This study investigates how anisotropy in solid-liquid surface energy influences orientation selection during repeated nucleation in polycrystalline film growth and its impact on crystallographic texture formation. A novel methodology was developed to determine the nucleation probability as a function of substrate and nucleus orientation, based on the equilibrium shape of the nucleus under given conditions. Two approaches were devised to determine this shape: one based on a multi-phase field method and another on the analytical solution of the geometrical problem defining the shape. The former, extensively developed in this work, is most suitable for cases where an analytical solution of the geometrical problem is not possible. Multiple model variants were examined, using a custom MATLAB solver implemented to assess their performance against benchmark problems. While the models showed consistent performance in reproducing the anisotropic curvature driving force, discrepancies were found for the triple junction angle benchmark. Supported with these results, it was possible to select the most suitable model for the considered application.

The analytical solution to the shape-defining problem, on the other hand, enabled the creation of shape factor-orientation maps. These were used in a Monte Carlo simulation algorithm to model polycrystal growth. This simulation demonstrated how anisotropic interface energy can influence texture evolution and lead to new texture evolution modes. These findings could offer a qualitative explanation for the peculiar texture evolution observed in electrodeposited nickel, providing new insights into the effects of anisotropic nucleation on material properties.

Deze studie onderzoekt hoe anisotropie in vast-vloeistof grensvlakenergie de oriëntatieselectie beïnvloedt tijdens herhaalde kiemvorming in polykristallijne filmgroei en de impact ervan op kristallografische textuurvorming. Er werd een nieuwe methodologie ontwikkeld om de kans op kiemvorming te bepalen als functie van de substraat- en nucleatiekiemoriëntatie, gebaseerd op de evenwichtsvorm van de kiem onder gegeven omstandigheden. Er werden twee benaderingen bedacht om deze vorm te bepalen: een gebaseerd op een meerfasige veldmethode en een andere op de analytische oplossing van het geometrische probleem dat de vorm definieert. De eerste, uitgebreid ontwikkeld in dit werk, is meest geschikt voor gevallen waarin een analytische oplossing van het geometrische probleem niet mogelijk is. Er werden meerdere modelvarianten onderzocht, met behulp van een aangepaste MATLAB-solver die werd geïmplementeerd om hun prestaties te beoordelen ten opzichte van benchmarkproblemen. Hoewel de modellen consistente prestaties lieten zien bij het reproduceren van de drijvende kracht van de anisotrope kromming, werden er discrepanties gevonden voor de benchmark van de triplepuntshoeken. Ondersteund door deze resultaten was het mogelijk om het meest geschikte model voor de beschouwde toepassing te selecteren.

Op basis van de analytische oplossing van de vormbepalende vergelijkingen was het daarentegen mogelijk om vormfactor-oriëntatiekaarten te creëren voor specifieke geometrieën. Deze werden gebruikt in een Monte Carlo-simulatie-algoritme om de groei van polykristallen te modelleren. Deze simulatie liet zien hoe anisotrope grensvlakenergie de textuurevolutie kan beïnvloeden en zelfs kan leiden tot drastische textuurveranderingen. Deze bevindingen kunnen een kwalitatieve verklaring bieden voor de bijzondere textuurevolutie die wordt waargenomen in galvanisch nikkel, waardoor nieuwe inzichten kunnen worden verkregen in de effecten van anisotrope nucleatie op de materiaaleigenschappen.