



CONGRESO INTERNACIONAL DE METALURGIA Y MATERIALES

16° SAM - CONAMET

22 al 25 de Noviembre 2016

Córdoba - Argentina

SIMPOSIO - MATERIALES Y TECNOLOGÍAS PARA LA INDUSTRIA METALMECÁNICA Y AEROSPAZIAL

## INTERACCIÓN ENTRE VACANCIA E INTERFACES EN EL SISTEMA Cu-Sn: UN ESTUDIO ATOMÍSTICO

C. Deluque Toro<sup>(1)</sup>, Julián R. Fernández<sup>(2)\*</sup> y Susana Ramos<sup>(3)</sup>

<sup>(1)</sup>Grupo de Nuevos Materiales, Universidad de la Guajira,  
Km 5 Vía Maicao, Riohacha, La Guajira, Colombia.

<sup>(2)</sup>Departamento Estructura y Comportamiento, Gerencia de Materiales, CAC, CNEA/Instituto Sábato,  
UNSAM/CONICET, Av. General Paz 1499, Buenos Aires, Argentina.

<sup>(3)</sup>Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos, Biotecnología y Energías Alternativas,  
CONICET/Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue,  
Buenos Aires 1400, Neuquén, Argentina.

\*Correo Electrónico (autor de contacto): [julrfern@cnea.gov.ar](mailto:julrfern@cnea.gov.ar)

### RESUMEN

*En las uniones libres de Pb de circuitos electrónicos, la interacción entre la soldadura de Sn y el sustrato de Cu forma dos intermetálicos del sistema,  $\text{Cu}_3\text{Sn}$  y  $\text{Cu}_6\text{Sn}_5$ . El  $\text{Cu}_6\text{Sn}_5$  es el primero en formarse, mientras que el  $\text{Cu}_3\text{Sn}$  aparece posteriormente en la interface durante el envejecimiento de la unión. En determinadas condiciones, este último intermetálico muestra progresivamente la formación de microporos en su interface con el Cu que, eventualmente, llevan a la falla de la unión. Estos microporos, conocidos en la literatura como huecos o cavidades de Kirkendall, se atribuyen a una acumulación de vacancias cercanas a dicha interface [1]. Existe alguna controversia sobre si este efecto es debido a impurezas inicialmente existentes en el sustrato de Cu [1] o si se debe a una diferencia en la migración de ambos componentes [2]. En este último caso, la fuerza impulsora del viento de vacancias resultante podría atribuirse a una diferencia de energías entre las dos interfaces,  $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$  y  $\text{Cu}_3\text{Sn}/\text{Cu}_6\text{Sn}_5$ . En este trabajo, se presentan cálculos atomísticos con potenciales semiempíricos del tipo MEAM, desarrollados en un trabajo anterior [3]. Inicialmente, se estudian concentraciones de equilibrio de defectos puntuales (vacancias y antisitios) en función de la temperatura y la composición en cada uno de los intermetálicos,  $\text{Cu}_3\text{Sn}$  y  $\text{Cu}_6\text{Sn}_5$ . Posteriormente, se investigan las estructuras de ambas interfaces, y su interacción con una vacancia. Los resultados muestran que la formación de la vacancia se ve favorecida en la interface  $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$ , en correspondencia con la observación experimental.*

### ABSTRACT

*In Pb-free solders of electronic circuits, the interaction between the Sn solder and the Cu substrate leads to the formation of two intermetallics of the system,  $\text{Cu}_3\text{Sn}$  and  $\text{Cu}_6\text{Sn}_5$ .  $\text{Cu}_6\text{Sn}_5$  is the first to be formed, while  $\text{Cu}_3\text{Sn}$  appears afterwards in the interface during the joint annealing. Under certain conditions, the latter intermetallic shows progressively the formation of micropores in its interface with Cu that, eventually, lead to the failure of the joint. These micropores, known in the literature as Kirkendall voids, are attributed to the accumulation of vacancies close to such interface [1]. There exists some controversy whether this effect is due to impurities initially existent in the Cu substrate [1] or it is due to a difference in the migration of components [2]. In the latter case, the driving force of the resultant vacancy wind could be attributed to an energy difference between the two interfaces,  $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}$  and  $\text{Cu}_3\text{Sn}/\text{Cu}_6\text{Sn}_5$ . In this work, atomistic calculations with MEAM empirical potentials, developed in a previous work [3], are presented. Initially, point defect (vacancies and antisites) equilibrium concentrations as a function of temperature and composition in both intermetallics,  $\text{Cu}_3\text{Sn}$  and  $\text{Cu}_6\text{Sn}_5$ , are studied. Later, the interface structures and their*

*interaction with a vacancy are investigated. Results show that the vacancy formation is favored in the Cu/Cu<sub>3</sub>Sn interface, in correspondence with the experimental observation.*

## **REFERENCIAS**

1. L. Yin, F. Wafula, N. Dimitrov and P. Borgesen, "Toward a Better Understanding of the Effect of Cu Electroplating Process Parameters on Cu<sub>3</sub>Sn Voiding", *Journal of Electronic Materials*, Vol. 41 (2012), p. 302-312.
2. A. Paul, C. Ghosh and W. J. Boettinger, "Diffusion parameters and growth mechanism of phases in the Cu-Sn system"; *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 42 (2011), p. 952-963.
3. Deluque Toro, J. R. Fernández y S. Ramos de Debiaggi, *Anales AFA*, Vol. 24 (2012), p. 37-42.

**TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO:** *T18*

**PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER):** *P (poster)*