

**İnce Film Metalik İletişim Bağlarında Oluşan Elektrogöç
Güdümlüdeki İç Makro Boşlukların ve Yüzey Tane Oluklarının
Hidrostatik ve Çift Akslı Gerilimler Altındaki Dinamiklerinin
Matematik Modellemesi ve Bilgisayar Benzetimi**

Proje No: 107M011

Prof. Dr. Tarık Ömer OĞURTANI
Prof. Dr. Ali KALKANLI
Dr. Ersin Emre ÖREN

Öncü AKYILDIZ
Aytaç ÇELİK

EKİM 2009
ANKARA

ÖNSÖZ

Katı malzemelerin yüzey ve ara yüzlerinin kapiler kuvvetlerin etkisi altında geçirdikleri mikro yapısal evrim malzeme biliminin en zorlayıcı teorik problemlerinden birini oluşturmaktadır. Konunun pratikteki önemi, yüzeylerin veya heterojen faz sınırlarının fiziksel ve kimyasal süreçlerde oynadıkları temel rolden ve malzemelerin yapı ve özellik bakımından kararlılıklarını etkilemesinden kaynaklanmaktadır. Isınma, sinterleme, tane büyümesi, tane sınırı oluşması, ince filmlerin büyümesi bu tarzdaki şekil ve mikro yapısal değişikliklere örnektir. Bu yüzeylerin yön bağımlılığı (anisotropy) ve maruz kaldıkları etkiler (elektrik alan, ısı gerilmeler vs.) çeşitlendikçe problem iyice karışık bir hal almaktadır.

TÜBİTAK tarafından bilimsel ve teknolojik araştırma projelerini destekleme programı (1001) kapsamında 104M399 kodu ile desteklenen projenin devamı niteliğindeki bu projede (107M011), tek kristal ve çift kristal ince metalik filmlerin kapiler, elektro göç ve ısı mekanik gerilmeler altındaki davranışları tersinemez ısı devingen kuramın ilkelerinden faydalanılarak incelenmiş, kuramsal bulgular ışığında tasarlanan bilgisayar benzetim deneyleri düzenlenmiştir. Tüm bu çalışmalar mikro elektronik endüstrisi için pratik önem arz ettiğinden, benzetim deneylerinden elde edilen bulgular, laboratuvar ortamında yapılan çalışmaların literatürde yer alan sonuçlarını açıklama gayreti içinde çok önemli bilgiler ve öngörüler ortaya çıkarmıştır.

ÖZET

Metalik ara bağlarda elektro göç tarafından indüklenen tahribat çok karışık bir olaydır. Bu olay kafes boşluklarının ve/veya atomların, kompozisyon değişmeksizin akılarının yığılması (divergence), boşlukların ve tepeliklerin doğup, büyüyüp, şekil değiştirmeleri ile yakından ilişkilidir. Bağların kesit boyutlarının mikron altı değerlere düştüğü yerlerde bambu benzeri tane yapıları ortaya çıkmaktadır. Bu ince filmler yarı iletken tabanlara birleştirilmekte ve dielektrik malzemelerle yüksek sıcaklıklarda kapsüle edilmektedir. Metal filmle çevre malzemesi arasındaki ısı genleşme katsayısının farklı oluşu çalışma sıcaklıklarında ısı mekanik gerilmelerin ortaya çıkmasına sebep olmaktadır. Boşluklar film kenarlarında ve tercihen tane sınırlarının yüzeyleri kestiği yerlerde, gerilmeyi gevşetme mekanizması oluşturmak üzere doğmaktadır. Akabinde elektrik alan tatbik edildiğinde boşluk arabağ hattı boyunca hareket ederek tane içine yerleşmekte, elektrik akımı ve kalıntı gerilmelerin etkisi ile morfolojik değişimlere uğramaktadır.

Oğurtanı (2000) çok katmanlı sistemlerde boşlukların eğrisel yüzeylerinin, üçlü düğüm noktaları olsun veya olmasın, kapiler, elektro göç ve ısı gerilme alanları etkileşimlerinin tesiri altında morfolojik evriminin tersinemez ısı devingen kuramını ortaya koymuştur. Bu kuram, hareket halinde serbest sınır şartlarına haiz iyi huylu bir matematik model ortaya çıkarmış, çok başarılı bir şekilde taneler içi (Oğurtanı, Ören, 2001), ve taneler arası (Ören, Oğurtanı, 2002; Oğurtanı, Ören, 2004) boşluk dinamiği bilgisayar benzetimlerinin gerçekleşmesini sağlamıştır. Taneler arası boşluk dinamiği, boşluklarla tane sınırları arasındaki etkileşim ile sıkı ilişkili olup, literatürde ilk defa ele alınmıştır. Üçlü düğüm noktalarının dengesiz sistemler ısı devingen kuramı literatüre ilk defa bu çalışmalar ile girmiştir. Yine aynı konu değişkenler hesabı (calculus of variations) kullanılarak formüle edilmiş ve çok zengin bulgular elde edilmiştir.

Anahtar Sözcükler: Elektro göç, ısı göç, ince film mekaniği, tahribat mekaniği, boşluk büyümesi, ara yüz ve yüzeyler, difüzyon.

ABSTRACT

The electromigration induced failure of metallic interconnects is a complicated process, which involves flux divergence, vacancy and/or atom accumulation with or without compositional variations, void and hillock nucleation, growth, and shape changes. A near-bamboo grain structure is produced as the width goes down to submicron scale cross sectional dimensions. These thin films are deposited on semiconductors substrates and encapsulated by dielectric passivation layer at high temperatures. Because of the mismatch in thermal expansion coefficients between the metal and the surrounding materials, at the operating temperatures of microelectronic circuits, the interconnect films are subjected to a thermo-mechanical stress system (negative hydrostatic pressure-triaxial tension). This stress is induced during cooling from the passivation temperatures. Voids may nucleate at the film edges as a mechanism of stress relaxation, preferably at their intersections with grain boundaries of the metallic film. Under the subsequent application of an electric field, such voids migrate along the interconnect line, become transgranular, and evolve morphologically owing to current- and residual stress-induced diffusion mechanism.

Ogurtani (2000) has developed a rigorous irreversible thermodynamic treatment of morphological evolution of curved void surface layer (interphase) with or without triple junction singularities at the presence of capillary, electromigration and the strain field interactions for multi-components systems. This theory resulted in a well-posed moving free-boundary value problem, which is applied to the transgranular (Ogurtani, Ören, 2001) and the intergranular (Ören, Ogurtani, 2002; Ogurtani, Ören, 2004) void dynamics very successfully. The intergranular dynamics, which involve void and grain boundary mutual interactions appeared for the first time in the literature as an outcome of the theory. An application of the theory by the use of calculus of variations to the triple junction problem also resulted in very rich findings.

Keywords: Electromigration, thermomigration, interconnect failure, damage mechanics, void growth, interfaces and surfaces, diffusion.

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	i
ÖZET	ii
ABSTRACT.....	iii
İÇİNDEKİLER.....	iv
ŞEKİL VE TABLO LİSTELERİ.....	vi

BÖLÜM

1. GİRİŞ VE GENEL BİLGİLER.....	1
2. KURAMSAL TEMELLER	4
2.1. Yüzeylerin ve ara yüzlerin tersinemez ısı devingen kuramı	4
2.1.1. Ayrık mikro elamanlar için dâhili entropi üretimi	4
2.1.2. Üçlü kavşak ve sıradan noktaların sanal hareketi ile dâhili entropi üretimi	6
2.1.3. Tane sınırı ile etkileşim halindeki ara yüzlerin sanal hareketi ile global dâhili entropi üretimi.....	10
2.1.4. Yön bağımlı yüzey ve ara yüzler	13
2.1.5. Doğrusal istikrarsızlık analizi	15
2.1.5.1. Elektrogöç'ün tek kristal ince filmlerin kararsızlığı üzerine etkileri	17
2.1.5.2. Gerilme alanının tek kristal ince filmlerin kararsızlığı üzerine etkileri	19
2.2. Tersinemez ısı devingen kuramın değişkenler hesabı kullanılarak elde edilmesi.....	22
3.2.1. Global dâhili entropi üretimi.....	23
3.2.2. Zayıf çözüm.....	26
3.2.3. Zayıf çözümün eğik tane sınırı oluşu problemini kapsayacak şekilde genişletilmesi.....	27
3. GEREÇ VE YÖNTEM	30
3.1. Kullanılan araç ve gereçler	30
3.2. Fiziki ve matematiksel modelleme, sayısal yöntemler	31

3.2.1. Kuvvetli çözümler için genel strateji.....	31
3.2.1. Zayıf çözümler için genel strateji	38
4. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	44
4.1. Tek kristal ince filmler	44
4.1.1. Tek kristal metalik ince filmlerde tek eksenli sıkma gerilimi nedenli yüzey çatlaklarının ve düzensizliklerinin elektrogöç ile iyileşmesinin yöne bağımlılığı	44
4.1.1.1. YMK' da 2 bükümlü simetri düzlemi: bölge eksenini <110>..	46
4.1.1.2. YMK' da 4 bükümlü simetri düzlemi: bölge eksenini <100>..	47
4.1.1.3. YMK' da 6 bükümlü simetri düzlemi: bölge eksenini <111>..	48
4.1.1.4. Bozunma hızı sabitinin dalga genliğine bağımlılığı	49
4.1.2. Kapsüle edilmiş ince metalik filmlerde tane içi boşlukların kapiler, elektrogöç ve nispeten dengeli ısı akışından kaynaklı ısıl gerilme gradyanının etkisi altında yüzey sürüklenme difüzyonu ile şekilsel evrimi.....	51
4.2. Çift kristal ince filmler ve tekil yüzeylerde tane sınırı oluklaşması.....	51
4.2.1. Dirac δ tipi yön bağımlı yüzey katılığına sahip yüzeylerde asimetric tane sınırı oluklaşmasını ifade eden Dirichlet uç değeri problemi	52
4.2.2. Yöne bağımlı yüzey Gibbs serbest enerjisine sahip ince filmlerde eğik bir tane sınırı oluşunun şekilsel evrimi.....	55
4.2.3. Yüzey Gibbs serbest enerjisindeki kuvvetli yön bağımlılığı kısalmış dönme eğrisi ile temsil edilen ince filmlerde tane sınırı oluklaşması	58
4.2.4. Bambu benzeri metalik filmlerde elektrogöç ve kapiler kuvvetlerin güdümündeki yüzey sürüklenme difüzyonu ile gerçekleşen katot daralması ve sürüklenmesi ile birlikte tane sınırı oluklaşması	65
4.3. Epitaksiyel olarak gerilmiş bir altlık üzerindeki yassı damlacıklardan Stranski-Krastanow adacıkları oluşumu.....	68
5. SONUÇ	72
REFERANSLAR	76

ŞEKİL LİSTESİ

- 2.1.2.1** Üçlü kavşağın tane sınırı boylamında yer değiştirmesi. a) Üçlü kavşak makro yapısı. b) Üçlü kavşak mikro yapısı. 6
- 2.1.5.1** Dört bükümlü simetri düzlemleri için, {010} ve {100}, yüzey merkezli kristallerde ince film yüzeyine normal, [001] yönünde yüzey katılığı ve Gibbs serbest enerjisinin tipik davranışı. 17
- 2.1.5.1.1** Kapiler ve elektrogöç etkisi altında sinüsoidal yüzey bozuklukları için büyüme hızı katsayılarının, eğilme açısı (0-2 π) ve dalga sayısına (0- π) göre değişimi. $\chi = 0.75$, $A = 5$ 18
- 2.1.5.1.2** Farazi tek kristal ince film model..... 18
- 2.1.5.1.3** Kararsızlık sınır düzleminin a) eşyönlü ve b) eşyönsüz durumlar için elektron rüzgârı eşik değeri, eğilme açısı ve dalga sayısına bağlı değişimi. $A = 5$, a) $B = 0$ ve b) $B = 1$ 19
- 2.1.5.2.1** Gerilme kaynaklı (a, b, c) üst, (d) alt, kararsızlık yüzeyleri. a) $B = 0.02$ b) $B = 1/17$ c) $B = 0.20$ d) $B_{th} = 1/17$. Bakır için veriler (Barrett et. al., 1973): $Tr\underline{\lambda} = 0.30$, $E_o = 1.19 \times 10^{11} NM^{-2}$, $\nu \cong 0.34$, $g_\sigma^0 \cong 1.6 JM^{-2} (0.1eVA^{-2})$ 20
- 2.1.5.2.2** Kararsızlık büyüme hızı katsayısının üç farklı gerilme değeri, $|\underline{\sigma}| = 10^{-5} (1.19MPa)$, $|\underline{\sigma}| = 10^{-4} (11.90MPa)$, $|\underline{\sigma}| = 10^{-2} (1.19GPa)$, için çekme gerilmesi (a,c) ve sıkıştırma gerilmesi (b,d) altında Şekil 6'da bakır için verilen veriler ile (Barrett et. al., 1973) $B = 0.02$ 'nin altında ve $B = 0.1$ 'in üstünde eğilme açısı ve dalga sayısına bağlı değişimi 21
- 2.2.1** Üçlü kavşak makro yapısı. $\{\hat{t}^+, \hat{t}^-, \hat{t}_g\}$ değişkenleri üçlü kavşak etrafındaki tanjant yöneyleridir 23
- 2.2.3.1** Üçlü kavşak makro yapısının üstten görünümü. Tane sınırının x-ekseni ile yaptığı açı ζ , sağ ve sol dihedral açılar ϕ^\pm , yüzey tanjant yöneylerinin x-ekseni yaptığı açılar ise θ^\pm ile ifade edilmiştir. Simetri eksenlerinin x-ekseni ile yaptığı açılar ise ϕ^\pm ile gösterilmiştir 27

3.2.1.1	Eğrilik yarıçapının hesabında kullanılan, ardışık üç düğümden geçen çember.....	28
4.1.1.1	Eş yönlü yüzey difüzyonu ve sıkma gerilimi altında yan yüzeyin evrimi: a) tepe ve oluk noktalarının hareketi, b) başlangıç profili, sonuç profil ve çember gerilimi, c) yüzey dinamiğinin kinetik gelişimi, d) tepenin ikiye yarılması hamlesinin gösterimi.	45
4.1.1.2	$A=10$; $\Phi=75^\circ$ olan (110) düzleminde sıkma gerilimi ($\Xi=-10$) sonrası elektrostatik alan uygulanmış ($\chi=40$) yan duvarın morfolojik evrimi: a) tepecik ve oluk noktaları hareketleri; b) yüzey profili, çember gerilimi dağılımı ve çatlak oluşumu; çatlak gelişimi elektron rüzgarı ile kesilmiştir; c) yüzeyin 3 boyutlu morfolojik gelişimi; d) büyüme hızı sabiti Γ , difüzyon yon bağımlılık katsayısı $(1+A\cos 2\Phi)$, ve elektron rüzgarı yoğunluğu faktörünün $[-\psi(m, \Phi)]$ dönme açısına (Φ) göre değişimi.	47
4.1.1.3	Elektrogöç kararlı bölgenin çatlak iyileşmesi üzerindeki etkisi: (100) düzleminde $\Phi=30^\circ$ ve $A=10$ iken, $\Xi=-10$ sıkma geriliminden sonra elektrostatik alan uygulanması ($\chi=40$). a) ER tatbikinden sonra oluk gelişimindeki ani duruş ve gerileme; b) yüzey profili ve çember geriliminin gelişimi; c) morfolojik gelişimin 3 boyutlu gösterimi; d) tepenin ikiye bölünme anında yüzey profili ve çember gerilimi.	48
4.1.1.4	Elektrogöç kararlı bölgenin, çatlak iyileşmesi üzerindeki olumlu etkisi: $\Phi=20^\circ$ ile (111) düzlemi üzerine kurulmuş $A=10$ şiddetinde yöne bağımlı difüzyon katsayısına sahip numunenin $\Xi=-10$ sıkma gerilimine tabi tutulması ve $\bar{t}_s = 7.1 \times 10^{-5}$ zamanından sonra $\chi=40$ şiddetinde elektron rüzgarının sisteme girilmesinin etkileri	49
4.1.1.5	a) Bozunma hızı sabitinin uygulanan gerilim yoğunluğu parametresine bağlı değişimi. b) Seçilmiş bozunma hızı sabitinin farklı iki dalga boyuna sahip kapilari bölgeden alınmış boyutlandırılmış genlik verisine bağlı değişiminin yarı logaritmik grafiği.....	50
4.2.1.1	Yüzey Gibbs serbest erkesi ve yüzey katılığı tipik davranışları.	

	Yüzey merkezli küpte; a) dört bükümlü ($n = 4$, $\phi_0 = 65^\circ$, $c=0.40$), b) altı bükümlü ($n = 6$, $\phi_0 = 15^\circ$, $c=0.35$) simetri düzlemleri için, anormal kararsızlık rejiminden önceki davranışlar. Burada Dirac delta fonksiyonu tepeleri, $\phi_n = \phi_0 + k2\pi / n \quad \forall k = 0,1,..,(n-1)$ olarak verilen zirve yönlerinde düz radyal çizgilerdir.....	54
4.2.2.1	Eş yönlü yüzey katılığına sahip eğik asimetrik ısıl tane sınırı oluşunun şekilsel evrimi. (a) Normalize edilmiş ve ölçeklenmiş zaman ve uzay tanım kümesinde Mullins'in profil fonksiyonu ile en iyi örtüşen bilgisayar benzetimi sonucu. (b) Çok kristalli alümina için (LucaloxTM) Munoz ve diğerlerinin (2004) Şekil 4(a) ile verdiği AGM ölçümlerinin sayısallaştırılmış hali ve gerçek uzay ve zaman tanım kümesi içerisindeki bilgisayar benzetimi sonucu. (c) Buradaki kinetik veri, deneyin Mullins'in $\frac{1}{4}$ zaman üssüne uyduğunu gösterir. (d) Oluk derinliği, tümler dihedral açılar, tane sınırı ucunun hızı ve yatay akının zamana göre değişim grafikleri.	57
4.2.3.1	WYT indeksinin fonksiyonu olarak WYP faktörünün istikrarsızlık eşiği. WYT indeksi 1'e yaklaşırken, Dirac delta tekilliğinin devreye girdiği görülmektedir.	61
4.2.3.2	4 bükümlü simetri eksenine sahip düzlemlerde $\{100\}$, $[001]$ yönlerinde kısalmış dönme eğrisi kullanarak elde edilen yüzey Gibbs serbest erkesi ve yüzey katılığının a) alt ($\alpha=0.20$) ve b) üst ($\alpha=0.50$) WYT indeksi seviyelerinde tipik davranışı. Her iki grafikte de WYP faktörü, eşik seviyesinin üzerindedir, $\Psi=0.15$	62
4.2.3.3	Saf nikelde ait (Ni - 99.99 wt %) Gladstone ve diğerleri (2001) tarafından verilen AGM profiline uydurulan $\zeta = 88^\circ$ eğimli tane sınırı oluşu. Her iki tane de 4 bükümlü simetri ile ifade edilen (100) düzleminde $[010]$ yönündedir. Sağ ve sol dönme açıları: $\phi_R=10^\circ$ ve $\phi_L=-4.5^\circ$. WYP ve WYT parametreleri: $\Psi=0.02$, $\alpha=0.90$. Hareketlilik değerleri: dikey: 100, yatay: 10. Islanma parametresi ve normalize film kalınlığı: 0.125, 0.1.....	63

4.2.4.1	Sabit gerilim altında meydana gelen katot boşalması (ya da daralması) ve bozunmadan sonra sabit akım altında sürüklenen katot ucu.....	65
4.2.4.2	Katot alanındaki azalmanın, elektron rüzgarı kuvveti ve zamanın çarpımından elde edilen, evrensel zaman ile değişimi. Kapiler ve EM baskın rejimler $\chi=1.0$ sınırı ile net olarak birbirlerinden ayrılırlar.....	65
4.2.4.3	Bakır ince filmler için değişik sıcaklık ve film kalınlıklarında katot sürüklenme hızının akım yoğunluğu ile değişimi.	67
4.3.1	a) Başlangıç, sonuç ve ara etap adacık profili: sonuç profili gaussal çan şeklindedir ($h_p=2.30$, $w=3.25$); b) son damlacık profili boyunca anlık hız ve çember gerilim dağılımı; c) sol y ekseninde temas açısının değişimi, sağ y ekseninde ise gerilme enerjisi ve serbest yüzey enerjisi değişimi Ge/Si(100) için $nm^2 \rightarrow 10^{-18}$ ile boyutlandırılmış olarak verilmiştir; d) tepecik yüksekliği ve üçlü faz bağlantı noktası yer değiştirmesinin zamana göre değişimi.....	69
4.3.2	a) Büyüme teriminin ada morfolojisi üzerindeki etkisi: ana parçanın iki yanında oluşan tepecikler ana parçadan nerdeyse mükemmel düz bir ıslanma katmanı ile ayrılıyorlar. Oluşan sonuç şekli gaussal çan şakilinde olup $h_p=1.10$, $w=8.00$ parametreleri ile tanımlanmıştır; b) anlık hız ve çember gerilim dağılımı; c) sol y ekseninde temas açısının değişimi, sağ y ekseninde ise esneme enerjisi ve serbest yüzey enerjisi değişimi Ge/Si(100) için verilmiştir; d) tepecik yüksekliği ve üçlü faz bağlantı noktası yer değiştirmesinin zamana göre değişimi.....	71

TABLO LİSTESİ

3.1.1	Projede kullanılan donanımların listesi	30
3.1.2	Projede kullanılan yazılımların listesi	31

BÖLÜM 1

GİRİŞ VE GENEL BİLGİLER

Yüzeylerin şekilsel evrimi konusu, geride bıraktığımız on yıl içinde nano-teknolojide yaşanan gelişmeler nedeni ile özel bir önem kazandı. Bu dönemde geliştirilen deneysel taramalı uç mikroskopi (TUM) teknikleri bu alandaki gelişmelerin de önünü açmıştır. Bu araçlar daha geniş yüzey alanlarında atomik çözünürlükte tarama yapma imkânının yani sıra dikey (ör. AGM) veya yatay istikametlerde (ör. taramalı tünel mikroskobu, TTM) tarama yapma seçenekleri sunmaktadır. Yüzeylerin şekilsel evrim kinetikleri yüzey sürüklenme difüzyonu ile eşzamanlı buharlaşma yoğunlaşma süreçlerinin kontrolü altındadır. Bu anlaşılması güç davranış çoğu zaman yüzey katılığında (*surface stiffness*) kuvvetli yöne bağımlılık gösteren yüzeylerde meydana gelir, Wulff düzleminde Dirac delta fonksiyonu tekilliği ile ifade olunan bu yöne bağımlılık yüzeylerin şekilsel istikrarsızlığı ile yakından ilintilidir. Buna ek olarak kimi malzemeler çeşitli dış kuvvetlerin şiddetli yıpratıcı etkisine maruz kalmaktadırlar, bunlara en güzel örnek ise elektronik devrelerde yer alan ince film ara bağlantı elemanlarıdır.

Günümüz bilgisayarlarında işlemcilerin gittikçe daha yoğun bir işlem yeteneğine sahip olması, bütünleşmiş devrelerin (Ultra Large Scale Integrated Circuits, ULSI) daha küçük hacimlerde daha yoğun akımlarda çalışmalarını gerektirmektedir. Bu devre elemanlarını buluşturan ara bağlantı elemanları, kalınlıkları bir mikrondan daha az olan alüminyum ve bakır ince film malzemelerdir. Bu malzemeler çok çetin çalışma şartlarına tabiidirler: yüksek gerilmeler (200–400 MPa), kuvvetli elektrik akımı yoğunlukları (2 MA/cm^2) ve erime sıcaklığının üçte birini bulan sıcaklıklar (alüminyum için erime sıcaklığı 933 K). Bu kaba kuvvetlerin etkisi altındaki küçük boyutlara sahip malzemelerde difüzyon mekanizmalı bozulma aynı anda her yerde gözlenen bir olay halini almaktadır.

Elektronik devrelerde yer alan bakır veya alüminyum ara bağlantı elemanları çok kristallidirler, bir başka deyişle aynı yapıda fakat farklı yönelimlerde kristal

kafesler içeren tanelerin bir arada bulunduğu bir yapıya sahiptirler. Böyle bir telden elektrik akımı geçtiği zaman, hareket eden elektronlar – kısaca ‘elektron rüzgârı’ olarak adlandırılabilir – ve kristal kafes içindeki metal iyonları arasında bir etkileşim meydana gelir. Tane sınırlarında bulunan atomlar elektron rüzgârında diğer atomlara nazaran daha çok etkilenirler ve rüzgâr yönünde hareket etmeye zorlanırlar (elektrogöç). Bu etki nedeni ile zamanla bakır veya alüminyum atomları tane sınırlarında birikip elektrik akımı yönünde tepcikler meydana getirirken hareket halindeki atomların boşalttığı bölgelerde boşluklar meydana gelir. Oluşan bu tepcikler komşu ara bağlantı elemanını ile temas ettiğinde kısa devreye yol açarken, boşluklar belirli bölgelerde iletkenliği düşürerek en nihayet ara bağlantı elemanının bozulmasına neden olurlar.

Bu ince filmler yarı iletken altlıklar üzerine birleştirilip dielektrik pasivasyon katmanı ile yüksek sıcaklıklarda kapsüllenmektedirler. Metalin ve çevresindeki malzemenin ısıl genişleme katsayılarının farklılığından dolayı, mikro elektronik devrenin çalışma sıcaklıklarında, ara bağlantı filmleri ısıl mekanik gerilmeler altındadır.

Bu nedenlerledir ki mikro elektronik devre elemanlarının üretiminde malzemenin güvenilirlik (materials reliability) sorunu büyük önem kazanmaktadır. Bilgisayar benzetim deneylerinin sonuçlarının akıllı bir şekilde yorumu bize iki şey kazandırmaktadır:

1) Ters normalizasyon operasyonu ile bilgisayar deneylerinden elde edilen veriler, analitik hale getirilebilmekte ve bu da ara bağların ortalama ömürlerinin cihazın çalışma şartlarında (çalışma sıcaklık ve elektrik akımları şiddeti) tespitini, testlerin yapıldığı yüksek sıcaklık ve yüksek elektrik akı değerleri kullanılarak elde edilen verilerden tahmin (extrapolation) etmeyi sağlamaktadır.

2) Bulunan denklemlerde ara bağların geometrisi, fizikokimyasal özellikleri devreye girmektedir. Bunlara ilaveten difüzyon katsayıları, elektrogöç valans değerleri gene bu ortalama ömür (Median Time to Failure, MTF) denklemlerinde

açıkça mevcuttur. Kafes boşluklarını (vacancies) kontrol edecek ilave katkı elemanlarının seçiminde yapılacak çalışmalar yarar sağlayacaktır.

Malzeme biliminin en önemli problemleri arasında yer alan yüzey ve arayüzlerin hareketi ile ilgili bu konu için literatürde henüz tam bir görüş birliği yoktur. Yüzey ve arayüzlerin tersinemez ısıldevingen kuramı Oğurtanı tarafından 2000 yılında geliştirilmeye başlanmış, o günden bu güne çeşitli konularda uygulama alanı bulmuştur. Özellikle ince metalik filmlerin kararlılıkları konusuna ışık tutmuş, yapılan bilgisayar benzetim deneyleriyle, yukarıda bahsi geçen ve pratik önem arz eden laboratuar deneylerinin anlaşılmasına katkıda bulunmuş, önemli öngörüler ortaya koymuştur.

BÖLÜM 2

KURAMSAL TEMELLER

Proje kapsamında yapılan tüm bilgisayar benzetim çalışmalarının kuramsal temelleri bu bölümde özet hali verilecektir. Birinci kısımda geliştirilen kuramlar ikinci kısımda değişkenler hesabı (calculus of variations) kullanılarak yeniden formüle edilmiş, özellikle tane sınırı oluklaşması probleminde önemli bulgular ortaya çıkarmış, fakat sınırlı hesap imkânı verdiği gözlenmiştir. Bu iki yöntem karşılaştırıldığında matematiğin şaşmaz güzelliğinin en açık hali ile ortaya çıktığı görülebilir.

2.1. Yüzeylerin ve ara yüzlerin tersinemez ısı devingen kuramı

Yüzey ve arayüzlerin tersinemez ısı devingen kuramı Oğurtanı tarafından 2000 yılında yığın fazlar için Onsager (1932), Meixner (1941;1943), ve Progogine (1947) tarafından savunulan tersinemez ısı devingen kuramın temel postulatları kullanılarak geliştirilmiştir.

2.1.1. Ayrık mikro elemanlar için dâhili entropi üretimi

Mikro kapsamlı düzgün bir yüzey üzerine yapılan toplam tersinebilir iş Δ uzay-ölçekleme operatörü kullanılarak, hacminde $d\Delta V_\sigma$ ve alanında $d\Delta A_\sigma$ meydana gelen değişimler cinsinden: $\delta\Delta w = -\bar{P}d\Delta V_\sigma + \gamma d\Delta A_\sigma$ şeklinde verilir. Burada \bar{P} yüzey üzerindeki ortalama eş yönlü basınç, γ ise $\gamma = \int_0^{h_\sigma} Q dz$ ile tanımlanabilen yüzey gerilmesidir (burada Q gerilme tensorunun deviatorik kısmı, h_σ yüzey katmanının kalınlığıdır ve integrasyon yüzey normaline boyunca alınır). Açık bir yüzey için Helmholtz serbest enerjisindeki değişim ise:

$$d\Delta F_\sigma = -\Delta S_\sigma dT_\sigma - P_\sigma d\Delta V_\sigma + \gamma d\Delta A_\sigma + \sum_i \mu_\sigma^i d\Delta n_\sigma^i - \sum_j \Delta A_\sigma^j d\xi_\sigma^j \quad (1)$$

olarak verilir, burada ΔS_σ entropi, μ_σ^i kimyasal potansiyel, Δn_σ^i mikro elamadaki i 'inci kimyasal türün sayısı, $d\xi_\sigma^j$ sözkonusu fazdaki j 'inci kimyasal tepkimenin kapsamı, ΔA_σ^j ise j 'inci homojen kimyasal tepkimenin afinitesidir. (Th. De Donder, Ryssselberghe, 1936)

Yığın fazlar (bulk phases) için benzer denklem:

$$d\Delta F_b = -\Delta S_b dT_b - P_b d\Delta V_b + \sum_i \mu_b^i d\Delta n_b^i - \sum_j \Delta A_b^j d\xi_b^j \quad (2)$$

şeklindedir.

Kapalı yada açık olsun bir sistemin entropisi iki şekilde değişebilir; ya harici etkileşimlerden kaynaklı entropi akışı $d\Delta S_{ex}$ ile ya da sistemin içinde meydana gelen değişikliklerden kaynaklı dahili entropi üretimi $d\Delta S_{in}$ ile (Internal entropy production, IEP). Toplam entropi değişimi: $d\Delta S = d\Delta S_{in} + d\Delta S_{ex}$ ile ifade edilir, $d\Delta S_{in}$ tüm tersinemez (veya doğal) olaylar için artı, tersinebilir olaylar için sıfırdır, asla eksi değer almaz.

Açık bir sistem için (sistem ve çevresi arasında sadece erkenin değil maddenin de değiş tokuşu), ısıl devingenin birinci kanununu yazacak olursak:

$$\delta\Delta\Phi = d\Delta U - \delta\Delta w = d(\Delta F + T\Delta S) - \delta\Delta w \quad (3)$$

burada $\delta\Delta\Phi$ sistem tarafından ısı ve kütle aktarımı ile alınan erke, $d\Delta U$ dahili enerji değişimi, $\delta\Delta w$ sistem üzerine yapılan toplam tersinebilir iştir.

Kopuk fazlar içeren kompozit bir sistem için toplam IEP (1), (2) ve (3)'ten faydalanılarak aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\frac{d\Delta S_{in}}{\delta t} = -\sum_{i,k} \frac{\mu_k^i}{T_k} \frac{d\Delta n_k^i}{\delta t} + \sum_k \frac{1}{T_k} \frac{\delta\Delta\Omega_k}{\delta t} + \sum_{j,k} \frac{\Delta A_k^j}{T_k} \frac{d\xi_k^j}{\delta t} \quad (4)$$

k, i ve j indisleri değişik fazlar için (yığın yada yüzey) ve değişik kimyasal türler veya aynı faz içinde yer alan eş zamanlı tepkimeleri temsil etmektedir. $\delta\Delta\Omega_k$ fazlar arasında aktarılan erkenin miktarıdır.

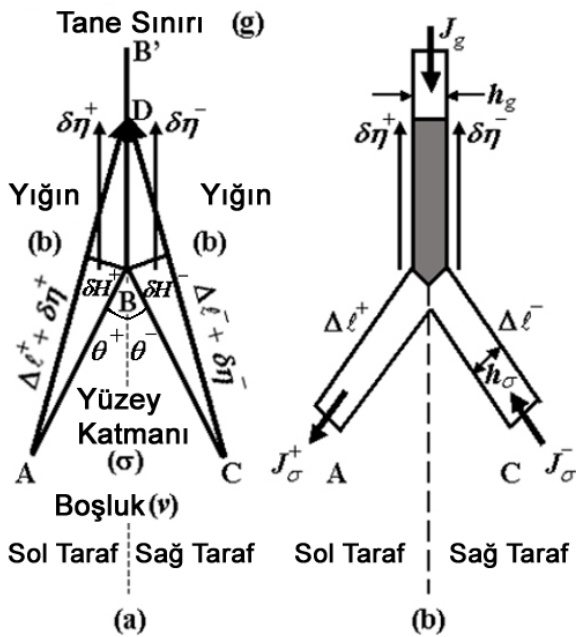
IEP ısıdevingen sistem için toplanabilir bir özellik değildir, bu yüzden sistemin global entropisini hesap edebilmek için açık kompozit sistemin entropi akış hızı (Rate of entropy flow, REF) aşağıdaki şekilde tanımlanır:

$$\frac{d\Delta S_{ex}}{\delta t} = -\sum_{i,k} \frac{\mu_k^i}{T_k} \frac{d\Delta n_{k\leftrightarrow s}^i}{\delta t} + \sum_k \frac{1}{T_k} \frac{\delta\Delta\Omega_{k\leftrightarrow s}}{\delta t} \quad (5)$$

burada $k\leftrightarrow s$, k sistemi ile s çevresi arasındaki madde ve enerji alışverişini temsil eder.

2.1.2. Üçlü kavşak ve sıradan noktaların sanal hareketi ile dâhili entropi üretimi

Üçlü kavşak için tüm sistemin ısı dengede olduğu ve boşluk arayüzü ve tane sınırı arasındaki faz dönüşümü haricinde herhangi bir kimyasal tepkimenin olmadığı varsayılmıştır.



Şekil 2.1.2.1. Üçlü kavşağın tane sınırı boylamında yer değiştirmesi. a) Üçlü kavşak makro yapısı. b) Üçlü kavşak mikro yapısı.

Bu dönüşüm literatürdeki diğer çalışmalarda kavşaktaki madde korunumu hesapları yapılırken tamamen yok sayılmıştır (Rice, Chuang, 1981). Öğürtanı kuramında kullanılan üçlü kavşak etrafındaki çok küçük, kompozit, ayırık, açık mikro sistem örnekleme kümesi Şekil 2.1.2.1 de verilmiştir.

Seçilen bu kompozit mikro sistem komşu mikro ayırık elemanlara düğümler ile bağlanır ve bu düğümler üzerinden gerçekleşen madde akışı sadece REF'e katkıda bulunur (IEP ile bir etkileşimi yoktur). Üçlü kavşağın tane sınırı boyunca $\delta\eta^+$ kadar bir hareketi ile ortaya çıkan dâhili entropi değişimi şekil 2.1.2.1'in ve aşağıda verilen (6), (7), (8) bağıntılarının yardımı ile:

$$\delta\Delta\ell^+ = \cos\theta^+ \delta\eta^+ \qquad \delta H^+ = \sin\theta^+ \delta\eta^+ \qquad (6)$$

$$\delta\Delta n_b^+ = -\frac{1}{2\Omega_b} \Delta\ell^+ \sin\theta^+ \delta\eta^+ \qquad \delta\Delta n_v^+ = \frac{1}{2\Omega_v} \Delta\ell^+ \sin\theta^+ \delta\eta^+ \qquad (7)$$

$$\delta\Delta n_\sigma^+ = \frac{h_\sigma}{\Omega_\sigma} \cos\theta^+ \delta\eta^+ \qquad \delta\Delta n_g^+ = -\frac{h_g}{2\Omega_g} \delta\eta^+ \qquad (8)$$

ve $\Delta\ell^\pm \gg \delta\eta^\pm$ varsayımı ile:

$$\frac{\delta\Delta S_{in}^+}{\delta t} = \frac{1}{T} \left\{ \sum_i \left(\frac{x_b^{i+}}{\Omega_b} \mu_b^{i+} - \frac{x_v^{i+}}{\Omega_v} \mu_v^{i+} \right) \frac{1}{2} \Delta\ell^+ \sin\theta^+ \right\} \frac{\delta\eta^+}{\delta t} \qquad (9)$$

$$+ \frac{\Gamma_g}{2} \sum_i x_g^i \mu_g^i - \Gamma_\sigma \cos\theta^+ \sum_i x_\sigma^{i+} \mu_\sigma^{i+}$$

hesap edilebilir.

Burada Ω_σ , Ω_g , Ω_b , Ω_v değerleri sırasıyla boşluk ara yüzeyi, tane sınırı, yığın, ve boşluk fazı için ortalama atomik özgül hacimler, $\Delta\ell^+$ ve $\Delta\ell^-$ üçlü kavşağın hemen sağında ve solundaki boşluk yüzeyinin kesit uzunlukları, h_σ ve h_g boşluk yüzeyinin ve tane sınırının kalınlıklarıdır. Bu tanımlardan faydalanılarak $\Gamma_\sigma = h_\sigma / \Omega_\sigma$ ve $\Gamma_g = h_g / \Omega_g$ ortalama özgül atomik yoğunluklar yazılabilir. Çok bileşenli yüzey

fazları için $\sum \Gamma_{\sigma}^i \mu_{\sigma}^i$, ve $\sum \Gamma_g^i \mu_g^i$ terimleri özgül Gibbs serbest erke yoğunluklarına eşdeğerdir ve g_{σ} ve g_g olarak gösterilebilirler. Burada $\Gamma_{\sigma}^i = \Gamma_{\sigma} x_{\sigma}^i$, ve $\Gamma_g^i = \Gamma_g x_g^i$ tanım olarak yüzeydeki kimyasal türlerin özgül konsantrasyonlarıdır. $\sum x_b^i \mu_b^i / \Omega_b$ ve $\sum x_v^i \mu_v^i / \Omega_v$ ise hacimsel Gibbs serbest erke yoğunluklarıdır. Sırası ile \bar{g}_b , (yığın) ve \bar{g}_v (boşluk) olarak gösterilirler. Bu değerler ve Gibbs serbest erke yoğunlukları arasındaki bağıntı: $g_{\sigma} = h_{\sigma} \bar{g}_{\sigma}$ şeklinde verilebilir.

Bu tanımlamaları takip eden bir dizi matematiksel operasyondan sonra (IJSS-2005) üçlü kavşağın dikine sanal hareketinden kaynaklanan IEP aşağıdaki denklemde verilen hali ile elde edilir:

$$\frac{d\hat{S}_{in}^{g\sigma}}{dt} = \frac{1}{T} \left[g_g - \left(g_{\sigma}^+ \cos \theta^+ + g_{\sigma}^- \cos \theta^- \right) \right] \frac{d\eta_g}{dt} \geq 0 \quad (10)$$

Denklem (10)'dan ve eğrilik yarıçapının tanımından faydalanarak; $\rho = \kappa^{-1}$,

$$\kappa = \lim_{\Delta \ell \rightarrow 0} \frac{\cos \theta}{\Delta \ell / 2} \quad (11)$$

sıradan noktalar için IEP hesap edilebilir:

$$\frac{d\hat{S}_{int}}{dt} = -\frac{1}{T} (\bar{g}_{vb} + g_{\sigma} \kappa) \frac{d\eta}{dt} \geq 0 \quad (\text{erg}^{\circ} \text{K}/\text{cm}^2/\text{sec}) \quad (12)$$

Burada $\bar{g}_{vb} = (\bar{g}_v - \bar{g}_b)$, dönüşümün hacimsel Gibbs serbest erke yoğunluğudur (the volumetric density of Gibbs Free Energy of Transformation (GFET)).

Başlangıçta kabul edilen ısı denge varsayımı hala geçerli olduğundan üçlü kavşak güç saçılımı (power dissipation) kavramından faydalanılarak ta ele alınabilir, bu kavram klasik mekanikte Helmholtz güç saçılım fonksiyonu olarak ta adlandırılır (Haase, 1969). Bu fonksiyon Oğurtanı ve Seeger (1983) tarafından iç sürtünme

(internal friction) ile ilgili problemlerde geniş çaplı kullanılmıştır. Fonksiyon basitçe IEP ile sıcaklığın çarpımı olarak tanımlanabilir ki bu da hareketin itici kuvveti ve hızının çarpımına eşittir:

$$T \frac{d\hat{S}_{in}^{\pm}}{dt} = \hat{F}^{\pm} \frac{d\eta^{\pm}}{dt} \geq 0 \quad (\text{erg/cm/sec}) \quad (13)$$

Yukarıdaki denklemler gözden geçirildiğinde genellenmiş kuvvetler yazılabilir:

$$\hat{F}^{\pm} = \left(\frac{g_g}{2} - g_{\sigma}^{\pm} \cos \theta^{\pm} \right) \quad (\text{dyne/cm}) \quad (14)$$

Bu kuvvetler kimyasal türler ile bağıntılı iç akılarda herhangi değişikliğe yol açmadan sistemde net malzeme akışına yol açar. Hız ve kuvvet arasındaki fenomenolojik bağıntının yazımında tek bir atomik parçacık üzerine etki eden kuvvetten faydalanılmak istendiğinde yukarıdaki genellenmiş kuvvet formülleri atomlar arası mesafe d_a ile çarpılmalıdır. Böylece üçlü kavşak hızı ve atomik genellenmiş kuvvetler fenomenolojik mobilite katsayısı \mathfrak{R}^{long}/kT , yardımı ile ilişkilendirilebilir:

$$\frac{d\eta^{\pm}}{dt} = \frac{\mathfrak{R}^{long} d_a}{kT} \left(\frac{g_g}{2} - g_{\sigma}^{\pm} \cos \theta^{\pm} \right) \quad (15)$$

Bu denklemden faydalanılarak üçlü kavşağa sağındaki ve solundaki boşluk yüzey katmanından girip çıkan atomik akılar yazılabilir:

$$\hat{J}_{\sigma}^{\pm} = \pm \Gamma_g \frac{\mathfrak{R}^{long} d_a}{2kT} g_{\sigma}^{\pm} \left(\lambda^{\pm} - \cos \theta^{\pm} \right) \pm \hat{J}_g / 2 \quad (16)$$

Yukarıdaki akı formülünde λ^{-} ve λ^{+} ıslanma parametleri olarak adlandırılırlar, sabit olarak varsayılp: $\lambda^{-} = g_g / 2g_{\sigma}^{-}$ and $\lambda^{+} = g_g / 2g_{\sigma}^{+}$ şeklinde tanımlanabilirler.

Bu noktada ister denklem (10)'dan direkt olarak veya denklem (16) yardımım ile maddenin korunumu ilkesinden faydalanarak üçlü kavşağın dikine hızını yazabiliriz:

$$v_g^{long} = \frac{d\eta_g}{dt} = (\hat{J}^+ - \hat{J}^- - \hat{J}_g) \frac{1}{\Gamma_g} = \frac{\mathfrak{R}^{long} d_a}{2kT} \left[g_g - (g_\sigma^+ \cos \theta^+ + g_\sigma^- \cos \theta^-) \right] \quad (17)$$

Denklemden yer alan mobilite katsayısı sıcaklığın kuvvetli bir fonksiyonudur, kimyasal reaksiyonların aktiveleştirilmiş kompleks hız kuramı yardımı ile aşağıdaki gibi yazılabilir (burada k Boltzman, h ise Plank sabitidir):

$$\mathfrak{R}^{long} = \left(\frac{kT}{h} \right) \exp \left(-\frac{\Delta G_{\sigma,g}^*}{kT} \right) \quad (18)$$

Eş yönlü (isotropic) bir sistem için ise:

$$v_g^{long} = \frac{\mathfrak{R}^{long} d_a g_\sigma}{2kT} \left[2\lambda - (\cos \theta^+ + \cos \theta^-) \right] \quad (\text{cm/sec}) \quad (19)$$

Şekil 2.1.2.1'in yardımı ve yukarıda izlenen yöntemin bir benzeri ile üçlü kavşağın yatay yönde sanal hareketi için de benzer çıkarımlar yapılır ve yatay hareket hızı aşağıdaki gibi elde edilir:

$$v_g^{trans} = \frac{\mathfrak{R}_g^{trans}}{kT} d_a \left(g_\sigma^- \sin \theta^- - g_\sigma^+ \sin \theta^+ \right) \quad (\text{cm/sec}) \quad (20)$$

2.1.3. Tane sınırı ile etkileşim halindeki ara yüzlerin sanal hareketi ile global dâhili entropi üretimi

Global IEP'nin eldesi için lokal entropi yoğunluğu değişiminin eğri yüzey boyunca entegre edilmesi gerekir, bu yüzden sadece local IEP (denklem (12),

kaynak terimi) değil aynı zamanda entropi akışı terimi de entegre edilmelidir. Bu iki terimin doğrusal kombinasyonu, lokal entropi yoğunluğu değişim hızı olarak adlandırılabilir ve denklem (5)'ten türetilir:

$$\frac{\partial \hat{S}}{\partial t} = -\frac{1}{T} \left\{ (\bar{g}_{vb} + g_{\sigma\kappa}) \frac{d\eta}{dt} + \Omega_{\sigma} \left[\frac{\partial}{\partial \ell} (\bar{g}_{\sigma} J_{\sigma}) + \bar{g}_{\sigma} (\hat{J}_b + \hat{J}_v) \right] \right\} \quad (21)$$

burada \hat{J}_v ve \hat{J}_b boşluk ve yığın arayüzlerine yönelmiş dikey yöndeki toplam atomik akılardır. Bu denklemin kapalı eğri arayüz boyunca $(-\varepsilon, \varepsilon)$ aralığında $\varepsilon \rightarrow 0$ integrali aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} d\ell \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \oint_{\varepsilon} d\ell \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} \quad (22)$$

$$= -\frac{1}{T} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \oint_{\varepsilon} d\ell \left[(\bar{g}_{vb} + g_{\sigma\kappa}) \frac{d\bar{\eta}}{dt} + \Omega_{\sigma} \left(\frac{\partial}{\partial \ell} (\bar{g}_{\sigma} J_{\sigma}) + \bar{g}_{\sigma} \hat{J}_{vb} \right) \right] \right\}$$

burada, $\hat{J}_{vb} = \hat{J}_v + \hat{J}_b$. Buna ek olarak aşağıdaki ifade yazılabilir:

$$\left[(c_b - c_v) - h_{\sigma} \bar{\kappa} c_{\sigma} \right] \frac{d\eta}{dt} = \sum_i \frac{\partial J_{\sigma}^i}{\partial \ell} - \sum_i (\hat{J}_b^i + \hat{J}_v^i) = \frac{\partial J_{\sigma}}{\partial \ell} - \hat{J}_{bv} \quad (23)$$

c_b , c_v ve c_{σ} yığın, boşluk ve yüzey fazları için atomik hacimsel konsantrasyonlardır. Boşluk fazı çok atomlu seyreltik bir gaz olarak düşünülürse $c_v = 0$, and $\bar{\kappa} h_{\sigma} = 0$ değerleri kullanılabilir. Literatürde (Verschaffelt, 1936; Wang, Suo, 1996; Oğurtanı, Ören, 2001) sıkça kullanılan $\Omega_b = c_b^{-1}$, bağıntısı ile yukarıdaki denklemi yeniden düzenlersek (\bar{n} ve \bar{r} yüzey normal ve pozisyon yöneyleridir):

$$\frac{d\eta}{dt} = \hat{n} \cdot \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} = \Omega_b \left(\frac{\partial J_{\sigma}}{\partial \ell} - \hat{J}_{bv} \right) \quad (24)$$

ve bunu denklem (22)'de yerine koyarsak aşağıdaki denklemi elde ederiz:

$$\int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} d\ell \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} = -\frac{\Omega_\sigma}{T} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \begin{aligned} & \int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} d\ell \left[(\tilde{g}_{vb} + g_\sigma \kappa) \frac{\partial J_\sigma}{\partial \ell} \right] - \int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} d\ell \left[(\tilde{g}_{vb} + g_\sigma \kappa) \hat{J}_{vb} \right] \\ & + \int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} d\ell \frac{\partial}{\partial \ell} (\tilde{g}_\sigma J_\sigma) + \int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} d\ell (\tilde{g}_\sigma \hat{J}_{vb}) \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

Kısmi integrasyon ile aşağıdaki denklemi elde edilir:

$$\frac{d}{dt} \int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} d\ell \hat{S} = \frac{\Omega_\sigma}{T} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \begin{aligned} & \int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} d\ell \left[J_\sigma \frac{\partial}{\partial \ell} (\tilde{g}_{vb} + g_\sigma \kappa) \right] - [(\tilde{g}_{vb} + g_\sigma \kappa) J_\sigma]_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} \\ & + \int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} d\ell \left[(\tilde{g}_{vb} + g_\sigma \kappa) \hat{J}_{vb} \right] - [\tilde{g}_\sigma J_\sigma]_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} - \int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} d\ell (\tilde{g}_\sigma \hat{J}_{vb}) \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

Bu denklem IEP ve REF terimleri olmak üzere iki parçaya ayrılabilir:

$$\frac{d}{dt} S_{IEP} = \frac{\Omega_\sigma}{T} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \begin{aligned} & \int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} d\ell \left[J_\sigma \frac{\partial}{\partial \ell} (\tilde{g}_{vb} + g_\sigma \kappa) \right] + \int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} d\ell \left[(\tilde{g}_{vb} + g_\sigma \kappa) \hat{J}_{vb} \right] \\ & - [(\tilde{g}_{vb} + g_\sigma \kappa) J_\sigma]_{-\varepsilon} + [(\tilde{g}_{vb} + g_\sigma \kappa) J_\sigma]_{+\varepsilon} \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

$$\frac{d}{dt} S_{REF} = \frac{\Omega_\sigma}{T} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ - \int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} d\ell (\tilde{g}_\sigma \hat{J}_{vb}) - [\tilde{g}_\sigma J_\sigma]_{-\varepsilon} + [\tilde{g}_\sigma J_\sigma]_{+\varepsilon} \right\} \quad (28)$$

Yeri gelmişken belirtilmelidir ki bu denklemlerde \cup hacimsel yoğunlukları, \wedge yığın akı şiddetlerini (#/cm2.sec) betimlemek için kullanılır.

Denklem (27)'nin integrali alındığında genellenmiş kuvvet denklemleri elde edilebilir (Oğurtanı, Ören, 2005):

$$F_\sigma = \Omega_\sigma \left\{ \frac{\partial}{\partial \ell} \left[\frac{1}{T} (\tilde{g}_{vb} + g_\sigma \kappa) \right] + \vec{t} \cdot \vec{F}_{Ext} \right\}, \quad \text{ve} \quad (29)$$

$$F_{vb} = \Omega_{\sigma} \left\{ \left[\frac{1}{T} (\tilde{g}_{vb} + g_{\sigma} \kappa) \right] + \vec{n} \cdot \vec{F}_{Ext} \right\} \quad (30)$$

burada F_{σ} ve F_{vb} arayüz katmanına etki eden boylamsal (longitudinal) ve enlemesine (transverse) genellenmiş kuvvetlerdir. \vec{t} ve \vec{n} boşluk yüzeyine tanjant ve normal birim yöneylerdir. Böylece daha önce yapıldığı gibi konzervatif harici kuvvet alanlarını da içine alan konjuge akı denklemleri elde edilebilir:

$$J_{\sigma} = \frac{M_{\sigma}}{kT} \Omega_{\sigma} \frac{\partial}{\partial \ell} \left[(\tilde{g}_{vb} + g_{\sigma} \kappa) - \langle eZ^* \rangle \frac{g}{\Omega_{\sigma}} + \langle \bar{\lambda} \rangle \otimes \bar{\sigma} \right] \quad (\text{yüzey akısı}) \quad (31)$$

ve

$$\hat{J}_{vb} = \frac{M_{vb}}{kT} \Omega_{\sigma} (\tilde{g}_{vb} + g_{\sigma} \kappa) \quad (\text{içeri giren yatık akı yoğunluğu}) \quad (32)$$

Burada M_{σ}/k ve M_{vb}/k genellenmiş fenomenolojik mobiliteLERdir. $\langle \bar{\lambda} \rangle$ ve $\langle eZ^* \rangle$ elastik çift kutup tensörü (elastic dipole tensor, EDT) ve efektif elektrogöç yükünün ortalama değerleridir. Tensör değişkenler üzerlerindeki çift çubukla diğerlerinden ayırt edilmiştir, \otimes operatorü ise iç tensör çarpımını ifade eder ($\bar{a} \otimes \bar{b} = a_{ij} b_{ij}$).

2.1.4. Yön bağımlı yüzey ve arayüzler

Oğurtanı, yukarıda özet olarak verilen kuramı yön bağımlı üç boyutlu uzaya genellemiştir (Oğurtanı, 2006-1). Burada özgül yüzey Gibbs erkesinin yön bağımlı olduğu durumda ana denklemlerin geliştirilmiş halleri verilecektir.

Sıradan noktalar için hareket hızı aşağıdaki denklem ile ifade edilir:

$$\frac{d\eta}{dt} \hat{n} = \hat{n} \frac{\hat{M}_\sigma}{kT} \Omega_\sigma^2 \nabla_s \bullet \left\{ D(\theta, \phi) \nabla_s \left[\Delta \tilde{g}_{\beta b} + \frac{1}{2} [\kappa_1 + \kappa_2] g_\sigma(\hat{n}) \right. \right. \\ \left. \left. + \nabla_s \bullet \frac{\partial [g_\sigma(\hat{n})]}{\partial \hat{n}} + |eZ_\sigma| \frac{\mathcal{G}}{\Omega_\sigma} + \langle \underline{\lambda} \rangle \otimes \underline{\sigma} \right] \right\} \\ - \hat{n} \frac{M_{vb}}{kT} \Omega_\sigma^2 \left\{ \Delta \tilde{g}_{\beta b} + \frac{1}{2} [\kappa_1 + \kappa_2] g_\sigma(\hat{n}) + \nabla_s \bullet \frac{\partial [g_\sigma(\hat{n})]}{\partial \hat{n}} \right\} \quad (33)$$

Burada ∇_s ve $\frac{\partial}{\partial \hat{n}}$ yüzey gradyan ve yönlü türev operatörleridir. Tanımlamak gerekirse:

$$\nabla_s \equiv \kappa_1 \hat{u}_1 \frac{\partial}{\partial \omega_1} + \kappa_2 \hat{u}_2 \frac{\partial}{\partial \omega_2} \equiv \hat{u}_1 \frac{\partial}{\partial \ell_1} + \hat{u}_2 \frac{\partial}{\partial \ell_2} \quad \text{ve} \quad \frac{\partial}{\partial \hat{n}} \equiv \hat{u}_1 \frac{\partial}{\partial \omega_1} + \hat{u}_2 \frac{\partial}{\partial \omega_2} \quad (34)$$

olarak ifade edilirler, $\{\hat{u}_1, \hat{u}_2\}$ ortogonal birim yöney seti, $\{\kappa_1, \kappa_2\}$ ise Gaussian eğrilik yarıçapı seti, \mathcal{G} elektrostatik potansiyeldir. ω , mikro elemanın rasgele seçilen bir referans çerçevesine (örneğin x eksenini) olan yönelimini temsil eder, yüzey Gibbs serbest erke yoğunlukları bu değişkene bağımlı olarak tanımlanır, burada önemli tanımlamalardan bir tanesi yüzey katılığı kavramıdır $[g^\sigma + g_{\omega\omega}^\sigma]$ (altsimge türevi ifade eder, surface stiffness). Yüzey katılığı, özgül yüzey serbest erkesi için oluşturulan Wulff düzleminde Dirac delta fonksiyonu tekilliği gösterir, bu konu ilerleyen kısımda daha ayrıntılı işlenecektir.

Üçlü kavşağın sol tarafındaki konjuge akı aşağıdaki denklem ile ifade edilir:

$$J^+ = \frac{\mathfrak{R}^{long} h_g d_a}{kT \Omega_g} \left\{ \begin{array}{l} g_g - (g_\sigma^+ \cos \theta^+ + g_\sigma^- \cos \theta^-) \\ - \left(\frac{\partial [g_\sigma^+]}{\partial \omega^+} \sin \theta^+ - \frac{\partial [g_\sigma^-]}{\partial \omega^-} \sin \theta^- \right) \end{array} \right\} + J^{trans} + J_g \quad (35)$$

Yine benzer şekilde üçlü kavşağın boylamsal hızı aşağıdaki gibidir:

$$V_g^{long} \equiv \frac{d\eta}{dt} = \frac{\mathfrak{R}^{long} d_a}{2kT} \left\{ \begin{array}{l} g_g - (g_\sigma^+ \cos \theta^+ + g_\sigma^- \cos \theta^-) \\ - \left(\frac{\partial [g_\sigma^+]}{\partial \omega^+} \sin \theta^+ - \frac{\partial [g_\sigma^-]}{\partial \omega^-} \sin \theta^- \right) \end{array} \right\} \quad (36)$$

Son olarak üçlü kavşağın sağ tarafındaki konjuge akı ise:

$$J^- \equiv \hat{j}_\sigma^{trans} = \text{Sign}(\psi) \Gamma_g \frac{\mathfrak{R}_g^{trans}}{kT} d_a \left\{ \begin{array}{l} \left(-\frac{\partial g_\sigma^-}{\partial \omega^-} \cos \theta^- - \frac{\partial g_\sigma^+}{\partial \omega^+} \cos \theta^+ \right) \\ \left[g_\sigma^+(\omega) \sin \theta^+ - g_\sigma^-(\omega) \sin \theta^- \right] \end{array} \right\} \quad (37)$$

ile ifade edilir, burada ψ üçlü kavşak civarındaki mikro elemanların saat yönünün tersine rotasyonlarının miktarını ifade eder. (Oğurtanı, 2006-1)

2.1.5. Doğrusal istikrarsızlık analizi

Oğurtanı (2006-2) önce sıradan noktalar için verilen diferansiyel denklemi ısıllı göç (Soret etkisi (Haase, 1969)) için ele almış, daha sonra uygulanan gerilmenin yön bağımlı yüzeylerde büyüme kinetiği ve şekil değişimi esnasında ortaya çıkardığı kararsızlıkları bu denklemden faydalanarak irdelemiş ve elde ettiği sonuçları epitaksiyel amorf silikonun büyümesi üzerine uygulamıştır.

Faz dönüşümü esnasında arayüzün hızını veren bu en kapsamlı denklem aşağıda verilmiştir:

$$\bar{V}_{ord} = \frac{\partial}{\partial \ell} \left[\bar{D}(\theta, \phi; m) \frac{\partial}{\partial \ell} \left(\Delta \bar{g}_{bv} + \chi \cdot \bar{\mathcal{G}} + \Xi_\sigma \cdot \text{Tr} \bar{\underline{\sigma}}_{b/\sigma} \right) \right] - \bar{M}_{bv}(\sigma, \beta; T) \left(\Delta \bar{g}_{bv} + \bar{\gamma}(\hat{\theta}, \phi; m) \bar{\kappa} \right) \quad (38)$$

$$+ \bar{M}_b \Xi_b \hat{n} \cdot \bar{\nabla}_2 (\text{Tr} \bar{\underline{\sigma}}_{b/\sigma}) - \bar{M}_b \Upsilon_b \hat{n} \cdot \bar{\nabla}_2 (\bar{T})$$

Burada, Υ_{σ} , Υ_b , boyutsuz ısıl göç şiddetlerini, χ elektron rüzgârı şiddetini, Ξ 'ler ise elastik çift kutup etkileşim şiddetlerini ifade eden parametrelerdir. Bu parametrelerin normalize edilmiş ve ölçeklenmiş olarak nasıl ele alındıkları sayısal yöntemler kısmında irdelenecektir.

Yön bağımlı difüzyon katsayısını ve yüzeyin özgül Gibbs serbest erkesini θ ve ϕ açılara (sırası ile yüzey tanjant yöneyinin x eksenine ile yaptığı açı ve yüzey normalinin x eksenine ile yaptığı açı (eğilme açısı, tilt angle)) ve yarım büküm sayısına, m (half fold number) bağılı olarak veren denklemler aşağıdadır:

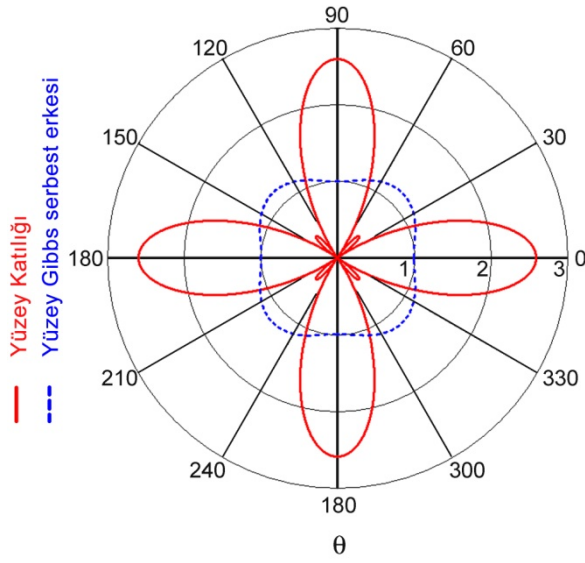
$$\widehat{D}(\theta, \phi; m) = D(\theta, \phi; m) / D_o = \{1 + A \cos^2 [m(\theta - \phi)]\} \quad (39)$$

$$\widehat{\gamma}(\hat{\theta}, \hat{\phi}; m) = \gamma(\hat{\theta}, \hat{\phi}; m) / \gamma_o = \{1 + B \sin^2 [m(\hat{\theta} - \hat{\phi})]\} \quad (40)$$

Bu son denklemden yüzey katılığını ifade eden denklem elde edilir:

$$\widehat{\gamma}(\hat{\theta}, \hat{\phi}; m) = \gamma_o (1 + B/2) \cdot \left[1 - \frac{B(1 - 4m^2)}{B + 2} \cos [2m(\hat{\theta} - \hat{\phi})] \right] \quad (41)$$

Bu denklemlerde A ve B yön bağımlılığın şiddetini belirleyen parametrelerdir.



Şekil 2.1.5.1 Dört bükümlü simetri düzlemleri için, $\{010\}$ ve $\{100\}$, yüzey merkezli kristallerde ince film yüzeyine normal, $[001]$ yönünde yüzey katılığı ve Gibbs serbest erkesinin tipik davranışı.

Bu konu, bulgular bölümünde tane sınırı oluşmasının deneysel sonuçlarında sistem üzerine olan etkisini gösterecektir. Bu noktada denklem (38)'in birinci dereceden doğrusal kararlılık analizine geçilerek konu iki alt başlıkta ele alınacaktır.

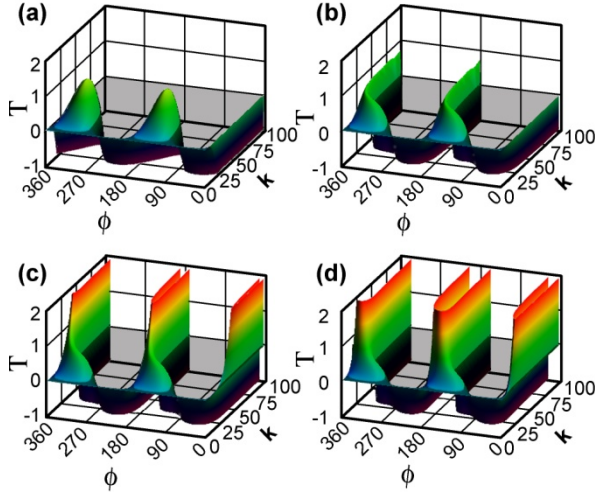
2.1.5.1. Elektrogöç'ün tek kristal ince filmlerin kararsızlığı üzerine etkileri:

Bu alt başlıkta kapiler ve elektrogöç kuvvetlerin yönbağımlı katı yüzeylerin kararsızlığı üzerine etkileri ele alınacaktır. Denklem (38) üzerine uygulanan bir dizi matematiksel operasyondan sonra (Oğurtanı, 2006-2), başlangıçta sinüs dalgası biçimindeki bir yüzey pertürbasyonuna sahip olan farazi ince filmin, yüzeyindeki bozukluğun büyüme hızını veren bir denklem elde edilir:

$$\Gamma \equiv kv_{\text{lm}} = -\chi mk^2 A \sin[2m\phi] - \left\{ [1 + A \cos^2 m\phi] k^2 + \bar{M}_{vb}^o \right\} \hat{\gamma}(\pi/2, \hat{\phi}) k^2 \quad (42)$$

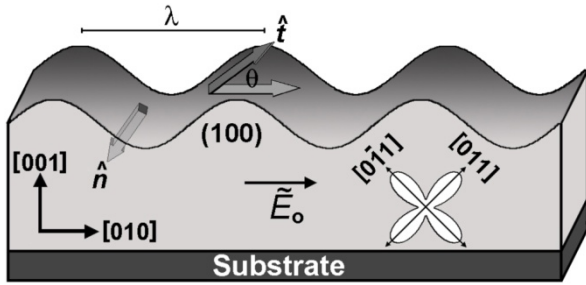
Burada k dalga sayısı, ϕ daha önceki gibi eğilme açısıdır. Bu değer Şekil 2.1.5.1.1'de $\langle 110 \rangle$ bölge eksenine ait, iki bükümlü rotasyonsal simetriye sahip düzlemler için k ve ϕ ile değişimi verilmiştir. 2.1.5.1.1'ün a) ve b) şıklarında yüzey katılığı artı c) ve d) şıklarında eksi değerlere sahiptir. a) ve b) şıkları B için iki uç değeri; $B=0$ (eş yönlü duruma denk gelir) ve $B=1$ göstermektedir. Bu figürlerde

pozitif yüzey katılığı için kararsızlık bölgeleri $\Gamma = 0$ düzlemine olan izdüşümü bölgeleridir. Gibbs serbest enerjisindeki yön bağımlılığın bu bölgeye etkisi açıktır.



2.1.5.1.1. Kapiler ve elektrogöç etkisi altında sinüsoidal yüzey bozuklukları için büyüme hızı katsayılarının, eğilme açısı ($0-2\pi$) ve dalga sayısına ($0-\pi$) göre değişimi. $\chi = 0.75$, $A = 5$

Burada en kritik durumun yüzey katılığı dyadic'inin ana eksenin (principle axis of surface stiffness dyadic) uygulanan elektrik akımına paralel fakat ters yönde olduğu durumlarda ortaya çıktığı gözlemi önemlidir. Durumun daha iyi anlaşılması açısından varsayılan fiziki model Şekil 2.1.5.1.2'de verilmiştir.



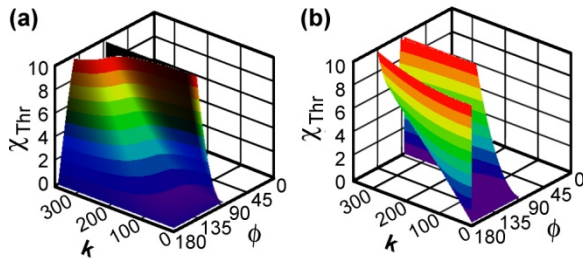
Şekil 2.1.5.1.2. Farazi tek kristal ince film model.

Şekil 2.1.5.1.1'e ait c) ve d) şıklarında B değerleri sırası ile $B=1.1$ ve $B=2.0$ dir. Negatif yüzey katılığının kararsızlık bölgesini nasıl etkilediği açıkça görülmektedir.

Yine aynı kaynaktan türetilen bir denklem yardımı ile üç boyutlu bir uzayda kararlı ve kararsız bölgeleri, elektron rüzgârı eşik değerine bağlı, birbirinde ayıran düzlemi çalışmak mümkündür. Bu denklem:

$$\chi_{Thr}(k, \phi) = -\frac{\hat{\gamma}(\pi/2, \phi; B)}{\{mA \sin[2m\phi]\}} \left\{ [1 + A \cos^2 m\phi] k^2 + M_{vb} \right\}; \quad \forall \phi \neq \left\{ \frac{\pi}{2m}; \frac{\pi}{m} \right\} \quad (43)$$

şeklinde ortaya çıkar. Şekil 2.1.5.1.3'de yüzey merkezli kübik kristallerde $\langle 110 \rangle$ bölge eksenine ait, iki bükümlü rotasyonsal simetriye sahip düzlemler için için elektron rüzgârı eşik değeri, eğilme açısı ve dalga sayısının oluşturduğu bu kararsızlık sınırı düzlemi çizilmiştir.



Şekil 2.1.5.1.3. Kararsızlık sınır düzleminin a) eş yönlü ve b) yön bağımlı durumlar için için elektron rüzgârı eşik değeri, eğilme açısı ve dalga sayısına bağlı değişimi. $A=5$, a) $B=0$ ve b) $B=1$

2.1.5.2. Gerilme alanının tek kristal ince filmlerin kararsızlığı üzerine etkileri:

İnce film yüzeyindeki bozukluğun gerilmenin etkisi altında büyüme hızı katsayısı veren denklem aşağıdaki gibidir (Oğutani, 2006-2):

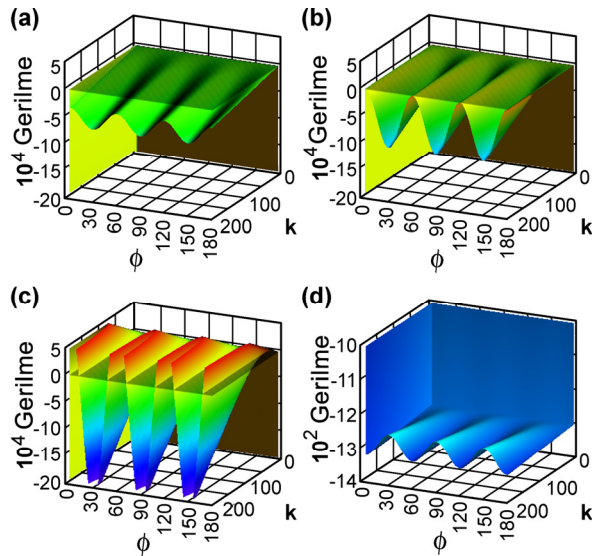
$$\Gamma \equiv kv_{lm} = -\left\{ \chi mk^2 A \sin[2m\phi] + [1 + A \cos^2 m\phi] \hat{\gamma}(\pi/2, \phi) k^4 + (\Xi_s + 2\Sigma) [1 + A \cos^2 m\phi] \cdot 2k^3 \right\} - \left\{ \bar{M}_{bv}^o [4\Sigma + \hat{\gamma}(\pi/2, \phi) k] k + \bar{M}_b \Xi_b \cdot 2k^2 \right\} \quad (44)$$

Burada, $\Xi_s = (1+\nu) \frac{\ell_o \sigma_o}{3g_s^o} |Tr \underline{\lambda}_s^V|$ ve $\Xi_b = (1+\nu) \frac{\ell_o \sigma_o}{3g_s^o} |Tr \underline{\lambda}_b^V|$ arayüz katmanı ve yığın faz için elastik çift kutup etkileşim şiddeti, $\underline{\lambda}$ 'lar ise arayüz katmanlarındaki hareketli mono boşluklar için elastik çift kutup tensörüdür.

Literatürde ünlü Rus akademisyeni Muskhelishvili'nin (1953) kullandığı bir yöntemi kullanarak Gao (1991–1,2) tarafından çözülen elastik sınır değeri probleminden yola çıkıldığında halka gerilmesi (hoop stress) için aşağıdaki karmaşık (complex) denklem verilebilir:

$$\sigma_h \equiv Tr \underline{\sigma}_{y=0} \cong \sigma_o \left[1 - 2\varepsilon k a_\varepsilon \left(\exp(ik(x-vt)) + c.c. \right) \right] \quad (45)$$

Burada fazla detaya girmeden belirtmelidir ki, denklem içindeki ν 'nin kendisi karmaşık bir niceliktir ve faz hızı olarak tanımlanır, denklemin bu hali ile görünmeyen birçok önemli parametreyi içerir. a_ε gezinen dalga'nın dalga boyu, $0 \leq \varepsilon \leq 1$ pertürbasyon derecesini gösteren parametre, $k \leftarrow 2\pi / \bar{\lambda} = kh_o$ ise yukarıda da kullanıldığı gibi normalize edilmiş dalga sayısıdır.



2.1.5.2.1. Gerilme kaynaklı (a, b, c) üst, (d) alt, kararsızlık yüzeyleri.

a) $B = 0.02$ b) $B = 1/17$ c) $B = 0.20$

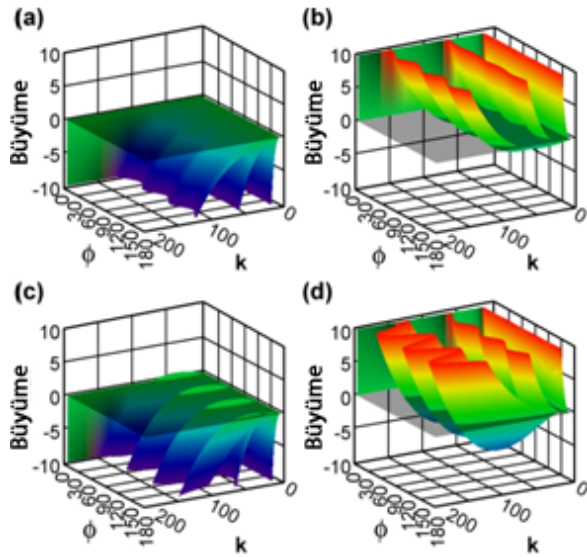
d) $B_{th} = 1/17$

Bakır için veriler, (Barrett et. al., 1973):

$$Tr \underline{\lambda} = 0.30, E_o = 1.19 \times 10^{11} NM^{-2},$$

$$\nu \cong 0.34, g_o^0 \cong 1.6 JM^{-2} (0.1eVA^{-2})$$

Şekil 2.1.5.2.1'de denklem (45)'ten yararlanılarak, elektrogöç kuvvetlerinin yokluğunda, $(111) \times [\bar{2}11]$ dokusundaki ince bakır filmin şekil değiştirmesi esnasında tek eksenli gerilmeden kaynaklı kararsızlık yüzeyleri çizilmiştir. Şekilde a) $B=0.02$ ve b) $B=1/17$ 'den görüldüğü gibi düşük yön bağımlılığı için mutlak ve çok iyi tanımlanmış, $[k=0; \phi=0]$ ile sınırlandırılmış, Şekil 2.1.5.2.1 d) ile verilen gerilmenin uç seviyesine $(\tilde{\sigma} \equiv \frac{\sigma}{E} \leq -(1-\nu)^{-1} |Tr \lambda_{\sigma}^V| / 3)$ doğru yükselen bir kararsızlık altkümesi vardır. $\tilde{\sigma} \equiv \frac{\sigma}{E} \leq -(1-\nu)^{-1} |Tr \lambda_{\sigma}^V| / 3$ değeri değişkenler yerine koyulduğunda bakır için $\tilde{\sigma} \cong -0.15$ ve silikon için -0.13 'tür (normalize edilmiş sıkıştırma gerilmesi, normalized compressive stress). Bakır için ters normalizasyon uygulandığında bu değer yaklaşık olarak $|\sigma| \cong 15.65 GPa$ ($156 Kbar$)'a denk gelir. Şekil 2.1.5.2.1 c) incelendiğinde çekme gerilmesi için dalga sayısından bağımsız olarak $\phi = 0^\circ, 60^\circ, 120^\circ$ değerlerinde belirgin bir kararsızlık söz konusudur.



2.1.5.2.2. Kararsızlık büyüme hızı katsayısının üç farklı gerilme değeri, $|\tilde{\sigma}| = 10^{-5}$ ($1.19 MPa$), $|\tilde{\sigma}| = 10^{-4}$ ($11.90 MPa$), $|\tilde{\sigma}| = 10^{-2}$ ($1.19 GPa$), için çekme gerilmesi (a,c) ve sıkıştırma gerilmesi (b,d) altında Şekil 2.1.5.2.1'de bakır için verilen veriler ile (Barrett et. al., 1973) $B=0.02$ 'nin altında ve $B=0.1$ 'in üstünde eğilme açısı ve dalga sayısına bağlı değişimi.

Şekil 2.1.5.2.2'de kararsızlık büyüme hızı katsayısının denklem (44) kullanılarak dalga sayısı ve eğilme açısına bağlı değişimi çizilmiştir. Şekle bakıldığında gerilme eşdeğer yüzey seviyesi yapraklarının sıkıştırma gerilmesi (b,d) için saat yönünde, çekme gerilmesi (a,c) için saat yönünün tersine döndükleri görülür. Şekil 2.1.5.2.2

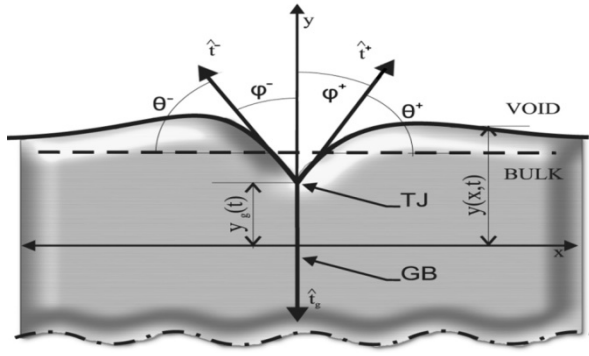
(b,d)'ye göre sistem kritik ($\phi = 30^\circ, 90^\circ, 150^\circ$) açıları arasında uygulanan düşük sıkıştırma gerilmeleri altında ve düşük dalga sayılarında kararlılık gösterir, yüzey katılığı anormalliği başladığında ise kararsızlık rejimine geçer. Çekme gerilmesi altında ise sistem ($\phi = 0^\circ, 60^\circ, 120^\circ$) kritik açıları arasında ve düşük dalga sayılarında negatif yüzey katılığından kaynaklı kararsızlık gözlemlenir.

Burada bir kısmı verilen çalışma (Oğurtanı, 2006-2) daha önce elektrogöç ve kalıntı gerilmelerin ince metalik filmler üzerine etkilerini görmek için gerek tarafımızdan yapılmış, gerekse dünya çapında çeşitli gruplar tarafından yapılmış olan bilgisayar benzetim deneyleri esnasında görülen kararsız durumlara getirdiği açıklıktan dolayı çok büyük önem taşımaktadır. Bir diğer önemi ise; hiç tartışılmaz ki, bundan sonra yapılacak olan çalışmalara yön göstericiliğinden kaynaklanmaktadır. Bu nedenlerdir ki makale (Oğurtanı, 2006-2), yayınlandığı dergiden (Physical Review B) bağımsız olarak, Kasım 2006'da nano teknoloji alanında önemli görülen makalelerin toplandığı bir dergi olan '*Virtual Journal of Nanoscience and Technology*' dergisinde yayınlanmak üzere istenmiştir.

2.2. Tersinemez ısıl devingen kuramın değişkenler hesabı kullanılarak elde edilmesi

Bu bölümde, bölüm 2.1'de olduğu gibi yön bağımlı özgül Gibbs serbest enerjisine sahip yüzey ve arayüzler için, Gibbs soyut geometrik model yerine Verschaffelt (1936) ve Guggenheim'in (1959) kullandığı gerçekçi mono katman model kullanılarak, tersinemez ısıl devingen kuram oluşturulacak fakat bu defa değişkenler hesabı devreye girecektir.

Varsayılan ısıl devingen kompozit system gerçekçi boşluk fazından eğri bir arayüz katmanı ile ve tane sınırı ile de birbirinden ayrılan iki yığın fazdan oluşur. y - ekseninde üçlü kavşak boyunca uzanan tane sınırı Şekil 2.2.1'de gösterilmiştir. Gibbs serbest enerjisi bu sistemde $g_g(\vartheta)$, ile ifade edilir, burada ϑ tane sınırı profilinin tanjant yönünün y - eksenini ile yaptığı açıdır.



Şekil 2.2.1. Üçlü kavşak makro yapısı. $\{\hat{t}^+, \hat{t}^-, \hat{t}_g\}$ değişkenleri üçlü kavşak etrafındaki tanjant yöneyleridir.

2.2.1. Global dâhili entropi üretimi

Arayüz katmanın yaptığı katkı aşağıdaki $x=0 \pm \varepsilon$ ve $y=\pm \eta$ noktalarında tekil olan saat yönünün tersine çevre entegrasyon ile ifade edilir. Burada kartezyen koordinat sisteminin merkezine yerleştirilen üçlü kavşak fiziksel bir tekillik olduğundan harici bitiş noktası olarak kabul edilip sağ ve sol tarafları sembolik olarak $\pm \bar{\varepsilon}(tj)$ pozisyon yöneyleri ile, yöneysel değişken operatörü de $\pm \delta \bar{\varepsilon}$ ile gösterilir. Dolayısıyla üçlü kavşak sadece boylamsal değil enlemsel de hareket edebilen, tamamen serbest bir nokta halini alır. Bu açıklamalar ışığında sistemin global Gibbs serbest erkesi aşağıdaki fonksiyonel ile ifade edilebilir:

$$\begin{aligned}
 G\{y\} &= \oint_{+\bar{\varepsilon} \rightarrow -\bar{\varepsilon}} dl g_{\sigma}(\theta) + \int_{x=0, y=-h}^{\bar{\varepsilon}(tj)} dl g_g(\vartheta) + \int_{S_v} ds \bar{g}_v + \int_{S_b} ds \bar{g}_b \\
 &= \oint_{+\bar{\varepsilon} \rightarrow -\bar{\varepsilon}} dx g_{\sigma}(\tan^{-1}(y_x)) \sqrt{1+y_x^2} + \int_{S_b} ds \bar{g}_b + \int_{x=0, y(-h)}^{\bar{\varepsilon}(tj)} dy g_g(\tan^{-1}(x_y)) \sqrt{1+x_y^2} + \int_{S_v} ds \bar{g}_v
 \end{aligned} \tag{46}$$

$y(x,t)$ ve $x(y,t)$ tane sınırı profil fonksiyonları, θ şekil 2.2.1'de gösterildiği gibi profilinin tanjant yöneyinin x - eksenini ile yaptığı açı, $\bar{\varepsilon}(tj)$ ise kavşağın geçici pozisyonudur. $\oint_{+\bar{\varepsilon} \rightarrow -\bar{\varepsilon}}$ sembolü, $+\bar{\varepsilon}$ ve $-\bar{\varepsilon}$ arasında birbiri ardına bağlanmış boşluk

yüzeyinde, saat yönünün tersine çevre entegrasyonunu ifade eder. Sistemin ısı dengede olduğu varsayımımızdan yola çıkarak, global Gibbs serbest erke

fonksiyonelindeki deęişme ile ilişkili global dahili entropi üretimindeki (GDEÜ) (global internal entropy production) deęişme, aşağıdaki denklem ile verilir:

$$\delta S_{IEP} \{ \delta y, \pm \delta \bar{\varepsilon}, \delta \bar{y}(0) \} = -\frac{1}{T} \left\{ \delta \oint_{+\delta \bar{\varepsilon} \rightarrow -\delta \bar{\varepsilon}} dl g_{\sigma}(\theta) + \delta \int_{y(-h)}^{\delta \bar{\varepsilon}(t_j)} dl g_g + \oint_{+\bar{\varepsilon} \rightarrow -\bar{\varepsilon}} \delta \eta dl \Delta \bar{g}_{vb} \right\} \geq 0 \quad (47)$$

Burada, $\Delta \bar{g}_{vb} = (\bar{g}_v - \bar{g}_b)$ dönüşümün hacimsel Gibbs serbest erke yoğunluęudur, bundan sonraki bölümlerde bu nicelięin deęişimi sıfır olarak alınacaktır ($\delta \Delta \bar{g}_{vb} \equiv 0$). Kartezyen koordinat sisteminde yukarıdaki denklem aşağıdaki hali alır:

$$\delta S_{IEP} \{ \delta y, \delta x, \delta(\pm \bar{\varepsilon}), \delta \bar{\varepsilon}(t_j) \} = -\frac{1}{T} \lim_{|\varepsilon| \rightarrow 0} \left\{ \begin{array}{l} \delta \oint_{+\delta \bar{\varepsilon} \rightarrow -\delta \bar{\varepsilon}} dx g_{\sigma}(\tan^{-1}(y_x)) \sqrt{1+y_x^2} \\ \delta \int_{y(-h)}^{\bar{\varepsilon}(t_j)} dy g_g(\tan^{-1}(x_y)) \sqrt{1+x_y^2} + \oint_{+\bar{\varepsilon} \rightarrow -\bar{\varepsilon}} \delta \eta dl \Delta \bar{g}_{vb} \end{array} \right\} \geq 0 \quad (48)$$

Denklemdaki, $\delta \eta = -(1+y_x^2)^{-1/2} \delta y$ ifadesi arayüz katmanının yüzey normali boyunca yığın faza doğru sanal yer deęiştirmesidir. Bu denklemle verilen deęişkenler problemi bir fonksiyonelin, $y(x,t)$ ve $x(y,t)$ profil fonksiyonlarının rasgele seçilmiş entegrasyon limitlerinde rasgele deęişimlerinin, genel deęişimini ortaya koyar. Kapalı haliyle $\delta S_{IEP} \{ \delta y, \delta x, \delta(\pm \bar{\varepsilon}), \delta \bar{y}(0) \} \equiv 0$ ifade edilen bu uç deęer probleminin Weiserstrass-Erdmann koşullarının tüm köşe noktalarda (mesela üçlü kavşak) sağlanması durumunda bir zayıf çözümlü olabilir. Bu ifadede $F \leftarrow g_{\sigma}(\tan^{-1}(y_x)) \sqrt{1+y_x^2}$ ataması yapıldıktan sonra, önce deęişim operasyonu gerçekleştirip sonra kısmi entegrasyon yürütürse aşağıdaki ifade elde edilir:

$$\begin{aligned}
\lim_{|\varepsilon| \rightarrow 0} \delta \oint_{+\delta\bar{\varepsilon} \rightarrow -\delta\bar{\varepsilon}} dx g_{\sigma} \left(\tan^{-1}(y_x) \right) \sqrt{1+y_x^2} &= \lim_{|\varepsilon| \rightarrow 0} \delta \int_{+\delta\bar{\varepsilon}}^{-\delta\bar{\varepsilon}} dx F(x, y, y_x) \\
&= \lim_{|\varepsilon| \rightarrow 0} \left(\int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} dx \left(F_y - \frac{d}{dx} F_{y_x} \right) \delta y \right. \\
&\quad \left. + F_{y_x} \Big|_{x=-\varepsilon} \delta [y(-\varepsilon)] + (F - y_x F_{y_x}) \Big|_{x=-\varepsilon} \delta(-\varepsilon) \right. \\
&\quad \left. - F_{y_x} \Big|_{x=+\varepsilon} \delta [y(+\varepsilon)] - (F - y_x F_{y_x}) \Big|_{x=+\varepsilon} \delta(+\varepsilon) \right)
\end{aligned} \tag{49}$$

Bu ifade $F(x, y, y_x)$ şeklindeki genel bir entegrasyon içi fonksiyon için yazılmıştır, bizim fonksiyonumuz esasen profil fonksiyonun birinci türevi olup basit olarak y_x ile ifade edilebilir. Bu tanımlamadan sonra Euler fonksiyonu $\left(F_y - \frac{d}{dx} F_{y_x} \right)$ açık ve kapalı halleri ile aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\left(F_y - \frac{d}{dx} F_{y_x} \right) = -\frac{d}{dx} F_{y_x} = -\frac{d}{dx} \{ g'_{\sigma} \cos(\theta) + g_{\sigma} \sin \theta \} \tag{50.a}$$

$$\left(F_y - \frac{d}{dx} F_{y_x} \right) = -y_{xx} F_{y_x y_x} \equiv -\kappa \left[\frac{d^2 g_{\sigma}}{d\theta^2} + g_{\sigma} \right] = -\kappa [g''_{\sigma} + g_{\sigma}] \tag{50.b}$$

(50.b) ile verilen Euler fonksiyonun kapalı hali yüzey biliminde oldukça sık olarak karşımıza çıkar, kimi yerlerde Herring'in (1950, 1951) yüzey kimyasal potansiyeli $\mu = -\kappa [g''_{\sigma} + g_{\sigma}]$ olarak da görülür. Daha önce de bahsettiğimiz gibi $\tilde{g}_{\sigma} \equiv [g''_{\sigma} + g_{\sigma}]$ yüzey katılığı, κ yerel eğrilik yarıçapıdır. (50.a) ilerleyen bölümde zayıf çözümü elde etmek için kullanılacaktır.

(48) ve (50) numaralı denklemler birleştirilir ve her iki taraf ta zaman artışı δt 'ye bölünür ise, GDEÜ'nün hızı (rate of global internal entropy production) elde edilir:

$$\frac{\delta S_{\text{int}}}{\delta t} = -\frac{1}{T} \lim_{|\varepsilon| \rightarrow 0} \left\{ \begin{aligned} & \oint_{+\varepsilon \rightarrow -\varepsilon} dl \{ \kappa \tilde{g}_\sigma + \Delta \tilde{g}_{vb} \} \frac{\delta \eta}{\delta t} + \\ & \left[(F - y_x F_{y_x}) \Big|_{x=-\varepsilon} - (F - y_x F_{y_x}) \Big|_{x=+\varepsilon} + \frac{\partial g_g(\vartheta)}{\partial \vartheta} \right] \frac{\delta(\varepsilon)}{\delta t} \\ & \left[(F_{y_x} \Big|_{x=-\varepsilon} - F_{y_x} \Big|_{x=+\varepsilon}) + g_g(\vartheta) \right] \frac{\delta[y(0)]}{\delta t} \end{aligned} \right\} \geq 0 \quad (51)$$

2.2.2. Zayıf çözüm

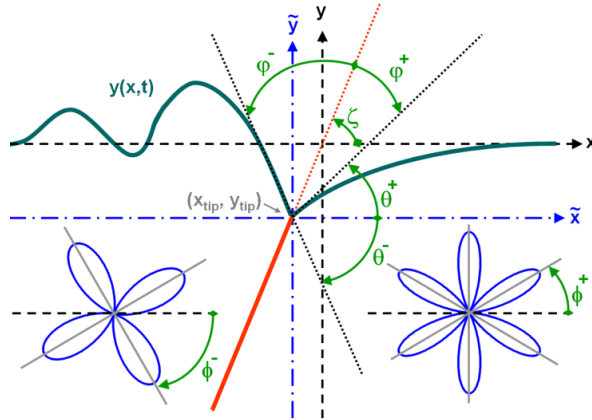
Bölüm 2.1.1 – 2.1.3 esnasında bahsi geçen kavramlardan faydalanarak, bir önceki bölümde gösterilmeye çalışılan değişkenler hesabı uygulamasının devamı üçlü kavşak tekilliği içeren yüzeyler için uç değer problemini verir (detaylar için: Öğurtanı, 2006-3):

$$\delta \Xi \{ J_\sigma, J_{vb} \} \cong \delta \left\{ \begin{aligned} & -\Omega_b \int_{-\infty}^{+\infty} dx \{ g'_\sigma \cos(\theta) + g_\sigma \sin \theta \} \frac{\partial^2 J_\sigma}{\partial x^2} \\ & \Omega_b \int_{-\infty}^{+\infty} dx \{ \Delta \tilde{g}_{vb} \} \left(\frac{\partial J_\sigma}{\partial x} \right) - \Omega_b \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sqrt{1 + \tan^2 \theta} \{ \Delta \tilde{g}_{vb} \hat{J}_{vb} \} \\ & \Omega_b \int_{-\infty}^{+\infty} dx \{ g'_\sigma \cos(\theta) + g_\sigma \sin \theta \} \frac{\partial}{\partial x} \left[\sqrt{1 + \tan^2 \theta} \hat{J}_{vb} \right] \\ & -\Omega_b \left\{ \{ g'_\sigma \cos(\theta) + g_\sigma \sin \theta \} \sqrt{1 + \tan^2 \theta} \right\}_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} \hat{J}_{vb}(0) \\ & + \left\{ (g_\sigma \cos \theta - g'_\sigma \sin \theta) \Big|_{x=+\varepsilon} - g'_\sigma \right\} \Gamma_\sigma^{-1} J_\sigma(0) \\ & + \frac{\Gamma_\sigma^{-1} J_\sigma^2(0)}{2d_a \hat{M}^{trans}} - [g_g] \left[\Omega_b \frac{\partial J_\sigma}{\partial x} \right]_{x=0} \\ & + \frac{\Gamma_\sigma}{2d_a \hat{M}^{long}} \left(\Omega_b \frac{\partial J_\sigma}{\partial x} \right)_{x=0}^2 + \frac{J_\sigma^2(0)}{2\hat{M}^\pm} \\ & + \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sqrt{1 + \tan^2 \theta} \frac{J_\sigma^2}{2\hat{M}_\sigma} + \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sqrt{1 + \tan^2 \theta} \frac{\hat{J}_{vb}^2}{2\hat{M}_{vb}} \end{aligned} \right\} = 0 \quad (52)$$

Problemin tam çözümü içeren bu denklemin sayısal çözümlemesinde kullanılması gereken yumuşak fonksiyon için en iyi adaylardan biri Hermite fonksiyonudur (Lösch, Lösch 1960). İlerleyen bölümde çözümlerde kullanılan sayısal yöntemler özetlenecektir. (Oğurtanı, 2006-3)

2.2.3. Zayıf çözümün eğik tane sınırı oluşu problemini kapsayacak şekilde genişletilmesi

Burada varsayılan ısı devingen bileşke sistem gerçekçi boşluk fazından eğri bir ara yüz katmanı ile ve belirli bir açıyla gelen tane sınırı ile de birbirinden ayrılan iki yığın fazdan oluşur. x-y düzleminde üçlü kavşak boyunca uzanan eğik tane sınırı Şekil 2.2.3.1'de kırmızı çizgi ile gösterilmiştir. Şekil 2.2.3.1'de profil tamamen keyfi olmakla birlikte kullanılan parametreleri tasvir etmek amacı ile sağdaki tanenin altı bükümlü simetri, soldakinin ise dört bükümlü simetriye sahip olduğu varsayılmıştır.



Şekil 2.2.3.1. Üçlü kavşak makro yapısının üstten görünümü. Tane sınırının x-ekseni ile yaptığı açı ζ , sağ ve sol dihedral açıları ϕ^\pm , yüzey tanjant yöneylerinin x-ekseni yaptığı açılar ise θ^\pm ile ifade edilmiştir. Simetri eksenlerinin x-ekseni ile yaptığı açılar ise ϕ^\pm ile gösterilmiştir.

Tanımlanan bu sistem için global Gibbs serbest erke fonksiyoneli yukarıda verilen yöntemler izlenerek yazıldıktan sonra global dahili entropi üretimindeki (GDEÜ) değişme elde edilir. GDEÜ'nün, zamana göre değişimi alınır ve süreklilik denkleminde faydalanılırsa Onsager hipotezine dayanılarak yüzey sürüklenme difüzyonuna ait analitik akı bağıntıları elde edilir:

$$J_{\sigma}^{\pm} = \frac{M_{\sigma}}{kT} \Omega \frac{\partial}{\partial \ell} \left\{ \kappa \tilde{g}_{\sigma}^{\pm} \right\}, \quad \text{yüzey sürüklenme-difüzyonu akıları} \quad (53)$$

$$J_{\sigma}^{trans} = \Gamma_g \frac{\mathfrak{R}^{trans}}{kT} \left[d_a \left\{ \begin{array}{l} + \left(g_{\sigma}^{+} \sin(\zeta - \theta^{+}) - g_{\sigma}^{\prime+} \cos(\zeta - \theta^{+}) \right) \\ - \left(g_{\sigma}^{-} \sin(\zeta - \theta^{-}) - g_{\sigma}^{\prime-} \cos(\zeta - \theta^{-}) \right) - \frac{\partial g_g(\zeta)}{\partial \zeta} \end{array} \right\} \right] \quad (54)$$

$$V_g^{long} = \frac{\mathfrak{R}^{long}}{kT} \left[d_a \left\{ \begin{array}{l} g_g - \left(g_{\sigma}^{+} \cos(\zeta - \theta^{+}) + g_{\sigma}^{\prime+} \sin(\zeta - \theta^{+}) \right) + \\ \left(g_{\sigma}^{-} \cos(\zeta - \theta^{-}) + g_{\sigma}^{\prime-} \sin(\zeta - \theta^{-}) \right) \end{array} \right\} \right] \quad (55)$$

Burada J_{σ}^{\pm} üçlü kavşağa sağındaki ve solundaki boşluk yüzey katmanından girip çıkan atomik akıları, J_{σ}^{trans} yatay yöndeki akıyı, V_g^{long} üçlü kavşağın dikine hızını ifade eder. Bu denklemlerde, M_{σ} yüzey atomlarının mobilitesi, k Boltzman sabiti, T sıcaklık, Ω ortalama atomik özgül hacim, κ kavis, \tilde{g}_{σ}^{\pm} yöne bağlı yüzey katılığı, Γ ortalama özgül atomik yoğunluk, \mathfrak{R} fenomenolojik mobilite g^{\pm} , $g^{\prime\pm}$ yöne bağlı yüzey Gibbs serbest erkesi ve onun θ 'ya göre türevi, d_a atomlar arası ortalama mesafedir. Yine her zamanki gibi σ ve g altsimgeleri sırası ile yüzey katmanı ve tane sınırını temsil etmektedir.

Oğurtanı tarafından kullanılan değiştirilmiş Rayleigh-Ritz (RR) metodu (Oğurtanı, 2006-3, 2007) ile eğik bir üçlü kavşak tekiliği içeren yüzeyler için uç değer problemi aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\delta \Xi \left\{ J_{\sigma}^{-}, J_{\sigma}^{+} \right\} \cong \delta \left\{ \begin{array}{l}
-\Omega_b \int_{-\infty}^{-xtip} dx \left\{ g_{\sigma}^{\prime-} \cos(\theta) + g_{\sigma}^{-} \sin \theta \right\} \frac{\partial^2 J_{\sigma}^{-}}{\partial x^2} \\
-\Omega_b \int_{+xtip}^{+\infty} dx \left\{ g_{\sigma}^{\prime+} \cos(\theta) + g_{\sigma}^{+} \sin \theta \right\} \frac{\partial^2 J_{\sigma}^{+}}{\partial x^2} \\
+\left(g_{\sigma}^{-} \sin \theta + g_{\sigma}^{\prime-} \cos \theta \right) \left[\Omega_b \frac{\partial J_{\sigma}^{-}}{\partial x} \right]_{x=-xtip} \\
-\left(g_{\sigma}^{+} \sin \theta + g_{\sigma}^{\prime+} \cos \theta \right) \left[\Omega_b \frac{\partial J_{\sigma}^{+}}{\partial x} \right]_{x=+xtip} \\
+\int_{-\infty}^{-xtip} dx \sqrt{1 + \tan^2 \theta} \frac{J_{\sigma}^{-2}}{2\hat{M}_{\sigma}} + \int_{+xtip}^{+\infty} dx \sqrt{1 + \tan^2 \theta} \frac{J_{\sigma}^{+2}}{2\hat{M}_{\sigma}}
\end{array} \right\} = 0 \tag{56}$$

BÖLÜM 3

GEREÇ VE YÖNTEM

3.1. Kullanılan araç ve gereçler

Laboratuvarımızda bulunan bilgisayarların tamamı çok sıkı bir program içerisinde kullanılmıştır. Projede kullanılan donanım ve yazılımlar Tablo 1 ve 2’de verilmiştir.

Tablo 3.1.1. Projede kullanılan donanımların listesi.

ADI/MODELİ	PROJEDE KULLANIM AMACI
CSL1, Fujisu Siemens AMD Workstation 2x AMD OPTERON 275 2.2 GHz Dual Core, 2Gb DDR400 ECC RAM, 73Gb 15k rpm HDD	Benzetim deneyleri
CSL2, PC AMD FX-57, 2Gb DDR400 RAM, 36Gb10k rpm HDD	Benzetim deneyleri
CSL3, HP xw8400 Workstation 2xIntel Xeon 5365 3.00 8MB/1333 QC, HP 4GB(2x2GB) DDR2-667 ECC RAM, HP 73GB SAS 3Gb/s 15K, NVIDIA Quadro NVS 290 256MB	Benzetim deneyleri*
CSL4, HP xw4600 Workstation Intel Core 2 Duo E6850 3.00 4MB/1333, HP 4GB(2x2GB) DDR2-800 ECC RAM, HP 160B WD Raptor SATA NCQ 10K, NVIDIA Quadro FX370 256MB	Benzetim deneyleri*
HEXA, PC IBM Thinkcentre Pentium IV 3 Ghz, 60 Gb HDD, 512 Mb RAM	Benzetim deneyleri/Data analizi
ELECTRON, PC AMD AMD ATHLON 2000XP, 40 Gb HDD, 256 Mb RAM	Benzetim deneyleri/Data analizi
PROTON, PC AMD AMD ATHLON 2000XP, 40 Gb HDD, 256 Mb RAM	Benzetim deneyleri/Data analizi
CSL, PC Intel Pentium III 800, 20 Gb HDD, 512 Mb RAM	Web sunucusu

*Proje kapsamında satın alınan cihaz.

Tablo 3.1.2. Projede kullanılan yazılımların listesi.

ADI/MODELİ	PROJEDE KULLANIM AMACI
Intel Visual Fortran/C++ Compiler, 11.0	Kaynak kodlarının hazırlanması ve derlenmesi
MS Visual Studio .Net 2008	Kaynak kodlarının hazırlanması
IMSL, FNL 6.0	Kaynak kodlarının hazırlanması
Mathcad, 13.0	Algoritmaların hazırlanması/Data analizi
Matlab, 7.1.0.246	Data analizi
Scientific Linux, Gentoo Linux	Derlenen programların çalıştığı platform
MS Windows XP Professional	Data analizinde kullanılan platform

3.2. Fiziki ve matematiksel modelleme; sayısal yöntemler

Yapılan çalışmalar birbirlerinden farklı olsalar da kullanılan sayısal yöntemler düşünüldüğünde iki temel başlık altında toplanabilirler; kuvvetli çözümler (front tracking metodu ile diferansiyel denklemlerin çözümü) ve zayıf çözümler (değişkenler hesabı ile integral denklemlerin çözümü) .

3.2.1. Kuvvetli çözümler için genel strateji

Sıradan noktalar için yüzeye dik doğrultudaki hız aşağıdaki diferansiyel denklemin çözümü ile elde edilir:

$$\bar{V}_{ord} = \frac{\partial}{\partial \ell} \left[D''(\theta, \phi) \frac{\partial}{\partial \ell} (\Delta \bar{g}_{vb} + \chi \bar{g} + \bar{\kappa}) \right] - \bar{M}_{vb} (\Delta \bar{g}_{vb} + \bar{\kappa}) \quad (57)$$

Üçlü kavşak için ise denklemler aşağıdaki gibidir:

$$\bar{V}_g^{long} = \bar{M}^{long} \frac{\bar{\Omega}_g \bar{d}_a}{2\bar{\Omega}_\sigma^2 \bar{h}_g} \left[2\lambda - (\cos \theta^+ + \cos \theta^-) \right] \quad (58)$$

$$\bar{J}_o^\mp = \mp \bar{M}^{long} \frac{\bar{d}_a}{2\bar{\Omega}_\sigma^2} (\lambda - \cos \theta^\mp) \mp \bar{J}_g / 2 + \bar{J}_g + \bar{M}^{trans} \frac{\bar{d}_a}{\bar{\Omega}_\sigma^2} (\sin \theta^+ - \sin \theta^-) \quad (59)$$

Burada $\bar{\kappa}$ lokal eğrilik yarıçapı, $\bar{\ell}$ boşluk yüzeyi boyunca eğrisel koordinat (curvilinear coordinate), g_σ özgül yüzey Gibbs serbest erkesi, χ elektron rüzgâr kuvveti, $\bar{\mathcal{G}}$ elektrostatik potansiyeldir. Bu değişkenlerin üzerindeki çizgi işareti, bunların ölçeklenmiş ve normalize edilmiş birer değişken olduğunu gösterir, açık halleri ile bunlar aşağıdaki gibidir:

$$\begin{aligned} \bar{t} &= t / \tau_o, \quad \bar{\ell} = \ell / \ell_o, \quad \bar{\kappa} = \kappa \ell_o, \quad \bar{w}_o = w_o / \ell_o, \quad \bar{L} = L / \ell_o \\ \Delta \bar{g}_{vb} &= \frac{\bar{g}_{vb} r_o}{g_\sigma}, \quad \bar{\mathcal{G}} = \mathcal{G} / (E_o \ell_o), \quad \chi = e |\bar{Z}| E_o \ell_o^2 / (\Omega_\sigma g_\sigma) \end{aligned} \quad (60)$$

Bu tanımlamalarda zaman ve uzay değişkenleri için $\{t, \ell\}$ ölçeklemede \hat{M}_σ ile tanımlanan yüzeydeki kütle akışına eşlik eden atomik mobiliteden ve yüzeyin özgül Gibbs serbest erkesinden faydalanılır. Böylece $\tau_o = \ell_o^4 / (\Omega_\sigma^2 \hat{M}_\sigma g_\sigma)$ şeklinde ortaya çıkarılan ölçeklenmiş zaman elde edilir, burada ℓ_o rastgele seçilmiş bir uzunluk ölçüsüdür.

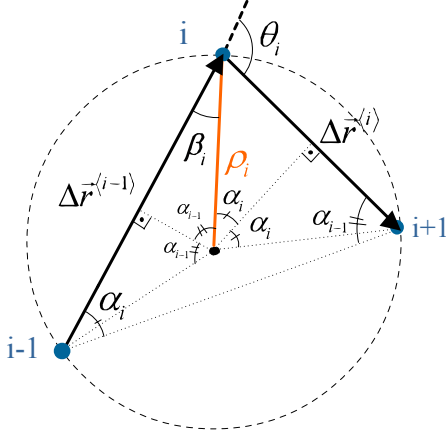
Varsayımsal sistemler iki boyutlu olmasına karşın yöney cebirini (vector algebra) kullanabilmek için sistem düğümleri (nodes) aşağıdaki gibi üç boyutlu yöneyler ile temsil edilirler:

$$\vec{r}^{(i)} = \begin{vmatrix} x \\ y \\ 0 \end{vmatrix} \quad (61)$$

Kesim (segment) boyları basitçe bu yöneylerin farkının mutlak değeri alınarak hesaplanır:

$$\Delta \vec{r}^{(i)} = \vec{r}^{(i+1)} - \vec{r}^{(i)} \quad s_i = \left| \Delta \vec{r}^{(i)} \right| \quad (62)$$

Eğrilik yarıçapının temel tanımı ve ayrık (discrete) geometrik bağlantılardan faydalanılarak düğümler için kavis hesaplamaları yapılarak kapiler kuvvet elde edilir.



Şekil 3.2.1.1. Eğrilik yarıçapının hesabında kullanılan, ardışık üç düğümden geçen çember.

Şekilden kolaylıkla aşağıdaki denklemler edilebilir:

$$\rho_i = \frac{s_i}{2 \sin(\alpha_i)} \quad \kappa_i = \frac{1}{\rho_i} = \frac{2 \sin(\alpha_i)}{s_i} \quad (63)$$

α_i in tanjantı aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$\tan(\alpha_i) = \frac{\sin(\theta_i)}{\frac{s_{i-1}}{s_i} + \cos(\theta_i)} \quad (64)$$

Bu formüller kullanılarak kapiler kuvvet aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$\kappa_i = \frac{2 \sin \left(\operatorname{atan} \left(\frac{\sin(\theta_i)}{\frac{s_{i-1}}{s_i} + \cos(\theta_i)} \right) \right)}{s_i} \quad (65)$$

Hemen her çalışmada devreye giren elektrostatik potansiyel ve bölüm 4.1.3.'te verilen çalışmada yer alan sıcaklık dağılımları, modellenen malzemenin yan duvarlarında Neumann, anot ve katot köşelerinde Dirichlet sınır koşullarını sağlar ve Laplace denkleminin uyarlar. Bu yüzden bu iki problemin sayısal çözümleri bir fark dışında aynıdır: homojen olmayan sıcaklık alanına eşlik eden ısı gerilme hesaplamalarında sınır elemanlarına ek olarak özel olarak tanımlanmış iç noktalarda da sıcaklık gradyanı bilgisine ihtiyaç vardır. Bölüm 4.1.3.'te verilen çalışmada iç boşluğun kütle merkezini referans alan ve literatüre ilk defa geçecek olan özel bir yöntem kullanılmış; sistemle birlikte hareket eden iç düğüm noktalarında sıcaklık gradyanı hesap edilmiştir (Oğurtanı, Akyıldız, 2008-1,2,3). Yine bu makalede ısı gerilmelerin hesabı için Duhamel & Neumann (Fung, 1965) teoreminden faydalanılarak çok özgün bir yöntem geliştirilmiştir.

Yukarıda bahsi geçen, bu yalnızca büyüklüğü olan (scalar) alanlar sınır düğümlerinin orta kesim pozisyonlarında kısmi (particular) ve tamamlayıcı (complimentary) fonksiyonların birleşimleri olarak, Trefftz metodunda kullanılan felsefeye (Beer, Watson, 1992) benzer şekilde hesaplandıktan sonra düğümlere aktarılır. Bu işlemin sebebi kenar ve köşelerin ikinci dereceden Fredholm integral denklemlerinin çözümünde problem yaratmasını engellemektir.

Laplace denklemi 'Dolaylı Sınır Elemanı Methodu' (Indirect Boundary Element Method, IBEM) ile çözülür. Elektrostatik potansiyel için düşünecek olursak aşağıda verilen denklemin çözümü aranır:

$$\nabla^2 g(r) = 0 \quad (65)$$

Sistemin sınır koşulları aşağıdaki gibi tanımlanmıştır:

$$\hat{n} \cdot \nabla g(r) = \hat{n} \cdot \frac{\partial g(r)}{\partial r} \hat{r} = 0 \quad (67)$$

$\mathcal{G}(r)$ fonksiyonu elektrostatik potansiyelin faz yüzeyindeki değerini ifade eder. İki boyutlu problem için, kaynağın malzeme boyunca yüzeyde artı sonsuzdan eksi sonsuza kadar dağıldığını varsayılır. Problemin temel çözümü aşağıdaki gibidir:

$$U(P, Q) = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{1}{r} \quad (68)$$

r kaynak noktası ile alan noktası arasındaki mesafeyi ifade eder. IBEM'de çözüm aşağıdaki formda aranır:

$$u(Q) = \int_S U(P, Q) \mu(P) dS_P \quad (69)$$

$\mu(P)$ kaynağın şiddetini ifade eder ve yüzey boyunca sürekli bir şekilde dağılmıştır. İki boyutlu sistemde, dS kavis uzunluğunu ifade eder. Neuman sınır koşulunun entegral denklemi aşağıdaki gibidir:

$$\frac{1}{2} \mu(Q) + \int_S T(P, Q) \mu(P) dS_P = \bar{t}(Q) \quad (70)$$

N kadar eleman için N tane eş zamanlı denklem elde edilir.

$$\frac{1}{2} \mu(Q_i) + \sum_{j=1}^N \Delta T_{ij} \mu(Q_j) = \bar{t} \mu(Q_i) \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (71)$$

ve

$$\Delta T_{ij} = \int_{S_j} T(P_j, Q_i) dS_{P_j} \quad (72)$$

Uygulanan elektrik alanın yarattığı elektrostatik potansiyel ve bu çözümün yaratacağı pertürbasyondan oluşan potansiyel iki farklı bileşen olarak düşünülür:

$$\mathcal{G}(r) = \mathcal{G}^I(r) + \mathcal{G}^{II}(r) \quad (73)$$

Elektrik alanın yüzey boyunca yüzeye dik bileşenin sıfır olması koşullu aşağıdaki sınır koşulu ile tanımlanmıştır.

$$\begin{aligned} E(Q) &= -grad(\mathcal{G}(Q)) \\ &= -grad(\mathcal{G}^I(Q)) - grad(\mathcal{G}^{II}(Q)) = E^I(Q) + E^{II}(Q) = 0 \end{aligned} \quad (74)$$

Elektrostatik olarak uygulanan voltaja karşılık gelen elektrostatik potansiyel aşağıdaki denklem ile ifade edilir:

$$\mathcal{G}^I(Q) = -E_o x = -E_o \vec{r} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -E_o r \cos(\phi) \quad (75)$$

Çözüm için elektrik alanın yüzeye dik bileşeni ise aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$E^I(Q) = -grad(\mathcal{G}^I(Q)) = -\hat{n} \cdot \nabla \mathcal{G}^I(Q) = -E_o \cos(\phi) \quad (76)$$

Neuman sınır koşulu ile kıyaslayarak, elektrik alanın yüzeye dik bileşeni nedeniyle yüzeyde dağılmış imgesel yükler ise aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$E^{II}(Q) = -E^I(Q) = E_o \cos(\phi) \quad (77)$$

Artık problem sınır koşullarını sağlayacak imgesel yüklerin, μ_i , hesaplanmasına indirgenmiştir. Temel çözümün türevi göz önünde bulundurularak, Q_i noktasındaki sınır koşulu aşağıdaki şekilde sağlanabilir:

$$\frac{1}{2} \mu(Q_i) + \sum_{j=1}^N \Delta T_{ij} \mu(Q_j) = E^I(Q_i) \quad (78)$$

Burada N imgesel yüklerin sayısıdır. Sınır koşulunu sağlayan İmgesel yüklerin dağılımı hesaplandıktan sonra, $\vartheta^{\text{II}}(Q)$ aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$\vartheta^{\text{II}}(Q_i) = \sum_{j=1}^N \Delta U_{ij} \mu(Q_j) \quad (79)$$

ve

$$\Delta U_{ij} = \int_{S_j} U(P_j, Q_i) dS_{p_j} \quad (80)$$

Bu integraller sayısal olarak yamuk kuralı kullanılarak hesaplanır ve sonuç olarak aşağıdaki eş zamanlı denklem elde edilir. Bu denklemin çözümü bize imgesel yükleri verecektir.

$$\Delta T_{i,j} \cdot \mu_i = E_i^I \quad (81)$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 0.5 & \Delta T_{0,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \Delta T_{0,mm} \\ \Delta T_{1,0} & 0.5 & & & & & \cdot \\ \cdot & & 0.5 & & & & \cdot \\ & & & 0.5 & & & \cdot \\ & & & & 0.5 & & \cdot \\ & & & & & 0.5 & \cdot \\ \cdot & & & & & & 0.5 \\ \cdot & & & & & & \Delta T_{mm-1,mm} \\ \Delta T_{mm,0} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \Delta T_{mm,mm-1} & 0.5 \end{bmatrix}}_{\Delta T} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} \mu_0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \mu_{mm} \end{bmatrix}}_{\mu} = \underbrace{\begin{bmatrix} E_0^I \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ E_{mm}^I \end{bmatrix}}_{EI}$$

Yukarıdaki denklem sisteminin çözümünde, Gaussian eleme yöntemi kullanılır.

Elektrostatik potansiyel veya sıcaklık dağılımları hesaplandıktan sonraki aşama olan ikinci dereceden zaman integrasyonu için oto-zaman-kontrollü *explicit Euler's* metodu kullanılmaktadır. Bu yöntem kapiler kuvvetlerin kendi kendini iyileştirici (self

recovery) özelliği ile birleştğinde uzun zamanlı sayısal kararlılık (long time numerical stability) ortaya çıkarmakta ve $10^6 - 10^7$ basamaklık hesaplamalarda dahi sistem kararlı kalmaktadır. Yeni düğüm örgüsünü (remeshing) oluşturmada kullandığımız yöntem ise literatürde Pan and Cocks (1995) tarafından da savunulmakta ve tane sınırı civarında hassas düğüm örgüsü (fine remeshing) yapmaktadır.

3.2.2. Zayıf çözümler için genel strateji

Zayıf çözümlerde kullandığımız sayısal yöntemde, yüzey profili Hermite fonksiyonları $\Psi_n(x)$ kullanılarak açılmıştır (Oğurtanı, 2006-3). Bu fonksiyon $-\infty \leq x \leq +\infty$ sonsuz aralığında tamamlanmış, iyi huylu ve kapalı küme ihtiva eder, ve üyelerinin türevleri mümkün mertebe hızlı ve gayet yumuşak bir şekilde zayıflar. Hermite fonksiyonu şu şekilde yazılabilir: $\Psi_n(x) = \alpha_n H_n(x) \exp(-x^2/2)$, burada $\alpha_n = (n!2^n \sqrt{\pi})^{-1/2}$ normalizasyon katsayısı olarak devreye girer. Hermite polinomları için tekrarlı formüller aşağıdaki şekilde ifade edilebilir:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \quad \text{ve} \quad dH_n(x)/dx = 2nH_{n-1}(x) \quad (82)$$

Bu tekrarlı formüller kullanılarak aşağıdaki Hermite fonksiyonunun kendisi ve türevlerinin hesabında kullanacağımız yararlı bağıntıları elde edebiliriz:

$$\begin{aligned} \Psi_{n+1} &= \left(\sqrt{2/(n+1)}\right)x\Psi_n - \left(\sqrt{n/(n+1)}\right)\Psi_{n-1} \\ \Psi'_n &= \sqrt{n/2}\Psi_{n-1} - \sqrt{(n+1)/2}\Psi_{n+1} \\ \Psi''_n &= \frac{1}{2} \left[\sqrt{(n+1)(n+2)} \Psi_{n+2} - (2n+1) \Psi_n + \sqrt{(n)(n+1)} \Psi_{n-2} \right] \end{aligned} \quad (83)$$

Yüzey profili hızı büyüme terimi yokken takip eden formu alır: $\partial y(x,t)/\partial t = -\Omega_b \partial J_\sigma(x,t)/\partial x$. Buradan yola çıkarak, yüzey profili ve parçacık akı yoğunluğu sırasıyla şu şekli alır:

$$y(x,t) = \sum_{n=0}^{n=N} a_n(t) \Psi_n(x) \quad \text{ve} \quad J_\sigma(x,t) = \sum_{n=0}^{n=N} b_n(t) \Psi_n(x) \quad (84)$$

Eğer kişi, bu denklemleri yukarıda bahsi geçen ıraksama bağıntısında yerine koyar ve orthonormal özellikleri uygular ise aşağıdaki bağıntıyı bulur:

$$\frac{da_n}{dt} = -\Omega_b \sum_{m=0}^{m=N} b_m(t) \langle \Psi_n | \Psi'_m \rangle \cong \Omega_b \left[b_{n-1} \sqrt{n/2} - b_{n+1} \sqrt{(n+1)/2} \right] + O(10^{-10}) \quad (85)$$

Parçacık hızı gösterimi ve akım alanı arasındaki Ters simetrik dönüşüm matrisi $\langle \Psi_n | \Psi'_m \rangle$ Kroneker delta fonksiyonu ile ifade edilebilir:

$$\langle \Psi_n | \bar{\Psi}'_m \rangle \equiv \langle n | m \rangle' \cong -\sqrt{(m+1)/2} \delta_{n,m+1} + \sqrt{m/2} \delta_{n,m-1} \quad (86)$$

Bu formül özel matris elemanları içermektedir. Bunlar $\langle 0 | k \rangle' \cong \delta_{1,k} / \sqrt{2}$ ve $\langle N | k \rangle' \cong -\delta_{N,k+1} \sqrt{2}$ sıraları ve $\langle k | 0 \rangle' \cong -\delta_{1,k} / \sqrt{2}$ ve $\langle k | N \rangle' \cong \delta_{N,k+1} \sqrt{2}$ sütunlarıdır.

Bu elemanlar $O(10^{-10})$ a varan yüksek hassasiyette hesap edilirler.

Normalize ve orantılı uzayda, kişi takip eden formülasyonun geçerliliğini kolayca gösterebilir; $\frac{d}{dt} |\bar{a}_n\rangle = - \sum_{m=0}^{m=N} \langle \Psi_n | \bar{\Psi}'_m \rangle |\bar{b}_m\rangle$. Bu evrimsel tipteki sıradan diferansiyel denklemini katı istikrarlı metodlar kullanarak anlık yüzey profili katsayı yöneylerini hesap etmek üzere kullanabiliriz.

Şu andaki sayısal yaklaşımda temel amaç parçacık akım yoğunluğunun açılım katsayılarını hesaplamaktır. Genel yol akım yoğunluğunun Hermite fonksiyonu açılımını yerine koymak ve elde edilen fonksiyonun $\delta \Xi(b_1, b_2, \dots, b_N)$ serbest değişim açılım katsayılarına $\{\delta b_1, \delta b_2, \dots, \delta b_N\}$ göre değişimini almaktır. Bir sonraki adım tüm serbest değişimlerin eş çarpanlarını sıfıra eşitlemektir. Bu bize $N+1$ Hermite

fonksiyonunun kullanıldığı $(N+1) \times (N+1)$ boyutlarında matris eşitliği verir. Gösterimi kolaylaştırmak için büyüme terimi göz ardı edilerek aşağıdaki şekilde ifade edilebilir:

$$\delta \Xi \{b_1, \dots, b_N\} \cong \delta \left\{ \begin{array}{l} -\Omega_b \sum_n b_n \int_{-\infty}^{+\infty} dx \{g'_\sigma \cos(\theta) + g_\sigma \sin \theta\} \Psi_n'' \\ +\Omega_b \sum_n b_n \left\{ (g_\sigma \cos \theta - g'_\sigma \sin \theta)_{x=+\varepsilon}^{x=-\varepsilon} - g'_g \right\} h_\sigma^{-1} \Psi_n(0) \\ -\Omega_b \sum_n b_n [g_g] \Psi_n'(0) \\ +\Omega_b \frac{h_\sigma}{2d_a \hat{M}_{long}} \sum_{n,m} b_n b_m \Psi_n'(0) \Psi_m'(0) \\ +\Omega_b \frac{1}{2d_a h_\sigma \hat{M}_{trans}} \sum_{n,m} b_n b_m \Psi_n(0) \Psi_m(0) \\ +\frac{1}{2\hat{M}_\sigma} \sum_{n,m} b_n b_m \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sqrt{1 + \tan^2 \theta} \Psi_n \Psi_m \end{array} \right\} = 0 \quad (87)$$

Sağ tarafın değişimi açılım katsayılarına göre alındığında ve δb_n değişimi ile ilintili terimler toplandığında aşağıdaki doğrusal cebirsel eşitlik elde edilir:

$$\left\{ \begin{array}{l} -\Omega_b \sum_n \delta b_n \int_{-\infty}^{+\infty} dx \{g'_\sigma \cos(\theta) + g_\sigma \sin \theta\} \Psi_n'' \\ +\Omega_b \sum_n \delta b_n \left\{ (g_\sigma \cos \theta - g'_\sigma \sin \theta)_{x=+\varepsilon}^{x=-\varepsilon} + g'_g \right\} h_\sigma^{-1} \Psi_n(0) \\ -\Omega_b \sum_n \delta b_n [g_g] \Psi_n'(0) \\ +\frac{\Omega_b h_\sigma}{2d_a \hat{M}_{long}} \sum_{n,m} [\delta b_n b_m] \Psi_n'(0) \Psi_m'(0) \\ +\left[\frac{\Omega_b}{d_a h_\sigma \hat{M}_{trans}} + \frac{h_\sigma^{-1}}{\hat{M}_\pm} \right] \sum_{n,m} [\delta b_n b_m] \Psi_n(0) \Psi_m(0) \\ +\frac{1}{\hat{M}_\sigma} \sum_{n,m} [\delta b_n b_m] \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sqrt{1 + \tan^2 \theta} \Psi_n \Psi_m \end{array} \right\} = 0 \quad (88)$$

Yukarıdaki homojen olmayan doğrusal eşitlikler barındıran uç değer problemi takip eden formda ifade edilebilir: $A.b=c$. Elementleri normalize ve orantılı genellenmiş hareketlilik matrisi A simetrik bir matristir. Ve yukarıdaki eşitlikten aşağıdaki şekilde bulunabilir.

$$A_{m,n} = \frac{\ell_o}{\hat{M}_\sigma} \left\{ \begin{array}{l} \frac{\bar{\Omega}_b \bar{h}_o \bar{\Psi}'_n(0) \bar{\Psi}'_m(0)}{\bar{d}_a \bar{M}^{long}} \\ + \left[\frac{\bar{\Omega}_b}{\bar{d}_a \bar{h}_\sigma \bar{M}^{trans}} + \frac{1}{\bar{h}_\sigma (\bar{M}_\pm)} \right] \Psi_n(0) \Psi_m(0) \\ + \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} \sqrt{1+y_x^2} \Psi_n(\bar{x}) \Psi_m(\bar{x}) \end{array} \right\} \equiv \frac{\ell_o}{\hat{M}_\sigma} \bar{A}_{m,n} \quad (89)$$

Doğrusal sistemin homojen olmayan kısmı \mathbf{c} ile ifade edilir ve kapiler kuvvet yöneyi olarak adlandırılır:

$$c_n \equiv g_\sigma^o \Omega_b \ell_o^{-1} \left\{ \begin{array}{l} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} \{ \bar{g}'_\sigma + \bar{g}_\sigma y_x \} / \sqrt{1+y_x^2} \bar{\Psi}''_n(\bar{x}) \\ - \bar{h}_\sigma^{-1} \left\{ (\bar{g}_\sigma \cos \theta - \bar{g}'_\sigma \sin \theta)_{x=-\varepsilon}^{x=+\varepsilon} + \bar{g}'_\sigma \right\} \Psi_n(0) \\ + [\bar{g}_g] \bar{\Psi}'_n(0) \end{array} \right\} \equiv g_\sigma^o \Omega_b \ell_o^{-1} \bar{C}_n \quad (90)$$

Artık homojen olmayan doğrusal denklem sistemini $\mathbf{b}=\mathbf{A}^{-1}\mathbf{c}$ şeklinde ifade edebiliriz. Son iki sistemi birleştirirsek aşağıdaki ifadeyi elde ederiz:

$$b_m = \left[\Omega_b \hat{M}_\sigma g_\sigma^o \ell_o^{-2} \right] \sum_n \bar{A}_{m,n}^{-1} \bar{C}_n \quad (91)$$

Sonuç olarak, kişi yüzey profilindeki değişimin oranı ile kapiler kuvvet yöneyi arasındaki ilişkiyi aşağıdaki şekilde ifade edebilir:

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{a}_k}{d\bar{t}} &= -\frac{\tau_o}{\ell_o} \Omega_b \sum_k b_m \langle k|m' \rangle \\
&= -\frac{\tau_o}{\ell_o} \left[\Omega_b^2 \hat{M}_\sigma g_\sigma^o \ell_o^{-3} \right] \sum_{m,n} \langle k|\bar{m}' \rangle \bar{A}_{m,n}^{-1} \bar{C}_n \\
&= -\sum_{m,n} \langle k|\bar{m}' \rangle \bar{A}_{m,n}^{-1} \bar{C}_n \\
\bar{a} &= -\bar{T} \bar{A}^{-1} \bar{C}
\end{aligned} \tag{92}$$

Burada $\bar{T}_{k,m} \equiv \langle k|\bar{m}' \rangle$ orantılı dönüşüm matrisini ifade eder. Yukarıdaki zorlu adi diferansiyel sisteminin zaman hesaplaması sayısal olarak yapılır. Değişkenler hesabı ile yapılan bilgisayar benzetimdeki temel zorluklar genelde homojen olmayan \bar{C} kısımda ve onun konjuge \bar{A} kısmında ortaya çıkmaktadır. Özellikle ilk integral yüksek dereceden Hermite fonksiyonlarında ($n \geq 30$) çok zorlu olmaktadır. Kişi eğer Gibbs yüzey serbest enerjisinin Wulff yapısındaki keskin uçları ifade etmeye kalkarsa problem sürekliliğin olmaması nedeniyle içinden çıkılmaz hal almaktadır. Bu zorluk sistemi köklerden ara parçalara bölerek ve peşinden Gauss-Legendre integrasyonu için parça başına 60 nokta ve yük kullanarak aşılmıştır. Bu modifikasyon bize çok güçlü ve hassas olmanın yanında zaman kullanımı yönünden de etkili integrasyon imkânı sağlamıştır. Elde edilen bu \bar{a} katsayıları ile yeni \bar{t} zamanında ortaya çıkan

yüzey profili ($y(x,t) = \sum_{n=0}^{n=N} a_n(t) \Psi_n(x)$) elde edilir.

Bolum 2.2.3'te elde edilen başlangıç yüzey normaline paralel olmayan tane sınırı oluklarının şekilsel evrimini hesaba katabilecek şekilde geliştirilmiş uç değer problemi ise $[-\infty \geq x \geq xtip]$ ve $[xtip \geq x \geq \infty]$ aralıklarında tanımlı olan iki sürekli ve tam fonksiyon setinin kullanıldığı karma bir yöntem ile çözülebilir. Bu fonksiyonlar sonsuza giderken ve $xtip$ noktasındaki üçlü kavşakta Dirichlet tipi sınır koşullarını sağlamak durumundadırlar. Yine yukarıdaki yöntem izlenerek, bu fonksiyon setleri ile açılan $J_\sigma^\pm(x)$ ve $y^\pm(x)$ standart minimizasyon yöntemleri ile belirlenebilecek bilinmeyen katsayılar içerirler. Ortonormal Laguerre fonksiyonlarının bu iş için yukarıdaki durumdan farklı olarak Hermite fonksiyonlarından daha uygun bir aday olduğu

görülmüştür (Oğurtanı, 2007). (56) no'lu denklemin çözümü ile birlikte gelen evrimsel tipteki adi diferansiyel denklemin zaman entegrasyonu yapılır ve yüzey profilini veren $|\bar{a}\rangle$ katsayı yöneyi elde edilir. Bu entegrasyon için ikinci dereceden Gear (1971) algoritması en iyi çalışan yöntem olarak bulunmuştur. Yüzey katılığının eksi değerler aldığı durumlarda sistemin oldukça kararsız bir hal aldığı gözlemlenmiştir. Bu durumdan kaynaklanan zorluklar yine yukarıda belirtildiği gibi entegrasyon alanını entegrendin köklerinden oluşan alt bölgelere ayırıp, her bölgede 60 noktalı Gauss-Legendre alan hesabı (quadrature) kullanıldıktan sonra bunları toplamak sureti ile aşılmıştır. Bazı kritik durumların dışında çoğu deneyde 15-20 dereceden Laguerre fonksiyonu ve nispeten kısa entegrasyon zaman basamakları $\Delta t \leq 10^{-6} - 10^{-8}$ kullanmak oldukça hassas tane oluğu topografyaları elde etmek için yeterli olmuştur.

BÖLÜM 4

BULGULAR VE TARTIŞMA

Yukarıda özetlenen kuramsal çalışmaların amacı gerçek bir fiziki model oluşturmak, normalize edilmiş ve ölçeklenmiş bilgisayar benzetim deneyleri düzenleyerek malzeme özelliklerinden bağımsız bulgular elde etmektir. Bu bulgular bize, proje başlığında belirtildiği gibi, kapiler, elektrogöç ve kalıntı gerilmeler sebebiyle mikro elektronik devrelerde kullanılan ince metalik filmlerde servis esnasında oluşan şekil değişimi ve bunun sonucunda ortaya çıkan tahribatı inceleme, bunların yaşam sürelerini belirleme imkânı tanır.

4.1. Tek kristal ince filmler

4.1.1. Tek kristal metalik ince filmlerde tek eksenli sıkma gerilimi nedenli yüzey çatlaklarının ve düzensizliklerinin elektrogöç ile iyileşmesinin yöne bağımlılığı

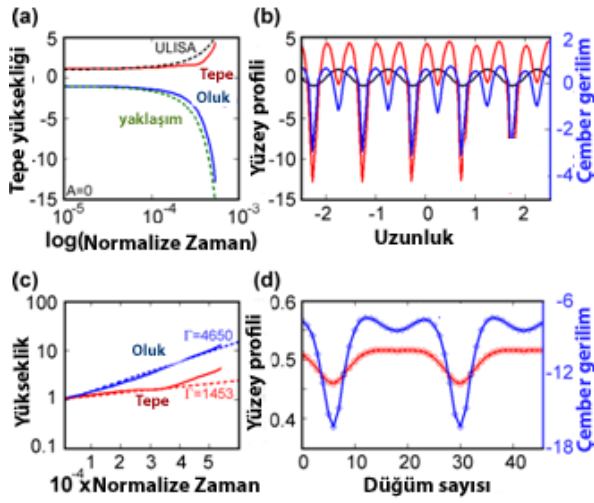
Metalik ince film yan yüzeylerinin, uygulanan gerilim ve elektrik alan altında yüzey sürüklenme difüzyonu nedenli, şekilsel evrimi bilgisayar benzetimi ile ele alınmıştır (Oğurtanı, 2009-2). Uygulanan sıkma geriliminin şekilsel kararsızlığın ana nedeni olduğu gözlemlenmiştir. Araştırmalarımızda bu sonuçtan elastik gerinme enerjisi yoğunluğundan (Σ ; elastic strain energy density) ziyade elastik çift kutuplu tensör etkileşimlerinin (Ξ ; elastic dipole tensor interaction) sorumlu olduğu saptanmıştır.

Bu çalışmada malzemenin alttan ve üstten yüksek dirençli bir kaplama ile kaplandığı ve yüzey difüzyonuna el verecek serbest bir yan yüzeyi olduğu varsayılmıştır.

Çalışmada tek eksenli (sıkma ve çekme) gerilimi, σ , ve karşılık gelen Σ , Ξ , parametreleri ile elektron rüzgarı yoğunluğu χ , ve sürüklenme difüzyonu yön

bağımlılığını ifade eden Φ (dönme açısı) ve A (yön bağımlılık şiddeti) parametrelerinin 15 farklı kombinasyonu göz önüne alınmıştır. Bu güçlere maruz bırakılan ince filmin yan yüzeyi sinüs dalgası şeklinde hazırlanmış uçlarına ise periyodik sınır koşulları tatbik edilmiştir. Benzer şekilde yüzeydeki sinüs dalgası çeşitli dalga boyu ve genliklerde test edilmiştir. Burada sadece dalga boyu 1 ve genliği 0.01 olan deneylerin sonuçları irdelenecektir $\{\lambda=1, a=0.01\}$.

Yön bağımlı deneyleri ele almandan önce, malzemenin eş yönlü ve sadece sıkma gerilimine maruz kaldığı özel bir durumu ele alalım. Bu deneyde yüzey titreşiminin dalga boyu $\lambda=1 \rightarrow k=2\pi$ ve genliği $a=0.01$ dir. Uygulanan gerilim parametreleri $[\Xi=-10, \Sigma=0.04]$, mikrometre boyuttaki bakır ince film için, kabaca $\sigma_o = -95$ MPa büyüklüğünde bir gerilime karşılık gelmektedir.



Şekil 4.1.1.1. Eş yönlü yüzey difüzyonu ve sıkma gerilimi altında yan yüzeyin evrimi: a) tepe ve oluk noktalarının hareketi, b) başlangıç profili, sonuç profil ve çember gerilimi, c) yüzey dinamiğinin kinetik gelişimi, d) tepenin ikiye yarılması hamlesinin gösterimi.

Şekil 4.1.1.1 (a) oluk oluşumunun kinetiğini logaritmik zamana karşı göstermektedir. Bu grafikte oluk ucunun hızla gelişmesi sonucu çatlak şekilli yapının oluşumunun kinetiği gözlemlenmektedir. Doğrusal ilişkilendirme analizi (linear regression) sonucu oluk hareketinin büyüme hızının $\Gamma \approx 4650$ değerini alarak teorik ergiyi takip ettiği, buna karşın tepe kinetiğinin teoriden büyük sapma gösterdiği görülmüştür (şekil 4.1.1.1 (c)). Şekil 4.1.1.1 (d) de dikkat çekilen tepenin ikiye yarılması ilk olarak Tomar ve diğerleri (2008) tarafından gözlemlenmiştir. Tepe kinetiğinin ilk safhasında büyüme hızı $\Gamma \approx 1453$ ve ikinci safhadaki büyüme hızı ise

oluk hızı ile nerdeyse aynıdır: $\Gamma \approx 4650$. Tepe kinetiğindeki iki safhayı birbirinden ayıran keskin dirsek tepenin ikiye ayrılması hamlesi ile bağlantılıdır.

Aşağıda, sıkma gerilimi altındaki yüzey merkezli kübik (YMK) kristale muhtelif düzlemlerde $\{n=2, 4, 6\}$, değişik açılarda tatbik edilen elektrik alanının etkileri özetlenmektedir.

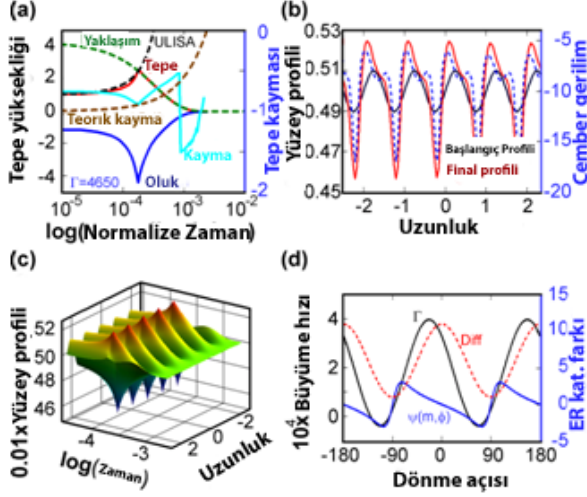
4.1.1.1. YMK' da 2 bükümlü simetri düzlemi: bölge ekseni <110>

Bu bölümde $\{110\}$ düzlemindeki ince film üzerinde farklı deney parametreleri kullanılarak yapılmış deneyler ele alınacaktır.

Şekil 4.1.1.2 de gösterilen sonuçlarda dalga boyu, $\lambda=1$ ve dalga genliği, $a=0.01$ olan yüzey dalgası $A=10$ şiddetinde yön bağımlı yüzey difüzyonuna tabiidir. Deneyde elektron rüzgarı (ER) yoğunluğu faktörü $[-\psi(m, \Phi)]$ negatif minimum verecek şekilde optimize edilmiş dönme açısı $\Phi=75^\circ$ alınmıştır. Deneyler süresince ince film tek eksenli sıkma gerilimine tabi tutulmuştur, malzeme olarak eni $w_0=1\mu\text{m}$ olan bakır düşünüldüğünde uygulanan deney parametreleri $\Sigma=0.04$ ve $\Xi=-10$ için $\sigma_{Cu} = -95\text{MPa}$ 'la denk gelmektedir. Başlangıçta sadece gerilim uygulanmış ve sıkma geriliminin sinüs dalgası üstündeki zararlı etkileri gözlemlenmiştir. Elektrik alan uygulamadan önce keskin olukların oluşumu açık bir şekilde gösterilmiştir.

Tepe hareketinin normalize edilmiş zamanla değişim grafiği teorik eğriden sapma göstermektedir, bu sapma sıkma geriliminin yön bağımlı difüzyon katsayısı nedeni ile tepeyi anoda doğru kaydırmasından kaynaklanmaktadır.

Tepeciğin büyüme hızı doğrusal ilişkilendirme analizi ile $\Gamma_{reg}=-2943$ bulunmuştur. Bu değer teorik olarak hesaplanan ile $\Gamma_{theo}=-2876$ değerine oldukça yakındır. Benzer şekilde oluğun büyüme hızı ise $\Gamma_{reg}=-2943$ olarak bulunmuştur.



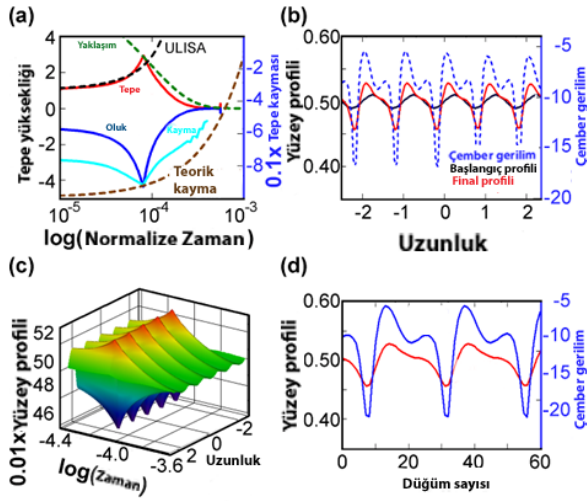
Şekil 4.1.1.2. $A=10$; $\Phi=75^\circ$ olan (110) düzleminde sıkma gerilimi ($\Xi=-10$) sonrası elektrostatik alan uygulanmış ($\chi=40$) yan duvarın morfolojik evrimi:

a) tepecik ve oluk noktaları hareketleri;
 b) yüzey profili, çember gerilimi dağılımı ve çatlak oluşumu; çatlak gelişimi elektron rüzgarı ile kesilmiştir; c) yüzeyin 3 boyutlu morfolojik gelişimi; d) büyüme hızı sabiti Γ , difüzyon yön bağımlılık katsayısı $(1+A\cos^2\Phi)$, ve elektron rüzgarı yoğunluğu faktörünün $[-\psi(m, \Phi)]$ dönme açısına (Φ) göre değişimi.

4.1.1.2. YMK' da 4 büklümlü simetri düzlemi: bölge eksen $\langle 100 \rangle$

Bu bölümde yapılan deneyde deney parametreleri eğilme açısı $\phi = 30^\circ$ dışında tamamen aynı tutuldu ($\Xi=-10$, $\chi=40$, $A=10$). Şekil 4.1.1.2 ve Şekil 4.1.1.3 deney sonuçlarında pek kayda değer değişiklik olmadığını gösterir. Tek değişiklik büyüme hızı sabitindeki artıştır: $\Gamma(30^\circ; n=4) \approx 1041$ ve $\Gamma(75^\circ; n=2) \approx 2943$. Bu sonuç bozunma zamanında bir mertebe azalmaya neden olur: $t_f(30^\circ; n=4) = 5.5 \times 10^{-4}$, a karşın $t_f(75^\circ; n=2) = 3.15 \times 10^{-3}$.

Bu sonuç gösteriyor ki yüksek genlik değerlerindeki yüzey dalgaları, $a \geq 0.05$, elektrogöç rejiminde kısmen doğrusal istikrarsızlık analizi ile elde edilen sonuçlara uygundur.



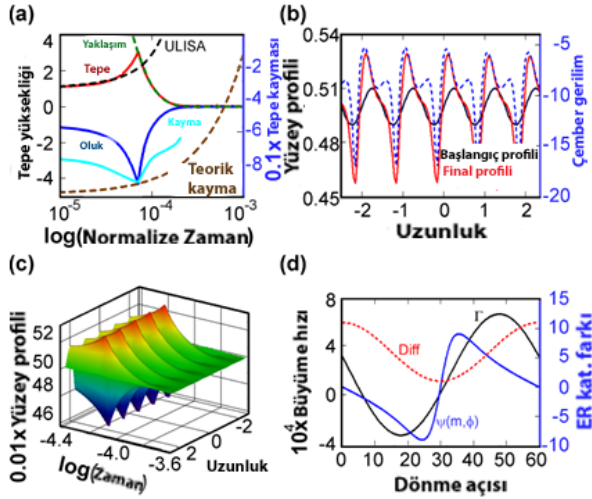
Şekil 4.1.1.3. Elektrogöç kararlı bölgesinin çatlak iyileşmesi üzerindeki etkisi: (100) düzleminde $\Phi=30^\circ$ ve $A=10$ iken, $\Xi=-10$ sıkma geriliminden sonra elektrostatik alan uygulanması ($\chi=40$).

a) ER tatbikinden sonra oluk gelişimindeki ani duruş ve gerileme; b) yüzey profili ve çember geriliminin gelişimi; c) morfolojik gelişimin 3 boyutlu gösterimi; d) tepenin ikiye bölünme anında yüzey profili ve çember gerilimi.

4.1.1.3. YMK' da 6 büklümlü simetri düzlemi: bölge eksenine $\langle 111 \rangle$

Yüzey normali $\{111\}$ olan $\langle 111 \rangle$ bölge eksenine, en yüksek simetri elemanına sahip olan düzlemdir: $C_6 \in \{1\bar{1}0\} \cup \{\bar{1}\bar{1}2\}$ bu düzlemlerin her biri morfolojik evrim sürecinde aktif rol alırlar. Şekil 4.1.1.4. (d) de yon bağımlı difüzyon katsayısı $D(m, \Phi)$, elektron rüzgarı yoğunluğu faktörü $-\psi(m, \Phi)$, ve büyüme hızı sabiti $\Gamma(\Xi, \chi, m, \Phi)$ eğim açısına bağlı olarak gösterilmiştir [$0 \leq \Phi \leq 2\pi/n = 60^\circ$]. Uygulanan sıkma gerilimi $\Xi = -10$ ve elektron rüzgarı yoğunluğu şiddeti $\chi = 40$ diğer deneylerle aynı tutulmuştur. Eğim açısı minimum büyüme hızı sabitini sağlayan $\Phi = 17.8^\circ$ açısına yakın olarak $\Phi = 20^\circ$ alınmıştır. Şekil 4.1.1.4 (c) de yüzeyin morfolojik evriminin 3 boyutlu gösterimi verilmiştir. Şekil 4.1.1.4 (b) den keskin oluk ucundan çatlak oluşumunu görülebilir.

Şekil 4.1.1.4 (a) da teorik ve doğrusal ilişkilendirme ile elde edilmiş eğriler sırasıyla noktalı siyah ve yeşil eğrilerdir. Siyah teorik çizgi $\Gamma_{\text{theo}} = 10519$ büyüme hızı sabitine denktir ve sistem başlangıçta teori ile uyumlu davranırken kararsız bölgeye girdiğinde çok daha yüksek büyüme hızı sabitlerine ulaşmaktadır: $\Gamma_{\text{reg}} = 22060$. Bu değerdeki keskin değişim keskin oluk ve tepe uçları nedeniyle ortaya çıkmaktadır.

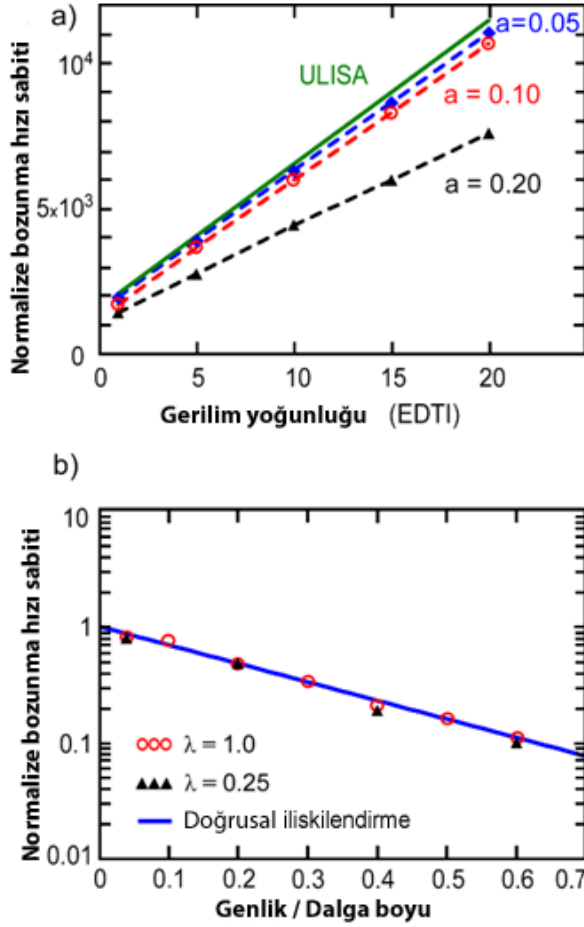


Şekil 4.1.1.4. Elektrogöç kararlı bölgenin, çatlak iyileşmesi üzerindeki olumlu etkisi: $\Phi=20^\circ$ ile (111) düzlemi üzerine kurulmuş $A=10$ şiddetinde yöne bağımlı difüzyon katsayısına sahip numunenin $\Xi=-10$ sıkma gerilimine tabi tutulması ve $\bar{t}_s = 7.1 \times 10^{-5}$ zamanından sonra $\chi=40$ şiddetinde elektron rüzgarının sisteme girilmesinin etkileri.

4.1.1.4. Bozunma hızı sabitinin dalga genliğine bağımlılığı

Yöne bağımlı difüzyon sabitine sahip $1\mu\text{m}$ ene sahip ince metalik film üzerinde geniş bir yüzey dalgası genliği aralığında çekme gerilimi altında $\{1 \leq \Xi \leq 20\}$ yapılan deneylerin sonucunda elde edilen oluk ve tepeler için bozunma hızı sabitleri ($-\Gamma$) Şekil 4.1.1.5'te toplanmıştır. Bozunma hızının uygulanan gerilime bağımlılığı yüksek genlik $a \geq 0.20$ değerlerinde bile doğrusal kalmıştır, fakat doğrusal istikrarsızlık teorisine göre bir miktar düşük değerler elde edilmiştir. Şekil 4.1.1.5(a) da bakır test numuneleri varsayılarak 100-150 MPa [$\Xi \rightarrow 10-15$] gerilim değerlerinde yapılan deneylerin doğrusal istikrarsızlık analizinden sapmaları gözlemlenebilmektedir.

Şekil 4.1.1.5 (b) de gösterilen verilerde çok geniş bir genlik aralığını yansıtır $\{0.01 \leq a \leq 0.60\}$. Doğrusal ilişkilendirme bize şu analitik ifadeyi verir: $\Gamma = -\left(6.599 / \bar{\lambda}\right)^4 \exp(-0.92a / \lambda)$. Tahmin edilen tüm bu davranışlar ince filmin sonlu boyuna şiddetli bağımlılık gösterir.



Şekil 4.1.1.5.

a) Bozunma hızı sabitinin uygulanan gerilim yoğunluğu parametresine bağlı değişimi.

b) Seçilmiş bozunma hızı sabitinin farklı iki dalga boyuna sahip kapıları bölgeden alınmış boyutlandırılmış genlik verisine bağlı değişiminin yarı logaritmik grafiği.

Bu çalışmada uygulanan elektrostatik alanın çatlak ve yüzey dalgalarında iyileştirici veya tahripkâr sonuçları bilgisayar benzetim aracılığı ile incelenmiştir. Sonuçlar açıkça gösteriyor ki uygulanan elektrostatik alan ile kristal yönelimi arasında uygun açı seçilmesi önemlidir. Aksi durumda, açının yanlış seçilmesi yüzey dalgalarında iyileşme yerine çatlak oluşumunu hızlandırır etki göstermektedir. Bu anlamda, doğrusal istikrarsızlık analizi teorisi uygulanan gerilim ve elektrostatik alan altında uygun açının seçimi hakkında önemli ipuçları vermektedir. Deneyler sonucunda normalize yıkım zamanı hakkındaki gözlemlerimizi özetlersek: $(111)-[\bar{1}10]$ dokusuna sahip ince filmlerde $[\bar{1}10]$ doğrultusunda elektrostatik alan uygulandığında yan yüzey kararlılığı $\Rightarrow \bar{t}_F \cong 3.55 \times 10^{-3}$ diğer tüm olasılıklara nazaran yüksektir: $(\bar{1}10)-[110] \Rightarrow \bar{t}_F \cong 2.50 \times 10^{-4}$, $(001)-[100] \Rightarrow \bar{t}_F \cong 5.27 \times 10^{-4}$. Eğer malzeme eş yönlü difüzyon katsayısına sahip ise elektrostatik alanın yüzey pürüzleri üzerinde hiçbir etkisi yoktur.

4.1.2. Kapsüle edilmiş ince metalik filmlerde tane içi boşlukların kapiler, elektrogöç ve nispeten dengeli ısı akışından kaynaklı ısıl gerilme gradyanının etkisi altında yüzey sürüklenme difüzyonu ile şekilsel evrimi

Bu başlık altındaki çalışmalara TÜBİTAK tarafından desteklenen 104M399 kodlu proje içerisinde başlanmış, sonuçların tek bir makale olarak yayınlanması planlanmıştır. Bu yüzden yapılan çalışma, adı geçen projenin sonuç raporunda ayrıntılı olarak ele alınmış, referanslar kısmında 'yayına iletilen makale' olarak geçmiştir. Fakat projenin tamamlanmasının ardından, dergi hakemlerinin istedikleri değişiklikler sonucunda makale teori (Oğurtanı, Akyıldız 2008-1) ve uygulama (Oğurtanı, Akyıldız 2008-2) olarak iki bölüme ayrılmıştır. Elde edilen sonuçların bir kısmı Materials Research Society'nin 2007 güz dönemi toplantısında, 'Theory, Modeling and Numerical Simulation of Multi-Physics Materials Behavior' sempozyumunda sunulmuş ve bu sempozyumda yapılan sunumların toplandığı hakemli dergide yer almıştır (Oğurtanı, Akyıldız 2008-3).

4.2. Çift kristal ince filmler ve tekil yüzeylerde tane sınırı oluklaşması

Tekil yüzeylerdeki tane sınırı oluklaşması Rabkin ve diğerleri (2000) ve Klinger ve Rabkin (2001) tarafından her biri değişik eş yönlü yüzey enerjilerine sahip, faset oluşmuş ve pürüzlü kalmış bölgeler olarak tanımlanarak çalışılmıştır. Yakın geçmişte Zhang ve diğerleri (2004) ve Xin ve Wong (2003) yöne bağımlı yüzey serbest enerjisi yerine yüzey katılığını kullanmayı öngörmüşlerdir. Ramasubramaniam ve Shenoy (2005) ise, yüzey biliminde ve sürekli ortamlar mekaniğinde son derece popüler olan Herring formülüne dayanan termokinetik tanımlamalar kullanarak, değişkenler hesabını devreye sokmuş ve faset oluşturan tane sınırlarının gelişme kinetikleri için bir zayıf çözüm elde etmek yönünde ciddi çabalar sarf etmişlerdir. Xin ve Wong (2003) ve Min ve Wong (2006) yüzey katılığındaki yöne bağımlılığın Mullins'in hız sabitine etkisi üzerine ilginç bir gözlem yapmışlardır.

Daha sonraları Oğurtanı (2007), Ramasubramaniam ve Shenoy'dan (2005) uyarlanan Gibbs serbest yüzey enerjisi fonksiyonu ile 4 katlı simetri için aynı etkiyi

gözlemlemiştir. Oğurtanı (2007) bu gözlemleri bir araya getirdiği analitik teoride yöne bağımlı yumuşak tane sınırı oluklarının, Mullins hız sabiti (B)'nin yön bağımlılığı katsayısı (Ψ) kullanılarak ($B-\Psi$) ayarlandığı ve eğim parametresindeki dihedral açının (yön bağımsız) yön bağımlı durumdaki karşılığı ile değiştirildiği '*değiştirilmiş Mullins*' fonksiyonu ile ifade edilebileceğini göstermiştir. Oğurtanı ve diğerleri (2008), ve Oğurtanı (2009-1) sonraki dönemlerde başlangıç yüzey normaline paralel olmayan tane sınırı oluklarını da kapsayacak şekilde geliştirilen zayıf çözümü kullanarak, teorinin değişik malzemelerle yapılan laboratuvar deneylerini açıklamakta ne derece başarılı olduğunu göstermişlerdir.

4.2.1. Dirac δ tipi yön bağımlı yüzey katılığına sahip yüzeylerde asimetric tane sınırı oluklaşmasını ifade eden Dirichlet uç değer problemi

Bu çalışmada (Oğurtanı, 2007) zayıf çözüm kavramı (değişkenler hesabı uygulaması) kullanılarak yöne bağılı yüzey katılığına (anisotropic surface stiffness) sahip ince filmlerde Dirichlet sınır koşulu altında asimetric ısı tane sınırı oluklaşması incelenmiştir. Bu amaç için Galerkin fonksiyonel uzayı ile birleştirilmiş, genellenmiş bir Rayleigh-Ritz (RRG) metodu, genişletilmiş ve değiştirilmiş Laguerre fonksiyonları kullanılarak tertip edilmiştir. Kuvvetli çözüme (front-tracking method) daha çok benzeyen bu yeni melez RRG yaklaşımı yöne bağılı yüzey katılığında kaynaklı analitik çözümsüzlüğe tabii olan oluk kökü topolojisinin saf özelliklerini önceki yaklaşımdan (Oğurtanı, 2006-3) daha hassas olarak ortaya çıkartmıştır.

Denklem (56) da kullanılan g_σ , yöne bağımlı yüzey serbest Gibbs erkisi aşağıdaki gibi bir fonksiyon ile ifade edilebilir:

$$g_\sigma(c, \theta, \phi, m) = \left[1 - c + c \left\{ \left| \sin \frac{m}{2}(\theta - \phi) \right| + \left| \cos \frac{m}{2}(\theta - \phi) \right| \right\} \right] \quad (93)$$

Bu formül üst yüzeyleri iki- $\langle 110 \rangle$, dört- $\langle 100 \rangle$ ve altı- $\langle 111 \rangle$ bükümlü rotasyonel simetriye sahip ince filmlerin bilgisayar benzetiminde kullanılabilir. Burada c yöne

bağımlılığın şiddeti belirleyen katsayı $0 \leq c \leq 1$, m ise yarım büküm sayısıdır $\{n \equiv 2m = 2, 4, 6\}$. Denklem faset yönlerinde $\{\phi + n\pi/2, n = 0, 1, 2, \dots\}$ zirve yaparken atlama süreksizliği $\{2c \cos\phi\}$ de gösterir. Denklem θ 'ya göre ikinci dereceden türevi bahsedilen zirve tekillikleri haricindeki bölgelerde kolayca hesaplanabilir. Asadaki formül bu şekilde hesap edilen, zirve tekilliklerinde Dirac delta fonksiyonu özelliği gösteren, bunun yanı sıra her yerde sürekli ve sonlu olan yüzey katılığıdır $\tilde{g}_\sigma(\theta, \phi) \equiv g_\sigma(\theta, \phi) + \partial_{\theta\theta} g_\sigma(\theta, \phi)$:

$$\tilde{g}_\sigma(c, \theta, \phi, m) = (1-c) \left[1 + \frac{c}{1-c} \left(1 - \frac{m^2}{4} \right) \left\{ \left| \sin \frac{m}{2}(\theta - \phi) \right| + \left| \cos \frac{m}{2}(\theta - \phi) \right| \right\} \right] \quad \forall c \neq 1 \quad (94)$$

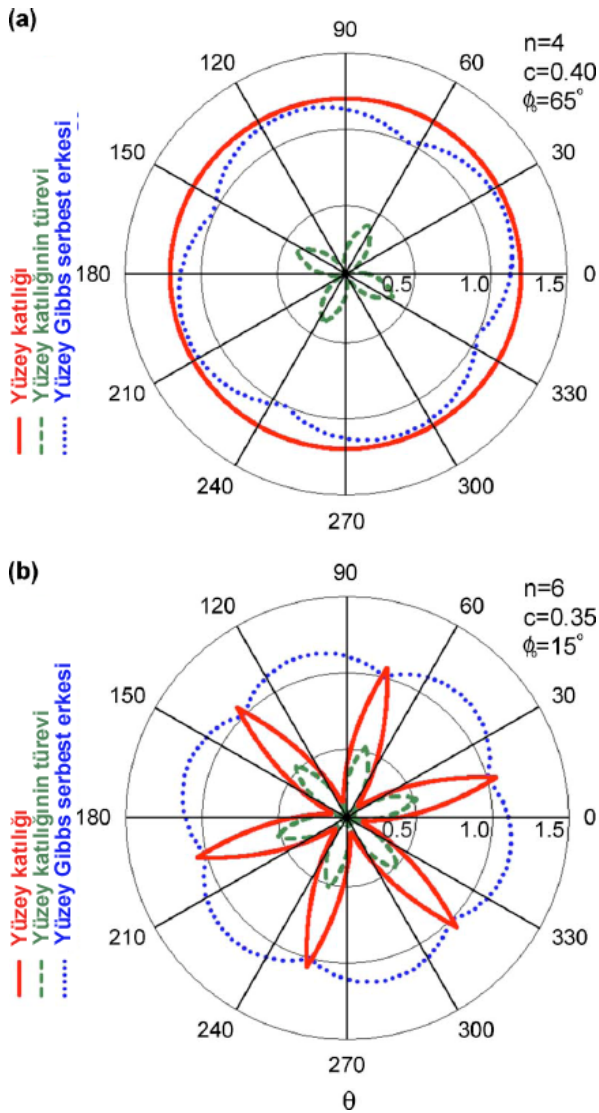
Zirve tekilliklerindeki yüzey katılığı Heaviside basamak fonksiyonu ve Dirac delta dağılım fonksiyonu arasındaki diferansiyel bağıntıdan $dH(x)dx \equiv 2\delta(x)$ faydalanılarak kolayca hesap edilebilir:

$$\tilde{g}_\sigma(c, \theta, \phi, m) = 1 + (mc) \delta \left[\theta - \left[\phi + \frac{k\pi}{m} \right] \right] \quad \forall k = 0, 1, \dots, (2m-1) \quad (95)$$

Bu bağıntı mc ile verilen Dirac delta fonksiyonunun genliğinin denge kristal şekli üzerindeki faset uzunluğuna denk geldiğini gösterir ki durum dört bükümlü, $n=2$; $m=4$, simetri için Ramasubramaniam ve Shenoy (2005) ve Xin ve Wong (2003) tarafından da belirtilmiştir. Şekil 4.2.1.1'de bu fonksiyonların tipik davranışları resmedilmiştir.

Yüzey Gibbs serbest erkesi ve katılığının bu fonksiyonlarla modellenme ve zayıf çözüme bütünleştirilmesi ile elde edilen sonuçlar atomik güç mikroskobu ve taramalı tünel mikroskobu gözlemleri ile uyum halindedir. Normalize edilmiş dikine hareketliliğin (longitudinal mobility) düşük değerlerinde Mullins'in $t^{1/4}$ ölçekleme yasasından ciddi sapmalarla birlikte fasetimsi yapılar gözlemlenmiştir (quasifaceting). Hareketliliğin bu değerlerinde kinetik davranış topografik oluşumda enerjik davranışa baskın gelmektedir. Çok yüksek dikine hareketlilik değerlerinde ise düzgün ve

simetrik oluklar, dört katlı simetri için, durağan durumda, değiştirilmiş Mullins fonksiyonu ile oldukça hassas biçimde ifade edilebilmişlerdir. Bu fonksiyon elde edilirken oran sabiti yön bağıntı katsayısı ile ayarlanmış, eğim parametresinin hesabında ise dihedral açının tümleyeni devreye girmiştir. Yeni geliştirilen analitik teori bahsedilen gözlemi tamamen desteklemekte, sırt oluşumu ve nüfuz derinliği hesabı için yön bağımlı sabitlerin eşik seviyesinin nicel olarak belirlenmesini sağlamaktadır.



Şekil 4.2.1.1. Yüzey Gibbs serbest erkesi ve yüzey katılığı tipik davranışları.

Yüzey merkezli küpte;

a) dört bükümlü ($n = 4$, $\phi_0 = 65^\circ$, $c=0.40$),

b) altı bükümlü ($n = 6$, $\phi_0 = 15^\circ$, $c=0.35$)

simetri düzlemleri için, anormal kararsızlık rejiminden önceki davranışlar.

Burada Dirac delta fonksiyonu tepeleri,

$$\phi_n = \phi_0 + k2\pi / n \quad \forall k = 0, 1, \dots, (n-1)$$

olarak verilen zirve yönlerinde düz radyal çizgilerdir.

4.2.2. Yöne bağılı yüzey Gibbs serbest enerjisine sahip ince filmlerde eğik bir tane sınırı oluşunun şekilsel evrimi

Bu çalışmada (Oğurtanı, Akyıldız, Oren, 2008) zayıf çözüm kavramı (değişkenler hesabı uygulaması) yöne bağılı yüzey Gibbs serbest enerjisine sahip ince filmlerde difüzyonun gerçekleştiği yüzeyde iki kristali, yüzey normaline paralel olmayan durumları da kapsayacak şekilde, belirli bir açı ile birbirinden ayıran tane sınırı oluşunun şekilsel evrimini hesaba katabilecek şekilde geliştirilmiştir.

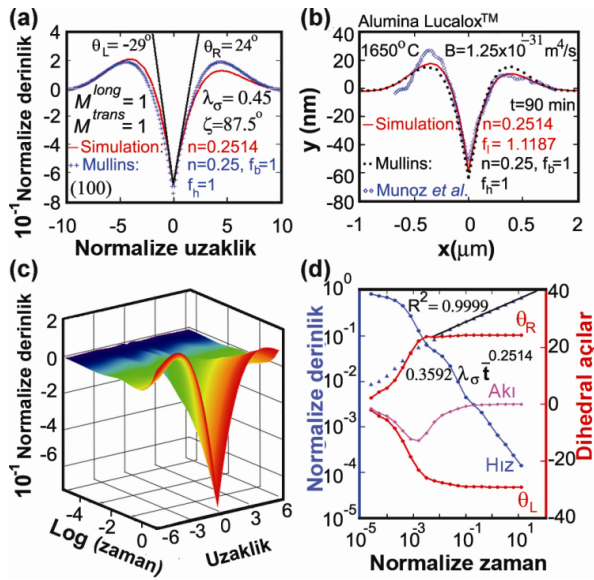
(53-56) ve (93-95) numaraları ile verilen denklemler incelendiğinde, sistemin operasyonel özelliklerinin üç kategoride toplanabileceği görülür: kinetik özellikler, fizikokimyasal özellikler ve mikro-yapısal özellikler. Kinetik özellikler ya da parametreler izotermal ve izobarik olarak çalışan bir sistem için sabittir; bunlar benzetim deneylerinin girdi parametrelerinin bir kısmını oluştururlar. Dikey ve yatay kurmaca mobiliteler $[\tilde{M}_{trans}, \tilde{M}_{long}]$ bunlar arasındadır ve bu çalışmada $\subset [1, 1000]$ aralığında değişmektedirler. Fizikokimyasal özellikler operasyon esnasında zaman ve mekâna göre değişim gösterebilirler, ıslanma sabiti, yüzey Gibbs serbest enerjisi ve türevleri bu türden özelliklerdir. Bunların değişme tarzları sistemin içsel özelliklerince dikte edilir; analitik olarak ise Wulff açısı ile haritalanabilir. Bu harita çift kristalden meydana gelen bir sistem için mikro-yapısal parametrelerce belirlenir. Bu parametreler yöne bağımlılık şiddeti $c^{\pm} \subset [0 - (0.361, 1, 4,)]$, simetri ekseninin x-ekseni ile yaptığı açı $\phi^{\pm} \subset [0^{\circ} - (60^{\circ}, 90^{\circ}, 180^{\circ})]$, büküm sayıları $m^{\pm} \subset [3, 2, 1]$ ve tane sınırının x-ekseni ile yaptığı açıdır $\zeta \subset [0^{\circ} - (60^{\circ}, 90^{\circ}, 120^{\circ})]$. Özetle yatay bir serbest yüzeyde biten eğik bir tane sınırına sahip bir çift kristal yapı başlangıç konfigürasyonu için 9 parametreye ihtiyaç duyar. Bunlara, normalize edilmiş programa doğrudan girmeyen fakat kurmaca ve gerçek mobiliteler arasında bağ kuran, doğal uzunluk ölçütü olarak film kalınlığı da $[h_o \cong 0.3nm]$ eklenebilir.

Yukarıda bahsedilen parametre uzayında birçok bilgisayar benzetim deneyi yapılmış, kritik görülen bazı durumlar makalede yer almış, detaylı analizleri

verilmiştir. Yöntemin testi için literatürde deneysel çalışan gruplar tarafından rapor edilmiş bazı oluk profillerinin de analizleri yapılmıştır.

Çok kristalli alüminada (Lucalox™) ısıtılma sınırı oluklaşması Munoz ve diğerleri (2004) tarafından çalışılmıştır. 0.5 µm kalınlığına getirilen numuneler 1650 °C'de 30 dakika ısıtılma işleminden geçirilerek görünür ışık mikroskobu (GIM) ile haritalanır. Daha sonra 1650 °C'de 1 saat bekletilir. GIM haritası daha sonraki AGM ölçümleri için kılavuz vazifesi görür. AGM analizinde yay sabiti 0.32, sonda ucunun yarıçapı ise 40 nm'dir, bu durum 40 nm civarında oluk kokunun yuvarlaşmasına neden olur. Çalışmada (Munoz ve diğerleri, 2004) ne diyagonal yöndeki azami tarama hatasından ne de dihedral açı ölçümlerinde AGM sondasından kalan artıklardan kaynaklanan hatalardan bahsedilmemiştir. Shin ve diğerleri (1998) tarafından, aynı malzeme üzerinde 25 nm uç yarıçapı ve 70°'lik koni açısına sahip AGM sondası ile yapılan çalışmalar incelenerek Munoz ve diğerlerinin (2004) yapmış olduğu çalışmadaki oluk derinliği ölçümlerinde $\Delta d \approx 5-10$ nm civarında bir hata öngörülebilir. Deneysel verileri, bilgisayar benzetim deneyleri ya da Mullins'in (1957) analitik kuramı ile karşılaştırırken bu nokta göz önünde tutulmalıdır. Munoz ve diğerlerinin (2004) Şekil 4(a)'sında verilen, durağan bir tane sınırından AGM ile ölçülen asimetrik oluk profili, sayısallaştırılarak Şekil 4.2.2.1(b)'ye aktarılmıştır. İki tepe arası mesafesi $w \approx 0.68$ µm, ve sağ ve sol tepelik yükseklikleri $d_{sağ} \approx 60$ nm, $d_{sol} \approx 77$ nm bulunan oluşa Mullins'in eş yönlü oluk genişliği formülünün (Mullins, 1957) doğrudan uygulaması B -oranı $B = \ell_o^4 / \tau_o$ için 8.8×10^{-32} m⁴/s ön değerini verir. Rapor edilen dihedral açılardan $\phi_{sol} = 69^\circ$, $\phi_{sağ} = 74^\circ$, ıslanma parametresi $\lambda = 0.317$ ve tane sınırı eğimi $\zeta = 87.25^\circ$ olarak hesap edilir. Shin ve diğerlerinin (1998) yaptığı çalışmalara göre, sıcaklıktaki veya ölçüm zamanındaki azalma ölçülen dihedral açı değerlerini artırır (ıslanma parametresini düşürür). Rapor edilen zaman bağıntısı, bilgisayar benzetimi ile elde edilen ve Şekil 4.2.2.1(c)'de verilen kinetik diyagram ile uyum içindedir. Bu diyagramdan tüm dihedral açıların, ıslanma parametresi ve eğilme açısı tarafından belirlenen durağan bir değere ulaşana kadar düzgün bir artış gösterdikleri gözlemlenir. Sıcaklık bağıntısı, yüzeyin Gibbs serbest enerjisindeki, tane sınırına nispeten, yüksek entropi terimi ile yakından ilintili olabilir. 1643-1873 °K'de rapor edilen ortalama dihedral açı (Shin ve diğerleri, 1998) 130°, 0.42 ye yakın bir

ıslanma parametresine denk düşer ki bu 1600°C 'de bir saat tavlanan numunenin değerlerine, $2\phi = 124^{\circ}$, $\lambda = 0.465$ yakındır.



Şekil 4.2.2.1. Eş yönlü yüzey katılığına sahip eğik asimetric ısıtılma sınırı oluşunun şekilsel evrimi. (a) Normalized edilmiş ve ölçeklenmiş zaman ve uzay tanım kümesinde Mullins'in profil fonksiyonu ile en iyi örtüşen bilgisayar benzetimi sonucu. (b) Çok kristalli alümina için (Lucalox™) Munoz ve diğerlerinin (2004) Şekil 4(a) ile verdiği AGM ölçümlerinin sayısallaştırılmış hali ve gerçek uzay ve zaman tanım kümesi içerisindeki bilgisayar benzetimi sonucu. (c) Buradaki kinetik veri, deneyin Mullins'in $\frac{1}{4}$ zaman üssüne uyduğunu gösterir. (d) Oluk derinliği, tümler dihedral açılar, tane sınırı ucunun hızı ve yatay akının zamana göre değişim grafikleri.

Gerçek uzay ve zaman tanım kümesi içerisindeki Şekil 4.2.2.1(b)'de Mullins fonksiyonu ve bilgisayar benzetimi sonucu elde edilen grafiğin $\lambda = 0.45$ için en iyi $B = 1.25 \times 10^{-31} \text{ m}^4/\text{s}$ ($D_{\text{Al}_2\text{O}_3} \approx 6.45 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$) değeri kullanıldığı zaman örtüştüğü bulunmuştur. Shin ve diğerlerinin (1998) yaptığı ölçümlerde ise $1370\text{-}1600^{\circ}\text{C}$ arasında yüksek yoğunluktaki (99.9%) alümina için difuzivite $D_0 \approx 8.22 \times 10^3 \text{ m}^2/\text{s}$, aktivasyon entalpisi ise $\Delta H = 577 \pm 30 \text{ kJ/mol}$ olarak bulunmuştur. Bu değerler daha sonra Lee ve Case (1999) tarafından $D_0 \approx 6.06 \times 10^3 \text{ m}^2/\text{s}$, $\Delta H = 571 \pm 30 \text{ kJ/mol}$ olarak bulunarak teyit edilmiştir. Shin ve diğerleri (1998) 1600°C 'de ve vakumda alüminanın yüzey serbest enerjisini $\gamma_{\text{Al}_2\text{O}_3} \approx 1.091 \text{ J/m}^2$ olarak vermiştir. Bununla birlikte, yukarıda verilen difuzivite değeri de hesaba katıldığında, ortaya çıkan B parametresi $4.1 \times 10^{-31} \text{ m}^4/\text{s}$ 'dir ki bu değer Munoz ve diğerleri (2004) tarafından Mullins' genişlik formülü kullanılarak hesap edilenden ve benzetim sonucu ortaya çıkardığımız değerden üç kat daha büyüktür. Yine de, 10 nm derinliğinde ve 2.8 nm diyagonal ölçümlerde ortaya çıkabilecek hatalar göz önüne alındığında B için yapılan tahminin oldukça iyi olduğu düşünülebilir.

Dört ve altı bükümlü simetriye sahip kristalli yapılarda ortaya çıkabileceği düşünülen kritik bazı durumların benzetimleri ve Sachenko ve diğerlerinin tungsten filmlerde yapmış olduğu çalışmaların detaylı analizleri çalışmanın diğer bölümlerini oluşturur.

Bu çalışma ile yöne bağlı yüzey Gibbs serbest enerjisine sahip ince filmlerde gerçekleşen eğik tane sınırı oluşunun şekilsel evrimini hesaba katabilecek bir zayıf çözüm elde edilmiştir. Bu özelliğe sahip çift kristal filmlerde, değişik tane sınırı oluşu topolojilerini incelemek için, dört ve altı bükümlü yüzey Gibbs serbest enerjileri denenmiştir. Çok kristalli alümina (Munoz ve diğerleri, 2004) (Lucalox™) ve tungsten (Sachenko ve diğerleri, 2000) filmlerde rapor edilen tane sınırı oluklaşmaları için yapılan benzetim deneyleri AGM fotoğrafları ile uyuşmuş, alümina ve tungsten için hassas ortalama yüzey difüzyon sabitleri vermiştir: $D_{Al_2O_3} \approx 6.45 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$, $D_W \approx 5.2 \times 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$.

4.2.3. Yüzey Gibbs serbest enerjisindeki kuvvetli yön bağıllığı kısalmış dönme eğrisi ile temsil edilen ince filmlerde tane sınırı oluklaşması

Bu çalışmada (Oğurtanı, 2009-1) Gibbs serbest yüzey erkesindeki kuvvetli yöne bağımlılık, Wulf yapısındaki tekilliklerde Dirac delta dağılım fonksiyonuna temel alınan, bir çeşit kısalmış dönme eğrisi (curtate cycloid) fonksiyonu ile ifade edilmiştir. Bu yeni ifade, yumuşaktan sertte doğru kayan fasetler arasında düzgün bir geçişe imkan vermiş, aksi halde elde edilmesi mümkün olmayan yüzey profillerinin benzetimini sağlamıştır.

Bu çalışmadaki ana farklılık denklem (1) de kullanılan, $\bar{g}_\sigma \equiv \bar{g}_\sigma(\theta, \phi, m)$, normalize edilmiş yöne bağımlı yüzey serbest Gibbs erkesinin ifade edildiği fonksiyondadır. Normalizasyonda kullanılan g_σ^o Wulff yapısındaki minimum değere karşılık gelir. Burada θ yüzey tanjantının, ϕ ise simetri ekseninin x-ekseni ile yaptığı açı, m (1, 2, 3) değerlerini alabilen sırası ile {110}, {100} ve {111} düzlemlerindeki simetriyi ifade eden yarım büküm ya da kat sayısıdır. Küçük kristallerin denge şekilleri veya faset

oluşumunun ikincil detayları ile ilgilenilmediği sürece, yüzey Gibbs serbest erkesinin çeşitli trigonometrik fonksiyonlar ile açılması, onun şekilsel değişimlere olan etkisini tartışmak ve çözümlenmek açısından faydalıdır. Aksi durumda ise, özellikler Gibbs serbest erkesindeki tekil bölgelere hassasiyetle bağlıdır. Bulgularımıza göre bu tekilliklerin ifadesine en uygun analitik fonksiyonlardan biri polar koordinatlarda birim çember etrafında dönen eğrinin haritalanması ile elde edilir. Bu kısaltılmış dönme eğrisi fiziksel amaca uydurmak için yapılan birkaç ufak değişiklikten sonra parametrik olarak şu şekilde verilebilir:

$$\gamma(\zeta) = \gamma_0 \{1 + \Psi \cos(\zeta)\}, \quad x(\zeta) = \{\zeta + \alpha \sin(\zeta)\} \quad (96)$$

Buradaki γ_0 daha önce tanımlanan g_σ^o 'ye karşılık gelir. Yukarıdaki şekilde değiştirilen eğrinin dalga boyu $\lambda=2\pi$ olarak verilebilir, buradan yola çıkarak dönme açısının (ξ) değişme aralığı $[0, 2n\pi]$ olarak yazılır ($n=2m$ simetri kat sayısıdır). Ancak bu aralık $[\pi, (2n+1)\pi]$ olarak alınır ise seçilen herhangi bir tekil yüzeyin normali x-ekseni ile örtüşür ki tanım olarak burada $\varphi=0$ 'dir. Hesaplamaları rahatlatması açısından bu seçim daha doğrudur. $\Psi=\alpha/\gamma_0 \leq 1$ olarak verilen parametre, Wulff yüzey pürüzlülük faktörüdür (WYP), yüzey Gibbs serbest erkesindeki kimsi değişimlerin ortalama değere göre bir olcusunu tutar, yöne bağlılığın şiddetini belirler. Bu sabit verilen bir α değeri için belirli bir esik değerine sahiptir, bu esik aşıldığı andan itibaren kapiler kuvvetler artık belirli yönlerde sistemi stabilize etmekte katkı yapamaz halle gelir. Bunun nedeni bu noktadan sonra yüzey katılığının belirli yönlerde negatif değerler almasıdır. α parametresi Wulff yapısında özellikle tekil bölgelerdeki şekilsel değişiklikleri tanımlar. Normalize edilmiş ve değiştirilmiş dönme eğrisinde $(\gamma(\xi)/\gamma_0)$, $\alpha=0$ olduğunda polar koordinatlardaki Wulff grafiğinde birim yarıçapı olan bir çember, $\alpha=1$ olduğunda ise periyodik $(2\pi/n)$ çöküntüler (kısaltılmış (curtate) ve iki ucu kabarık (prolate) dönme eğrileri arasında çatallanma (bifurcation)) oluşturur. $0 < \alpha < 1$ aralığında ise tekil bölgeler arasında düzgün bir şekilde dalgalanan periyodik eğriler meydana gelir. Dolayısı ile α parametresini Wulff yüzey topografya (WYT) indeksi olarak adlandırılabilir. Yüzey katılığının tanımından $(\tilde{\gamma} = \gamma + \gamma_{\theta\theta})$ yola çıkarak ve denklem (2) yi kullanarak aşağıdaki bağıntı elde edilir:

$$\hat{\gamma}(\zeta) = \gamma_0 \left\{ -n^2 \Psi \frac{(\alpha + \cos(\zeta))}{(1 + \alpha \cos(\zeta))^3} + \{1 + \Psi \cos(\zeta)\} \right\}, \quad (97)$$

$$x(\zeta) = n(\theta - \phi + \pi/n) \quad \forall \quad \pi \leq \zeta \leq (2n+1)\pi \quad \forall \quad 0 \leq (\hat{\theta} - \phi) \leq 2\pi$$

Üçlü kavşaktaki dikine genellenmiş kuvvet formülü aşağıdaki verilmiştir:

$$\bar{F}_g^{long} \Big| = \mp \left(\bar{g}_\sigma^\pm \cos(\zeta - \theta^\pm) + \bar{g}'_\sigma^\pm \sin(\zeta - \theta^\pm) \right) + 2\bar{\lambda}_g \quad (98)$$

Simetrik olarak yerleşmiş (tane sınırı açısı: $\xi = \pi/2$) 4 katlı dönme simetrisine sahip bir oluk için denklem (96) ve (97) denklem (98)'e yerleştirildiğinde aşağıdaki bağıntı elde edilir:

$$\bar{F}_g^{long} \Big| = 2 \left\{ \lambda_g - \left([1 + \Psi \cos(\zeta)] \sin(\theta^\pm) - n \frac{\Psi \sin(\zeta)}{1 + \alpha \cos(\zeta)} \cos(\theta^\pm) \right) \right\} \quad (99)$$

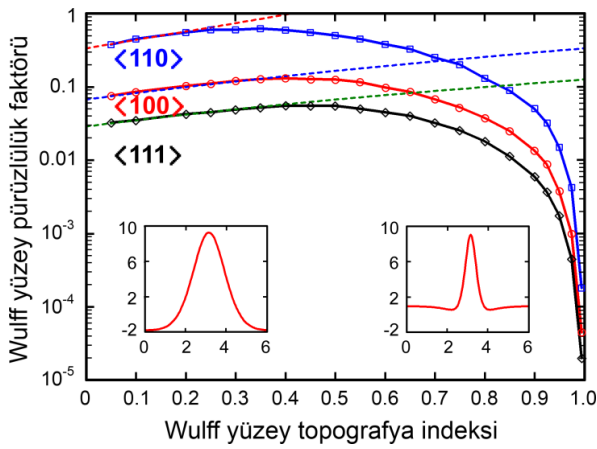
Bu formülden sürekli ve kararlı durum göz önüne alınarak $[\bar{F}_g^{long} \Big| \Rightarrow 0]$ oluk kökündeki tümleyen dihedral açıları ve WYP faktörünü ($\Psi \leq 1$) birbirine bağlayan bağıntı çıkarılabilir:

$$\Psi(\theta^\pm) = \left(\lambda_\sigma - \sin(\theta^\pm) \right) \left\{ \cos(\zeta) \sin(\theta^\pm) - \frac{n \sin(\zeta) \cos(\theta^\pm)}{[1 + \alpha \cos(\zeta)]} \right\}^{-1} \quad (100)$$

Benzer şekilde sırt oluşumu başlangıcına karşılık gelen WYP faktörünün esik değeri tümleyen dihedral açılarının sıfıra eşitlenmesi ile $\theta^\pm \rightarrow 0^\circ$ elde edilebilir:

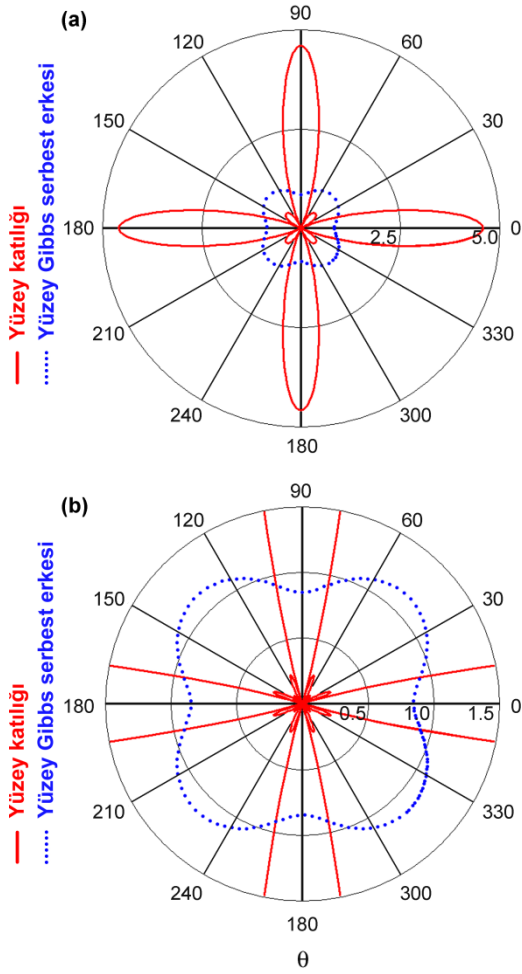
$$\Psi_{Thres.} = \left(\lambda_\sigma \frac{1 + \alpha \cos(\zeta)}{n \sin(\zeta)} \right) \quad (101)$$

Yukarıdaki denklem, (96) ve (97) numaralı denklemlerle birlikte göstermektedir ki, yön bağımlılığı sabitinin sırt oluşumuna (ters dönme) yol açması için eşik değeri ıslanma sabiti λ_σ ve WYT indeksine α açık olarak, φ açısına ise kapalı olarak bağlıdır. Şekil 4.2.3.1'de WYP faktörünün istikrarsızlık düzeyleri yüzey merkezli kübik kristal için muhtelif düzlemlerde $\{n=2, 4, 6\}$ WYT indeksinin bir fonksiyonu olarak görülmektedir.



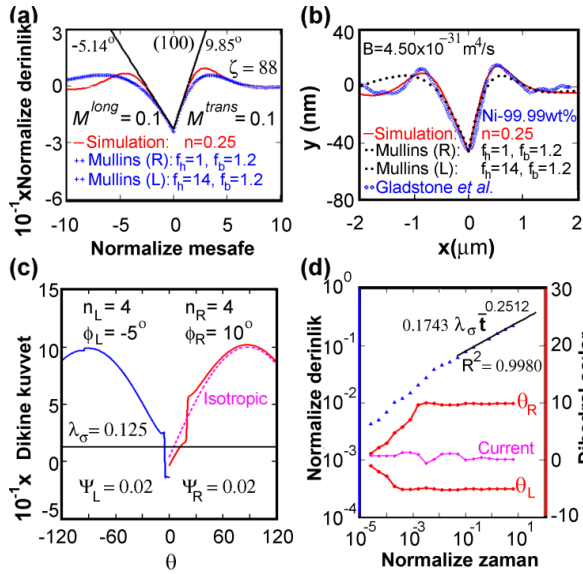
Şekil 4.2.3.1. WYT indeksinin fonksiyonu olarak WYP faktörünün istikrarsızlık eşiği. WYT indeksi 1'e yaklaşırken, Dirac delta tekilliğinin devreye girdiği görülmektedir.

Eşik düzeyi eğrileri aynı zamanda genellenmiş dikine kuvvet diyagramlarında da sert kesintilerin ortaya çıktığı sınırları da belirler. Eğer ıslanma parametresi bu kesinti bölgesine denk gelirse faset oluşumu gözlenebilir. Şekil 4.2.3.1'de iki farklı bölge dikkat çeker, bunlardan ilkinde ($0 < \alpha < 0.35$) Dirac delta dağılımına temel alınan fonksiyon düzgün Gaussian benzeri bir şekilde iken, diğerinde omuzlarında çukurlarlar olan keskin bir tepecik şeklindedir. Şekil 1'de $\langle 110 \rangle$ simetri ekseninden $\langle 100 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ eksenlerine doğru giderken esik seviyesinde ani düşüş açıkça görülür. WYT indeksi artarken WYP faktörü yarı logaritmik ölçekte önce doğrusal bir artış, ardından gelen $\alpha_{\text{dirsek}}=0.35$ dirsek noktasından sonra tekdüze düşüşe geçer, bu bölgeden sonra ortaya çıkacak yüzey şekilleri trigonometrik bir fonksiyon kullanarak elde edilemez. Şekil 4.2.3.2'de değiştirilmiş ve kısaltılmış dönme eğrisi kullanarak elde edilmiş yüzey Gibbs serbest erkesi ve yüzey katılığının bahsedilen birinci (2a) ve ikinci (2b) bölgelerdeki tipik davranışı polar koordinatlarda verilmiştir.



Şekil 4.2.3.2. 4 bükümlü simetri eksenine sahip düzlemlerde {100}, [001] yönlerinde kısalmış dönme eğrisi kullanarak elde edilen yüzey Gibbs serbest erkesi ve yüzey katılığının a) alt ($\alpha=0.20$) ve b) üst ($\alpha=0.50$) WYT indeksi seviyelerinde tipik davranışı. Her iki grafikte de WYP faktörü, eşik seviyesinin üzerindedir, $\Psi=0.15$.

Önerilen hesaplama yönteminin tahmin edebilme yeteneğini göstermek için, üçlü kavşağı kontrol eden hareketliliklerin düşük [$\hat{M}_\sigma=1-100$] ve yüksek [$\hat{M}_\sigma=1000-5000$] değerlerini içeren benzetim deneyleri yapılmıştır. Burada teorinin ne denli başarılı olduğunu göstermek için Gladstone ve diğerleri (2001) tarafından deneysel olarak gözlenen saf nikel (Ni - 99.99 wt %) filmlerdeki tane sınırı oluklarına yönelik çalışma verilecektir.



Şekil 4.2.3.3. Saf nikele ait (Ni - 99.99 wt %) Gladstone ve diğerleri (2001) tarafından verilen AGM profiline uydurulan $\zeta = 88^\circ$ eğimli tane sınırı oluşu. Her iki tane de 4 bükümlü simetri ile ifade edilen (100) düzleminde [010] yönündedir. Sağ ve sol dönme açıları: $\phi_R=10^\circ$ ve $\phi_L=-4.5^\circ$. WYP ve WYT parametreleri: $\Psi=0.02$, $\alpha=0.90$. Hareketlilik değerleri: dikey: 100, yatay: 10. İslanma parametresi ve normalize film kalınlığı: 0.125, 0.1.

Soğuk haddelemede %93 incelmeden sonra vakum ya da Ar-1%H₂ gibi bir ortamda 4 saat boyunca 800 °C'de tavlansak elde edilen yüksek saflıktaki nikel (99.99% Goodfellow) filmlerde meydana gelen tane sınırı oluşması Gladstone ve diğerleri (2001) tarafından AGM ile izlenmiştir. Haddeleme hasarından kaynaklanacak yüzey oluşumlarını ortadan kaldırmak için filmler yeniden kristalleşmeden önce elektro-parlatmaya tabii tutulmuşlardır. Şekil 4.2.3.3b'de verilen görüntü, Gladstone ve diğerlerinin (2001) rapor ettiği AGM fotoğrafının sayısallaştırılmış halidir. Bir ön tahmin yapabilmek için Mullins'in (1957) eş yönlü oluk genişliği formülü, $w = 4.6(Bt)^{1/4}$ (w =genişlik, t =zaman), AGM verisine (genişlik; $w = 1.35 \mu\text{m}$, derinlik; $d = 55 \text{ nm}$) uygulandığında, B oran sabiti $5.15 \times 10^{-31} \text{ m}^4/\text{s}$ olarak kabaca bulunur. Aynı şekilde Mullins'in (1957) eş yönlü eğim (m) formülü, $m=4.727d/w$; $\lambda=m/\sqrt{1+m^2}$ ile de ıslanma parametresi için ön tahminler $m = 0.193$, $\lambda = 0.189$ olarak bulunur. Bu ıslanma parametresi değeri 1060 °C'de yüksek acili nikel tane sınırları için Murr (1975) tarafından verilen ortalama değere yakındır ($\lambda = 0.190$; 1060 °C'de). Diğer taraftan ıslanma parametresi AGM fotoğrafından ölçülen dihedral açılar ile de hesaplanabilir ($\lambda = \cos \bar{\phi}$). Bu yapıldığında 82.75° lik dihedral açığa karşılık $\lambda = 0.126$ olarak bulunur. Shin (1998) ve diğerlerinin çok kristalli Al₂O₃ filmlerdeki AGM çalışmalarında da belirttikleri gibi ölçülen dihedral açılardan hesaplanan ıslanma parametreleri gerçekten her zaman küçük çıkmaktadır. Bunun

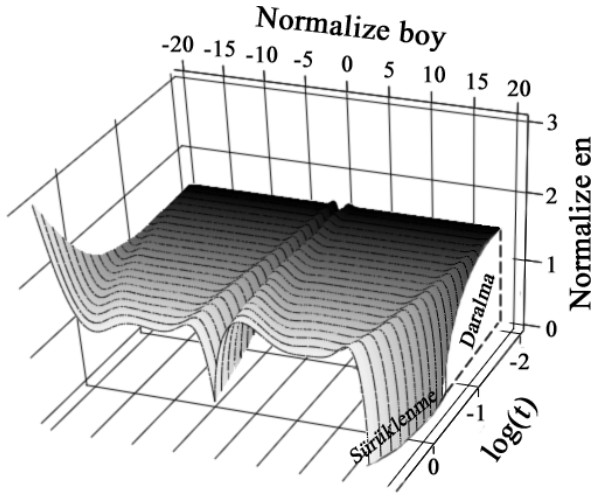
nedeni AGM ucunun 25-40 nm'lik bir yarıçapa sahip olmasından dolayı oluk koku civarını yuvarlak olarak ölçmesidir. Yuvarlanan bu bölgenin genişliği belirtilen yarıçap için 30-50 nm'yi bulabilmekte bu da oluk derinliğinde en az 10 nm'lik bir hataya sebebiyet vermektedir. Bu ön verileri kullanarak deneme yanılma yolu ile yapılan birçok deney sonrasında Şekil 3'de verilen, deneysel veri ile en iyi şekilde örtüşen hareketlilik, tane sınırı eğimi, dönme açısı, ıslanma parametresi elde edilmiştir. Özel olarak seçilen WYP faktörü, $\Psi=0.02$ ve WYT indeksi, $\alpha=0.90$ sistemi bir önceki bölümde bahsedilen anomal durumun ortaya çıkışının hemen öncesinde tutar, böylece yüzeyde çok fazla dalgalanmaya (istikrarsızlığa) sebebiyet vermeden oluşun her iki tarafında da keskin fasetler oluşmaya başlar (Şekil 4.2.3.3a-d). Buna göre en iyi sonuçları veren sağ ve sol tanelere ait dönme açıları sırası ile $\phi_R=10^\circ$ ve $\phi_L=-4.5^\circ$, tane sınırının x-ekseni ile yaptığı açı ise $\zeta = 88^\circ$ bulunmuştur. Bu değerler kendi yöntemleri ile aynı deneyi analiz eden Min ve Wong'un (2006) kullandığı, 12° , -5° , ve 87.3° lik değerlere oldukça yakındır. Esasen yön bağımsız tane siniri açısı 92.75° civarlarında olmalıyken, saat yönünde dönmüş bir tane siniri almak, ıslanma parametresinin 0.125 olarak seçmemizdeki en önemli nedendir. Bu seçim Min ve Wong'un (2006) karmaşık eğri yerleştirme yöntemlerinin sonucunda bulduklarından 3 kat büyüktür. Şekil 4.2.3.3a'da yön bağımsız *değiştirilmiş Mullins* fonksiyonu benzetim deneyi sonucu elde edilen asimetric oluşun her iki tarafına ayrı ayrı mümkün olduğunca yerleştirilmeye çalışılmıştır. Figür üzerinde verilen 'f' değerleri bu değiştirme esnasında kullanılan parametrelerdir (Oğurtanı, 2007). Şekil 4.2.3.3a'da normalize edilmiş ve ölçeklenmiş zamanda verilen profil, 3b'de ters ölçeklemede önce yukarıda bahsedilen B sabiti kullanılarak gerçek zamana aktarılmıştır, ardından bu tahmini değer benzetim sonucu elde edilen oluk genişliğinden faydalanarak bir miktar düzeltilmiştir. Bu yeni değer, $B = 4.5 \times 10^{-31} \text{ m}^4/\text{s}'\text{dir}$. $g_{Ni} \approx 2.28 \text{ J/m}^2$ (yüzey Gibbs serbest erkesinin en düşük değeri), $\Omega \approx 1.66 \times 10^{-29} \text{ m}^3$ (ortalama atom hacmi) ve $h_{Ni} \approx \Omega^{1/3}$ (film kalınlığı) olarak alındığında (Murr, 1975) $5.73 \times 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}'\text{lik}$ bir difüzyon sabitine denk gelir. Nikel yüzey atomlarının (100) düzleminde [110] yönlerindeki hareketleri için aktivasyon entalpisi Tung ve Graham (1980) tarafından $\Delta H_{Ni} = 0.63 \text{ eV}$ olarak verilmiştir. 225 K'de iyon alanı mikroskopisi ile elde edilen difüzyon hızı $10^{-17} \text{ m}^2/\text{s}'\text{dir}$, daha sonra bu değer yukarıda verilen aktivasyon entalpisini hesap etmek için, teorik değeri $1.2 \times 10^{-17} \text{ m}^2/\text{s}$ olarak hesap edilen D_0 (preeksponensiyel sabit) ile birlikte kullanılmıştır. Bu veriler kullanılarak $800^\circ \text{C}'\text{de}$ difüzyon hızı $1.3 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ olarak

hesaplanır, bu değer Latta ve Bonzel (1977) tarafından temiz UHV ortamında (001) düzleminde $[1\bar{1}0]$ yönündeki difüzyon hızı olarak verilen değer ile aynıdır ([001] yönündeki değerden 14 kat daha büyük olduğu rapor edilmiştir). Bu değer kullanılarak B oran sabiti hesaplanırsa $8.7 \times 10^{-29} \text{ m}^4/\text{s}$ bulunur, bu bizim Gladstone (2001) deneyi için yaptığımız Mullins analizi ve benzetim deneyi ile hesap ettiğimiz değerlerden 1000 kat daha büyüktür. Yaptığımız difüzyon hızı hesabına en yakın değerler, $10 \mu\text{m}$ genişliğinde yüzey çentikleri ile yüksek çözünürlükte profilometri ile çalışan Azzeri ve Colombo (1976) tarafından verilmiştir. Buna göre $T \geq 0.75T_m$; 1300 K'de, $D_0 = 10 \text{ m}^2/\text{s}$, $\Delta H_{Ni} = 2.79 \text{ eV}$ 'dir. Bunlar 800°C 'de $D = 7.55 \times 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$ 'lik bir difüzyon sabitine ve $B = 4.95 \times 10^{-31} \text{ m}^4/\text{s}$ değerlerine karşılık gelir ki bunlar bu makalede hesap edilenlere gerçekten çok yakındır. Literatürde nikel için yer alan bu tutarsızlık Ondrejcek ve diğerleri (2006) tarafından etraflıca tartışılmıştır.

4.2.4. Bambu benzeri metalik filmlerde elektrogöç ve kapiler kuvvetlerin güdümündeki yüzey sürüklenme difüzyonu ile gerçekleşen katot daralması ve sürüklenmesi ile birlikte tane sınırı oluşması

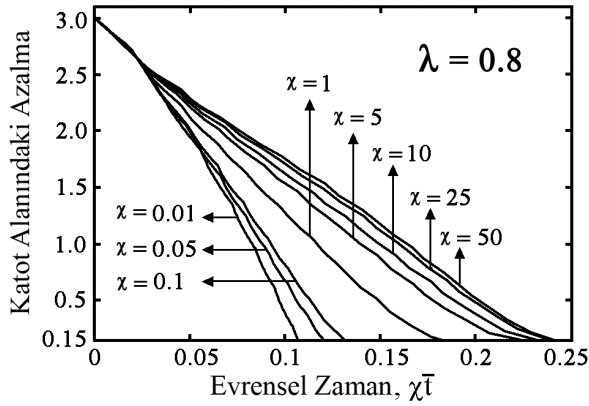
Bu çalışmada (Oğurtanı, Akyıldız, 2008-4) ele alınan fiziksel model başlangıçta dikdörtgen şeklinde olan, dielektrik ve difüzyon bariyerleri ile sandviç edilmiş iki taneli bambu benzeri bir ince filmidir. Bu model sayesinde ince filme elektrik akımının giriş noktası olan katot bölgesinin daralması (elektriksel direnç artışı) ve serbest kalmasından (bozulma) sonra anoda doğru sürüklenmesi olayları ile eşzamanlı tane sınırı oluşması incelenebilmiştir. Kuvvetli çözüm kullanılarak gerçekleştirilen benzetim deneyleri sabit akım (constant current, CC) ve sabit gerilimden sabit akıma geçiş yapılarak (switch-over constant voltage, SOCV) iki ayrı elektrostatik sınır koşulu altında gerçekleştirilmiştir.

Şekil 4.2.4.1'de sabit gerilimden sabit akıma geçiş yapılarak tamamlanan bir deneyin görünümü verilmiştir. Bu şekilde modellenen ince filmin yalnızca üst tarafı görünmektedir, alt taraf x eksenine göre simetrik olarak düşünülebilir.



Şekil 4.2.4.1. Sabit gerilim altında meydana gelen katot boşalması (ya da daralması) ve bozunmadan sonra sabit akım altında sürüklenen katot ucu.

Yan duvarlarda meydana gelen yüzey difüzyonunun yol açtığı katot ucundaki daralma, Şekil 4.2.4.2'de sunulmuştur. Bu bulgular yukarıda betimlendiği gibi sabit voltaj ve yansıtıcı sınır koşullarının uygulandığı deneylerden elde edilmiştir. (Oğurtanı, Akyıldız, 2005, 2006)



Şekil 4.2.1.2. Katot alanındaki azalmanın, elektron rüzgarı kuvveti ve zamanın çarpımından elde edilen, evrensel zaman ile değişimi. Kapiler ve EM baskın rejimler $\chi=1.0$ sınırı ile net olarak birbirlerinden ayrılırlar.

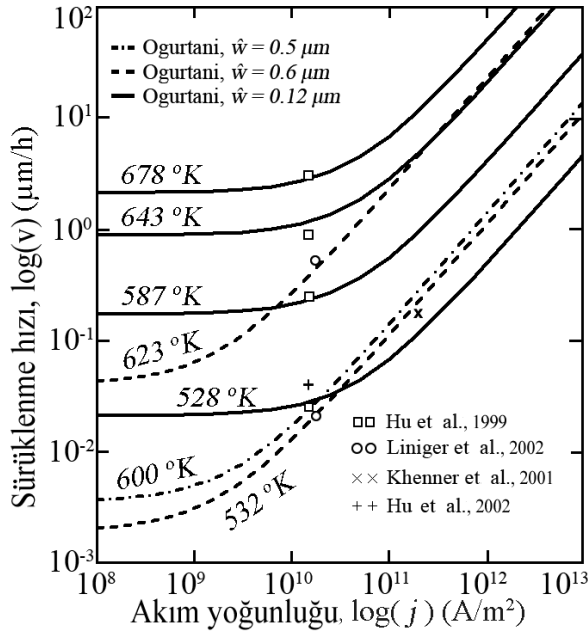
$$\begin{aligned} \bar{A}_{CV}(\bar{t}, \chi) &\cong 3(1 - 4.5\chi\bar{t}) \quad \chi > 1 \quad \text{EM baskın rejim} \\ &\cong 3(1 - 8\chi\bar{t}) \quad \chi \leq 0.1 \quad \text{Kapileri baskın rejim} \end{aligned} \quad (102)$$

Alandaki azalmayı veren bu formül ile birlikte, katot sürüklenmesi için literatürde yer alan deneysel çalışmalar ile mükemmel bir şekilde uyum gösteren, ortam parametrelerine bağımlı, katot bozulmasını veren denklem aşağıdaki gibidir:

$$t_{CFT}(j, w, f) = \frac{f}{1+f} \frac{w^2}{9} \left[\alpha \frac{D_{\sigma} h_{\sigma}}{kT} e^{\hat{Z}} \frac{\Delta \mathcal{G}}{L} \right]^{-1} \quad (103)$$

Burada j elektrik akımının yoğunluğu, w malzemenin eni, f ise katot bozulması için referans alınan yüzde direnç değişimidir (fractional resistance variation). f A.B.D. mikro elektronik sanayinde lehim ek yerleri (solder joints) için 5% (dirençte 5% oranında değişim) olarak kabul edilir.

Katodun bozulmasından sonra sabit akım altında anoda doğru sürüklenmesi takip edilmiştir. Katot sürüklenme hızları ve bozulma zamanları normalize edilmiş elektron rüzgâr şiddetine (electron wind intensity parameter, χ) bağlı iki farklı safhanın varlığına işaret etmiştir: 1) kapiler baskın rejim ($\chi \leq 0.01$) ve 2) elektrogöç baskın rejim ($\chi > 0.01$). Bu iki rejim sırası ile 0 ve 1 akım üssüne sahiptir.



Şekil 4.2.4.3. Bakır ince filmler için değişik sıcaklık ve film kalınlıklarında katot sürüklenme hızının akım yoğunluğu ile değişimi.

Elde ettiğimiz katot sürüklenme hızını akım yoğunluğu ile ilişkilendiren teorik bağıntı değişik sıcaklıklar için Şekil 4.2.4.3.'de resmedilmiştir. Literatürden toplanan veriler bu grafik üzerine yerleştirildiğinde, rapor edildikleri sıcaklıklardaki teorik

çizgilerin hemen yakınındaki yerlerini alırlar. Katot sürüklenme hızına dair literatürde (Hu ve diğerleri, 1999, 2002; Khenner ve diğerleri, 2001; Liniger ve diğerleri, 2002) yer alan bu laboratuvar deneylerinin analizi, üretim ve test aşamalarında değişik şekillerde pislenecek bakır ara bağlantı elemanları için oldukça tutarlı bir difüzyon sabiti ortaya çıkartmıştır: $1.0 \times 10^{-5} \exp(-1.0 \text{ eV/kT}) \text{ (m}^2\text{s}^{-1}\text{)}$. Bu değer, $1/kT$ düzeltmesi yapıldıktan sonra, literatürde rapor edilen Nernst–Einstein hareketlilik (mobility) bağıntısı ile ilişkilendirilmiş zahiri aktivasyon ısıları değerleri ile mükemmel uyum göstermiştir.

Bu çalışmada son olarak katot bölgesinin sürekli olarak daralması ile meydana gelen nihai bozulma zamanları için elde edilen formülün bambu, yarı – bambu ve hatta çok kristalli metalik ince filmler için de geçerli olabileceği, film genişliğine, kalınlığına ve tane boyutuna bağlı olan bir parametrenin çeşitli durumlar için hesabı ile gösterilmiştir (Oğurtanı, Akyıldız, 2008-4).

4.3. Epitaksiyel olarak gerilmiş bir altlık üzerindeki yassı damlacıklardan Stranski-Krastanow adacıkları oluşumu

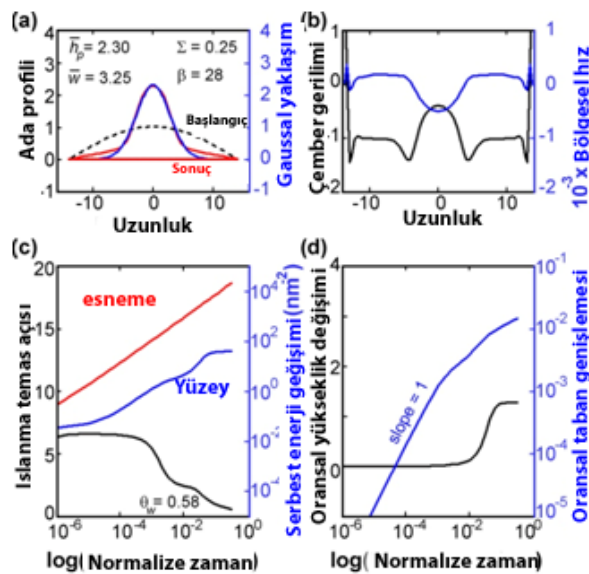
Bu çalışmada (Oğurtanı, Çelik, Ören, 2009) altlık üzerinde yassı kristal damlacık olduğu varsayılır. Damlacığın tanımında yarım kosinüs dalgası dalga boyu $2L$ ve yükseklik h_p kullanılmıştır. Damlanın en boy oranı $\beta=L/h_p$ olarak tanımlanmıştır. En boy oranı aynı zamanda damlanın altlık ile yaptığı temas açısını, $\theta=\arctan(\pi/\beta)$, belirler. Böylece normalize ve boyutlandırılmış zaman uzunluk uzayında damlanın şekli ve boyutları bir tek β parametresi ile belirlenir.

Fiziksel olarak, damla altlığa bağdaşık bir yüzeyle bağlanmıştır ve üst yüzeyi sürüklenme difüzyonuna tabidir. Sayısal hesaplamaları basitleştirmek için film/altlık ara yüzeyi düz ve altlık değişmez olarak varsayılmıştır. Bu varsayımlar sayesinde uygulanan uyumsuzluk gerinmesinin ε_o (mismatch strain) neden olduğu ara yüzey boyunca ilk yer değiştirme süreç boyunca sabit kalmaktadır (Dirichlet sınır koşulu).

Süreç boyunca, yüzey görünümü sürekli olarak değişir. Dolayısıyla, damla genel gerilme enerjisi değişiminin hesabı için güç saçımının (power dissipation) kullanılması gerekir. Bu hesap Helmholtz serbest enerjisi değişiminin yüzeydeki küçük değişimler için zamana bağlı türevini alarak yapılabilir.

Damlanın büyüme olmadan morfolojik evrimi bölümünde, en boy oranı yüksek olan damlacıklar, $\beta=10-28$, uyumsuzluk gerilmesine tabi tutulmuş ve yüzey morfolojisi değişimleri gözlemlenmiştir.

Şekil 4.3.1.(a)'da film kalınlığına oranla normalize uzunluk $\beta = \bar{L} = 28$, ve kosinüs dalda genliği $\bar{h}_p = 1.0$ 'dur. Birçok elastik gerilme enerjisi yoğunluğu (Σ) uygulamış olmamıza rağmen, burada sadece birkaç temel sonuçtan bahsedilecektir: ($\Sigma = 0.075, 0.175, \|0.250\|, 0.300, 0.350, 0.400, \|0.413\|, 0.425, 0.450$). Çift dikey çizgiler kabaca bulunan geçiş bölgelerini gösterir. En düşük Σ değerinde ($\Sigma = 0.075$) damla konfigürasyonunu kararsızlaştırmıştır. Burada sadece tekli morfolojileri değil aynı zamanda geçiş morfolojileri ile ayrılmış ikili morfolojileri de görüyoruz. Çalışmamızda morfolojiler dışında süreç boyunca damla tepeciği kinetiğinin gelişimi, üçlü faz bağlantı noktası hareketi ve açığa çıkan gerilme enerjisi de takip edilmiştir.



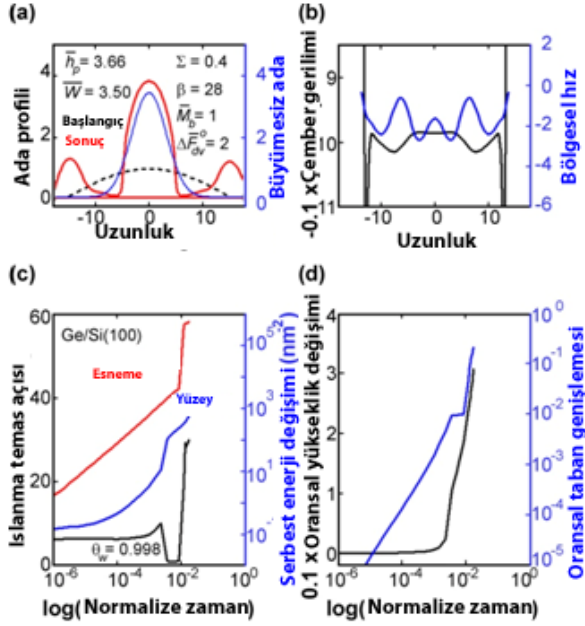
Şekil 4.3.1. a) Başlangıç, sonuç ve ara etap adacık profili: sonuç profili gaussal çan şeklindedir ($h_p=2.30$, $w=3.25$; b) son damlacık profili boyunca anlık hız ve çember gerilim dağılımı; c) sol y ekseninde temas açısının değişimi, sağ y ekseninde ise gerilme enerjisi ve serbest yüzey enerjisi değişimi Ge/Si(100) için $\text{nm}^2 \rightarrow 10^{-18}$ ile boyutlandırılmış olarak verilmiştir; d) tepelik yüksekliği ve üçlü faz bağlantı

noktası yer değiştirmesinin zamana göre değişimi.

Varsayımsal numune üzerinde $\Sigma=0.25$ gibi kritik bir değer atayarak yapılan benzetim sonuçları Şek. 4.3.1. de verilmiştir. Diğer benzetim parametreleri $\bar{h}_p = 1$, $\beta=28$, $\nu=0.273$, $\bar{M}_{TJ} = 2$, $\lambda=1$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$ ve $f_d = 1$ şeklindedir. Şek. 4.3.1. (a) da olgunlaşmamış veya geçiş ada profilinin çok uzun çalışma sürelerinde bile ıslanma katmanı oluşturmadığı gösterilmiştir. Bu sonuç profili aşağıdaki formül ile ifade edilen normalize boyutta yarı genişliği $\bar{w} = 3.25$ ve tepe yüksekliği $\bar{h}_p = 2.30$ olan bir gaussal eğridir: $G(x; \bar{h}_p, \bar{w}) = \bar{h}_p \cdot \exp(-\ln(2)x^2 / \bar{w}^2)$.

Damlanın büyüerek morfolojik evrimi bölümde, değişkenler arasında büyüme terimini de katarak yaptığımız deneylere örnek verilecek ve irdelenecektir. Bunu sağlamak için büyüme hareketliliği $\bar{M}_b = 1$ ve Helmholtz serbest enerjisi $\Delta\bar{F}_{vd}^o = 2$ olarak sisteme girilmiştir.

Aşağıda sunulan deneyinde kullanılan girdiler şu şekildedir: $\Sigma = 0.40$, $\bar{h}_p = 1$, $\beta=28$, $\nu=0.273$, $\bar{M}_{TJ} = 2$, $\lambda=1$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$ and $f_d = 1$ ve büyüme parametreleri $\bar{M}_b = 1$, $\Delta\bar{F}_{vd}^o = 2$. Deney bitiminde ana tepelikten ayrı iki yanda yeni iki tepeliğin oluşumu gözlemlenmiştir. Bu tepelikleri ayıran ıslanma katmanı diyebileceğimiz çok ince ($\delta\bar{h}_{Ge} \cong 0.0587 \rightarrow 0.28 \text{ nm}$) bir film vardır. Kinetik verilerden de anlaşılacağı gibi bu sistem $\bar{t} \approx \{0.05 - 0.1\}$ zaman aralığında kararsız rejime girer. Bu süreçte ara yüzeyin kenarlarında çok yüksek gerilimlerin olduğu gözlemlenmektedir ($\bar{\sigma} \cong 2.25 \rightarrow 13.389 \text{ GPa}$). Hız değerleri de pozitif maksimum yapmaktadır, bu bize tepeliklerin küçülme ve düzleşme eğiliminde olduğunu gösterir. Hız dağılımı aralardaki ıslanma katmanlarının sıfır büyüme hızında olduğunu gösteriyor.



Şekil 4.3.2. a) Büyüme teriminin ada morfolojisi üzerindeki etkisi: ana parçanın iki yanında oluşan tepecikler ana parçadan nerdeyse mükemmel düz bir ıslanma katmanı ile ayrılıyorlar. Oluşan sonuç şekli gausssal çan şeklinde olup $h_p=1.10$, $w=8.00$ parametreleri ile tanımlanmıştır; b) anlık hız ve çember gerilim dağılımı; c) sol y ekseninde temas açısının değişimi, sağ y ekseninde ise esneme enerjisi ve serbest yüzey enerjisi değişimi Ge/Si(100) için verilmiştir; d) tepecik yüksekliği ve üçlü faz bağlantı noktası yer değiştirmesinin zamana göre değişimi.

Bu çalışmada (Oğurtanı, Çelik, Ören, 2009), katı adacıkların kendiliğinden dinamik evrimi Oğurtanı tarafından geliştirilen fiziko-matematiksel model ile tanımlanmış, sistemin altlık üzerinde Stranski-Krastanow (SK) adacıkları oluşturma süreci gözlemlenmiştir. En boy oranı β ve adacık büyüklüğünün SK oluşumunda temel rolü paylaştığı anlaşılmıştır. Deneyler göstermiştir ki başlangıç morfolojisinden bağımsız olarak aynı büyüklükteki adacıklar daima SK adacıklarına dönüşmüşler ve aralarındaki tek fark ıslanma katmanında olmuştur. Küçük en boy oranlarında büyük oranlara sahip adacıklara nazaran daha dar ıslanma katmanı olduğu gözlemlenmiştir.

BÖLÜM 5

SONUÇ

Bu projenin yürürlük safhasında elde edilen sonuçları iki kategoride toplamak mümkündür. Birincisi, temel bilimlere kuramsal alanda yapılan katkılar. İkincisi ise uygulama alanında ve özellikle mikro elektronik devrelerin yaşlanması ve tahribatı ile ilgili katkılar. Her iki kategoride yapılan yayınların sonuçları ilgili bölümlerde detaylı ve sistematik bir şekilde ele alınmıştır. Araştırmaya konu olan elektronik malzemeler mikro yapı bakımından tek kristal, çift kristal ve bambu yapısındaki çok kristal ince filmler olarak sınıflandırılırlar. Tane sınırlarının ısıl oluklaşması ile ilgili değişkenler hesabı ile ısıldevingen modele dayalı çalışmaların sonuçları çok daha geniş kapsamlı olup bütün konvansiyonel malzemeleri içermektedir.

Bu kapsamda tersinemez termodinamik modele dayalı zayıf çözüm başlangıç yüzey normaline paralel olmayan tane sınırı oluklarının şekilsel evrimini hesaba katabilecek şekilde geliştirilmiş, Gibbs serbest yüzey erkesindeki kuvvetli yöne bağımlılık, Wulf yapısındaki tekilliklerde Dirac delta dağılım fonksiyonuna temel alınan, değişik fonksiyonlar ile ifade edilmiştir.

Ramasubramaniam ve Shenoy'dan (2005) uyarlanan Gibbs serbest yüzey enerjisi fonksiyonu ile 1650 °C de 90 dakika tavllanmış çok kristalli alümina (Munoz ve diğerleri, 2004) (Lucalox™) ve 1350 °C de 120 dakika vakumda tavllanmış tungsten (Sachenko ve diğerleri, 2000) filmlerde rapor edilen tane sınırı oluklaşmaları için bu malzemelere ait yapısal ve fizikokimyasal veriler kullanılarak özel bilgisayar benzetim deneyleri tasarlanmıştır. Elde edilen profiller yayınlanan atomik güç mikroskobu (AGM) fotoğrafları ile uyuşmuş, alümina ve tungsten için hassas ortalama yüzey difüzivite vermiştir: $D_{Al_2O_3} \approx 6.45 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$, $D_W \approx 5.2 \times 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$.

Kısalmiş dönme eğrisi (curtate cycloid) fonksiyonu ise yalnızca Wulf yüzey pürüzlülük faktörüne (WYP) değil (yöne bağımlılık şiddeti) aynı zamanda sıcaklık yüzey

pürüzlenmesi olayında ölçüt olarak kullanılabilir Wulff yüzey topografya (WYT) indeksine de (şekil parametresi) sahiptir. 800 °C'de, vakumda 4 saat tavllanmış saf nikel (Ni - 99.99 wt %) filmlere ait yapısal ve fizikokimyasal verilerin kullanıldığı bilgisayar benzetim deneyleri yapılmıştır. Sonuçlar sayısallaştırılan AGM fotoğrafları (Gladstone ve diğerleri, 2001) ile örtüşmüş, ortalama yüzey difüzyon sabiti $5.7 \times 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$ (800 °C) olarak hesaplanmıştır. Bu değer 1300 K'dan büyük sıcaklıklarda kısmen daha kirli yüzeylerde geniş yüzey çentiklerinin kapiler modda kayboluşlarının yüksek hassasiyetli profilometri ölçümleri ile elde edilen difüzyon sabiti ile nicel olarak uyumludur.

Buradan çıkan sonuçlar göstermiştir ki, uygulanan bilgisayar benzetim teknikleri, güvenilir ve hassas difüzyon verileri elde etmek için oldukça elverişlidirler. (Oğurtanı 2007, 2009-1; Oğurtanı, Akyıldız, Oren, 2008)

Diğer bir çalışmada (Oğurtanı, Akyıldız, 2008-4) ele alınan fiziksel model başlangıçta dikdörtgen şeklinde olan, dielektrik ve difüzyon bariyerleri ile sandviç edilmiş iki taneli bambu benzeri bir ince filmidir. Bu model sayesinde ince filme elektrik akımının giriş noktası olan katot bölgesinin daralması (elektriksel direnç artışı) ve serbest kalmasından (bozulma) sonra anoda doğru sürüklenmesi olayları ile eşzamanlı tane sınırı oluşması incelenebilmiştir. Kuvvetli çözüm kullanılarak gerçekleştirilen benzetim deneyleri sabit akım (constant current, CC) ve sabit gerilimden sabit akıma geçiş yapılarak (switch-over constant voltage, SOCV) iki ayrı elektrostatik sınır koşulu altında gerçekleştirilmiştir. Katot sürüklenme hızları ve bozulma zamanları normalize edilmiş elektron rüzgâr şiddetine (electron wind intensity parameter, χ) bağlı iki farklı safhanın varlığına işaret etmiştir: 1) kapiler baskın rejim ($\chi \leq 0.01$) ve 2) elektrogöç baskın rejim ($\chi > 0.01$). Bu iki rejim sırası ile 0 ve 1 akım üssüne sahiptir. Katot sürüklenme hızına dair literatürde yer alan birçok laboratuvar deneyinin analizi, üretim ve test aşamalarında değişik şekillerde pislenecek bakır ara bağlantı elemanları için oldukça tutarlı bir difüzyon sabiti ortaya çıkartmıştır: $1.0 \times 10^{-5} \exp(-1.0 \text{ eV}/kT) (\text{m}^2\text{s}^{-1})$. Bu değer, $1/kT$ düzeltilmesi yapıldıktan sonra, literatürde rapor edilen Nernst–Einstein hareketlilik (mobility) bağıntısı ile ilişkilendirilmiş zahiri aktivasyon ısıları değerleri ile mükemmel uyum göstermiştir.

Katot bölgesinin sürekli olarak daralması ile meydana gelen nihai bozulma zamanları için elde edilen formülün bambu, yarı – bambu ve hatta çok kristalli metalik ince filmler için de geçerli olabileceği, film genişliğine, kalınlığına ve tane boyutuna bağlı olan bir parametrenin çeşitli durumlar için hesabi ile gösterilmiştir. (Oğurtanı, Akyıldız, 2008-4)

Sıcaklık gradyanı etkisi ile ortaya çıkan gerilmeler altında kuvvetli çözüm ile yapılan benzetim deneylerinde elde edilen sonuçlar, ara bağların lehim bağlantılarına uygulanmış ve bunların tahribatı ile ilgili sayısal ve laboratuvar deneylerine uyumlu sonuçlar elde edilmiştir. Bu uygulama ile hesap edilen tahribat zamanı ile deneysel veriler arasında çok iyi bir uyum olduğu tespit edilmiştir. İç boşluklarda oluşan çatlakların oluşumu ile ilgili parametreler benzetim deneyleri verileriyle formüle edilmiştir (Oğurtanı, Akyıldız 2008-1,2,3). Özellikle yüksek sıcaklıklarda edilgenleştirilmiş metalik arabağlarda ortaya çıkan ısıl-mekanik gerilmelerin (hydrostatic and biaxial stresses), difüzyon ve elektrod ile etkileşimli olarak dış yüzey morfolojisine (tane sınırı oluklarının sebep oldukları kırılma mekanizmaları, yüzeydeki çukur ve tepeliklerin davranışları) olan etkilerinin sistemin tahribatı ile ilişkilendirilmesi ileride ayrıntılı olarak ele alınması gereken en önemli konu olarak görünmektedir. (Oğurtanı, Akyıldız 2008-1,2,3)

Diğer bir çalışmada tek kristal metalik ince filmlerde tek eksenli sıkma gerilimi ile oluşmuş yüzey çatlaklarına ve düzensizliklerine uygulanan elektrostatik alanın iyileştirici veya tahripkâr sonuçları bilgisayar benzetim aracılığı ile incelenmiştir. Sonuçlar açıkça göstermiştir ki uygulanan elektrostatik alan ile kristal yönelimi arasında uygun açı seçilmesi önemlidir. Aksi durumda, açının yanlış seçilmesi yüzey dalgalarında iyileşme yerine çatlak oluşumunu hızlandırır etki göstermektedir. Bu anlamda, doğrusal istikrarsızlık analizi teorisi uygulanan gerilim ve elektrostatik alan altında uygun açının seçimi hakkında önemli ipuçları vermektedir. Deneyler sonucunda normalize yıkım zamanı hakkındaki gözlemlerimizi özetlersek: $(111)-[\bar{1}10]$ dokusuna sahip ince filmlerde $[\bar{1}10]$ doğrultusunda elektrostatik alan uygulandığında yan yüzey kararlılığı $\Rightarrow \bar{t}_f \cong 3.55 \times 10^{-3}$ diğer tüm olasılıklara nazaran

yüksektir: $(\bar{1}10)-[110] \Rightarrow \bar{t}_F \cong 2.50 \times 10^{-4}$, $(001)-[100] \Rightarrow \bar{t}_F \cong 5.27 \times 10^{-4}$. Eğer malzeme eş yönlü difüzyon katsayısına sahip ise elektrostatik alanın yüzey pürüzleri üzerinde hiçbir etkisi yoktur. (Oğurtanı, 2009-2)

Son olarak epitaksiyel olarak gerilmiş bir altlık üzerindeki yassı damlacıklardan Stranski-Krastanow adacıkların kendiliğinden dinamik evrimi Oğurtanı tarafından geliştirilen fiziko-matematiksel model ile tanımlanmış, sistemin altlık üzerinde Stranski-Krastanow (SK) adacıkları oluşturma süreci gözlemlenmiştir. En boy oranı ve adacık büyüklüğünün SK oluşumunda temel rolü paylaştığı anlaşılmıştır. Deneyler göstermiştir ki başlangıç morfolojisinden bağımsız olarak aynı büyüklükteki adacıklar daima SK adacıklarına dönüşmüşler ve aralarındaki tek fark ıslanma katmanında olmuştur. Küçük en boy olanlarında büyük oranlara sahip adacıklara nazaran daha dar ıslanma katmanı olduğu gözlemlenmiştir. (Oğurtanı, Celik, Oren, 2009)

REFERANSLAR

AZZERRI, N., COLOMBO, R. L., Surface diffusion measurements in nickel using a modified relaxation technique, *Metallography*, 9 (3), 233-244 (1976)

BARRETT, C.R., NIX, W.D., TETELMAN, A.S., *The principles of engineering materials*, Prentice-Hall, Inc., New Jersey, (1973). Pp. 197

BEER, G., WATSON, J.O., *Introduction to finite and boundary element methods for engineers*, Wiley, New York, (1992). Pp. 151

DONDER, Th. De, VAN RYSSELBERGHE, P., *Affinity*, Stanford University Press, Menlo Park, (1936). Pp.12

FUNG, Y.C., *Foundation of solid mechanics*, Prentice-Hall, Inc., New Jersey, (1965). Pp. 385

GAO, H., in: Modern theory of anisotropic elasticity and applications, ed: WU, J.J., TING , T.C.T., BARNETT, D.M., SIAM, Philadelphia, (1991). Pp. 139

GAO, H., A boundary perturbation analysis for elastic inclusions and interfaces, *Int. J. Solids Struct*, 28 (6), 703 (1991).

GEAR, C. W., Numerical initial value problems in ordinary differential equations (Prentice-Hall, New Jersey, 1971) Pp.109

GLADSTONE, T.A., MOORE, J.C., WILKINSON, A.J., GROVENOR, C.R.M., Grain boundary misorientation and thermal grooving in cube-textured Ni and Ni-Cr tape, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* 11, 2923 (2001).

GUGGENHEIM, E.A., *Thermodynamics, 3rd Edition*, North-Holland Pub. Co., Amsterdam, (1959). Pp. 46

HAASE, R., *Thermodynamics of irreversible processes*, Addison-Wesley, Massachusetts, (1969). Pp. 245

HERRING, C., *The physics of powder metallurgy*, ed: W. E. Kinston, McGraw-Hill, New York, (1951). Pp. 143

HERRING, C., Diffusional viscosity of a polycrystalline solid, *J. Appl. Phys.*, 21, 437 (1950).

HU, C.-K., LEE, K.Y., GIGNAC, L., CARRUTHERS, R., Electromigration in 0.25 μm wide Cu line on W, *Thin Solid Films* 308, 443–447 (1997)

HU, C.-K., GIGNAC, L., ROSENBERG, R., LINIGER, E., RUBINA, J., SAMBUCETTI, C., DOMENICUCI, A., CHEN, X., STAMBER, A.K., Reduced electromigration of Cu wires by surface coating, *Applied Physics Letters* 81 (10), 1782–1784 (2002)

KHENNER, M., AVERBUCH, A., ISRAELI, M., NATHAN, M., Numerical simulation of grain-boundary grooving by level set method, *Journal of Computational Physics* 170 (2), 764–784 (2001)

KLINGER, L., RABKIN, E., Effects of Surface Anisotropy on Grain Boundary Grooving, *Interface Science*, 9 (1-2), 55-63 (2001)

KRAFT, O., ARZT, E., Numerical simulation of electromigration-induced shape changes of voids in bamboo line, *Appl. Phys. Lett.*, 66, 2063 (1995).

LATTA, E. E., and BONZEL, H. P., Anisotropy of Surface Self-Diffusion on Ni(110), *Phys. Rev. Lett.* 38, 839 - 841 (1977)

LEE, K.-Y., CASE, -E. D., A comparison of theoretical and experimental profiles for thermally-induced grain-boundary grooving, *Eur. Phys. J. AP* 8, 197-214 (1999)

LINIGER, E., GIGNAC, L., HU, C.K., KALDOR, S., In situ study of void growth kinetics in electroplated Cu lines, *J. Appl. Phys.* 92 (4), 1803–1810 (2002)

LÖSCH, L.F., LÖSCH, J.E., *Tables of higher functions*, McGraw-Hill, New York, (1960). Pp. 101

MEIXNER, J., Zur Thermodynamik der irreversiblen Prozesse, *Ann. Physik*, **39**, 333 (1941); *Z. Phys. Chem. B*, **53**, 235 (1943).

MIN, D., WONG, H., Grain-boundary grooving by surface diffusion with asymmetric and strongly anisotropic surface energies, *J. Appl. Phys.* 99, 023515 (2006)

MULLINS, W. W., Theory of thermal grooving, *J. Appl. Phys.*, 28 (3), 333 (1957).

MUNOZ, N. E., GILLISS, S. R., CARTER, C. B., The Monitoring of Grain-Boundary Grooves in Alumina, *Phil. Mag. Lett.*, 84 (1), 22 (2004).

MURR, L. E., Interfacial phenomena in metals and alloys (Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1975), p.124-132.

MUSKHELISHVILI, N.I., *Some basic problems of the mathematical theory of elasticity*, P. Noordhoff Ltd., Groningen, Holland, (1953). Pp. 104

RABKIN, E., KLINGER, L. and SEMENOV, L., Grain boundary grooving at the singular surfaces, *Acta Mater.* 48 (7), 1533 (2000).

ONDREJCEK, M., RAJAPPAN, M., SWIECH, W., and FLYNN, C. P., Step fluctuation studies of surface diffusion and step stiffness for the Ni(111) surface, *Phys. Rev. B* 73, 035418 (2006)

OĞURTANI, T.O., Irreversible thermokinetics theory of surfaces and interfaces with a special reference to triple junctions, unpublished, (2000).

OĞURTANI, T.O., Mesoscopic nonequilibrium thermodynamics of solid surfaces and interfaces with triple junction singularities under the capillary and electromigration forces in anisotropic three dimensional space, *J. Chem. Phys.*, 124, 144706 (2006).

OĞURTANI, T.O., Unified theory of linear instability of anisotropic surfaces and interfaces under the capillary, electrostatic and elastostatic forces: Special reference to the regrowth of epitaxial amorphous silicon, *Phys. Rev. B* 74, 155422 (2006).

OĞURTANI, T O., Variational formulation of irreversible thermodynamics of surfaces and interfaces with grain-boundary triple-junction singularities under the capillary and

electromigration forces in anisotropic two-dimensional space, *Phys. Rev. B* 73, 235408 (2006).

OĞURTANI, T O., Dirichlet extremum problem associated with the asymmetric grain-boundary groove topography under the Dirac delta type anisotropic surface stiffness in bicrystal thin solid films, *J. Apply. Phys.*, 102, 063517 (2007).

OĞURTANI, T O., The orientation dependent electromigration induced healing on the surface cracks and roughness caused by the uniaxial compressive stresses in single crystal metallic thin films. *J. Appl. Phys.* 106, 053503 (2009); doi:10.1063/1.3211855

OĞURTANI, T.O., SEEGER, A.K., The kinetics of hopping motion of interstitials with chemical-reactions in arbitrary time-dependent inhomogeneous interactive fields, *J. Chem. Phys.*, 79 (10), 5041 (1983).

OĞURTANI, T.O., GUNGOR, R., The power spectrum associated with a kink chain oscillating in a nonstokesian atmosphere of paraelastic interstitials, *J. Alloys and Compounds*, 211/212, 140 (1994).

OĞURTANI, T.O., OREN, E.E., Computer simulation of void growth dynamics under the action of electromigration and capillary forces in narrow thin interconnects, *J. Apply. Phys.*, 90 (3), 1564 (2001).

OĞURTANI T.O., OREN, E.E., Electromigration-induced void grain-boundary interactions: The mean time to failure for copper interconnects with bamboo and near-bamboo structures, *J. Appl. Phys.*, 96, 7246 (2004).

OĞURTANI , T.O., OREN, E.E., Irreversible thermodynamics of interfacial triple junctions with a special reference to the void intergranular motion under the electromigration forces, *Int. J. Solids Struct.*, 42 ,3918 (2005).

OĞURTANI, T.O., AKYILDIZ, O., Grain boundary grooving and cathode voiding in bamboo-like metallic interconnects by surface diffusion under capillary and electromigration forces, *J. Appl. Phys.*, 97 093520 (2005).

OĞURTANI, T.O., AKYILDIZ, O., *Computer simulations on grain boundary grooving and cathode edge displacement in bamboo-like metallic interconnects*, in: Materials, Technology and Reliability of Low-k Dielectrics and Copper Interconnects, ed: Tsui T.Y., Joo Y-C., Volinsky A.A., Lane M., Michaelson L., Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 914 Warrendale, PA, (2006). Pp. 0914-F09-22

OĞURTANI, T.O., AKYILDIZ, O., Morphological evolution of voids by surface drift-diffusion driven by the capillary, electromigration and thermal-stress gradient induced by the steady state heat flow in passivated metallic thin films and flip chip solder joints:
Part-I (Theory), *J. Appl. Phys.*, 104, 023521 (2008).

OĞURTANI, T.O., AKYILDIZ, O., Morphological evolution of voids by surface drift-diffusion driven by the capillary, electromigration and thermal-stress gradient induced by the steady state heat flow in passivated metallic thin films and flip chip solder joints:
Part-II (Applications), *J. Appl. Phys.*, 104, 023522 (2008).

OĞURTANI, T.O., AKYILDIZ, O., Morphological Evolution of Intragranular Void under the Thermal-Stress Gradient Generated by the Steady State Heat Flow in Encapsulated Metallic Films: Special Reference to Flip Chip Solder Joints, *Solid State Phenomena*, Volume 139, pp.151, 2008. Selected, peer reviewed papers from the Symposium: Theory, Modeling and Numerical Simulation of Multi-Physics Materials Behavior organized within the MRS Fall Meeting 2007 held in Boston MA, USA, November 26-30, 2007. Editors: Veena Tikare, Graeme E. Murch, Frédéric Soisson and Jeung Ku Kang

OĞURTANI, T.O., AKYILDIZ, O., Cathode edge displacement by voiding coupled with grain boundary grooving in bamboo like metallic interconnects by surface drift-diffusion under the capillary and electromigration forces, *Int. J. Solids Struct.* 45, 921 (2008).

OĞURTANI, T.O., CELIK, A., Surface morphological evolution of single crystal films by strong anisotropic drift diffusion under capillary and electromigration forces, *J. Appl. Phys.* 100, 043504 (2006).

OĞURTANI, T.O., CELIK, A., OREN, E.E., Morphological evolution of edge-hillocks on single crystal films having anisotropic drift-diffusion under the capillary and electromigration forces, *Thin Solid Films*, Volume 515, Issue 5, 22, 2974-2983, (2007).

OĞURTANI, T.O., CELIK, A., OREN, E.E., Stranski-Krastanow island formation in epitaxially strained flat droplets on rigid substrates, submitted (2009).

ONSAGER, L., FUOSS, R.M., Irreversible processes in electrolytes. Diffusion, conductance, and viscous flow in arbitrary mixtures of strong electrolytes, *J. Phys. Chem.*, 36, 2689 (1932).

OREN, E.E., OĞURTANI, T.O., *Void intergranular motion under the action of electromigration forces in thin film interconnects with bamboo structure*, ed: C.S. Ozkan, R.C. Cammarata, L.B. Freund, H. Gao, Mater. Res. Soc. Symp. Proc., 695, 209. (2002). Pp. L5.5.1-L.5.5.7

PAN, J., COCKS, A.C.F., A numerical technique for the analysis of coupled surface and grain-boundary diffusion, *Acta Metall. Mater.*, 43 (4), 1395 (1995).

PRIGOGINE, I., *Etude Thermodynamique des phenomenes irreversibles*, Dunod, Paris, and Desoer, Liege, (1947).

RAMASUBRAMANIAM, A., SHENOY, V.B., Three-dimensional simulations of self-assembly of hut shaped Si-Ge quantum dots, *J. Appl. Phys.*, 95, 7813-7824 (2004).

RAMASUBRAMANIAM, A., SHENOY, V.B., On the evolution of faceted grain boundary grooves by surface diffusion, *Acta Mater.*, 53, 2943 (2005).

RICE, J., CHUANG, T.J., Energy variations in diffusive cavity growth, *J. Am. Ceram. Soc.*, 64 (1), 50 (1981).

SACHENKO, P., SCHNEIBEL, J. H., SWANADER, J. G., and Zhang, W., Experimental and simulated grain boundary groove profiles in tungsten, *Phil. Mag. Lett.* 80,627 (2000).

SHIN, W., SEO, W., Koumoto, K., Grain-boundary grooves and surfaces diffusion in polycrystalline alumina measured by atomic force microscope, *J European Ceramic Soc*, 18, 595 (1998).

TUNG, R. T., GRAHAM, W. R., Single atom self-diffusion on nickel surfaces, *Surface Science*, 97 (1), 73-87 (1980)

VERSCHAFFELT ,J.E., The thermomechanics of the superficial layer. I. Generalities; pure substances, *Bull. Sci. Acad. R. Belg. B. Cl. Sci.*, 22, 373 (1936).

WANG, W.Q., SUO, Z., A simulation of electromigration-induced transgranular slits, *J. Appl. Phys.*, 79 (5), 2394 (1996).

XIN, T., WONG, H., Grain-boundary grooving by surface diffusion with strong surface energy anisotropy, *Acta Mater.*, 51 (8), 2305 (2003)

ZHANG, W., SACHENKO, P., and GLADWELL, I., Thermal Grain Boundary Grooving with Anisotropic Surface Free Energies, *Acta Mater.*, 52, 107-116 (2004)

TÜBİTAK
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje No: 107M011
Proje Başlığı: İnce Film Metalik İletişim Bağlarında Oluşan Elektrogöç Güdümündeki İç Makro Boşlukların ve Yüzey Tane Oluklarının Hidrostatik ve Çift Akslı Gerilimler Altındaki Dinamiklerinin Matematik Modellemesi ve Bilgisayar Benzetimi.
Proje Yürütücüsü ve Araştırmacılar: Prof. Dr. Tarık Ömer OĞURTANI, Prof. Dr. Ali KALKANLI, Dr. Ersin Emre ÖREN
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi: Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Metalürji ve Malzeme Mühendisliği
Destekleyen Kuruluş(ların) Adı ve Adresi: Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri: 01.09.2007 – 31.08.2009
Öz (en çok 70 kelime) Mikro-elektronik devrelerde ara bağlantı elemanı (metallizations) olarak kullanılan alüminyum ve bakır ince filmlerde, özellikle elektrik akımına dikey doğrultudaki tane sınırlarında kitlesel boşlukların oluşması ve bunların elektrogöç (electromigration) kuvvetlerinin etkisi ile hareket ve şekil değiştirmeleriyle ortaya çıkan devre kesintilerinin sonuçta sistemin top yekün tahribatına yol açmasının fiziki nedenselliğinin bilgisayar benzetimi ile incelenmesi Oğurtanı tarafından kurulan tersinemez ısıl devingen kuram sayesinde mümkün olmuştur. Özellikle yüksek sıcaklıklarda pasife olmuş metalik ara bağlarda ortaya çıkan ısıl-mekanik gerilimlerin, iç boşluklar ve dış yüzey morfolojisine olan etkilerinin sistemin tahribatı ile olan ilişkileri, yüzey difüzyon katsayısındaki ve yüzey özgül Gibbs serbest erkesindeki eşyönsüzlüğün etkileri incelenmiştir.
Anahtar Kelimeler: Elektrogöç, ısıl göç, ince film mekaniği, tahribat mekaniği, boşluk büyümesi, ara yüz ve yüzeyler, difüzyon.
Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu mu? Evet <input type="checkbox"/> Gerekli Değil <input checked="" type="checkbox"/> Fikri Ürün Bildirim Formu'nun tesliminden sonra 3 ay içerisinde patent başvurusu yapılmalıdır.
Projeden Yapılan Yayınlar: T. O. OGURTANI, Dirichlet extremum problem associated with the asymmetric grain-boundary groove topography under the Dirac delta type anisotropic surface stiffness in bicrystal thin solid films. Journal of Chemical Physics, 102, 063517 (2007). T. O. OGURTANI and O. AKYILDIZ, Cathode edge displacement by voiding coupled with grain boundary grooving in bamboo like metallic interconnects by surface drift-diffusion under the capillary and electromigration forces. International Journal of Solids and Structures, 45, 921 (2008). T. O. OGURTANI, O. AKYILDIZ and E. E. OREN, Morphological evolution of tilted grain-boundary thermal grooving by surface diffusion in bicrystal thin solid films having strong anisotropic surface

Gibbs free energies.

[Journal of Applied Physics, 104, 013518 \(2008\).](#)

T. O. OGURTANI and O. AKYILDIZ, Morphological evolution of voids by surface drift-diffusion driven by the capillary, electromigration and thermal-stress gradient induced by the steady state heat flow in passivated metallic thin films and flip chip solder joints: Part-I (Theory).

[Journal of Applied Physics, 104, 023521 \(2008\).](#)

T. O. OGURTANI and O. AKYILDIZ, Morphological evolution of voids by surface drift-diffusion driven by the capillary, electromigration and thermal-stress gradient induced by the steady state heat flow in passivated metallic thin films and flip chip solder joints: Part-II (Applications).

[Journal of Applied Physics, 104, 023522 \(2008\).](#)

T. O. OGURTANI and O. AKYILDIZ, Morphological evolution of intragranular void under the thermal-stress gradient generated by the steady state heat flow in encapsulated metallic films: Special reference to flip chip solder joints.

[Solid State Phenomena, 139, 151 \(2008\).](#)

T. O. OGURTANI, Thermal grain-boundary grooving in bicrystal thin solid films having strong anisotropic surface Gibbs free energy represented by the modified cycloid-curtate function.

[Journal of Crystal Growth, 311, 1584-1593 \(2009\).](#)

T. O. OGURTANI, The orientation dependent electromigration induced healing on the surface cracks and roughness caused by the uniaxial compressive stresses in single crystal metallic thin films.

[Journal of Applied Physics, 106, 053503 \(2009\).](#)

T. O. OGURTANI, A. CELIK, and E. E. OREN, Stranski-Krastanow island formation in epitaxially strained flat droplets on rigid substrates.

[Manuscript submitted for publication. Journal of Applied Physics 2009, September.](#)