



**Max-Planck-Institut für Metallforschung
Stuttgart**

Versetzungen in dünnen Metallschichten
Burghard von Blanckenhagen

Dissertation
an der
Universität Stuttgart

Bericht Nr. 117
März 2002

Versetzungen in dünnen Metallschichten

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

Vorgelegt von

BURGHARD VON BLANCKENHAGEN

aus Bremen

Hauptberichter: Prof. Dr. phil. E. Arzt
Mitberichter: Prof. Dr. rer. nat. M. Rühle
Tag der mündlichen Prüfung: 15.03.2002

INSTITUT FÜR METALLKUNDE DER UNIVERSITÄT STUTTGART UND
MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR METALLFORSCHUNG, STUTTGART
MÄRZ 2002

Burghard von Blanckenhagen

Versetzungen in dünnen Metallschichten

203 Seiten, 122 Abbildungen, 2 Filme, 7 Tabellen

Zusammenfassung

Die Fließspannungen polykristalliner dünner Metallschichten sind viel größer als die der entsprechenden Volumenmaterialien und nehmen mit abnehmender Schichtdicke zu. Die Versetzungsbewegung wird durch die einschränkende Geometrie behindert, die genauen Mechanismen, die die hohen Fließspannungen verursachen, sind bisher noch nicht verstanden und deshalb Gegenstand dieser Arbeit.

Versetzungssimulationen berechnen die Dynamik von Versetzungen basierend auf der linearen Elastizitätstheorie unter Berücksichtigung der Selbstwechselwirkung einer Versetzung, Wechselwirkungen zwischen den Versetzungen, Versetzungsreaktionen, Randbedingungen und angelegten Spannungen.

In dieser Arbeit wird die Bewegung von Versetzungen in Konfigurationen, die für eine dünne Schicht charakteristisch sind, simuliert. Zuerst wird festgestellt, daß Modelle, die bewegliche Versetzungen betrachten, die sich über die gesamte Schichtdicke erstrecken, nicht die experimentell gemessenen, hohen Fließspannungen oder deren Skalierung mit der inversen Schichtdicke erklären können, auch wenn die Wechselwirkungen mit anderen Grenzflächenversetzungen berücksichtigt werden.

Die Aktivierung von Versetzungsquellen in kleinen Körnern wird simuliert. Diesen Ergebnissen folgend wird ein neues Modell vorgeschlagen, welches sich auf der Voraussetzung begründet, daß nur wenige Versetzungsquellen in der dünnen Schicht vorhanden sind und diese mehrfach aktiviert werden müssen, um eine plastische Verformung der Schicht zu erreichen. Es wird festgestellt, daß die effektive Quellengröße nur einen Bruchteil der Schichtdicke beträgt und daß Versetzungsquellen berücksichtigt werden müssen, wenn das Hall-Petch Modell für dünne Schichten verwendet wird. Dieses Quellenmodell sagt Fließspannungen voraus, die in guter Übereinstimmung mit experimentellen Daten sind, und erklärt das beobachtete Skalierungsverhalten der Fließspannung mit der Schichtdicke.



Burghard von Blanckenhagen

Dislocations in thin metal films

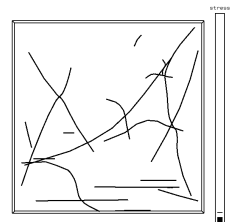
203 pages, 122 figures, 2 films, 7 tables

Abstract

The flow stresses of polycrystalline thin metal films are much higher than for the corresponding bulk material and scale approximately with the inverse film thickness. The dislocation motion is restricted by the confined geometry, but the detailed mechanisms which cause the high stresses are not well understood. Therefore, in this work the plastic deformation of thin films is investigated with the help of a discrete dislocation simulation. Discrete dislocation simulations compute the movement of dislocations based on linear elasticity theory, taking into account the interaction between different dislocations, the dislocation self-interaction, boundary conditions, dislocation reactions and applied stresses.

The dislocation simulation is used here to investigate dislocation configurations, which are characteristic for thin films. First, it is found that models based on moving dislocations which extend over the whole film thickness either can not explain the high flow stresses measured experimentally or give a wrong scaling with the film thickness, even when the interaction with other interface-dislocations is taken into account.

The operation of dislocation sources in small grains is simulated. Following these results a new model is proposed based on the assumption that the number of dislocation sources per grain is small, thereby requiring multiple activation of a source. It follows that the effective source size is only a fraction of the film thickness and that source effects have to be taken into account if the Hall-Petch model is applied to thin films. This source-model predicts flow stresses which are in good agreement with experimental data and explains the observed scaling behavior of the flow stress with the film thickness.



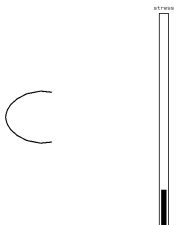
Erläuterung zum Film auf den geraden Seiten

Der Film auf der linken Seite zeigt die simulierte Aktivierung einer Frank–Read Quelle in einem kolumnaren Korn einer dünnen Schicht. Die Quelle wird durch ein an beiden Enden festgehaltenes Versetzungssegment realisiert. Beim Anlegen einer Spannung baucht sich das Segment aus und bewegt sich, bis es auf die Korngrenzen bzw. Grenzflächen des Korn trifft. Diese sind für die Versetzungen undurchdringbare Hindernisse, weshalb sich die Versetzungen vor ihnen aufstauen. Damit die Frank–Read Quelle erneut aktiviert werden kann, muß die Versetzung einmal um die Festhaltepunkte herumgleiten. Hierbei spaltet sich ein Versetzungsring vom festgehaltenen Segment ab. Die Aktivierung der Quelle wird mit zunehmender Anzahl der erzeugten Versetzungsringe schwieriger, die angelegte Spannung, die durch den schwarzen Balken rechts im Film angezeigt wird, muß erhöht werden. Genaueres zur Aktivierung von Versetzungsquellen in kleinen Kristalliten findet sich in Kapitel 4.2.1.

Erläuterung zum Film auf den ungeraden Seiten

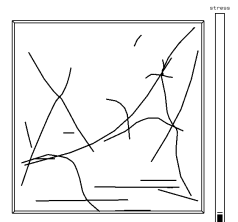
Im Film auf der rechten Seite ist die Simulation der Versetzungsbewegung unter einer angelegten Spannung in einem kolumnaren, würfelförmigen Korn einer polykristallinen dünnen Metallschicht wiedergegeben. In das Korn wurden 20 Versetzungsquellen mit zufällig ausgewählter Größe, Orientierung, Positionierung und Gleitsystem gesetzt. Die Korngrenzen wurden als undurchdringbare Hindernisse eingeführt, die Grenzflächen zur Ober- und Unterseite des Korns als freie Oberflächen, an denen die Versetzungen das Simulationsvolumen verlassen können. Durch Anlegen einer Spannung werden die Versetzungsquellen aktiviert und Versetzungen an den Korngrenzen abgelegt. Die angelegte Spannung wird über eine konstante Dehnrage gesteuert, der Verlauf ist am schwarzen Balken rechts im Bild zu erkennen. Die Blickrichtung ist die $\langle 112 \rangle$ Richtung parallel zur Schichtebene in das Korn hinein.

Weitere dreidimensionale Simulationen mit mehreren Versetzungsquellen werden in Kapitel 4.3 präsentiert und erläutert.



Inhaltsverzeichnis

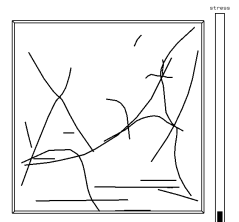
Liste der häufig verwendeten Symbole	8
1 Einleitung	9
2 Dünne Metallschichten	13
2.1 Dünnschichtexperimente	13
2.2 Fließspannungsmodelle	16
2.2.1 Versetzungen in dünnen Schichten	17
2.2.2 Kaltverfestigung	19
2.3 Polykristalline Materialien und metallische Multilagenschichten	20
2.3.1 Hindernisstärke einzelner Korngrenzen	20
2.3.2 Hall-Petch-Modelle	21
2.3.3 Experimente zur Feinkornhärtung	24
2.4 Direkte Beobachtung von Versetzungen in dünnen Metallschichten	25
2.5 Zusammenfassender Vergleich	27
3 Versetzungssimulation	30
3.1 Übersicht	30
3.1.1 Grundlagen	30
3.1.2 Kurzreichweitige Versetzungswechselwirkungen	36
3.1.3 Randbedingungen	38
3.1.4 Anwendungen	39
3.1.5 Simulation von Versetzungen in dünnen Schichten	40
3.2 Implementierung	40
3.2.1 Tests zur Überprüfung der Implementierung	44
3.2.2 Implementierung der kurzreichweitigen Versetzungswechselwirkungen	50
3.2.3 Randbedingungen	56
3.2.4 Zusammenfassung der in der Versetzungssimulation verwendeten An-	
nahmen	59
4 Ergebnisse	60
4.1 Versetzungsbewegung in dünnen Schichten	60
4.1.1 Einzelne parallele Grenzflächenversetzungen	61



4.1.2	Felder von parallelen Grenzflächenversetzungen	64
4.1.3	Wechselwirkung zwischen Threading-Segmenten	66
4.1.4	Sich kreuzende Grenzflächenversetzungen	68
4.1.5	Felder von Grenzflächenversetzungen auf sich kreuzenden Gleitebenen	71
4.1.6	Versetzungsschneidprozesse	72
4.2	Versetzungen in kleinen Kristalliten	74
4.2.1	Versetzungsquellen in der eingeschränkten Geometrie eines Korns .	75
4.2.2	Hall-Petch Modell mit Frank-Read Quelle	85
4.3	Simulationen mit mehreren Versetzungsquellen	91
4.3.1	Einfluß der Startkonfiguration	93
4.3.2	Unterschiedliche Schichtdicken	98
4.3.3	Unterschiedliche Versetzungsquellen	99
4.3.4	Spannungszustand und Orientierung	103
4.3.5	Freie Oberflächen	108
4.3.6	Simulation eines Vielkristalls	110
5	Diskussion	114
5.1	Versetzungsbewegung in dünnen Schichten	115
5.1.1	Grenzflächenversetzungen auf parallelen Gleitebenen	117
5.1.2	Grenzflächenversetzungen auf sich kreuzenden Gleitebenen	119
5.1.3	Wechselwirkungen zwischen Threading-Segmenten	120
5.1.4	Wechselwirkungen mit horizontalen Versetzungen	121
5.2	Versetzungsquellen in dünnen Schichten	122
5.2.1	Das Quellenmodell	123
5.3	Simulationen mit mehreren Versetzungsquellen	128
5.3.1	Vergleich 3D Simulation – Quellenmodell	129
5.3.2	Vergleich mit experimentellen Daten	134
5.3.3	Thermisch aktiviertes Versetzungsgleiten	146
5.3.4	Natur der Versetzungsquellen	148
5.4	Hall-Petch Modell für dünne Schichten	149
5.4.1	Vergleich mit analytischen Versetzungsaufstaumodellen	149
5.4.2	Auswirkungen auf die Dünnschichtplastizität	152
5.5	Quellenmodell mit Korngrenzendurchbruch	157
6	Schlußfolgerungen	160
6.1	Ausblick	162
6.1.1	Überprüfung des Quellenmodells	163
6.1.2	Erweiterungen und neue Anwendungen der Versetzungssimulation .	165
A	Model for Grain boundary hardening	168
A.1	Energy balance model	169
A.1.1	Application to coherent twin-boundaries	171
A.1.2	Application to polycrystalline thin films	172



B Mittelung über alle Schmidfaktoren	175
B.1 Uniaxialer Zug	175
B.1.1 $\langle 111 \rangle$ Orientierung	175
B.1.2 $\langle 001 \rangle$ Orientierung	176
B.2 Biaxialer Zug	176
B.2.1 $\langle 111 \rangle$ Orientierung	177
B.2.2 $\langle 001 \rangle$ Orientierung	177
C English Summary	178
C.1 Introduction	178
C.2 Thin Metal Films	178
C.2.1 Flow stress models	179
C.2.2 Direct observation of dislocations in thin metal films	179
C.3 Dislocation Dynamics Simulation	179
C.4 Results	181
C.4.1 Dislocation motion in thin films	181
C.4.2 Dislocations in small crystallites	181
C.4.3 Simulations with several dislocation sources	183
C.5 Discussion	184
C.5.1 Dislocation motion in thin films	184
C.5.2 Dislocation sources in thin films	185
C.5.3 Simulations with several dislocation sources	185
C.5.4 Hall-Petch model for thin films	186
C.5.5 Source model with grain boundary breakthrough	187
C.6 Conclusions	187
Literaturverzeichnis	189



Häufig verwendete Symbole

B	Dämpfungskoeffizient
\mathbf{b}	Burgersvektor
c	Konstante
d	Korngröße
\mathbf{F}	Kraftvektor
f_s	Skalierungsfaktor der effektiven Quellengröße
h	Schichtdicke
K_{HP}	aufgelöste Hall–Petch Konstante
k_{HP}	Hall–Petch Konstante
l	Abstand
m	Schmidfaktor
N	Anzahl
N_0	Anzahl der Versetzungsquellen
\mathbf{n}	Normalenvektor der Gleitebene
\mathbf{r}	Ortsvektor
s	Versetzungsquellengröße
T	Temperatur
V	Volumen
v	Geschwindigkeit
$\Delta\mathbf{x}$	Verschiebungsvektor
ϵ_{pl}	plastische Dehnung
γ_{pl}	aufgelöste plastische Dehnung
μ	Schubmodul
ν	Querkontraktionszahl
ρ	Versetzungsdichte
ρ_0	Startversetzungsdichte
σ	Spannung
τ	aufgelöste Schubspannung
τ_b^*	kritische Durchbruchspannung

In der Simulation werden Spannungen in Einheiten von μ , Längen in Einheiten von b und Zeiten in Einheiten von B/μ verwendet. Die Querkontraktionszahl wird $\nu = 0.3333$ gesetzt.



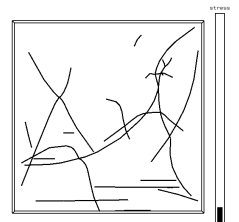
Kapitel 1

Einleitung

In der Mikroelektronik und Mikrosystemtechnik findet man heutzutage viele aus Metall bestehende Komponenten, deren Größe in mindestens einer Raumrichtung weniger als ein Mikrometer beträgt. So besitzt die aktuelle Generation von Mikroprozessoren Leiterbahnen aus Kupfer, die eine Breite von nur $0.15\mu\text{m}$ haben. Als ein Beispiel aus der Mikrosystemtechnik seien die Aufhängungen der Mikrospiegel von Projektoren genannt, die benutzt werden, um die Bildausgabe des Laptops an die Leinwand zu projizieren. Auf einem Chip sind viele Mikrospiegel nebeneinander angebracht, von denen jeder einen einzelnen Bildpunkt durch eine elektrostatisch gesteuerte Verkipfung des Spiegels kontrolliert. Die Aufhängungen der Spiegel bestehen aus Aluminium und haben Dicken von ca. einem Mikrometer.

In den miniaturisierten metallischen Bauteilen können große mechanische Spannungen entstehen, entweder durch direkte Belastung, wie in den Aufhängungen der Mikrospiegel, oder durch unterschiedliche thermische Ausdehnungskoeffizienten des Metalls und der umgebenden Materialien und Erwärmung im Betrieb. Mechanische Spannungen entstehen ebenfalls, wenn ein Strom durch Leiterbahnen fließt, da die bei endlichen Temperaturen immer stattfindende Selbstdiffusion der Metallatome durch den Strom der Elektronen in eine Vorzugsrichtung gelenkt wird. Hierdurch kommt es zur Entfernung von Material an der dem Minuspol zugewandten Seite und Anlage an der Pluspolarseite.

Zur Entwicklung der integrierten Systeme ist es wichtig, die Antworten der metallischen Komponenten auf mechanische Spannungen zu kennen, um die Systeme richtig auslegen zu können und deren Funktion und Zuverlässigkeit zu gewährleisten. Insbesondere dürfen die metallischen Komponenten nicht innerhalb der angestrebten Lebensdauer versagen (z. B. durch irreversible Verformung über die Toleranzgrenzen, Auftrennung oder Kurzschlußbildung von Leiterbahnen). Aus diesem Grund wurden und werden viele Experimente zur Bestimmung der mechanischen Eigenschaften dünner metallischer Schichten durchgeführt. Die Schichten zeichnen sich dadurch aus, daß eine Dimension — die Schichtdicke — von der gleichen Größenordnung wie die kleinste Dimension der miniaturisierten Metallkomponenten ist. Die Fließspannungen (die Spannung, bei der plastische, irreversible Verformung eintritt) von dünnen Schichten sind viel größer als die der entsprechenden Volumenmaterialien. Außerdem wurde eine Zunahme der Fließspannung mit abnehmender Schichtdicke



festgestellt. Dieser Schichtdickeneffekt steht im Gegensatz zu unseren Beobachtungen in der makroskopischen Welt. Hier kann sich ein Stahlbauer darauf verlassen, daß ein doppelt so dicker Stahlträger auch zweimal so große Lasten trägt. Bei dünnen Schichten verringert sich aber die Fließspannung bei einer Verdopplung der Schichtdicke ungefähr um die Hälfte, so daß die zumutbare Last nahezu konstant bleibt. Die Ergebnisse von Dünnschichtexperimenten werden in Kapitel 2 vorgestellt.

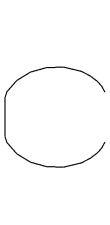
Bei normalen Temperaturen (Zimmertemperatur) wird die plastische Verformung in Metallen von Versetzungen (eindimensionale Defekte in der regelmäßigen Struktur des Kristallgitters, die sich unter externen Spannungen durch das Metall bewegen) getragen. In einer dünnen Schicht werden die Versetzungen aufgrund der geringen Schichtdicke in ihrer Bewegung eingeschränkt.¹ Es gibt verschiedene Theorien zur Berechnung der Fließspannungen in dünnen Schichten, die in Kapitel 2.2 und 2.3.2 genauer beschrieben werden, die jedoch entweder zu kleine Fließspannungen vorhersagen oder das Skalierungsverhalten der Fließspannung mit der Schichtdicke nicht richtig wiedergeben. Hieraus ergibt sich die Zielsetzung dieser Arbeit, die plastische Verformung von dünnen Metallschichten mit der Hilfe einer Versetzungssimulation zu verstehen.

Experimentelle Untersuchungen der Spannungen in dünnen Schichten wurden für verschiedene Metalle oder Legierungen, die auf unterschiedlichen Substraten abgeschieden und mit diversen Deck- und Zwischenschichten versehen waren, in verschiedenen Versuchsaufbauten unter unterschiedlichen Bedingungen (Temperaturen) durchgeführt. Das wesentliche Ergebnis war in den meisten Fällen das gleiche: die Fließspannung ist viel größer als die des Volumenmaterials und sie nimmt mit abnehmender Schichtdicke zu. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit ein verallgemeinertes Modellsystem betrachtet, das die wesentlichen Bestandteile enthält, um reale Systeme erklären zu können. Das Modellmaterial ist ein Metall mit kubisch-flächenzentrierter Kristallstruktur, der Struktur der in der Mikroelektronik und Mikrosystemtechnik am häufigsten gebrauchten Metalle (z. B. Aluminium, Kupfer, Silber oder Gold). Kubisch-flächenzentrierte Metalle sind bei Zimmertemperatur im allgemeinen duktil, Versetzungsgleiten ist der dominante Verformungsprozeß. Der Widerstand des Kristallgitters gegen die Versetzungsbewegung (die Peierls Spannung) ist nur gering und wird deshalb hier vernachlässigt. Quergleiten der Versetzungen wird nicht berücksichtigt, d. h. das Modellmaterial habe eine kleine Stapelfehlerenergie und die Temperatur sei entsprechend niedrig, so daß keine Quergleitprozesse aktiviert werden. Da das Material als elastisch isotrop behandelt wird, Spannungen auf den Schubmodul und Längen auf den Burgersvektor normiert werden, ist die einzige Materialkonstante, die in den Berechnungen direkt Eingang findet, die Querkontraktionszahl ν .²

Metallische dünne Schichten sind in der Regel polykristallin mit kolumnaren Körnern, deren Abmessungen von der gleichen Größenordnung wie die Schichtdicke sind. Sie ha-

¹Die Versetzungsbewegung ist meistens nicht nur in einer sondern in allen drei Raumrichtungen eingeschränkt, da die Metallschichten in der Regel polykristallin sind. Sie bestehen aus einzelnen Kristalliten, deren Größe in etwa so groß wie die Schichtdicke ist, und deren Grenzflächen für die Versetzungen Hindernisse darstellen.

²In den Berechnungen wurde $\nu = 0.3333$ verwendet. Die Variation von ν von Metall zu Metall ist aber nur gering.



ben überwiegend eine $\langle 111 \rangle$ Textur. Das verwendete Modellgefüge besteht deshalb aus Körnern, die sich über die gesamte Schichtdicke erstrecken. Untersucht werden Körner mit $\langle 111 \rangle$ oder $\langle 001 \rangle$ (der zweithäufigsten Texturkomponente) Orientierung. Die betrachteten Schichtdicken liegen zwischen 100nm und $2\mu\text{m}$, d. h. sie sind kleiner als die charakteristische Größe von Versetzungsstrukturen, die nach starker Verformung in Volumenmaterialien gefunden werden. Die Schichtdicke ist aber noch so groß, daß Versetzungsgleiten der wichtigste Verformungsprozeß ist. Bei noch kleineren Korngrößen im Bereich von einigen 10nm ist das Verhältnis der Korngrenzen zum Kornvolumen so groß, daß auch Diffusionsprozesse in den Korngrenzen zur Verformung beitragen.

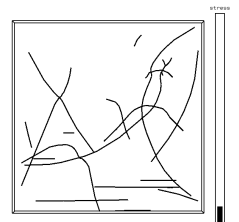
In dieser Arbeit wird eine Versetzungssimulation verwendet, mit deren Hilfe makroskopisch meßbare Größen, wie Fließspannungen und Verfestigungsraten, auf die Bewegung von mikroskopischen „Teilchen“, den Versetzungen, die man im (Elektronen-) Mikroskop beobachten kann, zurückgeführt werden. Versetzungen entstehen aus dem Zusammenwirken vieler Atome. Sie haben eine eigene Dynamik, und ihnen kann eine Masse zuordnet werden. Sieht man sich aber die Versetzungen genauer an (im Hochauflösungs- (Elektronen-) Mikroskop) wird man einzelne Atome feststellen, deren Anordnung im Kristallgitter entlang der Versetzungslinie gestört ist.³ Eine Versetzungssimulation ist daher nicht fundamental, da hier die Existenz und die Eigenschaften der Versetzungen als gegeben angenommen werden. Fundamental sind ab initio Methoden, die das kollektive Verhalten mehrerer Atome alleine aus den Eigenschaften eines einzelnen Atoms berechnen, wobei auch die Quantenmechanik benötigt wird. Die Systeme, die sich mit dieser Methode behandeln lassen, sind aber aufgrund des hohen Rechenaufwands viel zu klein, als daß man (heutzutage) damit die plastische Verformung eines makroskopischen Materials simulieren könnte. Die Simulation von größeren Systemen, die wenige Versetzungen enthalten können, ist mit Molekulardynamiksimulationen möglich, die mit vereinfachten Atompotentialen arbeiten und dadurch die direkte Berücksichtigung der Quantenmechanik umgehen. Makroskopische Zustandsgrößen lassen sich aber auch hiermit nicht bestimmen.

Versetzungssimulationen sind nicht dazu geeignet, exakte Zahlenwerte zu berechnen, da sie auf der Elastizitätstheorie kontinuierlicher Körper beruhen, die nur eine approximative Beschreibung der Wirklichkeit ist. So gibt es in der Elastizitätstheorie verschiedene (aber gleichwertige) Methoden, den inneren Abschneideradius einer Versetzung einzuführen.⁴ Je nach angewendetem Abschneideverfahren können sich in der Berechnung der Spannungen Unterschiede von bis zu 15% ergeben. Es hat sich aber gezeigt, daß die Behandlung einzelner Atome nicht immer notwendig ist und eine Simulation mit Versetzungen als elementare Teilchen ausreicht, um die plastische Verformung von Metallen zu simulieren.⁵ Insbesondere

³Genau genommen spalten die Versetzungen im realen Kristall in zwei Partialversetzungen auf, die von der Stapelfehlerenergie zusammengehalten werden, da dieser Zustand energetisch günstiger ist. Die Aufspaltung beträgt aber nur wenige Atomabstände und wird in der Simulation nicht berücksichtigt.

⁴Ein Abschneideradius muß eingeführt werden, da die Spannung sonst unendlich wird, wenn der Abstand von der Versetzung gegen null geht. Diese Divergenz ist natürlich unphysikalisch, da reale Kristalle nicht kontinuierlich sind, sondern aus Atomen bestehen.

⁵Hierfür müssen die Eigenschaften der Versetzungen bekannt sein, die z. B. in atomistischen Simulationen gewonnen werden können.



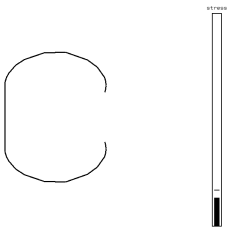
sind diese Simulationen gut zur Überprüfung von Versetzungsmodellen geeignet. Mit Hilfe einer Versetzungssimulation kann herausgefunden werden, welche mikroskopischen Mechanismen die beobachteten makroskopischen Verformungsphänomene verursachen. Aktuelle Forschungen haben ergeben, daß mit Versetzungssimulationen auch Reaktionen zwischen Versetzungen gut beschrieben werden können, obwohl hierbei Versetzungskerne miteinander reagieren, die aus diskreten Atomen bestehen. Genaueres zu Versetzungssimulationen und zur im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Simulationsmethode findet sich in Kapitel 3.

Mit einer Versetzungssimulation können Konfigurationen mit mehreren, beliebig geformten Versetzungen berechnet werden, was in einer analytischen Rechnung (mit Papier und Bleistift) nicht möglich ist, oder so viel Zeit in Anspruch nehmen würde, daß nur wenige Spezialfälle berechnet werden können. Insbesondere bieten sich dünne Schichten als Simulationsgegenstand an, da die Schichtdicke hier kleiner als die charakteristische Größe von Versetzungsnetzwerken im Volumenmaterial ist, wodurch die Anzahl der zu simulierenden Versetzungen minimiert wird. Die Simulation der Entstehung von Versetzungsnetzwerken, also das kollektive Zusammenwirken vieler Versetzungen mit dem Resultat der Erzeugung neuer Strukturen, ist auch mit heutigen Hochleistungscomputern noch nicht möglich.

In einer dünnen Schicht ergeben sich durch die einschränkende Geometrie typische Versetzungsanordnungen, die in dieser Arbeit mit der Simulation untersucht wurden. So wurde die Wechselwirkung einer beweglichen Versetzung mit an den Grenzflächen abgelegten Hindernisversetzungen für verschiedene Formationen untersucht. Des weiteren wurde die Aktivierung von Versetzungsquellen im Inneren eines Kornes studiert. Neben möglichst einfachen Konfigurationen, die nur die wesentlichen Bestandteile enthalten und sich noch (approximativ) analytisch nachvollziehen lassen, wurden komplexe Simulationen mit zufällig im Korn verteilten Versetzungsquellen durchgeführt, um Spannungs-Dehnungskurven zu berechnen. Die Ergebnisse der Simulationen werden in Kapitel 4 präsentiert.

In Kapitel 5 wird diskutiert, ob eine bestimmte Konfiguration den Betrag der experimentell gemessenen Fließspannung und deren Abhängigkeit von der Schichtdicke erklären kann und welche Erkenntnisse sich hieraus über die Plastizität dünner Schichten gewinnen lassen. Es zeigt sich, daß die plastische Verformung von dünnen Schichten besser verstanden werden kann, wenn davon ausgegangen wird, daß die Fließspannung hauptsächlich von der Erzeugung der Versetzungen kontrolliert wird und nicht von der Bewegung.

In den Schlußfolgerungen (Kapitel 6) werden die wichtigsten Resultate der Arbeit noch einmal zusammengefaßt, und es wird einen Ausblick über weiterführende Anwendungsmöglichkeiten der Versetzungssimulation und über Experimente zur Überprüfung der hier gewonnenen Modellvorstellungen gegeben.



Kapitel 2

Dünne Metallschichten

2.1 Dünnschichtexperimente

Die Bestimmung der mechanischen Eigenschaften dünner Metallschichten mit Schichtdicken von einigen Mikrometern und weniger erfordert besondere experimentelle Techniken. Die meisten Meßverfahren werden mit Schichten, die auf einem dickeren Substrat abgeschieden sind, durchgeführt. In einigen Experimenten wird das Substrat nach der Schichtherstellung entfernt, um eine freistehende Schicht zu untersuchen, in anderen wird das gesamte Schicht-Substrat-System untersucht. Die verwendeten Meßmethoden sind die Substrat-Krümmungsmethode, der Mikrozugversuch, Biegeversuche mit Mikrobalken [1] oder unter Vierpunktbelastung [2], der Bulge-Test [3, 4, 5, 6] und Nanoindentierung [7]. Auf die ersten beiden Methoden wird im folgenden genauer eingegangen, da die hiermit gewonnenen experimentellen Daten später mit den Simulationsergebnissen verglichen werden.

Eine Technik, die die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Substrat (in vielen Fällen Silizium) und Metallschicht ausnutzt, um mechanische Spannungen in der Schicht zu erzeugen, ist die Substrat-Krümmungsmethode [8, 9, 10, 11, 12, 13, 14]. Wie bei einem Bimetall ändert sich die Krümmung des Substrat-Schicht Verbundes bei einer Änderung der Temperatur. Aus der Krümmung, die sich z. B. über eine Laseroptik ausmessen läßt, kann auf die biaxiale Spannung in der Schicht rückgeschlossen werden [15].

Abbildung 2.1 zeigt typische Spannungs-Temperatur Zyklen einer jeweils auf einem Siliziumwafer (Si) abgeschiedenen $0.6 \mu\text{m}$ dicken Kupferschicht (Cu) und einer $0.5 \mu\text{m}$ Aluminiumschicht (Al). Ohne auf alle Details einzugehen (siehe hierzu z. B. [16]), seien die wichtigsten Bereiche kurz erläutert. Bei niedrigen Temperaturen (Zimmertemperatur) steht die Schicht unter Zugspannung. Beim Aufheizen (jeweils die untere Kurve in Abbildung 2.1) dehnt sich die Schicht stärker aus als das Si-Substrat, das einen kleineren Ausdehnungskoeffizienten besitzt. Die Zugspannung wird abgebaut und die Schicht geht in einen Druckspannungszustand über. Im ersten Teil des Zyklus ist die Verformung rein elastisch und ein linearer Spannungs-Temperatur Verlauf wird beobachtet (thermoelastischer Bereich). Beim weiteren Aufheizen tritt plastische Verformung auf. Bei niedrigen Temperaturen wird die plastische Verformung von gleitenden Versetzungen getragen, bei



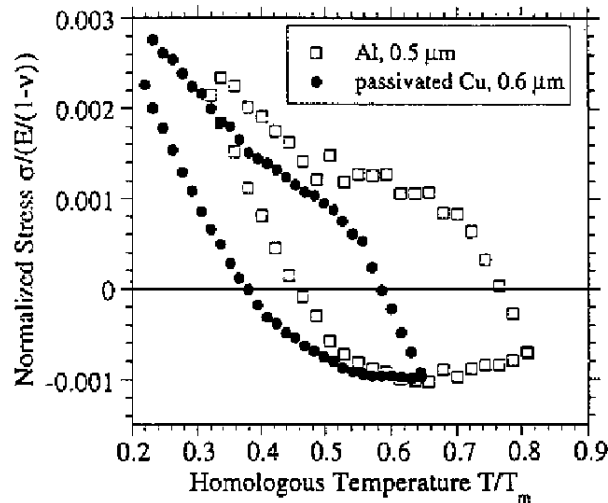
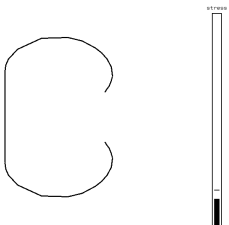


Abb. 2.1: Spannungs–Temperatur Zyklus für eine 0.6 μm dicke Cu Schicht (mit Passivierung) und eine 0.5 μm Al Schicht (mit natürlicher Oxidationsschicht) auf Si Substrat [13]. Aufgetragen ist die mit dem biaxialen E-Modul normierte Spannung über der homologen Temperatur.

hohen Temperaturen tragen vermutlich auch Diffusionsprozesse zur Spannungsrelaxation bei [17, 18]. Der Verlauf beim Abkühlen (obere Kurven) ist ähnlich, nur wird anstatt eines Spannungsmaximums eine kontinuierliche Spannungszunahme, die der Kaltverfestigung zugeschrieben wird, beobachtet. Mit abnehmender Temperatur wurde auch eine Zunahme der Versetzungsdichte festgestellt [10, 19]. Aufgrund der Kaltverfestigung läßt sich in einem Substrat–Krümmungsexperiment keine eindeutige Fließspannung definieren. Häufig wird hier die Spannung bei Zimmertemperatur angegeben, wobei dann allerdings unbekannt ist, wieviel plastische Dehnung und Verfestigung bereits stattgefunden hat.

Verglichen mit den Werten für das entsprechende Volumenmaterial sind die Spannungen in dünnen Schichten wesentlich größer. Für eine 590nm dicke Aluminiumschicht wurde z. B. eine Fließspannung bei Zimmertemperatur von 280 MPa gefunden [12], die Fließspannung von Volumenaluminium beträgt dagegen nur 20 MPa. Experimente anderer Gruppen für andere kubisch flächenzentrierte Metallschichten zeigen ebenfalls vergleichbar große Fließspannungen, sowie eine Zunahme dieser mit abnehmender Schichtdicke: Al [9, 11, 12], Al-0.5%Cu [10], Cu [13], Pb [20, 21], Ag [14], Au [22].

Mikrozugversuche haben gegenüber der Substrat–Krümmungsmethode den Vorteil, daß die Messungen bei konstanter Temperatur durchgeführt werden. Die untersuchten Schichten sind freistehend [23, 24] oder auf einem nachgiebigen Substrat abgeschieden [25, 26, 22, 27]. Die Bestimmung der Spannung in der Schicht kann direkt über die Zugapparatur erfolgen indem die am Substrat anliegende Spannung abgezogen wird [26] oder durch Messung der elastischen Dehnung in der Schicht (röntgenographisch über die Messung der elastischen Gitterdehnungen [28, 29]) und Umrechnung mit Hilfe der Elastizitätstheorie. Die totale Dehnung kann über die Zugapparatur oder über Dehnungsmeßstreifen auf der



Rückseite des Substrats ermittelt werden. Abbildung 2.2 zeigt die Spannungs–Dehnungs

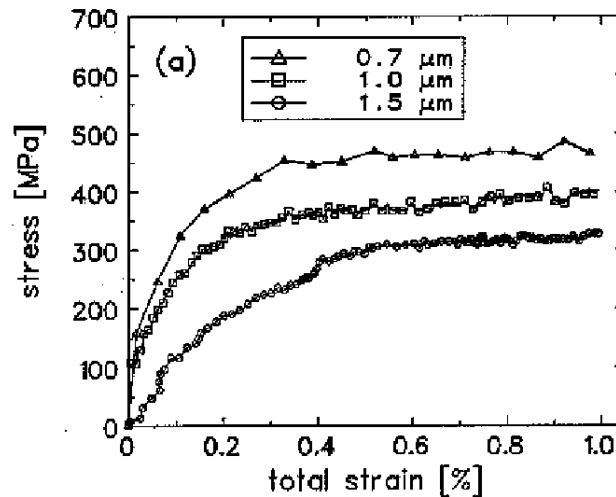
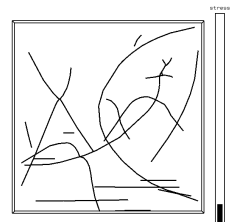


Abb. 2.2: Spannungs–Dehnungs Kurven für drei Kupferschichten unterschiedlicher Dicke jeweils auf Polyimid Substrat [29] Die Spannung ist über der totalen Dehnung aufgetragen.

Kurven für drei Kupferschichten unterschiedlicher Dicke auf Polyimid Substrat [29]. Nach einem anfänglichen elastischen Bereich verformt sich die Schicht plastisch. Im Bereich von 0.1% bis 0.5% totaler Dehnung nimmt die Spannung stark zu, für größere Dehnungen ist der Spannungsanstieg nur noch sehr klein. Die Versetzungsdichte steigt im Bereich von 0.1% bis 0.5% stark an, danach nur noch schwach (die Änderung der Versetzungsdichte kann in röntgenographischen Messungen über die Verbreiterung der Röntgenpeaks bestimmt werden) [30]. Abbildung 2.2 zeigt außerdem, daß die Spannung für eine gegebene Dehnung in dünneren Schichten größer ist.

Dünne Metallschichten zeigen häufig eine $\langle 111 \rangle$ Textur, d. h. die meisten Körner haben eine $\{111\}$ Ebene parallel zur Schichtebene [11, 14, 30, 31, 32]. Am zweit häufigsten kommen Körner mit einer $\langle 001 \rangle$ Orientierung vor [30, 31]. Wird die Dehnung in einer Schicht röntgenographisch bestimmt, kann die Dehnung und somit die Spannung in $\langle 111 \rangle$ und $\langle 001 \rangle$ Körnern getrennt bestimmt werden. In Messungen an Kupferschichten wurde festgestellt, daß die Spannung in $\langle 111 \rangle$ Körnern größer ist als in $\langle 001 \rangle$ Körnern [30, 31]. Der Grund dieses Unterschieds ist noch nicht verstanden, er kann weder durch die verschiedenen elastischen Konstanten noch durch das Verhältnis der Schmidfaktoren erklärt werden.

Oft sind die Metallschichten mit einer Passivierungsschicht oder natürlichen Oxidschicht versehen. Diese hat einen starken Einfluß auf die mechanischen Eigenschaften. Bei niedrigen Temperaturen werden in passivierten Schichten höhere Spannungen beobachtet (bis zu einen Faktor zwei [13]), bei Temperaturen über 300° ist der Verlauf der Spannungs–Temperatur Kurve im Substrat–Krümmungsexperiment gänzlich unterschiedlich [13]. Dies wird auf die Verhinderung der Oberflächendiffusion durch die Passivierungsschicht zurückgeführt [33]. Eine Passivierungsschicht verhindert auch die Bildung von Materialanhäufun-



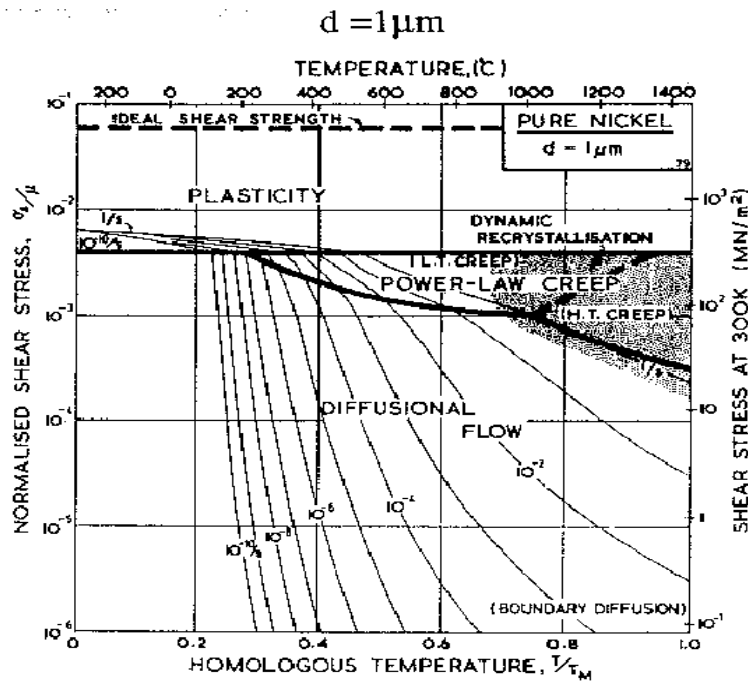


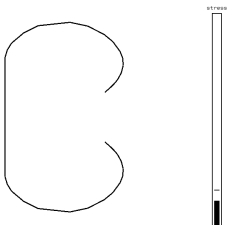
Abb. 2.3: Verformungsdiagramm für Nickel (Volumenmaterial) mit $1\mu\text{m}$ Korngröße [38]. Eingezeichnet sind die dominierenden Verformungsmechanismen für unterschiedliche Spannungen und Temperaturen.

gen (Hillocks) an der Schichtoberfläche (beobachtet für eine Al_2O_3 Passivierung auf einer Al Schicht [12]).

Die Zunahme der Fließspannung mit abnehmender Schichtdicke h ist in vielen Experimenten bestätigt worden, der Skalierungszusammenhang zwischen beiden Größen ist aber noch unklar. Da die Korngröße d mit der Schichtdicke skaliert [34] ist es schwierig, zwischen Korngrößen- und Schichtdickeneffekten zu unterscheiden. Venkatraman et al. konnten Schichten unterschiedlicher Dicke und konstanter Korngröße herstellen und haben hiermit Substrat-Krümmungsmessungen durchgeführt. Die Experimente zeigten eine zur inversen Schichtdicke proportionale Fließspannung [12, 11]. Auch andere Autoren beobachteten eine $1/h$ Abhängigkeit [20, 35, 13, 26, 16], ohne dabei jedoch auf die Korngröße einzugehen. Fast ebenso häufig wurde eine $1/\sqrt{d}$ Abhängigkeit konstatiert [5, 36, 13, 27, 37].

2.2 Fließspannungsmodelle

Die plastische Verformung in Metallen kann über verschiedene Mechanismen, wie Diffusion, Versetzungsklettern und Versetzungsgleiten, stattfinden. Welcher Mechanismus dominiert und die größte Dehnrage erzeugt, ist von der Temperatur und der Spannung abhängig und kann in sogenannten Verformungsdiagrammen dargestellt werden. Abbildung 2.3 zeigt ein



Verformungsdiagramm von polykristallinem Nickel (Volumenmaterial) mit einer Korngröße von $1\mu\text{m}$ als Beispiel für ein kfz Metall. Bei hohen Spannungen („shear stress“) wird die plastische Verformung von gleitenden Versetzungen getragen („plasticity“-Bereich). Bei mittleren Spannungen und mittleren bis hohen homologen Temperaturen ist der dominierende Verformungsprozeß das Versetzungskriechen („power-law creep“), bei niedrigen Spannungen das Diffusionskriechen („diffusional flow“). In dünnen Schichten gibt es aufgrund des größeren Korngrenzen und Grenzflächen zu Volumen Verhältnisses mehr Diffusionspfade, dennoch sind bei tiefen Temperaturen (Zimmertemperatur) die Diffusionsprozesse eingefroren, und die plastische Verformung wird alleine von gleitenden Versetzungen getragen.

Die Fließspannung wird durch die Nukleationsspannung der Versetzungen bzw. den Widerstand gegen das freie Versetzungsgleiten bestimmt. In Metallen ohne Legierungszusätze sind die wichtigsten Hindernisse für die Versetzungen die Korngrenzen (Polykristall, Feinkornhärtung), Grenzflächen (dünne Schichten) und andere Versetzungen (Kaltverfestigung). Die letzten beiden Punkte werden im folgenden Abschnitt diskutiert, Feinkornhärtung in Abschnitt 2.3.

2.2.1 Versetzungen in dünnen Schichten

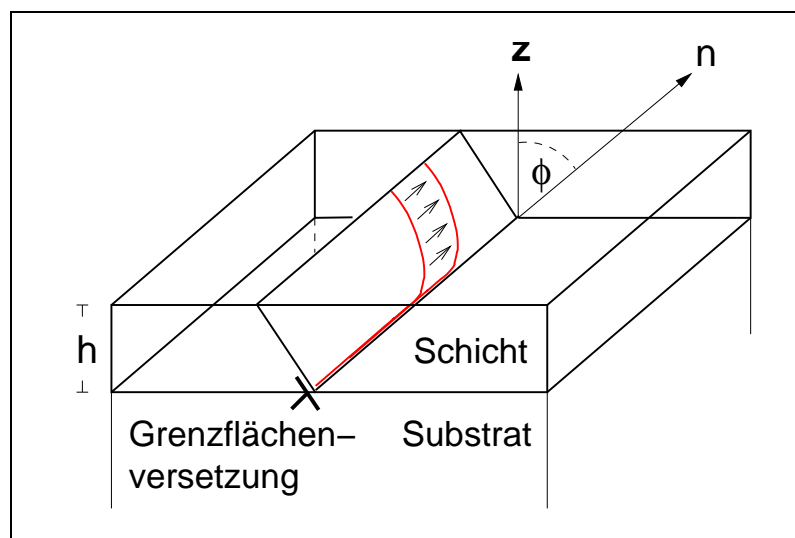
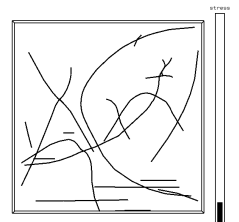


Abb. 2.4: Die Versetzungsbewegung in einer dünnen Schicht auf einem Substrat führt zur Erzeugung von Grenzflächenversetzungen an der Grenzfläche zwischen der Schicht und dem Substrat.

Abbildung 2.4 zeigt die Bewegung einer Versetzung in einer dünnen Schicht auf einem Substrat unter einer angelegten Spannung. Das vordere Versetzungssegment, welches sich von der Oberfläche bis zum Substrat erstreckt und als Threading-Segment bezeichnet wird, bewegt sich unter Beibehaltung der Form durch die Schicht. Hierbei wird an der Schicht-Substrat Grenzfläche (und an der Schicht-Passivierung Grenzfläche, wenn eine Passivierung vorhanden ist) eine Grenzflächenversetzung abgelegt, da die Versetzung weder



im Kristall enden, noch sich im Substrat (oder in der Passivierung) bewegen kann. Die Versetzung mit Burgersvektor b leistet im externen Spannungsfeld bei einer Verschiebung von Δx die Arbeit

$$W = \tau_{\text{res}} b \frac{h}{\sin \phi} \Delta x, \quad (2.1)$$

wobei τ_{res} die aufgelöste Schubspannung auf das Gleitsystem der Versetzung und $h/\sin \phi$ die auf die Gleitebene, die im Winkel ϕ in der Schicht liegt, projizierte Schichtdicke h ist (Abbildung 2.4). Die elastische Energie der Grenzflächenversetzung, die bei dieser Verschiebung erzeugt wird, ist [1]

$$E_{\text{el}} = \frac{1 - \nu \cos^2 \beta}{1 - \nu} \frac{b^2}{4\pi} \frac{2\mu_s \mu_f}{\mu_s + \mu_f} \ln \frac{\alpha h}{b} \Delta x. \quad (2.2)$$

μ_s und μ_f sind der Schubmodul von Substrat bzw. Schicht, ν ist die Querkontraktionszahl. Die Schichtdicke h wird als äußerer Abschneideradius des Spannungsfeldes eingeführt. Der innere Abschneideradius ist b , skaliert mit einer Konstanten α der Größenordnung eins. Gleichung (2.2) gibt die Energie einer gemischten Versetzung mit einem Winkel β zwischen Linienrichtung und Burgersvektor an. Die von der bewegten Versetzung geleistete Arbeit muß mindestens so groß sein, wie die Energie der erzeugten Grenzflächenversetzung. Durch Gleichsetzen von Gleichung (2.1) mit (2.2) folgt die kritische aufgelöste Schubspannung, die nötig ist, um die Versetzung durch die Schicht zu bewegen:

$$\tau_{\text{crit, nix}} = \frac{1 - \nu \cos^2 \beta}{1 - \nu} \frac{b}{4\pi} \frac{2\mu_s \mu_f}{\mu_s + \mu_f} \frac{\sin \phi}{h} \ln \frac{\alpha h}{b}. \quad (2.3)$$

Für eine Schicht mit Passivierung muß zusätzlich die Energie der Versetzung an der Schicht–Passivierung Grenzfläche aufgebracht werden, und es folgt [1]:

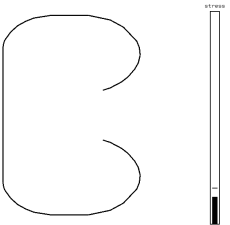
$$\tau_{\text{crit, nix}} = \frac{1 - \nu \cos^2 \beta}{1 - \nu} \frac{b}{4\pi} \frac{\sin \phi}{h} \left[\frac{2\mu_s \mu_f}{\mu_s + \mu_f} \ln \frac{\alpha h}{b} + \frac{2\mu_p \mu_f}{\mu_p + \mu_f} \ln \frac{\alpha' h_p}{b} \right] \quad (2.4)$$

mit der Dicke h_p , dem Schermodul μ_p und der Abschneiderkonstanten α' der Passivierungsschicht. Die kritische Schubspannung ist für die passivierte Schicht ungefähr zweimal so groß wie für eine Schicht mit freier Oberfläche. Das Nix Modell mit Gleichung (2.3) und (2.4) ist eine Übertragung der Modelle zum Einbau von Gitterfehlpassungsversetzungen in epitaktischen Schichten [39, 40] auf metallische Schichten unter mechanischen Spannungen.

Werden neben den Grenzflächen auch Korngrenzen als Hindernisse eingeführt (vergleiche hierzu Abschnitt 2.3), an denen Versetzungen abgelegt werden, so folgt nach Thompson [41] ein zusätzlicher Beitrag zur aufgelösten Fließspannung von

$$\tau_{\text{crit, thomp}} = \frac{1 - \nu \cos^2 \beta'}{1 - \nu} \frac{b \mu_f}{2\pi d} \ln \left(\frac{\alpha'' d}{b} \right), \quad (2.5)$$

mit der Korngröße d und dem Winkel β' zwischen Burgersvektor und Linienrichtung der an der Korngrenze abgelegten Versetzung. Die mit Gleichung (2.5) berechnete Fließspannung



ist vergleichbar mit der Fließspannung nach Gleichung (2.4), da in beiden Fällen die Energie für zwei Versetzungen an den Korngrenzen bzw. Grenzflächen bei der Versetzungsbewegung aufgebracht werden muß. Ähnliche Ergebnisse für kritische Spannungen wie Gleichung (2.4) und (2.5) wurden auch von Chaudhari [42] und Kuan und Murakami [21] hergeleitet.

Die Grenzflächenversetzungen wechselwirken über ihr Spannungsfeld mit Versetzungen auf anderen Gleitebenen und tragen somit zur Kaltverfestigung bei. Hierauf wird im nächsten Abschnitt genauer eingegangen.

2.2.2 Kaltverfestigung

Wird ein Einkristall verformt, so erhöht sich die Versetzungsdichte. Dadurch wird es vermehrt zu Versetzungsreaktionen wie Versetzungsknotenbildungen und Schneidprozessen kommen, die Anzahl der Hindernisse vergrößert sich. Folglich steigt die Fließspannung mit zunehmender plastischer Dehnung. Die Spannung, um eine Versetzung an zwei Hindernissen mit Abstand l vorbeizubewegen, ist näherungsweise gegeben mit

$$\tau_c = \frac{\alpha\mu b}{l}. \quad (2.6)$$

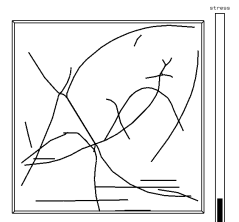
α ist eine numerische Konstante zwischen 0.3 und 0.6 (je nach Art der auftretenden Versetzungswechselwirkungen). Der Abstand zweier Versetzungen ist im Mittel umgekehrt proportional zur Wurzel der Versetzungsdichte ρ . Hiermit folgt

$$\tau_{wh} = \alpha\mu b\sqrt{\rho}. \quad (2.7)$$

Gleichung (2.7) beschreibt die Verfestigung im Bereich II der Spannungsdehnungskurve für Volumenmaterialien [43, S. 232]. In diesem Bereich werden Versetzungszellstrukturen mit Gebieten, die nahezu frei von Versetzungen sind und Gebieten mit erhöhter Versetzungsdichte beobachtet. Die charakteristische Größe der Versetzungsstrukturen ist größer als die Dicke der untersuchten dünnen Schichten. Versetzungszellstrukturen wurden in dünnen Schichten nicht beobachtet [44]. Es ist daher unklar, ob Gleichung (2.7) auch für die Verfestigung in dünnen Schichten herangezogen werden kann.

Da in dünnen Schichten bei der Versetzungsbewegung Grenzflächenversetzungen abgelegt werden, wird deren Dichte im Laufe der Verformung zunehmen, und die Wechselwirkung der Grenzflächenversetzungen mit den beweglichen Threading-Segmenten vermehrt zur Verfestigung beitragen. Hierzu gibt es Berechnungen von Nix [45], die eine hohe Verfestigung durch die Wechselwirkung von Threading-Versetzungen mit Grenzflächenversetzungen auf kreuzenden Gleitebenen vorhersagen. Allerdings haben Versetzungssimulationen für (001) texturierte Schichten gezeigt, daß die Näherungen in [45] zu vereinfachend sind, und die Hindernisstärke nur gering ist [46, 47]. In Abschnitt 4.1.4 werden diese Simulationen für die in dünnen Schichten vorkommende $\langle 111 \rangle$ Textur durchgeführt.

Die kritische Spannung, um Versetzungen durch Anordnungen von Versetzungen auf parallelen Gleitebenen in viellagigen dünnen Schichten zu bewegen, wurde von Anderson und Kreidler berechnet [48]. In einer zweidimensionalen Modellgeometrie fanden sie,



daß eine Scherung parallel zu den Lagen Verfestigung verursacht, wohingegen eine Scherung in senkrechter Richtung eine Erweichung zur Folge hat. Die Wechselwirkungen zwischen Grenzflächenversetzungen und einem geraden Threading-Segment auf einer parallelen Gleitebene in einer dünnen Schicht wurden von Weihnacht und Brückner [49] untersucht. Diese Wechselwirkungen tragen zur Verfestigung bei, können jedoch alleine genommen nicht die experimentellen Fließspannungen erklären [49]. Wechselwirkungen zwischen Grenzflächenversetzungen und mobilen Versetzungen mit realistischen Linienformen für diese und ähnliche Konfigurationen wurden auch mit dieser Versetzungssimulation durchgeführt. Die Ergebnisse werden in Abschnitt 4.1.1 und 4.1.2 präsentiert.

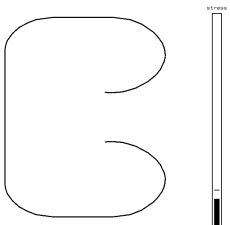
2.3 Polykristalline Materialien und metallische Multilagenschichten

Die Mikrostruktur polykristalliner Volumenmaterialien und metallischer Viellagenschichten (Multilayer) gleicht in einigen Aspekten der dünner Metallschichten: Die Korngrößen polykristalliner Metalle reichen von wenigen Nanometern bis zu einigen Millimetern und decken damit auch den Korngrößenbereich dünner Schichten ab. Metallische Multilayer bestehen aus einer wiederholten Abfolge dünner Schichten unterschiedlicher Materialien (z.B. Cu/Ni) mit Lagendicken, die ebenfalls im Bereich der dünnen Schichten liegen. Ein Vergleich der experimentellen Daten und der zur Beschreibung der plastischen Eigenschaften verwendeten Modelle kann deshalb zum Verständnis der Verformung dünner Schichten beitragen.

2.3.1 Hindernisstärke einzelner Korngrenzen

Korngrenzen sind Hindernisse für Versetzungen, da die Kristallstruktur an der Korngrenze gestört ist, und sich die Orientierung des Kristallgitters ändert. Wenn sich eine Versetzung durch eine Korngrenze bewegt (insofern sie die gestörte Zone überwinden kann), ändert sich dabei in der Regel das Gleitsystem (siehe Abbildung 2.5). Ändert sich der Burgersvektor, so muß aufgrund der Burgersvektorerhaltung in der Korngrenze eine Versetzung mit dem Differenzburgersvektor abgelegt werden. Bei einer Änderung der Gleitebene muß gegebenenfalls noch eine Versetzung zur Erhaltung der Kontinuität der Versetzungslinie in der Korngrenze deponiert werden. Durch Berechnung der Energie der in der Korngrenze abgelegten Versetzungen kann eine untere Schranke für die Hindernisstärke einer speziellen Korngrenze berechnet werden (Anhang A). Nach diesem Modell ist die Hindernisstärke einer 70.5° Zwillingsgrenze genauso groß wie die über alle möglichen Orientierungen gemittelte Hindernisstärke der Korngrenze zwischen zwei $\langle 111 \rangle$ oder zwei $\langle 001 \rangle$ orientierten Körnern. Die gemittelte Hindernisstärke der Korngrenze zwischen einem $\langle 111 \rangle$ und einem $\langle 001 \rangle$ Korn ist dagegen doppelt so groß (Anhang A).

Neben der Transmission können die Versetzungen auch von den Korngrenzen absorbiert werden [51]. Die Korngrenzen können auch als Versetzungsquellen auftreten, insbesondere



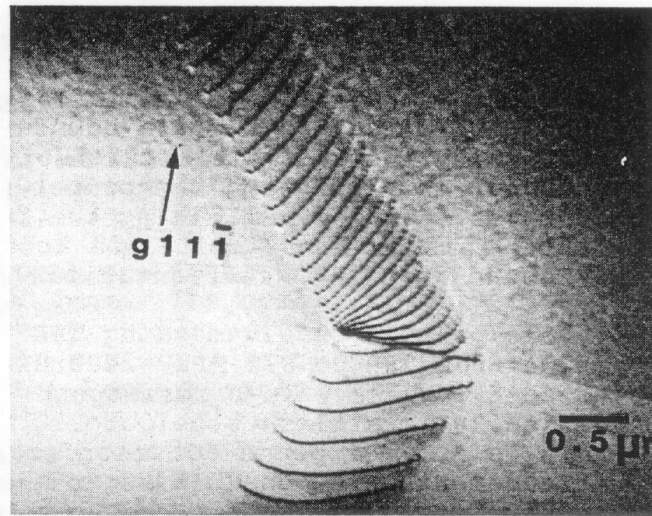


Abb. 2.5: Transmission von Versetzungen durch eine $\Sigma = 3$, $70.5(214)_1/[011]$ Korngrenze (austenitischer Stahl). Das Gleitsystem ändert sich von $[10\bar{1}]_1(111)_1$ im ersten Korn nach $[01\bar{1}]_2(111)_2$ im zweiten. Der Burgersvektor bleibt gleich, der Winkel zwischen den Schnittlinien der Gleitebenen beträgt $= 27.6^\circ$, d. h. die Versetzung wird beim Durchgang durch die Korngrenze verlängert [50].

wurde die Emission von Versetzungen aus Stufen (ledges) in der Korngrenze beobachtet [52, 53].

2.3.2 Hall–Petch–Modelle

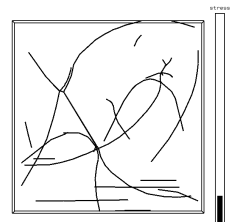
Die Abhängigkeit der Fließspannung σ polykristalliner Metalle von der Korngröße d wird bei niedrigen Temperaturen gut durch die Hall–Petch Gleichung [54, 55] beschrieben:

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{k_{\text{HP}}}{\sqrt{d}}. \quad (2.8)$$

σ_0 ist die Reibspannung (Peierls–Spannung), die den Widerstand des Kristalls gegen Versetzungsbewegung angibt, k_{HP} ist die Hall–Petch Konstante. Obwohl diese Gleichung für viele Materialien über einen weiten Korngrößenbereich experimentell bestätigt wurde [56], [43, S. 189], ist die physikalische Deutung noch umstritten. Die ursprüngliche Modellvorstellung zur Hall–Petch Gleichung geht davon aus, daß Versetzungen gegen die Korngrenzen laufen und dort Versetzungsaufstaus bilden. Die Spannung an der Korngrenze muß einen kritischen Wert τ_b^* überwinden, damit die Verformung im Nachbarkorn fortgesetzt wird (durch Transmission der Versetzung durch die Grenze oder Aktivierung einer Versetzungsquelle im Nachbarkorn). An der Spitze des Versetzungsaufstaus gibt es eine Spannungskonzentration:

$$\tau_b = N\tau_s. \quad (2.9)$$

$\tau_s = \tau_{\text{app}} - \tau_0$ ist die aufgelöste Schubspannung τ_{app} abzüglich der Reibspannung τ_0 , N die Anzahl der Versetzungen im Aufstau. N ist proportional zur Korngröße d dividiert durch



den mittleren Abstand der Versetzungen l . Da l umgekehrt proportional zur angelegten Spannung ist, folgt (für einen doppelseitigen Versetzungsaufstau gerader Schraubenversetzungen):

$$N = \frac{\pi\tau_s d}{4\mu b}. \quad (2.10)$$

Setzt man Gleichung (2.10) in (2.9) ein und löst nach der angelegten Spannung auf, folgt für die Fließspannung:

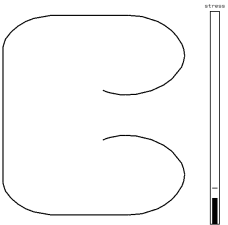
$$\tau_{\text{app}}^* = \tau_0 + \sqrt{\frac{4\tau_b^* \mu b}{\pi d}} = \tau_0 + \frac{K_{\text{HP}}}{\sqrt{d}} \quad (2.11)$$

Wird diese Gleichung durch den Schmidfaktor $m = \tau/\sigma$ dividiert, ergibt sich Gleichung (2.8) [43, S. 189]. Je nach Art der Aufstaus (Einseitig oder zu beiden Seiten des Korn), des Charakters der Versetzungen im Aufstau und der Linienform ergeben sich andere Hall-Petch Koeffizienten, die für die analytisch lösbaren Fälle in Tabelle 2.1 zusammengefaßt sind. Wird τ_b^* in Einheiten des Schubmoduls μ angegeben, so ist k_{HP} proportional zu μ , was auch für kfz Metalle beobachtet wird [56].

$K_{\text{HP}} = c_{\text{HP}} \sqrt{\mu b \tau_b^*}$		
	Schrauben	$c_{\text{HP}} = \sqrt{\frac{1}{\pi}}$
Einfacher Aufstau	Stufen	$c_{\text{HP}} = \sqrt{\frac{1}{\pi(1-\nu)}}$
	gemittelt	$c_{\text{HP}} = \sqrt{\frac{2-\nu}{2\pi(1-\nu)}}$
Beidseitiger Aufstau		$c_{\text{HP}}^{\text{beidseitig}} = 2c_{\text{HP}}^{\text{einfach}}$
Aufstau von Versetzungsringen	gemittelt	$c_{\text{HP}}^{\text{ring}} = \pi c_{\text{HP}}^{\text{einfach}}$

Tab. 2.1: Hall-Petch Koeffizienten für einseitige und beidseitige Aufstaus gerader Versetzungen unterschiedlichen Charakters sowie für Aufstaus von Versetzungsringen [57]

Die Zunahme der Fließspannung mit abnehmender Korngröße kann auch auf die Kaltverfestigung (Gleichung (2.7)) zurückgeführt werden [58]. Die Versetzungsdichte setzt sich hiernach aus statistischen Versetzungen und geometrisch notwendigen Versetzungen zusammen. Die Dichte der geometrisch notwendigen Versetzungen ist umgekehrt proportional zur Korngröße, womit nach Einsetzen der Dichte in Gleichung (2.7) ein zu (2.8) analoger Ausdruck folgt [58]. Andere Interpretationen der Feinkornhärtung berufen sich ebenfalls auf die Kaltverfestigung [59], auf Korngrenzen als Versetzungsquellen [60] oder beschreiben den



Polykristall als Verbundwerkstoff mit weichen Gebieten im Korninneren und einer höheren Fließspannung an den Korngrenzen [61] (hier folgt allerdings eine $1/d$ Abhängigkeit der Fließspannung).

Bei sehr kleinen Korngrößen sind die Gleichung (2.8) zu Grunde liegenden Versetzungsmodelle nicht mehr sinnvoll: wird die Anzahl der Versetzungen im Aufstau nach Gleichung (2.10) kleiner als zwei, was für Korngrößen $d < 100\text{nm}$ der Fall ist, gibt es weder eine Spannungskonzentration noch einen Versetzungsaufstau. Eine andere Grenze wird durch die Versetzungsquellen, die die Versetzungen im Aufstau erzeugen, gegeben. Die Größe der Versetzungsquellen wird durch die Korngröße beschränkt. Bei kleinen Körnern ($d < 15\text{nm}$) ist die Aktivierungsspannung der Versetzungsquellen größer als die Hall-Petch Spannung [56]. Da bei nanokristallinen Materialien das Verhältnis von Korngrenzfläche zu Kornvolumen viel größer ist, können auch bei relativ niedrigen Temperaturen Diffusionsprozesse zur Spannungsrelaxation beitragen (siehe Abschnitt 2.3.3) [62].

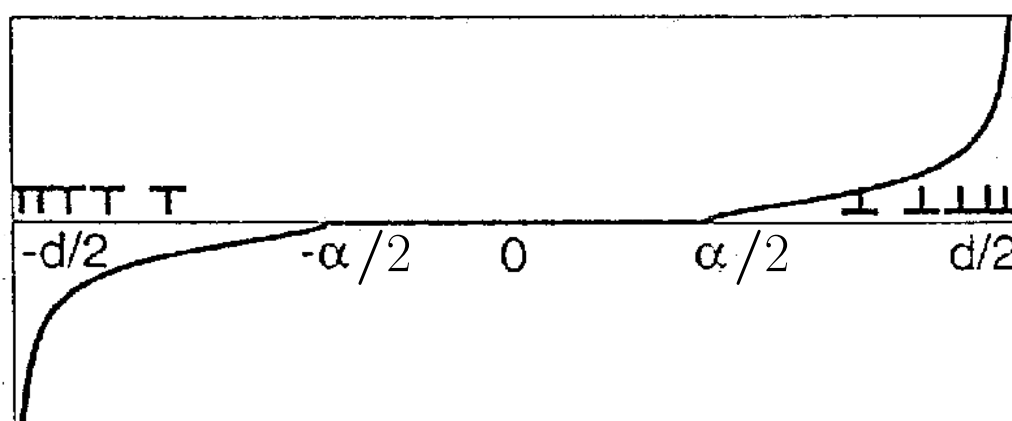


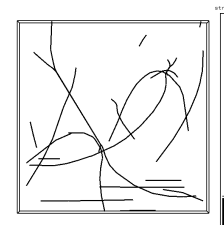
Abb. 2.6: Versetzungsaufstau mit Versetzungsquelle. Beim Erhöhen der angelegten Spannung auf die Quellenaktivierungsspannung entsteht innerhalb des Korns ein versetzungsfreier Bereich von $-\alpha/2$ bis $\alpha/2$ [63]

Der Aktivierung der Versetzungsquellen wird in einer Erweiterung des Hall-Petch Modells von Friedman und Chrzan [63] Rechnung getragen: Da Versetzungen erst bei Erreichen der Quellenaktivierungsspannung τ_{source} erzeugt werden, gibt es um die Versetzungsquelle (in der Mitte des Korns) eine versetzungsfreie Zone der Länge $\alpha = (\tau_{\text{source}}/\tau_{\text{app}})^2 d$ ([63] und Abbildung 2.6). Die Anzahl der Versetzungen ist jetzt gegeben mit

$$N = \frac{\pi\tau_s}{4\mu b}(d - \alpha) \quad (2.12)$$

(vgl. mit Gleichung (2.10)). Wird dieser Ausdruck in (2.9) eingesetzt und nach τ_{app} aufgelöst, so folgt für die Fließspannung im Falle eines beidseitigen, symmetrischen Schraubenversetzungsaufbaus [63]:

$$\tau_{\text{app}}^* = \sqrt{\frac{4\mu b\tau_b^*}{\pi d} + \tau_{\text{source}}^2} \quad (2.13)$$



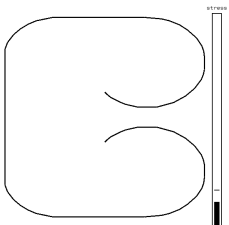
2.3.3 Experimente zur Feinkornhärtung

Viele Experimente wurden durchgeführt, um die Hall–Petch Beziehung für kleine Korngrößen zu überprüfen [64]. Es wurde festgestellt, daß nanokristalline Materialien mit Korngrößen von $d \approx 20\text{nm}$ und weniger geringere Fließspannungen haben, als durch Extrapolation von Gleichung (2.8) zu kleinen Korngrößen berechnet. In einigen Fällen wurde eine Abnahme der Fließspannung mit abnehmender Korngröße gemessen (inverser Hall–Petch Effekt). Viele dieser Ergebnisse sind Meßartefakte, bedingt durch die Herstellung der nanokristallinen Proben, diejenigen, die jedoch einer kritischen Prüfung standhalten, zeigen, daß es eine Abnahme der Fließspannung bei Korngrößen $d < 10\text{nm}$ gibt [65]. Atomistische Simulationen unterstützen diese Beobachtungen: es wurde berechnet, daß für $d < 10\text{nm}$ ein großer Anteil der Verformung auf Korngrenzgleiten zurückzuführen ist [66, 67, 68].

Die Hall–Petch Beziehung ist für Korngrößen $d > 1\mu\text{m}$ gut bestätigt, ebenso zeigen viele Experimente, daß es unterhalb $d = 100\text{nm}$ eine Erweichung gibt. Für den dazwischen liegenden Bereich gibt es nur wenig experimentelle Daten. Die Daten innerhalb dieses Bereiches werden in den meisten Veröffentlichungen gut durch eine $1/\sqrt{d}$ Abhängigkeit angefitet, jedoch werden hierfür häufig unterschiedliche Fitparameter für unterschiedliche Korngrößenbereiche benutzt. Gertsman et al. [69] haben die Korngrößenabhängigkeit von Kupfer für Korngrößen von 30nm bis $180\mu\text{m}$ untersucht und eine Abweichung von der Hall–Petch Beziehung bereits für Korngrößen $d < 1\mu\text{m}$ beobachtet (für $d > 1\mu\text{m}$ gilt $\sigma = 92\text{MPa} + 0.399\text{MPa m}^{1/2} d^{-1/2}$). Mertz und Dahlgren [70] fanden dagegen, daß sich ihre experimentellen Daten für Kupfer im Korngrößenbereich von 56nm bis $20\mu\text{m}$ durch die Hall–Petch Gleichung beschreiben lassen (mit $\sigma = 6.39\text{MPa} + 0.149\text{MPa m}^{1/2} d^{-1/2}$). Interessant und im Einklang mit Anhang A ist, daß Zwillingsgrenzen gleichwertig zu den Korngrenzen angesehen wurden. So wurde für eine Probe mit einer Korngröße von $d = 523\text{nm}$ und einem Zwillingsgrenzenabstand $d_{\text{zg}} = 30\text{nm}$ ein mittlerer Grenzenabstand von $\bar{d} = 56\text{nm}$ bestimmt. Die gemessenen Fließspannungen waren von der gleichen Größenordnung wie die Fließspannungen dünner Metallschichten: Für Kupfer mit einer Korngröße von $d = 1\mu\text{m}$ wurde eine Fließspannung von $\sigma_{0.1\%} \approx 270\text{MPa}$ festgestellt [69], Mertz und Dahlgren bestimmten für Kupfer mit einem gemittelten Grenzenabstand von $\bar{d} = 56\text{nm}$ ($d = 523\text{nm}$) eine Fließspannung $\sigma_{0.2\%} = 481\text{MPa}$ [70].

Ähnliche Beobachtungen werden für Nanomultilayer gemacht. Die Multilayer bestehen aus abwechselnden Schichten zweier Metalle (z. B. Cu/Nb oder Cu/Ni [71]), die jeweils nur wenige Nanometer Dicke haben und epitaktisch aufeinander abgedichtet sind. Die Fließspannung von Multilayern mit Schichtperioden größer als 100nm wird gut durch die Hall–Petch Beziehung beschrieben, wenn hier anstatt der Korngröße die Schichtperiode eingesetzt wird. Die Hall–Petch Konstante, die aus einem Fit der Hall–Petch Gleichung (2.8) an die experimentellen Daten gewonnen wird, ist vergleichbar mit der für eine polykristalline Probe aus einem Material, σ_0 ist jedoch deutlich größer [72, 73, 71, 74].¹ Für Multilayer

¹Experimentell wird meistens die Härte H der Nanomultilayer bzw. Nanokristalle mittels Nanoindentierung gemessen und hieraus mit $\sigma_{\text{yield}} = H/3$ die Fließspannung berechnet. Da die plastische Verformung bei der Nanoindentierung nicht unerheblich ist (ca. 7.5%), könnte auch das Meßverfahren zum großen σ_0 beigetragen haben.



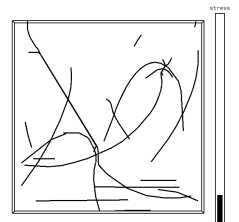
mit polykristallinen Schichten wurden größere Fließspannungen gemessen als für Multilayer, die aus einkristallinen Schichten bestehen [73]. Die experimentell bestimmte Fließspannung für Schichtsysteme mit Schichtperioden kleiner als 100nm ist geringer als vom Hall–Petch Modell vorhergesagt. Eine Erklärung hierfür ist die Änderung der Grenzflächeneigenschaften mit abnehmender Schichtperiode: Bei epitaktischen Schichten gibt es aufgrund der unterschiedlichen Gitterparameter Kohärenzspannungen in den einzelnen Lagen, die normalerweise durch Ablage von Versetzungen in den Grenzflächen abgebaut werden. Die Grenzflächenversetzungen hindern die beweglichen Versetzungen am Durchtritt durch die einzelnen Lagen und stärken somit die Grenzflächen. Bei sehr kleinen Schichtperioden ($< 10\text{nm}$) werden keine Versetzungen in den Grenzflächen abgelegt, da die Energie, die zur Erzeugung der Versetzungen aufgebracht werden muß, größer ist als die Energie, die durch Abbau der Kohärenzspannung frei wird. Die beweglichen Versetzungen können dann leichter durch die Grenzflächen durchtreten, die Fließspannung sinkt [75]. Zumindest für die Multilayer scheint die Versetzungsaufstauinterpretation des Hall–Petch Modells bestätigt: Hier wurden Versetzungsaufstaus in den einzelnen Schichten und das Fortschreiten der Versetzungen von Schicht zu Schicht im Transmissionselektronenmikroskop beobachtet [75].

2.4 Direkte Beobachtung von Versetzungen in dünnen Metallschichten

Versetzungen lassen sich im Transmissionselektronenmikroskop (TEM) direkt beobachten. Hierfür muß die Probe gedünnt werden (auf ca. 200nm), damit sie für den Elektronenstrahl transparent wird. Im TEM werden daher immer Dünnschichtproben, die meistens freie Oberflächen haben, untersucht. Je höher die Energie des Elektronenstrahls, desto dickere Proben können durchstrahlt werden, allerdings entstehen dadurch vermehrt Strahlenschäden. Strahlenschäden und die Probengeometrie beeinflussen die Dynamik der Versetzungen ebenso wie eine Aufheizung der Probe durch den Elektronenstrahl. Letzteres kann ausgenutzt werden, um mechanische Spannungen in den untersuchten Schichten zu erzeugen und so die Versetzungsbewegung in situ zu beobachten. Alternativ kann die Temperatur mit einer eingebauten Heizeinheit gesteuert werden, oder die mechanischen Spannungen können direkt über eine Mikrozugapparatur aufgebracht werden.

TEM Beobachtungen können Aufschluß darüber geben, ob die Annahmen der Fließspannungsmodelle dünner Schichten zutreffend sind. Das Nix Modell (Gleichung (2.4)) erfordert Versetzungen, die an den Grenzflächen abgelegt werden. Diese wurden in Experimenten, in denen die Schicht parallel zur Schichtnormalen bestrahlt wird („plan view“ Geometrie), beobachtet [21, 10, 11, 76, 77, 49].² Die Grenzflächenversetzungen verlaufen entlang unterschiedlicher Richtungen, die in $\langle 111 \rangle$ orientierten Körnern im 60° Winkel zueinander

²In den Referenzen [10] und [11] wird eine identische TEM Aufnahme einmal als Mikrostruktur einer Al–0.5%Cu Schicht [10] und einmal als Mikrostruktur einer reinen Al [11] Schicht präsentiert, so daß es insgesamt fraglich ist, ob die beobachteten Grenzflächenversetzungen wirklich repräsentativ für die untersuchten Schichten sind.



stehen [21,10,76], d. h. Versetzungen unterschiedlicher Gleitsysteme haben am Verformungsprozeß teilgenommen. Große Körner zeigten die stärkste Versetzungsaktivität [21, 11]. Es wurde beobachtet, daß Grenzflächen nach wenigen Sekunden Bestrahlung mit dem Elektronenstrahl verschwinden [21, 11, 78, 79]. Als Ursache hierfür wird eine Dissoziierung des Versetzungskerns oder eine Bewegung der Versetzung durch die Oxidschicht an die freie Oberfläche angegeben.

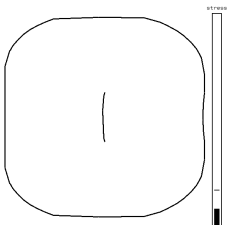
In in situ TEM-Experimenten mit Querschnittsproben einer Al Schicht auf Si mit einer SiO_x Zwischenschicht [80], bzw. einer Cu Schicht auf SiN_x/Si [81, 82] konnten keine Grenzflächenversetzungen beobachtet werden. Die sich in der Schicht bewegenden Versetzungen wurden dagegen von den Grenzflächen angezogen. Das Verschwinden der Versetzungen an den Grenzflächen wird mit der Existenz einer inkohärenten Grenzfläche zwischen Metallschicht und amorphem Substrat erklärt, von der die Versetzungen absorbiert werden können. Im Gegensatz dazu wurden in einer epitaktisch abgeschiedenen Aluminiumschicht auf einem Al_2O_3 Substrat in Querschnittsansicht durch die Schicht laufende Threading-Versetzungen, die Grenzflächenversetzungen deponieren, beobachtet [83]. Hier werden wahrscheinlich auch Gitterfehlpasungsversetzungen, die in der Grenzfläche liegen, zur Erhöhung der Hindernisstärke beitragen.

Kobrinisky [84, 85] und Dehm [81] beobachteten bei tiefen Temperaturen (Zimmertemperatur) ruckartige Versetzungsbewegungen, die auf Versetzungshindernisse (Waldversetzungen [84]) in der Schicht rückschließen lassen. Auch wurde die Aktivierung von Versetzungsquellen im Innern der Schicht beobachtet (Abbildung 2.7) [86, 87, 88, 81].

Ein indirekter Nachweis, daß Versetzungsquellen in dünnen Schichten eine limitierende Rolle bei der Verformung stellen könnten, wurde von Coupeau [89] gegeben. Sie untersuchten die Gleitlinienstrukturen von Goldschichten auf LiF Einkristallen nach Druckversuchen mittels Atomkraftmikroskopie. Ohne Beschichtung sind die Gleitlinien gleichmäßig verteilt, mit einer 150nm dicken Goldbeschichtung stellt sich eine heterogenere Struktur ein, es werden weniger, dafür tiefere Stufen beobachtet. Da sich die Stufenhöhe auf die Anzahl der Versetzungen, die auf der Gleitebene gelaufen sind, zurückführen läßt, kann geschlußfolgert werden, daß die Goldschicht entweder die Transmission der Versetzungen aus dem LiF Kristall verhindert, oder nur wenige Versetzungsquellen in der Goldschicht mehrfach aktiviert werden.

Die Versetzungsbewegung in dünnen Schichten ist weitestgehend reversibel [90] und nach dem Durchfahren mehrerer Temperaturzyklen wird keine Erhöhung der Versetzungsdichte beobachtet [21]. Versetzungsdichten in dünnen Schichten liegen im Bereich $10^{14} - 10^{15} \text{m}^{-2}$ [84, 44, 13, 82].

Es gibt eine Reihe von TEM Untersuchungen über Versetzungen in epitaktischen Halbleiterschichten (siehe z. B. [91]). Die Versetzungsstruktur und die Versetzungsbewegung ist in epitaktischen Halbleiterschichten jedoch völlig anders als in polykristallinen Metallschichten mit kfz Kristallstruktur, so daß sich diese Untersuchungen nicht direkt übertragen lassen. Die Versetzungsdichten sind in Halbleiterstrukturen mehrere Größenordnungen kleiner als in metallischen Schichten. Threading-Versetzungen in Halbleiterschichten entstehen beim Herstellungsprozeß, indem im Substrat existierende Versetzungen in der Schicht weitergeführt werden. Versetzungen, die sich in der Schicht bewegen, können daher ins Sub-



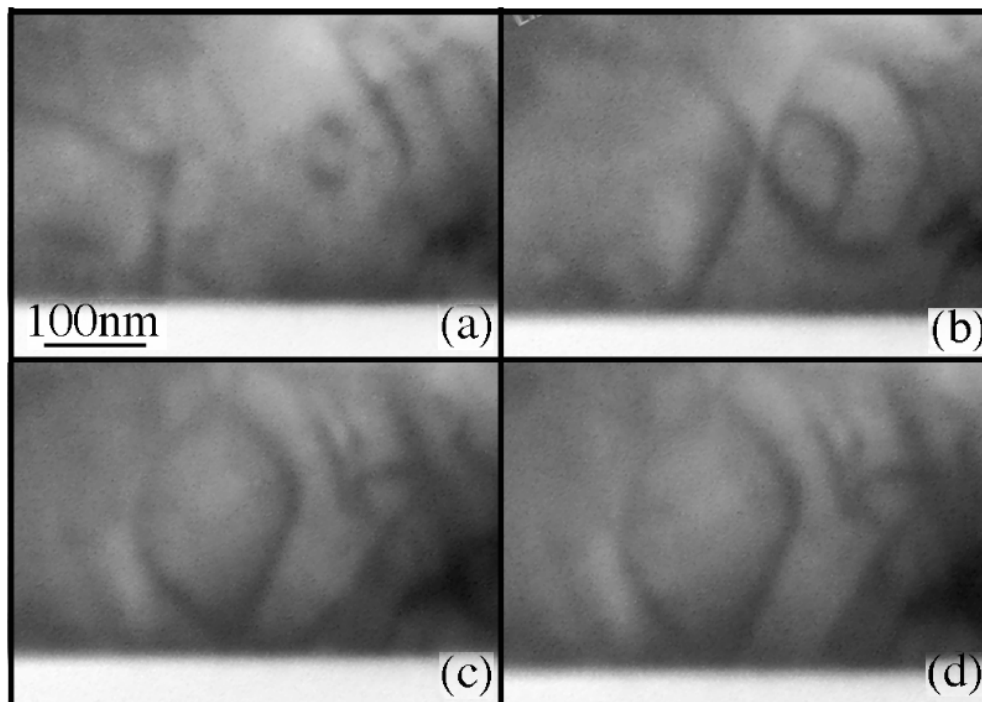
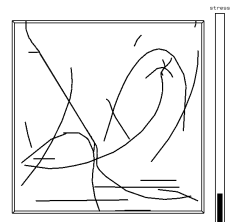


Abb. 2.7: In situ TEM Beobachtung der Aktivierung einer Versetzungsquelle im Korninneren [81]. Mehrere Versetzungsringe entstehen aus einem Punkt in der Mitte des Bildes und expandieren in Richtung der Grenzflächen

strat ausweichen [92]. Da im Halbleiter bei der Versetzungsbewegung kovalente Bindungen aufgebrochen werden müssen, ist der temperaturabhängige Widerstand des Kristallgitters gegen Versetzungsbewegung viel größer als bei kfz Metallen [93], wodurch eine andere Dynamik der Versetzungen resultiert. Simulationen von Versetzungen in Halbleiterschichten wurden durchgeführt, um die Entwicklung von Versetzungsstrukturen besser zu verstehen. Auf die Simulationen wird in Abschnitt 3.1.5 gesondert eingegangen.

2.5 Zusammenfassender Vergleich von experimentellen Daten und Modellen

Die Fließspannung dünner Metallschichten mit Schichtdicken zwischen einigen μm und 100nm ist bis zu einer Größenordnung größer als die der entsprechenden Volumenmaterialien und nimmt mit abnehmender Schichtdicke zu. Das Skalierungsgesetz ist noch nicht eindeutig bestimmt, es wird eine $1/h$ bzw. $1/\sqrt{h}$ Abhängigkeit der Fließspannung vorgeschlagen. Auch konnte bisher nur in wenigen Experimenten die Schichtdicke unabhängig von der Korngröße variiert werden. Eine Untersuchung, die überprüft, ob die Fließspannung nur von der kleineren Größe (Schichtdicke oder Korngröße) abhängt, wurde bisher



noch nicht durchgeführt. Das Nix Modell (Gleichung (2.4)) und das Thompson Modell (2.5) liefern eine $1/h$ bzw. $1/d$ Abhängigkeit der Fließspannung, sagen aber viel zu kleine Spannungen voraus, die experimentell ermittelten Fließspannungen sind etwa viermal so groß. Auch die Summe aus Nix Modell und Thompson Modell reicht nicht aus, die Experimente zu erklären [17, 35, 13, 18]. Abbildung 2.8 verdeutlicht diese Diskrepanz zwischen Experi-

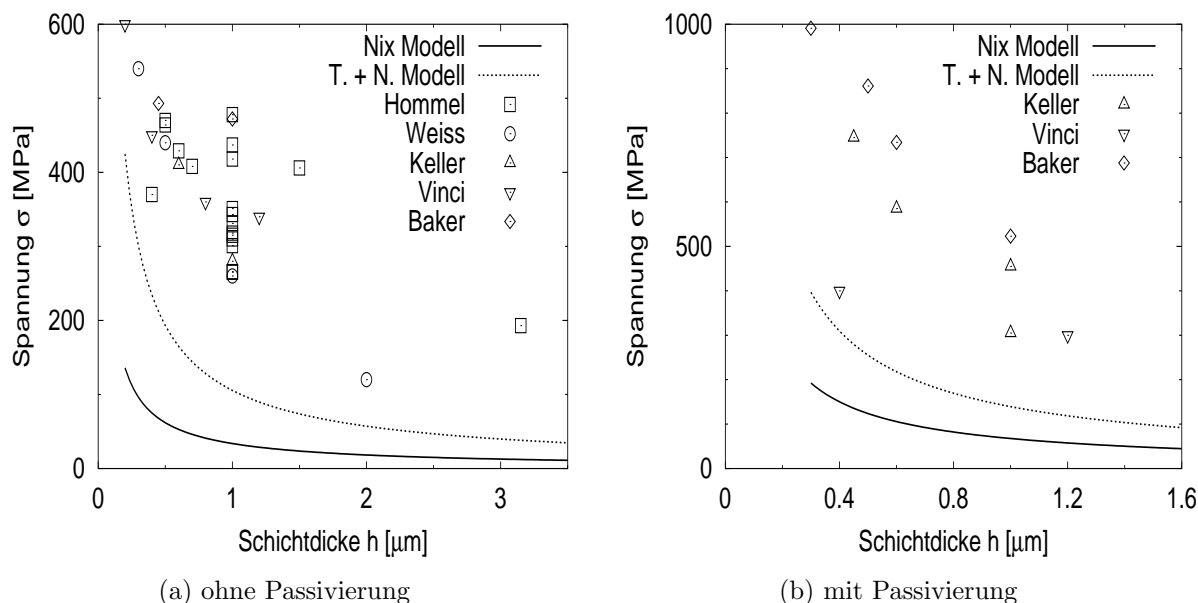
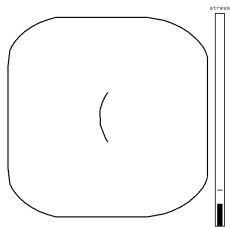


Abb. 2.8: Vergleich experimentell bestimmter Fließspannungen (Raumtemperaturspannung in Substrat-Krümmungs Experimenten: Vinci [35], Keller [13], Weiss [16], Baker [31] und 0.5% Fließspannung aus Mikrozugversuch Hommel [94]) mit dem Nix Modell (Gleichung (2.3) (ohne Passivierung) bzw. (2.4) (mit Passivierung)) und Thompson Modell (Gleichung (2.5))

ment und Modell. Hier wurden experimentelle Daten für Kupferschichten (Raumtemperaturspannung in Substrat-Krümmungs Experimenten: Vinci [35], Keller [13], Weiss [16], Baker [31] und Fließspannung bei 0.5% plastischer Dehnung aus dem Mikrozugversuch Hommel [94]) zusammen mit dem Nix Modell (Gleichung (2.3) keine Passivierung, Gleichung (2.4) mit Passivierung) und der Summe aus Thompson Modell (Gleichung (2.5)) und Nix Modell aufgetragen.³

Das Nix Modell kann nicht erklären, warum Fließspannungen von auf Polyimid abgeschiedenen Kupferschichten von der gleichen Größe wie Fließspannungen von Kupferschichten, die auf Silizium abgeschieden wurden, sind [18]. Auch konnte die logarithmische

³Folgende Konstanten wurden in Gleichung (2.3), (2.4) und (2.5) verwendet: $\beta = 60^\circ$, $\mu_s = \mu_p = \mu_f = 42.1 \text{ GPa}$, $\nu = 0.3333$, $b = 0.256 \cdot 10^{-9}$, $\phi = 70.5^\circ$ und $\alpha = 1$. Um die aufgelösten Spannungen in angelegte Spannungen umzurechnen, wurde ein Schmidfaktor $m = 0.27$ für $\langle 111 \rangle$ texturierte Schichten unter biaxialen Zug benutzt. Der Fehler durch Vernachlässigen der unterschiedlichen Schubmodule von Substrat, Passivierung und Schicht ist kleiner als 10% (vergleiche Abschnitt 3.2.3). Mit dieser Näherung und mit der Annahme $d = h$ ist die vom Thompson Modell vorhergesagte Fließspannung um den Faktor 0.94 kleiner als die Nix Spannung im Fall der passivierten Schicht.



Abhängigkeit von der Dicke der Passivierungsschicht in Gleichung (2.4) nicht experimentell bestätigt werden [35].

Als Ausnahme hierzu stellten Dehm et al. [83] eine gute Übereinstimmung zwischen dem Nix Modell und den Fließspannungen von epitaktischen Aluminiumschichten fest.⁴ Hier wurden Grenzflächenversetzungen beobachtet und das Nix Modell ist als untere Schranke der Fließspannung in Schichten mit geringer Versetzungsdichte und großen Körnern aufzufassen.

In nanokristallinen Materialien und metallischen Multilayern werden Einzelversetzungsprozesse, wie durch das Nix oder Thomson Modell beschrieben, erst für Korngrößen bzw. Schichtdicken unterhalb von 100nm erwartet. Deshalb ist es unwahrscheinlich, daß in dünnen Schichten (im Sinne vom Abschnitt 2.1) mit zehnfach größerer Schichtdicke Einzelversetzungsprozesse eine limitierende Rolle spielen.

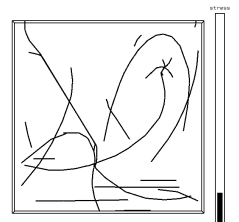
Wird der Hindernisabstand der Versetzungen l mittels der Orowan-Gleichung $\sigma = \mu b/ml$ für eine typische Schichtspannung von 400MPa (entspricht einer Schicht mit $1\mu\text{m}$ Schichtdicke aus [18]) abgeschätzt, so folgt ein Hindernisabstand von 100nm, der wesentlich kleiner als die Schichtdicke ist.⁵ Auch der aus der experimentell ermittelten Versetzungsdichte ($\rho \approx 10^{14}m^{-2}$) berechnete Versetzungsabstand $l' = \rho^{-1/2} \approx 100\text{nm}$ ist viel kleiner als Schichtdicke oder Korngröße. Diese Ergebnisse legen andere Versetzungsmechanismen als die durch das Nix bzw. Thompson Modell beschriebenen Einzelversetzungsprozesse nahe.

Das Hall-Petch Modell mit Parametern für Volumenmaterialien ergibt kleinere Fließspannungen als experimentell für dünne Schichten gemessen [12, 13]. Auch die Fließspannungen metallischer Multilayer lassen sich nicht mit dem Hall-Petch Modell mit Volumenparametern (bzw. Mittelwerten aus den Parametern der einzelnen Materialien) beschreiben [71]. Die Ergebnisse für polykristalline Volumenmaterialien mit Korngrößen im Bereich von 100nm bis $1\mu\text{m}$ sind widersprüchlich und lassen noch keine Aussage diesbezüglich zu.

Ziel dieser Arbeit ist es, mit Hilfe der Simulation der Versetzungsbewegung in dünnen polykristallinen Schichten die experimentell beobachteten Fließspannungen und die Abhängigkeit von Schichtdicke und Korngröße zu verstehen. Durch die einschränkende Geometrie der dünnen Schicht ergeben sich besondere Versetzungskonfigurationen, deren Auswirkung auf die Fließspannung untersucht wird. Ein Beispiel ist die Wechselwirkung von Grenzflächenversetzungen mit beweglichen Versetzungen innerhalb der Schicht. Der Aktivierung von Versetzungsquellen im Schichtinnern wird untersucht, sowie die Änderung der Parameter des Hall-Petch Modells bei Anwendung auf dünne Schichten.

⁴Venkatraman et al. [11] berichten ebenfalls von einer guten Übereinstimmung des Nix Modells mit den für Aluminiumschichten (in denen durch Laserschmelzen eine konstante Korngröße erzeugt wurde) gemessenen Fließspannungen. Allerdings wurden hier falsche Konstanten ($\alpha' = 17.6$ in Gleichung (2.4) anstatt $\alpha' \approx 1$) in das Modell eingesetzt und somit zu große Spannungen berechnet [12].

⁵Eingesetzt wurde ein Schmidfaktor für $\langle 111 \rangle$ texturierte Schichten unter biaxialem Zug von $m = 0.27$.



Kapitel 3

Simulation der Versetzungsdynamik

3.1 Übersicht

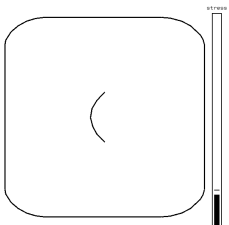
Versetzungssimulationen gehören zur Klasse der Molekulardynamik-Simulationen, die sich dadurch definieren, daß Kräfte auf einzelne Teilchen (dies können Atome, Moleküle aber auch andere Teilchen wie z. B. Sandkörner sein) wirken und die Bewegungsgleichungen für diese Teilchen gelöst werden, um die Dynamik zu bestimmen. In einer Versetzungssimulation werden diskrete Versetzungen betrachtet, die Versetzungslinien werden durch aneinandergereihte Segmente dargestellt. Es wird die Kraft auf jedes Segment berechnet und die Bewegungsgleichung für jedes Segment numerisch gelöst. Hierfür wird die Zeit ebenfalls diskretisiert. Ausgehend von einer Anfangskonfiguration werden für jeden Zeitschritt die neuen Positionen der Segmente berechnet.

In den folgenden Abschnitten wird auf die Grundlagen der Versetzungssimulation genauer eingegangen. Es wird dargestellt, wie die Kräfte berechnet werden und welche prinzipiellen Fehler durch die Verwendung der linearen Elastizitätstheorie kontinuierlicher Körper zur Beschreibung der Versetzungswechselwirkungen gemacht werden. Anschließend werden die wichtigsten Versetzungssimulationen anderer Forschungsgruppen vorgestellt und die Unterschiede zueinander deutlich gemacht.

Im Gegensatz zu den meisten Molekulardynamik-Simulationen bleibt die Anzahl der Teilchen (Versetzungsegmente) einer Versetzungssimulation in der Regel nicht konstant. Versetzungen können miteinander reagieren, sich gegenseitig auslöschen oder Versetzungen eines anderen Typs bilden. Hierauf wird in Abschnitt 3.1.2 eingegangen. Abschnitt 3.1.3 behandelt die Implementation der Randbedingungen in den in der Fachliteratur veröffentlichten Simulationen. Das Kapitel schließt mit einer kurzen Übersicht über die mit Versetzungssimulationen gewonnenen Erkenntnisse zur plastischen Verformung ab.

3.1.1 Grundlagen

Die Berechnung der Dynamik erfordert zunächst die Kenntnis der Kräfte, die auf die Versetzungen wirken. Diese können mit der Peach-Köhler Formel aus den lokalen Spannungen



berechnet werden:

$$\mathbf{F} = \mathbf{b} \tilde{\sigma} d\mathbf{l}, \quad (3.1)$$

\mathbf{F} ist die Kraft auf das infinitesimale Linienelement $d\mathbf{l}$. Der Spannungstensor $\tilde{\sigma}$ für das Versetzungssegment i am Ort \mathbf{r}_i setzt sich zusammen aus der angelegten Spannung $\tilde{\sigma}_{\text{app}}$, aus Spannungen $\tilde{\sigma}_{\text{rand}}$, die notwendig sind um die Randbedingungen zu erfüllen und den von den Versetzungen verursachten Spannungen $\tilde{\sigma}_{\text{ww}}$. Zusätzlich übt die Peierls Spannung $\tilde{\sigma}_{\text{peierls}}$ eine abbremsende Kraft entgegen der Bewegungsrichtung auf die Versetzungen aus:

$$\tilde{\sigma}_{\text{tot}}^i = \tilde{\sigma}_{\text{app}}(\mathbf{r}_i) + \tilde{\sigma}_{\text{rand}}(\mathbf{r}_i) + \sum_{j \neq i} \tilde{\sigma}_{\text{ww}}^j(\mathbf{r}_i) + \tilde{\sigma}_{\text{peierls}} \quad (3.2)$$

Die Peierls Spannung ist für kubisch flächenzentrierte Materialien verglichen mit den anderen Spannungen vernachlässigbar klein, und wird deshalb in den Simulationen meistens weggelassen. Die von den Versetzungen verursachten Spannungen werden im Rahmen der linearen Elastizitätstheorie isotroper Körper berechnet.

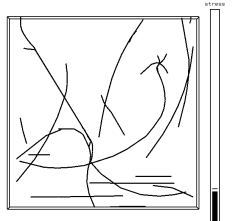
In der Elastizitätstheorie werden die Versetzungen als eindimensionale Liniendefekte und der Kristall als elastischer, kontinuierlicher Körper aufgefaßt. Diese Annahmen sind gerechtfertigt, wenn die betrachteten Längenskalen größer als der Abstand zweier benachbarter Atome im Kristall sind.¹ Eine Versetzung im Sinne der Elastizitätstheorie ist ein geschlossener Pfad C , der eine Fläche A begrenzt, wenn die beiden Seiten der Fläche um den (Burgers-) Vektor \mathbf{b} gegeneinander verschoben und anschließend wieder zusammengeklebt werden. Die durch die Versetzung verursachten Verschiebungen können mit der Methode der Greenschen Tensor Funktion und den Gleichgewichtsbedingungen der Elastizitätstheorie hergeleitet werden [96]. Hieraus wird die Spannung, die eine beliebig gekrümmte Versetzung am Ort \mathbf{r} erzeugt, durch Differenzieren und unter Verwendung des Hookeschen Gesetzes bestimmt [97]:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = & -\frac{\mu}{8\pi} \oint_C b_m \epsilon_{lmi} \frac{\partial}{\partial x'_l} \nabla'^2 R dx'_j - \frac{\mu}{8\pi} \oint_C b_m \epsilon_{lmj} \frac{\partial}{\partial x'_l} \nabla'^2 R dx'_i \\ & - \frac{\mu}{4\pi(1-\nu)} \oint_C b_m \epsilon_{lmk} \left(\frac{\partial^3 R}{\partial x'_l \partial x'_i \partial x'_j} - \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x'_l} \nabla'^2 R \right) dx'_k. \end{aligned} \quad (3.3)$$

ϵ_{ijk} sind die Komponenten des total antisymmetrischen Tensors dritter Stufe, b_i die Komponenten des Burgersvektors, x_i bezeichnen die Komponenten des Ortsvektors \mathbf{r} , μ ist der Schubmodul und $R = |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|$ der Abstand zum Integrationspunkt. Ein alternativer Ausdruck zur Beschreibung des Spannungszustandes ebener Versetzungsanordnungen wurde von Brown entwickelt [98]:

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2} \oint \frac{1}{R^2} \sin(\theta - \alpha) \left[\Sigma_{ij}(\theta) + \frac{d^2 \Sigma_{ij}(\theta)}{d\theta^2} \right] dl \quad (3.4)$$

¹Atomistische Simulationen haben gezeigt, daß die Berücksichtigung des atomaren Versetzungskerns bei der Wechselwirkung zwischen zwei Versetzungen erst bei Abständen kleiner als zwei bis drei Gitterabständen wichtig wird [95].



Hier wird die Spannung als Linienintegral über die gekrümmte Versetzung berechnet, wobei der Integrand, der ebene Spannungsfaktor Σ , aus der Theorie für gerade Versetzungen bestimmt wird:

$$\frac{1}{2}b_i\Sigma_{ij}(\alpha)n_j = E(\alpha) \quad (3.5)$$

mit dem prä-logarithmischen Faktor $E(\alpha)$.² α ist der Winkel zwischen dem Linienelement dl und der x-Achse des Koordinatensystems, θ der Winkel zwischen \mathbf{r}' und der x-Achse. Gleichung (3.4) bietet sich an, die Selbstspannung der Versetzung zu berechnen, Gleichung (3.3) kann benutzt werden, um die Beiträge von Versetzungen in anderen Ebenen zu bestimmen.

Berechnet man mit diesen Gleichungen die von einer Versetzung verursachte Spannung am Ort der Versetzung selbst (Selbstspannung), so wird die Spannung für $R \rightarrow 0$ unendlich. Daher wird die Selbstspannung nicht direkt am Ort der Versetzung bestimmt, bzw. es wird ein Abschneideradius ε eingeführt. Physikalisch macht es auch keinen Sinn, Spannungen auf Längenskalen unterhalb des Atomabstandes zu betrachten. Im Versetzungskern (innerhalb des Abschneideradius) sind die Kraft-Verschiebungs Gesetze aufgrund der großen Dehnungen nicht mehr linear und eine atomar-nichtlineare Behandlung wird notwendig. Der Abschneideradius wird von der Größenordnung des Burgersvektors gewählt. Jedoch nicht nur der Betrag von ε , auch die Abschneide- bzw. Mittelungsprozedur hat einen Einfluß auf die berechnete Selbstspannung [99].

Abbildung 3.1(a) zeigt Browns Definition der Selbstspannung [98]. Hiernach wird die Selbstspannung als Mittelwert aus den Spannungen an zwei Punkten in der Gleitebene, die im Abstand ε senkrecht zu der Versetzungslinie liegen, berechnet:

$$\tau^{\text{Brown}}(P) = \frac{1}{2}[\tau(P + \varepsilon) + \tau(P - \varepsilon)]. \quad (3.6)$$

Wird mit dieser Definition und Gleichung (3.4) die Spannung an einem Punkt P auf der Versetzungslinie berechnet, so folgt [100]:

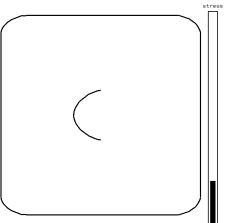
$$\tau^{\text{self}}(P) = \frac{1}{\rho}T \ln \frac{8\rho}{\varepsilon} + J^{(a)}. \quad (3.7)$$

T ist der Linienspannungsvorfaktor einer geraden Versetzung durch den Punkt P , ρ der Krümmungsradius in P . J ist ein Linienintegral, welches von der Form der Versetzungslinie und vom Punkt P abhängt, aber für $\varepsilon \rightarrow 0$ nicht singularär wird.

Die Selbstspannung kann auch durch Integration entlang der Linie und Auslassen eines Stückes der Länge ε um P herum (Abbildung 3.1(b)) berechnet werden. Das Ergebnis

²Für eine Versetzung im Koordinatenursprung und einer Ausrichtung der x-Achse parallel zum Burgersvektor gibt α den Charakter der Versetzung an, und es folgt

$$E(\alpha) = \frac{\mu b^2}{4\pi} \frac{1 - \nu \cos^2 \alpha}{1 - \nu}.$$



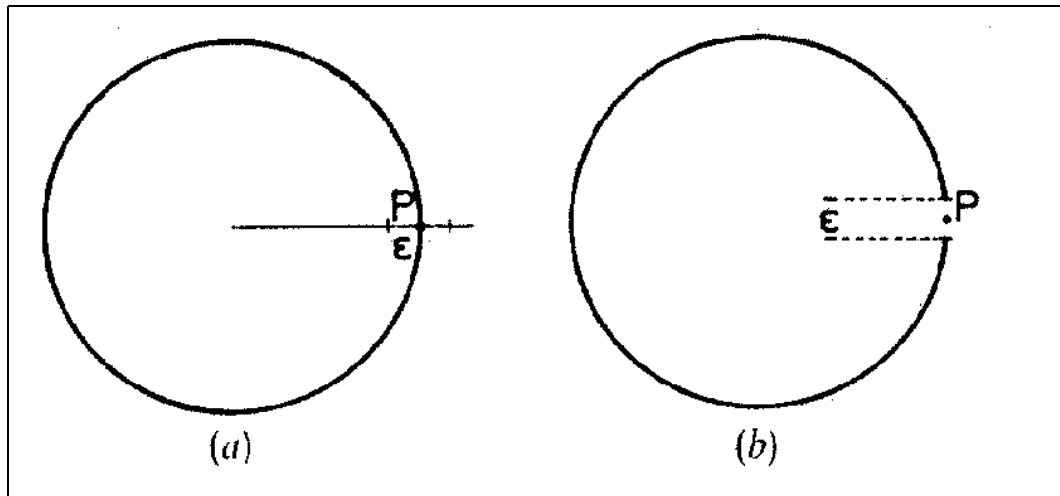


Abb. 3.1: (a) Definition der Selbstspannung nach Brown als Mittelwert, (b) Linienintegraldefinition der Selbstspannung mit Abschneideradius [99]

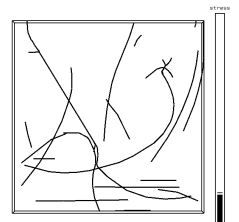
entspricht Gleichung (3.7), allerdings mit einem anderen $J^{(b)}$ Term.³ J ist von der gleichen Größenordnung wie T/ρ , und, da $\ln \frac{8\rho}{\epsilon} \approx 7$ für Versetzungen mit Krümmungsradien im Mikrometerbereich ist, können Berechnungen mit unterschiedlichen Regularisierungsmethoden um ca. 10% voneinander abweichen. Beim Überprüfen der Ergebnisse einer Simulation durch analytische Berechnungen (siehe Abschnitt 3.2.1) muß daher darauf geachtet werden, daß die verwendeten Regularisierungsmethoden identisch sind.

Eine genauere Berechnung der Selbstenergie erfordert noch zwei weitere Terme, T_c/ρ und E_{bl}/ρ , zusätzlich zu den in Gleichung (3.7) angegebenen. Der erste, verursacht durch den Versetzungskern, muß eingeführt werden, da sonst ϵ je nach Charakter der Versetzung gewählt werden müßte [101]. Der Bogenverlängerungsterm E_{bl}/ρ muß hinzugefügt werden, damit die Selbstspannungsberechnungen mit Energievariationsberechnungen übereinstimmen [100]. Beide Terme sind von der Größenordnung von T/ρ , werden jedoch in den meisten Berechnungen und Simulationen weggelassen (so auch hier).

Die Energie des Versetzungskerns und der Abschneideradius sind Größen, die mit den atomaren Eigenschaften der Versetzung verknüpft sind und nicht aus der Elastizitätstheorie hergeleitet werden können. Dies hat eine Unsicherheit von etwa 15% in Versetzungsberechnungen, die auf der Elastizitätstheorie beruhen, zur Folge. ϵ muß als effektiver Versetzungskern-Parameter angesehen werden, der aus dem Experiment oder durch Vergleich mit atomistischen Rechnungen bestimmt wird.

Die Linienintegrale in den Gleichungen (3.3) und (3.4) sind abgesehen von einigen Spezialfällen (z. B. kreisförmiger Versetzungsring) nicht analytisch lösbar. Um Spannungsfelder komplizierterer Versetzungsanordnungen berechnen zu können, können die gekrümmten Versetzungen durch aneinandergereihte gerade Segmente approximativ beschrieben wer-

³Für eine kreisförmige Versetzung mit Radius R im isotropen Kristall ist $J^{(b)} = \frac{3}{4}J^{(a)}$ [99].



den. Das Spannungsfeld eines geraden Segments läßt sich analytisch berechnen [102]. Das Feld der gesamten Versetzung ergibt sich dann durch Aufaddieren der Beiträge der einzelnen Segmente. Da in einer Versetzungssimulation die Kräfte auf einzelne Versetzungssegmente berechnet werden, bietet sich diese diskrete Darstellung natürlich auch zur Spannungsberechnung an.

Sind die Spannungen bekannt, werden die Kräfte auf die Versetzungen mit Gleichung 3.1 berechnet. Um die neuen Positionen der Versetzungssegmente nach einem Zeitschritt dt zu bestimmen, muß die Bewegungsgleichung für jedes Segment gelöst werden.

Abbildung 3.2 zeigt die beschleunigte Bewegung von geraden, unendlich langen Stufenversetzungen nach dem Anlegen einer Schubspannung (30MPa, 50MPa und 100MPa). Die Berechnungen wurden in einer Molekulardynamiksimulation für Nickel bei einer Temperatur von 300K durchgeführt [103]. Der Beschleunigungsbereich ist sehr kurz, die Verset-

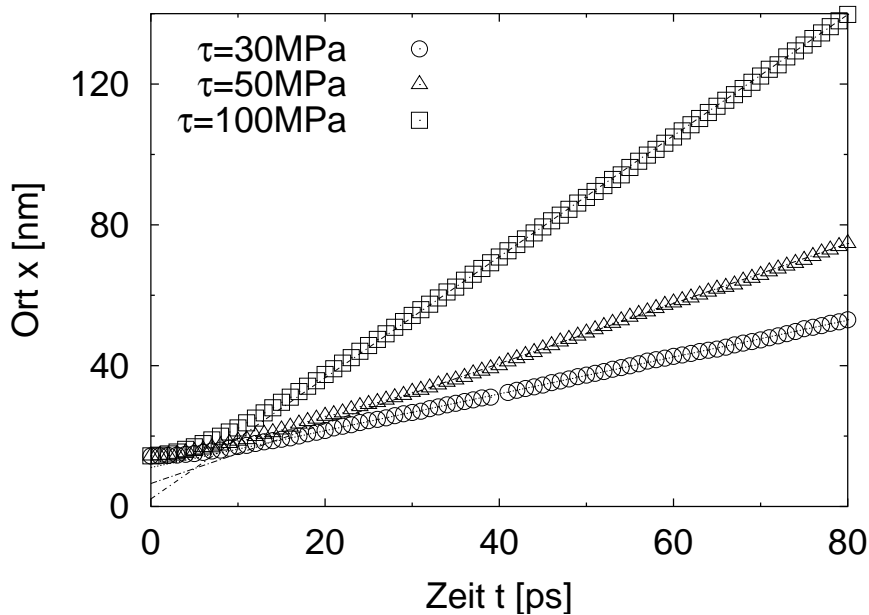
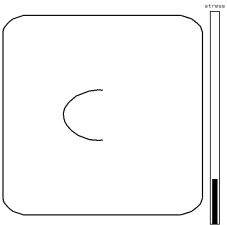


Abb. 3.2: Molekulardynamiksimulation der beschleunigten Bewegung einer unendlich langen, geraden Stufenversetzung in Nickel unter einer angelegten Spannung [103]. Aufgetragen ist der Ort der (geraden) Versetzung über der Zeit.

zungen bewegen sich bereits nach 20ps mit konstanter Geschwindigkeit. Die Entfernung, die sie in dieser Zeit zurücklegen, beträgt ca. 10nm. Die Zeit- und Längenskalen, die mit Beschleunigungen verbunden sind, sind viel kleiner als die charakteristischen Skalen, die in diskreten Versetzungssimulation betrachtet werden, so daß in dieser Arbeit nur Gleichgewichtsgeschwindigkeiten betrachtet werden. Die Geschwindigkeit eines Segments ist dann proportional zur auf das Gleitsystem projizierten Schubspannung τ :

$$v = \frac{\tau b}{B} \quad (3.8)$$



mit dem Dämpfungskoeffizienten B .

Die ersten numerischen Berechnungen, in denen das Spannungsfeld von Versetzungen durch Summieren der Beiträge einzelner Segmente im Computer bestimmt wird, wurden von Foreman [104] und Bacon [105] durchgeführt. Die Berechnungen waren statisch, es wurde die Gleichgewichtsform eines Versetzungsbogens unter einer angelegten Spannung, und somit die kritische Spannung einer Frank–Read Quelle unter verschiedenen Randbedingungen (mit unterschiedlichen Seitenarmkonfigurationen [104], bzw. orientierungsabhängigen Reibspannungen [105]) bestimmt. Es wurde nur eine Versetzung in einer Gleitebene behandelt, die Berechnungen waren zweidimensional.

Die Simulation kann auch auf zwei Dimensionen reduziert werden, indem nur unendlich lange, parallele Versetzungen betrachtet werden. Dabei werden nur die Durchstoßpunkte der Versetzungen durch eine Ebene senkrecht zur Linienrichtung erfaßt und deren Dynamik verfolgt [106,107,108,109,110]. Durch die zweidimensionale Simulation wird Rechenzeit gespart, und es können mehr Versetzungen simuliert werden. Allerdings kann die Linienspannung gar nicht und Versetzungsreaktionen, Multiplikation und Annihilation nur durch zusätzliche Regeln behandelt werden.

Die ersten wirklich dreidimensionalen dynamischen Simulationen wurden 1992 von Devincere, Condat und Kubin publiziert [111,112,113,114]. In diesen Simulationen werden die Versetzungen auf einem (virtuellen) Gitter bewegt, dessen Gitterparameter durch die Anihilationslängen der Versetzungen gegeben ist. Die Versetzungen werden durch Segmente mit reinem Schrauben- oder Stufencharakter dargestellt (kürzlich wurden auch Segmente mit 60° Charakter eingeführt, um Versetzungsreaktionen (Versetzungsknoten) besser beschreiben zu können [115]). Die Beschränkung auf Stufen- und Schraubensegmente, die jeweils im rechten Winkel zueinander stehen, hat den Nachteil, daß die Linienspannung nicht konsistent berechnet werden kann, und daß eine lange, gerade Versetzung mit gemischtem Charakter mit vielen kleinen Stufen- und Schraubensegmenten dargestellt werden muß. Diese Probleme treten nicht auf, wenn Segmente mit gemischtem Charakter benutzt werden, und eine kontinuierliche Bewegung erlaubt wird. Die Versetzungslinie wird dann durch Knoten⁴ dargestellt, die mit geraden Versetzungssegmenten verbunden sind. Die in der Literatur angeführten Simulationen unterscheiden sich hier hauptsächlich in der Behandlung der Wechselwirkung zwischen zwei benachbarten Segmenten. Berechnet man die Kraft auf ein Versetzungssegment verursacht durch andere Segmente, so ist es ausreichend, die Spannung entfernter Segmente nur an einer Stelle des betrachteten Segmentes zu berechnen, da diese über die Länge des betrachteten Segments näherungsweise konstant ist. Diese Näherung ist für benachbarte Segmente jedoch nicht mehr erfüllt. Zbib, Rhee und Mitarbeiter [116,117] berechnen die Kraft durch Integration über das Segment, wobei nur bis zu einem Abschneideabstand z_0 zum benachbarten Segment integriert wird. Unterschiedlich feine Diskretisierungen liefern allerdings unterschiedliche Selbstspannungen, da diese vom Winkel zwischen den Segmenten abhängen. z_0 müßte für jeden Winkel

⁴Diese Knoten zur Darstellung der Versetzungen sind nicht zu verwechseln mit Versetzungsknoten, die bei der Reaktion zweier Versetzungen zu einer neuen Versetzung mit anderem Burgersvektor gebildet werden.

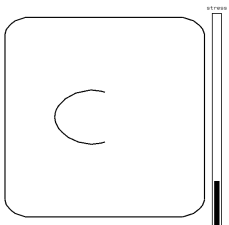


gesondert gewählt werden [116], was jedoch nicht praktikabel ist. Die nächste Nachbar Wechselwirkung kann auch berechnet werden, indem die benachbarten Segmente durch einen Kreisbogen ersetzt werden, und die Spannung an einen Punkt des Kreisbogens berechnet wird (z.B. durch Integration von Gleichung (3.4) unter Verwendung der Brownschen Mittelungsmethode wie in [104, 105]). Auf diese Art kann die Selbstspannung auch für unterschiedliche Krümmungsradien der Gesamtversetzung konsistent berechnet werden [92, 118, 119, 120, 121]. Die Kreisbogenmethode hat den Nachteil, daß die Versetzung nicht eindeutig dargestellt wird: Betrachtet man vier hintereinanderliegende mit A bis D gekennzeichnete Knoten, so wird zur Berechnung der Spannung an B und C der Kreisbogen durch ABC bzw. BCD definiert. Dabei werden im allgemeinen für das Segment BC unterschiedliche Linienformen angenommen. Diese Zweideutigkeit kann vermieden werden, wenn die Versetzungen durch eine Sequenz von parametrischen Polynomen repräsentiert werden [122, 123]. Die Spannungsberechnung wird dann allerdings aufwendiger, da die Integrale über die Versetzungslinie jetzt numerisch durchgeführt werden müssen.

3.1.2 Kurzreichweitige Versetzungswechselwirkungen

Unter kurzreichweitigen Wechselwirkungen werden die Wechselwirkungen zwischen Versetzungen zusammengefaßt, bei denen sich die Versetzungskerne überlappen. Dabei können die Versetzungen neu verknüpft werden, d. h. neue Versetzungen entstehen. Versetzungen, die sich sehr nahe kommen, wechselwirken im allgemeinen stark miteinander, da die Kraft zwischen zwei Versetzungen proportional zum inversen Abstand ist. Die Wechselwirkung ist attraktiv, wenn der Betrag der Summe der jeweiligen Burgersvektoren kleiner ist als die Summe der Beträge (Franks Regel), im umgekehrten Fall ist die Wechselwirkung abstoßend. Treffen zwei Versetzungen (oder zwei Teile der gleichen Versetzung) mit gleichem Burgersvektor und entgegengesetzten Linienrichtungen aufeinander, so ziehen sich diese an und werden sich gegenseitig auslöschen, wenn ihre Kerne überlappen. Das Reaktionsprodukt zweier sich anziehender Versetzungen mit unterschiedlichen Burgersvektoren ist eine Versetzung mit neuem Burgersvektor. Da die Versetzungen in kfz Kristallen in Partialversetzungen aufgespalten sind, müssen streng genommen bei Versetzungsreaktionen die Wechselwirkungen und Reaktionsprodukte zwischen den Partialversetzungen betrachtet werden. Hierbei können Versetzungen entstehen, deren Burgersvektor nicht mehr auf einer $\{111\}$ Ebene liegt, und die deshalb nicht gleiten können (z. B. Lomer Cottrell-Versetzungsknoten). Diese immobilen Reaktionsprodukte können aber auch identifiziert werden, wenn nur die perfekten Versetzungen betrachtet werden. Hiernach entstehen immobile Versetzungsknoten, wenn der resultierende Burgersvektor in keiner der beiden beteiligten Gleitebenen liegt.

Abstoßende Versetzungen bilden keine Reaktionsprodukte, allerdings kommt es bei Schneidprozessen ebenso wie auch beim Aufreißen von Versetzungsknoten zur Bildung von Kinken und Jogs. Die Erzeugung und Bewegung von Jogs erfordert zusätzliche Energie, die jedoch bei Zimmertemperatur verglichen mit der elastischen Wechselwirkung vernachlässigbar klein ist [124, S. 223ff]. Eine genaue Auflistung der möglichen Reaktionen von zwei Versetzungen im kfz Kristall basierend auf Franks Regel unter Berücksichtigung

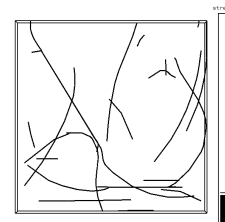


der Aufspaltung in Partialversetzungen findet sich in [125]. Die Länge eines Versetzungsknotens hängt auch von der Orientierung der Versetzungen zueinander und der Länge der Versetzungsarme ab. Ob ein Versetzungsknoten gebildet wird und unter welcher angelegten Spannung dieser wieder aufreißt, kann mit Hilfe der Linienspannungsnäherung berechnet werden. Dabei wird das Kräftegleichgewicht an jedem Ende des Versetzungsknotens bestimmt, wobei idealisierte Linienformen angenommen werden, und Wechselwirkungen zwischen entfernten Versetzungsteilen nicht berücksichtigt werden [126, ohne Berücksichtigung des Charakters der Versetzung], [127].

Eine exakte Behandlung von Versetzungsreaktionen erfordert atomistische Simulationen [128, 129, 130], die die Eigenschaften des Versetzungskerns (wie z. B. Aufspaltung in Partialversetzungen mit dazwischenliegendem Stapelfehler) einbeziehen. Allerdings haben Vergleiche zwischen atomistischen Simulationen und kontinuumsmechanischen Berechnungen bzw. Versetzungssimulationen für Einzelfälle gezeigt, daß die mit der Kontinuumstheorie berechneten Längen von Reaktionsversetzungsknoten und die nötigen Spannungen diese wieder aufzubrechen gut mit atomistischen Berechnungen übereinstimmen [131, 132, 133]. Eine systematische Untersuchung aller möglichen Reaktionen, wie sie in [125] aufgeführt sind, steht allerdings noch aus.

In Versetzungssimulationen können Versetzungsreaktionen durch die Implementierung von entsprechenden Regeln realisiert werden (z. B. [112, 117, 134]). In der Simulation von Devincere und Kubin mit senkrecht aufeinander stehenden Stufen- und Schraubensegmenten gibt nur eine begrenzte Anzahl von möglichen relativen Orientierungen zweier Segmente. Diese können in einer Tabelle abgelegt werden, aus der die Art der aktuellen Wechselwirkung im Falle einer Begegnung zweier Segmente numerisch effektiv ausgelesen werden kann. Bei einer attraktiven Wechselwirkung wird ein neues Versetzungsknotensegment eingeführt [112]. In der Simulation von Zbib und Rhee, in der Segmente gemischten Charakters verwendet werden, wird über den Winkel zwischen den kollidierenden Segmenten festgestellt, ob die Wechselwirkung anziehend ist. Ist dies der Fall und sind die Burgersvektoren gleich, werden die (perfekten) Versetzungen neu verknüpft. Bei unterschiedlichen Burgersvektoren wird ein neues Versetzungsknotensegment anstelle der zwei attraktiven Versetzungen eingesetzt. Die Stärke des Versetzungsknotens wird durch einen weiteren externen Parameter vorgegeben [117]. Die genaue Simulation der Entstehung und Vernichtung von Versetzungsknoten ist sehr zeitaufwendig. Da die Versetzungen aufgrund der großen Kräfte hohe Geschwindigkeiten haben, muß der Simulationszeitschritt entsprechend klein gewählt werden, wodurch die Simulation insgesamt gebremst wird. Durch die Einführung von Regeln für das Einsetzen und Löschen von Versetzungsknotensegmenten erspart man sich die genaue Berechnung und erreicht dadurch eine bessere Effizienz der Simulation. Da allerdings die Kaltverfestigung und die Bildung von Versetzungsnetzwerken kritisch von der Bildung und Zerstörung der Versetzungsknoten abhängt, wird das Ergebnis stark von der Wahl der Versetzungsknotenregeln beeinflusst.

Eine voll aufgelöste Simulation der Bildung von Versetzungsknoten wurde von Wickham et al. [135] durchgeführt. Hier werden keine neuen Versetzungsknotensegmente eingefügt, sondern die (perfekten) Versetzungen entsprechend der wirkenden Kräfte bewegt. Reaktionsversetzungen mit neuen Burgersvektoren werden dabei durch Nebeneinanderle-



gen der zwei ursprünglichen Versetzungen realisiert. Das Spannungsfeld der zwei einzelnen Versetzungen entspricht dem der Reaktionsversetzung. Die Simulationen zeigten, daß eine einfache Linienspannungsbetrachtung ausreichend ist, um vorherzusagen, ob sich ein Versetzungsknoten bilden wird.

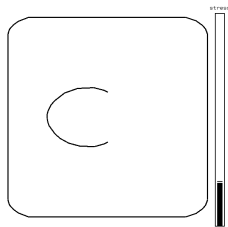
Shenoy et al. [131, 122] untersuchten die Entstehung von Versetzungsknoten in einer vollaufgelösten Versetzungssimulation, die die Aufspaltung in Partialversetzungen und den dabei entstehenden Stapelfehler berücksichtigt. Die Ergebnisse wurden mit atomistischen Simulationen verglichen (siehe Abschnitt 3.2.2.1).

3.1.3 Randbedingungen

Ein weiterer wichtiger Aspekt in einer Versetzungssimulation neben der Behandlung der Versetzungswechselwirkung und Versetzungsreaktionen ist die Implementation der Randbedingungen. Hier muß unterschieden werden zwischen der Simulation von Versetzungen in Volumenmaterialien, wo die Dynamik möglichst unabhängig von den Begrenzungen des Simulationsvolumens sein sollte und von Versetzungen in kleineren Strukturen, in denen das Verhalten stark von den Rändern beeinflußt wird. Eine Methode, Volumenmaterialien zu simulieren, ist, ein großes Simulationsvolumen zu wählen und die relevanten Größen (plastische Dehnung, Versetzungsdichte...) nur in einem kleineren repräsentativen Untervolumen zu bestimmen [136]. Das Untervolumen sollte dabei so klein gewählt werden, daß die Randbedingungen des Gesamtvolumens keinen wesentlichen Einfluß auf die Ergebnisse haben. Hier können z.B. freie Ränder, an denen die Versetzungen aus dem Simulationsvolumen austreten können (ohne die Berücksichtigung von Bildkräften), benutzt werden. Wird kein Untervolumen benutzt, muß darauf geachtet werden, daß genau so viele Versetzungen der Simulationsbox wieder hinzugefügt werden, wie durch die freien Ränder nach außen treten [137]. Eine andere Methode, Volumenmaterialien zu simulieren, ist die Verwendung von periodischen Randbedingungen [138].

Versetzungen in einem halbunendlichen Körper mit einer freien Oberfläche lassen sich simulieren, indem das Superpositionsprinzip der elastischen Felder ausgenutzt wird. Das Spannungsfeld der Versetzungen wird für einen unendlichen Körper berechnet. An der freien Oberfläche werden Punktkräfte aufgebracht, um die von den Versetzungen erzeugten Traktionen auf die Oberfläche zu kompensieren (Traktionskompensationsmethode). Das Spannungsfeld der Punktkräfte im Halbraum läßt sich analytisch berechnen und trägt mit der angelegten Spannung und der Wechselwirkung zwischen den Versetzungssegmenten mit zur auf ein Segment wirkenden Kraft bei [139]. Freistehende Schichten lassen sich ebenfalls mit dieser Methode simulieren, wenn die Punktkräfte auf beide Oberflächen aufgebracht werden und die Wechselwirkung der Oberflächen berücksichtigt wird (die Bildkräfte der Bildversetzungen) [140, 141].

Die Berechnung der Kompensationskräfte und der daraus resultierenden Spannungen ist sehr zeitaufwendig. Eine andere, weniger exakte aber schnellere Methode der Implementation einer freien Oberfläche besteht darin, die Bildversetzungen durch eine Spiegelung des Simulationsvolumens an der freien Oberfläche explizit mitzusimulieren. Alternativ kann das die Oberfläche treffende Versetzungssegment in einem bestimmten Winkel zur Oberfläche



gehalten werden, um so den Einfluß der Bildkräfte zu berücksichtigen [119]. Vergleichsrechnungen mit der Traktionskompensationsmethode haben gezeigt, daß in Fällen, in denen angelegte Spannung und Linienspannung dominieren, der Fehler durch Vernachlässigen der Bildkräfte nicht größer ist als die einer Versetzungssimulation aufgrund der Verwendung der Elastizitätstheorie inhärente Unsicherheit von 10–20% [142].

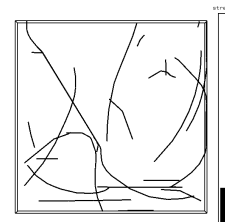
Komplexere Randbedingungen lassen sich verwirklichen, wenn die Spannungen, die notwendig sind, um die Randbedingungen zu erfüllen, mit der Finite Element Methode berechnet werden [143]. Auf diese Weise können auch Verschiebungsrandbedingungen realisiert werden. Eine direkter Kopplung von diskreter Versetzungssimulation und Finiten Elementen (FE) wurde von Lemarchand et al. verfolgt [144, 145, 146]. Die Spannungen werden mit dem FE Programm berechnet und als Input für die Versetzungssimulation benutzt. Diese berechnet die Dynamik der Versetzungen und die damit verbundenen plastischen Scherungen, die wiederum dem FE Programm für jeden Knoten des FE Netzes übergeben werden. Die Versetzungssimulation ersetzt somit das Verformungsgesetz, welches sonst immer dem Finite Elemente Programm vorgegeben werden muß.

3.1.4 Anwendungen

In der Literatur wurden Versetzungssimulationen benutzt, um Versetzungsgleichgewichtskonfigurationen, die sich analytisch nicht mehr behandeln lassen, zu berechnen, um Verformungsmodelle zu verifizieren, die auf Versetzungsbewegung beruhen, oder um das kollektive Verhalten von vielen Versetzungen zu studieren. Ein Beispiel für die erste Anwendungsgruppe ist die Wechselwirkung zwischen mobilen Versetzungen und Grenzflächenversetzungen in einer dünnen Schicht, auf die im nächsten Abschnitt noch genauer eingegangen wird. Die Berechnung der Dynamik einer Frank–Read Quelle in unterschiedlichen Materialien [147, 93] oder die temperaturunterstützte Bewegung von Versetzungen durch Hindernisfelder [148, 149] sind weitere Beispiele.

Modelle, die die plastischen Eigenschaften von Materialien beschreiben, können mit Versetzungssimulationen überprüft werden. Hier nutzt man aus, daß mit einer Simulation virtuelle Experimente durchgeführt werden können, in denen nur die Aspekte berücksichtigt werden, die für das untersuchte Phänomen wesentlich sind. Ein Beispiel ist die Simulation der Fließspannungsanomalie in Ni_3Al Legierungen. Hier hat die Simulation gezeigt, daß die Versetzungsdynamik im Niedrigtemperaturbereich in guter Übereinstimmung mit den Vorhersagen von Kink–Modellen ist, wohingegen bei hohen Temperaturen das „locking–unlocking“ Modell die Fließmechanismen gut beschreibt [150, 151].

Ein klassisches Problem der Kristallplastizität ist die Entwicklung der Versetzungsmikrostruktur (Versetzungnetzwerke) im Verlauf der Kaltverfestigung. Hier erhofft man sich durch die Simulation dieser Prozesse ein besseres Verständnis. Allerdings sind solche Rechnungen sehr aufwendig: die Größe der Simulationszelle muß größer sein als die charakteristische Größe der Versetzungnetzwerke ($\approx 10\mu\text{m}$) und die Randbedingungen müssen realistisch sein. Bisher konnten nur Simulationen, die sich auf den Bereich der Einfachgleitung beschränken [117], oder nur kleine Dehnungen [150] berechnen, durchgeführt werden. Letztere haben gezeigt, daß Quergleiten wichtig für die Entstehung von Netzwerken ist.



Vergleichsrechnungen ohne Quergleiten zeigten keine Kaltverfestigung, nahezu keine Speicherung von Versetzungen und eine viel homogenere Versetzungsstruktur [150].

Andere Beispiele für Simulationen mit vielen Versetzungen sind die Berechnung der Versetzungsbewegung im heterogenen Spannungsfeld unter einem Nanoindenter [143, 152] oder die Simulation der Wechselwirkung mit eindimensionalen Gitterfehlern in bestrahlten Materialien und der Entstehung von defektfreien Kanälen [153].

3.1.5 Simulation von Versetzungen in dünnen Schichten

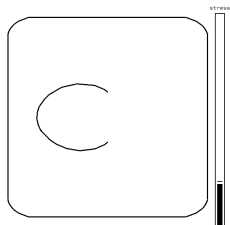
Simulationen von Versetzungen in dünnen Schichten gibt es erst seit wenigen Jahren, obwohl sich die Simulation von diesen Systemen anbietet. Die Anzahl der Versetzungen die behandelt werden müssen, um das Verformungsverhalten realistisch zu beschreiben, ist kleiner als im Volumenmaterial. Außerdem werden bei der direkten Beobachtung von Versetzungen im Transmissionselektronenmikroskop immer dünne Schichten untersucht.

Nicola et al. [154] untersuchten in einer zweidimensionalen Simulation die Verteilung der Versetzungen in einer dünnen Schicht und fanden eine erhöhte Versetzungsdichte in der Nähe des Substrats und eine verringerte Dichte an der freien Oberfläche. Hartmaier et al. [141] simulierten die Aktivierung von Frank–Read Quellen in freistehenden Schichten unter Berücksichtigung der Bildkräfte. Sie ermittelten eine verglichen mit der Aktivierungsspannung im Volumenmaterial um 10% kleinere Aktivierungsspannung für eine Versetzungsquelle, deren Versetzungssegment an Ober- und Unterseite der Schicht festgehalten wird. Die Wechselwirkung von Threading–Versetzungen mit Grenzflächenversetzungen auf kreuzenden Gleitebenen für $\langle 001 \rangle$ orientierte Schichten wurde von Schwarz und Tersoff [46] sowie von Gomez-Garcia et al. [47] untersucht. In beiden Arbeiten wurde festgestellt, daß der zusätzliche Härtingsbeitrag der Grenzflächenversetzungen nur ca. 15% beträgt. Von Schwarz gibt es noch eine Reihe von Simulationen der Bildung von Versetzungsstrukturen in epitaktischen Schichten, die in guter Übereinstimmung mit TEM Beobachtungen stehen [92, 118, 120, 155].

3.2 Implementierung

In diesem Unterkapitel wird das Computerprogramm zur Simulation der Dynamik diskreter Versetzungen vorgestellt. Es wurde während der Doktorarbeit entwickelt und ist für die Berechnung der Fließspannung dünner Schichten optimiert.⁵ Die grundlegenden Gleichungen der Simulation werden angeführt. Anschließend wird die Implementation durch Testrechnungen, die mit analytischen Lösungen verglichen werden können, überprüft.

⁵Das Programm ist größtenteils in C++ geschrieben. Lediglich die Routine zur Berechnung der durch die Versetzungen erzeugten Spannungen (die N^2 mal aufgerufen wird, wobei N die Anzahl der Segmente ist) wurde aus Geschwindigkeitsgründen in Fortran90 programmiert. Die Routine zur Berechnung der Bildkräfte für freie Oberflächen wurde von Hartmaier [141] übernommen und ist ebenfalls in Fortran90 geschrieben. Für Vektoren und Matrizen wurden die Implementationen der Blitz++ Bibliothek verwendet [156]. Die Blitz++ Bibliothek benutzt Template–Techniken, um die Ausführung von C++ Programmen zu beschleunigen.



In der Simulation werden die Versetzungen durch eine verkettete Liste von Knoten repräsentiert. Jeder Knoten beschreibt einen Punkt der Versetzung im Simulationsvolumen. Zwei benachbarte Knoten definieren ein Versetzungssegment mit (im allgemeinen) gemischtem Charakter. Die Berechnung der Kräfte auf die Versetzungen erfolgt durch die Bestimmung des Spannungstensors an den Positionen der Knoten. Die von der Versetzungen verursachten Spannungen werden durch Summation der Beiträge aller Versetzungssegmente — mit Ausnahme der dem Summationspunkt direkt benachbarten Segmente, die gesondert behandelt werden — ermittelt. Die durch ein gerades Versetzungssegment verursachte Spannung läßt sich aus Gleichung (3.3) herleiten [102]. Im Programm wurde eine vom Koordinatensystem unabhängige Form dieser Lösung benutzt [111]:

$$\sigma_{ij}^{\text{interaction}} = \frac{\mu}{4\pi R(L+R)} \left\{ (\mathbf{b} \times \mathbf{Y})_i t_j + (\mathbf{b} \times \mathbf{Y})_j t_i - \frac{1}{1-\nu} [(\mathbf{b} \times \mathbf{t})_i Y_j + (\mathbf{b} \times \mathbf{t})_j Y_i] - \frac{(\mathbf{b}, \boldsymbol{\rho}, \mathbf{t})}{1-\nu} \left[\delta_{ij} + t_i t_j + \frac{(\rho_i t_j + \rho_j t_i + L t_i t_j)(L+R)}{R^2} + \frac{\rho_i \rho_j (2 + \frac{L}{R})}{R(L+R)} \right] \right\} \quad (3.9)$$

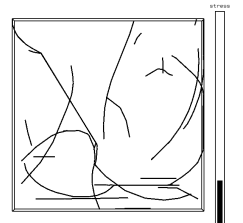
mit

$$L = \mathbf{R} \cdot \mathbf{t}, \quad \boldsymbol{\rho} = \mathbf{R} - L\mathbf{t}, \quad \mathbf{Y} = \mathbf{R} + R\mathbf{t}.$$

$(\mathbf{b}, \boldsymbol{\rho}, \mathbf{t})$ kennzeichnet das Spatprodukt. \mathbf{R} ist der Vektor, der von einem Ende des Segments zum Punkt der Spannungsberechnung zeigt und \mathbf{t} ist der Einheitsvektor in Tangentialrichtung. Gleichung (3.9) wird auch verwendet, um die von einer Versetzungskonfiguration verursachte Spannungsverteilung im Kristall zu berechnen, wie in Abbildung 3.4 am Beispiel der Oktaederspannung dargestellt.

Zur Berechnung der Spannungsbeiträge der Versetzungsstücke zwischen dem Summationspunkt P und seinen benachbarten Punkten wird die Versetzungslinie hier durch einen Kreisbogen beschrieben, der durch die drei Punkte gelegt wird (Abbildung 3.3). Das Spannungsfeld des Kreisbogens kann mit Gleichung (3.3) oder (3.4) berechnet werden. In beiden Fällen erhält man elliptische Integrale, die jedoch unter der Annahme kleiner Winkel θ_1 und θ_2 , Entwicklung der auftretenden trigonometrischen Funktionen und Mitnahme nur der ersten Terme zu irrationalen Integralen überführt und gelöst werden können ([119] bzw. [157]). Hier wurde die Näherung von Schwarz [119] benutzt, die der Brownschen Definition der Selbstspannung folgt (Gleichung (3.6)), da diese genauere Werte liefert (siehe Abschnitt 3.2.1.1):

$$\tau_{\text{Bogen}} = \frac{1}{8\pi(1-\nu)} \left[d_1(b) \sin \gamma + d_2(b) \cos \gamma + d_1(-b) \sin \gamma + d_2(-b) \cos \gamma \right] \quad (3.10)$$



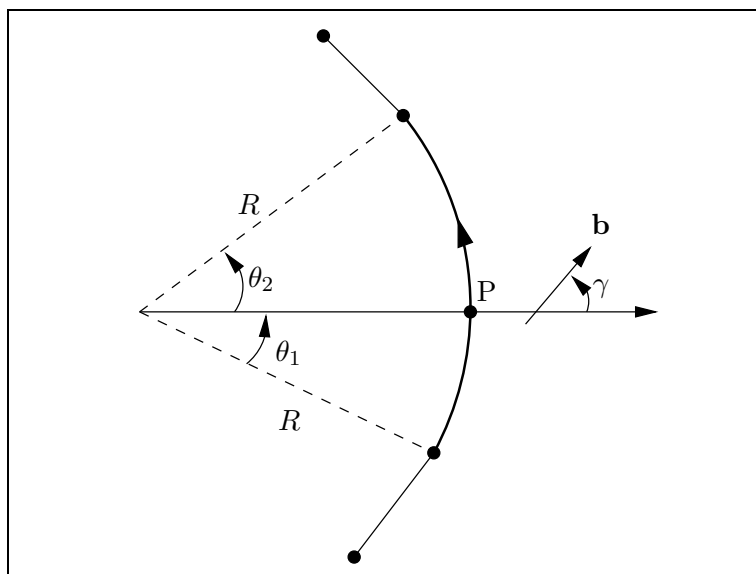


Abb. 3.3: Die Versetzungslinie um P herum wird durch einen Kreisbogen mit Radius R , der durch P und die benachbarten Punkte definiert wird, angenähert. Der Rest der Versetzung wird durch gerade Segmente beschrieben.

mit

$$d_1(\epsilon) = (1 - \nu)\epsilon I_0 \sin \gamma - \nu \rho I_1 \cos \gamma + \frac{1}{2} [(1 + \nu)\rho - (1 - \nu)\epsilon] I_2 \sin \gamma \\ + \frac{3}{2} \nu \rho I_3 \cos \gamma - \frac{1}{24} [(1 + 7\nu)\rho - (1 - \nu)\epsilon] I_4 \sin \gamma,$$

$$d_2(\epsilon) = \epsilon I_0 \cos \gamma - \nu \epsilon I_1 \sin \gamma + \frac{1}{2} [(1 - 2\nu)\rho - \epsilon] I_2 \cos \gamma \\ + \frac{1}{6} \nu (3\rho + \epsilon) I_3 \sin \gamma + \frac{1}{24} [(8\nu - 1)\rho + \epsilon] I_4 \cos \gamma$$

und

$$I_0 = f \frac{\theta}{as}, \quad I_1 = \frac{-f}{s},$$

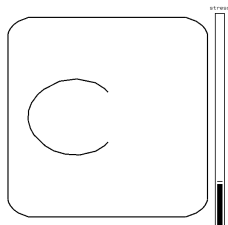
$$I_2 = \frac{-f\theta}{s} + f \ln(s + \theta), \quad I_3 = f \frac{2a + \theta^2}{s},$$

$$I_4 = \left(\frac{f\theta^3}{s} - 3aI_2 \right) / 2$$

sowie

$$\rho = R + \epsilon, \quad a = \frac{\epsilon^2}{R\rho},$$

$$s = \sqrt{a + \theta^2}, \quad f = \frac{1}{\sqrt{R^3\rho}}.$$



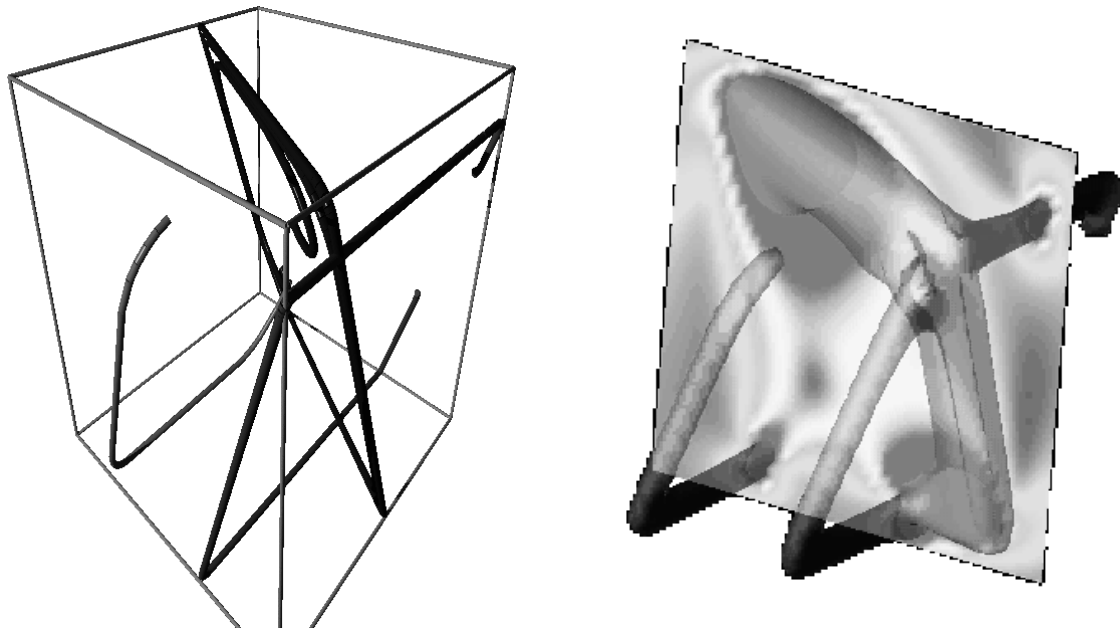


Abb. 3.4: Das Bild rechts zeigt die graustufenkodierte Oktaederspannung verursacht durch die links abgebildete Versetzungskonfiguration. Die Schläuche um die Versetzungen in der rechten Abbildung sind Flächen gleicher Spannung.

Gleichung (3.10) gibt die aufgelöste Spannung am Ort P , die das von P bis zum Nachbarpunkt im Winkel ϕ reichende Bogenstück verursacht.

Zum Wechselwirkungs–Spannungstensor wird noch der Tensor der angelegten Spannung und gegebenenfalls ein zur Erfüllung der Randbedingungen (freie Oberflächen) notwendiger Spannungstensor addiert. Da die Versetzungen in der Simulation nur konservative Bewegungen durchführen können, braucht nur die Kraftkomponente in Gleitrichtung berechnet zu werden:

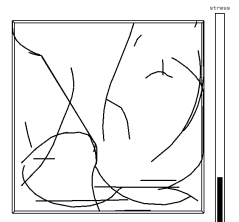
$$\mathbf{F}_{\text{glide}} = (b_i \sigma_{ij} n_j) \mathbf{n} \times \mathbf{t}. \quad (3.11)$$

\mathbf{n} kennzeichnet die Gleitebenennormale. Mit Gleichung (3.11) kann für Schraubenversetzungen auch die Kraft für Gleitung in der Quergleitebene bestimmt werden, wenn der entsprechende Normalenvektor \mathbf{n}_{quer} eingesetzt wird.

Um die neuen Positionen der Knoten \mathbf{r}_{k+1} zu bestimmen, muß die Bewegungsgleichung (3.8) gelöst werden. Hierfür wird die Integrationsmethode nach Euler mit dem Simulationszeitschritt Δt verwendet:

$$\mathbf{r}^{k+1} = \mathbf{r}^k + \frac{\mathbf{F}_{\text{glide}}^k}{B} \Delta t. \quad (3.12)$$

In der Simulation wurde ein Dämpfungskoeffizient $B = 1.7 \cdot 10^{-5}$ Pa s für Kupfer eingesetzt [158]. Die Verwendung der einfachen Einschrittmethode (3.12) hat den Nachteil, daß der Zeitschritt Δt sehr klein gewählt werden muß, um eine gute Näherung von Gleichung (3.8) zu erreichen. Allerdings ist dieses Kriterium hier nicht maßgebend für die Wahl des Zeitschrittes, sondern eine vorgegebene maximale Knotenverschiebung: Damit bei Begeg-



nungen zweier Versetzungen die Versetzungen innerhalb eines Simulationsschrittes nicht am Punkt maximaler Anziehung bzw. Abstoßung vorbeibewegt werden, darf die maximale Verschiebung nicht größer als $1b$ sein (siehe Abschnitt 3.2.2). Der hieraus resultierende Zeitschritt ist zur Approximation der Bewegungsgleichung klein genug: Eine Verdopplung von Δt liefert ein identisches Ergebnis. Auch aufgrund der nichtlinearen Kräfte und der benutzten Belastungsroutine (die angelegte Spannung wird über die mittleren Knotenverschiebungen gesteuert s. u.) ist das Eulerverfahren (3.12) anderen Verfahren höherer Ordnung (z. B. Runge Kutta) oder Mehrschrittverfahren vorzuziehen.

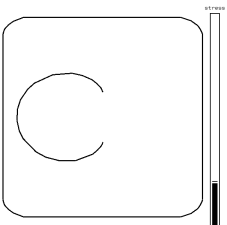
Wird ein deutlich größerer Zeitschritt gewählt, werden die Versetzungen instabil und nehmen eine Zickzackform an. Dieses Verhalten deutet auf ein zugrunde liegendes steifes Differentialgleichungssystem hin. Steife Differentialgleichungssysteme zeichnen sich durch stark unterschiedliche Zeitkonstanten (Einschwingzeiten) aus und erfordern zur Lösung sehr kleine Zeitschritte oder implizite Lösungsverfahren [159]. In der Simulation besitzt die Oszillation der Versetzungslinie um die Gleichgewichtslage eine Zeitkonstante, die viel kleiner als die Zeitkonstante der globalen Bewegung der Versetzungen ist. Durch die Beschränkung auf die maximale Verschiebungsweite von $1b$ ist Δt in der Simulation jedoch immer klein genug gewählt.

Führt man die Geschwindigkeit transversaler Scherwellen C_t als maximale Versetzungsgeschwindigkeit ein, so ergibt sich mit $C_t = 2.2 \cdot 10^3 \text{ m s}^{-1}$ für Kupfer ein minimaler Zeitschritt von $\Delta t \approx 10^{-13} \text{ s}$, um eine Verschiebung $\Delta r = |\mathbf{r}^{k+1} - \mathbf{r}^k| < 1b$ zu erreichen. Ein Punkt auf der Versetzung erreicht die maximale Geschwindigkeit jedoch nur bei der Bildung von Versetzungsknoten oder nach Annihilationsprozessen, wenn die dabei entstandenen Knicke in den Linien durch die Linienspannung gerade gezogen werden. Da eine exakte Behandlung der Dynamik dieser Prozesse jedoch nicht entscheidend für die Ergebnisse der Simulation ist, wurde eine Abschneidegeschwindigkeit von $v_{\text{ab}} = 10^3 \text{ m s}^{-1}$ benutzt.

3.2.1 Tests zur Überprüfung der Implementierung

Zur Überprüfung des Programms werden einige einfache Versetzungsanordnungen, die analytisch lösbar sind, simuliert und die Ergebnisse mit den analytischen Lösungen verglichen. Vier verschiedene Tests werden durchgeführt:

- Berechnung der Selbstspannung eines kreisförmigen Versetzungsringes und Vergleich mit der analytischen Lösung von Brown [160] (Abschnitt 3.2.1.1).
- Berechnung der kritischen Spannung, die notwendig ist, um eine Versetzung durch eine dünne Schicht zu bewegen. Diese Ergebnisse werden in Abschnitt 3.2.1.2 mit der analytischen Berechnung von Nix [1] verglichen.
- Berechnung der Versetzungsgeschwindigkeit in der Dünnschichtgeometrie zur Überprüfung der Dehnratensteuerung in Abschnitt 3.2.1.3
- Berechnung der Aktivierungsspannung einer Frank–Read Quelle und Vergleich mit den Simulationsergebnissen von Foreman [104] im Abschnitt 3.2.1.4.



3.2.1.1 Kreisförmiger Versetzungsring

Als erster Test der Simulation wird die Spannung an einem Punkt eines kreisförmigen Versetzungsringes ermittelt. Die Berechnung wird für verschiedene Ringradien R und Knotenanzahlen durchgeführt und mit dem analytischen Ausdruck [160]

$$\tau^{\text{self}} = \frac{\mu b}{4\pi R(1-\nu)} \left\{ \left(1 - \frac{\nu}{2} - \frac{3}{2}\nu \cos 2\gamma \right) \ln \frac{8R}{b} + 4\nu \cos 2\gamma \right\} \quad (3.13)$$

verglichen. ν ist die Querkontraktionszahl, γ der Winkel zwischen Burgersvektor und Gleitrichtung und μ der Schubmodul. Die Selbstspannung multipliziert mit dem Radius ist in

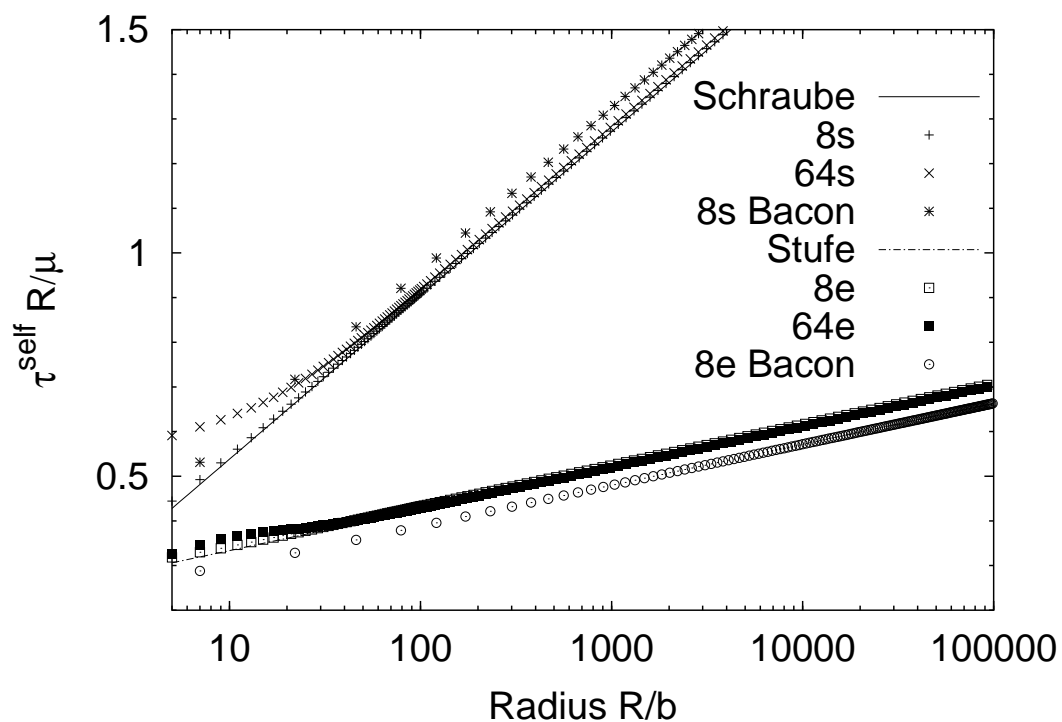
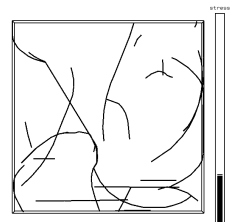


Abb. 3.5: Vergleich der simulierten Selbstspannung mit den analytischen Werten aus Gleichung (3.13). Die Selbstspannung ist für einen Punkt mit Schraubencharakter (obere Kurven) und einen Punkt mit Stufencharakter (untere Kurven) gezeigt. Der Kreis wurde in der Simulation mit acht bzw. 64 Knoten dargestellt. Gezeigt sind auch die Ergebnisse einer Simulation mit acht Knoten unter Verwendung der Methode von Bacon [157] zur Bestimmung der Spannung eines Kreisbogensegments.

Abbildung 3.5 für einen Punkt mit Schraubencharakter (obere Kurven) und einen Punkt mit Stufencharakter (untere Kurven) gezeigt. Die Ergebnisse der Simulation stimmen für Ringradien von $10b$ bis mehr als 10^5b gut mit der analytischen Lösung überein, und die Ergebnisse sind unabhängig von der Knotenanzahl sobald mehr als vier Knoten zur Darstellung des Ringes verwendet werden. Die Abweichung der Simulation mit 64 Knoten



von der analytischen Lösung bei kleinen Radien wird von unphysikalischen Beiträgen der Wechselwirkung zwischen übernächsten Nachbarn, die in diesem Fall dichter als $2b$ beieinander liegen, verursacht. Für derart kleine Abstände müßte die Mittelungsprozedur nach Brown (Gleichung (3.4)) auch für übernächste Nachbarsegmente durchgeführt werden. In der Simulation wird ein minimaler Knotenabstand von $5b$ verwendet und dadurch dieser Fall umgangen. Wenn diese Beschränkung eingehalten wird, ist die Übereinstimmung mit der analytischen Lösung ausgezeichnet.

Die gleichen Berechnungen wurden auch unter Verwendung der von Bacon hergeleiteten Gleichung zur Berechnung der Spannung eines Kreisbogensegments [157] durchgeführt, hier war die Übereinstimmung mit den analytischen Werten weniger gut (Abbildung 3.5).

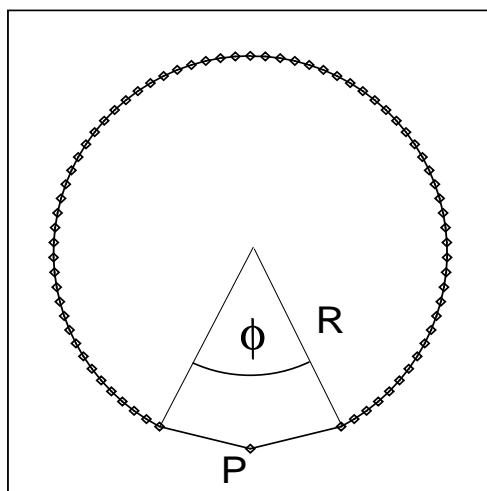


Abb. 3.6: Konfiguration zum Test der Genauigkeit von Gleichung (3.10) in Abhängigkeit von Winkel ϕ

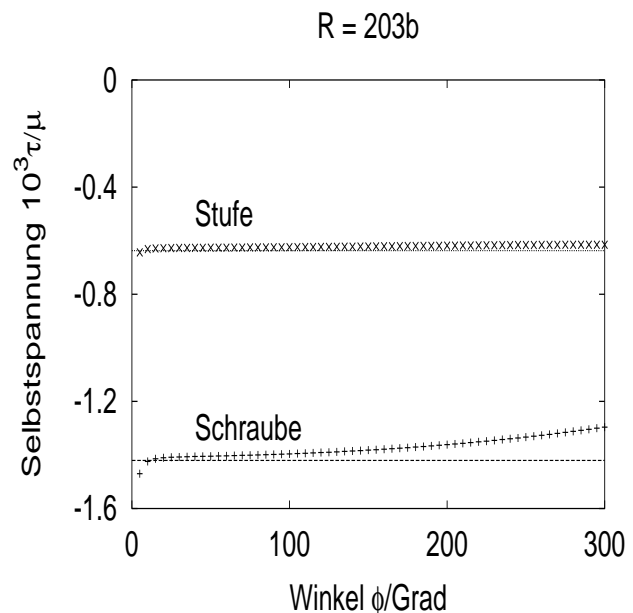
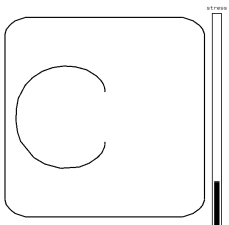


Abb. 3.7: Selbstspannung am Punkt P in Abhängigkeit vom Winkel ϕ . Die Linien entsprechen den Werten für einen regelmäßig diskretisierten Versetzungsring aus Abbildung 3.5.

Abbildung 3.6 zeigt eine Konfiguration zum Testen des Fehlers in der Selbstspannungsberechnung bei großen Winkeln ϕ . Hierzu wurde die Selbstspannung am Punkt P berechnet. Die Anzahl der Knoten und der Radius wurde konstant gehalten, variiert wurde der Winkel ϕ zwischen den benachbarten Knoten von P und somit die Größe des Kreisbogensegments in der Berechnung der Selbstspannung. Die Selbstspannung in Abhängigkeit von ϕ ist in Abbildung 3.7 wiedergegeben. Für die oberen Kurven wurde der Burgersvektor so orientiert, daß die Versetzung in P Stufencharakter hat, für die untere Kurve Schraubencharakter. Die konstanten Werte (Linien) sind die aus Abbildung 3.5 übernommenen Spannungen für eine gleichmäßige Diskretisierung der Versetzungsringes. Obwohl die Gleichung (3.10) zur Berechnung der Spannung eines Kreisbogensegments für kleine ϕ



hergeleitet wurde [119], stimmt die Selbstspannung auch noch für große ϕ erstaunlich gut mit dem Referenzwert überein. Für einen Winkel von $\phi = 300^\circ$ liegt der Fehler nur bei $\sim 10\%$.

3.2.1.2 Dünne Schicht

Die minimale Spannung, die notwendig ist, um eine Versetzung durch eine Schicht zu bewegen, ist eine weitere Größe, die analytisch berechnet werden kann (Abschnitt 2.2.1). Für diese Simulation wurde die sogenannte Kanalgeometrie verwendet. Die Bewegung der Versetzung beschränkt sich auf den Bereich der Schicht der Dicke h , die in der Ebene unendlich ausgedehnt ist. Die Grenzflächen sind undurchlässig, Bildkräfte werden nicht berücksichtigt (Abbildung 3.8). Es wurde eine vereinfachende Gleitgeometrie gewählt, in

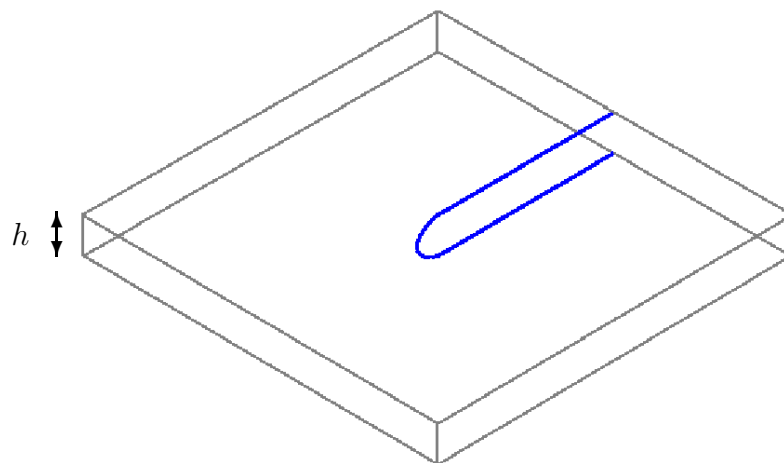
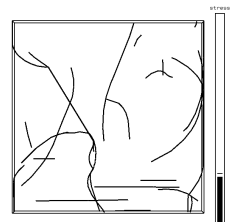


Abb. 3.8: Versetzung in einer dünnen Schicht. Da die Ränder nach oben und unten undurchdringbar sind, werden Versetzungen an den Grenzflächen beim Fortschreiten des vorderen Versetzungssteils (Threading-Segment) abgelegt.

der die Gleitebene senkrecht und der Burgersvektor parallel zu den Grenzflächen steht. Die Länge der Grenzflächenversetzungen wurde so gewählt, daß eine weitere Verlängerung das Ergebnis nicht veränderte. Die kritische aufgelöste Schubspannung ist für diese Geometrie gegeben mit [40]:

$$\tau_{\text{channel}} = \frac{\mu b}{2\pi h} \ln \frac{4h}{b}. \quad (3.14)$$

In der Simulation wurde die kritische Spannung als die angelegte Spannung bestimmt, bei der sich das führende Versetzungssegment (das Threading-Segment) gerade selbstähnlich durch die Schicht bewegt. Die Ergebnisse der Simulation sind zusammen mit der analytischen Lösung (3.14) in Abbildung 3.9 gezeigt. Die Übereinstimmung ist sehr gut und unabhängig von der Schichtdicke.



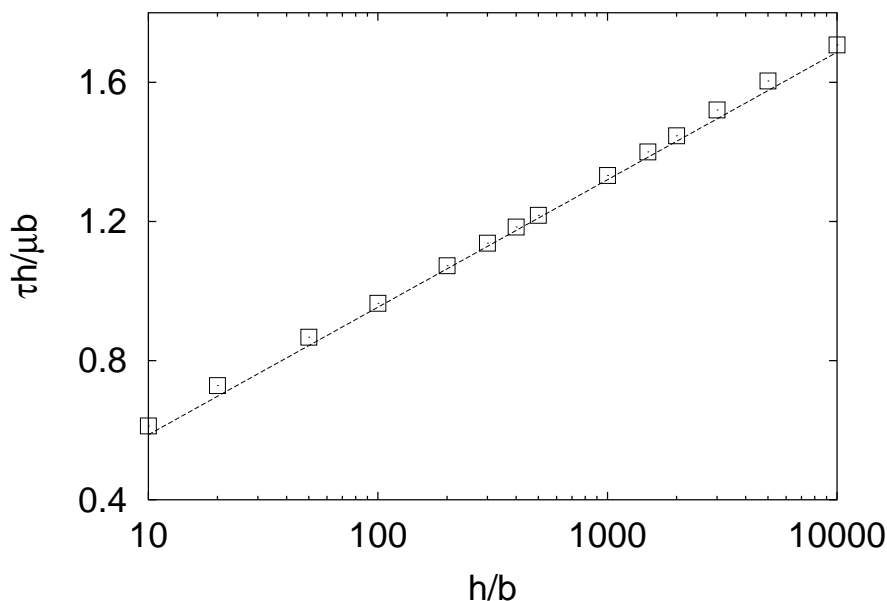


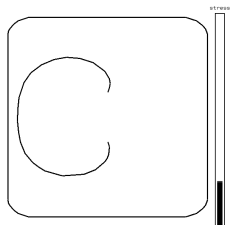
Abb. 3.9: Kritische Spannung um eine Versetzung in einer Schicht zu bewegen multipliziert mit der Schichtdicke aufgetragen über der Schichtdicke. Die Linie ist die analytische Lösung von Gleichung (3.14)

Der Kanaltest wurde auch von Gómez-García et al. [47] und Schwarz and Tersoff [46] mit einer leicht veränderten Geometrie durchgeführt. Beide Simulationen stimmen mit der analytischen Lösung überein, aber Gómez-García et al. müssen die Diskretisierungslänge der Größe des untersuchten Problems anpassen.

3.2.1.3 Versetzungsgeschwindigkeit

Die angelegte Spannung wird so gesteuert, daß eine konstante mittlere Versetzungsknotengeschwindigkeit erreicht wird.⁶ Zur Berechnung der kritischen Spannungen in Abbildung 3.9 wurde eine möglichst kleine Versetzungsgeschwindigkeit gewählt ($v_{\text{mean}} = 5 \text{ ms}^{-1}$), um so eine quasistatische Simulation zu erreichen, da die kritische Spannung für den Grenzübergang $v_{\text{mean}} \rightarrow 0 \text{ ms}^{-1}$ definiert ist. Dieser Grenzübergang ist jedoch nicht möglich, wenn sich die Versetzungsstruktur erst im Verlauf der Simulation entwickelt, da die Simulationszeit dann gegen unendlich gehen würde. Die mittlere Versetzungsgeschwindigkeit muß hier klein genug gewählt werden, daß der Fehler bei der Bestimmung der kritischen Span-

⁶Dies entspricht einer Steuerung über eine konstante Dehnrage. Es ist auch möglich, die Simulation über eine konstante Spannungsänderung zu steuern. Hier wurde die Dehnratensteuerung gewählt, da so kritische Konfigurationen an der Spannungs-Dehnungs-Kurve erkannt werden können. Die Versetzungen können außerdem nicht so schnell werden, daß die Annahme über einen linearen Zusammenhang zwischen der Kraft auf die Versetzung und deren Geschwindigkeit nicht mehr gegeben ist.



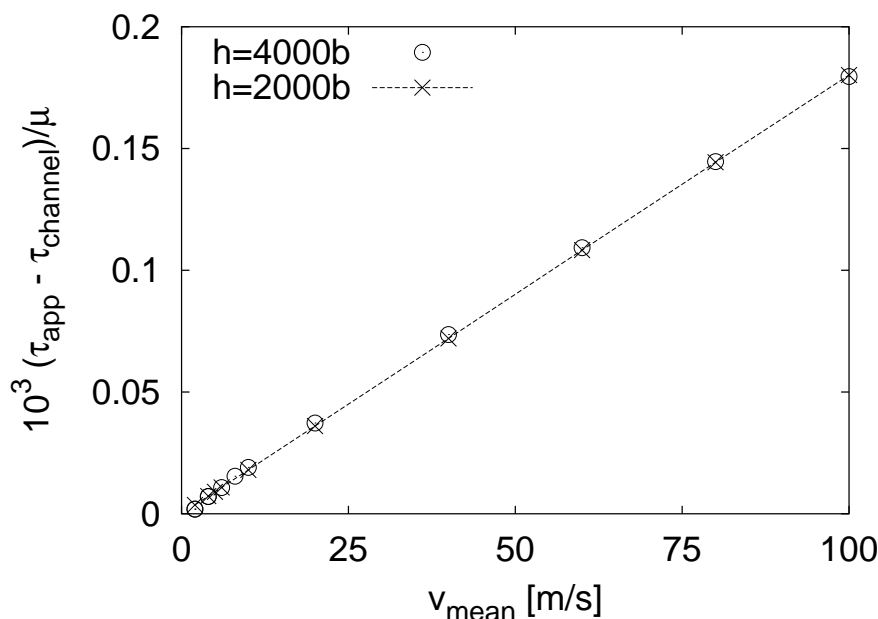


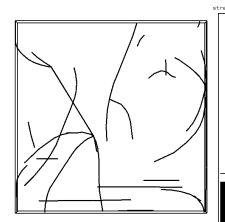
Abb. 3.10: Abhängigkeit der mittleren Geschwindigkeit von der Schubspannung für zwei verschiedene Schichtdicken

nungen noch akzeptabel ist, und die Simulation in einer angemessenen Zeit durchgeführt werden kann. Der Fehler durch eine endliche Geschwindigkeit kann anhand von Abbildung 3.10 abgeschätzt werden. Hier wurde die Differenz zwischen der angelegten Spannung und der Kanalspannung in Abhängigkeit von der mittleren Knotengeschwindigkeit aufgetragen. Die Abhängigkeit der Spannungsdifferenz von der Geschwindigkeit ist unabhängig von der Schichtdicke.

In den in Kapitel 4 präsentierten Simulationen wurde eine mittlere Knotengeschwindigkeit von $v_{\text{mean}} = 30 \text{ m/s}^{-1}$ benutzt. Hierdurch wird die Kanalspannung einer Versetzung in einer $1000b$ dicken Schicht um 3.3% überschätzt, was als ausreichend genau für die Simulation angesehen werden kann.

3.2.1.4 Frank–Read Quelle

Foreman [104] berechnete die Spannung, die nötig ist, um eine Frank–Read Quelle in einem unendlichen Kristall zu aktivieren. Die Rechenmethode könnte als zweidimensionale Simulation der diskreten Versetzungsstatik bezeichnet werden: die Selbstspannung wird an einigen Punkten der Versetzung berechnet und die Versetzung in ihre Gleichgewichtslage überführt. Nach dem Erreichen der Gleichgewichtslage wird die Spannung etwas erhöht und die Versetzung wieder relaxiert. Die Aktivierungsspannung ist diejenige, bei der keine stabile Lage gefunden werden kann. Zur Berechnung der Selbstspannung wurde die Brownsche Mittelungsmethode verwendet. Die Ergebnisse für eine festgehaltene Versetzung mit in der Gleitebene liegenden, geraden Seitenarmen sind in Tabelle 3.1 zusammengefasst. In



Quellgröße	Charakter	Foreman	DDD-Simulation
100	Schraube	0.8	0.82
100	Stufe	0.6	0.58
1000	Schraube	1.43	1.41
1000	Stufe	1.02	1.02
10000	Schraube	2.0	2.02
10000	Stufe	1.3	1.39

Tab. 3.1: Aktivierungsspannungen für Frank–Read Quellen mit in der Gleitebene liegenden Seitenarmen berechnet in einer zweidimensionalen Versetzungsstatik [104] und mit dieser Simulation. Längen sind in Einheiten von b , Spannungen in Einheiten von $\mu b/L$ angegeben.

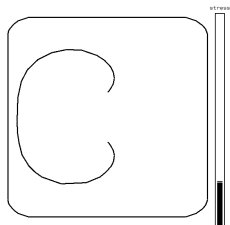
der ersten Spalte ist der Abstand der Festhaltepunkte angegeben, in der zweiten der Charakter der geraden Versetzungslinie. Die dritte Spalte zeigt die Aktivierungsspannungen ermittelt von Foreman, Spalte vier die Spannungen der Simulation. Die Übereinstimmung ist wieder sehr gut.

3.2.2 Implementierung der kurzreichweitigen Versetzungswechselwirkungen

Treffen zwei Versetzungen (oder zwei Stücke der gleichen Versetzung) mit gleichem Burgersvektor aber entgegengesetzter Linienrichtung aufeinander, annihilieren sie, d. h. die Knoten werden neu verknüpft. Den Vorgang für zwei Versetzungen auf unterschiedlichen Gleitebenen zeigt Abbildung 3.11. Nach der Rekombination sind die Versetzungen auf den beiden Gleitebenen mit jeweils einem Verbindungsknoten, der sich nur auf der Schnittgeraden der Gleitebenen bewegen kann, verbunden. Die Position des Verbindungsknoten wird so berechnet, daß der Abstand zwischen dem Verbindungsknoten und den nächsten Knoten der Versetzungen zu beiden Seiten minimiert wird [119].

Zwischen zwei Versetzungen mit unterschiedlichen Burgersvektoren kann es zu Reaktionen wie Abstoßung, Bildung von Versetzungsknoten unterschiedlicher Größe oder Anziehung ohne Versetzungsknotenbildung kommen. Um die Versetzungsreaktionen im Rahmen der Elastizitätstheorie für perfekte Versetzungen möglichst exakt zu behandeln, werden diese voll aufgelöst simuliert. Hierbei wird das Reaktionsprodukt nicht durch ein neues Versetzungssegment ersetzt, da zum einen die Erfassung aller möglichen Reaktionskombinationen sehr aufwendig ist, und zum anderen durch die Einführung von nicht verifizierbaren Reaktionskriterien, die angeben, wann ein Reaktionsversetzungssegment eingesetzt und wann aufgelöst wird, Fehler entstehen können. Eine voll aufgelöste Behandlung bedeutet, daß die Versetzungen auch bei kleinen Abständen entsprechend den nach der Elastizitätstheorie kontinuierlicher Körper wirkenden Kräfte bewegt werden. Für die gegenseitige Wechselwirkung von zwei Segmenten wird ein Abschneideradius von einem Burgersvektor eingeführt, d. h. bei Abständen kleiner als $1b$ werden die Spannungen konstant gehalten.

Ein Versetzungsschneidprozeß (Abbildung 3.12) wird dadurch erkannt, daß sich zwei



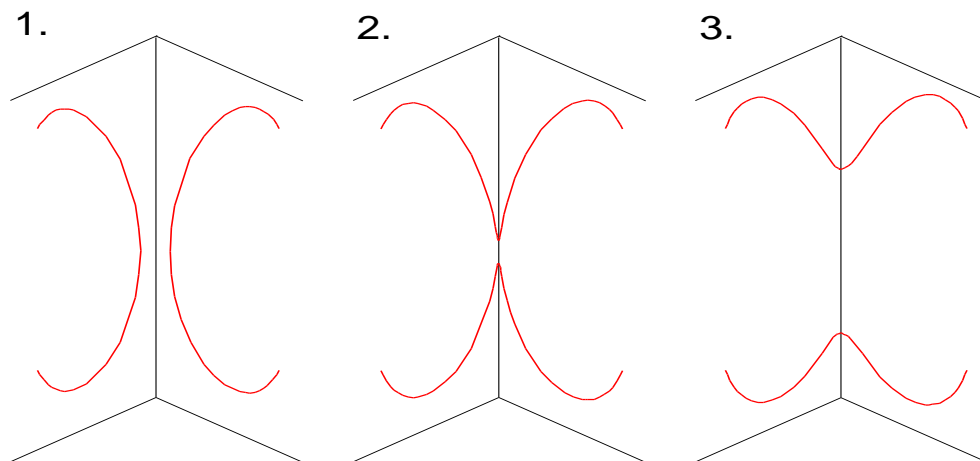


Abb. 3.11: Rekombination von zwei Versetzungen mit gleichem Burgersvektor auf verschiedenen Gleitebenen. 1. Die Versetzungen ziehen sich an. 2. Die Knoten werden neu verbunden. 3. Bei der weiteren Bewegung (hier unter einer angelegten Spannung) wird der Verbindungsknoten auf der Schnittlinie der Gleitebenen mitbewegt.

Versetzungspunkte sehr nahe kommen ($< 40b$) und nur ein Segment die Gleitebene der zweiten Versetzung schneidet. Auf diesen Schnittpunkt wird jeweils ein Kollisionsknoten gesetzt, der nicht gelöscht werden darf. Dadurch wird verhindert, daß die Versetzungen durch Rediskretisierungsprozesse (Einsetzen oder Löschen von Knoten) aneinander vorbei gesetzt werden. Die Versetzungen können sich nur dann schneiden, wenn die Kraft durch die Linienspannung größer ist als die Abstoßung zwischen den Kollisionsknoten. Die Entstehung von Jogs beim Schneidprozeß wird vernachlässigt.

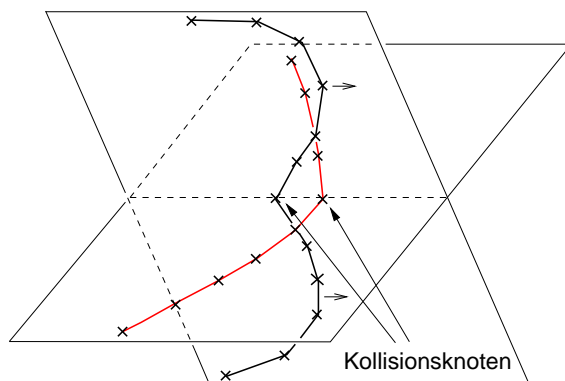


Abb. 3.12: Schematische Darstellung eines Versetzungsschneidprozesses. Die Bewegungsrichtung einer Versetzung ist durch Pfeile gekennzeichnet

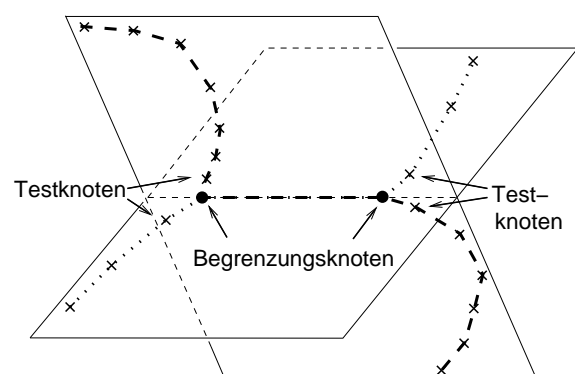
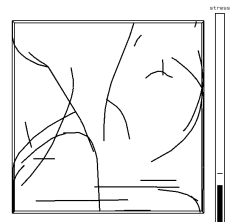


Abb. 3.13: Ein Versetzungsknoten besteht aus zwei attraktiven Versetzungen, die auf einer gemeinsamen Linie liegen.

Einen größeren Härtungsbeitrag liefern die attraktiven Wechselwirkungen, bei denen sich Versetzungsknoten formen, d.h. Versetzungen entlang der Schnittgeraden der Gleit-



ebenen abgelegt werden (Abbildung 3.13). Die Summe der Felder der Versetzungen im Versetzungsknoten entspricht dem Feld der rekombinierten Versetzung, ein neues Versetzungsknotensegment braucht nicht eingeführt werden. Die Knoten, die entlang der Schnittlinie liegen, werden sich aufgrund des Spannungsfeldes der attraktiven Partnerversetzung um die Schnittlinie hin und her bewegen, und die Versetzung wird hier eine Zickzackform annehmen. Deshalb werden diese inneren Knoten herausgeschnitten und der Versetzungsknoten durch jeweils zwei Begrenzungsknoten terminiert (Abbildung 3.13). Reihensich die den Begrenzungsknoten benachbarten Testknoten ebenfalls entlang der Schnittlinie auf, wird der Versetzungsknoten vergrößert. Bewegen sich von der Schnittlinie weg, wird er verkleinert. Die Entstehung eines Versetzungsknotens wird dadurch erkannt, daß der Abstand zwischen zwei Versetzungen kleiner ist als ein kritischer Abstand ($40b$) und mindestens zwei Segmente die Schnittgerade schneiden.

3.2.2.1 Vergleichsrechnungen

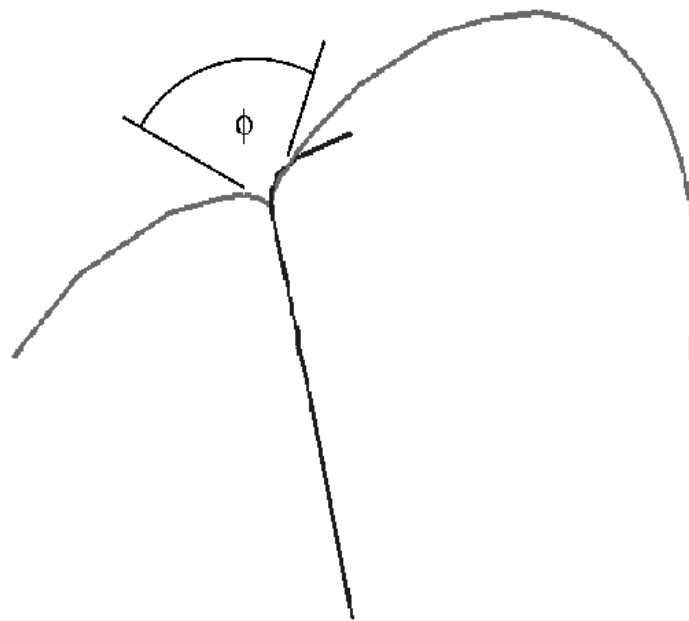
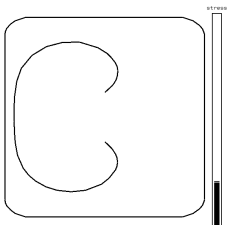


Abb. 3.14: Eine Versetzung mit Burgersvektor $\mathbf{b}_1 = [011]$ auf der Gleitebene $\mathbf{n}_1 = (1\bar{1}1)$ schneidet eine Versetzung mit $\mathbf{b}_2 = [1\bar{1}0]$ und $\mathbf{n}_2 = (111)$. Die Anfangslinienrichtungen standen senkrecht aufeinander: $\xi_1 = [110]$, $\xi_2 = [1\bar{1}0]$. Die Blickrichtung ist die $[1\bar{1}1]$ Richtung.

In der Simulation werden Versetzungsreaktionen stark vereinfacht behandelt, da nur Reaktionen von perfekten Versetzungen betrachtet werden, und die Veränderung der atomaren Struktur der Versetzungskerne vollständig vernachlässigt wird. Der genaue Verlauf der Reaktion (welche Partialversetzungen miteinander reagieren und wie deren Reaktionsprodukte sind, welche Jogs sich formen...) ist für die Simulation aber auch nicht entscheidend. Wichtig sind die Spannungen, die notwendig sind, um Versetzungen aneinander

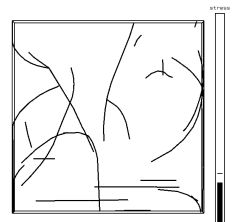


vorbei zu bewegen, um somit den Härungsbeitrag der Versetzungsreaktionen bestimmen zu können. Ob die Beschränkung auf perfekte Versetzungen und rein elastische Wechselwirkungen hierfür ausreichend ist, können Vergleiche mit Molekulardynamik-Simulationen zeigen. Da die atomistischen Simulationen sehr aufwendig sind, gibt es hier bisher nur sehr wenige Ergebnisse. Vergleiche mit Linienspannungsrechnungen oder anderen Versetzungssimulationen geben Aufschlüsse darüber, ob die Simulation unter den gemachten Vereinfachungen konsistent ist.

Als Vergleichswert für eine repulsive Versetzungsreaktion liegt nur eine Berechnung des kritischen Durchbruchwinkel ϕ_c für die in Abbildung 3.14 gezeigte Konfiguration vor [128, 129]. Der Vergleich gestaltet sich hier aber schwierig, da in der atomistischen Simulation die kritischen Durchbruchwinkel für die Partialversetzungen getrennt berechnet wurden (für die vordere Partialversetzung $\phi_c = 70^\circ$, für die hintere Partialversetzung $\phi_c = 180^\circ$)⁷, in der Versetzungssimulation der Winkel jedoch für die perfekte Versetzung berechnet wird ($\phi_c = 95^\circ \pm 5^\circ$ wobei der Fehler aus Streuung der Ergebnisse verschiedener Rechnungen überschlagen wurde).

Fivel et al. [133] verglichen die Ergebnisse von verschiedenen Simulationen und analytischen Berechnungen der Länge eines Lomer–Cottrell Versetzungsknotens. Abbildung 3.15 zeigt die verwendete Konfiguration. Die anfänglich geraden Versetzungen, die im Winkel ϕ zur Schnittlinie der Gleitebenen ausgerichtet sind, ziehen sich gegenseitig an und bilden einen Versetzungsknoten wie in Abbildung 3.13 dargestellt (ohne Anlegen einer externen Spannung). Abbildung 3.16 zeigt die Länge des Versetzungsknotens L_j normiert mit der ursprünglichen Länge der an beiden Enden festgehaltenen Versetzung in Abhängigkeit vom Winkel ϕ . Die Linien der Abbildung sind die Ergebnisse von Linienspannungsberechnungen. Hier wird die Länge des Versetzungsknotens über das Kräftegleichgewicht an den Tripelpunkten bestimmt. Die anisotrope Berechnung [127] berücksichtigt den unterschiedlichen Charakter der Versetzungen, der in der isotropen Berechnung [126] vernachlässigt wird. Neben den Resultaten der Linienspannungsberechnungen sind noch die in drei verschiedenen Versetzungssimulationen bestimmten Versetzungsknotenlängen eingetragen. Die „edge-screw“ Simulation [133] benutzt das Versetzungssimulationsprogramm von Kubin et al. [112, 111] mit reiner Stufen- und Schraubendiskretisierung der Versetzungen. Die „nodal solution“ [131] ist eine Simulation, die die Dissoziation einer Versetzung in Partialversetzungen, die durch die Stapelfehlerenergie (für Aluminium) zusammengehalten werden, berücksichtigt. Die Diskretisierung erfolgt hier mit gemischten Segmenten. Die Fehlerbalken ergeben sich aus der Unsicherheit beim Ablesen der Länge des Versetzungsknotens. Die Ergebnisse dieser Simulation sind mit Kreuzen („x“) in das Diagramm eingetragen. Der Fehler ist hier etwa genauso groß wie in den beiden anderen Simulationen. Die Ergebnisse dieser Simulation stimmen innerhalb der Fehlerschranken mit der

⁷In [128, 129] wird behauptet, das Ergebnis $\phi_c = 70^\circ$ sei in guter Übereinstimmung mit Werten, die mit Hilfe experimenteller Ergebnisse hergeleitet wurden [113]. Tatsächlich ist der kritische Bruchwinkel in [113] anders definiert als in [128, 129] und Abbildung 3.14, so daß mit diesen experimentellen Ergebnissen ein kritischer Bruchwinkel von $\phi_c = 140^\circ$ folgt. Außerdem wurde dieser Winkel unter Annahme starker Hindernisse berechnet. Diese resultieren jedoch aus attraktiven und nicht repulsiven Versetzungswechselwirkungen [124].



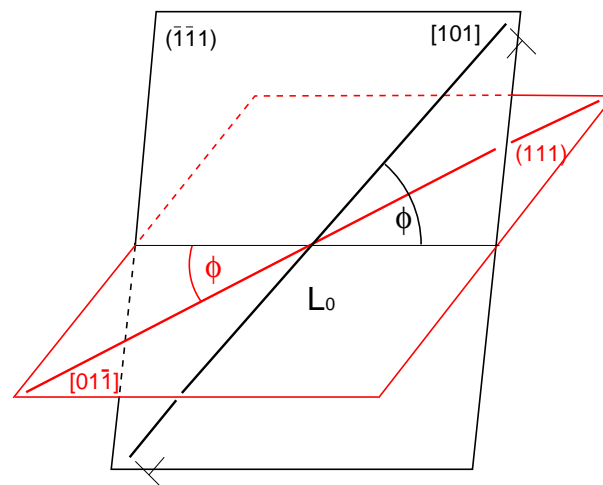


Abb. 3.15: Startgeometrie zur Berechnung der Versetzungsknotenlänge (Abbildung 3.16). ϕ ist der Winkel zwischen den geraden Versetzungen und der Schnittlinie der Gleitebene

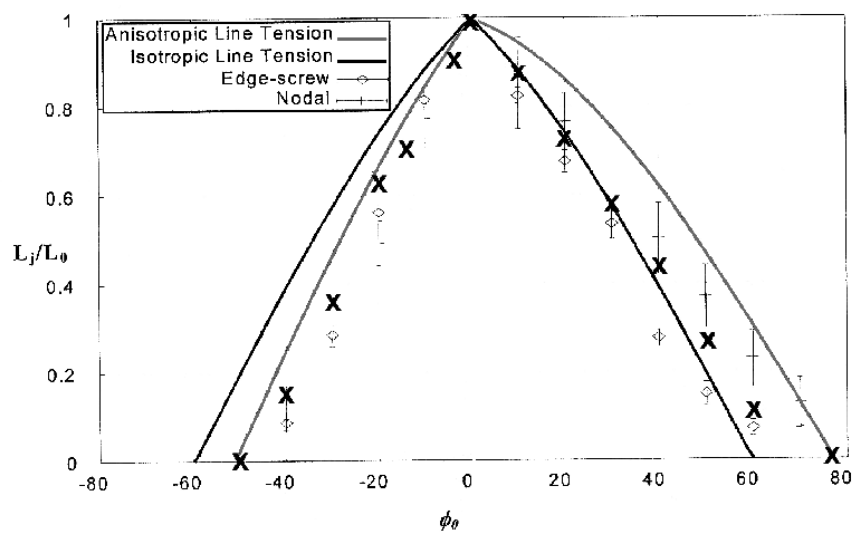
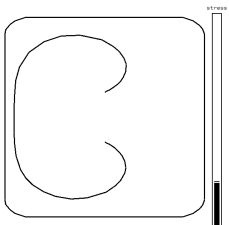


Abb. 3.16: Länge des Versetzungsknotens in Abhängigkeit von ϕ aus [133]. Die Ergebnisse dieser Simulation sind zum Vergleich mit „x“ eingetragen.



Simulation von Shenoy et al. [131] überein. Diese wurde bezüglich der Abmessungen des Versetzungsknotens und der Reaktionsprodukte mit einer atomistischen Simulation [130] (für Aluminium) verglichen, wobei ebenfalls gute Übereinstimmung gefunden wurde.

Die kritische Spannung, einen Versetzungsknoten mit $\phi = 60^\circ$ aufzureißen, wurde von Shenoy et al. [131] zu $\tau_c = 0.64\mu b/l$ bestimmt, wenn auf beiden Versetzungen die gleiche aufgelöste Schubspannung wirkt, und der Festhalteabstand der Versetzungen $2l$ beträgt. Diese Simulation liefert hier $\tau_c = 0.7\mu b/l$. Atomistische Berechnungen ergaben für $\tau_1 = 1.3\tau_2$ eine kritische Spannung von $\tau_c = 0.8\mu b/l$. Für $\tau_2 = 0$ ist die kritische Spannung der Versetzungssimulation aus [131] mit der dieser Simulation identisch ($\tau_1 = 1.17\mu b/l$). Die Ergebnisse der atomistischen Simulation stimmen gut mit der Simulation der Partialversetzungen überein und diese wiederum mit dieser Simulation perfekter Versetzungen. Zumindest für den Fall des Lomer-Cottrell Versetzungsknotens ist die Verwendung der linearen Elastizitätstheorie also ausreichend.

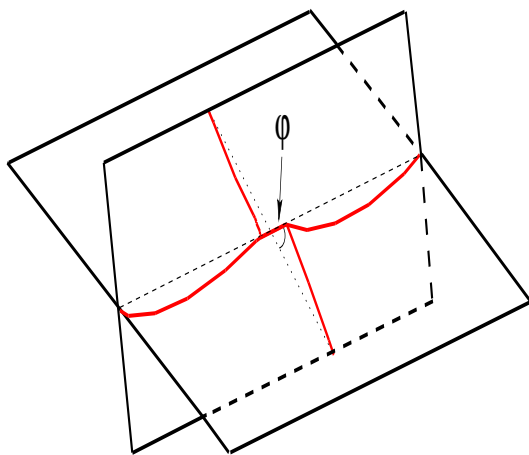


Abb. 3.17: Konfiguration für die Berechnung der Aufbruchspannung. Das Gleitsystem der Waldversetzung ist $(\bar{1}\bar{1}1)[\bar{1}0\bar{1}]$. ϕ ist der Winkel zwischen der (ursprünglichen) Linienrichtung der Waldversetzung und der Schnittgeraden der Gleitebenen ($[\bar{1}10]$ Richtung). Die mobile Versetzung hat eine $[1\bar{1}0]$ Startlinienrichtung, $[1\bar{1}0]$ Burgersvektor (Schraubencharakter) und liegt auf der (111) Gleitebene.

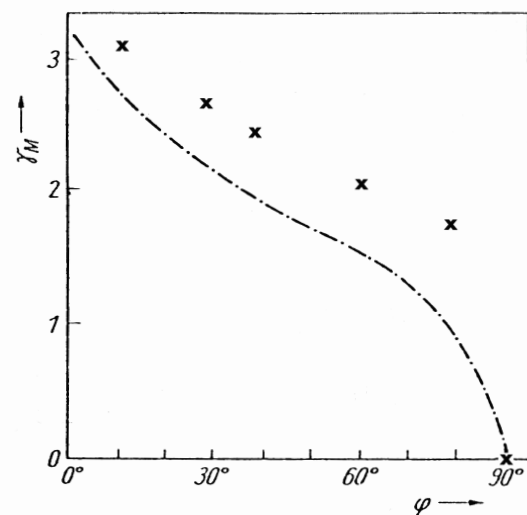
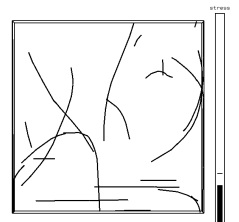


Abb. 3.18: Vergleich der reduzierten Aufbruchspannung $\gamma = \frac{2\tau L}{\mu b}$ mit den Linienspannungsberechnungen von Schoeck [127] für die Konfiguration 3.17. τ ist die aufgelöste Schubspannung auf die mobile Versetzung. Die Waldversetzung erfährt keine Kraft durch die externe Spannung.

Da keine weiteren atomistischen Berechnungen der Aufbruchspannung für andere Versetzungsknotenkonfigurationen existieren, wurde die Simulation mit Linienspannungsberechnungen [127] verglichen (Abbildung 3.18). In [127] wird die Gleichgewichtskonfiguration des Versetzungsknotens unter einer angelegten Spannung über virtuelle Verrückung der Versetzungsknotenenden bestimmt. Treffen die Versetzungsknotenenden aufeinander, ist die kritische Aufbruchspannung erreicht. Qualitativ ist die Übereinstimmung gut. Die



Beträge der Aufbruchspannungen sind von der gleichen Größenordnung, was unter Berücksichtigung der in [127] verwendeten Näherungen — Verwendung der Integration auf der Versetzungslinie bei der Herleitung der Linienenergie (vergleiche Abbildung 3.12), Vernachlässigung der Wechselwirkung entfernter Segmente, vereinfachte Beschreibung der Versetzungsformen (elliptische Form für die bewegliche Versetzung, gerade Segmente für die Waldversetzung) — als ausreichend bezeichnet werden kann.

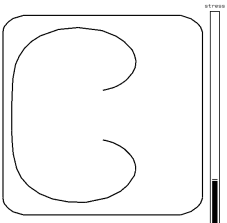
3.2.3 Randbedingungen

Wie in Abschnitt 3.1.3 dargestellt, müssen die Randbedingungen dem untersuchten Problem angepaßt werden. Da die Simulation verwendet werden soll, um die Versetzungsbewegung in dünnen Schichten zu untersuchen, müssen die Begrenzungen der Schicht entsprechend realisiert werden. Die einfachste Realisierung entspricht der in Abbildung 3.8 gezeigten Kanalkonfiguration. Hier werden die Grenzflächen der Schicht als undurchdringbare Hindernisse für die Versetzungen eingeführt: Die Versetzungen können sich nur innerhalb der Schicht bewegen und legen dabei an den Grenzflächen Versetzungen ab. Diese Konfiguration entspricht einem Modellsystem einer dünnen Schicht, die zu beiden Seiten von einem Material unendlicher Ausdehnung umgeben ist. Die elastischen Konstanten des Randmaterials sind identisch mit denen der Schicht, so daß die Versetzungen keine Bildkräfte erfahren. Die experimentell untersuchten Metallschichten (Al, Cu, Ag, Au) sind häufig auf einem Siliziumsubstrat (evtl. mit einer dünnen Oxidschicht (ca. 50nm dick) und Diffusionsbarriere (SiN_x ca. 50nm dick) als Zwischenschichten) abgeschieden und mit einer Passivierungsschicht oder einer natürlichen Oxidschicht abgedeckt. Das Silizium-Substrat ist in der Regel viel dicker als die Schicht ($\approx 500\mu\text{m}$) und hat ähnliche elastische Konstanten (z. B. beträgt der Schubmodul von Cu $\mu_f = 42.1\text{GPa}$, jener von Si $\mu_s = 63.7\text{GPa}$ [38]), so daß auf dieser Seite die Kanalrandbedingung erfüllt ist. Näherungsweise gilt das auch für die andere Seite, die Passivierungsschicht ist zwar dünner ($\approx 50\text{nm}$) hat aber einen größeren Schubmodul ($\mu_p = 117\text{GPa}$ für Si_3Ni_4).

Zur Abschätzung des Fehlers der Kanalrandbedingungen kann die kritische Spannung, die notwendig ist, um eine Versetzung durch die Schicht zu bewegen, mit Hilfe des Nix Modells (Abschnitt 2.2.1) berechnet werden. Die kritische aufgelöste Schubspannung ist hiernach:

$$\tau = \frac{\mu_{\text{eff}} b \sin \phi}{2\pi(1-\nu)h} \quad \text{mit} \quad \mu_{\text{eff}} = \frac{\mu_f \mu_s}{\mu_f + \mu_s} \ln\left(\frac{\alpha h}{b}\right) + \frac{\mu_f \mu_p}{\mu_f + \mu_p} \ln\left(\frac{\alpha' h_p}{b}\right), \quad (3.15)$$

wenn eine Stufenversetzung an der Grenzfläche abgelegt wird. α und α' sind numerische Konstanten von der Größenordnung eins [12], die den Abschneideradius des Versetzungsfeldes definieren. Setzt man die oben angegebenen Werte in (3.15) ein, so folgt für eine 500nm dicke Kupferschicht auf einem Silizium Substrat mit einer Si_3Ni_4 Passivierungsschicht ein effektiver Schubmodul von $\mu_{\text{eff}} = 355\text{GPa}$, für die Kanalgeometrie folgt $\mu_{\text{eff}} = 319\text{GPa}$. Der Fehler beträgt nur 10% und ist von der gleichen Größenordnung wie der inhärente Fehler der Versetzungssimulation.



Ist das Substrat oder die Passivierung steifer als die Schicht, werden die Grenzflächenversetzungen einen Abstand zur Grenzfläche haben, der jedoch verglichen mit den hier betrachteten Schichtdicken vernachlässigbar ist [161]. Im Grenzfall eines unendlich steifen Substrates und Passivierungsschicht ist die kritische Spannung 20% größer als für den Fall gleicher elastischer Konstanten [45].

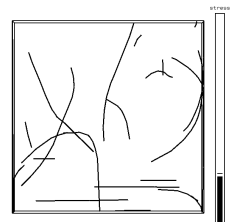
3.2.3.1 Freie Oberflächen

Sind Passivierungsschicht und Substrat elastisch nachgiebiger, so ist das Feld der Grenzflächenversetzungen im Schichtinneren kleiner. Im Grenzfall einer freistehenden Schicht können die Versetzungen an den Grenzflächen austreten und die Nix Spannung wird null (abgesehen von atomistisch bedingten Festhaltekräften an der Oberfläche wie die Erzeugung von Oberflächenstufen). Um den Einfluß der Grenzflächen abschätzen zu können, werden deshalb die Simulationen der Kanalgeometrie mit Simulationen einer freistehenden Schicht verglichen.

Berührt eine Versetzung eine freie Oberfläche so wird sie in der Simulation am Punkt der Berührung aufgeschnitten und die neuen Enden werden durch Knoten, die in der freien Oberfläche liegen, terminiert. Nach der Bestimmung der neuen Positionen aller Knoten innerhalb der Schicht werden die Oberflächenknoten so bewegt, daß das letzte Segment der Versetzung in einem rechten Winkel auf die Oberfläche trifft. Stufen- und Schraubenversetzungen werden auf diese Art gut beschrieben. Für Versetzungen mit gemischten Charakter besteht dagegen die Tendenz, die Versetzungslinie in Richtung des Burgersvektors auszurichten, um die Linienenergie zu minimieren [162]. Allerdings spielt die Behandlung der Versetzungen dicht an der Oberfläche nur eine untergeordnete Rolle, solange sich die kritischen Versetzungskonfigurationen (wie z. B. Frank-Read Quellen) im Innern der Schicht befinden (was in den Simulationen hier der Fall ist).

Die Simulation der freistehenden Schicht wurde in den folgenden Kapiteln ohne Berücksichtigung der Bildkräfte durchgeführt, da diese die Versetzungsbewegung nur unwesentlich beeinflussen, die Rechenzeit jedoch entscheidend verlängern (Faktor 100). Um den dadurch verursachten Fehler abschätzen zu können, wurde die mehrfache Aktivierung einer Frank-Read Quelle in einer freistehenden Schicht mit korrekter Behandlung der Randbedingungen simuliert und mit dem vereinfachten Fall verglichen. Die Randbedingungen wurden durch Verwendung der Traktionskompensationsmethode (siehe Abschnitt 3.1.3) auf einem 12×12 Gitter (Abbildung 3.19) erfüllt. Die Routine zur Berechnung der durch die Punktkräfte verursachten Spannungen an den Knoten der Versetzungen wurde von Hartmaier [141] übernommen. Die in [141] publizierten Simulationsergebnisse wurden als Vortest der Implementierung nachgerechnet und konnten gut reproduziert werden.

Zur Überprüfung der Wichtigkeit der Bildkräfte in den hier durchgeführten Simulationen wurde eine Frank-Read Quelle der Größe $s = 400b$ in einem kolumnaren Korn (Korngröße $d = 2000b$) einer $2000b$ dicken freistehenden Schicht simuliert (Abbildung 3.19). Die Korngrenzen wurden dabei als undurchdringbare Hindernisse für die Versetzungen eingeführt (siehe Abschnitt 4.2), so daß sich die Versetzungen davor aufstauen. Die angelegte Spannung ist in Abbildung 3.20 für die Simulationen mit und ohne Berücksichtigung der



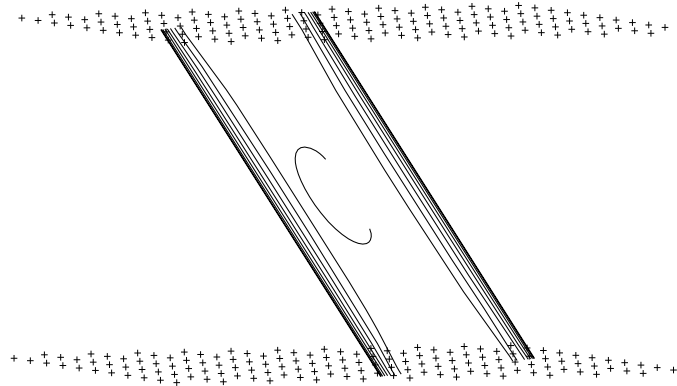


Abb. 3.19: Frank-Read Quelle in einer frei stehenden Schicht. Die Punkte in der Ober- und Unterseite kennzeichnen die Stellen, an denen die traktionskompensierenden Punktkräfte aufgebracht werden.

Bildkräfte aufgetragen. Sie wurde so gesteuert, daß eine konstante mittlere Versetzungsknotengeschwindigkeit von 30ms^{-1} erreicht wurde. Eine Einheit auf der x-Achse entspricht ungefähr der Emission eines Versetzungsrings. Der Unterschied zwischen den Simulationen ist sehr gering ($< 2\%$ für die Aktivierung der Frank-Read Quelle), lediglich wenn die Versetzungen auf die Oberfläche treffen, sind Differenzen zu erkennen. Eine Vernachlässigung der Bildkräfte ist für Versetzungsprozesse, die sich im wesentlichen im Inneren einer dünnen Schicht abspielen, gerechtfertigt.

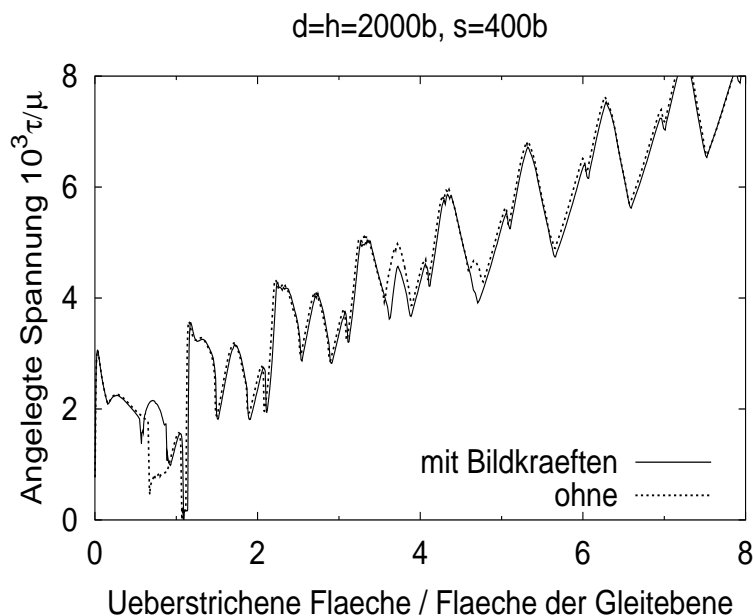
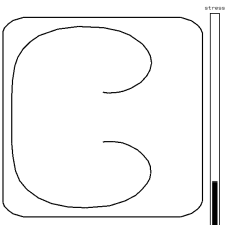


Abb. 3.20: Verlauf der angelegten Spannung bei konstanter Versetzungsgeschwindigkeit.



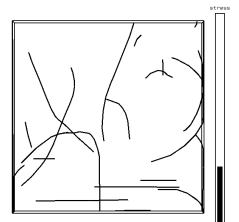
3.2.4 Zusammenfassung der in der Versetzungssimulation verwendeten Annahmen

Grundlage der Versetzungssimulation ist die isotrope lineare Elastizitätstheorie, auf der die Berechnung der Spannungen und Kräfte beruht. Die (perfekten) Versetzungen werden durch verkettete Listen von Knoten repräsentiert. Zur Berechnung der Selbstspannung auf einen Knoten wird die Versetzung zwischen dem Knoten, an dem die Spannung berechnet werden soll, und seinen Nachbarknoten durch einen Kreisbogen angenähert. Die Spannung des Kreisbogens wird mit einer Näherung von Schwarz [119] berechnet, wobei die Mittelungsmethode von Brown [98] verwendet wird. Die Spannungen, die vom entfernten Teil der Versetzung und von anderen Versetzungen verursacht werden, werden unter Verwendung eines analytischen Ausdrucks für gerade Segmente [111] bestimmt. Die Peierls Spannung wird vernachlässigt und es wird von einer gedämpften Bewegung der Versetzung ausgegangen.

Kurzreichweitige Wechselwirkungen werden voll aufgelöst behandelt, d. h. es werden keine speziellen Segmente oder Rekombinationsregeln verwendet, lediglich ein Abschneideradius der gegenseitigen Wechselwirkung von einem Burgersvektor wird eingeführt. Die Bildung von Jogs bei Schneidprozessen wird vernachlässigt.

Es werden Versetzungen in einem kolumnaren Korn einer polykristallinen Schicht simuliert. Zwei verschiedene Systeme werden betrachtet: eine freistehende Schicht und eine Schicht abgeschieden auf einem Substrat und abgedeckt mit einer Passivierungsschicht. Letzteres wird als Kanal- oder Würfelgeometrie bezeichnet und durch Einführung undurchdringbarer Grenzflächen realisiert. Bildkräfte aufgrund unterschiedlicher elastischer Konstanten von Substrat, Schicht oder Grenzfläche werden vernachlässigt. Die freien Oberflächen der freistehenden Schicht werden verwirklicht, indem die Versetzungen abgeschnitten werden, sobald sie die Oberfläche berühren. Der Endknoten der Versetzung, der in der freien Oberfläche liegt, wird so bewegt, daß das letzte Segment im rechten Winkel auf die Oberfläche trifft. Weitere Bildkräfte werden nicht berücksichtigt.

Korngrenzen werden als undurchdringbare Hindernisse eingeführt. Die Kraft, die von aufgestauten Versetzungen auf eine Korngrenze ausgeübt wird, wird in der Simulation berechnet, so daß festgestellt werden kann, wann ein Korngrenzendurchbruch stattfindet.



Kapitel 4

Ergebnisse

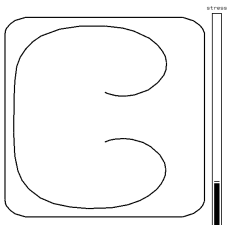
Die im vorangegangenen Kapitel eingeführte Versetzungssimulation soll nun benutzt werden, um das plastische Verhalten von dünnen Metallschichten zu untersuchen. Bei Raumtemperatur wird die plastische Verformung von den Versetzungen getragen. Die Bewegung, Erzeugung und Vernichtung von Versetzungen wird von der eingeschränkten Geometrie der dünnen polykristallinen Schicht stark beeinflusst. Die hohen Fließspannungen dünner Schichten resultieren aus diesen Einschränkungen, welcher Mechanismus aber im Detail dafür verantwortlich ist und warum die Fließspannung mit kleiner werdender Schichtdicke ansteigt, ist noch nicht verstanden und soll hier eingehender studiert werden. In Abschnitt 4.1 wird die Bewegung von Versetzungen in einer dünnen Schicht unter dem Einfluß von Hindernisversetzungen untersucht. Unterkapitel 4.2 hat die Erzeugung und Vervielfältigung von Versetzungen in kleinen Kristalliten zum Inhalt. In Abschnitt 4.3 werden komplexe Vielversetzungssimulationen durchgeführt, um Spannung–Dehnungskurven zu erhalten, die mit experimentellen Daten verglichen werden können.

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Simulationen vorgestellt. Sie werden zum Teil im Rahmen der Kontinuumstheorie interpretiert, um zu zeigen, daß die Rechnungen sinnvolle Resultate geliefert haben. Die Diskussion der Ergebnisse bezüglich ihrer Bedeutung in der Dünnschichtplastizität, der Vergleich verschiedener Rechnungen und die Gegenüberstellung mit experimentellen Daten erfolgt in Kapitel 5.

4.1 Versetzungsbewegung in dünnen Schichten

Wenn sich eine Versetzung in einer dünnen Schicht bewegt, muß sie an den Grenzflächen zum Substrat und zur Passivierungsschicht Versetzungen ablegen. Hierdurch ergeben sich für dünne Schichten typische Versetzungsanordnungen, die auch oft im Elektronenmikroskop als im 120° Winkel zueinander stehende Gleitspuren gesehen werden [21, 10, 11, 76, 77, 49]. Die Auswirkung dieser speziellen Anordnungen, insbesondere der Grenzflächenversetzungen, auf die Fließspannung werden in diesem Abschnitt untersucht.

Um eine Versetzung durch eine dünne Schicht zu bewegen, muß eine kritische Mindestspannung überwunden werden (Abschnitt 2.2.1). Im Fall einer einzelnen mobilen Ver-



setzung ergibt sich diese Spannung aus der Energie, die notwendig ist um die Grenzflächenversetzungen zu erzeugen. Sind noch weitere Versetzungen in der Schicht vorhanden, wechselwirken diese über ihr elastisches Spannungsfeld mit der mobilen Versetzung und beeinflussen somit die kritische Spannung. Diese Versetzungen werden im folgenden als Hindernisversetzungen bezeichnet. In den Abschnitten 4.1.1 und 4.1.2 wird der Einfluß von Hindernisversetzungen auf Gleitebenen, die parallel zur Gleitebene der mobilen Versetzung angeordnet sind, betrachtet. Im anschließenden Abschnitt 4.1.4 folgt die Berechnung für Hindernisversetzungen auf sich schneidenden Gleitebenen. Es werden Schichten betrachtet, die auf einem Substrat abgeschieden und mit einer Deckschicht versehen sind, d. h. beide Grenzschichten sind für Versetzungen undurchdringbar und die Konfiguration entspricht der in Kapitel 3.2.1.2 eingeführten Kanalgeometrie.

4.1.1 Einzelne parallele Grenzflächenversetzungen

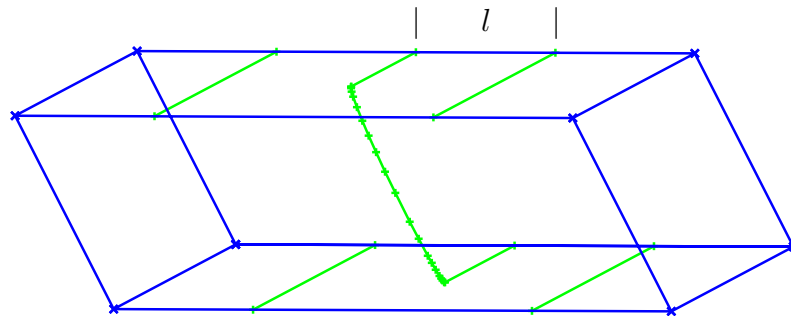
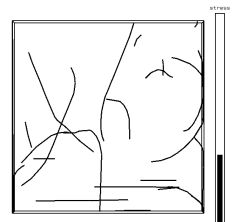


Abb. 4.1: Mobile Versetzung mit Threading-Segment und zwei Paare von Grenzflächenversetzungen auf parallelen Gleitebenen zu beiden Seiten der mobilen Versetzung

In diesem Abschnitt wird die Änderung der kritischen Spannung untersucht, die sich einstellt, wenn es zusätzliche Grenzflächenversetzungen auf parallelen Gleitebenen gibt. Abbildung 4.1 zeigt die simulierte Konfiguration. Die mobile Versetzung ist an dem Threading-Segment zu erkennen, welches sich über die Schichtdicke erstreckt. Beim Bewegen der Threading-Versetzung werden an den Grenzflächen Versetzungen abgelegt. Rechts und links der mobilen Versetzung befindet sich im Abstand l jeweils ein Paar von Grenzflächenversetzungen auf parallelen $\langle 111 \rangle$ Gleitebenen. Es wird zunächst angenommen, daß die Threading-Segmente, die die beiden Hindernisversetzungspaare abgelegt haben, bereits so weit durch die Schicht gelaufen sind, daß sie nicht mit der mobilen Versetzung wechselwirken. Die Rechnungen werden für eine $\langle 001 \rangle$ und eine $\langle 111 \rangle$ texturierte Schicht durchgeführt. In beiden Fällen haben die abgelegten Grenzflächenversetzungen entweder Schraubencharakter ($[1\bar{1}0]$ Burgersvektor) oder einen Schraubenanteil von 25% und einen Stufenanteil von 75% ($[10\bar{1}]$ und $[01\bar{1}]$ Burgersvektor). Die Rechnungen wurden mit identischen Burgersvektoren von Hindernis- und mobiler Versetzung durchgeführt, da der Schraubenanteil (Stufenanteil) der Threading-Versetzung nur mit dem Schraubenanteil (Stufenanteil) der Grenzflächenversetzung wechselwirkt. Diese Konfiguration ist am wahrscheinlichsten für



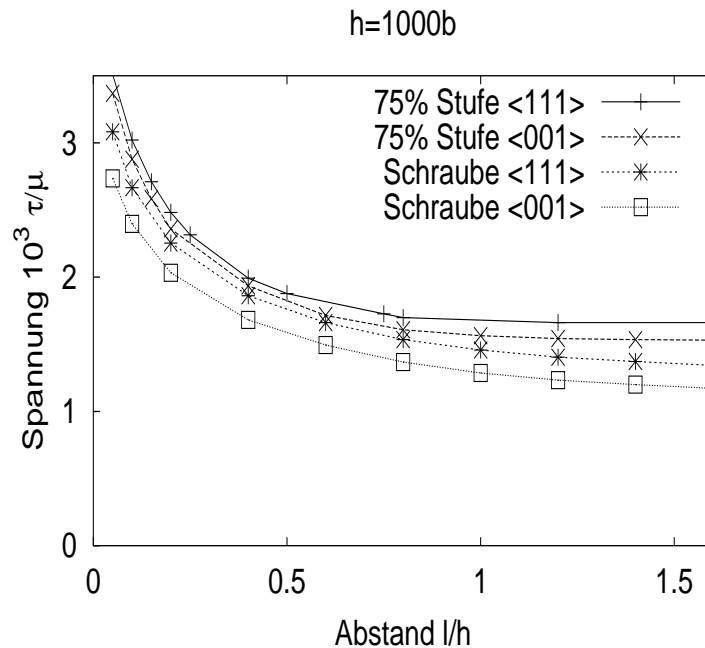
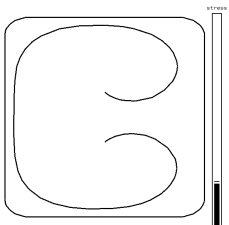


Abb. 4.2: Kritische Spannung τ in Einheiten von $10^{-3}\mu$ die benötigt wird, um eine Versetzung in Anwesenheit zweier Grenzflächenversetzungspaare im Abstand l durch die Schicht zu bewegen für zwei verschiedene Schichtorientierungen ($\langle 111 \rangle$ und $\langle 001 \rangle$) und Burgersvektoren ($[10\bar{1}]$ =75%Stufe und $[1\bar{1}0]$ =Schraube)

den Beginn der plastischen Verformung, wenn zunächst das primäre Gleitsystem mit dem höchsten Schmidfaktor aktiviert wird. Die Länge der Hindernisversetzungen und der Grenzflächenversetzungen der mobilen Versetzung wird in der Simulation so gewählt, daß eine weitere Verlängerung das Ergebnis nicht mehr verändert, wodurch näherungsweise unendlich lange Versetzungen beschrieben werden. Die kritische Spannung wird durch schrittweises Erhöhen der angelegten Spannung als die Spannung bestimmt, bei der sich die mobile Versetzung unter Beibehaltung ihrer Form gerade durch die Schicht bewegt.

Abbildung 4.2 zeigt die kritische aufgelöste Schubspannung τ , in Abhängigkeit vom Abstand der Hindernisversetzungen l . Die Schubspannung ist in Einheiten von Promille des Schubmoduls μ angegeben, l in Einheiten der Schichtdicke h . Die Berechnungen wurden für eine Schicht der Dicke $h = 1000b$ durchgeführt, wobei b der Betrag des Burgersvektors ist.¹ Für große Abstände ($l > 1.5h$) streben die kritischen Spannungen gegen die Spannung die notwendig ist, um eine einzelne Versetzung ohne zusätzliche Hindernisversetzungen durch die Schicht zu bewegen (Nix Spannung). Die Spannungen der Versetzungen mit $[1\bar{1}0]$ Burgersvektor sind kleiner, da Schraubenversetzungen an den Grenzflächen abgelegt

¹Die hier verwendeten Einheiten lassen sich einfach in SI-Einheiten umrechnen: In Burgersvektoren angegebene Längen können durch Division durch vier in nm überführt werden ($b=0.256\text{nm}$ für Kupfer). Spannungen lassen sich durch Multiplikation mit 42 ($\mu = 42.1\text{ GPa}$ für Kupfer) in MPa umrechnen.



werden, deren Energie verglichen mit Versetzungen gemischten Charakters am kleinsten ist. Die Versetzungsbewegung in der $\langle 111 \rangle$ orientierten Schicht erfordert größere aufgelöste Schubspannungen als für die $\langle 001 \rangle$ Orientierung, da hier die Gleitebenen steiler in der Schicht liegen, die Threading-Segmente kürzer sind, und somit die überstrichene Fläche und die geleistete Arbeit kleiner ist (vergl. Gleichung 2.4).

Für kleine Abstände l/h ist die Wechselwirkung zwischen der mobilen Versetzung und den Hindernisversetzungen abstoßend, die kritische Spannung steigt. Im Gegensatz zu den Schraubenversetzungen ($[1\bar{1}0]$ Burgersvektor) steigt die kritische Spannung der gemischten Versetzungen ($[10\bar{1}]$ Burgersvektor) erst für Abstände $l < 0.8 h$.

4.1.1.1 Analyse im Rahmen der Kontinuumstheorie

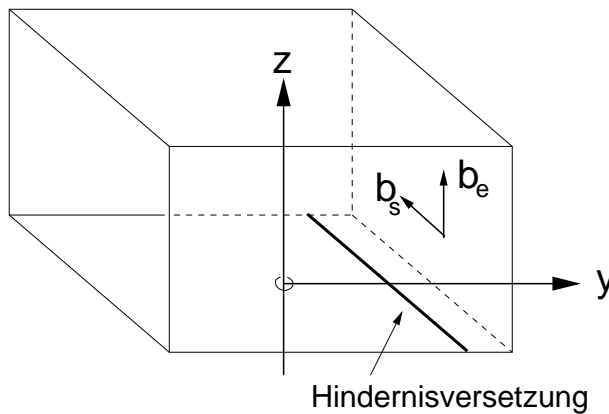


Abb. 4.3: Koordinatendefinition: Die Hindernisversetzung liegt in der Grenzfläche. Die x-Achse verläuft parallel zur Linienrichtung der Hindernisversetzung, die z-Achse parallel zur Schichtnormalen. Die y-Achse gibt den auf die Grenzfläche projizierten Abstand zur Hindernisversetzung an.

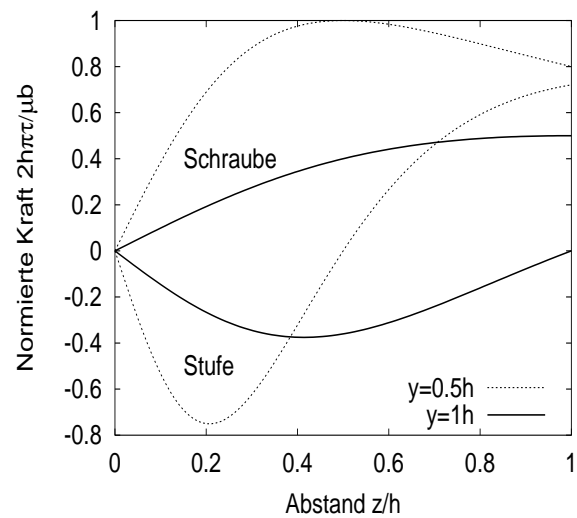
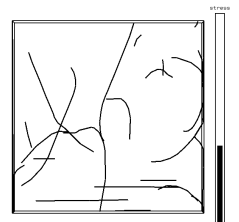


Abb. 4.4: Kraft pro Länge auf eine Versetzung im Abstand $y = 0.5h$ und $y = h$ von einer Hindernisversetzung in Abhängigkeit von der Entfernung z zur Grenzfläche. Die Testversetzung und die Hindernisversetzung haben den gleichen Charakter (Schraubencharakter bzw. Stufencharakter).

Die Kraft pro Länge, die eine einzelne, unendlich lange Hindernisversetzung auf eine Testversetzung ausübt, lässt sich unter Verwendung der Gleichung für das Spannungsfeld einer geraden Versetzung und der Peach-Köhler Gleichung einfach berechnen. In dem in Abbildung 4.3 dargestellten Koordinatensystem ist die Gleitkomponente der Kraft ausgeübt von einer Schraubenversetzung auf eine Testversetzung gleichen Charakters gegeben mit

$$F_{gl}^s = \frac{\mu b^2}{2\pi} \frac{z}{y^2 + z^2}, \tag{4.1}$$



für die Stufe folgt

$$F_{\text{gl}}^e = \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{z(z^2 - y^2)}{(z^2 + y^2)^2}. \quad (4.2)$$

Eine Hindernisversetzung mit Schraubencharakter übt keine Gleitkraft auf eine Stufenversetzung aus, gleiches gilt im umgekehrten Fall.

Abbildung 4.4 zeigt die Kraft auf eine Versetzung in Abhängigkeit von der Entfernung der Versetzung zur Grenzfläche z . Der horizontale Abstand zur Hindernisversetzung y wird konstant gehalten ($y = 0.5h$ und $y = h$). Eine positive Kraft bedeutet eine Abstoßung der Versetzung. Die Kraft auf die Stufe ist in dieser Konfiguration kleiner als auf die Schraubenversetzung. Sie wird negativ für kleine z , da die Anordnung von Stufenversetzungen untereinander energetisch günstig ist (Kleinwinkelkorngrenze). Wird wie im vorangegangenen Abschnitt die kritische Spannung betrachtet, die mindestens notwendig ist, um eine Versetzung neben einer Hindernisversetzung durch eine Schicht zu bewegen, so ergibt sich diese aus der maximalen Kraft auf die Versetzung, wenn die Versetzung von der Mitte der Schicht zur Grenzfläche bewegt wird. Für eine Stufenversetzung ist die kritische Spannung nur dann größer als null, wenn der Abstand zwischen den Versetzungen in der Schichtebene (l in Abbildung 4.1) kleiner ist als die halbe Schichtdicke, wie Abbildung 4.5 verdeutlicht.

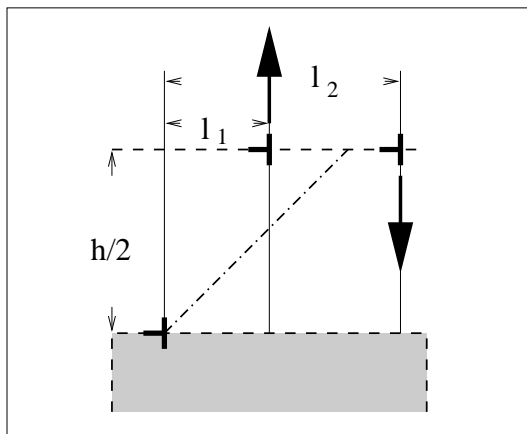
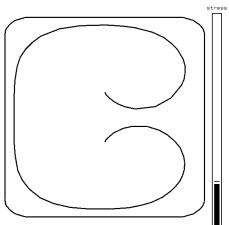


Abb. 4.5: Wechselwirkung zwischen einer Hindernisversetzung mit Stufencharakter (links unten) und mobilen Stufenversetzungen in der Mitte der Schicht. Die Versetzung im Abstand l_1 wird abgestoßen, die Versetzung im Abstand l_2 angezogen.

Diese Analyse erklärt, warum die kritische Spannung in Abbildung 4.2 im Fall der Versetzungen mit gemischtem Charakter ($[10\bar{1}]$ Burgersvektor) erst für $l < 0.8h$ ansteigt: Für größere Abstände ist die Kraft auf den Stufenanteil der Versetzung anziehend, wodurch die Abstoßung des Schraubenanteils kompensiert wird. Erst für kleinere Abstände wird die Kraft repulsiv.

4.1.2 Felder von parallelen Grenzflächenversetzungen

Jede Versetzung, die durch die Schicht läuft, hinterläßt an den Grenzflächen zum Substrat und zur Passivierungsschicht Grenzflächenversetzungen, wenn diese nicht durch die Grenzflächen hindurchtreten können oder dissoziieren. Sämtliche Grenzflächenversetzungen beeinflussen die Bewegung der Threading-Segmente und somit die kritische Spannung. Ist



nur ein Gleitsystem aktiviert, so entsteht unter plastischer Dehnung ein Feld von Grenzflächenversetzungen. Jede weitere Versetzung muß in dieses Feld hineingeschoben werden. In diesem Abschnitt wird die Spannung berechnet, die hierfür notwendig ist. Abbildung 4.6

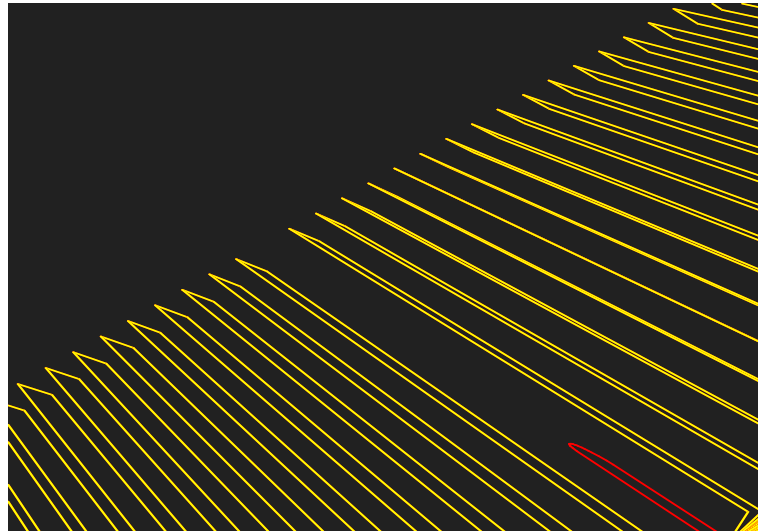
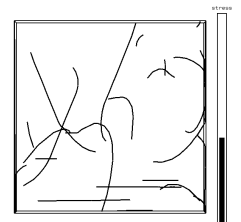


Abb. 4.6: Feld von parallelen Grenzflächenversetzungen. Die mobile Versetzung wird in die Mitte des Feldes hineingeschoben. Sie ist die letzte Versetzung, die das Feld vervollständigt.

zeigt die berechnete Konfiguration. Das Feld besteht aus 40 Grenzflächenversetzungspaaren mit konstantem Abstand l zur rechten und zur linken der mobilen Versetzung als Approximation eines unendlich großen Feldes. Die mobile Versetzung ist die letzte Versetzung, die das Feld vervollständigt.

Die kritischen Spannungen für Versetzungen mit $[1\bar{1}0]$ Burgersvektor, (111) Gleitebene in einer $\langle 001 \rangle$ orientierten Schicht und mit $[10\bar{1}]$ Burgersvektor, (111) Gleitebene in einer $\langle 111 \rangle$ orientierten Schicht werden berechnet. Diese Konfigurationen zeigen die maximale bzw. minimale Spannungserhöhung in den Berechnungen für nur ein Hindernisversetzungspaar zu jeder Seite (Abbildung 4.2). Die kritische Spannung ist in Abbildung 4.7 in Abhängigkeit vom Abstand l der Versetzungen im Feld wiedergegeben. Zum Vergleich sind auch die kritischen Spannungen ohne Hindernisversetzungen (Nix Spannung) eingetragen. Für Abstände $l > h$ gehen die Spannungen schnell gegen die Nix Spannungen. Für $l < h$ steigt die Spannung für die Versetzungen mit $[1\bar{1}0]$ Burgersvektor. Die kritische Spannung für die $[10\bar{1}]$ Versetzungen (Grenzflächenversetzungen mit 75% Stufenanteil) ist kleiner als die Nix Spannungen, solange $l > 0.5h$ ist. Die Anordnung der Stufenkomponenten der Versetzungen in der Grenzfläche entspricht der Anordnung in einer Kleinwinkelkorngrenze und ist energetisch günstig (siehe Abschnitt 4.1.1.1). Für $l < 0.3h$ ist in beiden Fällen ein starker Anstieg der kritischen Spannung zu beobachten.

Der Abstand der Versetzungen im Feld kann mit einer plastischen Dehnung der Schicht



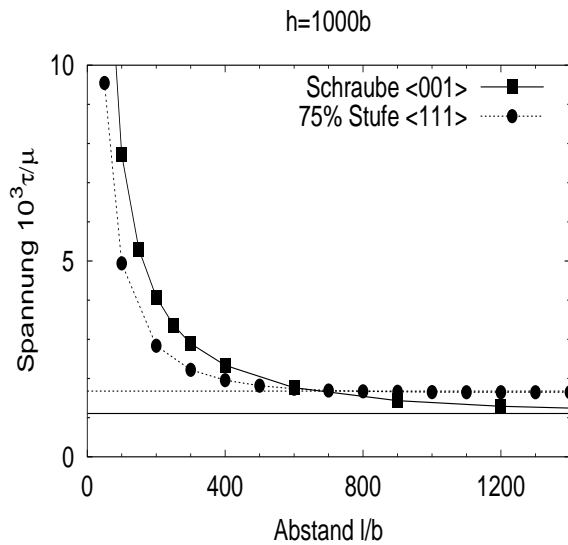


Abb. 4.7: Kritische Spannung in Abhängigkeit vom Abstand l der Versetzungen im Feld. Die horizontalen Linien sind die Spannungswerte ohne zusätzliche Hindernisversetzungen.

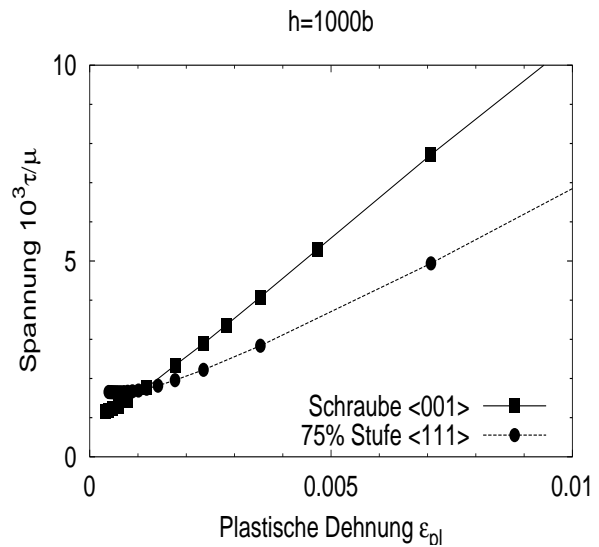


Abb. 4.8: Kritische aufgelöste Schubspannung als Funktion der plastischen Dehnung für eine Schichtdicke von $h = 1000b$

verknüpft werden:

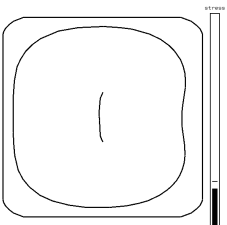
$$\epsilon_{pl} \approx \frac{b_{||}}{l}, \quad (4.3)$$

wobei $b_{||}$ die Komponente des Burgersvektors in Zugrichtung ist. Für eine angelegte Spannung in $[100]$ Richtung ergibt sich $b_{||} = b/\sqrt{2}$ und ein Schmidfaktor von $m = 0.41$ für die betrachteten Gleitsysteme. Die kritische Spannung in Abhängigkeit von der plastischen Dehnung ist in Abbildung 4.8 gezeigt.

Die kritische Spannung für verschiedene Schichtdicken bei konstantem Versetzungsabstand von $l = 400b$ bzw. konstanter plastischer Dehnung nach Gleichung 4.3 von $\epsilon_{el} = 0.2\%$ ist in Abbildung 4.9 für Versetzungen mit $[1\bar{1}0]$ Burgersvektor, (111) Gleitebene in einer $[001]$ orientierten Schicht aufgetragen. Gezeigt ist außerdem die Nix Spannung und die Differenz zwischen kritischer Spannung und Nix Spannung. Der Härtungsbeitrag durch die Hindernisversetzungen nimmt für abnehmende Schichtdicke immer mehr ab, da sich die Spannungsfelder beider Versetzungen eines Hindernisversetzungspaares aufgrund ihres entgegengesetzten Vorzeichens für $h/l \rightarrow 0$ kompensieren. Im Gegensatz dazu wird der Nix Beitrag immer größer, weil die Krümmung der Versetzung im Kanal größer wird.

4.1.3 Wechselwirkung zwischen Threading-Segmenten

Die Wechselwirkungen von zwei Threading-Segmenten kann ebenfalls zur Verfestigung beitragen. Hier wurden zwei Threading-Segmente mit gleichem Burgersvektor auf parallelen Gleitebenen betrachtet. Die Linienrichtungen der Threading-Segmente wurden ent-



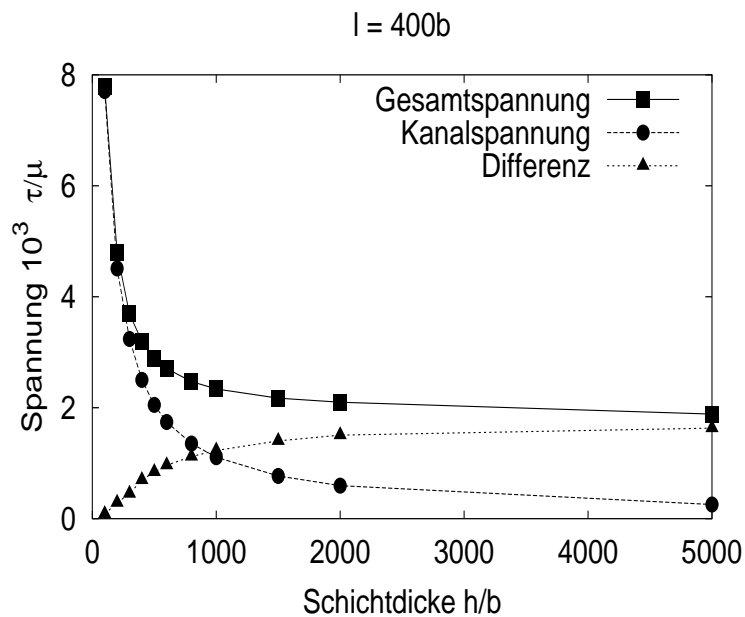


Abb. 4.9: Schichtdickenabhängigkeit der kritischen Spannung für einen festen Hindernisversetzungsabstand $l = 400b \sim 0.2\%$ Die Schicht hat eine $\langle 001 \rangle$ Orientierung.

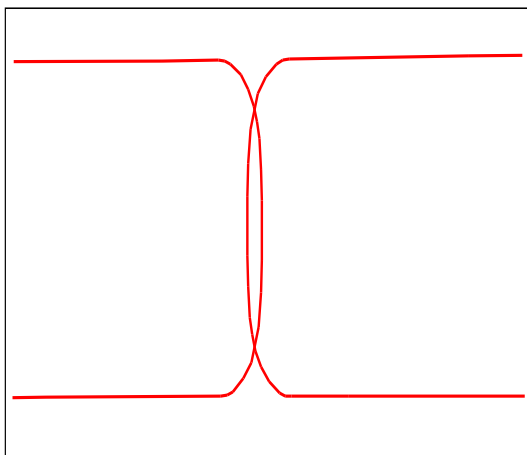


Abb. 4.10: Zwei Versetzungen auf parallelen Gleitebenen, deren Threading-Segmente durch die angelegte Spannung aufeinander zu bewegt werden.

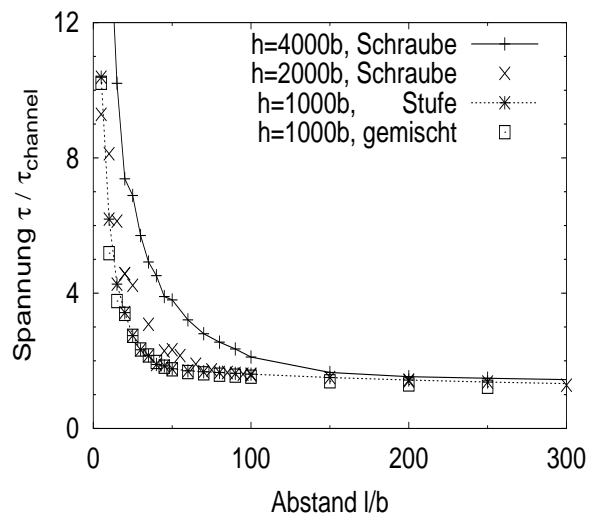
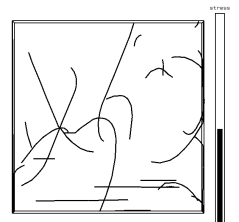


Abb. 4.11: Kritische Spannung, um die zwei Versetzungen aneinander vorbeizubewegen, normiert durch Kanalspannung über den Abstand der Gleitebenen



gegengesetzt gewählt, d. h. die Segmente ziehen sich gegenseitig an, wodurch ein Versetzungsdipol entsteht (Abbildung 4.10). Die Threading-Segmente werden von der angelegten Spannung aneinander vorbeibewegt, wenn diese die kritische Spannung übersteigt. Abbildung 4.11 zeigt die kritische Spannung in Einheiten der Kanalspannung über den Abstand der Gleitebenen. Für eine Schichtdicke von $h = 1000b$ wurde die kritische Spannung für Threading-Segmente mit Schrauben- bzw. gemischten Charakter (30° Winkel zwischen Linienrichtung und Burgersvektor) berechnet. Die normierte kritische Spannung ist dabei nahezu unabhängig vom Charakter der Versetzung. Für die Schichtdicken $h = 2000b$ und $h = 4000b$ wurde die Simulation für Threading-Versetzungen durchgeführt, die Schraubencharakter hatten.² Die Wechselwirkung zwischen den Threading-Versetzungen verursacht erst für Abstände kleiner als $100b$ eine signifikante Erhöhung der kritischen Spannung.

4.1.4 Sich kreuzende Grenzflächenversetzungen

Werden verschiedene Gleitsysteme aktiviert, kann es zu Wechselwirkungsereignissen zwischen Versetzungen auf Gleitebenen, die einander kreuzen, kommen, wie in Abbildung 4.12 dargestellt. Hier trifft eine mobile Versetzung auf ein Grenzflächenversetzungspaar an der Oberseite und Unterseite der Schicht. Das Threading-Segment kommt den Grenzflächen-

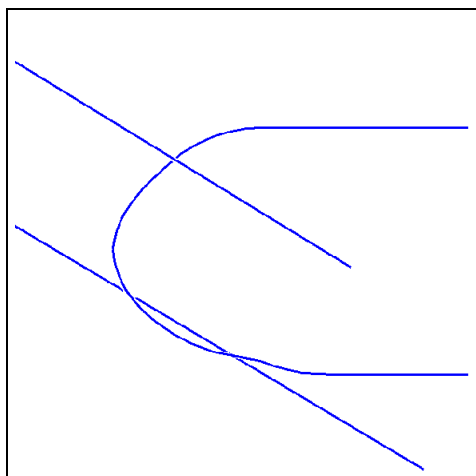


Abb. 4.12: Mobile Versetzung, die ein Hinderungsverzugspar kreuzt

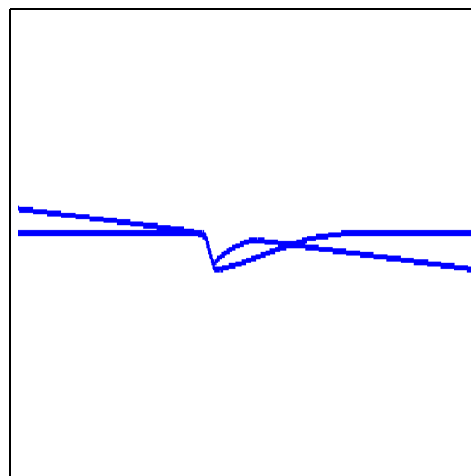
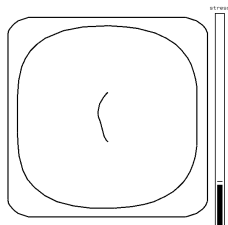


Abb. 4.13: Ausrichtung zweier anziehender Versetzungen entlang der Schnittlinie der beiden Gleitebenen

versetzungen sehr nahe und kann durch die Wechselwirkung an der weiteren Bewegung gehindert werden. Um den Härtungsbeitrag durch solche Ereignisse zu bestimmen, wurde

²Auch wenn in dieser Arbeit keine Simulationen, in denen die Versetzungen quergleiten können, präsentiert werden, sei noch angemerkt, daß diese Konfiguration zum Testen der Quergleitroutine verwendet wurde. In der Simulation mit eingeschalteter Quergleitroutine gleiten die Schraubenversetzungen für $l < 175b$ auf der Sekundärgleitebene und annihilieren sich gegenseitig. Dieser Wert stimmt erstaunlich gut mit dem experimentell bestimmten Annihilationsabstand von 50nm für Kupfer überein [163].



die Spannung, die nötig ist, um die Versetzung am Hindernisversetzungspaar vorbeizubewegen, berechnet. Die Berechnungen wurden für eine $\langle 111 \rangle$ orientierte Schicht durchgeführt, da diese Orientierung am häufigsten in dünnen Metallschichten zu finden ist.

mobile Versetzung	Hindernisversetzung	Spannungserhöhung $\tau/\tau_{\text{channel}}$
[110](111) Schraube $h = 1000b$	[011](111)	1.1
	[110](111)	1.3
	[101](111)	1.2
	[011](111)	1.1
[10 $\bar{1}$](111) gemischt $h = 1000b$	[10 $\bar{1}$](111)	1.3
	[110](111)	1.3
	[011](111)	1.1

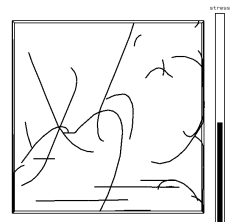
(a) Immobile Hindernisversetzungen

mobile Versetzung	Hindernisversetzung	$\tau/\tau_{\text{channel}}$ $h = 1000b$	$\tau/\tau_{\text{channel}}$ $h = 3100b$
[10 $\bar{1}$](111) gemischt, $h = 3100b$	[110](111)	1.3	1.3
	[011](111)	1.0	1.0
	[110](111)	1.0	1.0
	[101](111)	1.0	1.0

(b) Bewegliche Hindernisversetzungen, biaxialer Spannungszustand

Tab. 4.1: Erhöhung der kritischen Spannung durch ein Hindernisversetzungspaar auf einer kreuzenden Gleitebene

Tabelle 4.1(a) zeigt die kritische Spannung in Einheiten der Kanal-Spannung (ohne Hindernisse) für verschiedene Kombinationen von mobilen und Hindernisversetzungen. Die Hindernisversetzungen wurden hierbei in der Grenzschicht festgehalten. Hierdurch wird bewirkt, daß die angelegte Spannung nur auf die mobile Versetzung eine Kraft ausübt, und die Wechselwirkung zwischen den Versetzungen alleine vom Abstand der Versetzungen und nicht vom externen Spannungszustand abhängig ist. Die mobile Versetzung liegt in einer (111) Gleitebene und wechselwirkt mit Versetzungen in der ($1\bar{1}\bar{1}$) Gleitebene. Wechselwirkungen mit Versetzung in der ($1\bar{1}1$) Gleitebene lassen sich durch Umdrehen des Burgersvektors bzw. des Liniensinns einer Versetzung auf die hier betrachteten Kombinationen zurückführen. Gleiches gilt für die Burgersvektoren $[10\bar{1}]$ und $[0\bar{1}1]$ der mobilen Versetzung, so daß nur die Hinderniswirkung von allen Versetzungen auf der ($1\bar{1}\bar{1}$) Gleitebene mit den mobilen $[1\bar{1}0](111)$ und $[10\bar{1}](111)$ Versetzungen berechnet werden müssen. In Tabelle 4.1(a) sind nur die Kombinationen aufgeführt, für die eine Erhöhung der kritischen Spannung berechnet wurde. Im ungünstigsten Fall muß die externe Spannung um ca. 30%



erhöht werden, damit eine Versetzung, die sich durch den Schicht bewegt, Grenzflächenversetzungen auf kreuzenden Gleitebenen überwinden kann. Wie Abbildung 4.14 zeigt, hängt die Spannungserhöhung nur wenig von der Schichtdicke ab, wie hier für eine $[10\bar{1}](111)$ Versetzung und einem $[\bar{1}\bar{1}0](1\bar{1}\bar{1})$ Hindernisversetzungspaar berechnet wurde.

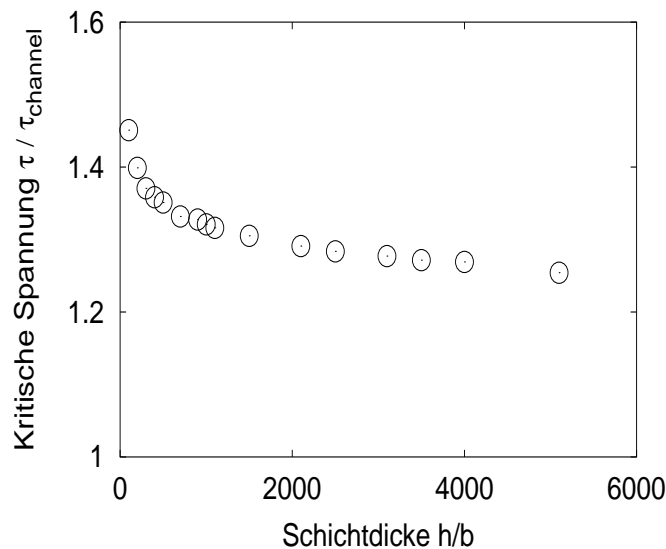
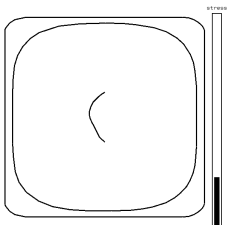


Abb. 4.14: Schichtdickenabhängigkeit der kritischen Spannung zur Überwindung eines Hindernisversetzungspaares ($[\bar{1}\bar{1}0](1\bar{1}\bar{1})$) in Einheiten der Kanalspannung. Das Gleitsystem der beweglichen Versetzung ist $[10\bar{1}](111)$.

Wird es den Hindernisversetzungen erlaubt, sich zu bewegen, können sich anziehende Versetzungen entlang der Schnittlinien der beiden Gleitebenen anordnen (Abbildung 4.13). Der externe Spannungszustand muß so gewählt werden, daß die mobile Versetzung durch die Schicht bewegt wird, und daß die Hindernisversetzungen gegen die Grenzflächen gedrückt werden. Ist letztere Bedingung nicht erfüllt, ziehen sich die Hindernisversetzungen gegenseitig an und können annihilieren. Die Berechnungen wurden für einen biaxialen Spannungszustand durchgeführt, da hier die aufgelöste Schubspannung auf Hindernisversetzung und mobiler Versetzung gleich ist. Versetzungen mit einem Burgersvektor parallel zu den Grenzflächen ($[\bar{1}\bar{1}0]$, $[101]$ und $[110]$) erfahren unter einem biaxialen Spannungszustand keine Schubspannung und werden deshalb nicht betrachtet. Die kritischen Spannungen für die möglichen Kombinationen zeigt Tabelle 4.1(b). Die Linienrichtungen der Versetzungen bzw. Vorzeichen der Burgersvektoren sind jetzt dadurch festgelegt, daß auf die Versetzungen im externen Spannungsfeld eine Kraft wirkt, die sie gegen die Grenzflächen drückt. Die maximale Spannung, die notwendig ist, um die Versetzung an einem Hindernisversetzungspaar vorbeizubewegen, ist für festgehaltene und bewegliche Hindernisversetzungen gleich (Tabelle 4.1(a) und Tabelle 4.1(b)) und beträgt 30%.



4.1.5 Felder von Grenzflächenversetzungen auf sich kreuzenden Gleitebenen

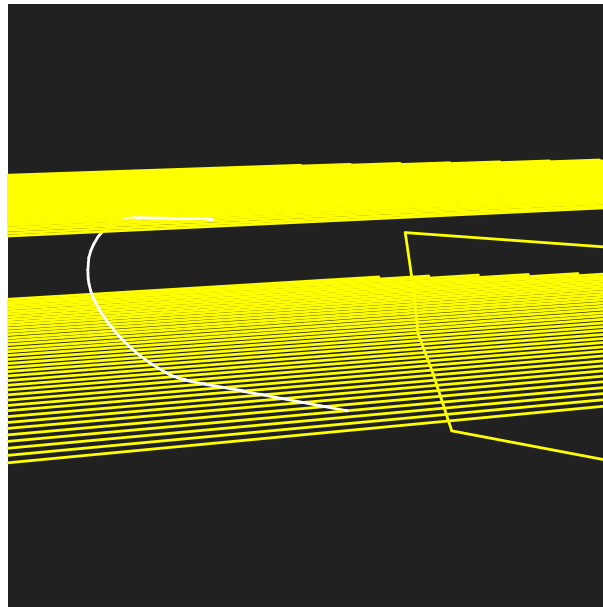
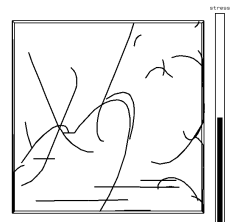


Abb. 4.15: Mobile Versetzung, die ein Feld von Grenzflächenversetzungen auf kreuzenden Gleitebenen durchqueren muss

Eine größere Hinderniswirkung ist zu erwarten, wenn die Versetzung mehrere Paare von Grenzflächenversetzungen auf kreuzenden Gleitebenen überwinden muß. Als Grenzfall wird deshalb hier die Durchquerung eines unendlichen (durch 80 Versetzungen angenähert), regelmäßigen Versetzungsfeldes simuliert (siehe Abbildung 4.15).

Abbildung 4.16 zeigt die kritische Spannung für verschiedene Abstände l der Versetzungen im Feld. Es werden $[1\bar{1}0](111)$ und $[10\bar{1}](111)$ Versetzungen in einer $\langle 111 \rangle$ orientierten Schicht betrachtet. Die Spannung für nur ein Hindernisversetzungspaar ist ebenfalls eingetragen. Für $l > h$ entspricht die kritische Spannung der für das Einzelhindernis, für kleinere Abstände der Hindernisversetzungen ist eine Zunahme der kritischen Spannung zu beobachten. Für $l = h/5$ ist die kritische Spannung etwa doppelt so hoch wie für das Einzelhindernis.

Die Schichtdickenabhängigkeit der Fließspannung für einen konstanten Versetzungsabstand von $l = 400b$ ist in Abbildung 4.17 wiedergegeben. Nach Gleichung 4.3 entspricht dem Abstand eine Dehnung von ca. 0.2%. Für große Schichtdicken wird die Kanal-Spannung um einen konstanten Wert, der Spannung zur Überwindung eines einzelnen Hindernisses, erhöht. Bei kleinen Schichtdicken $h < 200$ steigt auch der Anteil durch die Hindernisüberwindung (vgl. Abbildung 4.14).



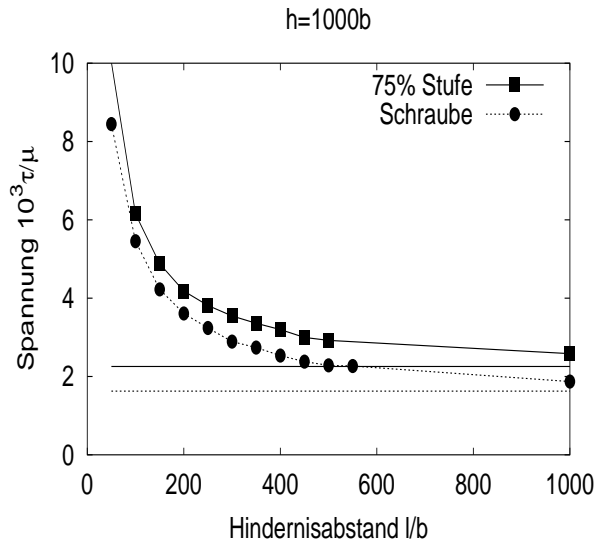


Abb. 4.16: Kritische Spannung um eine Versetzung (75% Stufe: $[10\bar{1}](111)$, Schraube $[1\bar{1}0](111)$) durch ein Feld von Hindernisversetzungen ($[101](1\bar{1}\bar{1})$) zu bewegen für verschiedene Abstände der Versetzungen im Feld. Die horizontalen Linien sind die Spannungswerte für die Überwindung eines einzelnen Hindernisses

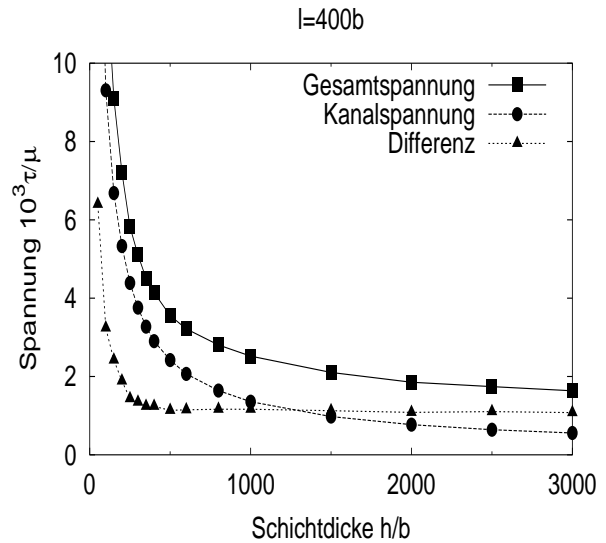
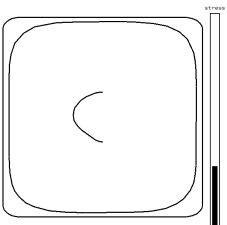


Abb. 4.17: Gleiche kritische Spannung für konstanten Abstand $l = 400b$ und variabler Schichtdicke. Eine $[1\bar{1}0](111)$ schneidet $[101](1\bar{1}\bar{1})$ Versetzungen in einer $[\bar{1}\bar{1}1]$ orientierten Schicht.

4.1.6 Versetzungsschneidprozesse

In diesem Abschnitt werden Wechselwirkungen zwischen Hindernisversetzungen auf Gleitebenen, die parallel zur Schichtebene liegen und mobilen Versetzungen auf geneigten Ebenen untersucht. In einer $[\bar{1}\bar{1}1]$ orientierten Schicht erfahren die Versetzungen auf der zur Grenzfläche parallelen $(\bar{1}\bar{1}1)$ Ebene keine Kraft durch eine in der Schichtebene wirkende Spannung, wie die durch unterschiedliche thermische Ausdehnungskoeffizienten bedingte Spannung im Substratkrümmungsexperiment oder die angelegte Spannung im Mikrozugversuch. Jedoch können durch inhomogene Verformung der Körner in einer polykristallinen Schicht Spannungskomponenten außerhalb der Schichtebene entstehen. Solche Spannungskomponenten werden vom Modell der eingeschränkten Diffusion für dünne Schichten von Gao et al. [164] vorhergesagt.³ Da diese Hindernisversetzungen quer über das Korn reichen,

³Hier wird angenommen, daß die Atome einer dünnen Schicht, die auf einem Substrat abgeschieden ist, während der Hochtemperaturphase eines Substratkrümmungsexperiments nur entlang der freien Oberfläche und den Korngrenzen aber nicht entlang der Substrat-Schicht Grenzfläche diffundieren können. Bei hohen Temperaturen dehnt sich die Schicht aus, wird aber vom Substrat zurückgehalten, wodurch Druckspannungen entstehen. Diese können durch Diffusion von Atomen aus den Korngrenzen lokal abgebaut werden. Da die Schicht jedoch noch fest auf dem Substrat haftet und hier keine Diffusion stattfindet, bildet sich ein Spannungszustand aus, der einem negativen Mode I Riß entspricht. Durch die Spannungskonzentration an der Korngrenze können Versetzungen erzeugt werden, die auf Gleitebenen parallel zur



müssen mobile Versetzungen auf geneigten Gleitebenen in der Regel die Hindernisversetzungen schneiden, wenn sie sich durch die Schicht bewegen. Abbildung 4.18 zeigt die zwei

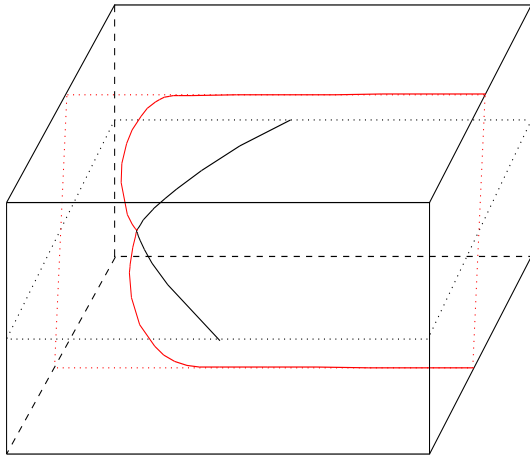


Abb. 4.18: Schneidprozeß zweier Versetzungen. Die Hindernisversetzung ($[1\bar{1}0]$ Burgersvektor) liegt auf einer $(\bar{1}\bar{1}1)$ Gleitebene parallel zu den Grenzflächen in der Mitte der Schicht, die mobile Versetzung ($[0\bar{1}1]$) gleitet auf der geneigten (111) Ebene.

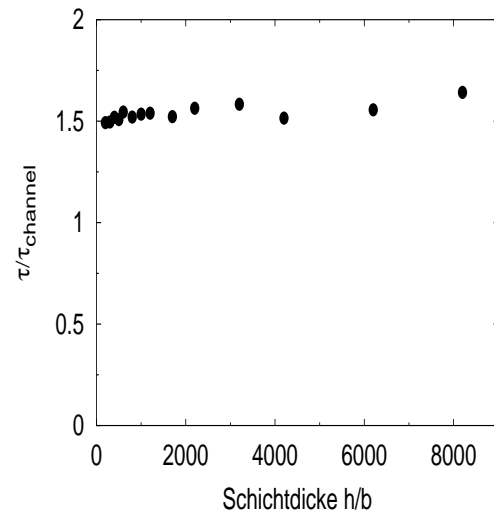


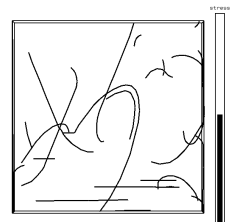
Abb. 4.19: Kritische Spannung in Einheiten der Kanalspannung über der Schichtdicke für die in Abbildung 4.18 gezeigte Konfiguration.

Versetzungen kurz bevor die mobile Versetzung die Hindernisversetzung schneidet. Wie in Abschnitt 3.2.2 dargelegt, wird die Erzeugung eines Jogs hierbei nicht berücksichtigt.

Die Spannungserhöhung, die der Schneidvorgang erfordert, ist in Tabelle 4.2 für verschiedene Burgersvektorkombinationen in Einheiten der Kanalspannung aufgetragen. Eine Versetzung wurde auf einer (111) Gleitebene in einer $2000b$ dicken Schicht in der Kanalgeometrie (Abschnitt 3.2.1.2) durch eine Hindernisversetzung auf der $(\bar{1}\bar{1}1)$ Ebene bewegt. Die Gleitebene der Hindernisversetzung liegt in der Mitte der Schicht. Die Endpunkte der Hindernisversetzung wurden in einem Abstand von $1000b$ zur Schnittlinie mit der (111) Ebene festgehalten. Zwischen den Festhaltepunkten ist die Hindernisversetzung frei beweglich, jedoch übt nur das Spannungsfeld der mobilen Versetzung eine Kraft aus auf die Hindernisversetzung aus. Die Simulationen für die mobile Versetzung mit $[10\bar{1}]$ Burgersvektor lassen sich durch Rotation und Umkehr der Linienrichtung auf die Simulationen der $[0\bar{1}1]$ Versetzung zurückführen. Ebenso sind von den sechs Simulationen der mobilen $[1\bar{1}0]$ Versetzung jeweils zwei ineinander überführbar. Hier sind alle Ergebnisse aufgeführt, um zu zeigen, daß die Simulation konsistente Zahlen liefert.

Die größte Hinderniswirkung hat eine $[0\bar{1}\bar{1}]$ Versetzung auf eine mobile $[0\bar{1}1]$ Versetzung. Hier ergibt sich eine Spannungserhöhung um einen Faktor 1.5. Die Abhängigkeit der Spannungserhöhung für diese Versetzungen von der Schichtdicke ist in Abbildung 4.19

Schichtebene liegen und von der Spannung zur Kornmitte bewegt werden.



Mobile Versetzung (111)	Hindernisversetzung ($\bar{1}\bar{1}1$)	krit. Spannung $\tau/\tau_{\text{channel}}$
[0 $\bar{1}1$]	[101]	1.1
	-[101]	1.4
	[1 $\bar{1}0$]	1.2
	-[1 $\bar{1}0$]	1.1
	[011]	1.1
	-[011]	1.5
[1 $\bar{1}0$]	[101]	1.3
	-[101]	1.1
	[1 $\bar{1}0$]	1.1
	-[1 $\bar{1}0$]	1.1
	[011]	1.1
	-[011]	1.3
[10 $\bar{1}$]	[101]	1.5
	-[101]	1.1
	[1 $\bar{1}0$]	1.1
	-[1 $\bar{1}0$]	1.2
	[011]	1.4
	-[011]	1.1

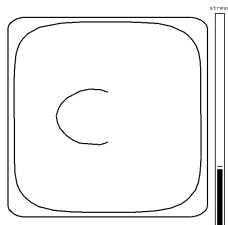
Tab. 4.2: Kritische Spannungen zur Durchdringung einer Versetzung auf einer zur Schichtebene parallelen Gleitebene in Einheiten der Kanalspannung. Die Schichtdicke ist $2000b$, der Abstand der Festhaltepunkte der Hindernisversetzung beträgt $1000b$. In den ersten beiden Spalten sind die Burgersvektoren von mobiler und Hindernisversetzung eingetragen. Ein Minuszeichen kennzeichnet eine Umkehrung des Liniensinns der Versetzung.

wiedergegeben. Für diese Rechnungen wurde die Länge der Hindernisversetzung gleich der Schichtdicke gesetzt. Im Rahmen der Simulationsgenauigkeit ist die Spannungserhöhung unabhängig von der Schichtdicke.

4.2 Versetzungen in kleinen Kristalliten

Dünne Metallschichten sind in der Regel polykristallin und es ist zu erwarten, daß auch die Korngrenzen — neben den Grenzflächen der Schicht — einen starken Einfluß auf die Versetzungsbewegung haben. Die Schichten sind meistens kolumnar und die Korngröße d ist von der gleichen Größenordnung wie die Schichtdicke h .⁴ Ein Modellkorn könnte deshalb so aussehen, wie in Abbildung 4.20 dargestellt. Das Korn hat eine [$\bar{1}\bar{1}1$] Orientierung, die Versetzungen gleiten auf einer geneigten (111) Ebene. Die Gleitebene wird auf der Ober- und

⁴In den hier präsentierten Simulationen mit nur einer Versetzungsquelle wird die auf die Gleitebene projizierte Schichtdicke mit h bezeichnet (siehe Abbildung 4.20)



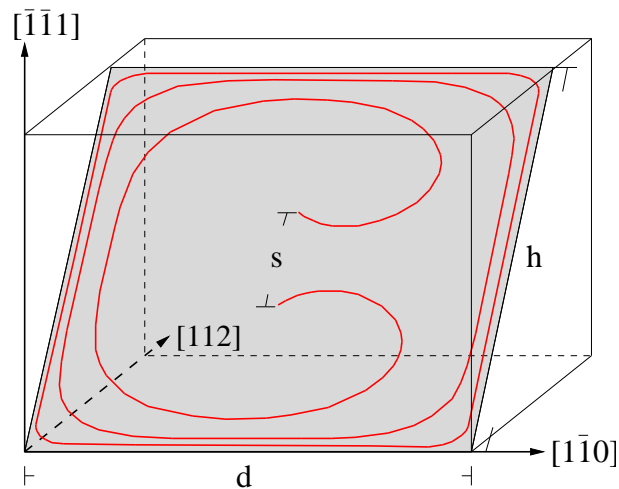
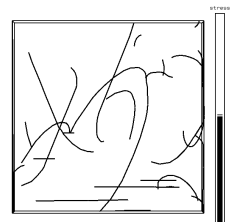


Abb. 4.20: Modellgeometrie eines kolumnaren Korns in einer Schicht mit $[\bar{1}\bar{1}1]$ Orientierung. Die Versetzungen gleiten auf einer (111) Gleitebene (Würfelgeometrie).

Unterseite vom Substrat und von der Passivierungsschicht beschränkt (diese Beschränkung wird in einem späteren Abschnitt fallengelassen). Zu den Seiten bilden die Korngrenzen undurchdringbare Hindernisse für die Versetzungen. Um diese Geometrie mit undurchdringbaren Grenzflächen von der einer freistehenden Schicht zu unterscheiden, wird sie im folgenden als Würfelgeometrie bezeichnet (Kanalgeometrie mit Korngrenzen). Im nächsten Abschnitt wird die Mehrfachaktivierung einer Versetzungsquelle, deren Gleitebene durch Grenzflächen und Korngrenzen beschränkt ist, untersucht [165]. In Abschnitt 4.2.2 wird der Korngrenze eine Korngrenzstärke zugeordnet und die externe Spannung bestimmt, bei der die Korngrenze durchlässig wird [166].

4.2.1 Versetzungsquellen in der eingeschränkten Geometrie eines Korns

Simuliert wird die Aktivierung einer Frank–Read Quelle in der Mitte eines Korns. Die Quelle, die z. B. durch einen Quergleit- oder Kletterprozeß entstanden sein könnte, wurde durch ein an den beiden Endpunkten festgehaltenes Versetzungssegment der Länge s realisiert. Die Segmente, die das festgehaltene Versetzungsstück mit den Rändern verbinden (z. B. Versetzungen auf der Quergleitebene), wurden in der Simulation der Einfachheit halber vernachlässigt. Der Burgersvektor wurde parallel zur Schicht–Substrat Grenzfläche gewählt ($[\bar{1}\bar{1}0]$ Richtung), das (ohne angelegte Spannung) gerade Versetzungsquellensegment zwischen den Festhaltepunkten (Abb. 4.21a) hat Stufencharakter. Diese symmetrische Konfiguration ermöglicht eine verglichen mit anderen Konfigurationen einfache Aktivierung der Quelle: Eine Quelle mit Stufencharakter hat die niedrigste Aktivierungsspannung und die Wechselwirkung der Quelle mit Versetzungen, die an den Grenzen des Korns abgelegt sind, wird am geringsten sein, wenn die Quelle im Korn zentriert ist. Somit kann in der



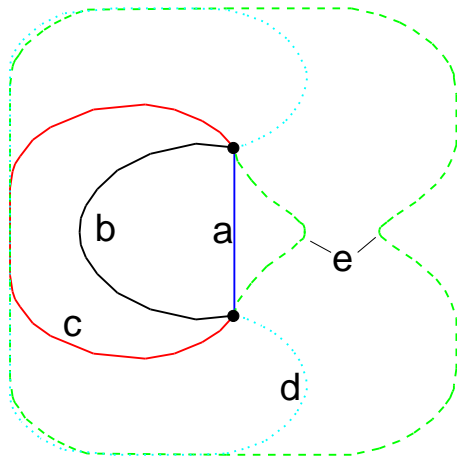


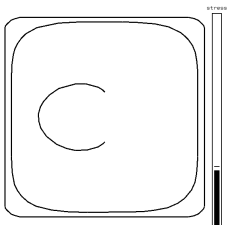
Abb. 4.21: Verschiedene Stadien im Entwicklungsprozeß eines Versetzungsringes aus einer Frank–Read Quelle; (a) auf beiden Seiten festgehaltenes Versetzungssegment; (b) Kritische Konfiguration der Quelle; (c) die Versetzung berührt die erste Korngrenze; (d) Überschlagen um die Festhaltepunkte; (e) kurz nach der Rekombination

gewählten Anordnung eine untere Schranke der Fließspannung ermittelt werden.

Die Belastung des Modells wird über die angelegte Spannung gesteuert. Diese wird so eingestellt, daß die mittlere Knotengeschwindigkeit 30 m s^{-1} beträgt. Dieser Wert ist ein Kompromiß zwischen einer quasistatischen Berechnung und dem Wunsch, die Rechenzeit zu minimieren. Durch die endliche Knotengeschwindigkeit werden die kritischen Spannungen etwas überschätzt. Der Fehler ist für die hier berechneten Werte jedoch kleiner als 3% (vergl. Abschnitt 3.2.1.2).

Bei einer Steuerung über eine konstante mittlere Knotengeschwindigkeit, die im wesentlichen einer Steuerung über eine konstante Dehnrates entspricht, können kritische Versetzungskonfigurationen, wie die Aktivierung einer Quelle oder die Überwindung eines Hindernisses, am Verlauf der angelegten Spannung erkannt werden. Abbildung 4.22 zeigt den Spannungsverlauf für zwei Simulationen mit Quellen unterschiedlicher Größe über der plastischen Dehnung. Die plastische Dehnung wird als eine Art Zeitparameter benutzt und ist definiert als die von den Versetzungen überstrichene Fläche multipliziert mit dem Betrag des Burgersvektors und normiert auf das Volumen des Kornes. Die Abmessungen des Kornes sind $d = h = 4800b$.

Der erste Peak der Kurve für die Quelle der Größe $s = h/6$ entspricht der ersten Aktivierung der Frank–Read Quelle (vergl. Abbildung 4.21b). Ist die kritische Konfiguration überschritten, wird die Spannung wieder erniedrigt, um die Versetzungsgeschwindigkeit konstant zu halten. Nachdem die Versetzung die Korngrenze erreicht, bleibt die Spannung ungefähr konstant, da sich der Krümmungsradius nicht mehr stark ändert (Abb. 4.21c). Die kleine Stufe in der Kurve resultiert aus der Rekombination der Versetzung zu Versetzungsring und Frank–Read Quelle (Abb. 4.21e). Für jede weitere Aktivierung der Quelle ist eine höhere Spannung notwendig, da neben der Frank–Read Spannung die Rückspannung von den bereits erzeugten Versetzungen überwunden werden muß. Die Spannungsspitze verschiebt sich nach mehrfacher Aktivierung zu einem „späteren Zeitpunkt“ im Aktivierungszyklus. Für die größere Quelle ist das Spannungsmaximum durchgängig später zu beobachten, und wird im Verlauf der Simulation ausgeprägter. Der kritische Schritt ist hier nicht die Aktivierung der Frank–Read Quelle sondern die Passage der Versetzung zwi-



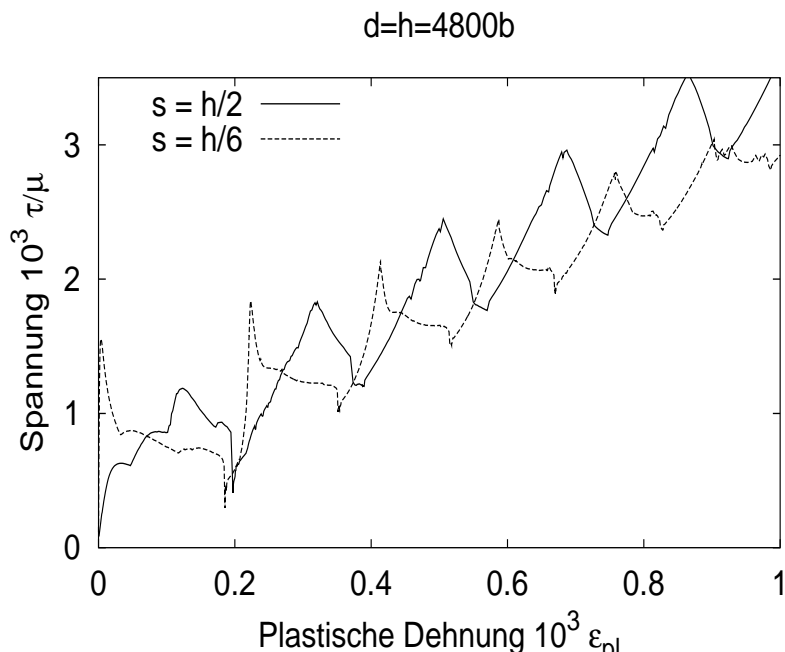
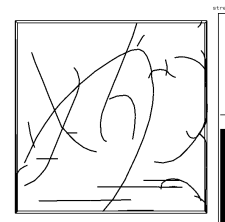


Abb. 4.22: Angelegte Spannung über plastischer Dehnung für zwei Simulationen mit unterschiedlichen Versetzungsquellen in einem Korn der Größe $h = d = 4800b$.

schen den Grenzflächen und den Festhaltepunkten (Abbildung 4.23(c)). Definiert man als Aktivierungsspannung der Quelle im Korn die maximale Spannung, die notwendig ist, um einen kompletten Versetzungsring zu erzeugen und die Frank–Read Quelle in die anfängliche Konfiguration zu überführen, so zeigt Abbildung 4.22, daß die Aktivierungsspannung für große Quellen vom Abstand des Festhaltepunktes zu den Grenzflächen bestimmt ist (4.23(c)). Dieser Abstand verringert sich (und die Aktivierungsspannung steigt), wenn die Quelle mehrfach aktiviert wird, da die Versetzung nun zwischen den an den Grenzen des Kornes abgelegten Versetzungen und den Festhaltepunkten hindurchgeschoben werden muß (vgl. Abbildung 4.23(d)). Die Aktivierungsspannung der kleineren Quelle ($s = h/6$) in Abbildung 4.22 zeigt einen Übergang von der Aktivierung der Frank–Read Quelle (die ersten fünf Aktivierungen) zu der Konfiguration Abbildung 4.23(d).

Abbildung 4.24 zeigt die oben definierte Aktivierungsspannung für Quellen unterschiedlicher Größe in einem Korn mit den Abmessungen $h = d = 4800b$. Sie ist normiert auf die Spannung τ_0 , die nötig ist, um eine Frank–Read Quelle der Größe $s = d$ zu aktivieren. Die unterste Kurve zeigt die Spannung der ersten Quellaktivierung. Für kleine Quellen ist eine hohe Spannung zu beobachten. Für größere Quellen sinkt die Aktivierungsspannung und folgt der durchgezogenen Linie, wenn die Versetzung sich frei ausdehnen kann. Da sie jedoch von den Korngrenzen und Grenzflächen hieran gehindert wird, steigt die Spannung wieder an, sobald $s > \frac{1}{3}$ ist. Mehrmalige Quellenaktivierungen erfordern eine höhere Spannung. Das Minimum in der Quellaktivierungsspannung verschiebt sich dabei zu kleineren



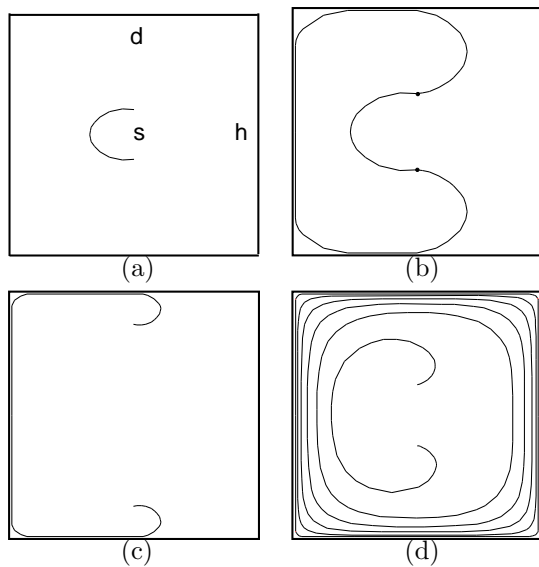


Abb. 4.23: (a) Kritische Konfiguration einer isolierten Frank–Read Quelle, (b) das Überschlagen der Versetzung wird schwieriger als die Aktivierung der Quelle, (c) kritische Konfiguration einer großen Quelle im Korn, (d) kritische Konfiguration einer kleineren Quelle nach mehrfacher Aktivierung

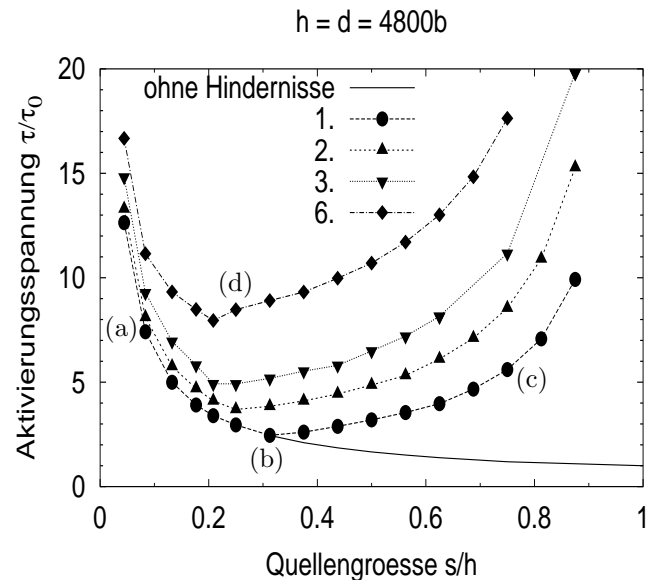


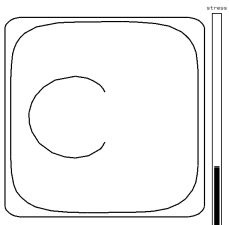
Abb. 4.24: Quellenaktivierungsspannung in Einheiten der Kanalspannung, aufgetragen über der Quellengröße in Einheiten der Schichtdicke für die erste, zweite, dritte und sechste Aktivierung der Quelle

Werten.

Abbildung 4.25 zeigt die mit τ_0 normierte Aktivierungsspannung über der Quellengröße in Einheiten der Schichtdicke bzw. Korngröße für verschiedene Kornabmessungen. Für die erste Aktivierung sind Spannungswerte in den reduzierten Einheiten nahezu identisch, Unterschiede sind erkennbar, wenn bereits mehrere Versetzungsringe im Korn vorhanden sind. Die relative Aktivierungsspannung ist hier für dünnere Schichten etwas größer.

4.2.1.1 Einfluß des Aspektverhältnisses

Bisher wurden nur quadratische Körner mit $d = h$ simuliert. Um den Einfluß des Aspektverhältnisses auf die Aktivierungsspannungen zu bestimmen, wurden Rechnungen mit konstanter Korngröße ($d = 3000b$) und variierender Schichtdicke bzw. konstanter Schichtdicke ($h = 3000b$) und variierender Korngröße und jeweils für eine kleine Quelle ($s = 400b$) und eine große Quelle ($s = 1000b$) durchgeführt (Abbildung 4.26). Die kritische Spannung der ersten Aktivierung der kleinen Quelle ist unabhängig von den Kornabmessungen. Die kritische Konfiguration der kleinen Quelle ist immer die in Abbildung 4.23(a) gezeigte, die der großen Quelle entspricht Abbildung 4.23(c) für $h < d$, bzw. 4.21(c) für $d < h$. Abbildung 4.26 zeigt, daß die Quellaktivierungsspannung nur von der kleineren Kornabmessung d oder h beeinflusst wird: sobald die variierte Größe größer als die konstant gehaltene ist, bleibt



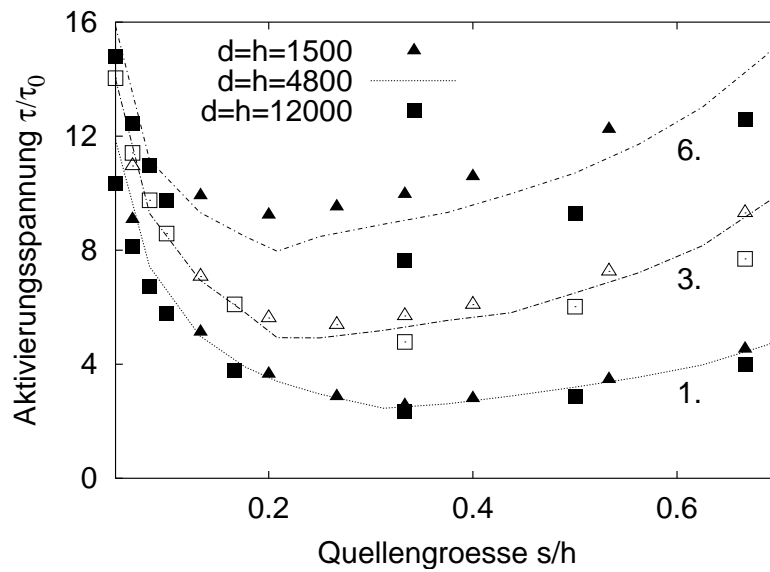


Abb. 4.25: Quellaktivierungsspannungen in Einheiten der jeweiligen Kanalspannung über der normierten Quellengröße für verschiedene Kornabmessungen

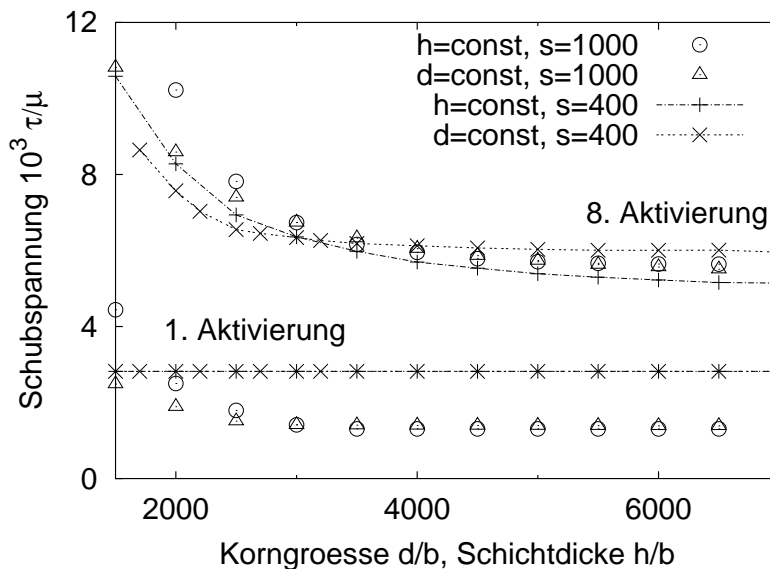
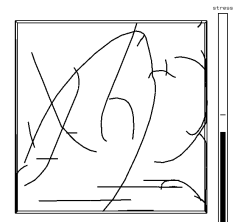


Abb. 4.26: Quellaktivierungsspannungen über Schichtdicke bei konstanter Korngröße $d = 3000b$ bzw. über Korngröße bei konstanter Schichtdicke $h = 3000b$. Die Quellengröße ist $s = 400b$ und $s = 1000b$. h ist die wirkliche Schichtdicke.



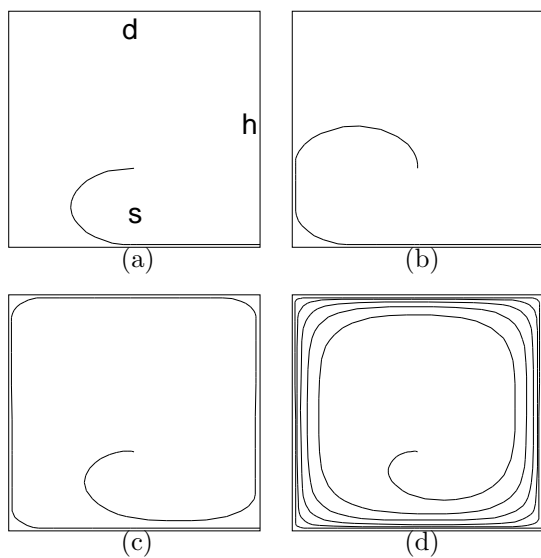


Abb. 4.27: Schnappschüsse der Simulation für spezielle Punkte in Abbildung 4.28.

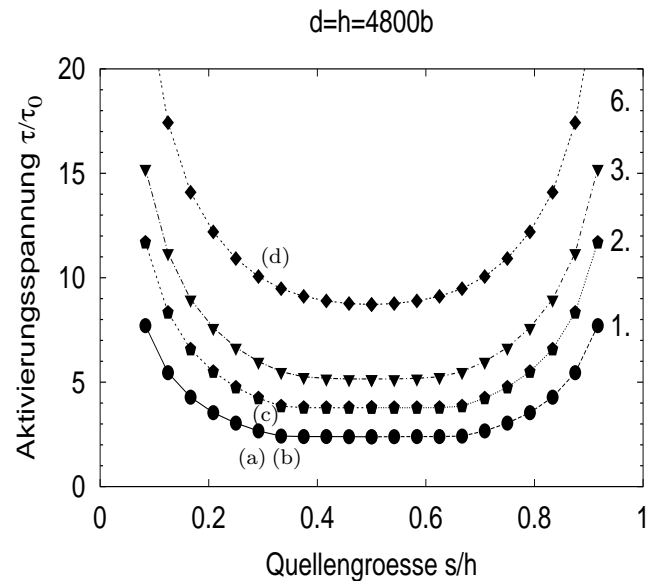
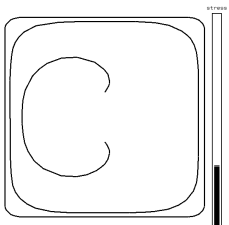


Abb. 4.28: Aktivierungsspannung einer Spiralquelle für die erste, zweite, dritte und sechste Aktivierung der Quelle in Abhängigkeit von der Quellengröße

die Spannung gleich. Lediglich die Aktivierungsspannung der kleinen Quelle mit konstantem h und variablem d ändert sich noch leicht für $d > h$ bei einer Mehrfachaktivierung. Die Rückspannung der Versetzungen an den Korngrenzen auf die Quelle ist verglichen mit der Rückspannung der Versetzungen an den Grenzflächen größer, weil sich die Quelle in Richtung der Korngrenzen ausbaucht und die Versetzungen an den Korngrenzen Stufencharakter haben und somit eine stärkere Kraft auf die Quelle ausüben.

4.2.1.2 Spiralquellen

Wenn nur ein Festhaltepunkt des Versetzungssegments der Frank–Read Quelle im Innern des Kristalls liegt und der andere Punkt am Rand des Kristalls (Korngrenze, Oberfläche oder Grenzfläche), wird die Versetzungsquelle zu einer Spiralquelle. Bei der Aktivierung einer Spiralquelle entstehen keine neuen Versetzungsringe. Die Versetzung bleibt zusammenhängend und wickelt sich spiralförmig um den zentralen Festhaltepunkt (Abbildung 4.27). Die Aktivierungsspannungen für mehrfache Aktivierungen einer Spiralquelle sind für unterschiedliche Quellengrößen in Abbildung 4.28 eingetragen. Die Auswertung der Simulationsergebnisse ist dabei etwas aufwendiger, da die Anzahl der Versetzungen im Korn konstant bleibt. Die Aktivierungsspannung wird deshalb so definiert, daß sie der maximal notwendigen Spannung entspricht, um die Versetzung aus der Konfiguration 4.27(a) in 4.27(c) zu überführen (bzw. in eine entsprechende Konfiguration mit einem zusätzlichen Überschlag). In der Simulation wurde der Randpunkt der Spiralquelle in die Ecke des Kornes gesetzt und von diesem ein festgehaltenes Segment bis zum Mittelpunkt der unteren

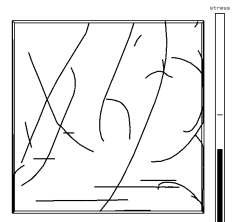


Grenzfläche gelegt (Abbildung 4.27(a)). Hierdurch wurde verhindert, daß die Versetzung den unteren Festhaltepunkt berühren kann, und dadurch Rekombinationen zu separaten Versetzungsringen stattfinden. Zur Veränderung der Größe der Quelle s wurde der obere Festhaltepunkt in vertikaler Richtung verschoben. Korngröße und Schichtdicke wurden konstant gehalten ($d = h = 4800b$), der Burgersvektor ist wie in den Simulationen im letzten Abschnitt parallel zu den Grenzflächen orientiert. Aufgrund der symmetrischen Anordnung müssen nur Berechnungen für $s < h/2$ durchgeführt werden, die restlichen Datenpunkte ergeben sich durch die Ersetzung $s \rightarrow h - s$.

Abbildung 4.28 zeigt ein ausgeprägtes Plateau für Quellengrößen um $s = h/2$. In diesen Bereich wird die Aktivierungsspannung durch die Überwindung der Konfiguration 4.27(b) bestimmt. Die kritische Spannung der Konfiguration 4.27(b) ist aufgrund der Burgersvektororientierung größer als die der Konfiguration 4.27(a). Außerdem ist Konfiguration 4.27(b) unabhängig von der Quellengröße. Die Zunahme der Aktivierungsspannung von einer Überschlagung zur nächsten ist sehr groß, da bei jedem Überschlag ein Versetzungsteil zwischen dem Festhaltepunkt und der Grenzfläche abgelegt und hierdurch die wirksame Quellengröße verkleinert wird. Im Gegensatz zur Spiralquelle ändert sich die wirksame Größe einer Frank–Read Quelle nicht bei kleinen Quellen, die Zunahme der Aktivierungsspannung wird hier lediglich durch die Rückspannung der aufgestauten Versetzungen bedingt und ist daher weniger groß (vergleiche Abbildung 4.24 mit 4.28).

4.2.1.3 Versetzungsquellen im Korn mit freien Oberflächen

In diesem Abschnitt wird die Versetzungsquellenaktivierung in einem Korn mit freien Oberflächen an der Ober- und Unterseite betrachtet. Die Versetzungen können das Korn an der freien Oberfläche verlassen, Bildkräfte werden aber nur in erster Näherung berücksichtigt: Das Segment, das an der Oberfläche endet, wird senkrecht zu dieser ausgerichtet, wodurch die Linienspannung der Bildversetzung angenähert wird (vergleiche Abschnitt 3.2.3.1). Die Quellenaktivierungsspannungen in einer freistehenden Schicht mit $d = h = 4800b$ sind in Abbildung 4.30 wiedergegeben. Für kleine Quellen (Abbildung 4.29(a) und 4.29(b)) sind die Spannungen vergleichbar mit denen der passivierten Schicht auf dem Substrat, lediglich der Anstieg der Aktivierungsspannung mit zunehmender Anzahl der Versetzungsringe ist etwas kleiner (vergleiche Abbildung 4.30 mit 4.24). Für Quellen größer als $d/3$ erreicht die Spannung einen Plateauwert. Hier ist die kritische Konfiguration die Passage zwischen dem Versetzungsaufstau an der Korngrenze und dem Festhaltepunkt der Versetzungsquelle (Abbildung 4.29(c)). Der Spannungswert der Plateauregion für die erste Versetzung ist etwas höher als für die isolierte Frank–Read Quelle (durchgezogene Linie), da die Versetzung in der Konfiguration 4.29(c) einer Versetzungsquelle mit Schraubencharakter entspricht, die eine höhere Aktivierungsspannung hat als die Versetzungsquelle bestehend aus einem geraden Segment mit Stufencharakter der Konfiguration 4.29(a). Für Quellen größer als $\frac{3}{4}d$ steigt die Spannung an. Jetzt wird von der Versetzung, die an der Oberfläche endet, und ihrer Bildversetzung eine Frank–Read Quelle geformt, die aktiviert werden muß (Abbildung 4.29(d)). In diesem Größenbereich kann die Simulation nur noch eine qualitative Bestimmung der Aktivierungsspannung geben, da Bildkräfte nicht korrekt erfaßt werden. Auch



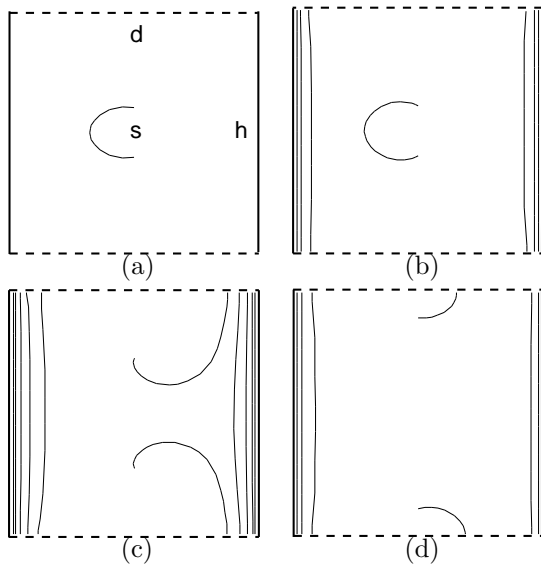


Abb. 4.29: Schnappschüsse der Simulation für spezielle Punkte in Abbildung 4.30.

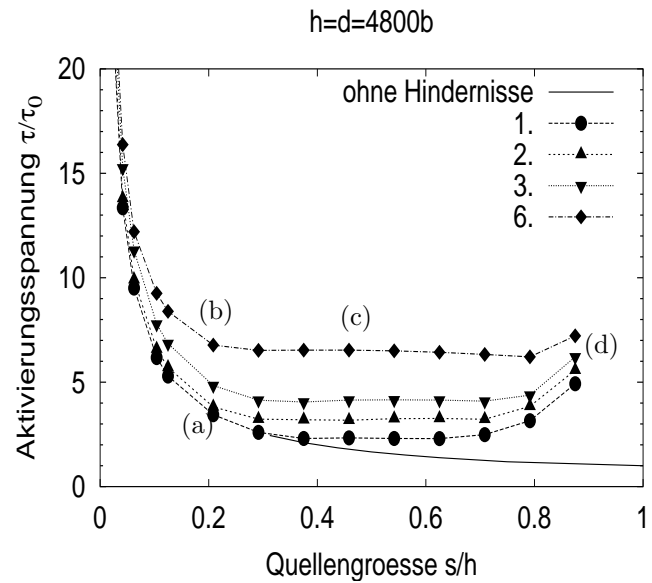


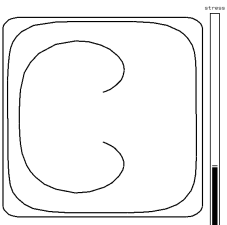
Abb. 4.30: Quellenaktivierungsspannungen in Einheiten der Spannung τ_0 über Quellengröße normiert durch die Schichtdicke für eine freistehende Schicht.

wird die kritische Spannung für die Konfiguration 4.29(c) unterschätzt: Die Versetzungen im Versetzungsaufstau sind an der Oberfläche enger zusammen, da die Rückspannung der Bildversetzungen vernachlässigt wurde. Eine Berücksichtigung der Bildkräfte würde in einer leichten Zunahme der Aktivierungsspannung resultieren, wenn s größer wird als $d/2$. Die Einbeziehung der Bildkräfte würde nur eine Erhöhung der Aktivierungsspannungen verursachen, weshalb die Simulationsergebnisse als untere Grenze angesehen werden können.

4.2.1.4 Berechnung von Spannungs–Dehnungskurven

Gibt es in einem Korn mehrere Versetzungsquellen unterschiedlicher Größe, so können aus den Aktivierungsspannungskurven in den Abbildungen 4.24, 4.28 und 4.30 Spannungs–Dehnungskurven berechnet werden, indem die Anzahl der bei einer gegebenen Spannung erzeugten Versetzungsringe abgezählt und die daraus resultierende plastische Dehnung berechnet wird.

Numerisch wird dafür die Achse der Quellengröße in den Abbildungen 4.24, 4.28 und 4.30 in z Bereiche einer vorgegebenen Breite unterteilt. Für jeden Bereich wird anhand der Daten in den Abbildungen überprüft, wie oft eine Quelle dieser Größe bei einer vorgegebenen angelegten Spannung aktiviert wird. Hierfür werden die Aktivierungsspannungen gegebenenfalls zwischen den simulierten Werten linear interpoliert. Die von den aktiven Quellen eines Größenintervalls erzeugte plastische Dehnung ist $\epsilon_{pl}^{\Delta} = nN_0/z \cdot b/h$. Hier ist n die Anzahl der Aktivierungen, b/h die plastische Dehnung eines an die Randflächen gelaufenen



Versetzungsringes und N_0/z die Anzahl der Versetzungsquellen in einem Größenintervall. Die Gesamtanzahl aller Quellen N_0 muß dabei vorgegeben werden. Es wurde zuerst eine homogene Quellenverteilung angenommen, d. h. Quellen unterschiedlicher Größe sind gleich wahrscheinlich. Die Gesamtdehnung bei einer vorgegebenen Spannung wird berechnet, indem über alle ϵ_{pi}^Δ summiert wird. In der Summation wurde berücksichtigt, daß Quellen mit $s > h/3$ im Mittel die halbe Fläche des Korns überstreichen, wenn die Spannung groß genug ist, um die Frank–Read Quelle zu aktivieren, aber noch nicht ausreicht, um die Versetzung zwischen Festhaltepunkten und Grenzflächen durchzudrücken (Abbildung 4.23(c)).

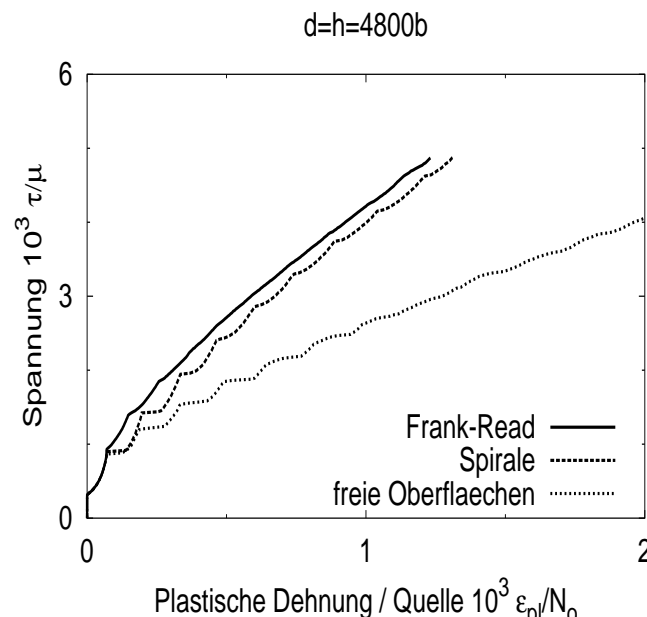
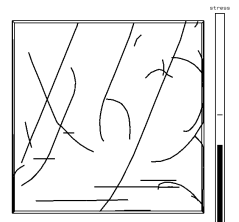


Abb. 4.31: Aufgelöste Schubspannung über plastischer Dehnung berechnet durch Abzählen der bei einer vorgegebenen Spannung emittierten Versetzungsringe anhand der Abbildungen 4.24, 4.28 und 4.30 für ein Korn mit Frank–Read Quellen und undurchdringbaren Grenzflächen und Korngrenzen (Würfelgeometrie), für ein Korn mit Spiralquellen in der Würfelgeometrie und für ein Korn mit Frank–Read Quellen in einer freistehenden Schicht ($d = h = 4800b$)

Abbildung 4.31 zeigt die aus den Abbildungen 4.24, 4.28 und 4.30 berechneten Spannungs–Dehnungskurven. Die Anzahl der Versetzungen ist auf eins normiert ($N_0 = 1$). Die erste plastische Verformung wird erreicht, wenn die Quellen, die sich über die gesamte Schichtdicke erstrecken, aktiviert werden. Der erste Knick in der Kurve entspricht der ersten Erzeugung von vollständigen Versetzungsringen (Aktivierung einer $s = h/3$ Quelle für die Würfelgeometrie, Abbildung 4.24). Die weiteren Knicke kennzeichnen eine erneute Aktivierung der Versetzungsquellen (d. h. das Erreichen eines Aktivierungsastes höherer Ordnung in den Abbildungen 4.24, 4.28 und 4.30). Direkt nach einem Knick verlaufen die Spannungs–Dehnungskurven der freistehenden Schicht und der Spiralversetzung flacher, da hier das Plateau in der Aktivierungsspannung breiter ist (Abbildungen 4.28 und 4.30) und



mehr Versetzungsquellen gleichzeitig aktiviert werden. Die Verfestigung ist in den Schichten mit den undurchdringbaren Grenzflächen (aus Abbildung 4.24 und 4.28, Würfelgeometrie) am größten, wobei die Kurve der Spiralquelle bei etwas geringeren Spannungen liegt. Die Spannungen in der freistehenden Schicht (Abbildung 4.30) sind am kleinsten. Allerdings ist hier die Versetzungsquelle so orientiert ist, daß der Einfluß der an den Korngrenzen abgelegten Versetzungen am geringsten ist (Abbildung 4.29). Eine Rotation der Quelle hätte eine größere Verfestigung zur Folge, für eine Drehung um 90° wäre ein ähnlicher Verlauf wie für die Würfelgeometrie zu erwarten, weil dann die Konfiguration in Abbildung 4.23(c) für Quellen kleiner als $h/3$ die Aktivierungsspannung vorgibt.

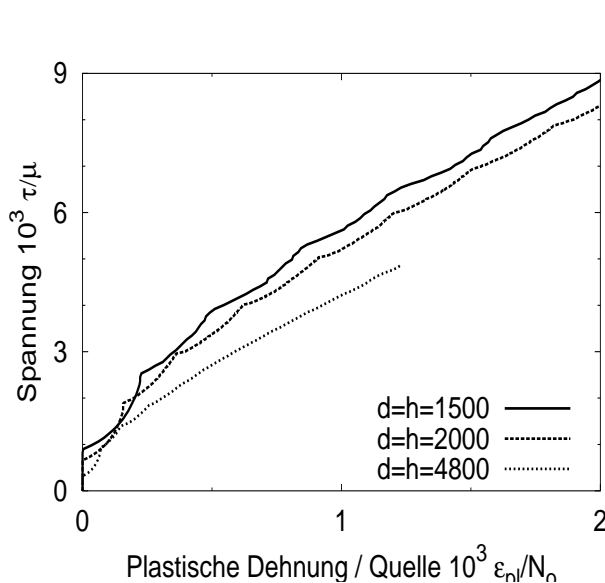


Abb. 4.32: Aufgelöste Schubspannung über plastischer Dehnung für verschiedene Kornabmessungen (Würfelgeometrie)

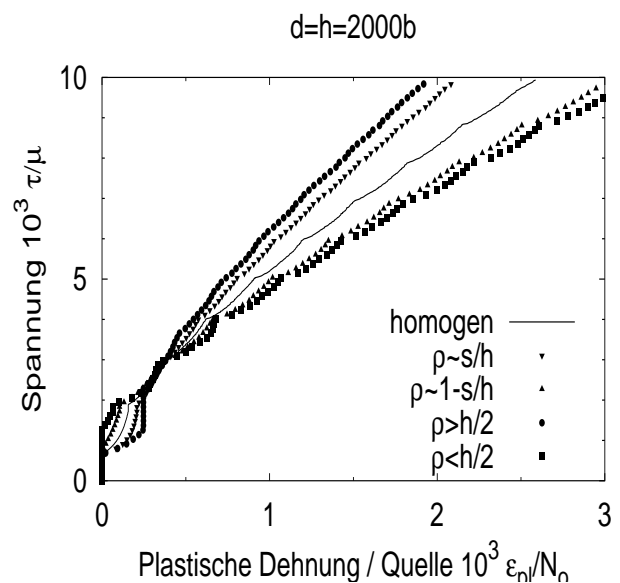
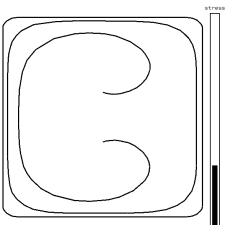


Abb. 4.33: Aufgelöste Schubspannung über plastischer Dehnung für inhomogene Quellenverteilungen (Würfelgeometrie, $d = h = 2000b$)

In Abbildung 4.32 sind die Spannungs–Dehnungskurven für verschiedene Korngrößen, bzw. Schichtdicken aufgetragen (Würfelgeometrie). Die plastische Dehnung ist auf die Quellenanzahl normiert, d. h. in dieser Darstellung ist die Versetzungsquellendichte in den kleinsten Körnern am größten. Es ist eine Zunahme der Spannung bei gleicher plastischer Dehnung mit abnehmenden Kornabmessungen zu beobachten.

Abbildung 4.33 verdeutlicht die Abhängigkeit des Spannungsverlaufs von der Quellenverteilung (Würfelgeometrie). Gezeigt ist eine homogene Quellenverteilung (aus Abbildung 4.31 mit $d = h = 2000b$), eine Verteilung mit einem linearen Anstieg der Quellenanzahl pro Größenintervall (d. h. der Quellendichte ρ) mit der Quellengröße ($\rho \sim s/h$), eine Verteilung mit linearem Abfall ($\rho \sim 1 - s/h$), eine Verteilung nur mit großen Quellen ($s > h/2$) und eine Verteilung nur mit kleinen Quellen ($s < h/2$). Die Quellenanzahl ist in allen Fällen auf $N_0 = 1$ normiert. Zu beobachten ist, daß die Spannungen für die Verteilungen mit einer erhöhten Anzahl großer Quellen zu Beginn der Verformung niedriger sind, aber



mit zunehmender Verformung größer werden als für die anderen Verteilungen. Große Versetzungsquellen emittieren die erste Versetzung schon bei relativ niedrigen Spannungen, blockieren dann aber, so daß für die wiederholte Aktivierung höhere Spannungen nötig sind.

4.2.2 Hall–Petch Modell mit Frank–Read Quelle

Im vorherigen Abschnitt wurden die Korngrenzen als undurchdringbare Hindernisse für die Versetzungen behandelt. Diese Annahme wird hier modifiziert, indem den Korngrenzen eine Korngrenzstärke oder Durchbruchspannung τ_b^* zugeordnet wird. Überschreitet die Spannung, die von den an der Korngrenze aufgestauten Versetzungen auf die Korngrenze ausgeübt wird, die Durchbruchspannung τ_b^* , so können Versetzungen durch die Korngrenze transmittieren, bzw. im Nachbarkorn werden Versetzungsquellen aktiviert, die durch ihr Spannungsfeld die Spannung an der Korngrenze erniedrigen. Genauso wie im Hall–Petch Modell kennzeichnet das Erreichen von τ_b^* den Beginn des globalen plastischen Fließens im gesamten Kristall.

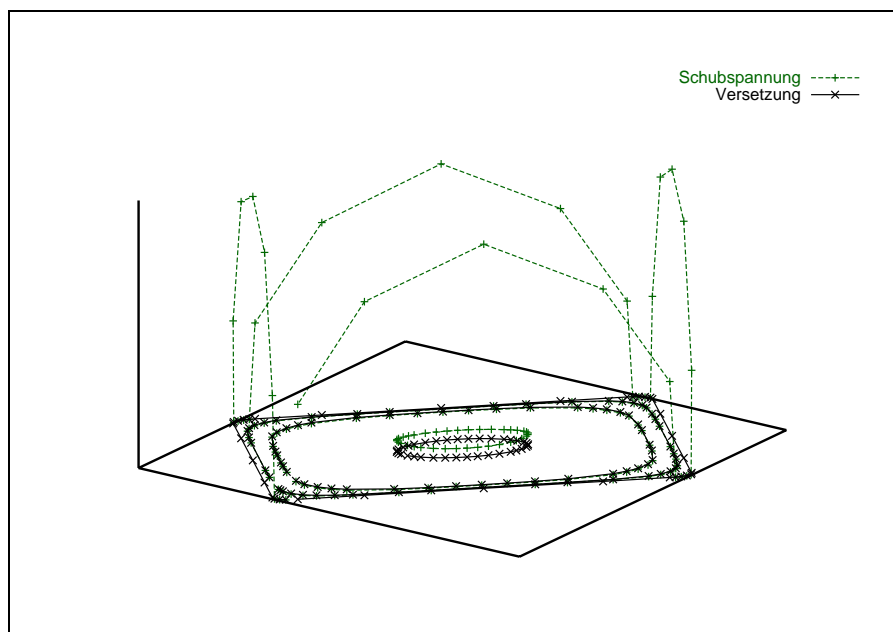
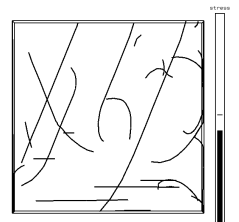


Abb. 4.34: Drei Versetzungsringe in einer Gleitebene. Über den Koordinaten der Versetzungsknoten ist in Richtung der z -Achse die aufgelöste Schubspannung des jeweiligen Knotens eingetragen (in willkürlichen Einheiten)

Abbildung 4.34 zeigt drei Versetzungsringe in einer Gleitebene. Die Ringe expandieren, da sie eine Kraft in radialer Richtung durch das angelegte Spannungsfeld erfahren. Der äußerste Ring wird von den Korngrenzen an der weiteren Bewegung gehindert. Über den Koordinaten der Versetzungsknoten ist in Richtung der z -Achse die aufgelöste Schubspannung des jeweiligen Knotens eingetragen. Die Spannung auf den inneren Ring ist



gleichmäßig positiv, er bewegt sich nach außen. Der mittlere Ring ist im Kräftegleichgewicht. Die Spannung auf den äußeren Ring ist am größten, da neben der angelegten Spannung die Spannungsfelder der inneren Ringe ihn nach außen drücken (Spannungskonzentration im Versetzungsaufstau). Die aus der Spannung resultierende Kraft muß von den Korngrenzen aufgebracht werden, um den Ring in seiner Position zu halten. Der Maximalwert der Spannung auf den äußeren Ring τ_b wird mit der Korngrenzstärke τ_b^* verglichen. Ist $\tau_b > \tau_b^*$, so liegt globales Fließen vor.

Die Fließspannung im Sinne des Hall-Petch Modells ($\tau_b = \tau_b^*$) wurde für Versetzungen auf einer (111) Gleitebene in einem quadratischen Korn berechnet. Die Korngröße wird mit d bezeichnet, die auf die Gleitebene projizierte Schichtdicke mit h (siehe Abbildung 4.20). Die Startkonfiguration ist eine Frank-Read Quelle in der Mitte des Korns, simuliert durch ein an zwei Punkten im Abstand s festgehaltenes Versetzungssegment.

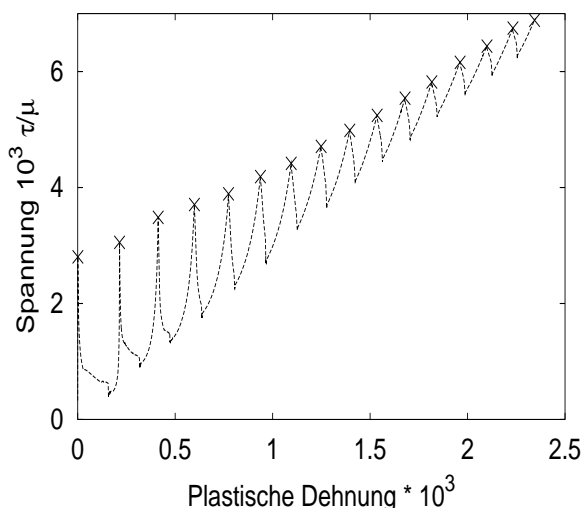


Abb. 4.35: Angelegte, aufgelöste Schubspannung über plastischer Dehnung. Schichtdicke und Korngröße sind $h = d = 5000b$, die Quellengröße ist $s = 400b$. Punkte, an denen sich die Quelle in einer kritischen Konfiguration befindet (Quellaktivierungspunkte), sind mit "x" gekennzeichnet.

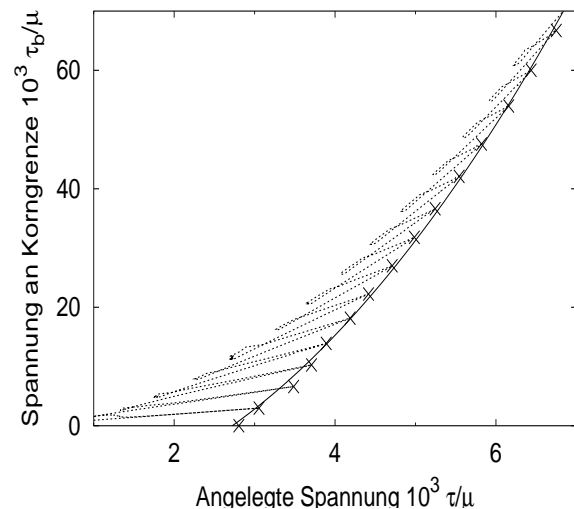
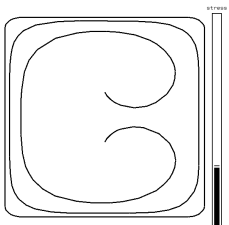


Abb. 4.36: Spannung auf die führende Versetzung im Aufstau für die gleiche Konfiguration wie in Abbildung 4.35. Die durchgezogene Linie ist Gleichung (2.13) aufgelöst nach τ_b und an die Quellaktivierungspunkte angepaßt (siehe Diskussion).

Abbildung 4.35 zeigt den Verlauf der angelegten Spannung während der Simulation am Beispiel einer Schicht mit den Abmessungen $d = h = 5000b$ und der Frank-Read Quelle der Größe $s = 400b$. Kreuze in Abbildung 4.35 markieren die Quellaktivierungsspannung, die mit zunehmender Anzahl der Versetzungsringe steigt.

Die aufgelöste Schubspannung der führenden Versetzung im Versetzungsaufstau, die äquivalent zur Spannung an der Korngrenze (τ_b) ist, ist in Abbildung 4.36 in Abhängigkeit von der angelegten Spannung gezeigt. Die Punkte, an denen die Frank-Read Quelle aktiviert wurde, sind wieder durch Kreuze gekennzeichnet. Die Fließspannung im Sinne des



Hall–Petch Kriteriums kann hier als die angelegte Spannung abgelesen werden, bei der ein bestimmter Spannungswert an der Korngrenze erreicht ist.

Abbildung 4.37(a) zeigt die aufgelöste Fließspannung für eine Korngrenzdurchbruchspannung von $\tau_b^* = 0.057\mu$.⁵ Die Größe der Versetzungsquelle wurde konstant gehalten $s = 400b$, Schichtdicke und Korngröße wurden variiert. Drei verschiedene Fälle sind gezeigt: (i) Die Schichtdicke wird variiert bei konstanter Korngröße ($d = 3000b$), (ii) variierte Korngröße und konstante Schichtdicke ($h = 3000b$) und (iii) Korngröße und Schichtdicke werden gleichzeitig verändert ($h = d$). In den ersten beiden Fällen ändert sich die Fließspannung nur wenig, sobald die variierte Größe größer als die festgehaltene ist.

Die Anzahl der Versetzungen im Korn N bei Erreichen der kritischen Spannung $\tau_b^* = 0.057\mu$ in Abhängigkeit von den Kornabmessungen ist in Abbildung 4.37(b) wiedergegeben. N wird größer mit zunehmender Korngröße. Wenn h variiert wird und d konstant gehalten wird, steigt zunächst die Anzahl der Versetzungen, zeigt aber dann ein Maximum bei einer Schichtdicke von $h \approx 3000b$.

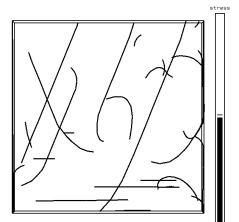
Der Einfluß der Versetzungsquelle kann anhand von Abbildung 4.38 deutlich gemacht werden. Hier wurde die Quellengröße variiert, dabei aber Schichtdicke und Korngröße konstant gehalten ($d = h = 4800b$). Die Fließspannungen sind für drei verschiedene Durchbruchspannungen τ_b^* gezeigt. Die Fließspannung steigt mit kleiner werdender Quellengröße, wobei die Abhängigkeit für kleine τ_b^* ausgeprägter ist.

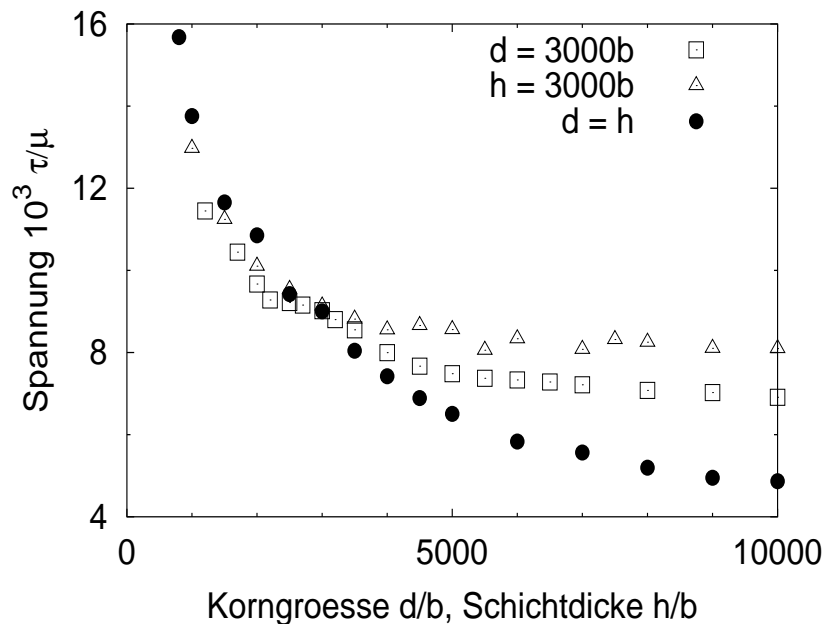
In Abbildung 4.39 ist die Fließspannung über der Korngröße ($d = h$) für eine Versetzungsquelle, deren Größe mit den Kornabmessungen skaliert ($s = h/4$ und $s = h/8$), dargestellt. Die Fließspannungen der $s = h/8$ Quelle sind bei kleinen Korngrößen größer als die der $s = h/4$ Quelle. Dieser Unterschied verschwindet für $d \rightarrow \infty$ und ist weniger auffällig bei großen Durchbruchspannungen.

4.2.2.1 Analyse der Abhängigkeit vom Aspektverhältnis

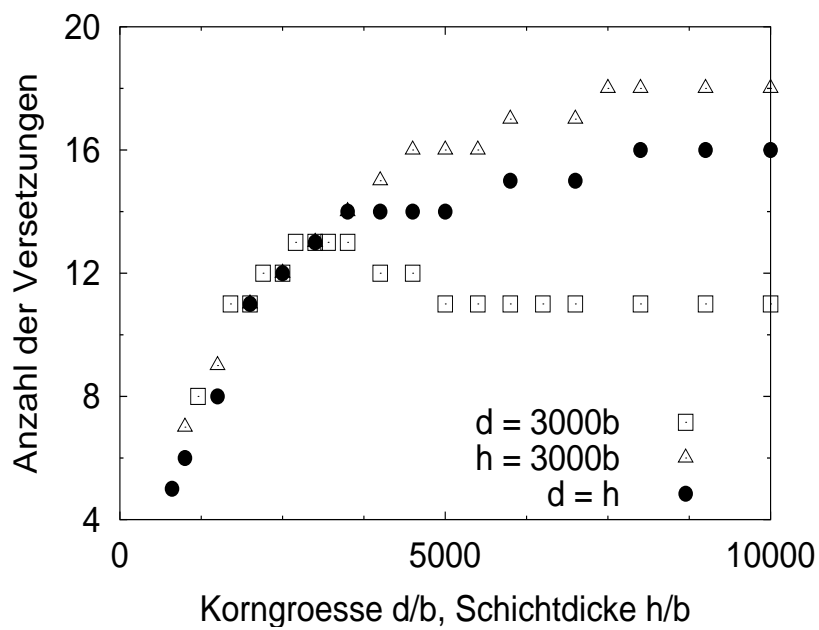
Wenn nur eine Größe — d oder h — variiert und die andere konstant gehalten wird, ist die Änderung der Fließspannung nur noch minimal, sobald die variierte Größe größer als die konstante ist ($> 3000b$ in Abbildung 4.37(a)). Der Unterschied im Niveau der Fließspannung in diesem Bereich ist durch die unterschiedlichen Charaktere der Versetzungen an den Korngrenzen bzw. Grenzflächen zu erklären. Wie in der Herleitung des Hall–Petch Modells in Kapitel 2.3 erwähnt, ist die Anzahl der Versetzungen proportional zur Korngröße (bzw. Schichtdicke) dividiert durch den mittleren Abstand der Versetzungen. Für eine gegebene Spannung ist der Gleichgewichtsabstand zweier Stufenversetzungen um den Faktor $1/(1 - \nu)$ größer als der zweier Schraubenversetzungen, da das Spannungsfeld der Stufenversetzungen um diesen Faktor größer ist. Vergleichen mit einem Aufstau aus Schraubenversetzungen, muß für einen Stufenversetzungsaufstau eine höhere Spannung zum Er-

⁵Die Simulationen wurden für drei verschiedene Durchbruchspannungen durchgeführt ($\tau_b^* = 0.0067\mu$, $\tau_b^* = 0.021\mu$ und $\tau_b^* = 0.057\mu$) um so den Bereich der plausiblen Werte abzudecken (siehe hierzu Abschnitt 5.4.2.3). In Abbildung 4.37(a) werden die Fließspannungen zu $\tau_b^* = 0.057\mu$ dargestellt, da die analytischen Zusammenhänge besser verdeutlicht werden können, wenn viele Versetzungen im Aufstau vorhanden sind (siehe Abschnitt 5.4.1).



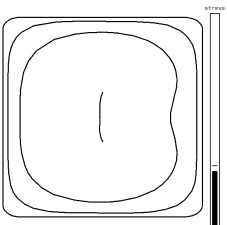


(a)



(b)

Abb. 4.37: Fließspannung (a) und entsprechende Anzahl der Versetzungen (b) über Korngröße bzw. Schichtdicke für eine Durchbruchspannung von $\tau_b^* = 0.057\mu$. Die Quellengröße ist $s = 400b$.



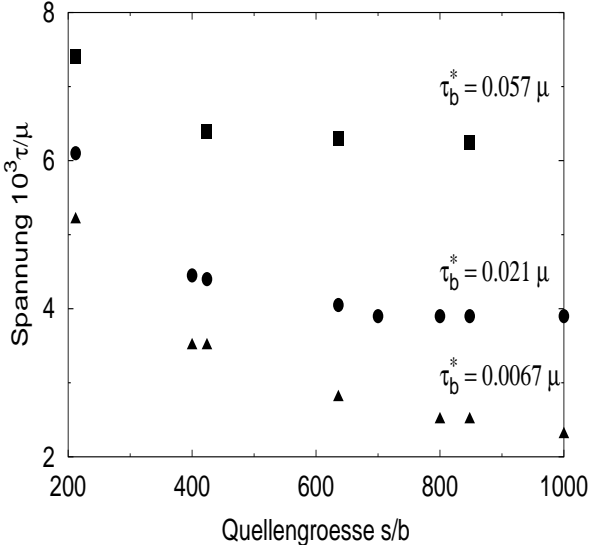


Abb. 4.38: Fließspannung über Quellengröße für konstante Kornabmessungen $h = d = 4800b$ für drei verschiedene Durchbruchspannungen τ_b^* .

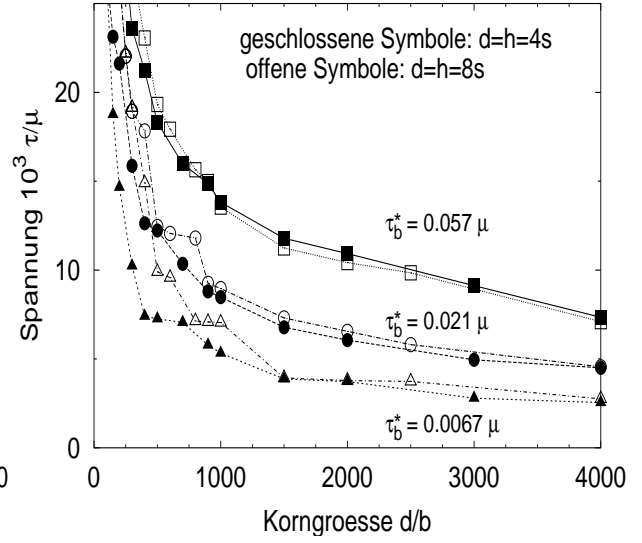


Abb. 4.39: Aufgelöste Fließspannungen über Schichtdicke ($d = h$) für mit der Schichtdicke skalierende Versetzungsquellen ($s = h/4$ und $s = h/8$)

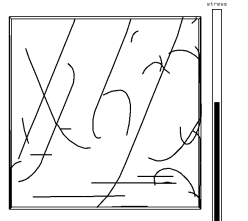
reichen der Korngrenzdurchbruchspannung angelegt werden, da (bei gleicher Spannung) weniger Versetzungen im Korn vorhanden sind. In der Simulation des rechteckigen Kornes gibt es gleichzeitig einen Aufstau von Schraubenversetzungen an den Grenzflächen der Länge h und Stufenversetzungen an den Korngrenzen der Länge d . Ist d dividiert durch den Skalierungsfaktor für Stufenversetzungen $1/(1-\nu)$ kleiner als h , wird der Gleichgewichtsabstand der Versetzungen und somit die Fließspannung von d kontrolliert ansonsten von h (wenn die Wechselwirkung zwischen den Aufstaus vernachlässigt wird):

$$\tau_{\text{app}}^* = \begin{cases} \sqrt{\frac{K_{\text{HP}}^2}{d} + \tau_{\text{source}}^2} & \text{falls } d < h/(1-\nu) \\ \sqrt{\frac{(1-\nu)K_{\text{HP}}^2}{h} + \tau_{\text{source}}^2} & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.4)$$

Gleichung (4.4) ist in Abbildung 4.40 zusammen mit den Simulationsdaten aus Abbildung 4.37(a) für große Körner dargestellt, für die die Aktivierungsspannung der Frank–Read Quelle konstant ist:

$$\tau_{\text{source}} = \frac{\mu b}{2\pi s} \ln\left(\frac{\alpha s}{b}\right) \quad (4.5)$$

Diese Gleichung wurde mit $\alpha = 3$, $\nu = 0.333$ und $s = 400b$ zur Berechnung der Aktivierungsspannung in Gleichung 4.4 verwendet. K_{HP} wurde durch Anpassen an die Daten gewonnen (eine genauere Beschreibung der Anpassungsprozedur folgt in Abschnitt 5.4.1). Für große d, h , wenn die Wechselwirkung zwischen den Aufstaus vernachlässigbar wird, beschreibt Gleichung (4.4) gut die simulierten Fließspannungen.



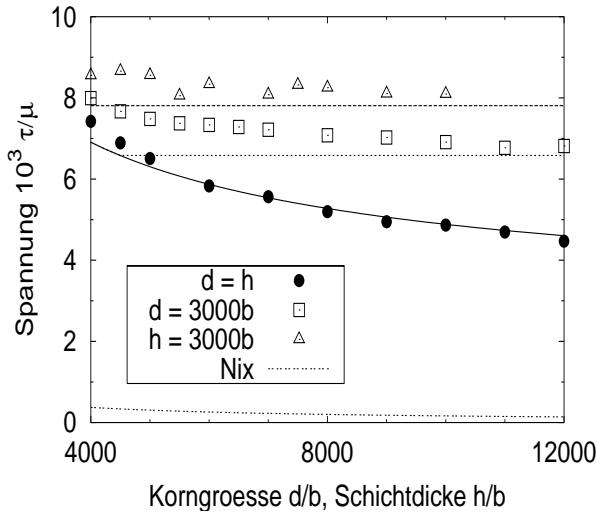


Abb. 4.40: Analytische Beschreibung des asymptotischen Verhaltens der Fließspannung für große Körner, $\tau_b^* = 0.057\mu$ und $s = 400b$

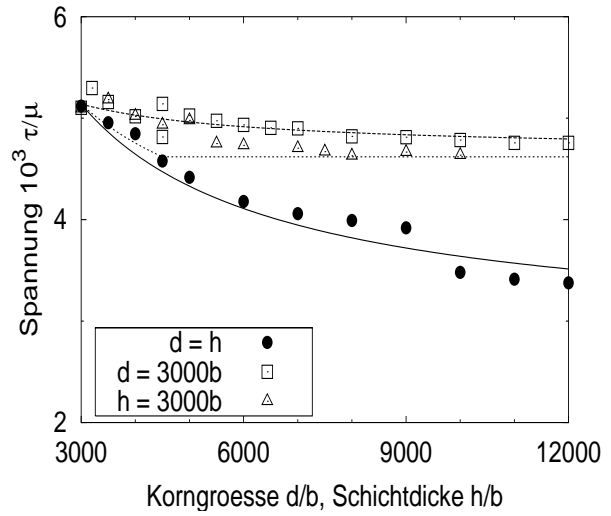


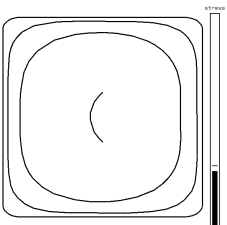
Abb. 4.41: Analytische Beschreibung des asymptotischen Verhaltens der Fließspannung unter Berücksichtigung der Nix Spannung für große Körner, $\tau_b^* = 0.021\mu$ und $s = 400b$

In $\langle 111 \rangle$ orientierten Körnern (der häufigsten Texturkomponente dünner Schichten) gibt es außer den oben betrachteten Versetzungen, die beim Bewegen Grenzflächenversetzungen mit Schraubencharakter ablegen, noch Versetzungen, deren Burgersvektor im 60° Winkel zur Grenzfläche liegt. Hier ist der Schichtdickeneinfluß dominierend, da der Stufenversetzungsanteil der Grenzflächenversetzungen größer ist als der Stufenversetzungsanteil der an den Korngrenzen aufgestauten Versetzungen. Die Fließspannung wird von der Schichtdicke kontrolliert, wenn

$$\frac{1 - \nu \cos 30^\circ}{1 - \nu} h \approx 1.12 h < 1.37 d \approx \frac{1 - \nu \cos 60^\circ}{1 - \nu} d \tag{4.6}$$

gilt. In einem $\langle 111 \rangle$ orientierten Korn sind unter einachsiger Belastung in der Schichtebene doppelt so viele Gleitsysteme mit 60° Burgersvektor wie mit zur Grenzfläche parallelen Burgersvektor aktiv, da die Gleitsysteme, deren Gleitebene parallel zur Grenzfläche liegt, keine aufgelöste Schubspannung erfahren. Wird der Wichtungsfaktor der Kornabmessungen über die aktiven Gleitsysteme gemittelt, ist er für Schichtdicke und Korngröße gleich groß (≈ 1.25 , vergl. mit Tabelle 2.1). D. h. auch unter Berücksichtigung des Charakters der Versetzungen sind Schichtdicke und Korngröße im Mittel gleichberechtigt, wenn Versetzungen unterschiedlicher Gleitsysteme bewegt werden.

Die Anzahl der Versetzungen im Aufstau (Abbildung 4.37(b)) hat ein Maximum für den Fall konstanter Korngröße und variierender Schichtdicke. Dieses Maximum läßt sich nicht mit den eindimensionalen Aufstaumodellen (Gleichung (2.8) oder (2.13)) erklären und beruht auf der zweidimensionalen Geometrie: Versetzungen an der Korngrenze erfahren eine Spannung aufgrund ihrer Krümmung, solange h kleiner als d ist. Diese Rückspannung re-



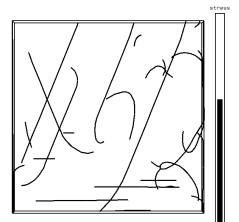
duziert die Spannung an der Korngrenze. Eine größere angelegte Spannung wird demnach benötigt, um τ_b^* zu erreichen. Die Anzahl der Versetzungen steigt mit größer werdendem h wie vom Hall–Petch Modell vorhergesagt. Für $h > d$ kontrolliert die Korngröße die Spannung, die benötigt wird, um die Versetzungen im Gleichgewicht zu halten. Da d konstant ist, sollte die Anzahl der Versetzungen auch konstant bleiben. Jedoch verringert sich die Krümmung der Versetzungen an der Korngrenze, wodurch die Rückspannung reduziert und folglich die Fließspannung und Anzahl der Versetzungen vermindert wird.

Als erste Näherung kann die Rückspannung in das Hall–Petch Modell eingebracht werden, indem ein Reibspannungsterm τ_0 wie in Gleichung (2.11) eingeführt wird, und die Kanal- (Nix) Spannung als τ_0 eingesetzt wird. Wie in Abbildung 4.40 verdeutlicht, ist die Nix Spannung im Vergleich mit der dort berechneten Fließspannung nur sehr klein, kann aber die Abnahme der Fließspannung mit zunehmenden h bei konstantem d erklären. Abbildung 4.41 zeigt die zusätzliche Abhängigkeit von der Schichtdicke. Hier wurde eine kleinere Durchbruchspannung $\tau_b^* = 0.021\mu$ gewählt, wodurch die Fließspannungen kleiner sind und die Rückspannung stärker ins Gewicht fällt. Für τ_{app}^* in Gleichung (4.4) wurde hier $\tau_{app}^* + \tau_{nix}$ substituiert, mit τ_{nix} aus Gleichung (3.14). Der Hall–Petch Koeffizient wurde durch Fitten der Gleichung an die simulierten Daten für $d = h$ bestimmt.

4.3 Simulationen mit mehreren Versetzungsquellen

In diesem Kapitel wird das bereits in den vorangegangenen Abschnitten untersuchte Modell der mehrfachen Aktivierung einer Versetzungsquelle im Inneren eines Kornes erweitert. Es werden nun mehrere unterschiedliche aktive Quellen berücksichtigt. Im Gegensatz zum Abschnitt 4.2, in dem nur eine isolierte Versetzungsquelle betrachtet wurde, können somit auch Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Versetzungsquellen und den emittierten Versetzungen berücksichtigt werden. Somit ist eine realistischere Simulation der Verformung eines Kornes in einer dünnen Schicht möglich, und Modellüberlegungen, die aus den Ergebnissen der vorangegangenen Abschnitten resultieren, können für diesen allgemeineren Fall überprüft werden.

Es wird wie schon in Abschnitt 4.2 davon ausgegangen, daß nur eine begrenzte Zahl von Versetzungsquellen zur Verfügung steht. Diese werden wieder als an beiden Enden festgehaltene Versetzungssegmente realisiert. Größe, Orientierung, Burgersvektor, Gleitebene und Position des Segments im Korn werden per Zufallsgenerator bestimmt (Abbildung 4.42). Das Gleitsystem der Versetzungen wird dabei aus den Hauptgleitsystemen eines kubisch flächenzentrierten Kristalls $\langle 110 \rangle \{111\}$ ausgesucht. Das Korn wird wie in den vorangegangenen Abschnitten durch ein Substrat und eine Passivierungsschicht zur Unter- und Oberseite (bzw. später durch freie Oberflächen) im Abstand h und durch Korngrenzen zur rechten und linken begrenzt (Abstand d). Zusätzlich werden jetzt noch Korngrenzen an der Vorder- und Rückseite eingeführt, deren Abstand ebenfalls d beträgt. Zunächst wird ein Korn mit der $(\bar{1}\bar{1}1)$ Gleitebene parallel zu den Grenzflächen zur Simulation einer $\langle 111 \rangle$ texturierten Schicht untersucht. Die Orientierung des Kristallgitters in der zu den Grenzflächen parallelen Ebene, d. h. die Rotation um die $[\bar{1}\bar{1}1]$ Achse, wird ebenfalls zufällig



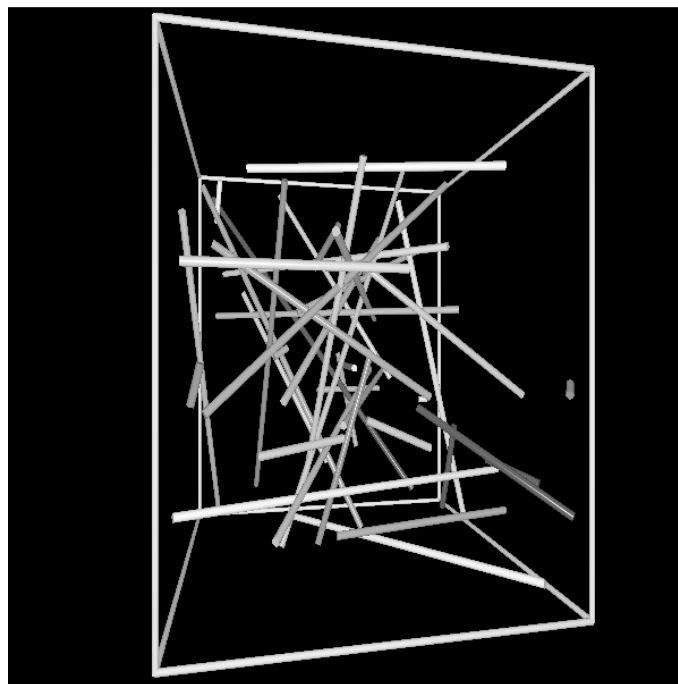


Abb. 4.42: Per Zufallsgenerator erzeugte Startkonfiguration für eine Simulation mit mehreren Versetzungsquellen. Der geschlossene Linienzug stellt die Kanten des simulierten Kornes dar. Das würfelförmige Korn wird von Korngrenzen (rechts, links, vorne, hinten) und Grenzflächen zum Substrat und zur Passivierungsschicht (oben und unten) begrenzt (Würfelgeometrie).

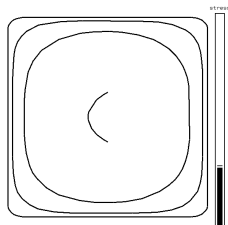
ausgesucht, der Randflächenwürfel bleibt dabei raumfest.

Eine homogene Zugspannung wird in Richtung der horizontalen Diagonalen des Simulationswürfels (links hinten nach rechts vorne) und parallel zu den Grenzflächen angelegt. Die Versetzungen bewegen sich unter dem Einfluß der Spannung und die hierbei verursachte plastische Dehnung wird aufgezeichnet. Der makroskopische plastische Dehnungstensor $\tilde{\epsilon}_{\text{pl}}$ berechnet sich dabei mit [167, S. 294]:

$$\tilde{\epsilon}_{\text{pl}} = \sum_{i=1}^N \frac{l_i \Delta x_i}{2V} (\mathbf{n}_i \otimes \mathbf{b}_i + \mathbf{b}_i \otimes \mathbf{n}_i), \quad (4.7)$$

wobei l_i die Länge des Segments i , Δx_i die Verschiebung des Segments während eines Zeitschritts, \mathbf{n}_i der Normalenvektor der Gleitebene, \mathbf{b}_i der Burgersvektor und V das Volumen des simulierten Kristalls ist. \otimes kennzeichnet das dyadische Produkt. Summiert wird über alle Segmente im Kristall. Vom Dehnungstensor wird die Komponente als plastische Dehnung ausgegeben, die einer Längenänderung in Richtung der Zugachse entspricht (d. h. die xx -Komponente des Dehnungstensors, wenn dieser in einem Koordinatensystem berechnet wird, in dem nur die xx -Komponente des Spannungstensors ungleich null ist).

Eine weitere Größe, die während der Simulation berechnet wird, ist die Versetzungsdichte. Diese ergibt sich durch Summation über die Länge aller Versetzungssegmente und



Division durch das Simulationsvolumen.

$$\rho = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N l_i \quad (4.8)$$

Abbildung 4.43 zeigt vier Momentaufnahmen der Versetzungskonfiguration im Verlauf einer Simulation am Beispiel eines Kornes mit den Abmessungen $d = h = 2000b$ und 40 Versetzungsquellen. Die Spannung bei einer gegebenen plastischen Dehnung hängt von der Anzahl der Versetzungsquellen aber auch von der jeweiligen (zufälligen) Konfiguration ab. Diese Aspekte werden in Abschnitt 4.3.1 genauer untersucht. Anschließend wird die Abhängigkeit der Fließspannung von der Schichtdicke und Korngröße studiert.

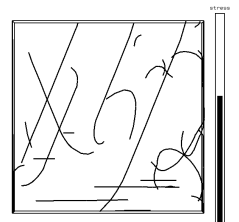
In den darauf folgenden Kapiteln werden einige der oben angeführten Beschränkungen überprüft, und unterschiedliche Kornorientierungen und Spannungszustände simuliert. So wird im Kapitel 4.3.3 der Einfluß der Seitenarme der Versetzungsquellen, die bisher vernachlässigt wurden, untersucht. Außerdem werden inhomogene Quellenverteilungen simuliert. In Abschnitt 4.3.4 werden die Ergebnisse für die Simulation einer (001) texturierten Schicht und einer Schicht unter biaxialer Spannung vorgestellt.

In den bisher angeführten Kapiteln wurden größtenteils Schichten simuliert, die auf einem Substrat abgeschieden und mit einer Passivierungsschicht versehen sind. Um den Einfluß von freien Oberflächen abschätzen zu können, werden in Kapitel 4.3.5 Simulationen für eine Schicht mit einer bzw. zwei freien Oberflächen präsentiert und mit der „eingepackten“ Schicht verglichen. Im letzten Abschnitt des Ergebnisteils wird die Wechselwirkung von Versetzungen in benachbarten Körnern eines Polykristalls untersucht.

4.3.1 Einfluß der Startkonfiguration

Abbildung 4.44 zeigt die Spannung über der plastischen Dehnung für ein Korn der Größe $d = h = 2000b$. Variiert wurde die Anzahl der Versetzungsquellen N_0 und bei gleicher Versetzungsquellenanzahl die Startkonfiguration, d. h. die zufällige Verteilung der Versetzungsquellen. Die Spannung wurde, wie in Abschnitt 3.2.1.2 erläutert, so gesteuert, daß eine mittlere Knotengeschwindigkeit von 30ms^{-1} erreicht wird. In Abbildung 4.44 und den folgenden Abbildungen sind aufgrund der besseren Übersichtlichkeit nur die lokalen Spannungsmaxima eingetragen (soweit nicht anders erwähnt).

Für kleine N_0 wird eine größere Spannung benötigt, um eine gegebene plastische Dehnung zu erzeugen. Außerdem zeigen die Ergebnisse eine Streuung der Spannungswerte bei gleichem N_0 : Unterschiedliche Startkonfigurationen können auch bei gleicher Versetzungsquellenanzahl in unterschiedliche Spannungs–Dehnungskurven resultieren. Dieses ist auf die endliche Anzahl der Quellen und deren zufällige Auswahl und Positionierung zurückzuführen. Von den vorhandenen Quellen sind nur wenige aktiv, eine unterschiedliche Aktivierungsspannung der einzelnen Quellen wird deshalb auch einen unterschiedlichen Spannungs–Dehnungsverlauf zur Folge haben. Je größer die Anzahl der Versetzungsquellen, desto größer ist die Wahrscheinlichkeit, daß es günstig gelegene Quellen mit niedrigen Aktivierungsspannungen gibt und desto mehr Quellen werden aktiv sein. Ist N_0 nicht so groß,



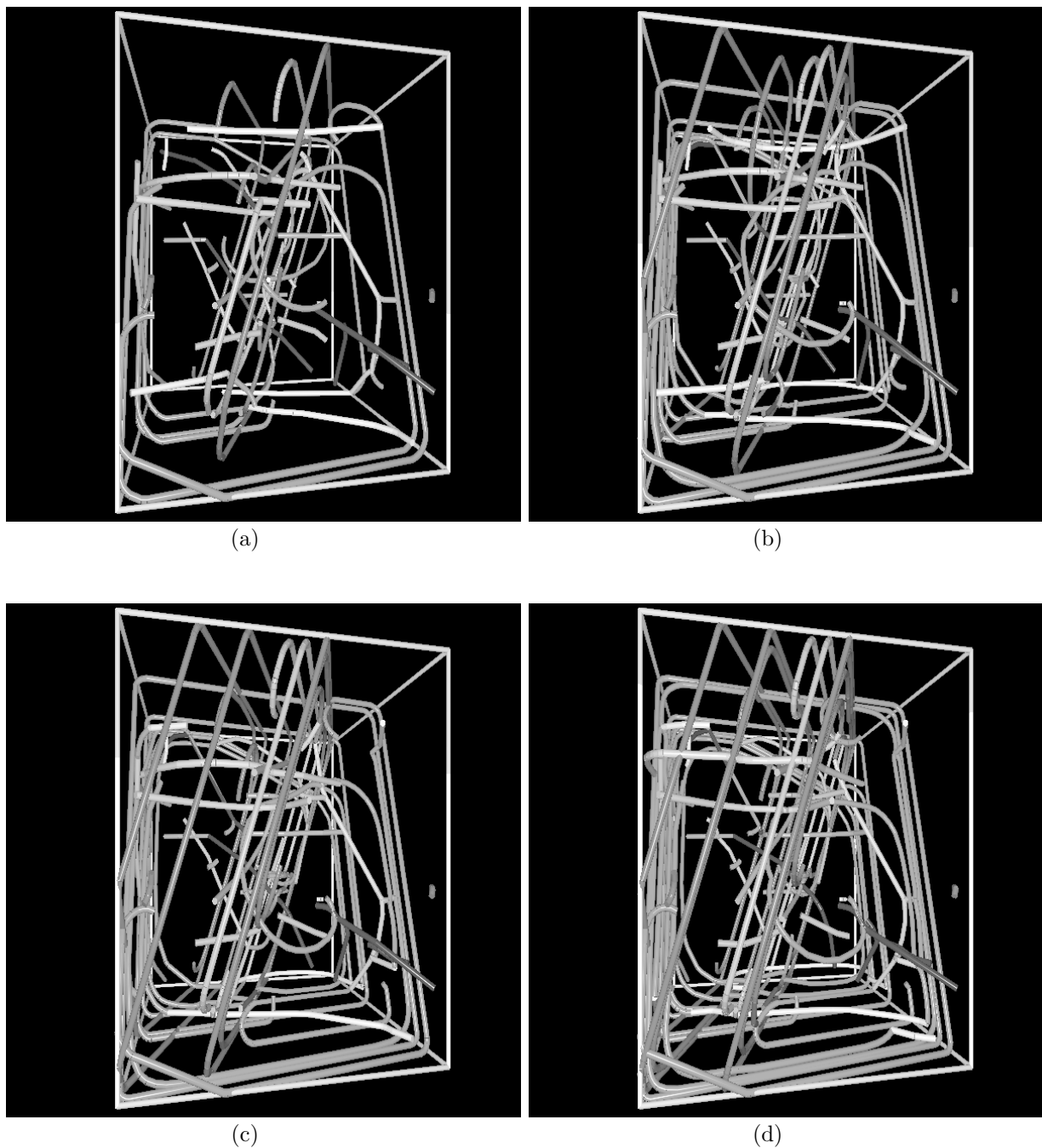
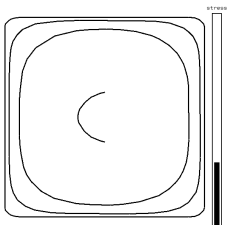


Abb. 4.43: Versetzungskonfiguration nach 0.14% (a), 0.24% (b), 0.31% (c) und 0.38% (d) plastischer Dehnung. Die entsprechenden Versetzungsdichten sind $\rho = 1.4 \cdot 10^{14} \text{m}^{-2}$ (a), $\rho = 2.2 \cdot 10^{14} \text{m}^{-2}$ (b), $\rho = 2.7 \cdot 10^{14} \text{m}^{-2}$ (c) und $\rho = 3.3 \cdot 10^{14} \text{m}^{-2}$ (d). Die Startkonfiguration ist in Abbildung 4.42 gezeigt.



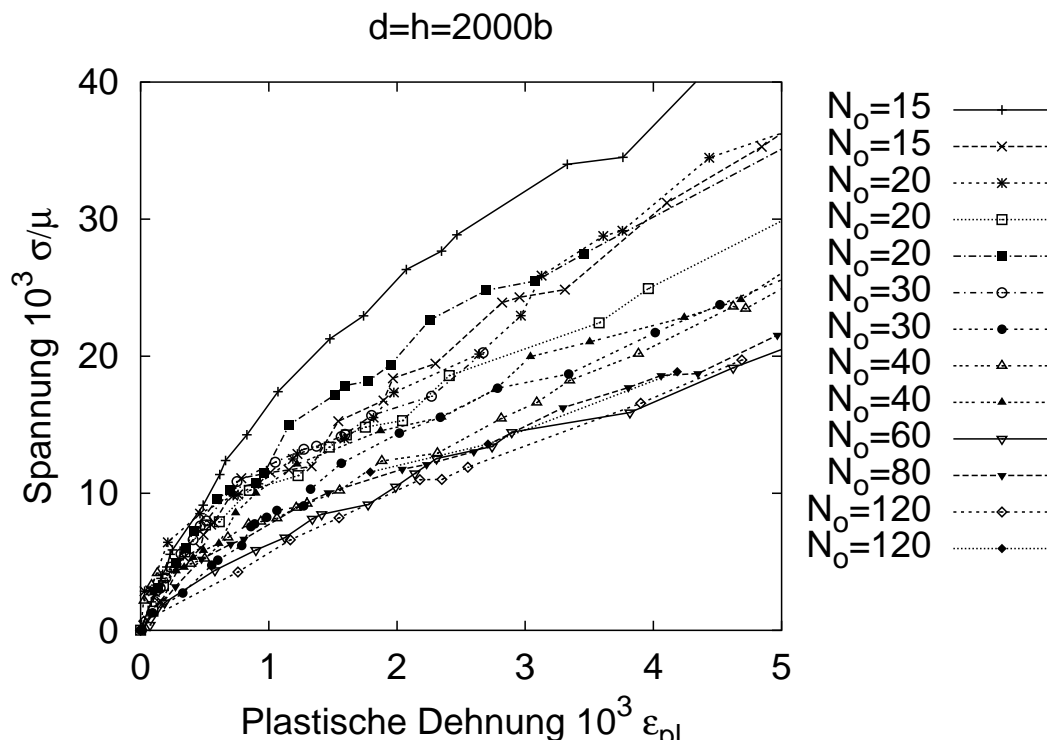


Abb. 4.44: Spannung über plastischer Dehnung für ein Korn mit den Abmessungen $d = h = 2000b$. Gezeigt sind Simulationen mit unterschiedlichen Versetzungsquellenanzahlen bzw. Anordnungen der Quellen.

daß sich die Quellen gegenseitig behindern, steigt die plastische Dehnung bei vorgegebener Spannung mit der Anzahl der Versetzungsquellen.

Abbildung 4.45 verdeutlicht diese Tendenz. Hier wurde die Spannung bei 0.1%, 0.2%, 0.3% und 0.5% plastischer Dehnung für verschiedene N_0 aufgetragen. Durch die Datenpunkte wurden Kurven der Form $\sigma = c_1/N_0 + c_2$ gelegt. Die Abhängigkeit der Spannung von der inversen Quellenanzahl läßt sich einfach erklären, wenn angenommen wird, daß die Quellen unabhängig voneinander operieren. Die Aktivierungsspannung einer einzelnen Quelle σ_{einz} steigt linear mit der Anzahl der bereits emittierten Versetzungsringe N_v [167, S. 774]

$$\sigma_{\text{einz}} \sim N_v, \quad (4.9)$$

wie auch in Abbildung 4.22, S. 77 zu erkennen, in der jede Spannungsspitze für eine Aktivierung der Quelle steht. Jeder Versetzungsring erzeugt eine bestimmte Abscherung des Kristalls, d. h. die von einer Versetzungsquelle verursachte plastische Dehnung ϵ_{einz} ist proportional zu N_v :

$$N_v \sim \epsilon_{\text{einz}}. \quad (4.10)$$

Da die Gesamtdehnung gleich der Anzahl der Versetzungsquellen N_0 (genauer: gleich der Anzahl aktiver Versetzungsquellen, die aber proportional zu N_0 ist) multipliziert mit der



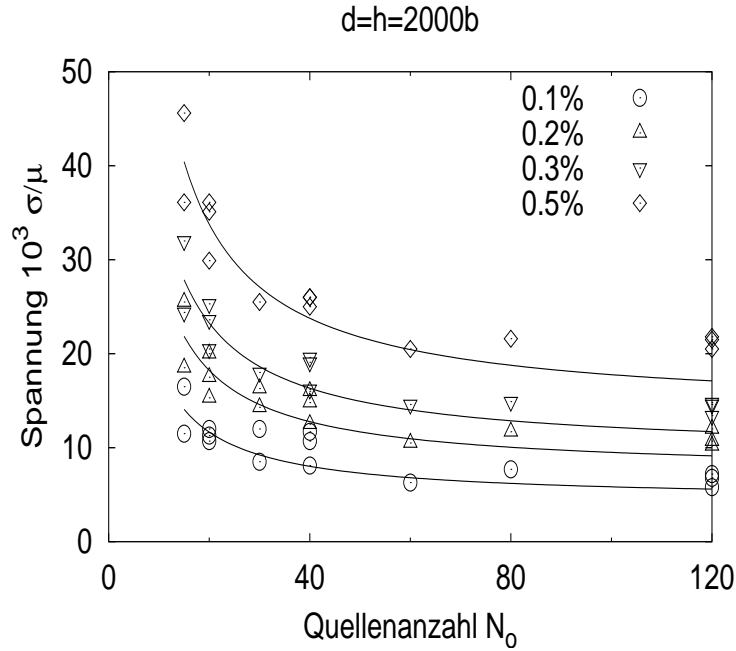


Abb. 4.45: Spannung bei 0.1%, 0.2%, 0.3% und 0.5% plastischer Dehnung über der Anzahl der Versetzungsquellen im Korn mit $d = h = 2000b$. Die Linien entsprechen der Funktion $\sigma = c_1/N_0 + c_2$ angepaßt an die Datenpunkte.

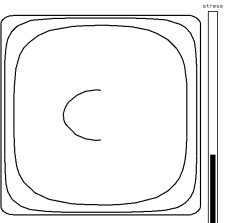
Dehnung pro Quelle ist ($\epsilon_{\text{pl}} = N_o \epsilon_{\text{einz}}$), folgt die beobachtete Abhängigkeit:

$$\sigma_{\text{einz}} \sim \frac{\epsilon_{\text{pl}}}{N_o}. \quad (4.11)$$

Der Achsenabstand c_2 der Fitgleichung in Abbildung 4.45 folgt aus der endlichen Aktivierungsspannung einer einzelnen Quelle. Da die von den Quellen emittierten Versetzungen jedoch auch miteinander wechselwirken, ergeben sich für große N_o ($N_o > 60$) wieder höhere Spannungen. In den Simulationen der folgenden Kapitel wurde deshalb meistens mit 40 Versetzungsquellen gerechnet (wenn $d=h=2000b$), da sich die Spannungen hier schon im Plateaubereich in Abbildung 4.45 befinden. Dieser Wert entspricht einer Startversetzungsdichte von $\rho_0 = 7.6 \cdot 10^{13} \text{m}^{-2}$. Außerdem wurden mehrere Simulationen mit unterschiedlicher Startkonfiguration gemittelt, um dadurch den statistischen Fehler zu verringern.

Die Versetzungsdichte ist in Abbildung 4.46 über der plastischen Dehnung aufgetragen. An den Grenzflächen und Korngrenzen aufgestaute Versetzungen leisten den größten Beitrag zur Versetzungsdichte. Da die plastische Dehnung proportional zu diesen Versetzungen ist, ist auch die Versetzungsdichte proportional zur plastischen Dehnung.

Abbildung 4.47 zeigt die Spannung über der Versetzungsdichte abzüglich der Versetzungsdichte zu Beginn der Simulation. Da die Versetzungsdichte ungefähr proportional zur plastischen Dehnung ist, ist der Verlauf der Spannung ähnlich wie in Abbildung 4.44.



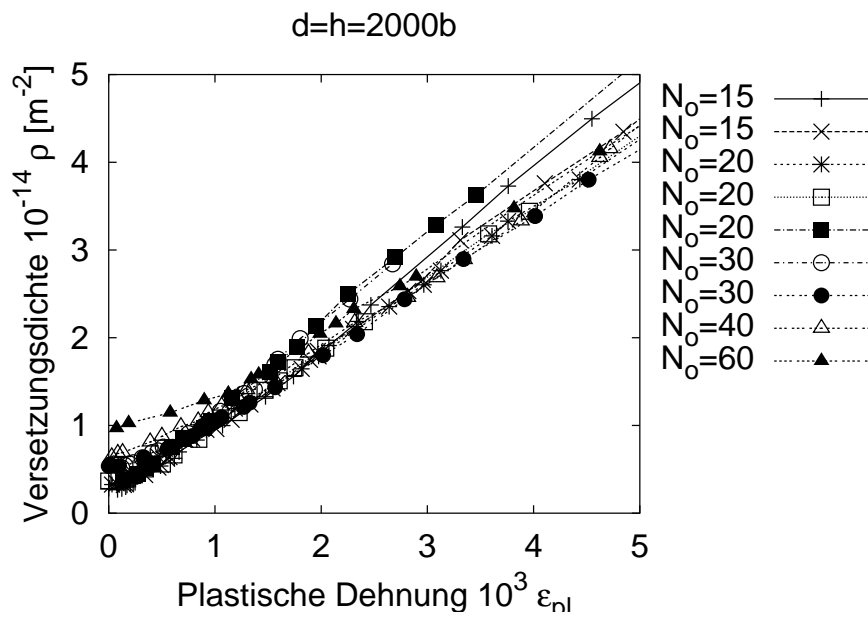


Abb. 4.46: Versetzungsdichte über plastischer Dehnung für die gleichen Konfigurationen wie in Abbildung 4.44

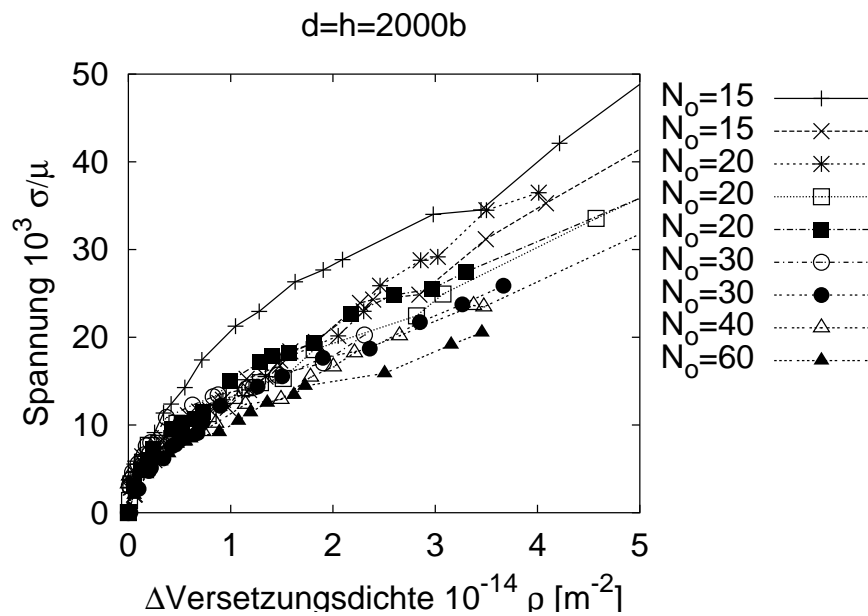
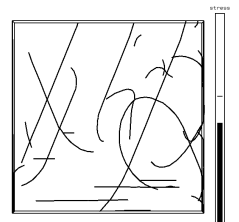


Abb. 4.47: Spannung über der Versetzungsdichte abzüglich der Startversetzungsdichte am Beginn der Simulation



4.3.2 Unterschiedliche Schichtdicken

Es wurden auch Vielquellensimulationen für Körner der Größe $d = h = 1000b$ und $d = h = 4000b$ durchgeführt. Die Spannungs–Dehnungskurven für $d = h = 4000b$ sind in Abbildung 4.48 dargestellt, die Spannungen für gegebene plastische Dehnungen hieraus in Abbildung 4.49. Verglichen mit der $d = h = 2000b$ Auftragung sind die Spannungen kleiner, qualitativ ergeben sich die gleichen Resultate. Größere Korndimensionen wurden nicht simuliert, da

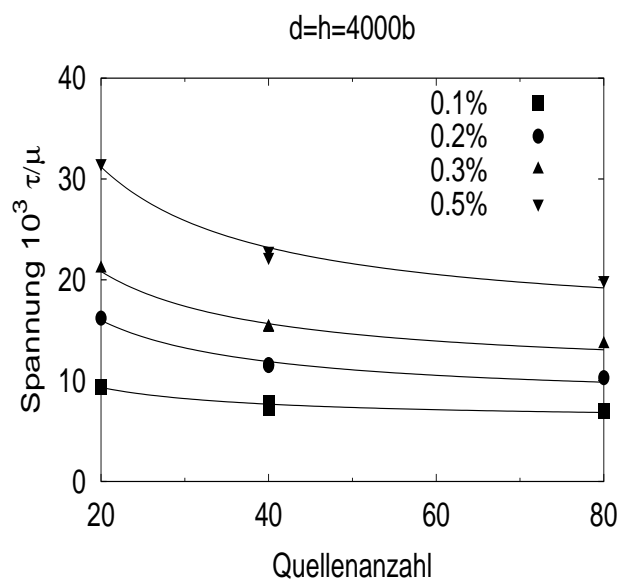
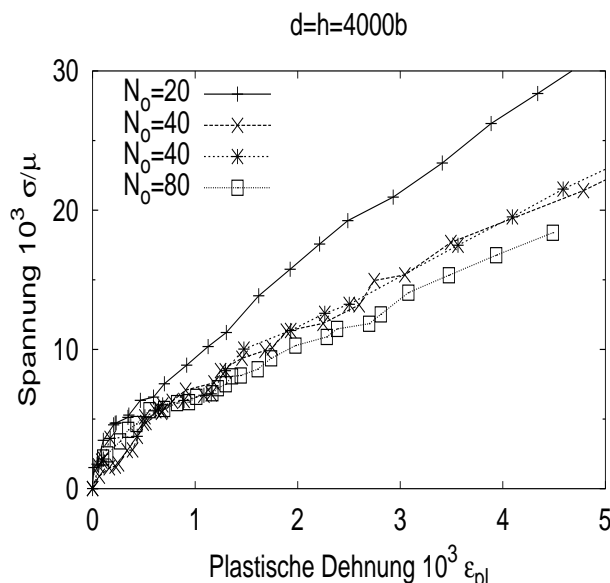


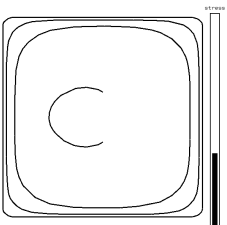
Abb. 4.48: Spannung über Dehnung für verschiedene Versetzungsanordnungen in einem Korn mit den Abmessungen $d = h = 4000b$

Abb. 4.49: Spannung über Quellenanzahl bei verschiedenen plastischen Dehnungen für $d = h = 4000b$

diese Rechnungen zu zeitaufwendig sind.⁶

Abbildung 4.50 zeigt die Spannungs–Dehnungskurven für verschiedene Schichtdicken bei konstanter Quellendichte $\rho = 7.6 \cdot 10^{13} \text{m}^{-2}$. Diese Quellendichte entspricht fünf Versetzungsquellen in einem Korn einer $d = h = 1000b$ Schicht, 20 Quellen im $d = h = 2000b$ Korn und 80 Quellen für den Fall $d = h = 4000b$. Die Spannungs–Dehnungskurven für $d = h = 1000b$ und $d = h = 2000b$ sind Mittelwerte aus vier bzw. drei Kurven mit unterschiedlichen Startkonfigurationen. Die Spannungen für die dünnste Schicht steigen sehr stark an, da nur fünf Quellen vorhanden sind und die Wahrscheinlichkeit für eine günstige Orientierung der Quelle gering ist. Außerdem ist die Verfestigung sehr groß, da wenige

⁶Eine Simulation für ein Korn mit $d = h = 2000b$ bis zu 0.5% plastischer Dehnung ist auf einer Alpha Workstation mit EV6 Prozessor in wenigen Tagen abgeschlossen. Soll die gleiche Dehnung in einem Korn der Größe $d = h = 4000b$ erzeugt werden, müssen doppelt so viele Versetzungen durch das Korn bewegt werden ($\epsilon \sim Nb/d$). Außerdem muß jede Versetzung im Mittel die zweifache Entfernung bis zu den Korngrenzen zurücklegen, so daß aufgrund der konstanten mittleren Geschwindigkeit der Versetzungen insgesamt eine achtmal so lange Rechenzeit resultiert.



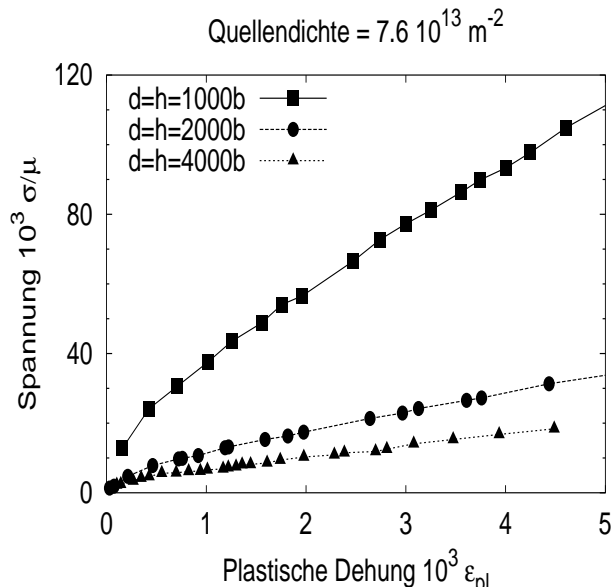


Abb. 4.50: Spannung über Dehnung für verschiedene Schichtdicken ($d=h$) bei konstanter Versetzungsquellendichte

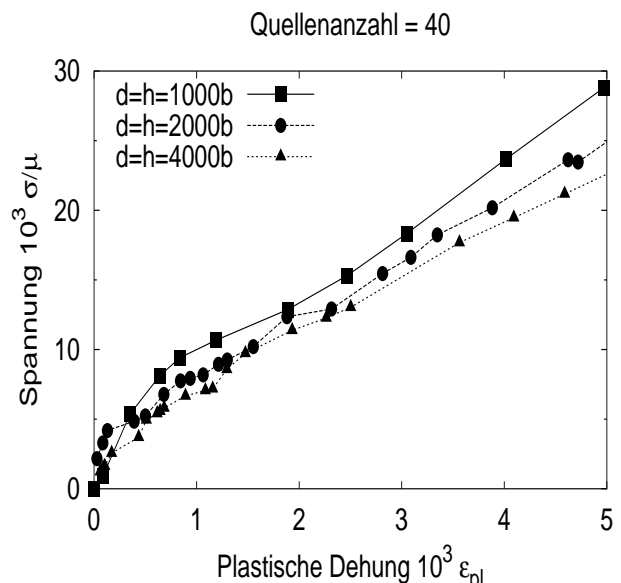


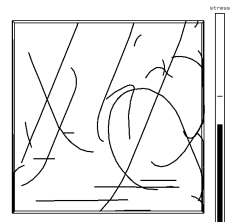
Abb. 4.51: Spannung über Dehnung für verschiedene Schichtdicken ($d=h$) bei konstanter Versetzungsquellenanzahl ($N_0 = 40$)

aktive Quellen große Aufstaus erzeugen. Das größte Korn mit $d = h = 4000b$ läßt sich bei den niedrigsten Spannungen plastisch verformen. Wird die Anzahl der Versetzungsquellen konstant gehalten, ist weiterhin zu beobachten, daß die Spannungen im kleinsten Korn am größten und im größten Korn am kleinsten sind, jedoch sind die Unterschiede geringer (Abbildung 4.51). Die entsprechenden Versetzungsquellendichten sind $6.1 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ für $d = h = 1000b$, $1.5 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ für $d = h = 2000b$ und $0.38 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ für $d = h = 4000b$.

Wird eine Spannungs–Dehnungskurve mit unterschiedlichen Startkonfigurationen aber ansonsten gleichen Bedingungen mehrmals berechnet, kann ein Fehler für die gemittelten Daten angegeben werden. Tabelle 4.3 zeigt diesen für die in Abbildung 4.50 und 4.51 gezeigten Simulationen, die mehrmals durchgeführt worden sind.

4.3.3 Unterschiedliche Versetzungsquellen

In diesem Unterkapitel soll die Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von der Realisierung der Versetzungsquellen untersucht werden. Bisher wurden die Quellen durch an beiden Enden festgehaltene Versetzungssegmente dargestellt. Solche Versetzungsquellen können z. B. durch Klettern oder Quergleiten entstehen. Die Versetzungsstücke (die im folgenden als Seitenarme bezeichnet werden), die das festgehaltene Segment mit den Korngrenzen oder Grenzflächen bzw. Oberflächen verbinden, wurden bisher vernachlässigt. Der Einfluß des Spannungsfeldes der Seitenarme auf die Aktivierungsspannung der Frank–Read Quelle ist nur gering [104], insbesondere wenn die Quelle mehrmals aktiviert wird. Allerdings können die Seitenarme Hindernisse für Versetzungen anderer Versetzungsquellen sein, wenn



$d = h$	N_0	Anzahl der Simulationen	Mittelwert \pm relativer Fehler bei		
			$\epsilon_{pl} = 10^{-3}$	$\epsilon_{pl} = 3 \cdot 10^{-3}$	$\epsilon_{pl} = 5 \cdot 10^{-3}$
1000b	5	4	$38 \pm 20\%$	$77 \pm 22\%$	$111 \pm 22\%$
1000b	40	2	$10 \pm 9\%$	$18 \pm 11\%$	$29 \pm 20\%$
2000b	20	3	$11 \pm 3.3\%$	$23 \pm 6\%$	$34 \pm 6\%$
2000b	40	3	$10 \pm 11\%$	$18 \pm 6\%$	$25.5 \pm 1.3\%$
2000b	120	3	$6.6 \pm 9\%$	$11 \pm 5\%$	$21.3 \pm 2\%$
4000b	40	2	$7.5 \pm 3\%$	$15.3 \pm 0.3\%$	$22.6 \pm 1.3\%$

Tab. 4.3: Statistische Daten zu den Spannungs–Dehnungskurven in den Abbildungen 4.45, 4.50 und 4.51. In der ersten Spalte ist die Größe des Korns angegeben, in der zweiten die Anzahl der Versetzungsquellen. Die dritte Spalte zeigt die Anzahl der Simulationsdurchläufe mit unterschiedlicher Startkonfiguration bei sonst gleichen Bedingungen. Die Spannungswerte bei drei verschiedenen plastischen Dehnungen sind in der vierten Spalte in Einheiten von $10^3 \mu$ zusammen mit dem relativen Fehler, der sich aus der Fehlerberechnung für wiederholte Messung einer dem Normalverteilungsgesetz unterliegenden statistischen Größe ergibt, angegeben.

diese die Seitenarme schneiden.

In Abbildung 4.52 wird die Spannungs–Dehnungskurve für Simulationen unter Einbeziehung der Seitenarme mit der Spannungs–Dehnungskurve aus Abbildung 4.51 ($d = h = 2000b$, $N_0 = 40$, keine Seitenarme) verglichen. Die Seitenarme wurden dabei auf die Quergleitebene des festgehaltenen Quellensegments gelegt und auf dieser senkrecht zum Quellensegment bis an die Grenzflächen geführt. Zunächst wurde die Bewegung der Arme

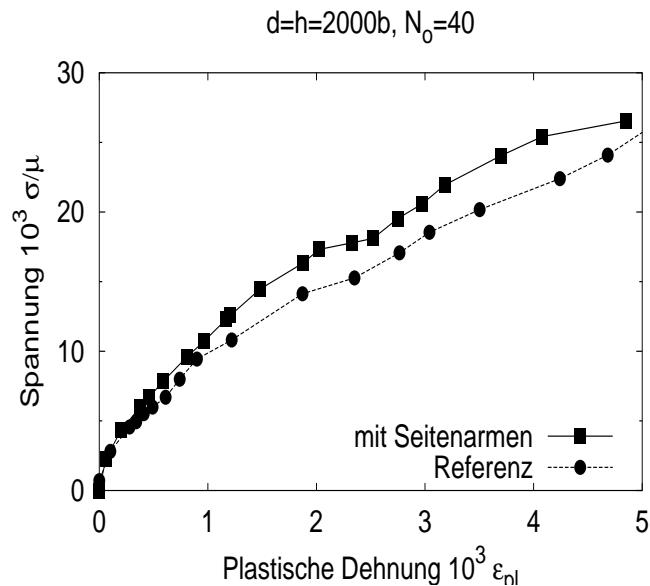
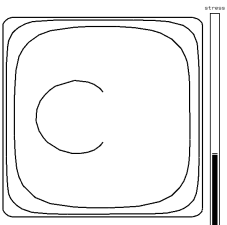


Abb. 4.52: Spannung über plastischer Dehnung. Vergleich der Simulation mit immobilisierten Seitenarmen mit der Referenzkurve aus Abbildung 4.51 (ohne Seitenarme)



verboten. Abbildung 4.52 zeigt, daß die Seitenarme als Hindernisse wirken, sie haben eine größere Spannung bei gleicher plastischer Dehnung zur Folge. Die Spannungserhöhung ist allerdings nur gering, bei 0.3% plastischer Dehnung beträgt sie $\Delta\sigma = 2.4 \cdot 10^3 \mu$, und ist damit kleiner als die Summe der Fehler der Simulation von $\Delta\sigma_{\text{err}} = 2.1 \cdot 10^3 \mu$ (mit Seitenarme) und $\Delta\sigma_{\text{err}} = 1.1 \cdot 10^3 \mu$ (ohne Seitenarme). Die Fehler und Mittelwerte wurden dabei jeweils aus drei Simulationsdurchläufen ermittelt.

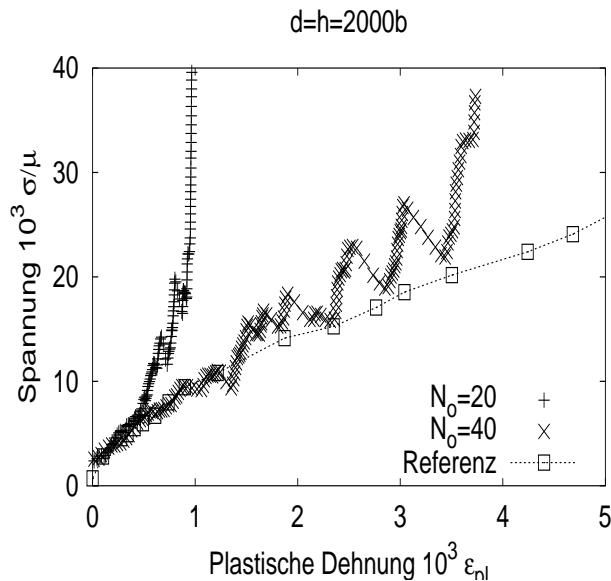


Abb. 4.53: Simulationen mit beweglichen Seitenarmen. Die Referenzkurve zeigt nur die lokalen Spannungsmaxima, für die Simulation mit Seitenarmen ist der komplette Spannungsverlauf eingetragen.

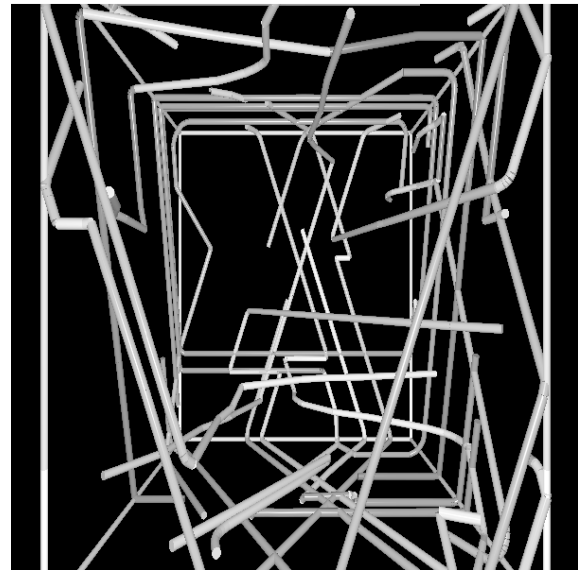
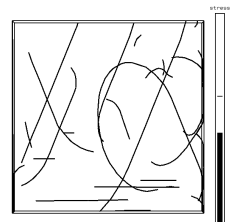


Abb. 4.54: Versetzungskonfiguration der Simulation mit beweglichen Seitenarmen und $N_0 = 20$ bei 0.1% plastischer Dehnung.

Wird die Bewegung der Seitenarme und der Verbindungsknoten (also der ehemaligen Festhalteknöten des Quellensegments, vergl. Abbildung 3.11) erlaubt, so ist der Spannungsverlauf für kleine plastische Dehnungen so wie in der Simulation ohne Seitenarme (Abbildung 4.53). Die Versetzungen inklusive der Quellen werden dabei jedoch gegen die Korngrenzen bzw. Grenzflächen gedrückt, so daß nach kurzer Zeit keine Versetzungsquellen mehr zur Verfügung stehen und keine plastische Verformung mehr erfolgt. Abbildung 4.54 zeigt für $d = h = 2000b$ und $N_0 = 20$, daß sich bei einer plastischen Dehnung von $\epsilon_{\text{pl}} = 0.1\%$ bereits keine Versetzungsquellen mehr im Korninneren befinden. Eine größere Versetzungsquellenanzahl verschiebt diesen Punkt zu größeren plastischen Dehnungen (s. Abbildung 4.53 für $N_0 = 40$).

Eine andere Möglichkeit Versetzungen zu realisieren, die nicht im Kristall enden, ist eine Verlängerung der Quellensegmente bis an die Korngrenzen bzw. Grenzflächen. Die entsprechende Spannungs-Dehnungskurve hierzu ist in Abbildung 4.55 zusammen mit der Referenzkurve für festgehaltene Quellensegmente im Korninneren eingetragen. Die Korn-



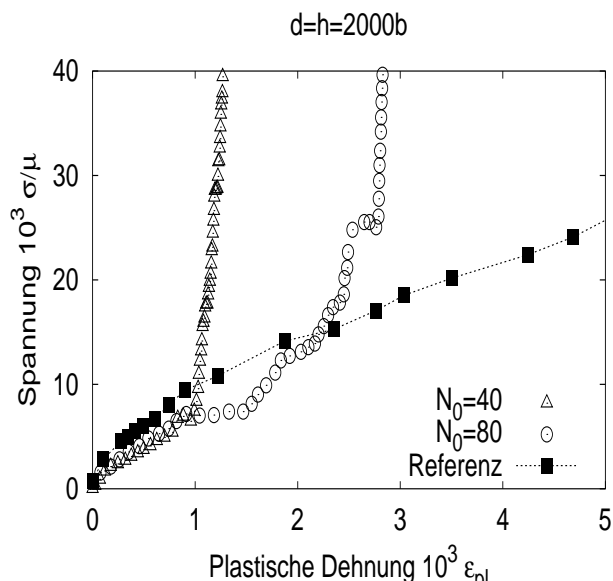


Abb. 4.55: Spannungs–Dehnungskurve für die Simulation mit bis an die Randflächen verlängerten Quellensegmenten (kompletter Spannungsverlauf) verglichen mit der Simulation für 40 Frank–Read Quellen im Korninneren

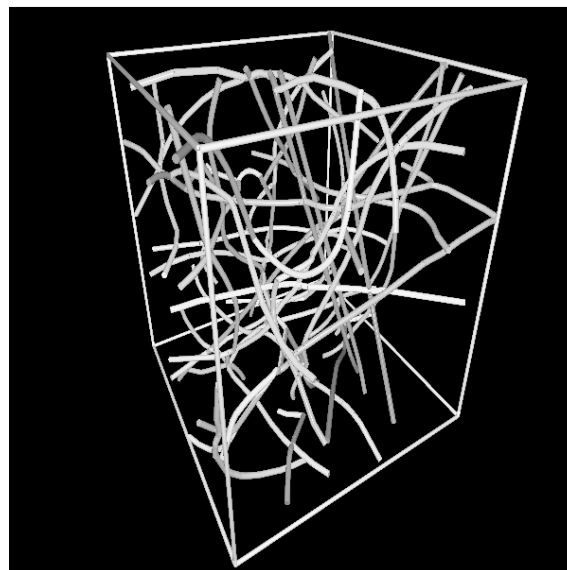


Abb. 4.56: Versetzungskonfiguration kurz nach Beginn der Simulation ($\epsilon_{pl} = 2.5 \cdot 10^{-4}$). Alle Versetzungssegmente beginnen bzw. enden an den Randflächen.

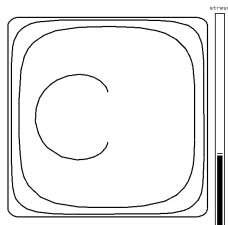
größe betrug in diesen Simulationen $d = h = 2000b$. Bei kleinen plastischen Dehnungen sind die Spannungen geringer als für den Referenzfall, da sich die Quellen über die gesamte Schichtdicke bzw. Korngröße erstrecken. Die Spannung ist dennoch größer als die Nix Spannung, da die Versetzungen sich gleichzeitig im Korn befinden und gegenseitig als Hindernisse wirken. Sobald die Versetzungen gegen die Grenzflächen gelaufen sind, steigt die Spannung stark an, ohne daß Verformung stattfindet. Dieser Punkt verschiebt sich wiederum mit größerem N_0 zu größeren plastischen Dehnungen.

4.3.3.1 Inhomogene Quellenverteilungen

Neben der Art der Versetzungsquelle hat auch die Verteilung der Quellengrößen einen Einfluß auf die plastische Verformung. Bisher wurden die Quellen aus dem gesamten möglichen Größenintervall von $0.01 < s/d < 1.0$ ausgewählt.⁷ Zum Vergleich wurden Simulationen mit Quellengrößen im Bereich $0.01 < s/d < 0.5$ und $0.5 < s/d < 1.0$ durchgeführt und die erhaltenen Spannungs–Dehnungskurven in Abbildung 4.57 gegenübergestellt. Als Quellen wurden wieder festgehaltene Segmente ohne Seitenarme verwendet.

Es ist zu beobachten, daß die $0.5 < s/d < 1.0$ Verteilung bei den kleinsten Spannung

⁷Noch kleinere Quellen wurden ausgeschlossen, da die angelegte Spannung in jedem Fall zu gering ist, um diese zu aktivieren.



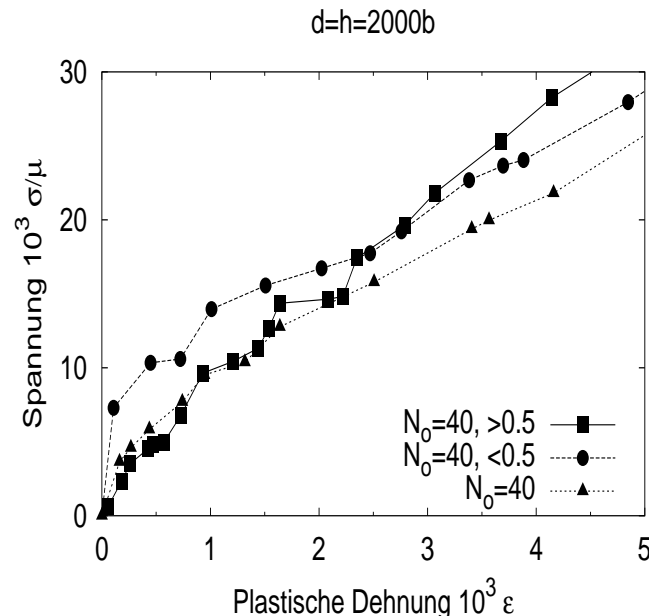
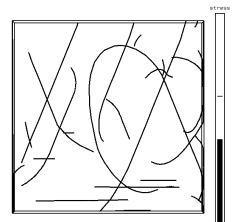


Abb. 4.57: Simulationen mit inhomogenen Quellenverteilungen. Gezeigt sind die Spannungs-Dehnungskurven für eine Simulation mit Quellen, die kleiner sind als $s < 0.5h$, eine Simulation nur mit großen Versetzungsquellen $s > 0.5h$ und für die gleichmäßige Verteilung aus Abbildung 4.51

bereits plastische Dehnung erzeugt. Dies ist auch plausibel, da die größten Quellen die geringste Aktivierungsspannungen benötigen. Umgekehrt sieht es für die $0.01 < s/d < 0.5$ Verteilung aus, hier muß die Spannung erst auf ca. $\sigma = 8 \cdot 10^3 \mu$ erhöht werden, bevor sich die Versetzungen durch die Schicht bewegen. Der Anstieg der Spannung ist für die $0.5 < s/d < 1.0$ Verteilung größer als für die anderen beiden Fälle, da große Versetzungsquellen am stärksten durch die an den Rändern aufgestauten Versetzungen blockiert werden (siehe Abschnitt 4.2.1). Für kleine Versetzungsquellen ist dieser Effekt geringer, weshalb die Verfestigungsrate für die $0.01 < s/d < 0.5$ Verteilung am kleinsten ist.

4.3.4 Spannungszustand und Orientierung

Wie in Abschnitt 2.1 erwähnt, wurde in Experimenten beobachtet, daß die Spannungen in unterschiedlich orientierten Körnern in dünnen Schichten verschieden sind. Unterschiedliche Kornorientierungen lassen sich auch in der Versetzungssimulation realisieren. In den bisher präsentierten Rechnungen hatten die Körner eine $\langle 111 \rangle$ Orientierung (die häufigste Texturkomponente in dünnen Schichten). In diesem Abschnitt werden Ergebnisse von Simulationen $\langle 001 \rangle$ orientierter Körner vorgestellt (der zweithäufigsten Orientierung). Hierfür wurden die Gleitebenen so gedreht, daß eine $\langle 001 \rangle$ Richtung senkrecht zur Schichtebene zeigt. Die Zugrichtung ist wieder diagonal im Simulationswürfel, parallel zur Schichtebene.



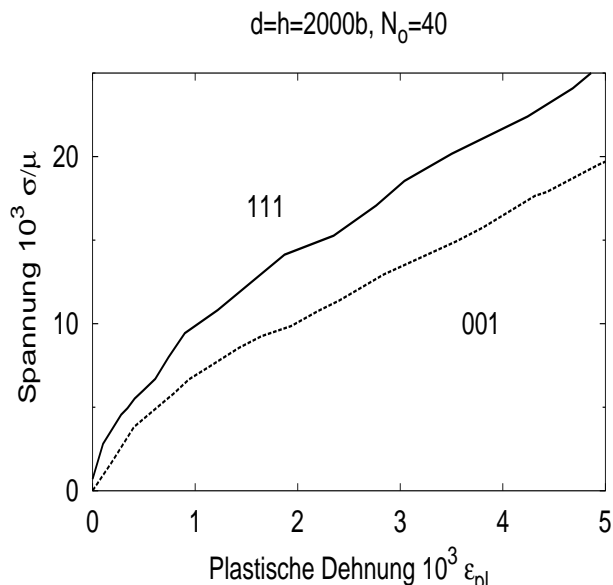


Abb. 4.58: Spannung über plastischer Dehnung für $\langle 111 \rangle$ und $\langle 001 \rangle$ Kornorientierung für einachsigen Zug in der Schichtebene

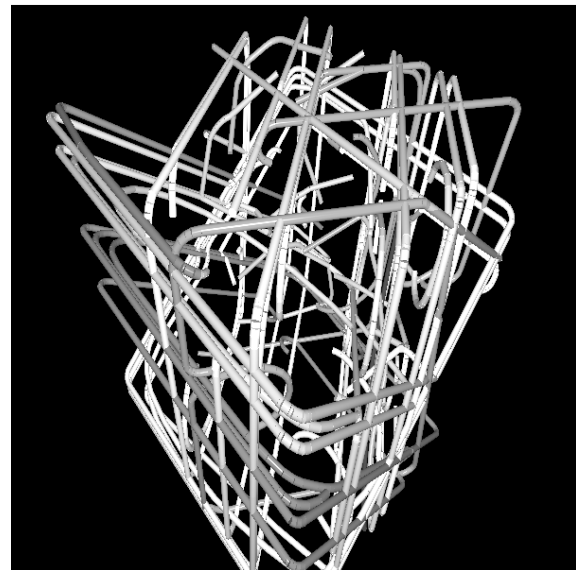


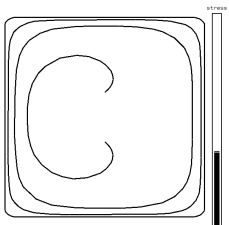
Abb. 4.59: Versetzungskonfiguration der Multiquellensimulation mit $N_0 = 40$ für ein $\langle 001 \rangle$ orientiertes Korn bei einer plastischen Dehnung von $\epsilon_{pl} = 0.48\%$

Abbildung 4.58 zeigt die über drei Simulationdurchläufe gemittelte Spannungs–Dehnungskurve⁸ für eine $\langle 001 \rangle$ Orientierung im Vergleich mit der Spannungs–Dehnungskurve aus Abbildung 4.51 für eine $\langle 111 \rangle$ Orientierung. Die Kornabmessungen sind $d = h = 2000b$ und die Versetzungsquellenanzahl ist in beiden Fällen $N_0 = 40$. Die Spannung bei gleicher plastischer Dehnung ist für $\langle 001 \rangle$ Körner ca. 30% geringer als für $\langle 111 \rangle$ Körner.

Abbildung 4.59 zeigt die Versetzungskonfiguration nach einer plastischen Dehnung von $\epsilon_{pl} = 0.48$ für ein $\langle 001 \rangle$ Korn. Verglichen mit der Konfiguration eines $\langle 111 \rangle$ Kornes (Abbildung 4.43 und 5.10) sind hier mehr Versetzungsquellen auf unterschiedlichen Gleitebenen aktiv, da es im Gegensatz zur $\langle 111 \rangle$ Orientierung keine Gleitsysteme gibt, deren Schmidfaktor generell null ist.

Im Mikrozugversuch werden dünne Schichten einachsigt belastet, in Substrat–Krümmungsexperimenten herrscht dagegen ein äqui–biaxialer Spannungszustand. In der Simulation läßt sich ein äqui–biaxialer Spannungszustand durch eine entsprechende Wahl des Tensors der angelegten Spannung realisieren. In Abbildung 4.60 werden die Spannungs–Dehnungskurven $\langle 111 \rangle$ und $\langle 001 \rangle$ orientierter Körner unter biaxialer Spannung verglichen. Dargestellt ist eine Spannungskomponente des Spannungstensors für Zug in einer Richtung in der Schichtebene und die entsprechende Komponente des Dehnungstensors (Gleichung 4.7). Die Zugspannung ist in alle Richtungen in der Schichtebene gleich. Die Dehnungen sind im Mittel in alle Richtungen in der Ebene ebenfalls gleich, da jedoch nur eine

⁸Bei einer plastischen Dehnung von $\epsilon_{pl} = 0.3\%$ beträgt die Unsicherheit der über vier Simulationen gemittelten Spannung $\Delta\sigma/\sigma = \pm 7.5\%$.



endliche Zahl diskreter Versetzungen simuliert wird, schwanken die Dehnungen um diese Mittelwerte. Unter biaxialem Zug ist die Spannung in $\langle 111 \rangle$ Körnern bei 0.3% plastischer Dehnung etwa um einen Faktor 1.7 größer als in $\langle 001 \rangle$ Körnern. In Abbildung 4.61 sind die Spannungs–Dehnungskurven für uniaxialen und biaxialen Zug für beide Kornorientierungen zusammengefaßt. Die Spannung unter biaxialer Belastung ist für beide Orientierungen deutlich größer als unter uniaxialer Belastung.

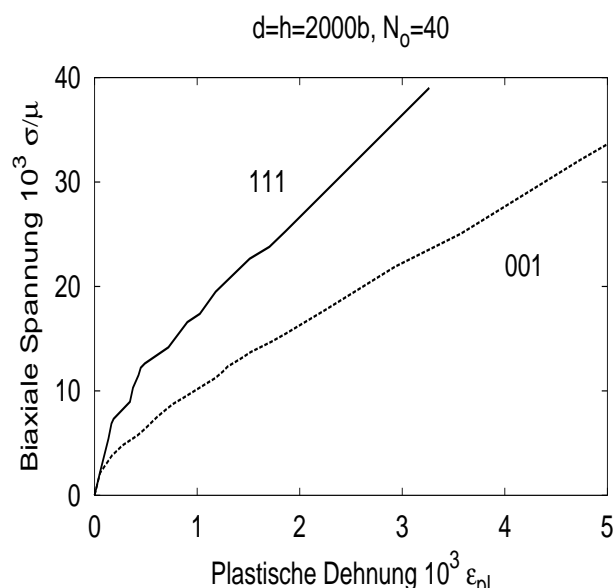


Abb. 4.60: Spannung über plastischer Dehnung für $\langle 111 \rangle$ und $\langle 001 \rangle$ Kornorientierungen und biaxialen Zug in der Schichtebene

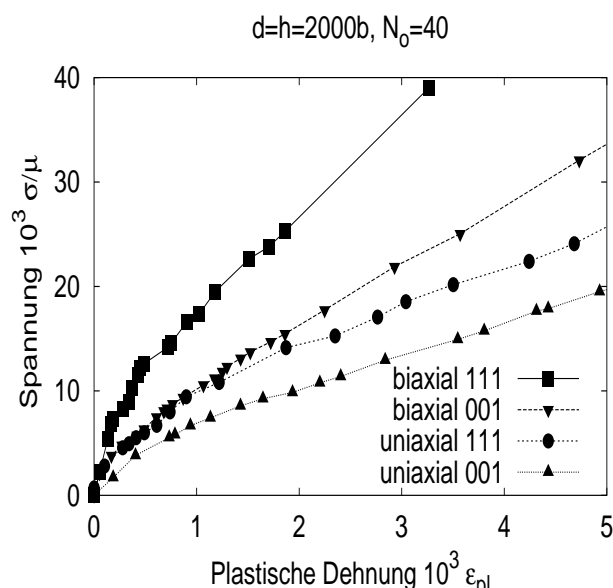


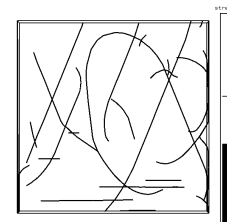
Abb. 4.61: Vergleichende Darstellung der Spannungs–Dehnungskurven aus den Abbildungen 4.58 und 4.60.

4.3.4.1 Interpretation der Spannungsunterschiede

Um die unterschiedlichen Spannungsverläufe in Abbildung 4.61 zu verstehen, müssen die jeweiligen Schmidfaktoren betrachtet werden. Der Schmidfaktor eines einzelnen Gleitsystems ist definiert als Verhältnis zwischen aufgelöster Schubspannung τ und angelegter Spannung σ . Auf einen gleichen Wert führt eine Berechnung über das Verhältnis von plastischer Dehnung in Zugrichtung zu plastischer Dehnung im einzelnen Gleitsystem. Berechnet man einen Absolutwert der plastischen Dehnung als Summe über die plastische Dehnung aller Gleitsysteme mit

$$\epsilon_{\text{pl}}^{\text{abs}} = \sum_{i=1}^N \frac{l_i \Delta x_i}{V} b, \quad (4.12)$$

so kann der mittlere Schmidfaktor \bar{m} ermittelt werden, indem die mit Gleichung (4.7) bestimmte Dehnung in Zugrichtung mit $\epsilon_{\text{pl}}^{\text{abs}}$ normiert wird. Abbildung 4.62 zeigt die so berechneten mittleren Schmidfaktoren. Für den biaxialen Spannungszustand wurde die



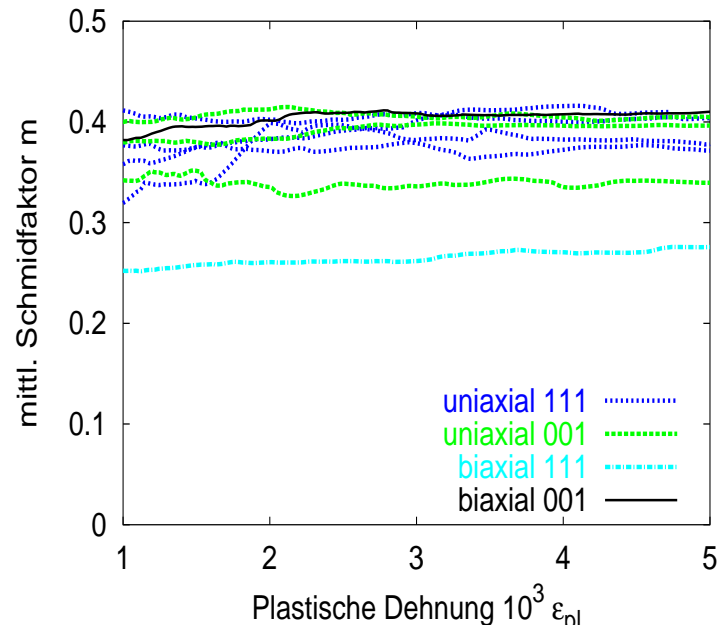
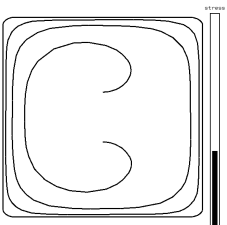


Abb. 4.62: Mittlere Schmidfaktoren im Verlauf der Simulation berechnet über die plastische Dehnung für verschiedene Orientierungen und Spannungszustände

plastische Dehnung nach Gleichung (4.7) in Richtung der Schichtnormalen berechnet, um den entsprechenden Schmidfaktor zu bekommen. Für $\langle 111 \rangle$ Körner unter einachsigem Zug ergibt sich näherungsweise $\bar{m}_{uniax}^{111} \approx 0.4$, für $\langle 001 \rangle$ Körner $\bar{m}_{uniax}^{001} \approx 0.4$. Für einen biaxialen Spannungszustand ist der Schmidfaktor für alle Gleitsysteme, deren Gleitebene oder Burgersvektor nicht in der Schichtebene liegt, gleich und es folgt $\bar{m}_{biax}^{111} = 0.27$ für $\langle 111 \rangle$ und $\bar{m}_{biax}^{001} = 0.41$ für $\langle 001 \rangle$ Körner. Die Schwankungen des Schmidfaktors in Abbildung 4.62 ergeben sich aus der ungleichmäßigen Bewegung von Versetzungen auf Gleitsystemen mit unterschiedlichen Schmidfaktoren. Im Gegensatz zum biaxialen Spannungsfall mit Schmidfaktoren, die entweder null sind oder den Maximalwert haben, sind für uniaxiale Spannungen alle Werte zwischen null und dem Maximalwert möglich, weshalb die Schwankungen hier größer ausfallen.

Die Schmidfaktoren eines $\langle 001 \rangle$ orientierten Korns sind unter uniaxialer und biaxialer Belastung nahezu identisch. Abbildung 4.61 zeigt einen größeren Spannungsanstieg unter biaxialen Zug, da hier die Dehnungskomponenten in der Ebene ϵ_{\parallel} eingetragen sind⁹, der Schmidfaktor im biaxialen Fall jedoch für die Komponente senkrecht zur Schichtebene ϵ_{\perp} berechnet wird. Da beim Versetzungsgleiten das Volumen konstant bleibt, ist die Spur des

⁹Für den biaxialen Spannungszustand ist diese Auftragung äquivalent zu einer Spannung über Temperatur Auftragung eines Substrat-Krümmungsexperiments (z.B. Abbildung 2.1, S. 14). Die Temperatur ist in diesen Experimenten proportional zur (Gesamt-) Dehnung. Da die Grenzfläche zwischen Substrat und Schicht in zwei Dimensionen ausgedehnt ist, werden der Schicht Dehnungen in zwei Richtungen aufgezwungen und es kommt zu einem biaxialen Spannungszustand.



Dehnungstensors null und es gilt

$$\epsilon_{\parallel} = \frac{1}{2}\epsilon_{\perp}. \quad (4.13)$$

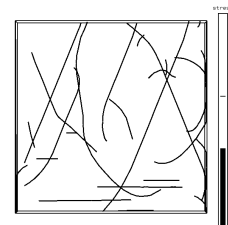
Wird die plastische Dehnung des $\langle 001 \rangle$ orientierten Korns unter biaxialer Belastung mit zwei multipliziert, fällt die Spannungsdehnungskurve genau auf die Kurve für uniaxiale Belastung.

Werden Spannungs–Dehnungskurven für uniaxialen und biaxialen Zug für die $\langle 111 \rangle$ Orientierung verglichen, muß einmal berücksichtigt werden, daß die gleiche angelegte Spannung unter uniaxialem Zug im Mittel größere Kräfte auf die Versetzungen ausübt, d. h. diese schon bei geringeren angelegten Spannungen gleiten, da der mittlere Schmidfaktor größer ist. Zusätzlich erzeugen gleitende Versetzungen unter uniaxialem Zug aufgrund des größeren Schmidfaktors eine größere plastische Dehnung in Zugrichtung. Für die Spannungsänderung in Zugrichtung folgt daher unter der Annahme einer linearen Kaltverfestigung $\delta\tau/\delta\gamma_{\text{pl}}$ auf einem Gleitsystem [61] :

$$\frac{\delta\sigma}{\delta\epsilon_{\text{pl}}} = \bar{m}^2 \frac{\delta\tau}{\delta\gamma_{\text{pl}}}. \quad (4.14)$$

Unter uniaxialer Belastung haben $\langle 001 \rangle$ und $\langle 111 \rangle$ Körner nahezu den gleichen Schmidfaktor (Abbildung 4.62), dennoch ist die Spannung in den $\langle 111 \rangle$ Körnern deutlich größer. Hier muß berücksichtigt werden, daß die Gleitebenen in $\langle 001 \rangle$ Körnern eine größere Neigung haben, woraus eine geringfügig größere effektive Schichtdicke resultiert (Faktor 1.15). Außerdem sind in $\langle 001 \rangle$ Körnern mehr Versetzungsquellen aktiv, wie ein Vergleich von Abbildung 4.59 mit 5.10 zeigt. Da die Verfestigung geringer ist, wenn die Verformung auf mehrere Quellen verteilt wird, folgt hieraus eine niedrigere Spannung bei gegebener Dehnung. Diese Beobachtung einer von der Orientierung abhängigen Anzahl der aktiven Quellen kann über die Schmidfaktoren begründet werden, wenn dabei aktive sowie inaktive Gleitsysteme berücksichtigt werden. Im Gegensatz zur Berechnung in Abbildung 4.62 mit den Gleichungen (4.7) und (4.12), in der nur Versetzungen eingehen, die sich unter der angelegten Spannung bewegen, müssen somit auch die Gleitsysteme betrachtet werden, für die $m = 0$ ist. Eine entsprechende Rechnung ist in Anhang B angeführt. Die über alle zwölf Gleitsysteme gemittelten Schmidfaktoren eines kubisch–flächenzentrierten Kristallgitters sind danach $\bar{m}_{\text{uniax}}^{111} = 0.17$ und $\bar{m}_{\text{uniax}}^{001} = 0.24$ für einachsigen Zug, sowie $\bar{m}_{\text{biax}}^{111} = 0.135$ und $\bar{m}_{\text{biax}}^{001} = 0.27$ für zweiachsigen Zug. Das Verhältnis zwischen $\bar{m}_{\text{uniax}}^{111}$ und $\bar{m}_{\text{uniax}}^{001}$ entspricht in guter Näherung dem Spannungsunterschied zwischen diesen beiden Orientierungen in Abbildung 4.58.

Vergleicht man die Spannungsdehnungskurven unter biaxialer Spannung in Abbildung 4.60 für beide Kornorientierungen, so ergibt sich hier eine bessere Übereinstimmung, wenn die unterschiedliche Anzahl der aktiven Versetzungsquellen nicht berücksichtigt wird, und die Verfestigung entsprechend Gleichung 4.14 umskaliert wird. Da nur eine endliche Anzahl von Versetzungsquellen im Korn vorhanden ist, und diese zufällig verteilt sind, wird sich immer eine Schwankung der effektiven Schmidfaktoren zwischen den in Anhang B ermittelten und den Schmidfaktoren aus Abbildung 4.62 ergeben.



4.3.5 Freie Oberflächen

In diesem Abschnitt wird der Einfluß unterschiedlicher Grenzflächen betrachtet. Eine freistehende Schicht mit zwei freien Oberflächen wird mit einer Schicht auf einem Substrat und einer freien Oberfläche sowie mit einer Schicht mit Passivierung und Substrat (Würfelgeometrie) verglichen. Hierfür wird jeweils ein kolumnares Korn in der Schicht simuliert. Die freien Oberflächen werden wie in Abschnitt 3.2.3.1 beschrieben realisiert. Die Laststeuerung erfolgt spannungskontrolliert über eine konstante Änderung der angelegten Spannung.

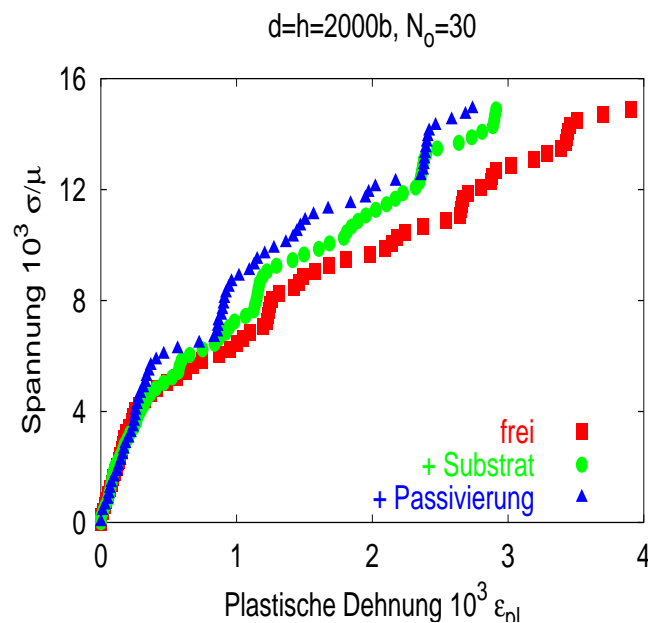
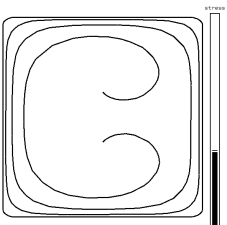


Abb. 4.63: Spannung über plastischer Dehnung für eine freistehende Schicht, eine Schicht auf einem Substrat mit freier Oberfläche und eine Schicht auf einem Substrat mit einer Passivierungsschicht

Abbildung 4.63 zeigt drei Spannungs–Dehnungskurven für jeweils die gleiche Startkonfiguration ($N_0 = 30$) aber unterschiedliche Randbedingungen. Die Spannung des Kornes in der Würfelgeometrie ist bei gleicher plastischer Dehnung größer als die der Körner mit einer oder zwei freien Oberflächen. Von den letzten beiden zeigt das Korn mit der freistehenden Schicht die geringsten Spannungen. Dieser Unterschied wird für größere plastische Dehnungen ausgeprägter. Er ist darauf zurückzuführen, daß die Versetzungen an den freien Oberflächen die Schicht verlassen können und somit die Erzeugung und Bewegung der Versetzungen im Korn weniger behindert wird.

In Abbildung 4.64 sind zusätzlich zu den Belastungskurven aus Abbildung 4.63 die Spannungs–Dehnungsverläufe bei Entlastung für die drei verschiedenen Systeme dargestellt. Die Entlastung wird realisiert, indem das Vorzeichen der Spannungsänderung ($4 \cdot 10^{-7} \mu$ pro Zeitschritt) nach dem Erreichen der Maximalspannung umgedreht wird. In der



Kurve des Korns mit nur einer freien Oberfläche (auf Substrat) wurde das Vorzeichen dreimal umgedreht, was zu der zusätzlichen Schleife geführt hat.

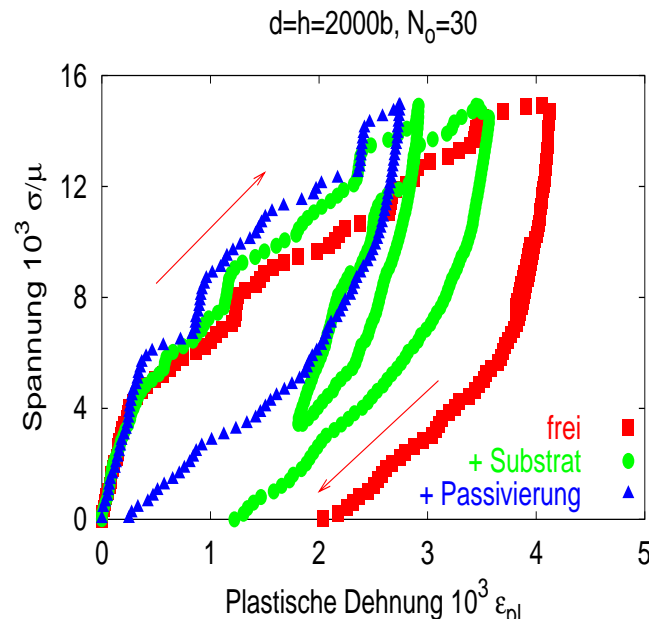
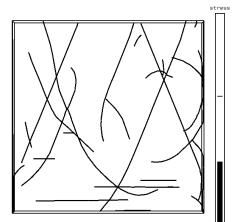


Abb. 4.64: Be- und Entlastungskurven für die in Abbildung 4.63 bereits gezeigten Konfigurationen. Die zeitliche Abfolge der Be- und Entlastungen ist durch Pfeile gekennzeichnet.

Zu beobachten ist, daß sich die plastische Dehnung bei Beginn der Entlastung nur sehr langsam ändert. Erst nach Unterschreiten eines bestimmten Spannungswertes σ_{back} findet plastische Verformung in die entgegengesetzte Richtung statt, d. h. die an den Kornrändern in der Belastungsphase aufgestauten Versetzungen bewegen sich in Richtung des Kornmittelpunktes und annihilieren dort. Die Steigung im Entlastungsbereich für $\sigma < \sigma_{\text{back}}$ entspricht der Steigung im Belastungsbereich. Die Existenz einer Mindestspannung σ_{back} erklärt sich durch das Vorhandensein von kritischen Konfigurationen, die überwunden werden müssen, bevor sich die Versetzung bewegen kann (bzw. bevor sie von einer Quelle emittiert wird): Während der Belastungsphase der Verformung stellt die Aktivierung der Versetzungsquellen den schwierigsten Schritt dar. Hat die Versetzung die kritische Konfiguration in der Aktivierung der Quelle überwunden, bewegt sie sich ohne weitere Spannungserhöhung, bis sie die Grenzflächen erreicht (bzw. an ein Stauende gleitet). Diese Konfiguration ist auch bei niedrigeren Spannungen noch stabil, so daß erst ein Spannungswert σ_{back} unterschritten werden muß, bevor sich die Versetzungen zurückbewegen. σ_{back} ist für das freistehende Korn am geringsten und für das Korn ohne freie Oberflächen am größten. Im letzteren Fall können die Versetzungen das Korn nicht verlassen, die durch die aufgestauten Versetzungen verursachte gesamte Rückspannung ist deshalb größer.

Die plastische Rest-Dehnung bei $\sigma = 0$ nach dem Entlasten entspricht dem Versetzungsverlust in der Schicht. Da Versetzungsquergleiten- oder Klettern in der Simulation



nicht berücksichtigt ist, ist der einzige Erholungsmechanismus im Korn die Rekombination (und Auslöschung) von Versetzungen mit gleichen Burgersvektoren und unterschiedlichen Linienrichtungen. Das Korn mit Passivierung und Substrat zeigt deshalb nur eine sehr geringe plastische Rest-Dehnung bei $\sigma = 0$. Größere Rest-Dehnungen sind für die Schichten mit freien Oberflächen zu beobachten. Hier können die Versetzungen an den Oberflächen aus dem Simulationsvolumen austreten. Diese Versetzungen fehlen bei der entgegengesetzten Verformung im Entlastungsbereich, die Verformung ist weniger reversibel. Die Akkumulation der plastischen Verformung äußert sich auch in der Verschiebung des Dehnungsmaximums zu größeren Dehnungen nach dem Durchlaufen der Schleife in der Kurve des Korns mit einer freien Oberfläche.

4.3.6 Simulation eines Vielkristalls

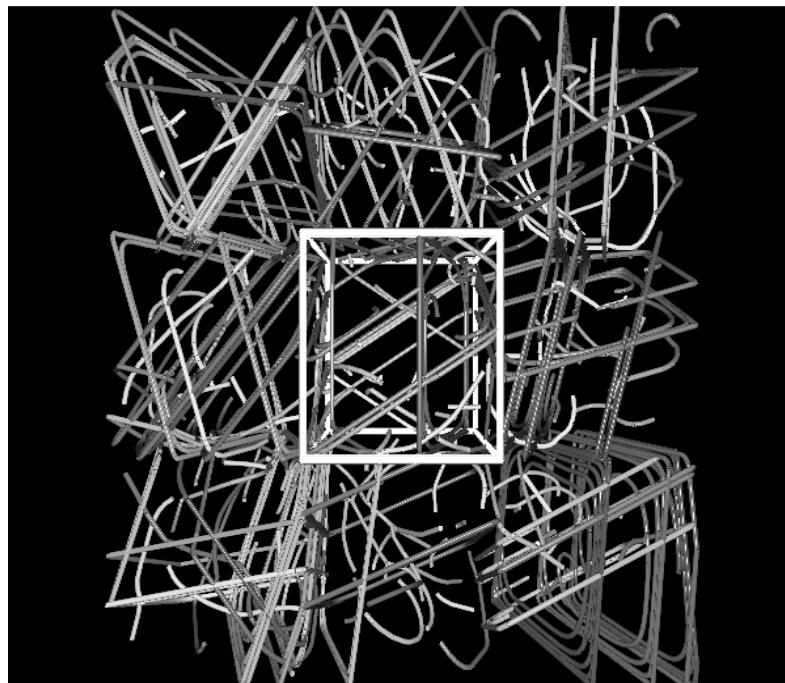
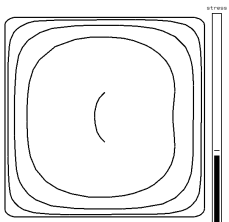


Abb. 4.65: Simulation von neun kolumnaren Körnern in einer Schicht zwischen Substrat und Passivierung. Die Kanten des zentralen Kornes sind weiß markiert. Die Grenzflächen zwischen den Körnern sind für die Versetzungen undurchdringbare Hindernisse.

Eine relativ einfache Methode, die Wechselwirkung zwischen Versetzungen in benachbarten Körnern zu berücksichtigen, besteht darin, mehrere Körner nebeneinander zu simulieren. Hierbei wird jedes Korn wie zu Beginn des Kapitels 4.3 beschrieben behandelt. Abbildung 4.65 zeigt ein kolumnares Korn umgeben von acht kolumnaren Nachbarkörnern. Die Körner haben eine $\langle 111 \rangle$ Achse senkrecht zur Schichtebene, die Rotation der Körner um diese Achse ist wieder zufällig bestimmt. Die zufällige Orientierung ist in Abbildung 4.65



an der Lage der Grenzflächenversetzungen erkennbar. Die Korngrenzen werden weiterhin als undurchdringbare Hindernisse für die Versetzungen angesehen.

Da jetzt neunmal so viele Versetzungen simuliert werden, und die Simulationszeit mit der Anzahl der Knoten zur Darstellung der Versetzungen im Quadrat skaliert, dauert die Simulation ca. 81 mal so lang wie für ein einzelnes Korn, um auf die gleiche plastische Dehnung zu kommen.¹⁰

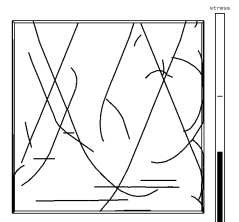
In diesem Abschnitt wird der Einfluß der Nachbarkörner auf die Verformung des zentralen Kornes untersucht. Hierfür wird die Spannungs–Dehnungskurve für das zentrale Korn des „Vielkristalls“ berechnet und mit der Kurve des isolierten Kornes verglichen. Werden die Nachbarkörner mit berücksichtigt, können sich Spannungsfelder von Versetzungen, die von beiden Seiten an einer Korngrenze aufstauen, gegenseitig kompensieren. Die Rückspannung der aufgestauten Versetzungen auf die Versetzungsquellen wird geringer, die Aktivierung der Quellen dadurch einfacher. Außerdem können die Spannungsfelder der aufgestauten Versetzungen direkt beim Aktivieren von Quellen im Nachbarkorn mitwirken. Aufgrund dieser Überlegungen ist zu erwarten, daß die Spannung, die benötigt wird, um eine bestimmte plastische Dehnung zu erreichen, für das isolierte Korn größer ist als für das Korn im „Vielkristalls“.

Die Simulationen wurden für eine freistehende Schicht durchgeführt, damit keine Grenzflächenversetzungen abgelegt werden. Das Spannungsfeld der Grenzflächenversetzungen (zwischen Schicht und Substrat sowie Schicht und Passivierung) wird nicht von Versetzungen in Nachbarkörnern abgeschirmt. Wird die Fließspannung hauptsächlich von der Wechselwirkung der Grenzflächen mit den Versetzungsquellen kontrolliert, verändert sich diese nicht, auch wenn zusätzlich Nachbarkörner berücksichtigt werden.¹¹

In Abbildung 4.66 ist die Spannung über der plastischen Dehnung im zentralen Korn bzw. im isolierten Korn aufgetragen. Um festzustellen, ob durch die Versetzungsaufstaus im zentralen Korn Versetzungsquellen im Nachbarkorn aktiviert werden, wurde außerdem eine Simulation mit neun Körnern durchgeführt, in der die angelegte Spannung nur auf die Versetzungen im zentralen Korn wirkt (passive Nachbarn). Der Spannungs–Dehnungsverlauf im Korn mit Nachbarkörnern, die keine angelegte Spannung erfahren, ist vergleichbar mit dem des isolierten Kornes. Verglichen mit der plastischen Dehnung im zentralen Korn, ist die Summe der plastischen Dehnungen in den passiven Nachbarkörnern, in denen die Versetzungen nur durch die Wechselwirkungen zwischen Versetzungen eine Kraft erfahren, vernachlässigbar. Die Spannung im zentralen Korn ist dagegen geringer als im isolierten Korn und im Korn umgeben von passiven Nachbarn. Dieser Unterschied vergrößert sich mit zunehmender plastischer Dehnung.

¹⁰Die Zusammensetzung der Schicht aus einzelnen Körnern würde eine Parallelisierung des Programms begünstigen, da dann davon ausgegangen werden kann, daß Versetzungen aus unterschiedlichen Körnern nicht miteinander reagieren. Ein Prozessor könnte jeweils ein Korn berechnen. Der Datenaustausch zwischen den Prozessoren würde nur zur Berechnung der durch die Versetzungen erzeugten Spannungsfelder nötig sein.

¹¹Tatsächlich wurde für den Fall der undurchdringbaren Grenzflächen kein signifikanter Unterschied in den Spannungs–Dehnungskurven festgestellt (zumindest bis zu der berechneten plastischen Dehnung von 0.2%).



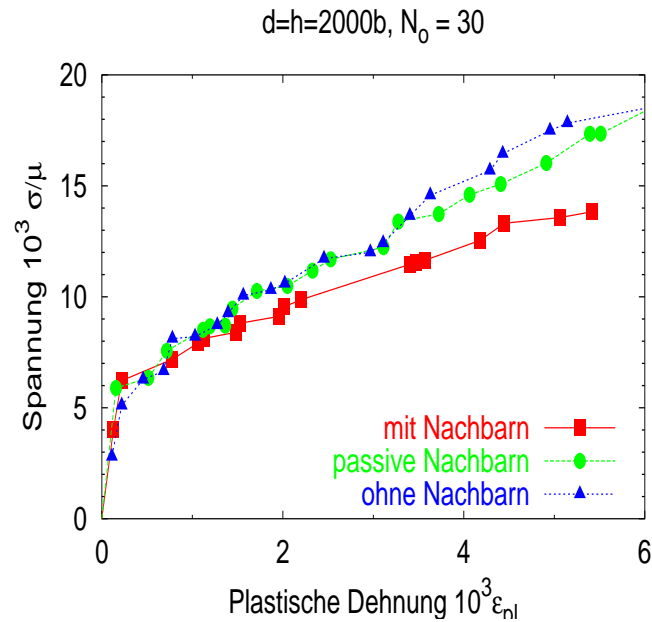
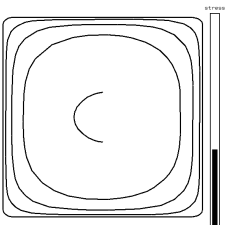
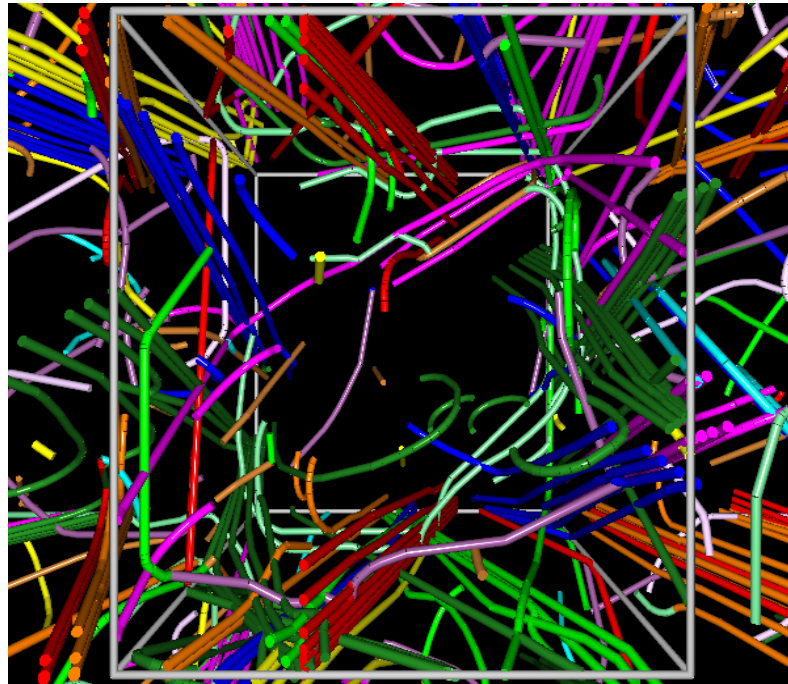


Abb. 4.66: Spannung über plastischer Dehnung (im zentralen Korn) für ein Korn umgeben von acht Nachbarkörnern mit angelegter Spannung in allen Körnern und mit angelegter Spannung nur im zentralen Korn (passive Nachbarn). Zum Vergleich ist die Spannungs–Dehnungskurve eines isolierten Kornes mit der gleichen Anfangsverstärkungsstruktur dargestellt. Die Simulationen wurden mit den Randbedingungen einer freistehenden Schicht durchgeführt.

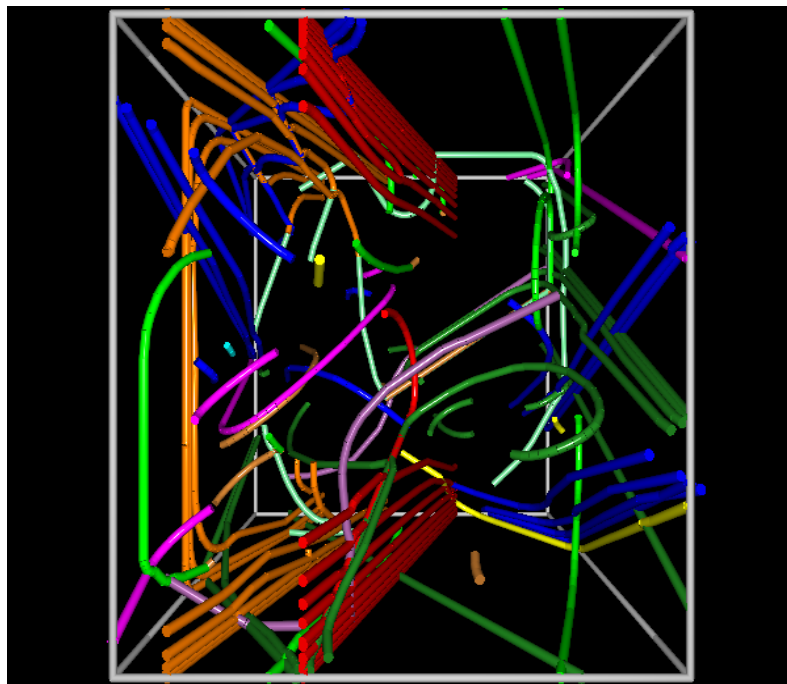
Die Versetzungsstartkonfigurationen waren in allen Simulationen gleich, so daß die entstandene Versetzungsstruktur verglichen werden kann (Abbildung 4.67). Es ist zu beobachten, daß im zentrierten Korn teilweise andere Versetzungsquellen aktiv waren. Im größten Aufstau im isolierten Korn befinden sich acht Versetzungen, im zentrierten mit angelegter Spannung in allen Körnern dagegen nur sechs. Die Versetzungserzeugung konnte auf mehrere unterschiedliche Versetzungsquellen verteilt werden, weshalb die Verfestigung geringer ist.

Die Wechselwirkung zwischen den Körnern findet hauptsächlich durch die an den Korngrenzen aufgestauten Versetzungen statt. Die Spannungskonzentrationen im zentralen Korn reichen nicht aus, um in den Nachbarkörnern Versetzungsquellen zu aktivieren, wenn diese selbst keine angelegte Spannung erfahren.



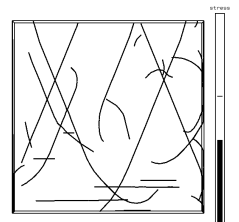


(a) Simulation mit Nachbarkörnern mit angelegter Spannung in allen Körnern



(b) isoliertes Korn

Abb. 4.67: Versetzungsstrukturen nach 0.5% plastischer Dehnung. Blickrichtung ist die Schichtnormale $[\bar{1}\bar{1}1]$.



Kapitel 5

Diskussion

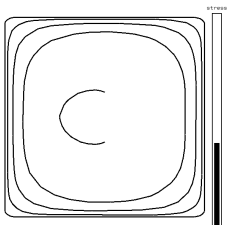
In diesem Kapitel werden die im vorangegangenen Kapitel präsentierten Ergebnisse diskutiert. Sie werden mit experimentellen Daten verglichen, und die der Simulation zugrunde liegenden Modellvorstellungen werden überprüft.

Die Diskussion gliedert sich in fünf Teile. Im ersten wird die Versetzungsbewegung von Versetzungen betrachtet, die sich über die gesamte Schichtdicke erstrecken, wie im Nix Modell angenommen. Es werden zum Nix Modell zusätzliche Härtungsbeiträge diskutiert, die sich aus der Wechselwirkung der beweglichen Versetzungen mit Grenzflächenversetzungen ergeben. Hierbei werden alle möglichen Versetzungskonfigurationen in einer $\langle 111 \rangle$ und in einer $\langle 001 \rangle$ orientierten Schicht berücksichtigt.

In Abschnitt 5.2 wird die Erzeugung und Multiplikation der Versetzungen behandelt: Die Aktivierung von Versetzungsquellen in polykristallinen dünnen Schichten wird analysiert. Um die Bedeutung der Grenzflächenversetzungen abzuschätzen, werden freistehende Schichten mit Schichten verglichen, deren Grenzflächen für Versetzungen undurchdringbar sind. Da die Simulationsergebnisse gut mit experimentellen Daten übereinstimmen, werden im dritten Teil der Diskussion (Abschnitt 5.3) dreidimensionale Rechnungen mit mehreren Versetzungsquellen diskutiert. Die verallgemeinerten Rechnungen erlauben eine Identifikation der wesentlichen Mechanismen in der Verformung und ermöglichen weitere Vergleiche mit experimentellen Daten.

In den ersten drei Teilen der Diskussion wurde die Fließspannung als die Spannung definiert, bei der sich Versetzungen durch die Schicht bewegen können, bzw. Versetzungsquellen aktiviert werden. In Kapitel 5.4 wird die Fließspannung über ein globales Fließkriterium nach dem Hall–Petch Modell festgelegt, indem die Durchbruchspannung der Korngrenzen als neuer Parameter eingeführt wird. Ist diese erreicht, kann plastische Verformung über die Korngrenzen hinaus stattfinden, und es gibt im Idealfall keine weitere Verfestigung mehr. Da, wie Abschnitt 5.3 zeigen wird, die wesentlichen Bestandteile der Dünnschichtverformung durch die Simulation einer einzelnen Versetzungsquelle wiedergegeben werden, werden in Kapitel 5.4 wieder Einzelversetzungssimulationen untersucht. Hierdurch lassen sich Zusammenhänge leichter analytisch nachvollziehen.

Im letzten Teil des Diskussionskapitels, Abschnitt 5.5, werden die Modelle der Quellenaktivierung in einer dünnen Schicht (Abschnitte 5.2 und 5.3) und das Hall–Petch Modell



(Abschnitt 5.4) zusammengefaßt und der jeweilige Geltungsbereich diskutiert.

5.1 Versetzungsbewegung in dünnen Schichten

Sind Versetzungen bereits in einer dünnen Schicht vorhanden, bzw. ist deren Erzeugung kein limitierender Schritt im Verformungsprozeß (siehe hierzu Abschnitt 5.2), so gibt das Nix Modell eine untere Schranke für die Fließspannung, vorausgesetzt, die Schicht hat Grenzflächen, die für Versetzungen undurchdringbar sind. Da Versetzungen nicht im Kristall enden können, müssen bei der Bewegung der Versetzungen durch die Schicht Grenzflächenversetzungen erzeugt werden. Die Energie der Grenzflächenversetzungen muß von der angelegten Spannung aufgebracht werden, woraus die Fließspannung des Nix Modells folgt. Sind die Spannungen geringer, werden sich die Versetzungen nicht durch die Schicht bewegen können.

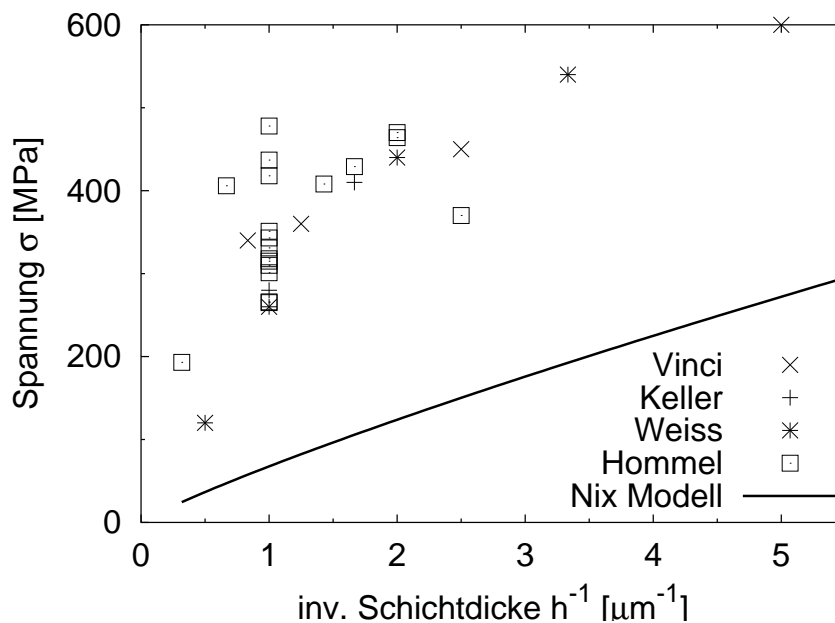
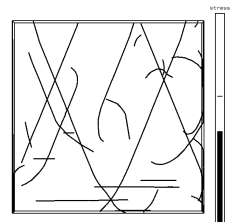


Abb. 5.1: Vergleich experimentell bestimmter Fließspannungen (Raumtemperaturspannung von Cu auf Si-Substrat ohne Passivierung bestimmt in Substrat-Krümmungs Experimenten: Vinci [35], Keller [13], Weiss [16] und 0.5% Fließspannung von Cu auf Polyimid-Folie (keine Passivierung) aus Mikrozugversuchen Hommel [94]) mit dem Nix Modell unter Annahme einer Passivierung. Die Fließspannungen sind über der inversen Schichtdicke h^{-1} aufgetragen.

Die Fließspannungen polykristalliner, dünner Metallschichten sind jedoch viel größer als vom Nix Modell vorhergesagt. Die Abbildungen 5.1 und 5.2 verdeutlichen diese Diskrepanz zwischen Experiment und dem Modell. In Abbildung 5.1 sind die Fließspannungen von Kupferschichten verschiedener Dicke aus vier unterschiedlichen Experimenten gezeigt.



Die in Substrat–Krümmungsmessungen gewonnenen Datenpunkte (Vinci [35], Keller [13] und Weiss [16]) entsprechen der Spannung bei Zimmertemperatur. Eingetragen sind auch im Mikrozugversuch gemessene Spannungen bei 0.5% plastischer Dehnung (Hommel [94]). Die Linie ist die nach dem Nix Modell Gleichung (2.4) berechnete Spannung. Die Experimente wurden für unpassivierte Schichten durchgeführt, dennoch wurde die Nix Spannung für eine passivierte Schicht berechnet, um somit einen oberen Grenzwert zu bekommen, und eine eventuell entstandene natürliche Oxidschicht zu berücksichtigen. Um einen Vergleich mit der Versetzungssimulation zu ermöglichen, wurde von einem Substrat und einer Passivierungsschicht mit unendlicher Ausdehnung und den elastischen Konstanten der Schicht ausgegangen (Kanargeometrie). Wie in Abschnitt 3.2.3 gezeigt, beträgt der Fehler durch die vereinfachte Kanargeometrie nur 10% und ist daher verglichen mit der Diskrepanz zwischen experimentellen Daten und dem Nix Modell vernachlässigbar. Es wurde ein mittlerer Schmidfaktor für eine $\langle 111 \rangle$ texturierte Schicht unter biaxialem Zug von $m = 0.27$ benutzt und davon ausgegangen, daß eine 60° Versetzung an den Grenzflächen abgelegt wird. Die experimentellen Werte sind ca. drei- bis viermal so groß wie vom Nix Modell vorhergesagt. Das gleiche Ergebnis ergibt sich für Schichten aus Alumini-

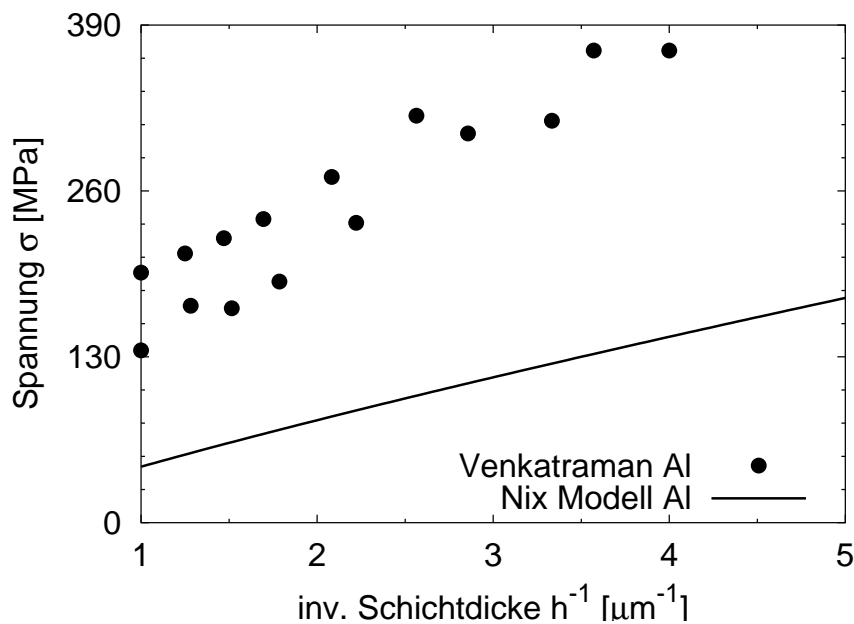
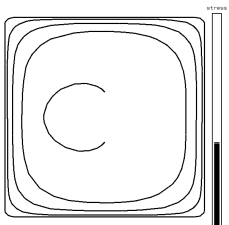


Abb. 5.2: Fließspannungen von Aluminiumschichten auf Silizium Substrat bestimmt im Substrat–Krümmungs Experiment [12] verglichen mit dem Nix Modell für Aluminium unter Annahme einer Passivierung. Die Fließspannungen sind über der inversen Schichtdicke h^{-1} aufgetragen.

um (Abbildung 5.2). Die experimentellen Daten stammen hier aus Substrat–Krümmungsexperimenten [12]. Die Nix Spannung wurde wie für die Kupferschichten berechnet, nur wurde jetzt $\mu_{\text{Al}} = 24.8\text{GPa}$ und $b_{\text{Al}} = 0.286\text{nm}$ für Aluminium anstatt $\mu_{\text{Cu}} = 42.1\text{GPa}$ und



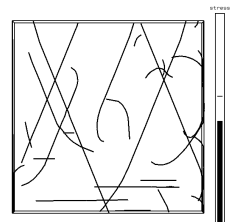
$b_{\text{Cu}} = 0.256\text{nm}$ für Kupfer verwendet. Das Verhältnis der Spannungen nach dem Nix Modell beträgt $(\mu_{\text{Al}}b_{\text{Al}})/(\mu_{\text{Cu}}b_{\text{Cu}}) = 0.65$ und entspricht ungefähr dem Verhältnis der gemessenen Spannungen in den Abbildungen 5.1 und 5.2.

Das Nix Modell beschreibt die Bewegung einer einzelnen, isolierten Versetzung in einer dünnen Schicht, die an der Grenzfläche Grenzflächenversetzungen ablegt. Zusätzliche Härtungsbeiträge können aus der Wechselwirkung der beweglichen Versetzung mit bereits abgelegten Grenzflächenversetzungen resultieren, wenn die Grenzflächenversetzungen auf dicht benachbarten parallelen Gleitebenen liegen oder wenn das Threading-Segment der beweglichen Versetzung Grenzflächenversetzungen auf anderen Gleitebenen kreuzt. Andere Mechanismen, die zur Härtung beitragen, sind Begegnungen zwischen zwei Threading-Segmenten, die Versetzungsdipole bilden und dadurch immobilisieren, oder der Schneidprozeß von Versetzungen auf horizontalen Gleitebenen, die in der Schicht vorhanden sind, wenn inhomogene Verformungsprozesse wie vom Gao Modell [164] der eingeschränkten Diffusion stattfinden. Diese Versetzungskonfigurationen, die aufgrund der Einschränkung der Bewegung der Versetzungen durch die Grenzflächen entstehen, und somit speziell in dünnen Schichten mit undurchdringbaren Grenzflächen häufig anzutreffen sind, werden in den folgenden Unterkapiteln diskutiert. Die entsprechenden Simulationen hierzu wurden in Kapitel 4.1 präsentiert.

5.1.1 Grenzflächenversetzungen auf parallelen Gleitebenen

Zu Beginn der Verformung werden sich zunächst die Versetzungen des Gleitsystems mit der größten aufgelösten Schubspannung bewegen. Gilt dies nur für ein Gleitsystem, so liegen die Versetzungen auf parallelen Gleitebenen und haben den gleichen Burgersvektor. Betrachtet man zunächst nur ein Paar von Grenzflächenversetzungen zur rechten und zur linken der beweglichen Versetzung, so zeigen die Simulationsergebnisse in Abbildung 4.2, S. 62, daß der Abstand l zwischen den Gleitebenen für eine $1000b$ dicke Schicht kleiner sein muß als $50b$ (bzw. $h/20$), um auf die experimentellen Spannungswerte zu kommen, d. h. eine Spannungserhöhung bezüglich der Kanal- oder Nix Spannung um einen Faktor vier zu erhalten. Eine einzelne Anordnung von zwei Grenzflächenversetzungs-paaren und einer beweglichen Versetzung auf so kleinem Raum ist eher unwahrscheinlich. Wahrscheinlicher ist, daß sich eine bewegliche Versetzung dort zwischen Grenzflächenversetzungen durchschieben wird, wo der Abstand vergleichsweise groß ist. Auf diese Weise wird ein mehr oder weniger regelmäßiges Feld von Grenzflächenversetzungen entstehen, in das neue bewegliche Versetzungen hineingeschoben werden müssen. In dieser periodischen Versetzungsanordnung ist bereits für Abstände kleiner als $200b$ eine Vervierfachung der Fließspannung verglichen mit der Nix Spannung zu beobachten (Abbildung 4.7, S. 66).

Der Abstand der Versetzungen im Feld läßt sich nach Gleichung (4.3) mit der plastischen Dehnung verknüpfen. Abbildung 4.8 zeigt die Zunahme der Spannung mit der plastischen Dehnung. Wird die Verfestigungsrate als das Verhältnis von Spannungsdiffe-



renz über Differenz in der plastischen Dehnung definiert,

$$H_{\text{pl}} = \frac{\Delta\sigma}{\Delta\epsilon_{\text{pl}}} = \frac{\Delta\tau/m}{\Delta\epsilon_{\text{pl}}}, \quad (5.1)$$

so folgt $H_{\text{pl}} \approx 105\text{GPa}$, wenn eine Schraubenversetzung an der Grenzfläche abgelegt wird und $H_{\text{pl}} \approx 63\text{GPa}$ für eine 60° Versetzung. In der Rechnung wurde ein Schmidfaktor von $m = 0.41$ verwendet.¹ Die Verfestigungsraten sind von der gleichen Größenordnung wie im Mikrozugversuch gemessene Werte: Wird die Verfestigung hier aus der Differenz zwischen der Spannung bei 0.1% und 0.5% plastischer Dehnung berechnet, so folgt aus den angegebenen experimentellen Daten eine typische Verfestigungsrate $H_{\text{pl}} = 50\text{GPa}$ für eine $0.5\mu\text{m}$ dicke Schicht [30].

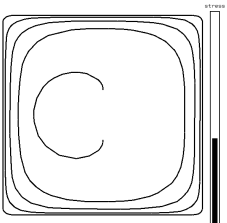
Abbildung 4.7, S. 66 und 4.9 verdeutlichen, daß die kritische Spannung unabhängig vom Abstand l der Versetzungen im Feld ist, sobald der Abstand kleiner als die Schichtdicke h ist. Andererseits wird die Spannung alleine von l kontrolliert, wenn $l < h$. Da nach Gleichung (4.3) l für plastische Dehnungen größer als 0.1% bereits kleiner als 200nm ist, ist die Fließspannung für die hier betrachteten Schichtdicken immer unabhängig von h . Dieses steht im Widerspruch zu einer Vielzahl von Experimenten, in denen eine Zunahme der Fließspannung mit abnehmender Schichtdicke festgestellt wurde (Abbildung 5.1).

Ähnliche Berechnungen zur Wechselwirkung zwischen einer mobilen Versetzung mit Grenzflächenversetzungen auf parallelen Gleitebenen (vier Versetzungen zu jeder Seite der beweglichen Versetzung) wurden von Weihnacht und Brückner [49] durchgeführt. Sie berechneten die kritische Spannung durch Gleichsetzen der Peach–Koehler Kräfte verursacht durch die angelegte Spannung und die Wechselwirkung mit den Grenzflächenversetzungen (unter Vernachlässigung der Linienspannung). Die kritischen Spannungen sind von der gleichen Größenordnung wie die in Abschnitt 4.1.2 präsentierten Werte.² In [49] wird eine Verfestigungsrate von $H_{\text{pl}} = 77\text{GPa}$ für 60° Versetzungen unter biaxialer Zugbelastung ($m = 0.27$ und $b_{\parallel} = b/\sqrt{3}$) berechnet. Werden die oben angegebenen Werte der Simulation auf diesen Belastungsfall umgerechnet, folgt für die 60° Versetzungen $H_{\text{pl}}^{\text{bi}} = 96\text{GPa}$, Schraubenversetzungen werden unter biaxialer Spannung nicht bewegt. Die Diskrepanz beruht wieder auf der unterschiedlichen Realisierung der Grenzflächenversetzungsfelder.

In [49] wurde die Verfestigung in einem Substrat–Krümmungsexperiment an einer $0.5\mu\text{m}$ dicken Cu–Schicht auf Silizium gemessen. Die Änderung der Spannung mit der Temperatur betrug im Abkühlteil des Temperaturzyklus bei Temperaturen unterhalb 250°C -2.2MPa/K . Hieraus folgt mit einem Unterschied in den thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Silizium und Kupfer $\Delta\alpha = 1.41 \cdot 10^{-5}\text{K}^{-1}$ [168] eine Spannungsänderung pro Gesamtdehnung von $\Delta\sigma/\Delta\epsilon_{\text{tot}} = 156\text{GPa}$ und nach Umrechnung auf Spannungsänderung pro plastischer Dehnung $\Delta\sigma/\Delta\epsilon_{\text{pl}} = 383\text{GPa}$ (mit einem biaxialen E-Modul von

¹Die unterschiedlichen Steigungen in Abbildung 4.8, S. 66 sind auf die unterschiedlichen Burgersvektoren zurückzuführen, die Textur spielt nur eine untergeordnete Rolle. Siehe hierzu Abschnitt 4.1.1.1.

²Zum Beispiel $\sigma \approx 290\text{MPa}$ für $l = 40\text{nm}$ aus [49] und $\sigma \approx 325\text{MPa}$ aus Abbildung 4.7 (ohne Nix Spannung und mit einem Schmidfaktor von $m = 0.27$ für biaxialen Zug) für 60° Versetzungen. Die Simulation liefert hier etwas größere Werte, da Grenzflächenversetzungen an der Ober- und Unterseite der Schicht sowie eine größere Anzahl von Versetzungen zur rechten und zur linken der beweglichen Versetzungen betrachtet wird.



$M_{111} = 263\text{GPa}$ [16]). Zu bemerken ist, daß dieser Wert deutlich größer als die theoretisch berechneten Werte ist, aber auch als die im Mikrozugversuch beobachtete Verfestigung.

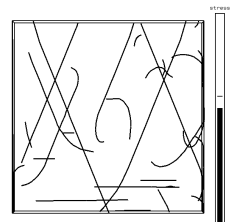
Weihnacht und Brückner [49] definieren die kritische Spannung als die Maximalspannung, die beim Hineinschieben der beweglichen Versetzung in das Feld von Grenzflächenversetzungen erreicht wird. Da das Spannungsmaximum dicht über der Grenzfläche liegt, ist die kritische Spannung und somit die Verfestigungsraten auch hier unabhängig von der Schichtdicke.

Der Unterschied in der Verfestigung zwischen Schrauben- und Stufenversetzungen kann zumindest qualitativ erklären, warum unter uniaxialer Belastung die Fließspannung in $\langle 111 \rangle$ Körnern größer ist als in $\langle 001 \rangle$ Körnern [30]: In einem Korn mit einer $\langle 111 \rangle$ Orientierung haben Schraubenversetzungen den höchsten Schmidfaktor, in einer $\langle 001 \rangle$ texturierten Schicht sind dagegen die maximalen Schmidfaktoren von Schrauben- und gemischten Versetzungen gleich. Schraubenversetzungen werden deshalb in $\langle 111 \rangle$ Körnern zuerst bewegt, weshalb aufgrund der größeren Verfestigung höhere Spannungen beobachtet werden. Hiermit kann aber nicht erklärt werden, warum auch in Substrat-Krümmungsexperimenten, in denen die Schichten biaxial belastet werden, in $\langle 111 \rangle$ Körnern größere Spannungen beobachtet werden [31], da Schraubenversetzungen unter biaxialer Spannung keine Kraft erfahren.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, daß sich Fließspannungen ergeben, die von der gleichen Größe wie die experimentell gemessenen sind, wenn die Versetzungen dicht genug beieinander liegen. Allerdings kann die beobachtete Schichtdickenabhängigkeit nicht erklärt werden: Die erforderlichen Abstände der Grenzflächenversetzungen sind viel kleiner als die Schichtdicke, so daß die Fließspannung nahezu unabhängig von der Schichtdicke wird (Abbildung 4.9, S. 67). Das Modell der parallelen Grenzflächenversetzungen gibt eine Verfestigung von der gleichen Größenordnung wie im Mikrozugversuch, Substrat-Krümmungsexperimente zeigen jedoch größere Verfestigungen. Gegen die Modellvorstellung der Verfestigung durch Wechselwirkung mit Grenzflächenversetzungen auf parallelen Gleitebenen spricht außerdem, daß die Grenzflächenversetzungen nicht besonders stabil sind, wie Beobachtungen im Transmissionselektronenmikroskop gezeigt haben [21, 11, 78, 79], bzw. gar nicht erst an den Grenzflächen abgelegt werden (Abschnitt 2.4). Außerdem zeigen auch freistehende Schichten, an deren Oberflächen die Versetzungen die Schicht verlassen können und somit kein Spannungsfeld im Schichtinneren erzeugen, hohe Fließspannungen.

5.1.2 Grenzflächenversetzungen auf sich kreuzenden Gleitebenen

Wird mehr als ein Gleitsystem aktiviert, müssen die Threading-Versetzungen beim Gleiten durch die Schicht Grenzflächenversetzungen auf kreuzenden Gleitebenen überwinden. Nix [45] hat für eine stark vereinfachte Geometrie eine um den Faktor 2.2 höhere Fließspannung berechnet, wenn eine Threading-Versetzung in einer passivierten Schicht ein Grenzflächenversetzungspaar an der Ober- und Unterseite überwinden muß. Allerdings haben diskrete Versetzungssimulationen mit realistischen Geometrien und Versetzungsformen ge-



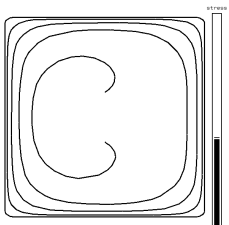
zeigt, daß die Hinderniswirkung viel geringer ist. Schwarz und Tersoff [46] berechneten die Spannungserhöhung für eine spezielle Versetzungskonfiguration in einer $\langle 001 \rangle$ texturierten Schicht, wobei die Hindernisgrenzflächenversetzungen als festgehaltene, gerade Linien dargestellt wurden. Sie fanden eine Erhöhung um nur 15%. Diese Simulationen wurden von Gomez-Garcia et al [47] mit einer anderen Versetzungssimulation bestätigt. In Abschnitt 4.1.4 wurden sämtliche Versetzungskonfigurationen, die in einer $\langle 111 \rangle$ texturierten Schicht auftreten können, berechnet. Die Grenzflächenversetzungen wurden hierbei ebenfalls festgehalten. Es wurde eine maximale Spannungserhöhung von 1.3 gefunden (Tabelle 4.1(a), S. 69). Diese Spannungserhöhung ist nur schwach von der Schichtdicke abhängig (Abbildung 4.14, S. 70). Werden die Hindernisversetzungen nicht festgehalten, können sich Versetzungsknoten wie in Abbildung 4.13 gezeigt bilden. Doch auch in diesem Fall beträgt die Spannungserhöhung nur ca. 30% (Tabelle 4.1(b)). Die Wechselwirkung mit einzelnen Grenzflächenversetzungen auf kreuzenden Gleitebenen reicht also nicht aus, um die Fließspannungen dünner Schichten zu erklären (siehe Abbildung 5.1).

Wenn die Versetzung eine periodische Anordnung von Grenzflächenversetzungen überwinden muß, ergeben sich höhere Fließspannungen (Abbildung 4.16, S. 72). Abbildung 4.17 zeigt die Simulationsergebnisse für einen Versetzungsabstand im Hindernisfeld von $l = 400b$, der einer plastischen Dehnung von 0.2% entspricht. Für Schichtdicken $h > l$ überwiegt die Fernfeldwechselwirkung der Versetzungsanordnung, der zum Nix Modell zusätzliche Härtingsbeitrag ist schichtdickenunabhängig. Für $h < l$ überwiegt die Wechselwirkung zwischen der beweglichen Versetzung mit einer einzelnen Hindernisversetzung, der Härtingsbeitrag ist ungefähr proportional zur Nix Spannung wie in Abbildung 4.14 gezeigt. Da für die hier untersuchten Schichten meistens $h \gg l$ gilt, ergibt sich eine ähnliche Situation wie für das parallele Versetzungsfeld: Liegen die Versetzungen im Feld dicht genug, vergrößert sich zwar die Fließspannung, jedoch verschwindet die Schichtdickenabhängigkeit. Außerdem bedarf dieser Erklärungsansatz über Grenzflächenversetzungsfelder, daß die Grenzflächenversetzungen in der Grenzfläche bleiben und deren Spannungsfeld fortwährend im Schichtinneren vorhanden ist, was, wie im Abschnitt 5.1.1 erwähnt, nicht immer der Fall sein muß.

5.1.3 Wechselwirkungen zwischen Threading-Segmenten

Wie Abbildung 4.11, S. 67 und von Pant et. al [169] gezeigt, kann die Wechselwirkung zwischen zwei Threading-Versetzungen groß werden, wenn sich diese Versetzungen sehr nahe kommen. Für eine $h = 1000\text{nm}$ dicke Schicht ergibt sich eine Spannungserhöhung um einen Faktor vier für einen Abstand der Gleitebenen von $l = 13\text{nm}$, wenn die Versetzungen auf parallelen Gleitebenen laufen und gleichen Burgersvektor sowie entgegengesetzte Linienrichtung haben (Abbildung 4.11, S. 67). Setzt man das Doppelte dieser Breite als Einfangbreite einer Threading-Versetzung an, kann hiermit die Wahrscheinlichkeit einer gegenseitigen Blockade zweier Threading-Versetzungen berechnet werden.

Die Wahrscheinlichkeit, daß sich zwei Threading-Segmente auf unterschiedlichen Gleitebenen treffen, ist verschwindend gering. Für zwei Versetzungen in einem Korn der Größe $d = 4000b \approx 1\mu\text{m}$ entspricht diese aufgrund von geometrischen Überlegungen $(2 \cdot l/d)^2 =$



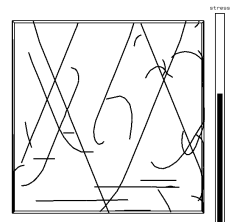
$6.25 \cdot 10^{-4}$. Außerdem ist die Wechselwirkung schwächer, wenn die Burgersvektoren nicht gleich sind. Begegnungen sind wahrscheinlicher für Versetzungen auf parallelen Gleitebenen, wenn die Versetzungen einander entgegen laufen. In einem Korn mit $d = 1\mu\text{m}$ und einer hohen Versetzungsdichte von $\rho = 10^{14}\text{m}^{-2}$ gibt es 100 Versetzungen. Nimmt man grob abgeschätzt an, daß ein Drittel hiervon Threading-Versetzungen und zwei Drittel Grenzflächenversetzungen an Ober- und Unterseite der Schicht sind, kommt man auf 33 Threading-Versetzungen im Korn. Weiterhin sei angenommen, daß diese alle auf parallelen Gleitebenen liegen, den gleichen Burgersvektor haben und rund 16 Versetzungen in die gleiche Richtung laufen. Die 16 Versetzungen haben eine maximale gemeinsame Einfangbreite von $16 \cdot 100b$. Diese Breite dividiert durch die Korngröße ergibt eine Einfangwahrscheinlichkeit von $\frac{4}{10}$, wenn alle Versetzungen gleichzeitig loslaufen.

Auch unter diesen idealisierten Bedingungen, alle Versetzungen haben das gleiche Gleitsystem und bewegen sich gleichzeitig, wird nicht einmal jede zweite Versetzung bei ihrer Bewegung durch die Schicht auf eine andere Threading-Versetzung stoßen. Die Versetzungsquellen werden nicht die gleichen Aktivierungsspannungen haben und die Spannung wird nicht im ganzen Korn homogen sein, weshalb es unwahrscheinlich ist, daß sich viele Versetzungen gleichzeitig durch das Korn bewegen. Gibt es aber weniger bewegliche Versetzungen im Korn, ist die Einfangwahrscheinlichkeit wesentlich kleiner. Die starke Wechselwirkung zwischen zwei dicht beieinander liegenden Threading-Segmenten reicht daher nicht aus, die großen Fließspannungen dünner Schichten zu erklären.

5.1.4 Wechselwirkungen mit horizontalen Versetzungen

Auf Versetzungen auf Gleitebenen parallel zur Schichtebene wirkt keine Kraft durch eine Spannung in der Ebene (der entsprechende Schmidfaktor ist null) und sie leisten deshalb auch keinen Beitrag zur Ausdehnung oder Kontraktion der Schicht in der Ebene. Da sie sich jedoch über die gesamte Kornbreite erstrecken, müssen Versetzungen auf geneigten Gleitebenen die parallelen Versetzungen in der Regel schneiden, wenn diese sich durch die Schicht bewegen. Versetzungen auf parallelen Gleitebenen wurden im Transmissionselektronenmikroskop beobachtet [170] und nach dem Modell von Gao et al. [164] können durch die eingeschränkte Diffusion in dünnen Schichten Spannungsfelder entstehen, die Versetzungen auf horizontalen Gleitebenen von der Korngrenze zur Kornmitte bewegen. Das Gao Modell konnte noch nicht direkt experimentell bestätigt werden, aber es wurde gezeigt, daß sich Spannungs-Temperatur Zyklen aus Substratkrümmungsexperimenten für Kupferschichten auf Silizium gut mit den Modellannahmen beschreiben lassen [33].

Die Hinderniswirkung der Versetzungen auf parallelen Gleitebenen wurde in Abschnitt 4.1.6 untersucht. Die maximale Spannungserhöhung in Einheiten der Kanalspannung beträgt 1.5, in den meisten Fällen ist sie jedoch niedriger, so daß auch das Schneiden der parallelen Versetzungen nicht die experimentell beobachteten Fließspannungen dünner Schichten, die viermal so groß wie die Kanalspannung sind, erklären kann (Abbildung 5.1, siehe auch Abschnitt 5.3.3) .



5.2 Versetzungsquellen in dünnen Schichten

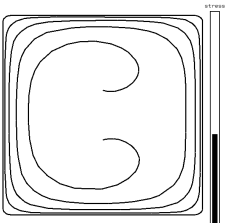
In den vorherigen Abschnitten zur Wechselwirkung zwischen Versetzungen in dünnen Schichten wurde davon ausgegangen, daß sich die Versetzungen bereits in der Schicht befinden und die Bewegung der Versetzungen durch die Schicht der schwierigste Schritt ist und somit die Fließspannung bestimmt. Es wurde festgestellt, daß die Wechselwirkung zwischen beweglichen Versetzungen, die sich über die gesamte Schichtdicke erstrecken, und anderen Grenzflächenversetzungen oder Threading-Versetzungen die experimentellen Fließspannungen in Abbildung 5.1 nicht erklären kann. In diesem Abschnitt wird deshalb die Erzeugung und Vervielfältigung von Versetzungen in dünnen Schichten genauer betrachtet und der Einfluß der Schichtgeometrie auf die Aktivierung der Versetzungsquellen untersucht.

Ist die Dichte der Versetzungsquellen (in Quellen pro Fläche ρ_s) unabhängig von der Korngröße d , so wird die Anzahl der Quellen pro Korn mit kleiner werdender Korngröße abnehmen. Zum Erreichen der gleichen plastischen Dehnung wird die Zahl der Versetzungen aus einer Quelle N_{akt}^0 dabei zunehmen, wie eine einfache Überschlagsrechnung zeigt: N_r^{tot} Versetzungsringe erzeugen beim Durchgleiten eines Kornes der Größe d die plastische Dehnung $\epsilon_{\text{pl}} = N_r^{\text{tot}} b_{\parallel} / d$, wobei b_{\parallel} die mittlere Komponente des Burgersvektors in Zugrichtung ist. Die Gesamtanzahl der Versetzungsringe ist gegeben mit $N_r^{\text{tot}} = N_{\text{akt}}^0 \rho_s d^2$. Hieraus folgt:

$$N_{\text{akt}}^0 = \frac{\epsilon}{\rho_s b_{\parallel} d}. \quad (5.2)$$

Setzt man für die Versetzungsquellendichte eine für dünne Schichten typische, experimentell gemessene (Gesamt-) Versetzungsdichte von $\rho_s = 10^{14} \text{m}^{-2}$ an [84, 44, 13, 82], so folgt mit $b_{\parallel} = 0.4 \cdot 0.256 \cdot 10^{-9} \text{m}$, und $d = 500 \text{nm}$ eine Aktivierungsanzahl von $N_{\text{akt}}^0 = 1$, um eine plastische Dehnung von $\epsilon = 5 \cdot 10^{-3}$ zu erreichen. Hier wurde der Burgersvektor mit dem mittleren Schmidfaktor einer $\langle 111 \rangle$ texturierten Schicht unter einachsigem Zug $m = 0.4$ multipliziert, um b_{\parallel} zu erhalten. Jede Quelle wird also im Mittel einmal aktiviert. Tatsächlich werden aber einige Quellen gar nicht und andere dafür mehrfach operieren, da nicht alle Quellen eine identische Aktivierungsspannung haben. Außerdem wird die Dichte der Quellen geringer als die hier eingesetzte Gesamtversetzungsdichte sein, was zu einer häufigeren Aktivierung einer einzelnen Quelle führt.

Auch experimentell gibt es einige Hinweise auf Versetzungsvervielfältigungsprozesse, die im Korn stattfinden. Die Entstehung von Versetzungsringen im Inneren eines Kornes konnte im Transmissionselektronenmikroskop direkt beobachtet werden (Abbildung 2.7, S. 27, [81]). Die Beobachtung einer ruckartigen Versetzungsbewegung mit freien Weglängen, die ein Bruchteil der Schichtdicke betragen [84, 85, 81], spricht für Versetzungswechselwirkungen auf einer Längenskala, die viel kleiner als die Schichtdicke ist. Ebenfalls können Versetzungsquellen im Korninneren dieses Verhalten verursachen, da sich hier Versetzungen so lange in einer kritischen Konfiguration befinden, bis die Spannung groß genug ist, um die Quellen zu aktivieren, worauf sich die Versetzungen mit hoher Geschwindigkeit weiterbewegen. Dünne Metallschichten bestehen nach der Abscheidung meistens aus sehr kleinen Körnern, deren Korngröße nur einen Bruchteil der Schichtdicke beträgt (z. B. [31]).



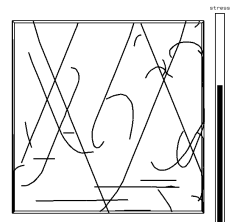
Die Schichten werden i. d. R. vor der Durchführung der Spannungsmessungen bei erhöhter Temperatur ausgelagert, um eine stabile Mikrostruktur zu erhalten. Die Körner wachsen dabei bis die Korngröße etwa der Schichtdicke entspricht [34]. Durch das Kornwachstum können Versetzungen im Korninneren zurückbleiben, wodurch die beobachtete sprunghafte Versetzungsbewegung bedingt wird und die gemessenen hohen Versetzungsdichten folgen. Die Beobachtung reversibler Versetzungsstrukturen bei zyklischer Belastung [21, 90, 170] deutet auf eine begrenzte Anzahl von aktiven Versetzungsquellen hin, denn wären beliebig viele Quellen vorhanden, könnte eine minimale Änderung des Spannungsverlaufes andere Quellen aktivieren und somit komplett andere Strukturen erzeugen (chaotisches Verhalten [171]).

Diese Überlegungen deuten darauf hin, daß in dünnen Schichten nur wenige Versetzungsquellen im Laufe der Verformung mehrfach aktiviert werden. Wirken die Grenzflächen der Schicht als Hindernisse für die Versetzungen, was zunächst angenommen werden soll, so werden die Versetzungen hier aufgestaut und üben eine Rückspannung auf die Versetzungsquelle aus, die eine erneute Aktivierung erschwert. Je dünner dabei die Schichtdicke, desto stärker ist die Rückspannung und desto schwieriger wird die plastische Verformung. Neben den Grenzflächen müssen hierbei auch die Korngrenzen betrachtet werden, da die Korngröße in der Regel von der gleichen Größenordnung wie die Schichtdicke ist, und auch die Korngrenzen Hindernisse für die Versetzungen darstellen.

5.2.1 Das Quellenmodell

Die Aktivierungsspannungen für Frank–Read Quellen unterschiedlicher Größe wurden in Abschnitt 4.2.1 berechnet. Hier werden zunächst die Ergebnisse für eine Quelle in einem kolumnaren Korn in der Kanalgeometrie diskutiert. Die undurchdringbaren Grenzflächen zur Ober- und Unterseite repräsentieren dabei Grenzflächen zu einer Passivierung bzw. zum Substrat. Die Korngrenzen an den Seiten des Kornes werden ebenfalls als undurchdringbare Hindernisse behandelt. Die Aktivierungsspannung ist als die Spannung definiert, die notwendig ist, um einen kompletten Versetzungsring zu erzeugen und die Quelle wieder in ihren Ursprungszustand zu überführen. Abbildung 4.24, S. 78 zeigt für $d = h$, daß die Erzeugung des ersten Versetzungsringes am einfachsten für eine Quelle der Größe $s = h/3 = d/3$ ist. Zur Erzeugung weiterer Ringe muß die Spannung erhöht werden und die Größe der am leichtesten zu aktivierenden Quelle verschiebt sich zu kleineren Werten. So ist die effizienteste Quellengröße, um fünf Versetzungsringe zu produzieren, ca. $s = h/5$. Diese Beobachtungen sind unabhängig von den Kornabmessungen, wenn die Schichtdicke gleich der Korngröße ist (Abbildung 4.25, S. 79). Für Aspektverhältnisse unterschiedlich von eins, ist die kleinere Größe h oder d diejenige, die die effizienteste Quellengröße s_{eff} bestimmt (Abschnitt 4.2.1.1), d. h. ist die Korngröße kleiner so ist $s_{\text{eff}} \approx d/3$, im umgekehrten Fall ist $s_{\text{eff}} \approx h/3$. Die kleinere der beiden Größen sei im folgenden mit l bezeichnet.

Die Ergebnisse des Abschnittes 4.2.1 bedeuten, daß bei mehrfacher Quellenaktivierung hauptsächlich Quellen im Größenbereich $s_{\text{eff}} = l/5$ bis $s_{\text{eff}} = l/3$ aktiv sind. Ohne die genaue Quellenverteilung in einem Korn zu kennen, läßt sich deshalb annehmen, daß die effektive Quellengröße einer polykristallinen Schicht ca. $s_{\text{eff}} = l/4$ beträgt. Große Quellen, die über



die gesamte Schichtdicke reichen, wie in den ersten Abschnitten dieses Diskussionskapitels angenommen, lassen sich zwar zunächst leicht aktivieren, allerdings versiegen diese Quellen, sobald die Versetzungen gegen die Begrenzungen des Korns gelaufen sind. Sehr kleine Frank–Read Quellen haben wiederum eine so große Aktivierungsspannung, daß sie keine Versetzungen emittieren.

Vergleich des Quellenmodells mit experimentellen Daten

Eine Quelle der Größe $s_{\text{eff}} = h/4$ benötigt eine Aktivierungsspannung, die viermal so groß ist wie die entsprechende Kanalspannung (Gleichung (3.14)).

$$\tau_s \approx \frac{4\mu b}{h}. \quad (5.3)$$

Diese Aktivierungsspannung für Schraubenversetzungsquellen ist in Abbildung 5.3 zusammen mit experimentellen Daten und den Spannungswerten des Nix Modells aus Abbildung 5.1 aufgetragen. Zur Berechnung der Quellenspannung wurde ein mittleren Schmidfaktor einer $\langle 111 \rangle$ texturierten Schicht unter biaxialem Zug von $m = 0.27$ benutzt. Abbildung 5.3

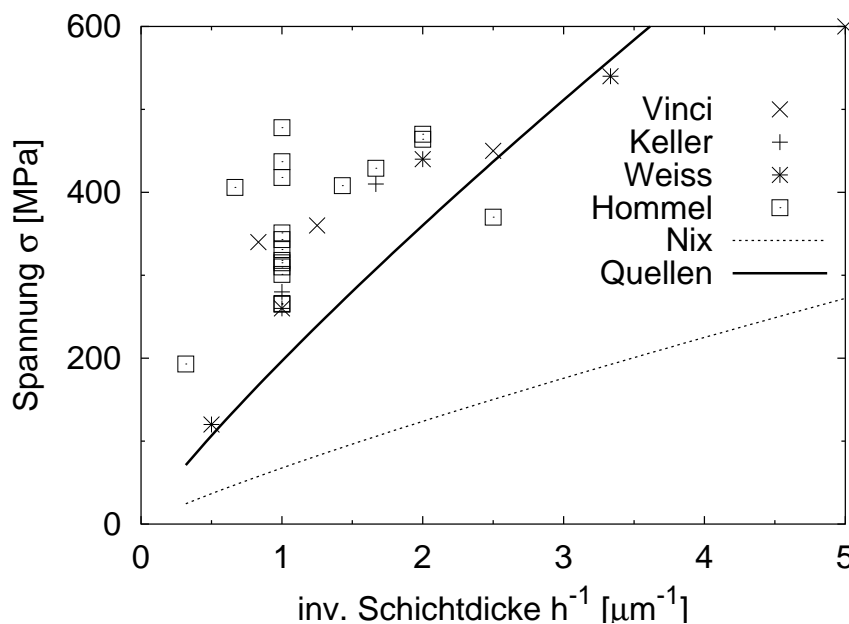
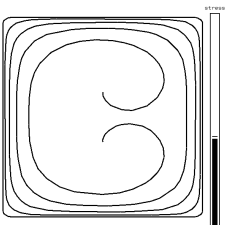


Abb. 5.3: Vergleich der Quellenaktivierungsspannung mit den experimentellen Daten (Vinci [35], Keller [13], Weiss [16] und Hommel [94], s. Abbildung 5.1) und der Spannung nach dem Nix Modell. Die Spannungen sind über der inversen Schichtdicke h^{-1} aufgetragen.

zeigt, daß das Quellenmodell, das von einer Aktivierung von Versetzungsquellen der Größe $s_{\text{eff}} = l/4$ ausgeht, im Gegensatz zum Nix Modell Fließspannungen vorhersagt, die den experimentellen Werten entsprechen. Etwas andere Spannungswerte ergeben sich, wenn



die Aktivierungsspannung für Stufenversetzungen (eine um den Faktor $1/(1 - \nu)$ größere Spannung) oder ein mittlerer Schmidfaktor für einachsigen Zug ($m = 0.4$) benutzt werden, die jedoch nichts an dieser Aussage ändern. Die Abweichung einiger experimenteller Daten läßt sich dadurch erklären, daß diese hier nur nach der Schichtdicke sortiert aufgetragen sind und die Korngrößenabhängigkeit vernachlässigt wurde. So ist die Streuung der Datenpunkte von Hommel für die Schichtdicke $h = 1\mu\text{m}$ durch die unterschiedliche Korngröße zu erklären. Nach der Modellvorstellung der Quellenaktivierung bestimmt die kleinere Größe von Schichtdicke und Korngröße die effektive Quellenabmessung und somit die Fließspannung. Abbildung 5.4 zeigt die Fließspannungen aufgetragen über dem Kehrwert der kleineren Dimension für die Daten, für die sowohl die Korngröße als auch die Schichtdicke angegeben war. Die Streuung der Daten ist wesentlich geringer und die Übereinstimmung mit dem Quellenmodell ausgeprägter.

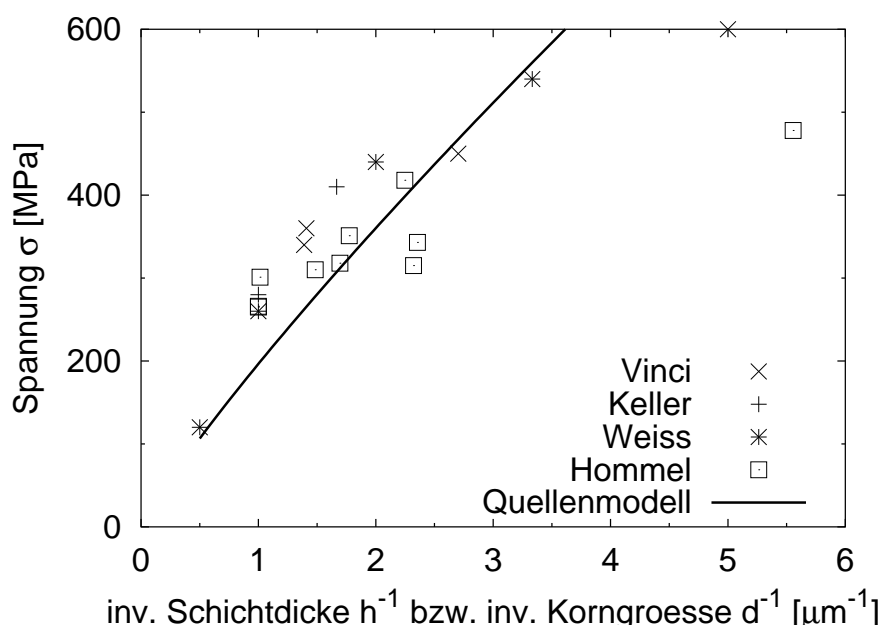
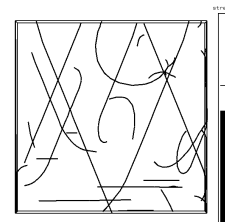


Abb. 5.4: Vergleich der Quellenaktivierungsspannung mit den experimentellen Daten (Vinci [35], Keller [13], Weiss [16] und Hommel [94]) aufgetragen über dem Kehrwert der kleineren Größe von Schichtdicke und Korngröße

Verallgemeinerung des Modells

Die Berechnungen der Aktivierungsspannung einer Versetzungsquelle in einer dünnen Schicht in Abschnitt 4.2.1 wurden für eine symmetrische Konfiguration einer Frank–Read Quelle mit Schraubencharakter im Zentrum eines Korns durchgeführt, können aber auch auf allgemeinere Konfigurationen übertragen werden. Eine Versetzung in der Mitte des Korns gibt eine untere Grenze für die effektive Quellenaktivierungsspannung. Wenn die Quelle

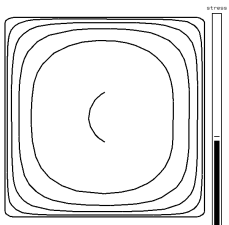


größer als ein Drittel der Korndimensionen ist, gibt es immer eine Konfiguration, für die die Passage zwischen der Grenze und einem Festhaltepunkt schwieriger ist als die Aktivierung der Frank–Read Quelle an sich, unabhängig davon, wo die Quelle im Korn positioniert ist. Ein anderer Burgersvektor oder eine andere Gleitebene der Versetzungen würden nur kleine Änderungen in der Aktivierungsspannung verursachen.

Keine wesentlichen Änderungen der Fließspannungen sind zu erwarten, wenn das Substrat oder die Passivierungsschicht steifer sind als die Metallschicht ($\pm 20\%$, siehe Abschnitt 3.2.3). Sind Substrat oder Passivierungsschicht weicher als die Metallschicht, so verringert sich die elastische Energie einer Versetzung an der Grenzfläche. Der Grenzfall entspricht einer freistehenden Schicht, wo die Versetzungen die Schicht an den Grenzflächen verlassen können und keine Grenzflächenversetzungen zurückbleiben. Dieser Fall wurde in Abschnitt 4.2.1.3 behandelt. Qualitativ entsprechen die Ergebnisse denen der Schicht in der Würfelgeometrie mit dem Unterschied, daß die effektive Quellengröße jetzt nur noch über die Korngröße d bestimmt wird. Wie für die eingepackte Schicht erfordern kleine und sehr große Quellen eine hohe Aktivierungsspannung. Eine effizienteste Quellengröße kann in Abbildung 4.30, S. 82 abgelesen werden. Sie wird vom Übergang der Konfiguration 4.29(a) in Konfiguration 4.29(c) gekennzeichnet. Für die erste Aktivierung folgt $s_{\text{eff}} \approx d/3$, für die nachfolgenden wird s_{eff} kleiner. Die effizienteste Quellengröße ist etwas größer für eine andere Burgersvektororientierung als hier verwendet, da die Überwindung der Konfiguration 4.29(c) dann einfacher wird, und kleiner für eine andere Orientierung der Quelle, wenn die Festhaltepunkte dichter zur Korngrenze kommen. Bei einer Drehung der Quelle um 90° entspräche die kritische Konfiguration der einer passivierten Schicht in der Würfelgeometrie (Abbildung 4.23(c)).

Nimmt man $s_{\text{eff}} \approx d/3$ als Mittelwert für die effektive Quellengröße in einem Korn einer freistehenden Schicht, so ist die hieraus folgende Fließspannung (d. h. die Aktivierungsspannung) etwas kleiner als für eine passivierte Schicht auf einem Substrat, jedoch deutlich größer (Faktor drei) als vom Thompson Modell, das an den Korngrenzen abgelegte Versetzungen betrachtet (Abschnitt 2.2.1), vorhergesagt. Da in freistehenden Schichten keine Versetzungen an den Grenzflächen abgelegt werden, ist die kritische Spannung nach dem Nix Modell null. Auch unter der Annahme, daß sich natürliche Oxidschichten an den Oberflächen bilden, die die Versetzungen am Austreten aus der Schicht hindern, ist die Fließspannung des Nix Modells um einen Faktor drei kleiner, als die des Quellenmodells für freie Oberflächen.

Im Gegensatz zu einer Schicht mit Passivierung und Substrat wird die Fließspannung einer freistehenden Schicht im Rahmen des Quellenmodells nur von der Korngröße d kontrolliert. Einige experimentelle Beobachtungen deuten ebenfalls auf diese Abhängigkeit hin: Die in Mikrozugversuchen bestimmte Fließspannung von Kupferschichten auf Polyimid-Folie zeigte sich unabhängig von der Schichtdicke [172]. Für Bleischichten (auf Silizium Substrat) wurde beobachtet, daß die Abhängigkeit der Spannung in der Schicht von der Korngröße sechsmal so groß ist wie die Abhängigkeit von der Schichtdicke [20]. Ursache hierfür könnte sein, daß die Grenzflächen der Schicht nicht so effektive Hindernisse für die Versetzungen sind, und die Versetzungen die Schicht an der Grenzfläche verlassen können (was auch im TEM beobachtet wurde [80, 81, 82]), bzw. deren Spannungsfeld in der



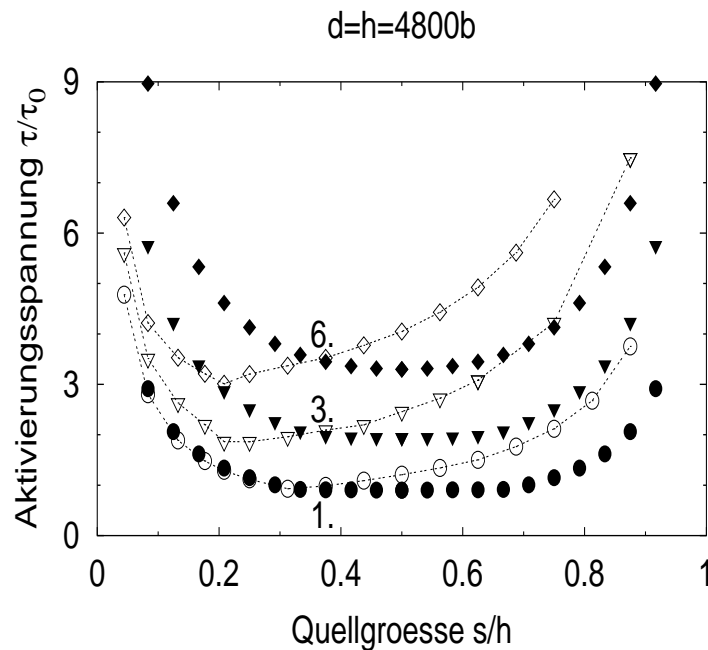
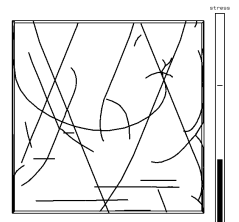


Abb. 5.5: Vergleich der Aktivierungsspannung einer Spiralquelle und einer Frank–Read Quelle in einer Schicht mit Passivierung und Substrat für die erste, dritte und sechste Aktivierung

Schicht durch diffusive Aufweitung des Versetzungskerns abgebaut wird. Die Modellierung der Grenzflächen wird hier irgendwo zwischen freien Oberflächen und undurchdringbaren Hindernissen liegen. Die Abhängigkeit der Fließspannung passivierter Schichten von der Schichtdicke konnte von Venkatraman et al. für Aluminiumschichten (mit Deckschichten aus Aluminiumoxid) unterschiedlicher Dicke und konstanter Korngröße nachgewiesen werden [11].

Das Quellenmodell zeigt eine starke Verfestigung, wie aus der Verschiebung der Kurven zu höheren Spannungen mit zunehmender Anzahl der Versetzungsemissionen in den Abbildungen 4.24, S. 78 und 4.30, S. 82 erkannt werden kann. Die Versetzungen an den Grenzflächen und Korngrenzen üben eine Spannung auf die Versetzungsquelle aus, wodurch die erneute Aktivierung erschwert wird. Die Verfestigung ist in den Vergleichen mit den Experimenten noch nicht berücksichtigt, hier wurde nur die Aktivierungsspannung der Quelle mit $s = s_{\text{eff}}$ eingetragen. Auf die Verfestigung wird im Abschnitt 5.3 noch genauer eingegangen.

Eine Spiralquelle, die nur einen Festhaltepunkt innerhalb des Kornes besitzt (Abbildung 4.27, S. 80), erfordert für die erste Aktivierung (d. h. die Erzeugung eines kompletten Überschlags) eine niedrigere Spannung als eine Frank–Read Quelle, da die optimale Quellengröße hier bei $s_{\text{eff}} = l/2$ liegt. Jedoch werden für die nachfolgenden Aktivierungen größere Spannungen benötigt, da die effektive Größe der Quelle durch die Ablage der Versetzungen zwischen Grenzflächen (oder Korngrenzen) und Festhaltepunkt bei jedem Überschlag

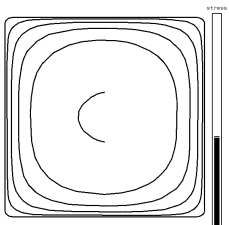


kleiner wird (Abbildung 5.5). Wird die plastische Dehnung wie in Kapitel 4.2.1.4 aus der Zahl der Quellenaktivierungen bei einer gegebenen Spannung bestimmt, so folgt für eine Spiralquellenverteilung nahezu die gleiche Spannungs–Dehnungskurve wie für eine Frank–Read Quellen–Verteilung (Abbildung 4.31, S. 83), so daß die Ergebnisse für Spiralquellen und Frank–Read Quellen als gleichwertig angesehen werden können.

5.3 Simulationen mit mehreren Versetzungsquellen

In den letzten beiden Abschnitten wurde das Modell der Quellenaktivierung aus den Ergebnissen von Simulationen einer einzelnen Versetzungsquelle in einem Korn herausgearbeitet. Unter der Annahme, daß eine Quelle mehrfach aktiv ist, ergibt sich eine effektive Quellgröße von $s_{\text{eff}} \approx h/4$, und die hieraus folgende Fließspannung kann die experimentell beobachteten Spannungswerte erklären. In einem Korn einer dünnen Schicht werden aber mehrere Quellen aktiv sein, und die von verschiedenen Quellen erzeugten Versetzungen werden miteinander wechselwirken. Hier kann eine dreidimensionale Versetzungssimulation, die Versetzungen auf verschiedenen Gleitebenen simuliert, Aufschluß darüber geben, ob das (zweidimensionale) Modell für diesen allgemeineren Fall anwendbar ist. Außerdem werden die folgenden Punkte mit Hilfe der dreidimensionalen Simulationsergebnisse aus Kapitel 4.3 diskutiert:

- **Zufällige Position der Quellen im Korn:** In den Einquellensimulationen wurde die Versetzungsquelle in der Mitte des Korns plaziert, um die Aktivierung möglichst einfach zu machen und somit eine untere Grenze der Fließspannung zu erhalten. In der dreidimensionalen Simulation wurde der Ort der Versetzungen zufällig bestimmt, hier ist eine mittlere Fließspannung zu erwarten.
- **Die Berechnung von Spannungs–Dehnungskurven:** Spannungs–Dehnungskurven können in der dreidimensionalen Simulation direkt berechnet werden. Aus den zweidimensionalen Berechnungen kann durch Bestimmung der bei einer gegebenen Spannung aktiven Quellen ebenfalls eine Spannungsdehnungskurve konstruiert werden (Abschnitt 4.2.1.4). Ein Vergleich beider Verfahren ermöglicht eine Abschätzung der Wechselwirkung verschiedener Quellen, sowie eine Aussage über die Anzahl der aktiven Quellen.
- **Bestimmung der Kaltverfestigung:** Aus den Spannungs–Dehnungskurven kann die Verfestigungsrate bestimmt werden und mit experimentellen Daten verglichen werden.
- **Entlastungsversuche:** In den Simulationen von Spannungs–Dehnungskurven wird die angelegte Spannung erhöht wodurch Versetzungsquellen aktiviert werden. Entlastungsversuche lassen sich simulieren, wenn die angelegte Spannung nach Erreichen einer Maximalspannung erniedrigt wird. Interessant ist hier das Einsetzen der plastischen Verformung (Rückwärtsbewegung der Versetzungen) unter Entlastung im Vergleich mit experimentellen Versuchen.

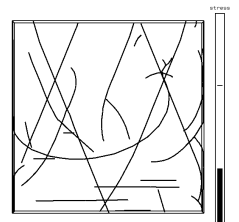


- **Wechselwirkungen zwischen Versetzungen in benachbarten Körnern** kann durch Simulation mehrerer Körner untersucht werden
- **Unterschiedliche Orientierungen und Spannungszustände** haben unterschiedliche Schmidfaktoren zur Folge. Hieraus können sich verschiedene mittlere Schmidfaktoren ergeben sowie eine Änderung der Anzahl aktiver Gleitsysteme.
- **Natur der Versetzungsquellen:** In der dreidimensionalen Simulation kann die Bedeutung der Seitenarme der Versetzungsquellen abgeschätzt werden. Außerdem können andere Realisierungen der Versetzungsquellen getestet werden.

5.3.1 Vergleich 3D Simulation – Quellenmodell

Basierend auf den Annahmen des Quellenmodells — wenige Quellen werden mehrfach aktiviert — lassen sich Spannungs–Dehnungskurven auf verschiedene Arten berechnen. Als einfachste Realisierung kann die Aktivierung einer einzelnen Quelle simuliert und die dabei erzeugte plastische Dehnung bestimmt werden (Einzelquellenrechnung, siehe z. B. Abbildung 4.22, S. 77). Hierfür wurde eine Quelle der Größe $s = h/4$ ausgewählt, da diese für wenige Aktivierungen die kleinste Aktivierungsspannung besitzt (Abschnitt 4.2). Sind die Versetzungsquellen über alle Größenbereiche verteilt, kann eine Spannungs–Dehnungskurve durch Summation über alle Quellen, die bei einer gegebenen Spannung aktiv sind, erhalten werden, wie in Abschnitt 4.2.1.4 dargestellt. Numerisch wird hier mit einer Versetzungsquellendichte pro Größenintervall gerechnet (die kleiner als eins sein kann). Die Gesamtanzahl der Quellen ergibt sich durch Summation über alle Größen und muß extern vorgegeben werden. Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Quellen werden in dieser Rechnung nicht berücksichtigt. Im Gegensatz dazu können in der 3D–Simulation (Abschnitt 4.3) mit mehreren (diskreten) Versetzungsquellen die Versetzungen miteinander reagieren (Versetzungsknotenbildung, Versetzungsschneidprozesse, Annihilation). Die Startkonfiguration einer 3D–Simulation wird per Zufallsgenerator bestimmt, so daß sich für unterschiedliche Konfigurationen Streuungen in den Spannungs–Dehnungswerten ergeben, die durch Mittelung über mehrere Simulationen verringert werden können. Analog dazu wird auch im Experiment eine Mittelung über verschiedene Körner durchgeführt (oder von einem gewissenhaften Experimentator zusätzlich über verschiedene Messungen).

Die Spannungs–Dehnungskurve für die einzelne Quelle, für die Summation über die aktiven Versetzungsquellen mit einer Gesamtquellenanzahl von $N_0 = 1$ und für die 3D–Simulation mit $N_0 = 40$ sind in Abbildung 5.6 eingetragen. Die Spannungen der Einzelquellenrechnung und der Summationsrechnung wurden mit einem Schmidfaktor $m = 0.41$ (mittlerer Schmidfaktor für uniaxialen Zug in einer $\{111\}$ Ebene) dividiert, die Dehnungen hiermit multipliziert, um einen Vergleich mit der 3D–Simulation zu ermöglichen. Die Summationsrechnung zeigt die größten Spannungen, da die Gesamtquellenanzahl von $N_0 = 1$ auf alle Quellengrößen (somit auch auf Quellen die nicht oder nur bei hohen Spannungen aktiviert werden) verteilt wurde. Eine einzelne Quelle mit der optimalen Quellengröße $s = h/4$ erzeugt daher bei niedrigeren Spannungen die entsprechende plastische Dehnung.



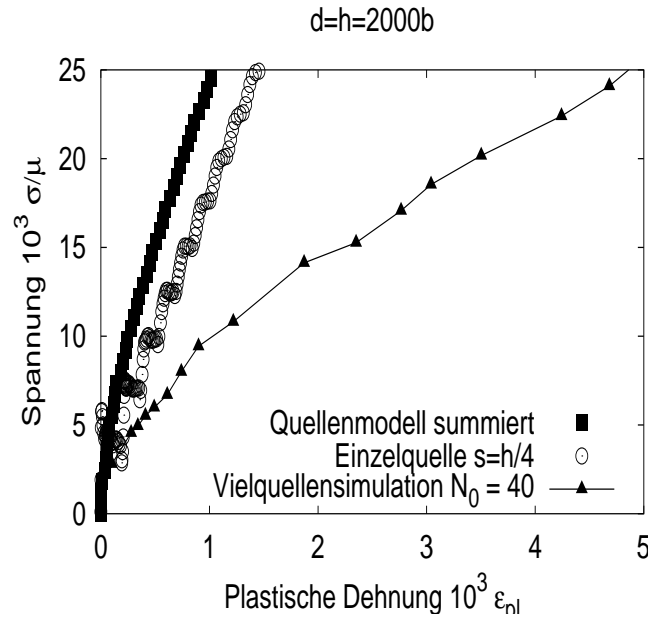


Abb. 5.6: Vergleich der Summation über das Quellenmodell (mit auf eins normierter Versetzungsanzahl) mit einer Einzelquellenrechnung und einer Vielquellensimulationen ($N_0 = 40$). Von der Spannungs–Dehnungskurve der Vielquellensimulation sind nur die lokalen Maxima gezeigt.

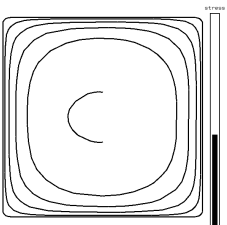
Die Spannungen der 3D–Simulation (Vielquellensimulation) sind viel geringer, da hier 40 Versetzungsquellen im Korn simuliert wurden, deren Beiträge zur plastischen Dehnung sich summieren. Zunächst soll nun der Spannungs–Dehnungsverlauf der Einzelquelle diskutiert werden, bevor versucht wird, die verschiedenen Spannungs–Dehnungskurven durch Anpassen der Anzahl der Versetzungsquellen aufeinander abzubilden.

5.3.1.1 Analytische Interpretation der Spannungs–Dehnungskurven

Die Kurve der einzelnen Quelle weist zwei verschiedene Steigungen auf. Im Anfangsbereich ist die Spannung durch die Aktivierung der Frank–Read Quelle τ_{FR} und die Rückspannung der aufgestauten Versetzungsringe gegeben. Die Aktivierungsspannung gibt den Achsenabschnitt, die Rückspannung bestimmt die Verfestigung. Sie ist proportional zur Anzahl der aufgestauten Versetzungsringe in der Gleitebene N_r dividiert durch die Aufstaulänge [167, S. 774] und wegen $N_r \approx (d/b)(\epsilon_{pl}/N_0)$ proportional zur plastischen Dehnung. Es folgt somit

$$\tau_1 = \tau_{FR} + c \frac{\epsilon_{pl}}{N_0}. \quad (5.4)$$

c ist eine Konstante, N_0 die Anzahl der Versetzungsquellen (hier der Skalierungsfaktor). Sobald die Frank–Read Quelle jedoch in zwei Spiralquellen übergeht, hängt τ_{source} auch von der plastischen Dehnung ab, da mit jedem emittierten Versetzungsring die effektive Größe



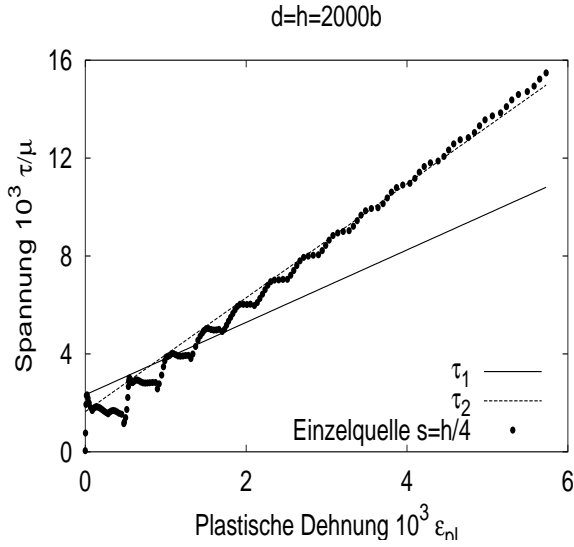


Abb. 5.7: Spannungs–Dehnungskurve der Einzelquellenrechnung zusammen mit Gleichung (5.4) und (5.6) für $d = h = 2000b$

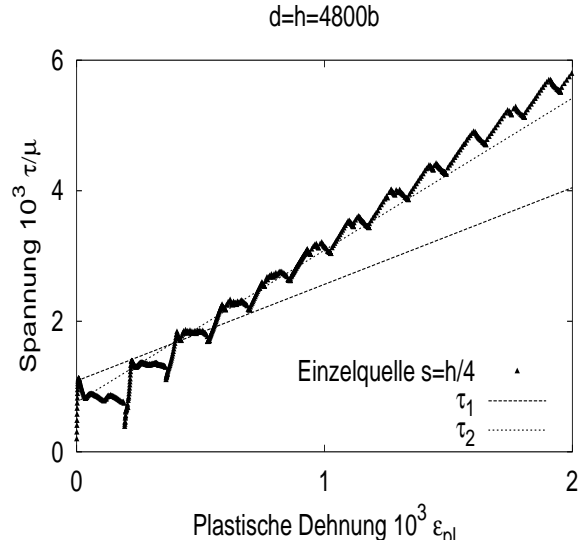


Abb. 5.8: Spannungs–Dehnungskurve der Einzelquellenrechnung zusammen mit Gleichung (5.4) und (5.6) für $d = h = 4800b$

der Quelle abnimmt.

$$\tau_2 = \tau_{\text{Spirale}} + c \frac{\epsilon_{\text{pl}}}{N_0}. \tag{5.5}$$

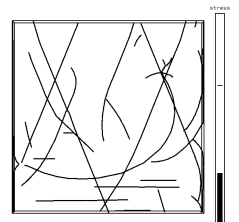
Setzt man für die Aktivierungsspannung τ_{Spirale} näherungsweise die Orowan–Gleichung $\tau = \mu b/p$ an, wobei $p = d/2 - s/2 - l$ der Abstand zwischen dem Festhaltepunkt der Versetzungsquelle und den an den Rändern aufgestauten Versetzungen der Breite $l = \mu b N_r / (\pi \tau)$ [167] ist, folgt in erster Näherung³:

$$\tau_2 = \frac{2\mu b}{d - s} + \left(\frac{2\mu}{\pi(1 - s/d)} + c \right) \frac{\epsilon_{\text{pl}}}{N_0}. \tag{5.6}$$

Abbildungen 5.7 und 5.8 zeigen Spannungs–Dehnungskurven von Einzelquellenrechnungen mit $s = d/4$ zusammen mit Gleichungen (5.4) und (5.6) für $d = h = 2000b$ und $d = h = 4800b$. Lediglich die Konstante c wurde an die ersten Quellenaktivierungspunkte für $d = h = 2000b$ angepaßt. Obwohl τ_1 und τ_2 nur grob überschlagen wurden, ist die Übereinstimmung mit den Simulationsdaten relativ gut.

In der 3D–Simulation und der Summationsrechnung ändert sich N_0 im Laufe der Verformung, da hier bei größeren Spannungen mehr Versetzungen aktiviert werden. Die Spannungszunahme ist deshalb nicht genau proportional zur Dehnungszunahme, dennoch lassen sich einige Ergebnisse dieser Simulationen mit der Hilfe von Gleichung (5.4) und (5.6) verstehen: Beide Gleichungen sagen eine von Schichtdicke bzw. Korngröße unabhängige

³Bei der Berechnung der Breite der Versetzungsaufstaus l wurde die Rückspannung der aufgestauten Versetzungen vernachlässigt.



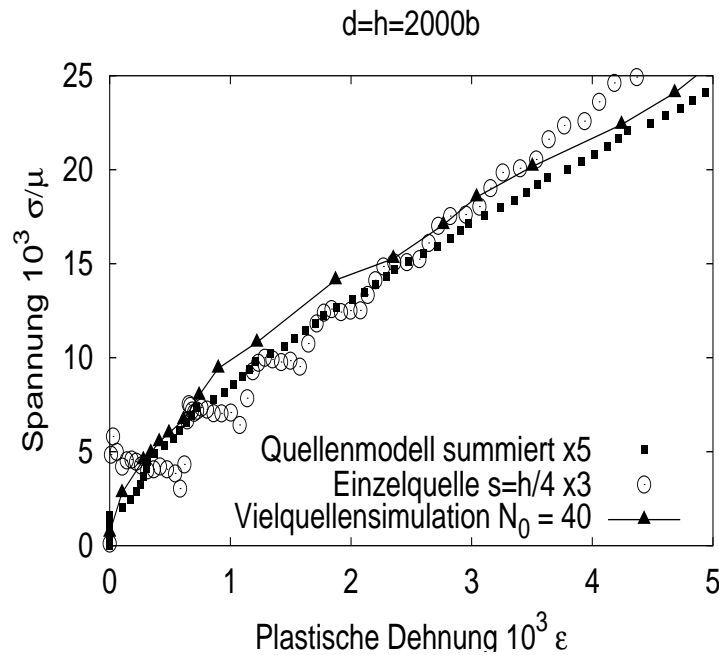
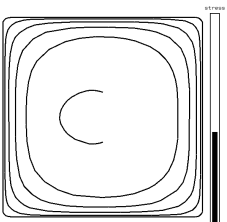


Abb. 5.9: Modellvergleich wie in Abbildung 5.6 mit Skalierung

Verfestigung voraus, wenn die Zahl der Versetzungsquellen N_0 ebenfalls unabhängig von h und d ist und s mit h bzw. d skaliert. Dies ist auch für die Summationsrechnung (Abbildung 4.32, S. 84) und für die 3D-Simulation (Abbildung 4.51, S. 99) zu beobachten. In einer freistehenden Schicht können die Versetzungen die Schicht an der Unter- und Oberseite verlassen, die Rückspannung der aufgestauten Versetzungen halbiert sich ($c \rightarrow \frac{1}{2}c$), wenn $h = d$. In der Summationsrechnung in Abbildung 4.31, S. 83 ist auch nahezu eine Halbierung der Spannung zu beobachten. Hier ist die Quelle so orientiert, daß der Effekt der freien Oberflächen am größten ist. In einer zufälligen Verteilung fällt die Abnahme geringer aus, wie die 3D-Simulation in Abbildung 4.63, S. 108 zeigt.

5.3.1.2 Abhängigkeit der plastischen Dehnung von der Anzahl der Versetzungsquellen

Um festzustellen, wieviel unabhängige, optimal platzierte Versetzungsquellen benötigt werden, um die plastischen Dehnungen der 3D-Simulation zu erreichen, wurde in Abbildung 5.9 die plastische Dehnung der Einzelquellenrechnung und der Summationsrechnung so skaliert, daß die Spannungswerte mit der 3D-Simulation zusammenfallen. Drei unabhängige Versetzungsquellen der Größe $s = h/4$ (zentral im Korn positioniert) erzeugen nach Abbildung 5.9 die gleiche plastische Dehnung bei vorgegebener Spannung wie 40 zufällig verteilte Versetzungen, die miteinander wechselwirken und reagieren können. Bei großen Dehnungen nehmen die Spannungswerte der Einzelquellenrechnung relativ zur 3D-Simulation zu,



da mit zunehmender Anzahl der emittierten Versetzungsringe die Quellengröße $s = h/4$ nicht mehr der Größe mit der niedrigsten Aktivierungsspannung entspricht (vergl. Abbildung 4.24, S. 78). Bei einer Verteilung der Quellen über alle Größen reichen insgesamt fünf Versetzungsquellen aus, um den gleichen Spannungs–Dehnungsverlauf wie in der 3D–Simulation mit 40 Quellen zu erhalten. Aufgrund der Verteilung über alle Quellenbereiche — also auch über die ungünstigen — ist eine größere Quellenanzahl nötig als für die Einzelversetzungsrechnung. Allerdings ist deshalb die Übereinstimmung mit der 3D–Simulation bei großen Dehnungen besser.

Abbildung 5.10 zeigt die Versetzungskonfiguration für die in Abbildung 5.9 dargestellte 3D–Simulation nach 0.47% plastischer Dehnung. Es ist zu erkennen, daß von den 40 vorhandenen Quellen nur neun mehrfach aktiv waren. In kubisch flächenzentrierten Metallen gibt es drei verschiedene Burgersvektoren und vier Gleitebenen, so daß zwölf unterschiedliche Gleitsysteme mit i. d. R. unterschiedlichen Schmidfaktoren resultieren. In einer $\langle 111 \rangle$ texturierten Schicht wird unter uniaxialem Zug parallel zur Schichtebene keine Kraft auf Versetzungen, die auf einer zur Schichtebene parallelen Gleitebene liegen, ausgeübt, so daß nur $\frac{3}{4}$ der vorhandenen Versetzungsquellen aktiv sind. Versetzungsquellen, die nicht die optimale Größe haben (vergleiche mit Abschnitt 4.2.1), Quellen, die zu dicht am Rand liegen und deshalb schnell blockieren und kleine Schmidfaktoren sind weitere Gründe, warum Quellen nicht oder erst bei hohen Spannungen aktiviert werden.

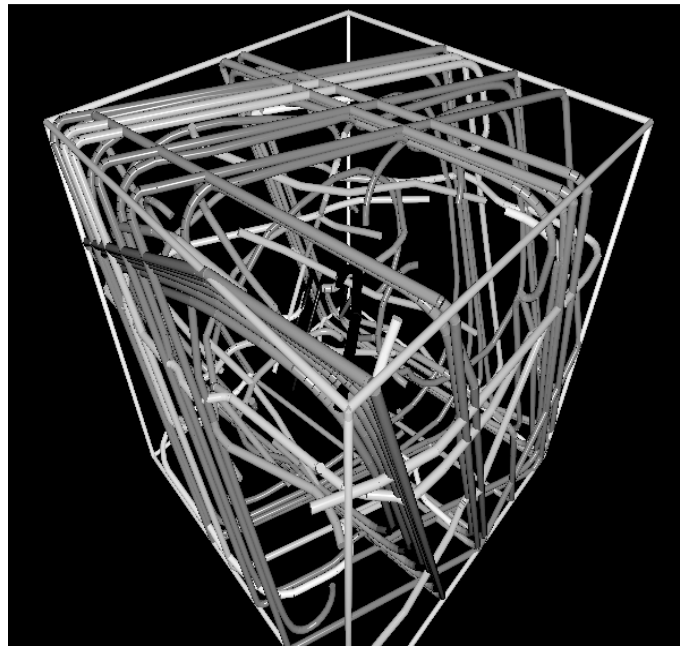
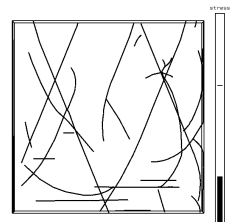


Abb. 5.10: Versetzungskonfiguration der 3D–Simulation mit $N_0 = 40$ bei einer plastischen Dehnung von $\epsilon_{pl} = 0.47\%$

In den gezeigten Simulationen ist der Verlauf der Spannungs–Dehnungskurve abhängig von der Anzahl der Versetzungsquellen. Die plastische Dehnung der Einzelquellenrechnung



und der Summationsrechnung skaliert direkt mit der Anzahl der Versetzungsquellen. Dies ist in der 3D-Simulation nur der Fall, wenn die Wechselwirkung zwischen Versetzungen verschiedener Quellen gegenüber der Aktivierung der Quellen vernachlässigbar ist. Abbildung 4.45, S. 96 verdeutlicht den Zusammenhang zwischen Spannung bei fester plastischer Dehnung und der Quellenanzahl N_0 . Wenn $N_0 < 40$ ist, ist die Spannung innerhalb der Streubreite der verschiedenen Startkonfigurationen proportional zu $1/N_0$, hier operieren die Quellen unabhängig voneinander, die Verfestigung wird durch die Rückspannung der an den Rändern aufgestauten Versetzungen auf die entsprechende Quelle verursacht. Für $N_0 > 60$ ist die Spannung nahezu unabhängig von der Versetzungsquellenanzahl. Einerseits nimmt hier die Spannung aufgrund der Wechselwirkung der verschiedenen Quellen zu, andererseits sind für $N_0 > 60$ nahezu alle Versetzungsringe, die erzeugt werden müssen, um eine Dehnung von 0.5% zu bekommen, auf einzelne Quellen verteilt, so daß eine weitere Zunahme der Quellenanzahl keine deutliche Verfestigungsreduktion mehr erbringt.

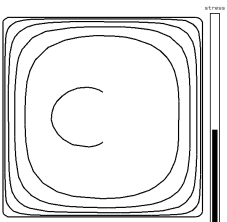
5.3.2 Vergleich mit experimentellen Daten

In Unterkapitel 5.2.1 wurden die Fließspannungen, berechnet nach dem Quellenmodell, bereits mit experimentellen Daten verglichen, und es wurde eine gute Übereinstimmung gefunden. Mit den Vorgaben des Quellenmodells — wenige Versetzungsquellen werden mehrfach aktiviert — lassen sich 3D-Simulationen durchführen, die weitere Ergebnisse liefern, die mit Experimenten verglichen werden können. So können z. B. Spannungs-Dehnungskurven, Verfestigungsraten oder Versetzungsdichten berechnet und mit experimentellen Daten verglichen werden.

5.3.2.1 Spannungs-Dehnungskurven

In Abbildung 5.11 sind verschiedene simulierte Spannungs-Dehnungskurven zusammen mit der Spannungs-Dehnungskurve einer Kupferschicht auf einem Polyimid-Substrat, die im Mikrozugversuch bestimmt wurde, dargestellt. Die Kupferschicht hatte eine Schichtdicke von $h = 1\mu\text{m}$ und eine Korngröße von $d = 0.6\mu\text{m}$ [30]. Diese Abmessungen sind auch in den Simulationen verwendet worden. Die Simulationen wurden mit verschiedenen Randbedingungen durchgeführt: mit undurchdringbaren Grenzflächen ($N_0 = 30$, Würfelgeometrie), freien Oberflächen an der Ober- und Unterseite ($N_0 = 40$) und mit freien Oberflächen und acht Nachbarkörnern mit 30 Versetzungsquellen pro Korn (vergl. Abschnitt 4.3.6).⁴ Die simulierten Spannungen sind bei allen Dehnungen größer als im Experiment gemessen. Bei kleinen plastischen Dehnungen ist dabei jedoch zu berücksichtigen, daß die experimentellen Daten hier mit großen Fehlern behaftet sind, was an der Streuung der Daten in

⁴In der Simulation mit Nachbarkörnern wurden aus Effizienzgründen keine Versetzungen auf Gleitebenen parallel zur Grenzfläche eingesetzt, da diese keinen Beitrag zur plastischen Dehnung leisten. Hierdurch wird die Hinderniswirkung dieser Versetzungen unterschlagen, die aber im Vergleich zur Aktivierungsspannung vernachlässigbar klein ist. Außerdem wurden nur Versetzungsquellen mit $s < h/2$ verwendet, da größere Quellen schnell blockieren und dann keine Versetzungen mehr erzeugen. Hierdurch wird die erst bei höheren Spannungen einsetzende plastische Verformung bedingt (siehe Abschnitt 4.3.3.1).



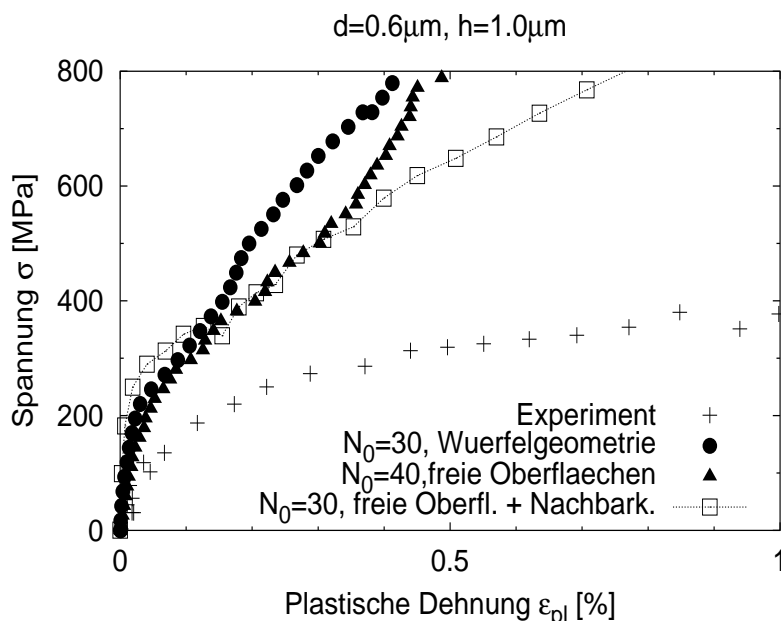
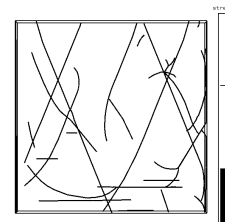


Abb. 5.11: Vergleich der Spannungsdehnungskurven aus Experiment [30] und Simulation. Die Simulation wurde mit undurchdringbaren Grenzflächen (Würfelgeometrie), mit freien Oberflächen und freien Oberflächen sowie acht Nachbarkörnern durchgeführt.

Abbildung 5.11 zu erkennen ist. Außerdem ist die experimentelle Korngröße nur ein Mittelwert. Es wird größere Körner geben, die eher zu fließen beginnen (da die Korngröße hier auch kleiner als die Schichtdicke ist), wodurch die größere plastische Dehnung bei geringen Spannungen im Experiment bedingt wird. Die Größenverteilung der Versetzungsquellen hat ebenfalls einen Einfluß auf das Einsetzen der plastischen Verformung. In der Simulation wurde von einer homogenen Verteilung der Versetzungsquellen ausgegangen, d. h. alle Quellengrößen sind gleich wahrscheinlich. Sind jedoch größere Quellen wahrscheinlicher (oder ist die Quellenanzahl insgesamt größer), ist ein flacherer Anstieg zu Beginn der Verformung zu beobachten (s. Abschnitt 4.3.3.1).

Im Experiment ist für plastische Dehnungen größer als 0.5% keine Verfestigung mehr zu beobachten, die Spannung bleibt konstant. In der Simulation fehlt offensichtlich ein Erholungsmechanismus, hier steigt die Spannung mit der plastischen Dehnung kontinuierlich an. Die Spannung ist geringer in der Simulation mit freien Oberflächen als in der Simulation in der Würfelgeometrie. Hier kann die Hälfte der Versetzungen an den Oberflächen aus dem Korn austreten. Die von den verbleibenden Versetzungen, die an den Korngrenzen aufstauen, verursachte Verfestigung ist aber immer noch sehr groß. Die Simulation mit den Nachbarkörnern zeigt, daß diese Verfestigung auch nicht wesentlich verringert wird, wenn Versetzungen von beiden Seiten gegen eine Korngrenze laufen können und sich dadurch die Spannungsfelder in den benachbarten Körnern kompensieren.

Abbildung 5.12 vergleicht die Versetzungsdichten in Simulation (Würfelgeometrie und



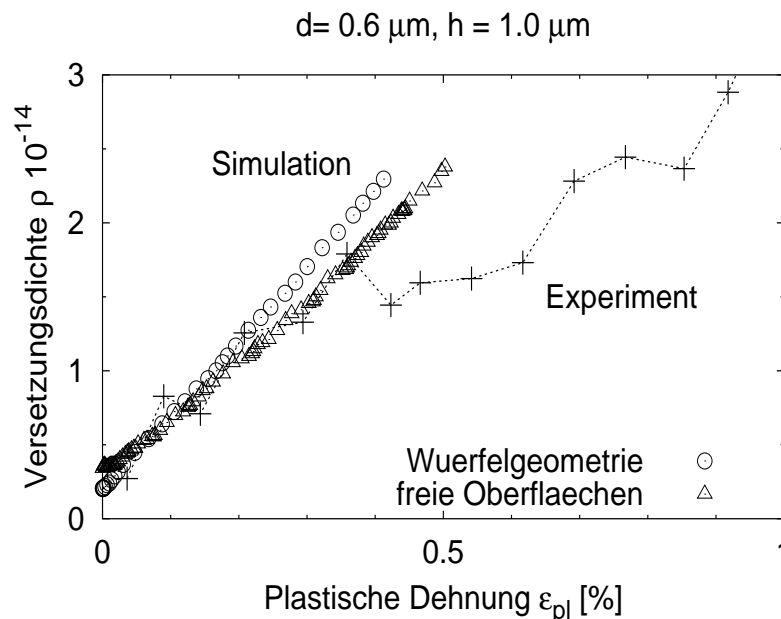
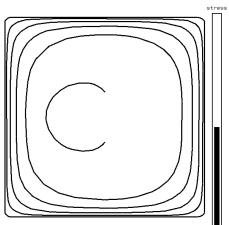


Abb. 5.12: Vergleich der Versetzungsdichten über der plastischen Dehnung aus Experiment [30] und Simulation (ohne Nachbarkörner) aus Abbildung 5.11

freie Oberflächen, jeweils ohne Nachbarkörner) und Experiment für den in Abbildung 5.11 dargestellten Spannungs–Dehnungsversuch. Die experimentelle Versetzungsdichte wurde aus der Differenz der Breite der Röntgenpeaks zu Beginn und während der Deformation bestimmt, weshalb die Werte nicht als absolut anzusehen sind, sondern die Änderung der Versetzungsdichte wiedergeben [30]. Zu Beginn der Verformung ist ein starker Anstieg der Versetzungsdichte zu beobachten, für plastische Dehnungen $\epsilon_{pl} > 0.4\%$ ist der Anstieg weniger stark. Die Versetzungsdichte im ersten Verformungsbereich stimmt sehr gut mit den Simulationsergebnissen überein. Der Anstieg der Versetzungsdichte mit der plastischen Dehnung ist für die Würfelgeometrie etwas größer als für die Simulation mit freien Oberflächen, da in letztgenannter Versetzungen das Simulationsvolumen verlassen können. Allerdings ist der Unterschied nicht groß genug, bzw. die experimentellen Daten nicht genau genug, als daß hieraus eine Aussage über die Natur der Grenzflächen gemacht werden könnte.

Ebenso wie das Erreichen eines konstanten Spannungsniveaus kann die Simulation nicht den verminderten Anstieg der Versetzungsdichte für $\epsilon_{pl} > 0.4\%$ reproduzieren. Die Koinzidenz des Abknickens der Versetzungsdichte mit dem Erreichen des Spannungsniveaus spricht für einen bei einer plastischen Dehnung von $\epsilon_{pl} > 0.4\%$ einsetzenden Relaxationsmechanismus, der in der Simulation nicht berücksichtigt ist. Denkbar ist hier z. B., daß die Spannungskonzentrationen durch Versetzungsaufstaus an den Korngrenzen so groß werden, daß Versetzungen durch die Korngrenzen durchtreten oder neue Quellen aktiviert werden, wie im Hall–Petch Modell beschrieben. Auf diesen Aspekt wird in Abschnitt 5.4



noch genauer eingegangen.

5.3.2.2 Verfestigungsraten

Abbildung 5.13 zeigt die Abhängigkeit der Verfestigungsrate H_{pl} von der Schichtdicke gewonnen aus verschiedenen experimentellen Daten. Die Verfestigungsrate aus dem Mikrozugversuch wurde aus der Differenz der Spannungen bei 0.1% und 0.2% plastischer Dehnung berechnet, um so einen maximalen Verfestigungswert zu bekommen (siehe Abbildung 5.11). Die Verfestigung aus den Substrat–Krümmungsexperimenten wurde als die Steigung der Abkühlkurve zwischen $T = 250^\circ\text{C}$ und $T = 100^\circ\text{C}$ eines Spannungstemperaturzyklusses bestimmt. Bei Temperaturen unterhalb $T = 250^\circ\text{C}$ frieren Diffusions- und Kletterprozesse ein, die plastische Verformung wird alleine von gleitenden Versetzungen getragen und entspricht näherungsweise der Verformung zu Beginn eines Mikrozugversuches.⁵ Thermische Aktivierung wurde nicht berücksichtigt, ebenso wurde die Temperaturabhängigkeit der elastischen Konstanten vernachlässigt.

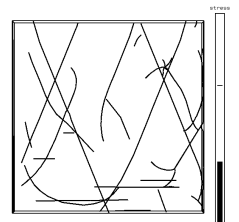
Die Daten in Abbildung 5.13 zeigen eine klare Abnahme der Verfestigung mit zunehmender Schichtdicke, das Skalierungsverhalten ist aber nicht eindeutig erkennbar. Die Abhängigkeit der Verfestigung liegt zwischen $1/h$ und $1/h^2$. Die im Mikrozugversuch gewonnenen Verfestigungsraten sind für $h < 1\mu\text{m}$ kleiner als die Substrat–Krümmungsdaten. Unterschiede zwischen passivierten und nicht passivierten Schichten lassen sich anhand der dargestellten Datenpunkte nicht festmachen.

Nach der einfachen Modellvorstellung von Abschnitt 5.3.1.1 hängt die Verfestigung nur von der Blockade der einzelnen Versetzungsquellen ab, die Wechselwirkung zwischen Versetzungen verschiedener Quellen ist vernachlässigbar, solange die Quellenanzahl klein ist. Wird die Änderung der Anzahl der aktiven Versetzungsquellen N_0 mit der Spannung nicht berücksichtigt, ist die Spannung proportional zur Gesamtdehnung ϵ_{pl} dividiert durch N_0 zuzüglich der Spannung σ_0 zur ersten Aktivierung der Quellen, die mit $1/h$ bzw. $1/d$ skaliert (siehe Gleichung (5.4) und (5.6)).

$$\sigma \sim \sigma_0 + c' \frac{\epsilon_{pl}}{N_0}. \quad (5.7)$$

Die Verfestigung ($\Delta\sigma/\Delta\epsilon_{pl}$) hängt somit von der Änderung der Versetzungsquellenanzahl N_0 mit der Schichtdicke bzw. Korngröße ab. Unter der Annahme, daß es eine von den Kornabmessungen unabhängige Dichte der Versetzungsquellen ρ_0 gibt, folgt $N_0 \sim \rho_0 h^2$ (mit $d = h$), wenn ρ_0 als Quellenanzahl pro Fläche angegeben wird (was der Fall ist, wenn die Quellendichte proportional zu einer nach dem Auslagern übriggebliebenen Versetzungsdichte ist). Auf eine $N_0 \sim \rho_0 h$ Abhängigkeit führt eine konstante Versetzungsdichte (Versetzungslänge pro Grenzfläche) in den Korngrenzen und Grenzflächen des Korns, da

⁵ Die Gesamtdehnung, die die Metallschicht beim Abkühlen von $T = 250^\circ\text{C}$ auf $T = 40^\circ\text{C}$ erfährt, ist $\epsilon_{tot} = \Delta\alpha\Delta T = 0.3\%$. Die Spannung der Schicht ändert sich dabei um ca. $\Delta\sigma = 300\text{MPa}$ (nicht passivierte Schicht mit $h = 600\text{nm}$ [13]). Hierbei erfolgt eine zusätzliche elastische Dehnung von $\epsilon_{el} = \Delta\sigma/M \approx 0.1\%$ und eine plastische Dehnung, die hauptsächlich durch Versetzungsbewegung getragen wird, von $\epsilon_{pl} = \epsilon_{tot} - \epsilon_{el} \approx 0.2\%$.



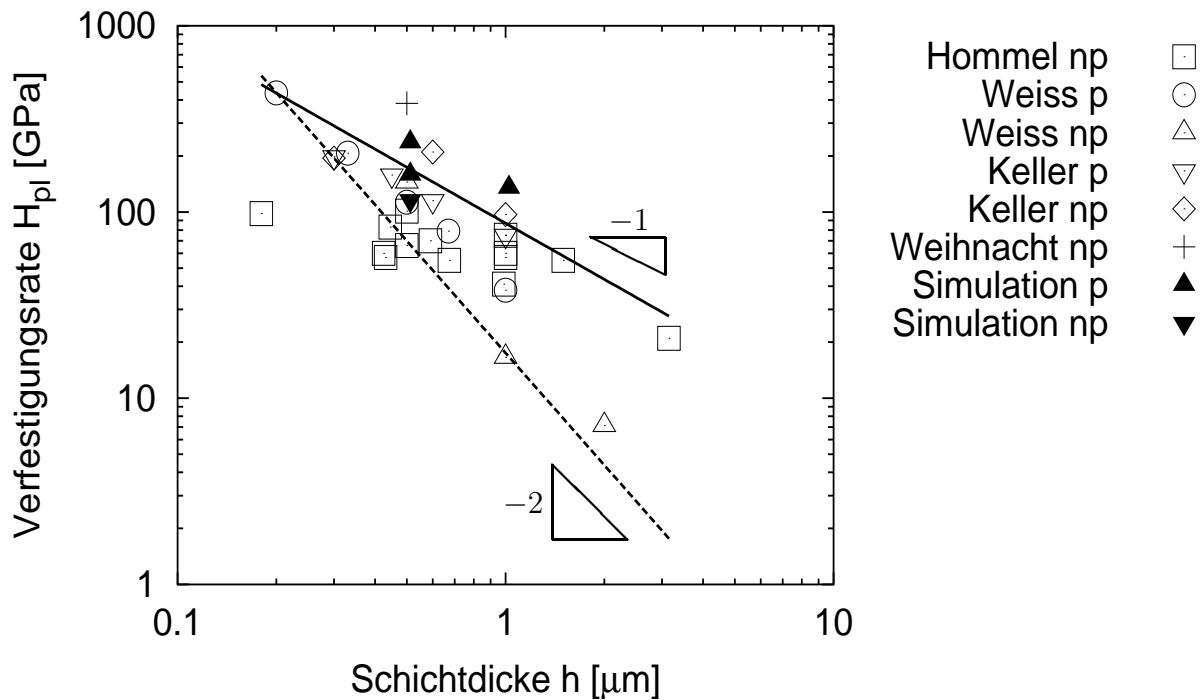
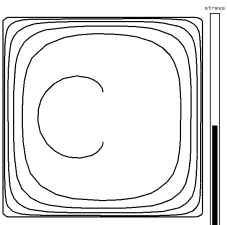


Abb. 5.13: Doppelt logarithmische Auftragung von experimentellen Verfestigungsraten (Spannungsänderung über plastischer Dehnung) aus Mikrozugversuchen (Hommel: Kupfer ohne Passivierung, Differenz der Spannung bei 0.2% und 0.1% plastischer Dehnung [94]) bzw. Substrat-Krümmungsexperimenten (Weiss p: Selbstpassivierte Cu-1%Al Schicht [173]; und Weiss np: UHV Kupferschicht ohne Passivierung [16]; Keller: passivierte und nicht passivierte Kupferschichten [174]; Weihnacht: nicht passivierte Kupferschicht [49]). Eingezeichnet sind ebenfalls mit der 3D-Simulation berechnete Datenpunkte (p = Würfelgeometrie, np = freistehende Schicht). Die Linien verdeutlichen verschiedene Abhängigkeiten der Verfestigung von der Schichtdicke.

diese Flächen mit h^2 skalieren. Die experimentellen Daten lassen nicht auf eine eindeutige Abhängigkeit schließen, aber eine $1/h$ oder $1/h^2$ Abhängigkeit erscheint plausibel.

Zum Vergleich sind in Abbildung 5.13 auch mit der 3D-Simulation berechnete Verfestigungsraten eingetragen (berechnet aus der mittleren Steigung im Bereich von $\epsilon_{pl} = 0.1\%$ bis $\epsilon_{pl} = 0.5\%$ der Spannungs-Dehnungskurven in den Abbildungen 4.63, S. 108 und 4.50, S. 99). Die simulierten Verfestigungsraten der Schicht in der Würfelgeometrie sind größer als die experimentellen Daten, da hier alle Versetzungen im Simulationsvolumen verbleiben und außer der Annihilation von Versetzungen mit gleichem Burgersvektor am gleichen Ort keine Relaxationsmechanismen (z. B. Quergleiten) implementiert sind. Die simulierte Verfestigung der freistehenden Schicht ist kleiner als die der Würfelgeometrie und nur wenig größer als die Daten aus dem Mikrozugversuch (Hommel [94]). Die Änderung der simulierten Verfestigung mit der Schichtdicke ist ungefähr proportional zur inversen Schichtdicke. Da die Versetzungsdichte (Quellen pro Fläche) hier konstant gesetzt wurde, wäre nach der



einfachen Modellbeschreibung (Gleichung 5.7) eine $1/h^2$ Abhängigkeit zu erwarten. Die Simulationsergebnisse zeigen jedoch, daß die Anzahl der aktiven Quellen N_0 nicht, wie oben angenommen, unabhängig von der Spannung ist. Bei höheren Spannungen werden neue Quellen aktiv, deren Aktivierungsspannungen proportional zur inversen Schichtdicke sind, wodurch die beobachtete Abhängigkeit resultiert.

Abbildung 5.13 zeigt eine größere Verfestigungen in Substrat–Krümmungsexperimenten verglichen mit den Mikrozugversuchsdaten. Hier muß aber berücksichtigt werden, daß der mittlere Schmidfaktor der $\langle 111 \rangle$ Körner (der häufigsten Texturkomponente) unter biaxialem Zug kleiner als unter uniaxialem Zug ist, was eine größere Verfestigung zur Folge hat (siehe Abschnitt 4.3.4).

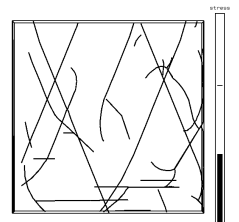
5.3.2.3 Bauschinger Effekt

Wenn eine Probe plastisch über die Streckgrenze verformt wird und anschließend nach der Entlastung in der entgegengesetzten Richtung belastet wird, ist im entgegengesetzten Belastungsfall häufig schon bei niedrigeren Spannungen ein Einsetzen des Fließens zu beobachten. Dieser sogenannte Bauschinger Effekt wird in dünnen Schichten besonders ausgeprägt beobachtet, oft beginnt die plastische Verformung in der Entlastungsphase bereits bevor die Probe vollständig entlastet ist und die Belastungsrichtung umgedreht wird [25,175,176]. In Abbildung 5.14 ist die Be- und Entlastungskurve einer dünnen Kupferschicht auf Polyimid Folie gemessen im Mikrozugversuch dargestellt [177]. Die Spannung ist hier über der Gesamtdehnung aufgetragen. Die plastische Verformung setzt im Entlastungszweig bereits unter Zugspannungen ein, was an der Abweichung der Entlastungskurve von der elastischen Geraden zu erkennen ist.⁶ Ebenfalls eingetragen ist eine unter den Annahmen des Quellenmodells simulierte Be- und Entlastungskurve einer freistehenden Schicht (aus Abbildung 4.64, S. 109). Da, wie bereits in Abschnitt 5.3.2.1 festgestellt, die Simulation den Bereich der Verformung bei großen plastischen Dehnungen ohne wesentliche Spannungszunahme nicht wiedergibt, wurde die Kurve bei der Maximalspannung aufgeschnitten und der Entlastungsast zu größeren Dehnungen verschoben.

Auch in der Simulation ist das Einsetzen der plastischen Verformung während der Entlastung bereits im Zugbereich deutlich zu erkennen. In der Belastungsphase stauen die Versetzungen an den Korngrenzen auf. Wird die Spannung zurückgefahren, bewegen sich die Versetzungen angetrieben durch die gegenseitige Abstoßung rückwärts. Diese Rückwärtsbewegung setzt aber nicht sofort bei Erniedrigung der Spannung ein, da der schwierigste Schritt der Verformung die Aktivierung der Versetzungsquellen ist, und die Versetzungen bei niedrigeren Spannungen bereits gegen die Grenzflächen laufen (und dort liegenbleiben).

Abbildung 5.15 zeigt die Versetzungsdichte über der Gesamtdehnung für die Simulation

⁶Druckspannungen können im Mikrozugversuch erreicht werden, indem ein nachgiebiges Substrat verwendet und die Dehnung nur über die Schicht–Substrat Grenzfläche auf die Schicht übertragen wird. Das Substrat verformt sich elastisch, während die Schicht im Zug bereits plastisch verformt wird. Beim Entlasten steht das Substrat noch unter Zugspannungen, wenn die Schicht bereits den lastfreien Zustand erreicht hat. Bei weiterer Entlastung des Gesamtsystem erzeugt das (dickere) Substrat daher Druckspannungen in der Schicht [29].



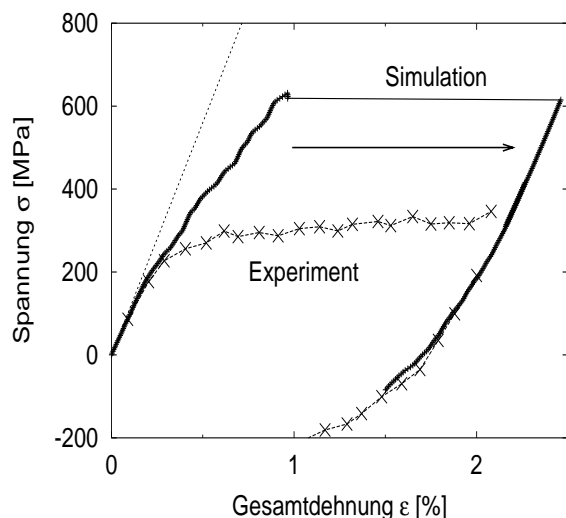


Abb. 5.14: Spannung über Gesamtdehnung bestimmt im Mikrozugversuch ($h = 1\mu\text{m}$, $d \approx h$) [177] und in der Simulation ($d = h = 0.5\mu\text{m}$, $N_0 = 30$). Der Ast für abnehmende Belastung der Simulationsrechnung wurde zu größeren Dehnungen verschoben, um einen Vergleich mit den experimentellen Daten zu ermöglichen. Eingezeichnet ist auch die elastische Gerade.

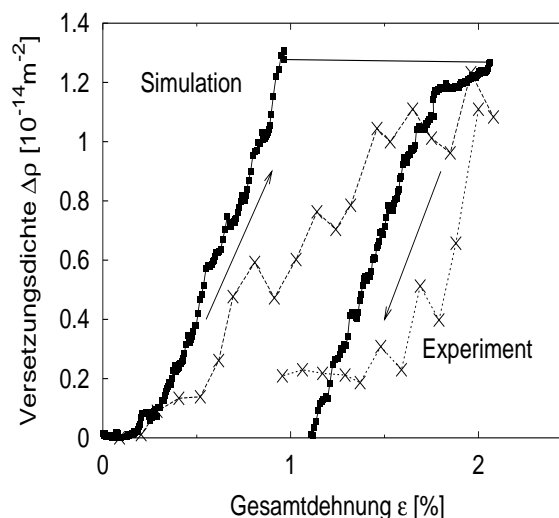


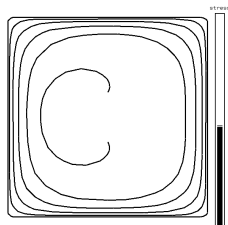
Abb. 5.15: Änderung der Versetzungsdichte über Gesamtdehnung bestimmt im Mikrozugversuch ($h = 1\mu\text{m}$, $d \approx h$) [177] und in der Simulation ($d = h = 0.5\mu\text{m}$, $N_0 = 30$). Die Pfeile kennzeichnen die Be- bzw. Entlastungsrichtung.

und das Experiment aus Abbildung 5.14. Für kleine Dehnungen ist wieder ein starker Anstieg der experimentellen Versetzungsdichte zu beobachten, der geringer wird, sobald die Spannung das Maximalniveau erreicht (vergl. Abschnitt 5.3.2.1). Im Experiment wie auch in der Simulation ist zu beobachten, daß die Versetzungsdichte zu Beginn der Entlastung konstant bleibt und erst später (bei niedrigeren Spannungen) abfällt. Dieser Abfall ist auf die Rückwärtsbewegung und Annihilation der (während der Belastungsphase) aufgestauten Versetzungen zurückzuführen.

Die (qualitative) Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation spricht dafür, daß a) Versetzungen während der Verformung in der Schicht gespeichert werden und bei Reduzierung der Spannung zurücklaufen können, und b) daß während der Verformung unter Belastung kritische Konfigurationen von den Versetzungen überwunden werden müssen. Beide Aspekte sind im Quellenmodell berücksichtigt.

5.3.2.4 Schichtdickenabhängigkeit

In Abbildung 5.16 werden Fließspannungen aus verschiedenen Experimenten mit Simulationsdaten verglichen. Die Simulationen wurden für eine konstante (niedrige) Temperatur durchgeführt, bei der die plastische Verformung durch Versetzungsgleiten getragen wird. Deshalb bieten sich zum Vergleich Mikrozugversuche an, die ebenfalls bei konstanter Temperatur durchgeführt werden. Da hier jedoch nicht genug Daten vorliegen, wur-



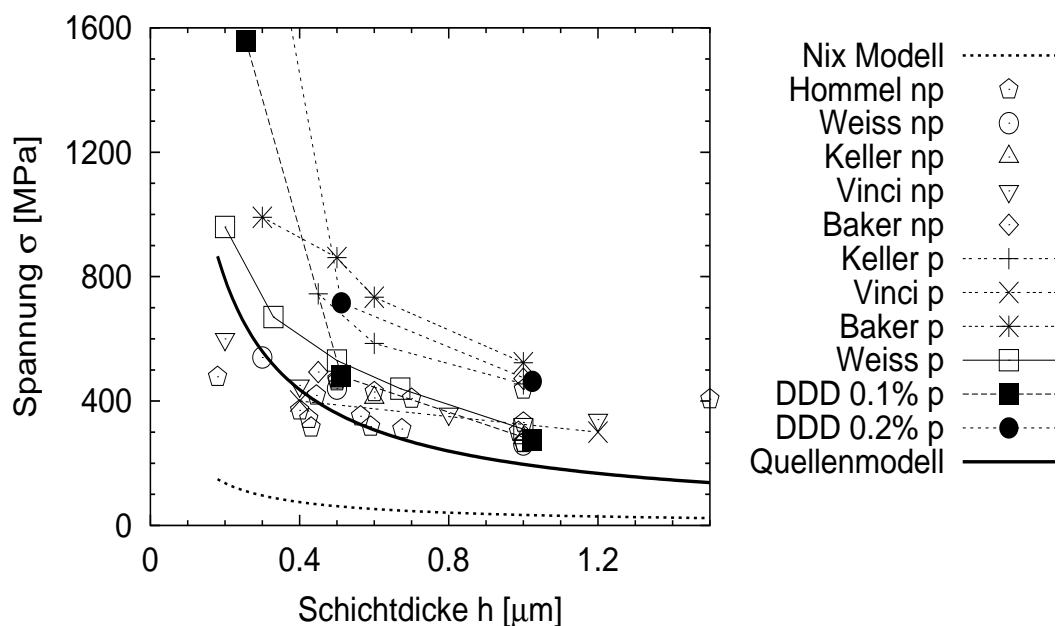
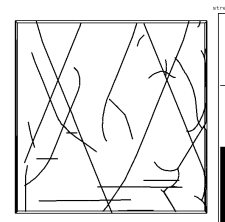


Abb. 5.16: Vergleich der Fließspannung für verschiedene Schichtdicken. Die Simulationsdaten (DDD) wurden für undurchdringbare Ränder mit einer konstanten Versetzungsquellendichte von $\rho = 0.76 \cdot 10^{14} m^{-2}$ berechnet (vergl. Abbildung 4.50). Die experimentell bestimmten Fließspannungen sind die Raumtemperaturspannungen in Substrat-Krümmungs Experimenten (Vinci [35], Keller [13], Weiss [173, 16], [31]) und die Spannungen bei 0.5% plastischer Dehnung aus Mikrozugversuchen (Hommel, [94]). Daten von passivierten (p) und nicht passivierten (np) Schichten sind dargestellt. Zum Vergleich ist auch das Nix Modell (Gleichung (2.4), mit Passivierung) sowie das Quellenmodell (Abschnitt 5.2.1) eingetragen.

den außerdem in Substrat-Krümmungsexperimenten gewonnene Fließspannungen mit in die Abbildung übernommen. Aus dem Mikrozugversuch wurden die Spannungen bei 0.5% plastischer Dehnung eingetragen, die Datenpunkte der Substrat-Krümmungsexperimente entsprechen der Spannung bei Zimmertemperatur (bzw. der niedrigsten Temperatur des Zyklusses von ca. $T = 40^\circ C$). In beiden Fällen ist durch die plastische Verformung bereits eine Verfestigung eingetreten. Geht man davon aus, daß die plastische Verformung für Temperaturen kleiner als $T = 250^\circ C$ vom Versetzungsgleiten getragen wird so erfolgt im Substrat-Krümmungsexperiment bei Abkühlung von $T = 250^\circ C$ auf Zimmertemperatur eine plastische Dehnung von ca. 0.2% (siehe Fußnote auf Seite 137).

Das bereits in Abbildung 5.3 eingetragene Quellenmodell gibt mit der Aktivierungsspannung einer Quelle der Größe $s = h/4$ eine untere Grenze der Fließspannung, da die Kaltverfestigung vernachlässigt wird. Diese wird in den 3D-Simulationen (DDD) berücksichtigt, die hier unter uniaxialer Belastung durchgeführt wurden. Es sind die Spannungswerte bei den plastischen Dehnungen $\epsilon_{pl} = 0.1\%$ und $\epsilon_{pl} = 0.2\%$ eingetragen (aus Abbildung



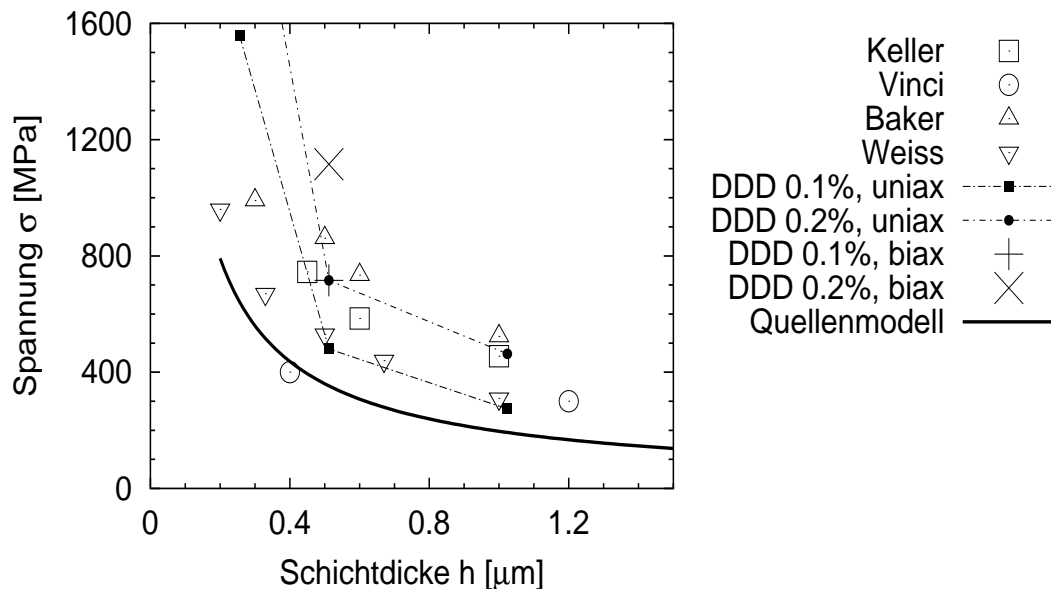


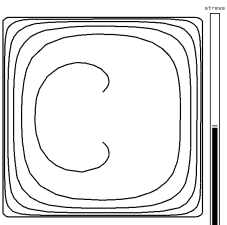
Abb. 5.17: Auszug aus Abbildung 5.16. Gezeigt sind nur Daten für Schichten mit einer Passivierung aus Substrat-Krümmungsexperimenten. Zusätzlich sind Simulationsdaten für eine biaxiale Belastung eingetragen.

4.50, S. 99). Die Versetzungsquellendichte ρ_0 [$1/\text{m}^{-2}$] wurde konstant gehalten.

Die simulierten Spannungen für die $d = h = 256\text{nm}$ dicke Schicht sind viel größer als im Experiment gemessen, da hier nur noch fünf Versetzungsquellen im Korn vorhanden sind, und die Wahrscheinlichkeit sehr groß ist, daß keine hiervon leicht zu aktivieren ist (siehe Abschnitt 4.3.1). Bevor diese hohen (berechneten) Spannungen erreicht werden, werden andere Verformungsmechanismen aktiviert, bzw. die Versetzungen werden durch die Korngrenzen durchtreten (siehe Abschnitt 5.4.2).

Der Spannungsabfall bei einer Verdoppelung der Schichtdicke von $h = 512\text{nm}$ auf $h = 1024\text{nm}$ (mit $d = h$) ist vergleichbar mit den experimentellen Ergebnissen, bei einer plastischen Dehnung von 0.2% sind die simulierten Fließspannungen bereits größer als im Mikrozugversuch gemessen. Übereinstimmung gibt sich hier mit den Substrat-Krümmungswerten, jedoch muß dabei berücksichtigt werden, daß unter biaxialer Spannung im Substrat-Krümmungsexperiment die Schmidfaktoren anders sind. Hierzu sind in Abbildung 5.17 Simulationsdaten aus einer Rechnung mit biaxialer Spannung ($d = h = 512\text{nm}$) zusätzlich eingetragen.

Im Gegensatz zu anderen Modellen zur Beschreibung der Dünnschichtplastizität — Nix Modell, Thompson Modell, Hall-Petch Modell mit den Parametern für das Volumenmaterial bzw. die Summe aus allen dreien — die allesamt zu geringe Spannungen vorhersagen, führen die Annahmen des Quellenmodells zu Fließspannungen, die größer sind als expe-



rimentell gemessen. Hierbei muß aber berücksichtigt werden, daß außer Rekombinationen von Versetzungen mit gleichem Burgersvektor (wenn sich diese am selben Ort treffen) noch keine Relaxationsmechanismen in Modell und Simulation berücksichtigt sind. Thermische Aktivierung, Quergleiten, Durchtritt der Versetzungen durch Korngrenzen, Versetzungsklettern sind Relaxationsmechanismen, die die Fließspannung absenken können und zu einer konstanten Spannung bei großen Dehnungen führen können. So wurde von Weihnacht und Brückner [49] im Substrat–Krümmungsexperiment bei einer konstanten Temperatur von 30°C eine Relaxation von 360 MPa auf 330MPa innerhalb von 47 Stunden beobachtet (500nm dicke Kupferschicht auf Siliziumsubstrat). Nach 15 Monaten bei Zimmertemperatur sank die Spannung in dieser Schicht auf 290MPa. Die verbleibende Spannung ist immer noch erheblich, jedoch zeigen die Experimente, daß es gewisse Spannungsrelaxationen auch bei niedrigen Temperaturen gibt, die zu niedrigeren experimentellen Fließspannungen führen, da die Messungen in einer endlichen Zeit durchgeführt werden.

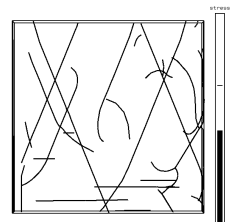
In Abbildung 5.16 ist anhand der Daten aus Substrat–Krümmungsexperimenten zu erkennen, daß die Fließspannungen passivierter Schichten größer sind als die nicht passivierter Schichten. Dies kann nach Abschnitten 4.3.5 und 5.3.2.2 auf die größere Verfestigung in passivierten Schichten zurückgeführt werden. Allerdings wird aber auch durch eine Passivierung die Oberflächendiffusion unterdrückt [13,33], wodurch die Spannung bei hohen Temperaturen nicht so stark relaxiert wird, und die Versetzungsbewegung auch schon bei höheren Temperaturen als $T = 250^\circ\text{C}$ einsetzt. Als Folge sind die Spannungen bei $T = 250^\circ\text{C}$ und auch bei Zimmertemperatur größer als in den nicht passivierten Schichten.

Im Gegensatz zu den Mikrozugversuchen, die bei Dehnungen $\epsilon_{\text{pl}} > 0.5\%$ ein Spannungsplateau aufweisen, wurde dieser Rückgang der Verfestigung in Substrat–Krümmungsexperimenten nicht beobachtet. Insbesondere wurde in Versuchen bei Temperaturen des flüssigen Stickstoffs festgestellt daß sich die Experimente am besten beschreiben lassen, wenn eine lineare Verfestigung bis zu diesen Temperaturen angenommen wird [176,49].

5.3.2.5 Einfluß der Textur

In Abschnitt 4.3.4 wurde der Einfluß der Orientierung der simulierten Körner untersucht. Unter uniaxialem Zug wurde für eine $\langle 111 \rangle$ Orientierung eine etwa 30% höhere Fließspannung verglichen mit der $\langle 001 \rangle$ Orientierung für eine Schichtdicke $h = 512\text{nm}$ gefunden. Dieser Unterschied ist größer als das Verhältnis der maximalen Schmidfaktoren (0.493/0.471) zuzüglich Berücksichtigung der unterschiedlichen Neigung der Gleitebenen (1.15) vermuten läßt ($\Rightarrow \sigma_{111} = 1.20 \sigma_{001}$). Experimentell wurden Verhältnisse von $\sigma_{111}/\sigma_{001}$ bei 0.5% plastischer Dehnung von 1.25 bis 2.3 gemessen [94]. Ein Teil dieser Differenz kann dadurch zustande gekommen sein, daß bei der Spannungsmessung die $\langle 001 \rangle$ Körner immer nach den $\langle 111 \rangle$ gemessen wurden und somit mehr Zeit zur Spannungsrelaxation hatten [94].

Unter biaxialer Spannung wurde in der Simulation eine Spannungserhöhung für eine $\langle 111 \rangle$ Orientierung bezüglich der $\langle 001 \rangle$ Orientierung um einen Faktor 1.7 bei 0.3% plastischer Dehnung (zunehmend mit zunehmender plastischer Dehnung) festgestellt. Das Verhältnis der Schmidfaktoren beträgt 1.5. In Substrat–Krümmungsexperimenten wurde bei Raumtemperatur in den $\langle 111 \rangle$ orientierten Körnern eine doppelt so große Spannung



wie in den $\sigma_{111}/\sigma_{001}$ Körnern gemessen [31].

Insgesamt ist der mit der Simulation berechnete Unterschied in den Fließspannungen für die zwei verschiedenen Orientierungen größer als das einfache Verhältnis der Schmidfaktoren. Dieser Umstand kann mit der einfachen Modellbeschreibung aus Abschnitt 5.3.1, in der die 3D-Simulation als Ansammlung von nicht miteinander wechselwirkenden Quellen, deren Verfestigung jeweils proportional zur plastischen Dehnung ist, behandelt wird, erklärt werden: Die Spannung, bei der die Plastizität (die Aktivierung der ersten Quellen) einsetzt, ist umgekehrt proportional zum mittleren Schmidfaktor der entsprechenden Orientierung. Die Verfestigung ist jedoch nach Abschnitt 4.3.4.1 umgekehrt proportional zum Quadrat des mittleren Schmidfaktors. Je nach Aktivierungsspannung der ersten Quellen und nach der verrichteten plastischen Dehnung ist ein Spannungsunterschied bis zu $(m_{001}/m_{111})^2 = (0.41/0.27)^2 = 2.3$, bzw. $(\bar{m}_{001}/\bar{m}_{111})^2 = (0.27/0.135)^2 = 4$ für biaxialen Zug möglich, wenn berücksichtigt wird, daß nur eine endliche Anzahl von Versetzungsquellen zur Verfügung steht und die Schmidfaktoren wie in Anhang B gemittelt werden. Zumindest anhand der einfachen Modellbeschreibung lassen sich die experimentell beobachteten Unterschiede in den Spannungen vom Betrag her verstehen, jedoch müßte für eine genaueres Modell noch die (elastische und plastische) Wechselwirkung zwischen benachbarten Körnern untersucht werden, insbesondere, wenn die elastischen Konstanten wie im Fall von Kupfer für die beiden Orientierungen stark unterschiedlich sind.

5.3.2.6 Vergleich mit TEM Beobachtungen

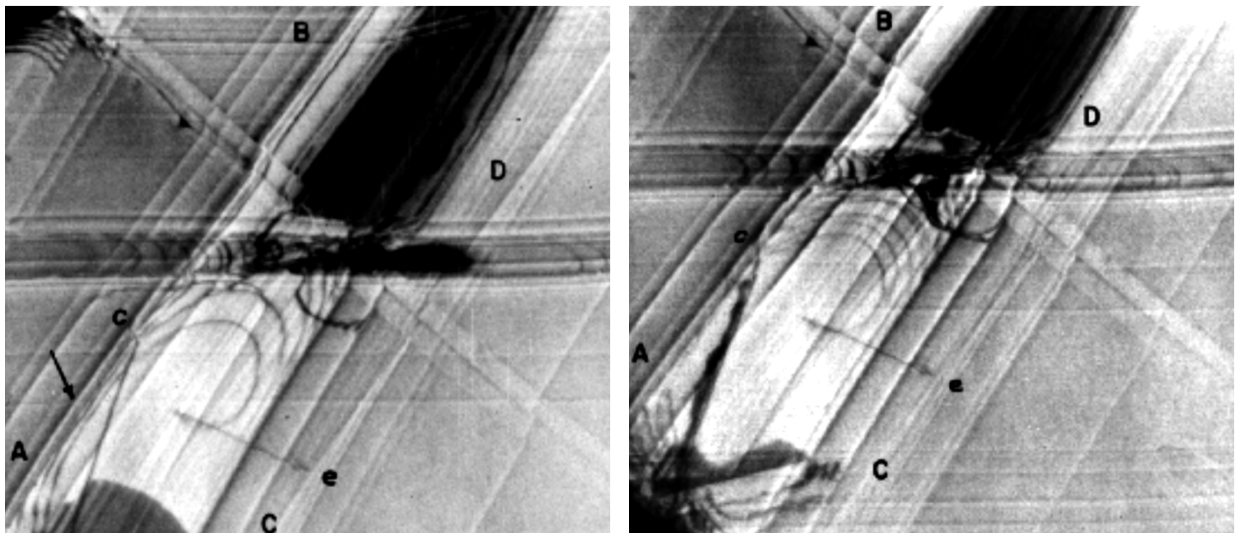
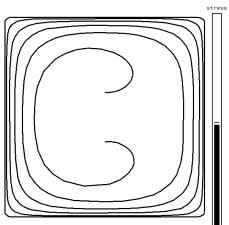


Abb. 5.18: TEM Bilder einer aktiven Spiralquelle in einer Edelstahlfolie [86]

Die in der Versetzungssimulation berechneten Versetzungskonfigurationen und deren zeitliche Entwicklung können gut mit Beobachtungen im Transmissionselektronenmikroskop verglichen werden. In der Simulation wurde von Frank-Read Quellen oder Spiralquellen ausgegangen, die sich im Inneren des Kornes befinden. Diese Annahme wird durch die



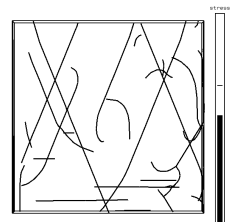
Beobachtung der Entstehung von Versetzungsringen im Inneren eines Kornes in Querschnittsansichten einer dünnen Kupferschicht [81, 82] bestätigt (siehe auch Abbildung 2.7, S. 27). Die Wirkungsweise einer Spiralquelle konnte ebenfalls im TEM verfolgt werden (Abbildung 5.18, [86]). Die im Korninneren entstandenen Versetzungsringe expandieren unter der angelegten Spannung und bewegen sich in Richtung der Grenzflächen und Korngrenzen [81, 82].

Versetzungen können auch aus Korngrenzen [76] oder Korngrenztripelpunkten emittiert werden [170, 178]. Dieser Versetzungserzeugungsprozeß wurde jedoch in der Simulation nicht berücksichtigt, da Versetzungsquellen in der Korngrenze sich nicht so einfach und eindeutig implementieren lassen wie z. B. Frank–Read Quellen, für die lediglich das Gleitsystem und der Abstand der Festhaltepunkte festgelegt werden muß. So ist nicht bekannt, wie groß die Aktivierungsspannungen der Quellen in den Korngrenzen sind, ob sich diese mehrfach aktivieren lassen oder wie ihre geometrische Anordnung ist. In Abschnitt 5.4 wird den Korngrenzen eine Durchbruchspannung zugeordnet, um der Transmission von aufgestauten Versetzungen oder der Aktivierung einer Versetzungsquelle ausgelöst durch die Spannungskonzentration eines Versetzungsaufstaus im Nachbarkorn Rechnung zu tragen. Die Spannungskonzentration durch den Versetzungsaufstau kann aber nur entstehen, wenn es im Korn Vervielfältigungsmechanismen von Versetzungen gibt. Ebenso wird in der Literatur argumentiert, daß nur in der Anfangsphase der plastischen Verformung solche Versetzungsquellen wichtig sind, die eigentliche Vervielfältigung der Versetzungen (Frank–Read Mechanismus) findet im Korninneren statt [60, 178].

Es wurde beobachtet, daß Korngrenzen und Zwillingsgrenzen Hindernisse für die Versetzungen sind, an denen diese liegenbleiben [21]. Die Hindernisstärke der Grenzflächen hängt von der Natur der Grenzflächen ab. In einigen Experimenten wurden Versetzungen an den Grenzflächen beobachtet [21, 10, 11, 76, 77, 49], die jedoch in einigen Fällen nach kurzer Bestrahlzeit mit dem Elektronenstrahl verschwinden [21, 11, 78]. In in situ TEM–Experimenten mit Querschnittsproben von Al bzw. Cu Schichten auf einem Siliziumsubstrat mit einer amorphen Zwischenschicht konnte keine Hinderniswirkung der Grenzfläche auf die Versetzungen festgestellt werden, die Versetzungen schienen hier die Schichten an den Grenzflächen verlassen zu können [80, 82]. In der Simulation wurden aufgrund dieser Beobachtungen die Korngrenzen und Grenzflächen als Hindernisse eingeführt, an denen die Versetzungen aufstauen. Um dem Verschwinden der Versetzungen an den Grenzflächen Rechnung zu tragen, wurden freistehende Schichten simuliert, deren Grenzflächen ebenfalls für die Versetzungen offen sind.

In situ TEM Untersuchungen zeigten ferner, daß die Versetzungen in der Schicht eine ruckartige Bewegung durchführen [84, 81], was auf das Vorhandensein von Hindernissen innerhalb der Schicht rückschließen läßt. In der Simulation wird ebenfalls dieser Bewegungstyp beobachtet. Die Versetzungen verharren lange in der kritischen Konfiguration der Frank–Read bzw. Spiralquelle und bewegen sich dann, sobald die Spannung groß genug ist, bis sie die nächste kritische Konfiguration erreichen.

In der Simulationen werden die ersten Versetzungsringe von den Quellen erzeugt, deren Gleitsysteme einen hohen Schmidfaktor besitzen. Da die Rückspannung der aufgestauten Versetzungen auf die Versetzungsquelle sehr groß ist, blockieren diese Quellen schnell und andere Quellen mit geringeren Schmidfaktor werden aktiv. Das gleiche Verhalten wurde in



einer Studie der aktiven Gleitsysteme mittels in situ Transmissionselektronenmikroskopie an dünnen Al–Cu Schichten festgestellt [76].

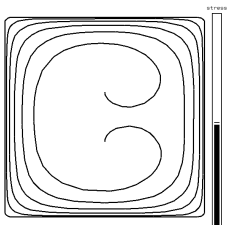
In den Abbildungen 4.67(b), S. 113 und 5.10 ist zu erkennen, daß die Versetzungsdichte an den Kornrändern nach 0.5% plastischer Dehnung größer ist als im Inneren des Kornes. Ähnliche Versetzungsverteilungen wurden auch in polykristallinen dünnen Kupferschichten beobachtet [30].

Die Vergleiche der simulierten Versetzungsconfigurationen mit TEM Untersuchungen zeigen, daß die Annahmen der Simulation konsistent sind und typische Simulationsergebnisse in realen Systemen wiedergefunden werden können.

5.3.3 Thermisch aktiviertes Versetzungsgleiten

Kobrinsky und Thompson [84] beobachteten im Transmissionselektronenmikroskop eine sprungartige Bewegung der Versetzungen, wobei die Länge des beweglichen Versetzungssegments nur einen Bruchteil der Schichtdicke betrug. Aus Relaxationsexperimenten bei relativ niedrigen Temperaturen (unter 150°C) konnten sie über das Aktivierungsvolumen eine freie Versetzungslänge von der gleichen Größenordnung wie im TEM Experiment bestimmen. Hieraus folgerten sie, daß Versetzungen beim Bewegen durch die Schicht einen „Wald“ von Hindernisversetzungen durchqueren müssen. Die hohen gemessenen Spannungswerte resultieren aus den geringen Abständen der Waldversetzungen, die thermische Aktivierung manifestiert sich in temperaturunterstützten Schneidprozessen der Waldversetzungen. Im folgenden wird diskutiert, wie sich das Modell des thermisch aktivierten Versetzungsgleitens mit den Simulationsergebnissen dieser Arbeit verträgt.

Die Simulationen mit bis an die Randflächen verlängerten Versetzungen (Abbildung 4.55, S. 102) haben gezeigt, daß sich auch mit diesen Versetzungsconfigurationen relativ hohe Spannungen (etwa $\frac{3}{4}$ des Quellenmodells) erzeugen lassen, wenn die Versetzungsdichte groß genug ist ($\rho_0 \approx 10^{14} \text{m}^{-2}$). Allerdings werden im Laufe der Verformung alle Versetzungen gegen die Randflächen bewegt, und das Korninnere wird versetzungsfrei. Der wichtigste Versetzungswechselwirkungsmechanismus ist in diesen Simulationen ein anderer, als von Kobrinsky und Thompson vorgeschlagen. Nicht Schneidprozesse sondern attraktive Wechselwirkungen mit der Bildung von Versetzungsknoten stellen die wichtigsten Hindernisse dar. Analoge Beobachtungen ergeben sich in den Simulationen mit Frank–Read Quellen im Korninneren: Hier muß die Spannung erhöht werden, um Versetzungen zwischen Festhaltepunkten und den Kornbegrenzungen durchzuschieben (Überwindung der kritischen Konfiguration der Versetzungsquelle) oder um Versetzungsknoten aufzutrennen. Da diese Hindernisüberwindung eine Bewegung der Versetzung über eine Strecke erfordert, die viel größer als ein Burgersvektor ist, sind solche Prozesse nicht thermisch aktivierbar [124, S. 222]. Sie können aber die im TEM beobachtete sprunghafte Bewegung der Versetzungen erklären (siehe Abschnitt 5.3.2.6), da die Quellengröße nur einen Bruchteil der Schichtdicke beträgt und die freie Bewegungslänge entsprechend klein ist. Die Simulation zeigt, daß abstoßende Versetzungen bei hohen Spannungen keine effektiven Hindernisse sind, weil die Kraft auf bewegte Versetzungen, die eine kritische Konfiguration überwunden haben, so groß ist, daß die Waldversetzungen sofort durchschnitten werden.



Wird der Abstand der Waldversetzungen l berechnet, der notwendig ist, um die gemessenen Spannungen zu erklären, muß hierfür die Friedelgleichung für schwache Hindernisse verwendet werden, da eine Waldversetzung ein leichtes Punkthindernis mit einem Durchbruchwinkel $\phi_c \geq 100^\circ$ darstellt:

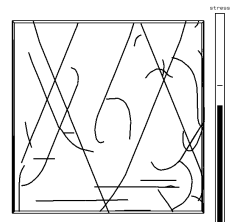
$$\tau = \frac{\mu b}{l} \left(\cos \frac{\phi_c}{2} \right)^{3/2}. \quad (5.8)$$

Wird hier die Spannung $\sigma = 420\text{MPa}$ (aus [84]) und ein Durchbruchwinkel $\cos(\phi_c/2) = \frac{1}{4}$, der sich aus den Simulationen in Abschnitt 4.1.6 ergibt⁷, eingesetzt, folgt ein Abstand der Waldversetzungen von $l = 12\text{nm}$. Der verwendete Spannungswert ist die Spannung, die benötigt wird, um die Schicht ohne thermische Aktivierung zu verformen [84] und wurde mit einem Schmidfaktor $m = 0.27$ für eine $\langle 111 \rangle$ texturierte Schicht unter biaxialer Spannung in eine aufgelöste Schubspannung umgerechnet. Aus diesem Abstand errechnet sich eine Versetzungsdichte bei einer gleichmäßigen Verteilung der Waldversetzungen von $\rho = 7.1 \cdot 10^{15}\text{m}^{-2}$. Weder die kleinen Abstände noch die großen Versetzungsdichten sind im Experiment beobachtet worden, woraus zu schließen ist, daß stärkere Hindernisse für die hohen Fließspannungen verantwortlich sind.

Die Schichtdickenabhängigkeit der Fließspannung kann im Modell des thermisch aktivierten Versetzungsgleiten nur erklärt werden, wenn angenommen wird, daß es eine schichtdickenabhängige Versetzungsdichte gibt [179]. TEM Studien zeigten, daß die freie Länge der Versetzungen mit abnehmender Schichtdicke ebenfalls abnimmt [179]. Diese Feststellung kann aber auch mit der Abnahme der Quellengröße nach dem Quellenmodell erklärt werden. Die experimentellen Daten zum Aktivierungsvolumen bestimmt aus Spannungsrelaxationsmessungen sind nicht eindeutig: In [84] wurde für zwei verschiedene Schichtdicken ($h = 250\text{nm}$ und $h = 860\text{nm}$) das gleiche Aktivierungsvolumen gemessen, in [179] ein Anstieg des Aktivierungsvolumens für Schichtdicken kleiner als $h = 380\text{nm}$ und für größere Schichtdicken ein Plateaubereich. Eine mit der inversen Schichtdicke zunehmende Versetzungsdichte läßt sich hieraus nur konstruieren, wenn angenommen wird, daß der Schneidprozeß (d. h. der Durchbruchwinkel ϕ_c) selbst spannungsabhängig ist. Die schichtdickenabhängige Kaltverfestigung (siehe Abschnitt 5.3.2.2) sowie der Bauschinger Effekt (Abschnitt 5.3.2.3) können durch thermisch aktiviertes Versetzungsgleiten nicht erklärt werden.

Ein von der Schichtdicke unabhängiges Aktivierungsvolumen (was einer neuen aber größtenteils innerhalb der Fehlerbalken verträglichen Interpretation der in [84, 179] präsentierten Daten entspricht) könnte durch die thermisch aktivierte Dissoziierung von Verset-

⁷Aus Tabelle 4.2, S. 74 folgt, daß eine Hindernisversetzung auf einer Gleitebene parallel zur Schichtebene im Mittel über alle Versetzungskombinationen eine Spannungserhöhung von $\tau_{\text{app}} = 1.25\tau_0$ verursacht. τ_0 ist die Nix oder Orowan Spannung $\tau_0 \approx \mu b/h$ für die gesamte Schichtdicke h . Kurz bevor die bewegliche Versetzung die Hindernisversetzung schneidet, herrscht ein Kräftegleichgewicht. Die angelegte Kraft $F_{\text{app}} = \tau_{\text{app}}bh/2$ ist gleich der Linienspannungskomponente in Zugrichtung am Schnittpunkt mit der Hindernisversetzung $F_{\text{T1}} = T \cos \phi_c/2$ zuzüglich der Kraft, die von der Versetzung an der Grenzfläche aufgenommen wird ($F_{\text{T2}} = T$). ϕ gibt den Durchbruchwinkel an (siehe Abbildung 3.14, S. 52). Wird die Linienspannung mit $T = \mu b^2/2$ approximiert, folgt $\cos(\phi_c/2) = \frac{1}{4}$.



zungen an den Korngrenzen und Grenzflächen und deren Austritt aus dem Kornvolumen erklärt werden. Die Energiebarriere für diesen Prozeß dürfte nicht allzu groß sein, wie das Verschwinden von Grenzflächenversetzungen nach kurzer Bestrahlung mit dem Elektronenstrahl im TEM zeigt [21, 11, 78, 79].

Sprunghafte Versetzungsbewegung und thermische Aktivierung lassen sich also auch ohne Annahme eines Versetzungswaldes erklären, wenn vom Quellenmodell ausgegangen wird. Insbesondere folgt hier die Schichtdickenabhängigkeit der Fließspannung direkt aus dem Modell.

5.3.4 Natur der Versetzungsquellen

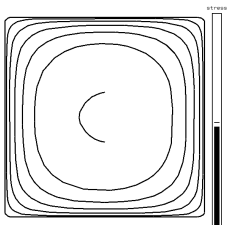
In den vorangegangenen Kapiteln des Diskussionsteils wurde im Rahmen des Quellenmodells und in den entsprechenden Simulationen vorausgesetzt, daß es nur wenige Quellen gibt, die mehrfach aktiviert werden. Unter diesen Annahmen wurden Größen berechnet, die mit experimentellen Ergebnissen verglichen werden konnten. Die Ergebnisse der 3D-Simulationen geben auch einige Erkenntnisse über die Natur der Versetzungsquellen, die in diesem Abschnitt diskutiert werden sollen.

Bisher wurden die Quellen durch an beiden Enden festgehaltene Versetzungssegmente realisiert, die im Kristall enden. Diese Annahme ist nicht physikalisch, doch hat Abschnitt 4.3.3 gezeigt, daß der Einfluß von Seitenarmen, die die Segmente mit den Randflächen des Kornes (Grenzflächen, Oberflächen, Korngrenzen) verbinden, nur gering ist, wenn diese Arme immobil sind. Solche Versetzungsquellen können z. B. durch Kletterprozesse bei hohen Temperaturen entstanden sein. Wird eine Bewegung der Seitenarme (auf den Quergleitebenen) und der Festhalte- bzw. Verbindungspunkte erlaubt, ist zu beobachten, daß die Quellen gegen die Ränder gedrückt werden und hier blockieren, d. h. keine weiteren Versetzungsringe erzeugen. Es findet keine plastische Verformung mehr statt (Abbildung 4.53, S. 101). Entweder muß es also noch weitere Quellen (evtl. in den Korngrenzen) geben oder die Verbindungspunkte sind nicht so beweglich, wie in der Simulation angenommen. Zudem kann die Entstehung von neuen Quellen im Korn nicht simuliert werden, da Versetzungsquergleiten nicht implementiert ist.⁸

Alternativ könnte auch der Durchtritt von Versetzungen an der Spitze eines Versetzungsaufstaus durch die Korngrenzen zu neuen beweglichen Versetzungen im Korninneren führen. Die Emission von Versetzungen aus Korngrenzen wurde im Elektronenmikroskop beobachtet [52]. Eine Stufe in einer Korngrenze kann aber nur eine einzelne Versetzung emittieren, die eigentliche Vervielfältigung findet im Korn statt (durch Doppelquergleitmechanismen) [60].

Letztendlich kann das Problem des Ursprungs der Versetzungsquellen nicht mit einer Versetzungssimulation gelöst werden, da hier immer irgendwelche Angaben über die Quellen gemacht und Versetzungen nicht aus einem perfekten Kristall erzeugt werden können.

⁸Erste Vorversuche haben gezeigt, daß in der Simulation mit bis an die Kornränder verlängerten Versetzungen (Abbildung 4.56) Spiralquellen durch Quergleitprozesse oder durch Rekombinationen von Versetzungen mit gleichem Burgersvektor entstehen können.



Nichtsdestoweniger ist es bemerkenswert, daß sich alleine durch die Annahme einer zufälligen Verteilung von Versetzungsquellen die im Experiment beobachteten Phänomene so gut beschreiben lassen.

5.4 Hall–Petch Modell für dünne Schichten

5.4.1 Vergleich mit analytischen Versetzungsaufstaumodellen

Das ursprüngliche Hall–Petch Modell sagt eine $1/\sqrt{d}$ Abhängigkeit der Fließspannung von der Korngröße d voraus, wenn sich an den Grenzen Versetzungsaufstaus bilden:

$$\tau_{\text{app}}^* = \frac{K_{\text{HP}}}{\sqrt{d}}. \quad (5.9)$$

Abbildung 4.38, S. 89 zeigt, daß die Fließspannung auch von der Größe der Quelle, die die Versetzungen im Aufstau produziert, abhängt. Diese Abhängigkeit ist im ursprünglichen Hall–Petch Modell nicht berücksichtigt, findet jedoch in der Erweiterung von Friedman und Chrzan [63] Eingang:

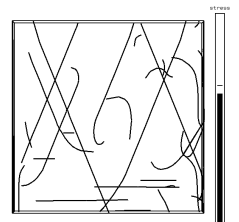
$$\tau_{\text{app}}^* = \sqrt{\frac{K_{\text{HP}}^2}{d} + \tau_{\text{source}}^2} \quad (5.10)$$

Ihr Ergebnis, das für eine eindimensionale kontinuierliche Versetzungsverteilung hergeleitet wurde, wird hier mit der zweidimensionalen Simulation verglichen. Für den Vergleich zwischen diskreten und kontinuierlichen Berechnungen werden nur die Quellenaktivierungspunkte (Kreuze in den Abbildungen 4.35, S. 86 und 4.36) berücksichtigt. Gleichung (5.10) wurde nach τ_b aufgelöst (mit $K_{\text{HP}} = c_{\text{HP}}\sqrt{\tau_b\mu b}$, siehe Tabelle 2.1, S. 22), um die Abhängigkeit der Spannung an der Korngrenze von der angelegten Spannung zu erhalten und an die Quellenaktivierungspunkte in Abbildung 4.36 angepaßt. Anpaßparameter sind die Aktivierungsspannung der Quelle τ_{source} und der Vorfaktor in der Hall–Petch Konstante c_{HP} . Der Fit von Gleichung (5.10) paßt sehr gut, die angepaßte Quellengröße entspricht der berechneten und die Hall–Petch Konstante ergibt sich zu

$$K_{\text{HP}} = c_{\text{HP}}\sqrt{\tau_b^*\mu b} \quad \text{mit} \quad c_{\text{HP}} = 1.67. \quad (5.11)$$

Dieser Hall–Petch Koeffizient für Körner mit $h = d$ liegt zwischen dem Wert für kreisförmige Versetzungen ($K_{\text{HP}} = 2.17\sqrt{\tau_b^*\mu b}$) und geraden Stufenversetzungen ($K_{\text{HP}} = 1.38\sqrt{\tau_b^*\mu b}$) im Aufstau, für die analytische Lösungen existieren (siehe Tabelle 2.1). Der Wert ist plausibel, da die Form der Versetzungen zwischen diesen beiden limitierenden Fällen liegt.

Um zu beurteilen, ob die Hall–Petch Erweiterung für unterschiedliche Korngrößen verwendet werden kann, wurde Gleichung (5.10) mit den aus Abbildung 4.36, S. 86 gewonnenen Fitparametern zusammen mit Simulationsergebnissen in ein Fließspannung–Korngrößendiagramm eingetragen (Abbildung 5.19). Für Korngrößen und Schichtdicken größer als $4000b$ ergibt sich gute Übereinstimmung, für kleinere Körner sind die simulierten Fließspannungen größer als von Gleichung (5.10) vorhergesagt. Für diese Abweichung



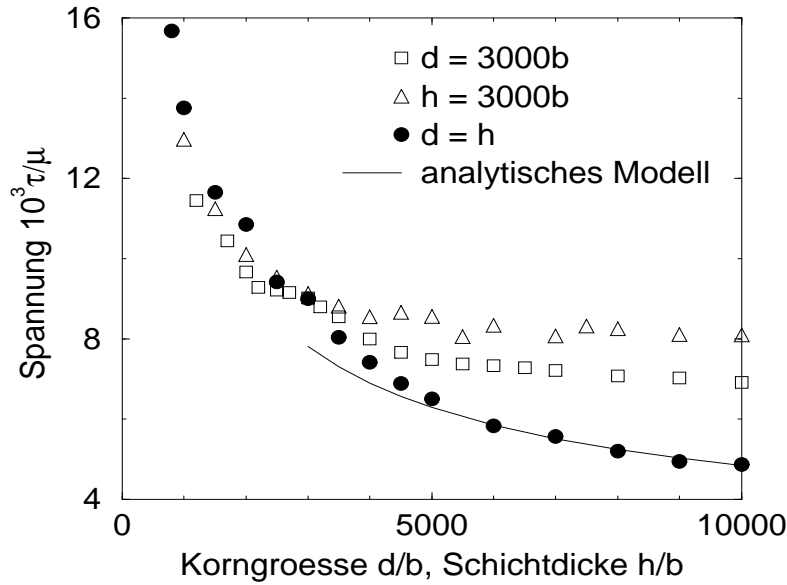


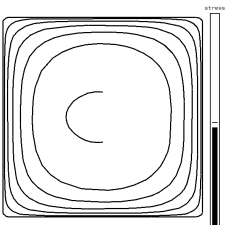
Abb. 5.19: Fließspannung über Korngröße bzw. Schichtdicke für eine Durchbruchspannung von $\tau_b^* = 0.057\mu$. Die Quellengröße ist $s = 400b$. Die durchgezogene Linie entspricht der analytischen Lösung (5.10) mit den aus Abbildung 4.36 gewonnenen Parametern.

gibt es zwei Gründe. Erstens wurde in der Herleitung von Gleichung (5.10) davon ausgegangen, daß die Quellenaktivierungsspannung im Zentrum des Korns erreicht werden muß. Diese Annahme ist für große Quellen verletzt, da sich die Versetzungen in der kritischen Konfiguration dicht an der Korngrenze befinden. Zweitens ändert sich die effektive Quellengröße während der Verformung: Der Abstand p zwischen einem Festhaltepunkt der Versetzungsquelle und den Versetzungen, die an den Rändern abgelegt sind, kann kleiner werden als der Abstand s zwischen den Festhaltepunkten. Die Frank–Read Quelle geht in ein Paar von Spiralquellen über. Die Quellenaktivierungsspannung wird dann vom Abstand p kontrolliert, der mit zunehmender Anzahl von Versetzungsringen im Korn abnimmt. Wird die Breite eines Aufstaus an der Grenzfläche mit $l = \mu b N / (\pi \tau)$ [167, S. 774], die kritische Spannung mit $\tau \approx \mu b / p$ beschrieben und $p = d/2 - s/2 - l$ eingesetzt, kann abgeschätzt werden, wann p kleiner als s wird. Dieser Übergang findet statt, wenn die Anzahl der Versetzungen N den Wert von

$$\tilde{N} = \frac{\pi}{2} \left(\frac{d}{s} - 3 \right) + 1. \quad (5.12)$$

übersteigt. Diese Gleichung zusammen mit den Ergebnissen von Abbildung 4.37(b), S. 88 gibt eine Korngröße von $d = 4000b$, unterhalb der die Quelle wie eine Spiralquelle operiert. Diese Abschätzung ist in Übereinstimmung mit den Daten in Abbildung 5.19.

Befinden sich nur wenige Versetzungen im Aufstau, so ergeben sich Unterschiede beim Vergleich der analytischen Gleichung (5.10), die für eine kontinuierliche Versetzungsvertei-



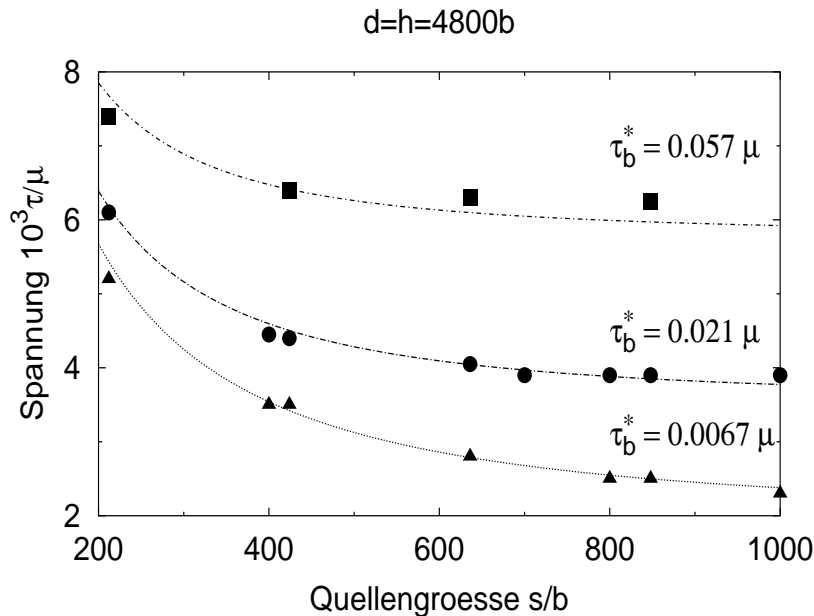


Abb. 5.20: Fließspannung über Quellgröße für konstante Kornabmessungen $h = d = 4800b$ für drei verschiedene Durchbruchspannungen τ_b^* . Die Linien sind die analytischen Lösungen Gleichung (5.10) mit (5.13).

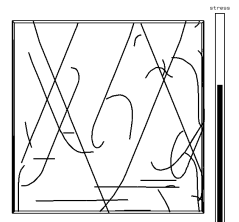
lung hergeleitet wurde, mit der Simulation ganzer Versetzungen. Die Spannungswerte der Simulation sind im Mittel etwas kleiner. Dies wird anhand von Abbildung 4.36 deutlich: Die Spannung in der Simulation ist durch die gestrichelte Linie dargestellt, die des analytischen, kontinuierlichen Modells durch die durchgezogene Linie. In der Simulation wird eine gegebene Korngrenzdurchbruchspannung gelegentlich schon bei niedrigeren angelegten Spannungen erreicht, da die angelegte Spannung nach der Aktivierung einer Quelle zurückgefahren wird.

Um die Abhängigkeit der Fließspannung von der Quellgröße für kleine Quellen ($N < \tilde{N}$) in Abbildung 5.20 zu erklären, wurde die Quellenaktivierungsspannung mit der Gleichung [104]

$$\tau_{\text{source}} = \frac{\mu b}{2\pi s} \ln\left(\frac{\alpha s}{b}\right) \quad (5.13)$$

berechnet und zusammen mit (5.11) in Gleichung (5.10) eingesetzt. Es wurde $\alpha = 3.0$ gesetzt, da dieser Wert die beste Übereinstimmung mit den simulierten Aktivierungsspannungen ergab. Auf diese Art lassen sich die Simulationsergebnisse in Abbildung 5.20 gut beschreiben.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, daß die Aktivierungsspannung der Versetzungsquelle, die den Aufstau erzeugt, in einem Fließspannungsmodell berücksichtigt werden muß. Das Modell von Friedman und Chrzan [63] trägt dem Rechnung und gibt eine gute Beschreibung für quadratische Körner mit einem entsprechend angepaßten Hall–



Petch Parameter (5.11), wenn die Quellenaktivierungsspannung bekannt ist und während der Verformung konstant bleibt. Wie in Kapitel 5.2 dargelegt, wird die Größe der Quellen jedoch meistens mit den Kornabmessungen skalieren. Sind d und h unterschiedlich, steuert die kleinere Größe von beiden die Fließspannung (im Rahmen einer Unsicherheit, die durch den Charakter der Versetzungen gegeben ist). Wird die Nix Spannung als Reibspannung eingesetzt, kann die Abnahme der Fließspannung mit h und $h > d = \text{const.}$ erklärt werden (siehe Abschnitt 4.2.2.1), der Betrag der Fließspannung ändert sich aber nur unwesentlich (für die hier eingesetzten Durchbruchspannungen).

5.4.2 Auswirkungen auf die Dünnschichtplastizität

Im folgenden werden die Resultate des vorangegangenen Kapitels bezüglich ihrer Bedeutung für die Plastizität dünner Metallschichten diskutiert.

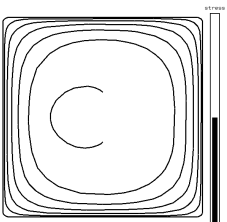
5.4.2.1 Aspektverhältnis

Wie schon für die Aktivierung der Versetzungsquellen in kleinen Körnern festgestellt (Abschnitt 5.2.1), wird auch bei einer Definition der Fließspannung nach dem Hall–Petch Kriterium die Spannung von der kleineren Größe von Schichtdicke oder Korngröße bestimmt. Auch unter Berücksichtigung des Charakters der Versetzungen sind Schichtdicke und Korngröße gleichberechtigt, wenn Versetzungen unterschiedlicher Gleitsysteme bewegt werden und über alle Burgersvektoren gemittelt wird (Abschnitt 4.2.2.1).

In der Simulation wurde von einem Modellsystem ausgegangen, welches eine Schicht mit Passivierung auf einem Substrat beschreibt, wenn Passivierung und Substrat die gleichen elastischen Konstanten wie die Schicht haben. Wenn die elastischen Konstanten verschieden sind, wirken auf die Versetzungen Bildkräfte, die unterschiedliche Wichtungsfaktoren der Kornabmessungen zur Folge haben können. Sind Substrat und Passivierung elastisch steifer als die Schicht, ergeben sich nach Abschnitt 3.2.3 nur kleine Änderungen ($< 20\%$) in der Kanalspannung. Da die Bildkräfte auf die Versetzungen, die am dichtesten an der Grenzfläche liegen, am größten sind, sollte dieser Effekt für die inneren Versetzungen des Aufstaus noch geringer sein. Im Fall eines elastisch weicheren Substrates und Passivierung wird die Korngröße wichtiger als die Schichtdicke. Der Extremfall in dieser Hinsicht ist eine freistehende Schicht. Die Versetzungen können die Schicht hier an den Grenzflächen verlassen, es gibt nur Aufstau an den Korngrenzen, weshalb alleine die Korngröße die Fließspannung kontrolliert. Der Betrag der Fließspannung nach dem Hall–Petch Kriterium ist für freistehende Schichten genauso groß wie für Schichten in der Würfelgeometrie, wenn sich letztere im korngroßendominierten Bereich befinden (zur Aktivierungsspannung der Versetzungsquelle siehe Abschnitt 5.2.1).

5.4.2.2 Korngrößenabhängige Aktivierungsspannung

Wie in Abbildung 5.20 gezeigt, ist die Fließspannung nach dem Hall–Petch Kriterium (eine gegebene Durchbruchspannung muß an den Korngrenzen erreicht werden) abhängig von



der Aktivierungsspannung der Versetzungsquelle, die den Aufstau erzeugt. In Abschnitt 5.2.1 wurde dargelegt, daß die Größe einer Versetzungsquelle und somit auch deren Aktivierungsspannung mit den Kornabmessungen skaliert. Somit stellt sich die Frage, ob die Fließspannung nach dem Hall–Petch Kriterium von der Aktivierung der Quellen oder der Transmission der Verformung durch die Korngrenzen bestimmt wird. Der Hall–Petch Term in Gleichung (5.10) skaliert mit $1/\sqrt{d}$, die Quellenaktivierungsspannung nach Abschnitt 5.2.1 mit $1/s = f_s/d$ ($f_s \approx 4$ ist der Skalierungsfaktor).⁹ Für kleine Korngrößen wird folglich die Aktivierung der Versetzungsquellen der bestimmende Schritt sein, für große Körner ist das Hall–Petch Verhalten entscheidend und die Quellenaktivierung kann vernachlässigt werden. Die kritische Korngröße d^* , bei der der Übergang zwischen den Modellen stattfindet, läßt sich durch Gleichsetzen der beiden Terme in Gleichung (5.10) und Auflösen nach d bestimmen:

$$d^* = \left(\frac{f_s \mu b}{K_{\text{HP}}} \right)^2, \quad (5.14a)$$

bzw. mit Gleichung (5.11):

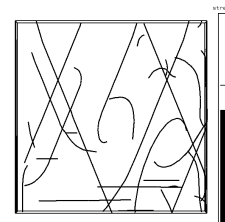
$$d^* = \left(\frac{f_s}{c_{\text{HP}}} \right)^2 \frac{\mu b}{\tau_b^*}. \quad (5.14b)$$

Abbildung 5.21 zeigt den Übergang vom quellenkontrollierten zum Hall–Petch Verhalten anhand der Simulationsergebnisse für $\tau_b^* = 0.007\mu$ (aus Abbildung 4.39, S. 89). Eingetragen ist Gleichung (5.13) zur Kennzeichnung der Quellenaktivierungsspannungen und die Hall–Petch Spannung Gleichung (5.9) mit der Hall–Petch Konstanten aus Gleichung (5.11). Bei kleinen Schichtdicken ist die Quellaktivierungsspannung größer als die Durchbruchspannung, es gibt nur eine Versetzung im „Aufstau“ ($N = 1$). Bei größeren Kornabmessungen nähern sich die Datenpunkte der Hall–Petch Geraden an, die Anzahl der Versetzungen im Aufstau steigt. Der Schnittpunkt der Geraden in Abbildung 5.21 liegt bei $d = 921b$, aus Gleichung 5.14b folgt $d = 856b$. Der Unterschied wird durch die zur Herleitung von Gleichung 5.14b verwendete Näherung $\ln(\alpha s/b) \approx 2\pi$ verursacht. Der stufenförmige Verlauf der Simulationsdaten resultiert aus der Behandlung von ganzen Versetzungen, die einzeln erzeugt werden.

Korngrößenabhängige Durchbruchspannung

Die Durchbruchspannung τ_b^* im Hall–Petch Modell gibt an, wie groß die Spannung an der Korngrenze sein muß, um im Nachbarkorn plastische Verformung zu initiieren. Der Mechanismus, der die Abgleitung des Nachbarkorns verursacht, kann die Transmission von Versetzungen durch die Korngrenze, das Herausdrücken von Korngrenzenversetzungen ins Korninnere oder die Aktivierung von Frank–Read Quellen im Nachbarkorn sein [167, S. 788]. Die Größe einer Frank–Read Quelle wird von der Schichtdicke (bzw. Korngröße) abhängen und — nach dem Quellenmodell (Abschnitt 5.2.1) — bei mehrfacher Aktivierung ungefähr

⁹Die Skalierung folgt, wenn der logarithmische Term der Aktivierungsspannung wieder durch 2π angenähert wird.



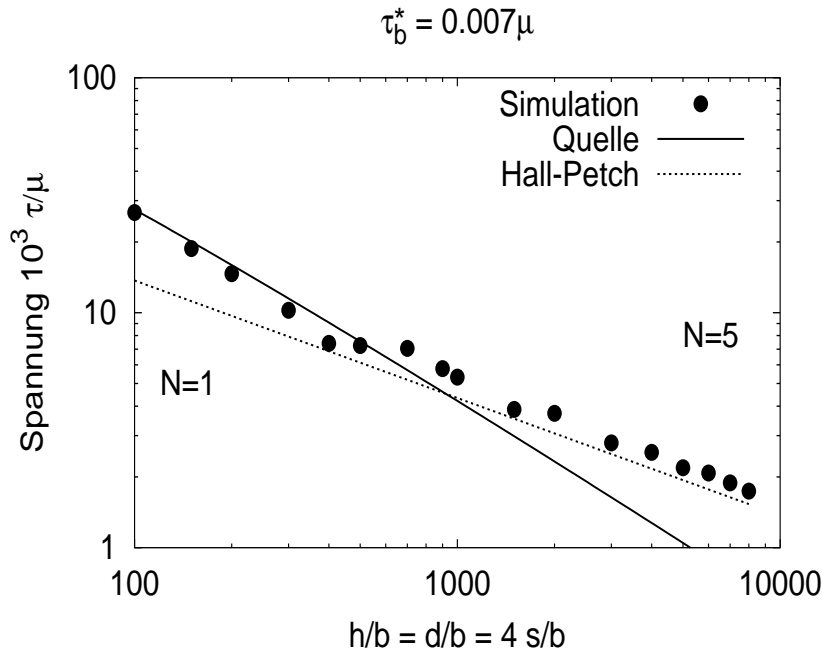


Abb. 5.21: Übergang der in der Simulation berechneten Fließspannungen vom Quellenbereich (Gleichung (5.13)) zum Hall-Petch Bereich (Gleichung (5.11))

$s = h/4$ betragen. Sind Frank-Read Quellen die Ursache der Abgleitungstransmission, so skaliert daher auch die Durchbruchspannung mit der Schichtdicke (bzw. Korngröße):

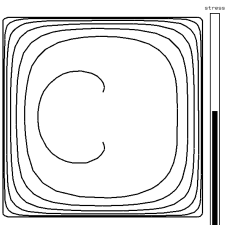
$$\tau_b^* = \frac{1}{a(x)} \tau_s. \quad (5.15)$$

$a(x)$ beschreibt das Abklingen der Spannung von der Korngrenze bis zur Versetzungsquelle am Ort x im Nachbarkorn. Direkt vor der Spitze des Aufstaus (im Nachbarkorn) entspricht das Scherspannungsfeld dem eines Mode II Risses, weiter entfernt dem einer Superversetzung [167, S. 776]. Für einen von der Korngröße unabhängigen Abstand zwischen Korngrenze und zu aktivierender Frank-Read Quelle im Nachbarkorn (konstante Quelledichte) folgt $a = \text{const.}$ und $\tau_b^* \sim 1/h$. Wird Gleichung (5.15) in (5.10) eingesetzt, so folgt mit (5.3) und (5.11):

$$\tau_{\text{app}}^* = \frac{1.67}{\sqrt{4a}} \tau_s. \quad (5.16)$$

D. h. wenn die Durchbruchspannung mit den Kornabmessungen skaliert, ist die Fließspannung nach dem Hall-Petch Modell und dem Friedmann-Chrzan Modell proportional zur Quellenaktivierungsspannung und damit proportional zur inversen Schichtdicke bzw. Korngröße.

In Kapitel 4.3.6 wurde eine Vielquellensimulation durchgeführt, um zu testen, ob durch die Versetzungsaufstaus Versetzungsquellen in den Nachbarkörnern aktiviert werden. Es



wurden zufällig verteilte Versetzungsquellen in die Nachbarkörner gesetzt, die lediglich durch die Wechselwirkung mit den Versetzungen im zentralen Korn, nicht aber durch die angelegte Spannung, Kräfte erfahren. In der Simulation konnte keine signifikante Spannungserniedrigung durch Aktivierung der Quellen in den Nachbarkörnern nachgewiesen werden (Abbildung 4.66, S. 112). Möglicherweise war die Dichte der Quellen und die Spannungskonzentration der Versetzungsaufstaus noch nicht groß genug, um einen Effekt zu beobachten.

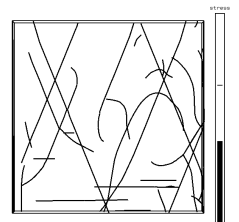
Über die Natur der Übertragung der plastischen Verformung über die Korngrenzen ist nur wenig bekannt, so daß die Annahme einer von Schichtdicke bzw. Korngröße abhängigen Durchbruchspannung zunächst nur eine gedankliche Weiterführung des Quellenmodells ist. Ebenso vorstellbar ist, daß durch die große Spannungskonzentration am Versetzungsaufstau andere Mechanismen, die nicht von den Kornabmessungen abhängen und die bei einer homogenen Spannungsverteilung nicht aktiv sind, Versetzungen erzeugen.

5.4.2.3 Vergleich mit experimentellen Daten

Die in Kapitel 4.2.2 berechneten Fließspannungen hängen alle von der Durchbruchspannung τ_b^* ab, ein Parameter, der extern vorgegeben werden muß. Um eine Aussage über die Korngröße, die den quellendominierten vom Hall–Petch dominierten Bereich (Gleichung (5.14)) unterscheidet, machen zu können und um die Fließspannungen mit experimentellen Daten vergleichen zu können, muß τ_b^* sinnvoll festgelegt werden. Dieses kann z. B. durch den Vergleich mit experimentellen Daten oder theoretischen Berechnungen von τ_b^* geschehen.

Theoretische Berechnungen der Durchbruchspannung existieren zur Transmission von Versetzungen durch epitaktische Al–Ni Grenzflächen. Mit Hilfe eines Kontinuum–Peierls Modells wurde eine Durchbruchspannung von $\tau_b^* = 0.021\mu$ berechnet [180]. Die Berechnung basiert auf dem Unterschied der elastischen Konstanten der beiden Materialien, allerdings wurde eine starke Erhöhung von τ_b^* beobachtet ($\tau_b^* = 0.07\mu$), wenn der Grenzfläche ein niedrigerer Schubmodul zugeordnet wird. Ein niedrigerer Schubmodul entspricht weniger starken Bindungen zwischen den Atomen und hat eine Aufweitung des Versetzungskerns zur Folge. Ähnliche Bedingungen gelten auch für eine Korngrenze, weshalb nach diesem Modell auch für Korngrenzen Durchbruchspannungen von der gleichen Größenordnung zu erwarten sind. Die Ablage von Grenzflächenversetzungen beim Durchtritt durch die Grenzfläche wurde in diesem Modell nicht berücksichtigt, sie leistet noch einen weiteren Beitrag zur Durchbruchspannung (siehe Anhang A). Ebenso können Wechselwirkungen mit bereits in der Grenzfläche vorhandenen Versetzungen die Durchbruchspannung um einen Beitrag der Größenordnung $10^{-2}\mu$ erhöhen [180].

Die Fließspannungen von Volumenmaterialien mit Korngrößen $d > 1\mu\text{m}$ werden gut durch die Hall–Petch Beziehung beschrieben, und viele Hall–Petch Koeffizienten wurden experimentell bestimmt. Hieraus kann mit Gleichung (5.11) oder mit Tabelle 2.1, S. 22 die Durchbruchspannung berechnet werden, wobei sich eine Unsicherheit dadurch ergibt, daß in der Regel nicht bekannt ist, welcher Art die Versetzungsaufstaus sind (Stufen oder



Schrauben, einseitig oder zweiseitig, rund oder eckig).¹⁰ Für Kupfer Volumenmaterial wurde ein Hall–Petch Koeffizient von $k_{\text{HP}} = 0.112 \text{MN m}^{-3/2}$ gemessen [181, S. 171]. Unter der Annahme, daß die Versetzungsaufstaus einseitig sind und aus geraden Versetzungen bestehen, folgt $\tau_b^* = 7.7 \cdot 10^{-3} \mu$, wobei ein mittlerer Schmidfaktor von $\bar{m} = \frac{1}{3}$ und eine Gleichung aus Tabelle 2.1, S. 22 für über den Charakter gemittelte Versetzungen verwendet wurde. Ist der Mechanismus, der den Transfer der Verformung über die Korngrenzen beschreibt, unabhängig von der Korngröße, so kann sich dennoch K_{HP} verändern, wenn sich die Art der Aufstaus verändert. In kleinen Körnern sind kreisförmige Aufstaus wie in Kapitel 4.2.2 wahrscheinlicher. Wird Gleichung (5.11), die für eine polykristalline, dünne Schicht hergeleitet wurde, verwendet, um aus der experimentell bestimmten Durchbruchspannung wieder die Hall–Petch Konstante auszurechnen, folgt $k_{\text{HP}} = 0.30 \text{MN m}^{-3/2}$. Auch experimentell wurde festgestellt, daß sich die Fließspannungen bei kleinen Korngrößen besser durch das Hall–Petch Modell beschreiben lassen, wenn hier eine größere Hall–Petch Konstante verwendet wird [13]. Wenn die Hall–Petch Gleichung an experimentelle Daten angepaßt wird, ergibt sich zudem bei Nichtberücksichtigung der Quellenaktivierungsspannung eine scheinbar größere Hall–Petch Konstante.

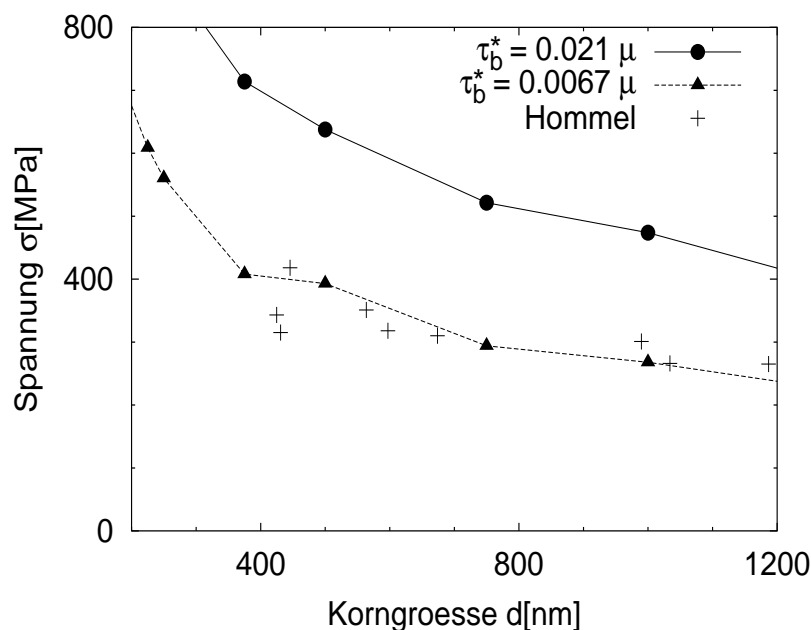
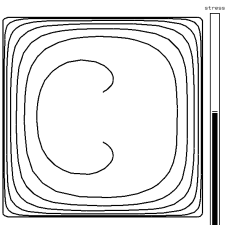


Abb. 5.22: Im Mikrozugversuch ermittelte Fließspannung bei 0.5% plastischer Dehnung (Kupferschicht auf Polyimid-Folie [94]) im Vergleich mit simulierten Fließspannungen für zwei verschiedene Durchbruchspannungen aufgetragen über der Korngröße

In Abbildung 5.22 werden simulierte und experimentell bestimmte Fließspannungen für unterschiedliche Korngrößen verglichen. Die experimentellen Daten sind die Spannungen

¹⁰Bzw. ob es wirklich Versetzungsaufstaus gibt, da sich die Hall–Petch Beziehung auch durch andere Mechanismen erklären läßt (siehe Abschnitt 2.3.2).



von dünnen Kupferschichten auf einem Polyimid Substrat bei 0.5% plastischer Dehnung und wurden im Mikrozugversuch bestimmt [94]. In der Simulation wurde eine Versetzungsquelle verwendet, deren Größe mit der Korngröße skaliert ($s = d/4$ aus Abbildung 4.39, S. 89). Gezeigt sind die Spannungswerte beim Erreichen von zwei verschiedenen Durchbruchspannungen. Im Mikrozugversuch herrscht im Mittel ein einachsiger Spannungszustand, und aufgrund der ausgeprägten $\langle 111 \rangle$ Textur dünner Schichten kann ein Schmidfaktor $m = 0.4$ angenommen werden. Da in der Simulation aufgelöste Schubspannungen berechnet wurden, wurden die Spannungswerte durch diesen Schmidfaktor dividiert, um einen Vergleich mit den experimentellen Daten zu ermöglichen.

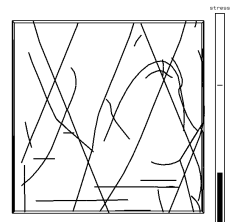
Für die Durchbruchspannung $\tau_b^* = 0.0067\mu$ stimmen die simulierten Spannungen gut mit den experimentellen Daten überein und die Abhängigkeit der Spannung von der Korngröße kann gut reproduziert werden, wie Abbildung 5.22 zeigt. Diese Durchbruchspannung ist außerdem in guter Übereinstimmung mit der aus Kupfervolumenmaterial berechneten Spannung. Mit Gleichung (5.14b) folgt eine kritische Korngröße von $d^* = 220\text{nm}$, die den quellendominierten vom Hall–Petch dominierten Bereich trennt.¹¹ Die oben angeführten, theoretisch berechneten Durchbruchspannungen sind von der gleichen Größenordnung.

5.5 Quellenmodell mit Korngrenzendurchbruch

In den vorangegangenen Kapiteln wurden zwei verschiedene Modelle zur Beschreibung der plastischen Verformung dünner Schichten verwendet: das Quellenmodell und das Hall–Petch bzw. Friedman Modell. Das Quellenmodell betrachtet die Erzeugung von Versetzungen mit einer limitierten Anzahl von Versetzungsquellen. Werden die Quellen mehrfach aktiviert, folgt daraus eine mit der Schichtdicke (oder Korngröße) skalierende Mindestspannung, die notwendig ist, um Versetzungen zu erzeugen. Die Fließspannung nach dem Quellenmodell zeigt in erster Näherung eine lineare Zunahme mit der plastischen Dehnung. Das Hall–Petch Modell definiert die Fließspannung als die Spannung, bei der globales Fließen über die Korngrenzen hinweg erreicht wird. Sobald die Durchbruchspannung an der Korngrenze erreicht ist, gibt es hiernach im Idealfall keine Verfestigung mehr.

Die Kombination beider Modellvorstellungen ergibt sich nahezu zwangsläufig, da weder Versetzungsaufstaus, wie sie im Hall–Petch Modell benötigt werden, ohne Versetzungsquellen erzeugt werden können, noch die vom Quellenmodell vorhergesagte Verfestigung unendlich lange stattfinden kann. Hierbei entsteht folgendes Bild: Um eine plastische Verformung zu erhalten, müssen zunächst die Versetzungsquellen (Versetzungen, die irgendwie an zwei Punkten festgehalten werden, die geklettet oder quergeglitten sind) aktiviert werden. Zuerst werden Versetzungen bewegt, deren Festhaltepunkte einen großen Abstand haben. Diese laufen gegen die Korngrenzen und Grenzflächen, die großen Quellen können daher nicht oder erst bei hohen Spannungen erneut aktiviert werden. Um einen Versetzungsaufstau, d. h. zwei Versetzungen oder mehr auf der gleichen Gleitebene, zu erzeugen, muß eine Quelle *mindestens zweimal* operieren. Die hierfür erforderliche Spannung ist drei-

¹¹Wird die experimentell berechnete Hall–Petch Konstante $k_{\text{HP}} = 0.112\text{MN m}^{-3/2}$ direkt in Gleichung 5.14a eingesetzt, folgt eine kritische Korngröße von $d^* = 1.3\mu\text{m}$ (mit $\bar{m} = \frac{1}{3}$).



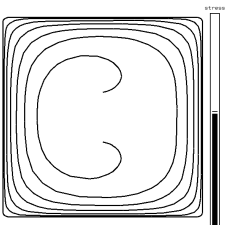
mal so groß wie die Nix Spannung (der Spannung, die benötigt wird, um eine Versetzung durch eine dünne Schicht zu bewegen), wenn die Quelle die optimale Größe von einem Drittel der Kornabmessungen hat. Mit zunehmender plastischer Dehnung gibt es eine starke Verfestigung, da die Versetzungen (zunächst) nicht das Korn verlassen können und eine Rückspannung auf die Quelle in ihrer Gleitebene ausüben. Die Zunahme der Spannung ist näherungsweise proportional zur plastischen Dehnung, da die Aktivierungsspannung einer Quelle linear mit der Anzahl der an den Kornrändern abgelegten Versetzungen steigt und die plastische Dehnung proportional zu dieser Anzahl ist. Abweichungen vom linearen Anstieg kommen dadurch zustande, daß bei größeren Spannungen mehr Quellen aktiviert werden können.

Durch die Ansammlung von Versetzungen an den Korngrenzen kommt es zu Spannungskonzentrationen, wodurch Versetzungsquellen aktiviert werden, die alleine durch die angelegte Spannung keine Versetzungen emittieren, oder Versetzungen an der Spitze des Aufstaus durch die Korngrenze transmittiert werden. Da hierdurch Versetzungen aus einem Korn entfernt werden, bzw. sich die elastischen Felder der Versetzungen in benachbarten Körnern auslöschen, gibt es (im Idealfall) keine weitere Verfestigung mehr. Das Erreichen eines konstanten Spannungsniveaus (Sättigungsspannung) wurde auch in der 3D-Simulation festgestellt, wenn die vorderste Versetzung eines Aufstaus bei Überschreitung der Durchbruchspannung aus dem Simulationsvolumen entfernt wurde. In einer realen Schicht wird es kein abruptes Ende der Verfestigung geben, da hier Körner unterschiedlicher Größe vorhanden sind, die unterschiedliche Fließspannungsniveaus besitzen. Die in den Abbildungen 5.11 und 5.12 dargestellten experimentellen Daten zeigen die zwei Bereiche in der Verformung: In der Spannungsdehnungskurve gibt es einen anfänglichen Bereich mit hoher Verfestigung, in dem ebenfalls die Versetzungsdichte stark ansteigt. Anschließend folgt ein Bereich mit konstanter Spannung, die Zunahme der Versetzungsdichte ist nur noch gering.

Die Abhängigkeit der Sättigungsspannung von der Schichtdicke bzw. Korngröße kann durch die Friedman Erweiterung gut beschrieben werden, wenn hier eine von der Schichtdicke abhängige Quellengröße ($s = h/4$) eingesetzt wird, wie Abbildung 5.22 zeigt.

Die Skalierung der Fließspannung mit Schichtdicke und Korngröße hängt von der plastischen Dehnung und den Kornabmessungen selbst ab. In kleinen Körnern mit Abmessungen kleiner als die kritische Korngröße d^* gibt die Aktivierung der Versetzungsquellen die Fließspannung vor, die Fließspannung skaliert mit $1/d$ bzw. $1/h$. In großen Körnern ($d, h \gg d^*$) ist die Erzeugung von Versetzungen relativ einfach und aus dem Hall-Petch Modell folgt die $1/\sqrt{h}$ bzw. $1/\sqrt{d}$ Abhängigkeit. In beiden Fällen wird die Spannung von der kleineren Größe aus Schichtdicke oder Korngröße kontrolliert, wenn an den Grenzflächen Versetzungen abgelegt werden (Abschnitte 4.2.1.1 und 4.2.2.1). In einer freistehenden Schicht hängt die Fließspannung nur von der Korngröße ab (4.2.1.3).

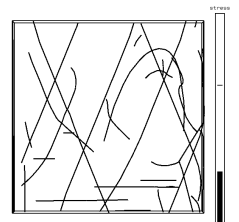
Die kritische Korngröße d^* (Gleichung (5.14)) ist abhängig von der Durchbruchspannung, vom Vorfaktor c_{HP} in der Hall-Petch Konstante und vom Verhältnis von Schichtdicke zu Quellengröße c . Die Simulationsrechnungen zum Quellenmodell haben ergeben, c mindestens drei, bei mehrfacher Aktivierung einer Quelle eher vier oder größer ist. Da c in der kritischen Korngröße im Quadrat eingeht, tritt der Übergang zur quellendominierten Fließspannung viel eher auf, als ein einfacher Vergleich von Hall-Petch Spannung mit der



Nix Spannung vermuten läßt. Berücksichtigt man die Quellenaktivierung im Hall–Petch Modell mittels der Friedman Erweiterung, ist zu beobachten, daß die Versetzungsquelle auch für $d > d^*$ eine Erhöhung der Fließspannung verursacht (vgl. Abbildung 4.39, S. 89), was zu einer scheinbar größeren Hall–Petch Konstante führt.

Ein ausgeprägtes Spannungsplateau in der Spannungs–Dehnungskurve für große plastische Dehnungen konnte im Gegensatz zu Mikrozugversuchen in der Abkühlkurve von Substrat–Krümmungsexperimenten nicht festgestellt werden.¹² Die gesamte Dehnung, die in einer Kupferschicht auf einem Siliziumsubstrat beim Abkühlen von 500°C auf Zimmertemperatur aufgrund der unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten erzeugt wird, liegt bei 0.7%. Wird hiervon eine elastische Dehnung — abgeschätzt durch eine typische Dünnschichtspannung von 500MPa dividiert durch den biaxialen E-Modul $M_{111} = 263\text{GPa}$ [16] — von $\epsilon_{\text{el}} = 0.2\%$ abgezogen, bleibt eine plastische Dehnung von 0.5%. Allerdings tragen bei hohen Temperaturen Kletter- bzw. Diffusionsprozesse zur plastischen Verformung bei, so daß der Beitrag des Versetzungsgleitens zu ϵ_{pl} geringer sein wird. Diffusions- und Kletterprozesse sind in Kupfer bereits ab Temperaturen von etwa 250°C aktiv (zumindest in nicht passivierten Schichten [182, 33]). Wird daher angenommen, daß der Spannungsabbau durch konservative Versetzungsbewegung erst unterhalb 250°C einsetzt, beträgt die plastische Dehnung durch Versetzungsgleiten nur $\epsilon_{\text{pl}} = 0.2\%$. Die Versetzungsaufstaus in der Schicht sind noch nicht so groß, daß die Durchbruchspannung erreicht wird, die Schicht befindet sich noch im Verfestigungsbereich. Nach dem Quellenmodell folgt hier eine Skalierung der Fließspannung mit der inversen Schichtdicke (oder Korngröße), wenn eine konstante Versetzungsquellendichte vorausgesetzt wird. Diese Überlegungen erklären die Beobachtungen, daß für viele Substrat–Krümmungsexperimente die Fließspannungen besser durch eine $1/h$ Abhängigkeit als durch eine $1/\sqrt{h}$ Abhängigkeit beschrieben werden [35, 13, 173, 16].

¹²Eine gelegentlich beobachtete geringere Steigung bei tiefen Temperaturen ($T < 100^\circ\text{C}$) ist hier eher einer langsameren Abkühlrate und somit einer größeren Spannungsrelaxation in der Schicht zuzuschreiben.

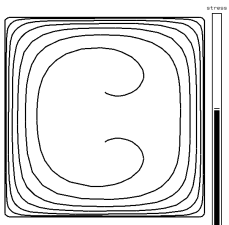


Kapitel 6

Schlußfolgerungen

Die hohen Fließspannungen dünner metallischer Schichten und deren Zunahme mit abnehmender Schichtdicke deuten darauf hin, daß die Bewegung der Versetzungen in den Schichten aufgrund der geringen Schichtdicke eingeschränkt ist. Das Nix Modell, das von einer Versetzung ausgeht, die sich über die gesamte Schichtdicke erstreckt und beim Bewegen durch die Schicht Grenzflächenversetzungen ablegt, zeigt eine Schichtdickenabhängigkeit, jedoch ist die Fließspannung viel kleiner als experimentell bestimmt. Wenn von allen Versetzungen, die sich durch die Schicht bewegen, Grenzflächenversetzungen abgelegt werden, wird eine mobile Versetzung auch mit anderen Grenzflächenversetzungen wechselwirken, wodurch ein zusätzlicher Härtungsbeitrag entstehen kann. Die Wechselwirkung wurde in dieser Arbeit für alle möglichen Konstellationen in $\langle 111 \rangle$ orientierten Körnern (der häufigsten Texturkomponente) berechnet. Mit dem Ergebnis, daß die Berücksichtigung der Hinderniswirkung einer Grenzflächenversetzung auf einer kreuzenden Gleitebene oder einer parallelen Gleitebene nicht ausreicht, um die beobachteten Spannungen zu erklären. Wenn viele Grenzflächenversetzungen vorhanden sind (Felder von Grenzflächenversetzungen), ergeben sich aufgrund der summierten Wechselwirkungen größere Fließspannungen, die im Bereich der experimentellen Werte liegen. Allerdings muß dann der Abstand zwischen den Grenzflächenversetzungen viel kleiner als die Schichtdicke sein, wodurch die Schichtdickenabhängigkeit der Fließspannung verloren geht. Die Reaktion von mobilen Versetzungen mit Versetzungen auf Gleitebenen, die parallel zur Schichtebene ausgerichtet sind und in der Mitte der Schicht liegen, können ebenfalls nicht die hohen Fließspannungen erklären. Zwei bewegliche Versetzungen deren Threading-Segmente einander sehr nahe kommen, können sich durch gegenseitigen Einfang immobilisieren. Solche Ereignisse sind aber zu selten, als daß sich hierdurch die experimentell beobachteten Spannungen erklären lassen.

Zusammenfassend läßt sich festhalten, daß Modelle, die die Fließspannung aus der Wechselwirkung von beweglichen Versetzungen, die sich über die gesamte Schichtdicke erstrecken, mit anderen Versetzungen in Anordnungen, wie sie bei der Verformung dünner Schichten wahrscheinlich auftreten (z. B. als Grenzflächenversetzungen), nicht die experimentellen Beobachtungen erklären können. TEM Studien haben außerdem gezeigt, daß die Existenz von Grenzflächenversetzungen keine notwendige Voraussetzung für die hohen



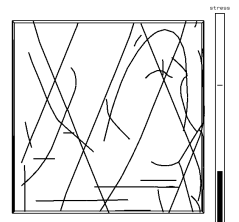
Spannungen in den dünnen Schichten ist.

Da die Untersuchung der Bewegung von Versetzungen nicht zu plausiblen Erklärungen geführt hatte, wurde die Erzeugung bzw. Vervielfältigung von Versetzungen simuliert. Hier wurde davon ausgegangen, daß es wenige Versetzungsquellen im Inneren der Körner gibt, die mehrfach aktiviert werden müssen, um eine plastische Verformung der Schicht zu erreichen. Eine emittierte Versetzung muß einmal um die Versetzungsquelle herumgleiten, um einen geschlossenen Versetzungsring zu erzeugen. Wird die effektive Quellengröße als der kleinste Hindernisabstand definiert, auf den die Versetzung bei der Umrundung der Quelle trifft, folgt hieraus eine maximale effektive Versetzungsquellengröße von einem Drittel der Schichtdicke oder Korngröße für die erste Aktivierung bzw. eine kleinere Größe für die nachfolgenden Aktivierungen. Die Versetzungsringe stauen an den Korngrenzen und (wenn vorhanden) Grenzflächen auf, und üben eine Rückspannung auf die Versetzungsquelle aus. Hierdurch wird die erneute Aktivierung der Quelle erschwert, es kommt zu einer starken Verfestigung. Die Fließspannung nach dieser Modellvorstellung (dem Quellenmodell) ergibt sich aus der Spannung, die benötigt wird, um Versetzungen zu erzeugen. Da die Quellen effektiv eine Größe von höchstens einem Drittel der Schichtdicke haben, ist die Fließspannung mindestens dreimal¹ so groß wie für eine Versetzung, die sich über die gesamte Schichtdicke erstreckt (Nix Modell) und damit vergleichbar mit experimentellen Daten. Schichtdicke und Korngröße sind gleichwertige Parameter, die kleinere Größe kontrolliert die Fließspannung, vorausgesetzt, es werden Versetzungen an den Grenzflächen abgelegt. In freistehenden Schichten wird die Fließspannung nach dem Quellenmodell alleine von der Korngröße kontrolliert, aber auch wenn keine Grenzflächenversetzungen abgelegt werden ergeben sich hohe Fließspannungen.

Um zu überprüfen, ob das einfache Bild einer einzelnen Quelle auf den allgemeineren Fall vieler Quellen, deren Versetzungen miteinander wechselwirken können, übertragbar ist, wurden komplexere Simulationen mit mehreren Quellen in einer dreidimensionalen Geometrie durchgeführt. Es konnte gezeigt werden, daß die Verfestigung auch in der Vielquellensimulation hauptsächlich auf die Rückspannung der aufgestauten Versetzungen auf die eigene Quelle zurückzuführen ist. Wechselwirkungen der Versetzungen verschiedener Quellen können vernachlässigt werden, wenn die Dichte der Versetzungsquellen nicht sehr hoch ist ($\rho_0 < 2.3 \cdot 10^{14} \text{m}^{-2}$ im Fall der 2000b dicken Schicht).

Viele experimentelle Beobachtungen konnten mit der Simulation reproduziert und verstanden werden: Die Änderung der simulierten Gesamtversetzungsdichten ist bei kleinen plastischen Dehnungen vergleichbar mit im Mikrozugversuch anhand der Röntgenpeakbreite bestimmten Versetzungsdichten. Die simulierten Versetzungskonfigurationen zeigen in Übereinstimmung mit TEM Beobachtungen höhere Versetzungsdichten an den Korngrenzen und Grenzflächen. Die Simulationsergebnisse können erklären, warum die Verfestigung mit abnehmender Schichtdicke zunimmt: Die Verfestigung ist proportional zur plastischen Dehnung aufgeteilt auf die Quellen in einem Korn. Ist die Quellendichte unabhängig von der Schichtdicke und Korngröße, so gibt es in kleineren Körnern weniger Quellen, die

¹Berücksichtigt man hier eine mehrfache Aktivierung der Quelle und die entsprechende Verfestigung, ergibt sich schnell ein Faktor vier oder fünf.



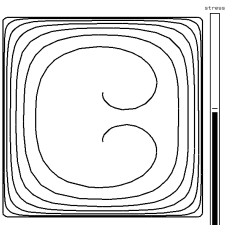
Verfestigung ist entsprechend größer. Der Bauschinger Effekt wird auch in simulierten Entlastungsexperimenten gefunden. In der Simulation wurde ebenso wie im Experiment beobachtet, daß das Verhältnis der Fließspannungen von $\langle 111 \rangle$ orientierten Körnern zu der Fließspannung in $\langle 001 \rangle$ Körnern größer ist, als das Verhältnis der Schmidfaktoren. Die simulierten Fließspannungen nehmen mit abnehmender Schichtdicke oder Korngröße zu, die berechneten Fließspannungen sind im Gegensatz zu allen anderen veröffentlichten Modellvorhersagen größer als die experimentellen Werte. Ein Überschätzen der Fließspannungen ist jedoch auch zu erwarten, da Relaxationsmechanismen wie thermische Aktivierung, Klettern oder Quergleiten der Versetzungen oder die Transmission der plastischen Verformung über die Korngrenzen in die Nachbarkörner nicht berücksichtigt wurden.

Um den letztgenannten Mechanismus genauer zu studieren, wurden Simulationen durchgeführt, in denen den Korngrenzen eine Stärke zugeordnet wurde (Hall–Petch Fließkriterium). Es wurde eine einzelne Quelle in einem Korn simuliert, an der sich, wie in der Vielquellensimulation gezeigt, die wesentlichen Punkte der Dünnschichtverformung studieren lassen. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen verdeutlichen, daß die Versetzungsquelle in einer Modellbeschreibung berücksichtigt werden muß. Die Fließspannung nach der Hall–Petch Definition wird ebenso wie die Quellenaktivierungsspannung von der kleineren Größe von Korngröße oder Schichtdicke gesteuert. Skaliert die Größe der Versetzungsquelle mit den Kornabmessungen, so folgt eine kritische Korngröße (bzw. Schichtdicke), unterhalb derer die Quellenaktivierung die Fließspannung kontrolliert (Skalierung der Fließspannung mit $1/h$ bzw. $1/d$). Oberhalb der kritischen Korngröße zeigt die Fließspannung Hall–Petch Verhalten (Skalierung mit $1/\sqrt{h}$ bzw. $1/\sqrt{d}$). Abbildung 6.1 faßt diese Ergebnisse zusammen. Die Schichtdicken der untersuchten dünnen Schichten sind von der gleichen Größenordnung wie d^* , wenn d^* aus der experimentell gemessenen Hall–Petch Konstanten berechnet wird.

Die Durchbruchspannung τ_b^* ist in dem Modell ein freier Parameter, der angibt, wie weit die Körner verfestigen. Bei einer Überschreitung der Durchbruchspannung bleibt die Fließspannung im Rahmen der Modells konstant (in einer realen Schicht wird dieses abrupte Ende der Verfestigung nicht zu beobachten sein, da es Körner unterschiedlicher Größe gibt). Wird die Fließspannung mittels τ_b^* an experimentelle Daten dünner Schichten angepaßt, ist τ_b^* vergleichbar mit der aus Experimenten am grobkörnigen Volumenmaterial berechneten Durchbruchspannung. Die Korngrößenabhängigkeit der Fließspannung wird dabei durch das Modell gut reproduziert.

6.1 Ausblick

Auf der Basis der hier präsentierten Ergebnisse und Modelle ergeben sich Vorschläge für weiterführende Untersuchungen, die sich in zwei Gruppen einteilen lassen: neue Experimente zur Überprüfung des Quellenmodells und Erweiterung der Simulation und Anwendung auf neue Problemstellungen.



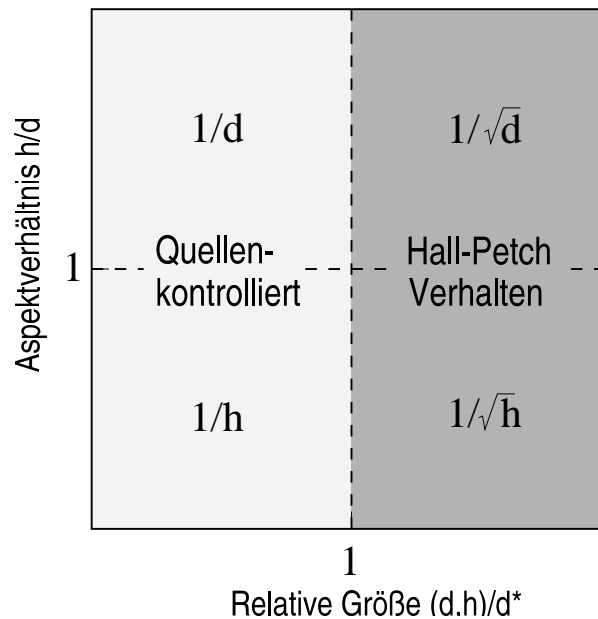
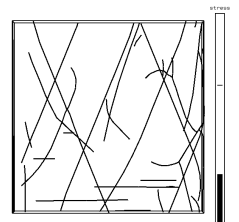


Abb. 6.1: Einfaches Schema der Verformungsmechanismen für eine polykristalline, dünne Schicht, das die Abhängigkeit der Fließspannung für unterschiedliche Aspektverhältnisse (h/d) und relative Kornabmessungen (die kleinere Größe von d oder h dividiert durch d^*) verdeutlicht. Es wurde vorausgesetzt, daß die Größe der Versetzungsquelle mit der Schichtdicke oder Korngröße skaliert. Unterschiede zwischen Schrauben- und Stufenversetzungen wurden vernachlässigt.

6.1.1 Überprüfung des Quellenmodells

Schichtdicke und Korngröße sind nach den Ergebnissen dieser Arbeit gleichwertige Parameter in der Kontrolle der Fließspannung, vorausgesetzt, Versetzungen stauen vor Korngrenzen und Grenzflächen auf (passivierte oder oxidierte Schichten). Fließspannungen bereits durchgeführter und zukünftiger Experimente sollten deshalb über der kleineren Größe aus Schichtdicke und Korngröße aufgetragen werden (wie dies schon in Abbildung 5.4 geschehen ist). Lassen sich hierdurch Ausreißerpunkte erklären, würde dies die Modellvorstellung bestätigen. Mit dieser Auftragung kann auch die Skalierung der Fließspannung mit der Schichtdicke untersucht werden, wofür zusätzliche Experimente insbesondere mit der Mikrozugapparatur über einen größeren Bereich von Korngrößen und Schichtdicke wünschenswert wären (was wahrscheinlich der Wunsch eines jeden Theoretikers ist, aber für Experimentatoren ohne die Zugabe von neuen Legierungselementen, anderen Passivierungen und Variation der Temperatur viel zu langweilig ist). Mikrozugversuche sind besser geeignet als Substrat-Krümmungsexperimente, da sie bei konstanter Temperatur durchgeführt werden und die Spannung bei einer vorgegebenen plastischen Dehnung bestimmt werden kann. Anhand von neuen, zusätzlichen Spannungsdaten aus dem Plateaubereich in Mikrozugversuchen ($\epsilon_{pl} \geq 0.5\%$) sollte überprüft werden, ob die Änderung der Skalierung der Fließspannung mit den Kornabmessungen l von $1/l$ zu $1/\sqrt{l}$ beobachtet wird. Dieser Übergang



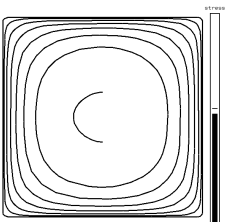
wird im Bereich $200\text{nm} \leq l \leq 1300\text{nm}$ erwartet (Abschnitt 5.4.2.2). Möglicherweise kann die $1/l$ Abhängigkeit nicht eindeutig bewiesen werden, wenn sich nicht genug Datenpunkte gewinnen lassen. Durchgängige Schichten mit Schichtdicken $h < 200\text{nm}$ sind nur schwer herstellbar (allerdings könnten hier auch dickere Schichten mit kleineren Korngrößen verwendet werden), und bei sehr kleinen Kornabmessungen und hohen Spannungen können andere Verformungsmechanismen wie Korngrenzgleiten zum Spannungsabbau beitragen. Allerdings sollte eine $1/\sqrt{l}$ Abhängigkeit bei großen Kornabmessungen festgestellt werden können. Interessant ist auch die Fragestellung, ob ein Übergang zum Verhalten des Volumenmaterials beobachtet werden kann, denn nicht nur die Untersuchung immer dünnerer Schichten sondern auch der Bereich zwischen $1\mu\text{m}$ und $20\mu\text{m}$ kann neue Ergebnisse bringen: Was passiert, wenn die Körner wieder so groß sind, daß Versetzungsnetzwerke in ihnen Platz haben. Ändert sich die Hall–Petch Konstante bzw. die Durchbruchspannung bei diesem Übergang? Welche Folgen hat der Übergang von einer kolumnaren zu einer nicht-kolumnaren Kornstruktur (nach dem Quellenmodell sind hier keine Unterschiede zu erwarten).

Im Diskussionsteil wurde davon ausgegangen, daß die Raumtemperaturspannungen von Substrat–Krümmungsexperimenten sich noch nicht im Plateaubereich befinden ($\epsilon_{\text{pl}} < 0.5\%$) und sich daher besser durch eine $1/l$ Abhängigkeit beschreiben lassen. Diese Annahme muß natürlich experimentell noch eingehender untersucht werden. Zunächst könnte durch Relaxationsexperimente im Temperaturbereich zwischen 200°C und 300°C festgestellt werden, ob es neben dem Gleiten der Versetzungen einen Mechanismus gibt, der bei hohen Temperaturen Spannungen abbaut und in diesem Temperaturintervall einfriert. Dieser Relaxationsmechanismus könnte ausgenutzt werden, um die Spannungen in der Schicht durch genügend langes Halten bei einer Temperatur knapp über der Einfriertemperatur zu relaxieren, um so vor dem Abkühlen auf Zimmertemperatur in allen Schichten gleiche Anfangsbedingungen zu bekommen.² Aus den Abkühlkurven können dann Verfestigungsraten und Fließspannungen bei gleicher plastischer Dehnung bestimmt werden.

Zur Bestätigung der Annahmen des Quellenmodells sind weitere experimentelle Beobachtungen von Versetzungen notwendig, in denen insbesondere die Entstehung bzw. Multiplikation der Versetzungen und das Aufstauen an Korngrenzen oder Grenzflächen untersucht wird.³ Gut geeignet sind hierfür in situ Zugversuche im Transmissionselektronenmikroskop, in denen die Bewegung von Versetzungen unter einer angelegten Spannung direkt beobachtet werden kann. Auch durch indirekte Methoden können Aussagen über die Versetzungsevolution gemacht werden. Durch Untersuchungen von Gleitspuren an der Oberfläche nicht passivierter Schichten mittels Atomkraftmikroskopie kann festgestellt werden, wie homogen die Versetzungsquellen in der Schicht verteilt sind und wie viele Versetzungen sich auf der gleichen Gleitebene bewegen [183]. Hiermit könnte überprüft werden,

²Nach dem Gao Modell der eingeschränkten Diffusion [164] findet die Spannungsrelaxation durch Diffusion nur im Bereich der Korngrenzen statt, so daß eine Relaxation der gesamten Schicht nicht erreicht werden kann.

³Wenn die Kornabmessungen im Bereich der kritischen Korngröße d^* liegen, gibt es keine großen Versetzungsaufstaus: ein oder zwei Versetzungen reichen dann aus, um plastische Verformung über die Korngrenze ins Nachbarkorn zu transferieren (Abbildung 5.21).



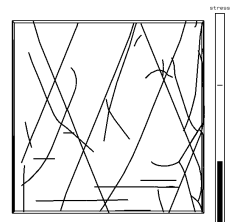
ob die Annahme weniger, mehrfach operierender Quellen gerechtfertigt ist.

Möglicherweise sind die großen Versetzungsdichten und die Versetzungsquellen im Korninneren auf den Herstellungsprozeß der Schichten zurückzuführen. Die meisten der untersuchten Metallschichten werden durch Sputtern auf ein Substrat hergestellt. Direkt nach der Herstellung ist die Korngröße viel kleiner als die Schichtdicke, erst in einem nachfolgenden Auslagerungsprozeß wachsen die Körner, bis die Korngröße etwa genauso groß wie die Schichtdicke ist. Mikroskopische Untersuchungen der Mikrostrukturentwicklung und die Verwendung anderer Herstellungsverfahren können darüber Aufschluß geben, ob die Versetzungsstrukturen herstellungsbedingt sind und welche Auswirkungen der Herstellungsprozeß auf die mechanischen Eigenschaften hat.

Mikrozugversuche mit Be- und anschließender Entlastung können herangezogen werden, um aus der bleibenden plastischen Rest-Dehnung nach der Entlastung die Anzahl der verlorenen (nicht reversiblen) Versetzungen zu bestimmen. Durch Vergleich von passivierten und nicht passivierten Schichten könnte überschlagen werden, ob und wieviele Versetzungen die Schicht an der freien Oberfläche verlassen, bzw. ob eine Passivierung die Versetzungen in der Schicht halten kann. Außerdem können diese Daten mit Simulationsergebnissen verglichen werden, um dadurch die Randbedingungen der Simulation zu überprüfen. Ebenso interessant wäre es, die Zeitabhängigkeit und Temperaturabhängigkeit des Versetzungsschwundes zu untersuchen. Hierdurch könnte unterschieden werden, ob thermisch aktivierte Relaxationsprozesse auf das thermisch aktivierte Schneiden von Waldversetzungen oder auf andere thermisch aktivierte Prozesse, die einen Abbau des Spannungsfeldes der Versetzungen in den Körnern verursachen (Kernaufweitung und Dissoziation von Grenzflächenversetzungen, Durchtritt durch Grenzflächen), zurückzuführen ist. Letzteres hätte eine Zunahme des Versetzungsschwundes mit Zeit und Temperatur zur Folge. Ist dagegen thermisch aktiviertes Überwinden von Waldversetzungen der einzige Relaxationsprozeß bei niedrigen Temperaturen $T < 200^\circ\text{C}$, wäre der Versetzungsschwund unabhängig von Zeit und Temperatur.

6.1.2 Erweiterungen und neue Anwendungen der Versetzungssimulation

Ohne wesentlich neues in die Simulation bringen zu müssen, sind Erweiterungen möglich, die zunächst die Lücke zwischen der Welt der Versetzungen in einkristallinen, isolierten Körnern und konkreter Mikrostrukturen (Polykristalle, realistische Korngrenzen) verkleinern. Wie in Kapitel 4.3.6 gezeigt, sind Simulationen von mehreren, benachbarten Körnern möglich. Diese können leicht modifiziert werden, so daß auch Körner unterschiedlicher Größe und Form behandelt werden können. Ein Problem ist die mit der Anzahl der Körner zum Quadrat zunehmende Rechenzeit. Hier bietet sich eine Parallelisierung des Programms an, in der jedes Korn von einem Prozessor berechnet wird. Realitätsnahe Simulationen sind dort möglich, wo die realen Strukturen ebenfalls nur aus wenigen Körnern bestehen, wie das bei einigen Strukturen in integrierten Schaltungen bereits der Fall ist. Ein voraussichtlich gut geeignetes Beispiel sind Kupferleiterbahnen mit einer Bambus-Kornstruktur. In den



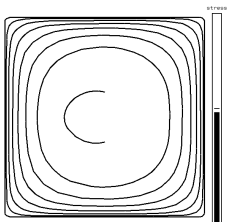
Vielkristallsimulationen können außerdem Modelle über das Verhalten von Korngrenzen (Versetzungsquellen, Senken, Transmission von Versetzungen durch Korngrenzen) getestet werden.

Neue Anwendungsmöglichkeiten der Versetzungssimulation ergeben sich, wenn versucht wird, Versetzungskonfigurationen im Transmissionselektronenmikroskop so genau zu bestimmen, daß diese als Startkonfigurationen in der Simulation verwendet werden können. In situ Beobachtungen können dann mit Simulationen der Versetzungsdynamik verglichen werden und entsprechende Modelle direkt überprüft werden.

In Spannungsmessungen mit großer Ortsauflösung (mittels Röntgenstrahlung [184] oder konvergenter Elektronenbeugung [185]) kann die Spannung innerhalb einzelner Körner in dünnen Schichten bestimmt werden. Vergleichbare Spannungsdaten können auch mit der Simulation gewonnen werden, da hier sämtliche Komponenten des Spannungstensors berechnet und gegebenenfalls über die Auflösungsgenauigkeit des entsprechenden Experiments gemittelt werden können (vergleiche mit Abbildung 3.4). Interessant sind solche Vergleiche insbesondere für Simulationen mit mehreren unterschiedlichen Körnern, um Verformungsinhomogenitäten zu untersuchen.

In einer realen Schicht werden die Spannungen, die durch die Zugapparatur oder die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten aufgebracht werden, im allgemeinen nicht überall gleich sein. Diesem kann in der Simulation Rechnung getragen werden, indem eine Ortsabhängigkeit des angelegten Spannungstensors implementiert wird. Wenn es einen analytischen Ausdruck für die Ortsabhängigkeit des Spannungstensors gibt, kann dieser direkt in der Simulation verwendet werden, ansonsten könnte die Spannungsverteilung z. B. mit einem Finite Elemente Programm berechnet werden und punktweise der Versetzungssimulation übergeben werden. Auf diese Weise ist auch eine Verknüpfung der Spannungsrelaxation durch Diffusionsprozesse mit der Versetzungsbewegung möglich. Nach dem Modell der eingeschränkten Diffusion in dünnen Schichten [164] relaxieren die Spannungen im Bereich der Korngrenzen durch Einbau oder Wegnahme von Atomen in diesen Bereichen. Hierdurch verringern sich die Spannungen an den Korngrenzen, während sie im Korninneren unverändert bleiben. Außerdem entstehen dabei Scherspannungen auf der Ebene parallel zur Schichtdicke, die Versetzungen in diesen Ebenen bewegen. Hierdurch können komplett andere Versetzungskonfigurationen entstehen, da diese Versetzungen durch in der Schichtebene angreifenden Zug oder Druck keine Kräfte erfahren. Für den Spannungszustand, der sich durch die eingeschränkte Diffusion einstellt, existieren analytische Ausdrücke, so daß diese unmittelbar in der Simulation verwendet werden können. Alternativ könnte ein Spannungszustand einer dünnen Schicht auf einem Substrat unter Berücksichtigung der Relaxation der Schichtränder verwendet werden, für den ebenfalls analytische Ausdrücke vorhanden sind [186, 17].

Abbildung 6.2 zeigt, daß sich unter inhomogenen Spannungsverteilungen andere Versetzungsanordnungen ergeben können: Im Gegensatz zur homogenen Spannungsverteilung (die in den in dieser Arbeit präsentierten Simulationen verwendet wurde) liegen die Versetzungen hier nicht am Rand sondern in der Mitte des Korns. Ähnliche Versetzungsanordnungen wurden auch im Elektronenmikroskop auf Gleitebenen parallel zur Schichtebene beobachtet [170].



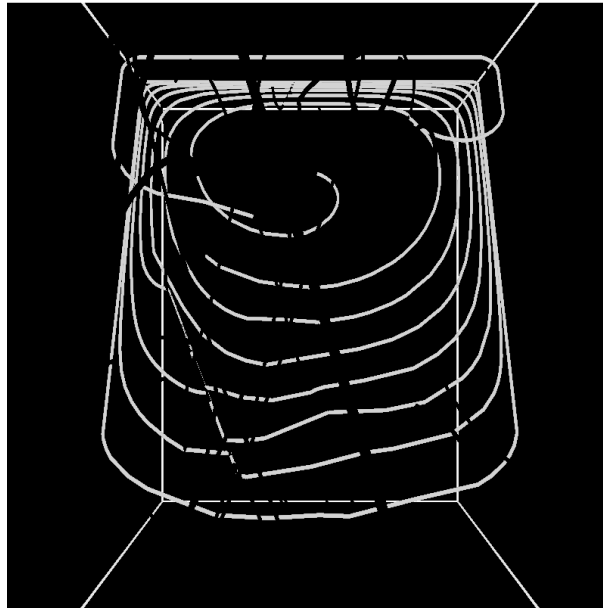
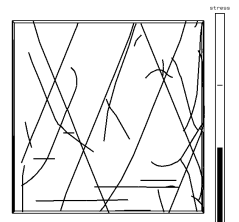


Abb. 6.2: Versetzungskonfiguration für eine (künstliche) inhomogene Spannungsverteilung. Die Zugspannung variiert über der Länge des Korns: Vorne und hinten ist sie maximal, in der Mitte des Korns ist sie null. Sichtbar sind nur die Versetzungen eines Gleitsystems, alle anderen Versetzungen sind schwarz gefärbt.

Andere Erweiterungen der Simulation, die eine realistischere Simulation von Spannungs–Dehnungskurven ermöglichen, sind der Einbau von Relaxationsmechanismen, wie Versetzungsquergleiten, welches schon implementiert aber noch nicht anhand von Testrechnungen überprüft ist, Versetzungsklettern, thermisch aktivierte Überwindung von Hindernissen oder das zeitabhängige Verschwinden von Versetzungen an Korngrenzen und Grenzflächen. Diese Mechanismen verursachen eine Spannungsreduktion, so daß sich durch deren Integration in die Simulation eine verbesserte Übereinstimmung mit experimentellen Daten (z. B. Abbildung 5.11) ergeben sollte.

Die Realisierung aller aufgezählter Erweiterungen der Simulation — Relaxationsmechanismen, Korngrenzen als Quellen und Senken, Ankopplung eines Finite Elemente Modells über die angelegte Spannung, Übernahme von Versetzungskonfigurationen aus experimentellen Beobachtungen — ist ein langer Prozeß, würde aber damit belohnt werden, daß die Durchführung von realistischen Verformungsexperimenten im Computer in den Bereich des Möglichen kommt.



Anhang A

Model for Grain boundary hardening

The obstacle strength of grain boundaries for lattice dislocations is generally unknown. It has been argued that grain boundaries are impenetrable for dislocations [181, S. 170], but at least for some special grain-boundaries dislocation transmission was observed [187,188]¹.

In the Hall–Petch model the obstacle strength of a grain boundary is included only as an unknown parameter τ_{gb} .

Atomistic calculations are in principle able to predict τ_{gb} but this has not been done systematically. It is not possible to treat the interaction in a mesoscopic theory based on continuum elasticity (i. e. based on dislocation dynamics) in an exact way, but some minimum requirements for dislocation–transmission can be established. These give a lower estimate of a grain boundary obstacle strength.

Different grains are distinguished by their different crystallographic orientation. This suggests the following definition of dislocation–transmission through a grain boundary:

Definition In general dislocations have to change the slip plane and the Burgers vector when transferring from one grain to the adjacent one.

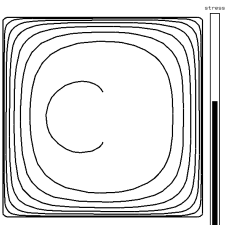
Two conditions have to be fulfilled during this process:

Condition 1 Burgers vector conservation has to be achieved,

Condition 2 Dislocation line continuity has to be preserved.

With this definition, and the two additional conditions, the strength of a grain-boundary can be established in a line tension model and dislocations transmission through grain boundaries can be examined in a DDD simulation. Since the exact nature of the transmission is ignored, this should give a lower limit for the grain boundary strength.

¹In this context transfer or transmission of dislocations through grain boundaries is understood as the combination of absorption of a dislocation in the boundary and simultaneous emission of a new dislocation in the adjacent grain.



A.1 Energy balance model of dislocation–transmission through grain boundaries in a thin film

In this section the critical stress to drive a dislocation through a grain boundary is derived by equating the energy needed to generate dislocations in the grain boundary with the work done by the moving dislocation.

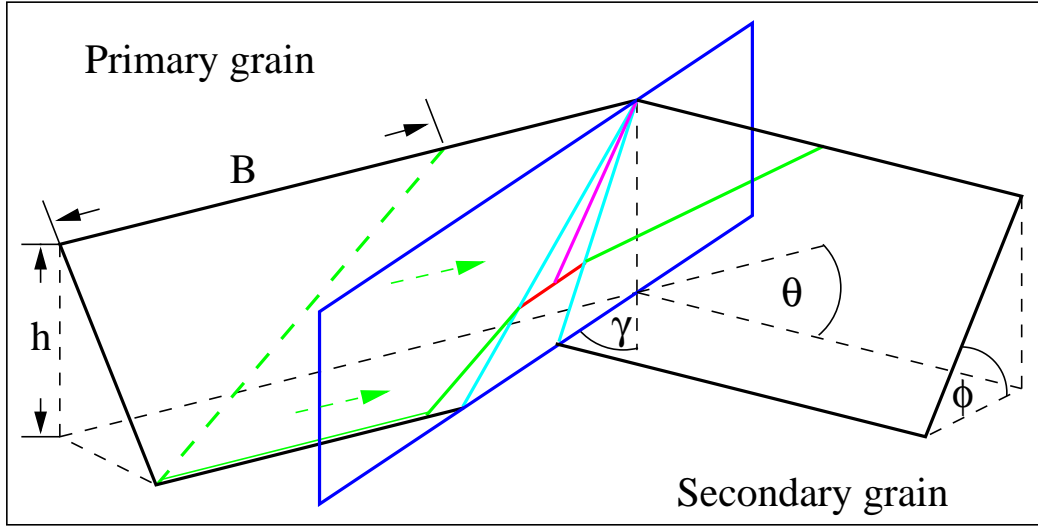


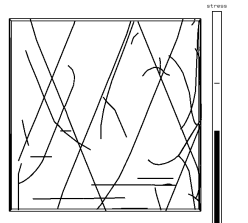
Abb. A.1: Geometry of a grain boundary in a thin film. The inclined slip planes of the primary and secondary grain are intersected by the vertical grain boundary. The boundary is asymmetrical and the intersection lines of the slip planes with the grain boundary do not coincide. A dislocation moves from the primary to the secondary grain.

Figure A.1 shows a dislocation passing through a grain boundary. According to the conditions of the previous section two additional dislocations have to be deposited in the boundary.

If the dislocation changes its Burgers vector during the transmission, a new dislocation with the residual Burgers vector $\Delta \mathbf{b} = \mathbf{b}_{\text{before}} - \mathbf{b}_{\text{after}}$ has to be deposited in the grain boundary to fulfill condition 1. The length of this dislocation for a given grain boundary is characterised by γ and θ (γ being the angle between the primary slip plane and the grain boundary and θ the tilt of the secondary grain) and can be found from Figure A.1:

$$\eta_{\text{tot}} = l \sqrt{\frac{\cos^2 \phi}{4} \left(\frac{1}{\cos(\theta/2 + \gamma)} + \frac{1}{\cos(\theta/2 - \gamma)} \right)^2 + \sin^2 \phi}. \quad (\text{A.1})$$

Here it is supposed that this dislocation is deposited between the traces of the slip planes. For a perfectly textured film the residual Burgers vector is always parallel to the film



surface and the deposited dislocation has pure edge character with an energy:

$$W_{\text{gb,tot}} = \frac{(\Delta b)^2 \mu_f}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{\alpha \rho_d^{-2}}{b^2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \sqrt{\frac{\cos^2 \phi}{4} \left(\frac{1}{\cos(\theta/2 + \gamma)} + \frac{1}{\cos(\theta/2 - \gamma)} \right)^2} + \sin^2 \phi \Delta l. \quad (\text{A.2})$$

If the intersections of the slip planes with the grain boundary do not coincide (i. e. if the grain boundary is not symmetrical), an additional dislocation has to be deposited to bridge the distance between the glide planes and to assure condition 2. The length of the “bridge” segment after a complete passage is given by

$$\eta_{\text{segm}} = \left| \frac{1}{\cos(\theta/2 + \gamma)} - \frac{1}{\cos(\theta/2 - \gamma)} \right| l \cos \phi. \quad (\text{A.3})$$

The energy of this segment is the same as that given by equation (2.2) for a dislocation of length η_{segm} :

$$W_{\text{segm}} = \frac{1 - \nu \cos^2 \beta}{1 - \nu} \frac{b^2}{4\pi} \frac{2\mu_s \mu_f}{\mu_s + \mu_f} \ln \frac{\alpha h}{b} \left| \frac{1}{\cos(\theta/2 + \gamma)} - \frac{1}{\cos(\theta/2 - \gamma)} \right| l \cos \phi. \quad (\text{A.4})$$

The total energy deposited in the grain boundary dislocations while the dislocation advances a small distance Δl is given by the sum of both contributions: ²

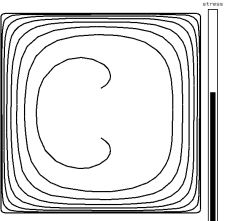
$$W_{\text{gb,tot}} = \frac{1 - \nu \cos^2 \beta}{1 - \nu} \frac{b^2}{4\pi} \frac{2\mu_s \mu_f}{\mu_s + \mu_f} \ln \frac{\alpha h}{b} \left| \frac{1}{\cos(\theta/2 + \gamma)} - \frac{1}{\cos(\theta/2 - \gamma)} \right| \Delta l \cos \phi + \frac{b\mu_f}{3\pi(1-\nu)} \ln \frac{\alpha \rho_d^{-2}}{b^2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \sqrt{\frac{\cos^2 \phi}{4} \left(\frac{1}{\cos(\theta/2 + \gamma)} + \frac{1}{\cos(\theta/2 - \gamma)} \right)^2} + \sin^2 \phi \Delta l. \quad (\text{A.5})$$

The length of these grain boundary dislocations — and therefore the energy — is proportional to the projection of the part of the dislocation which has already passed the boundary on the intersection line of slip plane and grain boundary (see Figure A.2). Hence it becomes necessary to relate the projection Δl to the advance Δx of the threading segment when equating the energies. Generally, Δl is a function of Δx and will depend on the actual line shape at the boundary. But, for simplicity, it is assumed that the threading segment has a constant slope and Δl is given by

$$\Delta l = \frac{l}{B} \Delta x \quad (\text{A.6})$$

with the dislocation base length B and width l (compare with figure A.2). The width is given by the film thickness $l = \frac{h}{\sin \phi}$ whereas the base length is undetermined. A reasonable

²This is an approximation insofar as the effective shear modulus $\frac{2\mu_s \mu_f}{\mu_s + \mu_f}$ applies when the dislocation is deposited at the film–substrate interface. This is only the case after a complete passage of the moving dislocation and not for an infinitesimal advance.



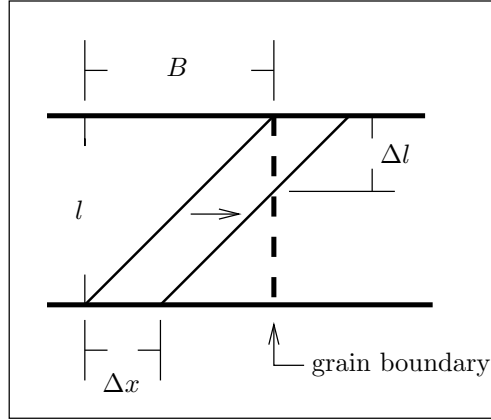


Abb. A.2: Schematic view of the dislocation's leading segment (the threading segment) passing the grain boundary (seen along the slip-plane normal)

value and upper bound for B is the mean grain size d . Using equation (A.6) and the expression for the work done by the dislocation (2.1) one obtains the critical resolved shear stress:

$$\begin{aligned} \tau_{\text{gb,tot}}(\theta, \gamma) = & \frac{b\mu_f}{3\pi(1-\nu)} \ln \frac{\alpha\rho_d^{-2}}{b} \sin^2 \frac{\theta}{2} \sqrt{\frac{\cos^2 \phi}{4} \left(\frac{1}{\cos(\theta/2 + \gamma)} + \frac{1}{\cos(\theta/2 - \gamma)} \right)^2 + \sin^2 \phi} \frac{1}{B} \\ & + \frac{1-\nu \cos^2 \beta}{1-\nu} \frac{b}{4\pi} \frac{2\mu_s\mu_f}{\mu_s + \mu_f} \ln \frac{\alpha h}{b} \left| \frac{1}{\cos(\theta/2 + \gamma)} - \frac{1}{\cos(\theta/2 - \gamma)} \right| \frac{\cos \phi}{B}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

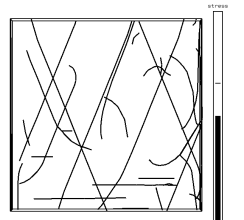
Figure A.3 displays $\tau_{\text{gb,tot}}$ in the (θ, γ) -plane in units of $\frac{Pam}{B}$. $\tau_{\text{gb,tot}}$ diverges, when the grain boundary is parallel to a glide plane. For these angles the grain boundary dislocations become infinitely long³.

A.1.1 Application to coherent twin-boundaries

It has been observed that thin copper films with a strong (111) texture contain many twins [94]. If one tries to measure the average grain size it is not clear, whether the twins should be taken as separate grains. But the grain size is of crucial importance if one wants to estimate grain boundary strengthening. The model introduced in the preceding section can serve to evaluate the importance of twin boundaries for strengthening.

The twin boundary is characterised by a 70.5° rotation about the $\langle 110 \rangle$ direction. The boundary plane is $(1\bar{1}\bar{1})_1$ for the first grain and $(1\bar{1}1)_2$ in the coordinate system of the second. For an incoming slip system of $[0\bar{1}1]_1(111)_1$ it is obvious that the critical resolved shear stress is zero because the dislocation can change to the secondary slip system

³In the calculation the following material constants for copper on silicon have been used: $b = 0.3\text{nm}$, $\nu = 0.324$, $\mu_f = 54.6\text{ GPa}$ and $\mu_s = 68.1\text{ GPa}$.



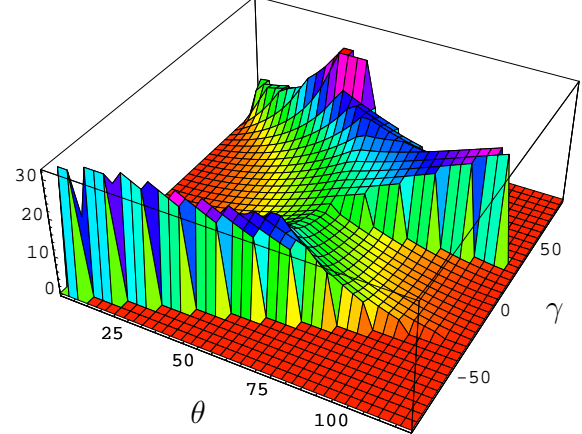
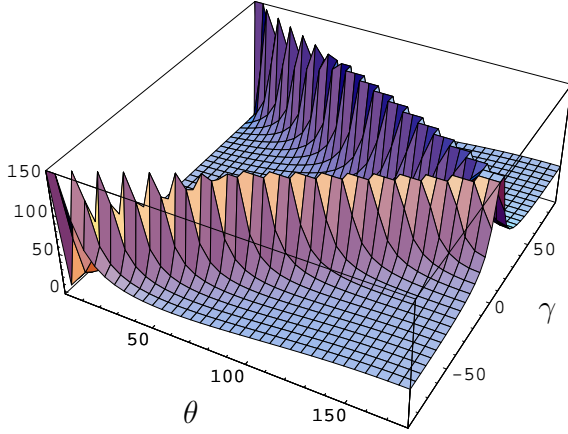


Abb. A.3: Critical resolved shear stress in units of $[Pa m/B]$ as given by equation (A.7). **Abb. A.4:** Lowest critical resolved shear stress under consideration of all possible slip systems

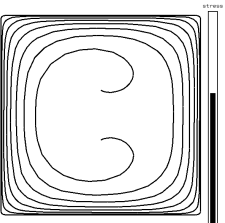
$(\bar{1}01)_2(111)_2$ without changing its Burgers vector or bridging a gap in the grain boundary. If the incoming slip system is assumed to be $[\bar{1}01]_1(111)_1$, among the twelve possible slip systems the one with the lowest critical stress has to be chosen. It can be seen from Table A.1 that the transition $[10\bar{1}]_1(111)_1 \rightarrow [1\bar{1}0]_2(111)_2$ shows the lowest critical stress. For this transition the traces of the slip-planes with the boundary meet in a single line (i. e. the intersection angle is 0°). No bridge dislocation (equation (A.4)) is needed. The residual Burgers vector equals $\Delta b = 1/6[121]_2 = b_0/\sqrt{3}$ and the grain boundary dislocation has a $\beta = 73^\circ$ character. Its length-increment is given by $\Delta l = \frac{2b}{\sqrt{3}B} \Delta x$. Taking these values and equation (A.7) the critical resolved shear stress needed to drive a dislocation through a coherent twin boundary can be calculated as:

$$\tau_{\text{crit,twin}} = \frac{7.1}{B} \text{Pa m.} \quad (\text{A.8})$$

The same critical stress results from the $[1\bar{1}0]_1(111)_1 \rightarrow [0\bar{1}1]_2(111)_2$ transition.

A.1.2 Application to polycrystalline thin films

The expression for the critical stress contribution due to the grain boundaries derived in section A.1 depends on the relative orientation of the neighbouring grains and the grain boundary. A polycrystal contains many different grain boundaries and one has to average over the possible orientations to get an estimate of the mean contribution to the flow stress. This is done in this subsection by assuming that all orientations are equally probable.



Slip plane	Burgers vector	intersection angle	residual dislocation	critical stress
$(111)_2$	$1/2[1\bar{1}0]_2$	0.0°	\mathbf{b}_1	7.1
	$1/2[\bar{1}01]_2$		$\mathbf{b}_4 + 2\mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3$	30
	$1/2[0\bar{1}1]_2$		$2\mathbf{b}_2$	24
$(\bar{1}\bar{1}1)_2$	$1/2[110]_2$	60.0°	$\mathbf{b}_4 - \mathbf{b}_1$	68
	$1/2[101]_2$		$-2\mathbf{b}_3$	76
	$1/2[0\bar{1}1]_2$		$2\mathbf{b}_2$	76
$(1\bar{1}\bar{1})_2$	$1/2[110]_2$	0.0°	$\mathbf{b}_4 - \mathbf{b}_1$	19
	$1/2[\bar{1}01]_2$		$\mathbf{b}_4 + 2\mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3$	30
	$1/2[011]_2$		$2\mathbf{b}_4 - 2\mathbf{b}_3$	38
$(11\bar{1})_2$	$1/2[1\bar{1}0]_2$	60.0°	\mathbf{b}_2	52
	$1/2[101]_2$		$-2\mathbf{b}_3$	76
	$1/2[011]_2$		$2\mathbf{b}_4 - 2\mathbf{b}_3$	94

Tab. A.1: Critical stress in [$Pa m/B$] for every slip system in the second grain for a coherent twin boundary in copper (calculated with equation (A.7)) ($\mathbf{b}_1 = 1/6[121]_2$, $\mathbf{b}_2 = 1/6[21\bar{1}]_2$, $\mathbf{b}_3 = 1/6[\bar{1}12]_2$, $\mathbf{b}_4 = 1/3[1\bar{1}1]_2$)

In Figure A.3 only one secondary slip-system (characterised by the angle θ) was chosen as the active one. But since there are six possible secondary slip-systems for a biaxial stress state (three glide planes with two Burgers vectors each) a different slip system which shows a lower critical stress might be activated in the second grain. For these the force on the dislocation points in the direction of the primary grain.

To find the critical stress one chooses a fixed slip system for the incoming dislocation. For the second grain the slip system with the lowest critical stress is selected among the geometrically possible ones. Figure A.4 shows the lowest critical resolved shear stress $\tau_{\text{crit, min}}(\theta, \gamma)$ under consideration of all possible slip systems.

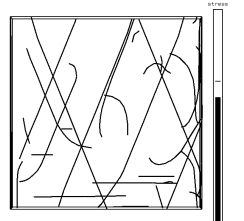
Next the influence of the grain boundary orientation relative to the incoming slip plane has to be considered (see Figure A.5). If the position of the incoming slip plane is random, the probability that the dislocation meets a grain boundary at an angle γ' relative to its slip plane is given by $\sin \gamma'$. Multiplying by this factor removes the divergences seen in figure A.3.

When calculating the average critical shear stress one has to perform the integration⁴

$$\tau_{\text{crit, mean}} = N^{-1} \int_0^{\pi/2} d\theta \int_{(\pi-\theta)/2}^{-(\pi-\theta)/2} d\gamma \cos(\theta/2 + \gamma) \tau_{\text{crit, min}}(\theta, \gamma), \quad (\text{A.9})$$

where N is the norm of the integral.

⁴in the calculation a different definition of the angle γ characterising the grain boundary orientation is used. The relation between both is $\gamma' = 90^\circ - \theta/2 - \gamma$.



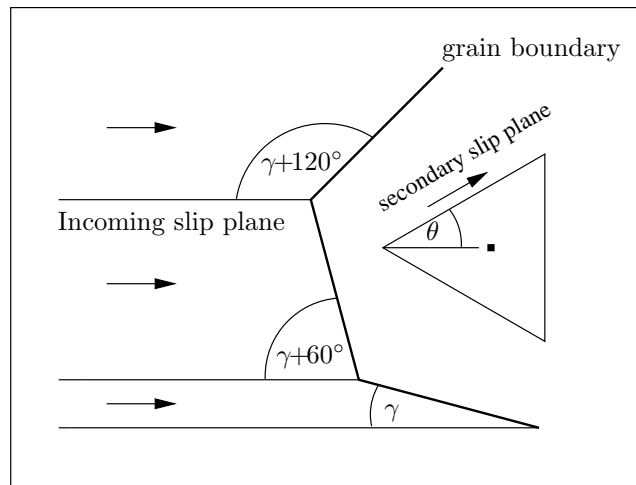


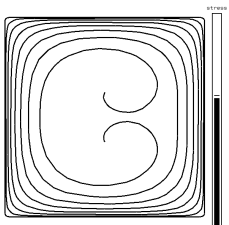
Abb. A.5: The closer the angle between the incoming slip plane and the grain boundary to 90° the larger the probability that the incoming dislocation meets the grain boundary.

Table A.2 shows the results for polycrystalline thin films with different textures. First

Transmission	$\tau_{\text{res,crit}} [\text{Pa m}]/B$
111 \rightarrow 111	6/B
100 \rightarrow 100	7/B
100 \rightarrow 111	13/B
111 \rightarrow 100	13/B

Tab. A.2: Grain boundary contribution to the critical resolved shear stress for different configurations

it is assumed that all grains in the film have a $\langle 111 \rangle$ orientation. For this transition 111 \rightarrow 111 the grain boundary contribution is approximately one half the value due to the deposition of interface dislocations (section 2.2.1 equation (2.3)). The transition 100 \rightarrow 100 gives a slightly higher stress. A grain boundary between a $\langle 111 \rangle$ and a $\langle 100 \rangle$ oriented columnar grain is less symmetric. For these transitions (111 \rightarrow 100 and 100 \rightarrow 111) the average over all possible grain boundary configurations between these grains results in twice the critical stress for the perfect textures.



Anhang B

Mittelung über alle Schmidfaktoren

Wird der Schmidfaktor m als Verhältnis von aufgelöster zu angelegter Spannung berechnet, so gilt

$$m = |\cos(\mathbf{n}, \mathbf{t}) \cos(\mathbf{b}, \mathbf{t})| = |(\mathbf{n} \cdot \mathbf{t})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{t})|. \quad (\text{B.1})$$

Hier ist \mathbf{t} die Zugrichtung, \mathbf{n} die Gleitebenennormale und \mathbf{b} der Burgersvektor. Im folgenden wird m über alle Gleitsysteme für uniaxialen und biaxialen Zug sowie für $\langle 111 \rangle$ und $\langle 001 \rangle$ orientierte Kristalle gemittelt.

B.1 Uniaxialer Zug

B.1.1 $\langle 111 \rangle$ Orientierung

Für einen $[111]$ orientierten Kristall unter uniaxialem Zug in der (111) Ebene gibt es drei verschiedene Gleitsystemgruppen, die sich nicht durch Rotation des Korns um die $[111]$ Achse ineinander überführen lassen (vorausgesetzt ist wieder ein kfz Gitter):

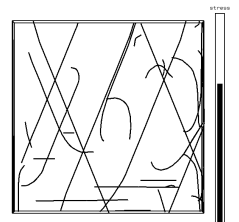
1. Alle drei Gleitsysteme mit der (111) Gleitebene haben den Schmidfaktor $m = 0$, da $\mathbf{n} \cdot \mathbf{t} = 0$.
2. Drei Gleitsysteme mit $\mathbf{n} = (1\bar{1}\bar{1})$ (geneigte Gleitebene) und $\mathbf{b} = [0\bar{1}1]$ (Burgersvektor in der (111) Ebene) bzw. die entsprechenden Gleitebenennormalen und Burgersvektoren, die sich durch Rotation um die $[111]$ Richtung ergeben mit Schmidfaktor

$$m = \left| \frac{\cos^2 \theta - \sin^2 \theta}{\sqrt{6}} - \frac{2 \cos \theta \sin \theta}{\sqrt{18}} \right|,$$

wobei θ den Winkel der Zugrichtung bezüglich der $[11\bar{2}]$ Richtung angibt. Bildet man den Mittelwert über alle Zugrichtungen mit

$$\bar{m} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} m d\theta, \quad (\text{B.2})$$

so folgt $\bar{m} = 0.30$.



3. Für die restlichen sechs Gleitsysteme mit geneigter Gleitebene (z.B. $\mathbf{n} = (1\bar{1}\bar{1})$) und geneigtem Burgersvektor (z.B. $\mathbf{b} = [101]$) gilt:

$$m = \left| \frac{4 \cos^2 \theta - 1}{3\sqrt{6}} \right|$$

und nach Mittelung mit Gleichung (B.2) $\bar{m} = 0.20$.

Der über zwölf Gleitsysteme gemittelte Schmidfaktor für uniaxialen Zug in der (111) Ebene eines [111] orientierten Kristalls ist danach:

$$\bar{m}_{\text{uniax}}^{111} = \frac{1}{12} (3 \times 0 + 3 \times 0.3 + 6 \times 0.2) = 0.17 \quad (\text{B.3})$$

B.1.2 $\langle 001 \rangle$ Orientierung

Für eine [001] Orientierung und Zug in der (001) Ebene gibt es zwei verschiedene Gleitsystemgruppen:

1. Vier Systeme mit Burgersvektor in der (001) Ebene (z.B. $\mathbf{n} = (1\bar{1}\bar{1}), \mathbf{b} = [110]$):

$$m = \left| \frac{1}{\sqrt{6}} \cos 2\theta \right|,$$

mit $\bar{m} = 0.26$.

2. Acht Systeme mit geneigtem Burgersvektor (z.B. $\mathbf{n} = (1\bar{1}\bar{1}), \mathbf{b} = [10\bar{1}]$):

$$m = \left| \frac{1}{2\sqrt{6}} (1 - \cos 2\theta + \sin 2\theta) \right|,$$

mit $\bar{m} = 0.23$.

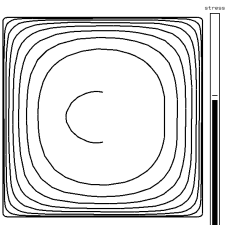
Der über zwölf Gleitsysteme gemittelte Schmidfaktor für uniaxialen Zug in der (001) Ebene eines [001] orientierten Kristalls ist:

$$\bar{m}_{\text{uniax}}^{001} = \frac{1}{12} (4 \times 0.26 + 8 \times 0.23) = 0.24 \quad (\text{B.4})$$

B.2 Biaxialer Zug

Der Schmidfaktor für (äqui-) biaxialen Zug folgt, wenn in eine Richtung senkrecht zur ersten Zugrichtung die gleiche Zugspannung aufgebracht wird:

$$m_{\text{biax}} = m_{\text{uniax}}(\theta) + m_{\text{uniax}}(\theta + 90^\circ) \quad (\text{B.5})$$



B.2.1 $\langle 111 \rangle$ Orientierung

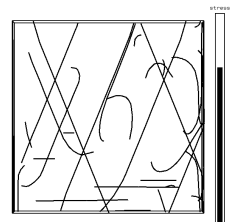
Sechs Gleitsysteme mit Burgersvektor in der $[111]$ Ebene haben den Schmidfaktor $m = 0$ die restlichen sechs Gleitsysteme haben den Schmidfaktor $m = 0.27$. Hieraus folgt:

$$\bar{m}_{\text{biax}}^{111} = \frac{1}{12}(6 \times 0 + 6 \times 0.27) = 0.135 \quad (\text{B.6})$$

B.2.2 $\langle 001 \rangle$ Orientierung

Hier gibt es vier Gleitsysteme, die einen Burgersvektor in der $[001]$ Ebene besitzen, und folglich den Schmidfaktor $m = 0$ haben, sowie acht Gleitsysteme mit $m = 0.407$. Es folgt

$$\bar{m}_{\text{biax}}^{001} = \frac{1}{12}(4 \times 0 + 8 \times 0.407) = 0.27 \quad (\text{B.7})$$



Anhang C

English Summary

C.1 Introduction

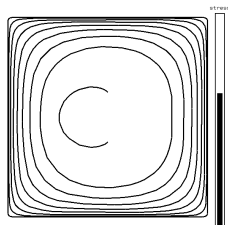
Thin metal films with thicknesses of one micron and below are commonly found in micro-electronics and micro-mechanical devices. Due to differing thermal expansion coefficients of the metal films and the surrounding material, large mechanical stresses can arise in the films during heating and cooling. In order to design reliable micro devices, it is important to know the mechanical properties of the metal films. Many experiments have been performed on face centered cubic polycrystalline thin metal films. It has been found that the flow stresses of the films are much higher than those of the corresponding bulk material and that they scale approximately with the inverse film thickness. At low temperatures the plastic deformation is mediated by gliding dislocations. The thickness of the investigated films is smaller than the characteristic size of dislocation networks observed in bulk material after plastic deformation, but until now it was not understood in which way the confinement of the dislocations in the film could cause the measured flow stresses.

In this work, discrete dislocation dynamics simulation is used to investigate the dislocation motion in thin films. The simulation is based on linear isotropic elasticity and treats dislocations as one-dimensional line defects.

C.2 Thin Metal Films

Commonly used methods to measure the flow stresses of thin films are the wafer-curvature technique [8, 9, 10, 11, 12, 13, 14], micro-tensile tests [23, 24, 25, 26, 22, 27], bending experiments with micro-beams [1] or under four-point loading [2], the bulge-test [3, 4, 5, 6] and nanoindentation [7]. It was found for many different fcc metals that the flow stresses for thin films are much higher than those of the corresponding bulk material and that they increase with decreasing film thickness: Al [9, 11, 12], Al-0.5%Cu [10], Cu [13], Pb [20, 21], Ag [14], Au [22].

The grain size d of polycrystalline films scales with the film thickness h and the grains are usually columnar. Therefore it is difficult to differentiate between grain size and film thickness effects. The scaling relation of the flow stress with the film thickness or grain size



is also still under debate. Many authors found a $1/h$ relation [12, 11, 20, 35, 13, 26, 16], but nearly as many publications state a $1/\sqrt{d}$ dependence of the flow stress [5, 36, 13, 27, 37].

C.2.1 Flow stress models

A comparison of the strain rate of different deformation mechanisms shows that the plastic deformation of thin films at room temperature is mediated by moving dislocations. Thin films are often deposited on a substrate and are capped with a passivation-layer. Under the assumption that the interfaces to the substrate and the passivation-layer are impenetrable for dislocations, interface dislocations must be deposited when dislocations move through the film. If the work done by the moving dislocation is balanced by the energy of the interface dislocations that are created, a critical stress will result, which has to be exceeded in order to move the dislocations (Nix model, equations (2.3), p. 18 and (2.4)). A critical stress of the same order of magnitude is obtained if dislocations deposited at grain boundaries are considered (Thompson model). The Nix model, the Thompson model and the Hall–Petch model with parameters for bulk material all predict flow stresses which are much smaller than the experimentally measured ones (fig. 2.8(a), p. 28 and 2.8(a)).

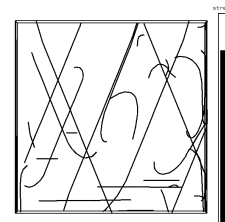
The Hall–Petch relation was also applied to nanocrystalline bulk material. It was found that a deviation from the Hall–Petch relation occurs for grain sizes smaller than 10nm [65]. In the grain size range from 100nm to 1000nm, only few data are available for polycrystalline bulk materials. The Hall–Petch relation can be fitted to the experimental data but the parameters are often different from the parameters for bulk material [69, 70].

C.2.2 Direct observation of dislocations in thin metal films

Dislocations can be observed in the transmission electron microscope (TEM). Interface dislocations in thin films on a substrate were observed in a plan view geometry [21, 11, 76, 77, 49]. The disappearance of the interface dislocations after a short time of bombardment with the electron beam was also reported [21, 11, 78, 79]. In-situ TEM studies, which were done for a copper film on a silicon substrate in a cross section geometry, revealed that dislocations disappear when they reach the interfaces and that interface dislocations do not exist for this material system [81, 82]. Jerky dislocation motion at room temperature was observed for Ag and Cu thin films [84, 81].

C.3 Dislocation Dynamics Simulation

In the following, the implementation of the discrete dislocation dynamics simulation will be described. To determine the dynamics of dislocations in a crystal, the generally curved dislocations are represented by nodes, which are connected by straight segments. The forces on each node are calculated from the local stresses using the Peach–Koehler formula. The local stress consists of the applied stress, stresses generated by the dislocations (including the self-stress of a dislocation), stresses necessary to fulfill the boundary conditions, and



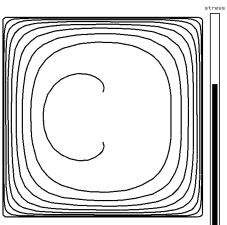
the lattice friction stress (Peierls stress) (eq. (3.2), p. 31). The latter is neglected here, since for fcc metals its contribution is much smaller than the other stresses. To compute the self-stress of a dislocation, the segments connecting the node of stress calculation with its neighboring nodes are replaced by a circular arc. The stress of the circular arc is calculated using Brown's averaging procedure (eq. (3.4), p. 31, [98]) and an approximation of the stress from Schwarz (eq. (3.10), p. 41, [119]). The stress caused by the remote part of the dislocation and by other dislocations is computed using an analytical expression to determine the stress from the straight segment which connects two nodes (eq. (3.9), p. 41, [111]), and summing over all segments.

Once the forces which act on the dislocation nodes are known, the dynamics are calculated by solving the equation of motion. At room temperature the motion of the dislocations is damped and the velocity of a node is proportional to the force acting on the node (eq. (3.8), p. 34). The time is discretised and, starting from an initial configuration, the new positions of the nodes at the next time step are determined by applying the Euler scheme to solve the equation of motion.

Short range interactions between dislocations are calculated in a fully resolved manner: the interaction is computed according to linear elasticity as described above. A cut-off distance for the mutual interaction of one Burgers vector is introduced. Dislocations with the same Burgers vector can recombine. Dislocation locks can form if two dislocations on different glide planes align along the line of intersection of the glide planes. The creation of jogs in cutting processes of two dislocations is neglected, since the energy needed to move a jog at room temperature is much smaller than the elastic interaction between dislocations [124, p. 223].

To test the implementation, calculations are performed for which analytical solutions exist (self-stress of a circular dislocation loop, critical stress of a dislocation in a channel (channel stress)). The agreement is found to be excellent. The implementation of the short range interactions is checked by comparing with other simulations (atomistic simulations and dislocation simulations) and with analytical line tension models. The results from the different calculations are in good agreement with one another (fig. 3.16, p. 54 and 3.18).

The boundary conditions for a thin film deposited on a substrate and capped with a passivation or oxidation layer are realized by introducing impenetrable interfaces between film and substrate and between film and capping layer (channel configuration). Differences in elastic moduli of film, substrate and capping layer are neglected, i. e. image forces are not considered. This is a good approximation for stiffer substrates and capping layers. To capture the effect of softer surrounding materials, a film with free surfaces at the top and bottom is simulated (free-standing film). To estimate the importance of the image forces due to the free surfaces, calculations with (using compensating point forces at the free surfaces) and without image forces are compared. It is found that the image forces are not important if dislocation motion in the film interior is considered. Therefore, image forces are neglected in the following simulations of free-standing films.



C.4 Results

C.4.1 Dislocation motion in thin films

According to the Nix model, a dislocation which is moving in a thin film has to deposit interface dislocations. First, the interactions between mobile dislocations and interface dislocations are investigated, to determine the additional hardening contribution of these interactions.

If a pair of interface dislocations is located to the left and to the right of a moving dislocation on parallel glide planes (fig. 4.1, p. 61), the critical stress needed to move the dislocation through the film has to be increased. The critical stress becomes larger if the distance between the glide planes l decreases (fig. 4.2, p. 62). The calculations were done for $\langle 111 \rangle$ and $\langle 001 \rangle$ orientations, which are the two most prominent texture components of thin films. Two different Burgers vectors are possible for the moving dislocation. The increase in stress is stronger if the deposited interface dislocations have screw character. For interface dislocations with mixed character, an increase is observed only if $l < 0.8h$.

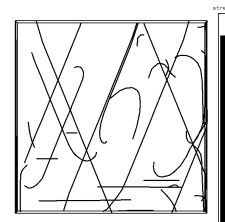
Simulations were done for an array of interface dislocation pairs on parallel glide planes (fig. 4.6, p. 65). The stress increase is stronger than for the single dislocation pair (fig. 4.7). The distance between the interface dislocations can be related to the plastic strain, thereby giving the strain hardening shown in figure 4.8. The stress increase becomes independent of the film thickness if $l < h$ (fig. 4.9).

The interaction between two threading dislocation segments on parallel glide planes with the same Burgers vector and opposing line directions was calculated (fig. 4.10, p. 67). The critical stress increases significantly only if the distance between the glide planes is smaller than $100b$ (where b is the magnitude of the Burgers vector).

Interface dislocations on glide planes intersecting the glide plane of the moving dislocation (fig. 4.12, p. 68) cause a maximum increase in the critical stress of a factor 1.3 with respect to the critical stress for the isolated dislocation (tab. 4.1, p. 69). The stress increase is almost independent of film thickness (fig. 4.14). The cutting process of dislocations on glide planes that are parallel to the interfaces and centered in the grain causes a maximum stress increase of a factor 1.5 (tab. 4.2, p. 74) and is independent of film thickness (fig. 4.19, p. 73).

C.4.2 Dislocations in small crystallites

In the first part of this section grain boundaries are introduced, which are impenetrable obstacles for the dislocations and are treated in a similar manner to the interfaces. In the second part of this section, a grain boundary strength τ_b^* is attributed to the grain boundaries and the consequences are investigated.



C.4.2.1 Dislocation sources in the confined geometry of a grain

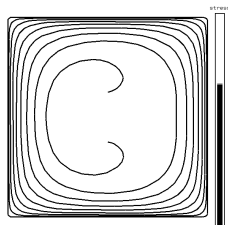
The activation of a Frank–Read source in the grain is simulated. The source is mimicked by a dislocation segment pinned at two points separated a distance s (fig. 4.20, p. 75). The source activation stress is defined as the stress to produce a dislocation loop and to transfer the pinned segment back to its initial configuration. For small sources the activation stress is high. It decreases as s becomes larger. For $s > h/3$, the activation stress increases since the most difficult step in the activation is now the passage of the dislocation between a pinning point and the interfaces (fig. 4.23, p. 78 and 4.24). Repeated source activation becomes more difficult as more dislocation loops are deposited at the grain boundaries and interfaces and the size of the source with the lowest activation stress shifts from $s = h/3$ to smaller values. This behavior is almost independent of the grain dimensions when the size of the source is expressed in units of the film thickness and the activation stresses in units of the channel stress (fig. 4.25). If the aspect ratio of film thickness to grain size is different from unity, the smaller of both controls the activation stress (fig. 4.26).

Similar simulations are performed for a spiral source in a grain with impenetrable interfaces (cube configuration) and for a Frank–Read source in a grain with two free surfaces (free-standing film configuration). The activation stresses for the spiral source show a plateau region for sizes around $s = h/2$ and a strong increase in the stress for multiple activations (fig. 4.28, p. 80). The critical configuration becomes smaller for large and for small source sizes due to the accumulation of dislocation loops between the pinning point and the interfaces. In a free-standing film, such as the configuration shown in figure 4.29, the source size with the lowest activation stress is given by $s = h/2$. The activation stresses are not as high as for the cube configuration but are still twice as high as the channel stress (fig. 4.30).

If there is a distribution of dislocation sources of different sizes in a grain, stress-strain curves can be calculated from the source activation stresses in figures 4.24, 4.28 and 4.30, by summing all active sources at a given stress level. It is found that the stress-strain curves for the Frank–Read source and the spiral source in the cube geometry are very similar, whereas the stresses for the Frank–Read source in the free-standing film are only half as high (fig. 4.31, p. 83). Using this summation scheme, stress-strain curves for different film thicknesses (fig. 4.32) and source distributions (fig. 4.33) can be calculated.

C.4.2.2 Hall–Petch model with Frank–Read source

In this section a strength is attributed to grain boundaries. Large stresses can be exerted on boundaries by dislocations which pile up in front. If this stress exceeds the grain boundary strength τ_b^* , global plastic flow is assumed to occur by transmission of dislocations through the boundary or by activation of sources in the neighboring grain. This flow stress criterion is analogous to the Hall–Petch model. In the simulation, a Frank–Read source is used to produce the dislocation pile-ups. A typical configuration is shown in figure 4.20, p. 75. It is found that the flow stress given by the Hall–Petch criterion is strongly dependent on the size of the dislocation source (fig. 4.38, p. 89 and 4.39). The smaller dimension of film



thickness or grain size controls the flow stress (fig. 4.40, p. 90 and 4.41).

C.4.3 Simulations with several dislocation sources

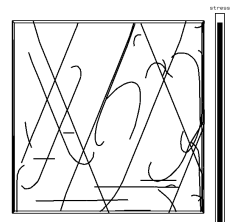
To check if the results of the previous section, which were done for a single dislocation source, are applicable to grains with many sources, three-dimensional simulations are performed with several dislocation sources of different glide systems. The initial size of a source, its orientation, position, glide plane and Burgers vector are chosen randomly (fig. 4.42, p. 92). The simulation also takes into account reactions between dislocations: dislocations can cut through each other and dislocation locks can be formed. A stress is applied, and the macroscopic plastic strain and the dislocation density are calculated from the evolving dislocation configuration. Different starting configurations can yield a different evolution of the strain with stress, even if the number of dislocation sources inside the grain and the grain dimensions are the same. Therefore, most of the stress-strain curves presented in this chapter are averages of three or four simulations with different starting configurations. The statistical error can be calculated from the deviations of a single simulation from the average (tab. 4.3, p. 100). The dependence of the stress-strain curve on different source size distributions is shown in figure 4.57, p. 103.

The dislocation sources are realized as dislocation segments which are pinned at two points inside the crystal. To facilitate the simulations, the parts of the dislocations which connect the pinning points with the boundaries and interfaces of the grain (sidearms) are neglected. Test simulations have shown that the stress increase due to interactions with the sidearms is quite small (fig. 4.52, p. 100).

The plastic strain for a given stress level depends on the number of dislocation sources N_0 inside the grain. For small numbers of dislocations ($N_0 < 40$ for a grain with $d = h = 2000b$) the stress scales with $1/N_0$. The work hardening is lower if the production of dislocations is distributed among more sources, since the interaction between dislocations from different sources is not important (fig. 4.45, p. 96 and 4.49).

Stress-strain curves are calculated for different grain dimensions with constant initial dislocation density (fig. 4.50, p. 99) and constant number of dislocations (fig. 4.51). Figure 4.61, p. 105 shows simulated stress-strain curves for different grain orientations ($\langle 111 \rangle$ and $\langle 001 \rangle$) and stress states (uniaxial and biaxial). It can be seen that the stresses are higher in the $\langle 111 \rangle$ oriented grains and under biaxial tension. The effect of different interfaces on the stress-strain curves is shown in figure 4.63, p. 108, where the deformation of a grain with boundary conditions for impenetrable interfaces (cube geometry), one free surface and one impenetrable interface, and two free surfaces (free-standing film) is simulated. The same boundary conditions were used to simulate a loading-unloading experiment (fig. 4.64). It is shown that directly after unloading the dislocations remain at their positions, but move backwards as the stress becomes lower than a certain stress level (Bauschinger effect). The remaining plastic strain after decreasing the stress to zero corresponds to the dislocation loss from the simulated grain. It is largest for the free-standing film and smallest for the cube geometry.

Simulations are performed for a grain surrounded by eight neighboring grains to inve-



stigate the elastic interaction between dislocations in different grains. Figure 4.65, p. 110 shows that the stress-strain curve of an isolated grain is almost unchanged if the grain is surrounded by passive grains (the external stress is applied only to the central grain). The stress at a given level of plastic strain is lowered, but still increases when the external stress is applied to all grains. In this case, the stress fields of dislocations piling up at grain boundaries from both sides can compensate, and work hardening becomes smaller.

C.5 Discussion

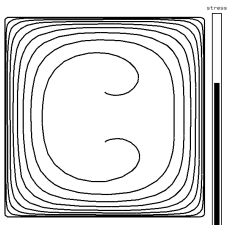
The simulations of dislocations in thin films, which were presented in the previous section, were performed in order to gain an understanding of the plastic deformation of thin films. In this chapter the results are compared with experimental data and the underlying models are checked for their dependencies on the grain dimensions and on the plastic strain. This section is divided into three parts. In the first part, the interaction of moving dislocations with interface and obstacle dislocations is discussed. The second part considers the activation of dislocation sources in a small geometry, while in the third part the Hall–Petch model with dislocation sources is investigated.

C.5.1 Dislocation motion in thin films

The simplest model which treats dislocation motion in thin films is the Nix model (eq. (2.3), p. 18 and (2.4)). It considers a single dislocation which deposits interface dislocations as it moves. The predicted flow stress shows a linear dependence on the inverse film thickness, but the experimentally measured stresses are four times larger (fig. 5.1, p. 115). According to the Nix model, interface dislocations are deposited by every moving dislocation. Additional hardening contributions can arise if a moving dislocation encounters other interface dislocations.

An interface dislocation pair on parallel glide planes to the left and to the right of the moving dislocation will cause an increase in stress of a factor four with respect to the Nix stress, if the distance between the glide planes becomes smaller than $h/20$. The probability of finding such an arrangement of a pair of interface dislocations and a moving dislocation is very small, unless an array of interface dislocations exists. If the moving dislocation is the last to complete the array, a stress increase of a factor four will be found, if the distance l between the dislocations in the array is smaller than $h/5$. The distance l can be related to the plastic strain (eq. (4.3), p. 66). For a plastic strain of $\epsilon_{pl} \approx 0.1\%$ a distance of $l \approx 200\text{nm}$ follows. The magnitude of the measured flow stresses can be explained by assuming an array of interface dislocations, but the stress is independent of film thickness as soon as $l < h$, i. e. this model can not explain the experimental data (fig. 5.1, p. 115). According to this model, the stress increases with increasing plastic strain. The hardening rate is independent of film thickness, which also contradicts the experimental findings (fig. 5.13, p. 138).

Interactions of the moving dislocation with interface dislocations on intersecting glide



planes and on horizontal glide planes that are centered in the grain give a maximum stress increase of a factor 1.3 or 1.5, respectively, and can not explain the experiments (fig. 5.1, p. 115).

Threading segments on parallel glide planes can form dislocation dipoles if the distance between the planes is small. The dislocations immobilize and the stress has to be increased to break up the dipole. For a stress increase of a factor four with respect to the Nix stress, the distance between the threading segments has to be smaller than 13nm. The probability of such a close approach of two threading segments in a grain with $d \approx h \approx 10^3$ nm is very small, indeed too small to explain the experimental data (fig. 5.1, p. 115).

C.5.2 Dislocation sources in thin films

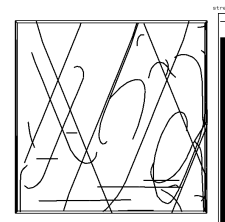
If dislocation sources and dislocation multiplication sites are rare in thin films, a source has to operate several times in order to deform the film (source model). For multiple operation of a source, the dislocation has to move around the pinning points (fig. 4.21, p. 76). It follows that the largest effective size of a source is $h/3$ or $d/3$, where the smaller of d or h controls the effective source size (fig. 4.24, p. 78 and 4.26, p. 79). This source size gives a lower boundary for the stress needed to produce dislocations in the film (flow stress), which turns out to be three times the stress of a source which extends over the whole film thickness (Nix stress). The smallest effective source size decreases and the flow stress increases as more dislocation loops are produced by the source. To account for the stress increase an effective source size of $h/4$ is used and the flow stress resulting from the activation of the source is plotted together with experimental data in figure 5.3, p. 124. This source model can explain the high flow stresses and the increase with decreasing film thickness or grain size (whichever is smaller, see fig. 5.4).

C.5.3 Simulations with several dislocation sources

Three-dimensional simulations with many dislocation sources in a grain have shown that the source model, which was derived for a single source, is applicable to this more general case: Interactions between dislocations from different sources are not important as long as the number of dislocation sources N_0 is not very large (fig. 5.9, p. 132).

The simulated stress-strain and the dislocation-density-strain curves at the beginning of deformation are comparable to the curves for a copper film on a polyimide substrate measured in a micro-tensile test (fig. 5.11, 5.14, 5.12 and 5.15). The simulated strain hardening rates are of the same order as the experimentally measured ones and show an increase with decreasing film thickness (fig. 5.13, p. 138).

The Bauschinger effect, which was found to be very pronounced for thin films [25, 175, 176] can be reproduced with the simulation (fig. 5.14, p. 140). This agreement indicates that dislocations are stored during deformation and can move backwards as the stress is decreased, and that critical configurations (i. e. the activation of dislocation sources) have to be overcome.



The stress determined in a micro-tensile experiment of a thin copper film shows a plateau for plastic strains larger than 0.5% (fig. 5.11 and 5.14). The increase in dislocation density is reduced for plastic strains larger than 0.5% (fig. 5.12 and 5.15). This can not be reproduced by the simulation, since no relaxation mechanisms are implemented. The dislocations stay inside the grain and cause steady work hardening. A lower amount of work hardening is observed when a free-standing film is simulated, where the dislocations can leave the film at the interfaces or when neighboring grains are included in the simulations, where the stress fields from pile-ups in different grains can compensate one another (fig. 4.63, p. 108 and 5.11, p. 135). Other relaxation mechanisms which are not implemented are thermal activation, cross-slip, dislocation climb, and transmission of glide through the grain boundaries. The last point will be covered in more detail in the next section.

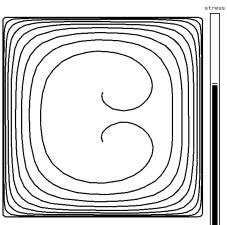
Figure 5.16, p. 141 compares the dependence of the flow stress on thickness for the simulated and the experimental data. In the simulations a constant density of dislocation sources was used. The simulated data points for $h = 256\text{nm}$ are very high since only five dislocation sources are inside the grain and the probability is very small that one source is easy to operate. For small strains ($\epsilon_{\text{pl}} = 0.1\%$) the simulated stresses agree with the experimental data, but they are too large for larger strains, since no relaxation mechanisms are implemented and the dislocations can not leave the grain (impenetrable interfaces).

The results of simulations of grains with different orientations show that the stresses are higher for $\langle 111 \rangle$ than for $\langle 001 \rangle$ orientation for both uniaxial and equi-biaxial tension (fig. 4.61, p. 105). The relative difference is larger than the ratio of the corresponding Schmid factors, since the work hardening depends on the ratio of the Schmid factors squared (eq. (4.14), p. 107), and the number of active sources is larger for the $\langle 001 \rangle$ orientation. The differences between experimentally measured flow stresses for the two orientations are larger than simulated. The elastic and plastic interaction of neighboring grains has to be taken into account for an exact description of the orientation dependence of the flow stress.

The simulated dislocation configurations can be compared with TEM observations. A basic ingredient of the source model is the operation of dislocation sources in the grain interior, which was also observed in the TEM (fig. 2.7, p. 27 and 5.18, p. 144). Interface dislocations were found in some TEM studies, but not in others. Therefore, both cases were simulated: impenetrable boundaries and free surfaces. The simulations show that the dislocation density is larger at the grain boundaries than in the center of the grain after plastic deformation (fig. 4.67(b), p. 113), as was found from experiment [30].

C.5.4 Hall–Petch model for thin films

The Hall–Petch model defines the flow stress as the stress, where a certain stress-level is exerted on the grain boundaries by a dislocation pile-up. The flow stress depends on the activation stress of the source, which produces the pile-up, for the grain sizes considered here (fig. 5.20, p. 151). The source dependence is not considered in the original Hall–Petch model but is considered in an extension from Friedman and Chrzan [63]. The simulation shows that the one-dimensional model from Friedman and Chrzan, which treats straight, infinitely long dislocations, is applicable to curved dislocations if the grain size is much



larger than the size of the source (fig 5.19, p. 150). In two dimensions, the smaller dimension (h or d) controls the flow stress (fig. 4.40, p. 90 and 4.41).

If the source size scales with the grain size (or film thickness), activation of the source becomes the most difficult step below a critical grain size d^* , and the flow stress scales with $1/d$. The same scaling follows for small strains, when the stress concentration at the pile-ups is still too small to initiate the transfer of slip to the neighboring grain. For grain sizes much larger than d^* , Hall–Petch behavior dominates and a $1/\sqrt{d}$ relation results.

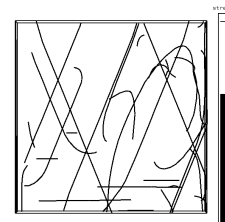
The grain boundary strength τ_b^* is a free parameter. It can be used to fit the simulated data to flow stresses of thin copper films measured in micro-tensile tests (fig. 5.22, p. 156). The fitted τ_b^* is of the same order as τ_b^* calculated from the Hall–Petch coefficient, which was measured for bulk copper with large grains.

C.5.5 Source model with grain boundary breakthrough

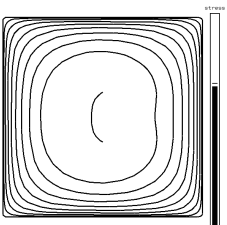
The Hall–Petch model is based on dislocation pile-ups, which cause stress concentrations and the transfer of slip through the grain boundaries. In order to produce a pile-up, a dislocation source has to operate at least twice, hence the source model applies. The effective source size is at least one third of the film thickness or grain size (whichever is smaller) and the activation stress increases with every operation of the source. If the stress at the grain boundary exceeds the grain boundary strength, the dislocation at the head of the pile-up can leave the grain and there is no further work hardening.

C.6 Conclusions

- Dislocation models which consider the interaction of moving dislocations with interface dislocations can not explain the experimentally measured flow stresses of thin metal films.
- If dislocation sources are rare and a source has to operate at least twice to produce the plastic deformation, an effective maximum source size will result, which is one third of the smaller grain dimension (thickness or grain size) for a film with impenetrable grain boundaries and which is one half for a free-standing film. The source activation stress increases with every activation and the effective maximum source size decreases.
- Simulations with many dislocation sources have shown that hardening can be related to the hardening of a single source.
- Many experimental findings can be reproduced qualitatively with the three-dimensional simulation of dislocation sources: dislocation densities, Bauschinger effect, orientation dependence, TEM observations, thickness dependence of flow stress and hardening rates.
- The three-dimensional simulations predict stresses which are larger than those observed experimentally, since no stress relaxation processes are incorporated.

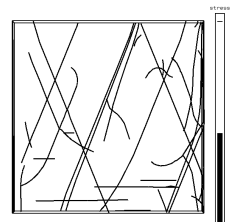


- Dislocation sources have to be taken into account if the Hall–Petch model is used for thin films with thicknesses below $1\mu\text{m}$.
- If the grain boundary strength τ_b^* is reached, the stress in the grain will not increase with further straining.
- If the grain size or film thickness is smaller than the critical grain size d^* or if only small plastic strains are imposed on the film, the flow stress will scale with $1/d$ or $1/h$; otherwise, it will scale with $1/\sqrt{d}$ or $1/\sqrt{h}$.
- The flow stress scales with the smaller of film thickness or grain size.

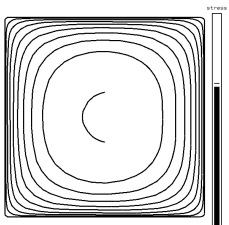


Literaturverzeichnis

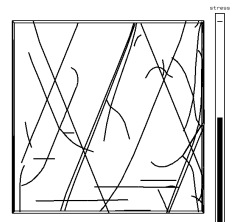
- [1] W. D. Nix, "Mechanical Properties of thin films," Metall. Trans. A **20A**, 2217–2245 (1989).
- [2] V. Weihnacht, W. Brückner, and C. M. Schneider, "Apparatus for thin-film stress measurement with integrated four-point bending equipment: Performance and results on Cu films," Rev. Sci. Instrum **71**, 4479–4482 (2000).
- [3] H. Leidheiser, Jr. and B. W. Sloop, "Mechanical properties of copper films," J. Appl. Phys. **41**, 402–406 (1978).
- [4] A. J. Griffin Jr., F. R. Brotzen, and C. F. Dunn, "Mechanical properties and microstructures of Al-1%Si thin film metallizations," Thin Solid Films **150**, 237–244 (1987).
- [5] A. J. Griffin Jr., F. R. Brotzen, and C. F. Dunn, "Hall–Petch relation in thin film metallizations," Scripta Metall. **20**, 1271–1272 (1986).
- [6] A. J. Kalkman, A. H. Verbruggen, and G. C. A. M. Janssen, "Creep and anelastic relaxation in freestanding thin aluminum (alloy) films," In , Workshop: Stress induced phenomena in metallization (Max–Planck–Institut, Stuttgart, 1999).
- [7] W. D. Nix, "Elastic and plastic properties of thin films on substrates: nanoindentation techniques," Mater. Sci. Eng. **A234–236**, 37–44 (1997).
- [8] A. K. Sinha and T. T. Sheng, "The temperature dependence of stresses in aluminum films on oxidized silicon substrates," Thin Solid Films **48**, 117 (1978).
- [9] M. F. Doerner, D. S. Gardner, and W. D. Nix, "Plastic properties of thin films on substrates as measured by submicron indentation hardness and substrate curvature techniques," J. Mater. Res. **1**, 845–851 (1986).
- [10] R. Venkatraman, J. C. Bravman, W. D. Nix, P. W. Davies, P. A. Flinn, and D. B. Fraser, "Mechanical properties and microstructural characterisation of Al-0.5%Cu thin films," J. Electron. Mater. **19**, 1231–1237 (1990).



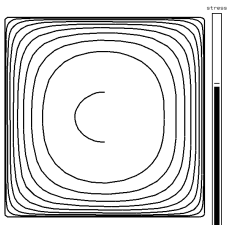
- [11] R. Venkatraman, S. Chen, and J. C. Bravman, "The effect of laser reflow on the variation of stress with thermal cycling in aluminum thin films," *J. Vac. Sci. Technol. A* **9**, 2538–2542 (1991).
- [12] R. Venkatraman and J. C. Bravman, "Separation of film thickness and grain boundary strengthening effects in Al thin films on Si," *J. Mater. Res.* **7**, 2040–2048 (1992).
- [13] R.-M. Keller, S. P. Baker, and E. Arzt, "Quantitative analysis of strengthening mechanisms in thin Cu films: Effects of film thickness, grain size and passivation," *J. Mater. Res.* **13**, 1307–1317 (1998).
- [14] M. J. Kobrinsky and C. V. Thompson, "The thickness dependence of the flow stress of capped and uncapped polycrystalline Ag thin films," *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1–3 (1998).
- [15] G. G. Stoney, "The tension of metallic films deposited by electrolysis," *Proc. R. Soc.* **A82**, 172–175 (1909).
- [16] D. Weiss, Ph.D. thesis, "Deformation mechanisms in pure and alloyed copper films", Universität Stuttgart, 2000.
- [17] M. Murakami, T. S. Kuan, and I. A. Blech, "Mechanical properties of thin films on substrates," in *Treatise on Materials Science and Technology* (Academic Press, 1982), pp. 164–210.
- [18] O. Kraft, M. Hommel, and E. Arzt, "X-ray diffraction as a tool to study the mechanical behaviour of thin films," *Mater. Sci. Eng.* **A288**, 209–216 (2000).
- [19] R. Venkatraman, P. R. Besser, J. C. Bravman, and S. Brennan, "Elastic strain gradients and X-ray line broadening effects as a function of temperature in aluminum thin films on silicon," *J. Mater. Res.* **9**, 328–335 (1994).
- [20] M. Murakami, "Thermal strain in thin lead films III: Dependences of the strain on film thickness and on grain size," *Thin Solid Films* **59**, 105–116 (1979).
- [21] T. S. Kuan and M. Murakami, "Low temperature strain behavior of Pb thin films on a substrate," *Metall. Trans. A* **13A**, 383–391 (1982).
- [22] R. D. Emery, D. X. Lenshek, B. Behin, M. Gherasimova, and G. L. Povirk, "Tensile behavior of free-standing gold films," *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **472**, 361–366 (1997).
- [23] R. R. Keller, J. M. Phelps, and D. T. Read, "Tensile deformation-induced microstructures in free-standing copper thin films," *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **338**, 227–232 (1994).



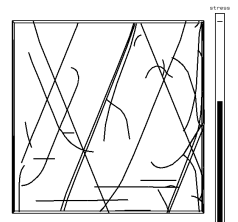
- [24] R. W. Hoffman, "Nanomechanics of thin films: emphasis: tensile properties," Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **130**, 295–306 (1989).
- [25] A. Kretschmann, W.-M. Kuschke, S. P. Baker, and E. Arzt, "Plastic deformation on thin copper films determined by x-ray micro-tensile tests," Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **436**, 59–64 (1997).
- [26] Y. S. Kang, P. S. Ho, R. Knipe, and J. Tregilgas, "Film thickness effect on tensile properties and microstructures of submicron aluminum thin films on polyimide," Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **436**, 35–40 (1997).
- [27] M. Hommel, O. Kraft, S. P. Baker, and E. Arzt, "Micro-tensile and fatigue tests of copper thin films on substrates," Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **546**, 133–138 (1998).
- [28] I. C. Noyan and G. Sheikh, "X-ray tensile testing of thin films," J. Mater. Res. **8**, 764–770 (1993).
- [29] M. Hommel, O. Kraft, and E. Arzt, "A new method to study cyclic deformation of thin films in tension and compression," J. Mater. Res. **14**, 2373–2376 (1999).
- [30] M. Hommel and O. Kraft, "Deformation behavior of thin copper films on deformable substrates," Acta Mater. **49**, 3935–3947 (2001).
- [31] S. P. Baker, A. Kretschmann, and E. Arzt, "Thermomechanical behavior of different texture components in Cu thin films," Acta Mater. **49**, 2145–2160 (2001).
- [32] C. V. Thompson, "Grain growth in thin films," Annual Review of Materials Science **20**, 245–268 (1990).
- [33] D. Weiss, H. Gao, and E. Arzt, "Constrained diffusional creep in UHV-produced copper thin films," Acta Mater. **49**, 2395–2403 (2001).
- [34] W. W. Mullins, "The effect on thermal grooving on grain boundary motion," Acta Mater. **6**, 414–427 (1958).
- [35] R. P. Vinci, E. M. Zielinski, and J. C. Bravman, "Thermal strain and stress in copper thin films," Thin Solid Films **262**, 142–153 (1995).
- [36] J. A. Ruud, D. Josell, and F. Spaepen, "A new method for tensile testing of thin films," J. Mater. Res. **8**, 112–117 (1993).
- [37] H. Huang and F. Spaepen, "Tensile testing of free-standing Cu, Ag and Al thin films and Ag/Cu multilayers," Acta Mater. **48**, 3261–3269 (2000).
- [38] H. J. Frost and M. F. Ashby, *Deformation Mechanism Maps* (Pergamon Press, Oxford, 1982).



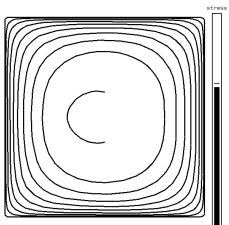
- [39] J. W. Matthews, S. Mader, and T. B. Light, "Accommodation of misfit across the interface between crystals of semiconducting elements of compounds," *J. Appl. Phys.* **41**, 3800–3804 (1970).
- [40] L. B. Freund, "A criterion for arrest of a threading dislocation in a strained epitaxial layer due to an interface misfit dislocation in its path," *J. Appl. Phys.* **68**, 2073–2080 (1990).
- [41] C. V. Thompson, "The yield stress of polycrystalline thin films," *J. Mater. Res.* **8**, 237–238 (1993).
- [42] P. Chaudari, "Plastic properties of polycrystalline thin films on a substrate," *Phil. Mag. A* **39**, 507–516 (1979).
- [43] G. E. Dieter, *Mechanical Metallurgy* (McGraw-Hill Book Co., New York, 1986).
- [44] R. R. Keller, J. M. Phelps, and D. T. Read, "Tensile and fracture behavior of free-standing copper films," *Mater. Sci. Eng.* **A214**, 42–52 (1996).
- [45] W. D. Nix, "Yielding and strain hardening of thin metal films on substrates," *Scripta Metall.* **39**, 545–554 (1998).
- [46] K. W. Schwarz and J. Tersoff, "Interaction of threading and misfit dislocations in a strained epitaxial layer," *Appl. Phys. Lett.* **69**, 1220–1222 (1996).
- [47] D. Gomez-Garcia, B. Devincre, and L. Kubin, "Dislocation dynamics in confined geometry," *J. Comput. Aided Mater. Design* **6**, 157–164 (1999).
- [48] P. M. Anderson and E. R. Kreidler, jr., "Dislocation-based models of stress-strain behavior in multilayered thin films," *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **505**, 571–576 (1998).
- [49] V. Weihnacht and W. Brückner, "Dislocation accumulation and strengthening in Cu thin films," *Acta Mater.* **49**, 2365–2372 (2001).
- [50] Z. Shen, R. H. Wagoner, and W. A. T. Clark, "Dislocation pile-up and grain boundary interactions in 304 stainless steel," *Scripta Metall.* **20**, 921–926 (1986).
- [51] B. J. Pestman, J. T. M. De Hosson, V. Vitek, and F. W. Schapnik, "Interaction between lattice dislocations and grain boundaries in f.c.c. and ordered compounds: a computer simulation," *Phil. Mag. A* **64**, 951–969 (1991).
- [52] A. Mascanzoni and G. Buzzichelli, "Electron microscopy evidence for a Frank-Read source operating from a grain boundary in alpha -iron," *Phil. Mag. A* **22**, 857–860 (1970).
- [53] L. E. Murr, "Strain-induced dislocation emission from grain boundaries in stainless steel," *Mater. Sci. Eng.* **51**, 71–79 (1981).



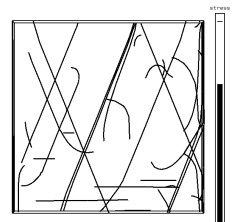
- [54] E. O. Hall, "The deformation and ageing of mild steel: III discussion of results," *Proc. R. Soc. Lond.* **B64**, 747–753 (1951).
- [55] N. J. Petch, "The cleavage strength of polycrystals," *Iron Steel Inst.* **174**, 25–28 (1953).
- [56] A. Lasalmonie and J. L. Strudel, "Review: Influence of grain size in the mechanical behaviour of some high strength materials," *J. Mater. Sci.* **21**, 1837–1851 (1986).
- [57] J. C. M. Li and Y. T. Chou, "The role of dislocations in the flow stress grain size relationships," *Metall. Trans.* **1**, 1145–1159 (1970).
- [58] M. F. Ashby, "The deformation of plastically non-homogeneous materials," *Phil. Mag. A* **21**, 388–424 (1970).
- [59] A. W. Thompson, M. I. Baskes, and W. F. Flanagan, "The dependence of polycrystal work hardening on grain size," *Acta Mater.* **21**, 1017–1028 (1973).
- [60] J. C. M. Li, "Petch relation and grain boundary sources," *TMS AIME* **227**, 239–247 (1963).
- [61] U. F. Kocks, "The relation between polycrystal deformation and single-crystal deformation," *Metall. Trans.* **1**, 1121–1143 (1970).
- [62] A. H. Chokshi, A. Rosen, J. Karch, and H. Gleiter, "On the validity of the Hall–Petch relationship in nanocrystalline materials," *Scripta Metall.* **23**, 1679–1684 (1989).
- [63] L. H. Friedman and D. C. Chrzan, "Continuum analysis of dislocation pile-ups: influence of sources," *Phil. Mag. A* **77**, 1185–1204 (1998).
- [64] C. Suryanarayana, "Nanocrystalline materials," *Int. Mater Rev.* **40**, 41–64 (1995).
- [65] C. C. Koch and J. Narayan, "The inverse Hall–Petch effect — fact or artifact," *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **634**, B5.1.1–B5.1.11 (2001).
- [66] J. Schiøtz, T. Vegge, F. D. Di Tolla, and K. W. Jacobsen, "Atomic-scale simulations of the mechanical deformation of nanocrystalline metals," *Phys. Rev. B* **60**, 11971–11983 (1999).
- [67] H. van Swygenhoven, M. Spaczer, A. Caro, and D. Farkas, "Competing plastic deformation mechanisms in nanophase metals," *Phys. Rev. B* **60**, 22–25 (1999).
- [68] H. van Swygenhoven, A. Caro, and D. Farkas, "Grain boundary structure and its influence on plastic deformation of polycrystalline fcc metals at the nanoscale: a molecular dynamics study," *Scripta Metall.* **44**, 1513–1516 (2001).



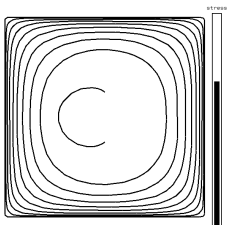
- [69] V. Y. Gertsman, M. Hoffmann, H. Gleitner, and R. Birringer, "The study of grain size dependence of yield stress of copper for a wide grain size range," *Acta Metall. Mater.* **42**, 3539–3544 (1994).
- [70] M. D. Merz and S. D. Dahlgren, "Tensile strength and work hardening of ultrafine-grained high-purity copper," *J. Appl. Phys.* **46**, 3235–3237 (1975).
- [71] B. M. Clemens, H. Kung, and S. A. Barnett, "Structure and strength of multilayers," *MRS Bulletin* **24**, 20–26 (1999).
- [72] T. E. Mitchell, Y. C. Lu, and A. J. Griffin Jr., "Structure and Mechanical properties of Copper / Niobium multilayers," *J. Am. Cer. Soc.* **80**, 1673–1976 (1997).
- [73] A. Misra, M. Verdier, Y. C. Lu, H. Kung, T. E. Mitchell, M. Nastasi, and J. D. Embury, "Structure and mechanical properties of Cu–X (X = Nb, Cr, Ni) nanolayered composites," *Scripta Metall.* **39**, 555–560 (1998).
- [74] A. Misra, J. P. Hirth, H. Kung, R. G. Hoagland, and J. D. Embury, "Dislocation Models for strengthening in nanostructured metallic multilayers," *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 634 (2001).
- [75] P. M. Anderson, T. Foecke, and P. M. Hazzledine, "Dislocation-based deformation mechanisms in metallic nanolaminates," *MRS Bulletin* **24**, 27–33 (1999).
- [76] D. Jawarani, H. Kawasaki, I.-S. Yeo, L. Rabenberg, J. P. Start, and P. S. Ho, "In situ transmission electron microscopy study of plastic deformation in passivated Al–Cu thin films," *J. Appl. Phys.* **82**, 171–181 (1997).
- [77] R.-M. Keller-Flaig, M. Legros, W. Sigle, A. Gouldstone, K. J. Hemker, S. Suresh, and E. Arzt, "In situ transmission electron microscopy investigation of threading dislocation motion in passivated thin aluminum films," *J. Mater. Res.* **14**, 4673–4676 (1999).
- [78] P. Müllner and E. Arzt, "Observation of dislocation disappearance in aluminum thin films and consequences for thin film properties," *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **505**, 149 (1998).
- [79] E. Arzt, G. Dehm, P. Gumbsch, O. Kraft, and D. Weiss, "Interface controlled plasticity in metals: dispersion hardening and thin film deformation," *Progr. Mats. Sci.* **46**, 283–307 (2001).
- [80] M. Legros, G. Dehm, R. M. Keller-Flaig, E. Arzt, K. J. Hemker, and S. Suresh, "Dynamic observation of Al thin films plastically strained in a TEM," *Mater. Sci. Eng. A* **A309–310**, 463–467 (2001).



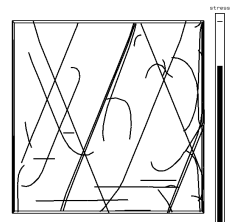
- [81] G. Dehm and E. Arzt, "In situ transmission electron microscopy study of dislocations in a polycrystalline Cu thin film constrained by a substrate," *Appl. Phys. Lett.* **77**, 1126–1128 (2000).
- [82] G. Dehm, D. Weiss, and E. Arzt, "In-situ transmission electron microscopy study of thermal-stress-induced dislocations in a thin Cu film constrained by a Si substrate," *Mater. Sci. Eng. A* **309–310**, 468–472 (2001).
- [83] G. Dehm, B. J. Inkson, T. J. Balk, T. Wagner, and E. Arzt, "Influence of film/substrate interface structure on plasticity in metal thin films," *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **673**, P2.1.1–12 (2001).
- [84] M. J. Kobrinsky and C. V. Thompson, "Activation volume for inelastic deformation in polycrystalline Ag thin films," *Acta Mater.* **48**, 625–633 (2000).
- [85] M. J. Kobrinsky and C. V. Thompson, "Activation volume for inelastic deformation in polycrystalline Ag films at low temperatures," *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **594**, 57–62 (2000).
- [86] H. G. F. Wilsdorf, "On the multiplication of dislocations in thin foils," in *Structure and Properties of Thin Films* (John Wiley & Sons, New York, 1959), p. 151.
- [87] Y. Miura, F. Higuchi, and H. Era, "Dislocation multiplication sources in copper revealed by X-ray topography," *Phil. Mag. A* **71**, 1363–1373 (1995).
- [88] R. Beanland, "Dislocation multiplication mechanisms in low-misfit strained epitaxial layers," *J. Appl. Phys.* **77**, 6217–6222 (1995).
- [89] C. Coupeau, F. Cleymand, and J. Grilhé, "Atomic force microscopy of dislocation locking effects at gold film LiF substrate interface," *Scripta Metall.* **43**, 187–192 (2000).
- [90] C. W. Allen, H. Schroeder, and J. M. Hiller, "In situ study of dislocation behavior in columnar Al thin film on Si substrate during thermal cycling," *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **594**, 123–128 (2000).
- [91] E. A. Stach, R. Hulls, R. M. Tromp, F. M. Ross, M. C. Reuter, and J. C. Bean, "In-situ transmission electron microscopy studies of the interaction between dislocations in strained SiGe/Si(001) heterostructures," *Phil. Mag. A* **80**, 2159–2200 (2000).
- [92] K. W. Schwarz, "Interaction of dislocations on crossed glide planes in a strained epitaxial layer," *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4785–4788 (1997).
- [93] A. Moulin, M. Condat, and L. P. Kubin, "Simulation of Frank–Read sources in silicon," *Acta Mater.* **45**, 2339–2348 (1997).



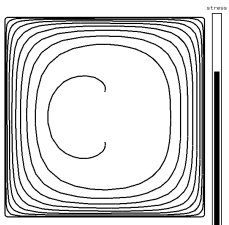
- [94] M. Hommel, Ph.D. thesis, “Röntgenographische Untersuchung des monotonen und zyklischen Verformungsverhaltens dünner Metallschichten auf Substraten”, Universität Stuttgart, 1999.
- [95] S. J. Zhou, A. E. Carlsson, and R. Thomson, “Dislocation core-core interaction and Peierls stress in a model hexagonal lattice,” *Phys. Rev. B* **49**, 6451–6456 (1994).
- [96] R. de Wit, “The continuum theory of stationary dislocations,” *Solid State Phys.* **10**, 249–292 (1960).
- [97] M. O. Peach and J. S. Koehler, “The forces exerted on dislocations and the stress fields produced by them,” *Phys. Rev.* **80**, 436–439 (1950).
- [98] L. M. Brown, “A proof of Lothe’s Theorem,” *Phil. Mag. A* **15**, 363 (1967).
- [99] H. Schmid and H. O. K. Kirchner, “Self-stress and equilibrium shapes of dislocation loops,” *Phil. Mag. A* **58**, 905–921 (1988).
- [100] S. D. Gavazza and D. M. Barnett, “The self-force on a planar dislocation loop in an anisotropic linear-elastic medium,” *J. Mech. and Phys. Solids* **24**, 171 (1976).
- [101] F. Prinz, H. O. K. Kirchner, and G. Schoeck, “Dislocation core energies in the Peierls model,” *Phil. Mag. A* **38**, 321–332 (1978).
- [102] R. de Wit, “The Self-Energy of Dislocation Configurations Made up of Straight Segments,” *Phys. Status Solidi* **20**, 575–580 (1967).
- [103] E. Bitzek, Max-Planck-Inst. f. Metalsresearch, Stuttgart 2001 (unpublished).
- [104] A. J. E. Foreman, “The bowing of a dislocation segment,” *Phil. Mag. A* **15**, 1011–1021 (1967).
- [105] D. J. Bacon, “A method for describing a flexible dislocation,” *Phys. Status Solidi* **23**, 527–538 (1967).
- [106] J. Lépinoux and L. P. Kubin, “The dynamic organization of dislocation structures: A simulation,” *Scripta Metall.* **21**, 833–838 (1987).
- [107] A. N. Gulluoglu, D. J. Srolovitz, R. LeSar, and P. S. Lomdahl, “Dislocation distributions in two dimensions,” *Scripta Metall.* **23**, 1347–1352 (1989).
- [108] H. Y. Wang and R. LeSar, “O(N) algorithm for dislocation dynamics,” *Phil. Mag. A* **71**, 149–164 (1995).
- [109] R. J. Amodeo and N. M. Ghoniem, “Dislocation dynamics. I. A proposed methodology for deformation micromechanics,” *Phys. Rev. B* **41**, 6958–6967 (1990).



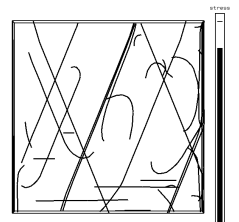
- [110] H. H. M. Cleveringa, E. van der Giessen, and A. Needleman, “Comparison of discrete dislocation and continuum plasticity predictions for a composite material,” *Acta Mater.* **45**, 6163–3179 (1997).
- [111] B. Devincre and M. Condat, “Model validation of a 3D simulation of dislocation dynamics: Discretisation and line tension effects,” *Acta Metall. Mater.* **40**, 2629–2637 (1992).
- [112] L. P. Kubin, G. Canova, M. Condat, B. Devincre, V. Pontikis, and Y. Bréchet, “Dislocation microstructures and plastic flow: A 3D simulation,” *Solid State Phenom.* **23 & 24**, 455–472 (1992).
- [113] B. Devincre and L. P. Kubin, “Simulation of forest interactions and strain hardening in fcc crystals,” *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **2**, 559–570 (1994).
- [114] B. Devincre, “Meso-scale simulation of the dislocation dynamics,” in *Computer Simulations in Materials Science*, Vol. 308 of *Series E: Applied Sciences*, H. O. Kirchner and L. P. Kubin, eds., (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996), pp. 309–323.
- [115] B. Devincre, L. P. Kubin, C. Lemarchand, and R. Madec, “Mesoscopic simulations of plastic deformation,” *Mater. Sci. Eng. A* **309–310**, 211–219 (2001).
- [116] H. M. Zbib, M. Rhee, and J. P. Hirth, “On plastic deformation and the dynamics of 3D dislocations,” *Int. J. Mech. Sci.* **40**, 113–127 (1998).
- [117] M. Rhee, H. M. Zbib, J. P. Hirth, H. Huang, and T. de la Rubia, “Models for long-/short-range interactions and cross slip in 3D simulation of bcc single crystals,” *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **6**, 467–492 (1998).
- [118] K. W. Schwarz and F. K. LeGoues, “Dislocation patterns in strained layers from sources on parallel glide planes,” *Phys. Rev. Lett* **79**, 1877–1880 (1997).
- [119] K. W. Schwarz, “Simulation of dislocations on the mesoscopic scale. I. Methods and examples,” *J. Appl. Phys.* **85**, 108–119 (1999).
- [120] K. W. Schwarz, “Simulation of dislocations on the mesoscopic scale II. Application to strained –layer relaxation,” *J. Appl. Phys.* **85**, 120–129 (1999).
- [121] V. Mohles, D. Rönnpapel, and E. Nembach, “Simulation of dislocation glide in precipitation hardened materials,” *Comp. Mat. Sci.* **16**, 144–150 (1999).
- [122] M. S. Duesbery, N. P. Louat, and K. Sadananda, “The numerical simulation of continuum dislocations,” *Phil. Mag. A* **65**, 311–325 (1992).
- [123] N. M. Ghoniem, S. Tong, and L. Z. Sun, “Parametric dislocation dynamics: A thermodynamic-based approach to investigations of mesoscopic plastic deformation,” *Phys. Rev. B* **61**, 913–927 (2000).



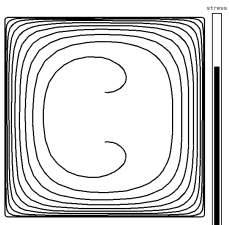
- [124] J. Friedel, *Dislocations* (Pergamon Press, Oxford, 1964).
- [125] J. P. Hirth, “On dislocation interactions in the fcc lattice,” *J. Appl. Phys.* **32**, 700–706 (1961).
- [126] G. Saada, “Sur le durcissement dû á la recombinaison des dislocations,” *Acta Mater.* **8**, 841–847 (1960).
- [127] G. Schoeck and R. Frydman, “The contribution of the dislocation forest to the flow stress,” *Phys. Status Solidi (b)* **53**, 661–673 (1972).
- [128] S. J. Zhou, D. L. Preston, P. S. Lomdahl, and D. M. Beazley, “Large-scale molecular dynamics simulations of dislocation intersection in copper,” *Science* **279**, 1525–1527 (1998).
- [129] S. J. Zhou and D. L. Preston, “Short-range dislocation interactions,” *Physica D* **133**, 498–504 (1999).
- [130] D. Rodney and R. Phillips, “Structure and strength of dislocation junctions: an atomistic level analysis,” *Phys. Rev. Lett* **82**, 1704–1707 (1999).
- [131] V. B. Shenoy, R. V. Kutka, and R. Phillips, “Mesoscopic analysis of structure and strength of dislocation junctions in fcc metals,” *Phys. Rev. Lett* **84**, 1491–1494 (2000).
- [132] V. Bulatov, F. F. Abraham, L. Kubin, B. Devincre, and S. Yipp, “Connecting atomistic and mesoscale simulations of crystal plasticity,” *Nature* **391**, 669–672 (1998).
- [133] C. S. Shin, M. C. Fivel, D. Rodney, R. Phillips, and L. Dupuy, “Formation and strength of dislocation junctions in fcc metals: a study by dislocation dynamics and atomistic simulations,” *J. Physique IV* **11**, Pr5–19 – 26 (2001).
- [134] H. M. Zbib, T. Diaz de la Rubia, M. Rhee, and J. P. Hirth, “3D dislocation dynamics: stress-strain behavior and hardening mechanisms in fcc and bcc metals,” *J. Nucl. Mater.* **276**, 154–165 (2000).
- [135] L. K. Wickham, K. W. Schwarz, and J. S. Stölken, “Rules for forest interactions between dislocations,” *Phys. Rev. Lett* **83**, 4574–4577 (1999).
- [136] M. Verdier, M. Fivel, and I. Groma, “Mesoscopic scale simulation of dislocation dynamics in fcc metals: principles and application,” *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **6**, 755–770 (1998).
- [137] A. El-Azab, “The boundary value problem of dislocation dynamics,” *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **9**, 37–54 (2000).



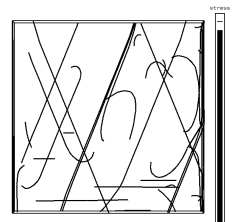
- [138] V. V. Bulatov, M. Rhee, and W. Cai, “Periodic boundary conditions for dislocation dynamics simulations in three dimensions,” *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **653**, Z1.3.1–Z1.3.6 (2001).
- [139] M. C. Fivel, T. J. Gosling, and G. R. Canova, “Implementing image stresses in a 3D dislocation simulation,” *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **4**, 581–596 (1996).
- [140] M. C. Fivel and G. R. Canova, “Develop rigorous boundary conditions to discrete dislocation dynamics simulations,” *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **7**, 753–768 (1999).
- [141] A. Hartmaier, M. C. Fivel, G. R. Canova, and P. Gumbsch, “Image stresses in a free-standing thin film,” *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **7**, 781–793 (1999).
- [142] X. H. Liu, F. M. Ross, and K. W. Schwarz, “Modelling of dislocations in an epitaxial Island Structure,” *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **673**, P4.2.1–12 (2001).
- [143] M. Fivel, M. Verdier, and G. Canova, “3D simulation of a nanoindentation test at a mesoscopic scale,” *Mater. Sci. Eng. A* **234–236**, 923–926 (1997).
- [144] C. Lemarchand, B. Devincere, L. P. Kubin, and J. L. Chaboche, “Coupled meso-macro simulations of plasticity: validation tests,” *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **538**, 63–68 (1998).
- [145] C. Lemarchand, J. L. Chaboche, B. Devincere, and L. P. Kubin, “Multiscale modelling of plastic deformation,” *J. de Phys. IV* **9**, 271 (1999).
- [146] C. Lemarchand, B. Devincere, and L. P. Kubin, “Homogenization method for a discrete-continuum simulation of dislocation dynamics,” *J. Mech. and Phys. Solids* **49**, 1962–1982 (2001).
- [147] A. K. Faradjian, L. H. Friedman, and D. C. Chrzan, “Frank–Read sources within a continuum simulation,” *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **7**, 479–494 (1999).
- [148] D. Rönnpagel, T. Streit, and T. Pretorius, “Including thermal activation in simulation calculations of dislocation glide,” *Phys. Status Solidi (a)* **135**, 445–454 (1993).
- [149] V. Mohles and D. Rönnpagel, “Thermal activation analysis of dislocations in obstacle fields,” *Comp. Mat. Sci.* **7**, 98–102 (1996).
- [150] B. Devincere and L. P. Kubin, “Mesoscopic simulations of dislocations and plasticity,” *Mater. Sci. Eng.* **A234–236**, 8–14 (1997).
- [151] B. Devincere, P. Veysiere, and G. Saada, “Simulation of the plastic flow in Ni₃Al: work hardening and strain-rate sensitivity,” *Phil. Mag. A* **79**, 1609–1627 (1999).



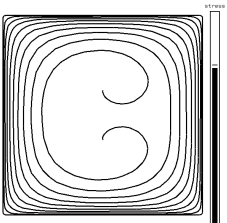
- [152] M. C. Fivel, C. F. Robertson, G. R. Canova, and L. Boulanger, “Three-dimensional modelling of indent-induced plastic zone at a mesoscale,” *Acta Mater.* **46**, 6183–6194 (1998).
- [153] T. Diaz de la Rubia, H. M. Zbib, T. A. Khraishi, B. D. Writh, M. Victoria, and M. J. Caturla, “Multiscale modeling of plastic flow localisation in irradiated materials,” *Nature* **406**, 871–874 (2000).
- [154] L. Nicola, E. van der Giessen, and A. Needleman, “2D dislocation dynamics in thin metal layers,” *Mater. Sci. Eng. A* **309–310**, 274–277 (2001).
- [155] K. W. Schwarz, “Dislocation dynamics near film edges and corners in silicon,” *J. Appl. Phys.* **85**, 7198–7208 (1999).
- [156] “Blitz++, C++ class library for object oriented numerical programming,” <http://oonumerics.org/blitz/>.
- [157] D. J. Bacon, U. F. Kocks, and R. O. Scattergood, “The effect of dislocation self-interaction on the Orowan stress,” *Phil. Mag. A* **28**, 1241–1263 (1973).
- [158] K. Jassby and T. Vreeland Jr., “An experimental study of the mobility of edge dislocations in pure copper single crystals,” *Phil. Mag. A* **21**, 1147–1168 (1970).
- [159] H. R. Schwarz, in *Numerische Mathematik* (B. G. Teubner, Stuttgart, 1997), Chap. 9.
- [160] L. M. Brown, “The self-stress of dislocations and the shape of extended nodes,” *Phil. Mag. A* **10**, 441–466 (1965).
- [161] J. D. Embury and J. P. Hirth, “On dislocation storage and the mechanical response of fine scale microstructures,” *Acta Metall. Mater.* **42**, 2051–2056 (1994).
- [162] J. Lothe, “The image force on dislocations at free surfaces — comments on the concept of line tension,” in *Fundamental Aspects of Dislocation Theory*, J. A. Simmons, R. de Wit, and R. Bullough, eds., (National Bureau of Standards Spec. Publ., 1970), Vol. 317, pp. 11–22.
- [163] U. Essmann and H. Mughrabi, “Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities,” *Phil. Mag. A* **40**, 731–756 (1979).
- [164] H. Gao, L. Zang, W. D. Nix, C. V. Thompson, and E. Arzt, “Crack-like grain-boundary diffusion wedges in thin metal films,” *Acta Mater.* **47**, 2865–2878 (1999).
- [165] B. von Blanckenhagen, P. Gumbsch, and E. Arzt, “Discrete dislocation simulation of thin film plasticity,” *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **673**, P2.3.1–6 (2001).
- [166] B. von Blanckenhagen, P. Gumbsch, and E. Arzt, “Dislocation sources in discrete dislocation simulations of thin film plasticity and the Hall–Petch relation,” *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **9**, 157–169 (2001).



- [167] J. P. Hirth and J. Lothe, *Theory of Dislocations* (Krieger Publishing Company, Malabar, 1982).
- [168] J. H. Adams, *Metals Handbook Vol. 2: Properties and Selection — Non-ferrous Alloys and special-purpose Materials* (ASM International, Cleveland, 1990).
- [169] P. Pant, K. W. Schwarz, and S. P. Baker, “Dislocation dynamics simulations of dislocation interactions in thin fcc metal films,” *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **673**, P2.2.1–6 (2001).
- [170] T. J. Balk, G. Dehm, and E. Arzt, “Observation of dislocation motion and stress inhomogeneities in a thin copper film,” *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **673**, P2.1.13–19 (2001).
- [171] V. S. Deshpande, A. Needleman, and E. Van der Giessen, “Dislocation dynamics is chaotic,” *Scripta Metall.* **45**, 1047–1053 (2001).
- [172] R. Schwaiger, 2001, private communication.
- [173] D. Weiss (unpublished).
- [174] R.-M. Keller, Ph.D. thesis, “Thermomechanisches Verhalten und Mikrostruktur dünner, polykristalliner Kupferschichten”, Universität Stuttgart, 1996.
- [175] S. P. Baker, R.-M. Keller, and E. Arzt, “Energy storage and recovery in thin metal films on substrates,” *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **505**, 606–610 (1998).
- [176] Y.-L. Shen, S. Suresh, M. Y. He, A. Bagchi, O. Kienzle, M. Rühle, and A. G. Evans, “Stress evolution in passivated thin films of Cu on silica,” *J. Mater. Res.* **13**, 1928–1937 (1998).
- [177] O. Kraft (unpublished).
- [178] K. Owusu-Boahen and A. H. King, “The early stages of plastic yielding in polycrystalline gold thin films,” *Acta Mater.* **49**, 237–247 (2001).
- [179] M. J. Kobrinsky, G. Dehm, C. V. Thompson, and E. Arzt, “Effects of thickness on the characteristic length scale of dislocation plasticity in Ag thin films,” *Acta Mater.* **49**, 3597–3607 (2001).
- [180] P. M. Anderson, S. Rao, Y. Cheng, and P. M. Hazzledine, “The critical stress for transmission of a dislocation across an interface: results from Peierls and embedded atom models,” *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **586**, 267–272 (2000).
- [181] T. H. Courtney, *Mechanical Behavior of Materials* (McGraw Hill, Singapore, 1990).
- [182] R.-M. Keller, S. P. Baker, and E. Arzt, “Stree–temperature behavior of unpassivated thin copper films,” *Acta Mater.* **47**, 415–426 (1999).



- [183] D. Weiss, 2001, private communication.
- [184] R. Spolenak *et al.*, “Microtexture and strain in electropolated copper interconnects,” *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **621**, D10.3.1–7 (2000).
- [185] J. A. Nucci, R. R. Keller, S. Krämer, C. A. Volkert, and M. E. Gross, “Localized measurement of strains in damascene copper interconnects by convergent–beam electron diffraction,” *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **612**, D8.5.1–6 (2000).
- [186] I. A. Blech and A. A. Levi, “Comments on Aleck’s stress distribution in clamped plates,” *J. Appl. Mech.* **48**, 442–445 (1981).
- [187] Z. Shen, R. H. Wagoner, and W. A. T. Clark, “Dislocation and grain boundary interaction in metals,” *Acta Metall.* **36**, 3231–3242 (1988).
- [188] T. C. Lee, I. M. Robertson, and H. K. Birnbaum, “An in situ transmission electron microscope deformation study of slip transfer mechanisms in metals,” *Metall. Trans. A* **21A**, 2437–2447 (1990).



Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde am Max-Planck-Institut für Metallforschung in Stuttgart in der Zeit von Juli 1998 bis Dezember 2001 in der Gruppe von Herrn Prof. Dr. E. Arzt angefertigt. Für die Möglichkeit, diese Arbeit an seinem Institut durchführen zu können, und sein Interesse an ihrem Fortgang möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. E. Arzt herzlich bedanken.

Herrn Prof. Dr. M. Rühle danke ich für die Übernahme des Mitberichts.

Mein besonderer Dank gilt Peter Gumbsch für die interessante Themenstellung der Arbeit und die wertvollen Diskussionen, die wir geführt haben.

Bedanken möchte ich mich auch bei Oliver Kraft. Er war für mich das Bindeglied zur experimentellen Dünnschichtforschung und hat somit sichergestellt, daß meine theoretische Arbeit engen Bezug zum Experiment hat.

Ich danke Alexander Hartmaier für seine Hilfe in der Einarbeitungszeit, die ich benötigte, um mich sowohl in der Theorie und Simulation von Versetzungen als auch in Stuttgart zurechtzufinden.

Mein Dank gilt Gerhard Dehm für den fruchtbaren Wissensaustausch und dafür, daß er genau zur richtigen Zeit die richtigen Versetzungen im TEM entdeckt hat.

Nicht zuletzt bedanke ich mich bei meiner Freundin Claude und meinen Eltern für ihre Unterstützung und Ermutigungen.

