## Fatigue of Al thin films at ultra high frequencies

Von der Fakultät für Chemie der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.) genehmigte Abhandlung

> Vorgelegt von Dipl.-Ing. Christoph Eberl aus Tübingen

Hauptberichter:Prof. Dr. phMitberichter:Prof. Dr. reTag der mündlichen Prüfung:13.12.2004

Prof. Dr. phil. Eduard Arzt Prof. Dr. rer. nat. Oliver Kraft 13.12.2004

Institut für Metallkunde der Universität Stuttgart und Max-Planck-Institut für Metallforschung Stuttgart

Stuttgart, Januar 2005

## Index

1.	Introduction	9
2.	Literature review and motivation	11
	2.1 Working principle of SAW test devices and material selection	11
	2.2 Surface acoustic wave induced cyclic stress state	15
	2.3 Microstructural changes in SAW devices	16
	2.4 Technological challenges	18
	2.5 Fatigue in thin films	.19
	2.6 Fatigue at ultra high frequency	.20
	2.7 Defect mechanisms active at ultra high frequencies	.21
	2.8 Summary of literature review and aims of this study	.24
3	In situ observations of ultra high cycle fatigue in patterned Al thin films	25
	3.1 Introduction	.26
	3.2 Experimental	.27
	3.3 Results	.32
	3.4 Finite Element Analysis	.38
	3.5 Discussion	.40
	3.6 Summary	.44

4	Damage analysis in A	thin films fatigued	at ultra high free	auencies	45
•	Duniuge unurysis in M	i unin minis rauguoa	at antia mgn no	queneres	15

4.1 Introduction	
4.2 Experimental	
4.3 Results	
4.3.1 Microstructural damage analysis in 2-port devices	53
4.3.2 Microstructural changes in L-type devices	
4.3.3 Quantitative analysis of damage formation in L-type devices	61
4.4 Discussion	
4.4.1 Continuous Al thin films	65
4.4.2 Patterned Al thin films	67
4.4.3 Damage density and frequency shift correlation in structured films	69
4.4.4 Short circuit probability	73
4.5 Summary	

## 5 Fatigue damage and frequency shift at ultra high frequency: a Finite Element analysis. 77

5.1 Introduction	
5.2 FEM model	79
5.3 FEM simulation results	
5.3.1 Inhomogeneity of cyclic stress state	
5.3.2 Young's modulus and mass density changes	
5.3.3 Stiffness decrease	
5.3.4 Mass changes	91
5.3.5 Damage density	95
5.4 Discussion	
5.4.1 Principal considerations	97
5.4.2 Extrusion length variation	
5.4.3 Damage density variation in the FEM model	
5.4.4 Comparison with experimental data	
5.5 Conclusions	

6	Discussion of possible mechanisms	105
	6.1 Model description	105
	6.2 Microstructure and reliability	110
	6.2.1 Grain size	
	6.2.2 Texture	111
	6.2.3 Grain boundary diffusivity	112
7	Summary	113
8	Appendix	115
	8.1 In situ experiments (L-type test devices)	115
	8.2 Frequency shift versus damage density in continuous Al films (2-port test devices)	117
	8.3 Fatigue life time of continuous Al films at 900 MHz (2-port test devices)	118
	8.4 Grain size analysis of fatigued Al films (L-type test devices)	119
	8.5 Ex situ experiments with patterned Al films (L-type test devices)	120
	8.6 FEM calculations	123
9	References	124
10	Deutsche Zusammenfassung	131

#### CHRISTOPH EBERL:

#### FATIGUE OF AL THIN FILMS AT ULTRA HIGH FREQUENCIES

Institute of Physical Metallurgy, University of Stuttgart and Max-Planck-institute for Metals Research Stuttgart, 2004 138 pages, 48 figures, 14 tables

ABSTRACT: Ultra high-cycle fatigue at frequencies in the GHz regime leads to a characteristic void and extrusion formation in patterned metal thin films. Resulting from the microstructural damage formation a significant degradation in form of a shift of the resonance frequency and failures by short circuits in Surface Acoustic Wave (SAW) test devices take place. To study fatigue at ultra high cycles, SAW test devices were used to test continuous and patterned Al thin films at ultra high frequencies. For stress amplitudes as low as 14 MPa lifetime measurements showed no fatigue limit for 400 nm Al thin films. The resulting damage sites appeared in regions of cyclic stress concentration as identified by Finite Element Analysis. In situ measurements revealed that the characteristic extrusion/void formation mechanism operates on a short time scale. The post-test analysis of microstructural changes reveals extrusion and void formation concentrated at grain boundaries. This finding and the observed grain growth indicates a high material flux at the grain boundaries induced by the cyclic load. Quantitative analysis also shows a correlation between extrusion density and electrical devices performance. This direct correlation shows a functional agreement with a common theory on the influence of crack density on intrinsic stresses in thin metal films. Advanced Finite Element (FEM) calculations simulate very well the sensitivity of the resonance frequency to damage structure in interconnects such as cracks, voids and extrusions. The experimentally observed linear correlation between damage density and frequency shift is reproduced by the FEM model. The estimation of the short circuit probability from the extrusion length distribution revealed an exponential dependency on the electrode distance. The observed damage formation is explained by the combined action of dislocation motion and stress-induced diffusion processes.

#### FATIGUE OF AL THIN FILMS AT ULTRA HIGH FREQUENCIES

Institute für Metallkunde, Universität Stuttgart und Max-Planck-Institut für MetallForschung Stuttgart, 2004 138 Seiten, 48 Abbildungen, 14 Tabellen

KURZZUSAMMENFASSUNG: Ermüdung in dünnen Metallschichten bei ultra-hohen Frequenzen (GHz) führt zu einer charakteristischen Poren- und Extrusionsbildung. Durch die mikrostrukturelle Schädigung kommt es zu einer messbaren Beeinträchtigung der Eigenschaften von Oberflächenwellen-(OFW)-Bauteilen, die sich in Form von Verschiebungen in der Resonanzfrequenz als auch in Form von Ausfällen durch Kurzschlüsse äußern. Um Ermüdung von strukturierten und unstrukturierten Al-Schichten (420 nm) bei ultra hohen Frequenzen zu untersuchen wurden OFW-Teststrukturen verwendet. Lebensdauermessungen mit diesen Schichten haben ergeben, dass selbst bei Spannungsamplituden von nur 14 MPa kein Ermüdungslimit auftritt. Der Vergleich mit Finiten Elemente Simulationen (FEM) zeigte, dass die resultierende Schädigung bevorzugt an den Stellen hoher zyklischer Spannungen zu finden ist. In situ Messungen haben gezeigt, dass die Bildung der Poren und Extrusionen innerhalb kurzer Zeit passiert. Die Mikrostrukturanalyse nach der Belastung zeigt, dass sich die Schädigung hauptsächlich an den Korngrenzen abspielt. Dieser Befund und das beobachtete Kornwachstum deuten auf einen starken Materialfluss an der Korngrenze hin. Quantitative Analysen der Schädigung haben gezeigt, dass die Defektdichte und die Verschiebung der Resonanzfrequenz direkt miteinander korrelieren. Dieser funktionelle Zusammenhang konnte mit einer Theorie, die sich mit dem Einfluss der Rissdichte auf intrinsische Spannungen in metallischen Schichten beschäftigt, erklärt werden. Um einen besseres Verständnis für den Spannungszustand in der Metallisierung und den Einfluss der unterschiedlichen Schädigungsstrukturen auf die Resonanzfrequenz der Bauteile zu bekommen, wurden FEM-Simulationen durchgeführt, die den Schädigungseinfluss sehr gut wiedergeben. Die beobachtete Schädigungsbildung kann anhand eines Modells, das auf der Kombination von Versetzungsbewegung und spannungsinduzierten Diffusionsprozessen basiert, erklärt werden.

## 1. Introduction

Researching fatigue mechanisms in metals has a long tradition in material science. The key function of this research area is to prevent reliability issues in applications due to cyclic mechanic load [1, 2]. From all these studies it is well known that even if the cyclic stress amplitude is much lower than the flow stress of a metal, locally plastic deformation can be induced which leads to crack nucleation and growth. Thus in modern applications the prevention of fatigue is a well established target. The field of applications on which it is applied ranges from air plane wings to chip solderings or even Surface Acoustic Wave (SAW) devices and dimensions reach from some tens of meters to some micrometers, while the load frequency ranges from less than 1 Hz to some GHz. In this work ultra high cycle fatigue in SAW devices will be addressed.

SAW devices have been commercially used since the middle of the 80's as frequency filter devices for video and TV applications. Since the mid 90's they are commonly used in wireless applications such as mobile phones, bluetooth or wireless network devices and taking into account, that 2003 roughly 520 million mobile phones were sold worldwide [3], it is clear that their reliability has technical relevance nowadays. In these SAW frequency filter devices electromagnetic signals are transduced into acoustic waves on the surface of the piezoelectric substrate. At high electrical powers the acoustic wave can lead to a degradation of the metallization, which is used as electrode material, accompanied by a decrease in device performance [4]. As the damage formation is attributed to the cyclic mechanical stress induced by the acoustic wave and has a similar damage structure as observed in electromigration experiments, this effect is commonly called 'acoustomigration'.

Although intensive reliability evaluations of these devices are industrial standard, hardly anything is known about the fatigue mechanisms at ultra high frequencies. Since future communication devices demand more bandwidth and portability, a further increase in frequency and a reduction in device dimensions is required. This leads to a steady increase of the acoustic energy density in the metallizations and thus understanding the underlying mechanisms and correlation between microstructural changes and device performance gains in importance. Aside from the technological challenges, SAW test devices offer an interesting playing ground for material science [4], as the stress conditions are rather enormous for the used metallization, especially compared to bulk fatigue experiments.

- The dimensions of the metallizations are limited by film thickness and feature size (e.g. electrode width) reaching from some micrometer down to some tens of nanometers. This has a significant impact on damage formation, as e.g. dislocation movement is inhibited and diffusion paths are short compared to bulk material.
- The mechanical load frequency in these devices reaches from several hundred MHz to some GHz, which is up to 10<sup>5</sup> times higher than in common fatigue tests. Therefore the time period of a load cycle is in the range of nanoseconds, in which the active defect mechanism has to interact with the external load.
- The cyclic stress state is rather inhomogeneous as it is induced by an acoustic wave on the surface of the substrate with a wave length which is equal to the pattern size. Thus the induced stress state has a significant gradient.

In this research work fatigue is studied at ultra high frequencies (900 MHz) by the use of SAW test devices with pure Al metallizations (film thickness 420 nm) on single crystalline piezoelectric  $42^{\circ}$ -y-cut LiTaO<sub>3</sub> substrates. The observed microstructural damage due to cyclic load will be interpreted by a model and correlated to the device performance and their influence on the reliability of SAW devices. In chapter 2 a literature overview and the motivation for this work will be given. In chapter 3 and 4 experimental observations will be presented and discussed. The focus of chapter 3 lies on *in situ* experiments which provide a better insight in the damage formation, while in chapter 4 the quantitative analysis of *ex situ* experiments will address the correlation between microstructural changes and device performance as well as the lifetime of pure Al metallizations. The correlation between damage structure and device performance will be discussed in depth in chapter 5 by the use of Finite Element simulations, and in chapter 6 a qualitative model will be presented which explains the observed damage formation due to the acoustic waves. Chapter 7 comprises the summary and conclusions.

## 7 Summary

Surface Acoustic Wave (SAW) test devices were used to study fatigue in pure Al thin films at ultra high frequencies in the GHz regime. In SAW devices a standing acoustic wave on the surface of the piezoelectric substrate induces a cyclic mechanical stress in the metallization, which leads to a characteristic damage structure accompanied by significant device degradation. By the use of these devices for fatigue experiments cycle numbers of up to  $10^{15}$  cycles can be reached in a reasonable time.

For the experiments at ultra high frequencies, two different designs of SAW test devices were used: a 2-port design was used to study the fatigue behavior of continuous Al thin films and a Ladder-type design was used to study fatigue in small scale Al electrodes with a width of roughly 1 µm. In both cases, the resonance frequency of the test devices was approximately 900 MHz. The device performance degradation was monitored during the test by the measurement of the resonance frequency shift of the test devices. The 420 nm thick films were vapor deposited onto a piezoelectric single-crystalline 42° rotated Y-cut LiTaO<sub>3</sub> substrate and patterned by a lift-off process. The microstructure was stabilized by an annealing step in air at 540 K. The resulting microstructure had a preferred (111) out-of-plane orientation and the mean grain size was slightly smaller than the film thickness.

The cyclic mechanical stress induced by the surface waves leads to void formation at the grain boundaries accompanied by material extrusions out of the surface of the Al metallization on a short time scale of some hundred seconds. Extrusions were observed to appear as two different types: *high aspect ratio extrusions* with a height equal to their width and significant higher lengths grow out of the grain boundaries while *grain like extrusions* result from grains growing out of the surface of the metallization. The void and extrusion formation preferably takes place at sites of high cyclic stresses, which are strongly localized due to the short wavelength (roughly 4 $\mu$ m) of the surface wave.

By the use of Focused Ion Beam (FIB), Scanning Electron (SEM) and Atomic Force microscopy (AFM), the extrusion density at the surface of the continuous and patterned Al thin film could be analyzed quantitatively. The microstructural analyses revealed significant grain growth during fatigue testing. This grain growth showed a strong correlation to the

frequency shift of the device. Aside from the grain size, the observed extrusion density at the surface of the metallization increases linearly with the shift of the measured resonance frequency of the SAW test devices. This correlation was found to result from the void formation which reduces the effective stiffness of the metallization. For the Ladder-type devices with the patterned Al thin film an analytical model of Xia and Hutchinson [65] could be applied which describes stress relaxation by parallel cracks in thin films. For small crack densities the model predicts a linear connection between damage density and stiffness of a metallization.

Although the linear connection between damage density and the resonance frequency of the device was explained, the comparison with experimental data shows significant differences due to the complex geometry and stress state in SAW test devices. Therefore a detailed Finite Element (FEM) study was performed to gain a deeper understanding how the observed voids and extrusions influence the eigenfrequency of the electrode/substrate system which is equivalent to the resonance frequency of the SAW test device. This study showed that aside from the stiffness decrease the shift of the mass from the voids in the inside of the electrodes to the extrusions at the side of the electrodes has an additional influence on the resonance frequency of the device.

At stress amplitudes as low as 14 MPa the Al thin films reached up to  $10^{14}$  cycles to failure and did not show a fatigue limit, which was expected since fcc-metals do not show a fatigue limit.

Aside from the shift of the resonance frequency, the degradation of the metallization can also lead to short circuits, since extrusions can bridge the gap between neighboring electrodes in the SAW test devices. Therefore, the distribution of the extrusion lengths was analyzed, which revealed that the probability of a short circuit depends exponentially on the width of the gap between the electrodes, as well as on the extrusion density which is equivalent to the frequency shift.

Based on the experimental observations and FEM simulations, a qualitative model was developed which explains the observed damage structure of voids and extrusions at the grain boundary. It is assumed that the dislocations vibrate at the resonance frequency of the SAW device. Due to the gradient of the stress amplitude, dislocations on glide planes at an inclined angle relative to the substrate have different deflection amplitudes in back and forth direction, which leads to a stepwise shift. Thus, neighboring grains "drift" into or out of each other. This induces a normal compressive or tensile stresses at the grain boundary leading to the formation of voids or extrusions.

# 10 Deutsche Zusammenfassung:Ermüdung in dünnen Al-Schichten bei ultra hohen Frequenzen

## 10.1 Motivation und Literaturüberblick

Die Untersuchung von Ermüdung in metallischen Werkstoffen hat eine lange Tradition in der Materialwissenschaft. Das Ziel dieser Forschungsrichtung ist es, die Zuverlässigkeit von Bauteilen unter zyklischer mechanischer Belastung zu verbessern. Es ist allgemein bekannt [1, 2], dass bei zyklischer Belastung schon eine wesentlich niedrigere Spannungsamplitude als die Fließspannung zum Versagen von Metallen führt. Durch die dynamische Belastung kann es zu lokalen plastischen Verformungen kommen, die beispielsweise zur Nukleierung von Rissen führen können. Die Größenskalen in denen Ermüdungserscheinungen auftreten reichen von mehreren Metern (Flugzeugflügel oder -rümpfe) bis hinab in den Bereich von unter einem Mikrometer (MEMS). Das Frequenzspektrum in dem zyklische Verformung auftritt umfasst Größenordnungen von einigen Hz bis GHz. In der vorliegenden Arbeit wurde die Ermüdung in dünnen Al-Schichten bei ultra hohen Frequenzen in Oberflächenwellen-Bauteilen (OFW; engl. Surface Acoustic Wave - SAW) untersucht.

OFW-Bauteile werden seit Mitte 80er Jahre als Frequenzfilter in Video- und TV-Produkten eingesetzt. Seit der Mitte der 90er Jahre werden sie typischerweise auch in drahtlosen Anwendungen wie in Mobiltelefonen, Bluetooth- oder drahtlosen Netzwerkadaptern verwendet. Berücksichtig man, dass im Jahr 2003 weltweit ca. 520 Mio. Mobiltelefone verkauft wurden [3], ist es offensichtlich, dass die Zuverlässigkeit dieser Bauteile heutzutage eine hohe Relevanz hat. In diesen OFW-Frequenzfiltern werden elektromagnetische Signale in eine akustische Welle an der Oberfläche des piezoelektrischen Substrates umgewandelt [5]. Diese akustische Welle kann zu einer Schädigung in der Metallisierung führen [4], die als Elektrodenmaterial an der Oberfläche des Substrates genutzt wird. Die Schädigung in der Metallisierung wird von einer Frequenzverschiebung des Filterbauteils begleitet.

Obwohl intensive Zuverlässigkeitsprüfungen dieser Applikationen industrieller Standard sind, ist kaum etwas über die Ermüdungsmechanismen bei ultra hohen Frequenzen bekannt.

Da zukünftige Kommunikationstechnologien mehr Bandbreite und Mobilität erfordern, wird eine weitere Erhöhung der Übertragungsfrequenz und eine Abnahme der Frequenzfilterdimensionen benötigt. Dies führt zu einer stetigen Zunahme der akustischen Energiedichte in der Metallisierung und zu einer zunehmenden Bedeutung des Wissens um die zugrunde liegenden Schädigungsmechanismen.

Die Schädigung durch Oberflächenwellen wurde zuerst von Latham et al. [4] beobachtet (Abb. 2.3 a), die nach der Belastung an der Oberfläche der Metallisierung Dendriten-ähnliche Auswüchse fanden. Neben diesen Extrusionen fanden Shibagaki et al. [10] korrespondierende Poren (Abb. 2.3 b). Die beobachtete Schädigung zeigt dabei eine starke Ähnlichkeit zu Schädigungsstrukturen, die bei Elektromigrationsexperimenten [11, 12] (Abb. 2.4) oder thermomechanischer Ermüdung [13] auftreten. Dieser Befund steht im Kontrast zu Schädigungsstrukturen an dünnen Cu- und Ag-Filmen, die bei niedrigen Frequenzen ermüdet wurden [31, 32]. Die hier gefundenen Schädigungsstrukturen zeigen plattenartige Extrusionen an der Oberfläche, die auf einen reinen Schermechanismus hindeuten (Abb. 2.6). Die mikrostrukturelle Schädigung in der Metallisierung der OFW-Bauteile führt zu messbaren Veränderungen der Filtereigenschaften. Es kommt zu irreversiblen Verschiebungen der Resonanzfrequenz der OFW-Teststrukturen [4], Kurzschlüssen durch Extrusionen [17] (Abb. 2.5) sowie zu einer Zunahme der Einfügedämpfung (Abfall der Signalamplitude zwischen Eingang und Ausgang am Bauteil) durch die abnehmende Leitfähigkeit der Metallisierung [10]. Um diesen Problemen entgegenzuwirken, werden den Al-Metallisierungen verschiedene Legierungselemente zugesetzt [18 - 20], einkristalline Schichten hergestellt [21, 22] oder Multilagenschichten angewandt [23 - 26].

Querschnitte der Metallisierung in OFW-Teststrukturen zeigen, dass die Poren meist nicht durch die ganze Metallisierung reichen und dass Tripelpunkte mögliche Nukleationsstellen für diese Extrusionen sein können [15]. Menzel et al. führen die zugrunde liegenden Prozesse die zu dieser Schädigung führen auf Korngrenzendiffusion zurück [16], eine Erklärung für diesen Schädigungsmechanismus bei ultra hohen Frequenzen kann die Literatur allerdings bisher nicht bieten. Außerdem wurde in der Literatur bisher kein Verfahren veröffentlicht, mit der die beschriebenen mikrostrukturellen Schädigungen quantitativ gemessen werden kann um sie mit den Filtereigenschaften zu korrelieren.

In der vorliegenden Arbeit wurden OFW-Teststrukturen dazu benutzt, die Ermüdung von dünnen Al-Schichten (420 nm) auf einkristallinen, piezoelektrischen LiTaO<sub>3</sub> Substraten zu untersuchen. Qualitative Untersuchungen der Schädigung sollen eine Klassifizierung der auftretenden Defekte ermöglichen und erste Hinweise auf die zugrunde liegenden Mechanismen liefern (Kapitel 3 und 4). Anhand spezieller *in situ*-Untersuchungen in einem Rasterelektronenmikroskop (REM) wird die Schädigungsbildung untersucht (Kapitel 3). Quantitative Untersuchungen der Schädigung nach der Belastung mittels Rasterionen- (FIB), Rasterelektronen- und Rasterkraftmikroskopie konzentrieren sich auf die Korrelation zwischen der Defektdichte und der Frequenzverschiebung und Ausfallwahrscheinlichkeit der Teststrukturen (Kapitel 4). Finite Elemente (FEM) Simulationen sollen ein tieferes Verständnis für den Spannungszustand und den Einfluss der einzelnen Defekte ermöglichen (Kapitel 5). Schlussendlich soll ein qualitatives Modell präsentiert werden, welches die beobachtete Schädigungsbildung durch die akustischen Wellen erklärt (Kapitel 6).

## **10.2** Experimentelles

Das Prinzip von OFW-Bauteilen basiert auf der Wandlung eines hochfrequenten elektromagnetischen Signals in eine akustische Welle [5]. Dies wird erreicht indem man zwei ineinander verschränkte Elektrodenkammstrukturen (interdigital transducer - IDT; Abb. 2.1 a) auf einem piezoelektrischen, einkristallinen Substratmaterial aufbringt. Durch das Anlegen einer elektrischen Wechselspannung an den beiden Kammstrukturen induziert das elektrische Feld zwischen den Elektroden in dem darunter liegenden Piezokristall eine akustische Welle (Abb. 2.1 b). Durch den Einsatz von Reflektoren an beiden Enden des IDTs kann man einen Resonanzkörper aufbauen, in dem sich bei der entsprechenden Frequenz eine stehende Oberflächenwelle ausbilden kann. Durch diese stehende Welle an der Oberfläche des Substrats werden Spannungen in die darüber liegende Metallisierung eingetragen, die einerseits aus Massenträgheitskräften und aus der zyklischen Bewegung der Elektroden in y-Richtung resultieren und andererseits durch die wellenförmige Verzerrung des Substrats an der Grenzfläche in die Metallisierung eingeprägt werden [6, 7].

Für die Experimente wurden zwei unterschiedliche Bauformen von OFW-Testbauteilen genutzt (Abb. 2.1): 2-Tor Teststrukturen (Abb. 4.2 a) wurden für die Ermüdungsuntersuchung von kontinuierlichen dünnen Al-Schichten verwendet und L-Typ Teststrukturen (Abb. 4.2 b) für die Untersuchung an Leiterbahnstrukturen. Die Teststrukturen beider Bauformen hatten eine Resonanzfrequenz von ca. 900 MHz. Die Ermüdung der Testbauteile wurde anhand der Verschiebung dieser Resonanzfrequenz gemessen. Die Metallisierung bestand aus einer 420 nm dicken Al-Schicht und wurde durch einen Aufdampfprozess auf dem piezo-elektrischen, einkristallinen LiTaO<sub>3</sub>-Substrat abgeschieden. Die Strukturierung wurde mittels

eines lithografischen Prozesses durchgeführt. Die Mikrostruktur der Al-Schicht wurde durch eine Auslagerung an Luft bei einer Temperatur von 540 K stabilisiert. Die resultierende Mikrostruktur hatte eine bevorzugte (111) out-of-plane-Orientierung und eine mittlere Korngröße welche etwas kleiner war, als die Schichtdicke.

Eine schematische Darstellung der Messapparatur ist in Abb. 3.3 zu sehen (detaillierter Messaufbau siehe [9]). Durch einen Verstärker wird das Signal eines Synthesizers verstärkt und in das Testbauteil eingespeist. Ein bidirektionaler Koppler erlaubt es, die Leistung des Signals über ein Strommessgerät während der Belastung zu messen. Zusätzlich kann über einen Netzwerkanalysator der Frequenzverlauf (transfer-function S<sub>12</sub>) der OFW-Testbauteile analysiert werden. Dieser Frequenzverlauf (Abb. 3.2) wird typischerweise benutzt, um die Filtereigenschaften zu charakterisieren. Um die Frequenzverschiebung aufgrund von Temperaturänderungen oder Schädigung der Metallisierung messen zu können, wird relativ zum Maximum bei -3 oder -6 dB die Verschiebung dieser Kurve bestimmt.

Die mikrostrukturelle Schädigung wurde mittels REM, FIB und AFM untersucht. Im Fall der quantitativen Schädigungsanalyse der strukturierten Al-Schichten wurde mittels REM und FIB die projizierte Größe und die Anzahl der Extrusionen an der Seite der Elektroden gemessen. Im Falle der kontinuierlichen Schichten wurde die Anzahl der Extrusionen mittels AFM bestimmt. Die Korngrößenbestimmung wurde mithilfe eines FIB vorgenommen.

#### 10.3 Ergebnisse und Diskussion

Die zyklische mechanische Spannung durch die Oberflächenwelle führt zu Bildung von Poren an der Korngrenze, begleitet von der Bildung von Extrusionen an der Oberfläche der Metallisierung. *In situ* Versuche haben gezeigt, dass diese Materialschädigung innerhalb von einigen hundert Sekunden stattfindet (Abb. 3.5, 3.6). Unabhängig davon, ob es sich um eine kontinuierliche (Abb. 4.3) oder eine strukturierte (Abb. 4.5) Metallisierung handelte, konnten anhand der qualitativen Schädigungsanalyse zwei verschiedene Typen von Extrusionen unterschieden werden: Zum einen fanden sich Extrusionen mit einem hohen Aspektverhältnis, bei denen Höhe und Breite signifikant kleiner waren als deren Länge. Diese Extrusionen wurden nur an Korngrenzen gefunden. Zum anderen fanden sich kornähnliche Extrusionen, die durch das Wachstum von Körnern aus der Oberfläche entstanden waren.

Die Mikrostrukturanalyse zeigte weiterhin, dass es während der Ermüdung zu einem signifikanten Kornwachstum kommt, das eine starke Korrelation zur Frequenzverschiebung

der Teststrukturen aufweist (Abb. 4.7, 4.8). Ein anfänglicher Anstieg der mittleren Korngröße geht für Frequenzverschiebungen von mehr als 1 MHz in ein Plateau über. Dies lässt sich auf die starke Porenbildung an den Korngrenzen zurückführen, die ein weiteres Wachstum der Körner verhindert. Da kein Einfluss der experimentellen Parameter wie Temperatur, eingebrachte elektrische Leistung oder Belastungsdauer auf diesen Verlauf gefunden wurde, kann man daraus folgern, dass der zugrunde liegende Mechanismus für das Kornwachstum und die Schädigungsbildung derselbe ist.

Die Poren- und Extrusionsbildung findet bevorzugt an Stellen von hohen zyklischen Spannungen statt, die durch die kurze Wellenlänge (ca. 4 µm) der stehenden Oberflächenwelle örtlich stark eingegrenzt sind. FEM-Berechnungen der strukturierten Al-Schichten zeigen, dass die höchsten zyklischen Spannungen an den unteren Kanten der Elektroden auftreten (Abb. 3.10), was mit dem Schädigungsbild (Abb. 4.5) übereinstimmt. Auch der Vergleich der Extrusionsanzahl an den einzelnen Elektroden innerhalb eines Filterbausteins zeigt aufgrund der inhomogenen Verteilung der akustischen Energie [64] die Übereinstimmung mit der Belastungsamplitude (Abb. 4.9). Zu den Reflektoren hin erzeugt die akustische Welle eine abnehmende Spannungsamplitude, während die Belastung im Inneren des IDTs einen konstanten Amplitudenverlauf hat. Während die Extrusionsanzahl mit dieser verteilung übereinstimmt ändert sich die mittlere Extrusionslänge nicht signifikant.

quantitative Untersuchung der Extrusionsdichte an der Oberfläche der Die kontinuierlichen sowie strukturierten Metallisierung hat ergeben, dass diese linear mit der Verschiebung der Resonanzfrequenz korreliert ist (Abb. 3.8, 4.11). Diese Korrelation wurde auf die Porenbildung zurückgeführt, die die Steifigkeit der Metallisierung reduziert und damit zu einer Abnahme der Oberflächenwellen-Geschwindigkeit führt. Dies hat wiederum eine Abnahme der Resonanzfrequenz der Teststruktur zur Folge. Auf diese Korrelation konnte ein Modell von Xia und Hutchinson angewandt werden, welches Spannungsrelaxation durch parallele Risse in dünnen Schichten beschreibt [65]. Für kleine Rissdichten sagt das Modell einen linearen Zusammenhang zwischen dem inversen Defektabstand und der relativen Steifigkeitsänderung der Metallisierung (Formel (4.4)) voraus. Unter der Annahme, dass die Extrusionsdichte und die Porendichte proportional zueinander sind und dass die Porendichte proportional zu dem im Modell angenommenen inversen Defektabstand ist, ergibt sich daraus ein linearer Zusammenhang zwischen der relativen Steifigkeitsänderung und der Extrusionsdichte. Da für kleine relative Frequenzverschiebungen eine direkte Korrelation zur relativen Steifigkeitsänderung besteht (Abb. 5.7), kann damit der lineare Zusammenhang zwischen der Extrusionsdichte und der Frequenzverschiebung erklärt werden. Obwohl

dadurch der generelle Zusammenhang zwischen Defektdichte und Resonanzfrequenz einer OFW-Teststruktur gezeigt werden konnte, weist der Vergleich mit experimentellen Ergebnissen signifikante Unterschiede in der Größe der Effekte auf. Dies wird auf die komplexe Geometrie und den Spannungszustand zurückgeführt.

Um ein tieferes Verständnis für den Einfluss der Poren und Extrusionen auf die Eigenfrequenz eines Elektroden-Substrat-Systems zu entwickeln, wurden detaillierte Finite-Elemente-Simulationen eingesetzt. Hierzu wurde eine Eigenfrequenzanalyse an einem Elektroden-Substrat-Modell durchgeführt, bei dem durch die Variation der Elektrodengeometrie der Einfluss der einzelnen Defekte untersucht wurde. Beim Einbringen von Rissen konnte gezeigt werden, dass die Spannung in einem Bereich von 1,5-fachen der Schichtdicke signifikant erniedrigt wird, diese allerdings nicht Null wird (Abb. 5.9). Die Änderung der Risslänge und Position in der Leiterbahn hat gezeigt, dass bei derselben Gesamtrisslänge einzelne Risse, die von der Seite der Leiterbahn in die Mitte laufen, dieselbe Frequenzverschiebung zur Folge haben, wie zwei Risse, die von entgegen gesetzten Seiten in die Leiterbahnmitte laufen (Abb. 5.10). Dagegen ist der Einfluss von Rissen, die von der Grenzfläche zum Substrat in die Leiterbahn laufen höher als der Einfluss von Rissen die von der Oberfläche aus in die Leiternbahn hineinwachsen (Abb.5.11). In der Realität finden sich allerdings keine Risse sondern Poren an den Korngrenzen der Leiterbahnen. Die Simulation von Poren als auch von Extrusionen als einzelne Defekte erzeugen in dem FEM Modell auch immer eine Massenzu- oder -abnahme, was im realen System nie der Fall ist, da sich hier das Volumen der Poren und Extrusionen ausgleicht. Daher kann man diese beiden Fälle mit dem hypothetischen Fall der Dichteänderung der Metallisierung vergleichen. Hier zeigt sich, dass der Einfluss der Extrusionen meist weniger signifikant ist als der Einfluss der Poren. Dies resultiert aus der Tatsache, dass mit dem Einbringen einer Pore neben der Massenabnahme der Leiterbahn auch gleichzeitig die Steifigkeit der Schicht wie im Fall eines Risses abnimmt (Abb. 5.12). Allerdings gilt ebenfalls wie in den noch folgenden Fällen, dass die Geometrie und Position der Extrusionen einen entscheidenden Einfluss auf die Eigenfrequenz des untersuchten FEM-Modells haben. Die Variation der Extrusionslänge zeigt, dass der Einfluss der Extrusionen stark variiert, da die Extrusionen bei bestimmten Längen in Eigenresonanz geraten und damit einen sehr starken Einfluss auf das Gesamtmodell haben (Abb. 5.13). Der Einfluss der Extrusionen auf die Eigenfrequenz des FEM Modells kann dann sowohl eine positive als auch negative Verschiebung erzeugen. Die Variation der Fixierungshöhe der Extrusion an der Seitenwand der Leiterbahn hat ergeben, dass mit zunehmender Fixierungshöhe der Einfluss der Extrusion auf die Eigenfrequenz des Modells stark zunimmt

(Abb. 5.14). Dies resultiert aus dem Grund, dass die Extrusion einen umso weiteren Weg zurücklegen muss je weiter oben sie an der Leiterbahn befestigt ist, da die Auslenkung der Leiterbahn mit der Höhe zunimmt. Um nun einen Vergleich der FE Simulation mit experimentellen Werten zu ermöglichen, wurde die Frequenzverschiebung der verschiedenen Defekte (Riss, Pore, Pore + Extrusion mit hohem Aspektverhältnis, Pore + kornähnliche Extrusion) gegen deren inversen Defektabstand, die äquivalent zur Defektdichte ist, abgetragen (Abb. 5.15). In allen Fällen zeigt sich für geringe Defektdichten eine lineare Korrelation. Vergleicht man die Wirkung der einzelnen Fälle miteinander, so zeigt sich, dass die stärkste Verschiebung der relativen Eigenfrequenz im Falle der Kombination einer Pore mit kornähnlichen Extrusionen auftritt. Die Verlagerung der Masse von der Mitte der Leiterbahn nach außen in die Extrusionen führt verglichen mit einem einfachen Riss zu einer zusätzlichen Frequenzverschiebung was sich mit den Simulationen der Extrusionslängenänderung deckt. Bei sehr kleinen Aspektverhältnissen der Extrusionslänge zur Extrusionsbreite und -höhe erzeugen Extrusionen eine negative Frequenzverschiebung. Die geringste Frequenzverschiebung findet sich im Fall der Kombination einer Pore mit Extrusionen mit hohem Aspektverhältnis. Auch hier gilt, dass die Geometrie der Extrusion eine kritische Einflussgröße hat. Die gewählten Extrusionen haben dabei nur eine geringe negative Frequenzverschiebung zur Folge, die den Einfluss der Pore nur leicht abschwächt. Diese erzeugt zwar dieselbe Steifigkeitsabnahme wie sie im Fall eines Risses auftritt, was allerdings durch die Massenabnahme der Elektrode überdeckt wird. Dadurch erzeugt eine Pore in dem untersuchten FEM-Modell eine positive Frequenzverschiebung. In allen Simulationen kann man auch eine Abweichung von der linearen Abhängigkeit der Frequenzverschiebung für höhere Defektdichten feststellen. Dies resultiert aus der Überlagerung des Einflusses benachbarter Schädigungen. Ein Vergleich der FEM-Simulationen mit den experimentellen Daten (Kapitel 4) zeigt, dass die Frequenzverschiebung in einem vergleichbaren Bereich liegen. Auch wenn in den realen Bauteilen nicht nur Extrusionen mit einer Länge sondern mit einer Verteilung von unterschiedlichen Längen und Aspektverhältnissen auftreten, zeigt dieser Vergleich sehr deutlich, dass die simulierten Systeme eine gute Übereinstimmung liefern. Außerdem hat sich gezeigt, dass neben der Steifigkeitsabnahme durch die Porenbildung auch die Verschiebung des Schwerpunkts durch den Massentransport in den geschädigten Elektroden einen signifikanten Einfluss auf die Eigenfrequenz der Elektroden hat.

Lebensdaueruntersuchungen bei ultra hohen Frequenzen haben ergeben, dass die dünnen Al-Schichten bei Spannungsamplituden von nur 14 MPa das Ausfallkriterium erst nach 10<sup>14</sup>

Zyklen erreichen. Dabei wurde bei den Al-Schichten kein Ermüdungslimit gefunden, wie man es von einem kfz-Material erwartet (Tab. 4.1). Ein Vergleich mit dünnen Kupferschichten bei sehr viel höheren Spannungsamplituden hat gezeigt, dass die gefundenen Lebensdauern bei einer Extrapolation über ca. 10<sup>6</sup> Zyklen im erwarteten Bereich liegen.

Neben der Verschiebung der Resonanzfrequenz führt die Schädigungsbildung auch zu Kurzschlüssen in OFW-Teststrukturen, da sehr lange Extrusionen die Distanz zwischen benachbarten Elektronen überbrücken können. Eine Analyse der Extrusionslängenverteilung hat gezeigt, dass es sich dabei um eine Log-Normalverteilung handelt (Abb. 4.12). Extrapoliert man diese Verteilung zu höheren Extrusionslängen, kann man die Wahrscheinlichkeit bestimmen, bei der eine Extrusion den Abstand zwischen den Elektroden überbrücken kann (Tab. 4.2). Unter der Annahme, dass die Länge einer Extrusion unabhängig vom Rest der Extrusionen ist, kann man damit die Kurzschlusswahrscheinlichkeit in einem Bauteil berechnen (Formel 4.9).

Basierend auf den experimentellen Ergebnissen und den Berechnung des Spannungszustandes mittels FEM-Simulationen wurde ein Modell entwickelt, das die gefundene Schädigungsstruktur in Form von Poren und Extrusionen an den Korngrenzen erklärt. Es wird angenommen, dass die zyklische Spannung durch die Oberflächenwelle dazu führt, dass die Versetzungen mit der Resonanzfrequenz der OFW-Struktur schwingen. Aufgrund des Gradienten der Spannungsamplitude (Abb. 6.1 b) ist die Schwingungsamplitude der Versetzungen auf Gleitebenen, die zur Substratoberfläche verkippt sind (Abb. 6.1 a), unterschiedlich. Dies führt dazu, dass sich die Versetzungen schrittweise in eine Richtung bewegen (Abb. 6.1 c). Dadurch können sich einzelne Körner aufeinander zu- oder wegbewegen, was Druck- und Zugspannungen an den Korngrenzen induziert (Abb. 6.2). Eine genauere Betrachtung der mikrostrukturellen Änderungen zeigt, dass es zur Verschiebung und Rotation der Körner relativ zueinander kommt (Abb. 3.11). Es wird angenommen, dass diese Verschiebungen zu Druck- und Zugspannungen an den Korngrenzen führen. Diese Spannungen können durch Kletterprozesse von Versetzungen an den Korngrenzen relaxieren, was die Bildung von Extrusionen und Poren zur Folge hat. Eine Abschätzung des Materialflusses durch Kletterprozesse zeigt eine gute Übereinstimmung der möglichen Extrusionswachstumsgeschwindigkeit mit der experimentell beobachteten.