

DOI:10.16356/j.1005-2615.2017.04.010

内连导线线宽对沿晶微裂纹演化的影响

杜杰锋 黄佩珍

(南京航空航天大学机械结构力学及控制国家重点实验室,南京,210016)

摘要:基于应力诱发表面扩散的经典理论,用有限元法模拟了线宽对铜内连导线中沿晶微裂纹演化的影响。数值模拟结果表明:随着线宽的减小,椭圆形沿晶微裂纹存在分节与不分节两种演化分叉趋势,且演化分节存在临界线宽 \bar{h}_c ; 当 $\bar{h} \leq \bar{h}_c$ 时,沿晶微裂纹分节成 3 个新的沿晶微裂纹;当 $\bar{h} > \bar{h}_c$ 时,沿晶微裂纹圆柱化。沿晶微裂纹分节时间 \bar{t}_f 随线宽的减小而减小,即减小线宽会加速微裂纹分节。临界外载 $\bar{\sigma}_c$ 与临界形态比 β_c 随线宽的减小而减小,即减小线宽有利于沿晶微裂纹分节。临界外载和临界形态比随晶界能与表面能比值的增大而减小,且沿晶微裂纹比晶内微裂纹更易发生分节。

关键词:沿晶微裂纹演化;内连导线;应力迁移;线宽;有限单元法

中图分类号:TG113 **文献标志码:**A **文章编号:**1005-2615(2017)04-0518-06

Effect of Line Width on Intergranular Microcrack Evolution in Interconnects

DU Jiefeng, HUANG Peizhen

(State Key Laboratory of Mechanics and Control of Mechanical Structures, Nanjing University of Aeronautics & Astronautics, Nanjing, 210016, China)

Abstract: Based on the classical theory of surface diffusion induced by stress migration, a finite element program is developed for simulating the evolution of intergranular microcracks in copper interconnects. The numerical results show that there exists a critical value of the line width under the biaxial tensile stress state. When the line width is equal or less than the critical value, the intergranular microcrack will grow and split into three small microcracks along the grain boundary. When the line width is greater than the critical value, the microcrack will directly evolve into a cylinder. The splitting time of the intergranular microcrack reduces with the line width decreasing, which means that the decrease of the line width will accelerate the splitting process. Both the critical value of the stress and that of the aspect ratio decrease when the line width decreases, that is, the decrease of the line width is beneficial to the microcrack splitting. The critical values of the stress and the aspect ratio decrease when the ratio of the grain-boundary energy to the surface energy increases. And it is easier for the intergranular microcrack to split than the intragranular microcrack.

Key words: intergranular microcrack evolution; interconnects; stress migration; line width; finite element method

基金项目:江苏省自然科学基金(BK20141407)资助项目;机械结构力学及控制国家重点实验室自主课题(MCMS-0215G01)资助项目;江苏高校优势学科建设工程资助项目。

收稿日期:2017-01-04;**修订日期:**2017-03-23

通信作者:黄佩珍,女,教授,博士生导师,E-mail:pzhuang@nuaa.edu.cn。

引用格式:杜杰锋,黄佩珍.内连导线线宽对沿晶微裂纹演化的影响[J].南京航空航天大学学报,2017,49(4):518-523.
DU Jiefeng, HUANG Peizhen. Effect of line width on intergranular microcrack evolution in interconnects[J]. Journal of Nanjing University of Aeronautics & Astronautics, 2017, 49(4): 518-523.

随着现代科技的发展,微电子器件和微机电系统正高速地向微型化推进。微器件中广泛应用微/纳米尺度低维材料,如金属内连导线,以满足微系统高度集成化和高速微型化的要求。研究发现内连导线的应力失效速度与其尺寸效应密切相关^[1-2]。因此,研究线宽对金属内连导线中微裂纹演化的影响具有重要的理论和工程应用价值。

数值模拟是应力诱发下微裂纹形态演化的主要研究方法^[3-11]。Levitas等^[12]对应力诱发表面扩散下微结构相变的现象提出了解析解并进行了有限元模拟。Ogurtani和Akyildiz^[13]研究了在电迁移和热应力梯度作用下孔洞形貌演化。Shewmon^[14]对于孔洞的研究结果表明在小尺寸微裂纹的演化过程中,表面扩散起主导作用。Pan等^[15]研究发现表面张力与晶界张力的共同作用决定了多晶固体颗粒的表面形貌。

包含表面扩散和蒸发-凝结机制的仿真微结构演化的有限元方法首次由Sun和Suo^[16]提出,He等^[17-18]将此方法推广至外场诱发下微结构演化。本文沿用此方法,详细分析仅在表面扩散下线宽对内连导线中沿晶微裂纹演化的影响,且采用如图1所示的模型。

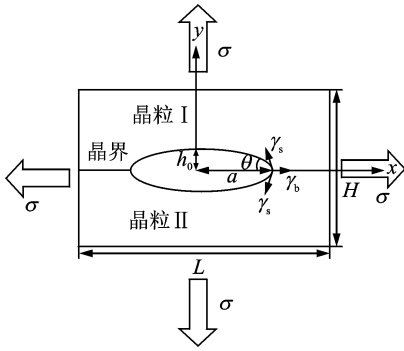


图1 内连导线中沿晶微裂纹模型

Fig.1 Simplified model of an intergranular microcrack in a conductor

图1所示为铜内连导线中沿晶微裂纹模型。假设铜内连导线发生理想弹性形变,垂直于平面的维度远远大于平面上的两个维度,则可将该问题简化为平面应变问题,其横截面即表示微裂纹的裂腔表面。裂纹形貌由形态比 $\beta = \frac{a}{h_0}$ 确定,其中 a 与 h_0 分别表示椭圆在 x, y 方向上的半轴长。令 H 表示内连导线实际宽度,则 $\bar{h} = H : h_0$ 表示量纲一化线宽。

在考虑形貌演化的因素时,不仅要考虑载荷引起的应力场作用,同时要兼顾晶体内部的表面能作用与晶界处的晶界能作用,并假设这三者的作用相

互独立。此外,晶界与裂面相交处在表面能 γ_s 与晶界能 γ_b 共同作用下存在晶界热蚀沟现象,且 2θ 为晶界三叉点处的二面角(图1)。

1 有限元方法

1.1 微结构演化的弱解描述

当微结构表面同时存在表面扩散和蒸发-凝结两种质流过程时,表面扩散驱动力 \mathbf{F} 与蒸发凝结驱动力 \mathbf{p} 作用下系统自由能的减少量 $-\delta G$ 为^[16]

$$\int_{\text{surface}} \mathbf{F} \cdot \delta \mathbf{I} ds + \int_{\text{surface}} \mathbf{p} \cdot \delta i ds = -\delta G \quad (1)$$

式中: $\delta \mathbf{I}$ 为表面扩散下的物质虚位移; δi 为蒸发-凝结下的表面法向虚位移。

根据Herring理论^[19],采用线性动力学原理

$$\mathbf{J} = M\mathbf{F} \quad (2)$$

$$j = mp \quad (3)$$

式中: \mathbf{J} 为表面扩散的流量; j 为蒸发-凝结下表面法向速度; M 与 m 分别为表面扩散与蒸发-凝结的原子迁移率。

结合质量守恒定理,表面扩散与蒸发-凝结机制下的弱解描述为^[16]

$$\int \left\{ \frac{\mathbf{J} \delta \mathbf{I}}{M} + \frac{(\mathbf{v}_n + \partial \mathbf{J} / \partial s) [\delta \mathbf{r}_n + \partial (\delta \mathbf{I}) / \partial s]}{m} \right\} ds = -\delta G \quad (4)$$

式中 \mathbf{v}_n 和 $\delta \mathbf{r}_n$ 分别为两种机制下的微结构表面的真实法向速度和表面法向虚位移。

1.2 系统自由能

在一般情况下,微结构系统的总自由能由多个部分组成,如表面能、晶界能、化学能以及弹性能等。在图1所示的模型中,假定机械载荷仅体现为对位移的控制,而不存在载荷对表面演变过程的作用;且系统的总自由能仅包括表面能、晶界能和应变能,即

$$G = \int_{\text{surface}} \gamma_s dA + \int_{\text{grain boundary}} \gamma_b dA + \int_{\text{volume}} w dv \quad (5)$$

式中 w 为应变能密度。由于微裂纹形态演化过程比较快,所以假定固体在微裂纹演化过程中始终处于机械平衡状态。因而可确定在任何时刻、任何给定的表面构形下的系统应力场以及相应的应变能密度。

1.3 有限单元法

二维沿晶微裂纹的表面可用许多线性单元来拟合。单元节点的坐标及物质位移 \mathbf{I} 形成广义坐标 q_i ,广义速度为 \dot{q}_i ,表面虚位移则可表示为 δq_i 。对式(5)进行积分,左端可得含 \dot{q} 及 δq 的双线性型表达式,右端则为关于虚位移的总自由能变

化,表达式为

$$\delta G = - \sum f_i \delta q_i \quad (6)$$

式中 f_i 为广义力。两端消去 δq_i 后可得

$$\sum_j H_{ij} \cdot \dot{q}_j = f_i \quad (7)$$

式中 H_{ij} 为粘度矩阵中的变量。

基于以上控制方程,如给定当前构形的沿晶微裂纹,使用当前的广义坐标计算式中的粘度矩阵 H 以及载荷向量 f ,通过 Gauss-Seidel 迭代求解式(7),得出各节点的广义速度为 \dot{q}_i 。已知节点速度,对于给定的微小时间增量 Δt ,可得到更新表面的节点位移。循环该过程,即可模拟出沿晶微裂纹的形貌演化过程。

1.4 边界条件

在如图 1 所示的晶界与裂面的三叉点处必须满足边界条件

$$\cos\theta = \frac{\gamma_b}{2\gamma_s} \quad (8)$$

由于沿晶微裂纹模型以及施加的电场关于 x 轴对称,第 1 个节点和第 NG 个节点处原子流量和 y 轴方向速率均为零,即

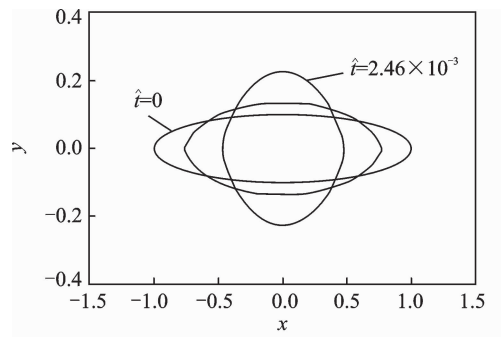
$$J_1 = J_{NG} = 0 \quad (9)$$

$$\dot{y}_1 = \dot{y}_{NG} = 0 \quad (10)$$

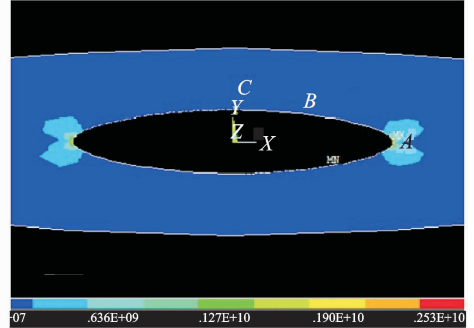
2 计算结果与分析

基于所建立的有限单元控制方程,采用六节点三角形单元,应用 Fortran 语言编制相应程序,数值分析双向等值拉应力诱发表面扩散下铜内椭圆形沿晶微裂纹的演化规律。仅在表面扩散下的微裂纹在形态演化过程中其腔体的总体积应保持为常数。计算结果表明本文计算精度可靠。为便于计算,采用量纲一化应力 $\hat{\sigma} = \sigma h / \gamma_s$, 量纲一化时间 $\hat{t} = t M \gamma_s / h_0^4$ 和量纲一化线宽 $\hat{h} = H / h_0$ 。

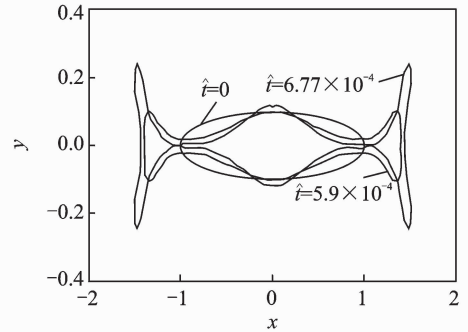
图 2 分别给出了 $\hat{\sigma} = 10, \beta = 10$ 时沿晶微裂纹在线宽 $\hat{h} = 30, 15$ 和 10 下的演化过程。由图 2(a) 可见,对于初始时刻为椭圆形的沿晶微裂纹,由于裂纹两端的曲率大于裂面中心的曲率,相应的表面能驱动原子由中心裂面向裂纹尖端迁移,导致微裂纹裂尖钝化并向中心收缩。由应力分布云图(图 2(b))可知, A, B, C 处的应变能密度关系为 $\omega_A > \omega_B > \omega_C$ 。在应变能诱发的表面扩散驱动力作用下, A 处的原子向 C 处方向扩散。而随着线宽的减小, $\omega_A > \omega_C > \omega_B$ (图 2(d)), A 处的原子向 B 处方向扩散, C 处的原子向 B 处方向扩散。在化学位差与应变能诱发的两种扩散驱动力作用下,原子会在



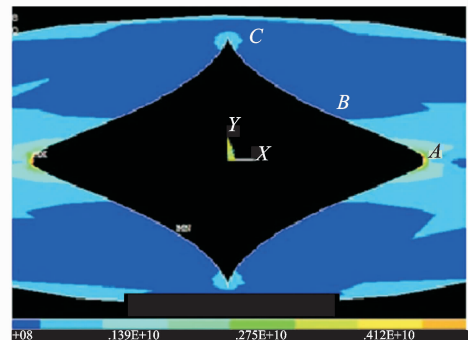
(a) $\hat{h}=30$



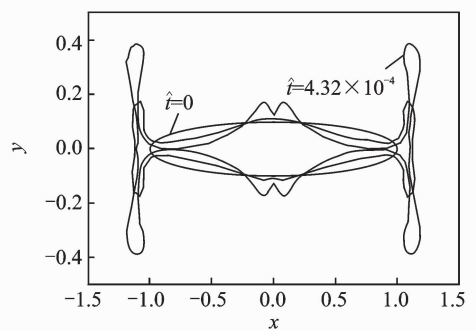
(b) Stress nephogram at initial time when $\hat{h}=30$



(c) $\hat{h}=15$



(d) Stress nephogram at initial time when $\hat{h}=10$



(e) $\hat{h}=10$

图 2 $\hat{\sigma} = 10, \beta = 10$ 时沿晶微裂纹的演化
Fig. 2 Evolution of intergranular microcrack when $\hat{\sigma} = 10$ and $\beta = 10$

A,C之间的某处B 滞留并形成如图 2(c) $\hat{t}=5.9 \times 10^{-4}$ 时刻所示的凸起,使该处裂面出现负曲率,化学位升高。在凸起达到一定尺寸后,若从凸起发射出原子占优势,凸起部位的原子会向两侧流动并使凸起消失,进而内凹,最终在表面扩散作用下微裂纹面上各处能量趋于相同,形成如图 2(a)所示的圆柱化裂腔。随着线宽的减小,若应变能驱动力占优,B 处附近的原子会不断聚集使凸起继续长大。当上下裂面上的凸起连接在一起,裂腔就分节成如图 2(c,e)所示的 3 个裂腔,且裂腔在晶界方向明显扩展。

对比图 2(c,e)可见,随着线宽的减小,分节时左右两个裂腔将增大,同时分节所需的时间将减小。图 3 详细给出了 $\hat{\sigma}=20$ 时沿晶微裂纹分节时间 t_f 随线宽 \hat{h} 的变化。由图 3 可见,随着内连导线线宽的减小,沿晶微裂纹分节所需要的时间也趋于减小。这一趋势表明,小线宽的内连导线中的沿晶微裂纹比大线宽中的沿晶微裂纹更快发生分节,即减小线宽会加速沿晶微裂纹的分节。对比不同形态比下的各条曲线可知,形态比越大,所需要的分节时间越少,即表明初始形态越狭长的微裂纹越快发生分节。

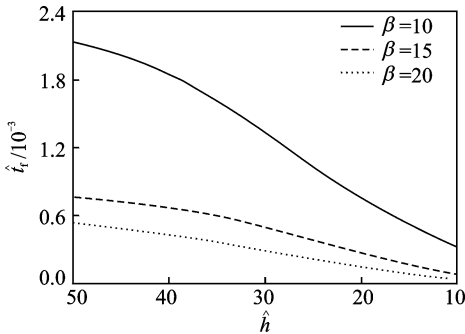


图 3 分节时间 t_f 与线宽 \hat{h} 的关系

Fig. 3 Splitting time t_f as a function of \hat{h}

通过大量的数值计算可知:对于给定形态比与外载下的沿晶微裂纹,存在一个临界线宽 \hat{h}_c 。当 $\hat{h} > \hat{h}_c$ 时,微裂纹不分节;当 $\hat{h} \leq \hat{h}_c$ 时,微裂纹沿晶界方向扩展并最终分节为 3 个小裂腔。给定外载和线宽,沿晶微裂纹存在形态演化分叉的临界形态比 β_c ;且当 $\beta \geq \beta_c$ 时,微裂纹发生分节,反之裂腔不分节。图 4 给出了不同外载下沿晶微裂纹发生分节时的临界形态比 β_c 与线宽 \hat{h} 的关系。由图中曲线可知,随着线宽的减小,沿晶微裂纹分节所需的临界形态比逐渐减小。即:在给定外载的条件下,线宽越小,微裂纹分节的临界形态比越小,微裂纹更易发生分节。且当 $\hat{h} \leq 20$ 时,临界形态比对

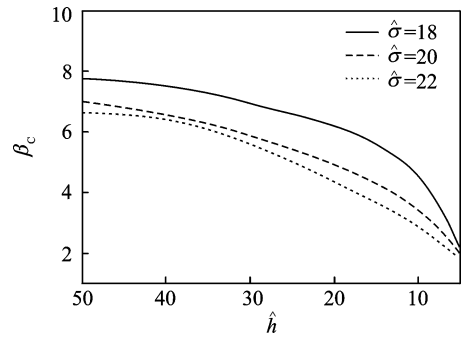


图 4 临界形态比 β_c 与线宽 \hat{h} 的关系

Fig. 4 Critical value of aspect ratio β_c as a function of \hat{h}

线宽的依赖性更强。对比不同外载下的各条曲线可知,外载越大,临界形态比越小,即表明外载有助于沿晶微裂纹发生分节。

给定形态比和线宽,沿晶微裂纹存在形态演化分叉的临界外载 $\hat{\sigma}_c$;且当 $\hat{\sigma} \geq \hat{\sigma}_c$ 时,微裂纹发生分节,反之裂腔不分节。图 5 给出了不同初始形态比的沿晶微裂纹发生分节时的临界外载 $\hat{\sigma}_c$ 与线宽 \hat{h} 的关系。由图中曲线可知,随着线宽的减小,沿晶微裂纹分节所需的临界外载逐渐减小。即:在给定形态比的条件下,线宽越小,微裂纹分节的临界外载越小,微裂纹更易发生分节。当 $\hat{h} \leq 20$ 时,临界外载对线宽的依赖性更强。

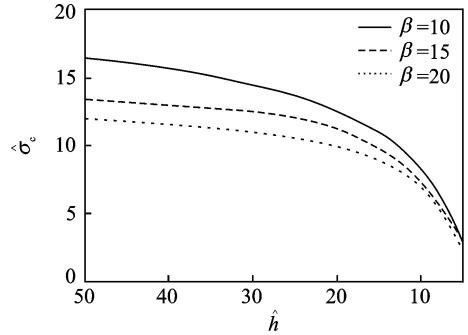
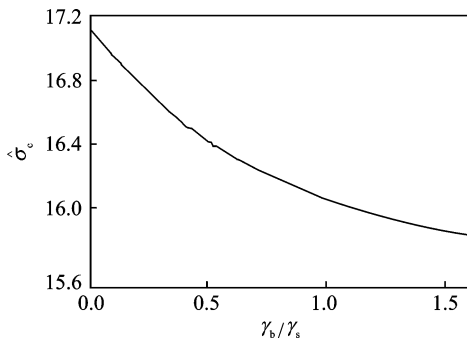
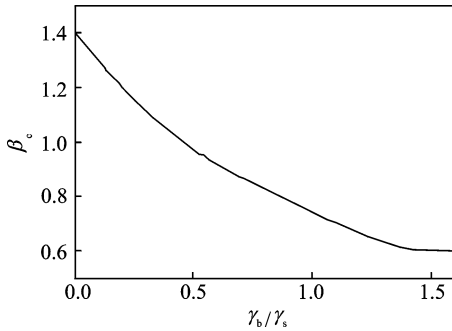


图 5 临界外载 $\hat{\sigma}_c$ 与线宽 \hat{h} 的关系

Fig. 5 Critical value of stress $\hat{\sigma}_c$ as a function of \hat{h}

晶界的存在是沿晶微裂纹与晶内微裂纹物理性质差异的关键,其对于微裂纹的演化存在着不可忽略的影响。图 6,7 分别给出了形态比 $\beta=10$ 和外载 $\sigma=20$ 时临界外载 $\hat{\sigma}_c$ 和临界形态比 β_c 随晶界能与表面能的比值 γ_b/γ_s 的变化规律。由图可见,晶界能与表面能的比值 γ_b/γ_s 增大时,沿晶微裂纹分节的临界外载 $\hat{\sigma}_c$ 和临界形态比 β_c 均减小。且当 $\gamma_b/\gamma_s < 1.2$ 时,该影响效果显著。而当 $\gamma_b/\gamma_s = 0$ 时,沿晶微裂纹退化为晶内微裂纹。由图 6 和图 7 可见,沿晶微裂纹比晶内微裂纹更易发生分节。

图6 临界外载 $\hat{\sigma}_c$ 随 γ_b/γ_s 的变化Fig. 6 Critical value of stress $\hat{\sigma}_c$ as a function of γ_b/γ_s 图7 临界形态比 β_c 随 γ_b/γ_s 的变化Fig. 7 Critical value of aspect ratio β_c as a function of γ_b/γ_s

3 结 论

本文应用有限单元法数值模拟了内连导线线宽对沿晶微裂纹演化的影响,得出具体结论如下:

(1)对于给定形态比与外载下的沿晶微裂纹,存在一个临界线宽 \hat{h}_c 。当 $\hat{h} > \hat{h}_c$ 时,微裂纹不分节;当 $\hat{h} \leq \hat{h}_c$ 时,微裂纹沿晶界方向扩展并最终分节为3个小裂腔。

(2)沿晶微裂纹分节时间随着线宽的减小而减小,即减小线宽可以加速微裂纹分节。

(3)临界外载与临界形态比都随着线宽的减小而减小,即,减小线宽有利于微裂纹分节。且当 $\hat{h} \leq 20$ 时,临界外载和临界形态比对线宽的依赖性更强。

(4)临界外载、临界形态比随着晶界能与表面能比值的增大而减小,且沿晶微裂纹比晶内微裂纹更易发生分节。

由于内连导线中微裂纹发生分节形成的小裂纹不足以使得内连导线产生断路,从而保持电路的稳定;反之,内连导线中微裂纹的扩展会导致导线断裂,造成电路失效。本文模拟结果可为内连导线的寿命预测和安全设计的准则提供理论依据和技术支持。

参考文献:

- [1] KORHONEN M A, PASZKIET C A, LI C Y. Mechanisms of thermal stress relaxation and stress induced voiding in narrow aluminium-based metallizations [J]. *Journal of Applied Physics*, 1991, 69 (12): 8083-8091.
- [2] ZHAI C J, WALTER Y H, MARATHE A P, et al. Simulation and experiments of stress migration for Cu/low-k BeOL [J]. *IEEE Transactions on Device and Materials Reliability*, 2004, 4(3): 523-529.
- [3] HULL D, RIMMER D E. The growth of grain-boundary voids under stress [J]. *Philosophical Magazine*, 1959, 4(42): 673-687.
- [4] RAJ R, ASHBY M F. Intergranular fracture at elevated temperature [J]. *Acta Metallurgica*, 1975, 23 (6): 653-666.
- [5] CHUANG T E, RICE J R. The shape of intergranular creep cracks growing by surface diffusion [J]. *Acta Metallurgica*, 1973, 21(12): 1625-1628.
- [6] PREVOST J H, BAKER T J, LIANG J, et al. A finite element method for stress-assisted surface reaction and delayed fracture [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2001, 38(30/31): 5185-5203.
- [7] LIU Z, YU H. A numerical study on the effect of mobilities and initial profile in thin film morphology evolution [J]. *Thin Solid Films*, 2006, 513 (1/2): 391-398.
- [8] BOWER A F, SHANKAR S. A finite element model of electromigration induced void nucleation, growth and evolution in interconnects [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2007, 15(8): 923.
- [9] LIU Z, YU H. Stress relaxation of thin film due to coupled surface and grain boundary diffusion [J]. *Thin Solid Films*, 2010, 518(20): 5777-5785.
- [10] SINGH N, BOWER A F, SHANKAR S. A three-dimensional model of electromigration and stress induced void nucleation in interconnect structures [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010, 18(6): 65006.
- [11] HUANG P Z, ZHANG Z Z, GUO J W, et al. Axisymmetric finite-element analysis for interface migration-controlled shape instabilities of plate-like double-crystal grains [J]. *Advanced Materials Research*, 2012, 460: 230-235.
- [12] LEVITAS V I, LEE D, PRESTON D L. Interface propagation and microstructure evolution in phase

- field models of stress-induced martensitic phase transformations [J]. *International Journal of Plasticity*, 2010, 26(3): 395-422.
- [13] OGURTANI T O, AKYILDIZ O. Cathode edge displacement by voiding coupled with grain boundary grooving in bamboo like metallic interconnects by surface drift-diffusion under the capillary and electromigration forces [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2008, 45(3/4): 921-942.
- [14] SHEWMON P G. The movement of small inclusions in solids by a temperature gradient [J]. *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, 1964, 230(4): 1134-1137.
- [15] PAN J, COCKS A. A numerical technique for the analysis of coupled surface and grain-boundary diffusion [J]. *Acta Metal Mater*, 1995, 43(4): 1395-1406.
- [16] SUN B, SUO Z. A finite element method for simulating interface motion—II. Large shape change due to surface diffusion [J]. *Acta Metallurgica*, 1997, 45(12): 4953-4962.
- [17] HE D N, HUANG P Z. A finite-element analysis of intragranular microcracks in metal interconnects due to surface diffusion induced by stress migration [J]. *Computational Materials Science*, 2014, 87: 65-71.
- [18] HE D N, HUANG P Z. A finite-element analysis of in-grain microcracks caused by surface diffusion induced by electromigration [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2015, 62: 248-255.
- [19] HERRING C. Surface tension as a motivation for sintering [C]//*The Physics of Powder Metallurgy*. New York: McGraw-Hill, 1951:33-69.

