

University of Groningen

## Stress and dislocations in thin metal layers

Nicola, Lucia

**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:*

2004

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

*Citation for published version (APA):*

Nicola, L. (2004). *Stress and dislocations in thin metal layers*. [Thesis fully internal (DIV), Groningen]. 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).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

### 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.

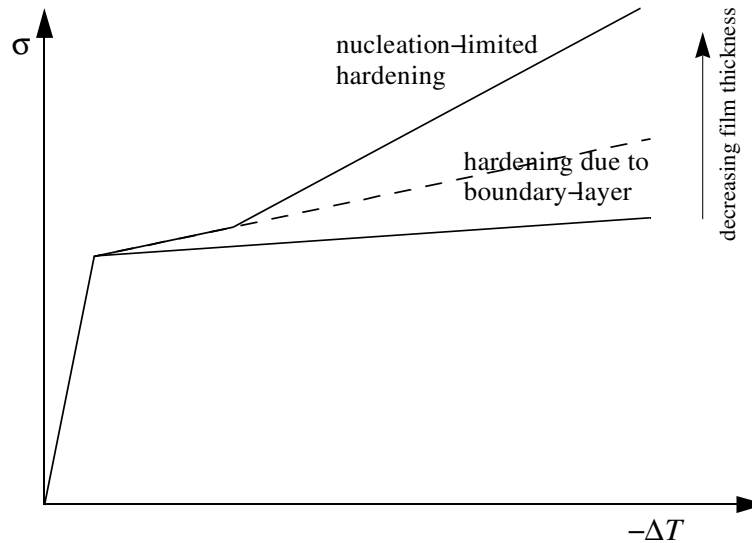
Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

## Samenvatting

Experimenten hebben laten zien dat er belastingssituaties zijn waarbij kleine metalen structuren moeilijker plastisch vervormbaar zijn dan hetzelfde materiaal in bulk. Dit doet zich voor wanneer minstens één van de afmetingen van de orde-grootte van een micrometer is of kleiner. Het verschijnsel treedt bijvoorbeeld op in dunne metalen coatings: hoe dunner de film, hoe moeilijker het is om deze plastisch te deformereren. Dit verschijnsel is in tegenspraak met klassieke plasticiteitstheoriën, die uitsluitend een schaal-*onafhankelijke* respons beschrijven.

Dit proefschrift handelt over de bestudering van dit schaaleardeffect in dunne lagen met behulp van een tweedimensionaal discrete-dislocatie plasticiteitsmodel. In dit model wordt plasticiteit beschreven door middel van het collectief gedrag van randdislocaties op voorgedefinieerde glijsystemen. Dit raamwerk bevat een intrinsieke lengteschaal –de Burgers vector van de dislocatie– hetgeen een noodzakelijke voorwaarde is om schaaleardeffecten te kunnen beschrijven.

Na een korte inleiding van de methode, in hoofdstuk 1, richt ik mij eerst op het mechanisch gedrag van één-kristallijne dunne lagen op een dik en stijf substraat. De praktisch relevante belastingssituatie is dat het film-substraat systeem onderworpen wordt aan een temperatuursverandering. Als gevolg van het verschil in thermische uitzettingscoëfficiënt tussen substraat (meestal silicium) en film ontstaat bij afkoeling een trekspanning in de film. De mate waarin deze spanning kan relaxeren door plastische deformatie blijkt, in films die tussen 0.25 and  $1\mu\text{m}$  dik zijn, afhankelijk te zijn van die laagdikte (hoofdstuk 2). De resulterende spanning is laagdikte-afhankelijk op een wijze die in kwalitatief goede overeenstemming is met experimentele resultaten. De oorzaak blijkt te liggen in de vorming van een relatief harde grenslaag die een gevolg is van de opeenhoping van dislocaties aan de interface tussen film en substraat, die verondersteld wordt geen dislocaties door te laten. Aangezien de dikte van deze grenslaag niet schaalbaar met de dikte van de laag, is de relatieve bijdrage groter in dunne films waardoor de totale respons harder is. Echter, zoals in meer detail besproken wordt in hoofdstuk 3, is de grenslaag niet de enige oorzaak: beneden een materiaalafhankelijke drempelwaarde van de laagdikte treedt er additionele versterking op wegens ge-



**Figure 1** Schematische samenvatting van de twee gevonden versterkingsmechanismen in kristallijne dunne lagen op een hard substraat. Gemiddelde spanning in de film is  $\sigma$ , temperatuuroename is  $\Delta T$ .

brek aan voldoende nucleatie van nieuwe dislocaties.

Hoofdstuk 4 behandelt de analyse van spanningsrelaxatie in één-kristallijne verbindingen in geïntegreerde schakelingen. Ook hier is weer een tweedimensionaal model gebruikt, d.w.z. van de dwarsdoorsnede van de lijn, onder de aanname dat er een vlakke vervormingstoestand heerst in de lengterichting van de lijn. De berekeningen zijn voornamelijk gericht op het achterhalen van de invloed van afmeting en vorm van de lijn op spanningsontwikkeling en relaxatie. Het blijkt dat spanningsrelaxatie door dislocatiebeweging niet effectief is in lijnen met een bijna vierkante doorsnede omdat de spanningstoestand dan vrijwel hydrostatisch is. In plattere lijnen treedt relaxatie vooral op in het midden van de doorsnede, terwijl zich grenslagen vormen aan boven- en onderzijde, tegen de passiveringslaag respectievelijk het substraat. Deze grenslagen zijn verantwoordelijk voor een schaafeffect in dunne lijnen.

In hoofdstuk 5 wordt het dunne-laagprobleem van hoofdstukken 2 en 3 uitgebreid naar polykristallijne films. Als gevolg van depositie zijn de kristallieten kolomvormig; ze worden gemodelleerd als rechthoekige korrels met een uniforme breedte. Aldus zijn er in polykristallijne films twee lengteschalen: de filmdikte en

de korrelgrootte. Beiden leggen beperkingen op aan spanningsrelaxatie en beiden kunnen onafhankelijk worden gevarieerd in het model. Uit de simulaties vinden we op deze manier dat versterking zowel van filmdikte als van korrelgrootte afhangt. Het laatste effect is in bulk bekend als het Hall-Petch effect, maar de schalingsregelmatigheid in bulk lijkt niet op te gaan voor dunne lagen.

Een alternatief voor discrete-dislocatieplasticiteit is een niet-lokale versie van continuumplasticiteit om aldus een materieële lengteschaal te introduceren. De vorm van een dergelijke theorie is echter niet bekend, en er zijn diverse formuleringen in de literatuur te vinden. Hoofdstuk 6 behandelt één ervan, namelijk de kristalplasticiteitstheorie van Gurtin [1]. Deze theorie koppelt het niet-lokale of rekgradiëntseffect aan de netto Burgers vector van dislocaties. Dit maakt de theorie uitermate geschikt voor confrontatie met dislocatieplasticiteit. Ik bekijk verschillende functionele vormen voor de defect-energie, waarmee vervolgens het dunne-filmprobleem van hoofdstuk 2 wordt opgelost. Uit vergelijking met de discrete-dislocatieresultaten kunnen de lengteparameters in Gurtin's theorie worden gefit. De beste fit wordt gevonden met een defect-energie die evenredig is met de energie in dislocatie opeenhopingen.

In tegenstelling tot en in aanvulling op eerdere hoofdstukken, handelt hoofdstuk 7 tenslotte over vrijstaande dunne lagen. Discrete dislocatie berekeningen aan dergelijke films onder trek worden gezet tegenover experimentele resultaten waarin korrelgrootte en filmdikte onafhankelijk konden worden gevarieerd. De experimenten zijn verricht door Xiang en Vlassak [2] op een zgn. 'bulge-testing machine' waarbij de films in één richting in een vlakke vervormingstoestand gehouden worden ter onderbouwing van de tweedimensionale simulaties. Versterking blijkt af te hangen van de aanwezigheid van passiveringslagen. Voor twee passiveringslagen vertonen de spanning-rek curves een schaaffect voor filmdiktes tussen 1 en 4.2  $\mu\text{m}$ . De twee belangrijkste vrije parameters in het model, namelijk de dichtheid van dislocatiebronnen en hun sterkte, zijn gefit aan de experimentele curves.

## Verwijzingen

- [1] M.E. Gurtin, *J. Mech. Phys. Solids*, **50** (2002) 5.
- [2] Y. Xiang, J.J. Vlassak, M.T. Perez-Prado, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, **795** (2003) paper U11.37.

