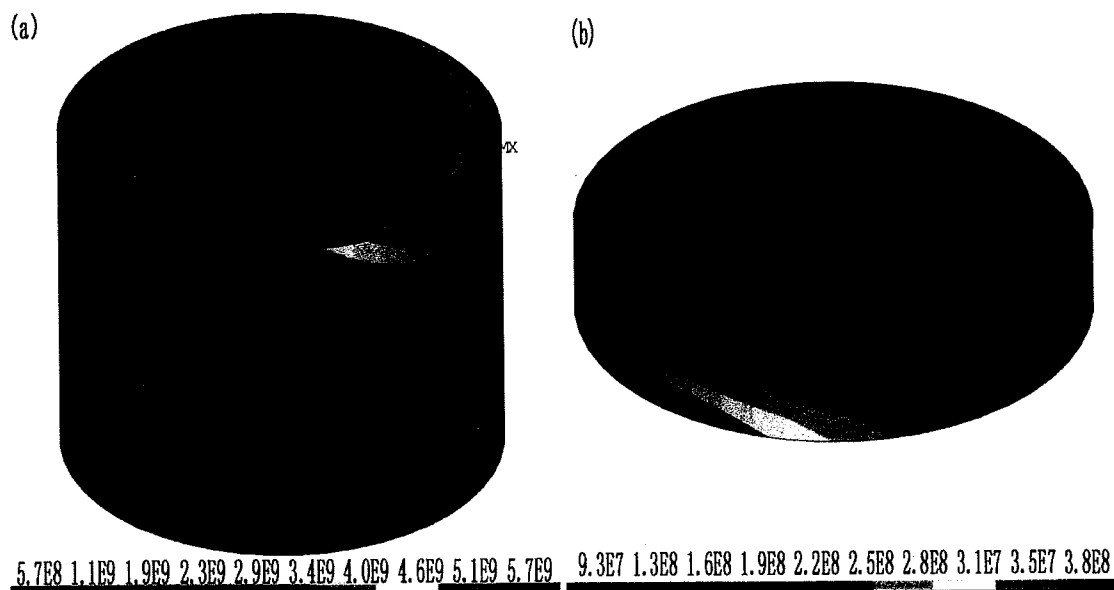


图 37 电流密度分布 (a) 铜柱凸点, (b) Sn 焊料帽

Fig. 37 current density distribution: (a) in copper pillar (b) in solder Sn cap

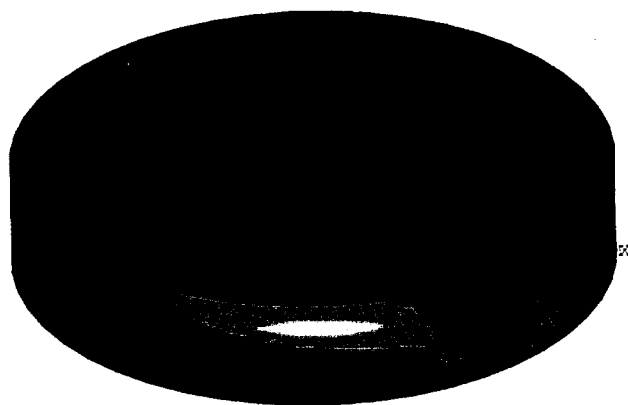


图 38 焊料层中剪切应力分布

Fig. 38 thermal shear stress distribution in solder cap

2.4.2 电迁移原子流方程计算

铜柱凸点互连在电流作用下界面以及化合物内形成柯肯达尔孔洞和电迁移孔洞，导致裂纹形成失效，从微观上来说主要是原子在电子流的作用下从阴极向阳极迁移，与之相对应的空位从阳极向阴极迁移形成孔洞；以及化合物形成过程

中柯肯达尔孔洞的原子相互扩散的过程。以下从原子迁移的角度来阐释铜柱凸点电迁移失效过程。

图 39 给出了 Cu 原子和 Sn 原子在电迁移作用下的主要原子流示意图(有的项没有给出,但是计算中会涉及到)。电迁移过程中,原子流包括由化学势引起的扩散原子流和电子流作用下的电迁移原子流。在对应的相中,扩散原子流可以表示为:

$$J_{Cu}^{Chem} = -D_{Cu} \frac{\partial C_{Cu}}{\partial x} \quad (2.2)$$

$$J_{Sn}^{Chem} = -D_{Sn} \frac{\partial C_{Sn}}{\partial x} = D_{Sn} \frac{\partial C_{Cu}}{\partial x} \quad (2.3)$$

式中:

J_{Cu}^{Chem} 表示 Cu 的原子扩散通量

D_{Cu} 为 Cu 的扩散系数

C_{Cu} 为 Cu 的原子浓度

J_{Sn}^{Chem} 表示 Sn 的原子扩散通量

D_{Sn} 为 Sn 的扩散系数

C_{Sn} 为 Sn 的原子浓度

而由电迁移引起的电迁移原子流通量可以表示为:

$$J_{Cu}^{EM} = D_{Cu} \frac{C_{Cu}}{kT} Z_{Cu}^* e \rho_{Cu} j = C_{Cu} D_{Cu} \phi_{Cu} j \quad (2.4)$$

$$J_{Sn}^{EM} = D_{Sn} \frac{C_{Sn}}{kT} Z_{Sn}^* e \rho_{Sn} j = C_{Sn} D_{Sn} \phi_{Sn} j \quad (2.5)$$

式中:

J_{Cu}^{EM} 表示 Cu 原子电迁移扩散通量

J_{Sn}^{EM} 表示 Sn 原子电迁移扩散通量

Z_{Cu}^* 表示 Cu 原子的有效电荷常数

Z_{Sn}^* 表示 Sn 原子的有效电荷常数

e 表示电子电荷

ρ 表示电阻率

j 表示电流密度

k 表示玻尔兹曼常数

T 表示绝对温度

$\phi_{Cu} = (Z_{Cu}^*/kT)e\rho_{Cu}$ 表示 Cu 原子的有效电迁移扩散系数

$\phi_{Sn} = (Z_{Sn}^*/kT)e\rho_{Sn}$ 表示 Cu 原子的有效电迁移扩散系数

式中所使用材料参数列于表 4。在电流作用下，对于图 39 中的每一相内物质的迁移形成化合物或者化合物的分解都可以用原子流来表示，将 Cu 和 Sn 的扩散系数等参数代入式 2.4 和 2.5 即可得出其扩散通量，数值列于表 5。从表中数值可以看出 Cu 在 Sn 中的电迁移通量为 $48 \times 10^{16} \text{atom} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$ ，而 Sn 在 Sn 中电迁移通量为 $20.2 \times 10^{16} \text{atom} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$ ，电迁移过程中 Cu 在焊料 Sn 中的电迁移通量大于 Sn 在焊料 Sn 的电迁移通量，因此电迁移孔洞的形成主要是由 Cu 原子在电子流作用下从阴极向阳极迁移，在阴极留下空位聚集形成电迁移孔洞。同时，Cu 原子迁移到阳极与 Sn 原子反应，促进了化合物 Cu_6Sn_5 和 Cu_3Sn 的生成，而在阴极由于 Cu 原子的迁出，使得阴极化合 Cu_6Sn_5 和 Cu_3Sn 分解。对于界面孔洞的研究也可以通过对每个界面计算物质的总迁移量来判断，以物质流出界面为正，流入界面为负，那么当一个界面总的物质迁移量为正值时表示界面流失物质，则在界面会形成孔洞；而当界面总的物质迁移量为负值时表示界面获得物质，则界面形成化合物。则图 39 中每个界面的总原子流通量表示如下：

$$J_{1-1} = (J_{Cu, \varepsilon}^{chem} - J_{Sn, \varepsilon}^{chem}) + (J_{Cu, \varepsilon}^{EM} + J_{Sn, \varepsilon}^{EM}) \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} J_{2-2} = & (J_{Cu, \eta}^{chem} - J_{Sn, \eta}^{chem}) + (J_{Sn, \varepsilon}^{chem} - J_{Cu, \varepsilon}^{chem}) \\ & + (J_{Cu, \eta}^{EM} + J_{Sn, \eta}^{EM}) - (J_{Cu, \varepsilon}^{EM} + J_{Sn, \varepsilon}^{EM}) \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} J_{3-3} = & (J_{Cu, (Sn)}^{chem} - J_{Sn, (Sn)}^{chem}) + (J_{Sn, \eta}^{chem} - J_{Cu, \eta}^{chem}) \\ & + (J_{Cu, (Sn)}^{EM} + J_{Sn, (Sn)}^{EM}) - (J_{Cu, \eta}^{EM} + J_{Sn, \eta}^{EM}) \end{aligned} \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} J_{3'-3'} = & (J_{Cu, (Sn)}^{chem} - J_{Sn, (Sn)}^{chem}) + (J_{Sn, \eta}^{chem} - J_{Cu, \eta}^{chem}) \\ & - (J_{Cu, (Sn)}^{EM} + J_{Sn, (Sn)}^{EM}) + (J_{Cu, \eta}^{EM} + J_{Sn, \eta}^{EM}) \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} J_{2'-2'} = & (J_{Cu, \eta}^{chem} - J_{Sn, \eta}^{chem}) + (J_{Sn, \varepsilon}^{chem} - J_{Cu, \varepsilon}^{chem}) \\ & - (J_{Cu, \eta}^{EM} + J_{Sn, \eta}^{EM}) + (J_{Cu, \varepsilon}^{EM} + J_{Sn, \varepsilon}^{EM}) \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$J_{1'-1'} = (J_{Cu, \varepsilon}^{chem} - J_{Sn, \varepsilon}^{chem}) - (J_{Cu, \varepsilon}^{EM} + J_{Sn, \varepsilon}^{EM}) \quad (2.11)$$

式中:

J_{1-1} , J_{2-2} , J_{3-3} , $J_{3'-3'}$, $J_{2'-2'}$, 和 $J_{1'-1'}$ 分别表示阴极和阳极 Cu/Cu₃Sn、Cu₃Sn/Cu₆Sn₅ 和 Cu₆Sn₅/Sn 界面。原子流通量的第一个下标表示迁移的原子类型, 第二下标表示原子迁移的相, 比如 $J_{Cu, \varepsilon}^{EM}$ 表示 Cu₃Sn 中 Cu 的电迁移原子流通量。根据实际铜柱凸点互连结构中的测得的化合物厚度进行计算分析。从阴极到阳极 Cu₃Sn/Cu₆Sn₅/Sn/Cu₆Sn₅/Cu₃Sn 厚度为 1/1/50/4/2μm, 利用式 2.6—2.11 计算出各界面总的物质迁移量, 如表 6 所示。可以看出在阴极 Cu/Cu₃Sn、Cu₃Sn/Cu₆Sn₅ 和 Cu₆Sn₅/Sn 界面总的原子流通量为正, 表明阴极这三个界面总的物质迁移为迁出, 因此在电流的作用下, 界面会形成孔洞, 充分阐释了实验结果中界面出现的孔洞。并且, 可以发现在阴极 Cu₆Sn₅/Sn 界面原子迁出量大于 Cu/Cu₃Sn 和 Cu₃Sn/Cu₆Sn₅ 界面, 意味着 Cu₆Sn₅/Sn 界面形成的孔洞会大于 Cu/Cu₃Sn 界面, 这与实验结果相符, 如图 33-图 35 中 Cu₆Sn₅/Sn 界面有较大的孔洞, 而 Cu/Cu₃Sn 界面的孔洞较小。而在阳极侧, Cu₆Sn₅/Sn 界面和 Cu₃Sn/Cu₆Sn₅ 界面总的原子流通量为负值, 说明这两个界面属于获得原子, 随着电流作用时间的增加, 界面处相应的化合物厚度增加。但是阳极 Cu/Cu₃Sn 界面总的原子流通量为正值, 说明该界面是原子流出型, 随着电流作用时间的增加, 界面出现孔洞, 与实验结果相符, 如图 33-图 35 所示, 界面处形成了细小的柯肯达尔孔洞。值得注意的是, 表 6 中的数值仅表示了电迁移某一时刻的数值, 各界面总原子流通量数值随电迁移时间是变化的, 当阳极化合物厚度不断增加时, 阳极各界面得到的原子流通量逐渐减小。

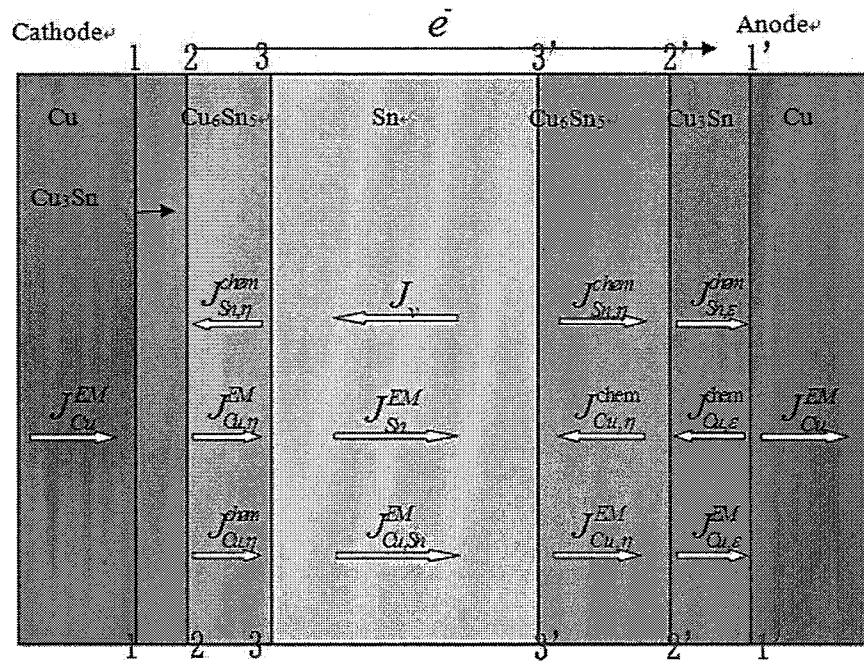


图 39 铜柱凸点电迁移下原子流示意图

Fig. 39 mass fluxes in solder connects undergoing EM

表 4 材料参数

Table 4 diffusion coefficients, effective charge number and resistivity

phase	diffusant	Z^*	$D(\text{m}^2/\text{s})$	$\rho (\Omega/\text{m})$
Cu	Cu	$2-7^{[46, 118]}$	$5.83 \times 10^{-31}^{[120]}$	1.7×10^{-8}
	Sn	$0.6 \sim 3.25^{[119]}$	$1.67 \times 10^{-28}^{[120]}$	
Cu ₃ Sn	Cu	$26.5^{[121]}$	$1.47 \times 10^{-17}^{[122]}$	8.9×10^{-8}
	Sn	$23.6^{[121]}$	$5.09 \times 10^{-19}^{[122]}$	
Cu ₆ Sn ₅	Cu	$26^{[121]}$	$3.23 \times 10^{-17}^{[122]}$	17.5×10^{-8}
	Sn	$36^{[121]}$	$8.81 \times 10^{-17}^{[122]}$	
Sn	Cu	$2^{[28]}$	$3.74 \times 10^{-11}^{[120]}$	11×10^{-8}
	Sn	$18^{[28]}$	$1.04 \times 10^{-14}^{[120]}$	

表 5 电流密度为 30 kA/cm^2 时电迁移原子流通量Table 5 EM atomic fluxes in each phase under current stressing of 30 kA/cm^2

Atomic flux ($\times 10^{16} \text{ atom}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$)	cathode		
	Cu ₃ Sn	Cu ₆ Sn ₅	Sn
$J_{\text{Cu}}^{\text{EM}}$	15	3	46.8
$J_{\text{Sn}}^{\text{EM}}$	1.4	15.5	20.2

表 6 各界面总原子流通量

Table 6 the total net atomic flux of each interface

厚度	J_{1-1}	J_{2-2}	J_{3-3}	$J_{3'-3'}$	$J_{2'-2'}$	$J_{1'-1'}$
1/1/20/4/2	11.3	9.7	602.1	-34.3	-51.2	2.7

随着电迁移时间的增加, 当 Sn 全部耗尽时, 铜柱凸点互连结构变为金属间化合物互连结构, 其中原子流示意图如图 40 所示。从表 4 中的扩散系数可知, Cu 在 Cu₃Sn 和 Cu₆Sn₅ 中扩散速率相比于 Sn 中较小, 因此电流作用下的电迁移原子流通量也较小, 如表 5 中的电迁移通量数据所示。当电流密度为 30 kA/cm^2 时, Sn 相中的 Cu 原子的电迁移通量分别是 Cu₃Sn 和 Cu₆Sn₅ 中的 3 倍和 15.6 倍, 因此当铜柱凸点转变为金属间化合物互连后, 金属间化合物中的电迁移效应减弱, 表现为极性效应减弱, 如图 33-图 35 所示, 阴极和阳极侧 Cu₃Sn 化合物厚度相差较小。另一方面, 根据 Gan^[51]的报道, 当电流密度为 30 kA/cm^2 时, Cu₆Sn₅ 的电迁移临界长度为 $16 \mu\text{m}$, 这一厚度基本上小于本实验中金属间化合物互连中 Cu₆Sn₅ 的厚度, 因此电流作用下, Cu₆Sn₅ 中背应力较大, 几乎抵消了电迁移效应。综合上述原因, 金属间化合物互连中电迁移效果微弱, 几乎可以忽略不计, 而化学势驱动的扩散成为原子迁移的主导, 结果导致阴极和阳极侧的 Cu/Cu₃Sn 界面上都会形成大量的柯肯达尔孔洞并且相互联结形成裂纹造成失效或者在热应力的作用下形成界面裂纹和脆性断裂, 如图 33-图 35 中所示。

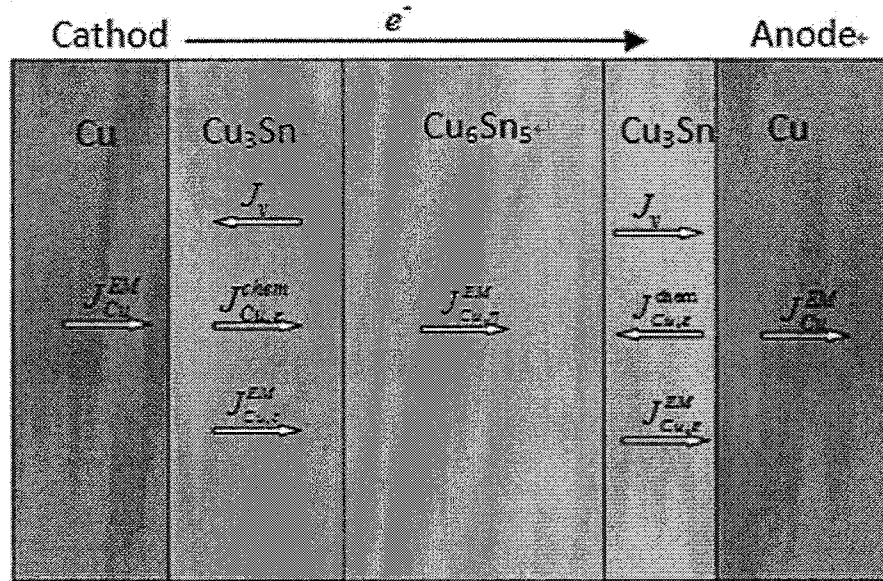


图 40 焊料 Sn 耗尽后各相中原子流示意图

Fig. 40 mass fluxes in IMCs connects undergoing EM

2.5 本章小结

为了研究铜柱凸点互连结构的电迁移寿命以及可靠性,本章设计了电迁移正交实验组,同步监测了电迁移过程中样品电阻和温度的变化,准原位观察了界面化合物演变过程。基于实验观察和有限元分析,得出如下结论:

- 1) 根据寿命数据得出 Black 寿命预测模型中电流密度指数为 1.64, 电迁移激活能为 0.88eV; 温度升高或电流密度增加电迁移寿命都会相应降低。
- 2) 铜柱凸点电迁移时,最大电流密度发生在电流从 Cu 线流入铜柱的部位,远离了焊料区域,使得铜柱凸点抗电迁移性能增加。
- 3) 铜柱凸点电迁移失效模式有三种类型:电迁移主导的阴极侧 Cu/Cu₃Sn 界面开裂失效;柯肯达尔孔洞主导的阳极侧界面开裂失效;金属间化合物脆性断裂失效。

第三章 铜柱凸点热循环可靠性

3.1 引言

微电子产品在实际使用过程中往往要经受温度的变化,包括环境温度变化和自身使用过程中造成的温度变化。在这种温度变化下,产品内部不同材料之间的热膨胀系数和结构的差异会使得材料内产生交变应力。材料尤其是低熔点焊料在交变应力下容易发生疲劳和蠕变变形,随着使用时间的增加,变形累积造成产品失效。由于热循环过程中温度随时间变化,相比热时效的等温条件,热循环下焊料转变为金属间化合物的情况更为复杂。热循环下金属间化合物的生长还受到热循环交变应力的影响,比如 Andersson 等^[123]研究指出热循环条件下焊点组织的演变是稳态时效和应变增强时效双重作用的结果。铜柱凸点因其结构与传统倒装焊球不同,必然在热循环下表现出不同的应力状态,金属间化合物的生长也不尽相同。目前有关铜柱凸点在热循环下界面失效的机理尚未明确,仍需要进一步研究。本章节将研究铜柱凸点热循环下的寿命和失效模式。

3.2 实验方法

铜柱凸点热循环研究所使用的样品与电迁移样品相同,其制备方法参见铜柱凸点电迁移实验部分。铜柱凸点热循环测试根据 JEDEC 热循环标准设计。选择热循环实验条件为:热循环温度: -40—125℃,低温和高温各保温 10 分钟,升降温速率 11℃/min,升温降温时间各 15 分钟,循环周期为 50min,热循环载荷曲线如图 41 示。实验组由 30 个铜柱凸点样品串联而成,测试过程中同步监测样品电阻变化以判断样品是否失效。根据样品的实际电阻变化情况,实验中当样品电阻超过 1Ω 时判定样品开路失效,最终统计得出其寿命数据。

为了研究铜柱凸点热循环失效模式,失效的样品制作截面样品后在扫描电镜 Quanta600 下观察,并且使用 EBSD 技术分析焊料 Sn 的取向与失效模式的关系。

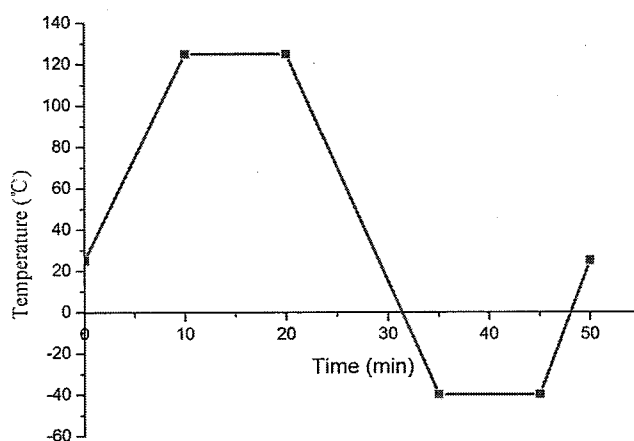


图 41 热循环加载

Fig. 41 thermal cycling load profile

3.3 实验结果

3.3.1 热循环寿命

统计失效铜柱凸点的寿命，然后使用两参数 Weibull^[124, 125]分布对其进行分析，Weibull 函数如下：

$$F(t) = 1 - \exp[-(t/\eta)^\beta]$$

式中：

$F(t)$ 为累计分布函数

η 为特征寿命

β 为形状因子

统计分析得出铜柱凸点在-40—125°C热循环下的平均寿命为 13390 周次。

3.3.2 热循环失效模式

铜柱凸点样品在热循环失效后对其进行截面样品制备，然后在扫描电镜下观察，分析统计后发现铜柱凸点在热循环下的主要失效模式有两种：互连结构中焊料 Sn 中间开裂和与铜柱凸点连接处的芯片侧铜布线的断裂。其中焊料 Sn 中间开裂占绝大部分，而铜布线的断裂仅占很小部分。

图 42是铜柱凸点结构中Sn焊料中间断裂的典型形式，裂纹横贯焊料中部造成铜柱凸点互连失效。为了探究这种失效模式的断裂机制，以下将从焊料在热循环下的组织演变展开研究。经过统计分析了大量铜柱凸点回流后界面样品的组织，铜柱凸点互连焊料Sn的组织可以分为两类。第一类为互连焊料Sn是由两层晶粒组成，如图 43所示。焊料界面基本上可以分为靠近铜柱凸点侧的一层晶粒和靠近PCB侧的另一层晶粒。并且每一层晶粒取向随机分布。第二类组织为焊料Sn由单层晶粒组成，如图 44所示。值得注意的是，此处的单层晶粒并非单晶，而是由几个晶粒组成，其晶界都是从基板指向铜柱凸点，垂直于互连界面。经过分析铜柱凸点在热循环下的失效模式与焊料层的组织结构的关系，发现Sn焊料中间开裂只发生于双层晶粒的焊料Sn中，如图 45所示。热循环后其晶粒结构，尤其是裂纹附近也并未发生变化，并没有出现再结晶形成的小晶粒，未发现传统焊球热循环后的再结晶现象^[126]。微观组织的变化表现在铜柱侧和PCB板侧的化合物 Cu_6Sn_5 和 Cu_3Sn 的厚度增加以及 Cu_6Sn_5 的形貌从回流后的扇贝状转变为热循环后的层状。从图中的裂纹形态可以判断出裂纹萌生于焊料边缘，然后向中间扩展。并且裂纹萌生并扩展的位置处在上下两层晶粒的横向晶界上。

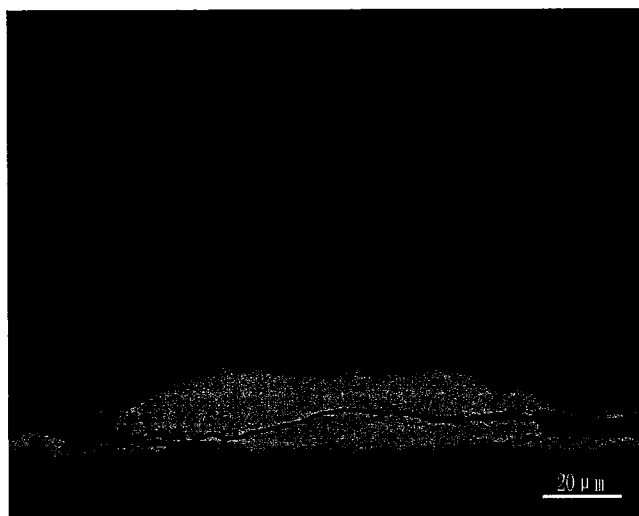


图 42 铜柱凸点互连结构焊料中部断裂

Fig. 42 crack in the middle of solder

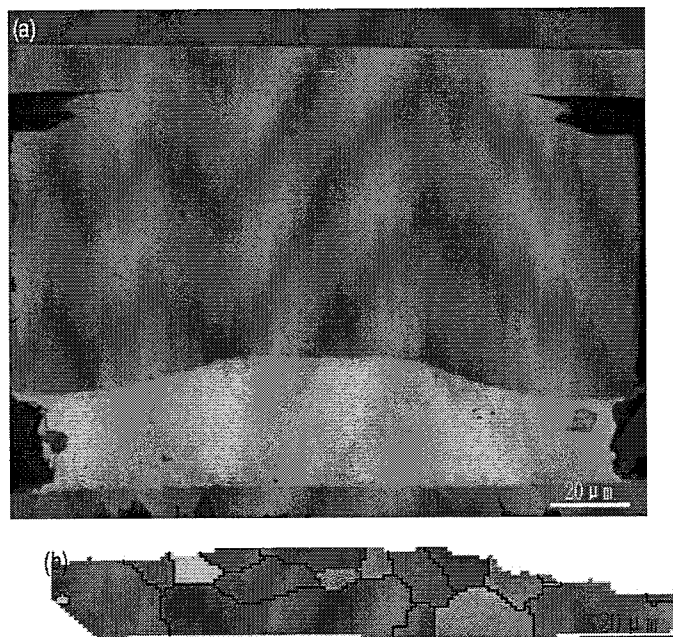


图 43 两层晶粒结构的焊料 Sn

Fig. 43 Two-layer grain structure of copper pillar



图 44 单层晶粒结构的焊料 Sn

Fig. 44 the as-solidified microstructures of the tin cap



图 45 两层晶粒结构的焊料中部开裂

Fig. 45 the two-layer grains microstructure after 435cycles

图46是铜柱凸点在热循环下的第二种失效模式，即芯片侧与铜柱凸点互连的铜布线开裂。裂纹在铜柱凸点两侧的铜布线中贯穿铜布线厚度方向，造成铜柱凸点开路失效，如图中红色椭圆标记。分析这种失效模式与焊料的组织关系后发现这种失效模式主要发生在单层Sn晶粒结构的铜柱凸点中。对于单层Sn晶粒结构的铜柱凸点，热循环下其微观组织的演变与双层晶粒结构相似，即没有发生再结晶，但是界面化合物厚度增加，铜柱侧和PCB板侧 Cu_3Sn 层厚度都明显增加，并且在PCB侧 $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ 界面形成了大量细小的柯肯达尔孔洞，与此同时，右侧中间焊料Sn已经全部转化为 Cu_6Sn_5 。Sn焊料中间只在左侧形成了小的裂纹，如图46所示。显然以这种模式失效的样品比第一种失效模式具有更长的寿命。由此可预见，单晶Sn焊料的铜柱凸点结构应具有更长的热循环寿命。

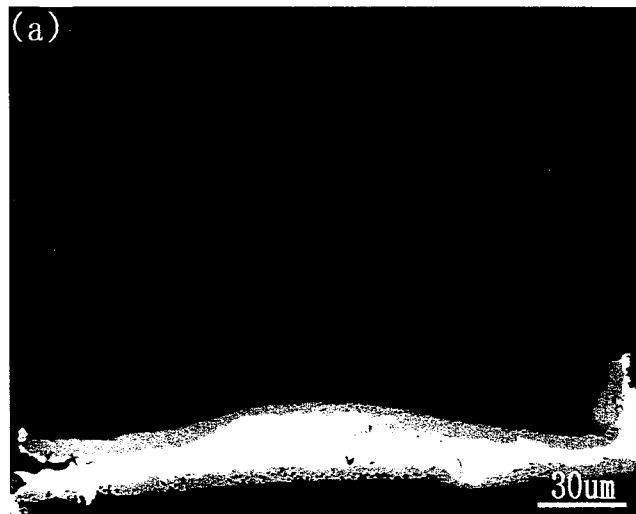


图 46与铜柱凸点连接处的铜布线中裂纹

Fig. 46 cracks at the interconnecting corner of Cu trace and Cu pillar after 4770 cycles

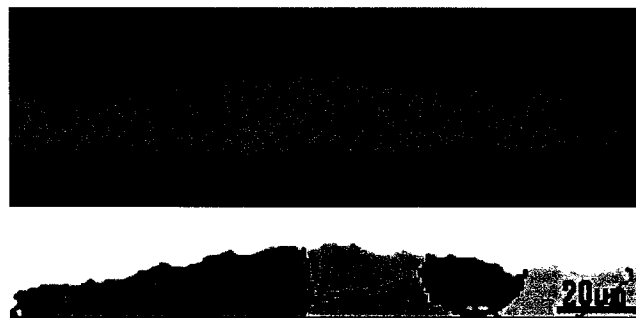


图 47 单层晶粒结构焊料热循环后形貌

Fig. 47 the one-layer grains microstructure after 614cycles

3.4 讨论

铜柱凸点热循环下两种晶粒结构对应两种失效模式，而不同部位出现裂纹必然与其受力状态有关。为了探究其具体失效机理，使用有限元对铜柱凸点在热循环下的应力分布进行了分析。所使用的有限元模型以及材料与电迁移有限元部分相同，而加载方式和边界条件与热循环实验条件相同。为了考虑两种不同的晶粒结构对应力状态的影响，同时为了简化模型，此处将双层晶粒结构简化为一种由上下两个晶粒构成的界面，其中一个晶粒方向假定与 Sn 晶粒的 c 轴平行，另外一个晶粒与 y 轴平行，然后赋予两个晶粒相对应的材料属性，比如热膨胀系数和

杨氏模量等进行计算。从图 43-图 44 中晶粒结构可以看出,焊料 Sn 中一般含有的晶粒数量较少,是由几个大的晶粒组成,而且其取向相差并不大,因此认为以上有限元计算简化近似的双层晶粒结构来模拟结构在热循环下的应力分布是合理的。

有限元分析给出铜柱凸点互连的应力分布如图 48 所示。图 48a 是两个互连的铜柱凸点以及连接两个铜柱的互连导线中的应力分布,图 48b 和图 48c 分别是图 48a 中左右两个铜柱凸点的局部放大应力图。图中应力集中区域位于铜柱凸点与布线连接处的布线中。铜柱凸点和互连线中的应力分布不依赖于焊料中的晶粒结构。但焊料中的应力分布会受到焊料晶粒结构的影响,见图 49。对于双层晶粒结构,应力较大的位置位于焊料中部两层晶粒的晶界附近区域,如图 49a 所示;对于单层晶粒结构,应力较大的位置出现在焊料中部边缘位置,如图 49b 所示。两种晶粒结构的应力集中区域都有可能发生失效。但是相比于单层焊料中部最大应力 13MPa,双层晶粒结构焊料中的最大应力为 28MPa,虽然小于 Cu 线处的应力,但是由于焊料 Sn 的弹性模量比 Cu 小很多,焊料中部处于较高应力状态的边缘位置在热循环作用下更容易萌生裂纹,并且沿着横向裂纹扩展直至贯穿整个焊料界面,造成开裂失效,这与实验结果相吻合。而对于单层晶粒结构,焊料中部边缘的最大应力较小,裂纹转而在应力更大的 Cu 线处萌生扩展。

双层晶粒结构中焊料中的应力相比于单层晶粒结构更大,这是因为双层晶粒的取向不同。由于 Sn 的各项异性,不同取向的晶粒的力学性能不同,尤其是热膨胀系数和弹性模量的不同,晶界处在热循环下容易产生取向差造成的热应力。Subrama's 等^[127]的研究也证实了热膨胀系数不同产生的晶界应力会引起晶界滑移和晶界开裂。而单层晶粒结构中虽然也存在晶界,但是这些晶界方向几乎都垂直于界面方向,因此在剪应力作用下并不利于裂纹萌生和平行于界面方向的扩展。

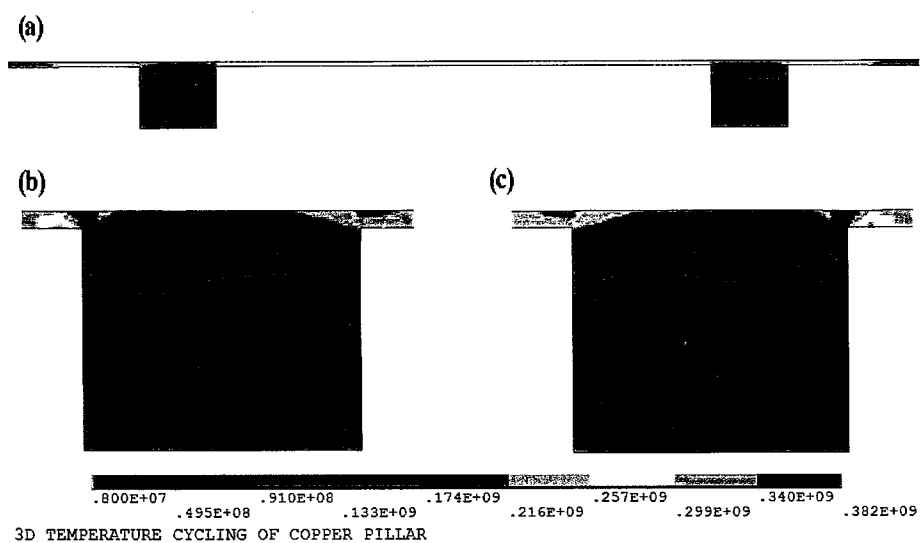
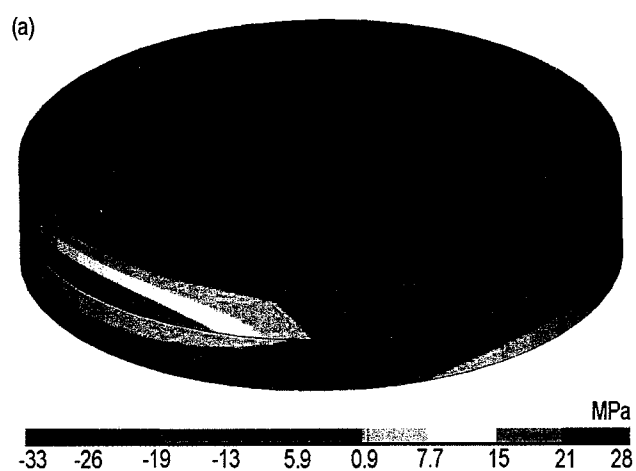


图 48 铜柱凸点互连在热循环下铜柱及布线中应力分布

Fig. 48 the stress distribution in copper pillar interconnect and copper line under thermal cycling



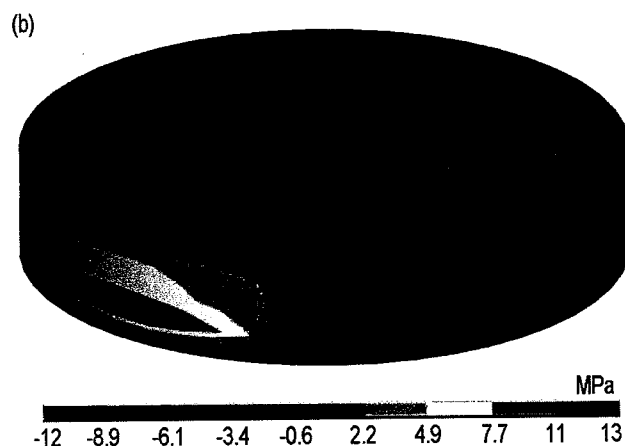


图 49 铜柱凸点热循环下应力分布 (a) 双层晶粒结构, (b) 单层晶粒结构

Fig. 49 shear stresses distribution; (a) stress of the two-layer grains microstructure; (b) stress of the one-layer grains microstructure

3.5 本章小结

为了评价铜柱凸点热循环下的寿命和可靠性,本章通过实验测试铜柱凸点的热循环寿命,并在实验过程中定时取样观察界面随着热循环时间的演变情况,最后统计分析了所有失效样品的界面形貌,得到了如下结论:

1) 铜柱凸点在热循环下有两种失效模式,分别为 Sn 焊料中部断裂和与铜柱凸点连接处的铜布线的断裂,后一种失效模式的样品比前一失效模式的样品具有更长的寿命;

2) 铜柱凸点热循环下的失效模式与其焊料 Sn 的晶粒结构相关,当焊料由单层晶粒构成时失效倾向发生于铜布线中,而当焊料由两层晶粒构成时失效倾向于发生在焊料中部。

第四章 铜柱凸点多场可靠性

4.1 引言

焊料凸点通常在微电子产品中起着至关重要的作用,主要用来实现微电子封装的机械支撑和电路导通,其可靠性无疑是电子产品不可或缺的关注点^[128]。作为机械支撑的焊球通常处在特殊的线-凸点互连结构中。由于不同封装材料之间的热膨胀系数的差异,焊球通常处于高应力状态,容易发生蠕变和疲劳塑性变形^[44, 129, 130]。另一方面,作为电路导通的焊球长时间处于电流作用下,原子在电子流的作用下从阴极向阳极迁移而引起电迁移失效。多数情况下研究者对以上两种可靠性都是进行独立研究。但是电子产品实际使用中往往同时处于应力场和电场作用下,二者的耦合作用不能忽视。尤其是随着微电子封装向着小型化和高密度的方向发展,焊球的尺寸和间距也越来越小,电场和应力场的耦合作用对封装的可靠性影响更加显著^[131]。

焊球的寿命预测对微电子产品至关重要。针对单场热循环下的焊点疲劳或蠕变寿命的预测现在已经有大量的模型^[44, 132-136]。而焊球的电迁移寿命预测通常使用 Black 经验公式^[116]。在电迁移和热循环这两种物理场下的寿命研究通常是单独进行,两种物理场耦合下的寿命鲜有研究。因此提出一个完整可靠的电迁移—热循环多场寿命预测模型是必要的。寿命预测模型的正确与否离不开模型建立的理论基础和实验数据的验证。因此需要通过实验来揭示多场耦合下铜柱凸点的失效机理。

本章的研究目的是:基于累积损伤原理和粘塑性模型模型建立电迁移—热循环多物理场下的寿命预测模型,并通过设计实验获得多场下的铜柱凸点的寿命,验证所建立模型的准确性。通过分析观察多场实验中铜柱凸点互连界面的变化来探究铜柱凸点的失效机理。

4.2 电迁移-热循环耦合服役寿命预测模型

构建电迁移—热循环多物理场条件下的铜柱凸点寿命预测模型，二者的耦合作用至关重要。涉及到疲劳、蠕变、电迁移，电迁移对热循环的影响和热循环对电迁移的影响，如果将这些因子全部考虑到模型中，此寿命模型无疑是一个非常复杂的问题。为了简化模型，本文将从以下规则出发构建模型。

累积损伤原理经常被用于预测材料的受到其他因素，比如高温条件下的疲劳寿命，其损伤规则可以表示为疲劳损伤和蠕变损伤的线性加和，损伤规则如下：

$$D_f + D_c = 1 \quad (4.1)$$

式中： D_f 表示疲劳引起的损伤

D_c 表示蠕变引起的损伤

针对热循环—电迁移多物理场也可以使用该累积损伤规则构建寿命预测模型^[137]。热循环中，当加载频率足够低，即低于 0.05Hz，且在最高加载点有保载时间时，材料的蠕变量较显著不能忽视。同时考虑电流、疲劳和蠕变的交互作用亦对材料构成额外损伤，电迁移-热循环多物理场累积损伤规则可写为：

$$D_f + D_c + D_e + D_{inter} = 1 \quad (4.2)$$

式中： D_e 表示电迁移引起的损伤

D_{inter} 表示疲劳、蠕变和电迁移交互作用引起的损伤

式 4.2 也可以用寿命表示为：

$$\frac{1}{N} = \frac{1}{N_f} + \frac{1}{N_c} + \frac{1}{N_e} + \frac{1}{N_{inter}} \quad (4.3)$$

式中： N 表示多场下失效寿命周次

N_f 表示疲劳失效寿命周次

N_c 表示蠕变失效寿命周次

N_e 表示电迁移失效寿命周次

N_{inter} 表示疲劳、蠕变和电迁移交互作用寿命周次

这里的寿命周次也可以使用失效时间来代替, $t=NT$, 式中 T 为每循环周期时间。

从材料的微观机制来看, 电迁移、疲劳和蠕变的交互作用非常复杂, 难以用具体的模型来表示。为了简化, 交互作用项可分解为疲劳与蠕变交互项和电流与前一交互作用项。对于疲劳与蠕变的交互作用, 蠕变损伤会加速疲劳微裂纹的扩展, 疲劳裂纹的扩展同样会加速蠕变过程的进行。二者相辅相成, 由于焊料非弹性变形具有粘塑性性质, 所以一般采用统一粘塑性 Anand 模型描述材料行为以代替疲劳蠕变交互作用^[138], 因此式 4.3 可写为:

$$\frac{1}{N} = \frac{1}{N_{fc}} + \frac{1}{N_e} + \frac{1}{N_{e-fc}} \quad (4.4)$$

式中: N_{fc} 表示疲劳蠕变失效寿命周次

N_{e-fc} 表示电流与疲劳蠕变交互作用寿命周次

此时, 只需要给出式 4.4 中电流和疲劳蠕变交互作用项引起的寿命损伤就可以完成铜柱凸点在电流—热循环下的寿命预测模型的建立。

在一个热循环周期内, 焊点在升温阶段的应力状态与降温阶段的应力状态大小近似相等, 方向相反, 即焊点在升温过程中若承受压应力, 那么其在降温阶段就会处于拉应力状态。根据拉应力会促进电迁移过程, 而压应力会抑制电迁移过程^[51], 本文假设热循环升温阶段产生的压应力对电迁移的影响会抵消降温阶段产生的拉应力对电迁移的影响, 即热循环交变应力对电迁移的影响可以忽略。此时, 电迁移—热循环的交互作用只需考虑电迁移对疲劳蠕变的影响。因此, 式 4.4 可以进一步简化为:

$$\frac{1}{N} = \frac{1}{N_{efc}} + \frac{1}{N_e} \quad (4.5)$$

式中: N_{efc} 表示电迁移影响下的疲劳蠕变失效寿命周次

电迁移过程加速了焊料中空位的运动, 使得位错的湮灭加快, 焊料发生软化, 降低疲劳和蠕变的激活能, 加速蠕变和疲劳损伤。为此, 将电流作用对疲劳蠕变的影响考虑进去, Anand 模型可以改写为^[138]:

$$\dot{\varepsilon}_{ec} = A \exp\left(-\frac{Q-\Delta Q_e}{kT}\right) \left[\sinh\left(\xi \frac{\sigma}{s}\right)\right]^{\frac{1}{m}} \quad (4.6)$$

式中： $\dot{\varepsilon}_{ec}$ 非弹性应变速率

A 是幂指数前因子

Q 是激活能

ΔQ_e 是电流引起的激活能变化量

m 是应变敏感指数

σ 表示应力

s 为内部变量，表示塑性流动的各项同性阻力

ξ 是应力乘子

k 为玻尔兹曼常数

T 为温度

其中电流对激活能的影响可以表示为：

$$\Delta Q_e = \beta j^2 \quad (4.7)$$

式中： β 为常数

j 为电流密度

以应变为损伤主控参量，将式 4.7 代入式 4.6 并积分可以得到应变表达为：

$$\Delta \gamma_{ec} = \oint \dot{\varepsilon}_{ec} dt = \oint \dot{\varepsilon}_0 \times \exp\left(\frac{\beta j^2}{kT}\right) dt \quad (4.8)$$

式中： $\Delta \gamma_{ec}$ 为应变

$\dot{\varepsilon}_0$ 为疲劳蠕变应变速率，可表示为：

$$\dot{\varepsilon}_0 = A \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right) \left[\sinh\left(\xi \frac{\sigma}{s}\right)\right]^{\frac{1}{m}} \quad (4.9)$$

使用 Engelmanier 疲劳模型来计算疲劳蠕变寿命， N_{fc} [139]：

$$N_{fc} = \frac{1}{2} \left[\frac{\Delta \gamma_t}{2 \varepsilon_f} \right]^{1/c} \quad (4.10)$$

式中： γ_t 为非弹性剪切应变幅

ε_f 为疲劳延性系数

c 为疲劳延性指数, 可用热循环平均温度 $\bar{T}_s$ 和频率 f 表示为:

$$c = -0.442 - 6 \times 10^{-4} \bar{T}_s + 1.74 \times 10^{-2} \ln(1 + f)$$

此时, 设定无电流作用的热循环为参考组。对于有电流作用的热循环组, 电流的施加必定引起热循环加速失效, 此处定义电流引起的加速因子为参考组寿命与施加电流作用实验组的寿命的比值:

$$F_A = \frac{N_0}{N} \quad (4.11)$$

式中: F_A 为加速因子

N_0 为参考组寿命

将式 4.9 和 4.10 代入式 4.11 可得到加速因子表示为应变相关的形式:

$$F_A = \left(\frac{\Delta \gamma_0}{\Delta \gamma_{ec}} \right)^{1/c} \quad (4.12)$$

将应变的表达式 4.8 代入上式可以得到:

$$F_A = \left(\frac{\oint \dot{\varepsilon}_0 dt}{\oint \dot{\varepsilon}_0 \times \exp\left(\frac{\beta j^2}{kT}\right) dt} \right)^{1/c} \quad (4.13)$$

根据积分中值定理上式可以简化为:

$$F_A = \left(\frac{\oint \dot{\varepsilon}_0 dt}{\exp\left(\frac{\beta j^2}{kT_f}\right) \oint \dot{\varepsilon}_0 dt} \right)^{1/c} = \exp\left(-\frac{\beta j^2}{ckT_f}\right) \quad (4.14)$$

同时, 从损伤累积规则角度出发, 电流引起的加速因子可以写为:

$$F_A = \frac{\frac{1}{N} \frac{1}{N_e}}{\frac{1}{N_{fc}}} \quad (4.15)$$

因此, 式 4.14 中的常数 β 可以通过联立式 4.14 和 4.15 来获得:

$$\exp\left(-\frac{\beta j^2}{ckT_f}\right) = \frac{\frac{1}{N} \frac{1}{N_e}}{\frac{1}{N_{fc}}} \quad (4.16)$$

改写 4.16 式，可以得到铜柱凸点在电流—热循环下的寿命预测公式：

$$\frac{1}{N} = \frac{1}{N_e} + \frac{1}{\exp(-\frac{\beta j^2}{ckT_f})N_{fc}} \quad (4.17)$$

通过实验测定电迁移寿命和式中常数 β ，就可以给出铜柱凸点在电流—热循环下的寿命。

4.3 多场实验

实验中使用铜柱凸点尺寸和样品制备参见 2.2 节电迁移实验部分。多场实验具体是指铜柱凸点在电流和热循环共同作用下的可靠性以及寿命测试实验。本实验共包含 4 组实验，每组实验样品由 30 个铜柱凸点样品串联而成，实验时将串联样品放入热循环箱中，同时给样品加上相应的电流。热循环温度同样采用 -40—125℃ 的温度循环，低温和高温各保温 10 分钟，升降温速率 11℃/min，升温降温时间各 15 分钟，循环周期为 50min。实验电流设定为 3.5A、4.0A 和 4.5A，对应的电流密度分别为 $1.74 \times 10^4 \text{ A/cm}^2$ 、 $1.99 \times 10^4 \text{ A/cm}^2$ 和 $2.24 \times 10^4 \text{ A/cm}^2$ 。实验条件如表 7 所示。实验在空气中进行，采用恒电流输出，并记录样品电阻和温度变化。实验中进行等间隔时间取样观察，并对失效的所有样品进行截面扫面观察分析。

为了验证前文建立的多场耦合寿命预测模型，需要实验获得铜柱凸点或多场下的寿命。然而由于焦耳热效应，铜柱凸点样品的实际温度要高于热循环箱中的环境温度，列于表 7 中。为了解决这个问题，本文通过有限元模拟来计算实际温度区间下累积损伤的主控参量，即应变参量，然后根据 Engelmaier 模型计算相应热循环条件下的寿命。

本章节使用的有限元模型与 2.4 节中相同，详细请参考 2.4 节。模拟所使用材料参数见表 8。为了真实反映焊料在热循环下的疲劳和蠕变行为，有限元模拟中使用 Anand 统一粘塑性模型描述焊料的力学行为，而其他材料则假定为线弹性材料^[140]。由于焊料 Sn 的 Anand 粘塑性材料参数的缺失，考虑到铜柱凸点回流后互连界面变为 SnCu 合金界面，因此本文采用 Sn0.7Cu^[136]的相关材料参数近似代替 Sn 的参数并列于表 9 中。模拟过程中使用的温度循环范围与四组

实验样品的实际温度相一致。有限元模拟时加载 5 个热循环周期，因为一般情况下，结构的应力应变在热循环加载三个周期后会达到稳定状态。

表 7 热循环实验组条件

Table 7 thermal cycling conditions

电流/A	3.5	4.0	4.5
样品温度/°C	-15—163	1—176	15—190
环境温度/°C	-40—125	-40—125	-40—125

表 8 有限元计算中使用材料参数

Table 8 material properties used in FEA analysis

materials	CTE (ppm/k)	Poisson's ratio	E (GPa)
Si	2.6	0.28	162
Cu	16.5	0.33	85.56
Sn	23.5	0.2	42
FR4	16	0.28	27.9

表 9 材料粘塑性参数

Table 9 Material parameters of viscoplastic Anand model for solder alloys

A(s-1)	Q(J/mol)	ξ	m	$\hat{s}$	n	h ₀	α	s ₀
764.17	48534	2	0.123	26.4	0.043	11656	2.33	4.43

4.4 实验结果

4.4.1 多场实验寿命统计

实验过程中原位监测样品电阻变化情况，以判断样品是否失效。图 50 为典型的铜柱凸点电阻随时间变化曲线。可以看出铜柱凸点在多场低温和高温时的电阻变化趋势相同，都经过很长一段缓慢增加的过程后电阻突然在短时间内剧烈增加，直至失效。铜柱凸点在电迁移和热循环同时作用下在焊点内部和焊点界面会形成孔洞，有些孔洞会湮灭，因此造成电阻的波动。总体上，随着焊点的损伤累积，电阻增加，焦耳热效应的作用又使得样品温度升高，反过来，温度的升高进一步使得电阻增加和热应力的增加，加速了样品失效。最终，裂纹扩展于整个互连界面，样品发生断裂失效。此外，样品失效主要发生在多场实验时的高温阶段。由于本实验中样品的电阻前期缓慢增加阶段占据其寿命周期的绝大部分，而快速上升直至断裂阶段所占时间较短，因此将铜柱凸点发生开路失效为断裂标准。

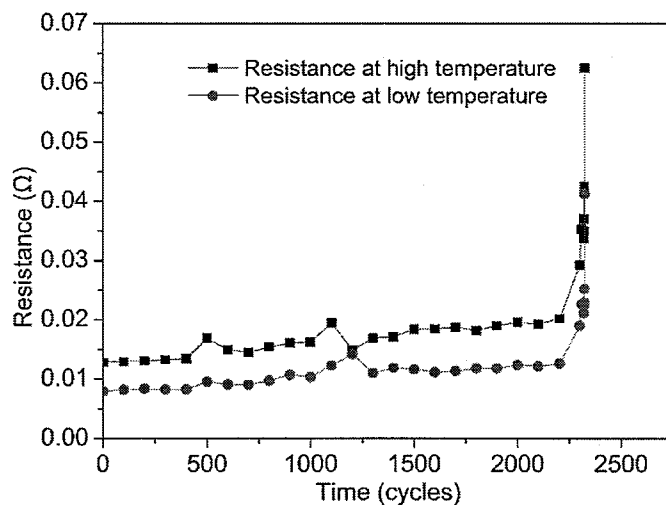


图 50 铜柱凸点多场下电阻随时间变化曲线

Fig. 50 The resistance variation of interconnects

以铜柱凸点发生开路为失效标准，所有样品失效后，统计其寿命数据，并使用两参数 Weibull 分布进行分析计算平均寿命。各组实验的 Weibull 分布曲线如图 51 所示。各组实验的平均寿命根据 Weibull 分布的形状因子 β 和特征寿命 η

而得到, 列于表 10 中第三列。以实际样品温度变化区间为条件的等效热循环组的疲劳蠕变寿命则使用 Engelmaier 模型来计算。五个热循环周期后, 等效累积蠕变应变如图 52 所示。对于每一组等效热循环, 等效累积蠕变应变随每一热循环周期呈阶梯式增加。等效热循环最高温度越高, 其对应的等效累积蠕变应变值也越大。以总的剪切应变幅作为模型中的塑性应变幅, γ_t , 根据式 4.10 计算出各组的疲劳蠕变寿命, 列于表 10 中的第四列。各组的电迁移寿命可以根据 Black 方程的寿命损伤准则来得出:

$$N_e = 1 / \int \frac{1}{A j^{-\alpha} \exp(\frac{Q}{kT})} dT \quad (4.18)$$

式中相关参数已经在铜柱凸点电迁移部分测得, 电迁移激活能为 0.88eV, 电流密度指数为 1.64。根据上式积分得出各组电迁移寿命列于表 10 中的第五列。以 -40—125°C 热循环为参考组, 则可根据式 4.11 计算出相关各组的加速因子。表 10 第六列和第七列分别为多场实验各组的加速因子和有限元计算的对应等效热循环组的加速因子。

从表中数据可以发现, 参考组的有限元计算寿命与实验测得寿命数据相近, 这充分验证了有限元模型的可行性。然而对于其他等效热循环组, 计算出的疲劳蠕变寿命大于加载了电流的实际多场实验寿命, 这说明电流的加载加速了热循环失效, 缩短了寿命。另一方面, 未加载热循环组的寿命, 即电迁移寿命也远远大于加载了热循环的多场实验寿命, 这也说明热循环的加载加速了电迁移失效, 缩短了寿命。这两组数据的巨大差异充分说明不能单独使用电迁移寿命预测模型或热循环寿命预测模型来预测电流—热循环多场寿命, 因此构建多场寿命预测模型是必要的。

横向比较表中数据, 即比较同一温度范围时的多场实验加速因子和有限元计算热循环加速因子, 可以发现电迁加速因子总是大于热循环加速因子, 这说明电迁移对多场实验组的加速比热循环对多场实验组的加速更显著。因此当电流密度较低时, 多场实验组的加速因子与等效热循环的加速因子相近, 随着电流密度的增加, 多场实验组的加速因子快速增加而等效热循环组的加速因子缓慢增加, 当电流密度为 22.4kA/cm² 时, 多场实验组的加速因子甚至已达到等效热循环组的 60 余倍。

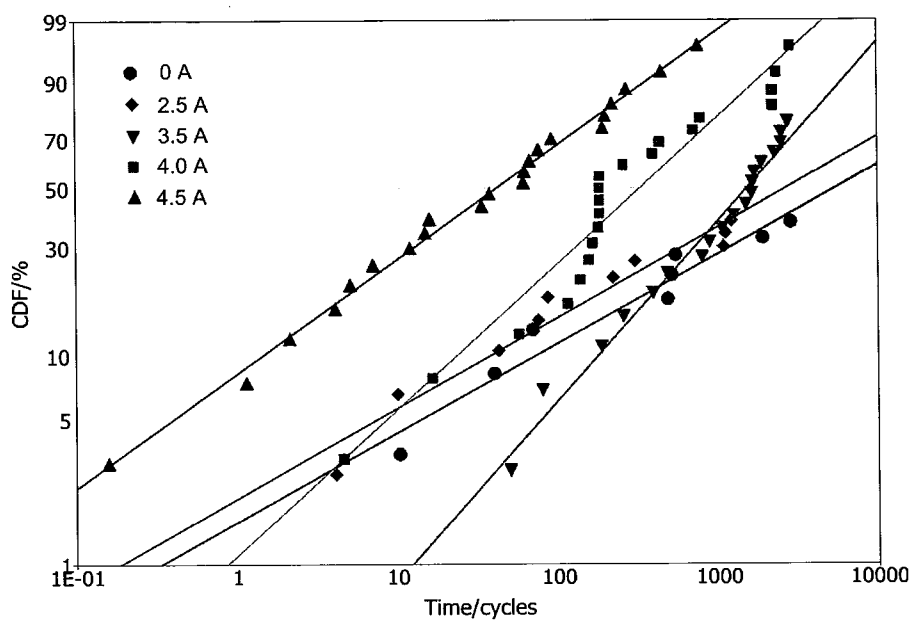


图 51 各组实验的 Weibull 分布曲线

Fig. 51 The Weibull cumulative distribution curve

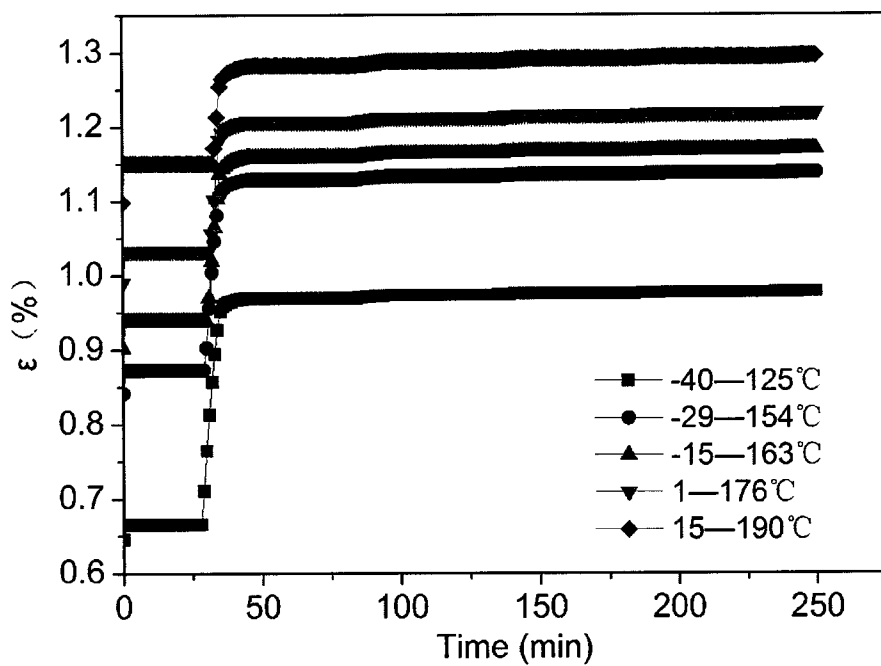


图 52 各组等效热循环的等效累积蠕变应变

Fig. 52 Accumulated equivalent creep strain

表 10 各组实验的寿命相关数据

Table 10 multi-field lifetime statistics of Cu pillar bumps at various test conditions						
j	Temperature	N	N _{fc}	N _e	A _F of	A _F of
(kA/cm ²)	range(°C)	(cycles)	(cycles)	(cycles)	Experiment	FEA
0	-40-125	13390	14746			
12.4	-29-154	5800	10904	26273	2.54	1.35
17.4	-15-163	2158	9878	9162	6.83	1.49
19.9	1-176	599	8425	3695	24.62	1.68
22.4	15-190	118	6775	1382	125	2.09

为了给出多场寿命预测模型的具体形式，需要计算出式 4.17 中的唯一未知参数 β 。根据 4.16 式作出电迁移加速因子与电流密度的平方的双对数曲线，如图 53 所示。可以发现电迁移加速因子的对数与电流密度平方的对数呈直线分布，因此通过拟合直线可以计算出 β 的值为 6.5×10^{-9} 。当电流密度为 12.4, 17.4, 19.9 和 22.4 kA/cm² 时，由电流作用引起的激活能变化量分别为 0.014, 0.029, 0.040 和 0.053 eV。电流密度越大，其引起的激活能变化越大。这是因为较大的电流密度会产生较高的电子风力，带来更高的空位运动，从而使得焊料软化。到此，可以根据式 4.17，代入相关参数便可以预测电流-热循环多场下的寿命。

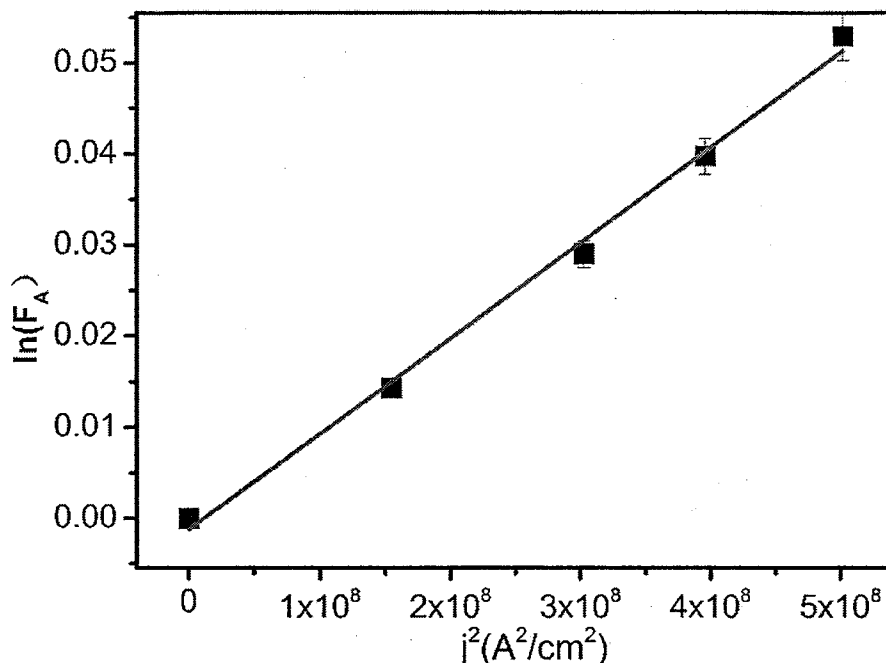


图 53 电迁移加速因子与电流密度平方的双对数曲线

Fig. 53 The logarithm of acceleration factor curve with the square of current density

4.4.2 失效模式

铜柱凸点的电流—热循环多场实验样品的初始状态与电迁移实验样品相同，如图 27 所示，即回流后铜柱凸点侧和 PCB 侧对称地形成一层较薄的扇贝状 Cu_6Sn_5 。多场实验过程中通过等间隔时间取样，观察其界面演变，如图 54 所示。图 54a 中电子流从 PCB 侧流向铜柱凸点。在 PCB，可见回流态的扇贝状 Cu_6Sn_5 转变为层状，其厚度并没有显著变化。在铜柱凸点侧，即阳极侧，回流态的扇贝状 Cu_6Sn_5 亦转变为层状，且其厚度明显增加并大于阴极侧 Cu_6Sn_5 的厚度，表现出了电迁移极性效应，即在电子流的作用下 Cu 原子从阴极迁移到阳极，造成阴极金属间化合物的分解，同时促进了阳极金属间化合物的生成，故阳极的金属间化合物厚度大于阴极金属间化合物厚度。不过值得注意的是，多场下的极性效应没有单场电迁移的极性效应显著，如图 32 所示。单场电迁移时阴极几乎没有化合物生成。而多场时阴极仍然生成较厚的 Cu_6Sn_5 ，这一方面与多场下的电流密度较小有关，另一方面与多场下的应力状态有关。多场升温阶段焊料处于压力状态，而压应力会抑制阴极处电迁移效应。此外，从图 54a 的局部放大图 54c 中可以

看到在阴极 $\text{Cu}_3\text{Sn}/\text{Cu}_6\text{Sn}_5$ 界面和 Cu_6Sn_5 中形成微裂纹，这些微裂纹的存在亦阻碍了 Cu 原子从阴极向阳极迁移，也就抑制了阴极处化合物的分解，从而使得阴极侧化合物厚度在高温时也不断随多场实验时间增加而增加。以上三方面因素综合作用使得阴极和阳极的化合物差并不显著，即电迁移极性效应不显著。阳极侧 $\text{Cu}_3\text{Sn}/\text{Cu}_6\text{Sn}_5$ 界面和 Cu_6Sn_5 中的微裂纹使得焊料界面强度下降，为铜柱凸点最终失效埋下隐患。

随着多场实验时间增加到 580 周次，阴极和阳极的化合物厚度都有所增加，此时的电迁移极性效应仍然不是很显著，但是此时可以很明显的发现焊料中出现了两条裂纹，如图 54b 所示。从裂纹的形态判断，裂纹从边缘到中间由宽变细，由此认定裂纹是在焊料边缘位置萌生然后向中间扩展。左侧的裂纹位于 Sn 焊料中部，而右侧的裂纹从焊料边缘萌生，然后穿过一个 Cu_6Sn_5 晶粒沿着 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面向中间扩展，并且在右边与金属间化合物中的微裂纹相连。这些裂纹的扩展最终导致铜柱凸点的失效。

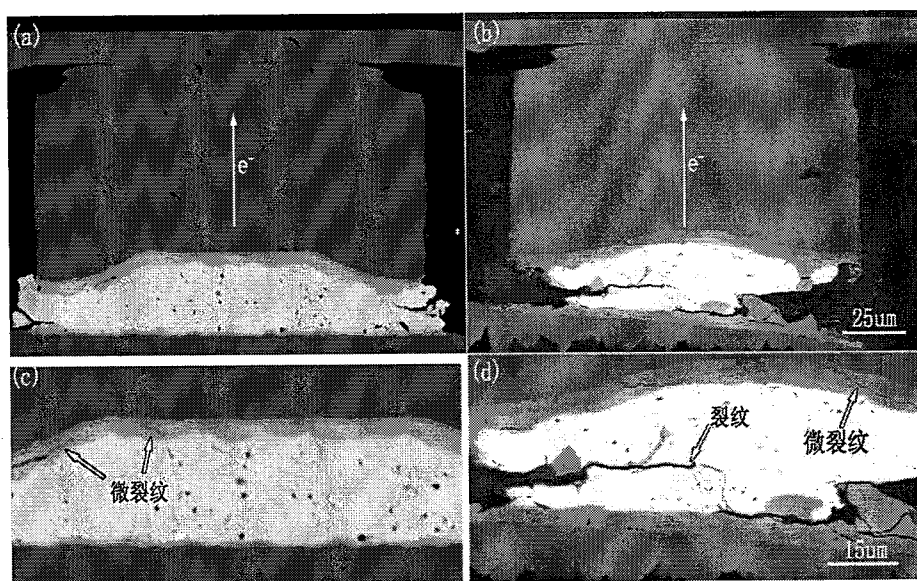


图 54 多场下铜柱凸点界面演变：(a) 200 周次，(b) 560 周次，(c) a 图的局部放大图，(d) b 图的局部放大图

Fig. 54 the interfacial morphology development under the coupled condition: (a) after 288 cycles, (b) after 560 cycles, (c) close-up view of (a), (d) close-up view of (d)

本文对每组实验所有失效后样品制作截面样品，然后在扫描电镜下观察，对每个铜柱凸点的失效方式分析并归类，最终得出铜柱凸点在不同场下的失效模式有三种。

第一种失效模式为耦合作用引起的阴极处 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面开裂，如图 55 所示。图 55a 中电子流方向从 PCB 板侧指向铜柱凸点，图 55b 是与图 55a 中相连的另一个铜柱凸点，其中电子流方向相反，由铜柱凸点指向 PCB 侧。从图 55a 中可看出，互连界面焊料 Sn 没有发生耗尽，这与单场电迁移不同。单场电迁移失效发生时，焊料 Sn 已经全部耗尽转变为金属间化合物，此样品在不同场下发生电迁移失效时，只有部分焊料 Sn 转变为金属间化合物。阴极侧只观察到了一层较薄的 Cu_3Sn ，并没有发现 Cu_6Sn_5 。从图 55a 和图 55b 两个图中都可以发现在阴极 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面出现横贯整个互连凸点的裂纹，造成铜柱凸点开路失效。这种失效方式是一种典型的电迁移引起的失效模式。这种失效模式的铜柱凸点一般寿命较短。

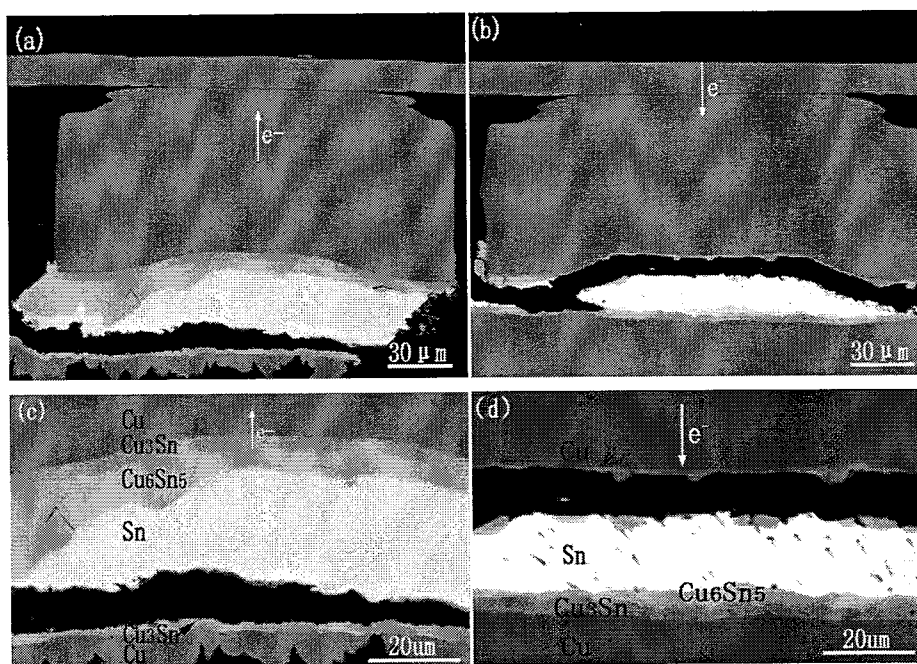


图 55 铜柱凸点不同场下阴极侧 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面开裂：(a) 电子流方向由 PCB 侧指向铜柱凸点，(b) 电子流方向由铜柱凸点指向 PCB 板侧，(c) 图 a 的局部放大图，(d) 图 b 的局部放大图

Fig. 55 cracks formation on the cathode side (a) cathode side on the PCB side, (b) cathode side on the copper pillar side, (c) close-up of (a), (d) close-up of (b)

第二种失效模式是阳极侧 $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ 界面开裂失效, 如图 56 所示。图中焊料 Sn 已经全部耗尽转变为金属间化合物 Cu_6Sn_5 和 Cu_3Sn , 阴极和阳极侧的 Cu_3Sn 厚度基本相同, 并未呈现出电迁移极性效应。从局部放大图中可以看到 $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ 界面和 Cu_3Sn 内形成大量的柯肯达尔孔洞。另外, 在阴极 $\text{Cu}_3\text{Sn}/\text{Cu}_6\text{Sn}_5$ 界面出现较大的孔洞, 这是电迁移作用下 Cu 原子和 Sn 原子由阴极向阳极迁移而在阴极侧留下孔洞。这种失效模式多发生在 PCB 一侧。

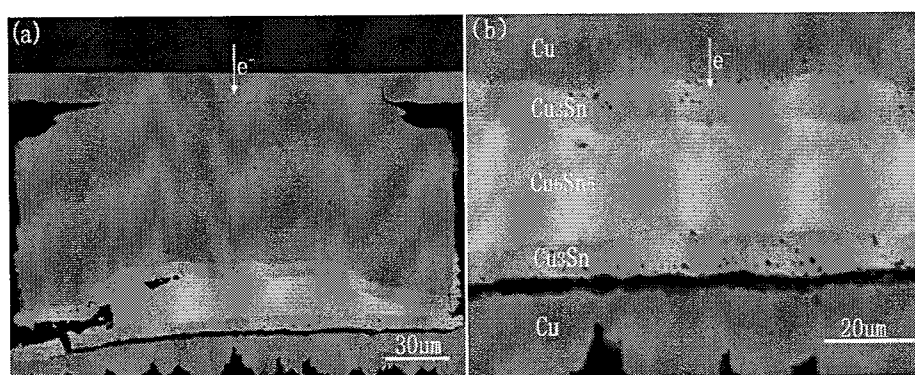


图 56 阳极侧 $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ 开裂失效: (a) 电子流从铜柱凸点侧指向 PCB 板侧, (b) a 图的局部放大图

Fig. 56 cracking of $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ interface (a) fracture on anode side, (b) close- up view of (a)

第三种失效模式是焊料 Sn 中间开裂失效, 如图 57 所示。裂纹萌生时, 如图 57a 中焊料中间左侧部分, 焊料 Sn 尚未完全耗尽转变为金属间化合物。电子流从铜柱凸点流向 PCB 板侧, 阴极和阳极侧都形成了 Cu_3Sn 和 Cu_6Sn_5 , 且电迁移极性效应并不显著, 而且此时的 Cu_6Sn_5 仍然是保持着回流态的扇贝状, 并未转变为上文中讨论的层状, 说明裂纹的萌生发生在多场实验初期。随着多场实验时间的增加, 裂纹不断在焊料 Sn 中间扩展, 有些情况下裂纹会在焊料两侧边缘同时萌生向中间扩展, 如图 57b 中的裂纹形态所示, 此时, 焊料 Sn 仍未耗尽, 阴极和阳极的 Cu_3Sn 厚度有所增加, 阳极侧的 Cu_6Sn_5 厚度也有所增加, 而阴极侧的 Cu_6Sn_5 厚度几乎没有发生变化, 呈现出了电迁移极性效应, 但是阴极和阳极侧的 Cu_6Sn_5 都由扇贝状转变为了层状。且 Cu_6Sn_5 内部出现了大量的微裂纹, 而疲劳蠕变裂纹在残存的焊料中间扩展失效。当多场实验时间进一步增加时, 裂纹从两侧向中间扩展直至贯穿整个界面, 造成铜柱凸点互连开路失效, 这种失效

方式与铜柱凸点在热循环下的焊料疲劳蠕变失效方式相同,但是其寿命相比于热循环下的寿命显著缩短,主要原因是电迁移作用增加了焊料中的孔洞以及增强了焊料中空位运动降低了焊料的力学性能。这种失效模式主要发生在低电流密度的实验组里,而且具有相对较长的寿命。

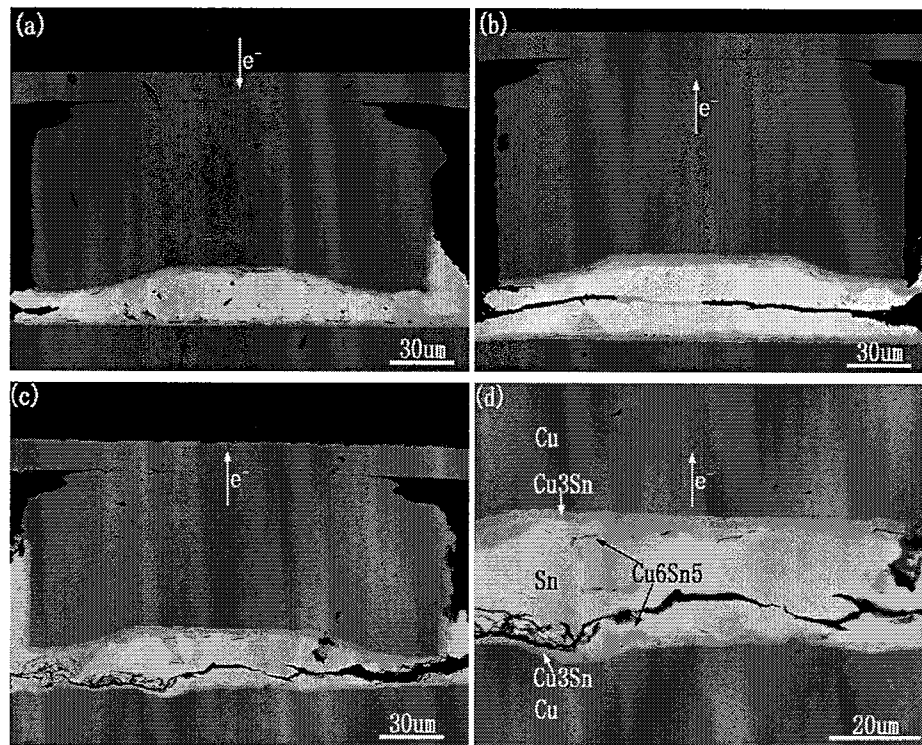


图 57 焊料中间开裂失效: (a) 裂纹萌生, (b) 裂纹扩展, (c) 开裂失效, (d) c 图的局部放大图

Fig. 57 failure in solder (a) initiation site of crack, (b) extension of crack, (c) open failure in solder, (d) close-up view of (c)

经过统计分析每个失效样品的失效模式,并将其归类,计算每种失效模式的样品所占总失效模式的比例,列于表 11。表中第二列数据表示第一种失效模式,即电迁移引起的阴极 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面开裂。当电流密度为 $12.4\text{kA}/\text{cm}^2$ 时,第一种失效模式所占比例为 31%,而随着电流密度的增加,电迁移引起的失效比例也相应的增加,当电流密度为 $22.4\text{kA}/\text{cm}^2$ 时,第一种失效模式所占比例增加到 44%。表中第三列数据为阳极 $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ 界面开裂失效的所占比例。其比例数值也随着电流密度的增加而增加,从电流密度为 $12.4\text{kA}/\text{cm}^2$ 时的 12%增加到电流密度为

22.4kA/cm²时的 37%。表中第四列数据为焊料中间开裂失效所占比例，当电流密度为 12.4kA/cm² 时，第三种失效模式所占比例高达 56%，而随着电流密度的增加这一比例下降，当电流密度增加到 22.4kA/cm² 时，其失效比例下降到 19%。如果横向比较三种失效模式所占的比例数据可以发现，当电流密度较低时第三种失效模式为主导，而当电流密度较高时第一种失效模式为主导。

表 11 各种失效模式占比分布

j (kA/cm ²)	EM	Anode crack	Fatigue-creep
12.4	31%	12%	56%
17.4	40%	20%	40%
19.9	42%	21%	37%
22.4	44%	37%	19%

4.5 分析讨论

为了探究多场下电流和热循环对铜柱凸点失效模式的具体影响方式，以及二者的相互影响，下文将对三种失效模式展开分析讨论。

第一种失效模式，阴极侧 Cu₆Sn₅/Sn 界面开裂失效。这种失效方式有三方面的影响因素：电迁移引起的孔洞，Cu₆Sn₅ 相内部的微裂纹和 Cu₆Sn₅/Sn 锯齿状界面的疲劳。

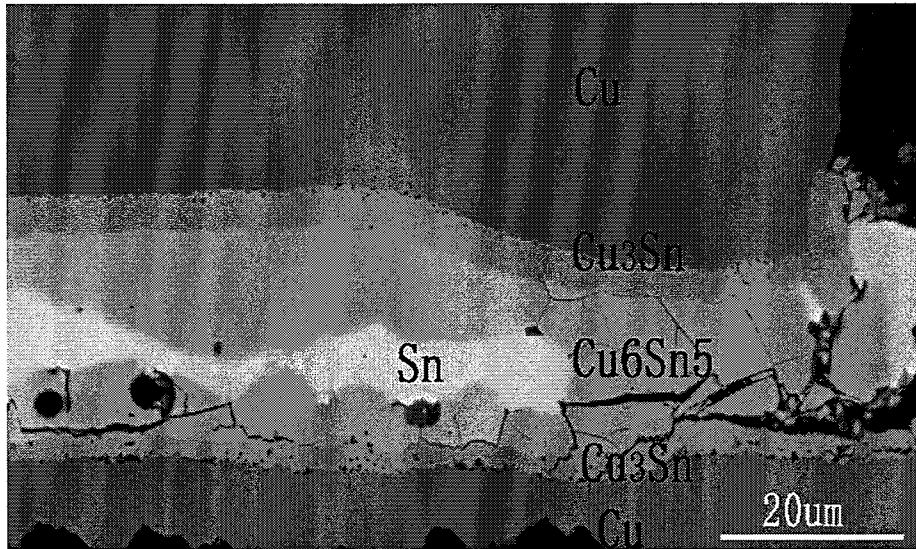
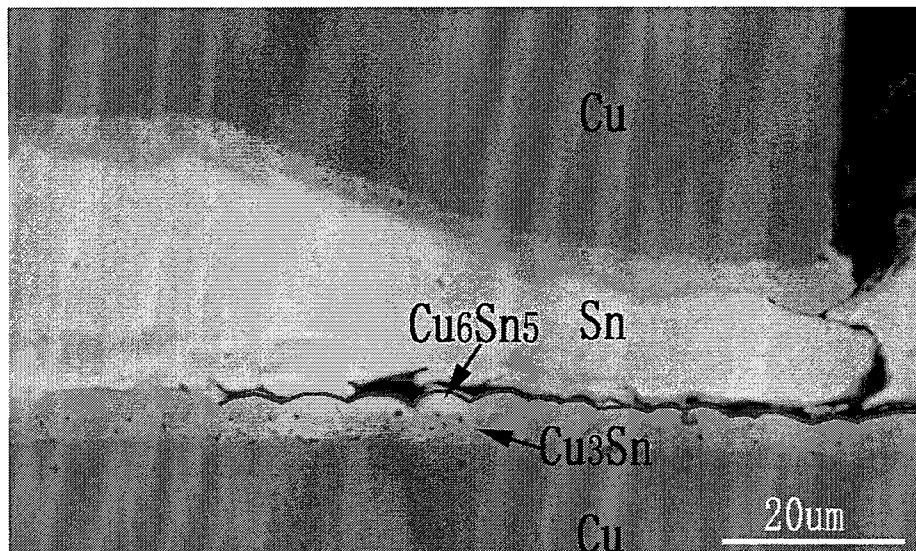
首先，电迁移引起的孔洞的生成过程在铜柱凸点的单场电迁移失效中已经得到详细的分析，主要是在电子流的作用下，阴极 Cu₆Sn₅/Sn 界面的 Cu 原子和 Sn 原子向阳极迁移，而此界面上迁入的原子流不足以平衡迁出的原子流，因此空位在此界面聚集。随着电迁移时间的进行，孔洞逐渐聚集形成大的电迁移孔洞，如图 33-图 35 和图 55a 所示。但形成的孔洞显然要小于单场电迁移下的孔洞，因为电流—热循环多场下，Cu₆Sn₅/Sn 界面开裂失效时，焊料 Sn 并没有像单场电迁

移失效时全部耗尽转变为金属间化合物。而单场电迁移下形成的电迁移孔洞尚不能布满整个界面造成失效,故此多场下的电迁移孔洞必然也不能单独造成此种模式的失效发生。多场下以这种模式失效的样品寿命远远小于单场电迁移的寿命^[141],说明除了电迁移因素,热循环也对引起这种失效方式有一定的影响。

其次, Cu_6Sn_5 中的微裂纹对第一种失效方式也有影响,如图 58 所示。这种微裂纹与无电流的热循环下的铜柱凸点中的微裂纹相同。微裂纹倾向于在 $\text{Cu}_3\text{Sn}/\text{Cu}_6\text{Sn}_5$ 界面生成,这种微裂纹的生成与 Cu_6Sn_5 和 Cu_3Sn 的热膨胀系数不同有关,在温度循环过程中,材料的热膨胀系数不同引起界面的交变热应力,因而在脆性的金属间化合物内产生微裂纹,甚至造成脆性断裂,如图 58 中右侧 PCB 板侧裂纹从右侧沿着 $\text{Cu}_3\text{Sn}/\text{Cu}_6\text{Sn}_5$ 界面向中间扩展开来。这些微裂纹的存在使得界面力学性能下降。

最后, $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 锯齿形状界面的疲劳对第一种失效模式也有一定的影响,如图 59 所示。在 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面形成裂纹,裂纹的形貌与 Cu_6Sn_5 的形貌相吻合,裂纹沿着扇贝状 Cu_6Sn_5 的顶部扩展形成了锯齿状的裂纹。这种裂纹的形成与此界面热应力有关,因为 Cu_6Sn_5 的热膨胀系数 ($\alpha_{\text{Cu}_6\text{Sn}_5} = 16.3 \times 10^{-6}$) 与 Sn 的热膨胀系数 ($\alpha_{\text{Sn}} = 23.5 \times 10^{-6}$) 相差较大,在热循环的作用下在界面处形成较大的交变热应力。因此, $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面极易发生疲劳裂纹,而且此界面特殊的锯齿形状也为疲劳裂纹的扩展提供有利途径。

综上三方面因素,在多场下,铜柱凸点 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面产生疲劳裂纹,在电迁移孔洞的帮助下沿着有利于裂纹扩展的特殊的 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 锯齿界面扩展,并与化合物中微裂纹在局部区域交互作用,连在一起加速了裂纹的扩展,最终导致阴极界面发生断裂,这种失效模式是电迁移和热循环耦合作用造成的。当电流密度较大时,这种失效模式占主导是因为电流密度越大,在 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面形成的孔洞越大而且形成的 Cu_6Sn_5 化合物厚度更大,其内部更容易产生微裂纹所致。

图 58 Cu_6Sn_5 中的微裂纹Fig. 58 microcracks in Cu_6Sn_5 scallops图 59 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面疲劳裂纹Fig. 59 fatigue crack at $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ interface

对含有金属间化合物的铜柱凸点互连结构界面进行有限元分析, 从其应力应变角度分析裂纹的生成和扩展机理。图 60a 是有限元计算后焊料 Sn 和金属间化合物 Cu_6Sn_5 中的 y 向应力分布图, 最大应力位于 PCB 板侧的 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面的边缘位置, 而且经过计算包含不同厚度的 Cu_6Sn_5 的此种互连结构, 结果都发现最大应力的位置始终位于 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面。这一应力的形成除了材料热膨胀系数

不匹配在温度循环时造成热应力外,还包括形成化合物时其体积发生变化而引起的应力。 y 向应力垂直于界面方向,由此判断 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面的疲劳裂纹属于 I 型裂纹。

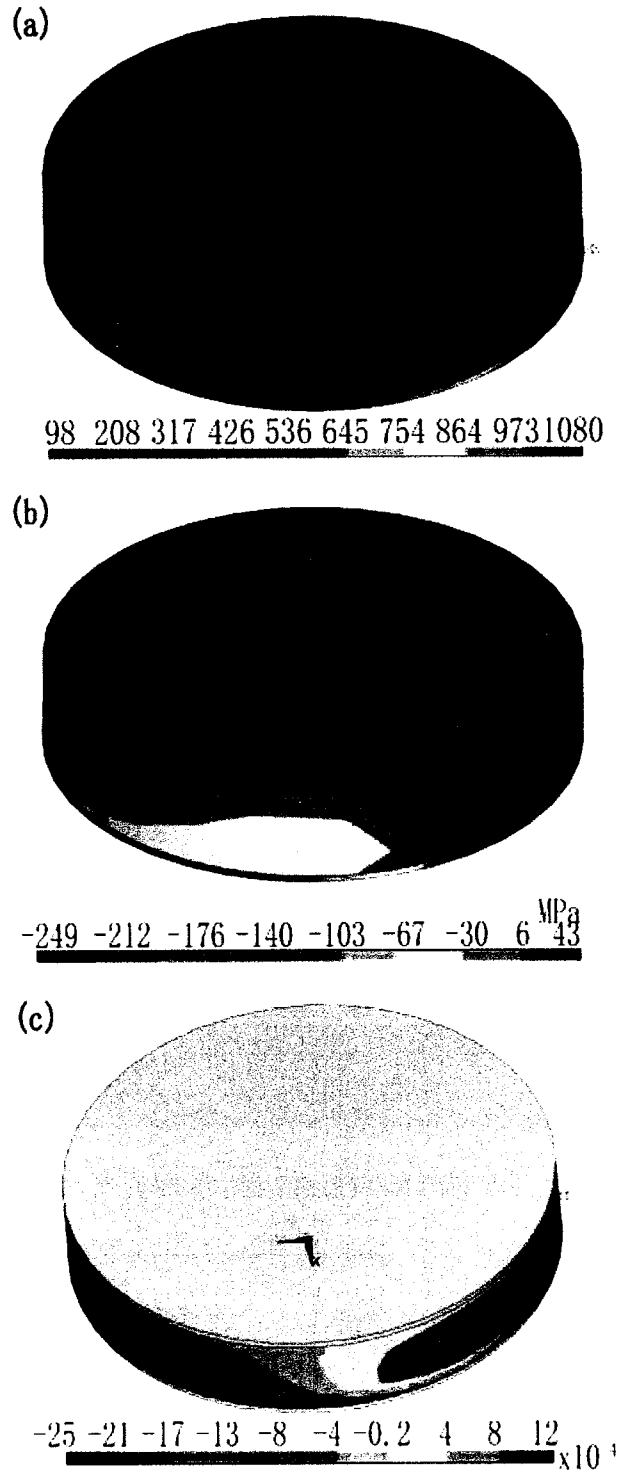


图 60 铜柱凸点中的应力应变分布图: (a) y 向应力, (b) xz 剪切应力, (c) xz 剪切应变

Fig. 60 FEA simulated deformation and stress (a) y-stress, (b)xz-stress, (c) xz-strain

对于第二种失效模式，阳极侧 Cu/Cu₃Sn 界面开裂失效，其主要原因是电迁移作用。电迁移作用下，金属 Cu 原子从阴极向阳极迁移，促进阳极侧 Cu₆Sn₅ 和 Cu₃Sn 的生成，而 Cu₃Sn 的生成往往伴随着柯肯达尔孔洞的出现^[142-146]，因此形成较厚的 Cu₃Sn 的同时阳极 Cu/Cu₃Sn 界面出现了大量的柯肯达尔孔洞，这些孔洞则降低了此界面的力学性能。因此在较大的应力状态下，界面柯肯达尔孔洞相互联结成裂纹并沿着界面扩展，最终导致失效，如图 56 所示。这种失效模式与单场电迁移第二种失效模式相同，如图 34 所示，属于典型的铜柱凸点电迁移失效。以此种模式失效的样品往往比以第一种失效模式的样品的寿命较长，从其化合物的演变可以发现当第二种失效模式发生时，焊料 Sn 已经全部转化为金属间化合物，而第一种失效模式发生时焊料 Sn 并未耗尽，充分说明第二种失效模式的发生需要更长时间的电迁移作用。这两种失效模式的主要区别可能与焊料 Sn 的晶粒组织有关^[42, 127, 147-157]，当焊料中包含晶粒个数较少，且取向 c 轴与电子流方向平行时，电迁移速度较快，焊料 Sn 在短时间内全部转化为金属间化合物，来不及发生第一种模式的失效而转变为金属间化合物互连结构，金属间化合物结构在电迁移作用下界面演变由 Cu₆Sn₅ 逐渐转变为 Cu₃Sn 相对焊料电迁移时较慢^[158, 159]，因此发生第二种失效模式比第一种失效模式的所需时间更久。

对于第三种失效模式，即焊料中间的裂纹，通过 EBSD 技术分析样品失效后微观组织，如图 61 所示，从图中可以看出裂纹附近没有细小的再结晶晶粒，焊料 Sn 仍然由几个大的晶粒组成，这种失效方式及其组织结构与铜柱凸点在不电流加载的热循环下情况相似，但与传统焊球热循环时裂纹在焊料再结晶晶界形成并沿着再结晶晶界扩展不同^{[126] [160-166]}。多场下，铜柱凸点焊料 Sn 中裂纹在焊料边缘萌生，如图 57a 所示。此处裂纹的萌生是由于焊料边缘处于应力应变集中区域，如图 60b 和图 60c 所示，热循环下最大剪切应力和最大剪切应变位于焊料中间的边缘。根据裂纹区域的应力应变状态可以判断此类型的裂纹属于 I 型裂纹和 II 型裂纹的混合裂纹，如图 62 所示。明显的可以发现图中焊料失效后裂纹上下两部分发生了横向相对位移，如红色圆圈 A 和 B 之间发生了相对位移，说明了焊料在剪切应力的作用下发生了剪切变形，这属于 II 型裂纹。另一方面，焊料

在热循环过程中同时也承受着垂直于界面的纵向应力，焊料中裂纹的扩展属于 I 型和 II 型混合裂纹。这种类型的失效多见于加载电流密度较低的样品中。电流密度较低，电迁移作用对热循环的影响较小，二者的耦合作用较小，热循环引起的交变应力对样品失效起主导作用。其失效方式与无电流加载的热循环相同，故以此种模式失效的多场样品具有最长的寿命。

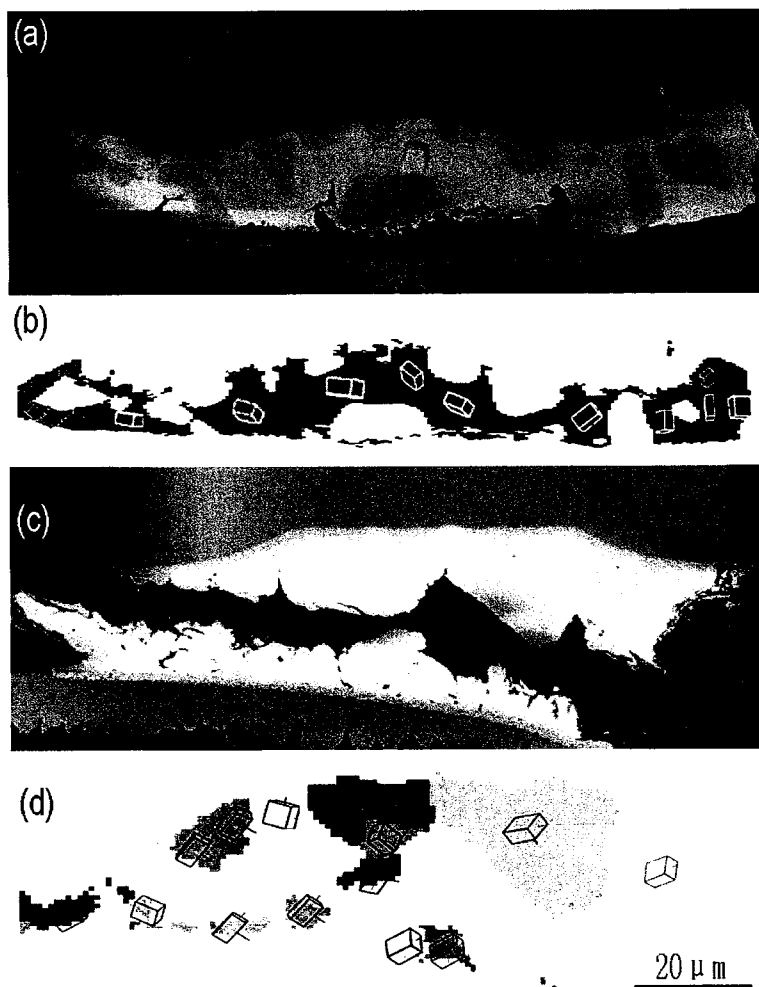


图 61 铜柱凸点失效后焊料 Sn 的界面形貌：(a) 焊料 Sn 的 c 轴平行于电子流方向的样品失效形貌，(b) a 图的晶粒取向，(c) 焊料 Sn 的 c 轴偏离电子流方向的样品失效形貌，(d) c 图的晶粒取向

Fig. 61 EBSD map of solder Sn with a crack (a) SEM picture of Sn grains with c-axes long current direction, (b) EBSD map of (a), (c) SEM picture of Sn grains with c-axes deviate from current direction, (d) EBSD map of (c)

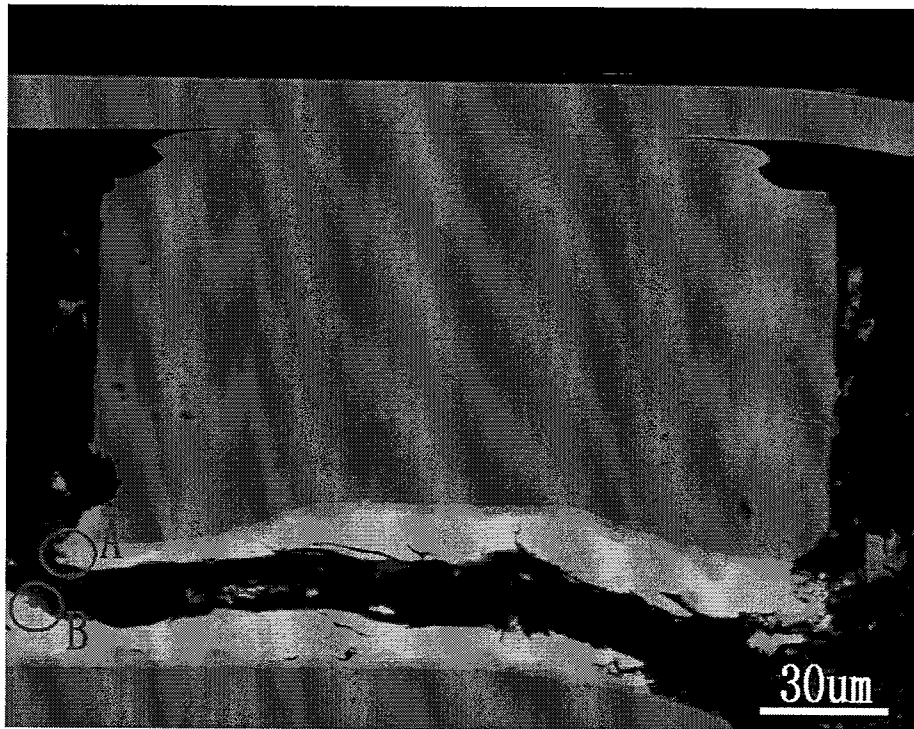


图 62 焊料中裂纹

Fig. 62 crack in solder tin

4.6 本章小结

为了评估铜柱凸点在电流-热循环加载下的寿命和可靠性，本章节根据累积损伤法则，将热循环和电流的耦合作用考虑进去，把热循环 Engelmaier 寿命预测模型和 Black 电迁移寿命预测模型统一起来，建立了铜柱凸点在多场下的寿命预测模型。设计了多场实验，测得了铜柱凸点在多场下的寿命，分析了电流和热循环对多场寿命的影响，验证了多场寿命预测模型。根据统计分析所有失效样品的界面形貌，将铜柱凸点的多场失效模式分为以下三类：

- 1) 阴极侧耦合作用引起的阴极处 $\text{Cu}_6\text{Sn}_5/\text{Sn}$ 界面开裂；
- 2) 电迁移引起的阳极侧 $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ 界面开裂；
- 3) 热循环引起的焊料中间开裂

通过分析多场下三种失效模式可以得出：铜柱凸点在多场下的失效模式兼具单场电迁移和热循环的失效形式，但又不是二者简单叠加；两者的耦合作用对多

场下的失效模式及服役寿命起着至关重要的作用。一方面电迁移作用增加了焊料中以及界面的孔洞,弱化了其强度,促进了焊料疲劳蠕变的失效进程。另一方面,热循环引起的交变应力对电迁移原子迁移带来影响,并且对电迁移作用下形成的金属间化合物造成影响,从而加速了电迁移失效。

第五章 TSV 热时效可靠性

5.1 引言

硅通孔互连作为 3D IC 的关键技术之一,虽然给电子信息行业带来了前所未有的突破,实现了更高集成密度,更小体积和更低功耗等,但是目前其相关工艺以及检测仍然存在很多问题。比如缺乏硅通孔互连设计规范和软件;缺乏相关检测技术和软件;无孔填充铜需要花费较长时间;硅通孔互连晶圆良品率要求苛刻($\geq 99.9\%$);CTE 不匹配引起的相关可靠性问题,等等。

正如前面所提到的,热机械可靠性是硅通孔互连的一个重要问题。原因有两方面,一是硅通孔互连制造工艺过程带来的,其原因在于制造温度较高:①沉积 Cu 种子层,工艺温度为 $250\sim 450^{\circ}\text{C}$;②电镀填充 Cu,工艺温度 $150\sim 250^{\circ}\text{C}$;③退火,工艺温度为 $400\sim 420^{\circ}\text{C}$ 。另一方面是产品使用过程中带来的:①小尺寸封装中的堆叠多功能芯片产生的热量很高;②3D 堆叠芯片之间的间隙对于冷却通道来说过小,不能提供流体流动的通道;③薄芯片会导致芯片上产生过热点。综合以上两方面原因,硅通孔互连结构会长时间处于高温情况下。由于 Si 和 Cu 的热膨胀系数差异较大,硅通孔互连结构在制造工艺和服役过程中产生较大热应力[66, 101, 112, 167-170],进而引起一系列可靠性问题:(1)Si 中较大的应力影响器件性能,甚至导致 Si 开裂^[169, 171]。比如 Thompson 等人证实,100MPa 应力足以引起 MOSFET 半导体器件的载流子移动性变化 7%,严重影响器件的可靠性,并且使得硅通孔互连周围高应力区无法布置器件。(2)硅通孔互连中的高应力会影响原子迁移,应力造成的原子迁移甚至高达 88%,这与电迁移相互作用更加剧了原子迁移,使得结构存在可靠性隐患。(3)高应力导致的硅通孔互连界面破坏,致使器件漏电失效^[170, 172]。

硅通孔互连在高温下的可靠性问题目前还缺乏详尽的研究结果,失效机制尚不明晰。本章节主要研究硅通孔互连在热时效下的界面和表面可靠性;研究不同热处理工艺对其可靠性的影响;研究不同组织结构对其可靠性的影响。

5.2 实验设计

5.2.1 TSV 样品制备

实验采用的 TSV 样品的深径比为 $100\mu\text{m}/50\mu\text{m}$ ，每小片上有三组孔，每组孔个数为 8×20 ，孔间距为 $120\mu\text{m}$ 。采用深反应离子刻蚀技术（DRIE）刻蚀盲孔，通过热氧化技术在孔壁上沉积 500nm 厚的 SiO_2 绝缘层，随后溅射 Ti 阻挡层和 Au 种子层，其厚度分别为 20nm 、 150nm 。

本实验中制备了纯铜填充的 TSV 样品。填充 TSV 采用反向脉冲电镀的方法，采用硫酸-硫酸铜体系电镀液，基本镀液成分组成： Cu^{2+} 40g/L 、 H_2SO_4 100g/L 、 Cl^- 50mg/L 、加速剂、整平剂和抑制剂。

为方便电镀实验中参数的设定，电流密度定义为电流与样品电沉积部分的面积之比。用划片机将晶圆切割成一定面积的小块样品。将切割后的 TSV 样品用双面铜导电胶带和绝缘胶带固定在塑料板上，并使实际电沉积面积保持一定。首先用浓度为 5% 的稀盐酸除去样品表面的氧化膜，随后放置酒精中超声清洗 5min ，再用去离子水冲洗干净。将处理好的样品放置在抽真空容器内进行真空处理，待容器内抽成真空后，将小片样品浸入盛有去离子水的烧杯中，再抽真空一定时间，以保证盲孔内的空气完全排除，至此样品的预润湿工艺完成。然后小心将样品取出放入电解液中，并用夹子夹持固定。

由于 TSV 尺寸是大马士革工艺（Damascene）中尺寸的几十倍乃至上百倍，电镀前盲孔内部存在的气泡会影响样品的填充效果，且随着深径比的增加，盲孔内的空气对填充的效果影响越明显，因此预处理阶段的真空处理工艺对于实现无孔填充十分重要。一些研究采用表面活性剂润湿孔壁，但表面活性剂会与镀液中添加剂相互作用。本课题采用的真空处理方法，可以保证孔内的气泡排出，进而保证溶液到达孔底部。

本实验采用酸性硫酸铜体系的电镀液，TSV 自底向上生长电镀所采用的阳极板为磷铜板，一方面可为电镀提供充足的铜离子，同时阳极铜板中含有少量的磷，其与一价铜离子反应生成的产物覆盖在阳极表面，会形成一层黑色的导电膜，阻止 Cu 的过快溶解和歧化反应的发生，进而降低了 Cu^+ 的含量和铜泥的生成，

有效控制电镀容器内的铜离子浓度。但阳极板中磷含量过多也会影响电镀铜的表面质量。有实验中指出磷含量在 0.004%-0.006% 范围内为最佳[88]。

在实验中所用的电镀槽容积为 1L，脉冲电镀时所用的电源为可精确输出正反向脉冲的 Autolab 204 电化学工作站，所使用脉冲电流参数如图 63 所示。直流电镀时使用的电源为直流电源 TEKTRONIX 2200-20-5。电镀过程采用磁力搅拌器对电镀液进行搅拌，以保证孔内溶液的离子供给，所有的电镀实验均在常温条件下进行。

为了研究晶粒尺寸大小对 TSV 热时效可靠性的影响，通过控制电镀电流密度大小制备了三组不同晶粒尺寸的 Cu-TSV 样品，列于表 12。此外为了研究晶粒分布对热时效的影响，采用分步电镀法制备了晶粒尺寸梯度样品。

表 12 热时效前后晶粒尺寸.

Table 12 the grain sizes of three samples before and after annealing			
样品组	A	B	C
晶粒大小(μm)	1.94	1.60	0.98

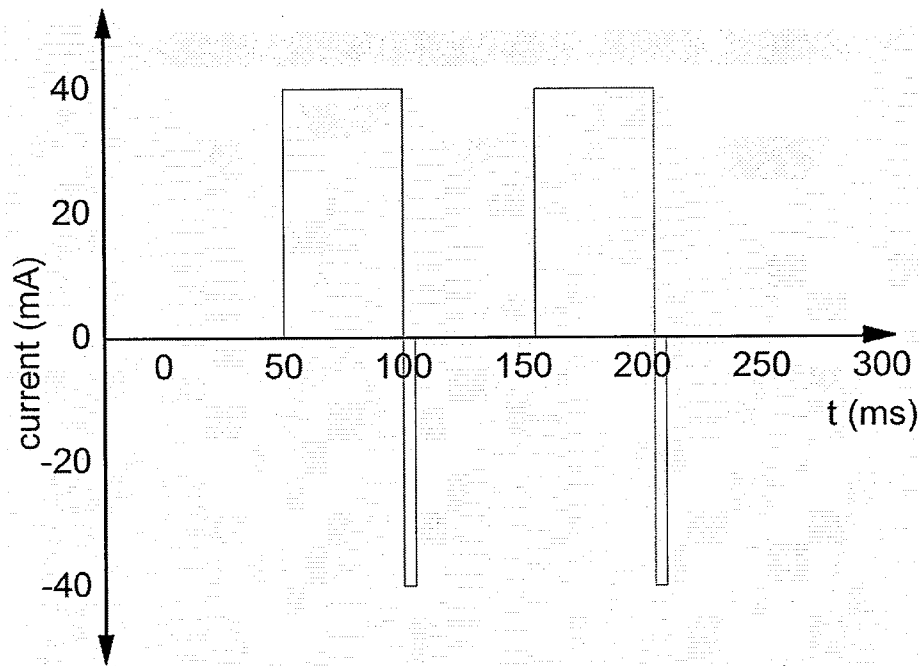


图 63 脉冲电流示意图

Fig. 63 the sketch diagram of pulse current

5.2.3 TSV 热时效

为了方便观察热时效对 TSV 表面形貌的影响,热时效前需要对电镀后的样品表面进行处理。对电镀后 TSV 表面上多余的 Cu 采用 3000#及以上的砂纸研磨后进行机械抛光得到光滑而平整的表面。用激光共聚焦显微镜测量表面平整度,再用扫描电镜观察表面形貌。然后对样品进行热处理实验。参考 TSV 的工艺流程中所使用的温度,将 TSV 热时效实验温度设为 400°C ,真空度为 $3.5 \times 10^{-2} \text{Pa}$ 。样品热处理的保温时间分别设定为 15、30、45 和 60 分钟。为了研究不同加热速率对 Cu-TSV 的可靠性影响,将热时效加热速率分别设定为 $12.5^{\circ}\text{C}/\text{min}$, $25^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 和 $100^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 。

5.3 实验结果

5.3.1 微观结构的变化

为了对 TSV 样品进行原位无损的观察，热时效前首先使用三维 X 射线对样品进行检测。热时效后再使用三维 X 射线对样品进行原位检测，得到 TSV 的 3D 原位观察结果，如图 64 所示。可以看出，热时效前 TSV 内部完整，没有孔洞或者裂纹，如图 64a 所示。而热时效后，如图 64b 所示，TSV 内部出现了孔洞。这些孔洞既出现在填充 Cu 的内部，也出现在 Si/Cu 界面，而且孔洞主要分布在 Cu-TSV 偏上部分。

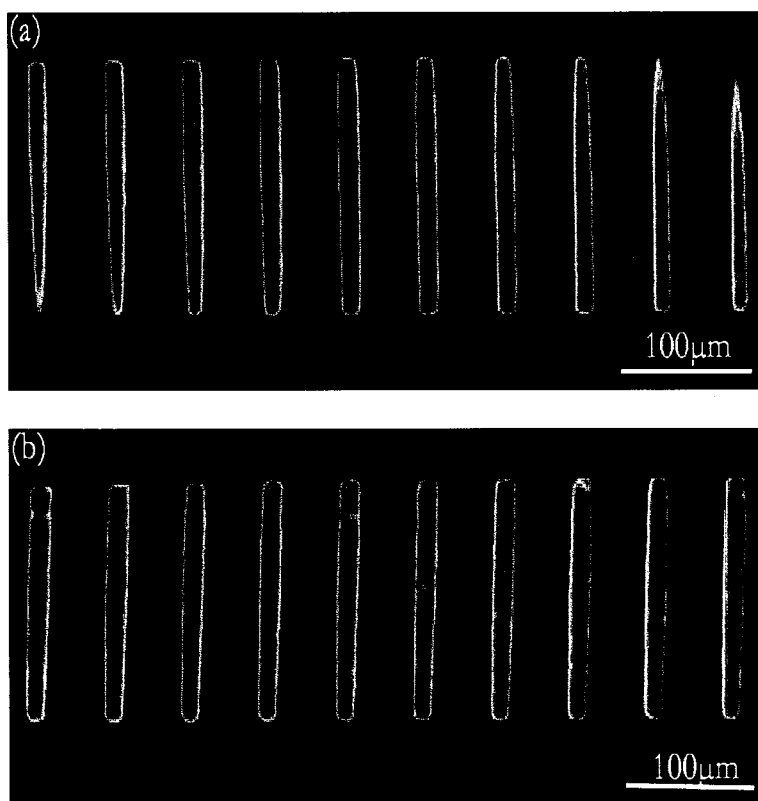


图 64 Cu-TSV 热时效前后三维 XRD 形貌；(a) 热时效前，(b) 热时效后

Fig. 64 3D XRD inspection of Cu-TSV: (a) before annealing, (b) after annealing

使用扫描显微镜观察 Cu-TSV 热时效前后的表面形貌变化，如图 65 所示。热时效前，抛光的表面光滑而平整，Cu/Si 界面处于同一个平面内。而热时效后，

界面处形成了台阶，填充的 Cu 高出基体 Si，如图 65d 所示。这种现象称为 TSV 的挤出效应^[102, 106-108, 113, 114, 173-176]。发生挤出后界面处的 Cu 仍然保持来的形状，没有发现随机突起的峰和局部塑性变形，说明挤出过程中没有发生由于热膨胀导致的塑性变形^[102, 108]。另外，抛光后平整光滑的 Cu 表面经热时效后变得粗糙不平，Cu 的晶界显现出来。这一现象表明热时效过程中填充的 Cu 内发生了晶界滑移。此外，在晶界处出现了孔洞，孔洞在靠近界面的部分较细小，数量也较少，但从界面到中心逐渐变多，而且尺寸也变大，在局部甚至相互联结成了裂纹。可见热时效后 TSV 内部和表面都出现了孔洞。

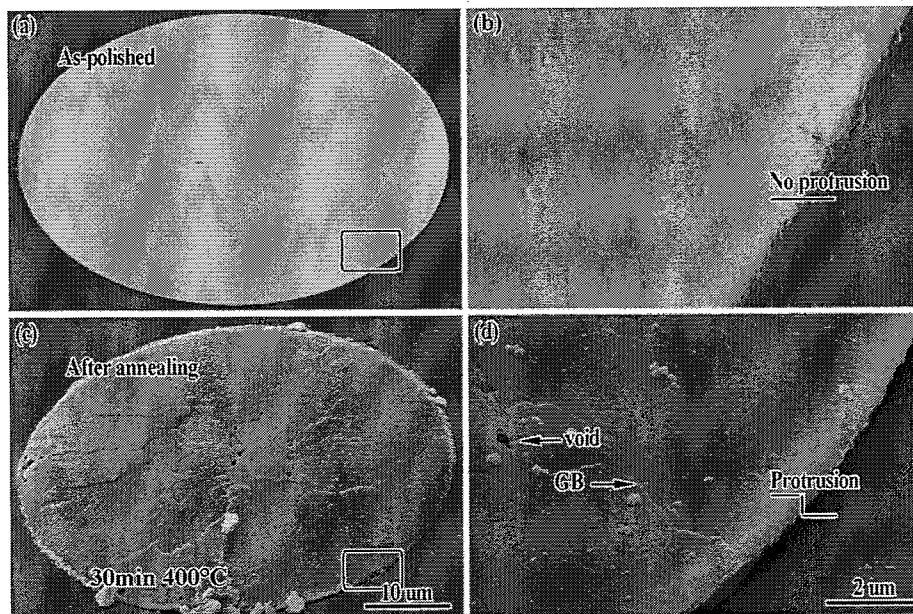


图 65 Cu-TSV 热时效前后表面 SEM 形貌：(a) 热时效前，(b) a 图界面部分局部放大图，(c) 400°C 热时效 30min 后，(d) c 图界面部分局部放大图

Fig. 65 TSV topography before and after annealing (a) before annealing, (b) close-up view of (a), (c) after annealing 15min, (d) close-up view of (c)

5.3.2 挤出形貌

为了更直观的展现 Cu-TSV 的挤出现象，通过激光共聚焦显微镜观察其挤出三维形貌，如图 66 所示。从图中可以看出其三维形貌呈小山包状，即中间挤出部分比界面挤出部分高，并且界面部分是垂直挤出。界面垂直挤出部分说明了热

时效过程中 Cu/Si 界面发生了相对位移。晶界在三维形貌图中也清楚的呈现出来。这一形貌还可以通过测量其中心截面高度曲线来表征,如图 67 所示。值得注意的是在靠近界面垂直挤出部分挤出高度有微小回落,并且挤出高度曲线出现波动,这些波动是由晶界高低不平导致的。

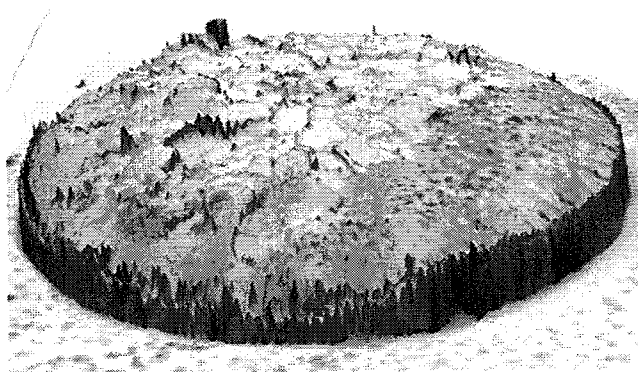


图 66 挤出三维形貌

Fig. 66 3D protrusion morphology

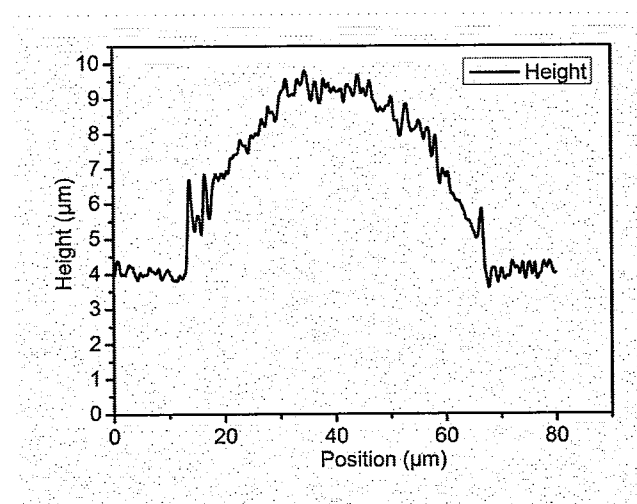


图 67 挤出高度曲线

Fig. 67 protrusion profile of TSV

5.3.3 挤出高度

为了观察 Cu-TSV 的挤出动力学,使用激光共聚焦显微镜测量挤出高度并绘

制出挤出高度随时间变化的曲线。图 68 给出了不同升降温速率的热时效挤出高度曲线。对比发现，在热时效的前 30min，升降温速率为 $100^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 的样品挤出速率最大， $25^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 次之， $12.5^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 时最小，说明升降温速率越大，挤出速率也越大。对比同一热时效时间点的挤出高度则可以得出升温速率越高，挤出高度也越大。值得注意的是升温速率为 $12.5^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 和 $25^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 时，其挤出高度随热时效时间增加而增加，并在 30min 后趋于稳定。然而，升温速率为 $100^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 的样品挤出高度增加到一个最大值后会下降。这一现象是因为升温速率较大，在界面处引起较高的热应力而致使界面处发生了开裂，如图 69 所示，热时效 30min 后在 Cu 和 SiO_2 的界面处产生了裂纹。

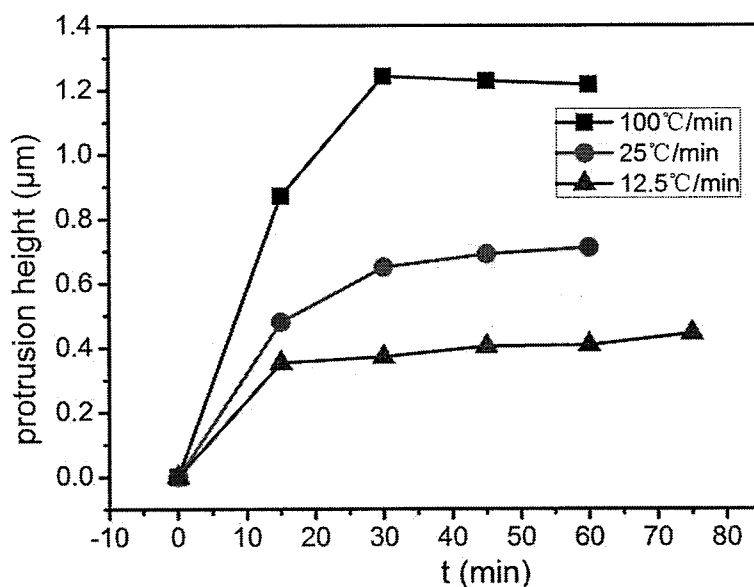


图 68 挤出高度随热时效时间曲线

Fig. 68 protrusion height with different ramping rate

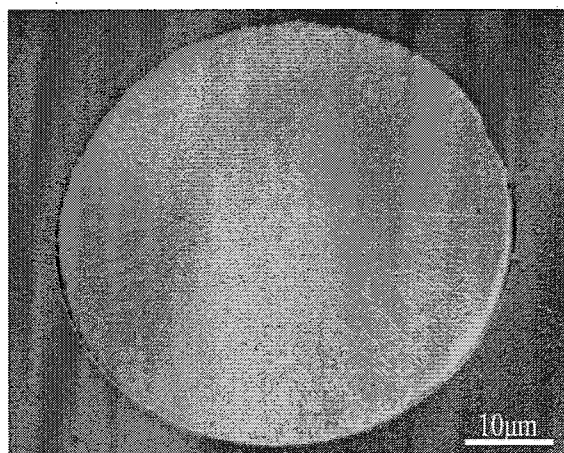


图 69 Cu-TSV 中界面开裂

Fig. 69 delamination of the interface in Cu-TSV

除了研究热时效升温速率和热时效时间对 Cu-TSV 挤出的影响, 本文还研究了 Cu-TSV 的挤出高度与填充 Cu 的组织结构的关系。通过控制电镀电流密度制备了三种不同晶粒大小的 Cu-TSV 样品, 如图 70a-c 所示, 三个样品热时效前晶粒大小分别为 1.94, 1.60 和 0.98 μm 。热时效后用 EBSD 原位观察表面晶粒组成, 如图 70d-f 所示。可以看出, 热时效 30 分钟后三个样品的晶粒都有所长大。统计三种不同晶粒尺寸的样品的 Cu-TSV 挤出高度, 列于表 13 中, 发现初始晶粒越大, 挤出高度越小。

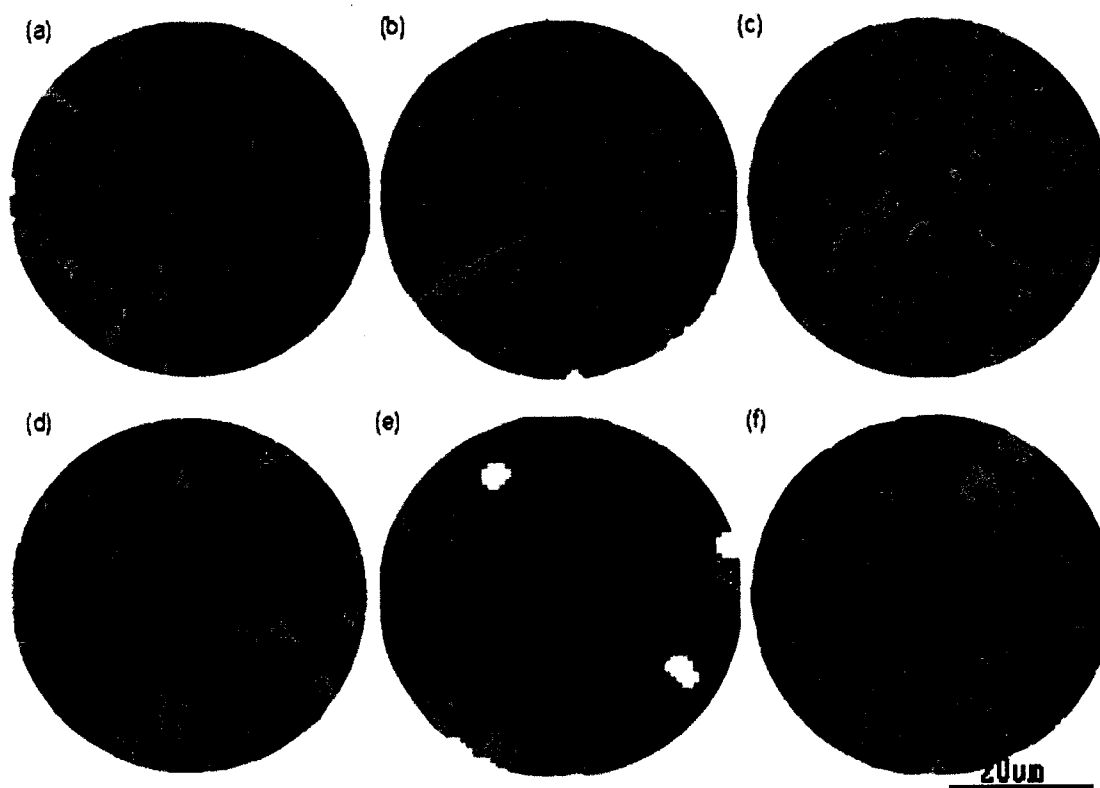


图 70 热时效前后晶粒尺寸对比; (a), (b), (c) 为热处理前, 晶粒尺寸分别为 1.94, 0.60, 0.98 μm ; (d), (e), (f) 为对应于(a), (b), (c) 热处理后

Fig. 70 Cu-TSVs samples with different grain sizes, (a) 1.94 μm before annealing, (b) 1.60 μm before annealing, (c) 0.98 μm before annealing, (d), (e) and (f) corresponding to (a), (b) and (c) after annealing 30min

表 13 不同晶粒大小的样品挤出高度

Table 13 the protrusion height of samples with different grain sizes			
晶粒尺寸 (μm)	1.94	1.60	0.98
挤出高度 (μm)	1.89	2.16	2.58

5.3.4 组织结构对挤出形貌的影响

热时效后,对三个晶粒大小不同的样品进行表面形貌扫描观察。A 组样品热时效后表面形貌如图 71a 所示,表面上晶界显现清晰,并且在晶界上有大量的孔洞形成,孔洞在 TSV 中心位置相互联结形成微裂纹。对于 B 组样品,热时效后其晶界同样也显现出来,但其晶界与 a 图中相比较不明显;晶界上也有孔洞形成,如图 71b 所示,但是孔洞仍然是相互独立的,并未在 TSV 中心部分相互联结形成裂纹。对于晶粒尺寸最小的 C 组样品,热时效后其晶界若隐若现,只有部分可见且并不明显,晶界上孔洞尺寸很小,数量也较少,如图 71c 所示。

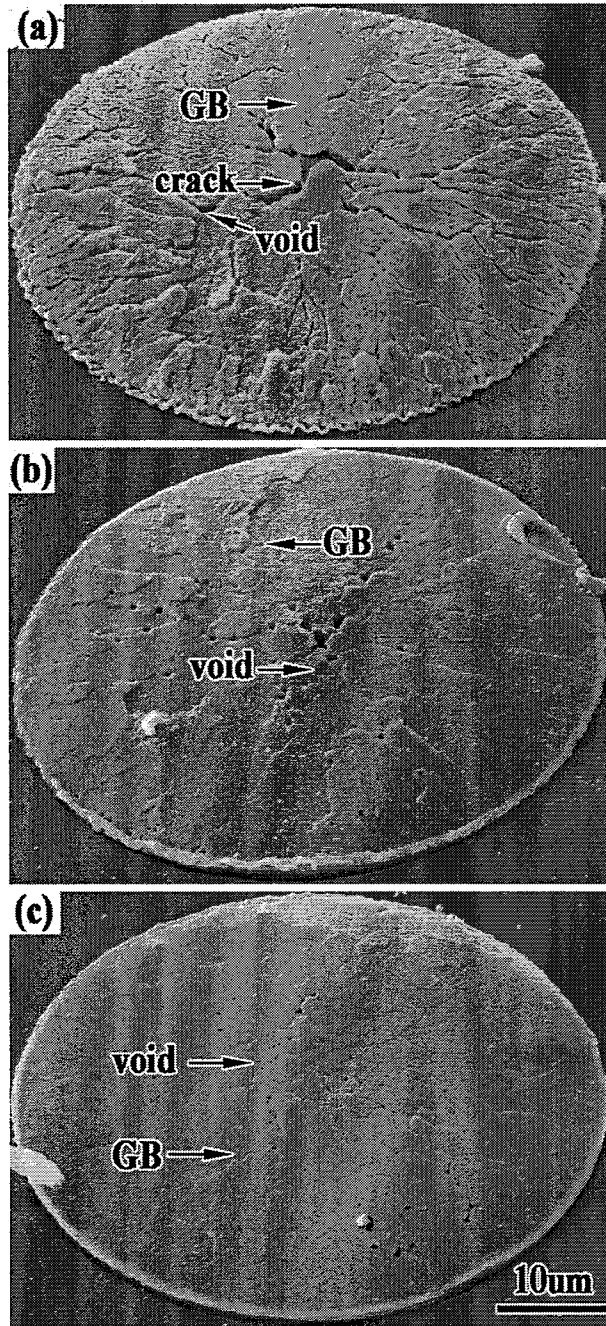


图 71 三种不同晶粒大小样品热时效 30 分钟后表明形貌：(a) 1.94 μm 样品，
(b) 1.60 μm 样品，(c) 0.98 μm

Fig. 71 SEM images of Cu-TSV after annealing, (a) sample A with grain size 1.94 μm , (b) sample B with grain size 1.60 μm , (c) sample C with grain size 0.98 μm

为了实现快速无孔填充，有的研究者采用了分步电镀的方法^[78,81]，即采用不同大小的电流密度分多步完成电镀填充，导致填充后的 TSV 晶粒组织不均匀分布。根据上文所知，不同晶粒大小的 TSV 样品热时效后挤出高度和表面形貌不

同，因此这种晶粒组织不均匀结构也势必会对 TSV 的可靠性产生一定的影响。为了验证以上的推测，采用分布电镀方法制得 D 组实验样品。其组织结构如图 72b 所示。图中晶粒可以分为黑色虚线标记外的小晶粒区和标记线内的中心大晶粒区。对其进行 400°C 热时效 30 分钟后可以看到小晶粒区凸起高出大晶粒区，两种尺寸晶粒的界面处出现了台阶，如图 72c 和 d 中所示。

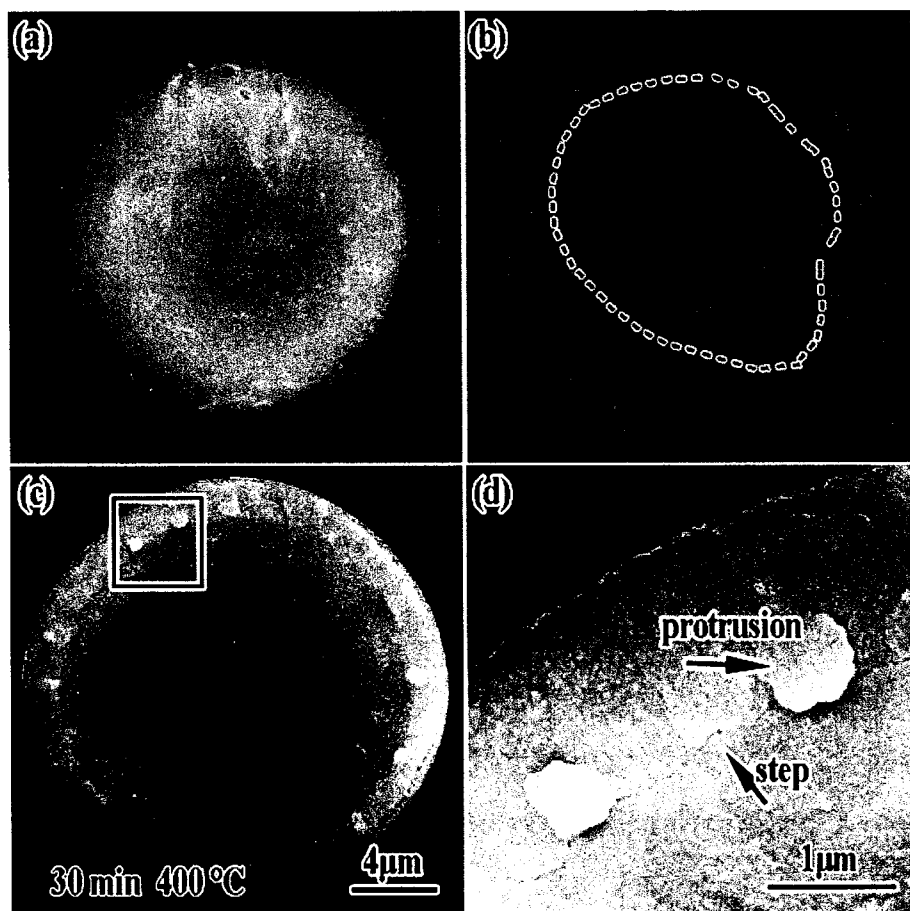


图 72 400°C 热时效后晶粒间裂纹对比；(a) 和 (b) 是初始状态，(c) 和 (d) 是 30min 后

Fig. 72 the reliability issues in nonuniformly distributed TSV (a) before annealing, (b) 15min, (c) 30min, (d) the EBSD map of (a), (e) close-up view of (b), (f) close-up view of (c)

5.4 分析与讨论

5.4.1 挤出机制

从 TSV 的挤出形貌可以看出，挤出由两部分构成：界面部分的垂直挤出和

从界面到中心逐渐增加的挤出。界面的垂直挤出说明界面发生了相对位移，即发生了界面滑移。而热时效后表面晶界显现出来说明 TSV 在热时效过程中发生了晶界滑移。因此 TSV 的挤出机理可以认为是界面滑移和晶界滑移的共同作用。

研究普遍认为扩散协同下的界面滑移常存在于很多材料体系中。比如颗粒增强金属^[177, 178]，纤维增强金属基复合材料^{[179] [180]}以及 TSV^[113]中。针对不同的材料体系，研究者们给出了相应的应变速率模型，对于 TSV 结构，Dutta^[113]也给出了应变速率与温度和应力的关系，如下所示：

$$\dot{\epsilon} = \frac{C\delta_i D_i \Omega}{kTh^2} \left[\tau_i + 2\pi^3 \left(\frac{h}{\lambda} \right)^3 \sigma_n \right]$$

式中：

C 是材料常数

δ_i 界面厚度

D_i 是扩散系数

Ω 是原子体积

λ 和 h 分别为界面周长和粗糙度

k 和 T 分别是波尔兹曼常数和温度

τ_i 和 σ_n 分别是界面剪切应力和正应力。

在此模型中，界面剪切应力是蠕变的驱动力，并且根据此模型，蠕变的发生存在临界应力，只有在临界应力以上才会发生蠕变。本实验中的 TSV 采用 Bosch 刻蚀工艺而成，形成了扇贝状的界面形貌，如图 73 所示。为了简便的描述以及分析界面上的受力状态，TSV 界面可以简化为周期波动的正弦曲线。当温度变化时，Cu 和 Si 热膨胀量不同，界面处产生剪切应力。在剪切应力的作用下，界面上产生周期性变化的正应力，包括弹性和热应力。界面上周期性变化的正应力驱动了界面滑移^{[113] [181]}。该界面滑移模型中包括体扩散和晶界扩散机制。当 $(\pi\delta/\lambda)(D_B/D_v) \gg 1$ 时，晶界扩散在界面滑移中占主导作用，此时，界面滑移速率与界面周期 λ 无关，而与界面波动幅值的平方逆相关，即与 $1/h^2$ 成正比；当 $(\pi\delta/\lambda)(D_B/D_v) \ll 1$ 时，体扩散在界面滑移中占主导作用。本文中根据界面相关几何数据计算出 $(\pi\delta/\lambda)(D_B/D_v) \approx 1.5 \times 10^4$ ，远远大于 1，因此界面滑移主要是晶界扩散起主导作用。

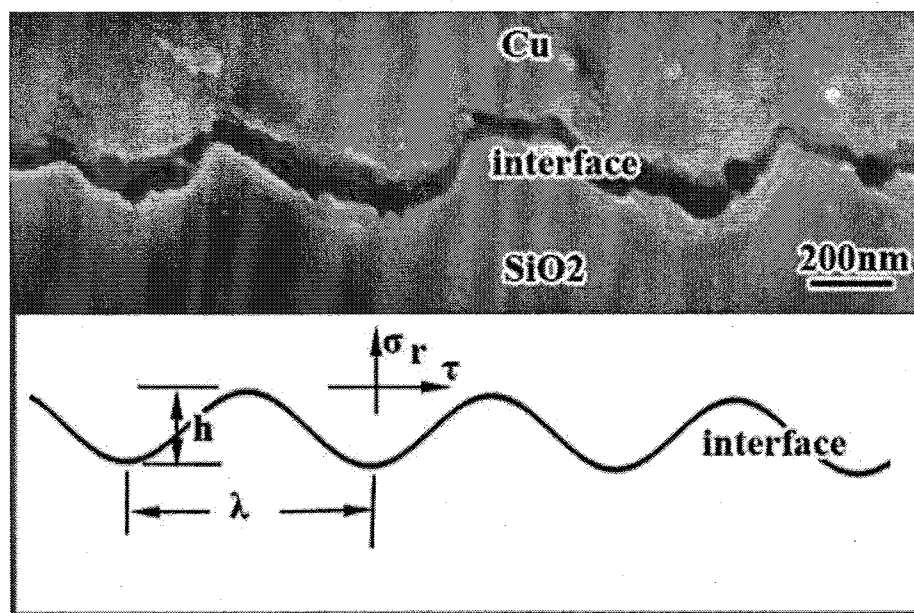


图 73 TSV 界面形貌以及其简化形式

Fig. 73 interface morphology of TSV

但是上述界面滑移模型中没有考虑 TSV 界面以内部分的晶界滑移。当晶粒尺寸较大时，稳态蠕变速率不随晶粒尺寸变化^[182]；然而当晶粒尺寸较小（小于 0.01mm）时，蠕变速率随晶粒尺寸减小而增加^[181]。根据对上述实验结果的分析，发现在 TSV 的热时效过程中，发生了晶界滑移。因此晶界滑移也是挤出的一个重要因素。

另外，晶界滑移过程伴随着孔洞的形成和增长，如图 71 所示。根据 Chawla^[168]的理论，这些孤立的小孔洞是由大量的空位聚集在晶界而形成。随着热时效时间的增加，Cu-TSV 中心出现了较大的孔洞甚至形成裂纹。值得注意的是这些孔洞都出现在晶界上。晶界上 Nabarro-Herring 应力扩散^[183, 184]可能是孔洞增长的原因。在 TSV 结构中，径向热应力从界面到中心逐渐递减，如图 75 所示。空位在应力梯度下从高应力的界面区扩散到低应力的中心部分，聚集形成孔洞，随着热时效时间的增加，孔洞相互联结形成裂纹。除了空位的扩散聚集，电镀留下的杂质也可能发生扩散聚集。一旦晶界上形成孔洞和裂纹就会弱化晶界。弱化的晶界更容易发生滑移。因此晶界滑移结合界面滑移造成了 Cu 的挤出。

5.4.2 晶粒大小对 TSV 热时效可靠性的影响

空位扩散和晶界滑移还与晶粒结构有关。这种相关首先体现在晶粒大小上，从上文的结果中可知小晶粒的 Cu-TSV 比大晶粒的 Cu-TSV 挤出更高。根据 Raj 和 Ashby^[181]的研究报道，晶界滑移造成的应变速率可以表示为如下：

$$\dot{\epsilon}_{gbs} = \frac{132\Omega\sigma\delta}{d^3kT} D_{gb}$$

式中：

β 是统一的常数

b 是伯格矢量

σ 是应力

d 是晶粒尺寸

k 是波尔兹曼常数

T 是温度。

从中可以看出应变速率与晶粒尺寸成反比，因此晶粒小的 Cu-TSV 挤出更高。但是此结论似乎与不同晶粒尺寸样品在热时效后的表面孔洞和晶界滑移量相悖。由上文结果可知，晶粒较大的样品热时效后表面上孔洞和裂纹更多，晶界凸显程度也更显著。这一结果似乎说明晶粒越大晶界滑移量越大，与晶界滑移理论相悖，具有“欺骗性”。下文将从挤出高度曲线来分析晶粒大小与晶界滑移量的关系。

图 74 给出了三组样品不同热处理时间下的挤出高度曲线。为了便于对比，所有曲线基底设置为相同高度。图中的每条曲线都是由界面的垂直部分和从界面到中间逐渐增加的挤出构成。分别统计相应的界面垂直挤出高度和中间逐渐增加的平均挤出高度。热时效 30 分钟后，A、B 和 C 组样品的中间逐渐挤出部分高度分别为 $0.49\mu\text{m}$ ， $0.71\mu\text{m}$ 和 $0.81\mu\text{m}$ 。根据上文讨论 TSV 中间逐渐挤出的部分是由晶界滑移造成的，因此初始晶粒尺寸越小，热时效后晶界滑移量越大，与 Raj 和 Ashby^[181]的晶界滑移理论一致，并且与 Joke^[114]报道的顶部含有一个晶粒的 TSV 样品热时效挤出高度小于顶部含有 3 个晶粒的 TSV 样品挤出高度相吻合。

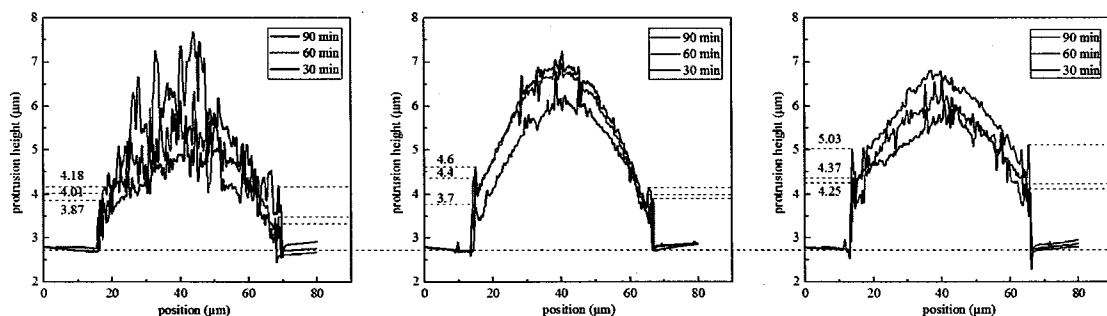


图 74 三种不同晶粒大小样品在不同热时效温度下的挤出高度曲线：(a) 初始晶粒尺寸为 $1.94\mu\text{m}$ ，(b) 初始晶粒尺寸为 $1.60\mu\text{m}$ ，(c) 初始晶粒尺寸为 $0.98\mu\text{m}$

Fig. 74 protrusion profile of Cu-TSV after annealing (a) sample grain size $1.94\mu\text{m}$, (b) sample grain size $1.60\mu\text{m}$, (c) sample grain size $0.98\mu\text{m}$

A、B 和 C 三组样品中的晶粒分布比较均匀，没有突变。而分布电镀法填充的 TSV 样品中晶粒分布不均匀，如图 72 所示，晶粒大小可以分为两个区域，一个是外圈的小晶粒区，另外一个为中心的大晶粒区。从上文讨论可知，晶粒小，应变速率较大，而晶粒大，应变速率相对较小。因此在外圈的小晶粒区热时效后，由于蠕变而造成挤出比内圈大晶粒区的挤出大，形成了如图 72c 和图 72d 中所示的台阶。两个区域的界面晶粒取向杂乱，成为空位和杂质扩散的有效障碍，随着时间的增加，空位和杂质在这个界面聚集形成孔洞。

5.4.3 组织结构对挤出的影响

热时效后样品表面形貌与挤出理论的不一致是晶粒大小以外的因素对晶界滑移造成的。首先，晶粒形状的分布也会影响空位的扩散和晶界的滑移。电镀填充 TSV 时电流密度较小，填充时 Cu 更倾向于从侧壁向中间生长，形成柱状晶粒，即大多数晶界方向是径向的，而且晶粒尺寸较大，如图 70a 和图 70b 所示。空位在应力梯度下，沿着径向的晶界向中心扩散，扩散过程中几乎不受到晶界的阻碍，因此空位最后更容易在中心部分聚集形成孔洞和裂纹，如图 71a 和图 71b 所示。当电镀填充 TSV 时所用电流密度较大时，容易形成晶粒尺寸较小的等轴

晶粒,如图 70c 所示,晶界的方向是随机的。空位在应力梯度下从界面向中心扩散时,如果遇到环向的晶界或者三叉晶界,空位扩散受阻而停下来聚集形成孔洞,因此最后孔洞的分布也比较均匀,如图 71c 所示。此外,TSV 中的杂质也对热时效后表面形貌有一定的影响^[69,185,186]。电镀电流密度较小,样品中残留的有机杂质较高,这些杂质在热时效时容易溢出到表面,使得表面形成孔洞,聚集成裂纹。而电镀电流密度较大,样品中残留的有机物较少,热时效时形成的孔洞也较少。

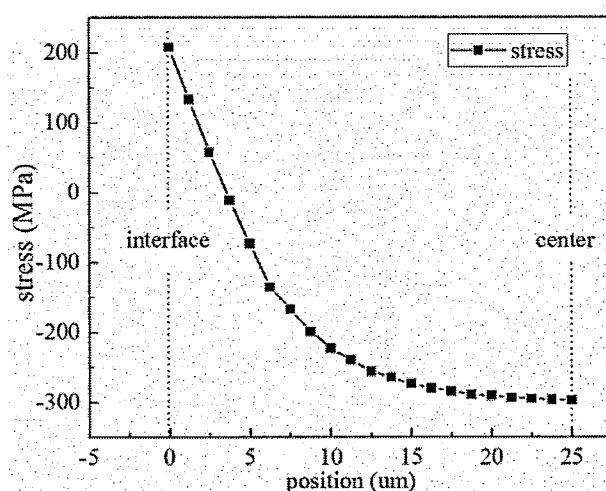


图 75 TSV 中从界面到中心的应力变化曲线

Fig. 75 radial stress from interface to center of TSV

5.4.1 有限元分析

为了揭示 TSV 在热时效过程中的应力状态和验证挤出的界面滑移和晶界滑移机制,本文对 TSV 的热时效过程进行了有限元模拟。有限元分析将界面滑移和晶界滑移统一起来。界面滑移模型和晶界滑移模型都具有如下形式:

$$\dot{\epsilon} = \frac{c\sigma^n}{T} \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right)$$

式中:

c 为常数;

σ^n 为应力;

n 为应力指数

T 为温度

Q 为激活能

k 为玻尔兹曼常数

但是 ANSYS 材料库中没有预置上式所示的材料模型,为此本文使用 ANSYS 二次开发工具 UPFs 定义了新的材料蠕变模型。主要是根据上式修改用户自定材料模型 usercreep 中的应变速率表达式,建立了 TSV 界面滑移和晶界滑移统一材料模型。有限元中所用的材料参数见表 14。为了真实准确的模拟界面形貌对界面滑移的影响,建立了具有周期波动的锯齿形状界面的 TSV 模型。然后模拟 TSV 的热时效过程。

表 14 有限元计算中所用材料参数^[113]

Table 14 properties and constants used in FEM

材料性能	铜	硅
热膨胀系数	16.5×10^{-6}	2.6×10^{-6}
杨氏模量, E (GPa)	115	130
晶格扩散激活能 (kJ/mol)	197	
晶界扩散激活能 (kJ/mol)	104	
界面扩散激活能 (kJ/mol)	55	
原子体积, Ω (m^3)	1.18×10^{-29}	
晶粒尺寸, d (μm)	1,1.5,2	
界面波动幅, h (nm)	245	
界面波动波长, λ (nm)	875	

图 76 给出了有限元模拟的 400°C 热时效 30 分钟后 TSV 中应变分布和挤出形貌。从图 76a 中的蠕变应变分布图可以看出,蠕变应变主要集中在 TSV 的

Si/Cu 界面及其附近, 并且主要分布于 TSV 靠近表面的上部分。作出上表面从界面到中心沿着 L1 路径的蠕变应变曲线, 见图中左下角曲线, 可以看出蠕变应变在界面处较大并且向着 TSV 中心急剧下降。为了验证挤出模型的正确性, 图 76b 给出了 TSV 挤出形貌和挤出高度。沿着 L2 路径作出表面上从界面到中心的挤出高度曲线, 见图中左下角。挤出高度曲线与实验所测形状相同, 即都是由界面处的垂直挤出部分和从界面到中心的逐渐挤出部分构成。而且从界面垂直挤出部分到中间的逐渐挤出部分之间有微小的高度回落, 这一细节也可以从挤出形貌的局部放大图中得到验证, 如图中左上角的挤出形貌局部放大图所示。模拟的挤出形貌和挤出高度与实验结果完全吻合。从有限元模拟的蠕变应变和挤出形貌来看, TSV 热时效过程中应变主要集中在界面部分, 从而发生了界面滑移。而且界面滑移对总的挤出起主导作用。晶界滑移对于总的挤出只是起到辅助作用, 与界面滑移和晶界滑移理论相符。模拟结果和理论与实验部分的高度一致说明了有限元中建立的 TSV 界面滑移和界面滑移统一理论的正确性。

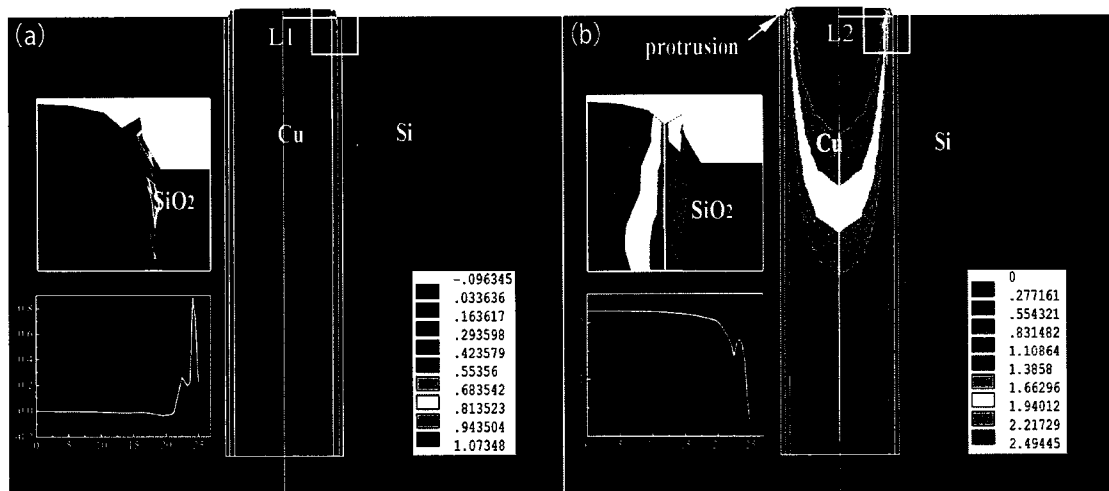


图 76 有限元模拟 TSV 热时效过程: (a) 蠕变应变分布, (b) 挤出形貌

Fig. 76 FEM with interfacial sliding model (a) creep strain distribution, (b) protrusion

5.5 本章小结

本章节通过对 TSV 进行热时效处理, 并对其表面形貌变化进行原位观察, 并结合有限元应力分析得到如下结论:

- 1) 热时效后 TSV 中的 Cu 挤出 Si 表面, 其挤出高度随着热时效时间增

加而增加，最后趋于稳定；TSV 的挤出高度与热时效的加热速率相关，加热速率越大，挤出高度越大；

2) TSV 的挤出高度与填充 Cu 的晶粒大小有关，在一定范围内晶粒越小，挤出高度越大；

3) TSV 的挤出机理为界面滑移和晶界滑移共同作用，其中界面滑移起主导作用；

4) TSV 热时效后表面和内部晶界形成孔洞，空位在应力梯度下的扩散聚集是孔洞形成的主要原因。

第六章 TSV 热循环可靠性

6.1 引言

TSV 制作工艺过程中会有温度变化和机械载荷, 由于不同的材料之间热膨胀系数不同, 器件中会产生温度变化引起的热应力。比如在温度升高的过程中, Cu 的膨胀量为 Si 的 5 倍, SiO_2 的 10 倍, 由此会在 Cu/Si 界面和 Si/ SiO_2 界面产生较大应力, 可能对相应界面产生分层和开裂等破坏, 严重影响器件的可靠性^[61, 66, 72, 97, 98]。因而, 硅通孔互连的热机械可靠性成为目前亟待解决的问题。本章将研究硅通孔互连在热循环下的可靠性。

6.2 实验流程

实验所用样品为通孔 TSV, 样品及其制备见 5.2 节。热循环实验采用从 -40°C 到 125°C 的温度循环, 其加载曲线如图 41 所示, 低温和高温保温分别为 10 分钟, 升温 and 降温速率是 $11^\circ\text{C}/\text{min}$, 一个完整周期历时 50 分钟。试样在电镀后首先进行表面抛光, 然后放入热循环箱。试验过程中每隔 30 周期, 取样并使用激光共聚焦显微镜和白光干涉仪对其表面进行观察, 并且通过扫描显微镜 (Quanta 600 和 Supra 55) 对其截面显微组织进行观察。

6.3 实验结果

试验后用白光干涉仪观察 Cu-TSV 表面, 其表面形貌如图 77 所示。图 77a, 图 77c 和图 77e 为 Cu-TSV 正面表面形貌, 而图 77b, 图 77d 和图 77f 为背面形貌。此处, 正面是指电镀后抛光的面, 而背面指减薄后漏出 Cu-TSV 的面。热循环前 TSV 正面 Cu 在界面的区域稍微凸出 Si 基体一些, 而背面 Cu 则稍有沉入 Si 基体且表面起伏不平, 如图 77a 和图 77b 所示。热循环 30 周次后, 正面

原本稍微凸出的 Cu 已经沉入了 Si 基体, 如图 77c 所示。同时, 从图 77d 中可以发现 Cu-TSV 背面 Cu 也倾入了表面。这种现象称为 TSV 的倾入。当热循环周次增加到 90 周时, TSV 正面和背面的 Cu 进一步倾入 Si 基体, 如图 77e 和图 77f 所示。

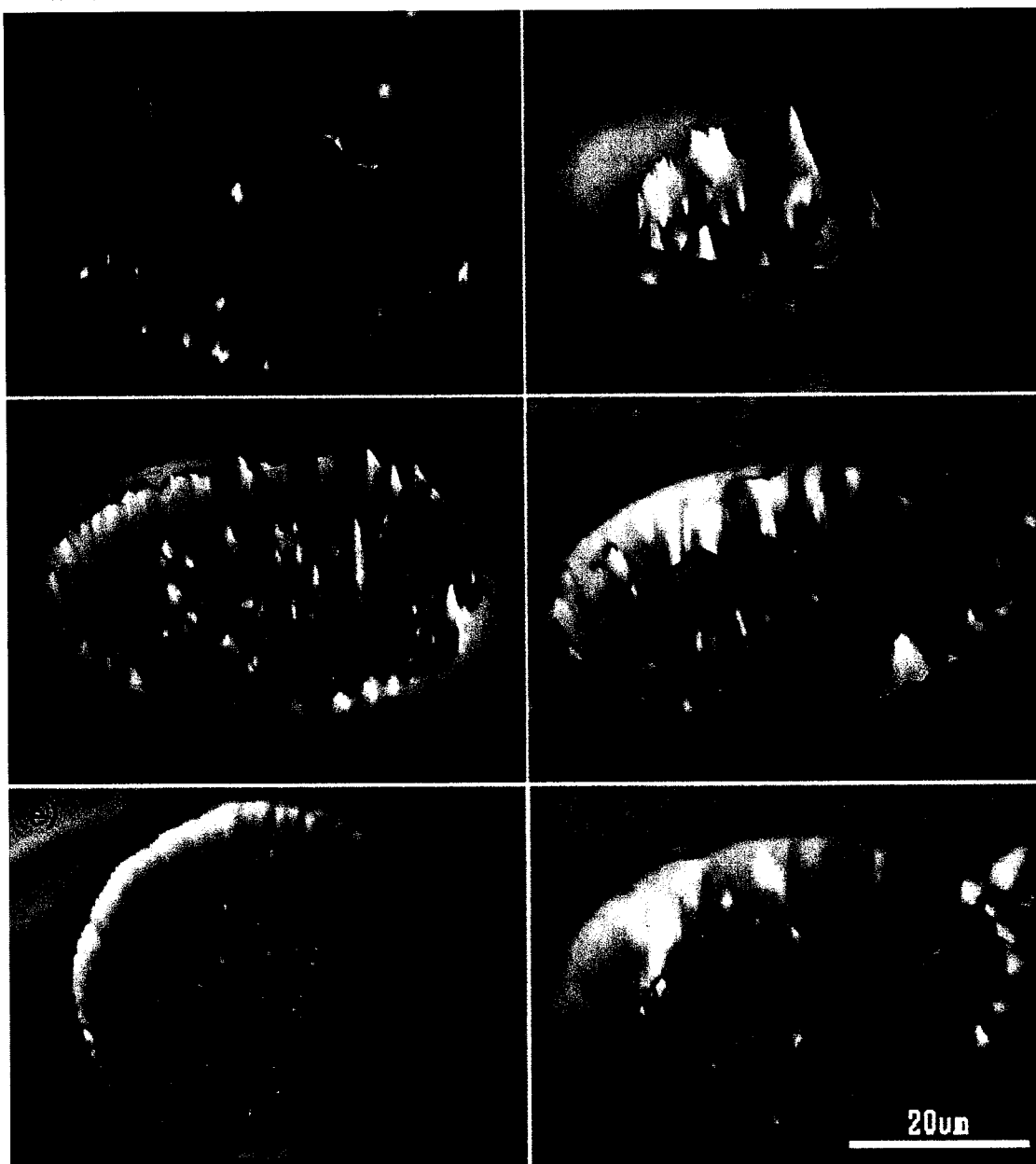


图 77 Cu-TSV 正面和背面形貌: (a) 正面热循环前, (b) 背面热循环前, (c) 正面 30 周后, (d) 背面 30 周后, (e) 正面 90 周后, (f) 背面 90 周后

Fig. 77 the topography of TSVs before and after thermal cycling: (a)before thermal cycling of frontside, (b)before thermal cycling of backside, (c) after 90 cycles of frontside, (d) after 90 cycles of backside, (e) after 210 cycles of frontside, (f) after 210 cycles of backside

统计每个样品上所有 Cu-TSV 的倾入深度, 得出其平均深度随热循环次数的曲线, 如图 78 所示。发现倾入深度随循环次数的增加而增加。正面倾入深度从 30 周次后的 $0.17\mu\text{m}$ 增加到 210 周后的 $0.72\mu\text{m}$ 后趋于稳定。而背面的倾入深度小于正面, 30 周后为 $0.15\mu\text{m}$, 210 周稳定后达到 $0.53\mu\text{m}$ 。倾入深度趋于稳定与 TSV 中应力逐渐释放有关^[113], 而背面的倾入深度比正面低可能是因为他们们的应力状态不同造成的。Liu^[187]报道 TSV 中上部的应力要大于底部的应力。

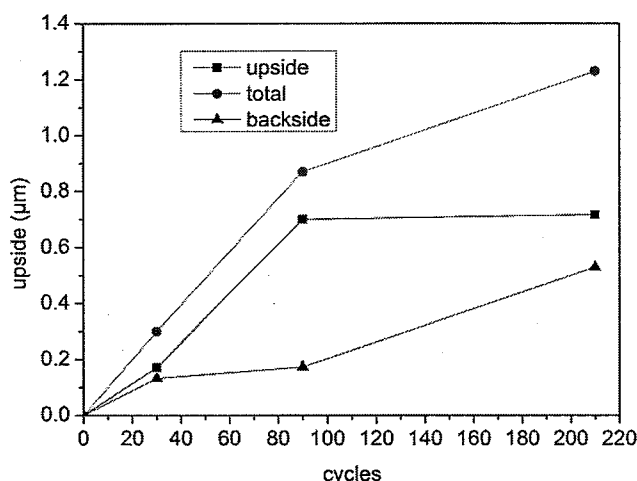


图 78 倾入深度随热循环周次曲线

Fig. 78 the intrusion height with number of cycles

图 79 给出了 Cu-TSV 倾入形貌的曲线图。值得注意的是图 79a 中, 靠近界面的地方倾入深度要比中心的倾入深度大。而对于背面来说, 界面处的倾入深度比中心的小, 如图 79b 所示。这一现象也可以从图 77e 和图 77f 中得到证实。在图 77e 中, 界面处的颜色比中心处的更深, 意味着界面处的倾入深度比中心部分要大; 而在图 77f 中心处的倾入深度比界面处的大, 并且在界面处形成了台阶。这一现象充分说明 Cu-TSV 的倾入是由于界面处发生了滑移。这一滑移现象是由于低应力下扩散蠕变造成的。Kumar 的研究中也指出了这一机制^[113]。

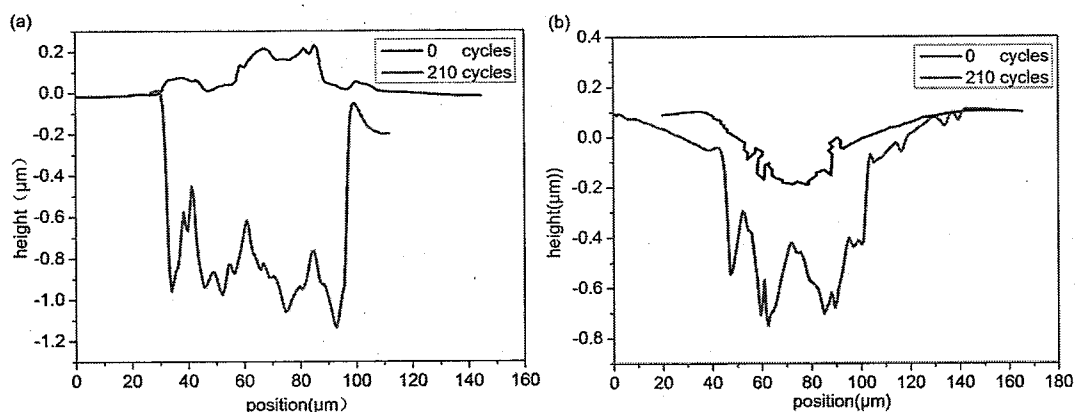


图 79 侵入形貌曲线图: (a) 正面, (b) 背面

Fig. 79 the intrusion height curve: (a) intrusion curve of frontside, (b) intrusion curve of backside

图 80 是 TSV 表面形貌扫描电镜图像。热循环前, TSV 的填充 Cu 表面平整而且光滑, 热处理后表面则变得粗糙不平, 并且在界面处出现了很多小的孔洞, 从界面局部放大图中可以观察到侵入台阶。此外, 界面处有裂纹形成, 如图 81 所示。

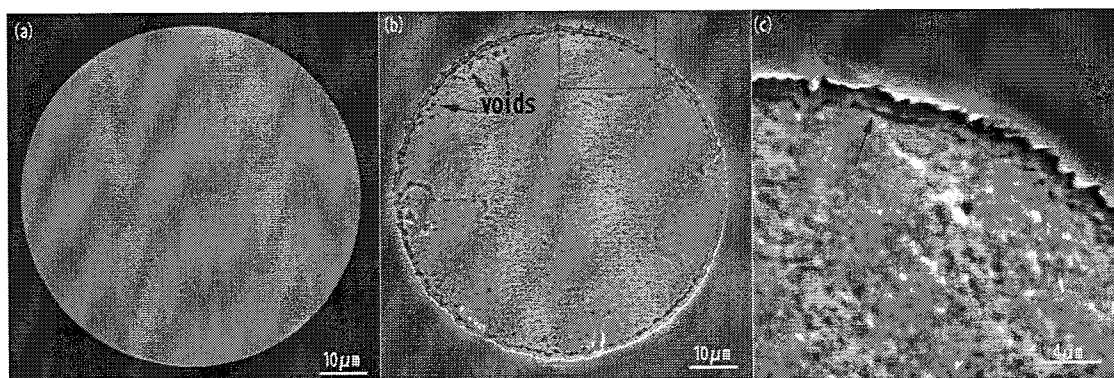


图 80 Cu-TSV 表面扫描形貌: (a) 热循环前, (b) 热循环 210 周后, (c) 图 b 的局部放大图

Fig. 80 SEM figures of topography of TSV: (a) before thermal cycling, (b) after 210 cycles; (c) close-up view of the interface

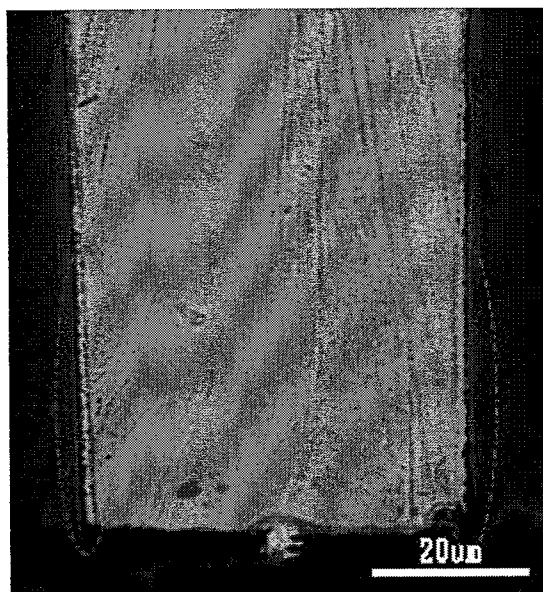


图 81 Cu-TSV 中界面处裂纹

Fig. 81 cracks at interface of TSV

为了充分理解界面应力及其对 Cu-TSV 的可靠性影响,有必要对界面应力分布进行分析。使用 ANSYS 软件对 Cu-TSV 在热循环过程中的热应力进行有限元计算。为了计算方便,对模型进行了简化,建立了对称的只包含一个 Cu-TSV 的三维模型,如图 82 所示。模型中包含了 $2\mu\text{m}$ 厚 SiO_2 绝缘层。x 方向是径向方向, y 方向则是轴向方向。边界条件采用周期性对称边界条件来反映真实的 TSV 阵列。在计算过程中设定最高温度 125°C 为零应力状态。计算中所采用的材料参数列于表 15。

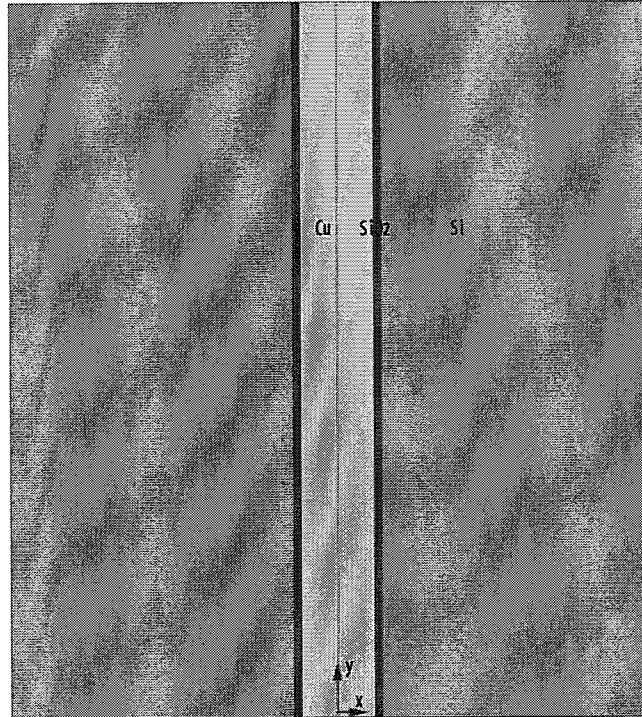


图 82 Cu-TSV 有限元模型

Fig. 82 FEM model of TSV

表 15 材料参数

Table 15 material properties used in FEM

材料	热膨胀系	泊松比	弹性模量 (GPa)
	数 (ppm/k)		
Si	2.6	0.28	130
Cu	16.5	0.33	85.56
SiO ₂	0.5	0.16	71.4

图 83 所示为 Cu-TSV 纵截面中轴向应力分布。左侧部分为 Cu，中间部分为界面 SiO₂，右边一侧为 Si。在图 83a 中 Cu 处于压应力而 SiO₂ 处于拉应力，在界面处构成一对剪切应力，这一应力状态也可以从界面应力曲线（图 83b，沿着 x 轴方向应力）中可以看出。图 84 是 Cu-TSV 纵截面径向应力分布。图中界面

处 Cu 和 SiO₂ 中存在较大的应力差，在界面处构成一对撕开型的应力。

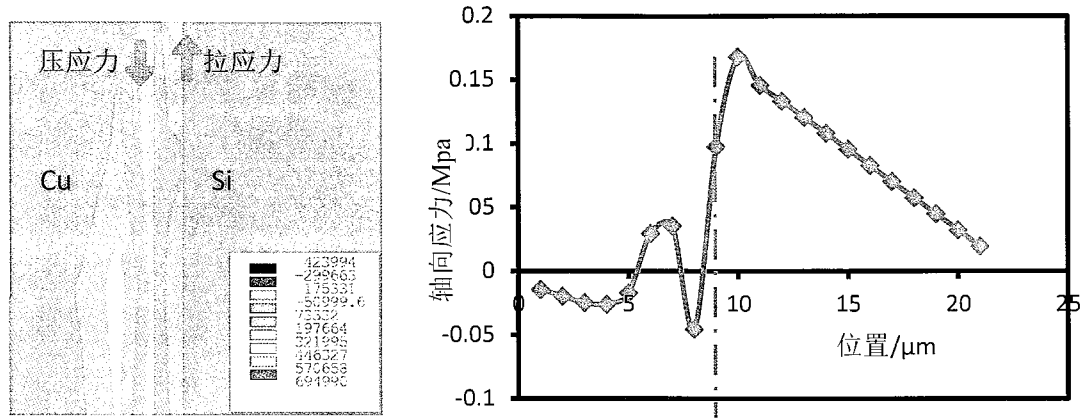


图 83 轴向应力分布: (a) 应力分布图, (b) 分布曲线

Fig. 83 axial stress distribution: (a) stress map, (b) stress curve

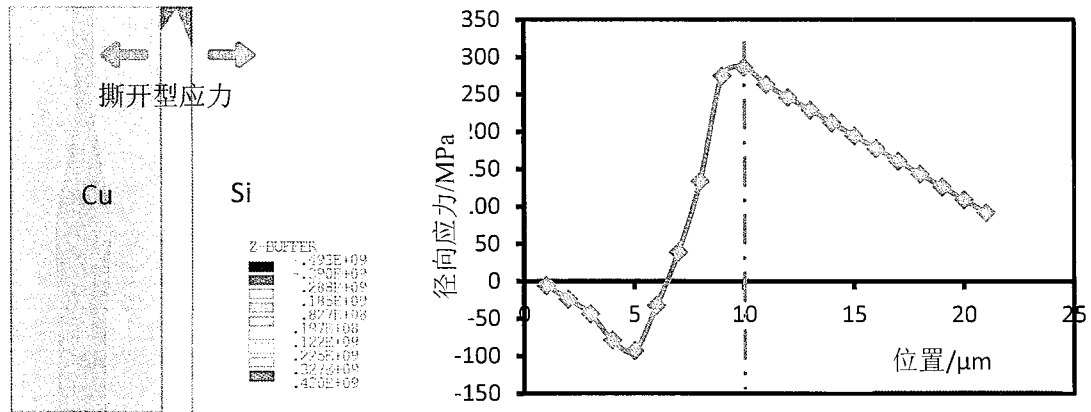


图 84 径向应力分布: (a) 应力分布图, (b) 分布曲线

Fig. 84 radial stress distribution: (a) stress map, (b) stress curve

6.4 倾入机理

针对以上 Cu 倾入 Si 表面的现象，从界面处产生滑移台阶可以判定其机理是界面处扩散蠕变造成的界面滑移。在加热和保温过程中，由于 Cu 的热膨胀系数比 Si 的大，使得 Cu 处于压应力。在高温时，Cu 在压应力的作用下发生蠕变，

当温度降到室温时形成了不可恢复的变形, 因此 Cu 倾入 Si 表面。这一蠕变过程主要表现在界面处 Cu 发生扩散蠕变而造成界面的滑移。

此外, Cu-TSV 中界面处的晶粒组织一般比中心部分更细小, 如图 85 所示, 这就意味着界面处存在更多的晶界, 晶界有利于扩散蠕变的进行。界面处细晶 Cu 相比于中心处的粗晶 Cu 更容易发生扩散蠕变, 因此会形成界面处比中心处倾入更深的现象。而对于背面中心处倾入较深的现象可能与背面减薄后表面形貌有关, 如图 77b 所示, 由于机械抛光造成 TSV 背面暴漏后 Cu 沉入 Si 基体, 这一初始形貌直接影响着热循环后倾入形貌。与此同时, 在扩散蠕变的过程中, Cu 发生空位扩散的现象, 当空位扩散到表面时会在晶界的地方聚集形成大的孔洞。由于界面处的晶粒细小, 空位在界面发生扩散更容易, 使得界面形成了更多的孔洞。从应力分析中可以看出, 界面处形成轴向的剪切应力, 同时存在径向的撕开型应力, 因此在界面处较容易形成裂纹。

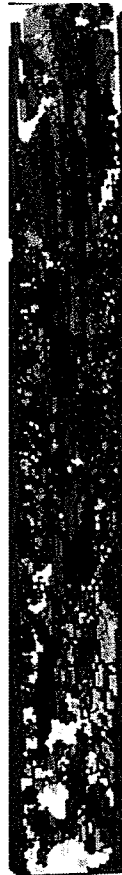


图 85 Cu-TSV 晶粒组织

Fig. 85 grain structure of TSV

6.5 本章小结

通过对 TSV 在-40—125℃温度循环下表面原位观察和有限元分析得到如下结论:

- 1) 研究了 Cu-TSV 在热循环下的可靠性,发现热循环后 Cu-TSV 的正面和背面都倾入表面。
- 2) TSV 的倾入深度随热循环周次增加而增加,并在 210 周次以后达到稳定。
- 3) TSV 热循环倾入后在界面处发现滑移台阶,TSV 的倾入过程是界面的蠕变造成的。

第七章 复合填充 TSV 的研究

7.1 引言

Cu-TSV 在热时效和热循环中会发生 Cu 的挤出或者倾入, 如图 65 和图 77 所示。Cu 的挤出或倾入会导致布线层产生变形甚至开裂, 严重影响 TSV 结构的可靠性, 而产生这一现象的主要原因是 Cu 和 Si 的热膨胀系数相差较大。为了解决这一问题, 首先可以考虑减小 Si 和填充 TSV 材料之间的热膨胀系数差。比如使用 FeNi 合金等具有低热膨胀系数的导电材料来代替 Cu。另一方面, 根据对 Cu-TSV 挤出现象的详细研究, 发现 Cu 的挤出机理主要是 Cu 的晶界蠕变和界面滑移, 如图 65 和图 66 所示。针对这一机理, 根据 Raj 和 Ashby 等人^[181]的研究, 界面和晶界第二相粒子可以降低蠕变速率^[188]。本章拟选择 Cu-ZrW₂O₈ 复合填充 TSV。因为 ZrW₂O₈ 具有负的热膨胀系数^[189-194], 和 Cu 构成的复合材料可以降低填充材料与基体 Si 之间的热膨胀系数差; 另一方面, ZrW₂O₈ 作为第二相颗粒加入, 分布在 TSV 侧壁界面和 Cu 内可以阻碍界面滑移和 Cu 的蠕变。

7.2 实验设计

复合填充 TSV 选用的通孔样品的孔径是 50 μm , 深 200 μm 。镀液是将一定量的 ZrW₂O₈ 粉末加入由 200g/L CuSO₄·5H₂O 和 100ml/L 的浓硫酸组成的溶液。实验中将通孔 TSV 粘在导电铜胶带上, 以铜胶带为基底, 自底向上复合沉积。电镀前需要对铜胶带除油, 酸洗, 去离子水清洗。粘好样品后, 将样品放入真空中抽气, 排出通孔中的气泡, 然后进行电镀。纯铜板作为阳极, TSV 通孔样品作为阴极, 使用 AUTOLAB204 提供反向脉冲电流进行电镀。反向脉冲电流参数如图 63 所示。实验电流密度分别为 30mA/cm²、40 mA/cm²、50 mA/cm² 和 60 mA/cm²。电镀时用恒温磁力搅拌镀液使粉体保持悬浮。

本实验采用水热合成的方法制备纳米 ZrW₂O₈ 粉体。以 ZrOCl₂·8H₂O 和 Na₂WO₄·2H₂O 为初始原料, 分别配制 0.15mol/L 的 ZrOCl₂ 溶液和 0.125mol/L 的

Na₂WO₄ 溶液。利用滴液漏斗通过双滴加法将 180mL 的 Na₂WO₄ 溶液和 90mL 的 ZrOCl₂ 溶液加入 45mL 的去离子水中（盛于 500mL 烧杯中）。上述滴加过程需要一边磁力搅拌一边滴加，同时控制其温度为 60℃。滴加结束继续恒温搅拌 2.5h 后加入 45mL 的浓盐酸，然后继续保持搅拌，直至混合液蒸发至 90mL，移入聚四氟乙烯内衬的不锈钢反应釜中，在 180℃恒温中反应 12h。水热反应产物用去离子水洗涤离心 5 次得到乳白色胶状体，然后在 80℃下烘干，得到前驱体 ZrW₂O₇(OH)₂(H₂O)₂，然后将此前驱体在 570℃下灼烧 3h，获得最终产物 ZrW₂O₈。实验流程图如图 86 所示。

本实验中制备得到的是 α-ZrW₂O₈（鉴定见实验部分的 X-RAY 分析），其热膨胀系数为 $-8.7 \times 10^{-6} \text{mK}^{-1}$ ，Cu 的热膨胀系数为 $16.7 \times 10^{-6} \text{mK}^{-1}$ 。一般认为，复合材料中如果其两相属于机械复合，则复合材料的热膨胀系数、热导率以及密度等物理性能具有加和性。因此不同 ZrW₂O₈ 含量的复合材料，其热膨胀系数可以表示为：

$$\alpha_{com} = \alpha_{ZrW2O8} V_{ZrW2O8} + \alpha_{Cu} V_{Cu}$$

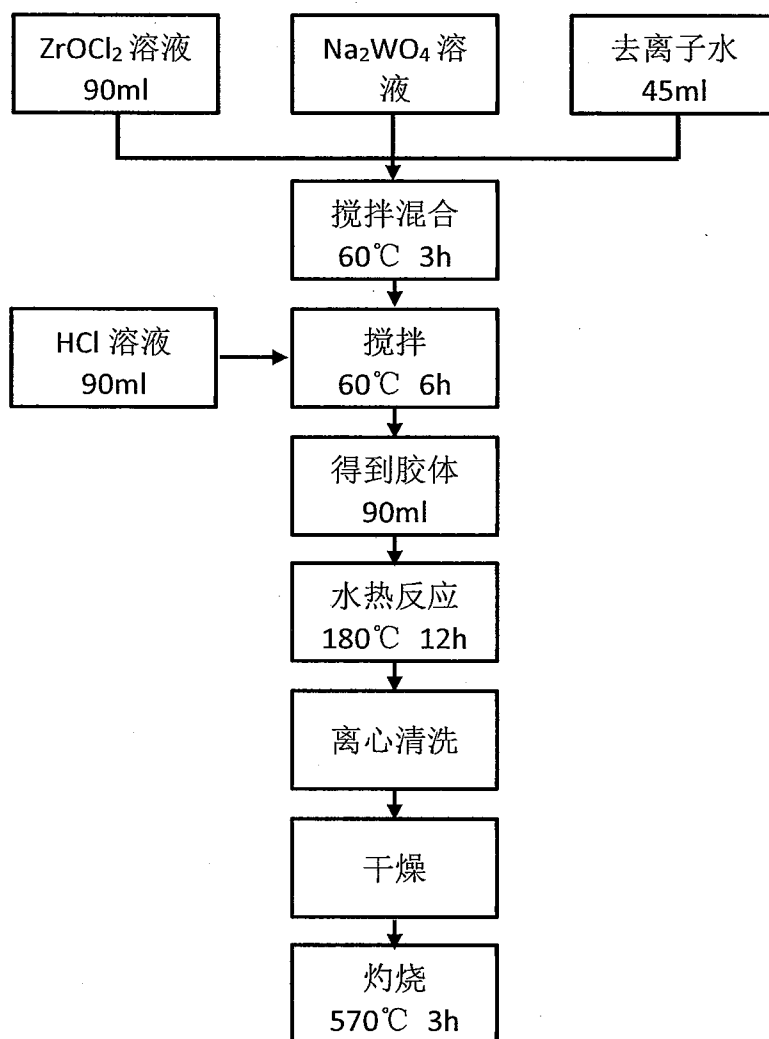
式中：

α_{com} 是 Cu-ZrW₂O₈ 复合材料的热膨胀系数

α_{ZrW2O8} ， V_{ZrW2O8} 分别是 ZrW₂O₈ 的热膨胀系数和体积分数

α_{Cu} ， V_{Cu} 是 Cu 的热膨胀系数和体积分数。

因此，根据上述公式，当 ZrW₂O₈ 体积分数达到一定值时，复合填充材料的热膨胀系数可以和硅芯片相匹配，从而消除热失配引起的微电子产品失效。

图 86 ZrW_2O_8 水热合成制备流程图Fig. 86 the flow scheme of composing ZrW_2O_8

7.3 实验结果

通过水热法制备的前驱体粉末如图 87 所示, 平均颗粒尺寸可达到 30nm。XRD 物相鉴定该粉末成分为 $\text{ZrW}_2\text{O}_7(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_2$ 。将此前驱体灼烧后, 发现粉末长大变为棒状, 如图 88 所示。棒的直径小于 1 μm , 而长度较大。XRD 物相鉴定灼烧后此种棒状物质为 ZrW_2O_8 , 其 XRD 图谱如图 89。由于棒状 ZrW_2O_8 较长, 填充 TSV 困难较大, 而且尺寸较大不能够实现实验设计中粉末所起的作用, 因此将棒状 ZrW_2O_8 进行球磨, 球磨三次以后得到较均匀的粉末, 如图 90 所示,

粉末中颗粒尺寸小于 $2\mu\text{m}$ 。

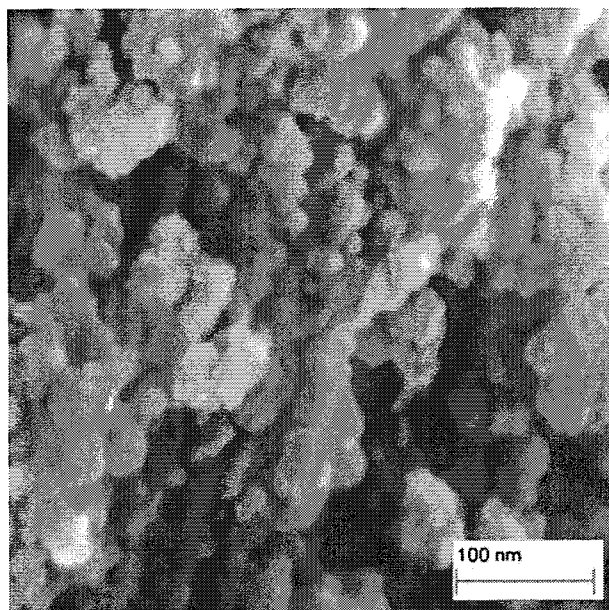


图 87 先驱体 $\text{ZrW}_2\text{O}_7(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_2$ 粉末

Fig. 87 precursor powder of $\text{ZrW}_2\text{O}_7(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_2$

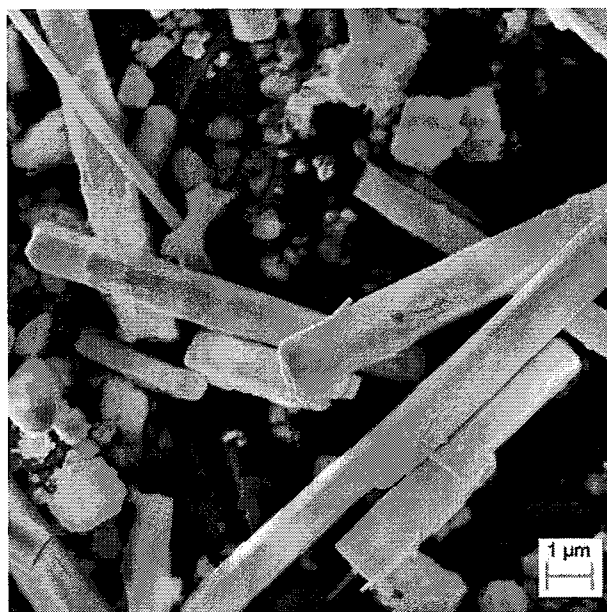
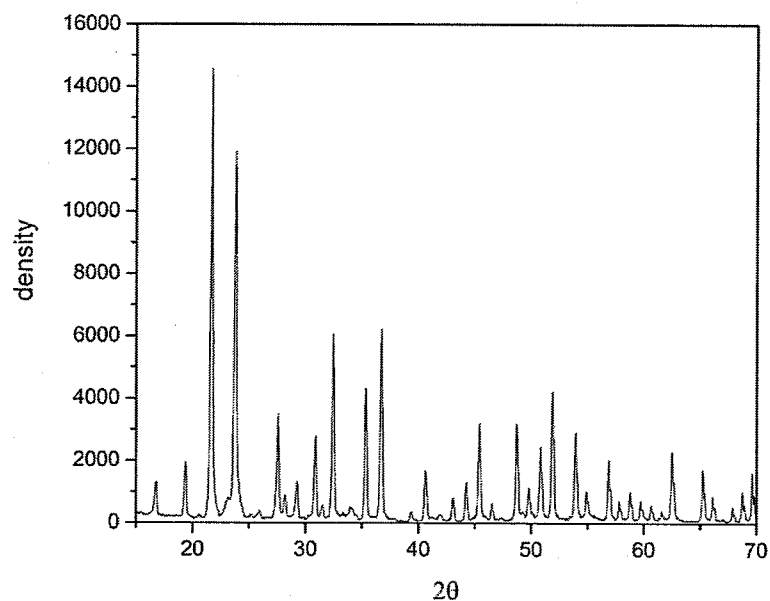
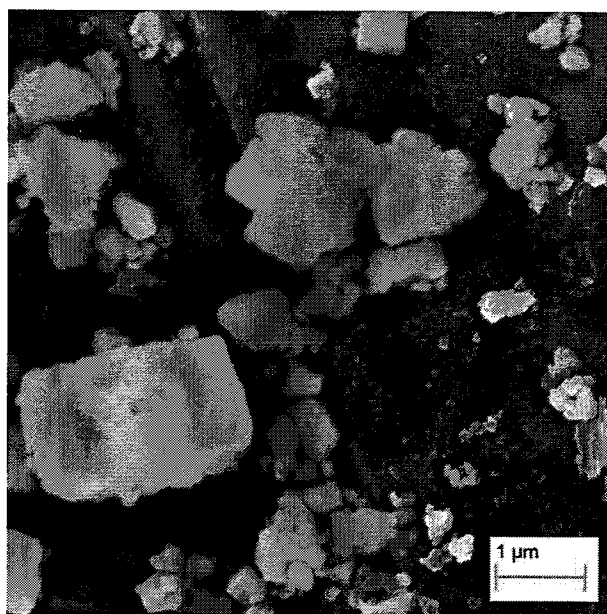


图 88 棒状 ZrW_2O_8

Fig. 88 rod-like ZrW_2O_8

图 89 ZrW_2O_8 XRD 图谱Fig. 89 XRD pattern of ZrW_2O_8 图 90 ZrW_2O_8 粉末Fig. 90 powder of ZrW_2O_8

复合电镀所使用电流密度范围从 $10\text{mA}/\text{cm}^2$ — $100\text{mA}/\text{cm}^2$ ，发现当电流密度小于 $30\text{mA}/\text{cm}^2$ 时，填充的为纯铜，没有粉末；而当电流密度大于 $60\text{mA}/\text{cm}^2$ 时，不能填满 TSV，中间形成空隙。图 91 中给出合适电流密度下填充好的 4 种

ZrW₂O₈ 含量不同的样品。30mA/cm² 的样品中只有零星的小白点，即 ZrW₂O₈ 颗粒。40mA/cm² 和 50mA/cm² 填充的 ZrW₂O₈ 颗粒有所增加，且均匀分布在 TSV 中。经过统计，这两种电流密度下的 TSV 中 ZrW₂O₈ 颗粒的占比为 3.7%。当电流密度增加到 60mA/cm² 时，ZrW₂O₈ 颗粒含量继续增加，均匀分布于 TSV 中，其占比达到了 30.7%。可见电镀电流密度对粉末含量有直接的影响。这是因为当电流密度较低时，Cu 的形核率较低，Cu 生长速度较低，电中性的 ZrW₂O₈ 颗粒容易被排出 Cu 表面。而当电流密度较高时，Cu 的形核率高，生长速度快，ZrW₂O₈ 颗粒来不及被排出而留在了 Cu 内部，因此形成了复合填充。此外，在图 91c 和图 91d 的界面上可以发现一些较大的孔洞，这些孔洞可能是因为电中性的 ZrW₂O₈ 颗粒靠近界面，阻碍了 Cu 的连续沉积造成。从图 91b-d 中 TSV 内部还可以发现均匀分布的一些小的黑色孔洞，这些孔洞是由于制备截面样品抛光时，颗粒较硬脱落造成的。

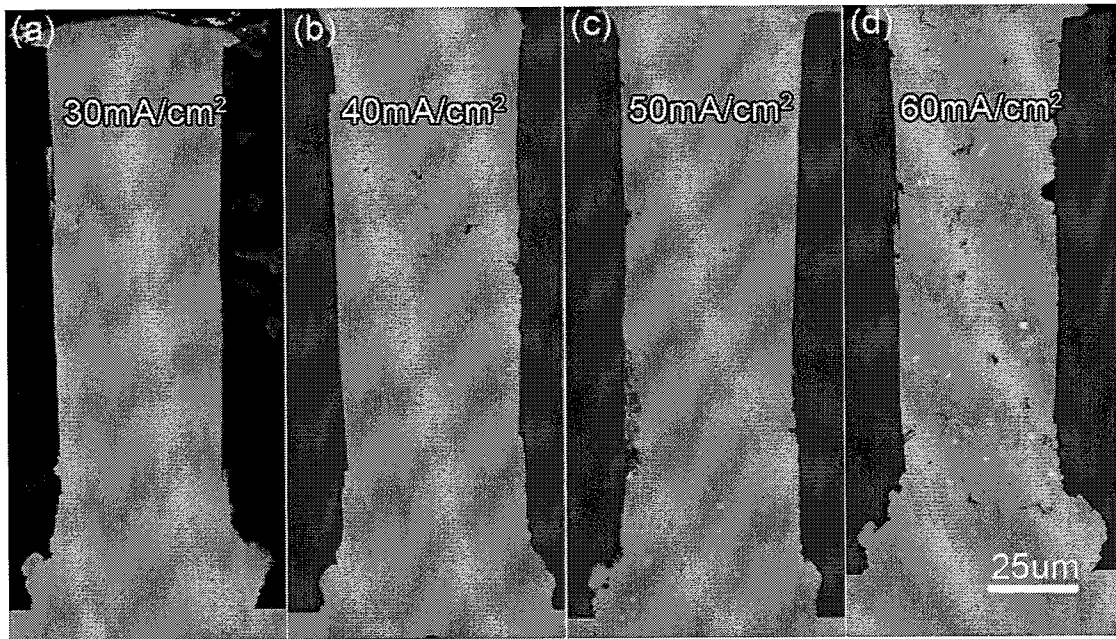


图 91 不同电流密度下填充的 TSV: (a) 30mA/cm², (b) 40mA/cm², (c) 50mA/cm², (d) 60mA/cm²

Fig. 91 samples filled with different current density: (a)30mA/cm², (b) 40mA/cm², (c) 50mA/cm², (d) 60mA/cm²

为了评价复合填充 TSV 的热可靠性，在热时效处理前后对其表面进行观察，测定表面形貌和高度。图 92a 为复合填充 TSV 机械抛光后的热处理前表面

形貌,可以看出,在样品表面,Cu-ZrW₂O₈孔与基体Si在界面处是平滑的并且位于同一平面。热时效处理后Cu-ZrW₂O₈被挤出了Si基体,如图92b所示,界面处挤出较多,而中心处挤出较少,形成U型挤出形貌。相比于Cu-TSV(图66),Cu-ZrW₂O₈TSV中心部分几乎没有挤出,且表面没有晶界显露出来,这可能是因为ZrW₂O₈的大多分布在晶界上,有效的阻碍了晶界滑移而使得中心部分挤出较少;而其界面处挤出较多是因为界面上ZrW₂O₈粉末较少,并且在界面上形成孔洞,如图91c和图91d,这些孔洞的存在使得热处理过程中界面滑移更加容易,因此界面处挤出相对较多。这一结果充分验证了先前的实验理论设计,即将ZrW₂O₈粉末加入Cu中,作为第二相粒子分布在Cu晶界上,抑制了热处理中Cu的晶界滑移。

由此可以合理推断,复合填充TSV的挤出高度与ZrW₂O₈粉末的含量相关。图93给出了不同电流密度下电镀样品的挤出高度。显而易见,当电流密度增加,即ZrW₂O₈含量增加时,平均挤出高度降低。挤出高度的降低不仅与ZrW₂O₈抑制了晶界滑移有关,还与复合填充材料的热膨胀系数相关,根据7.2节中实验设计理论可知,具有负热膨胀系数的ZrW₂O₈的加入使得复合材料的热膨胀系数降低,逐渐降低与硅的热失配,从而降低热处理过程中热应力,使得蠕变速率降低,减小了挤出高度。

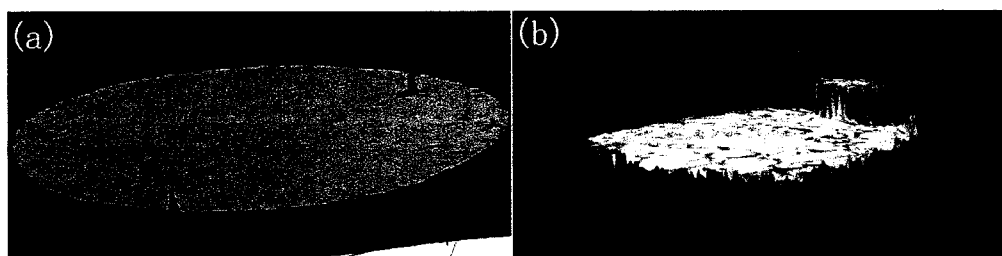


图 92 复合填充 TSV 的挤出形貌 (a) 热处理前; (b) 热处理后

Fig. 92 protrusion of Cu- ZrW₂O₈: (a) before annealing, (b) after annealing

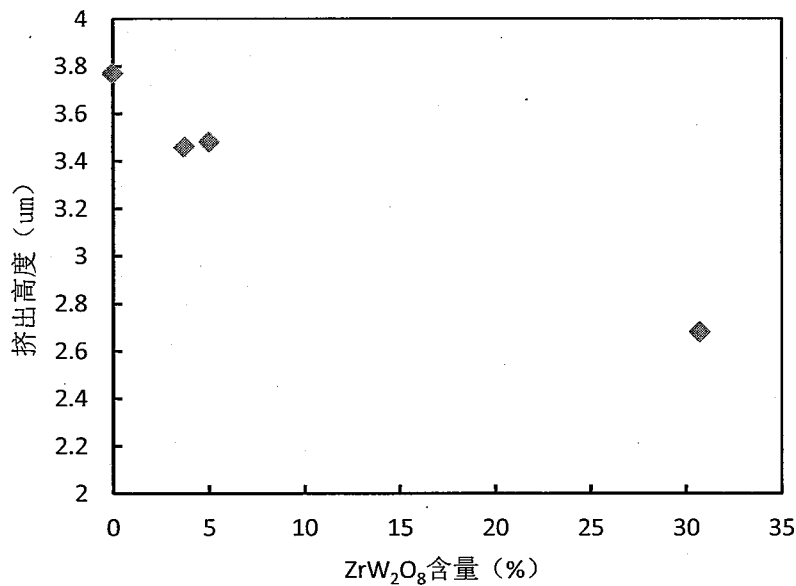


图 93 不同含量的粉末对挤出高度的影响

Fig. 93 the protrusion height of TSV samples with different content of ZrW₂O₈

显然, 复合填充 Cu-ZrW₂O₈ 于 TSV 中, 降低了热时效后 TSV 的平均挤出高度, 提高了其热可靠性。但是由于 ZrW₂O₈ 颗粒较大, 在界面处形成孔洞, 导致界面处挤出较高。而且颗粒较大影响 TSV 的其他物理性能, 比如导电性。因此为了提高 TSV 的可靠性, 下一步工作需要进一步减小 ZrW₂O₈ 颗粒的尺寸, 使其尺寸达到纳米尺度后进行填充。

7.4 本章小结

为了提高 TSV 热时效的可靠性, 本章节进行了 TSV 的复合填充并对其进行热时效得到如下结论:

- 1) 使用反向脉冲电镀成功制备了不同 ZrW₂O₈ 含量的复合 TSV 样品。
- 2) 随着粉末含量的增加, TSV 热时效后挤出高度降低, ZrW₂O₈ 粉末的添加成功抑制了晶界滑移。

第八章 全文总结

本论文主要研究了铜柱凸点在单场电迁移、热循环和多场（电迁移和热循环共同作用）下的寿命以及失效机理和 TSV 在热时效和热循环下的可靠性，得到了以下主要研究结果：

1. 铜柱凸点的单场电迁移下，测得其寿命数据并基于 Black 方程给出了寿命预测模型，其中电流密度指数为 1.64，电迁移激活能为 0.88eV。在电流作用下，铜柱凸点互连中最大电流密度发生在电流从 Cu 线流入铜柱的部位，远离了焊料区域，使得铜柱凸点抗电迁移性能增加。铜柱凸点电迁移失效模式有三种类型：电迁移主导的阴极侧 Cu/Cu₃Sn 界面开裂失效；柯肯达尔孔洞主导的阳极侧界面开裂失效；金属间化合物脆性断裂失效。
2. 铜柱凸点在热循环下有两种失效模式，分别为 Sn 焊料中部断裂和与铜柱凸点连接处的铜布线的断裂，后一种失效模式的样品比前一失效模式的样品具有更长的寿命。两种失效模式与其焊料 Sn 的晶粒结构相关，当焊料由单层晶粒构成时失效倾向发生于铜布线中，而当焊料由两层晶粒构成时失效倾向于发生在焊料中部。
3. 在多场作用下，根据累积损伤法则，将热循环和电流的耦合作用考虑进去，把热循环 Engelmaier 寿命预测模型和 Black 电迁移寿命预测模型统一起来，建立了铜柱凸点在多场下的寿命预测模型。设计了多场实验，测得了铜柱凸点在多场下的寿命，验证了多场寿命预测模型。铜柱凸点的多场失效模式分为三类：阴极侧耦合作用引起的阴极处 Cu₆Sn₅/Sn 界面开裂；电迁移引起的阳极侧 Cu/Cu₃Sn 界面开裂；热循环引起的焊料中间开裂。三种失效模式兼具单场电迁移和热循环的失效形式，但又不是二者简单叠加；两者的耦合作用对多场下的失效模式及服役寿命起着至关重要的作用。一方面电迁移作用增加了焊料中以及界面的孔洞，弱化了其强度，促进了焊料疲劳蠕变的失效进程。另一方面，热循环引起的交变应

力对电迁移原子迁移带来影响,并且对电迁移作用下形成的金属间化合物造成影响,从而加速了电迁移失效。

4. TSV 热时效后 Cu 挤出 Si 表面,其挤出高度随着热时效时间增加而增加,最后趋于稳定。加热速率越大,挤出高度越大;在一定范围内晶粒越小,挤出高度越大。TSV 的挤出机理为界面滑移和晶界滑移共同作用,其中界面滑移起主导作用。热时效后表面和内部晶界形成孔洞,空位在应力梯度下的扩散聚集是孔洞形成的主要原因。

5. TSV 热循环后 Cu-TSV 的正面和背面都倾入表面,其倾入深度随热循环周次增加而增加,并在 210 周次以后达到稳定。热循环倾入后在界面处发现滑移台阶,证实了 TSV 的倾入过程是界面的蠕变造成的。

6. 使用反向脉冲电镀成功制备了不同 ZrW_2O_8 含量的复合 TSV 样品。随着粉末含量的增加,TSV 热时效后挤出高度降低, ZrW_2O_8 粉末的添加成功抑制了晶界滑移。