宽线与近竹节状铝铜线中电迁移的溶质感知随机 Korhonen 模型

Narahara Chari Dingari[1 a)] [2],和 David R. Heskett[1] [2] *Worcester Polytechnic Institute Worcester Massachusetts USA*,,,) *Department of Physics, University of Rhode Island, Kingston, RI 02881, USA*

（日期：2026年11月24日）

我们将不断演化的铜场与随机晶粒图上的一维 Korhonen 应力方程耦合，用于宽线（10 μm）、窄线（3 μm）和近竹节状铝铜线。此前的随机微结构模拟将铜效应设为固定值，而大多数连续介质溶质模型采用预设结构并假定铜全部可移动；我们结合这两种方法，仅让溶解铜移动，过量部分则留作不可动析出物。对于温度为 200 ℃ 时每种条件下的 10^3 张图，我们报告成核时间和位置、永生比例以及 Black 定律参数。在阴极受限的线中，对于文中所述的铜扩散率，与不可动铜相比，铜耗尽会使中位成核时间缩短 1.15 至 1.20 倍；假定铜全部可移动，则在 2 重量百分比 Cu 时会使这一时间进一步被高估 2.24 至 2.36 倍；指数保持在 2 附近。在带储库端的宽线中，不可动析出物留下的铜阶跃会成为失效位置；若至少四分之一的析出物阻碍铝扩散，就会消除其无铜永生性。铜含量高于固溶线时，寿命不服从 Arrhenius 关系，因为溶解分数会随温度升高而增加：在 250 至 300 ℃ 范围内进行 Black 定律拟合，会使 150 ℃ 时的中位成核时间最高被高估 2.33 倍（铜含量为 2 重量百分比时），指数接近 2。在测试时长内，该模型定性地再现了窄线中的阴极侧损伤以及宽线中的铜积聚和中线峰值，但未能再现窄线中的阴极侧铜峰或较长寿命。

arXiv:2611.31206v1 [cond-mat.mtrl-sci] 23 Nov 2026

I. 引言

电迁移（EM）是金属原子在传导电子的动量传递作用下发生漂移的现象，它限制了集成电路中互连线的寿命。[1–3] 在两端阻挡原子通量的导线中，漂移会形成与之相抗的机械应力梯度。Korhonen及其同事将这种平衡写成静水应力的扩散方程，[4] 而Clement和Thompson则将其发展为受限导线中的应力演化模型。[5] 当拉伸应力达到临界值时，空洞便会形核。当电流密度与导线长度的乘积低于Blech 乘积（jL）$_{\text{crit}}$ 时，稳态应力会保持在该临界值以下，导线因而不失效。[6] 对于成核受限的失效，Korhonen 方程给出的寿命与 j^{-2} 成正比，即与Black 定律的指数 $n=2$ 成正比。[7,8]

少量添加铜可延长铝线的电迁移寿命。[9–11] 铜会偏聚到晶界，并减缓铝晶界扩散。[12,13] 铜自身会向阳极漂移，[14,15] 因此靠近阴极端的区域最先耗尽铜。经过一段孕育时间后，铝迁移和损伤会在耗尽区开始。[11,16,17] 在竹节状线中，铜带来的益处较小，失效时间的离散程度也更窄。[18] 若干模型将铜与应力联系起来。Korhonen等人将应力、电势和浓度梯度结合为驱动力。[19] Lloyd 和 Clement 推导了铜耗尽前沿远离阻挡边界移动时的 j^{-2} 标度关系。[20] Park、Andleigh 和 Thompson 将铝和铜的化学势与应力演化联系起来，研究具有给定结构的竹节状线和近竹状线，并在纯铝和铝铜合金中分别发现，$n=2$ 适用于成核，$n=1$ 适用于生长。[21] Kao 等人利用有限元模型重现了测得的铜分布和应力分布；在该模型中，当铜含量超过阈值时，铝迁移受到阻塞，[22] 近期关于铝铜合金线的研究也延续了这一方法。[23,24]Kim、Morris 和 Lee 对析出物进行了显式处理：他们模拟了阴极端无析出区的生长，并将孕育时间与该区域超过Blech长度所需的时间联系起来。[25]

另一类研究将微观结构视为随机的。近竹节状线中的多晶团簇决定了失效统计。[26–29] Knowlton、Clement和Thompson利用晶粒生长模拟器生成大量逼真的导线，并对其求解Korhonen型应力模型；由此获得了失效时间分布、多晶失效与穿晶失效之间的转变，以及近竹节状线的电流密度和温度标度关系。[30–32] Korhonen等人在蒙特卡洛晶粒结构上求解应力方程，并提取了表观激活能和电流密度指数。[33,34] Dwyer根据随机微观结构和Korhonen方程计算了形核时间分布。[35,36] 机制图展示了纯金属线和合金线中失效模式如何随 j 和 L变化，[37] 而针对铜互连的应力模型如今已从微观结构分辨

[38,39] 到全芯片[40,41] 模型。

据我们所知，这两方面的工作尚未被结合起来。在 Knowlton 的模拟中，铜被设为团簇扩散率的固定降低，使得团簇扩散率与竹节扩散系数之比为 200，而不是纯铝的 10^4 。[32] 上述溶质模型每次采用一种预先给定的结构，而大多数连续介质模型则允许全部铜移动。因此，演化中的铜场与随机晶粒结构对寿命的共同影响

a)电子邮箱：ndingari@wpi.edu；备用邮箱：ncdin-gari@gmail.com

分布、成核位置以及表观 Black 定律参数尚未得到计算。

这一问题并不局限于20世纪90年代的Al-Cu线。铝互连线在200至300 ℃下的电迁移，是高温电子器件所受的限制之一，而太空探索、地热、航空电子和汽车系统都需要这类器件。[42] 在结温为300至 450 ℃下运行的SiC功率器件中，源极接触孔内的铝电极因电迁移而失效，表观指数为 $n = 3.0$ 至3.4，并且在该指数保持固定的情况下，寿命被外推到跨越两个数量级的电流密度范围。[43] 在铜镶嵌互连线中，溶质再次作用于晶界传输。在Cu(Mn)线中，铜-溶质结合降低了铜晶界迁移，阴极处的铜耗尽之前先有一个孕育期，其间锰先被耗尽，情形如同铝（2原子百分比铜）；而在钴钨磷覆盖铜互连线中，当晶粒结构从近竹节状转变为多晶时，活化能从2.2 eV降至0.72 eV，[44] 这与铝铜中的三个要素相同。在先进制程节点，互连线（包括背面供电中的埋入式电源轨）呈竹节状或近竹节状，沿宽度方向仅有少数晶粒，其晶粒结构会改变电迁移驱动力。[45] 最后，基于Korhonen方程的基于物理的分析正在发展之中，用以取代建立在Black定律和Blech判据之上的基于规则的检查，但尚未进入实践；其中，工艺变异以活化能的分布形式进入，加速测试中测得的寿命则以相同的电流密度指数换算到使用条件。[46] 可迁移溶质和随机微观结构是否会在测试条件与使用条件之间改变 n 和 E_a，直接关系到这一步骤。

本文旨在弥补这一空白。这一步虽属渐进式拓展，但有四项贡献。

（*1*）随机微观结构上的耦合溶质-应力模型。我们将一个演化的铜浓度场 $c(x,\ t)$，连同漂移、扩散与耗尽，耦合到随机晶粒段图谱总体上的Korhonen应力方程。此处局部铝扩散率取决于局部铜含量，且仅溶解度以下的铜发生移动；超出部分以不动析出物形式保留。Knowlton[30,32] 在模拟的近竹节微观结构上求解了Korhonen应力，但仅将铜表示为团簇扩散率的固定降低（$D_c/D_b = 200$），并将铜耦合留作后续工作。Park、Andleigh和Thompson[21] 在指定互连线结构上将铜与铝的输运耦合到应力。Korhonen 等人[34] 使用了不含溶质的蒙特卡洛晶粒结构。我们的模型在一个一维求解器中汇合了这两条研究路线。我们通过在铜保持不可动以及铜全部可移动（早期溶质模型的假设）两种条件下重复总体模拟，检验演化场是否重要。结果表明它确实重要，且方式取决于线路的失效位置：成核前的铜耗尽会缩短阴极主导线路的中位成核时间，而不改变 n；在具有储库端的宽线中，不动析出物留下的铜阶跃成为失效位置。将铜全部视为可移动会夸大第一种效应，并逆转第二种效应。

(2) 近竹节状线和多晶粒线沿铜含量轴的寿命分布。基于每种条件下10^3 张图谱，我们报告近竹节状线和多晶粒（$W \gg D_{50}$）线的成核时间分布及不失效比例，并将其表示为初始铜含量和 Blech 乘积 jL 的函数。Knowlton 的模拟使用每个总体约 10 条线以及两种固定扩散率比（纯铝和铝铜），确立了近竹节状线在 W/D_{50}、L/D_{50}、 j 和 T 条件下的趋势，其中包括双峰失效统计。[32] 我们新增铜含量轴（0、0.5 和 2 重量百分比）、多晶粒类别，并采用足够大的总体规模，以解析早期失效（t_{01}）尾部。

(3) 检验溶质耗尽是否会改变表观 *Black* 参数。我们考察铜耗尽孕育阶段是否会改变从模拟总体中提取的表观电流密度指数 n 和活化能 E_a。先前研究发现，铝铜中的成核受限失效存在$n = 2$。[20,21] Knowlton 表明，在不含溶质的情况下， n和 E_a 会在机制转变过程中及接近永生性时偏离其扩散值。[32] Korhonen 等人从微结构样本中提取了表观 n和 E_a。[34] 我们通过比较铜含量受限、不可动、完全可动以及不含铜的运行结果，将溶质的影响与机制转变的影响分离开来，并报告无论 n是否偏离 2，所得结论如何。随后我们加入温度轴（150 至 300 ℃）；在此范围内，铜溶解度变化约十倍。我们还检验在加速条件下拟合的 Black 定律对较低 T 和 j下模拟寿命的预测效果。

(4) 损伤位置与铜分布特征同测量值的比较。 我们预测空洞沿线的形核位置，即阴极、内部团簇端部或朝向阳极，以及伴随的铜分布。我们将这些预测与在 200 °C下受应力的Al-Cu线的光学显微镜、原子力显微镜、扫描电子显微镜和能量色散谱结果进行定性比较。[47] Knowlton仅报告应力最大值位于团簇端部还是线端。他使用带符号的拉应力判据与压应力判据来比较寿命和激活能，而不是用来定位损伤。[32] Knowlton与Park等人均未报告失效位置统计或铜分布。

若干要素并非新内容。铜-应力耦合，[19–22] 随机晶粒图上的Korhonen应力，[26,30,34,35] （最后一项针对Cu 线）模拟的寿命分布随线宽的变化、近竹状线中的双峰统计，以及Black定律标度在机制转变中的失效[30–32] 均已发表。带符号的拉伸与压缩阈值遵循Knowlton。[32] 该模型是一维的，仅预测空洞成核，而不预测空洞生长或电阻变化。一个开放且经过验证的求解器是本工作的一部分，但其本身并不被宣称为一项贡献。我们还将同一求解器应用于Cu(Mn)线，以表明它并非专用于铝铜；该情形并非一项贡献

也不是。

第 II 节介绍模型及其参数，第三节介绍数值方法、验证和统计分析，第四节介绍实验。第五节报告模拟结果，第六节介绍测量值及其与模拟结果的比较。第七节讨论模型的局限性。

II. 模型

A. 应力与溶质输运

该线段占据 $0 \le x \le L$，阴极位于$x = 0$。电子及随其移动的Al原子朝 $+x$移动。线段的状态由静水应力$\sigma(x,\ t)$（拉伸为正）以及总Cu原子分数$c(x,\ t)$（包括溶解态和析出态）描述。应力遵循 Korhonen 方程[4]

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\kappa_{\mathrm{eff}}(x,c)\left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} + G\right)\right], \qquad G = \frac{eZ^{*}_{\mathrm{Al}}\rho j}{\Omega}, \tag{1}$$

其中 $\kappa = D_a B\Omega/(k_{\mathrm{B}}T)$，$D_a$ 为有效原子扩散系数，B 为有效模量，Ω为原子体积，$\rho(T) = \rho_0[1 + \alpha_\rho(T - T_0)]$ 为电阻率。量 $\kappa(\partial_x\sigma + G)$ 与原子通量成正比。在阻挡端且 κ 恒定的条件下，稳态为$\sigma = \sigma_{\mathrm{res}} + G(L/2 - x)$，阴极处为拉伸应力。我们未纳入 Knowlton 所采用的扩散率对应力的依赖性。[32]

只有溶解铜会移动。在 200 °℃时，铜在铝中的溶解度为 $c_{\mathrm{sol}} = 0.10$ 重量百分比（4.2×10^{-4}），[32,48] 远低于互连线的铜含量，因此大部分铜以θ-铝$_2$铜析出物的形式存在。我们将溶解分数取为$c_m = \min(c, c_{\mathrm{sol}})$，超出部分则以不可动析出物的形式与之保持局部平衡；析出物在溶解铜被带走处溶解，在溶解铜到达处生长，且不受速率限制。于是Cu含量服从

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[D_s(x)\left(\frac{\partial c_m}{\partial x} - v c_m\right)\right], \qquad v = \frac{|Z^{*}_{\mathrm{Cu}}|e\rho j}{k_{\mathrm{B}}T}, \tag{2}$$

其中 D_s 为铜扩散率。对求解器而言，最小值被替换为在 c_{sol} 的 ±5.0%范围内的 C^1 混合。在其他温度下，c_{sol} 遵循固溶线，$c_{\mathrm{sol}}(T) \propto \exp(-4031\,\mathrm{K}/T)$，并拟合至Knowlton的固溶线数据点[32]（150、250和 300 °℃时分别为0.037、0.23和0.44重量百分比）。同时还计算了两种界限情形：铜全部可移动（$c_m = c$）以及铜全部不可移动（第V G节）。测得的铜在铝中的有效电荷为负，[15] 因此铜随电子风向阳极漂移。铜会阻碍铝的晶界扩散。在晶界材料上，我们采用

$$\kappa_{\mathrm{eff}} = \frac{\kappa}{1 + \beta c}, \tag{3}$$

其中 c为总铜，因此也会阻塞晶界析出物中的铜以及溶解铜。这是 Rosenberg[12] 和 Park 所采用的线性陷阱形式等人；[21] 对于竹节材料 $\kappa_{\mathrm{eff}} = \kappa$，这是因为 Knowlton 的竹节扩散系数不依赖于铜含量。[32] 该常数 β 无需参考我们的模拟结果，而是根据 Knowlton 的团簇扩散系数进行标定：200 ℃时，纯铝为$1.5 \times 10^{-16}\,\mathrm{m^2/s}$，铝-1 重量百分比 Cu 为 $3 \times 10^{-18}\,\mathrm{m^2/s}$。[32] 在 $c = 4.271 \times 10^{-3}\,\mathrm{g}$ 时，50 的比值给出$\beta = 49/c = 1.147 \times 10^4$。Knowlton 选择铝铜值以拟合失效时间，因此 β 继承了该标定，并假定在每种铜含量下阻塞都与 c 呈线性关系。

对于晶界材料 $D_a = D_{0,\ \mathrm{gb}}\exp(-E_{a,\ \mathrm{gb}}/k_{\mathrm{B}}T)$ 和 $D_s = D_{0,\ \mathrm{Cu}}\exp(-E_{a,\ \mathrm{Cu}}/k_{\mathrm{B}}T)$。对于竹节材料 $D_a = D_{0,\ b}\exp(-E_{a,\ b}/k_{\mathrm{B}}T)$，即界面主导值，而 D_s 是按与铝相同的比例 D_b/D_{gb} 缩放的晶界铜扩散率。在 200 ℃下，这些值在晶界处分别为 $D_{\mathrm{gb}} = 1.5 \times 10^{-16}\,\mathrm{m^2/s}$、$D_b = 1.5 \times 10^{-20}\,\mathrm{m^2/s}$ 和 $D_s = 4.0 \times 10^{-15}\,\mathrm{m^2/s}$，因此铜的扩散速度是铝的 27 倍。表 I 列出了每项输入及其来源。初始状态均匀，$\sigma = \sigma_{\mathrm{res}}$且 $c = c_0$，其中 c_0 为标称铜含量的原子分数（$c_0 = 2.13 \times 10^{-3}$，重量百分比为0.5）。

B. 边界条件、应力释放与事件

导线两端分别为阻塞边界（原子通量为零），$\kappa(\partial_x\sigma + G) = 0$，例如钨栓柱或通孔处；或为储库边界，具有 $\sigma = \sigma_{\mathrm{res}}$，例如大焊盘处。Knowlton 两种边界都使用过。[32]每次模拟中，两端的铜通量均为零，因此导线的铜存量守恒，焊盘或通孔不会与导线交换铜。这是一个假设，将在第 VII 节讨论。

当导线任意位置（包括阴极端面）的拉伸应力首次达到$\sigma_{\mathrm{crit}} = 150$ 兆帕时，空洞便会形核。此事件会结束本次模拟。我们记录时间t_{nuc}、位置 x_{nuc} 和位置类型。距 $x = 0$ 不超过一个单元的位置属于阴极位置。其他位置均为内部位置；如果其一个单元范围内存在一个边界，且 κ 沿 $+x$ 方向增大，则将该位置归因于拉伸通量散度。压应力受丘状凸起或挤出阈值 $\sigma_{\mathrm{cc}} = -350$ 兆帕限制，这是 Knowlton 提出的带符号压应力判据。[32] 低于该阈值时，会在式（1）右侧加入一个刚性的应力释放项 $+k_r\, r(\sigma_{\mathrm{cc}} - \sigma)$，使 σ 回升至 σ_{cc}附近，其中 $r(u) = 0$ 适用于 $u \le 0$，$u^2/2w$ 适用于 $0 < u < w$，$u - w/2$ 适用于 $u \ge w$。速率为 $k_r = 1000$ 最大值$\kappa/\Delta x^2$，宽度为 $w = 1$ 兆帕。二者都是数值选择，用于使 σ 保持在 σ_{cc}，并非测量量。首次达到阈值的时间记录为 t_{hill}。铜孕育时间 t_{inc} 是阴极单元中 Cu 含量首次低于$0.1\,c_0$的时间。

C. 随机晶粒分段图谱

每条线是从阴极铺设到阳极的一串晶粒，其长度 d 取自中位数为 $D_{50} = 1.7\ \mu\mathrm{m}$[49] 且 $\sigma_{\ln d} = 0.28$的对数正态分布。[32]

满足 $d \geq W$ 的晶粒横跨宽度，构成竹节段。满足 $d < W$ 的晶粒为晶界（多晶）段，其 κ与 D_s 乘以一个取自中位数为1、 $\sigma_{\ln} = 0.28$（即ln d的展宽）的对数正态分布的因子，因为晶界密度按 $1/d$标度。未计入晶界扩散率随取向差的展宽，因此这是一个下界。我们不施加团簇长度分布。多晶团簇是满足 $d < W$的连续晶粒，其长度由晶粒统计得出，如同从对数正态薄膜截取的Knowlton图。[27,32]

在 $L = 280$ μm 和 200 ℃ 条件下模拟了三个宽度类别，这些条件与实验条件相同（第四节）。宽 类别具有 $W = 10$ μm（$W/D_{50} = 5.9$）；竹节状晶粒几乎不会出现，因此该线路为多晶粒结构，其通量散度位于乘数不同的晶粒之间的边界处。窄 类别具有 $W = 3$ μm（$W/D_{50} = 1.76$）；晶粒贯穿整个宽度的概率仅为0.021，因此该线路主要为多晶粒结构，只有少量阻挡晶粒。近竹节状 类别具有 $W = D_{50}$，处于 Knowlton 模拟的范围内；[32] 半数晶粒为竹节状。均匀 线路由一个乘数为 1 的晶界段构成，用作确定性参考。图1展示了示例。

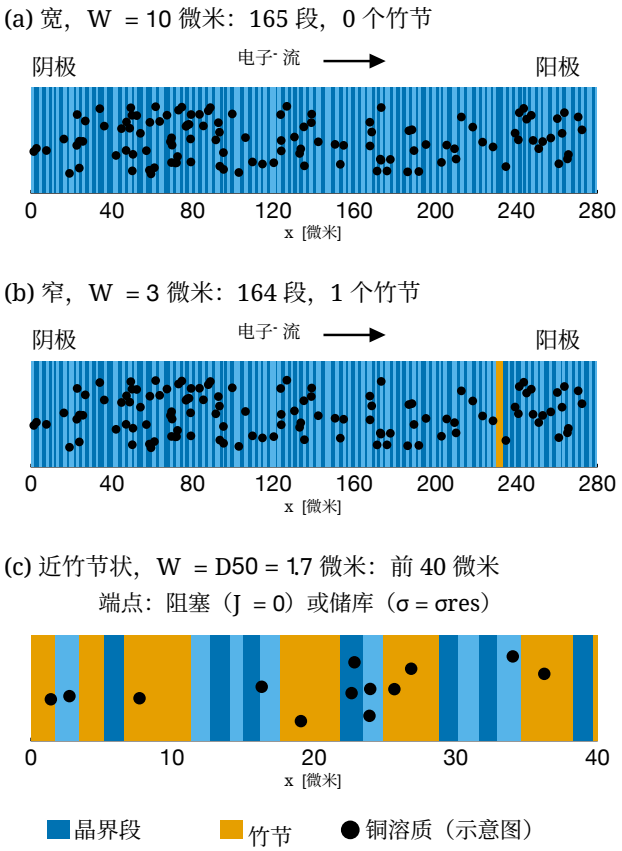

图 1. 模型几何结构。Seed-0 晶粒分段图：(a) 宽线（$W = 10$ μm，165 段，全部为晶界段）和 (b) 窄线（$W = 3$ μm，164 段，其中一段为竹节段），宽度为 $L = 280$ μm；以及 (c) 近竹节线（$W = D_{50}$）的前 40 μm。蓝色条带表示晶界段（交替深浅的色调表示相邻晶粒），橙色条带表示竹节段。黑点代表铜溶质，仅为示意；模型采用连续的 Cu 含量 $c(x,\ t)$。电子从阴极（$x = 0$）流向阳极（$x = L$）。每一端要么是阻塞端（原子通量为零），要么是储库端（应力维持在残余应力值）。

III. 数值方法与验证

A. 离散化

方程 (1) 和 (2) 采用直线法，在由 N 个宽度为 $\Delta x = L/N$ 的网格单元构成的均匀单元中心有限体积网格上求解；所有正式计算均使用 $N = 1600$（$\Delta x = 0.175$ μ米）。每个网格单元取与其重叠的各段的 κ （和 D_s）的长度加权调和平均；当单元中至少一半为晶界时，就将其视为晶界材料，并对其应用方程 (3)。内部网格界面 f（位于网格单元 $f-1$ 和 f 之间）的应力通量为

$$F_f = \kappa_f \left(\frac{\sigma_f - \sigma_{f-1}}{\Delta x} + G \right), \qquad \kappa_f = \frac{2\kappa_{f-1}\kappa_f}{\kappa_{f-1} + \kappa_f}, \quad (4)$$

其中，网格单元值 κ_i 已包含按照局部 c_i 计算的方程 (3) 中的铜阻挡。调和界面值可确保通量在晶界与竹节状单元之间、对比最高达 10^4 的情况下保持连续。阻挡端取 $F = 0$；储库端采用半单元界面， $F_0 = \kappa_0[$（$\sigma_0 - \sigma_{\mathrm{res}}$）/（$\Delta x/2$）$+ G]$，在 $x = L$ 处也同样处理。然后 $\mathrm{d}\sigma_i/\mathrm{d}t =$ （$F_{i+1} - F_i$）/Δx，再加上弛豫汇。

铜通量采用 Scharfetter-Gummel形式，[54]可在每个面上精确求解漂移-扩散通量

在通量恒定时：

$$J_f = \frac{D_{s,f}}{\Delta x} \left[\mathcal{B}(-v\Delta x)\, c_{m,f-1} - \mathcal{B}(v\Delta x)\, c_{m,f} \right], \qquad \mathcal{B}(z) = \frac{z}{e^z - 1}, \quad (5)$$

采用界面谐均扩散率 $D_{s,\ f}$，每个单元中可迁移铜 c_m溶解度上限，以及 $J = 0$ 两个端面。该方案在$v \to 0$ 时退化为中心差分扩散，在 $|v\Delta x| \gg 1$时采用迎风格式，保持 $c \geq 0$，精确守恒铜存量，并且在任意网格上具有精确的离散稳态 $c_i \propto e^{v x_i}$ 。

表 I. 模型输入。若输入为前因子，则列出 200 ℃ 时的数值。“推导值”表示根据所引来源计算得出的数值；推导过程与该数值一同记录在代码发布中的 params.yaml 文件里。Knowlton[32] 的论文是若干条目的二手来源，并引用了原始测量值。

符号	数量	数值	来源
$E_{a,\mathrm{gb}}$	铝晶界激活能	0.60 eV	参考文献32，第128页
$D_{0,\mathrm{gb}}$	铝晶界前因子（纯铝）	3.69×10^{-10} m²/s	推导得出，参考文献32，第74、76页
$E_{a,b}$	竹节界面活化能	1.0 eV	参考文献32，第128页
$D_{0,b}$	竹节前因子	6.72×10^{-10} m²/s	推导得出，参考文献32，第74、76页
Z^{*}_{Al}	铝的有效电荷（绝对值）	4	参考文献4、5和32
$\lvert Z^{*}_{\mathrm{Cu}}\rvert$	铝中铜的有效电荷（绝对值）	8.6	参考文献15
$E_{a,\mathrm{Cu}}$	铜晶界激活能	0.76 eV	参考文献15
$D_{0,\mathrm{Cu}}$	铜晶界指前因子	5.01×10^{-7} m²/s	参考文献15（40倍因子不确定）
β	铜阻塞常数，方程（3）	1.147×10^{4}	推导得出，参考文献32；形式见参考文献12和21
c_{sol}	铜在铝中的溶解度（ 200 ℃时）	0.10 重量百分比	推导得出，参考文献32，第42、137页；参考文献48
ρ_0	$T_0=200$ ℃时的电阻率	5.0 $\mu\Omega$ cm	参考文献32，第76页
α_ρ	温度系数 ρ	1.888×10^{-3} K^{-1}	推导得出，参考文献32，第70页
B	有效模量	50 吉帕	参考文献32，第76页
Ω	原子体积	1.0×10^{-29} m³	参考文献32，第76页
σ_{crit}	空洞成核阈值（拉伸）	150兆帕	参考文献32（引用范围100兆帕至1吉帕）
σ_{cc}	丘状突起阈值（压缩）	-350 兆帕	参考文献32，第127–129页
D_{50}	中位晶粒尺寸	1.7 μ米	参考文献49，据参考文献32所述
$\sigma_{\ln d}$	晶粒尺寸的对数正态分布范围	0.28	参考文献32，第94页
$\sigma_{\ln}$	区段 κ乘数的分布宽度	0.28	由 $\sigma_{\ln d}$ 推导（假设）
W, L, T	宽度、长度、温度	10和 3 μm, 280 μm, 200 ℃	参考文献47
W_{nb}	近竹节宽度	$1.0\,D_{50}$	在参考文献32的范围内
k_r, w	缓解速率因子和宽度	1000，1 兆帕	数值假设
Cu(Mn)线（第六节）			
E_a, D_0	铜界面扩散	0.80 eV，1.3×10^{-9} m²/秒	参考文献 50，如参考文献 51 所列
Z^{*}, ρ, B, Ω	铜基体	1； $2.25\times10^{-8}\,\Omega$ m；28 吉帕；1.18×10^{-29} m³	参考文献 50，数据引自参考文献 51
σ_{crit}	铜中空洞形核阈值	41 兆帕	参考文献 50，数据引自参考文献 51
D_0, E_a	铜中锰晶格扩散	8.0×10^{-6} m²/s，1.778 eV	参考文献 52
β_{Mn}	Mn 阻塞常数	9.26×10^{4}	由参考文献 53 推导得出（范围 1.1×10^{4} 至 9.3×10^{4}）

阻挡端. 时间积分与停止

$2N$ 常微分方程经过缩放（x/L、$t\,\kappa_{\max}/L^2$、 σ/GL、c/c_0），并使用 SciPy 的 solve ivp 通过变阶后向微分公式（BDF）进行积分，[55] 相对容差和绝对容差分别为10^{-6} 和 10^{-9}，同时采用解析稀疏雅可比矩阵。雅可比矩阵包含三对角的应力-应力、应力-铜和铜-铜子块，以及一个全零的铜-应力子块。空洞成核、丘状突起阈值和 Cu 孵育期作为积分器的根搜索事件处理。预定时间范围为 $t_{\mathrm{end}}=5\,\max(L^2/\kappa_{\min},\ L^2/D_{s,\ \min})$，即该线最慢扩散时间的五倍。当铜含量超过溶解度时，Cu 再分布速度约降低 c_0/c_{sol}，因此时间范围按该倍数延长。运行结果为在$10^{-6}t_{\mathrm{end}}$ 和 t_{end}之间分为 40 个按对数间隔的区段进行积分。每个区段结束后，将当前速率线性外推至剩余时限；若在连续两次检查中， c的变化小于 $10^{-3}c_0$ ，且应力与 σ_{crit} 之间的剩余裕度相比，增量不足其十分之一，则停止运行，并判定为稳态。受释放项约束的网格单元不计入应力变化率。由于变化率会随时间衰减并趋近稳态，线性外推是保守的。稳态停止的线在 t_{end} 之前不会成核，因此记录为不失效，并在 t_{end} 处右删失（第三节 D）。

C. 验证

V1，解析解。对于阻挡端处于阻塞状态且 G恒定的均匀线，归一化应力$\hat{\sigma} = (\sigma - \sigma_{\mathrm{res}})/GL$ 满足[4]

$$\hat{\sigma}(\xi,\tau) = \frac{1}{2} - \xi - \sum_{n\ \mathrm{odd}} \frac{4}{n^2\pi^2}\cos(n\pi\xi)\, e^{-n^2\pi^2\tau}, \qquad (6)$$

使用 $\xi = x/L$和 $\tau = \kappa t/L^2$。图 2(a) 在四个时刻对比了求解器（$N = 1600$）与式 (6)；在所有网格单元和时刻中，最大差异为 1.6×10^{-7} ofGL，出现在 $\tau = 0.002$。在 $\tau = 0.05$ 时，最大误差从 $N = 100$ 时的 1.6×10^{-6} 降至 $N = 1600$时的 6.5×10^{-9}，观测阶数为 1.97 至 2.00 [图 2(b)]。将积分器容差从 10^{-6} 收紧至 10^{-9} 后，剖面变化小于 10^{-4} of $GL/2$；对于扩散率对比为 10^5的线，在阻挡端条件下，平均应力的守恒误差为 $10^{-8}GL$ 。

V2，稳态与 *Blech* 阈值。求解器达到线性稳态 $\hat{\sigma} = 1/2 - \xi$。在均匀线和双段测试线中，当 $GL/2$ 超过 $\sigma_{\mathrm{crit}} - \sigma_{\mathrm{res}}$ 2% 时，阴极应力达到 σ_{crit}；当其低于该值 2% 时则不会达到，且成核时间与式 (6) 的根相差 1%。储库边界使均匀线保持平坦；具有储库端的三段线则达到其解析分段线性稳态。Cu 方案保持质量守恒、非负，并达到式 (2) 的指数稳态。

随机映射的网格收敛。 在 0.5 重量百分比 Cu 下，对每种类别和端部条件（3 MA/cm^2 ）以及带储库端的宽线（2 MA/cm^2），使用 $N = 800$、1600 和 3200 个网格单元运行了相同的每种条件 100 张图。从 $N = 1600$ 个网格单元增加到 3200 个时，每张图的 t_{nuc} 中位变化幅度为 0.06% 至 4.0%，且某种条件的中位寿命变化幅度至多为 3.7%。在 700 次运行中，有 0 次在成核与不失效之间发生变化。在 8% 至 24% 的窄线和近竹节状运行中，成核位置移动超过 1 μm，转移至应力几乎相等的竞争性发散位置，因此应将位置分布视为对此类竞争位置的统计结果。在 2 重量百分比 Cu 下（此时铜阶跃最大），对同一组数据进行计算，某种条件的中位寿命变化幅度至多为 10%，且没有运行在成核与不失效之间发生变化。

稳态停止。 一旦铜受限，几乎所有稳态停止的运行次数都是无 Cu 的：874 次 E3 运行次数均不含铜，另有少量含铜的 E9 运行次数。这种停止是否会掩盖晚期失效？我们选取了 100 次稳态停止的运行次数（所有含铜的 E9 运行次数，以及无 Cu 运行次数的分层样本），在关闭停止条件后将其重新运行至完整时域。其中没有一次发生成核。丘状物形成时间结果相同，最小应力最多变化 0.0037 兆帕。数目

数值上失败的全时程运行次数为 0。

回归防护。测试套件会对已提交结果中的 200 次运行进行分层抽样并重新模拟，要求成核时间和丘状物形成时间的相对

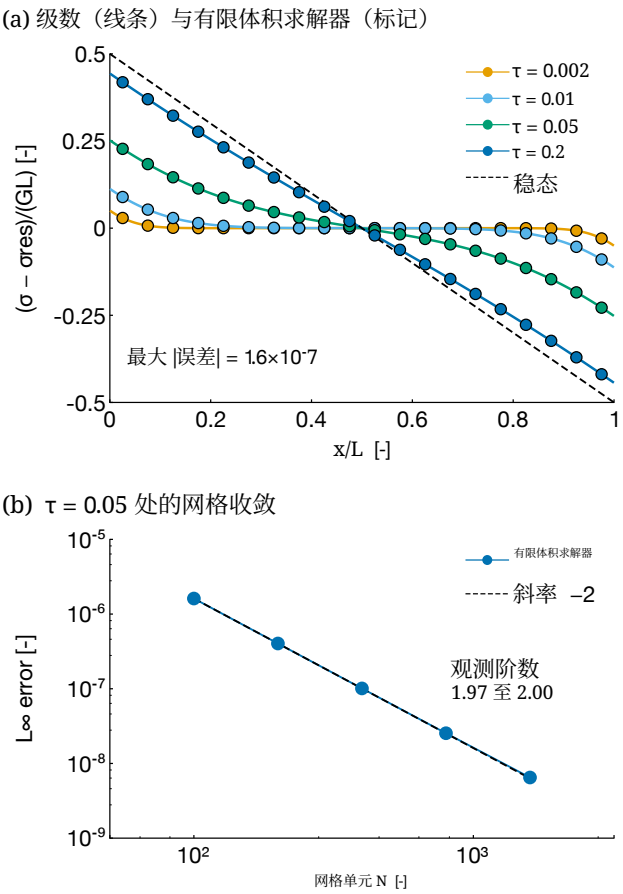

图 2. 针对具有阻挡端且 G 恒定的均匀线，与 Korhonen 级数的验证。(a) 在无量纲时间 $\tau = \kappa t/L^2$ 为 0.002、0.01、0.05 和 0.2 时，归一化应力 $(\sigma - \sigma_{\mathrm{res}})/GL$ 相对于 x/L：解析级数（线条）与采用 1600 个网格单元的有限体积求解器（标记，每隔 80 个网格单元显示一个），以及稳态 $1/2 - x/L$（虚线）。在所有网格单元和全部四个时刻上，求解器与级数之间的最大差值为 GL 的 1.6×10^{-7}（位于 $\tau = 0.002$）。(b) 在 $\tau = 0.05$ 处，求解器相对于级数的最大误差随网格单元数 N 的变化，并附有斜率 -2 参考线（虚线）。观测阶数为 1.97 至 2.00。

一致，且位置和永生性完全相同。

D. 统计

未发生形核的线在其预定时间范围处作右删失处理（I 型删失）。我们将这类线称为不失效线：在该时间范围内没有空洞形核，或者稳态停止表明应力已停止升高，低于 σ_{crit}。这表示模型内的不失效性，并不意味着已证明其寿命无限。对于每种条件，我们采用包含删失数据的最大似然法，对成核时间拟合对数正态分布，得到中位数 t_{50}和离散程度 $\sigma_{\ln}$，并计算 Kaplan-Meier

中位数[56] 及其基于线性格林伍德带的 95% 置信区间。当不失效比例达到 0.2 或以上时，单一对数正态分布并不适用，因为不失效线构成了一个独立的亚群体；此时报告 Kaplan-Meier 中位数。当不失效比例达到 0.5 或以上时，中位数本身为无限大。早期失效时间 t_{01} 是总体的 1% 分位数；其 95% 区间，以及 t_{01} 除以中位数所得比值的 95% 区间，均为基于各图谱进行自助抽样得到的百分位自助法区间（2000 次重抽样）。

使用经过删失的对数正态加速失效时间模型，对每次运行的寿命拟合 Black 定律参数，

$$\ln t = \ln A - n \ln j + \frac{E_a}{k_{\mathrm{B}} T} + \sigma \varepsilon, \qquad \varepsilon \sim \mathcal{N}(0,1), \quad (7)$$

采用最大似然法，并根据观测信息给出 95% Wald 区间。由于每个电流密度下都使用具有相同种子的图谱，因此同一图谱中的各次运行存在相关性；对整张图谱进行重抽样的自助法（400 次重抽样）所得区间宽度为 Wald 区间宽度的 0.22 至 1.4 倍，且关于 n 的结论均不变。只有当 T 变化时， E_a 才会起作用。我们分别对三个电流密度范围进行拟合：1 至 3、2 至 5 和 4 至 6 MA/cm^2。在任何电流密度下不失效比例达到 0.2 的范围内，我们不报告 n，因为此时斜率反映的是永生性增长的速度，而非 Black 指数。我们还对 $\ln t_{50}$ 进行普通最小二乘拟合，以作交叉检验。

E. 模拟

除非另有说明，所有运行均采用 200 ℃ 下的铝铜参数，长度为 L =280 μm。E1 是两端阻塞的均匀线，电流密度为 j = 1至 6 MA/cm^2、温度为 T = 150至 300 ℃，铜含量为 0 和 0.5 wt%，应力为 σ_{res} =0、37.5 和 75 兆帕（144 次运行）。E2 在 3 MA/cm^{2}下，针对每种类别、端部类型和铜含量（0、0.5、1 和 2 wt%），对 20 张图谱中的应力场和铜场进行分析。E3 是群体研究：包括三种类别、0、0.5 和 2 wt% 的铜含量、 $j = 1$ 至 6 MA/cm^2 的电流密度以及两种端部类型，每种条件下使用 1000 张图谱（共 108000 次运行；在同一类别中，给定种子对应的图谱在所有条件下均相同）。不考虑压缩应力缓解的敏感性测试集，在铜含量为 0.5 wt% 时，对宽线类和窄线类各重复 200 张图谱（ 4800 次运行）。E4 在 2 MA/cm^{2}和 0.5 wt% 铜含量、两端阻塞的条件下，将 L 从 1 变化至 50 μm（每种类别和长度使用 200 张图谱）。该研究将所有铜视为可动：在有上限的情况下，短线中处于稳态的析出物会在阳极单元中堆积（少数单元中的含量可达 c_0 的约 100 倍，但仍受有限铜存量约束），使积分速度降低几个数量级；与此同时，Blech 阈值仅取决于 jL （第 V G 节）。一项带上限的检查测试，在 20 张图谱上对宽线和窄线重复 $L = 3$ 至 6 μm 的条件（160 次运行）。E5 对 E3 群体进行 Black 定律分析（第 V E 节）。E6 将求解器应用于铜锰合金线（第六节）。E7 和 E3$_{\mathrm{mobile}}$ 是铜输运的极限情形（第 V G 节）。E7 在每种类别的前 200 张图谱上重复 E3 条件，铜含量为 0.5 和 2 wt%，并将铜设为不可动（ c_0 ，共 14,400 次运行）。E3$_{\mathrm{mobile}}$重复 E3 运行，铜含量不变，将所有铜视为可迁移溶质，且不设上限（72,000 次运行）。E10 重复带有上限的 E7 网格，并分别按总铜含量（主模型，用于与 E3 对照）或仅按溶解铜进行阻塞（28,800 次运行）。E11 重复 E10 网格，阻塞量为溶解铜加上析出物的 $f = 0.25$、0.5 或 0.75（43,200 次运行）。E12 仅延长铜场的演化，使其达到实测试验的持续时间（第六节）；铜方程不含应力项，因此无需假设成核后的应力变化（每种情况使用 200 张图谱，温度为 200、225 和 250 ℃，并在 200 ℃ 下将所有铜设为可动）。E8 针对铜含量为 0.5 wt%、两端阻塞的均匀线，在 2 和 5 MA/cm^2 下，每次改变一个输入参数（34 次运行；第七节）。E9 在每种类别的前 200 张图谱上，于 150、250 和 300 ℃ 下重复 E3 条件（64,800 次运行；第五节 H）。总计进行了 351,628 次模拟，所有模拟均设有随机种子且可复现，没有一次出现数值计算失败。在笔记本电脑的 12 个核心上运行完整网格约需 12 小时。

F. AI 工具的使用

Claude Code 2.1.316 版（Anthropic）用于编写和测试模拟与分析代码；该工具运行大语言模型 Claude Opus 5.5（Anthropic；模型 ID claude-opus-5-5），还用于根据通讯作者先前的实验工作（删失运行、Kaplan-Meier 中位数、加速失效时间拟合）提出模拟和统计设计，并实现通讯作者所采用的设计；用于运行模拟、检索和总结文献，以及起草手稿文本。使用该工具旨在缩短构建和运行如此规模的求解器与分析流程所需的时间，并确保每个数值和图表都能通过脚本重新生成。输出结果经过了200多项自动化测试、第 III C 节的解析验证、通过重新模拟已提交结果样本进行检查的回归防护机制，以及在独立 Claude Code 会话中进行的代码审查（Claude Opus 5.5 或 Claude Sonnet 5.5, Anthropic）；参与审查的会话未编写所审查的代码。每条引文都通过其 DOI 或可解析的 URL 得到核实。所有模拟数据均来自有文档记录且设定了随机种子的代码；除上述方式外，AI 未以任何其他方式生成或修改数据或图像。通讯作者设计了这项研究，包括模拟实验和统计方法，指导了整个工作，并作出和核查了每一项科学决策，包括对结果的解读。两位作者均核查了结果和文本，并对其负责。

IV. 实验

这些测量是为通讯作者的学位论文完成的，[47] 该论文首次报告了损伤和铜分布。我们在此再次使用这些测量来测试模型。测试结构由 ON Semiconductor 制造。在厚度为0.85 μm的钛钨底层上沉积了一层厚度为0.2 μm的铝铜薄膜，并将其制成长度为 280 μm的线；其中，宽度为 10 μm的线由含2 wt%铜的铝制成，或宽度为 3 μm的线由 Al-0.5 wt% Cu 制成；其上覆盖了一层厚度为 1 μm的 SiN 钝化层。芯片只有单层金属。测试线的每一端都连接到同一金属层上更宽的端子线，这些端子线承载电流并连接电压检测线；每个芯片均通过引线键合装入24引脚双列直插封装。[47] 因此，线端不是钨柱或通孔。五条宽线（w1 至 w5）在 200 °C和2 MA/cm^2, 下承受应力，六条窄线（n1 至 n6）在 200 °C和5 MA/cm^{2}下承受应力。应力施加期间记录电阻，并通过电阻的温度系数由电阻获得线温度，从而校正焦耳热。根据电阻判定，每条线均持续承受应力直至失效；宽线在约6天后失效，窄线在约11天后失效。另有一条宽线在应力前后通过能量色散X射线能谱进行测量，并在120小时后以开路形式失效。沉积完成时，铜沿线分布并不均匀；但在无电流条件下于 200 °C退火24小时后，对两条宽线进行能量色散X射线能谱测量发现，铜沿线分布均匀。

施加应力后，我们通过光学显微镜、原子力显微镜和扫描电子显微镜（SEM）定位了每条线上的损伤。在 SEM 中以 18 至 20 keV 的能量通过能量色散X射线能谱（EDS）测量铜含量。每条线上，我们沿其长度选取 6 至 10 个区域，并将电子束在每个区域上栅格扫描 20 至 30 分钟。论文将该区域的尺寸描述为约 $10\ \mu$m × $\times\ 25\ \mu$m，并在一条 $10\ \mu$m 长的线上展示了该区域；[47]论文没有单独给出 $3\ \mu$m 长线上的区域尺寸，这些线上 10 个区域的中心间距约为 $30\ \mu$m。没有任何区域延伸到相邻线。若区域宽于线，只有位于线上的部分会产生铜计数。这会使各位置的信号都大致按相同比例降低，而相对分布曲线的形状保持不变。我们扣除了背景，并拟合了铜 Kα 峰以及附近底层的钨 Lα 峰，将铜峰高度视为与该区域的平均铜浓度成正比。因此，这些分布曲线是相对值。记录时以距阳极的距离为基准；下文将其换算为从阴极起算的 x/L 。

V. 结果

A. 均匀线 (E1)

对于具有阻挡端的均匀线，在所有电流密度范围、残余应力和两种铜含量下，拟合得到的电流密度指数 n至 2.05（每次拟合均同时覆盖所有温度，并将 n和 E_a 一起拟合）。不含铜时，表观活化能为 0.634 至 0.635 eV，高于输入的$E_{a,\ \mathrm{gb}} = 0.60$ eV，这是因为 κ 含有 $1/T$，而 G^2 含有 ρ（T）[2]。这些数值由方程（6）的早期时间形式得出。在阴极处，$\hat{}\sigma(0,\ \tau) \approx\ 2\sqrt{\tau/\pi}$，因此对于 $\sigma_{\mathrm{crit}}\ \ll\ GL/2$，成核时间为 $t_{\mathrm{nuc}}\ \approx \pi\sigma_{\mathrm{crit}}^2/\ (4G^2\kappa)$，其随 j^{-2} 变化，且不依赖于 L。在 3 MA/cm^2 和 200 °C 下，$GL = 26.9$ 吉帕，估算值为 0.046 h，与模拟得到的 0.046 h 相同。因此，成核仅涉及厚度约为$\sigma_{\mathrm{crit}}/G = 1.6\ \mu$m 的阴极层；在 3 MA/cm^2, 下，该厚度约为一个晶粒。

在 0.5 重量百分比 Cu 下，3 MA/cm^{2}时的成核时间从 0.046 h 增至 1.0 h，增加了 22 倍。这略低于均匀阻塞因子 $1+\beta c_0 = 25.4$：应力逐渐建立的同时，部分铜以溶解铜的形式离开阴极层。第 V G 节的不动铜对照证实了这一点。表观激活能从 $\sigma_{\mathrm{res}} = 0$ 时的 0.728 eV 升至 0.688 至 0.728 eV（在 75 MPa 时为 0.688 eV）。有两种效应使其升高：铜输运的活化能较高（0.76 eV，而另一项为 0.60 eV）；并且沿固溶线，溶解分数随温度升高而增大（从 150 到 300 °C 时，由 0.037 增至 0.44 重量百分比），因此温度较高时，成核前能够离开阴极层的铜相对更多。在这条线中，铜不会改变指数 n 。

B. 应力与铜场 (E2)

图3跟踪了含0.5重量百分比 Cu、具有阻挡端、电流密度为3 MA/cm^{2}的seed-0宽线和窄线。两者均在3605 s于阴极成核。当应力达到σ_{crit} 时，它仍局限于阴极端及少数通量散度。此时铜场已沿整条线发生变化。只有溶解部分能够迁移，占0.5重量百分比铜的$c_{\mathrm{sol}}/c_0 = 0.20$ 。但在溶解通量发生散度之处，析出物溶解或生长，总铜在 κ 发生变化的边界处形成尖锐的局部谷值和峰值。析出物不会反向扩散，因此没有任何机制将这些特征抹平。在具有阻挡端的 seed-0 映射中，成核时最大内部铜含量为8.3 c_0 （位于 $x/L = 0.67$）；在所有含铜的seed-0 E2运行次数中，最大局部含量为8.2至 16 c_0，至多为11原子百分比。在所有具有阻挡端且含铜的E2图谱中，180次运行中有98次的阴极单元Cu含量在成核前降至 $0.1c_0$ 以下，因此孕育阶段往往在成核前不久结束。采用储库端时，宽线寿命更长，中位数 t_{inc} 为0.77 h。

考虑溶解度上限后，铜向阳极的积聚程度较弱。宽线末端十分之一部分的平均铜含量与 c_0 的中位比，在阻挡端条件下，铜含量为 0.5、1 和 2 重量百分比时均为 1.03；在储库端条件下则分别为 1.11、1.10 和 1.09。溶解铜的漂移通量受限于 vc_{sol}，因此输送到阳极的铜量不会随铜含量增加。在近竹节状

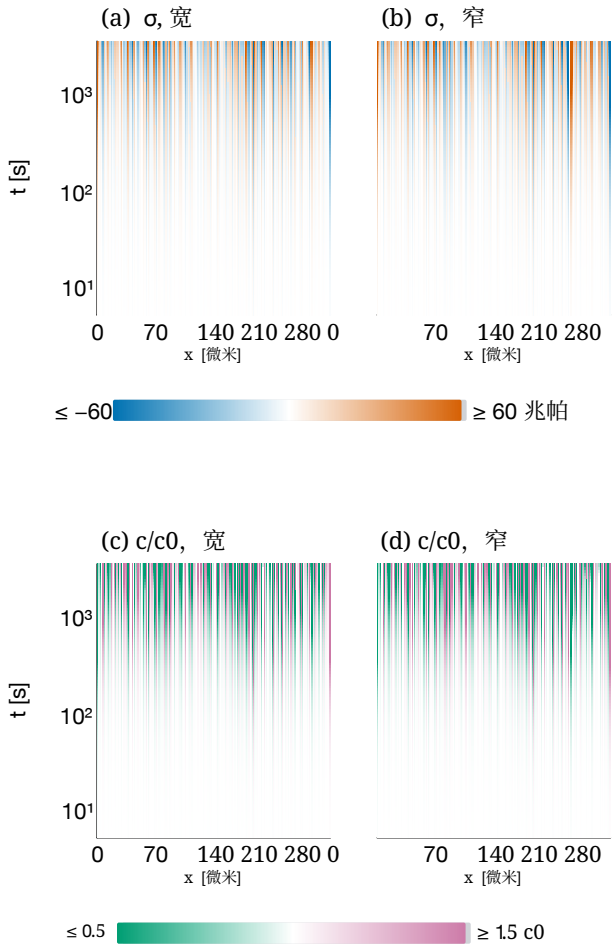

图 3. 单线中的应力与铜演化，Al-0.5 wt% Cu，阻挡端，$j = 3$ MA/cm^2, seed-0 映射。(a, b) 静水应力 $\sigma(x,t)$，单位为兆帕；(c, d) 总铜浓度$c(x,t)/c_0$ （溶解态与析出态），分别对应 (a, c) 宽线与 (b, d) 窄线，时间轴为对数时间轴，从$t = 5$ s 至阴极处的空洞成核（两条线均为 $t_{\mathrm{nuc}} = 3605$ s）。色标在 ± 60 兆帕处以及 0.5 至 1.5 c_0 处被截断；阴极应力在 t_{nuc} 处达到 $\sigma_{\mathrm{crit}} = 150$ 兆帕，最大内部铜含量为 8.3 c_0。图谱的每一列合并 8 个网格单元（1.4 μm），保留距 $\sigma = 0$ 或 $c = c_0$ 最远的值，以使通量散度位点处的窄峰仍然可见。

类别中，该比值为 1.00，因为铜移动缓慢的竹节晶粒会阻碍漂移。内部铜峰的位置与第 VI 节中的测量值进行了比较。

C. 寿命分布（E3）

表 II 列出了 3 MA/cm^2，下的成核时间中位数，图 4 展示了分布。存在阻挡端时，分布较窄： $\sigma_{\ln} = 0.096$ 对于宽线和窄线，在每种电流密度下，均为 0.26；在 0.5 重量百分比 Cu 和 3 MA/cm^2 下，1% 分位数 t_{01} 分别为中位数的 0.60（95% 区间为 0.58–0.64；宽线）和 0.66（0.63–0.68；窄线）。分布较窄是阴极层论证（第 V A 节）的结果：寿命由最前面的一个或两个晶粒的扩散率决定，其乘数变化范围为 $\sigma_{\ln} = 0.28$。因此，宽线和窄线几乎同时失效。在 0.5 重量百分比 Cu 下，从 $j = 2$ 到 6 MA/cm^2，两者中位数之比为 1.10 至 1.12。

铜含量增加会使中位寿命稳步提高。在电流密度为 3 MA/cm^2 且端部阻塞时，0.5 wt% Cu 使 t_{50} 分别增加 21.9 倍（宽线）、21.9 倍（窄线）和 21.4 倍（近竹节状线）；2 wt% Cu 则分别增加 86.2、87.5 和 86.5 倍，接近静态阻挡因子 $1 + \beta c_0 = 25.4$ 和 99.5。端部为储库端时，近竹节状类的增幅与端部阻塞时相同，窄线类也与之接近，但宽线类的增幅小得多（分别为 2.01 和 6.66），原因如下文所述。

端部为储库端时，均匀线保持在 σ_{res}，因此应力仅由 κ 中的对比产生。窄线和近竹节状线包含竹节晶粒，其 10^4 对比会造成强烈的通量散度；它们在储库端条件下的寿命接近端部阻塞时的数值，而且在任何条件下，失效的窄线和近竹节状线比例最高分别仅为 0.024 和 0.011。宽线则只有对数正态乘子对比。无铜时，它们的寿命比端部阻塞时更长，并且在低电流密度下有许多会不失效：在 1 MA/cm^2 和 2 MA/cm^{2}时，不失效比例分别为 0.701 和 0.131。添加 0.5 或 2 wt% Cu 后，在任何电流密度下都没有宽线会不失效；在 3 MA/cm^2 时，中位寿命为 3.38 h（0.5 wt% Cu），而端部阻塞时为 1.03 h。铜再分布会产生宽线微观结构中缺乏的通量散度。在种子0场中，每个宽线储库端空洞都形成于距铜含量阶跃 2 μm 以内；阶跃一侧的铜含量为 0.043–0.16 c_0，另一侧为 2.2–2.6 c_0，而经过 $\kappa_{\mathrm{eff}} = \kappa/(1 + \beta c)$ 后，这种阶跃就是一个数量级的 κ 对比。到成核时，封顶铜场沿线的大部分区域都出现了阶跃，因此阶跃的方向是更好的检验依据。在 t_{nuc} 处为其中 1200 次运行（每种铜含量和电流密度下最初的 100 张图谱）重建铜场后，所有运行中，空洞位置处的铜含量沿铝漂移方向下降；下游与上游铜含量之比的中位数为 0.12，而同一批线上的随机位置为 55%；空洞位置的铜对比高于该线上 76% 的位置（中位数）。上游富铜、低速的线段与下游贫铜、高速的线段相接，会使铝的流失速度超过补给速度，张力便在此处积累。第五节 G 表明，这需要铜输运和不动析出物共同作用。宽线储库端运行中，只有 5% 达到丘状突起阈值，而端部阻塞运行中没有一次达到。与其他类别相同，该类的早期失效尾部 $t_{01} = 0.60$为中位寿命的 0.56–0.64 倍，条件是铜含量为 0.5 wt%、电流密度为 3 MA/cm^2, 。

近竹节状类别在 1 MA/cm^{2}时呈双峰分布。有些线早期失效，而另一些只有在经历长时间瞬态后才失效——

表 II。 t_{50} 处空洞成核时间中位数（小时）和对数正态分布宽度 $\sigma_{\ln}$ ，条件为 $j = 3$ 兆安/平方厘米、²、 200 °摄氏度和 $L = 280$ μ米，每种条件下的图为 1000 张； f_{imm} 为储库端情况下的不失效比例（阻挡端情况下为零）。

类别	铜（重量百分比）	阻塞 t_{50}	阻塞 $\sigma_{\ln}$	储库 t_{50}	储库 $\sigma_{\ln}$	f_{imm}
Wide	0	0.0471	0.20	1.68	1.1	0.007
	0.5	1.03	0.20	3.38	0.18	0.000
	2	4.06	0.20	11.2	0.20	0.000
窄	0	0.0424	0.15	0.0519	0.70	0.000
	0.5	0.926	0.15	1.05	0.29	0.000
	2	3.71	0.16	4.24	0.26	0.000
近竹节状 0		0.0432	0.11	0.0433	0.11	0.000
	0.5	0.924	0.12	0.928	0.12	0.000
	2	3.74	0.13	3.76	0.13	0.000

态，且 $\sigma_{\ln}$ 达到 2.0 至 4.9。随后，对数正态分布中位数（ 100 至 815 小时）与 Kaplan-Meier 中位数（1489 至 3752 小时）相差最多一个数量级。在 1 MA/cm² 以上，近竹状分布再次变窄（在带阻挡端的 3 至 6 MA/cm²条件下，$\sigma_{\ln} = 0.11$ 为 0.13）。Knowlton 在近竹状群体中发现了同类双峰现象。[32]

对压缩应力缓解的敏感性。没有阻挡端的模拟达到 σ_{cc}；有阻挡端时，无论是否缓解，应力成核时间都相同（最大相对差异为 0）。对于储库端，在相同的 2 MA/cm² 、铜含量为 0.5 重量百分比的 200 条宽线图谱中，无论是否缓解，不失效比例均为 0；无缓解时的最小应力为 -0.474 吉帕。因此，在采用溶解度上限时，结果不受弛豫模型影响。

D. 成核位点(E3)

图 5 显示了失效互连线的成核位置，数据按铜含量和电流密度汇总。对于阻挡端，所有宽线均在阴极处失效（100%）。阴极层先达到 σ_{crit} ，早于任何内部位点，因为宽线的内部通量散度仅来自乘数对比和 Cu 再分布，而这些过程耗时更长。在窄线中，48% 的空洞形成于阴极处，其余形成于内部；54% 位于 $x/L < 0.1$ 范围内，75% 位于阴极半区，4.3% 位于 $x/L > 0.9$ 范围内。在近竹节状线中，只有 11% 的空洞形成于阴极处，55% 位于阴极半区。在所有内部空洞中，83.4% 位于微观结构的拉伸通量散度处，即 κ 沿电子流方向增加的边界。对于储库端，端部应力被固定，所有空洞都位于内部，成核位置沿线分布；根据类别不同，阴极半区内的比例为 49% 至 51%。

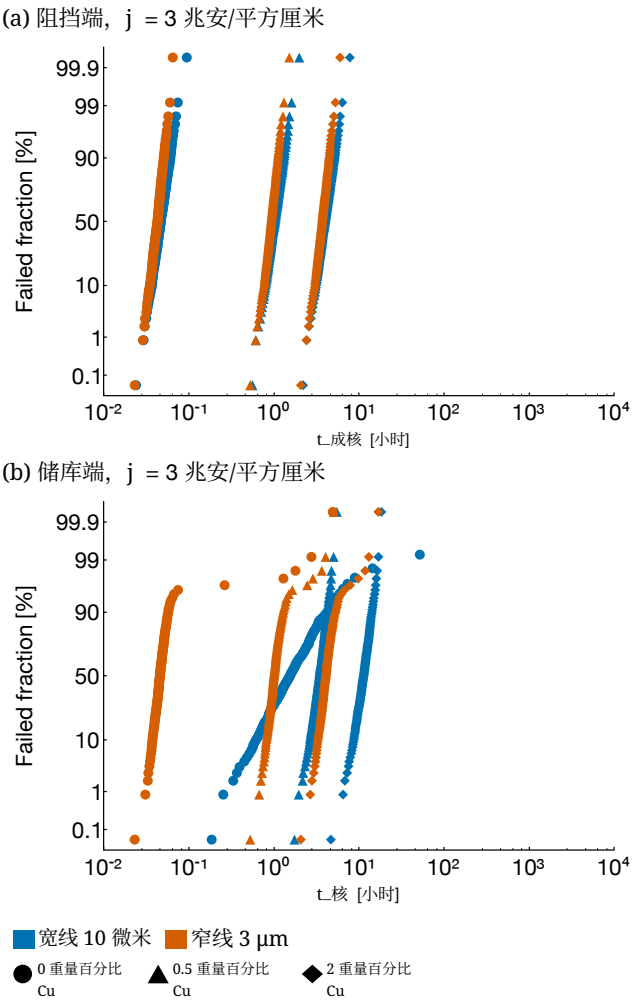

图 4. 宽线（蓝色）和窄线（朱红色）在 0、0.5 和 2 重量百分比 Cu 条件下的空洞成核时间 t_{nuc} （h）对数正态概率图（符号）， $j = 3$ MA/cm², 1000 每种条件下的图，其中（a）为阻挡端，（b）为储库端。不失效样本在预定时间范围处作右删失处理，绘图位置为 Kaplan-Meier中点。对于储库端，无铜宽线的不失效比例为 0.007；所有含 Cu 的线均发生失效。

E. 表观 Black 定律指数（E5）

拟合得到的指数见图 6。对于阻挡端，宽线的指数为 $n = 2.006$ 至 2.019，窄线的指数为 2.025 至 2.047；95% 区间均不宽于 ± 0.052。对于相同类别和电流密度范围，添加 Cu 使指数最多变化 0.01。因此，当所有线均发生失效且大多数失效发生在阴极时，Cu 不会改变 n 。它改变的是前因子，以及通过固溶线和铜活化能影响活化能（第 V A 节）。这与 Park 等人以及 Lloyd 和 Clement 的发现一致；他们发现，对于铝铜中受成核限制的失效， $n = 2$ 。[20,21]

近竹节状类别中，失效受控于

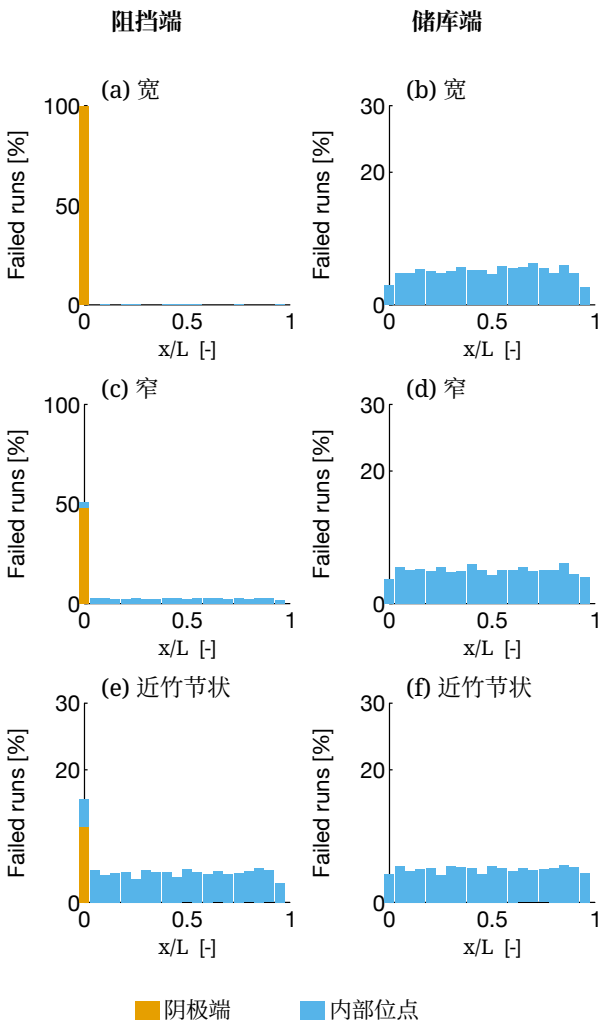

图5。失效运行中空洞形核位置的分布 x_{nuc}/L ，按铜含量（0、0.5 和 2 重量百分比）汇总，并$j = 1$ 至 6 MA/cm^2 （每种条件下 1000 张图谱）；对象为宽、窄和近竹节状线，分别采用阻挡端（左）和储库端（右）。柱形表示每个宽度为 $0.05L$ 的区间内失效运行的百分比，并分为阴极端空洞（橙色）和内部空洞（蓝色）。采用阻挡端时，阴极端所占比例分别为 100%（宽）、48%（窄）和 11%（近竹节状）；采用储库端时，所有空洞都位于内部。请注意纵轴刻度不同。

竹节晶粒处的内部散度，在高于 1 MA/cm^2, 时给出 $n = 2.12$ 至 2.25，此时几乎每条线都会失效，而铜并不改变该值：在 2 至 5 MA/cm^2 范围内采用阻挡端时，对于 0、0.5 和 2 重量百分比 Cu，该值分别为 2.25、2.23 和 2.23。具有储库端的窄线同样仅在内部散度处失效，给出 2.05、1.99 和 1.99。无 Cu 的近竹节状指数本身略高于 2。在铜全部可移动时，近竹节状指数随铜含量上升，在 2 重量百分比时达到 2.75；一旦仅溶解铜发生移动，这一上升即消失（第V G节）。

较大的指数出现在两种情况下。第一种是样本不再处于单一成核受限模式。电流密度为 1 至 3 MA/cm^2 时，近竹状线的 $n = 4.90$ 从 1 MA/cm^2 时双峰分布对应的数值增至 8.09；在此情况下，Cu 会使 n 从 7.35 降至 4.90（存在阻挡端时）。第二种情况是带储库端的无 Cu 宽线，其应力仅在乘数对比度较弱时才会累积。在 4 至 6 MA/cm^2, 范围内，所有此类线都会失效，其 $n = 3.56$ 为；在 2 至 5 MA/cm^2 范围内，其数值为 5.27，该范围内最大不失效比例为 0.13；在 1 至 3 MA/cm^2 范围内，不失效比例达到 0.2，且未报告 n 。这些偏离 $n = 2$ 的现象源于双峰性以及永生性或趋近永生性，这正是 Knowlton 在不含溶质的情况下指出的成因。[32] 铜消除了第二种成因：加入 0.5 或 2 重量百分比 Cu 后，宽储库端线在所有范围内的 $n = 2.23$ 均为 2.37，接近 2，因为它们此时会在铜阶跃处失效（第 V.C 节）。

F. 永生性与 Blech 乘积（E4）

对于阻塞端，零通量稳态在$\partial_x\sigma = -G$ 处满足 $\kappa_{\mathrm{eff}} > 0$, 无论微观结构和铜分布如何，因此每条线中的阴极应力都趋于 $\sigma_{\mathrm{res}} + GL/2$ 。因此，阻塞端导线的 Blech 阈值为（jL）$_{\mathrm{crit}} = 2\,(\sigma_{\mathrm{crit}} - \sigma_{\mathrm{res}})\,\Omega/\,(eZ^*_{\mathrm{Al}}\rho) = 936$ A/cm，即在 2 MA/cm^2, 时为 $L_{\mathrm{crit}} = 4.68$ μm，与类别及铜的分布方式无关。E4 证实了这一点（图 7）。所有 $L \le 4$ μm 的宽线、窄线和均匀线均不失效，而所有 $L \ge 5$ μm 的线都会失效。由于该阈值不取决于铜分布，E4 采用铜全部可移动的条件运行（第三节）；在 $L = 3$ 处对每个类别使用 20 个图谱并施加溶解度上限进行检查，得到的阈值相同： $L \le 4$ μm 的每条线均不失效，而 $L \ge 5$ μm 的每条线均会失效。远高于（jL）$_{\mathrm{crit}}$ 的永生性仅出现在具有储库端的无铜宽线中：在 $L = 280$ μm 时，其中 0.701 的线在 1 MA/cm^2 下不失效，在 2 MA/cm^2, 下这一比例为 0.131，适用于 $jL = 2.8 \times 10^4$和 5.6×10^4 A/cm。这与 Knowlton 报告的近竹节线在低 j 下的焊盘端接永生性属于同一类型。[32] 对于含铜的线，所有此类线都会失效。

G. 铜的移动量（E7、E10）

主模型仅允许溶解铜移动。在相同图谱上运行两种极限情况。在 E7 中，铜被视为不可动：每个面上的溶质通量均为零，因此 c 保持在 c_0，而晶界元胞上仍适用 $\kappa_{\mathrm{eff}} = \kappa/(1 + \beta c_0)$；预定时间范围延长至 $(1+\beta c_0)\,t_{\mathrm{end}}$ ，以确保所有未成核的不可动运行均达到稳态（0 次运行在时间范围结束时停止）。在 E3$_{\mathrm{mobile}}$ 中，所有铜均被视为可迁移溶质（无上限），即此前溶质耦合研究所采用的模型。两种对照均采用 E3 条件，在每个类别的前 200 张图谱中分别使用 0.5 和 2 重量百分比 Cu（每种条件各运行 14,400 次）。E10 在相同图谱上加入仅由溶解铜阻塞的封顶模型（运行 28,800 次，并重复主模型

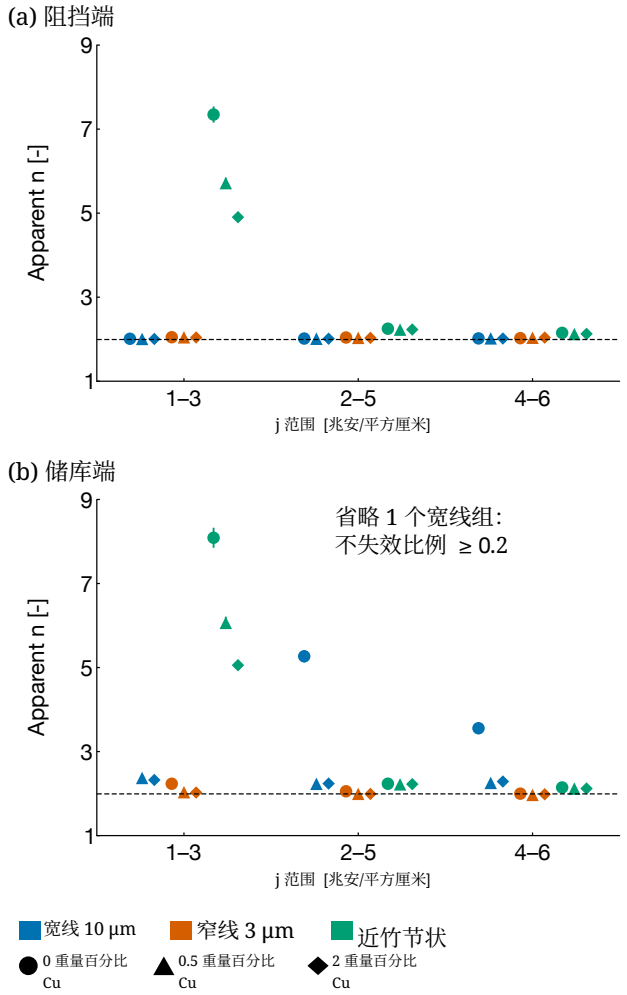

图 6. Black 定律的表观电流密度指数 n，通过删失对数正态加速失效时间模型对各次运行寿命进行拟合，电流密度范围为 1 至 3、2 至 5 和 4 至 6 MA/cm^2, ，对应 (a) 阻挡端和 (b) 储库端。颜色表示宽度类别，符号表示铜含量；误差线为 95% 置信区间，若其长度小于符号则被符号遮挡。虚线标示 $n = 2$。对于 1 组储库端，未报告电流密度为 1 至 3 MA/cm^{2}时的无铜宽线数据 n （该范围内至少一种条件下的不失效比例为 0.2 或更高）。

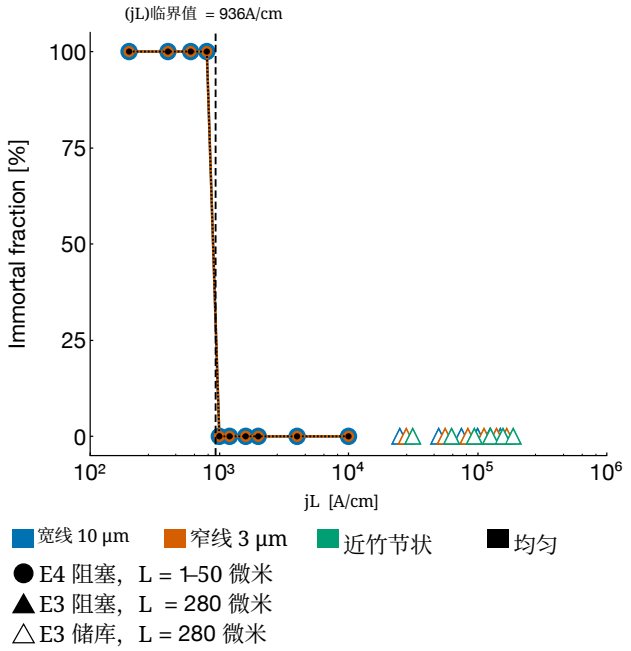

图 7. 不失效比例（%）与乘积 jL (A/cm) 的关系。线条：带阻挡端的铝-0.5 wt%铜线路，电流密度为$j = 2$ MA/cm^2，长度为 $L = 1$ 至 50 μ 米（宽线和窄线每个类别 200 张图，均匀线运行一次；铜全部可移动）。符号：电流密度为 $j = 1$ 至 6 MA/cm^2 、长度为 $L = 280$ μ 米的线路（每种条件 1000 张图），包括带阻挡端（实心）和储库端（空心）的线路；为便于观察，按类别将这些符号水平错开（宽线靠左，近竹节状靠右，间隔 0.05 个数量级）。竖直虚线表示解析的 Blech 乘积 $(jL)_{\text{crit}} = 936$ A/cm（电流密度为 2 MA/cm^{2}时长度为 $L_{\text{crit}} = 4.68$ μ 米）。所有乘积高于 $(jL)_{\text{crit}}$ 的阻挡端线路均失效；远高于 $(jL)_{\text{crit}}$ 时仅带储库端的无铜宽线会出现永生性（电流密度为 $j = 1$ 和 2 MA/cm^{2}时，不失效比例分别为 0.701 和 0.131）。

作为检查），E11 则允许比例为 f 的析出物产生阻塞（运行 43,200 次）。中位数比值附有配对自助法 95% 区间。

阴极主导线路。 不可动铜充当静态阻挡因子。对于阻挡端的宽线，在 3 MA/cm^2 下，其相较于无 Cu 时的中位数，在 0.5 和 2 wt% 时分别提高 25.4 和 99.5，等于 $1 + \beta c_0$ (25.4 和 99.5)。采用溶解度上限时，中位数略低：在含阻挡端的宽线和窄线中，0.5 wt% 时不可动模型的中位数是受限模型的 1.16 至 1.20 倍，2 wt% 时是 1.15 至 1.19 倍，且适用于所有电流密度。若铜全部可移动，中位数则低得多：受限模型的中位数是铜全部可移动模型的 1.33 至 1.38 倍 在 0.5 wt% 时是其 1.33 至 1.38 倍，在 2 wt% 时是其 2.24 至 2.36 倍。对于 3 MA/cm^2 、铜含量为 2 wt% 的宽线，三种模型的中位数分别为 4.70 h（不可动）、4.09 h（受限）和 1.73 h（铜全部可移动）。因此，将所有铜都视为可移动会高估离开阴极层的铜量，而且铜含量越高，高估幅度越大；这是因为实际漂移仅限于溶解分数，即 0.5 wt% 时铜的 0.20，2 wt% 时的 0.050。这些比值均不取决于 j，因此在这些线路中，三种模型给出的指数相差不超过 0.02。

带储库端的宽线。这里三种模型在定性上有所不同。对于不可动铜，在 1 MA/cm^2 时，不失效比例为 0.72；在 2 MA/cm^2, 时为 0.15，与不含铜时相同（0.701 和 0.131），因为均匀的不可动铜含量会均匀缩放 κ，这与第六节中的锰相同。铜全部可移动时，在 0.5 重量百分比下，不失效比例升至 0.99 和 0.46：铜向阳极方向堆积，使线的阴极部分受到压缩。堆积的铜含量可达数十原子百分比，远高于其溶解度，因此由此产生的不失效——

——是将所有铜都视为可移动所造成的假象。采用上限后，没有线能保持不失效（比例为 0 和 0）；在所有线都会失效的 4 至 6 MA/cm^2, 范围内，不可动铜模型的中位数是封顶模型的 4.19 至 8.40 倍。封顶模型中的这些线会在第 V.C 节所述的铜阶跃处失效；铜全部可移动时，溶解铜的反向扩散会平滑这些阶跃，而铜不可动时则不会形成阶跃。因此，指数也呈现出相应趋势：在 4 至 6 MA/cm^2 范围内，含铜量为 0.5 和 2 重量百分比时，不含铜和不可动铜模型的指数分别为 3.56 和 3.55，铜全部可移动模型的指数分别为 3.01 和 3.43，采用上限时则分别为 2.21 和 2.26。

近竹状线。 在超过 1 MA/cm^2 时，0.5 重量百分比下不可动铜的中位数是受限模型中位数的 1.18 至 1.24 倍，在 2 重量百分比下也是 1.18 至 1.24 倍；而受限模型的中位数分别是铜全部可移动模型中位数的 1.1 至 1.3 倍和 1.2 至 2.0 倍。在 1 MA/cm^2, 处，分布呈双峰时，不可动铜的中位数是受限模型中位数的 1.0 至 2.6 倍。在超过 2 至 5 MA/cm^2 且存在阻挡端时，含不可动铜时指数为 2.26 和 2.28，采用上限时为 2.21 和 2.23，铜全部可移动时为 2.37 和 2.75，而不含铜时为 2.25。铜全部可移动模型给出的 n 随铜含量上升，因此是移动的铜多于溶解的铜的另一个结果。

仅由溶解铜引起的阻塞。如果析出物不会阻碍晶界扩散，则只有溶解铜会进入 κ_{eff}。此时，铜带来的寿命增益将受 $1+\beta c_{\mathrm{sol}}$ 限制，且不会随铜含量增加：对于在 3 MA/cm^2 下两端均阻塞的宽线，中位寿命在 0.5 重量百分比时为 0.277 h，在 2 重量百分比时为 0.278 h，分别为全可动中位寿命的 0.363 至 0.371 倍和 0.153 至 0.161 倍。对于储库端，这一变体使宽线在 1 MA/cm^2 下的不失效比例达到 0.90（0.5 重量百分比）和 0.86（2 重量百分比）。我们的阻挡常数 β 是根据铜总含量校准的（第 II 节），因此主模型采用铜总含量。

析出物的部分阻塞。 析出物对晶界扩散的阻塞程度尚不清楚，因此 E11 在两种变体之间进行插值：起阻塞作用的 Cu 为 $c_m + f\,(c - c_m)$，即溶解铜加上析出物的 f，其中 $f = 0.25$; 在 E10 映射图上，0.5 和 0.75（$f = 1$ 为主模型，$f = 0$ 为仅溶解态变体）。在具有阻挡端的宽线和窄线中，随着 f 减小，中位数平滑下降；在 0.5 wt% Cu 下，当 $f = 0.75$ 为 0.5 和 0.25 时，分别降至主模型值的 0.84–0.85、0.67–0.68 和 0.48–0.49；在 2 wt% Cu 下，则降至 0.80–0.81、0.58–0.59 和 0.33–0.34。相比之下，具有储库端的宽线发生 Cu 阶跃失效时并不需要完全阻塞：对于每个 $f \geq 0.25$，在 1 和 2 MA/cm^2 下的不失效比例均为 0；只有在 $f = 0$ 时不失效性才恢复（在 1 MA/cm^2 下为 0.86 至 0.90）。在 4 至 6 MA/cm^2 范围内，这些线的指数在 $f = 0.25$ 时为 2.6 至 2.7，而在 $f = 0$ 时为 3.4 至 3.5。近竹节线在 2 至 5 MA/cm^2 范围内的指数在每个 f 下均为 2.2。在 $f = 0$ 下，2 wt% Cu 时的中位成核时间是 0.5 wt% 时的 1.00 至 1.12 倍（对 j 取几何平均值），因此超过溶解度的 Cu 几乎没有额外作用；在 $f \geq 0.25$ 下，该倍数为 1.9 至 4.0。因此，f 决定 Cu 能发挥多大作用，但我们在零值以上进行的每个 f 都会消除这些宽线的不失效性，就像主模型一样。

H. 温度与外推（E9）

E9 在每个类别的前 200 张图谱上重复 E3 的条件，温度分别为 150、250 和 300 °C（64,800 次运行）；在 200 °C 时，采用 E3 中相同的图谱。在 150 至 300 °C、2 至 5 MA/cm^2, 的范围内，两端均阻塞的群体的表观激活能为 0.63 至 0.79 eV，且随铜含量增加而升高，与均匀线中的情况相同（第 V A 节）。含铜时，寿命不遵循 Arrhenius 关系：对于在 2 MA/cm^2 下、含 2 重量百分比铜且两端均阻塞的宽线，150 至 200 °C 之间的局部活化能为 0.68 eV，250 至 300 °C 之间为 0.89 eV；不含铜时则分别为 0.63 和 0.64 eV。溶解分数随温度升高沿固溶线增加，因此在高温下，更多铜能够离开阴极层，寿命在该温度下随 T 下降得比低温时更快。对于近竹节状线，在四种温度下拟合的 1 至 3 MA/cm^2 指数为 4.8 至 7.6：在每种温度下，1 MA/cm^2 时群体中寿命较长的部分均存在（第 V.C 节）。

E9 还检验了这样一个步骤：使用在测试条件下拟合的指数和活化能，将加速测试得到的寿命外推至使用条件。[43,46]对于每种类别、铜含量和端部类型，我们利用 250 和 300 °C、4 至 6 MA/cm^2, 下的运行数据，拟合 n、E_a和前因子（删失对数正态加速失效时间，第三节 D），再用 Black 定律预测 150 和 200 °C、1 和 2 MA/cm^{2}下的中位数，并将预测值与该条件下模拟的中位数进行比较（图 8）。对于带阻挡端的宽线和窄线，这些线在测试条件下于阴极处失效，$n = 2.03$为 2.06，预测的中位数在 0 和 0.5 重量百分比 Cu 时与模拟中位数相差不超过 1.1 倍。含量为 2 重量百分比时，预测寿命偏长：在 150 °C 时为模拟中位数的 2.1 至 2.3 倍，在 200 °C 时为 1.2 至 1.3 倍，这是因为根据测试温度拟合的活化能对应高温情况。对于带储库端的窄线，预测值为模拟中位数的 0.77 至 1.8 倍；上限同样出现在 2 重量百分比 Cu 和 150 °C 时。对于近竹节状线（测试条件下的 $n = 1.94$ 为 2.16），在 2 MA/cm^2, 下预测值为模拟中位数的 0.66 至 1.4 倍；但在 1 MA/cm^{2}下，模拟中位数比预测值长 22 至 7,300 倍。带储库端的宽线在测试条件下的 $n = 1.94$为 3.30；在使用条件下，12 个总体中有 2 个（均为无 Cu）具有无穷大的 Kaplan-Meier 中位数，而对于中位数有限的情况，预测值为中位数的 0.072 至 0.47 倍。在 72 个预测中，有 12 个比模拟中位数高出 10% 以上，且全部对应 2 重量百分比 Cu；最大偏差为 2.33 倍。因此，当 Cu 含量远高于其溶解度时，根据高温测试进行 Black 定律外推可能会高估寿命。

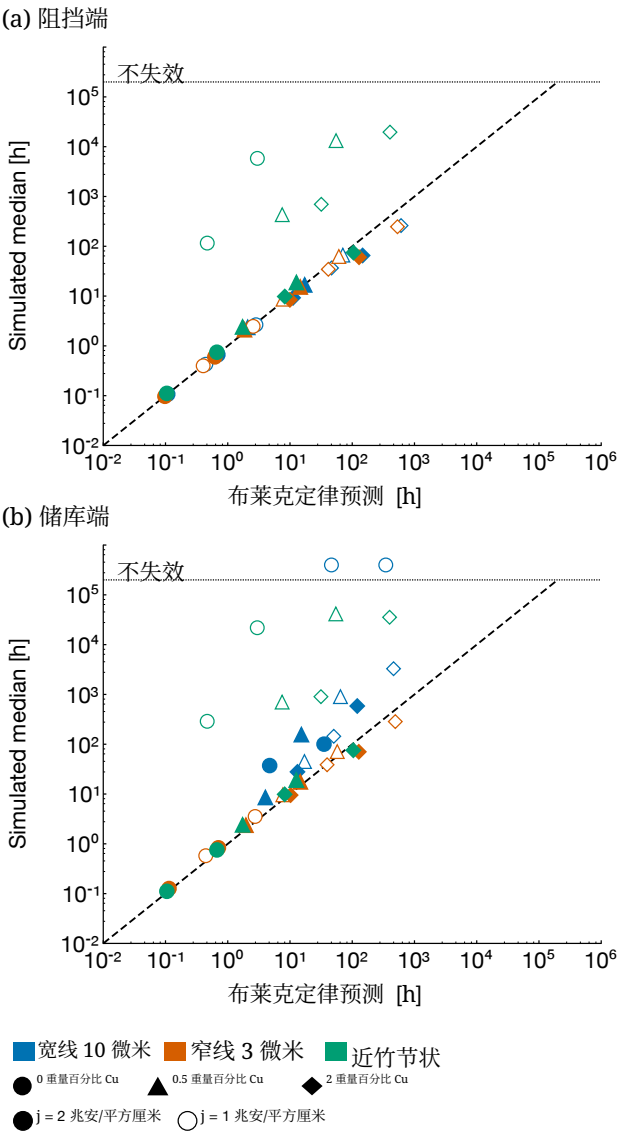

图 8. 从加速测试外推（E9）。对于 (a) 阻挡端和 (b) 储库端，比较 Black 定律预测的中位成核时间与在 150 和 200 ℃、1 和 2 MA/cm^2，下模拟得到的中位数。对于每种类别、铜含量和端部类型，采用删失对数正态加速失效时间模型，根据在 250 和 300 ℃、4 至 6 MA/cm^2 下的运行次数拟合 n、E_a 和前因子。颜色表示宽度类别，符号表示铜含量；实心符号为 $j = 2$，空心符号为 $j = 1$ MA/cm^2。Kaplan-Meier 中位数为无穷大的群体，按其预测中位数绘于标记为“不失效”的带状区域内。虚线表示预测值等于模拟值；线上方的点表示外推低估的寿命，线下方的点表示外推高估的寿命（均为 2 重量百分比 Cu）。

I. 铜锰合金线的应用（E6）

为检验该求解器是否专用于铝铜，我们使用铜参数对含 0、0.5 和 2 重量百分比锰的 Cu 线进行了测试——参数集取自 Alam 等人[50,51]（表 I），每种条件绘制 100 张图谱，并采用由类别、电流密度和端点构成的 E3 网格（10800 次运行）。每个晶界和竹节状单元中的铜扩散均由界面主导。锰被视为不可动：在测试时间尺度内，其晶格扩散率[52] 可忽略，且未找到晶界或界面数据。其阻挡常数 $\beta_{\mathrm{Mn}} = 9.26 \times 10^4$根据 Hu等人报道的电迁移活化能升高 0.2 eV 推导；[53] 根据评估该升高值时的温度不同，其数值介于1.1×10^4 和 9.3×10^4之间，我们采用较高值。电阻率保持为文献所报数值。采用阻挡端时，所有铜锰合金线均在阴极处失效。对于宽线，在 3 MA/cm^2 下，不含锰时中位数为 22.5 h，含 0.5 wt% 锰时为1.2×10^4 h，含 2 wt% 锰时为 4.8×10^4 h（图 9）。这些倍数 536 和 2136 等于 $1 + \beta_{\mathrm{Mn}} c_0$，因为均匀分布的不可动溶质会使 κ按相同比例缩放。出于同样的原因，在 3 MA/cm^2, 下，采用储库端时的不失效比例——宽线为 0.73，窄线为 0.70，近竹节状线为 0.99——不受锰含量影响。这个案例表明，求解器可以使用相同代码模拟不同的主体材料和溶质。

VI. 实验结果及与模型的比较

图10展示了一条宽线和一条窄线的铜分布，并汇总了全部11条线的Cu峰值和损伤位置。所有五条宽线都出现了损伤，包括空洞、挤出物和亮点；而六条窄线中只有两条出现损伤，且大部分损伤位于阴极一侧。宽线中，有些损伤出现在从线中部到阳极的区域，但阳极端没有损伤；窄线中的损伤则只出现在阴极一侧。宽线的铜浓度在靠近阳极处较高，在靠近阴极处较低，并在距阳极约40至50、100至150及190至 230 μm处形成三组峰值，其中大多数位于线中部 [图10(a)和图10(c)]。六条窄线中有四条的最高铜浓度出现在距阳极约225 μm处，$x/L \approx 0.20$，靠近阴极一侧[图10(b)和图10(c)]。

我们将这些观察结果与在测得的宽度、长度、温度、电流密度和铜含量条件下进行的模拟进行比较：铜含量为 2 重量百分比、电流密度为 2 MA/cm^2, 的宽线，以及铜含量为 0.5 重量百分比、电流密度为 5 MA/cm^2 的窄线。我们在测试持续时间（E12）对应的时刻比较铜分布：宽线约为 6 天，窄线约为 11 天，均采用各自的电流密度。该模型的铜方程不含应力项，因此无需对成核后的应力作任何假设，就可以继续计算铜场；每种情况使用 200 张图谱，端部条件不起作用，因为两端的铜通量均为零。这种比较属于定性回顾。模型给出首次空洞成核的时间和位置，而实验则在失效后对损伤成像并测量铜含量，每种宽度只测了几条线。表 III

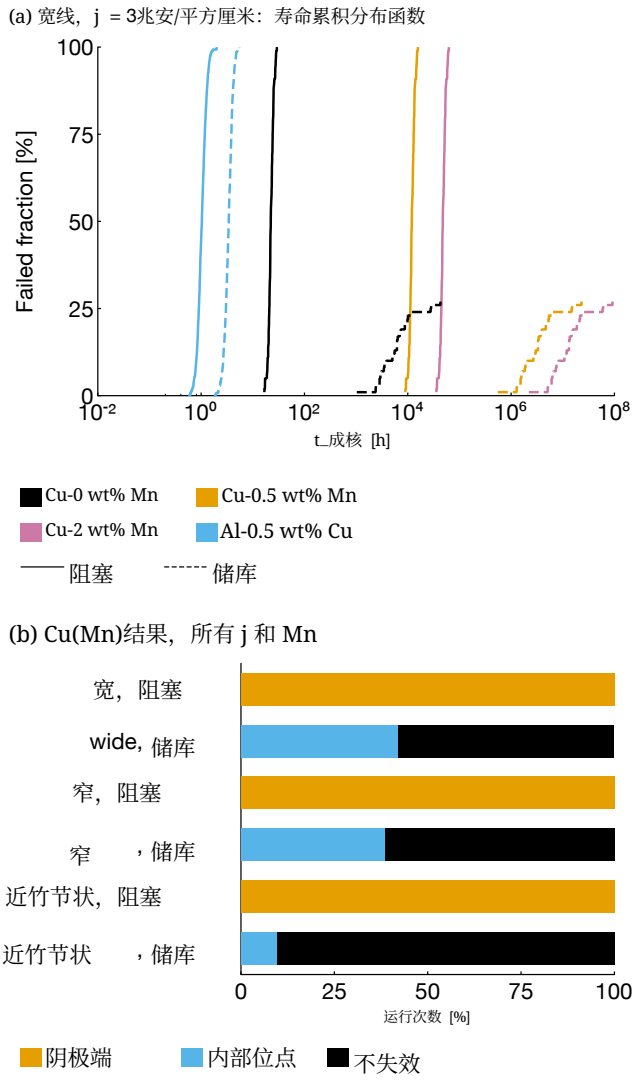

图9. 应用于 Cu(Mn)线。（a）在 $j = 3$ 兆安/平方厘米下，具有 0、0.5 和 2 重量百分比 Mn 的宽 Cu 线（每种 100 张图谱）以及作为参考的宽铝-0.5 wt%铜线路（1000 张图谱）中，失效线路占比随成核时间 t_{nuc} 的变化（Kaplan-Meier估计）。实线：阻挡端；虚线：储库端。从未成核形成空洞的线路（不失效线路）计为存活，因此储库端 Cu(Mn) 曲线在约 27% 处趋于平稳。（b）Cu(Mn)运行次数中，以阴极端空洞、内部空洞或无空洞（不失效）结束的比例，按宽度类别和端部类型统计，并汇总了 Mn 含量以及 $j = 1$ 至 6 兆安/平方厘米的情况（每个柱状条 1800 次运行）。

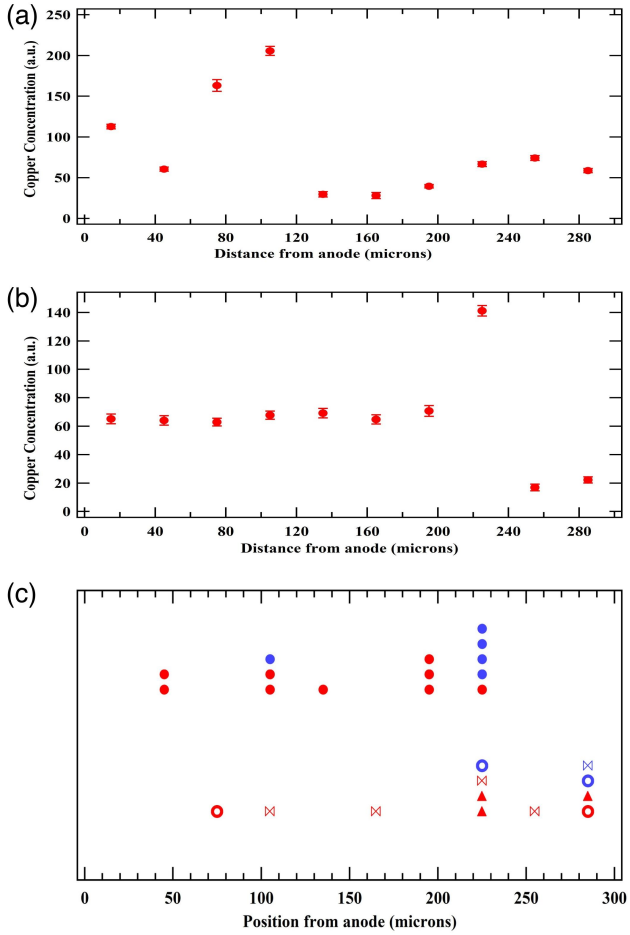

图 10. 在 200 °C下进行应力处理后测得的铜分布和损伤位置。[47] (a) 宽线 w1（10 μm × 280 μm，Al-2 wt% Cu，2 MA/cm^2, , 约 6 天后失效）中铜浓度（Cu Kα 能量色散X射线能谱强度，任意单位）随距阳极距离的变化。(b) 窄线 n2（3 μm × 280 μm，Al-0.5 wt% Cu，5 MA/cm^2, , 约 11 天后失效）的对应数据。(c) 宽线 w1 至 w5（红色）和窄线 n1 至 n6（蓝色）中，Cu峰值（实心圆，上排）以及空洞（空心圆）、亮点（三角形）和挤出物（蝴蝶结形）（下排）的位置随距阳极距离的变化。阴极位于 280 μm处。(a)中的每个数据点均为约 10 μm × 25 μm区域内的平均值；(b)中的区域中心间距约为 30 μm，且未延伸至相邻线（第四节）。原始图，未作任何改动地重现。

总结五项检查。*()*

1

损伤主要发生在阴极，但并非只发生在那里。具有阻挡端的窄线符合这一模式：48% 的空洞在阴极处形成，75% 位于阴极半区，只有 4.3% 位于 $x/L > 0.9$ 以内（图 5）。近竹节状线也呈现相同趋势，但较弱。具有阻挡端的宽线仅在阴极处失效，因此模型无法再现宽线中观察到的内部损伤。对于具有储库端的线，空洞位置没有阴极偏好。

(2) 宽线：铜向阳极端累积，且中部出现铜峰。 在测试时长内，模型再现了累积过程、其规模以及中线最大值，但未能再现它们的高度。在 2 MA/cm^2 下测试 6 天后，线末端十分之一处的平均 Cu含量与 c_0 之比的中位数为 1.73（第 10 至第 90 百分位数为 1.61 至 1.89），且在 100% 的图谱中，铜含量最大的位置都在阳极端。以十个 28 μm 窗口取平均值（窗口大小约等于 EDS区域），沿线铜含量的变化中位倍数为 7.0（4.5 至 17）；图 10(a) 的实测分布也变化了数倍。最大的

内部最大值（不包括首尾各十分之一）在 66% 的图谱中位于线的中间一半，与实测的三组分布大致相当。在线 w1中，中线最大值高于阳极端的铜含量 [图 10(a)]，；而在模型中，几乎每幅图谱的铜含量最高处都在阳极端。累积过程需要时间：在模型的成核时间，阳极端的比值仍仅为 1.03（E2）；6 小时后也为 1.03，因为只有溶解铜发生漂移。

(3) 窄线：*Cu*峰朝向阴极。模型既无法再现这些峰值，也无法再现实测到的阴极附近轻微耗尽。在 5 MA/cm^2 下运行 11 天后，模型使阴极端的铜耗尽，中位长度为 56 μm（第 10 至第 90 百分位数为 8.7 至 211 μm）；而在线n2中，最低铜含量约为线平均值的 0.6 倍，仅出现在距阴极约 25 μm的一处区域，阴极端区域的含量则恢复至接近平均值 [图 10(b)]。因此，模型将窄线阴极端的铜移出得比实测情况更多。在六条实测线中，有四条的最高铜含量出现在 $x/L \approx 0.20$；而在模型中，最大的 28 μm窗口仅在 4% 的图谱中位于 $x/L = 0.1$ 至 0.3 之间，在 22% 的图谱中位于阴极半区。模型中的Cu峰形成于溶解铜通量汇聚之处，即铜扩散率沿漂移方向下降的边界处，且大多位于阳极半部。考虑焦耳热时，线温度为 225 或 250 °C也不会改变这一结果（分别为 3% 和 2%）。若要像 Kim 等人的边缘漂移图景那样，在耗尽前沿形成铜堆积，就需要模型所不具备的机制，例如在前沿发生有限速率析出。

(4) 寿命。窄线在电流密度高出 2.5 倍的情况下，比宽线持续时间更长。这并非同类对比：两组在宽度、铜含量和电流密度上均有差异，而且测量的时间是电阻失效时间，而非空洞成核时间。在模型中，宽线的持续时间更长：阻挡端条件下，中位数分别为 9.16 h（宽线）和 0.328 h（窄线），相差 28 倍；储库端条件下相差 73 倍。阻挡端条件下，测得的失效时间是模拟成核时间的 16 至 805 倍（第 VII 节）。

(5) 哪种端部条件与（*1*）相符？阻挡端适用于窄线类，也较不明确地适用于近竹节类：阴极端应力最大，而竹节晶粒附近的内部散度也与之相当。采用储库端时，端部应力受到钳制，失效几乎均匀地分布在线路各处。测量的线路在同一金属层上终止于较宽的端子，而非通孔（第四节），因此更接近储库端而非阻挡端。然而，窄线与宽端子相连，并不能构成理想的储库，因为连接处晶粒结构的变化本身就会造成通量散度。因此，实际端部介于这两个极限之间；阻挡端更为吻合，这与测试期间连接处几乎没有提供铝的情况相符。

表 III. 模型与测量值的定性核验。[47] 宽线：Al-2 wt% Cu，2 MA/cm^2；窄线：Al-0.5 wt% Cu，5 MA/cm^2； 200 °C. 测试时长对应的铜分布（E12）。B，阻挡端；R，储库端。

观察	模型	判定
(1) 损伤主要 at the 阴极，而非仅那里	窄（阻挡端）：48% 阴极，内部其余区域；宽（阻挡端）：仅阴极；储库端：无阴极偏置	部分地一致
(2) 宽：阳极铜积聚，中-线路峰值	在测试时长：an-阳极累积过程，对比多个中的对比，线路中部最大值—值；阳极端始终最高	大多一致
(3) 窄：Cu 峰值朝向阴极，mild 阴极耗尽	峰值朝向阳极；无铜阴极区约 56 μm	不一致
(4) 窄 (5 MA/cm^2) 寿命更长 wide (2 MA/cm^2)	宽线的寿命长于窄线；成核时间短至 805 倍，短于失效时间	不一致（不像——对应)
(5) 端部条件 对于 (1)	阻塞	B 部分地，R no

VII. 讨论

A. 当固化分布很重要时

在阻挡端条件下，阴极处成核需要应力在长度约为σ_{crit}/G的层内上升 $\sigma_{\mathrm{crit}} - \sigma_{\mathrm{res}}$；当电流密度为 2 至 5 MA/cm^2 时，该长度相当于一两个晶粒。这需要$t_{\mathrm{nuc}} \approx \pi\sigma_{\mathrm{crit}}^2/(4G^2\kappa_{\mathrm{eff}})$（第 V A 节），而该层中的铜场通过 κ_{eff} 进入。其影响大小取决于有多少铜能够移动。我们在相同图谱上运行了三种处理方式，涵盖了这一范围（第V G节）。铜不可动时，中位成核时间为静态值，是无 Cu 情况下的 $1+\beta c_0$ 倍。仅溶解铜可动时，也就是主模型，在两种铜含量和所有电流密度下，成核时间都缩短至原来的 1.15 至 1.20 倍。铜全部可动时——这是早期溶质耦合模型所采用的假设——成核时间会进一步缩短：铜含量为 0.5 重量百分比时缩短至原来的 1.33 至 1.38 倍，含量为 2 重量百分比时缩短至原来的 2.24 至 2.36 倍。后一倍数随铜含量增加而增大，因为全可动模型允许漂移的、超过溶解度的部分也随之增加。这些倍数均不取决于j。标度论证也与此一致：层长按 $1/j$缩放，而铜漂移（$v \propto j$）或扩散穿过该层所需的时间按 j^{-2}缩放，与 t_{nuc}相同，因此成核时从该层流失的铜所占比例不取决于 j。因此，指数 n仍为 2。

因此，第I节的主张1是一个经过检验的条件性结果。在具有阻挡端的阴极主导群体中，演化的铜场以一个不大的因子改变中位成核时间以及窄线中阴极位点的占比，但不改变 n。它在以下位置对统计量的改变最大：

仅凭微观结构几乎不产生应力，即在具有储库端的宽线中。在那里，溶解铜发生移动而析出物保持不动，因此总铜形成扩散无法平滑的尖锐台阶，而这些台阶成为线失效处的通量散度。于是铜消除了这些线的永生性，而不是增加其永生性，并将其指数从约3.6降至约2.2。不可动铜与完全可动Cu均不能给出这一结果，因此它取决于固溶度极限。它还需要析出物阻塞铝扩散，但只需部分阻塞：四分之一的析出相阻塞即已足够（E11）。其大小取决于析出物溶解和生长的快慢，而模型将其取为瞬时过程；有限速率会平滑这些台阶。在实验[11,15,17]中观察到的孕育后漂移序列，对成核之后更缓慢的阶段更为重要，而模型并未包含这些阶段。

哪些铜会阻挡？铜台阶失效需要部分析出物来阻挡铝扩散，而文献并未确定其是否确实如此。Frear等人列出了关于铜效应的五种拟议机制，并发现它们之间并无共识。[57] Rosenberg将其归因于铜溶质与晶界缺陷之间的结合。[12,24] 在Wang 等人的线中，所有铜均已溶解，当铜含量高于约0.16原子百分比时，铝晶界扩散被有效阻止。[24] Hu 等人[11] 推断，沿晶界的铜电迁移而非铝$_2$铜析出物的溶解控制着损伤形成动力学；并且在亚微米竹节线中，加应力前形成的析出物降低了寿命。[18] Frear 等人 提出，晶界上的 θ 相薄共格膜或其前驱体会延缓扩散，并指出离散析出相的非共格界面仍可能是快速扩散路径。[57] Kim、Morris和Lee[25] 建立了阴极端无析出区生长的模型；他们对早期试验的分析表明，一旦该区超过Blech长度，漂移几乎立即开始，因此晶界铝$_2$铜析出物对于减缓铝电迁移至关重要。

有三项观察支持在 200 ℃ 下，多晶线中的析出物会产生一定程度的阻塞（$f > 0$）。首先，200 ℃ 时的溶解度为 0.10 wt%（0.04 原子百分比），仅为 Wang 等人发现会阻碍铝晶界扩散的含量的四分之一；然而，Knowlton 测得的该温度下 Al-1 wt% Cu 的扩散率比纯铝低 50 倍。[32]其次，采用 $f = 0$ 时，该模型给出的 2 wt% 和 0.5 wt% Cu 下的中位成核时间几乎相同：各类线路及端部条件下的比值为 1.00 至 1.12（对 j 取几何平均），因为这两种含量都超过了溶解度；每个 $f \geq 0.25$ 给出的比值则为 1.9 至 4.0。Kim等人的孕育时间也随初始铜含量增加而延长；Theiss 等人指出，与其竹节状线不同，将铜含量从 0.5 wt% 提高到 0.9 wt% 确实会改变多晶粒线的寿命。[18] 第三，在第 VI 节讨论的宽 Al-2 wt% Cu 线中，损伤发生在若干 Cu 峰值附近，且位于其阴极侧。[47] 这些位置的铜含量沿铝漂移方向升高，因此，如果富铜材料会产生阻塞，铝通量就会汇聚并形成压应力，这与这些线路中发现的挤出物和丘状突起相符；空洞在模型中形成于铜含量沿漂移方向降低的位置（第 V.C 节），无法用这种方式解释。这些线路的铜含量平均为其溶解度的 20 倍，因此在采用 $f = 0$ 时，大多数峰值两侧的阻塞程度相同，不会使损伤局限于峰值处。这三项证据都是间接的，且都无法确定 f。因此，我们有条件地陈述结果：宽储库端线在每种 $f \geq 0.25$（E11）下都会在铜阶跃处失效；只有析出物完全不产生阻塞时，它们才基本不失效。主模型采用 $f = 1$，因为 β 是根据 Knowlton 的 Al-1 wt% Cu 总铜含量校准的；部分阻塞会使中位成核时间大致按未受阻部分的比例缩短。因此，仅由于 f，富铜线路的寿命就存在约三倍的误差范围（如果 $f \geq 0.25$）；若析出物完全不产生阻塞，误差则会大得多：采用$f = 0$ 时，2 wt% Cu、3 MA/cm^2 下宽阻塞端线的中位成核时间会从 4.09 h 降至 0.278 h。

B. 寿命差距：成核与电阻失效的对比

模拟的成核时间比测得的失效时间短 16 至 805 倍（第 VI 节）。这两个量并不相同：模型在空洞成核时停止，而实验记录的是电阻失效；电阻失效发生在空洞生长之后，且成核受限失效和生长受限失效的标度不同（$n = 2$对比 $n = 1$）。[8,21] 输入参数也存在不确定性：文献给出的 200 °C 下铝铜团簇扩散率范围超过一个数量级，[32] 铜扩散率前因子的不确定幅度约为 40,[15] 倍，而且 β沿用了 Knowlton 将铝铜扩散率拟合到失效时间的结果。E8 对含 0.5 重量百分比 Cu、两端阻塞的均匀线逐一改变输入参数（表 IV）。在基准范围内，每项改变都会使 t_{nuc} 变为原来的 0.12 至 3.8 倍；在 2 和 5 MA/cm^2 下，这一变化幅度在 1% 以内。将 σ_{crit} 提高至 1 吉帕（其引用范围的上限）[32] 会使其延长 19 倍，远低于 $t_{\mathrm{nuc}} \propto \sigma_{\mathrm{crit}}^2$所预测的幅度，因为在较长的累积过程中，铜会离开阴极层。只有当所有输入参数都取其延长寿命的一端时（26 倍；若 σ_{crit} 为 1 吉帕，则为 156 倍），t_{nuc} 才接近宽线测得的差距。因此，造成这一差距最可能的解释是成核与电阻失效之间的差异。

C. 加速测试的外推

基于规则的与基于物理的电迁移检查有一个共同步骤：在高 T 和 j 下测得的寿命，用测试条件下拟合的 n和 E_a 外推至使用条件。[46] E9在模拟总体上检验该步骤（第五节 H）。会出现两类误差。第一类是测试条件与使用条件之间失效模式发生变化。在1 MA/cm^2 下，部分近竹节状总体-

表 IV. 成核时间（E8）的一次一项敏感性分析：均匀线，0.5 重量百分比 Cu，阻挡端， 200 ℃。条目 t_{nuc} 相对于基准值（2 MA/cm^2 时为 2.27 h，5 MA/cm^{2}时为 0.363 h）；此处列出 2 MA/cm^2 时的数值，5 MA/cm^2 时的数值与之相差不超过 1%。最后两行将每个输入都设为其范围内会延长 t_{nuc} 的端点值，其中 σ_{crit} 加倍或设为 1 GPa。

输入	较低设定值	较高设定值
σ_{crit} ($\times 0.5$, $\times 2$)	0.275	3.30
σ_{crit} (600 兆帕, 1 吉帕)	9.59	19
$D_{0,\ \mathrm{gb}}$ ($\times 0.1$, $\times 10$)	3.83	0.116
$E_{a,\mathrm{gb}}$ (-0.05, $+0.05$ 电子伏特)	0.334	2.26
β ($\times 0.5$, $\times 2$)	0.572	1.62
Z^*_{Al} ($\times 0.75$, $\times 1.25$)	1.66	0.666
所有长寿命， $\sigma_{\mathrm{crit}} \times 2$	26	
所有长寿命， σ_{crit} 1吉帕	156	

的寿命比预测值高出数个数量级，而带储库端的无铜宽线则基本不失效，任何有限的布莱克定律预测都无法表示这种情况。这些误差是保守的，因为在低 j下出现的机制——竹节晶粒阻塞和稳态不失效——会延长寿命。测试条件下远高于2的指数是其警示信号：在我们的总体中，它标志着内部失效或双峰总体，而不是在低 j下起主导作用的模式。碳化硅接触孔中的铝电极在300至 450 ℃下给出 $n = 3.0$至3.4，并以此指数对 j外推两个数量级；[43] 作者将高指数归因于三维通孔几何结构，我们的一维模型无法对此进行检验，但我们的结果表明，为何此类外推需要核查失效模式是否发生变化。

第二种误差没有这种警示信号。对于 2 重量百分比 Cu，在测试条件和使用条件下，失效模式相同，拟合得到的指数接近 2，而外推仍会高估中位成核时间，在 150 ℃ 时最高可达 2.33 倍。原因在于固溶线。已溶解、因而能够离开阴极层的 Cu 比例会随温度升高而增加，因此在 250 至 300 ℃ 之间的表观激活能（0.89 eV）高于在 150 至 200 ℃ 之间的表观激活能（0.68 eV）；用测试温度下拟合出的活化能会导致对使用温度下寿命的预测过长。温度差越大、超过固溶线的 Cu 含量越高，误差就越大；在 0 和 0.5 重量百分比 Cu 的情况下，Cu 在 300 ℃ 时几乎完全溶解，阴极受限导线中的误差在 10% 以内。因此，对 Cu 含量高于固溶线的合金进行加速测试时，测试温度要么应与使用温度处于固溶线的同一侧，要么应采用考虑固溶线影响的活化能。这些论述基于成核时间。模型未纳入的空洞生长，其指数接近 1（参考文献21），会改变数值，但不会改变论点。

D. 模型的局限性

该模型是一维的。晶界网络、三叉晶界和线宽仅通过区段分类和扩散率乘数进入模型，横向应力状态则被并入有效模量。空洞生长、电阻变化以及扩散率的应力依赖性均未纳入，均匀 σ_{res}之外的焦耳热或热应力亦未纳入。随机映射运行设定 $\sigma_{\mathrm{res}} = 0$。实测线条经过钝化，因此在测试温度下承受拉伸热应力；正的 σ_{res} 会降低成核所需的应力上升 $\sigma_{\mathrm{crit}} - \sigma_{\mathrm{res}}$，并缩短模拟时间，从而扩大上文讨论的寿命差距。铜阻挡定律对 c 呈线性，并在单一铜含量下标定；竹节状铜扩散由晶界值缩放而来，没有直接测量。析出被处理为瞬时局部平衡：仅低于溶解度的铜发生移动，过量部分为不可动析出物，并随溶解通量的需要立即溶解或生长。真实的 θ-铝$_2$铜析出物以有限速率溶解并粗化，且自身可在电流作用下迁移，[58] 因此该上限是这一步骤的极限情形，而非对其的描述。该上限采用体相溶解度，而铜沿晶界移动，偏聚会使局部铜含量高于晶格值。与 θ 平衡的可迁移晶界储量因此可能超过 c_{sol}；完全不动与完全可动极限将此情形夹在其间，受限结果应在二者之间解读。E7（不可动铜）与 E3$_{\mathrm{mobile}}$ （铜全部可移动）是铜输运的相反极限（第V G节）；它们是极限情景，并非对每一可观测量均已证明的界限，有限速率析出会平滑上限所产生的铜阶跃。成核空洞的线条局部铜含量保持在11原子百分比以下，低于 θ的成分。然而，在保持稳态的短阻挡端线条中，析出物堆积在少数阳极单元内，这正是Blech长度研究E4采用全可动模型的原因（第三节）。何种铜阻挡铝扩散是模型中最不确定的输入；其后果在第七节A中讨论。即使存在储库端，两端的铜通量仍为零；与线条交换铜的焊盘可能削弱其邻近的铜阶跃。铜传输方程是具有恒定有效电荷的简化漂移扩散模型，不含应力驱动或非理想化学势项。铜输入在E13的总体中进行了变化（100幅图谱，3 MA/cm^2）。耗尽使中位成核时间缩短：在所引输入下，阴极受限导线中为1.15至1.19；在 Z^*_{Cu} 的测量范围内为1.12至1.22；溶解度加倍时为1.39至1.49，但它强烈依赖于$D_{0,\mathrm{Cu}}$：若铜扩散慢40倍则约为1.0，若快40倍则为6.25至10.5。因此，本论文的耗尽因子主要由铜扩散率决定，而该扩散率在两个方向上均有40倍的不确定性。宽储库端线条在铜阶跃处的更早失效

在这些输入下仍然存在，但其幅度并非如此：在3 MA/cm^2 下，采用所引输入时，不动铜中位数超过受限结果的倍数为12.3至14.4，而在最慢的铜下仅为1.5。E13未测试无铜线变为不失效的低电流密度。第五节 H 的外推误差未针对这些输入重新计算；它通过溶解分数依赖于这些输入。压缩应力缓解是一种数值手段；在溶解度上限下，没有任何结果依赖于它（第 V.C 节）。两种端部条件是通孔与焊盘的理想化，比较并未明确偏向其中任何一种。求解器已对照解析解和守恒检验进行验证。在这些限度内，结果内部一致，除下文所述假设外，每一物理输入参数均有引用。应力释放参数 k_r 和 w 以及乘数分布 $\sigma_{\ln}$ 是所述假设，而非被引用的输入（表 I）。具有储库端的无铜宽线之不失效（铜会消除该不失效）依赖于由 $\sigma_{\ln}$ 设定的 κ 对比，且不含取向差分布或三叉晶界；更宽的对比也可能使无铜线失效。模型还省略了焦耳热，该效应在5 MA/cm^2, 的窄线中更大，并采用在氮化钛上测得的铝铜晶粒尺寸，因为未找到钛钨的相应数据；[49] 二者都可能移动窄线的Cu峰。模型的均匀初始铜场与在 200 ℃下24小时退火后测得的铜分布相符（第四节）。没有任何输入针对测量值进行调参。模型预测的是空洞成核，而非电阻失效，因此以其现有形式不应作为实测失效时间的定量预测器。两项结果没有孤立机制，仍是有待检验的模型预测：具有阻挡端的无铜近竹节状线的指数略高于2（2.15至2.25），以及4至6 MA/cm^2 下具有储库端的无铜宽线的指数（3.56）。

第八节：结论

我们将不断演化的铜场与随机晶粒分段图群体上的 Korhonen 应力方程耦合起来，使用经验证且开放的求解器，对宽线、窄线和近竹节状铝铜线进行求解；仅允许低于其溶解度的铜移动，并将结果与铜不可动和完全可动这两种极限情况进行比较。由此得出五项结果。

首先，在阻挡端和引用参数条件下，成核发生在约一个晶粒长度的阴极层中。溶解铜耗尽该层，使中位成核时间在所有电流密度和两种铜含量下，相较于不可动铜缩短1.15至1.20倍。该倍数主要由铜扩散率决定：在其40倍不确定性范围内，该倍数约为1.0至10.5（E13）。将所有铜视为可迁移铜会使这一影响进一步被高估1.33至2.36倍，且随着铜含量增加而增大。计入耗尽效应后，0.5和2重量百分比 Cu 会使中位成核时间分别增加约21.9倍和86.2倍。

其次，在每种条件下绘制1000张图时，对于带阻挡端的宽线和窄线，成核时间分布较窄（$\sigma_{\ln} \leq 0.26$）；而对于竹节状线，在1兆安/厘米^{2}下则呈双峰分布。对于不含铜且电流密度较低、带储库端的宽线，其大多不会失效；但含铜时，这类线均会失效：析出物不会移动，因此总铜含量会形成尖锐阶跃，充当通量散度。只要至少四分之一的析出物阻碍铝扩散，这一现象就会出现；部分阻塞会按比例减弱铜带来的益处，但仍会导致这些失效。寿命随铜含量增加而延长，以及在实测 Cu峰值旁发现的损伤，都支持存在这种阻塞，但二者都无法确定其大小。在带阻挡端的情况下，Blech 阈值与微观结构或铜含量无关。

第三，在具有阻挡端的宽线和窄线中，无论铜含量为零、铜不可动、受限还是完全可动，表观电流密度指数都保持在 2 附近（2.006 至 2.047），这与先前针对铝铜的成核模型结果一致。近竹节状线在高于 1 兆安/厘米^2, in-时，指数为 2.12 至 2.25，且与铜含量无关；完全可动铜情况下发现的指数随铜含量增加而上升的现象，在溶解度限制下不复存在。正如 Knowlton 在不含溶质时所发现的那样，双峰性以及永生性或趋近永生性的状态会产生更大的指数。当永生比例达到 0.2 时，我们不报告 n。

第四，在150至 300 ℃范围内，具阻挡端的群体表观激活能为0.63至0.79 eV；但当铜高于其溶解度时，寿命并不符合Arrhenius关系，因为溶解分数沿固溶线升高。在250至 300 ℃、4至6 MA/cm^2 条件下的Black定律拟合，对含0或0.5重量百分比 Cu的阴极受限导线，能在约10%以内预测150至 200 ℃、1至2 MA/cm^2 下的中位数，但对2重量百分比 Cu则高估达2.33倍，且失效模式不变、指数接近2。在失效模式发生变化之处，即低 j 下具储库端的近竹状线与无铜宽线，外推会低估寿命。在该成核模型内，从测试条件带到使用条件的固定指数与活化能，因此仅当二者之间失效模式与溶解Cu分数均不改变时才可靠；误差大小取决于铜的输入，并有待实验检验。

第五，该模型在定性上与窄线中部分内部位点出现的阴极侧损伤相符；当将铜场追踪至测试时长时，也与宽线中的阳极Cu富集和线中Cu峰相符。该模型无法再现窄线中朝向阴极的Cu峰；在窄线中，它从阴极端移除的铜也多于实测值。此外，该模型无法再现窄线较长的寿命，也无法再现寿命的量级。这些不一致之处表明，下一步应考虑空洞生长、有限速率析出，以及测试线的实测晶粒结构。

作者声明

利益冲突

作者声明不存在需要披露的利益冲突。

作者贡献

Narahara Chari Dingari： 概念化、方法学、软件、形式分析、调查、数据管理、可视化、撰写——初稿。**David R. Heskett：** 验证、撰写——审阅与编辑。

人工智能使用披露

本研究中人工智能工具的使用，包括实验设计、统计方法的选择以及模拟的运行，详见第 IIIF 节。

数据可用性

模拟代码、模拟结果以及每幅图背后的数据保存在一个 GitHub 仓库（https://github.com/ncdingari/solute-aware-korhonen-em）中；该仓库将在发表时公开，并归档至 Zenodo，同时赋予 DOI。在此之前，包括审稿人在内，均可向通讯作者提出合理请求以获取这些资料。

[1]J. Black，“电迁移——简要综述及若干近期结果”，IEEE电子器件汇刊 **16**，338–347（1969）。[2]J. Black，“半导体器件铝金属化中的电迁移失效模式”，IEEE会刊 **57**，1587–1594（1969）。[3]P. S. Ho、C.-K. Hu、M. Gall 与 V. Sukharev，“铜互连结构中的电迁移”，载于 *Electromigration in Metals*（剑桥大学出版社，2022），第127–202页。[4]M. A. Korhonen、P. Børgesen、K. N. Tu 与 C.-Y. Li，“受限金属线中电迁移引起的应力演化”，《应用物理学杂志》 **73**，3790–3799（1993）。[5]J. J. Clement 与 C. V. Thompson，“受限金属线中电迁移诱导应力演化的建模”，《应用物理学杂志》 **78**，900–904（1995）。[6]I. A. Blech，“氮化钛上薄铝膜中的电迁移”，《应用物理学杂志》 **47**，1203–1208（1976）。[7]M. Shatzkes 与 J. R. Lloyd，“一种同时考虑扩散与电迁移并得到电流指数为2的导体失效模型”，《应用物理学杂志》 **59**，3890–3893（1986）。[8]J. Lloyd，“再论 Black 定律——电迁移失效中的成核与生长”，微电子可靠性 **47**，1468–1472（2007）。[9]I. Ames、F. M. d’Heurle 与 R. E. Horstmann，“通过铜掺杂降低铝膜中的电迁移”，IBM研发杂志 **14**，461–463（1970）。[10]J. R. Lloyd，“铜在铝合金导体电迁移寿命中的作用”，《应用物理快报》 **57**，1167–1168 （1990）。[11]C.-K. Hu、M. B. Small 和 P. S. Ho，“Al(Cu) 双层结构中的电迁移：铜的影响及损伤形成动力学”，《应用物理学杂志》74，969–978（1993）。[12]R. Rosenberg，“薄膜中电迁移损伤的抑制”，《真空科学与技术杂志》9，263–270（1972）。[13]C.-L. Liu、X.-Y. Liu 和 L. J. Borucki，“铝和铝铜合金中的缺陷生成与扩散机制”，《应用物理快报》74，34 36 1999–（）。[14]I. A. Blech，“铝中的铜电迁移”，《应用物理学杂志》48，473–477（1977）。[15]H.-K. Kao、G. S. Cargill 和 C.-K. Hu，“Al(0.25 原子百分比 Cu) 导线中的铜电迁移”，《应用物理学杂志》–（），89，2588 25 2597，2001。[16]C. Kim 和 J. W. Morris，“窄 Al-2Cu-1Si 薄膜互连线电迁移失效的机制”，《应用物理学杂志》73，4885–4893（1993）。[17]J. Proost、A. Witvrouw、K. Maex、J. D’Haen 和 P. Cosemans，“大马士革工艺和等离子体刻蚀的 Al(Cu) 中电迁移诱导漂移：I. 多晶互连线中铜耗尽的动力学”，《应用物理学杂志》87，86–98（2000）。[18]S. K. Theiss、J. A. Prybyla 和 M. A. Marcus，“铜浓度及其分布对亚微米竹节状 Al(Cu) 导线寿命的影响”，MRS会议论文集473，387–392（1997）。[19]M. A. Korhonen、T. Liu、D. D. Brown 和 C.-Y. Li，“电迁移中的应力与合金化效应”，载于 *AIP Conference Proceedings* 373 1996 117 130，第卷（AIP，）第–页。[20]J. R. Lloyd 和 J. J. Clement，“铜耗尽导致 Al/Cu 合金导线发生电迁移损伤”，《应用物理快报》69，2486–2488（1996）。[21]Y.-J. Park、V. K. Andleigh 和 C. V. Thompson，“纯互连线和合金互连线中应力演化及电迁移诱导失效时间的电流密度标度关系模拟”，《应用物理学杂志》85，3546–3555（1999）。[22]H.-K. Kao、G. S. Cargill、F. Giuliani 和 C.-K. Hu，“Al(0.25 原子百分比 Cu) 导线中铜浓度与电迁移期间应力的关系”，《应用物理学杂志》93，2516–2527（2003）。[23]J. Gordineer 和 P.-C. Wang，“Al(0.25 原子百分比 Cu) 互连线中电迁移的数值建模”，载于 *The Minerals、Metals & Materials Series*（Springer Nature Switzerland，2024），第1169–1180页。[24]P.-C. Wang、K. T. Cavanagh、J. S. Gordineer 和 N. M. Caprotti，“Al(0.25 原子百分比 Cu) 导线中电迁移诱导短程应力演化的表征”，《应用物理学杂志》135，025105（2024）。[25]C.-U. Kim、J. W. Morris 和 H.-M. Lee，“Al–Cu 薄膜互连线中电迁移诱导边缘漂移的动力学”，《应用物理学杂志》82，1592–1598（1997）。[26]M. A. Korhonen、P. Børgesen、D. D. Brown 和 C.-Y. Li，“存在热诱导应力时受限线状金属化结构中电迁移损伤的基于微观结构的统计模型”，《应用物理学杂志》74，4995–5004（1993）。[27]Y.-C. Joo 和 C. V. Thompson，“近竹节状互连线晶粒结构的解析模型”，《应用物理学杂志》76，7339 7346 1994–（）。[28]J. R. Lloyd 和 J. Kitchin，“电迁移失效分布：细线情形”，《应用物理学杂志》69，2117–2127（1991）。[29]V. M. Dwyer，“微观结构对铝基互连线早期失效概率的影响”，《应用物理学杂志》96，2914–2922（2004）。[30]B. D. Knowlton、J. J. Clement 和 C. V. Thompson，“晶粒结构和晶粒生长对电迁移及互连线可靠性影响的模拟”，《应用物理学杂志》81，6073–6080（1997）。[31]B. Knowlton 和 C. Thompson，“温度和电流密度对近竹节状互连线电迁移限制可靠性的标度关系模拟”，《材料研究杂志》13，1164–1170（1998）。[32]B. D. Knowlton，*The effects of grain structure and Cu distribution on the reliability of near-bamboo Al-Cu alloy interconnects*，

博士学位论文，麻省理工学院，剑桥，马萨诸塞州（1997）。[33] M. Korhonen、T. Korhonen、D. Brown 和 C.-Y. Li，“芯片级互连线中电迁移损伤的模拟：基于晶粒结构的统计方法”，载于 *1999 IEEE International Reliability Physics Symposium Proceedings. 37th Annual (Cat. No.99CH36296)* 1999 227 232

（IEEE，）第–页。[34] T. Korhonen、D. Brown 和 M. Korhonen，“芯片级互连线中电迁移损伤的基于晶粒结构的统计模拟”，微电子可靠性**40**，2053–2060（2000）。[35] V. M. Dwyer，“短铜互连中电迁移失效时间分布的建模”，《应用物理学杂志》**104**，053708（2008）。[36] V. M. Dwyer，“短铜互连中电迁移诱导空洞成核时间统计的研究”，《应用物理学杂志》**107**，103718（2010）。[37] V. K. Andleigh、V. T. Srikar、Y.-J. Park 和 C. V. Thompson，“金属与合金互连线电迁移诱导失效的机制图”，《应用物理学杂志》**86**，6737–6745（1999）。[38] V. Sukharev、E. Zschech 和 W. D. Nix，“双镶嵌铜互连中电迁移诱导退化机制模型：微观结构的影响”，《应用物理学杂志》**102**，053505（2007）。[39] A. S. Saleh、K. Croes、H. Ceric、I. De Wolf 和 H. Zahedmanesh，“ 电迁移诱导应力演化、空洞成核及其动态过程的联合模拟框架：在纳米互连可靠性中的应用”，《应用物理学杂志》**134**，135102（2023）。[40] X. Huang、A. Kteyan、S. X.-D. Tan 和 V. Sukharev，“基于物理的电迁移模型与电源网格网络的全芯片评估”，《IEEE计算机辅助设计集成电路与系统汇刊》**35**，1848–1861（2016）。[41] Z. Sun、S. Yu、H. Zhou、Y. Liu 和 S. X.-D. Tan，“EMSpice：采用电子与应力耦合模拟的基于物理的电迁移检查”，《IEEE器件与材料可靠性汇刊》**20**，376 389 2020–（）。[42] D. K. Pradhan、D. C. Moore、A. M. Francis、J. Kupernik、W. J. Kennedy、N. R. Glavin、R. H. Olsson 和 D. Jariwala，“高温数字电子器件用材料”，自然评论·材料**9**，790–807（2024）。[43] S. Tanimoto、N. Nishio、T. Suzuki、Y. Murakami、H. Ohashi、H. Yamaguchi 和 H. Okumura，“高结温下工作的 SiC功率器件中接触孔的电迁移可靠性”，材料科学论坛**645-648**，1139–1142（2010）。[44] C.-K. Hu、L. G. Gignac、J. Ohm、C. M. Breslin、E. Huang、G. Bonilla、E. Liniger、R. Rosenberg、S. Choi 和 A. H. Simon，“铜电迁移中的微观结构、杂质与金属覆盖层效应”，载于 *AIP Conference Proceedings*，第1601卷（AIP Publishing LLC，2014），第67–78页。[45] H. Jiang、S. Liang、Y. Xu 和 S. Ramachandran，“堆叠集成中考虑晶粒演化的埋入式电源轨电迁移退化”，《IEEE元件、封装与制造技术汇刊》（2026），10.1109/TCPMT.2026.3704104。[46] S. S. Sapatnekar，“特邀：迈向集成系统中准确、大规模的电迁移分析与优化”，载于 *Proceedings of the 2026 International Symposium on Physical Design* 2026 191 199

（ACM，）第–页。

[47] N. C. Dingari, *Characterization of Electromigration in Semiconductor Device Interconnects Using Microscopic Techniques*, 博士论文，罗得岛大学，金斯敦，罗得岛州（2007）。[48] J. L. Murray，《铝铜系统》，《国际金属评论》**30**，211–234（1985）。[49] E. M. Atakov、A. Shepela 和 B. Miner，《层压材料和合金添加元素对铝互连线电迁移的影响》，MRS会议论文集**309**，401（1993）。[50] S. Alam、C. Gan、F. Wei、C. Thompson 和 D. Troxel，《铜金属化的电路级可靠性要求》，《IEEE器件与材料可靠性汇刊》**5**，522–531（2005）。[51] M. A. A. Shohel、V. A. Chhabria 和 S. S. Sapatnekar，《一种适用于一般互连线永生性的新型高效计算“Blech 判据”》，arXiv:2105.08784（2021）。[52] D. B. Butrymowicz、J. R. Manning 和 M. E. Read，《铜及铜合金中的扩散。第三部分：涉及IA、IIA、IIIB、IVB、VB、VIB和VIIB族元素的系统中的扩散》，《物理与化学参考数据》**4**，177–250（1975）。[53] C.-K. Hu、J. Ohm、L. M. Gignac、C. M. Breslin、S. Mittal、G. Bonilla、D. Edelstein、R. Rosenberg、S. Choi、J. J. An、A. H. Simon、M. S. Angyal、L. Clevenger、J. Maniscalco、T. Nogami、C. Penny 和 B. Y. Kim，《铜铝合金和铜锰合金大马士革互连线中的电迁移》，《应用物理学杂志》**111**，093722（2012）。[54] D. Scharfetter 和 H. Gummel，《硅读出二极管振荡器的大信号分析》，IEEE电子器件汇刊**16**，64–77（1969）。[55] P. Virtanen、R. Gommers、T. E. Oliphant、M. Haberland、T. Reddy、D. Cournapeau、E. Burovski、P. Peterson、W. Weckesser、J. Bright、S. J. van der Walt、M. Brett、J. Wilson、K. J. Millman、N. Mayorov、A. R. J. Nelson、E. Jones、R. Kern、E. Larson、C. J. Carey、 ̇I. Polat、Y. Feng、E. W. Moore、J. VanderPlas、D. Laxalde、J. Perktold、R. Cimrman、I. Henriksen、E. A. Quintero、C. R. Harris、A. M. Archibald、A. H. Ribeiro、F. Pedregosa、P. van Mulbregt、SciPy 1.0贡献者、A. Vi- jaykumar、A. P. Bardelli、A. Rothberg、A. Hilboll、A. Kloeckner、A. Scopatz、A. Lee、A. Rokem、C. N. Woods、C. Fulton、C. Mas- son、C. H¨aggstr¨om、C. Fitzgerald、D. A. Nicholson、D. R. Hagen、D. V. Pasechnik、E. Olivetti、E. Martin、E. Wieser、F. Silva、F. Lenders、F. Wilhelm、G. Young、G. A. Price、G.-L. Ingold、G. E. Allen、G. R. Lee、H. Audren、I. Probst、J. P. Dietrich、J. Sil- terra、J. T. Webber、J. Slavi ̌c、J. Nothman、J. Buchner、J. Kulick、J. L. Sch¨onberger、J. V. de Miranda Cardoso、J. Reimer、J. Har- rington、J. L. C. Rodr´ıguez、J. Nunez-Iglesias、J. Kuczynski、K. Tritz、M. Thoma、M. Newville、M. K¨ummerer、M. Boling- broke、M. Tartre、M. Pak、N. J. Smith、N. Nowaczyk、N. She- banov、O. Pavlyk、P. A. Brodtkorb、P. Lee、R. T. McGibbon、R. Feldbauer、S. Lewis、S. Tygier、S. Sievert、S. Vigna、S. Peter- son、S. More、T. Pudlik、T. Oshima、T. J. Pingel、T. P. Robitaille、T. Spura、T. R. Jones、T. Cera、T. Leslie、T. Zito、T. Krauss、U. Upadhyay、Y. O. Halchenko 和 Y. V ́azquez-Baeza，《SciPy 1.0：用于科学计算的基础算法》，《自然·方法》**17**，261–272（2020）。[56] E. L. Kaplan 和 P. Meier，《基于不完整观测的非参数估计》，《美国统计学会杂志》**53**，457–481（1958）。[57] D. R. Frear、J. R. Michael、C. Kim、A. D. Romig, Jr. 和 J. W. Morris, Jr.，《铝晶界处的铜对铝薄膜电迁移行为的影响》，载于 *SPIE Proceedings*，第1596卷（SPIE，1991），第72–82页。[58] C. Witt、C. Volkert 和 E. Arzt，《电迁移诱发的铜迁移及其在竹节状铝铜互连线中的析出》，《材料学报》**51**，49–60（2003）。