

混合键合界面力学行为的多尺度仿真:研究进展与挑战*

蔡新添^{1,2,3}, 舒朝玺⁴, 习杨^{4,5}, 东芳⁴, 张适⁵, 严晗⁶, 刘胜⁴, 彭庆^{5,7}

- (1. 武汉大学湖北省电子制造与封装集成重点实验室, 武汉 430072; 2. 湖北工业大学机械工程学院, 武汉 430068; 3. 湖北工业大学现代制造质量工程湖北省重点实验室, 武汉 430068; 4. 武汉大学集成电路学院, 武汉 430072; 5. 武创芯研科技(武汉)有限公司, 武汉 430075; 6. 武汉理工大学机电工程学院, 武汉 430070; 7. 武汉大学动力与机械学院, 武汉 430072)

摘要: 混合键合是实现高密度三维异质集成的关键互连途径, 其界面力学可靠性对先进封装器件的性能与良率具有决定性影响。然而, 材料热膨胀系数失配、超薄晶圆翘曲以及纳米尺度界面缺陷等问题, 易引发显著的应力集中、界面分层乃至结构失效, 已成为制约混合键合技术规模化应用的核心因素。系统综述了混合键合界面力学行为的多尺度仿真研究进展, 梳理了从宏观连续介质尺度到微观原子尺度的建模策略, 阐述了各尺度研究中侧重的关键问题与面临的挑战。在此基础上, 进一步探讨了量子-连续介质耦合建模、人工智能驱动的逆向工艺设计以及数字孪生闭环优化等前沿方向。通过上述多尺度仿真与智能方法的深度融合, 将有望实现混合键合研发范式从“经验试错”到“模型驱动”的根本性转变, 从而为后摩尔时代的高密度集成提供关键力学支撑。

关键词: 混合键合; 界面力学; 多尺度仿真; 分子动力学; 有限元方法; 先进封装

中图分类号: TN305.94 **文献标志码:** A **文章编号:** 1681-1070 (2026) 03-030008

DOI: 10.16257/j.cnki.1681-1070.2026.0097

中文引用格式: 蔡新添, 舒朝玺, 习杨, 等. 混合键合界面力学行为的多尺度仿真: 研究进展与挑战[J]. 电子与封装, 2026, 26 (3): 030008.

英文引用格式: CAI X T, SHU C X, XI Y, et al. Multiscale simulation of mechanical behavior at hybrid bonding interfaces: research progress and challenges[J]. Electronics & Packaging, 2026, 26(3): 030008.

Multiscale Simulation of Mechanical Behavior at Hybrid Bonding Interfaces: Research Progress and Challenges

CAI Xintian^{1,2,3}, SHU Chaoxi⁴, XI Yang^{4,5}, DONG Fang⁴, ZHANG Shi⁵, YAN Han⁶, LIU Sheng⁴, PENG Qing^{5,7}

- (1. Hubei Key Laboratory of Electronic Manufacturing and Packaging Integration, Wuhan University, Wuhan 430072, China; 2. School of Mechanical Engineering, Hubei University of Technology, Wuhan 430068, China; 3. Hubei Key Laboratory of Modern Manufacture Quality Engineering, Hubei University of Technology, Wuhan 430068, China; 4. School of Integrated Circuits, Wuhan University, Wuhan 430072, China; 5. IC Research Technology (Wuhan) Co., Ltd., Wuhan 430075, China; 6. School of Mechanical and Electronic Engineering, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China; 7. School of Power and Mechanical Engineering, Wuhan University, Wuhan 430072, China)

Abstract: Hybrid bonding has emerged as a critical interconnect method enabling high-density 3D

* 基金项目: 湖北工业大学博士科研启动基金(XJ2024008301); 湖北省教育厅科技研究项目(Q20233005); 国家自然科学基金(T2527901, 12272378)

收稿日期: 2025-12-21

E-mail: 蔡新添 caixintian@whu.edu.cn; 彭庆(通信作者) pengqing@whu.edu.cn

heterogeneous integration. The mechanical reliability of its interfaces has a decisive impact on the performance and yield of advanced packaging devices. However, issues such as coefficient of thermal expansion (CTE) mismatch, warpage of ultra-thin wafers, and nanoscale interfacial defects often lead to severe stress concentration, interfacial delamination, and even structural failure. These have become the core factors limiting the large-scale application of hybrid bonding technology. The research progress of multiscale simulation approaches on the mechanical behavior of hybrid bonding interfaces is systematically reviewed. Modeling strategies spanning from the macroscopic continuum scale to the microscopic atomic scale are systematically organized, and the key issues and challenges encountered at each scale of investigation are highlighted. Furthermore, the emerging frontiers are discussed, including quantum-continuum coupled modeling, artificial intelligence (AI)-driven inverse process design, and digital twin-enabled closed-loop optimization. The deep integration of multiscale simulation with intelligent methodologies holds the promise of transforming hybrid bonding development from empirical trial-and-error toward a model-driven paradigm, thereby providing essential mechanical foundations for high-density integration in the post-Moore era.

Keywords: hybrid bonding; interfacial mechanics; multiscale simulation; molecular dynamics; finite element method; advanced packaging

0 引言

随着半导体技术向三维集成方向演进,混合键合因其高密度互连能力、低功耗特性和优异的信号传输性能,已成为 2.5D/3D 封装的核心技术^[1-8]。混合键合通过 Cu-Cu 直接键合与介电层界面的协同作用,实现了亚微米级的高密度互连与机械支撑。作为半导体三维集成的核心技术,混合键合正逐步取代传统微凸点键合,成为高带宽存储器 (HBM)、人工智能 (AI) 芯片及 3D SoC 等高端产品的主流互连方案。混合键合技术的产业化需求迫切,HBM、芯粒、AI 等领域的快速发展,亟需其支撑更高带宽、更低延迟的互连架构。然而,良率瓶颈与可靠性问题仍严重制约其规模化落地。以台积电 SoIC、英特尔 Foveros、三星 X-Cube 等为代表的先进封装平台均将混合键合列为关键攻关方向,投入巨额资源开发高精度键合设备与可靠性评估体系。在此背景下,建立涵盖多尺度仿真、失效机理解析及工艺优化的完整力学研究框架,不仅是学术探索的前沿领域,更是突破产业技术壁垒的核心路径。

然而,混合键合的力学问题具有显著的前沿性与复杂性,其核心挑战体现在以下几方面。①多尺度力学耦合,包括从原子级的共价键/金属键的形成,到介观尺度的界面扩散行为,再到宏观尺度的热应力分布,混合键合的力学响应跨越纳米至毫米量级,需建立跨尺度的仿真框架。②界面主导行为,包括键合质量高度依赖表面能、粗糙度、羟基密度等界面参数,属

于典型的“界面力学”问题。例如,Cu-Cu 界面的原子扩散速率受晶界迁移与空位浓度调控,而介电层(如 SiO₂/SiCN)的键合强度则与表面活化工艺密切相关。③热-力疲劳失效机制。三维堆叠中,异质材料(如 Cu/Si/有机基板)的热膨胀系数(CTE)不匹配会导致周期性剪切应力^[9-11],加速界面裂纹萌生与扩展。此外,功率循环中的热疲劳与电流引起的焦耳热叠加,进一步加剧了电迁移与空洞演化^[12]。④工艺-结构-性能联动。化学机械抛光(CMP)、等离子体活化、退火工艺等直接影响界面微观结构(如晶粒取向、缺陷密度),进而决定宏观力学性能^[4],这一过程需通过“工艺-微观结构-宏观力学”关联模型实现闭环优化。因此,亟需建立跨尺度的力学仿真框架以揭示其内在机制。

当前研究普遍采用多尺度耦合策略解析这一复杂体系。在宏观尺度,有限元方法(FEM)结合晶体塑性模型可有效模拟 Cu 的蠕变行为、CTE 失配引起的局部应力集中、晶圆翘曲分析、长期可靠性寿命评估,以及 CMP 导致的凹陷效应对界面接触质量的影响^[13]。在介观尺度,相场方法(PFM)可预测动态的、界面拓扑变化的、由扩散和界面能驱动的结构演变^[14]。在微观尺度,密度泛函理论(DFT)揭示了界面结合的电子结构基础和热力学稳定性本源,而分子动力学(MD)模拟了原子尺度键合过程的动力学与缺陷演化机制。此外,跨尺度仿真致力于如何高效传递不同尺度间的物理信息,例如将 MD 获得的界面能参数嵌入 FEM 的损伤模型,或利用代理模型加速多参数空间探索,正成为连接微观机制与工程应用的关键桥梁。

本文旨在系统总结混合键合界面力学行为的多尺度仿真方法论, 通过梳理各尺度仿真方法的研究进展与现存局限, 进一步指出未来在高精度材料本构建模、跨尺度数据融合以及工艺-力学协同优化等方向的关键突破口, 为推动混合键合技术从实验室走向高可靠、高良率的工程化应用提供坚实的理论支撑。

1 混合键合界面力学多尺度仿真

晶圆键合技术种类繁多, 依据键合介质、工艺温度、是否引入中间层以及是否形成永久结合等标准, 可有多种分类方式。当前主流方法可系统归纳为 3 大类: 直接键合、中介层键合(间接键合)和混合键合。混合键合包含同时实现电学互连材料 Cu-Cu 与介质材料 SiO₂-SiO₂ 的键合, 需先后实现 SiO₂-SiO₂ 等离子体活化键合^[15]和 Cu-Cu 的直接键合^[10,13], 是目前制造小型化、实现高密度电学互连最具潜力的最优解决方案。

在混合键合的力学分析中, 芯片对芯片(C2C)、芯片对晶圆(C2W)和晶圆对晶圆(W2W)3种堆叠方案虽在工艺实施层面存在差异, 但其核心界面行为本质上具有高度一致性。无论是局部芯片间的点对点连接还是晶圆级的大规模键合, 力学仿真的关注焦点始终集中于 Cu-Cu 界面的扩散与变形机制、介电层的键合强度演化以及金属/介电交界区域的应力集中效应^[16-17]。工艺层面的差异(如对准精度、缺陷分布)主要影响良率与量产可行性。因此, 本文以混合键合界面本身为研究对象, 系统梳理其多尺度力学行为的仿真技术研究进展。多时间尺度和空间尺度的建模仿真技术总览如图 1 所示, 本章系统梳理混合键合在宏观、微观及跨尺度层面的关键力学进展与核心挑战, 并进一步探讨 AI 驱动的跨尺度建模与数字孪生技术如何有效弥合不同尺度仿真之间的鸿沟。

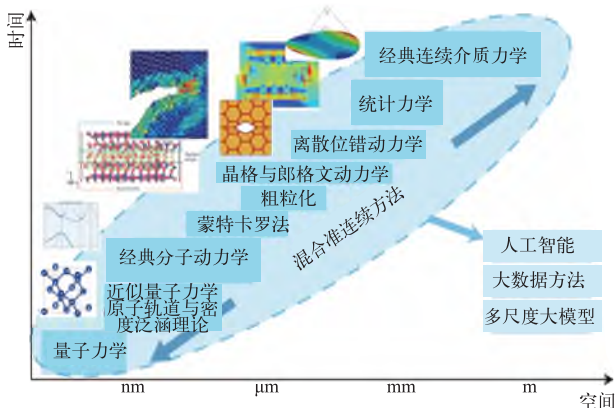


图 1 多时间尺度和空间尺度的建模仿真技术总览

1.1 宏观尺度

当研究尺度处于宏观层级(晶圆级, 毫米至厘米量级), FEM 是分析混合键合结构力学行为和制定工艺策略的核心工具。随着先进封装向更小互连间距($<1 \mu\text{m}$)、更高集成密度及更多堆叠层数(如 16 层以上 3D 集成)方向发展, 热膨胀系数失配问题日益突出, 典型的 Cu ($\text{CTE} \approx 17 \times 10^{-6}/\text{K}$) 与 SiO₂ ($\text{CTE} \approx 0.5 \times 10^{-6}/\text{K}$) 之间存在较大的 CTE 差异^[18]。在键合后的退火工艺及器件服役期间的温度循环过程中, 这种失配会在界面区域诱发高度局域化的残余热应力, 进而驱动复杂的界面变形、微裂纹萌生乃至分层失效, 成为制约器件长期可靠性的主要根源。

在宏观尺度下, 晶圆键合工艺主要面临 2 大类力学挑战。①静态/准静态载荷下的局部失效问题。由于有效键合面积有限且界面几何不连续, 应力高度集中于特定区域(如焊盘边缘或介质-金属交界处), 易诱发微裂纹或界面脱黏。②热-机械可靠性问题。在反复温度变化或热循环作用下, 累积的热应力可导致空洞扩展、界面分层、泄漏电流增大等渐进性损伤, 最终显著缩短键合结构的服役寿命。

以上 2 类问题正是 FEM 发挥优势的核心场景, FEM 的应用场景如图 2 所示。FEM 可以对键合机系统整体以及光学对准过程、晶圆平台、晶圆翘曲、不同形状焊盘和不同对准偏差情况下的应力进行全流程仿真, 减少因对准问题、晶圆翘曲以及晶圆焊盘设计不合理导致对准精度和有效键合面积降低; 可通过协同优化键合点的几何与排布参数(包括尺寸、形状、间距及阵列构型), 实现压力分布的均匀化^[4,9,19-20], 从而最大化有效键合面积, 并最终提升整体剪切强度; 也能优化退火过程中的温度梯度、调控冷却速率, 或调整支撑夹具布局, 指导生产工艺参数设计。

在多步键合场景(如 3D NAND 或 HBM 堆叠)中, 以 Xtacking™ 键合工艺^[22](如图 3 所示)为例, FEM 还可构建分步翘曲演化模型, 逐层预测每一键合步骤引入的形变累积效应, 进而优化多阶段工艺窗口(温度、压力、保持时间), 有效抑制因翘曲叠加导致的层间对准失败或局部脱黏^[19]。值得注意的是, FEM 的应用并不仅限于键合本身, 还可延伸至上游工艺(如 CMP 后的表面形貌建模)与下游封装集成, 形成覆盖“工艺-结构-性能”的全链条仿真能力。

对结构的服役寿命影响巨大的热-机械可靠性失效并非单一事件, 而是遵循“应力累积-局部损伤-整体崩溃”的渐进演化路径。FEM 能清晰揭示高风险区

域的应力集中特征^[4,9,19-20],在键合结构的“三相交界点”(即 Cu 互连、介电层与硅衬底的交汇处), Von Mises 应力在高温下可激增至千兆帕 (GPa) 量级,退火处理后界面的总变形如图 4^[13]所示。如此高的局部应力极易引发脆性介电层开裂,或在界面处触发微空洞的成核与扩展,最终演变为宏观分层。值得强调的是,FEM 能够系统评估多种工艺与设计变量的影响^[9]——包括焊盘间距、温度历史、阵列拓扑、对准偏差以及 CMP

引入的表面不平整度——并通过参数化仿真指导空洞抑制、应力缓释与寿命提升。

此外,这一可靠性问题不仅体现为空间上的静态应力集中,更表现为时间维度上的动态累积损伤。在典型的工业热循环条件 (-55~+125 °C) 下,界面应力会因材料的非弹性响应 (例如 Cu 的蠕变、晶粒再结晶、原子扩散等) 而发生再分布。然而,与此同时,循环载荷也可能诱发热机械疲劳,导致微裂纹缓慢但持续地

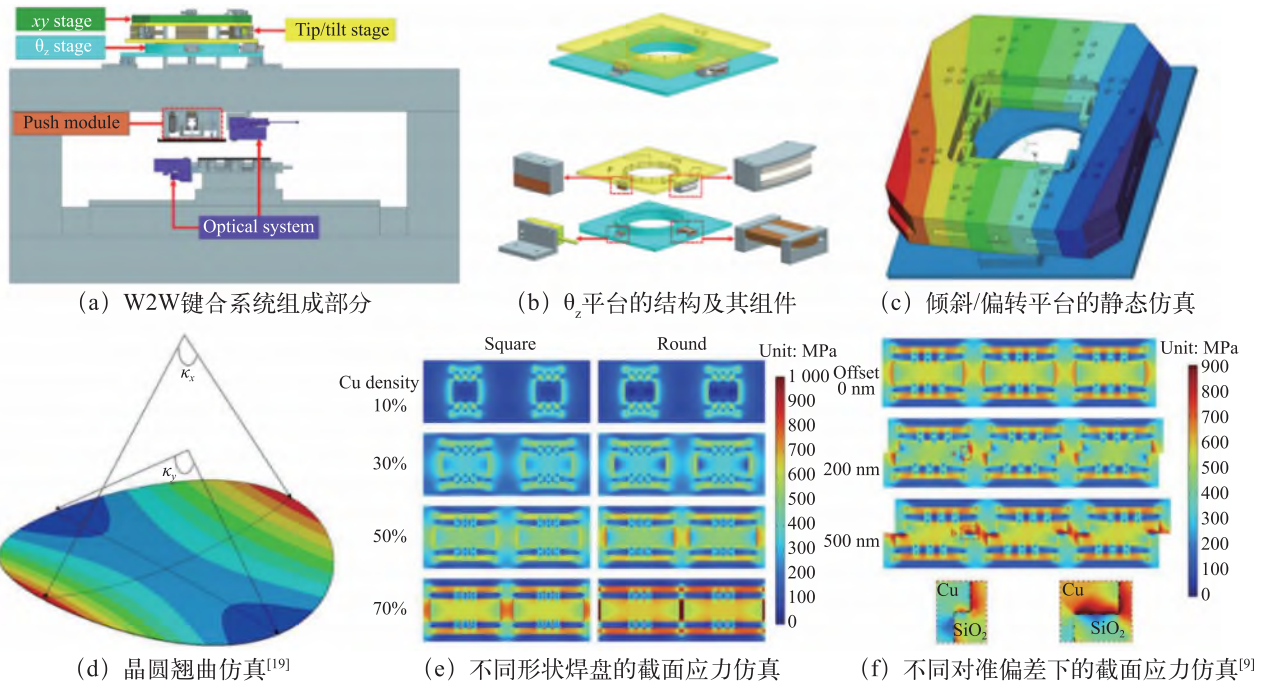


图 2 FEM 的应用场景^[21]

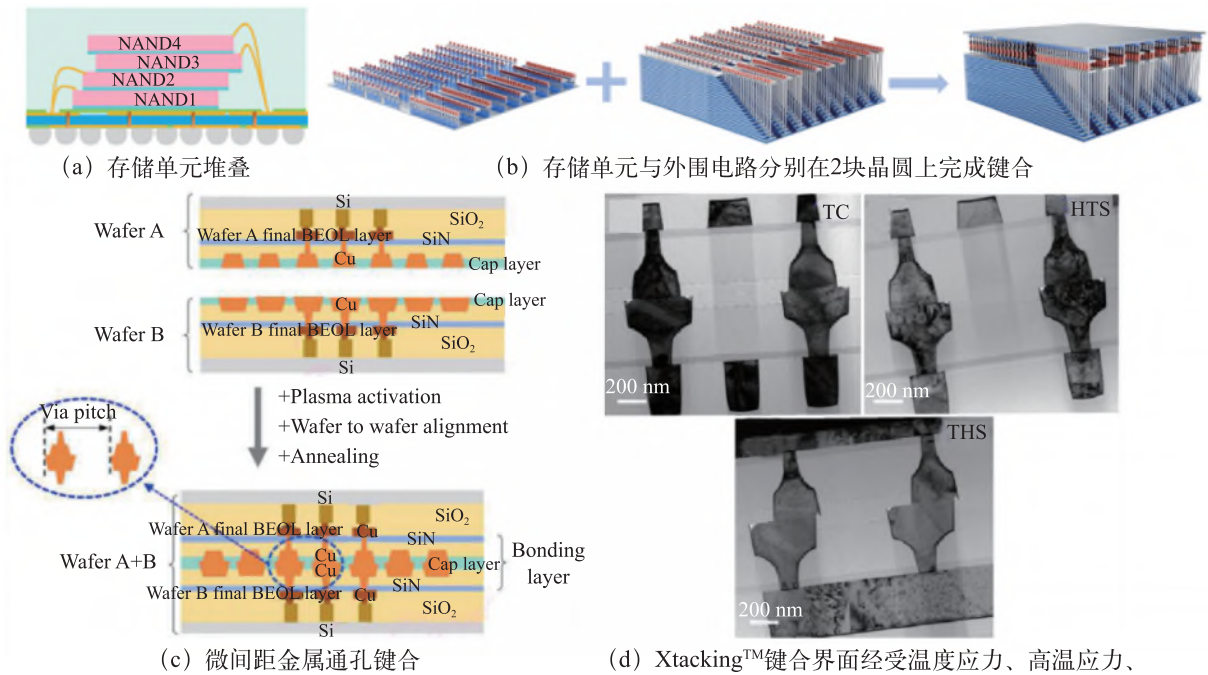
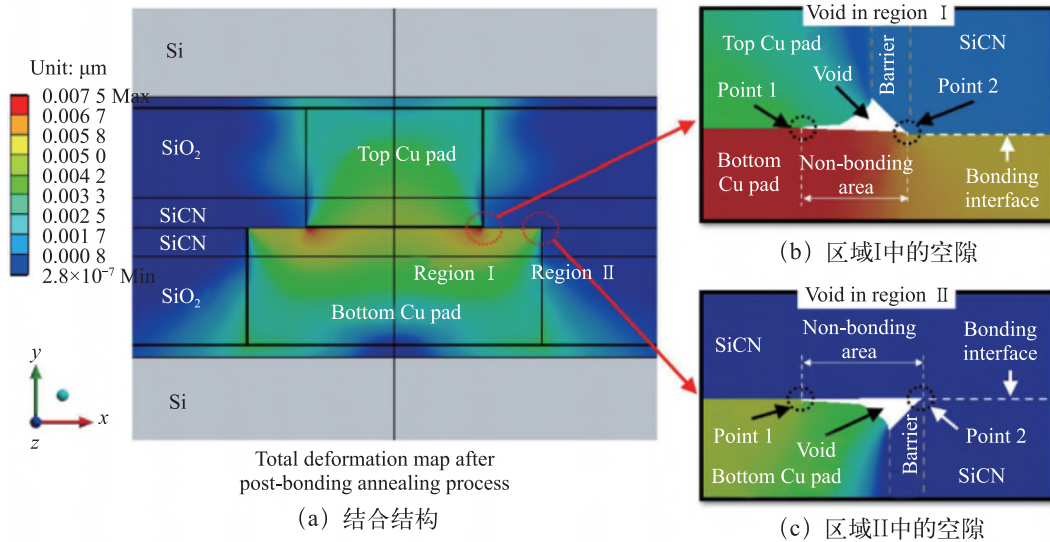


图 3 Xtacking™ 键合工艺^[22]

图 4 退火处理后界面的总变形^[13]

扩展。将 FEM 与损伤力学或疲劳寿命模型耦合^[23],有望实现对混合键合结构服役寿命的定量预测,为高可靠性先进封装提供关键工程依据。

聚焦于混合键合中 Cu-SiO₂ 界面形貌控制, FEM 可通过形貌建模与多物理场耦合分析,量化其对键合性能的影响边界。在混合键合工艺中, Cu 与 SiO₂ 因硬度差异显著,在 CMP 过程中极易产生碟陷效应^[24]。值得注意的是,该问题的处理并非以“完全消除凹陷”为目标,而是追求一种高度可控的微小凹陷形貌——通常要求 SiO₂ 表面略高于 Cu 焊盘。这一设计巧妙利用了 Cu 与 SiO₂ 热膨胀系数的差异:在后续键合退火过程中, Cu 因热膨胀而向上隆起,从而实现紧密的金属-金属电接触。然而,若 Cu 凹陷过深(如 10~20 nm 或更多),则难以在退火中完全闭合,易形成空隙,导致电连接失效。

为实现对碟陷的精准调控,工艺层面已发展出多项关键技术,包括高选择性浆料工程(如引入 BTA 抑制剂)、虚拟金属填充、多步 CMP 工艺集成以及高精度终点检测。在此背景下, FEM 可发挥重要作用:一方面,通过显式构建含凹陷的界面几何模型,并结合热-力多物理场耦合分析,量化不同凹陷深度对键合间隙闭合行为、接触压力及可靠性的影响边界;另一方面, FEM 可与 MD 等底层方法协同,用于指导 CMP 浆料设计与工艺优化——例如,基于 MD 模拟获得界面相互作用信息,构建更准确的材料去除模型,进而预测 CMP 后的形貌演化,并评估其对后续键合性能的潜在影响。

类似地,侵蚀作为另一类由图形密度不均引发的介质层过度抛光问题,其机理与碟陷相近,亦可通过上述多尺度建模策略进行分析,本文不再展开。

1.2 介观尺度

在介观尺度(微米量级),界面空洞的成核与演化是混合键合工艺中的核心挑战。实验观测与多尺度模拟结果一致表明,空洞通常起源于表面微米级颗粒污染或 CMP 残留的局部凹坑^[4],并在退火初期作为空位汇聚的核心位点,4 种情况下 Cu-Cu 键合过程中界面空隙与晶粒结构的模拟演变及截面图如图 5 所示。空洞的演化动力学主要由晶界网络驱动的集体原子输运行为主导,而非单个原子的随机运动。这一尺度下的问题超出 MD 的时空范围,基于连续性假设和固定的网格 FEM 也难以天然地描述界面空洞成核、演变所涉及的材料界面移动、拓扑变化和扩散主导的相变过程。引入序参数场(如从 0 到 1 连续变化),天然适合描述材料相(如固体/空洞)的界面及其演化,无需显式追踪界面的 PFM 更适合对介观尺度进行建模与仿真,以研究界面空隙闭合与晶界演变。

近期一项基于多物理场耦合相场模型的研究系统揭示了 Cu 晶粒微观结构对界面空洞演化动力学的决定性影响^[14]。在典型的混合键合条件(300 °C、10 MPa)下, Cu 互连垫的晶粒形貌显著调控原子扩散路径与空洞闭合速率,单晶结构(无晶界)中空洞完全闭合所需时间超过 3 600 s,而均匀细晶多晶结构仅需约 120 s,闭合效率提升近 30 倍。该加速效应源于晶界作为高通量扩散通道,有效促进了各向同性的物质输运,使空洞在径向与轴向同步收缩。Cu-Cu 键合过程中空隙演化与微观结构特征如图 6 所示^[14],不同晶粒构型下空洞的演化路径存在显著差异——细晶结构通过激活密集且连通的晶界扩散网络,实现了空洞的快速、各向同性闭合。

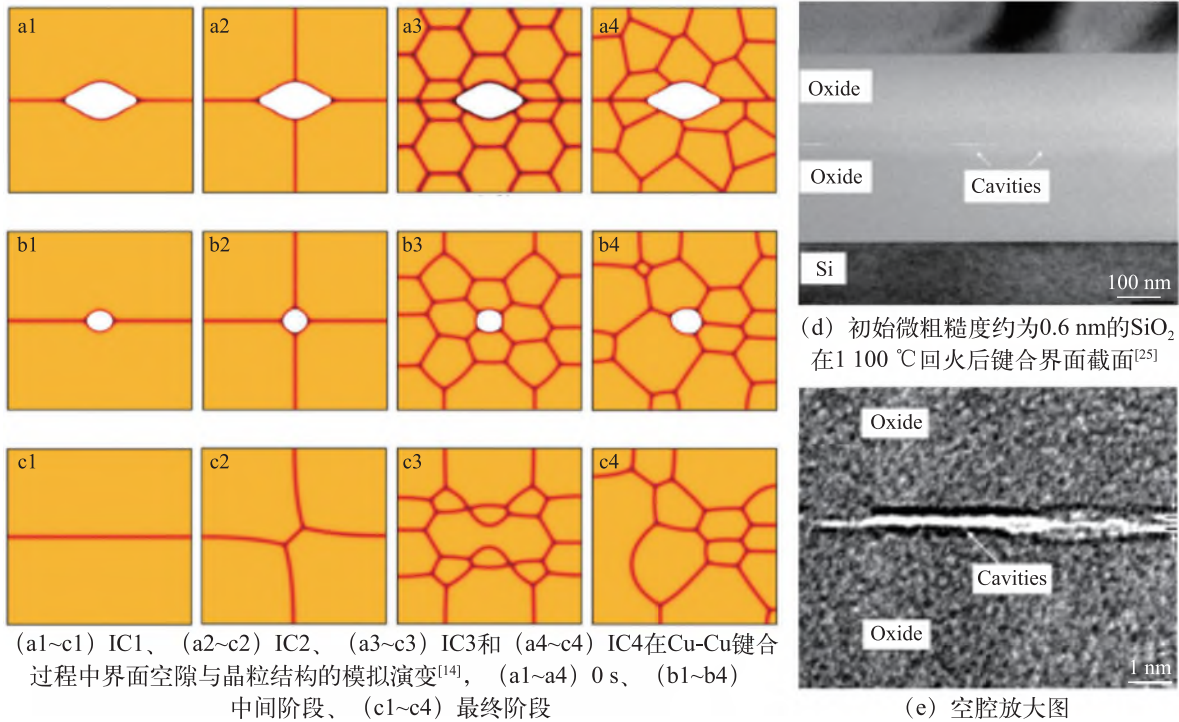


图 5 4 种情况下 Cu-Cu 键合过程中界面空隙与晶粒结构的模拟演变及截面图

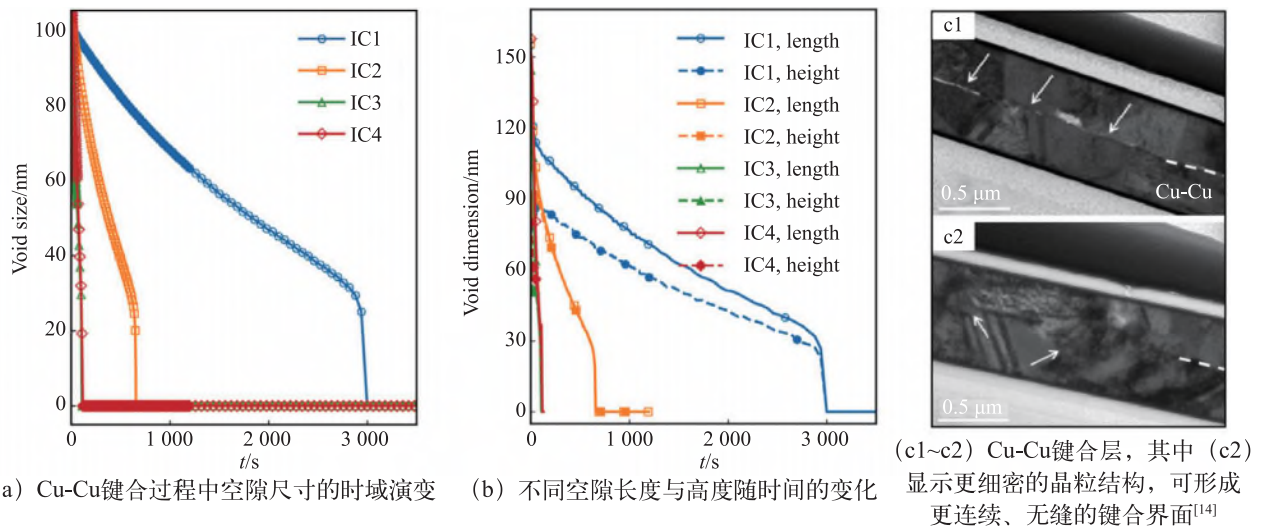


图 6 Cu-Cu 键合过程中空隙演化与微观结构特征

值得注意的是，相场模拟还揭示在整个闭合过程中，空洞区域始终处于静水压缩应力状态，为热压键合中空洞的热力学驱动力提供了有利的力学环境。这一发现从机理上解释了为何工业实践中通过 CMP 优化表面平整度，或通过低温退火调控 Cu 晶粒细化，能够显著提升键合可靠性并降低热预算。此外，文献[14]进一步指出，非均匀晶粒分布（如双峰尺寸分布或多尺度晶粒）虽仍优于单晶结构，但其空洞闭合效率略低于均匀细晶体系。这表明，晶粒尺寸分布的均匀性同样是影响键合质量的关键微观结构参数。该结果不仅深化了对“微观结构-输运行为-宏观性能”关联机

制的理解，也为建立“工艺-微观结构-宏观性能”联动的多尺度模型提供了定量依据，凸显了在微米尺度连续介质仿真中显式引入真实多晶拓扑结构（包括晶界取向、连通性与尺寸分布）的必要性。

1.3 微观尺度

在微观（原子与纳米）尺度上，混合键合界面的力学行为本质上由化学键形成、原子扩散及缺陷演化等过程主导，其基础物理机制与传统的硅-硅直接键合并无本质区别^[26]。目前，利用 DFT 与 MD 方法，系统研究界面化学组成以及表面活化工艺对界面力学性能的定量调控，已成为该领域的成熟方法论。本节将围

绕 DFT 与 MD 在混合键合界面力学行为研究中的作用展开讨论。

使用 MD 模拟能够在原子尺度上揭示材料行为的内在机理与过程细节, 例如位错形核、界面原子扩散、表面活化机制以及界面力学性能等。该方法通过模拟有限温度下原子的热运动, 能够呈现键合界面在时间与温度耦合作用下的动态演化路径, 涵盖空洞的形核与湮灭、应力场的分布与松弛、晶界与位错的迁移行为等关键过程。这些微观层次的物理图像可直接用于指导退火温度曲线设计、键合压力优化等关键工艺, 为晶圆键合技术提供动力学视角的指导。此外, MD 模拟可对表面粗糙度、污染物残留等非理想因素在热力学驱动下的演化进行建模, 评估工艺波动对键合质量的影响, 并动态追踪缺陷与残余应力的形成与演变, 为提高键合强度、可靠性与成品率提供关键洞见^[27]。更重要的是, MD 为原子尺度失效机制的解析提供了不可替代的研究窗口, 包括焊料扩散与断裂行为^[11,16]、蠕变与位错演化^[11,28-29]、疲劳裂纹扩展与应力腐蚀开裂^[12-13], 以及结晶与微观结构演变过程^[28-29], 从而在根本上支撑材料的可靠性和寿命预测。

对于 Cu-Cu 金属界面的直接键合, 其成功依赖于退火过程中 Cu 原子的体扩散与晶界迁移。目前主流工艺包括室温直接键合^[30]或室温键合后辅以后续退火^[25,31]。大量研究已聚焦于 Cu-Cu 键合中界面缺陷演化与工艺-结构关联, 尤其在表面粗糙度、金属间化合物形成及空洞抑制等方面取得了量化进展^[32]。MD 仿真在此领域展现出独特优势: 通过动态再现 Cu-Cu 界面的原子扩散机制与界面能调控规律, 可深入揭示键合过程的微观动力学。例如在加压与加热条件下, MD 可模拟微米/亚微米尺度 Cu 凸点接触瞬间的塑性流动、位错萌生与晶界滑移行为, 特别适用于研究纳米孪晶铜 (nt-Cu) 因其特殊晶界结构所表现出的低温快速致密化特性。同时 MD 可量化不同晶粒取向对局部应力集中与孔洞闭合效率的影响。

拉伸变形过程快照如图 7 所示, 在热-力耦合退火过程中, MD 能追踪 Cu 原子跨界面的扩散路径, 动态观察孔洞、空位团簇乃至 Kirkendall 孔洞的形成与演化, 从而解释为何短时高温加压仍可实现无孔洞键合。此外, MD 还可分析因 CTE 失配引起的残余热应力分布, 预测晶圆翘曲或界面脱黏风险。针对实际工艺中难以避免的对准偏差, MD 可构建 Cu 与 SiO₂ 错位接触模型, 模拟 Cu 向介电层边缘挤入或横向扩散的行为, 评估由此引发的局部电迁移或介质击穿风

险, 为工艺容差设计提供依据。

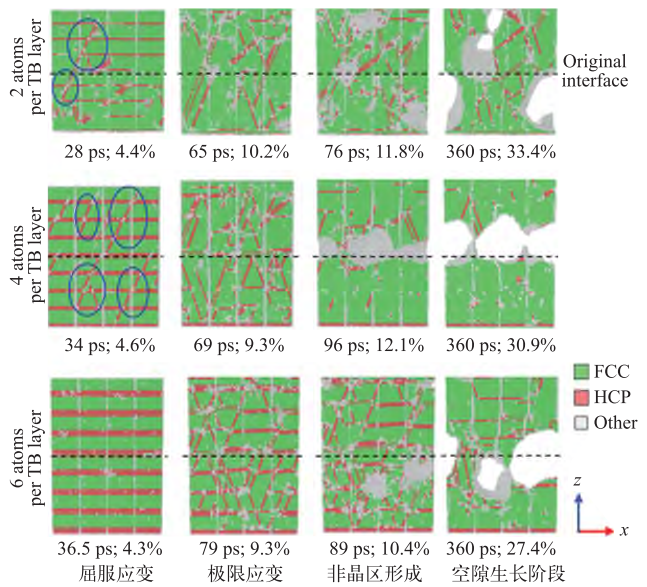


图 7 拉伸变形过程快照 (各快照下方数值分别表示时间和应变)

MD 研究表明, 在 300~400 °C 退火条件下, Cu 晶粒通过 Ostwald 熟化机制发生显著粗化, 晶界向低能态重构, 从而驱动界面空洞收缩甚至完全愈合。然而, 该过程高度依赖初始表面粗糙度与晶粒取向^[4], 小角度晶界迁移速率远低于大角度晶界, 易导致局部空洞残留。当上下铜表面晶向错配 (如 <110>、<111>) 时, 形成的高能晶界可显著加速原子扩散, 其扩散系数较同向界面高出 1~2 个数量级, 激活能低至 0.20 eV, 远低于传统多晶铜的晶界扩散值 (0.88 eV)^[33]。这一现象归因于错配晶界本身的结构不稳定性与界面纳米空洞的协同效应, 凸显了在亚微米键合间距下界面缺陷与晶界结构对扩散动力学的非线性增强作用。在具有可控粗糙度的 Cu-Cu 界面中, 主导致密化的实为晶界扩散, 表面扩散贡献极小^[33]。这也解释了为何表面粗糙度是决定 Cu-Cu 键合界面空洞率的关键因素^[32]。

晶界形貌与微观结构对金属键合行为的影响如图 8 所示, LIU 等人^[29]对 (111) 取向纳米孪晶银固态键合过程的研究结果表明, 键合起始于局部微塑性变形, 随后在应力梯度驱动下通过原子流动填充界面孔隙; 高应变率下, 界面位错可有效抑制裂纹萌生, 但过高的键合温度 (>593 K) 会诱发再结晶, 导致位错湮灭、拉伸强度下降。适中的键合温度 (393~593 K) 与最佳过盈量 (2~3 nm) 则能协同优化原子扩散效率与残余应力水平, 显著提升键合质量。该工作为混合键合中低温、低压工艺窗口的合理性设计提供了重要参考, 具有直接的借鉴意义。

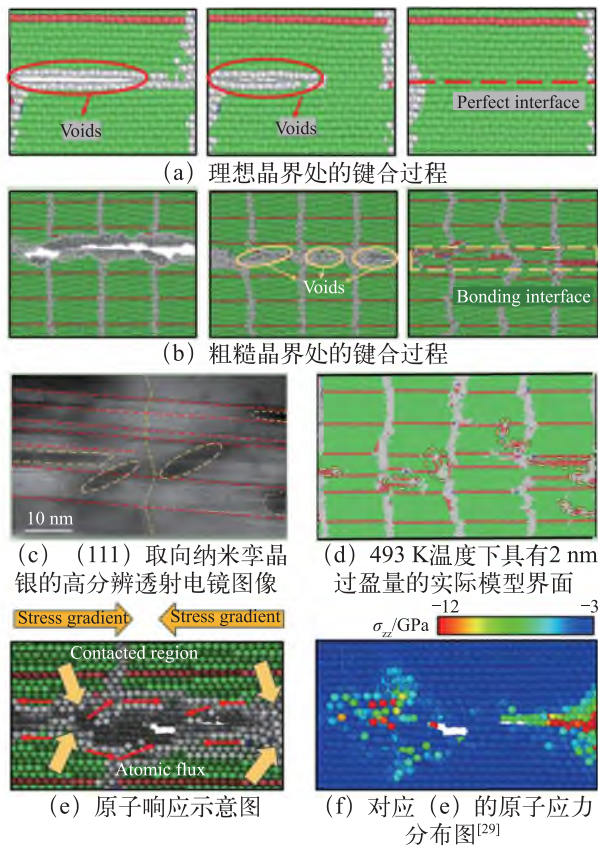


图 8 晶界形貌与微观结构对金属键合行为的影响

通过化学反应分子动力学 (ReaxFF-MD) 模拟,可

在原子尺度揭示 SiO₂ 界面终端化学态 (O/Si/OH) 如何决定键合类型 (氢键 / 硅氧烷共价键) 及其力学强度^[34-35]。研究表明, SiO₂ 界面的键合能力高度依赖其表面终端原子构型: 以 Si 原子结尾的界面可通过与水反应形成 Si—O—Si 共价键 (键长约 1.55 Å), 展现出可观的拉伸强度; 而以—OH 基团覆盖的界面则因化学惰性无法形成有效键合, 导致界面强度趋近于零^[34]。因此, 在混合键合前的表面活化工艺 (如等离子体处理) 中, 需精准调控表面羟基密度, 避免过度钝化, 以保留足够的反应性位点促进共价网络形成。硅表面模型及其与水分子相互作用的多尺度表征如图 9 所示, MD 可计算 SiO₂ 介电界面不同的表面终端化学态 (O/Si/OH) 对键合类型 (氢键 / 共价键) 和力学强度的决定性影响, 这正是混合键合中介电层 (如 SiO₂) 在等离子体活化或湿法处理后界面行为的核心问题。

铜 CMP 工艺原理与建模如图 10 所示, 基于 ReaxFF-MD 模拟, 还可揭示前道 CMP 工艺与后续混合键合界面质量之间的深层联系, 量化浆料对 CMP 后表面微观形貌的影响。总而言之, MD 不仅能有效揭示键合界面的原子运动、化学键形成、扩散路径与缺陷演化机制, 还能在不同键合场景中突破实验观测的时空局限, 探究不同工艺处理后的动力学行为。

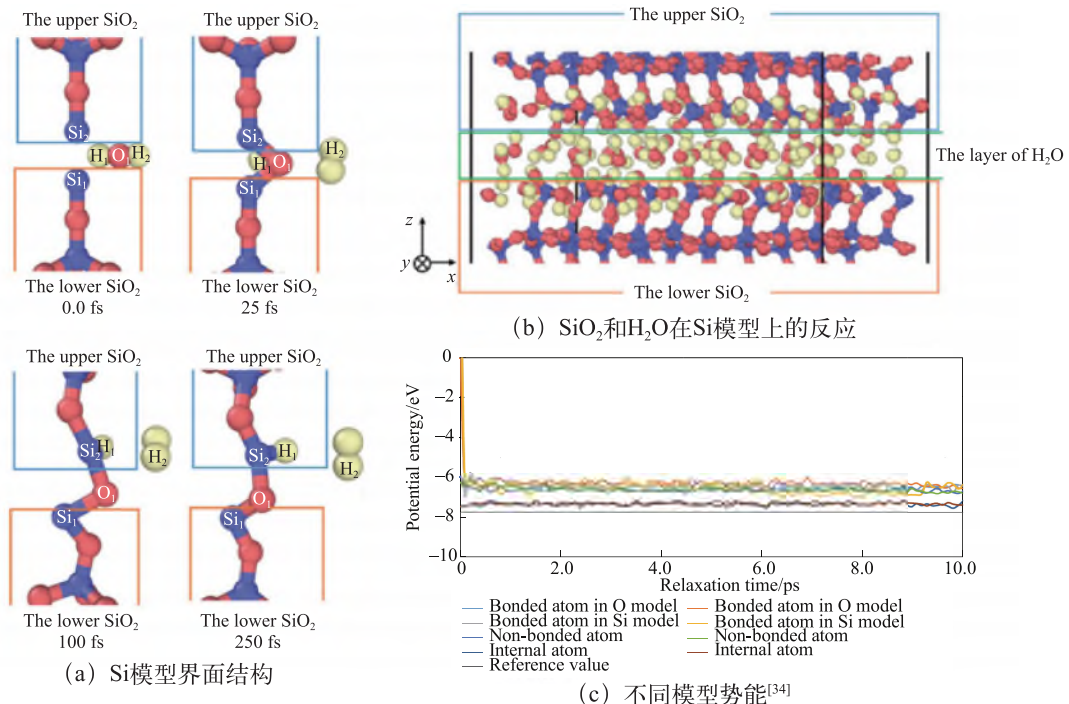


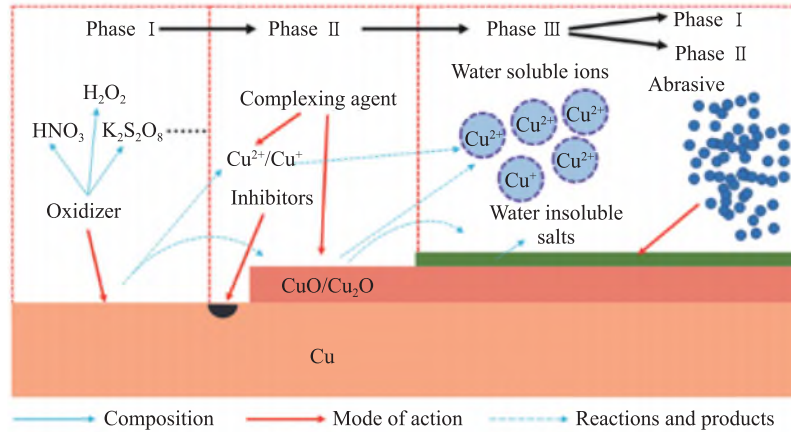
图 9 硅表面模型及其与水分子相互作用的多尺度表征

DFT 的核心价值在于从原子-电子层面揭示界面的本质物理化学机制^[37], 为工艺优化提供底层理论支撑。具体而言, DFT 可通过计算界面原子的成键类型、

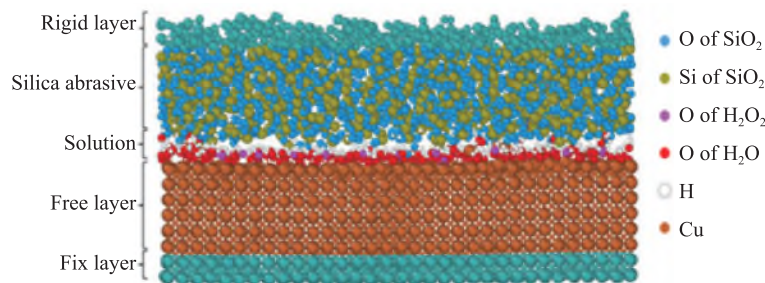
电荷转移与局域电子态密度, 解析键合强度的微观起源; 通过模拟杂质在界面处的吸附与反应行为, 指导清洗与表面处理工艺的设计; 还可评估不同材料组合

或中间层的界面能, 从而在实验前高效筛选最优集成方案。这些能力使得 DFT 不仅能够解释实验观测结

果, 还能预测材料兼容性, 并为关键工艺参数的设定提供根本性依据。



(a) 铜CMP工艺流程及材料去除机制



(b) 铜CMP模型^[36]

图 10 铜 CMP 工艺原理与建模

近年来, 新发展的 SCAN meta-GGA 泛函显著提升了 DFT 对混合键合中多类型相互作用的描述精度^[38]。该方法能够同时准确刻画 Cu-Cu 金属键、介电层内部的共价键/氢键, 以及界面区域的中程范德华作用, 从而实现对接面结构与能量的高精度、高效率预测。这为建立界面本构关系提供了高质量数据支撑。

以典型界面为例, DFT 可精确计算 Cu-Cu、Cu-SiO₂、SiO₂-SiO₂ 等体系在不同表面终止态下的界面结合能, 定量评估不同前处理工艺 (如 HF 处理引入—F、等离子体活化引入—OH) 对黏附强度的影响。对于介电层直接键合, 表面化学状态起决定性作用: SiO₂ 表面的羟基 (—OH) 密度是调控界面结合能的关键参数^[39-40]。相邻表面可通过脱水缩合反应形成稳定的 Si—O—Si 共价网络, 而 O₂ 或 Ar 等离子体活化工艺通过去除碳污染并引入高密度—OH 基团, 显著提升室温键合强度。然而, 过度活化可能导致表面粗糙度增加或引入亚稳态缺陷, 反而损害长期可靠性^[8,41-42]。

DFT 还可用于分析表面官能团对 Cu 原子扩散势垒的影响。例如, 通过计算 Cu 在不同氧化物表面 (含不同官能团或超薄钝化层) 上的扩散激活能, 可揭示为何特定表面处理 (如采用 <111> 取向的纳米孪晶铜

或沉积金属钝化层) 能显著降低退火温度, 促进低温致密化。

早期亲水性硅晶圆键合研究结果表明, 初始界面结合主要由范德华力与毛细力驱动, 键合能通常低于 0.3 J/m²; 而在高温退火 (>800 °C) 后, 界面发生脱水缩合, 形成连续的 Si—O—Si 网络, 键合能可接近体材料断裂能 (约 2~3 J/m²)^[43]。这一从“弱物理吸附”到“强化学键合”的转变机制, 为理解混合键合中介电层界面的演化提供了重要参照。值得注意的是, 等离子体活化等先进表面处理技术可大幅降低所需退火温度, 使低温高强键合成为可能。这一策略已被成功延伸至混合键合工艺中, 以满足后端制程 (BEOL) 对热预算的严苛限制。

在钝化层与杂质相的力学稳定性方面, DFT 亦发挥关键作用。例如, 对于沉积的超薄非晶 Si 或金属钝化层, DFT 可评估其与 Cu 或 SiO₂ 之间的晶格匹配度、界面应力状态及弹性模量, 进而预测其在热循环或机械载荷下的失效倾向。NAGAO 等人^[44]从微观结构与电子键合机制出发, 系统解析了 Cu/SiO₂ 界面的本构关系, 量化了界面化学组成、原子排列与附着力之间的内在关联, 研究表明, 界面结合强度主要

由强化学键(如 Cu—O 共价-离子混合键)驱动,且与氧含量呈正相关——O-终止界面的附着力高达 3.805 J/m²,约为 Si 终止界面的 2.7 倍;而羟基(—OH)的存在会钝化界面、抑制化学键的形成,导致附着力骤降至仅 0.331 J/m²。弛豫的 Cu/非晶石英(001)界面结构如图 11 所示。这一发现直接指导了 3 类工艺优化策略:①采用去羟基处理;②可控引入氧以增强 Cu—O 键合;③设计功能性过渡层。同时,该结果也提示晶圆键合后的长期可靠性(如在热循环或湿热环境下的界面分层)需特别关注水汽侵入风险——因界面易吸湿形成—OH,导致结合力退化^[41]。结合“高氧界面原子排列更致密”的规律,还可通过“氧辅助退火”促进 Cu—O 键在晶界处的填充,有效抑制空洞扩展,提升界面抗疲劳性能。

1.4 跨尺度

跨尺度仿真的必要性源于复杂系统内在的多尺度特性与单一尺度模型的根本局限性。在混合键合等先进半导体封装技术中,混合键合的力学行为本质上是从原子到晶圆的跨尺度耦合,其物理机制跨越多个时空尺度。而单一尺度模型存在“信息断层”:连续介质模型假设材料均匀、本构关系已知,但在亚微米间距下,界面不再是“光滑连续体”,而是由离散原子、晶界、空洞构成,传统本构失效;原子模拟虽能揭示键合机理,但受限于时间(ns~μs 级),无法覆盖退火、热循环等工程相关的时间尺度。

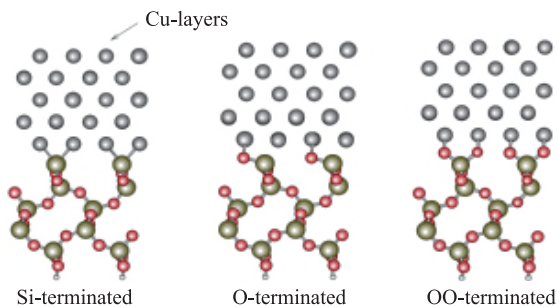


图 11 弛豫的 Cu/非晶石英(001)界面结构^[41]

针对封装结构中由材料异质性、几何复杂性和多物理场耦合带来的“局部高梯度”问题,工程领域广泛采用基于连续介质力学和 FEM 的工程化跨尺度策略^[45],以在计算效率与精度之间取得平衡,主要包括以下几种经典方法。

多级子模型法^[46-47]:作为封装仿真中最核心的跨尺度技术,其基本思路是将计算过程划分为“全局”与“局部”2 个层级。全局模型采用较粗网格模拟整个封装体(如芯片堆叠、硅通孔阵列)在热、力载荷下的整体响应,主要用于获取位移边界条件;随后在感兴趣的高应

力/应变梯度区域(如焊点与 IMC 界面、混合键合的 Cu-Cu 接触点)建立精细网格的局部子模型,通过插值边界条件进行高精度的局部场(应力、塑性应变、疲劳损伤)计算。该方法有效避免了全尺寸精细网格带来的巨大计算成本。

均匀化方法^[48]:主要针对封装中普遍存在的复合材料(如含填料的 EMC、底部填充胶),通过在微观尺度的代表性体积单元(RVE)上施加周期性边界条件,计算其等效宏观弹性或热膨胀属性,再将其作为均质材料参数输入到宏观封装模型中。这种方法实现了微观结构特征向宏观材料属性的跨尺度传递。

耦合场顺序分析^[49]:虽然侧重于多物理场,但也体现了不同物理机制在不同时空尺度上的主导作用。例如,先计算电-热耦合得到温度场,再将其作为载荷输入热-力耦合分析中,这种分步求解策略清晰分离了物理机制,是分析功率器件热管理与可靠性的标准流程。

然而,上述工程跨尺度方法主要解决结构完整性与应力分布问题,其准确性高度依赖于材料本构模型的输入。当研究深入到键合界面的本征物理机制(如原子扩散、位错发射)时,则需要引入更底层的物理跨尺度方法。

连续体与分子模型的桥接域仿真模型^[50]如图 12 所示,是处理键合界面的理想方法,而不是不同尺度的少数特定参数传递。其具有严格的跨尺度耦合理论与计算方法,能实现从密度泛函理论、分子动力学揭示的原子扩散与界面断裂原子机制,到相场法模拟的微观组织演化,再到晶体塑性有限元预测变形与残余应力的无缝链接。准连续介质法(QC)^[51]是其中一种通用型多尺度建模方法,旨在解决原子尺度模拟计算成本过高与连续介质模型无法捕捉局部非均匀变形(如位错、裂纹尖端)之间的矛盾。其目标是高效而准确地模拟材料在包含缺陷(如裂纹、位错)区域的力学行为。但此类跨尺度仿真目前大多停留于方法上,较少应用于晶圆键合。

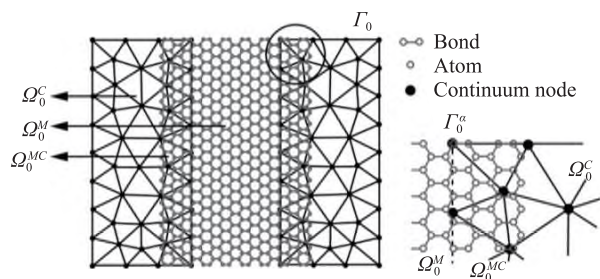


图 12 连续体与分子模型的桥接域方法模型^[50]

为突破传统连续介质模型在纳米尺度失效预测上的局限, 前沿研究开始尝试将量子力学直接嵌入宏观求解框架。基于纳米压痕技术的量子化学密度泛函理论(QCDFT)中的域划分如图 13 所示, PENG 等人^[52]通过将 DFT 与 QC 方法耦合, 首次在微米尺度的铝薄膜纳米压痕模拟中实现了电子结构级别的精度, 并准确捕捉到位错成核的临界条件(压入深度 9.4 Å)。该工

作不仅验证了“量子-连续介质耦合”技术的可行性, 其采用的“低精度模型主流程+高精度模型关键点校正”的混合策略, 也为构建面向混合键合的“虚拟工艺试验台”提供了重要思路——即在键合界面等关键区域部署 DFT 或高保真机器学习势, 而在全局尺度采用高效 FEM。

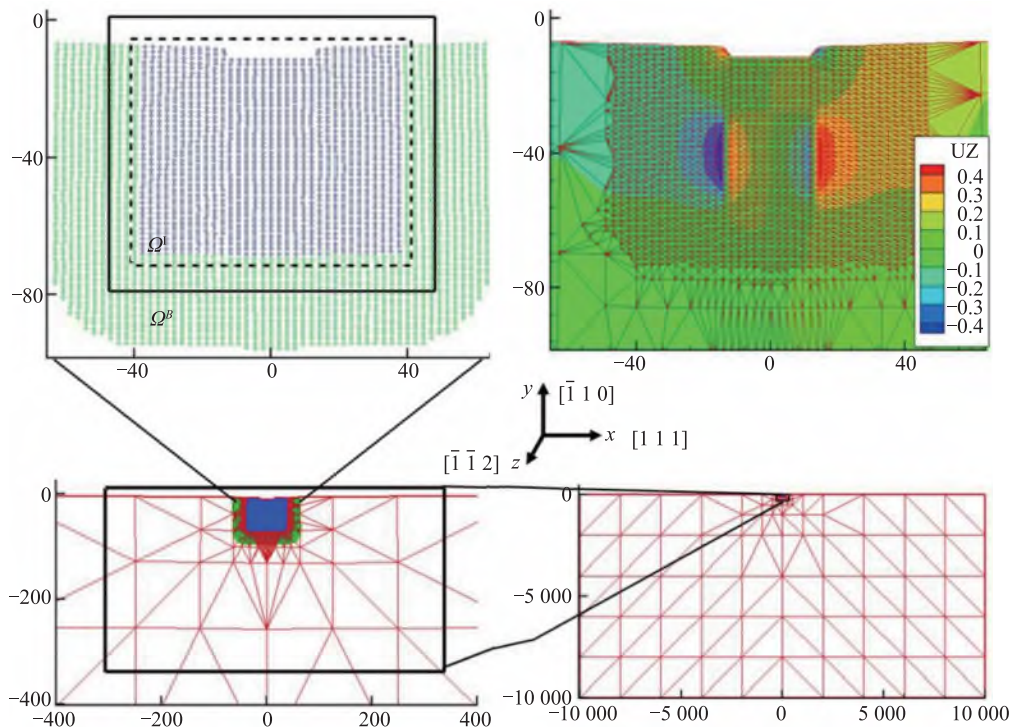


图 13 基于纳米压痕技术的量子化学密度泛函理论中的域划分(单位: Å)^[52]

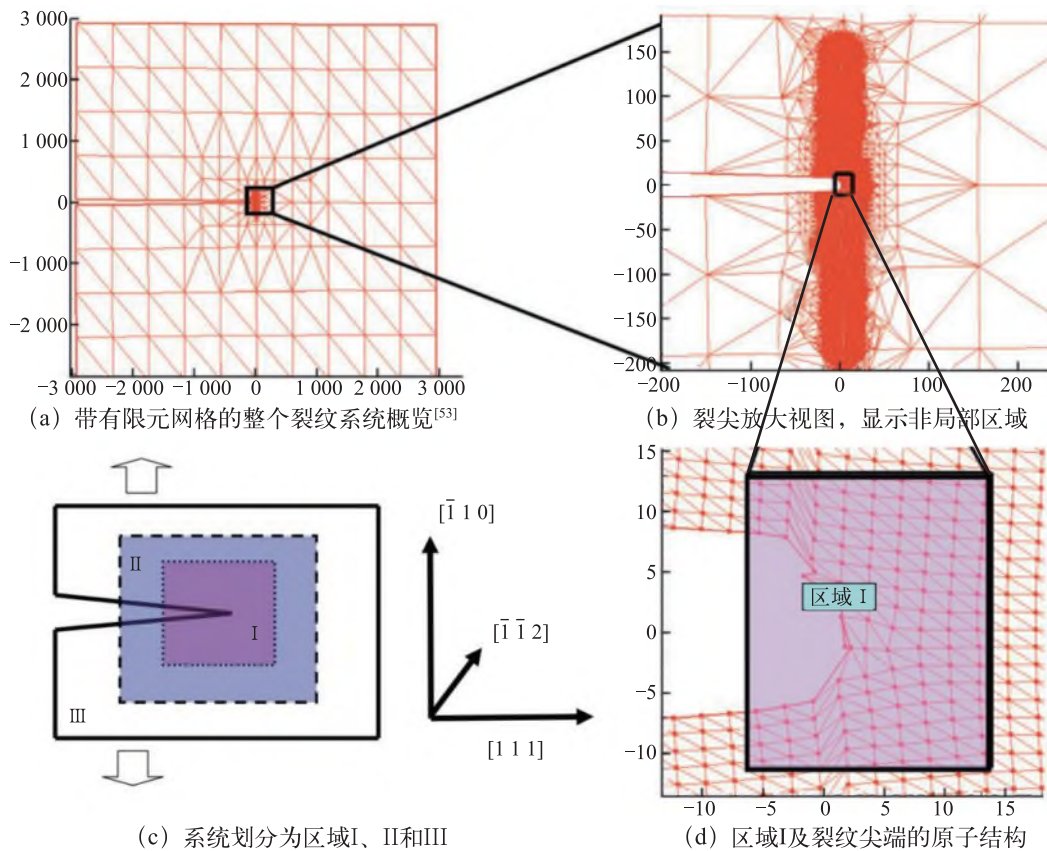
第一性原理到有限元的跨尺度模拟工作聚焦于金属铝中裂纹尖端的断裂行为^[52], 旨在揭示在原子尺度上, 采用量子力学与经验势描述原子相互作用时对裂纹尖端塑性行为包括位错发射、微孪晶形成、裂纹形貌预测的差异。这一问题本质上涉及界面/裂纹尖端区域的多尺度力学建模准确性, 与混合键合中 Cu-Cu 界面在纳米尺度下的键合强度、缺陷演化及失效机制具有深刻的类比性和方法论相关性。

PENG 等人的另一项工作^[53]进一步对比了量子力学精度与经验势对金属断裂行为的预测能力, 多尺度裂纹模拟体系如图 14 所示。研究结果揭示, 经验势即使经过体材料性质拟合, 仍可能在关键缺陷能(如不稳定堆垛层错能)上存在显著偏差, 从而导致定性错误的失效模式。这有力证明了在混合键合等高精度界面力学建模中, DFT 级别的电子结构描述不可或缺, 未来的全链条跨尺度仿真不应仅停留于经验参数传递, 而应向着量子-连续介质深度融合的方向发展。

1.5 AI 驱动的跨尺度建模与数字孪生

近年来, 人工智能的迅猛发展正推动各领域对既有研究范式进行深刻反思。AI 的角色已从传统的辅助工具逐步演变为驱动多尺度物理建模范式变革的核心引擎。严格而言, AI 驱动的跨尺度建模与数字孪生仍属于 1.4 节所述跨尺度方法的范畴。然而, 鉴于其在贯通微观机理与宏观性能、实现仿真-制造闭环中的关键作用, 有必要单设一节以系统阐述其方法论内涵与工程价值。

在电子封装尤其是晶圆键合领域, 传统仿真方法长期面临“精度-效率-尺度”难以兼顾的挑战: 微观尺度依赖高成本的第一性原理计算, 介观尺度受限于分子动力学模拟的时间与体系规模, 而宏观尺度的 FEM 则难以准确反映底层材料的本构行为。在此背景下, 融合数据驱动与物理约束的混合建模范式正有效弥合不同尺度间的鸿沟, 构建起一条从原子界面到整厂制造的贯通式预测链条。前文所述各尺度的研究, 均有潜力通过引入人工智能视角获得新的深化与拓展。

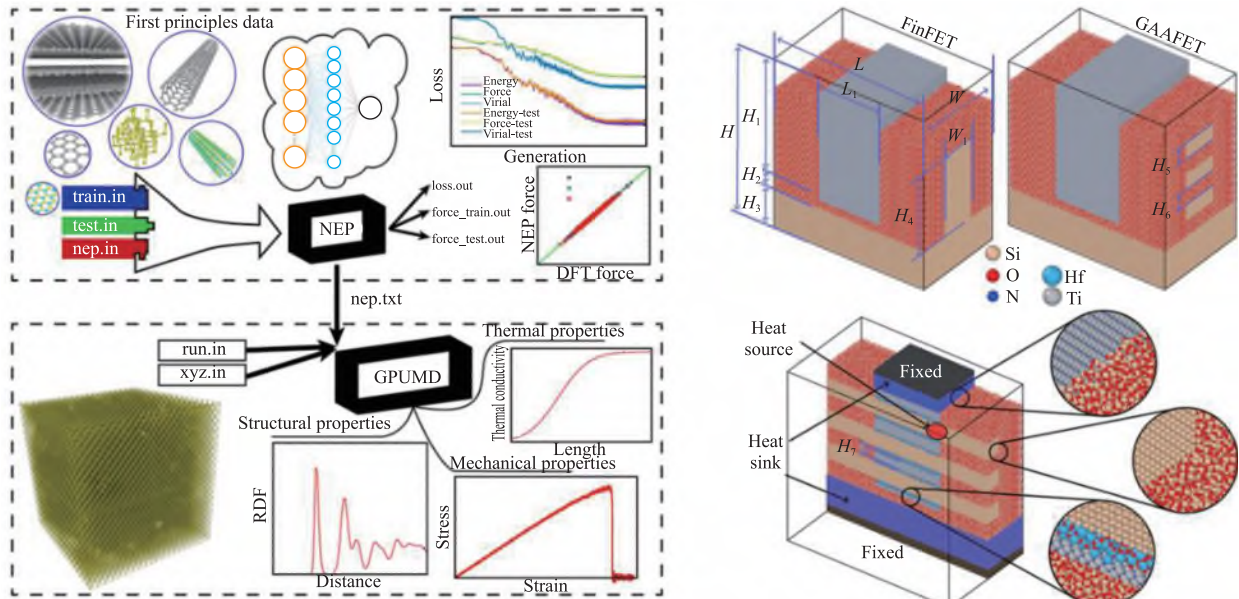
图 14 多尺度裂纹模拟体系 (长度单位为 \AA)

在微观层面, DFT 虽能提供高精度的电子结构信息, 但其计算复杂度随原子数呈立方增长, 严重制约了对实际键合界面 (如铜-铜直接键合或氧化物异质界面) 的大规模模拟。为突破这一瓶颈, 研究者开始利用神经网络直接学习原子构型与哈密顿矩阵或电子密度之间的映射关系。例如, 清华大学提出的 DeepH 方法^[54]借助图神经网络预测材料的哈密顿量, 在保持 DFT 精度的同时将计算速度提升数十至数百倍, 使得对包含数千原子的键合区域进行电子性质分析成为可能。

DFT 数据被用于构建机器学习力场 (MLFF), 从而在 MD 尺度实现高保真、高效率的动力学模拟。传统经验力场因参数化局限, 难以准确描述复杂界面中的非局域与多体相互作用; 而基于深度学习的 MLFF (如 DeePMD^[55]、GPUMD^[56-57]等) 能够从 DFT 数据中自动提取关键物理特征, 在接近量子力学精度的前提下, 将模拟体系扩展至百万原子量级, 时间尺度延伸至微秒以上。这使得研究者能以器件原胞尺度系统地追踪键合过程中界面空洞的成核、扩散路径的演化以及热循环下的疲劳损伤机制, 结合 GPUMD 软件包与 NEP-FET 器件建模流程的计算框架概览如图 15 所示, 图中以 2 个黑色方框表示 GPUMD 和 NEP 程序,

NEP 程序用于训练神经网络型有效势 (NEP) 模型, 而 GPUMD 程序则利用这些已训练的势函数执行原子尺度的分子动力学模拟^[57]。作为连接 DFT 与 MD 的关键桥梁, MLFF 显著提升了跨尺度仿真的能力。值得指出的是, DeePMD 与 GPUMD 均由我国科研团队自主研发, 已在材料与界面模拟领域获得广泛应用。

面对高密度互连结构 (如混合键合、TSV 集成) 所带来的几何复杂性与多物理场强耦合特性, 传统 FEM 在计算效率与模型保真度之间往往难以兼顾。近年来, 人工智能的引入为突破这一瓶颈提供了新路径。一方面, 针对设计优化或工艺窗口探索中需反复调用 FEM 求解器的问题, 研究者构建基于深度神经网络或高斯过程的代理模型^[59-60], 将原本耗时数小时的全场应力/位移仿真压缩至毫秒级, 显著提升参数敏感性分析与多目标优化的可行性。另一方面, 为克服纯数据驱动模型在物理一致性与外推能力上的不足, 物理信息神经网络 (PINN)^[61-63] 可被用于封装级热-力耦合问题的建模: 通过将控制偏微分方程 (如热传导方程、平衡方程) 作为软约束嵌入损失函数, PINN 能够在有限仿真或实验数据下学习符合物理规律的场变量分布, 尤其适用于处理晶圆中硅、氧化物、金属等异质材料交界区域的非均匀响应。此外, 在网格生成环节, 卷积



(a) GPUMD软件包包含2个核心可执行程序——GPUMD和NEP

(b) NEP-FET框架下纳米级场效应晶体管 (FET) 建模的集成视图^[58]

图 15 结合 GPUMD 软件包与 NEP-FET 器件建模流程的计算框架概览

神经网络 (CNN) 等视觉模型被用于自动识别关键力学区域^[64-65] (如 Cu-Cu 键合接触点或 TSV 边缘), 并指导自适应网格细化策略, 在保障局部精度的同时大幅降低整体自由度, 有效缓解跨尺度仿真中的“网格困境”。这些方法并非取代有限元分析, 而是通过智能化手段增强其在复杂场景下的适用性与效率, 使其更紧密地融入从设计到制造的闭环优化流程。

进一步地, 当视角从单点仿真拓展至整线制造, AI 与数字孪生的深度融合正催生新一代“认知型”先进封装产线。以台积电 CoWoS 技术为例, 键合良率不仅取决于本工序参数, 还深受上游 TSV 刻蚀质量、晶圆减薄均匀性等环节的影响。为此, 行业领军企业已着手构建覆盖全工艺链的数字孪生系统, 打通 TSV 刻蚀、晶圆减薄与键合等关键工序。该系统集成时序大模型与多模态感知 (如光学计量、设备传感器、计算机视觉图像), 可在虚拟空间中回溯缺陷根源、预演不同工艺组合下的良率表现, 甚至在物理投片前完成“虚拟爬坡”。类似地, 苏斯等设备厂商已在其键合平台中部署设备级闭环智能控制系统: 利用视觉大模型识别纳米级表面缺陷, 结合热漂移预测动态调整对准策略, 确保混合键合所需的 <50 nm 对准精度; 同时, 通过生成式 AI 合成稀有缺陷样本, 有效增强在线检测模型的泛化能力。

综上, AI 并非孤立地优化某一尺度的计算工具, 而是通过“DFT→MLFF→FEM→数字孪生”的层级传递, 构建了一个自下而上、数据贯通的多尺度建模新

范式。这一范式不仅显著提升了从原子机理到工程性能的预测能力, 更将晶圆键合的研发模式从经验试错转向基于仿真的主动设计, 为高密度 3D 封装、HBM 堆叠等前沿技术的快速产业化提供了关键支撑。

2 结论和展望

混合键合作为后摩尔时代实现高密度、高性能三维异质集成的核心使能技术, 正从辅助工艺跃升为决定系统集成密度、电性能与长期可靠性的关键环节。然而, 其产业化进程仍面临严峻的力学可靠性挑战, 包括异质材料热膨胀系数与泊松比失配引发的热-机械应力、超薄晶圆 (<10 μm) 翘曲导致的有效键合面积不足, 以及纳米尺度界面空洞、分层等局域化失效。这些问题跨越原子至晶圆尺度, 涉及热-力-电多物理场深度耦合, 传统“经验试错”开发模式已难以为继。

多尺度力学仿真为此提供了系统性解决方案, 并正驱动产业范式从工艺导向向“模型驱动”跃迁。在原子尺度, 密度泛函理论与分子动力学揭示了 Cu-Cu 界面扩散动力学及介电层表面化学状态对键合能的调控机制, 为等离子体活化等前处理工艺提供理论支撑; 在介观尺度, PFM 阐明了晶粒取向与晶界结构对空洞演化和闭合效率的决定性影响; 在宏观尺度, FEM 有效模拟了晶圆翘曲、焊盘布局优化及梯度中介层设计对整体应力分布的调控作用, 显著提升了结构稳健性与工艺窗口。

尽管多尺度仿真在揭示混合键合失效机理和指导工艺优化方面展现出巨大潜力,但在实际工程应用中仍面临若干关键障碍,制约了从“实验室演示”向“产线落地”的转化。

首先,跨尺度参数传递存在显著不确定性:原子尺度获得的界面能、扩散系数等本构参数,在向介观或宏观模型迁移时,常因尺度效应、边界假设或简化处理而失真,导致仿真预测与实测结果偏差较大。其次,高保真模型缺乏充分的实验验证支撑:纳米级界面缺陷(如亚微米空洞、非对称分层)难以通过常规无损检测手段精准量化,使得仿真结果的可信度难以验证闭环。最后,计算成本与工程时效性之间存在根本矛盾:全耦合多物理场仿真往往耗时数天甚至数周,难以满足产线快速迭代的需求。

面向未来,混合键合力学仿真的发展亟需构建一个全链条贯通、数物融合、智能增强的新范式,而这一体系本身即是对上述挑战的系统性回应。

第一,从“多尺度拼接”迈向“全链条贯通”。当前各尺度模型间存在“参数孤岛”与“尺度鸿沟”,亟需发展基于物理一致性的跨尺度信息传递机制。长远目标是实现从原子级界面行为到封装级可靠性的协同预测。例如,在HBM或3D芯粒等典型混合键合应用场景中,可探索将MD或DFT计算所揭示的界面扩散、空洞演化等微观机制通过MLFF或等效本构建模,转化为FEM模型可识别的损伤演化律或界面强度准则,进而用于评估热循环或机械冲击下的长期可靠性。尽管这一路径在理论框架与工程实现上仍面临诸多挑战,但其方向代表了下一代智能仿真体系的重要突破口。

第二,从“虚拟验证”升级为“数字孪生”。通过构建工艺-结构-性能一体化的数字孪生体,将高保真仿真与产线实时传感数据(如温度、压力、形貌)及后道表征结果(如SAM图像、剥离强度)动态融合,实现模型参数的在线校准与工艺偏差的自主补偿。同时结合六自由度高精度对准平台与AI算法,可实时预测晶圆翘曲并动态调整压合轨迹,显著提升贴合精度与良率稳定性。

第三,从“物理驱动”走向“智能增强”。面向工程时效性需求,深度融合人工智能技术:一方面,利用PINN、神经算子等“AI for Science”方法,在严格嵌入控制方程的前提下万倍加速多场耦合求解;另一方面,借助贝叶斯优化、强化学习等“AI for Engineering”策略,将仿真引擎转化为逆向设计,自动探索满足“超

低热预算”“超高强度”“超均匀性”等复杂约束的最优工艺窗口与新材料体系。

综上所述,通过构建贯通“原子机理-工艺过程-系统性能”的全链条认知框架,并与先进制造深度协同,多尺度仿真有望从辅助分析工具蜕变为突破超薄晶圆处理、纳米界面失效、异质集成失配等共性难题的核心引擎。这一范式转型不仅是仿真科学自身的演进,更是支撑3D IC、HBM、芯粒及AI芯片等下一代信息技术实现高可靠、高良率制造的关键基石。

参考文献:

- [1] 王成君,胡北辰,杨晓东,等. 3D集成晶圆键合装备现状及研究进展[J]. 电子工艺技术, 2022, 43(2): 63-67.
- [2] 田芳. 晶圆叠层3D封装中晶圆键合技术的应用[J]. 电子工业专用设备, 2013, 42(1): 5-7.
- [3] 赵国强,赵毅. 晶圆级集成技术研究进展[J]. 功能材料与器件学报, 2023, 29(1): 12-21.
- [4] 刘逸群,张宏伟,戴凤伟. 面向三维集成应用的Cu/SiO₂晶圆级混合键合技术研究进展[J]. 微电子学, 2022, 52(4): 623-634.
- [5] FORSBERG F, SAHARIL F, HARALDSSON T, et al. A comparative study of the bonding energy in adhesive wafer bonding[J]. Journal of Micromechanics and Microengineering, 2013, 23(8): 085019.
- [6] YAN D J, MA L L, LU J Q, et al. Advances of welding technology of glass for electrical applications[J]. Materials, 2025, 18(17): 4096.
- [7] REICHE M, GÖSELE U. Direct wafer bonding[J]. Handbook of Wafer Bonding, 2012: 81-100.
- [8] RAMM P, LU J J, TAKLO M M V. Handbook of wafer bonding[M]. Hoboken: Wiley, 2012.
- [9] ZHAO G Q, ZENG Y P, ZHAO Y. Simulation and experimental analysis of thermomechanical stress around interconnects for W2W hybrid bonding[C]// 2024 IEEE 10th Electronics System-Integration Technology Conference (ESTC), Berlin, Germany, 2024: 1-6.
- [10] LAU J H. Recent advances and trends in Cu-Cu hybrid bonding[J]. IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology, 2023, 13(3): 399-425.
- [11] AONO T, KAZAMA A, OKADA R, et al. Eutectic-based wafer-level-packaging technique for piezoresistive MEMS accelerometers and bond characterization using molecular dynamics simulations[J]. Journal of Micromechanics and Microengineering, 2018, 28(3): 035004.
- [12] KHAN A A, NGUYEN T K, TRINH Q T, et al. Wafer

- bonding technologies for microelectromechanical systems and 3D ICs: advances, challenges, and trends[J]. *Advanced Engineering Materials*, 2025, 27(20): 2500342.
- [13] LE X B, CHOA S H. Assessment of the risk of crack formation at a hybrid bonding interface using numerical analysis[J]. *Micromachines*, 2024, 15(11): 1332.
- [14] JIANG H, XU Y H, RAMACHANDRAN S, et al. Grain morphology effect on interfacial void closure in Cu-Cu bonding for advanced semiconductor packaging [J]. *Microelectronics Reliability*, 2025, 173: 115864.
- [15] LIM K, HAN M, JO G, et al. Design and simulation of symmetric wafer-to-wafer bonding compensating a gravity effect[C]// 2020 IEEE 70th Electronic Components and Technology Conference (ECTC), Orlando, FL, USA, 2020: 1480-1485.
- [16] REN Y Q, WANG Y X, LIN B H, et al. Al-Cu wafer-level bonding microscopic mechanism and its strength study[J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2025, 64(6): 065503.
- [17] WU C D, LIAO C F. Molecular dynamics simulation of the direct bonding of (111)-oriented nanotwinned Cu and its related mechanical behavior[J]. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2024, 187: 111872.
- [18] 张丹青, 韩易, 商庆杰, 等. 有限元仿真优化布局解决金键合局域化问题[J]. *电子与封装*, 2024, 24(4): 040202.
- [19] CHU W S, RASHIDI S E E, ZHANG Y L, et al. An analytical model for thin film pattern-dependent asymmetric wafer warpage prediction[C]// 2022 IEEE International Memory Workshop (IMW), Dresden, Germany, 2022: 1-4.
- [20] 谭琳, 王谦, 郑凯, 等. 三维集成堆叠结构的晶圆级翘曲仿真及应用[J]. *电子与封装*, 2024, 24(4): 040201.
- [21] KIM T H, AHN D, LEE M G, et al. Development of wafer bonding system for high precision bonding alignment[J]. *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing*, 2024, 25(9): 1823-1841.
- [22] OUYANG Y, YANG S H, YIN D D, et al. Excellent reliability of xstacking™ bonding interface[C]// 2021 IEEE International Reliability Physics Symposium (IRPS), Monterey, CA, USA, 2021: 1-6.
- [23] 甘磊, 吴昊, 仲政. 数据驱动的金属疲劳寿命模型研究进展[J]. *力学进展*, 2025, 55(1): 30-79.
- [24] ROSHANGHIAS A, KACZYNSKI J, HANGEN U. Cu pumping analysis during Cu/SiO₂ hybrid bonding using in-situ SPM imaging[J]. *IMAPSource Proceedings*, 2023, 2023: 302-305.
- [25] MORICEAU H, RIEUTORD F, FOURNEL F, et al. Low temperature direct bonding: an attractive technique for heterostructures build-up[J]. *Microelectronics Reliability*, 2012, 52(2): 331-341.
- [26] TONG Q Y, LEE T H, GÖSELE U, et al. The role of surface chemistry in bonding of standard silicon wafers[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 1997, 144 (1): 384-389.
- [27] LITTON D A, GAROFALINI S H. Modeling of hydrophilic wafer bonding by molecular dynamics simulations [J]. *Journal of Applied Physics*, 2001, 89(11): 6013-6023.
- [28] WU C D, LIAO C F. Atomistic simulations of effects of nanostructure on bonding mechanism and mechanical response of direct bonding of (111)-oriented nanotwinned Cu[J]. *Journal of Applied Physics*, 2024, 136(5): 054501.
- [29] LIU S C, ZHAO S, ZHANG D L, et al. Molecular dynamics analysis of the solid-state bonding mechanism and high strain rate response for (1 1 1)-oriented nanotwinned silver[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2025, 17(15): 23308-23321.
- [30] KIM T H, HOWLADER M M R, ITOH T, et al. Room temperature Cu-Cu direct bonding using surface activated bonding method[J]. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 2003, 21 (2): 449-453.
- [31] KAGAWA Y, FUJII N, AOYAGI K, et al. Novel stacked CMOS image sensor with advanced Cu₂Cu hybrid bonding [C]// 2016 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), San Francisco, CA, USA, 2016.
- [32] CHOI S, CHEN C M, HWANG B. Cu-Cu mechanical bonding for 3D integration of the next generation electronic chips: interfacial mechanisms, surface engineering, and emerging low-temperature strategies [J]. *Facta Universitatis, Series: Mechanical Engineering*, 2025, 23(4): 921.
- [33] TATSUMI H, KAO C R, NISHIKAWA H. Impact of crystalline orientation on Cu-Cu solid-state bonding behavior by molecular dynamics simulations[J]. *Scientific Reports*, 2023, 13: 23030.
- [34] SATO T, KUBOTA A, SAITOH K I, et al. Molecular dynamics study on SiO₂ interfaces of nonfiring solids[J]. *Journal of Nanomaterials*, 2020, 2020(1): 8857101.
- [35] WHALEY S D. Nano-bonding of silicon oxides-based surfaces at low temperature: bonding interphase modeling via molecular dynamics and characterization of bonding surfaces topography, hydro-affinity and free energy [D]. Tempe: Arizona State University, 2017.
- [36] TIAN Z Q, WANG S Z, LI R, et al. Study on polishing

- mechanisms of BEOL metal interconnects based on chemical and mechanical synergy[J]. *Microsystems & Nanoengineering*, 2025, 11: 109.
- [37] LI P, CHEN Z H, YAO P, et al. First-principles study of defects in amorphous-SiO₂/Si interfaces[J]. *Applied Surface Science*, 2019, 483: 231-240.
- [38] SUN J W, REMSING R C, ZHANG Y B, et al. Accurate first-principles structures and energies of diversely bonded systems from an efficient density functional[J]. *Nature Chemistry*, 2016, 8(9): 831-836.
- [39] PELMENSCHIKOV A, STRANDH H, PETTERSSON L G M, et al. Lattice resistance to hydrolysis of Si—O—Si bonds of silicate minerals: ab initio calculations of a single water attack onto the (001) and (111) β -cristobalite surfaces[J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2000, 104(24): 5779-5783.
- [40] YANG J J, MENG S, XU L F, et al. Water adsorption on hydroxylated silica surfaces studied using the density functional theory[J]. *Physical Review B*, 2005, 71(3): 035413.
- [41] BARNETTE A L, ASAY D B, KIM D, et al. Experimental and density functional theory study of the tribochemical wear behavior of SiO₂ in humid and alcohol vapor environments[J]. *Langmuir*, 2009, 25(22): 13052-13061.
- [42] HOWLADER M M R, SUGA T, ITOH H, et al. Role of heating on plasma-activated silicon wafers bonding[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2009, 156(11): H846.
- [43] MASTEIKA V, KOWAL J, BRAITHWAITE N St J, et al. A review of hydrophilic silicon wafer bonding[J]. *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, 2014, 3(4): Q42-Q54.
- [44] NAGAO K, NEATON J B, ASHCROFT N W. First-principles study of adhesion at Cu/SiO₂ interfaces[J]. *Physical Review B*, 2003, 68(12): 125403.
- [45] YU W, CHENG S C, LI Z Y, et al. The application of multi-scale simulation in advanced electronic packaging[J]. *Fundamental Research*, 2024, 4(6): 1442-1454.
- [46] CHEN C I, WU S C, LIU D S, et al. Global-to-local modeling and experiment investigation of HFCBGA package board-level solder joint reliability[J]. *Journal of Microelectronics and Electronic Packaging*, 2007, 4(4): 186-194.
- [47] CHANG S, LIU K, YANG M, et al. Theory and implementation of sub-model method in finite element analysis[J]. *Heliyon*, 2022, 8(11): e11427.
- [48] GUEDES J, KIKUCHI N. Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1990, 83(2): 143-198.
- [49] MENANTEAU L, PANTALÉ O, CAPERAA S. A methodology for large scale finite element models, including multi-physic, multi-domain and multi-timestep aspects[J]. *European Journal of Computational Mechanics*, 2006, 15(7/8): 799-824.
- [50] FISH J. *Multiscale methods: bridging the scales in science and engineering*[M]. Oxford: Oxford University Press, 2010.
- [51] MILLER R E, TADMOR E B. The quasicontinuum method: overview, applications and current directions[J]. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 2002, 9(3): 203-239.
- [52] PENG Q, ZHANG X, HUNG L, et al. Quantum simulation of materials at micron scales and beyond[J]. *Physical Review B*, 2008, 78(5): 054118.
- [53] PENG Q, LU G. A comparative study of fracture in Al: Quantum mechanical vs. empirical atomistic description[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2011, 59(4): 775-786.
- [54] LI H, WANG Z, ZOU N L, et al. Deep-learning density functional theory Hamiltonian for efficient ab initio electronic-structure calculation[J]. *Nature Computational Science*, 2022, 2(6): 367-377.
- [55] ZHANG L F, HAN J Q, WANG H, et al. Deep potential molecular dynamics: a scalable model with the accuracy of quantum mechanics[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 120(14): 143001.
- [56] DONG H K, SHI Y B, YING P H, et al. Molecular dynamics simulations of heat transport using machine-learned potentials: a mini-review and tutorial on GPUMD with neuroevolution potentials[J]. *Journal of Applied Physics*, 2024, 135(16): 161101.
- [57] FAN Z Y, WANG Y Z, YING P H, et al. GPUMD: a package for constructing accurate machine-learned potentials and performing highly efficient atomistic simulations[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2022, 157(11): 114801.
- [58] XU K, WANG G, LIANG T, et al. Device-scale atomistic simulations of heat transport in advanced field-effect transistors[J]. arXiv, 2025.
- [59] LIU Z, SHAN G B, CHEN Z Y, et al. Physics-guided

- neural surrogate model with particle swarm-based multi-objective optimization for quasi-coaxial TSV interconnect design[J]. *Micromachines*, 2025, 16(10): 1134.
- [60] JIANG Z L, WANG Z Q. Adaptive machine learning-enabled evolutionary optimization for reliability-based design of through silicon via (TSV) structures under uncertainty[J]. *IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology*, 2025, 15 (2): 387-398.
- [61] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. Physics-informed neural networks: a deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations [J]. *Journal of Computational Physics*, 2019, 378: 686-707.
- [62] HAGHIGHAT E, RAISSI M, MOURE A, et al. A physics-informed deep learning framework for inversion and surrogate modeling in solid mechanics[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2021, 379: 113741.
- [63] HARANDI A, MOEINEDDIN A, KALISKE M, et al. Mixed formulation of physics-informed neural networks for thermo-mechanically coupled systems and heterogeneous domains[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2024, 125(4): e7388.
- [64] YAMAGUCHI T, OKUDA H. Prediction of stress concentration at fillets using a neural network for efficient finite element analysis[J]. *Mechanical Engineering Letters*, 2020(6): 20-318.
- [65] SHAN Y C, CAO L T, WANG Y, et al. AI-driven generative and reinforcement learning for mechanical optimization of 2D patterned hollow structures[J]. *Materials Futures*, 2025, 4(3): 035001.



作者简介:

蔡新添 (1989—), 女, 湖北武汉人, 博士, 湖北工业大学机械工程学院讲师、硕士生导师, 长期从事机械 / 物理 / 计算交叉领域研究, 聚焦于薄膜生长过程的超快动力学建模、封装基板的超快激光加工与光电热耦合

仿真、二维材料力学性能分析等方向。