

Populärvetenskaplig sammanfattning av avhandlingen *Atomistic Studies of Nanosized Copper Structures*

Till skillnad från relativt stora föremål såsom synålar och motorblock så är andelen ytatomer i nanokomponenter inte negligerbar. Detta gör att den genomsnittliga bindningsenergin mellan atomerna förändras. Därtill, på nanonivå kan inte material längre ses som något som är homogent och kontinuerligt. Istället måste hänseende tas till atomers positioner och om atomerna är ordnade i kristaller, hur kristallerna är orienterade samt i vilken/vilka kristallriktningar eventuella mekaniska laster verkar i. Allt detta resulterar i att egenskaperna som ett material har på nanonivå skiljer sig från de egenskaper som materialet har på makronivå.

Det moderna informationssamhället som vi lever i uppstod som en följd av tillgängligheten på apparater såsom datorer, mobiltelefoner, satelliter etc. som möjliggör och tillgodoser snabb och lättillgänglig kommunikation. Dessa apparater består ofta av tusentals mikro- och nanoelektriska komponenter. För att tillverka sådana små komponenter krävs avancerad mätutrustning och tillverkningsrobotar med nanoprecision. Således är det moderna samhället beroende av apparater och som har egenskaper som bestäms på nanonivå.

På grund av sin låga resistivitet och förmåga att kunna leda starka strömmar är koppar ett lämpligt tillverkningsmaterial för mikroskopiska och nanoskopiska elektriska komponenter. Forskningen som presenteras i avhandlingen *Atomistic Studies of Nanosized Copper Structures* strävar efter att öka kunskapen och förståelsen för nanoelektriska komponenter av koppar och dess mekaniska egenskaper.

Resultaten i den här avhandlingen visar att teorier och beräkningsmodeller som förutsätter kontinuum kan ge en grov uppskattning av de mekaniska spänningarna och töjningarna, eller snarare förskjutningarna, på atomär nivå i närheten av en nanospricka i en nanokomponent av koppar. De största felen fås i närheten av sprickspetsen och detta beror på att det är där som diskontinuiteten är som störst. Detta eftersom materialet, på atomär nivå, är diskret och hålls ihop av en interatomär potential. Eftersom atomer i närheten av en spricka eller vakans har färre grannatomer kommer de största mekaniska spänningarna, till skillnad från vad kontinuumteorierna förutspår, inte att finnas precis vid sprickspetsen/vakansspetsen utan snarare ett fåtal atomer framför sprickspetsen/vakansspetsen. Resultaten visar även att när en komponent blir tillräckligt liten så kommer inte tillståndet plan spänning att förekomma inom komponenten. Vidare visar resultaten att de mekaniska egenskaperna för en koppar belagda kisel film varierar beroende på hur kiselkristallen och kopparkristallen är orienterade och att olika kristallorienteringskombinationer är optimala för olika typer av mekanisk last. Det visar sig att de mekaniska egenskaperna för kopparklädda kisel filmer till stor del bestäms av hur kopparatomerna i interfacet förflyttar sig. Koppardatomernas förflyttningar påverkas i sin tur av hur pass väl atompositionerna i kiselkristallen och kopparkristallen överrensstämmer samt lastriktningen.