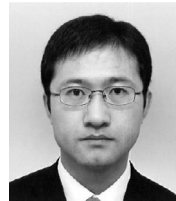
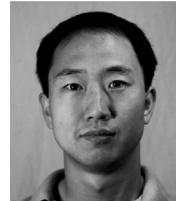


鉛フリーはんだにおける  
マルチスケールシミュレーションについて\*

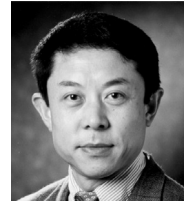
Feng GAO\*\*, Min PEI\*\*\* and Jianmin QU\*\*



Feng GAO



Min PEI



Jianmin QU

Multi-Scale Simulations in Lead-Free Soldering\*

by Feng GAO\*\*, Min PEI\*\*\* and Jianmin QU\*\*

**キーワード** はんだ, 鉛フリー, 界面, クリープ挙動, 破壊現象, 数値シミュレーション, マルチスケール

## 1. はじめに

連続体力学に基づく有限要素法 (FEM) は, パッケージデザインやその信頼性を解析する上で, 標準的なツールとなってきた. この FEM はすばらしい成果をおさめているとはいえ, 通常, 応力と変形だけしか予測することができない現象論的アプローチに過ぎない. 材料の破壊を予測するためには, FEM 解析の実施に先立ち, 材料特性に関する強度など (例えば, 降伏強度) が分かっている必要はない. さらにエレクトロニクス分野においては微細化が進行しており, 解析に必要な材料特性を実際に測定することが困難となっている. 一般にナノおよびマイクロスケールでの材料挙動は, その微細組織に起因するバルク全体の形態やサイズ効果とは大きく異なる可能性があることが明らかになっている. したがって, ナノおよびマイクロスケールの要素に関する特性を得るためには, 同じナノおよびマイクロスケールでの実験による測定を必要とする. この測定は不可能ではないにしても, その実施が極めて困難であることが非常に多い. このため, 距離スケールの差異処理を目的としたマルチスケール計算が頻繁に必要となる. 本稿では, 鉛フリーはんだ合金のバルク材料特性, ならびにはんだと Cu 界面の界面破壊現象を評価したマルチスケール研究の

成果について報告する.

## 2. マルチスケールシミュレーション

## 2.1 Sn-3.5Ag はんだ合金

Sn-3.5Ag はんだは, 不均質な微細組織を有しており, 初晶の  $\beta$ -Sn と共晶組織からなる. この共晶組織は,  $Ag_3Sn$  の金属間化合物粒子と Sn 母相からなる. 我々の構成則は, 既存モデルとは異なり, 階層型の微細構造をマルチスケールで考え, バルクでの材料特性を求めるものである. Sn-3.5Ag はんだ合金の場合, その短距離スケール (ミクロスケール) では, まず Sn-Ag 共晶領域を, Sn 母材中にサブミクロンサイズの  $Ag_3Sn$  粒子が分散している粒子強化の複合材料として取り扱う. このスケールでは,  $Ag_3Sn$  粒子は Sn 母材中にランダムに分散しているものと考えられる. 長距離スケール (マクロスケール) では, はんだ合金は粒子としてのマイクロサイズの Sn デンドライトと母相としての Sn-Ag 共晶領域が存在する二相の複合材料として取り扱われる. ここでは,  $Ag_3Sn$  粒子は球形であり, Sn 母相中にランダムに分散しているものと仮定する. Sn 母相のクリープ現象は, べき乗則に従うものと考え, 式 (1) のようにする.

$$\dot{\epsilon}_c = A(\sigma)^n \exp(-Q/RT) \quad (1)$$

ここで,  $\dot{\epsilon}_c$ : クリープ歪速度,  $\sigma$ : 応力,  $A$  及び  $n$ : 材料定数,  $Q$ : 活性化エネルギー,  $R$ : 気体定数,  $T$ : 絶対温度, である. 今回の Sn-3.5Ag はんだ合金試料中では, 図 1 に示すように共晶領域における  $Ag_3Sn$  粒子に関する体積割合は 0.18 であった. またここでは, 共晶領域における Sn 母相の特性は Sn デンドライトと同じものである

\*原稿受付 平成22年11月27日

\*\* Department of Civil and Environmental Engineering,  
Northwestern University, Evanston, IL, USA  
\*\*\* School of Mechanical Engineering, Georgia Institute of  
Technology, Atlanta, GA, USA  
(現 Currently at Intel Corporation, Chandler, AZ, 85226,  
USA)

と仮定して取り扱った。Sn デンドライトの材料定数の室温での値については、ナノインデンテーション試験を用いて測定した。

共晶領域におけるクリープ挙動の評価には、森・田中理論と合わせ標準的な割線係数によるアプローチを用いた<sup>2)</sup>。室温で歪み速度を変化させながら、定常状態での有効応力を求めプロットした図を図2に示す。図2に示した応力-歪み速度曲線の予測結果は、べき乗則の関数と一致している。またこのマイクロ力学モデルを検証するために、改めてナノインデンテーション試験をその共晶領域に関して実施し、定常応力-歪み速度の曲線を求めた。その結果もまた図中に示し、モデルによる予測値と比較した。本研究における歪み速度領域全体では、モデルによる予測とテストデータ間で良好な一致がみられた。

長距離スケールモデルでは、Sn デンドライトが約10 $\mu\text{m}$ であり、その共晶領域は短距離スケールモデルで示されたクリープ特性と同種であると見なす。また図1に示した微細組織から、合金中のSn デンドライトの体積割合は、Sn-3.5Ag はんだ合金中で0.61であるものと計算できる。Sn デンドライトが球形粒子であると仮定すると、森・田中理論<sup>2)</sup>と合わせ同じ割線係数によるアプローチを用いて、はんだ合金のクリープ挙動を評価できる。比較する目的で、Voigt 上限値と Reuss 下限値を用いたものもまた同じ図上にプロットした。長距離スケールモデルによる応力-歪み曲線の予測結果は、これら両限界内

にあって予想通りであった。

顕微鏡を用いた調査では、Sn デンドライトは球形でないことが分かっている。これらの形状はどちらかという和不規則なものとなっており、この不規則形状がモデル予測に影響を与えるかどうかを調べるため、代表体積要素 (representative volume element : RVE) のデジタル画像に基づく (DIB) モデルに、有限要素 (FE) をベースとしたモデリング技術を適用した。まず始めに、走査型電子顕微鏡 (SEM) を用いてはんだ組織顕微鏡画像の RVE 上への取り込みをおこなった。その後、図3に示すように FE メッシュの生成を行った。次いで、メッシュ化したモデルを応力解析用 ABAQUS 内にインポートした。RVE の境界上に一定の一軸速度場を定め、一定の歪み速度をシミュレートすることで、長距離スケールモデルの利用では出来ないことであるが、任意に与えられた歪み速度についての完全な応力-歪み曲線を求めることができる。その結果は、現状モデルが Sn-3.5Ag はんだを RVE として取り扱うことに満足なものであることを示している。また FE による結果は長距離スケールモデルによる予測値にも極めて近いことが分かり、Sn デンドライトを球形とする前提は妥当なものであることが示された。また RVE の応力-歪み場は、FE モデルからも求めることができる。図4は、全歪みが1%に規定された等価クリープ歪みである。これらの図から Sn が非常にクリープし易い傾向にあるために、予想通り Sn デンドライ

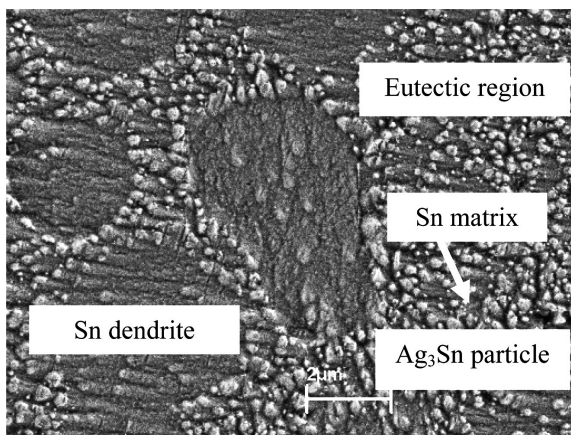


図1 Sn-3.5Ag はんだ合金微細組織の SEM 像

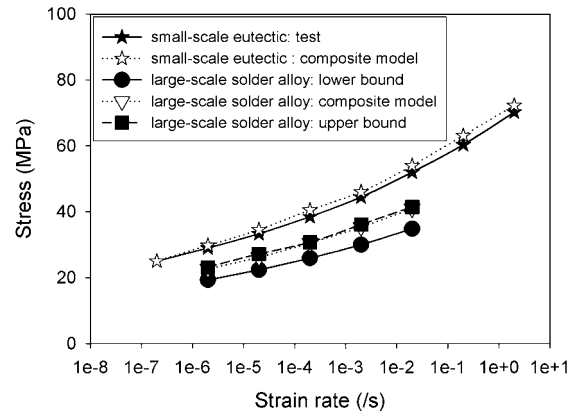
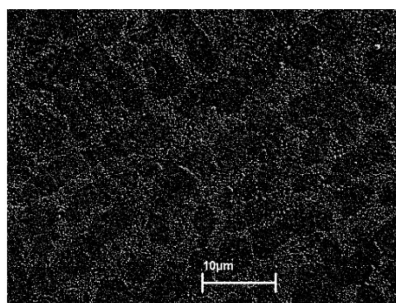
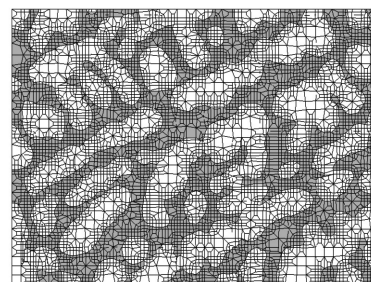


図2 短距離スケール (共晶領域) と長距離スケール (Sn-Ag 合金領域) モデルそれぞれにおける応力-歪み速度の関係



(a) オリジナルの SEM 写真



(b) メッシュ化した FEM モデル

図3 はんだ組織の SEM 写真とメッシュ化したモデル

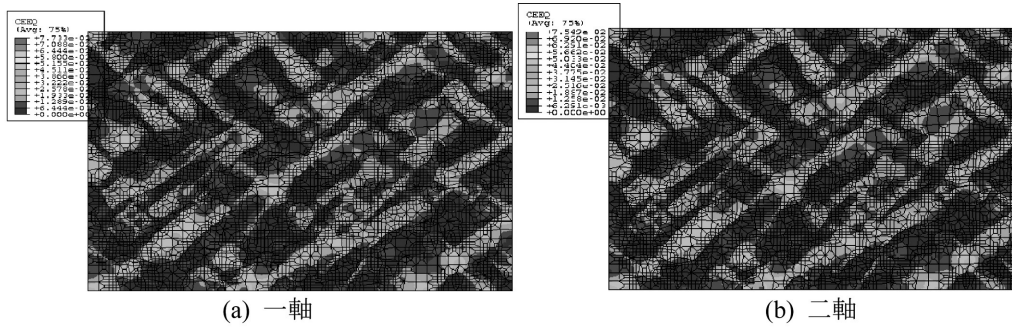


図4 DIB モデルによる Sn-Ag はんだ合金の等価クリープ歪み場

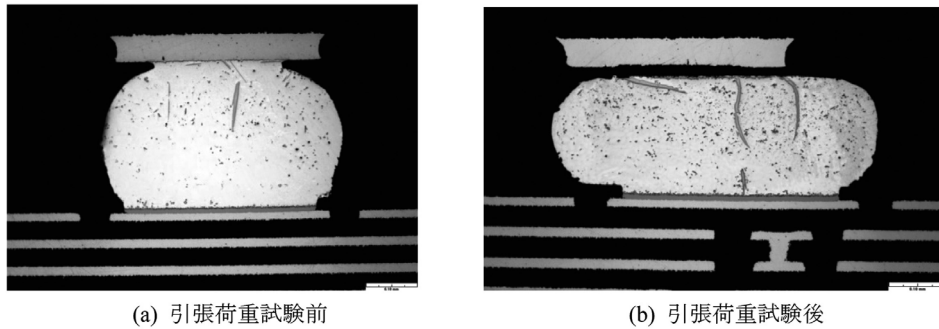


図5 はんだ接合部の微細構造

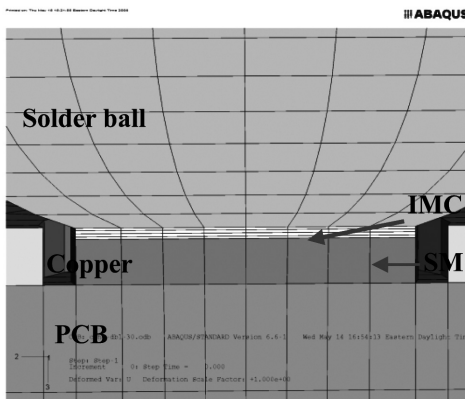


図6 はんだ接合部の有限要素法モデル

ト内ではクリープ歪みがかなり大きくなることになった。

2.2 はんだ継手の界面破壊

鉛フリーはんだ継手の深刻な問題の一つは、外部からの速い歪み速度負荷を受ける場合の界面破壊である。図5は5mm/sの引張荷重前後におけるはんだ継手の微細構造を示している。金属間化合物（intermetallic compounds: IMCs）がパッケージ側とボード側の両側に形成されている。また図5(b)には、引張荷重後のはんだ継手の典型的な破壊を例示しているが、支配的な破壊モードはボード側のIMC/Cuパッドに沿った脆性破壊であることが分かる。

FEMシミュレーション用3次元有限要素モデルを構築し、凝集要素を用いてはんだ/IMC/パッド界面をモデル化した。ボード側の界面の詳細を図6に示す。動的負荷をシミュレーションするために、有限要素モデルの底面に

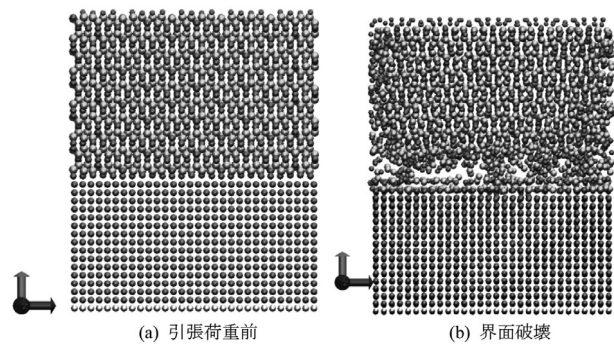


図7 MDシミュレーションによるCu<sub>6</sub>Sn<sub>5</sub>/Cu界面モデル

ついて、x, y, z方向の拘束をおこなった。有限要素モデル表面のすべてのノードに対して、5mm/sの速度を定めた。問題は、はんだ/IMC/Cuパッド界面における凝集要素の材料特性を求めることであり、我々の研究<sup>3)</sup>では、この特性を、分子動力学(MD)を用いて求めている<sup>3)</sup>。この際、Davoodiらによって作り出された原子間ポテンシャルを用いて<sup>4)</sup>、はんだ/Cu界面の原子間相互作用を表現した。

MDシミュレーション用にCu<sub>6</sub>Sn<sub>5</sub>/CuおよびCu<sub>6</sub>Sn<sub>5</sub>/β-Sn界面モデルを構築した。図7(a)に生成したCu<sub>6</sub>Sn<sub>5</sub>/Cu界面モデルを示す。上部は、Cu<sub>6</sub>Sn<sub>5</sub>IMCであり、下部はCu原子である。この界面モデルを変形させるため、1Å/psの均一な引張速度を上部加重面に作用させた。図7(b)に引張荷重時のCu<sub>6</sub>Sn<sub>5</sub>/Cu界面の破壊状態を示す。引張時の界面領域の変位は負荷面の変位の合計として定義した。原子応力は、ビリアル定義を用いて計算された<sup>5)</sup>。図8に反力に関するFEMシミュレーションと実験結果の比較を示す。実験データとFEM結果の間

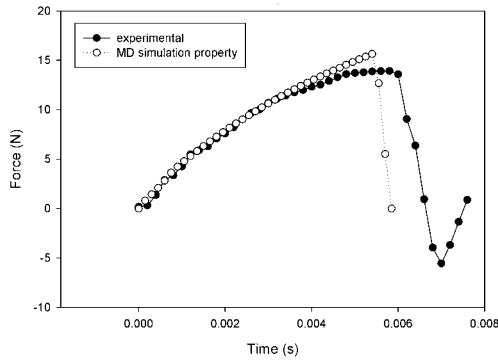


図8 FEM 解析結果と実験結果の比較

には良好な一致が見られる。

### 3. 結 論

得られた結論を以下に示す。

1. 本稿では、階層型モデルを Sn-3.5Ag はんだのクリープ挙動を表現することにより作り上げ、鉛フリーはんだ合金に共通のマルチスケールモデルについて説明した。本モデルは、測定が容易な構成材料の初期の微細組織とクリープ特性とを必要とする物理的な基礎モデルである。

2. 界面破壊は、凝集帯則を MD シミュレーションより求めると同時に、凝集帯モデルによってシミュレーションが可能であることを示した。また MD シミュレーションをもとにしたこの凝集帯モデルは、原子長さスケールと FEM 連続帯長さスケールとの橋渡しとして利用できる。

(訳：大阪大学 西川 宏)

### 謝 辞

この研究の一部は、インテルコーポレーションのサポートにより行われたものである。

### 参考文献

- 1) M. Pei, J.M. Qu, J. Electron. Pack., 2008, 130: 031004-1.
- 2) J.M. Qu, M. Cherkaoui, Fundamentals of Micromechanics of Solids, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2006.
- 3) F. Gao, J. M. Qu, Proc. ITEHRM2010, CD Edition, Las Vegas, 2010.
- 4) J. Davoodi, M.T. Fallahi, and H. Rafii-Tabar, J. Comput. Theor. Nanosci., 2008, 5 (3): 359.
- 5) X.W. Zhou, J.A. Zimmerman, E.D. Reedy Jr., N.R. Moody, Mech. Mater, 2008, 4: 832.