

# 三维电子封装铜硅通孔凸起机理的相场晶体法研究

刘金欣<sup>1</sup>, 黄智恒<sup>1</sup>

1. 材料科学与工程学院, 中山大学, 广东省, 广州市

**简介:**近年来, 半导体制造业正开始过渡到“超越摩尔”(More than Moore)的三维集成。然而, 由热应力引起的铜硅通孔凸起是三维电子封装中重要的可靠性问题, 会影响到器件的功能和完整性。为研究铜硅通孔凸起的机理, 本文采用相场晶体法从原子尺度模拟重现硅通孔的凸起过程。

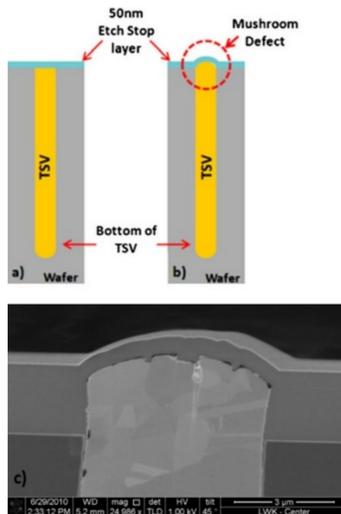


图 1. 铜硅通孔的凸起 [1]

**计算方法:**在使用COMSOL Multiphysics建立相场晶体法模型时, 我们采用的是基本模块, 即Mathematica模块。

相场晶体法的自由能泛函及控制方程为:

$$F[\rho] = \int d\vec{r} \left\{ \frac{\rho}{2} [r + (\nabla^2 + 1)^2 (\nabla^2 + Q^2)^2] \rho + \frac{\rho^4}{4} \right\}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \rho}$$

由于动力学方程为高阶非线性偏微分方程, 在求解时, 需要对方程进行降阶求解。

硅通孔的边界条件是根据所施加载荷所决定的, 即通过P. Stefanovic “惩罚项”的方法[2], 施加“收缩边界条件”。

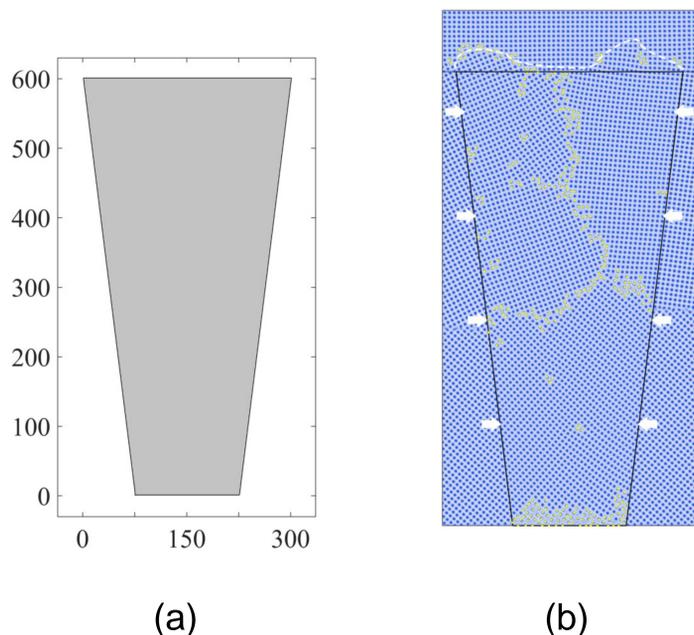


图 2. (a) 硅通孔模型示意图 (b) 硅通孔样品在压缩应变作用下的凸起, 白色虚线勾勒出凸起的轮廓

**结果:**在外加压缩载荷作用下, 观察到铜硅通孔内位错的滑移与攀移运动, 如图3所示。

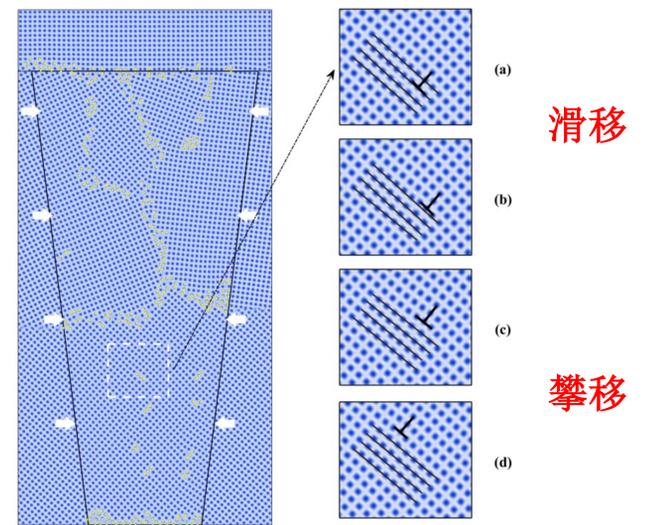


图 3. 在压缩应变作用下, 硅通孔样品中位错的运动: (a)  $t = 7000$ , (b)  $t = 8000$ , (c)  $t = 15000$ , (d)  $t = 16000$

**扩散蠕变模型:**通过模拟结果发现, 铜硅通孔内晶粒的变形可以使用扩散蠕变来进行描述。可以用以下表达式来描述:

$$\dot{\epsilon} \propto C \left( \frac{1}{d} \right)^p$$

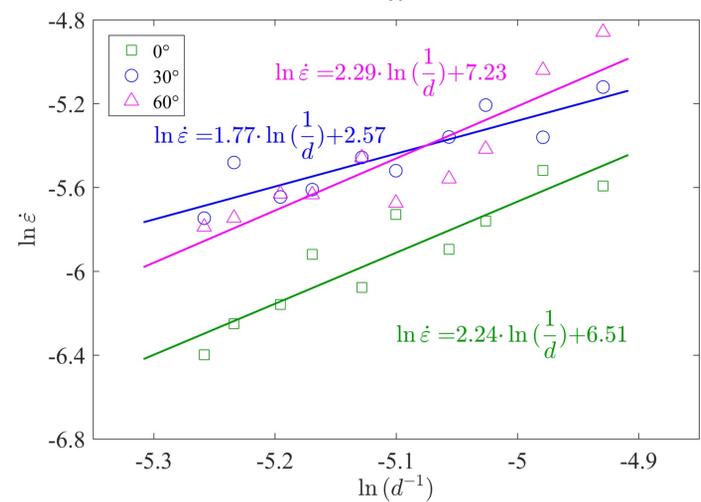


图 4.  $\ln \dot{\epsilon}$  与  $\ln(d^{-1})$  之间的关系

通过拟合得到晶粒指数  $p$  分别为 2.24, 1.77, 2.29, 表明, 硅通孔的凸起机制包括Coble蠕变和Nabarro-Herring蠕变的共同作用。另外, 这一指数也表明, 原子或空位通过晶格扩散比通过晶界扩散造成的变形贡献大, 也即是说, Nabarro-Herring蠕变的贡献较Coble蠕变大。

**结论:**仿真结果表明, 硅通孔在外加压缩载荷的作用下产生凸起现象, 同时观察到硅通孔内位错的滑移和攀移运动等现象。此外, 本文还使用扩散蠕变模型来解释铜硅通孔的凸起行为。通过模拟仿真, 可以设计调节硅通孔内部的微观结构, 从而抑制凸起的产生。

**参考文献:**

1. L. Kong *et al.*, Microelectronic Engineering, 2012, 92:24 - 28
2. P. Stefanovic *et al.*, Physical Review Letters, 2006, 96(22):225504