

УДК 537.311.33

С.В. Марченко

## УЗАГАЛЬНЕНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ЗАРОДЖЕННЯ ПОР У ПРОЦЕСІ ЕЛЕКТРОМІГРАЦІЇ В МЕТАЛЕВИХ ПРОВІДНИКАХ

*В межах даної статті розглянуто проблему моделювання явища електроміграції в чистих металах. Показано основні рушійні сили, які діють на загальне перенесення речовини провідника, та розвиток уявлень про них. Сформульовано та описано сучасні математичні моделі та підходи для прогнозування впливу електроміграції на зародження пор та цілісність провідника.*

**Ключові слова:** математична модель, електроміграція, потік вакансій, електронний вітер, механічні напруження, термоміграція.

### Вступ

Дослідження поведінки провідника в процесі протікання по ньому електричного струму, а також прогнозування часу до відмови провідника стає досить актуальною задачею, зважаючи на повсюдне поширення цифрових пристроїв. Зокрема, окремий інтерес представляє явище електроміграції – перенесення матеріалу провідника під дією струму. Наявність переносу речовини напряму пов'язана з питаннями надійності контактів, оскільки результатом даного процесу може бути розрив з'єднань, що пов'язано з накопиченням вакансій та утворенням пор у процесі експлуатації. Зменшення впливу електроміграції на металічні з'єднання суттєво збільшує час роботи пристрою до відмови, що стає особливо актуальним у зв'язку з мініатюризацією робочих елементів сучасних мікросхем та їх контактів. Висока вартість мікросхем викликає потребу не лише в експериментальному дослідженні електроміграції як основної загрози цілісності контактів, але й у комп'ютерному моделюванні цього процесу.

Насправді, під електроміграцією в металах можуть розуміти електролітичну (іонну) або твердотільну (solid state) електроміграцію [1]. Перший тип являє собою електрохімічне явище, яке відбувається за достатньо низьких температур ( $<100^{\circ}\text{C}$ ) та густин струму ( $<1\text{ mA/cm}^2$ ). Дані умови дозволяють надають можливість бути присутньою на поверхні води, яка забезпечує механізм електролітичної електроміграції. Якщо розглядати провідники, що розділяються ізолятором, необхідна значна вологість для електролітичної (іонної) провідності при прикладанні електричного потенціалу.

У фізиці твердого тіла термін «електроміграція» описує масоперенесення у твердих речовинах під впливом високих густин струму. Це явище привертає значну увагу в мікроелектроніці через його роль у продукуванні відмов інтегрованих мікросхем. Протікання постійного струму за умови твердотільної електроміграції створює перенесення речовини в основному за допомогою сили зіткнення між електронами провідності та атомами металу. Проте у зв'язку зі структурними неоднорідностями на зразок міжзеренних границь результуючий атомний потік не є просторово рівномірним, і його дивергенція призводить до збіднення концентрації матеріалу в одному місці та накопичення в іншому. Результатом збіднення деяких областей матеріалу є пошкодження та поступова відмова контакту. З іншого боку, переміщення і накопичення матеріалу викликає утворення наростів (hillocks) та «вусів» (whiskers), які можуть спричинити коротке замикання або навіть корозію, розриваючи захисні оболонки [2].

На відміну від електролітичної, твердотільна електроміграція відбувається в сухому середовищі і стає важливою за температур, вищих за  $150^{\circ}\text{C}$ , і густин струмів принаймні  $10^4\text{ A/cm}^2$ . Ці умови є звичними для інтегрованих мікросхем та тонкоплівкових провідників, проте вони можуть включати ефекти плавлення та інших пошкоджень провідників у комп'ютерних системах та схожих макроскопічних елементах. З іншого

боку, такі умови повністю виключають наявність вологості, тим самим прибираючи основний режим електролітичної електроміграції.

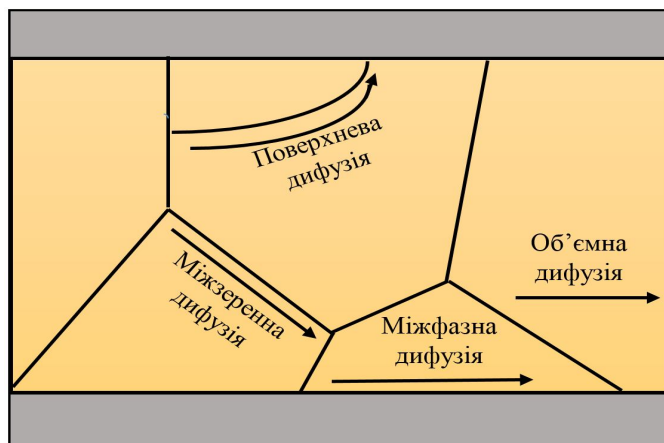


Рис. 1. Дифузійні шляхи

Однією з основних причин переходу індустрії на мідні провідники замість алюмінієвих на початку 2000-х років була більша стійкість міді до електроміграції. Проте така зміна мала як позитивні, так і негативні сторони. За результатами досліджень було встановлено, що в основних провідниках, які використовуються в промисловості – алюміній, мідь, олов'яний припій – в загальному існують однакові дифузійні шляхи (рис. 1), проте домінуючими для кожного провідника (при фіксованій температурі експлуатації) є різні шляхи [3]. Наприклад, в алюмінієвих провідниках при вказаних вище температурах переважає дифузія по міжзеренних межах [4], у мідних з'єднаннях – поверхнева дифузія [5], а в припої – решіткова дифузія [6]. Відповідно, спостерігається різна поведінка вище зазначених провідників в процесі електроміграції.

Зокрема, в алюмінієвих провідниках з бамбуковою структурою спостерігається збільшення періоду роботи до відмови, тому що відсутній неперервний шлях по міжзеренних межах вздовж напрямку електроміграції, що сповільнює масоперенесення. У той же час така структура для міді виграшу не дає, оскільки домінуючою для неї є поверхнева дифузія. Крім того, період до відмови мідних провідників не залежить від їх товщини, оскільки масова дифузія відбувається вздовж межі Cu/діелектричний шар.

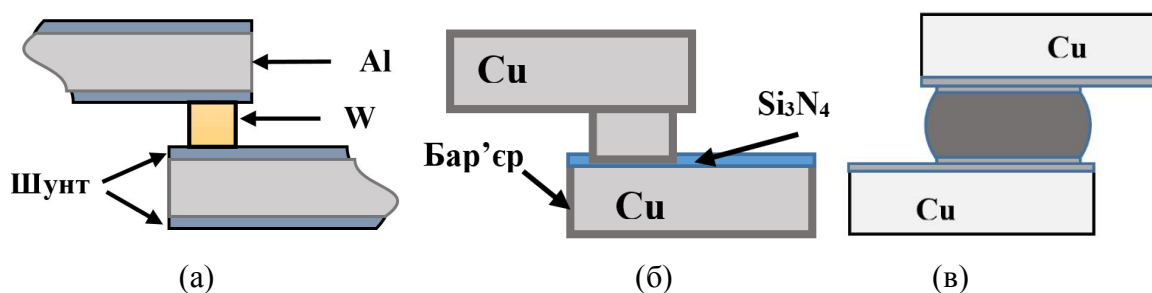


Рис. 2. Схематичне представлення архітектури з'єднань (а) алюміній; (б) мідь; (в) припойне з'єднання [3]

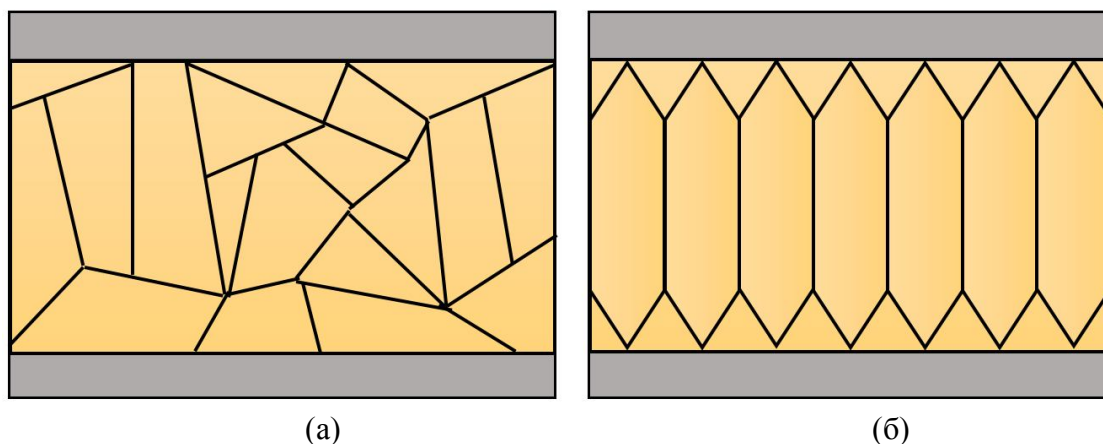


Рис. 3. Невпорядковані зерна (а) та зерна з бамбуковою структурою (б)

### Рухливі сили електроміграції

#### Градiєнт електричного потенціалу

До середини 1950-х років електроміграцію називали «електролізом металевих сплавів» і розглядали лише вплив електростатичної сили на перенесення маси. Нині є чітке розуміння, що електроміграція відбувається у зв'язку з обміном імпульсами між електронами провідності та атомами провідника. За умови ідеальної решітки опір відсутній, проте в реальних системах завжди існують дефекти: вакансії, міжзеренні межі, дислокації або домішки. Крім того, при температурах, які вищі за абсолютний нуль, атоми провідника вібрують, що в цілому призводить до розсіювання електронів – зміни напрямку їх руху після відбиття від атомів (рис. 4). Даний ефект називають ефектом електронного вітру. Разом з електростатичною силою  $F_{direct}$  він описує вплив проходження струму на провідник:

$$F = F_{wind} + F_{direct} = (Z_{wind}^* + Z_{el})eE = Z^*e\rho j, \quad (1)$$

де  $\vec{E} = \rho \vec{j}$  – вектор напруженості електричного поля,  $e$  – елементарний заряд, а  $Z^*$  – ефективний заряд, або ефективна валентність.

Електроміграція в присутності рушійної сили  $\vec{F}_{em}$  характеризується рівнянням Нернста-Ейнштейна [6]:

$$\vec{j} = \frac{CD}{kT} \vec{F}_{em} \quad (2)$$

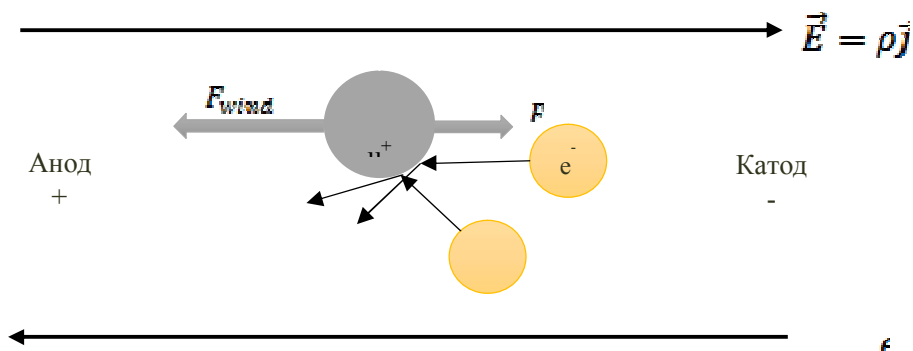


Рис. 4. Схема дії електричних сил

де  $\vec{J}$  – потік атомів, що переносить речовину,  $D$  – коефіцієнт дифузії, усереднений для всього провідника,  $C$  – концентрація атомів, що дифундують,  $k$  – стала Больцмана,  $T$  – абсолютна температура. Відповідний вираз для сили:

$$\vec{F}_{em} = Z^* e \vec{E} \quad (3)$$

Атоми металу мігрують відповідно до механізму обміну вакансій, тому атомний потік направлений в протилежну сторону до потоку вакансій [7]. Звідси,

$$\vec{J}_v = \frac{C_v D_v Z_v^* e}{kT} \vec{E} = -\frac{CDZ^* e}{kT} \vec{E} = -\vec{J} \quad (4)$$

де індекс  $v$  позначає вакансії. У формулі (4) враховано, що ефективний заряд вакансії протилежний за знаком заряду атома ( $Z^* < 0, Z_v^* > 0$ ).

#### *Вплив механічних напружень*

Активне дослідження явища електроміграції розпочалось у роботах І. Блеха [8-10]. Класичний експеримент [8] полягав у пропусканні струму силою  $3,7 \cdot 10^5$  А/см<sup>2</sup> протягом 15 годин через алюмінієві смужки різної довжини при температурі 350°C. Він показав, що існує деяке порогове значення густини струму, нижче якого електроміграція та пошкодження провідника відсутні. Також у [8] було встановлено, що дане порогове значення густини струму  $j_c$  наближено обернено пропорційне до довжини смужки, тобто час до відмови довгих смужок є коротшим за відповідний період для маленьких смуг. Виявилось, що добуток довжини лінії провідника  $L$  на порогове значення густини струму сталий і складає для алюмінію  $j_c L = 1,26 \cdot 10^5$  А/м. Цей добуток також називають критичним добутком або добутком Блеха.

Експериментальні дослідження [9, 10] також показали, що в процесі проходження струму високої густини через провідник виникають механічні напруження. Величина критичного добутку зростала при заключенні алюмінію в оболонку з нітриду кремнію, проте в процесі проходження струму поблизу аноду накопичувався тиск. Результатом цього були тріщини та розломи в оточуючому SiN. Атоми покидали катод, на якому наростали деформації розтягу та переміщались у бік аноду, де відбувалось стиснення. Градієнт механічних напружень спрямовував атоми від аноду до катода, тобто в протилежному напрямку до електронного вітру. Тому баланс між цими ефектами зупиняє атомну дифузію.

Корхонен [11] сформулював модель для вивчення атомної дифузії в інкапсульованому провіднику (рис. 5). За таких умов можна вважати, що в ньому виникають гідростатичні напруження. Нерівномірність розподілу напружень у провіднику призводить до того, що атоми будуть проникати в область з високим розтягом.

Якщо атом перенести з області, в якій відсутні механічні напруження в область під дією гідростатичного розтягу, його вільна енергія зменшиться на  $\Omega \sigma$ , де  $\Omega$  – атомний об'єм металу,  $\sigma$  – механічні напруження. Відповідно, рушійна сила по переміщенню атомів у провіднику має вигляд:

$$F = \Omega \frac{\partial \sigma}{\partial x} \quad (5)$$

Аналогічно до рівняння (2), атомний потік співвідноситься з даною рушійною силою відповідно до рівняння Ейнштейна:

$$J = \frac{CDF}{kT} \quad (6)$$

Дивергенція потоку призводить до появи відносної об'ємної деформації  $\theta$ , яка змінюється в часі [12]:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \Omega \frac{\partial J}{\partial x} \quad (7)$$

Враховуючи, що гідростатичні напруження  $\sigma$  пов'язані з відносною об'ємною деформацією

$$\sigma = B\theta, \quad (8)$$

де  $B$  – модуль всебічного стиснення, отримаємо:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = B\Omega \frac{\partial J}{\partial x}. \quad (9)$$

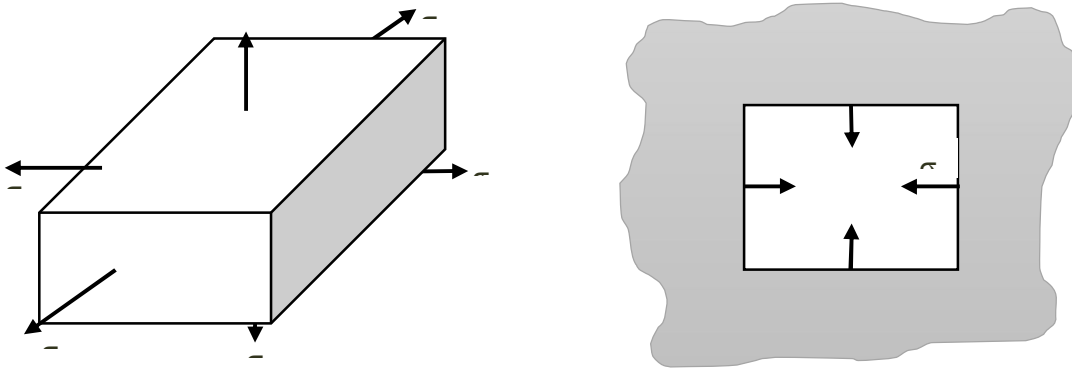


Рис. 5. Ізольований провідник

Підставивши (6) в (9), отримаємо остаточний вираз, який встановлює відповідність між швидкістю напружень та дивергенцією потоку

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = \frac{DB\Omega}{kT} \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} \quad (10)$$

Розв'язок диференціального рівняння (10) разом з відповідними початковими та крайовими умовами надає можливість відстежувати зміни в розподілі напружень  $\sigma(x, t)$  з часом.

Загальний процес переносу речовини включатиме як електричні, так і механічні сили, тобто результуючу силу можна отримати як суму сил (3) і (5). Враховуючи, що внаслідок електронного вітру ефективний заряд атома  $Z^*$  від'ємний,

$$f_x = +\Omega \frac{\partial \sigma}{\partial x} + Z^* e E_x = +\Omega \frac{\partial \sigma}{\partial x} - |Z^*| e E_x = +\Omega \frac{\partial \sigma}{\partial x} - |Z^*| e \rho j_x \quad (11)$$

Розглядаючи стаціонарний випадок, можна помітити, що для встановлення балансу необхідне виконання умови:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x} = \frac{|Z^*| e \rho j_x}{\Omega}, \quad (12)$$

яку також називають умовою Блеха. Загальний розв'язок рівняння (12) матиме вигляд [13]:

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{|Z^*|e\rho j_x}{\Omega} x \quad (13)$$

де  $\sigma_0$  – напруження при  $x = 0$ .

На основі рівнянь (4), (6) та (11) потік вакансій, зумовлений проходженням струму по провіднику виражається так:

$$J_v = \frac{D_v C_v}{kT} \left( Z_v^* e \rho j - \Omega \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) \quad (14)$$

Поява механічних напружень вимагає узгодженості моделі з теорією пружності. У твердому тілі завжди мають місце внутрішні сили, пов'язані із взаємодією молекул між собою, забезпечуючи існування твердого тіла, його міцність. При дії на тіло зовнішніх сил воно деформується, внаслідок чого виникають додаткові внутрішні сили.

Сили внутрішніх напружень, які виникають при деформації кристалу, характеризуються симетричним тензором напружень  $\sigma_{ik}$ . У випадку гідростатичного стиснення кристалу тиском  $p$  даний тензор має вигляд:

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik}, \quad (15)$$

де  $\delta_{ik}$  – символ Кронекера. Величину  $p_0 = -\sigma_{ik}/3$  називають середнім гідростатичним тиском навіть у тому випадку, коли тензор напружень не співпадає з (15) та описує більш складний напружений стан кристалу.

Диференціальні рівняння рівноваги для тіла [14], яке знаходиться під дією вище описаних сил мають вигляд:

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} + X = 0 \\ \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z} + Y = 0 \\ \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} + Z = 0 \end{cases} \quad (16)$$

де  $X, Y, Z$  – компоненти об'ємних сил, які діють на тіло. Якщо розглядати дані рівняння в контексті задачі електроміграції, зовнішньою силою для провідника буде виступати електрична сила, тому для одномірного випадку рівняння зведеться до вигляду (11).

### *Нерівноважні вакансії в процесі електроміграції*

Вище зазначені рівняння описують електроміграцію за відсутності нерівноважних вакансій, проте перерозподіл вакансій у процесі проходження струму призводить до появи градієнту концентрації вакансій. Шацкез і Ллойд [15] розглядають модель, у якій під дією струму відбувається дрейф вакансій із швидкістю

$$\vec{v} = \frac{D_v Z_v^* e \rho \vec{j}}{kT} = - \frac{D Z^* e \rho \vec{j}}{kT} \quad (17)$$

Враховуючи (6), потік вакансій запишеться у вигляді:

$$J_v = D \left( \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{C Z^* e}{kT} \rho j \right) = D_v \left( \frac{C_v Z_v^* e}{kT} \rho j - \frac{\partial C_v}{\partial x} \right), \quad C + C_v = const \quad (18)$$

Беручи до уваги присутність механічних напружень, у вираз загального потоку вакансій включають доданок (3). Для досягнення кращої відповідності з фізичною моделлю вводять множник  $0 < f < 1$ , який характеризує деформації решітки навколо вакансій. Звідси, зміна повного об'єму буде дорівнювати  $(1 - f)\Omega \equiv f' \Omega$  [16, 22]. Тоді:

$$J_v = D_v \left( \frac{C_v Z_v^* e}{kT} \rho j - \frac{\partial C_v}{\partial x} - \frac{f \Omega C_v}{kT} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) \quad (19)$$

Таким чином, основними рушійними силами, які присутні при проходженні струму через провідник, є (1) власне електричні сили, (2) градієнт концентрації вакансій, зумовлений дією електронного вітру, та (3) дрейф атомів у полі механічних напружень.

### Термоміграція

Для представлення більш повної картини також включають і вплив температури на загальний процес, хоча внесок відповідної компоненти потоку значно менший за інші рушійні сили [3].

Процес переносу тепла називають термоміграцією. Вона відбувається як у чистих металах, так і сплавах за наявності градієнта температур. Прикладом такого процесу є готування їжі в алюмінієвому горщику в духовці. Очікуваним результатом є його розширення після років використання, оскільки ззовні він витримує температуру порядку 300-400°C, а всередині підтримується 100°C для кипіння води. Для стінки порядку 1мм градієнт температури складатиме 3000°C/см, що має змусити атоми алюмінію переміщуватись від зовнішньої стінки до внутрішньої. Проте цього не відбувається. Причиною цього є те, що решіткова дифузія в алюмінії відбувається за допомогою вакансійного механізму. Гарячіша зовнішня стінка матиме вищу концентрацію вакансій, ніж внутрішня, що формує протилежний за напрямком потік атомів. Результуюча різниця цих потоків зазвичай надто мала, щоб бути помітною [17].

Фіксом було показано, що наявність градієнта температури в металах призводить до виникнення термодифузійного потоку внаслідок ефекту захоплення іонів електронами провідності [18]. Розглянемо випадок, за якого провідник на кінцях має різну температуру ( $T_1 < T_2$ ). Природним результатом цього є різні швидкість руху та енергія електронів провідності в холодній та гарячій області (рис. 7). Таким чином, потоки електронів від гарячого кінця до холодного і від холодного до гарячого відрізняються, що призводить до появи термоелектричного поля в металі в результаті накопичення заряду на кінцях. Дане поле наростає до тих пір, доки не збалансує обидва потоки. Звідси, виникає обґрунтована необхідність включити в загальне рівняння потоку рушійну силу термоміграції [19]

$$F = \frac{Q^*}{T} \left( - \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (20)$$

де  $Q^*$  – теплота переносу, яка є основною експериментальною характеристикою теплопереносу. Для її обчислення можна використовувати також стаціонарний метод, суть якого полягає у виконанні відпалу в неоднорідному температурному полі рівномірно розподіленого початкового поля концентрацій атомів. Після досягнення стаціонарного стану потік атомів (вакансій) вздовж градієнта дорівнює нулю. Тоді, згідно з [20]:

$$\frac{\partial C_v}{\partial x} = - \frac{C_v Q^*}{kT^2} \frac{\partial T}{\partial x} \Rightarrow Q^* = k \frac{\partial \ln C_v}{\partial \left( \frac{1}{T} \right)} \quad (21)$$

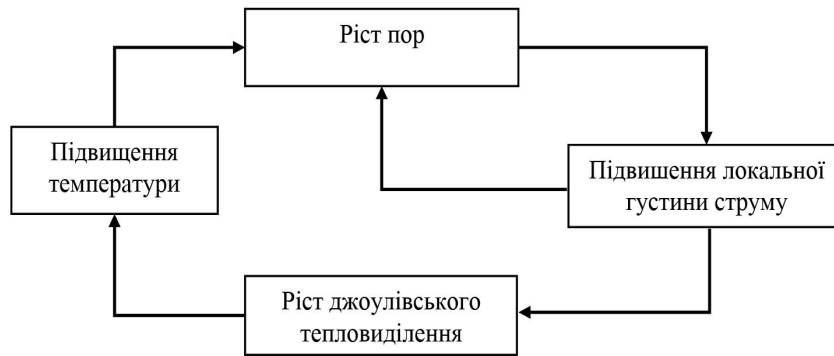


Рис. 6. Зв'язок електро- та термоміграції

Відповідно до цього рівняння можна обчислювати теплоту переносу. Якщо  $Q^* > 0$ , теплоперенос речовини здійснюється в напрямку холодного кінця (протилежно до градієнта температури), інакше – до гарячого кінця зразка.

За допомогою співвідношення Ейнштейна (6), загальний потік із включенням термоміграційної компоненти матиме вигляд:

$$J_v = D_v \left( \frac{C_v Z_v^* e}{kT} \rho j - \frac{\partial C_v}{\partial x} - \frac{f \Omega C_v}{kT} \frac{\partial \sigma}{\partial x} + \frac{C_v Q^*}{kT T} \frac{\partial T}{\partial x} \right). \quad (22)$$

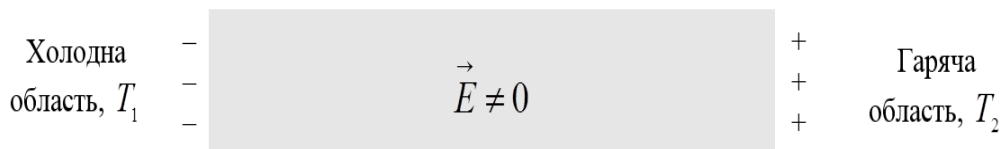


Рис. 7. Ілюстрація термодифузії

### Інші рушійні сили

Електроміграція як процес, що є дифузійним за своєю суттю, включає різні рушійні сили (табл. 1).

Таблиця 1

Приклади рушійних сил для дрейфового руху атомів [12]

Сила	Вираз	Позначення
Градієнт електричного потенціалу $E = -\rho \text{ grad } \varphi$	$Z^* e E$	$Z^*$ – ефективний заряд
Градієнт концентрації вакансій (хімічних потенціалів)	$-\text{grad } C_v$ ( $-\text{grad } \mu$ )	$C_v$ – поле концентрацій вакансій
Градієнт температури	$-\frac{Q^*}{T} \text{ grad } T$	$Q^*$ – теплота переносу
Градієнт механічних напружень	$-\nabla U_{el}$	$U_{el}$ – енергія пружної взаємодії відповідно до поля напружень
Гравітаційна сила	$mgz$	$m$ – маса частинки; $g$ – прискорення вільного падіння
Відцентрова сила	$m^* \omega^2 r$	$m^*$ – ефективна атомна маса; $\omega$ – кутова швидкість; $r$ – відстань від осі обертання



Гравітаційні сили відносно слабкі, тому майже не відіграють ролі в процесі дифузії в твердих тілах. Проте в рідинах та газах гравітаційні сили можуть викликати ефект осідання. Експериментальне дослідження впливу відцентрових сил вимагає швидкого обертання зразка, тому в процес моделювання їх теж не включають. Дані рушійні сили є основними причинами переносу матеріалу провідника.

### Узагальнена модель зародження пор у процесі електроміграції

Модель переносу вакансій будується на основі рівняння переносу

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} + \operatorname{div} J_v = G, \quad (23)$$

де  $J_v$  – узагальнений вигляд потоку вакансій у формі (19):

$$J_v = D_v \left( \frac{C_v Z_v^* e}{kT} \rho \operatorname{grad} \varphi - \operatorname{grad} C_v - \frac{f \Omega C_v}{kT} \operatorname{grad} \sigma \right), \quad (24)$$

а  $G$  – функція Гріна, яка моделює процес зародження та знищення вакансій:

$$G = L_v kT \ln \frac{C_v}{C_v^{eq}}, \quad C_v^{eq} = C_{v0} \exp \left( \frac{f' \Omega C_v}{kT} \right), \quad (25)$$

$L_v$  – середня довжина вільного пробігу,  $C_{v0}$  – початкова концентрація вакансій.

Дивергенція потоку вакансій створює локальні деформації. Загальний тензор деформацій складається з двох частин: пружної  $\varepsilon_{ik}^\sigma$  та непружної  $\varepsilon_{ik}^V$ :

$$\varepsilon_{ik} = \varepsilon_{ik}^\sigma + \varepsilon_{ik}^V \quad (26)$$

Появу непружної деформації спричиняють відхилення локальних концентрацій вакансій від рівноважної концентрації  $C_v^{eq}$ . Відповідно, при відсутності таких відхилень, зокрема, на початку моделювання, непружні деформації будуть нульовими. Саричев [22] запропонував кінетичні рівняння

$$\frac{\partial \varepsilon_{ik}^V}{\partial t} = \frac{\Omega}{3} (f \operatorname{div} J_v + f' G) \delta_{ik} \quad (27)$$

для обчислення швидкості об'ємних деформацій, що пов'язані з міграцією вакансій та їх утворенням. Враховуючи ізотропність матеріалу (однаковість діагональних елементів та симетричність тензора деформацій), отриманий вираз можна звести до єдиного рівняння:

$$\frac{\partial \varepsilon_{ik}^V}{\partial t} = \Omega (f \operatorname{div} J_v + f' G). \quad (28)$$

Компонента пружної деформації  $\varepsilon_{ik}^\sigma$  виникає у зв'язку з неоднорідністю розподілу вакансій та взаємодією металу з оточуючим середовищем. У лінійній теорії пружності для ізотропного тіла узагальнений закон Гука встановлює відповідність між тензором деформації  $\varepsilon_{ij}$  та тензором напружень:

$$\sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}. \quad (29)$$

Звідси, загальний вираз для обчислення компонентів тензора напружень буде мати вигляд:

$$\sigma_{ij} = -B\varepsilon_{kk}^V + \lambda\varepsilon_{kk}\delta_{ij} + 2\mu\varepsilon_{ij} \quad (30)$$

де  $\lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}$ ,  $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$  - сталі Ламе,  $\nu$  - коефіцієнт Пуассона,  $E$  - модуль Юнга, а  $B = (3\lambda + 2\mu)/3$  - модуль всебічного стиснення.

Враховуючи, що зміна вектору зміщень  $u = (u_1, u_2, u_3)$  з часом управляється законом Ньютона, отримаємо:

$$\rho_m \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}, \quad (31)$$

де  $\rho_m$  - густина металу, а величини прискорень - незначні, можна наближено прирівняти праву частину рівняння до нуля

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (32)$$

Прийдемо до трьох рівнянь, які виражають зміщення через деформації:

$$\mu \Delta u + (\lambda + \mu) \frac{\partial}{\partial x_i} (\operatorname{div} u) - B \frac{\partial \varepsilon_{kk}^V}{\partial x_i} = 0. \quad (33)$$

Отримавши поле зміщень, можна обчислити повний тензор деформацій:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (34)$$

У результаті на основі сферичної частини тензора непружних деформацій та повного тензору деформацій відповідно до формули (30) обчислюється тензор напружень  $\sigma_{ij}$ , звідки знаходиться

$$\sigma = \frac{Sp(\sigma_{ij})}{3}. \quad (35)$$

Замикання моделі за Саричевим потребує рівняння Лапласа для опису розподілу потенціалів  $\varphi$ :

$$\operatorname{div} \left( \frac{1}{\rho} \operatorname{grad} \varphi \right) = 0. \quad (36)$$

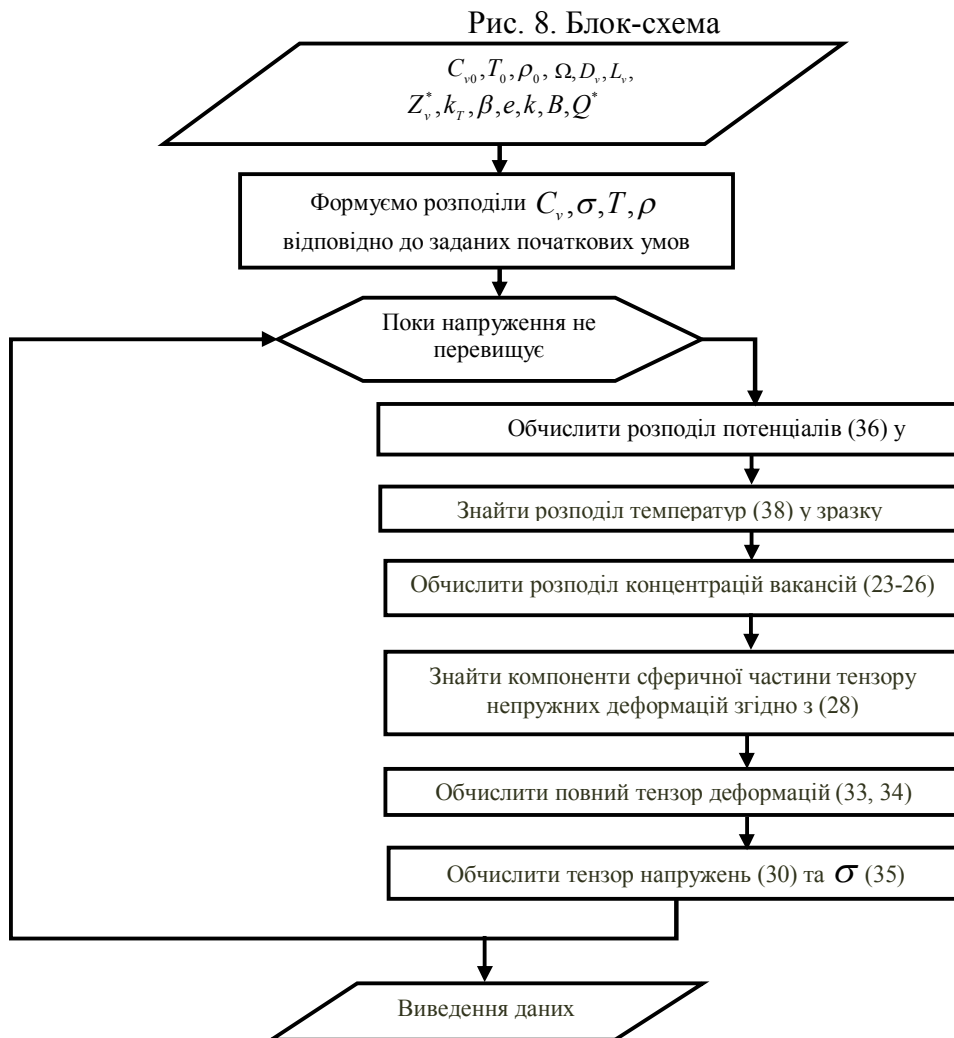
Модель [22] не включає термоміграцію, проте Сухарев [23] розглядає вплив градієнту температури на електроміграцію. Як відомо, опір  $\rho$  залежить від температури

$$\rho = \rho_0 (1 + \beta(T - T_0)) \quad (37)$$

де  $\rho_0 = \rho(T_0)$ ,  $\beta$  - температурний коефіцієнт електричного опору,  $T_0$  - початкова температура. Крім того, протікання струму призводить до нагріву провідника та перерозподілу температури в ньому, що описується рівнянням Фур'є:

$$- \operatorname{div}(k_T \operatorname{grad} T) - \frac{(\operatorname{grad} \varphi)^2}{\rho} = 0 \quad (38)$$

За даними співвідношеннями можна побудувати узагальнену математичну модель, яка включатиме всі чотири рушійні сили. На рис. 8 наведено блок-схему алгоритму виконання обчислень за цією моделлю. Критерієм виходу з циклу є досягнення в деяких точках провідника значення критичної напруги. Спочатку вважалося, що зародження пор відбувається у зв'язку з досягненням критичної концентрації вакансій в певному місці провідника, проте виявилось, що в такому разі необхідні нереалістично високі показники пересичення вакансіями [24]. Разом з тим за результатами досліджень [25, 26] виявилось, що в якості критерію утворення пори можна розглядати досягнення критичного значення механічного напруження в точці.



реа

лізації моделі

Єдиного підходу щодо знаходження цього критичного значення досі немає. Флінн [27] припустив, що зародження пори відбувається з уже існуючої вільної поверхні, пов'язаної з домішками, що завжди присутні в процесі виробництва. Вони перешкоджають зчепленню поверхні металу з покриваючим (capping) прошарком. Взавши

для дефекту форму кулі з радіусом  $R_p$ , вираз критичного напруження для зародження пори запишеться так:

$$\sigma_{кр} = \frac{2\gamma_s}{R_p} \quad (39)$$

де  $\gamma_s$  – енергія вільної поверхні металу. Клеменс [28] показав, що дане рівняння працює у тому випадку, коли пора розростається в області домішок, що не завжди так. Пора може вийти за межі області дефекту, досягнувши рівноважного контактного кута  $0^\circ < \theta_c < 90^\circ$  (рис. 9). Тоді порогове механічне напруження  $\sigma_{кр}$  задається як

$$\sigma_{кр} = \frac{2\gamma_s \sin \theta_c}{R_p} \quad (40)$$

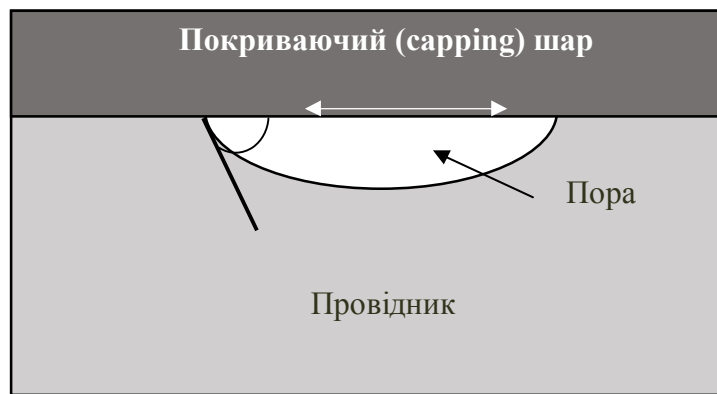


Рис. 9. Схема приповерхневого зародження пори

Слід також зазначити, що величина критичного напруження значно зменшується зі збільшенням площі дефекту. Для радіусу 10 нм  $\sigma_{кр} \approx 340$  МПа, у той час, як для радіусу 100 нм дане значення сягає лише 70 МПа, яке досить легко отримати в процесі електроміграції.

### Висновки

Розглянута узагальнена модель зародження пор у процесі електроміграції в металевих провідниках включає чотири основних рушійних сили, які відносяться до різних галузей фізики. Тому найбільш поширеними інструментами для моделювання даної задачі є технологічні системи автоматизованого проектування [29,30,31] на зразок ANSYS, COMSOL Multiphysics та ін., які базуються на методі скінченних елементів.

Зародження пор не є кінцевим результатом дії електроміграції на провідник, оскільки пора повинна набути деяких форм і розмірів, щоб спричинити відмову контакту. Звідси, окремою задачею, не передбаченою даною статтею, є моделювання еволюції пори, яка, з точки зору обчислювальної математики, зводиться до задачі з рухомою границею. Для її розв'язування використовуються метод ліній рівня (level set), метод фазового поля (phase field) тощо.

Нині залишається багато питань, відповідь на які досі не знайдена. Наприклад, що є першочерговим у відмові контакту: зародження пори чи її ріст? Як впливає місце зародження пори, зокрема на межі провідник/діелектрик або на міжзеренній границі, на відмовостійкість контакту? Чи може критерій зародження пори залежати від її форми?

Також досліджується вплив мікроскопічних ефектів на загальний процес електроміграції [32,33], конкуренція ефекту Кіркендала та механічних напружень у провіднику [34].

Сучасні досягнення в моделюванні електроміграції надають можливість досить точно спрогнозувати тривалість роботи різноманітних з'єднань, проте це явище є багатofакторним, що зумовлює подальші дослідження в даному питанні.

#### Подяка

Робота виконана під керівництвом та у співробітництві з проф. Гусаком А. М. та доц. Богатирьовим О. О.

#### Література

1. Krumbein S. J. Metallic Electromigration Phenomena / Simeon J. Krumbein. // IEEE Transactions on Components, Hybrids, and Manufacturing Technology. – 1988. – №1. – С. 5–15.
2. Silver migration and printed wiring / S. W. Chaikin, J. Janney, F. M. Church, C. W. McClelland. // Industrial & Engineering Chemistry. – 1959. – №51. – С. 299–304.
3. Kim C. Electromigration in Thin Films and Electronic Devices / Choong-Un Kim. – Cambridge: Woodhead Publishing, 2011. – 352 с.
4. Blech I. A. Electromigration in Thin Al Films / I. A. Blech, E. S. Meieran. // Journal of Applied Physics. – 1969. – №2. – С. 485–491.
5. Hau-Riege C. S. Electromigration in Cu interconnects with very different grain structures / C. S. Hau-Riege, C. V. Thompson. // Applied Physics Letters. – 2001. – №22. – С. 3451–3453.
6. Verbruggen A. H. Fundamental questions in the theory of electromigration / A. H. Verbruggen. // IBM Journal of Research and Development. – 1988. – №1. – С. 93–98.
7. D'Heurle F. M. Electromigration and Failure in Electronics : An Introduction / Francois M. D'Heurle. // Proceedings of the IEEE. – 1971. – №10. – С. 1409–1418.
8. Blech I. A. Electromigration in Thin Aluminum Films on Titanium Nitride / I. A. Blech. // Journal of Applied Physics. – 1976. – №4. – С. 1203–1208.
9. Blech I. A. Stress Generation by Electromigration / I. A. Blech, C. Herring. // Applied Physics Letters. – 1976. – №3. – С. 131–133.
10. Blech I. A. Measurement of Stress Gradients Generated by Electromigration / I. A. Blech, K. L. Tai. // Applied Physics Letters. – 1977. – №8. – С. 387–389.
11. Stress evolution due to electromigration in confined metal lines / M. A. Korhonen, P. Borgesen, K. N. Tu, C. Li. // Journal of Applied Physics. – 1993. – №8. – С. 3790–3799.
12. Lloyd J. R. Electromigration and Mechanical Stress / J. R. Lloyd. // Microelectronic Engineering. – 1999. – №1. – С. 51–64.
13. Suo Z. Reliability of Metal Interconnects / Z. Suo., 2003. – 580 с. – (Comprehensive Structural Integrity; т. 8).
14. Косевич А. М. Основы механики кристаллической решетки / А. М. Косевич. – Москва: Наука, 1972. – 280 с.
15. Shatzkes M. A model for conductor failure considering diffusion concurrently with electromigration resulting in a current exponent of 2 / M. Shatzkes, J. Lloyd. // Journal of Applied Physics. – 1986. – №11. – С. 3890–3893.
16. Kirchheim R. Stress and electromigration in Al-lines of integrated circuits / R. Kirchheim. // Acta Metallurgica et Materialia. – 1992. – №2. – С. 309–323.
17. Thermomigration in solder joints / [C. Chen, H. Hsiao, Y. Chang та ін.]. // Materials Science and Engineering R. – 2012. – №73. – С. 85–100.
18. Фикс В. Б. Ионная проводимость в металлах и полупроводниках / В. Б. Фикс. – Москва: Наука, 1969. – 295 с.
19. Shewmon P. Diffusion in Solids / Paul Shewmon., 1989. – 246 с.
20. Кузьменко П. П. Электроперенос, термперенос и диффузия в металлах / П. П. Кузьменко. – Киев: Вища школа, 1983. – 151 с.
21. Mehrer H. Diffusion in Solids: Fundamentals, Methods, Materials, Diffusion-Controlled Processes / Helmut Mehrer. – Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2007. – 651 с. – (Springer Series in Solid-state Sciences).
22. General model for mechanical stress evolution during electromigration / [M. E. Saruchev, Y. V. Zhitnikov, L. Borucki та ін.]. // Journal of Applied Physics. – 1999. – №6. – С. 3068–3075.
23. Sukharev V. A model for electromigration-induced degradation mechanisms in dual-inlaid copper interconnects: Effect of interface bonding strength / V. Sukharev, E. Zschech. // Journal of Applied Physics. – 2004. – №11. – С. 6337–6343.

24. Rosenberg R. Void Formation and Growth During Electromigration in Thin Films / R. Rosenberg, M. Ohring. // Journal of Applied Physics. – 1971. – №13. – С. 5671–5679.
25. Hull D. The growth of grain-boundary voids under stress / D. Hull, D. E. Rimmer. // Philosophical Magazine. – 1959. – №42. – С. 673–687.
26. Hirth J. P. Analysis of cavity nucleation in solids subjected to external and internal stresses / J. P. Hirth, W. D. Nix. // Acta Metallurgica. – 1985. – №3. – С. 359–368.
27. Flinn P.A. Mechanical stress in VLSI interconnections: origins, effects, measurement, and modeling. // P. A. Flinn. // MRS Bulletin. – 1995. – №11. – С. 70-73.
28. Clemens B. M. Void nucleation on a contaminated patch / B. M. Clemens, W. D. Nix, R. J. Gleixner. // Journal of Materials Research. – 1997. – №8. – С. 2038–2042.
29. Multi-physics computer simulation of the electromigration phenomenon / [X. Zhu, H. Kotadia, S. Xu та ін.]. // 12th International Conference on Electronic Packaging Technology and High Density Packaging (ICEPT-HDP). – 2011. – С. 1–5.
30. Electromigration induced failure mechanism: Multiphysics model and correlation with experiments / [F. Cacho, V. Fiori, L. Doyen та ін.]. // International Conference on Thermal, Mechanical and Multi-Physics Simulation and Experiments in Microelectronics and Micro-Systems. – 2008. – С. 1–6.
31. Transient modeling of TSV-wire electromigration and lifetime analysis of power distribution network for 3D ICs / X.Zhao, Y. Wan, M. Scheuermann, S. Lim. // International Conference on Computer-Aided Design (ICCAD). – 2013. – С. 363 – 370.
32. Microstructural impact on electromigration: A TCAD study / H.Ceric, L. R. de Orio, W. H. Zisser, S. Selberherr. // Facta universitatis: Electronics and Energetics. – 2014. – №1. – С. 1–11.
33. Sukharev V. A model for electromigration-induced degradation mechanisms in dual-inlaid copper interconnects: Effect of microstructure / V. Sukharev, E. Zschech, W. D. Nix. // Journal of Applied Physics. – 2007. – 53505. – С. 1–14.
34. Gusak A. Electromigration revisited: competition between Kirkendall shift and backstress in pure metals and two-phase alloys / A. Gusak, B. Wierzba, M. Danielewski. // Philosophical Magazine. – 2015. – №10. – С. 1093–1104.

*Стаття надійшла* 02.04.2015  
*Прийнято до друку* 09.04.2015

## Аннотация

**С.В. Марченко**

**Обобщенная математическая модель зарождения пор в процессе электромиграции в металлических проводниках**

*В рамках данной статьи рассмотрено проблему моделирования явления электромиграции в чистых металлах. Показано основные движущие силы, которые действуют на общий перенос вещества проводника, и развитие представлений о них. Сформулировано и описано современные математические модели и подходы к прогнозированию влияния электромиграции на зарождение пор и целостность проводника.*

**Ключевые слова:** математическая модель, электромиграция, поток вакансий, электронный ветер, механические напряжения, термомиграция.

## Summary

**S. V. Marchenko**

**General mathematical model of the void nucleation during electromigration in metallic conductors**

*The problem of modeling the phenomenon of electromigration in pure metals was discussed in this article. It was shown the main driving forces, which act on the overall transfer of the substance of the conductor, and the development of ideas about them. Modern mathematical models and approaches for the forecasting of influence of electromigration on void nucleation and integrity of conductor were formulated and described.*

**Key words:** mathematical model, electromigration, vacancy flux, electric wind, mechanical stress, thermomigration.