

相场模拟在电子封装可靠性中的应用

董姝含¹, 吴 芃^{1,3}, 周颂超¹, 李浩喆¹, 孙戈辉²,
林鹏荣², 冯佳运^{1,3}, 王 尚^{1,3}, 田艳红^{1,3}

(1. 哈尔滨工业大学 材料结构精密焊接与连接全国重点实验室, 黑龙江 哈尔滨 150001)

(2. 北京微电子技术研究所, 北京 100076)

(3. 哈尔滨工业大学 郑州高等研究院, 河南 郑州 450018)

摘要: 随着电子器件不断向着微型化、集成化和多功能化方向快速发展, 芯片封装的复杂性显著提升, 封装密度不断增加, 焊点尺寸逐渐缩小, 电子器件在服役过程中的工作环境愈加严苛, 微互连焊点可靠性问题日益突出, 焊点失效已成为限制电子封装技术进一步发展的关键瓶颈之一。本文围绕微互连焊点的失效行为, 梳理了电子封装中常见的几类可靠性问题, 根据选择的相场变量的不同, 总结几种常见的相场模拟模型。针对几种常见的可靠性失效模式, 如电迁移、硅通孔技术、界面金属间化合物生长等, 分析了相场方法在模拟这些失效过程中的应用与发展现状。最后, 文章对相场模型在微观失效机制研究中的潜力进行了展望, 并探讨其在多物理场耦合、数据驱动建模与工程应用方面的发展趋势。本文旨在为研究微互连焊点失效行为的理论分析和工程实践提供系统参考和方法支持。

关键词: 相场模拟; 电子封装; 可靠性; 电迁移

中图分类号: TN604; O414.12

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2026)05-1317-17

1 引言

随着电子封装技术的不断发展, 芯片、人工智能芯片等器件功能逐渐提高, 智能汽车、智能家居等产品得到普及, 电子产品不断向着轻薄化、微型化、多功能化的方向发展, 对封装技术的要求不断提高, 因此封装问题已经成为制约半导体产业发展的瓶颈问题之一^[1]。为了满足更高的性能要求, 实现更小的尺寸和更高的集成度需求, 相应的电子封装产业也从传统2D封装、3D封装逐渐转化为2.5D封装、3.5D封装^[2]。2D封装是在传统的封装领域, 在基板的表面水平安装所有芯片和无源器件的集成方式。3D封装^[3]是指硅通孔技术(through-silicon via, TSV)的集成, 通过在垂直方向上堆叠多个芯片, 以减小封装面积, 提高了封装集成度。3.5D封装是通过3D封装TSV技术将多块芯片堆叠, 并使用混合键和技术实现直接互连, 取消了凸点的存在, 进一步减小了界面互连间距, 提高了互连密度。图1介绍了一种基于TSV和微凸点(micro pin fin, MPF)三维堆叠技术的芯片封装方案, 它将处理器与内存垂直集成于单一硅中介层之上, 并最终集成于印刷电路板(printed circuit board, PCB)上, 以此实现系统性能的跨越式提升。

为达到当今电子器件产品高精度、高密度和高算力的功能需求, 封装面积逐渐减小, 焊点尺寸也进一步减小。而焊点尺寸的减小会造成相同工作环境下电流密度的激增, 易发生电迁移失效, 严重影响电子器件的可靠性^[1]。其中材料的组织形貌对封装性能和器件可靠性具有至关重要的影响。材料的微观结构, 包括晶粒尺寸、相分布、孔隙率、晶界特性等对其机械、热学、电学和化学性能起到决定性作用。在高硅铝合金的微观组织中, Si相的尺寸和分布对其力学性能和热物理性能有显著影响。随着Si含量的增加, 合金材料的密度、热导率、热膨胀系数及伸长率降低, 而刚度和硬度提高^[4]。材料的组织形貌还会影响材料的热膨胀系数、吸湿性等, 进而影响封装的可靠性。例如, 湿气能够通过塑封料渗透, 与金属材料发生反应并形成副产物, 进而诱发器件性能退化甚至失效^[5]。在现代电子封装中, 随着封装密度不断提升、功能多样化, 在3D封装、高密度系统级封装、多尺度异质集成微结构中多物理场耦合的可靠性问题更加明显。封装材料的组织形貌不仅影响其自身的性能, 还会影响封装结构的整体性能和可靠性。封装材料的内应力、热膨胀系数不匹配等问题可能导致封装结构的分层、空洞和芯片

收稿日期: 2025-05-29

基金项目: 国家自然科学基金(U2241223); 国家部委项目(31513050302)

作者简介: 董姝含, 女, 2002年生, 硕士, 哈尔滨工业大学材料结构精密焊接与连接全国重点实验室, 黑龙江 哈尔滨 150001, E-mail: 24S009098@stu.hit.edu.cn

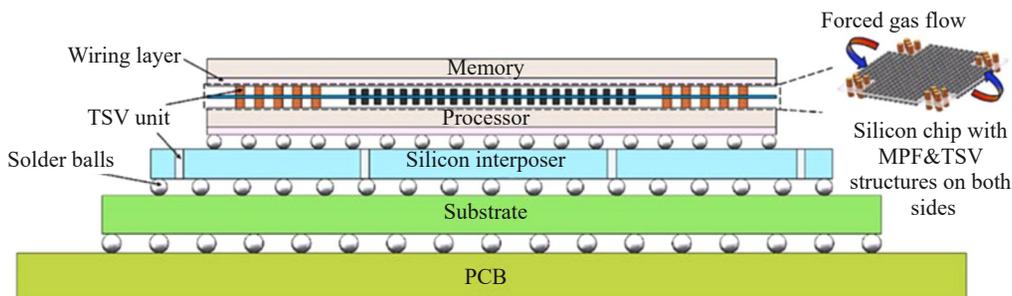


图1 3D封装示意图

Fig.1 Schematic diagram of 3D packaging

破裂等缺陷^[6]。因此,优化材料的组织形貌是提高电子封装性能和可靠性的关键。

多物理场作用会引发焊点中诸多故障模式,降低焊点可靠性^[7-8],如金属间化合物(intermetallic compound, IMC)的过度生长和空洞的聚集等,这些故障严重威胁焊点的可靠性。深入理解这些故障机制及其演变规律是提高焊点可靠性的关键所在。已有大量研究工作针对电迁移过程中焊点可靠性问题展开,重点聚焦于IMC生长及Kirkendall空洞的聚集机制。例如, Madanipour等人^[9]指出焊点的电迁移行为受到两种微观组织成分因素的影响,即IMC和Kirkendall空洞,通过改变实验温度观察焊点内部空洞聚集以及IMC随着时间演化逐渐增厚,发现在较低温度下,空洞聚集占主导地位,在较高温度下电诱导的IMC生长占主导地位。刘宝磊^[10]在不同温度条件下,通过对Cu/Sn/Cu三明治互连结构施加一定强度的低电流密度载荷,探究温度、电流密度对焊点内部微观组织演变规律,发现IMC出现明显的非对称生长现象。Cai等人^[11]采用改进的应变退火的方法,定量地证明了去除杂质及增大基板晶粒尺寸可降低焊点内Kirkendall空洞密度。余春^[12]设计电迁移加速实验和热老化实验,使用有限元模拟及第一性原理方法,探究不同合金体系钎料对器件抗电迁移性能的改善。

尽管实验研究取得了许多重要发现,但其局限性在于实验条件严苛且难以动态观察IMC生长的具体过程。为克服这一不足,研究者逐步采用数值仿真方法。Chiang等人^[13]通过有限元软件建立三维模型,研究了不同温度和电流密度条件下Sn3.0Ag0.5Cu焊点的电迁移行为,发现焦耳热对电迁移寿命的预测有显著影响。但有限元法存在一定局限性,即无法观察到微观组织形貌变化^[14]。相比之下,相场方法作为一种先进的数值模拟手段,特别适用于研究电子封装系统中多物理场条件下的微观组织、成分和结构的演变问题,以其在描述材料微观组织演变及界面动态行为方面的独特优势^[15-16],成为近年来材料科学领域的研究热点之一。

本文全面探讨了相场模拟在电子封装领域中的适用性及发展前景,系统地梳理了几种常见的可靠性问题,特

别关注焊点内微观组织演变、IMC生长过程、TSV中的微观组织演化、相分离、Kirkendall空洞演化等现象,总结了常见的相场模型,深入剖析了相场法在这些失效过程中的应用场景及发展态势。相较于传统的实验方法和有限元模拟方法,相场模拟能够更精准地捕捉焊点内部复杂的微观结构变化,揭示材料在不同物理场作用下的动态过程^[17]。通过这一方法,不仅能够弥补实验手段的局限性,还可以为优化焊点材料设计、改进封装结构提供系统的理论支持和技术参考,从而提升电子封装的整体可靠性,并为后续研究相场方法在更多复杂工程问题中的应用提供重要的指导意义。

2 相场模拟基本理论

相场模拟是一种研究复杂系统相变、相分离的数值模拟方法。材料的相变极大地影响了材料的组织结构,进而影响材料性能^[18]。相场模型是根据热力学与动力学基本原理建立的一种用于预测微观组织演化的重要方法。在相场模型中,通过一组连续的序参量描述相变的本质,通过求解空间中不均匀的序参量场与时间关联的相场动力学方程描述微结构的演化过程。相场模型已经被广泛应用于各种扩散和非扩散相变的微结构演化研究中^[19-20],使用相场模型可进行最终的热力学平衡态预测^[21],考虑化学^[22]、弹性^[23]、电磁^[24]和热因素^[25]等情况的热力学势函数及其动力学贡献,在包含晶格缺陷^[26]的情况下预测实际的微结构演化。

2.1 相场变量

相场模拟结果的准确性受相变过程公式化描述的影响,构建清晰简略的动力学方程表达式是进行相场模拟的核心环节。构建数学模型的第一步是确定界面模型和相场变量。常用的界面模型有2种,分别是尖锐界面模型和扩散界面模型^[27-28]。这2种模型都是用于描述金属材料界面处相组织成分的,其区别在于尖锐界面模型相场变量在两相界面处发生突变,为不连续变量,而扩散界面模型的相场变量在界面处平滑连续过渡,且界面具有一定厚度,二者差别如图2^[29]。目前扩散界面模型是一种常用的使用随空间和时间连续变化的相场变量来描述

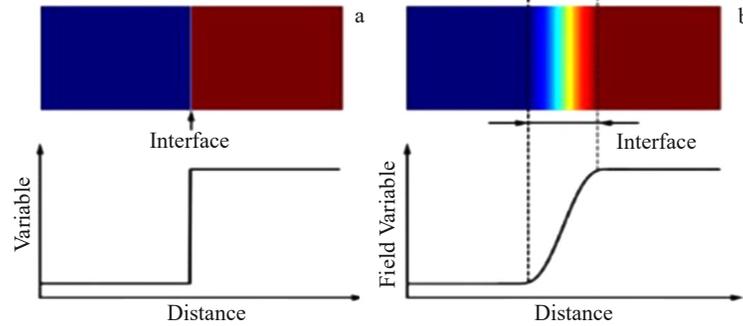


图2 金属材料界面模型

Fig.2 Interface models of metal material^[29]: (a) sharp interface model; (b) diffuse interface model

微观组织形貌演化的相场模型。在模拟过程中,通常使用相场变量描述相变过程成分和微结构的变化。相场变量主要包括2种,分别是守恒变量和非守恒变量,二者的区别在于描述的相组织状态不同。其中常见的守恒变量如浓度场通常与组分有关,可以用于描述微观组织形貌分布^[30],常用的非守恒变量如序参量,可以用来描述相同浓度条件下微观组织的不同状态^[31],通过定义不同晶粒取向或原子排列方式,表征晶界形貌和缺陷分布等特征^[32],有利于描述微观组织形貌的有序化演变。在相场模拟中,两者的区别主要在于其演化过程中是否遵循守恒定律。其中守恒变量满足连续性方程,其总量在系统中保持不变,通常由Cahn-Hilliard方程描述,适用于扩散主导的过程,如相分离或溶质再分配;而非守恒变量的总量可以随时间变化,由Allen-Cahn方程控制,适用于界面迁移、相变等非守恒过程,如晶粒生长或凝固过程中的固相形成。在实际模拟过程中,相场变量的选择主要取决于模拟的物理机制,对于需严格保持总量守恒问题中,应采用守恒变量;若涉及界面动力学或相变问题,则采用非守恒变量。两者也可联合使用,可以更全面地耦合扩散与相变效应。图3为实验过程中界面金属间化合物生长情况与模拟区域对比图^[29],图中使用保守变量 x 描述不同界面层的Sn原子浓度,用于表示界面处IMC的种类,使用非守恒变量 η 区分界面层不同晶粒,用于观察不同

晶粒生长形貌变化。

2.2 自由能函数及动力学方程

相场与微结构演化驱动力源自于体自由能的降低、界面能的降低、弹性能的降低以及外场的影响。一般地,系统的自由能 F ^[33]包括体自由能 F_{bulk} 、界面能 F_{int} 和弹性应变能 F_{el} ,如式(1)。

$$F = F_{\text{bulk}} + F_{\text{int}} + F_{\text{el}} \quad (1)$$

以相场变量为一种浓度场和一组序参量为例,由于传统热力学问题假设整个系统是均匀的,在温度、压力和摩尔体积不变且没有弹性场、磁场或电场时,系统的总自由能表达式(2)如下:

$$F = F_{\text{bulk}} + F_{\text{int}} = \int_V [f(c, \eta_i) + a(\nabla c)^2 + \sum_i \beta_{jk}^i \frac{\partial \eta_i}{\partial r_j} \cdot \frac{\partial \eta_i}{\partial r_k}] dV \quad (2)$$

式中,第一项为均值系统中相场变量的自由能,其表达式与相共存区域的平衡条件有关,对于守恒相场变量 c ,其自由能表达式需满足相共存区域的平衡条件,通过对应平衡组分浓度的公切线条件确定;对非守恒变量 η ,其自由能受到不同序参量对应的瞬内能量最小值条件约束^[34]。式中第二项为界面自由能, a 为界面梯度能系数。式中第三项为扩散界面中非均质系统中的自由能密度,其大小决定了界面厚度,其中 β_{jk}^i 为非守恒变量对应的梯度能系数, V 代表系统体积, r_i, r_k 为空间变量。金兹堡和

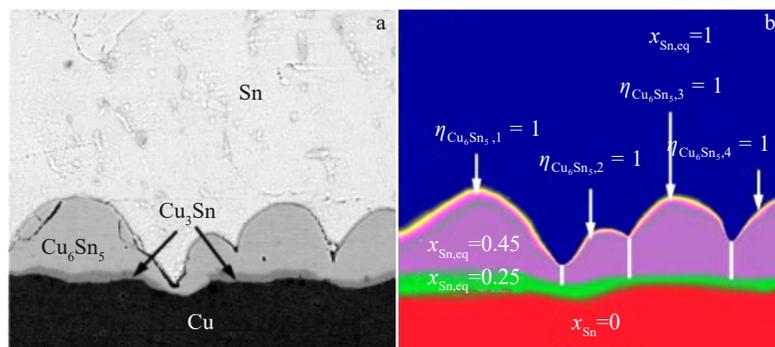


图3 Cu/Sn互连界面图像

Fig.3 Images of Cu/Sn interconnect interface^[29]: (a) experimental microstructural morphology of the interface; (b) phase-field variables describing the distribution of microstructural morphology

朗道在相变的基础上,结合超导体的电动力学、量子力学和热力学性质,提出一个描述超导现象的模型^[35],即金兹堡-朗道方程。朗道理论^[36]引入的序参量为平均参量,引入的序参量密度函数描述序参量的涨落,使相场模型具有描述不同区域的特异性。通过将相场变量转换为序参量的空间分布最终描述相形态和分布。

相场动力学方程如式(3)和式(4)所示,包括 Cahn-Hilliard 方程^[37]和 Allen-Cahn 方程^[38]两种,其中 Cahn-Hilliard 方程是用于描述守恒变量的相场动力学方程,Allen-Cahn 方程是用于描述非守恒变量的相场动力学方程:

$$\frac{\partial c(r,t)}{\partial t} = M\nabla^2 \frac{\partial F}{\partial c(r,t)} \quad (3)$$

$$\frac{\partial \eta(r,t)}{\partial t} = -L\nabla \frac{\partial F}{\partial \eta(r,t)} \quad (4)$$

其中 M 为原子迁移率, L 是动力学系数, r 为空间变量, t 为时间。

根据相场动力学方程中应用的相场变量不同,可对模型进行分类,其中将只应用守恒变量的相场模型称为守恒变量相场模型,将只应用非守恒变量的相场模型称为非守恒变量相场模型,而两者都使用的相场模型称为复杂相场模型。相场动力学的基本思想包括^[39-40]:(1)金兹堡-朗道理论引入序参量在空间上的不均匀分布,用于描述组成相或微结构的形态与分布;(2)基于金兹堡-朗道动力学方程数值求解序参量随时间的变化,模拟相变或微观结构的演变过程;(3)选择扩散界面描述非均匀连续体系,利用守恒和非守恒场变量的空间梯度描述各相之间的扩散界面。

3 守恒变量相场模型

守恒变量相场模型在焊点失效领域的应用主要包括空洞迁移演化模型和相分离模型。焊点在电场作用下易发生电迁移,存在空洞的形成,且焊点内部由于热力学不稳定性,钎料易出现相分离行为,极易导致失效行为发生。

3.1 空洞迁移演化模型

在相场方法中,微观结构的演化通常通过一组随时间和空间变化的连续相场变量来表示。这些变量在界面区域内表现出连续且快速的变化,隐式地捕获了界面几何结构的变化。通常选择最简单的单一守恒变量模型来描述 Kirkendall 空洞的迁移过程。建立如图 4 所示的模型图^[29],模型中守恒变量通常由浓度场 c 来表示,其代表模拟区域不同位置的相浓度变化,并构建扩散界面模型,使浓度变量 c 在相界面处平滑连续过渡,过渡区域即为界面厚度。

梁水保^[29]应用该模型对空洞迁移进行研究,根据热力学方程构建自由能函数为:

$$F = \int_V [f(c) + \frac{1}{2}k|\nabla c|^2] dV \quad (5)$$

其中, $f(c)$ 是体自由能密度, k 是梯度能系数,其表达式为 $f(c)=(1-c^2)^2/2$,这是一个简单的双势阱函数,控制着两个平衡相之间的能量势垒大小,该表达式控制的平衡浓度为 $c=0.0$ 和 $c=1.0$ 。还有 2 种其他的 $f(c)$ 表达式来描述体自由能密度,表达式如下:

$$f(c) = \frac{1}{4}A(1 - c^2)^2 \quad (6)$$

$$f(c) = 4A\left(-\frac{1}{2}c^2 + \frac{1}{4}c^4\right) \quad (7)$$

其中, A 是一个常数参数,它控制着体自由能密度双势阱的势垒高度。该表达式控制的平衡浓度为 $c=-1.0$ 和 $c=1.0$ 。

根据 Cahn-Hilliard 理论构建动力学方程,得到:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla D \left(2\Omega \nabla \frac{\delta F}{\delta c} \right) \quad (8)$$

其中, D 为原子扩散系数, Ω 为原子体积。在讨论具体问题时还可在自由能函数中加入不同物理场作用项,如电迁移驱动下原子迁移驱动力 F_{elec} , 温度场作用下原子迁移驱动力 F_{th} 等。模拟区域中电场和温度场满足如下分布表达式:

$$\nabla \cdot [\zeta_r \nabla V] = 0 \quad (9)$$

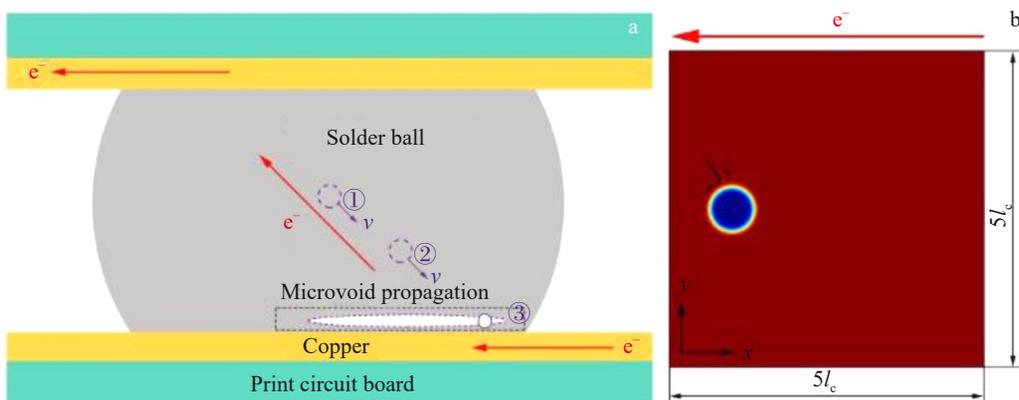


图 4 微空洞迁移示意图和相场模拟二维区域示意图

Fig.4 Schematic diagrams of microvoid migration (a) and two-dimensional region of phase field simulation (b)^[29]

$$\nabla \cdot [\lambda_T \nabla T] = 0 \tag{10}$$

其中, ξ_V 为电导率, λ_T 为热导率。

梁水保^[29]利用模型研究了焊点内部空洞电场作用下的迁移和聚集过程,如图5所示,其中 k 为梯度能系数, τ 为无量纲化时间, l_c 为特征长度。在电场作用下,微空洞向低电势侧迁移,低电场强度下迁移速度恒定,但高电场强度会使圆形空洞失稳甚至扁平化,诱发裂纹。微互连焊点中多空洞的存在使得电流密度和电势分布不均匀,影响微空洞的演化和迁移,电场可加速多空洞的粗化,微空洞的平均迁移速度随电场强度的增加而线性增大。

目前,有许多学者使用该模型对空洞的迁移和演化过程进行模拟^[41-42]。Li等人^[43]研究了在辐照和温度场条件下材料中空洞的迁移和生长动力学。该模型考虑了辐照损伤相关的空位和间隙原子的生成、复合、扩散以及缺陷的影响。结果表明,温度梯度会促使空洞向高温区域迁移,但空洞迁移速度与空洞大小无关。空位浓度、生成率和复合率对空洞迁移影响较小,却显著影响其生长动力学。董聪聪等人^[44]基于金属材料中微结构演化的基本理论,建立了电迁移诱发各向异性界面扩散下导电夹杂演化的相场模型,探究初始形态比对夹杂演化的影响,证明了导电夹杂的演化模式对电迁移速度以及形态的影响。Li等人^[45]应用该模型对模拟材料在辐照条件下的空洞演化和体积膨胀现象进行研究,发现空洞的临界形核尺寸随温度升高而增加,随空位浓度增加而减小。观察

不同温度下空洞的形核和演化过程,发现低温下空洞尺寸较小但密度较高,而高温下空洞尺寸较大但密度较低。且空洞体积分数随温度变化的“准钟形”分布,即在560 K时达到最大值,这与实验观察结果一致。Hu等人^[46]对模型进行改进,研究了不同迁移率及温度梯度作用下Kirkendall空洞位置、半径及迁移速率变化(图6,其中 l_0 为特征长度)。他们发现空洞迁移速度与空洞半径成反比,受空位迁移率(M)影响;温度梯度增加会加快空洞迁移,而空洞浓度对其迁移速度影响有限。

Sadasiva等人^[47]开发一种考虑扩散各向异性和接触角的相场模型,对电迁移引起的空隙生长进行研究。结果表明扩散的各向异性在电迁移失效过程中起主导作用,接触角决定了空洞形状的演变且固相原子的表面扩散和空洞界面处空位的聚集和合并有助于空洞的运动和生长。Santoki等人^[48]利用具有高度表面扩散各向异性对称性的相场方法研究电迁移诱导的岛状结构的形态变化,观察晶体中的{100}和{111}晶面体系,发现岛体动力学行为与电导率差异和取向偏差角有关。

3.2 相分离模型

相分离^[49]是指在一个多组分的系统中,由于热力学不稳定性或动力学过程,系统自发地分成两个或多个具有不同成分和性质的相的过程。这种现象通常发生在合金、聚合物、溶液等体系中,当系统的自由能降低时,相分离会发生,导致成分和结构的不均匀分布。由于相分离

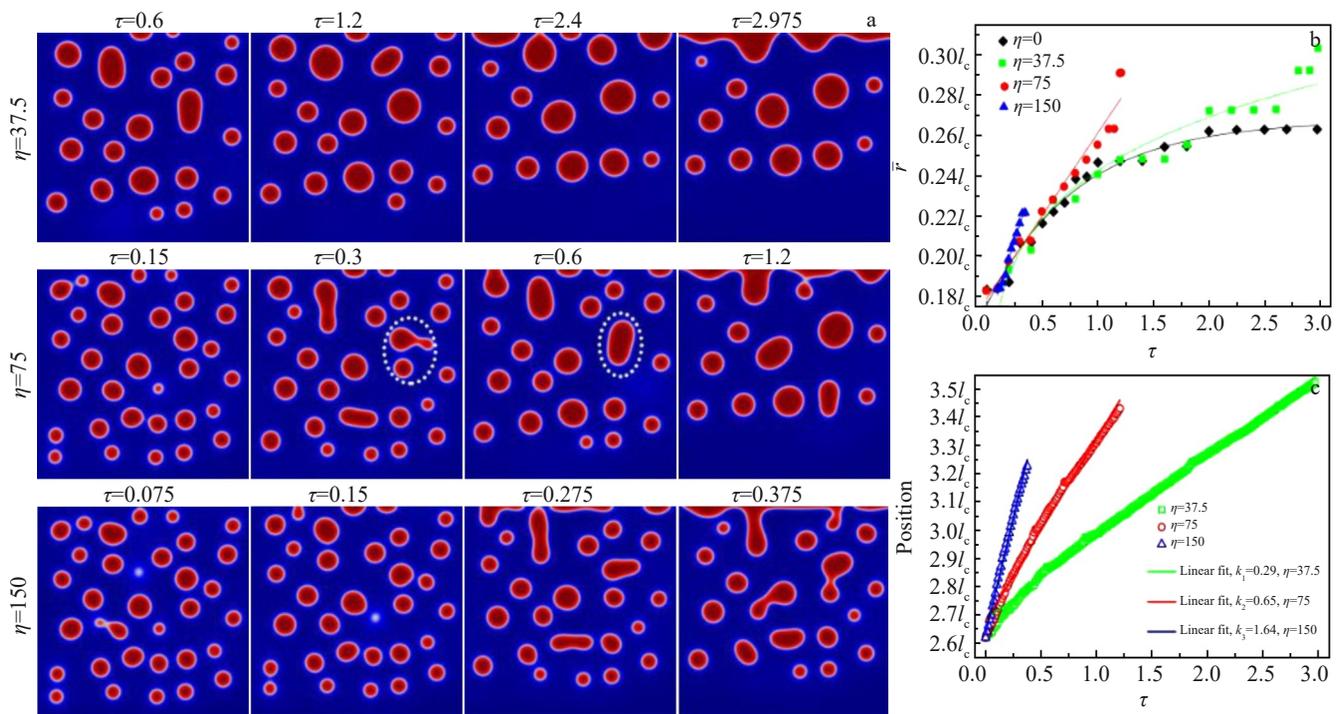


图5 不同电场参数下多空洞半径及迁移速率相场模拟

Fig.5 Phase-field simulation of multiple void radii and migration rates under different electric field parameters^[29]: (a) evolution and migration of voids under different electric field intensities; (b) effect of electric field intensity (η) on void radius (\bar{r}); (c) effect of electric field intensity on void migration rate

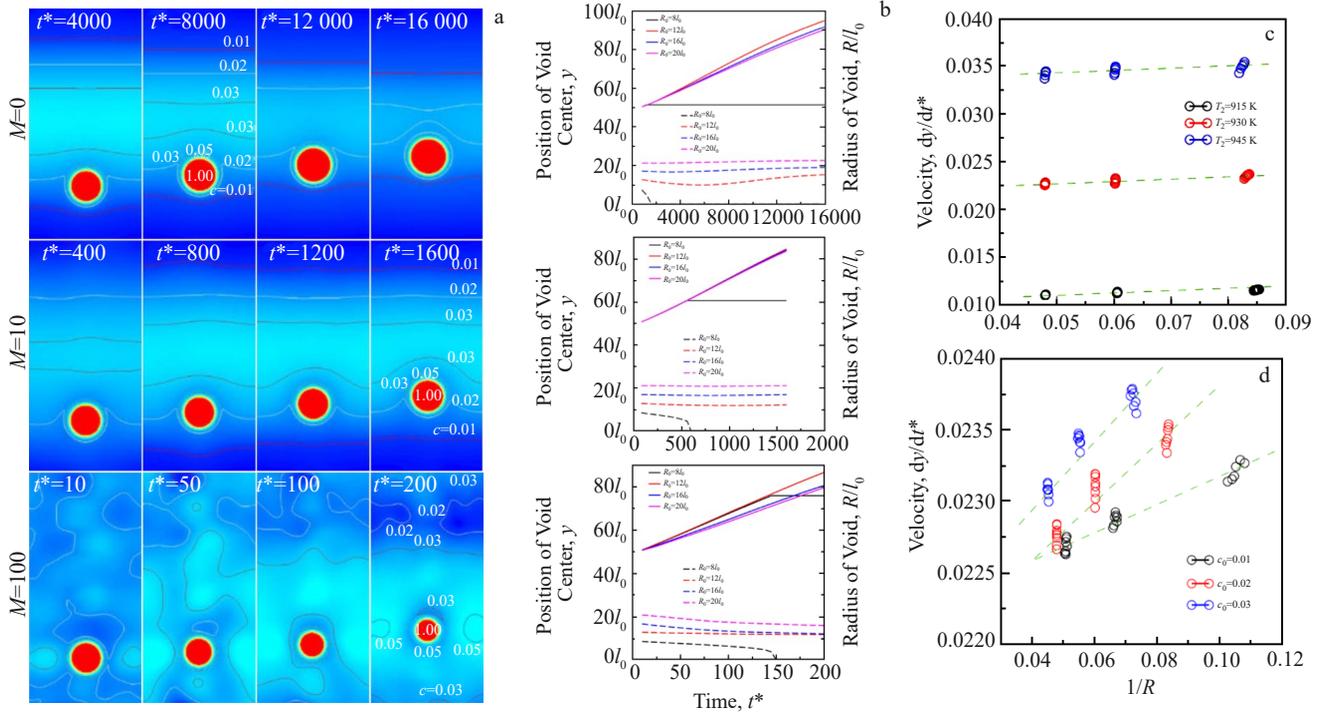


图 6 不同空洞迁移率及温度梯度作用下空洞迁移相场模拟

Fig.6 Phase-field simulation of void migration under different void mobilities and temperature gradients^[46]: morphological (a) and temporal (b) evolutions of position and radius of voids under different mobility conditions; (c) effect of temperature gradient (T_2) on void mobility; (d) effect of initial void concentration (c_0) on void migration rate

过程在空间和时间上的尺度较小,仅通过实验难以全面分析其微观机理,可采用相场模拟的方式进行研究^[50]。二元合金相分离过程可使用单一守恒变量进行分析,分析合金在不同条件下微观组织演化过程及相分离组织形成的差别。

Sn-Pb、Sn-Bi 等二元共晶系列钎料在通电过程中还会出现相分离的情况加剧焊点失效,针对这一现象,Ubachs 等人^[51](图 7)采用了基于 Cahn-Hilliard 模型,结合非局部变量和弹性存储能量作为扩散驱动力的相场模型,模拟了 Sn-Pb 共晶钎料在热机械载荷下的相分离和粗化过程,与实验观察到的粗化现象具备良好的定性拟合,有效预测焊料微观结构演化及其对损伤起始和扩展的影响,且计算效率较高。Tavakoli 等人^[52]同样模拟了 Sn-Pb 合金中的组织粗化现象,并通过拟合实验与模拟的界面周长演化数据,计算了界面迁移率等未知物理参数,实现了对实验现象的校准和定量预测。

对于多元合金体系,应引入多个守恒变量表示不同模拟区域的相组成,构建自由能函数为:

$$F = \int_V \left[\sum_i \frac{W^2(n)}{2} |\nabla c_i|^2 + f_{dw}(c_i) \right] dV \quad (11)$$

其中, $W(n)$ 为扩散界面宽度, n 通常表示界面的法线方向(单位矢量), $f_{dw}(c)$ 为双势阱函数,并根据 Cahn-Hilliard 理论构建不同相的动力学方程:

$$\frac{\partial c_i(r,t)}{\partial t} = V_m \nabla \left[\sum_j M_{ij} \nabla \frac{\delta F}{\delta c_j(r,t)} \right] + \zeta(r,t) \quad (12)$$

其中 V_m 为摩尔体积, i, j 表示不同元素, M 为原子迁移率, F 为体系总自由能, $\zeta(r,t)$ 是随机噪声项。

Liang 等人^[53-54]对在温度梯度作用下球栅阵列(ball grid array, BGA)焊点内微观组织分布进行分析,探究了在温度梯度作用下焊点内微观组织动态演化和热传输性能的变化规律,着重分析了不均匀分布的微观组织对局部热传输的影响,并分析了温度梯度下微焊点中微观组织的粗化和迁移动力学。研究发现温度梯度作用会造成原子的偏析聚集,造成热导率的显著下降,使焊点的传热性能变差。程子浩^[55]通过三维相场模型研究了 Cu 含量和时效温度对 Fe-Cr-Al-Cu 合金中 α' 相的影响(图 8)。研究发现 Cu 元素在 α/α' 相界面聚集,形成 Cr/Cu 核壳结构,而 Al 元素则偏聚于富 Fe 的 α 相基体,且 Cu 含量增加会导致 Cu 壳层增厚,阻碍 Cr 扩散,抑制了 α' 相的长大和粗化过程。当时效温度升高时,相分离和粗化速率显著加快。Ma 等人^[56]通过微观相场法结合微弹性理论,以 $\text{Co}_8\text{Al}_5\text{V}_{14}$ 合金为研究对象,在 1173 K 等时效条件下探究弹性应变能对该合金有序相析出过程的影响。研究发现,弹性应变能对合金析出序列影响较小,但能促进单一取向的过渡相 $L1_0$ 的形成、加速 $L1_2$ 相析出并提高其体积分数,提升合金有序度与原子聚集度。

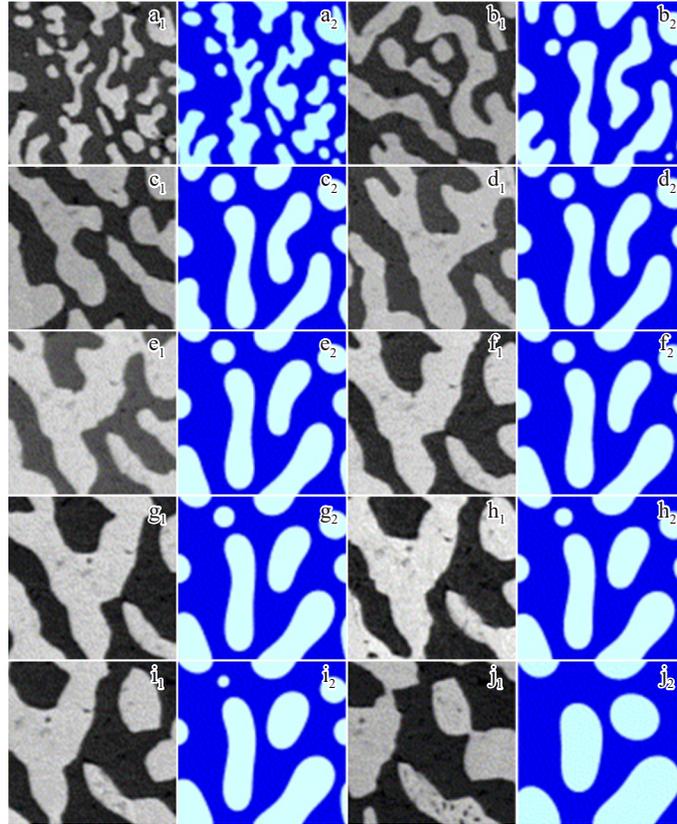


图7 不同时间下Sn-Pb钎料组织粗化过程的实验与相场仿真

Fig.7 Experiment (a₁-j₁) and phase-field simulation (a₂-j₂) of microstructure coarsening in Sn-Pb solder at different time (dimension of each image is 10 μm×10 μm)^[51]: (a₁, a₂) 0 h; (b₁, b₂) 2 h; (c₁, c₂) 6 h; (d₁, d₂) 9 h; (e₁, e₂) 12 h; (f₁, f₂) 15 h; (g₁, g₂) 18 h; (h₁, h₂) 21 h; (i₁, i₂) 24 h; (j₁, j₂) 48 h

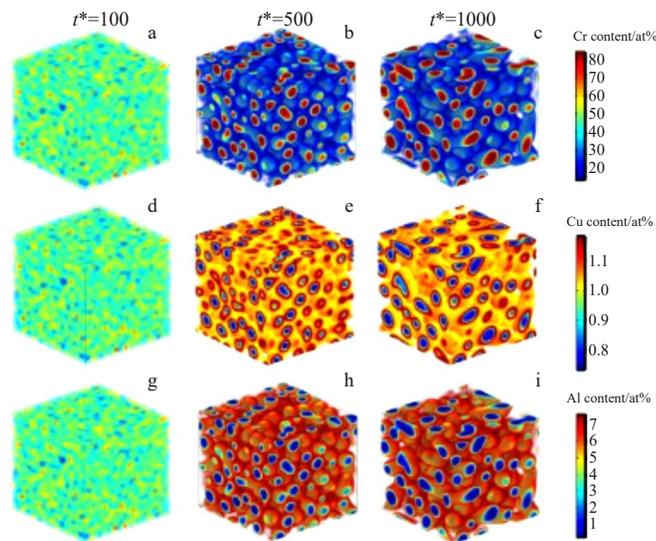


图8 750 K下合金元素分布的时间演变三维图

Fig.8 Three-dimensional temporal evolution of alloying element distribution at 750 K^[55]: (a-c) Cr; (d-f) Cu; (g-i) Al

4 非守恒变量相场模型

非守恒变量相场模型主要应用于TSV中微观组织演化和晶粒长大部分。TSV技术通过垂直互连,打破了传统二维封装的限制,在性能、功耗和集成多样性方面带来了显著提升。因此其可靠性问题变得至关重要,需对

其微观组织进行观察预测。晶粒长大会对焊点性质造成影响,需对其进行合理控制,探究其对焊点可靠性的具体影响。

4.1 TSV中微观组织演化

硅通孔技术是3D集成的重要互连方式,可实现多个功能芯片的直接垂直互连。作为先进半导体封装的关键

环节,TSV 技术面临热应力引发的结构变形、电迁移导致的失效以及晶粒结构对 TSV 突起的影响等难题,限制了其在相关领域的广泛应用。

相场法凭借独特的理论架构和数值处理方式,在模拟微结构演化方面具有显著优势,为解决 TSV 技术难题提供了新思路 and 有效方案。通过构建精确的相场模型,研究者能够模拟 TSV 在不同工艺条件和工作环境下的微结构变化,深入剖析相关物理过程的内在机制,进而提出针对性的优化策略,推动 TSV 技术发展。

对此类问题的研究通常需要构建由多个非守恒变量组成的相场模型。每个序参量 $\phi_i (i=1,2,\dots,N)$ 对应一个特定的晶粒取向或晶粒类型,其取值在空间上具有明确的物理意义:在该晶粒的区域取值为 1,在其他晶粒区域则取 0,通过这种阶跃变化来清晰地表征晶界位置。这种多种序参量方法可以有效地模拟 TSV 中微观组织演化过程,构建自由能函数如式(13):

$$F = \int_V \left[\sum_i^N \frac{k_i}{2} |\nabla \phi_i|^2 + f(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N) \right] dV \quad (13)$$

其中,第一项为梯度能项, k_i 为各序参量对应的梯度能系数,这一项反映了由于序参量空间变化引起的能量增加,本质上描述了晶界能的影响;第二项 f 为体自由能密度函数,其具体表达式为:

$$f(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N) = \sum_i^N \left(-\frac{A}{2} \phi_i^2 + \frac{B}{4} \phi_i^4 \right) + \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \phi_i^2 \phi_j^2 \quad (14)$$

其中 A 和 B 为正常数,第一项多项式确保了每个序参量在晶粒内部 ($\phi_i=1$) 和晶界外 ($\phi_i=0$) 的能量最小值状态,第二项交叉耦合项则保证了不同序参量之间的相互排斥,使得在空间任意点最多只有一个序参量取显著值,从而清晰地划分不同晶粒区域。

根据自由能函数建立动力学方程。该模型选取的相场变量为非守恒变量序参量,因此建立 Allen-Cahn 方程如下:

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -L_i \frac{\delta F}{\delta \phi_i}, i = 1, 2, \dots, N \quad (15)$$

将自由能函数代入,得到如下自由能方程表达式:

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -L_i \left(-A \phi_i + B \phi_i^3 + 2 \phi_i \sum_{j \neq i}^N \phi_j^2 - k_i \nabla^2 \phi_i \right), i = 1, 2, \dots, N \quad (16)$$

对于硅通孔、玻璃通孔技术 (through-glass via, TGV) 等焊点在服役过程中的晶粒生长及应力分布问题,Zeng 等人^[57]采用相场模拟了具有多晶结构的梯形 Cu-TSV 的电迁移失效过程。观察到了由于晶界沟槽、界面扩散以及空洞的迁移和变形导致的裂缝形成。而在 TGV 的力

学性能模拟与断裂形式预测方面,Gong 等人^[58](图 9)提出了一种考虑混合模式断裂的热机械耦合相场模型,以研究互连结构的力学性能和断裂行为。通过模拟热循环条件下单个焊点、多个焊点以及焊点界面的断裂模式,展示了独特裂纹模式和复杂裂纹网络的形成,与实验中观察到开裂行为相似。该方法为 3D 封装技术中 TGV 焊点的可靠性预测提供了一种高效可靠的仿真方法。Liang 等人^[59]采用上述相场模型,建立不同取向的晶粒并构建相应 Allen-Cahn 方程,全面分析了不同晶粒形貌及尺寸变化对 TSV 热-力行为及其它可靠性问题的影响。研究表明 TSV 中铜柱内晶粒取向对 Cu 晶粒的杨氏模量、剪切模量、泊松比等参数具有显著影响,且影响各晶粒发生塑性变形的程度,且服役过程 TSV 中 Cu 晶粒力学性能的各向异性会影响热应力的分布,进而驱使 TSV 中低杨氏模量的晶粒优先生长,使铜柱中平均 von Mises 应力降低。Nabiollahi 等人^[60]提出一种计算高效的三维相场模型,研究 TSV 中晶粒生长形貌,并将得到的晶粒取向尺寸等数据应用于具有各向异性弹性性能以及各向同性的塑性性能的有限元变形模型中实现多尺度模拟。Zeng 等人^[61]建立多晶结构的梯形 Cu-TSV 电磁诱导失效模型,观察界面扩散以及空洞的迁移和变形。研究发现,增加 TSV 中晶粒数量、减小晶粒尺寸以及空洞的产生聚集会造成失效程度的加剧,并提出两种提高 TSV 互连抗电磁干扰能力的方法,即增加晶粒尺寸和开发 TSV 底部和顶部的无空洞填充。

4.2 晶粒长大

对晶粒长大的研究在电子封装领域具有重要意义。晶粒长大可以改善材料的导电性能,在铜互连材料中,通过退火处理促进晶粒长大,能够有效降低电阻率,从而提高互连性能^[62]。晶粒长大还会影响材料的力学性能、热稳定性和介电性能^[63-64]。因此,合理控制晶粒长大对于优化电子封装材料的性能至关重要。

为研究不同晶体学取向的晶粒生长微观结构形貌,构建多个非守恒变量的相场模型,探究晶粒结构演变对材料物理性能和力学性能等的影响。Wu 等人^[65]应用该模型研究纳米尺度下二维晶粒的生长,研究表明不同初始取向差的晶粒面积随时间演变线性减小,但演变机制不同,对于取向差较大的晶粒,其晶界发生滑动但并不旋转;对于小取向差的晶粒发生旋转且取向差逐渐增大,其旋转受到晶界的法向运动和相应晶粒的切向运动耦合控制;当晶粒取向差适中时,在晶界处发生“刻面-消面转变”(faceting-defaceting transition);在多晶体系中,发现在三重结处产生位错并影响晶粒生长形态,产生非平面晶界。Miyoshi 等人^[66]通过在超级计算机上进行超大规模相场模拟,如图 10 所示,深入研究了理想晶粒生长现象,并提供了可靠的统计数据,其中 R 为等效半径, $\langle R \rangle$

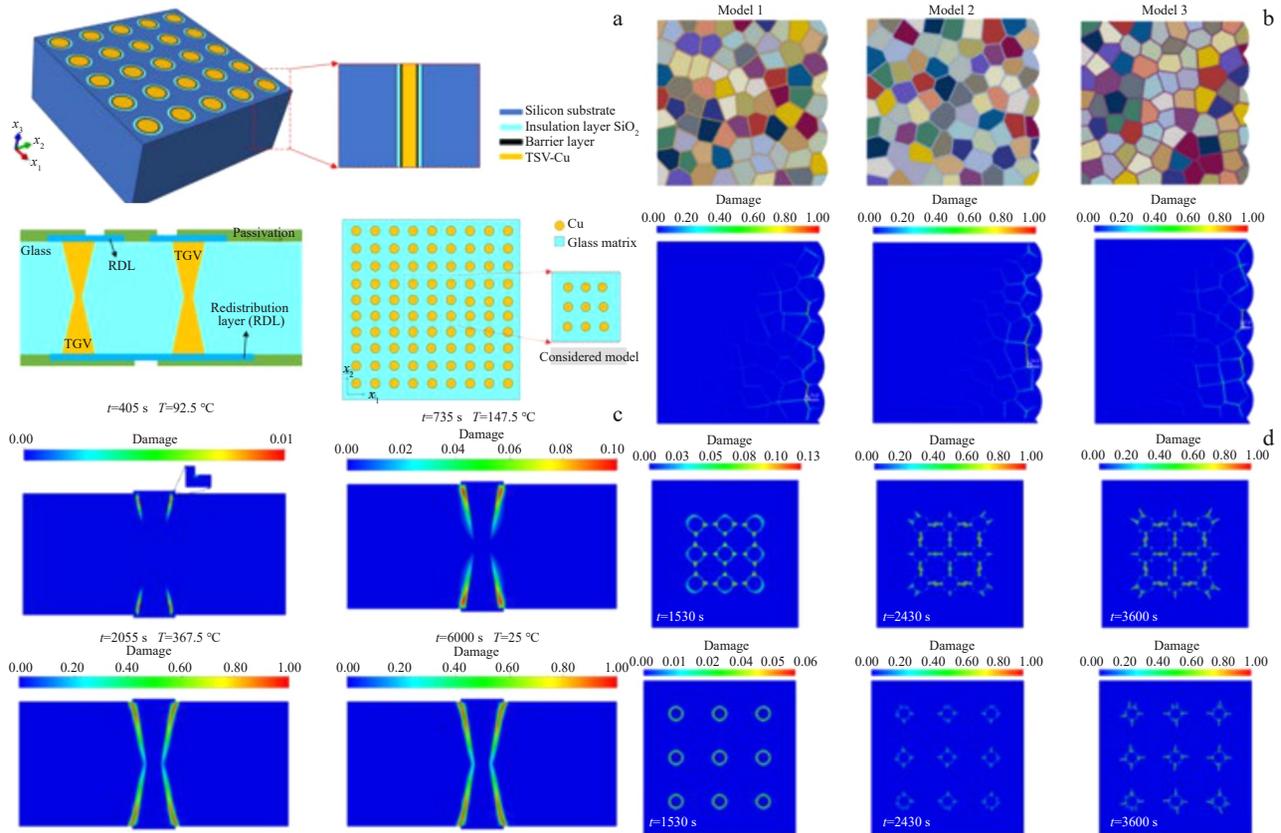


图9 TGV焊点断裂模式预测的相场模拟

Fig.9 Phase-field simulation for fracture mode prediction in TGV solder joints^[58]: (a) schematic diagram of the TGV solder joint model; (b) prediction of interfacial crack propagation in solder joint; (c) prediction of fracture mode for a single TGV; (d) prediction of fracture modes for multiple TGVs

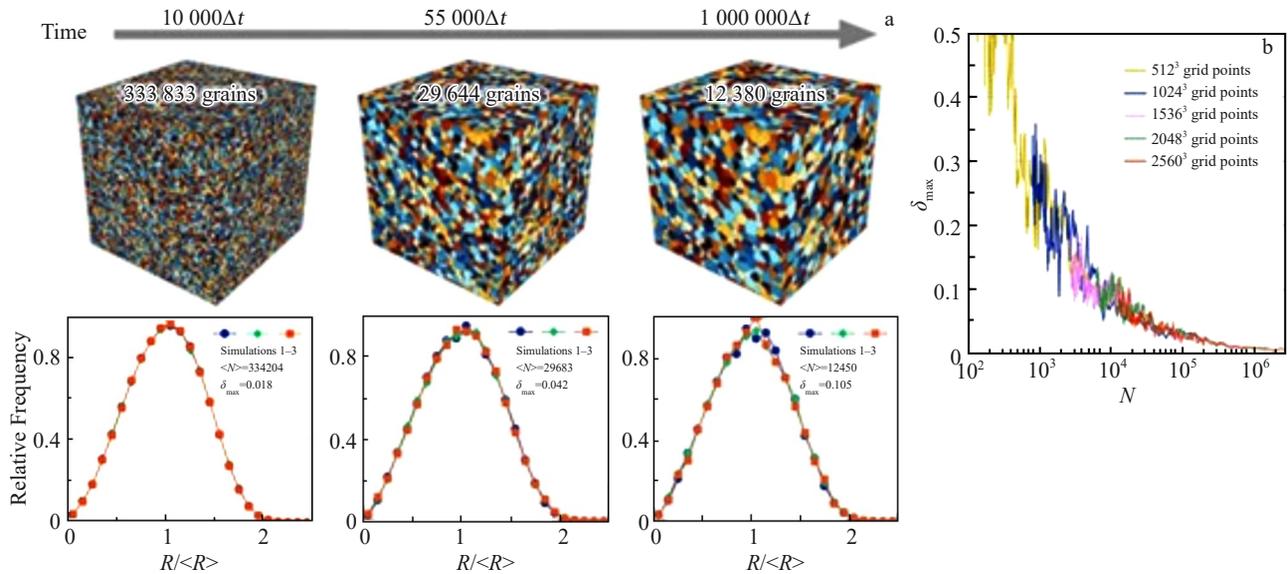


图10 晶粒尺寸分布的相场法模拟

Fig.10 Phase-field simulation of grain size distribution^[66]: (a) evolution of grain growth and grain size distributions at different time periods; (b) maximum difference (δ_{max}) as a function of the average number of remaining grains (N) calculated from different domain sizes in three simulations

为平均半径。研究揭示了晶粒生长的真实统计行为,并建立了全面的理论框架,准确量化了模拟中的生长行为。

结果显示,在稳态生长期间,晶粒尺寸分布几乎不随时间变化,呈正态分布,晶粒生长动力学遵循抛物线定律。

Krill 等人^[67]使用相场模拟的方法对三维晶粒长大过程进行研究。研究表明,模拟得到的晶粒长大动力学和微观结构的拓扑特性与实验和其他模拟方法得到的结果一致,验证了相场模型在三维晶粒长大模拟中的有效性。探究了晶粒长大过程中晶粒尺寸分布和拓扑参数的演变规律,发现不同方法在抑制晶粒合并的情况下能够得到相似的动力学和拓扑特性,但在晶粒尺寸分布形状上与实验结果仍存在一些差异。Moelans 等人^[68]研究了相场模型中的模拟参数对各向异性的晶粒长大过程的影响。结果表明,模型参数与晶界能和晶界迁移率之间有定量关系,并开发一种生成模型参数的程序,能够准确地复现材料的晶界能和迁移率,同时保证扩散界面宽度恒定,从而在数值解中实现均匀的稳定性和准确性条件。Mukherjee 等人^[69]使用相场模拟方法对金属互连线中裂纹在表面和晶界同时扩散下产生和传播机制进行探究。研究发现裂纹传播速度与电场强度成正比关系,较小尺寸晶粒可延缓裂纹的传播,且裂纹的形成主要由晶界扩散控制,整体失效时间由初始阶段决定。Vanherpe 等人^[70]通过三维相场模型研究球状颗粒对晶粒生长的影响,发现颗粒分布的钉扎效应随体积分数的增加而增强,随长径比的增加而增大,且晶界处颗粒的总比例与体积分数和纵横比呈正比关系,并提出一个考虑颗粒长宽比的广义 Zener 关系,以更准确地描述非球形颗粒的钉扎效应,控制晶粒尺寸并提高材料性能。

5 复杂相场模型

复杂相场模型主要用于模拟界面和多元合金内部微观组织演化模拟中,焊点界面和内部在电迁移、回流焊过程中易出现失效,需对界面 IMC 的生长、焊点内组织演化过程进行研究,分析造成失效原因。

5.1 界面微观组织演化

IMC 的生长是影响电迁移可靠性的关键因素之一。在电迁移过程中,金属原子从阴极向阳极定向迁移,导致两极界面处的金属间化合物厚度及形态发生变化。在电流作用下,阳极界面处金属原子的持续堆积会促进 IMC 的快速增厚;而阴极界面则由于金属原子的流失,不仅抑制了 IMC 的生长,还可能导致界面空洞的形成。这种生长的极性效应会使得焊点的机械性能和可靠性降低,显著改变焊点的微观结构:阳极侧过厚的 IMC 层因其固有的脆性容易成为裂纹萌生的位置,而阴极侧的空洞则会减小有效导电面积,形成局部电流集聚,最终导致焊点早期失效^[71]。

为更好地探究焊点内 IMC 生长演化规律, Park 等人^[72]对给定相的多个晶粒的相变进行建模,将前两种相场模型结合,将单一的相场方程扩展到多相场方程,通过使用非保守的相场变量 ϕ_i 来区分不同晶粒,浓度场 c 表示每

一项的成分浓度,且满足 $\sum_{i=1}^N \phi_i = 1$ 和 $c(x,t) = \sum_{i=1}^N \phi_i c_i$ 。体系的自由能考虑体自由能、界面自由能以及电场作用,可写成如下表达式:

$$f = \sum_i \phi_i f_{\text{chem}}^i(c_i) + \sum_{j>i} \sum_i \left[-\frac{\epsilon_{ij}^2}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j + w_{ij} \phi_i \phi_j \right] + \sum_i \phi_i f_{\text{em}}^i(c_i) \quad (17)$$

其中,第一项为相成分 c 的体自由能密度, $f_{\text{chem}}^i(c_i)$ 是第 i 相的体化学自由能密度,第二项为界面自由能,其中 ϵ_{ij} 为梯度能系数, w_{ij} 为双势阱函数,第三项对应为电场作用下的自由能函数变化项,其表达式满足如下:

$$f_{\text{em}}^i = N_A e \psi \sum_i Z_i^* c_i \quad (18)$$

其中, N_A 为阿伏伽德罗常数, e 为电子核电荷数, ψ 为电势, Z_i^* 为相组成为 c_i 的相的有效电荷数。

根据自由能函数构建动力学方程,由于选择的相场变量分别为守恒变量及非守恒变量,因此构建两种相应的动力学方程如下:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left[D(\phi_i) \sum_i \phi_i \nabla c_i - \frac{D(\phi_i)}{k_B T} \sum_i \phi_i c_i \cdot e Z_i^* \nabla \psi \right] \quad (19)$$

$$\phi_{it} = -\frac{2}{N_p} \chi_i \chi_j \sum_{i \neq j}^N M_{ij} \left[\frac{\epsilon_{ij}^2}{2} (\nabla^2 \phi_j - \nabla^2 \phi_i) + w_{ij} (\phi_j - \phi_i) + \chi_k \sum_{k \neq ij}^N \left\{ \left(\frac{\epsilon_{ik}^2}{2} - \frac{\epsilon_{jk}^2}{2} \right) \nabla^2 \phi_k + (w_{ik} - w_{jk}) \phi_k \right\} + (f_i - c_i f') - (f_j - c_j f') \right] \quad (20)$$

式(19)中, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为体系温度, $D(\phi_i)$ 为第 i 相的扩散系数。式(20)中,当对应区域存在相应相时, $\chi_i = 1$, 反之为零, N_p 表示计算区域共存相的数量, M_{ij} 表示界面区域的迁移率。 ϕ_i 为第 i 相的序参量,表示该相的体积分, ϕ_{it} 为相场变量对时间的偏导数,表示该相的体积分变化率, N_p 为归一化因子, χ_i 为权重函数, f' 为自由能函数对浓度的导数。

该模型对焊点电迁移过程进行如下假设:并未考虑焊点内空洞的形成及迁移;对 IMC 层施加最大背应力,并假设整个 IMC 层的应力分布是线性的;忽略温度对组分电阻率的影响,仅考虑组分和相变化引起的电阻率变化^[73-75]。这些假设在保证计算效率的同时也限定了其适用范围:未考虑空洞形成与迁移的假设使得模型仅能准确预测电迁移早期阶段的 IMC 生长行为,而无法反映阴极侧空洞演化导致的后期失效机制;采用最大背应力和线性应力分布的简化处理会高估界面应力梯度为 15%~20%,这要求模型适用于 IMC 层较薄且组织均匀的体系,对于厚 IMC 层或存在显著晶粒取向差异的情况需引入非线性应力修正;忽略温度对电阻率的影响将使高温区域的电流密度分布计算产生偏差,因此模型更适用于等温或小温度梯度条件。这些假设共同决定了该模型最适合用

于预测中等电流密度下、微观结构相对均匀的焊点在服役初期的IMC演化行为,若要扩展至完整电迁移寿命预测或复杂工况,则需要逐步完善相关假设并引入多物理场耦合^[73-75]。

Park 等人^[76-77](图11)开发了相场模型用于Cu/Cu/Sn界面IMC在瞬态液相键合过程中的组织演变模拟,Cu₆Sn₅在液相Sn存在时占主导生长,在Sn耗尽后Cu₆Sn₅层晶粒相互碰撞并粗化,同时Cu₃Sn层生长直至完全消耗Cu₆Sn₅层停止,该模型为实验前合理预测焊点形态提供了理论依据。该研究者还结合了CALPHAD热力学描述和电化学贡献研究了电迁移条件下Cu/Sn焊料系统中金属间化合物层的演变,分析了电流密度和极性对IMC生长的影响,发现由Cu和Sn扩散通量不平衡引起的非平衡空位产生的背应力对IMC层演变起关键作用,模拟结果与实验现象在IMC生长速率、晶粒形态和界面粗糙度演变方面定性吻合良好。

Attari 等人^[78]建立多相场模拟,结合电荷连续性方程及空位运输模型,探究电迁移作用下Cu/Sn/Cu三明治结构中界面处金属间化合物的生长及空位的演化,观察不同温度和电流密度的条件下界面IMC的形核、扩展及合并过程。研究发现阴极侧IMC溶解阳极侧迅速生长,IMC层的演化受短程扩散通道、界面特性以及空位运输影响,且Cu₃Sn层中空位浓度随时间演化而不断增加,将引起微空洞的聚集和失效。Haq 等人^[79]构建多物理场相场模型,结合有限元方法对Sn基钎料在电迁移作用下金属间化合物的演化过程进行探究,观察不同电流密度下Sn的晶粒取向对IMC生长的影响。结果表明,当晶粒取向与电流方向一致时,晶界对原子的迁移起加速作用,并

造成IMC层团簇化转变。Guo 等人^[80]还针对热-电-力条件下Cu/Sn界面的粗糙度对IMC的扩散行为及应力分布影响进行了研究,揭示了界面粗糙度对IMC演变的非单调影响机制。Zhao 等人^[81]通过泰勒展开的方法推导了自由能函数,并开展了多物理场耦合电迁移失效模拟研究,提出了临界断裂韧性和电压偏差率的混合模型作为失效判据来评估封装可靠性。Kunwar 等人^[82-83]通过机器学习与相场法结合,并对体系施加温度场,观察界面处Cu₆Sn₅晶粒在成分驱动力及温度梯度驱动力共同作用下的形貌演化情况,探究有效电荷数及热迁移驱动力对焊点电迁移程度的影响。Huh 等^[84]采用多相场模型,对焊点在回流焊过程中形成的IMC层微观组织和生长演变进行模拟,提出了快速晶界扩散可以使IMC层增厚而Gibbs-Thomson效应会导致界面面积减小,合理地解释了IMC层在晶界处的快速扩散、晶粒随IMC层增厚而同步粗化这一现象。Durga 等^[85]在该模型中考虑了材料的弹塑性效应,探究其对IMC生长的影响,发现外部载荷的大小、加载条件及其相对于接头的加载方向均会对IMC的生长造成影响。

5.2 多元多相合金微观组织模拟

在电子封装领域,多相多元合金微观组织较为复杂,易引发可靠性问题。在锂金属电池中,枝晶的生长会破坏固态电解质膜(solid electrolyte interface, SEI),导致电池内部短路,引发安全隐患,同时还会产生“死锂”,造成电池容量大幅衰减,库仑效率降低^[86]。通过控制枝晶的生长方向和形态,可以设计出具有特定结构的微纳材料,用于改善电子器件的散热性能或增强其机械稳定性^[87]。此外,研究枝晶生长机制和抑制方法,有助于开发更安

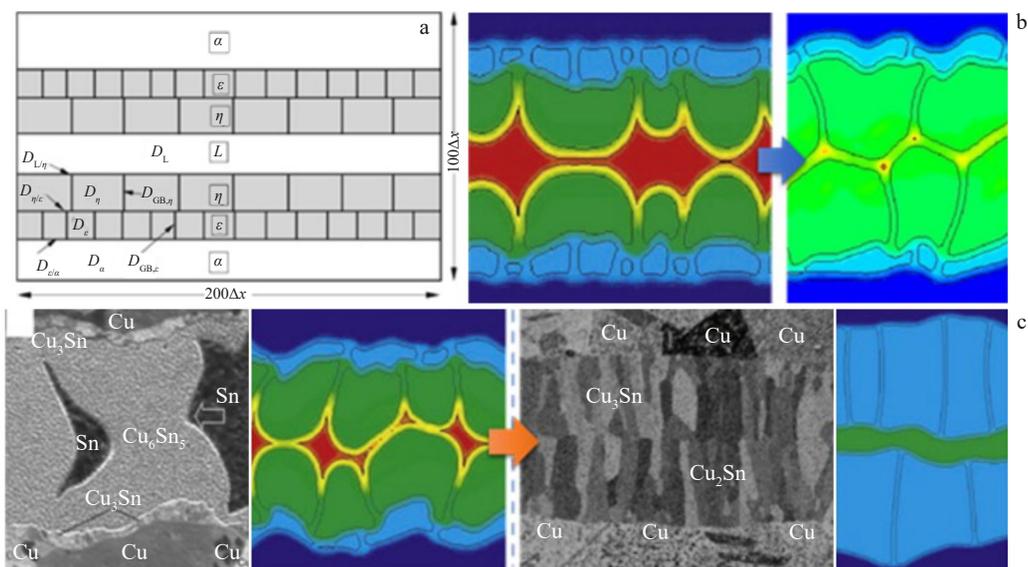


图11 瞬态液相键合界面IMC生长的实验与相场模拟

Fig.11 Experiment and phase-field simulation of IMC growth at transient liquid phase bonding interface^[76]: (a) schematic diagram of the IMC model; (b) evolution of grain growth, and (c) comparison between simulated and experimental IMC growth

全、更高效的电子封装材料和技术^[88]。

Seiz 等人^[89]通过相场法模拟了合金凝固过程中树枝晶、共晶及树枝晶-共晶耦合生长的微观结构演变,开发了一种可同时模拟这 3 种结构的模型。研究发现,耦合生长对单独生长的枝晶和共晶影响较小,但会使共晶层间距减小、靠近树枝晶的共晶层厚度增加,且改变凝固速度会导致微观结构的形态滞后现象。Han^[90]等人对 Al-Li 合金激光焊接过程熔池微观结构演变进行多物理场多尺度模拟,首先构建宏观尺度传质传热模型,使用 Jmatpro 软件获取合金热物理性能;之后进行微观组织演化的相场模拟,考虑形核及多晶凝固建立多组分的二维和三维相场模型;最后建立加速实验模型,验证模拟结果。模拟发现,随着形核率增加,柱状晶生长距离减小,晶粒由柱状晶向等轴晶转变,且等轴晶从树枝晶结构变为无明显树枝晶结构。Park 等人^[91]构建半定量的二维和三维相场模型,研究了过共晶 Al-Mn-Fe-Si 合金在凝固过程中微观结构的演变,重点关注 Al_6Mn 相的析出行为和不同凝固阶段形成的 $Al_6(Mn_x, Fe_{1-x})$ 相中 Mn 与 Fe 的比例差异。研究发现,由于 Fe 在 α -Al 相中溶解度有限,导致其在枝晶间液相中富集,使得后期形成的析出相中 Fe 含量显著高于早期主析出相。Kang 等人^[92]通过电子背散射衍射技术 (electron backscattered diffraction, EBSD)、透射电子显微镜 (transmission electron microscope, TEM) 和相场法 (phase field, PF) 研究了亚共晶 Mg-Al 合金在部分离异共晶凝固过程中的微观结构演变。结果表明, α -Mg 和 β -Mg₁₇Al₁₂ 相的离异共晶结构由 Al 含量和冷却速率决定,随着 Al 含量增加,结构从完全离异向部分离异转变。分析发现, β 相和 α 相之间存在显著溶质浓度差异,生长过程非交互式。相场模拟显示, β 相先在 α 相枝晶间液相中形核生长,随后触发 α 相形核,形成部分离异共晶结构。研究为理解离异共晶形成机制及优化合金性能提供了理论依据。

有许多学者借助 MICRESS 软件成功实现了对 Al-Si、Mg-Al 等典型合金系统凝固过程中枝晶形貌、相分布等微观组织演化的定量预测^[93-95]。该软件通过与热力学数据库的直接耦合,可自动获取精确的相平衡成分、吉布斯自由能、界面能等关键热力学参数,通过输入合金成分和温度条件,使用 CALPHAD 方法计算多元体系的热力学平衡数据,并将这些参数整合到相场模型的自由能函数中。

Xin 等人^[96]通过第一性原理和相场模拟的方法,并结合实验对体心立方 (bcc) 结构的 Mg-11Li-3Al (LA113) 合金在非等温失效过程中的相变行为和机制进行分析。结果表明,该合金的相变在物理过程中发生了从 Al 富集区到 θ 相最后变成 AlLi 相的转变。通过相场模拟获取了旋节分解和 θ 相到 AlLi 的相变过程,并分析了相变与力

学性能的关联,为新一代超轻 Mg 合金的成分设计与性能优化提供理论支撑。Nomoto 等^[97]采用多相场模型与计算相图方法相结合的方式,对 Al-Ti-B 和 Al-Si-Ti-B 系合金在凝固过程中的晶粒细化现象展开模拟研究,为深入探究这些合金体系中晶粒细化的机制提供了理论依据,有助于优化相关合金的制备工艺。Fukumoto 等^[98]利用该软件预测了 Fe-Cr-Ni-Mo-N 合金凝固过程中 12 μm 区域内 σ 相、Mo 及 N 的形成情况 (图 12)。这一研究成果对于掌握 Fe-Cr-Ni-Mo-N 合金的凝固行为、控制其最终微观组织和性能提供了关键信息。Tian 等人^[99]针对 Cu-Al-Ni 合金,通过单向冷轧、分离式霍普金森压杆变形 (split Hopkinson pressure bar, SHPB) 及时效处理的热机械处理工艺,实现了强度与延展性的协同提升。其核心机制包括孪生/晶界优化和第二相优化,两者均与位错运动相关且协同作用;通过相场晶体法模拟了孪晶与位错的相互作用,最终提出高强高延铜合金的典型特征为小晶粒尺寸、高孪生密度和稳定晶界。Ham 等^[100]提出一种高效、快速且完全显式的自适应数值算法,用于求解二维和三维空间中新型晶体生长相场模型。该算法采用自适应窄带域方法和双尺寸网格技术,并结合显式欧拉法进行数值求解,能有效消除新型相场模型中的人工曲率效应,在保证计算精度的同时提高了计算效率,为晶体生长模拟提供了有效手段。

6 晶体相场法

晶体相场法 (phase-field crystal, PFC) 是相场法的一个分支,专注于晶体结构和原子尺度的模拟。它通过引入原子密度分布作为相场变量,并结合晶体的自由能泛函来描述系统的演化。其核心在于通过自由能泛函的简化 (如基于两点相关函数的多项式拟合) 来捕捉晶体的微观结构和原子运动过程,可以在扩散时间尺度上模拟原子的动态行为,同时保持较高的计算效率。它特别适用于研究晶体生长、枝晶形成、晶体相变以及多晶体系的微观结构演化。

自 2002 年起, Elder 等人^[101-102]基于 Swift-Hohenberg 自由能泛函和过阻尼保守场动力学方程建立了晶体相场模型,并在 2007 年从经典密度泛函理论 (classical density functional theory, CDFT) 出发进一步完善了该模型的自由能泛函,为其奠定了坚实的物理和数学基础^[103]。CDFT 中自由能泛函的核心是两点相关函数 C_2 , 其可通过晶格常数、晶体体积模量和液相等温压缩率 3 个参数表征。PFC 模型的自由能泛函展开式是 C_2 第一个峰的四次拟合多项式,这种简化极大提高了计算效率,使其能够描述扩散时间尺度上的原子运动过程。此后,研究者们受到这种“简化”思路的启发,提出了多种不同形式的 PFC 自由能泛函,如八阶单模 PFC 模型、双模 PFC 模型以

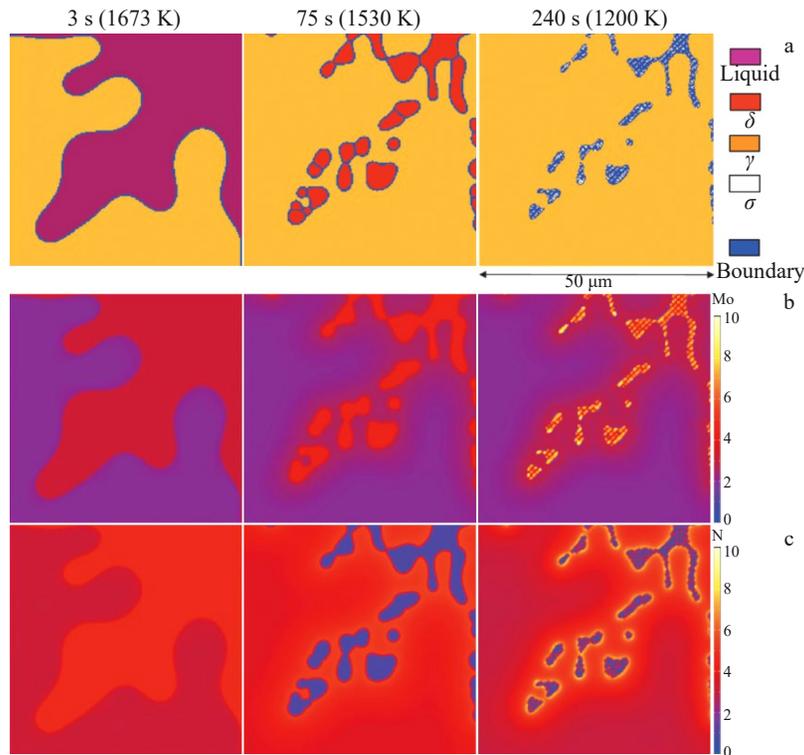


图12 合金中 α 相形成及Mo和N的微观偏析在不同时间的模拟结果

Fig.12 Simulation results of α phase formation (a), microsegregation of Mo (b) and N (c) of alloy at different time

及三模近似PFC模型等,以描述不同的晶体结构。此外,Greenwood等人^[104]采用可叠加的高斯函数拟合 C_2 ,建立了多模PFC模型,能够很好地描述晶体结构相变过程,并可扩展到多元体系中。除了改变拟合相关函数的数学模型外,研究者们还通过耦合其他物理场或添加罚函数来构建特定系统的PFC模型,如合金PFC模型、液晶PFC模型、空位相场晶体模型(vacancy phase field crystal, VPFC)、多组分晶体相场模型(multi-component phase field crystal, M-PFC)、描述缺陷电迁移的PFC模型以及描述铁磁相变的PFC模型等,极大地拓展了该模型的应用范围。

晶体相场法在模拟材料微观组织演化的理论与实践均取得显著进展,在组织凝固、固态相变、晶粒生长、显微组织分析以及裂纹扩展等方面得到广泛应用^[105]。随着该领域研究不断深入,一系列创新性成果涌现,对理论发展和实际应用起到重要推动作用。

6.1 Kirkendall 空洞的演化和生长

马文婧等^[106]运用晶体相场法模拟Sn/Cu互连体系中Kirkendall空洞的演化和生长动力学,构建二元合金晶体相场模型,研究空洞的形成、形貌演化及长大过程,分析界面 Cu_3Sn 层厚度和杂质含量对空洞形貌及数量尺寸的影响(图13)。研究表明,Kirkendall空洞的数量和尺寸随 Cu_3Sn 层厚度增加而增大,但厚度对其形核位置和生长规律影响不明显,空洞数量随时间呈先增后减的规律。

杂质含量增加时,空洞数量、尺寸和生长速率均增大,但对形核位置和生长规律影响不明显,数量变化规律仍为先增后减。

6.2 TSV 热膨出

当TSV结构进行热加工时,由于普通填充材料Cu与Si之间的热膨胀系数不匹配会导致突起^[107]从而造成后端线层的损坏,导致3D封装失效,因此进行原子尺度的结构可控模拟是重点研究手段。通常使用晶体相场模型对Cu突起进行模拟,可实现原子尺度和扩散时间尺度分辨率的材料微观结构演化模拟^[108-110]。

Liu^[111]等人采用晶体相场模型,对TSV结构中Cu热膨出现象进行研究,结果表明温度越高TSV突起越大,当温度低于300℃时,位错运动引起的变形占主导地位,当温度高于300℃时,扩散的位错蠕变同时发生。当TSV晶粒结构不同时,会产生不同的突起轮廓:当TSV顶端有单一晶粒时,会产生突起和侵入现象;当顶端含有多个晶粒时,会造成两端突出现象。对TSV结构施加载荷可以发现,在对称载荷作用下,晶粒的合并发生在靠近顶端区域,通过应变分布的计算可对TSV热膨出现象进行有效预测。

7 未来发展方向

本文基于两种不同的相场变量对相场模型进行总结,探究相场模拟在电子封装领域的应用,关注其对互连器件可靠性问题的研究,分析几种常见的可靠性失效模

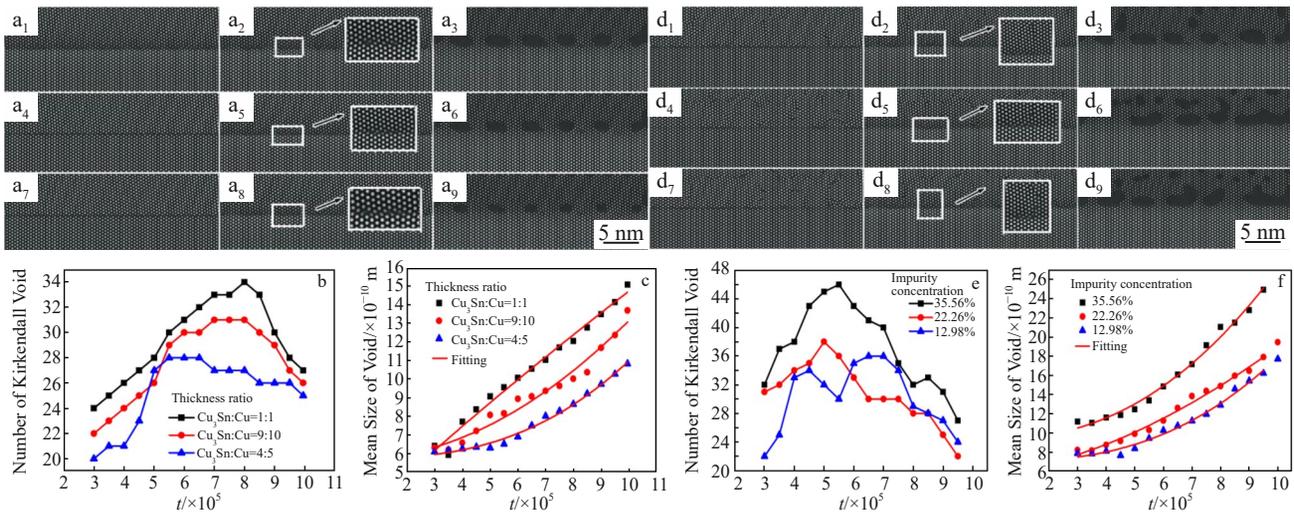


图 13 Sn/Cu 界面 IMC 层厚度与杂质含量对空洞形成影响的晶体相场研究^[106]

Fig.13 Crystal phase-field study on influences of IMC layer thickness (a_1 – a_9 , b–c) and impurity content (d_1 – d_9 , e–f) on void formation in Sn/Cu interface: (a_1 – a_9) simulated morphologies of Kirkendall voids at the Cu/Cu₃Sn interface with thickness ratios of Cu₃Sn layer to Cu layer being 1:1 (a_1 – a_3), 9:10 (a_4 – a_6) and 4:5 (a_7 – a_9) at $t=0.6\times 10^5$ (a_1 , a_4 , a_7), $t=1\times 10^5$ (a_2 , a_5 , a_8) and $t=7\times 10^5$ (a_3 , a_6 , a_9); (b, e) evolution of void number; (c, f) evolution of void size; (d_1 – d_9) simulated morphologies of Kirkendall voids at the Cu/Cu₃Sn interfaces with impurity concentrations of 12.98% (d_1 – d_3), 22.26% (d_4 – d_6) and 35.56% (d_7 – d_9) at $t=0.6\times 10^5$ (d_1 , d_4 , d_7), $t=1\times 10^5$ (d_2 , d_5 , d_8) and $t=7\times 10^5$ (d_3 , d_6 , d_9)

式并对其进行机理分析,总结导致电子元件失效问题的原因。这些模型从不同的角度分析了常见的可靠性失效模式,但目前的研究仍存在一定的局限性。在此基础上,本文提出进一步的研究工作。

7.1 多尺度多物理场耦合模型

随着电子封装结构的日益复杂,相场模拟将更多地结合热、力、电等多物理场耦合效应,以更全面地研究封装结构的力学性能和可靠性。更加注重通过相场模拟建立微观组织形貌与宏观性能之间的定量关系,例如焊点内微观组织演变、IMC 生长过程等,从而为优化封装材料和结构提供理论支持。将微观相场模拟与宏观有限元分析结合实现多尺度模拟,可以在不同尺度上分析封装结构的性能,从而更准确地预测封装的可靠性和失效行为。

7.2 构建三维相场模型模拟真实焊点失效过程

当前的相场模型主要基于二维空间进行研究,这使得无法全面捕捉到三维焊点中微观组织形貌演化过程。因此,未来的研究可以着手扩展现有模型,采用三维相场模拟来更真实地研究电子元件焊点内相关组织演化规律。三维模型将有助于更精细地描绘电迁移过程中焊点内部的微观结构变化,提升预测精度,并为电子封装的设计和可靠性优化提供更具实用价值的技术支持。

7.3 材料体系的扩展

焊点材料的选择和其微观结构对电迁移失效过程具有重要影响,不同材料体系使用的相场模型可能不同。因此,未来的研究可以探索不同焊点材料以及其微观结构特征对电迁移失效模式的影响。焊点材料和工艺不断

发展,如何将不同材料体系的特点纳入相场模型中,成为未来的研究重点。

7.4 与机器学习相结合

相场模拟与机器学习(ML)的结合,并通过相场模拟生成微观结构演化数据集构建神经网络,可高效预测材料性能,利用长短期记忆网络(long short-term memory, LSTM)等算法建立快速替代模型,将模拟速度提升 3 个数量级^[112];同时 ML 能优化相场模拟关键参数,而相场模拟为 ML 提供物理约束,避免数据驱动的过拟合。这种融合策略既可实现正向预测,又能通过高通量相场模拟与 ML 协同逆向设计最优材料参数,但需解决数据规模、模型可解释性等挑战。该交叉方法显著降低了多尺度模拟成本,建立了工艺-结构-性能的定量关联,推动了材料研发从经验探索向精准设计的转变。

8 结语

本文围绕电子封装中微互连焊点的可靠性问题,系统梳理了相场模拟在该领域的应用与发展,明确了相场模拟作为研究微观组织演化及界面动态行为的有效工具的重要性。文章介绍了相场模拟的基本理论,分类总结了不同相场模型的应用:守恒变量模型用于模拟空洞迁移演化、相分离等过程;非守恒变量模型聚焦于 TSV 微观组织演化、晶粒长大等现象;复杂相场模型结合两类变量,深入探究了界面 IMC 生长、枝晶生长等复杂失效机制;晶体相场法则模拟了 Kirkendall 空洞演化、TSV 热膨胀及多元合金凝固等问题。

参考文献

References

- [1] Wang S B, Yao Y, Long X. *Applied Sciences*[J], 2019, 9(2): 227
- [2] Zhou Zibo(周梓博), Zhai Qiang(翟强). *Electronics World*(电子世界)[J], 2021(17): 25
- [3] Zhang Y C, Ding C X, Feng R *et al.* *Measurement*[J], 2024, 226: 114125
- [4] Li Haijun(李海军), Zong Fuchun(宗福春), Hu Zengwu(胡增武). *Electronics & Packaging*(电子与封装)[J], 2022, 22(12): 21
- [5] Chen Zhiwen(陈志文), Mei Yunhui(梅云辉), Liu Sheng(刘胜). *Journal of Mechanical Engineering*(机械工程学报)[J], 2021, 57(16): 248
- [6] Wang Juanjuan(王娟娟), Yu Yingfeng(余英丰), Jing Hua(景华). *China Adhesives*(中国胶粘剂)[J], 2023, 32(2): 25
- [7] Abteu M, Selvaduray G. *Materials Science and Engineering R: Reports*[J], 2000, 27(5–6): 95
- [8] Besser P R, Madden M C, Flinn P A. *Journal of Applied Physics*[J], 1992, 72(8): 3792
- [9] Madanipour H, Kim Y R, Kim C U *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2021, 862: 158043
- [10] Liu Baolei(刘宝磊). *Unidirectional Growth of Cu-Sn Compounds Assisted by Electric Currents and Ultrafast Bonding Mechanism for Microsolder Joints*(Cu-Sn 化合物电流辅助定向生长与微焊点瞬态键合机理)[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2017
- [11] Cai Chongyang, An Rong, Wang Chunqing *et al.* *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*[J], 2018, 29: 8287
- [12] Yu Chun(余春). *Study of Electromigration Reliability of Solder Bump Joints*(钎料凸点互连结构电迁移可靠性研究)[D]. Shanghai: Shanghai Jiaotong University, 2009
- [13] Chiang K N, Lee C C, Lee C C *et al.* *Applied Physics Letters*[J], 2006, 88(7): 072102
- [14] Tian Ruyu, Chen Shuai, Feng Jiayun *et al.* *Materials Characterization*[J], 2023, 201: 112979
- [15] Goh Y X, Haseeb A S M A, Liew H L *et al.* *Journal of Materials Science*[J], 2015, 50: 4258
- [16] Chiu Tz-Cheng, Zeng Kejun, Stierman R *et al.* *54th Electronic Components and Technology Conference*[C]. Las Vegas: IEEE, 2004: 1256
- [17] Liang Xiaobo(梁晓波), Li Xiaoyan(李晓延), Yao Peng(姚鹏) *et al.* *Journal of Materials Engineering*(材料工程)[J], 2018, 46(8): 106
- [18] Tonks M R, Aagesen L K. *Annual Review of Materials Research*[J], 2019, 49(1): 79
- [19] Asp K, Ågren J. *Acta Materialia*[J], 2006, 54(5): 1241
- [20] Gugenberger C, Spatschek R, Kassner K. *Physical Review E*[J], 2008, 78(1): 016703
- [21] Zhao Wenjuan(赵文娟), Ding Hua(丁桦). *Aeronautical Manufacturing Technology*(航空制造技术)[J], 2007, 50(8): 68
- [22] Böttger B, Eiken J, Steinbach I. *Acta Materialia*[J], 2006, 54(10): 2697
- [23] Stefanovic P, Haataja M, Provatas N. *Physical Review Letters*[J], 2006, 96(22): 225504
- [24] Yang C L, Yang F, Meng X M *et al.* *International Journal of Heat and Mass Transfer*[J], 2024, 218: 124754
- [25] Wang J J, Wang Y, Ihlefeld J F *et al.* *Acta Materialia*[J], 2016, 111: 220
- [26] Tourret D, Liu H, LLorca J. *Progress in Materials Science*[J], 2022, 123: 100810
- [27] Caginalp G, Xie W. *Physical Review E*[J], 1993, 48(3): 1897
- [28] Chen Longqing, Zhao Yuhong. *Progress in Materials Science*[J], 2022, 124: 100868
- [29] Liang ShuiBao(梁水保). *Phase Field Study of the Microstructure Evolution and Its Influence on Reliability of Microscale Interconnects Under Electro-thermo-mechanical Loads*(电-热-力场作用下微互连中微观组织演化及其对可靠性影响的相场模拟研究)[D]. Guangzhou: South China University of Technology, 2019
- [30] Chen L Q, Yang W. *Physical Review B*[J], 1994, 50(21): 15752
- [31] Haessner F, Hofmann S, Seekel H. *Scripta Metallurgica*[J], 1974, 8(4): 299
- [32] Moelans N, Blanpain B, Wollants P. *Acta Materialia*[J], 2007, 55(6): 2173
- [33] Bai X M, Zhang Y, Tonks M R. *Acta Materialia*[J], 2015, 85: 95
- [34] Kim S G, Kim D I, Kim W T *et al.* *Physical Review E*[J], 2006, 74(6): 061605
- [35] Cyrot M. *Reports on Progress in Physics*[J], 1973, 36(2): 103
- [36] Lin Y H, Hu Y C, Tsai C M *et al.* *Acta Materialia*[J], 2005, 53(7): 2029
- [37] Novick-Cohen A. *Handbook of Differential Equations: Evolutionary Equations*[J], 2008, 4: 201
- [38] Beneš M, Chalupecký V, Mikula K. *Applied Numerical Mathematics*[J], 2004, 51(2–3): 187
- [39] Moelans N. *Acta Materialia*[J], 2011, 59(3): 1077
- [40] Biner S B. *Programming Phase-Field Modeling*[M]. Switzerland: Springer International Publishing, 2017
- [41] Zhang Wei(张伟), Cheng Dazhao(程大钊), Liu Caiyan(刘彩艳) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2024, 53(10): 2926
- [42] Zhu Wei(朱伟), Cheng Dazhao(程大钊), Liu Caiyan(刘彩艳) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2024, 53(8): 2193
- [43] Li Y L, Hu S Y, Sun X *et al.* *Journal of Nuclear Materials*[J], 2010, 407(2): 119
- [44] Dong Congcong(董聪聪), Huang Peizhen(黄佩珍). *System Simulation Technology*(系统仿真技术)[J], 2022, 18(1): 1
- [45] Li Y L, Hu S Y, Sun X *et al.* *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*[J], 2011, 54(5): 856
- [46] Hu S Y, Henager Jr C H. *Acta Materialia*[J], 2010, 58(9): 3230
- [47] Sadasiva S, Vaitheeswaran P, Subbarayan G. *Computational Mechanics*[J], 2020, 66: 373
- [48] Santoki J, Mukherjee A, Schneider D *et al.* *Journal of Applied Physics*[J], 2021, 129(2): 025110

- [49] Chen Y Z, Liu F, Yang G C *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2007, 427(1-2): L1
- [50] Li Yong(李勇), Li Huan(李焕), Zhao Yaru(赵亚茹). *Materials Reports(材料导报)*[J], 2016, 30(9): 95
- [51] Ubachs R L J M, Schreurs P J G, Geers M G D. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 2004, 52(8): 1763
- [52] Tavakoli M M, Tavakoli R, Davami P *et al.* *Journal of Computational Electronics*[J], 2014, 13(2): 425
- [53] Liang S B, Ke C B, Ma W J *et al.* *2016 IEEE 66th Electronic Components and Technology Conference (ECTC)*[C]. Las Vegas: IEEE, 2016: 264
- [54] Liang S B, Ke C B, Huang J Q *et al.* *Microelectronics Reliability*[J], 2019, 92: 1
- [55] Cheng Zihao(程子浩). *Evolution Behaviors of Core-Shell Nanophase in Fe-Cr-Al-Cu-Ni Multi-Component Alloys(Fe-Cr-Al-Cu-Ni 多元合金核壳纳米相演化行为)*[D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2022
- [56] Ma Qingshuang, Zhang Wei, Wang Yuntong *et al.* *Materials Today Communications*[J] 2024, 40: 109572
- [57] Zeng Xin, Huang Zhiheng, Xiao Min *et al.* *2022 23rd International Conference on Electronic Packaging Technology (ICEPT)*[C]. Dalian: IEEE, 2022: 1
- [58] Gong Yanpeng, Kou Yuguo, Yue Qiang *et al.* *International Communications in Heat and Mass Transfer*[J], 2024, 159: 108033
- [59] Liang S B, Wei C, Ke C B *et al.* *IEEE Transactions on Device and Materials Reliability*[J], 2022, 22(2): 267
- [60] Nabiollahi N, Moelans N, Gonzalez M *et al.* *Microelectronics Reliability*[J], 2015, 55(5): 765
- [61] Zeng X, Huang Z H, Wang S J *et al.* *IEEE Transactions on Electron Devices*[J], 2024 71(1): 322
- [62] Han S L, Li C Y, Chen Y H *et al.* *Thin Solid Films*[J], 2024, 805: 140514
- [63] Yan Feng(燕峰), Liu Chunli(刘春丽). *Journal of University of Science and Technology Liaoning(辽宁科技大学学报)*[J], 2011, 34(4): 4
- [64] Soliman O R, Mabied A F, Ibrahim S A *et al.* *Materials Chemistry and Physics*[J], 2025, 329: 130105
- [65] Wu K A, Voorhees P W. *Acta Materialia*[J], 2012, 60(1): 407
- [66] Miyoshi E, Takaki T, Ohno M *et al.* *npj Computational Materials*[J], 2017, 3(1): 25
- [67] Krill III C E, Chen L Q. *Acta Materialia*[J], 2002, 50(12): 3059
- [68] Moelans N, Blanpain B, Wollants P. *Physical Review B*[J], 2008, 78(2): 024113
- [69] Mukherjee A, Ankit K, Selzer M *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2023, 228: 112330
- [70] Vanherpe L, Moelans N, Blanpain B *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2010, 49(2): 340
- [71] Fu Z W, Zhou B, Yao R H, *et al.* *IEEE Transactions on Device and Materials Reliability*[J], 2017, 17(4): 773
- [72] Park M S, Gibbons S L, Arróyave R. *Acta Materialia*[J], 2013, 61(19): 7142
- [73] Kang S K, Rai R S, Purushothaman S. *Journal of Electronic Materials*[J], 1996, 25: 1113
- [74] Lee Y G, Duh J G. *Journal of Materials Science*[J], 1998, 33: 5569
- [75] Schaefer M, Fournelle R A, Liang J. *Journal of Electronic Materials*[J], 1998, 27: 1167
- [76] Park M S, Gibbons S L, Arróyave R. *Acta Materialia*[J], 2012, 60(18): 6278
- [77] Park M S, Gibbons S L, Arróyave R. *Journal of Electronic Materials*[J], 2013, 42: 999
- [78] Attari V, Ghosh S, Duong T *et al.* *Acta Materialia*[J], 2018, 160: 185
- [79] Haq F, Pham A, Sadasiva S *et al.* *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2024, 32(6): 065017
- [80] Guo Hao, Zhang Long, Yin Limeng. *Microelectronics Reliability*[J], 2022, 137: 114792
- [81] Zhao Zhipeng, Zhang Xiaomin, Wu Zhouzhi *et al.* *Mechanics of Materials*[J], 2021, 163: 104104
- [82] Kunwar Anil, Coutinho Yuri Amorim, Hektor Johan *et al.* *Journal of Materials Science & Technology*[J], 2020, 59: 203
- [83] Kunwar A, Hektor J, Nomoto S *et al.* *International Journal of Mechanical Sciences*[J], 2020, 184: 105843
- [84] Huh J Y, Hong K K, Kim Y B *et al.* *Journal of Electronic Materials*[J], 2004, 33: 1161
- [85] Durga A, Wollants P, Moelans N. *Acta Materialia*[J], 2020, 188: 241
- [86] Huang Yue(黄月), Gu Yu(顾宇), Shang Hong(商虹). *Journal of Yunnan University(云南大学学报)*[J], 2024, 46(4): 720
- [87] Geng L, Xue D C, Yao J M *et al.* *Energy & Environmental Science*[J], 2023, 16(6): 2658
- [88] Feng Shanshan(丰闪闪), Liu Xiaobin(刘晓斌), Guo Shilin(郭石麟) *et al.* *CIESC Journal(化工学报)*[J], 2022, 73(1): 97
- [89] Seiz M, Kellner M, Nestler B. *Acta Materialia*[J], 2023, 254: 118965
- [90] Han C, Jiang P, Geng S N *et al.* *Journal of Materials Science & Technology*[J], 2024, 171: 235
- [91] Park J, Oh C S, Kang J H *et al.* *Metals*[J], 2020, 10(10): 1325
- [92] Kang J H, Park J, Song K *et al.* *Journal of Magnesium and Alloys*[J], 2022, 10(6): 1672
- [93] Li Bin(李斌), Xu Qingyan(许庆彦), Liu Baicheng(柳百成). *Acta Metallurgica Sinica(金属学报)*[J], 2007, 43(3): 240
- [94] Zhang Qiang(张强), Yang Zenan(杨泽南), Wang Zhen(王祯). *Aeronautical Manufacturing Technology(航空制造技术)*[J], 2017, (Z2): 48
- [95] Xu Hong(徐宏), Li Jingshe(李京社), Fu Jianxun(付建勋) *et al.* *Chinese Journal of Engineering(工程科学学报)*[J], 2009, 31(3): 352
- [96] Xin Tongzheng, Tang Song, Ji Fan *et al.* *Acta Materialia*[J], 2022, 239: 118248
- [97] Nomoto S, Minamoto S, Nakajima K. *ISIJ International*[J],

- 2009, 49(7): 1019
- [98] Fukumoto S, Oikawa Y, Tsuge S *et al.* *ISIJ International*[J], 2010, 50(3): 445
- [99] Tian X L, Zhao Y H, Gu T *et al.* *Materials Science and Engineering A*[J], 2022, 849: 143485
- [100] Ham Seokjun, Li Yibao, Kwak Soobin *et al.* *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*[J], 2024, 131: 107822
- [101] Elder K R, Katakowski M, Haataja M *et al.* *Physical Review Letters*[J], 2002, 88(24): 245701
- [102] Elder K R, Grant M. *Physical Review E*[J], 2004, 70(5): 051605
- [103] Singh Y. *Physics Reports*[J], 1991, 207(6): 351
- [104] Greenwood M, Ofori-Opoku N, Rottler J *et al.* *Physical Review B*[J], 2011, 84(6): 064104
- [105] Xue Yongdong(薛永栋), Han Jingtao(韩静涛), Xiang Song(向嵩). *Proceedings of 2004 Youth Academic Annual Conference of the Chinese Society for Metals*(2004年中国金属学会青年学术年会论文集)[C]. Beijing: The Chinese Society for Metals, 2004: 417
- [106] Ma Wenjing(马文婧), Ke Changbo(柯常波), Zhou Minbo(周敏波) *et al.* *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2015, 51(7): 873
- [107] Vogel D, Auerswald E, Auersperg J *et al.* *Microelectronics Reliability*[J], 2014, 54(9–10): 1963
- [108] Liu J X, Huang Z H, Conway P P *et al.* *2017 18th International Conference on Electronic Packaging Technology (ICEPT)*[C]. Harbin: IEEE, 2017: 789
- [109] Liu J X, Huang Z H, Zhang Y *et al.* *Japanese Journal of Applied Physics*[J], 2018, 58(1): 016502
- [110] Liu J X, Huang Z H, Conway P P. *2019 Electron Devices Technology and Manufacturing Conference (EDTM)* [C]. Singapore: IEEE, 2019: 303
- [111] Liu J X, Huang Z H, Conway P P *et al.* *IEEE Journal of the Electron Devices Society*[J], 2019, 7: 1270
- [112] Zhao Yuhong. *npj Computational Materials*[J], 2023, 9: 94

Application of Phase Field Simulation in Reliability of Electronic Packaging

Dong Shuhan¹, Wu Peng^{1,3}, Zhou Songchao¹, Li Haozhe¹, Sun Gehui², Lin Pengrong²,
Feng Jiayun^{1,3}, Wang Shang^{1,3}, Tian Yanhong^{1,3}

(1. State Key Laboratory of Precision Welding & Joining of Materials and Structures, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

(2. Beijing Microelectronics Technology Institute, Beijing 100076, China)

(3. Zhengzhou Advanced Research Institute, Harbin Institute of Technology, Zhengzhou 450018, China)

Abstract: With the rapid advancement of electronic devices towards miniaturization, high integration, and multifunctionality, the complexity of chip packaging has increased significantly. As packaging density continues to rise and solder joint size decreases, the operating conditions of electronic components in service become increasingly demanding. Consequently, the reliability of micro-interconnect solder joints has become a critical concern, with solder joint failure emerging as one of the key bottlenecks hindering the further development of electronic packaging techniques. This paper focuses on the failure behavior of micro-interconnect solder joints and reviews several common reliability issues in electronic packaging. Based on the selection of different phase-field variables, several typical phase-field modeling approaches are summarized. Furthermore, the paper analyzes the application and current progress of phase-field methods in simulating several representative failure modes, such as electromigration, through-silicon vias (TSVs), and interfacial intermetallic compound (IMC) growth. Finally, the potential of phase-field modeling in studying micro-scale failure mechanisms is discussed, along with its future development trends in multi-physics coupling, data-driven modeling, and engineering applications. This work aims to provide systematic references and methodological support for both theoretical analysis and practical engineering studies on the failure behavior of micro-interconnect solder joints.

Key words: phase field simulation; electronic packaging; reliability; electromigration

Corresponding author: Feng Jiayun, Ph. D. Associate Researcher, State Key Laboratory of Precision Welding & Joining of Materials and Structures, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, P. R. China, E-mail: fengjy@hit.edu.cn; Tian Yanhong, Ph. D. Professor, State Key Laboratory of Precision Welding & Joining of Materials and Structures, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, P. R. China. E-mail: tianyh@hit.edu.cn