

University of Groningen

Stress relaxation in thin films due to grain boundary diffusion and dislocation glide

Ayas, Can

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version

Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:

2010

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Ayas, C. (2010). *Stress relaxation in thin films due to grain boundary diffusion and dislocation glide*. s.n.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

Samenvatting

In hoofdstuk 3 hebben we onderzocht hoe intrinsieke spanningen relaxeren als gevolg van dislocatie-plasticiteit. De intrinsieke spanning was hierbij in rekening gebracht door middel van een kolom van korrelgrens dislocaties. De verdeling van hun Burgers vector langs de korrelgrens bepaalt dan de feitelijke separatie tussen de korrels als gevolg van eerder opgetreden diffusieprocessen langs de korrelgrenzen. Simultaan hieraan zijn discrete dislocatie (DD) simulaties uitgevoerd aan film/substraatsystemen zonder intrinsieke spanning maar die zijn onderworpen aan thermische spanning. Omdat beide soorten berekeningen zijn uitgevoerd kunnen we onderscheid maken tussen de invloed van de spanningsverdeling en de invloed van de grootte van de intrinsieke spanningen op hun relaxatie. Het blijkt dan dat er twee tegenstrijdige effecten van lengteschaal optreden. Enerzijds neemt de versteviging van het materiaal toe met afnemende korrelgrootte omdat dislocatiebeweging gehinderd wordt door de korrelgrenzen ('kleiner is harder'). Anderzijds echter, wordt de spanningsverdeling uniformer als de korrels kleiner zijn zodat spanningsrelaxatie effectiever is, omdat er meer materiaal kan diffunderen naarmate de afstand tussen korrelgrenzen kleiner is. Als gevolg van dit laatste kan 'kleiner zachter' zijn. De overgang tussen deze schaalafhankelijkheden blijkt in hoofdstuk 3 te liggen tussen korrelgroottes van $d = 0.25 \mu\text{m}$ en $d = 0.5 \mu\text{m}$.

Het onderzoek aan korrelgrensdiffusie zelf is in hoofdstuk 4 uitgevoerd met een aanpak die het mogelijk maakt om het gekoppelde proces, diffusie plus dislocatie-plasticiteit, binnen één DD raamwerk te modelleren. Daartoe wordt diffusie beschreven in termen van het 'klimmen' van discrete dislocaties langs de korrelgrens. Na de afleiding van de vergelijkingen die diffusie op deze manier beschreven, is de numerieke methode toegepast voor de relaxatie van thermische spanningen in dunne lagen. Het is daarmee voor het eerst mogelijk gebleken om de twee-dimensionale spanningsverdeling in de polykristallijne film te berekenen en niet slechts de spanningsverdeling langs de korrelgrens. Een belangrijk resultaat van hoofdstuk 4 is dat zelfs wanneer het dif-

fusieproces gestopt is er nog spanningen overblijven in de film. De grootte van deze restspanning hangt af van de grootte van de initiële spanning maar ook van de slankheid van de korrels. Deze vormafhankelijkheid van de effectiviteit van relaxatie hangt direct samen met de vorm en breedte van de wig van materiaal die door diffusie langs de korrelgrens wordt aangebracht. Voor slanke korrels heeft deze wig de vorm van een U, maar wordt meer V-vormig met toenemende breedte van de korrel.

Een bijproduct van het DD model voor diffusie uit hoofdstuk 4 is dat dit het belang onderstreept heeft van fysisch correcte randvoorwaarden op de interface tussen film en substraat. Diffusiemodellen in de literatuur brengen wel in rekening dat aan dat einde van een korrelgrens er geen materiaal getransporteerd kan worden, maar niet dat de wig van gediffundeerd materiaal geen dikte kan hebben als de film goed hecht aan het substraat. Om deze reden is in hoofdstuk 5 een volledig twee-dimensionaal model ontwikkeld dat voortbouwt op bestaande beschrijvingen en alle randvoorwaarden in rekening brengt. Dit leidt tot een overdaat een randvoorwaarden in de klassieke wiskundig zin, maar deze kan omzeild worden door een stapsgewijze numerieke oplossing voor de diffusie- en voor het elasticiteitsprobleem op basis van gemengde eindige differenties en eindige elementen. Ter vergelijking, is dit model toegepast op hetzelfde film/substraatprobleem onder initiële thermische spanning als behandeld in hoofdstuk 4. Als uitbreiding op de bevindingen in het vorige hoofdstuk wordt een schalingsrelatie vastgesteld tussen de efficiency van relaxatie en de korrelgrootte. Deze schaling blijkt onafhankelijk te zijn van de initiële spanning, in tegenstelling tot wat was gevonden met het DD model. Verder voorspelt het continuum model geen schaalgrootte-effecten, die wel door het DD model worden beschreven. De dieperliggende reden hiervoor is dat de dikte van de diffusiewig in het continuum model willekeurig klein zijn, terwijl deze in het DD model begrenst is door de grootte van de Burgers vector (die bepaald wordt door de grootte van een atoom). Het is deze intrinsieke lengteschaal die het relaxerend vermogen volgens het DD model begrenst bij zeer slanke korrels.

Daar waar in de voorgaande hoofdstukken de intrinsieke spanning op een kunstmatige manier was aangebracht, is hoofdstuk 6 juist gewijd aan de opbouw van deze spanningen, als gevolg van een oververzadiging van ad-atomen tijdens depositie van de film. Hiertoe zijn zowel het DD als het continuum model voor korrelgrensdiffusie uitgebreid met de mogelijkheid van aangroei van de film. Daarmee is vervolgens onderzocht hoe de ontwikkeling van intrinsieke spanning afhangt van materiaalparameters en procescondities. De eerste belangrijke parameter is de korrelgrootte, omdat we al gezien hadden dat diffusie effectiever is bij slanke korrels. De trekspanning die in de vroege stadia van filmgroei ontstaan als gevolg van de coalescentie van eilandjes kan door diffusie snel worden gerelaxeerd; daarna neemt een compressieve depositie-spanning het over. De tweede belangrijke factor is de groeisnelheid. Als de groeisnel-

heid laag is, of de temperatuur hoog, is diffusie effectiever. Echter, bij snelle groei of lage temperatuur ontwikkeld zich een compressieve spanning. In het geval van snelle filmgroei met grote korrels bij hoge temperatuur kan een significante fractie van de coalescentie-spanning aanwezig blijven.

Tenslotte geeft dit proefschrift aan hoe spanningsrelaxatie als gevolg van diffusie en dislocatieplasticiteit kan worden gemodelleerd, rekening houdend met de verschillende intrinsieke tijschalen van diffusie en dislocatiebeweging. De eerste summier resultaten laten het grote belang zien van de nucleatie van dislocaties.

