

**IC-MPPE / Integrated Computational Materials Process and Product Engineering**

Programm: COMET – Competence Centers for Excellent Technologies

Förderlinie: COMET-Zentrum (K2)

Projekt P2.12 “Development of an experimental and atomistic modelling toolbox for the characterization of temperature-dependent elastic-plastic and interface properties in integrated multilayer materials used for power semiconductor applications”

single-firm project (2018-2021)

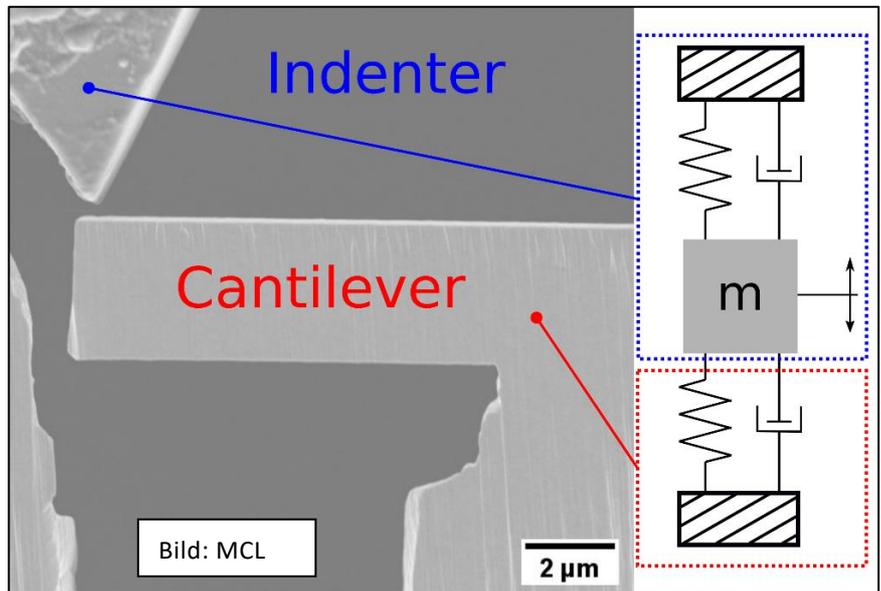


Bild: MCL

2 μm

## QUANTIFIZIERUNG DES EFFEKTS VON KORNGRENZEN-ENGINEERING MIT MIKROMECHANISCHEN METHODEN

### NEUE DYNAMISCHE PRÜFTECHNIK LÖST ÄNDERUNGEN DER KORNGRENZEN-STRUKTUR AUF

Von Stahl, der im Bauwesen verwendet wird, bis hin zu Silizium in der Halbleiterindustrie sind die meisten Materialien, die heutzutage für strukturelle und funktionelle Zwecke verwendet werden, kristalliner Natur. Je nach Verarbeitung und gewünschter Anwendung sind diese Materialien gelegentlich einkristallin, aber in der Mehrzahl eine Anordnung unterschiedlich orientierter Körner unterschiedlicher Größe und Form, die durch Korngrenzen getrennt sind. Diese Korngrenzen sind für viele mechanische, elektrische, thermische und magnetische Eigenschaften in solchen Materialien verantwortlich. Daher kann die Veränderung ihrer inneren Struktur zu einer Vielzahl von abstimmbaren Eigenschaften führen, was heute als "Korngrenzen Engineering" bekannt ist.

Man könnte sich solche Korngrenzen als einen nanoskaligen Designraum zwischen zwei Körnern vorstellen, in dem die Atome so angeordnet sind, dass sie sich beiden Körnern "am besten anpassen". Die Veränderung dieser atomistischen Struktur durch unterschiedliche Chemie oder Verformung kann also zu lokalen Stellen einer „schlechten Passung“ führen, was zu mehr oder weniger dicht gepackten Korngrenzenbereichen führt, die der Ursprung für die gewünschte (oder unerwünschte) Änderung der Materialeigenschaften sind.

Leider ist es aufgrund der atomistischen Natur nur selten möglich, solche Korngrenzenbereiche aufzulösen, was das Korngrenzen-Engineering zu einer recht aufwendigen Aufgabe macht.

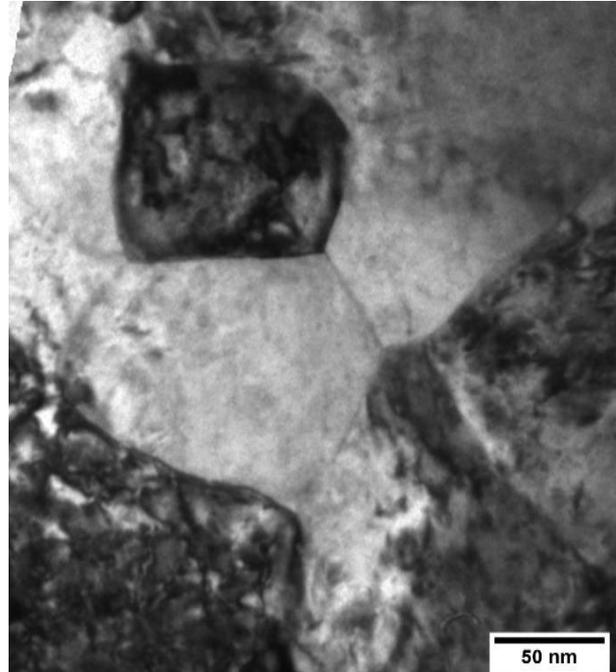
## SUCCESS STORY

Wenn man jedoch bedenkt, dass diese mehr oder weniger dicht gepackten Stellen unterschiedlich auf dynamische Schwingungen reagieren, kann man von dieser Dämpfungsreaktion indirekt die Veränderung der lokalen Struktur messen. Um solch kleine Änderungen im dynamischen Verhalten aufzulösen, ist es jedoch notwendig, sehr kleine Kräfte und Verschiebungen zu messen und die Tatsache zu berücksichtigen, dass eine eventuelle Luftdämpfung die Änderung der Korngrenzenstruktur dominieren würde. Auf der Grundlage unserer langjährigen Erfahrung mit mikromechanischen Messtechniken im Vakuum konnten wir diese Herausforderung lösen und Korngrenzenänderungen in nanokristallinem Tantal (Ta), einem in der Elektronik hochrelevanten Material, durch die Entwicklung einer neuartigen Technik auf der Grundlage der mechanischen Spektroskopie an mikroskopischen Proben messen.

### Wirkungen und Effekte

Diese neuartige Methode dient als Grundlage für weitere Untersuchungen an verschiedenen strukturellen und funktionellen Materialien, die durch Korngrenzen-Engineering vorangetrieben werden könnten. Insbesondere die Möglichkeit, Veränderungen in der Korngrenzenstruktur auf effiziente Weise zu quantifizieren, ermöglicht einen informationsgetriebenen Ansatz zur Prozess-

optimierung, um die derzeit notwendige "Trial and Error"-Arbeit zu reduzieren.



Kornstruktur von nanokristallinem Ta. Zum Vergleich: Ein menschliches Haar ist tausendmal größer im Durchmesser.  
Bild: MCL, publiziert in M. Alfreider et al. Acta Materialia (2020)

Diese Arbeit wurde zur Veröffentlichung in der renommierten internationalen wissenschaftlichen Zeitschrift Acta Materialia, Elsevier, angenommen.

### Projektkoordination (Story)

Dr. Roland Brunner  
Group Leader Material and damage analytics  
Dept. Microelectronics  
T +43 (0) 3842 45922-0  
roland.brunner@mcl.at

**Materials Center Leoben Forschung GmbH**  
**Trägerorganisation: COMET K2 Zentrum IC-MPPE**  
Roseggerstrasse 12  
A-8700 Leoben, Austria  
T +43 (0) 3842 45922-0  
mclburo@mcl.at  
www.mcl.at

### Projektpartner

- Materials Center Leoben Forschung GmbH, Österreich
- Montanuniversität Leoben, Österreich
- Infineon Technologies Austria AG, Österreich

Diese Success Story wurde von der Zentrumsleitung und den genannten Projektpartnern zur Veröffentlichung auf der FFG Website freigegeben. Das COMET-Zentrum IC-MPPE wird im Rahmen von COMET – Competence Centers for Excellent Technologies durch BMK, BMDW, und den Bundesländern Steiermark, Oberösterreich und Tirol gefördert. Das Programm COMET wird durch die FFG abgewickelt. Weitere Informationen zu COMET: [www.ffg.at/comet](http://www.ffg.at/comet)