

Proje No: 104M399

**Mikro elektronik Devrelerde Metalik İletişim Bağlarının Elektro göç
Sonucu Tahribatının Bilgisayar Modellemesi:**

**Özellikle Difüzyon Anisotropisinin ve Termal Streslerin Yüzey
Morfolojisine ve Katot Tahribatına Etkileri**

Prof. Dr. Tarık Ömer OĞURTANI
Doç. Dr. Mehmet Kadri AYDINOL
Dr. Ersin Emre ÖREN

Öncü AKYILDIZ
Aytaç ÇELİK

TEMMUZ 2007
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. İslanma, sinterleme, tane büyümesi, tane sınırı oluklaşması, ince filmlerin büyümesi bu tarzdaki şekil ve mikro yapısal değişikliklere örnektir. Bu yüzeylerin eşyönsüzlüğü (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 bu projede, 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 bařlarda elektro g tarafından indklenen tahribat ok karışık bir olaydır. Bu olay kafes boşluklarının ve/veya atomların, kompozisyon deęişmeksizin akılarının yığılması (divergence), boşlukların ve tepeliklerin doğup, büyüyüp, şekil deęiřtirmeleri ile yakından ilişkilidir. Bařların kesit boyutlarının mikron altı deęerlere düřtüęü yerlerde bambu benzeri tane yapıları ortaya ıkmaktadır. Bu ince filmler yarı iletken tabanlara birleřtirilmekte ve dielektrik malzemelerle yüksek sıcaklıklarda kapsüle edilmektedir. Metal filmle evre malzemesi arasındaki ısıl genleřme katsayısının farklı oluřu alıřma sıcaklıklarında ısıl mekanik gerilmelerin ortaya ıkmasına sebep olmaktadır. Bořluklar film kenarlarında ve tercihen tane sınırlarının yüzeyleri kestięi yerlerde, gerilmeyi gevřetme mekanizması oluřturmak üzere doğmaktadır. Akabinde elektrik alan tatbik edildięinde boşluk arabaę hattı boyunca hareket ederek tane iine yerleřmekte, elektrik akımı ve kalıntı gerilmelerin etkisi ile morfolojik deęişimlere uğramaktadır.

Oęurtanı (2000) ok katmanlı sistemlerde boşlukların eęrisel yüzeylerinin, üçlü düęüm noktaları olsun veya olmasın, kapiler, elektro g ve ısıl gerilme alanları etkileřimlerinin tesiri altında morfolojik evriminin tersinemez ısıl devingen kuramını ortaya koymuřtur. Bu kuram, hareket halinde serbest sınır řartlarına haiz iyi huylu bir matematik model ortaya ıkarmıř, ok bařarılı bir řekilde taneler ii (Oęurtanı, Ören, 2001), ve taneler arası (Ören, Oęurtanı, 2002; Oęurtanı, Ören, 2004) boşluk dinamięi bilgisayar benzetimlerinin gerekleřmesini saęlamıřtır. Taneler arası boşluk dinamięi, boşluklarla tane sınırları arasındaki etkileřim ile sıkı ilişkili olup, literatürde ilk defa ele alınmıřtır. Üçlü düęüm noktalarının dengesiz sistemler ısıl devingen kuramı literatüre ilk defa bu alıřmalar ile girmiřtir. Yine aynı konu deęiřkenler hesabı (calculus of variations) kullanılarak formüle edilmiř ve ok zengin bulgular elde edilmiřtir.

Anahtar Sözcükler: Elektro g, ısıl g, ince film mekanięi, tahribat mekanięi, 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 capsulated 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 (Oğurtanı, Ören, 2001) and the intergranular (Ören, Oğurtanı, 2002; Oğurtanı, 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	3
2.1. Yüzeylelerin ve ara yüzlelerin tersinemez ısı devingen kuramı	3
2.1.1. Ayrıık mikro elamanlar için dâhili entropi üretimi	3
2.1.2. Üçlü kavşak ve sıradan noktaların sanal hareketi ile dâhili entropi üretimi	5
2.1.3. Tane sınırı ile etkileşim halindeki ara yüzlelerin sanal hareketi ile global dâhili entropi üretimi	9
2.1.4. Eşyönsüz yüzey ve aryüzler	12
2.1.5. Doğrusal istikrarsızlık analizi	14
2.1.5.1. Elektrogöç'ün tek kristal ince filmlerin kararsızlığı üzerine etkileri	16
2.1.5.2. Gerilme alanının tek kristal ince filmlerin kararsızlığı üzerine etkileri	18
2.2. Tersinemez ısı devingen kuramın deęişkenler hesabı kullanılarak elde edilmesi	21
3.2.1. Global dâhili entropi üretimi	21
3.2.2. Zayıf çözüm	24
3. GEREÇ VE YÖNTEM	26
3.1. Kullanılan araç ve gereçler	26
3.2. Fiziki ve matematiksel modelleme, sayısal yöntemler	27
3.2.1. Kuvvetli çözümler için genel strateji	27
3.2.1. Zayıf çözümler için genel strateji	33

4. BULGULAR VE TARTIŞMA	38
4.1. Tek kristal ince filmler	38
4.1.1. Tek kristal film yüzeylerinin kapiler ve elektrogöç kuvvetlerinin etkisi altında, kuvvetli sürükleme difüzyonu eşyönsüzlüğünde şekilsel evrimi.....	38
4.1.2. Tek kristal filmlerde yüzey tepeliklerinin kapiler ve elektrogöç kuvvetlerinin etkisi altında, kuvvetli sürükleme difüzyonu eşyönsüzlüğünde şekilsel evrimi	43
4.1.3. Kapsüle edilmiş ince metalik filmlerde tane içi boşlukların kapiler, elektrogöç ve nispeten dengeli ısı akışından kaynaklı ısı gerilme gradyanının etkisi altında yüzey sürükleme difüzyonu ile şekilsel evrimi.....	46
4.2. Çift kristal ince filmler ve tane sınırı oluşması	50
4.2.1. Bambu benzeri metalik ara bağlantılarda kapiler ve elektrogöç kuvvetlerinin etkisi altında yüzey sürükleme difüzyonu ile gerçekleşen tane sınırı oluşması ve katot boşalması	50
4.2.3. Kuvvetli eşyönsüz yüzey özgül Gibbs serbest enerjisine sahip nano boyutlu arabağlantı elemanlarında ısı tane sınırı oluşması.....	53
5. SONUÇ	56
REFERANSLAR	58

ŞEKİL LİSTESİ

2.1.2.1	Üçlü kavşağın tane sınırı boylamında yer değiştirmesi. a) Üçlü kavşak makro yapısı. b) Üçlü kavşak mikro yapısı.	5
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.	15
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. $\chi = 0.75$, $A = 5$	16
2.1.5.1.2	Farazi tek kristal ince film model	17
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) $B = 1$	17
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): $Tr\lambda = 0.30$, $E_o = 1.19 \times 10^{11} NM^{-2}$, $\nu \cong 0.34$, $g_o^0 \cong 1.6 JM^{-2} (0.1eVA^{-2})$	19
2.1.5.2.2	Kararsızlık büyüme hızı katsayısının üç farklı gerilme değeri, $ \tilde{\sigma} = 10^{-5} (1.19MPa)$, $ \tilde{\sigma} = 10^{-4} (11.90MPa)$, $ \tilde{\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.....	20
2.2.1	Üçlü kavşak makro yapısı. $\{\hat{t}^+, \hat{t}^-, \hat{t}_g\}$ değişkenleri üçlü kavşak etrafındaki tanjant yöneyleridir	21
3.2.1.1	Eğrilik yarıçapının hesabında kullanılan, ardışık üç düğümden geçen çember.....	28
4.1.1.1	Başlangıç morfolojisi	39
4.1.1.2	Difüzyon katsayısı türevlerinin difüzyon dönme açısına göre grafiği	39
4.1.1.3	a) Soliton oluşumu, b) normalize edilmiş konum zaman grafiği.....	40

4.1.1.4	Yüzey duvarının diğer yüzeye ulaşp teli kırması.....	41
4.1.1.5	Elektron rüzgârı şiddetine karşılık kısa devre zamanı	41
4.1.1.6	Üçgen şekilli iç boşluğun katot yönünde hareketi	42
4.1.1.7	Yüzeyde kıvrım oluşumu ve katot yönünde hareketi	42
4.1.2.1	Başlangıç sistemi.....	43
4.1.2.2	Orta dereceli EWI değerlerinde yan duvarlarındaki tepeciğin morfolojik evrimi.....	43
4.1.2.3	Yüzeyin orta derecede EWI değerindeki morfolojik evrimi.....	44
4.1.2.4	Testere dişi formundaki solitari dalgaların oluşumu.....	45
4.1.2.5	Yüzeyde kıvrım şeklinde dalga oluşumu.....	45
4.1.2.6	İkili kıvrım dalgasının yüzey boyunca hareketi.....	46
4.1.2.7	Yüzeydeki yalpalanan dalgaların evrimi.....	46
4.1.3.1	En boy oranı yüksek olan, $\bar{w} = w_o / r_o = 10$, durumda ısıl gerilme gradyanının $\Xi_{grad}^{Al} = 0.5 \Rightarrow 3 \times 10^5 K/m$ değeri için boşluk hareketi. Boşluk sabit sürüklenme hızı ile yüksek sıcaklık bölgesinden (anot), düşük sıcaklık bölgesine doğru, herhangi bir çatlak oluşumuna sebebiyet vermeden yumurta şeklini alarak ilerler	47
4.1.3.2	En boy oranı yüksek olan, $\bar{w} = w_o / r_o = 10$, durumda ısıl gerilme gradyanının: $\Xi_{grad} = 1.0 \Rightarrow [Cu, Al, Sn, Pb, 37Pb63Sn \cong \{9.3, 6.1, 6.0, 4.1, 4.6\} \times 10^5 K/m]$ değeri için çatlak oluşumu ve ilerlemesi.....	48
4.1.3.3	Alüminyum ara bağlantısında $[r_o = 1\mu m]$, ısı kalabalıklaşması durumunda $\bar{w}_o = 4$, TSG değeri $[4 \times 10^5 \text{ } ^\circ K/m]$ iken ortaya çıkan yaba şekilli kesikler.....	49
4.1.3.4	Alüminyum filmde EDTI eşik değerinin hemen üstündeki TSG değeri tarafından indüklenen mikro çatlak oluşumu. $\Xi_g^{Al} = 2.25 \rightarrow 1.4 \times 10^6 \text{ } ^\circ K/m$ ve $\chi_{Al} = 10 \rightarrow 8.9 \times 10^9 A/m^2$	49
4.2.1.1	Eşyönlü malzeme için kapiler kuvvetler altında tane sınırı oluklaşmasının zamanla gelişimi. Islanma parametresi, $\lambda = 0.8$. Tane sınırı eğimleri: a) $\varphi = 120^\circ$ b) $\varphi = 90^\circ$ c) $\varphi = 60^\circ$	51

- 4.2.1.2** Eşyönlü malzeme için kapiler ve eletrogöç kuvvetler altında tane sınırı oluklaşmasının zamanla gelişimi. Bu deneylerde katot kopuşu gerçekleşene kadar sabit voltaj daha sonra sabit akım ve serbest sınır koşulları kullanılmıştır..... 52
- 4.2.1.3** 90^0 eğimli bir tane sınırında dihedral açıların sabit akım altında, iki farklı durumda (kapiler baskın, $\chi = 0.01$ ve EM baskın $\chi = 10$), zamanla değişimi..... 52
- 4.2.1.4** Katot alanındaki azalmanın, elektron rüzgarı kuvveti ve zamanın çarpımından elde edilen, evrensel zaman ile değişimi. Kapiler ve EM baskın rejimler $\chi = 1$ sınırı ile net olarak birbirlerinden ayrılırlar..... 53
- 4.2.2.1** Eşyönsüz yüzey katılığına sahip tane sınırı oluşunun şekilsel evrimi. Her iki tane de, (001) düzleminde $[100]$ yönünde $\hat{\phi} = 30^0$ açısıyla döndürülmüş dört bükümlü rotasyonel simetri ile tanımlanan aynı dokuya sahiptir. Sistem parametleri: $B = 0.1$, $\bar{M}^{long} = 10-1000$, $\bar{M}^{trans} = 0.1$, $M^{\pm} = 0.1$, $h_{\sigma} = 0.01$, ve $\lambda_{\sigma} = 0.6$ 54
- 4.2.2.2** Wulf yapılanmasında $\phi + n\pi / 2$, $n = 0,1,2,\dots$ noktalarında zirve yapan eşyönsüz yüzey katılığına sahip tane sınırı oluşunun şekilsel evrimi. Sistem parametleri: $c = 0.4$, $\bar{M}^{long} = 100$, $\bar{M}^{trans} = 100$, $M^{\pm} = 0.001$, $h_{\sigma} = 0.001$, ve $\lambda_{\sigma} = 0.6$ 55

TABLO LİSTESİ

3.1.1	Projede kullanılan donanımların listesi.....	26
3.1.2	Projede kullanılan yazılımların listesi	26

BÖLÜM 1

GİRİŞ VE GENEL BİLGİLER

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 tepelikler meydana getirirken hareket halindeki atomların boşalttığı bölgelerde boşluklar meydana gelir. Oluşan bu tepelikler 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 laboratuvar 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 ısıl devingen kuramı

Yüzey ve arayüzlerin tersinemez ısıldevingen kuramı Oğurtanı tarafından 2000 yılında yığın fazlar için Onsager (1932), Meixner (1941;1943), ve Progogine (1947) tarafından savunulan tersinemez ısıldevingen 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 normali 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, Rysselberghe, 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

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:

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

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

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

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

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

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

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 \tilde{g}_b , (yığın) ve

\tilde{g}_v (boşluk) olarak gösterilirler. Bu değerler ve Gibbs serbest erke yoğunlukları arasındaki bağıntı: $g_\sigma = h_\sigma \tilde{g}_\sigma$ 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:

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

Burada $\tilde{g}_{vb} = (\tilde{g}_v - \tilde{g}_b)$, 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 Ogurtani 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:

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

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:

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

Yukarıdaki akı formülünde λ^{-} ve λ^{+} ıslanma parametreleri 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) yardımı 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 aktive edilmiş kompleks hız kuramı yardımı ile aşağıdaki gibi yazılabilir (burada k Boltzman, h ise Plank sabitidir):

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

Eşyönlü (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:

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

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:

$$\begin{aligned} \int_{+\varepsilon}^{-\varepsilon} d\ell \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \oint_{\varepsilon} d\ell \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{T} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \oint_{\varepsilon} d\ell \left[(\bar{g}_{vb} + g_{\sigma} \kappa) \frac{d\bar{\eta}}{dt} + \Omega_{\sigma} \left(\frac{\partial}{\partial \ell} (\bar{g}_{\sigma} J_{\sigma}) + \bar{g}_{\sigma} \hat{J}_{vb} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (22)$$

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

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

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):

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

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

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

Kısmi integrasyon ile aşağıdaki denklemi elde edilir:

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

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

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

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

Yeri gelmişken belirtmelidir 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):

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

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

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. Eşyönsüz yüzey ve arayüzler

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

Sıradan noktalar için hareket hızı aşağıdaki denklem ile ifade edilir:

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

$$- \hat{n} \frac{M_{vb}}{kT} \Omega_{\sigma}^2 \left\{ \Delta \tilde{g}_{\beta b} + \frac{1}{2} [\kappa_1 + \kappa_2] g_{\sigma}(\hat{n}) + \nabla_s \bullet \frac{\partial [g_{\sigma}(\hat{n})]}{\partial \hat{n}} \right\}$$

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

$$\nabla_s \equiv \kappa_1 \hat{u}_1 \frac{\partial}{\partial \omega_1} + \kappa_2 \hat{u}_2 \frac{\partial}{\partial \omega_2} \equiv \hat{u}_1 \frac{\partial}{\partial l_1} + \hat{u}_2 \frac{\partial}{\partial l_2} \quad \text{ve} \quad \frac{\partial}{\partial \hat{n}} \equiv \hat{u}_1 \frac{\partial}{\partial \omega_1} + \hat{u}_2 \frac{\partial}{\partial \omega_2} \quad (34)$$

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 enerji yoğunlukları bu değişkene bağımlı olarak tanımlanır, burada önemli tanımlamalardan bir tanesi yüzey katılığı kavramıdır $[g^\sigma + g_{\omega\omega}^\sigma]$ (altsimgge türevi ifade eder, surface stiffness). Yüzey katılığı, özgül yüzey serbest enerjisi 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.

Burada bahsi geçen çalışma (Oğurtanı, 2006-1) yayınlandığı dergiden (Journal of Chemical Physics) bağımsız olarak, Mayıs 2006'da nano teknoloji alanında önemli görülen makalelerin toplandığı bir dergi olan '*Virtual Journal of Nanoscience and Technology*' dergisinde yayınlanmak üzere istenmiştir.

2.1.5. Doğrusal istikrarsızlık analizi

Proje kapsamında Phys Rev B'ye sunulan ve 2006 yılında yayınlanan çalışmada Oğurtanı (2006-2) önce sıradan noktalar için verilen diferansiyel denklemi ısııl göç (Soret etkisi (Haase, 1969)) için ele almış, daha sonra uygulanan gerilmenin eşyönsüz 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:

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

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

Burada, Υ_{σ} , Υ_b , boyutsuz ısııl 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.

Eşyönsüz difüzyon katsayısını ve yüzeyin özgül Gibbs serbest erkesini θ ve ϕ açılarına (sırası ile yüzey tanjant yöneyinin x eksenini ile yaptığı açı, ve yüzey

normalinin x eksenini ile yaptığı açı (eğilme açısı, tilt angle)) ve yarım büküm sayısına, m (half fold number) bağlı olarak veren denklemler aşağıdadır:

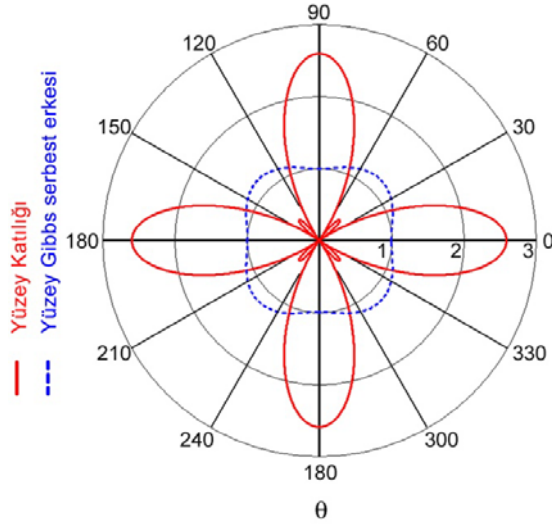
$$\hat{D}(\theta, \phi; m) = D(\theta, \phi; m) / D_o = \{1 + A \cos^2 [m(\theta - \phi)]\} \quad (39)$$

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

Bu son denklemden yüzey katılığını ifade eden denklem elde edilir:

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

Bu denklemlerde A ve B eşyönsüzlüğün 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.

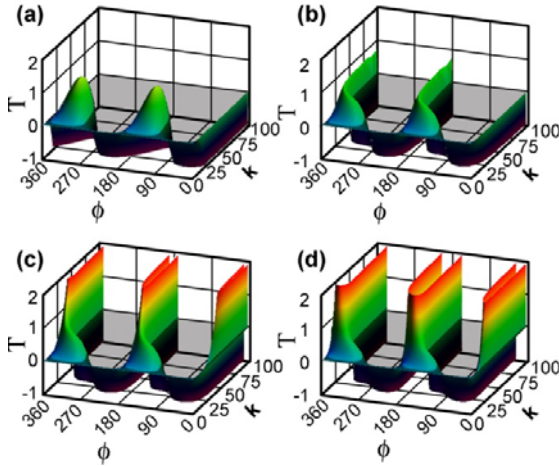
Bu konu, bulgular bölümünde tane sınırı oluşmasının deneysel sonuçlarında sistem üzerine olan etkisini gösterecektir. Bu noktada denklem (38)'in birinci dereceden doğrusal kararlılık analizine geçilerek konu iki alt başlıkta ele alınacaktır.

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

Bu alt başlıkta kapiler ve elektrogöç kuvvetlerin eşyönsüz 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:

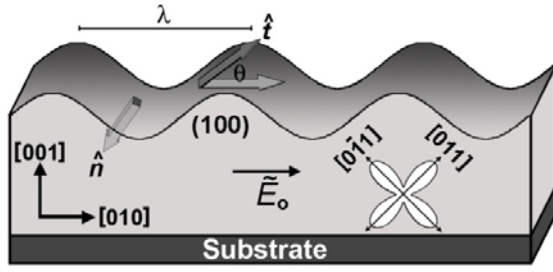
$$\Gamma \equiv kv_{im} = -\chi mk^2 A \sin[2m\phi] - \left\{ [1 + A \cos^2 m\phi] k^2 + \bar{M}_{vb}^o \right\} \hat{\gamma}(\pi/2, \hat{\phi}) k^2 \quad (42)$$

Burada k dalga sayısı, ϕ daha önceki gibi eğilme açısıdır. Bu değerler 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; $B=0$ (eşyönlü duruma denk gelir) ve $B=1$ göstermektedir. Bu figürlerde pozitif yüzey katılığı için kararsızlık bölgeleri $\Gamma=0$ düzlemine olan izdüşümü bölgeleridir. Gibbs serbest erkesindeki eşyönsüzlüğün 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 diadic'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.



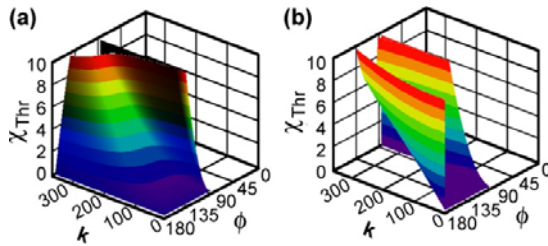
Şekil 2.1.5.1.2. Farazi tek kristal ince film model.

Şekil 2.1.5.1.1'e ait c) ve d) şıklarında B değerleri sırası ile $B=1.1$ ve $B=2.0$ dır. Negatif yüzey katıllılığının 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 çizilmektedir. Bu denklem:

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

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) eşyönlü ve b) eşyönsüz durumlar için elektron rüzgârı eşik değeri, eğilme açısı ve dalga sayısına bağlı değişimi. $A=5$, a) $B=0$ ve b) $B=1$

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):

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

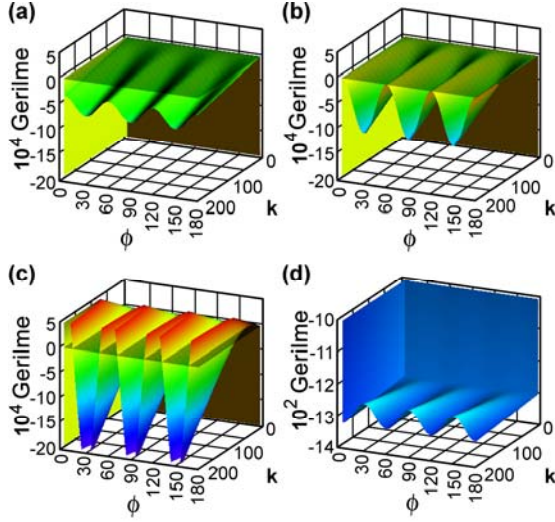
Burada, $\Xi_s = (1 + \nu) \frac{\ell_o \sigma_o}{3g_s^o} |Tr \underline{\lambda}_s^V|$ ve $\Xi_b = (1 + \nu) \frac{\ell_o \sigma_o}{3g_s^o} |Tr \underline{\lambda}_b^V|$ arayüz katmanı ve yığın faz için elastik çift kutup etkileşim şiddeti, $\underline{\lambda}$ 'lar ise arayüz katmanlarındaki hareketli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

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

Burada fazla detaya girmeden belirtmelidir ki, denklem içindeki v 'nin kendisi karmaşık bir niceliktir ve faz hızı olarak tanımlanır, denklemin bu hali ile görünmeyen birçok önemli parametreyi içerir. a_ε gezinen dalganın 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.

Şekil 2.1.5.2.1'de denklem (45)'ten yararlanılarak, elektrogöç kuvvetlerinin yokluğunda, $(111) \times [211]$ dokusundaki ince bakır filmin şekil değiştirmesi esnasında tek eksenli gerilmeden kaynaklı kararsızlık yüzeyleri çizilmiştir.



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):

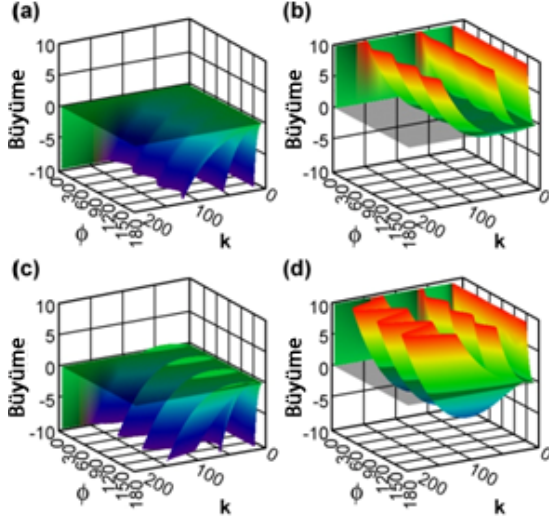
$$Tr\lambda = 0.30, E_o = 1.19 \times 10^{11} NM^{-2},$$

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

Şekil 2.1.5.2.1 a) $B = 0.02$ ve b) $B = 1/17$ 'den görüldüğü gibi düşük eşyönsüzlük değerleri 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.

Şekil 2.1.5.2.2'de kararsızlık büyüme hızı katsayısının denklem (44) kullanılarak dalga sayısı ve eğilme açısına bağlı değişimi çizilmiştir.



2.1.5.2.2. Kararsızlık büyüme hızı katsayısının üç farklı gerilme değeri, $|\tilde{\sigma}|=10^{-5}$ (1.19MPa), $|\tilde{\sigma}|=10^{-4}$ (11.90MPa), $|\tilde{\sigma}|=10^{-2}$ (1.19GPa), 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.

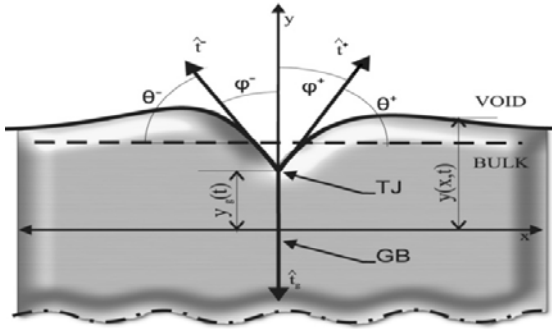
Şekil 2.1.5.2.2’ye bakıldığında gerilme eşdeğer yüzey seviyesi yapraklarının sıkıştırma gerilmesi (b,d) için saat yönünde, çekme gerilmesi (a,c) için saat yönünün tersine döndükleri görülür. Şekil 2.1.5.2.2 (b,d)’ye göre sistem kritik ($\phi = 30^\circ, 90^\circ, 150^\circ$) açıları arasında uygulanan 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 katılığında 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 nedenlerledir 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 eşyönsüz özgül Gibbs serbest enerjilerine 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 $g_g(\mathcal{G})$, ile ifade edilir, burada \mathcal{G} tane sınırı profilinin tanjant yöneyinin y - eksenine 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 $\pm \vec{\varepsilon}(t_j)$ pozisyon yöneyleri ile, yöneysel değişken operatörü de $\pm \delta \vec{\varepsilon}$ 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 enerjisi aşağıdaki fonksiyonel ile ifade edilebilir:

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

$y(x,t)$ ve $x(y,t)$ tane sınırı profil fonksiyonları, θ şekil 2.2.1'de gösterildiği gibi profilinin tanjant yöneyinin x - eksenine ile yaptığı açı, $\bar{\varepsilon}(tj)$ ise kavşağın geçici pozisyonudur. $\oint_{+\varepsilon \rightarrow -\varepsilon}$ 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 fonksiyonundaki değişim ile ilişkili global dahili entropi üretimindeki (global internal entropy production, GIEP) değişim, aşağıdaki denklem ile verilir:

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

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

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

Denklemdaki, $\delta \eta = -(1+y_x^2)^{-1/2} \delta y$ ifadesi arayüz katmanının yüzey normalini boyunca yığın faza doğru sanal yer değiştirmesidir. Bu denklemle verilen değişkenler problemi

bir fonksiyonelin, $y(x,t)$ ve $x(y,t)$ profil fonksiyonlarının rasgele seçilmiş entegrasyon limitlerinde rasgele değişimlerinin, genel değişimini 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 değer probleminin Weiserstrass-Erdmann koşullarının tüm köşe noktalarda (mesela üçlü kavşak) sağlanması durumunda bir zayıf çözümü olabilir. Bu ifadede $F \Leftarrow g_\sigma \left(\tan^{-1}(y_x) \right) \sqrt{1+y_x^2}$ ataması yapıldıktan sonra, önce değişim operasyonu gerçekleştirip sonra kısmi entegrasyon yürütürse aşağıdaki ifade elde edilir:

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

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:

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

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

(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, GIEP'nin hızı (rate of global internal entropy production, RGIEP) 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 kavramlarda faydalanarak ve bir önceki bölümde gösterilmeye çalışılan değişkenler hesabı uygulamasını devam ettirerek üçlü kavşak tekliği içeren yüzeyler için uç değer problemin aşağıdaki zayıf çözümü elde edilir (detaylar için: Oğurtanı, 2006-3):

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

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.

Burada özetlenen çalışma da (Oğurtanı, 2006-3) yayınlandığı dergiden (Physical Review B) bağımsız olarak, Temmuz 2006'da 'Virtual Journal of Nanoscience and Technology' dergisinde yayınlanmak üzere istenmiştir.

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, Fujitsu 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
HEXA, PC IBM Thinkcentre Pentium IV 3 Ghz, 60 Gb HDD, 512 Mb RAM	Benzetim deneyleri
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
GAMMA, PC Intel Pentium III 800, 20 Gb HDD, 512 Mb RAM	Data analizi
CSL, PC Intel Pentium II 266, 9.1 Gb HDD, 256 Mb RAM	Web sunucusu

Tablo 3.1.2. Projede kullanılan yazılımların listesi.

ADI/MODELİ	PROJEDE KULLANIM AMACI
Intel Visual Fortran/C++ Compiler, 9.1	Kaynak kodlarının hazırlanması ve derlenmesi
MS Visual Studio .Net 2003	Kaynak kodlarının hazırlanması
IMSL, FNL 5.0	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:

$$\bar{V}_{ord} = \frac{\partial}{\partial \bar{\ell}} \left[D''(\theta, \phi) \frac{\partial}{\partial \bar{\ell}} (\Delta \bar{g}_{vb} + \chi \bar{\mathcal{G}} + \bar{\kappa}) \right] - \bar{M}_{vb} (\Delta \bar{g}_{vb} + \bar{\kappa}) \quad (53)$$

Üçlü kavşak için ise denklemler aşağıdaki gibidir:

$$\bar{V}_g^{long} = \bar{M}^{long} \frac{\bar{\Omega}_g \bar{d}_a}{2\bar{\Omega}_\sigma^2 \bar{h}_g} \left[2\lambda - (\cos \theta^+ + \cos \theta^-) \right] \quad (54)$$

$$\bar{J}_o^\mp = \mp \bar{M}^{long} \frac{\bar{d}_a}{2\bar{\Omega}_\sigma^2} (\lambda - \cos \theta^\mp) \mp \bar{J}_g / 2 + \bar{J}_g + \bar{M}^{trans} \frac{\bar{d}_a}{\bar{\Omega}_\sigma^2} (\sin \theta^+ - \sin \theta^-) \quad (55)$$

Burada $\bar{\kappa}$ lokal eğrilik yarıçapı, $\bar{\ell}$ boşluk yüzeyi boyunca eğriliği olan 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:

$$\bar{t} = t / \tau_o, \quad \bar{\ell} = \ell / \ell_o, \quad \bar{\kappa} = \kappa \ell_o, \quad \bar{w}_o = w_o / \ell_o, \quad \bar{L} = L / \ell_o \quad (56)$$

$$\Delta \bar{g}_{vb} = \frac{\bar{g}_{vb} r_o}{g_\sigma}, \quad \bar{\mathcal{G}} = \mathcal{G} / (E_o \ell_o), \quad \chi = e |\bar{Z}| E_o \ell_o^2 / (\Omega_\sigma g_\sigma)$$

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 enerjisinden 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.

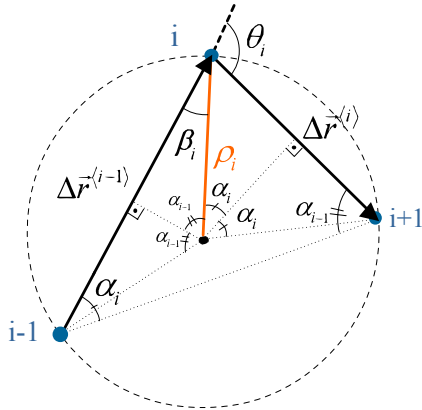
Varsayımsal sistemler iki boyutlu olmasına karşın yöney cebirini (vector algebra) kullanabilmek için sistem düğümleri (nodes) aşağıdaki gibi üç boyutlu yöneyler ile temsil edilirler:

$$\vec{r}^{(i)} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ 0 \end{pmatrix} \quad (57)$$

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

$$\Delta \vec{r}^{(i)} = \vec{r}^{(i+1)} - \vec{r}^{(i)} \quad s_i = \left| \Delta \vec{r}^{(i)} \right| \quad (58)$$

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:

$$\rho_i = \frac{s_i}{2 \sin(\alpha_i)} \quad \kappa_i = \frac{1}{\rho_i} = \frac{2 \sin(\alpha_i)}{s_i} \quad (59)$$

α_i in tanjantı aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$\tan(\alpha_i) = \frac{\sin(\theta_i)}{\frac{s_{i-1}}{s_i} + \cos(\theta_i)} \quad (60)$$

Bu formüller kullanılarak kapiler kuvvet aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$\kappa_i = \frac{2 \sin \left(\operatorname{atan} \left(\frac{\sin(\theta_i)}{\frac{s_{i-1}}{s_i} + \cos(\theta_i)} \right) \right)}{s_i} \quad (61)$$

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 denkleminde 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, 2007). 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:

$$\nabla^2 g(r) = 0 \quad (62)$$

Sistemin sınır koşulları aşağıdaki gibi tanımlanmıştır:

$$\hat{n} \cdot \nabla g(r) = \hat{n} \cdot \frac{\partial g(r)}{\partial r} \hat{r} = 0 \quad (63)$$

$g(r)$ 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:

$$U(P, Q) = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{1}{r} \quad (64)$$

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

$$u(Q) = \int_S U(P, Q) \mu(P) dS_P \quad (65)$$

$\mu(P)$ 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:

$$\frac{1}{2}\mu(Q) + \int_S T(P, Q)\mu(P)dS_P = \bar{t}(Q) \quad (66)$$

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

$$\frac{1}{2}\mu(Q_i) + \sum_{j=1}^N \Delta T_{ij}\mu(Q_j) = \bar{t}\mu(Q_i) \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (67)$$

ve

$$\Delta T_{ij} = \int_{S_j} T(P_j, Q_i)dS_{p_j} \quad (68)$$

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

$$\mathcal{G}(r) = \mathcal{G}^I(r) + \mathcal{G}^{II}(r) \quad (69)$$

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

$$\begin{aligned} E(Q) &= -grad(\mathcal{G}(Q)) \\ &= -grad(\mathcal{G}^I(Q)) - grad(\mathcal{G}^{II}(Q)) = E^I(Q) + E^{II}(Q) = 0 \end{aligned} \quad (70)$$

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

$$\mathcal{G}^I(Q) = -E_o x = -E_o \vec{r} \cdot \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} = -E_o r \cos(\phi) \quad (71)$$

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

$$E^I(Q) = -grad(\mathcal{G}^I(Q)) = -\hat{n} \cdot \nabla \mathcal{G}^I(Q) = -E_o \cos(\phi) \quad (72)$$

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

$$E^{\text{II}}(Q) = -E^{\text{I}}(Q) = E_0 \cos(\phi) \quad (73)$$

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:

$$\frac{1}{2} \mu(Q_i) + \sum_{j=1}^N \Delta T_{ij} \mu(Q_j) = E^{\text{I}}(Q_i) \quad (74)$$

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

$$\mathcal{G}^{\text{II}}(Q_i) = \sum_{j=1}^N \Delta U_{ij} \mu(Q_j) \quad (75)$$

ve

$$\Delta U_{ij} = \int_{S_j} U(P_j, Q_i) dS_{p_j} \quad (76)$$

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

$$\Delta T_{i,j} \cdot \mu_i = E_i^{\text{I}} \quad (77)$$

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

$\underbrace{\hspace{15em}}_{\Delta T} \quad \underbrace{\hspace{2em}}_{\mu} \quad \underbrace{\hspace{2em}}_{EI}$

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 birleştiğinde 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) oluşturmakta 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 $\alpha_n = \left(n! 2^n \sqrt{\pi} \right)^{-1/2}$ normalizasyon katsayısı olarak devreye girer. Hermite polinomları için tekrarlı formüller aşağıdaki şekilde ifade edilebilir:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \quad \text{ve} \quad dH_n(x)/dx = 2nH_{n-1}(x) \quad (78)$$

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

$$\begin{aligned} \Psi_{n+1} &= \left(\sqrt{2/(n+1)}\right)x\Psi_n - \left(\sqrt{n/(n+1)}\right)\Psi_{n-1} \\ \Psi'_n &= \sqrt{n/2}\Psi_{n-1} - \sqrt{(n+1)/2}\Psi_{n+1} \\ \Psi''_n &= \frac{1}{2}\left[\sqrt{(n+1)(n+2)}\Psi_{n+2} - (2n+1)\Psi_n + \sqrt{n(n+1)}\Psi_{n-2}\right] \end{aligned} \quad (79)$$

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:

$$y(x,t) = \sum_{n=0}^{n=N} a_n(t)\Psi_n(x) \quad \text{ve} \quad J_\sigma(x,t) = \sum_{n=0}^{n=N} b_n(t)\Psi_n(x) \quad (80)$$

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

$$\frac{da_n}{dt} = -\Omega_b \sum_{m=0}^{m=N} b_m(t) \langle \Psi_n | \Psi'_m \rangle \cong \Omega_b \left[b_{n-1} \sqrt{n/2} - b_{n+1} \sqrt{(n+1)/2} \right] + O(10^{-10}) \quad (81)$$

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

$$\langle \Psi_n | \Psi'_m \rangle \cong \langle n | m \rangle' \cong -\sqrt{(m+1)/2} \delta_{n,m+1} + \sqrt{m/2} \delta_{n,m-1} \quad (82)$$

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:

$$\delta \Xi \{b_1, \dots, b_N\} \cong \delta \left\{ \begin{array}{l} -\Omega_b \sum_n b_n \int_{-\infty}^{+\infty} dx \{g'_\sigma \cos(\theta) + g_\sigma \sin \theta\} \Psi''_n \\ +\Omega_b \sum_n b_n \left\{ (g_\sigma \cos \theta - g'_\sigma \sin \theta) \Big|_{x=+\varepsilon}^{x=-\varepsilon} - g'_g \right\} h_\sigma^{-1} \Psi_n(0) \\ -\Omega_b \sum_n b_n [g_g] \Psi'_n(0) \\ +\Omega_b \frac{h_\sigma}{2d_a \hat{M}_{long}} \sum_{n,m} b_n b_m \Psi'_n(0) \Psi'_m(0) \\ +\Omega_b \frac{1}{2d_a h_\sigma \hat{M}_{trans}} \sum_{n,m} b_n b_m \Psi_n(0) \Psi_m(0) \\ +\frac{1}{2\hat{M}_\sigma} \sum_{n,m} b_n b_m \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sqrt{1 + \tan^2 \theta} \Psi_n \Psi_m \end{array} \right\} = 0 \quad (83)$$

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

$$\left\{ \begin{aligned}
& -\Omega_b \sum_n \delta b_n \int_{-\infty}^{+\infty} dx \{ g'_\sigma \cos(\theta) + g_\sigma \sin \theta \} \Psi_n'' \\
& + \Omega_b \sum_n \delta b_n \left\{ (g_\sigma \cos \theta - g'_\sigma \sin \theta)_{x=+\varepsilon}^{x=-\varepsilon} + g'_g \right\} h_\sigma^{-1} \Psi_n(0) \\
& - \Omega_b \sum_n \delta b_n [g_g] \Psi_n'(0) \\
& + \frac{\Omega_b h_\sigma}{2d_a \hat{M}_{long}} \sum_{n,m} [\delta b_n b_m] \Psi_n'(0) \Psi_m'(0) \\
& + \left[\frac{\Omega_b}{d_a h_\sigma \hat{M}_{trans}} + \frac{h_\sigma^{-1}}{\hat{M}_\pm} \right] \sum_{n,m} [\delta b_n b_m] \Psi_n(0) \Psi_m(0) \\
& + \frac{1}{\hat{M}_\sigma} \sum_{n,m} [\delta b_n b_m] \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sqrt{1 + \tan^2 \theta} \Psi_n \Psi_m
\end{aligned} \right\} = 0 \quad (84)$$

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

$$A_{m,n} = \frac{\ell_o}{\hat{M}_\sigma} \left\{ \begin{aligned}
& \frac{\bar{\Omega}_b \bar{h}_o \bar{\Psi}'_n(0) \bar{\Psi}'_m(0)}{\bar{d}_a \bar{M}^{long}} \\
& + \left[\frac{\bar{\Omega}_b}{\bar{d}_a \bar{h}_\sigma \bar{M}^{trans}} + \frac{1}{\bar{h}_\sigma (\bar{M}_\pm)} \right] \Psi_n(0) \Psi_m(0) \\
& + \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} \sqrt{1 + y_x^2} \Psi_n(\bar{x}) \Psi_m(\bar{x})
\end{aligned} \right\} \equiv \frac{\ell_o}{\hat{M}_\sigma} \bar{A}_{m,n} \quad (85)$$

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

$$c_n \equiv g_\sigma^o \Omega_b \ell_o^{-1} \left\{ \begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} \{ \bar{g}'_\sigma + \bar{g}_\sigma y_x \} / \sqrt{1 + y_x^2} \bar{\Psi}'_n(\bar{x}) \\
& - \bar{h}_\sigma^{-1} \left\{ (\bar{g}_\sigma \cos \theta - \bar{g}'_\sigma \sin \theta)_{x=+\varepsilon}^{x=-\varepsilon} + \bar{g}'_g \right\} \Psi_n(0) \\
& + [\bar{g}_g] \bar{\Psi}'_n(0)
\end{aligned} \right\} \equiv g_\sigma^o \Omega_b \ell_o^{-1} \bar{c}_n \quad (86)$$

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

$$b_m = \left[\Omega_b \hat{M}_\sigma g_\sigma^o \ell_o^{-2} \right] \sum_n \bar{A}_{m,n}^{-1} \bar{C}_n \quad (87)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{a}_k}{d\bar{t}} &= -\frac{\tau_o}{\ell_o} \Omega_b \sum_k b_m \langle k|m' \rangle \\ &= -\frac{\tau_o}{\ell_o} \left[\Omega_b^2 \hat{M}_\sigma g_\sigma^o \ell_o^{-3} \right] \sum_{m,n} \langle k|\bar{m} \rangle' \bar{A}_{m,n}^{-1} \bar{C}_n \\ &= -\sum_{m,n} \langle k|\bar{m} \rangle' \bar{A}_{m,n}^{-1} \bar{C}_n \\ \bar{a} &= -\bar{T} \bar{A}^{-1} \bar{C} \end{aligned} \quad (88)$$

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 Wulf 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.

BÖLÜM 4

BULGULAR VE TARTIŞMA

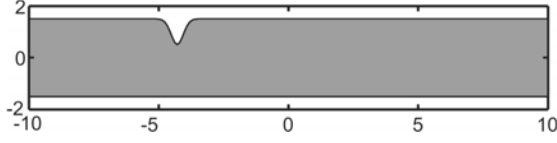
Yukarıda özetlenen kuramsal çalışmaların amacı gerçek bir fiziki model oluşturmak, normalize edilmiş ve ölçeklenmiş bilgisayar benzetim deneyleri düzenleyerek malzeme özelliklerinden bağımsız bulgular elde etmektir. Bu bulgular bize, proje başlığında belirtildiği gibi, kapiler, elektrogöç ve kalıntı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

4.1. Tek kristal ince filmler

4.1.1. Tek kristal film yüzeylerinin kapiler ve elektrogöç kuvvetlerinin etkisi altında, kuvvetli sürüklenme difüzyonu eşyönsüzlüğünde şekilsel evrimi

Bu çalışmada (Oğurtanı, Çelik, 2006) arabağın alttan ve üstten yüksek dirençli olan bir malzeme ile kaplandığı varsayılarak, bu yönlerde difüzyon bariyeri oluşturulmuştur. Sadece yan duvarların yüzey difüzyonuna maruz kaldığı varsayımı yapılmış ve çevresindeki diğer malzemelerin iletkenliği ihmal edilmiştir.

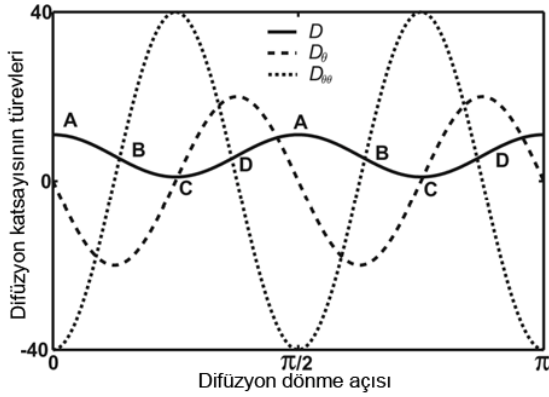
Toplamda 192 farklı birleşimde yüzey dokusu, sürüklenme difüzyonu eşyönsüzlüğü katsayısı ve elektron rüzgârı kuvveti (electron wind intensity, EWI) göz önünde bulundurularak sayısal analiz çalışmaları yapılmıştır. Tüm deneylerde EWI malzemenin boyu doğrultusunda yan yüzeyleri tarayacak şekilde uygulanmıştır. Temel olarak 4 farklı EWI aksı katsayısı uygulanmıştır bunlar: $\chi = 5, 10, 25$ and 50 . Bu değerler orta seviyeden yüksek akım yoğunluklarını kapsamaktadır ($j = 10^9 - 10^{12} \text{ A/m}^2$) ve genellikle laboratuvar şartlarında örneklere uygulanan değerlerdir. Yüzeye başlangıçta Gaussian yüzey boşluğu yerleştirilmiştir. Bu çalışmada özel tip madde korunum sınır koşulu uygulanmıştır. Bu koşul yüzey kavisliğinin birinci ve daha üst türevlerinin sıfıra eşitlenmesi ve elektrik alan yoğunluğunun katot ve anot uçlarında sonsuzdaki değere eşitlenmesi ile tanımlanır.



Şekil 4.1.1.1.

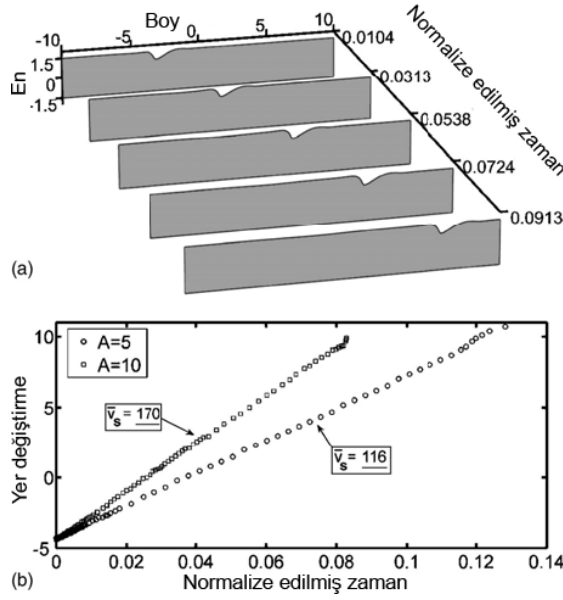
Başlangıç morfolojisi.

Yüzey morfolojisi yukarıdaki Fig 4.1.1.1 gösterilmiştir. Şekilde elektrik alanın yönü olarak sol taraftan (anot) sağ tarafa (katot) doğru alınmıştır. Deneylerde tek tanecikli ince filmin üst yüzeyi, yüzey merkezli küp (FCC) yapısının üç farklı kristalografik düzlemi ($\{\hat{1}10\}$, $\{100\}$ and $\{\hat{1}11\}$) kullanılarak modellenmiştir. Bu yüzeyler sırasıyla iki, dört ve altı katlama simetrik yapılar olarak tanımlanabilirler. Şekil 4.1.1.2 de eşyönlü difüzyon katsayısının birinci ve ikinci türevlerinin dönme açısına göre grafiği verilmiştir. EWI domine ettiği bölgelerde, sonlu genliklerdeki pertürbasyonlar için kararlılık ve kararsızlık rejimleri ($0 < \phi < \pi/2m$) ve ($\pi/2m < \phi < \pi/m$) açık aralıkları için tanımlanabilir.



Şekil 4.1.1.2. Difüzyon katsayısı türevlerinin difüzyon dönme açısına göre grafiği.

İki bükümlü simetrik düzlemde $\{110\}$ dönme açısı $\phi = 90^\circ$ olduğunda, yüzey boşluğu oldukça özel bir morfoloji evrimi gösterir (Şekil 4.1.1.3). Bu davranışta $D_\phi(0, \phi, m) = 0$ ve $D_{\phi\phi}(0, \phi, m) > 0$ değerleri sistemi karakterize eder. Bu yapılandırmada, difüzyon EWI yönünde en azdır. Kişi bu durumda Gaussian formun testere dişi şeklindeki solitari dalgaya dönüştüğünü görür.



řekil 4.1.1.3. a) Soliton oluřumu, b) normalize edilmiř konum zaman grafięi.

Elde edilen veriler deęerlendirildięinde, bořluk ucu pozisyonunun zamana karřı grafięi bize řu baęintıyı vermektedir: $\bar{x} \cong 0.78(1+A)\bar{\chi}t - 4.30$. řekil 4.1.1.3 (b) de gosterildięi gibi, deney noktaları katota doęru sıra dıřı bir dűzgűnlűk ve doęrusal olarak hızlanan hareket gstermiřtir. Bu sonuęlar ięeriye bořluk girmesinin olmadıęı $5 \leq \chi \leq 25$ aralıęında geęerlidir. Yer deęiřtirme ve ilerleme hızının katoda doęru deęiřimi ięin ařaęıdaki forműller elde edilmiřtir.

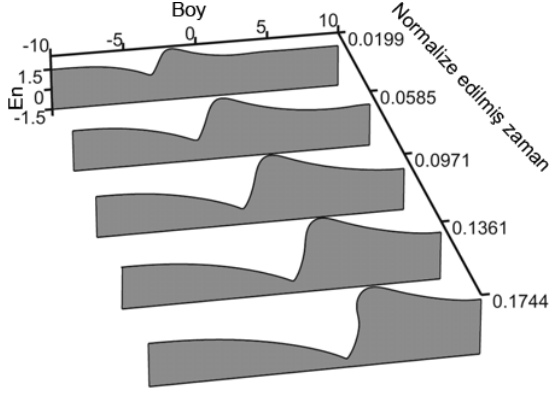
$$x \cong 2.3(1+A) \frac{\tilde{D}_\sigma h_\sigma e |Z_\sigma|}{kT_w} \rho_b J_b t + 0.007w \quad \text{Solitari dalgaların yer deęiřtirmesi}$$

ve

$$V_s \cong 2.3(1+A) \frac{\tilde{D}_\sigma h_\sigma e |Z_\sigma|}{kT_w} \rho_b J_b \quad \text{Solitari dalga hızı; } C_2, \phi = \pi/2; \chi \leq 25$$

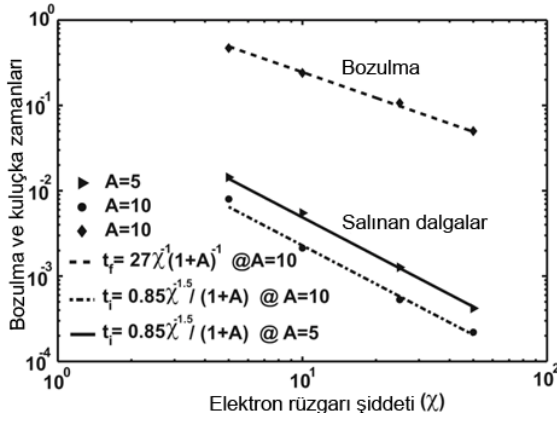
(89)

Dört bűkűmlű simetrik dűzleme {100} uygulanan dűřűk řiddetli EWI'ın $\chi \leq 10$ etkisi řekil 4.1.1.4 deki gibidir. Bařlangıęta Gaussian řekilli kenar bořluęu evrime bařladıktan sonra v řekilli bozulma haline gelir ve geliřimini karřı kenara ulařana kadar sűrdűrűr. Bu evrimin sonucu kısa devre kaęınılmazdır.



Şekil 4.1.1.4. Yüzey duvarının diğer yüzeye ulaşip teli kırması.

Şekil 4.1.1.5'de ince film arabağlantı elemanının zamana bağlı kısa devre zamanlarını vermektedir.



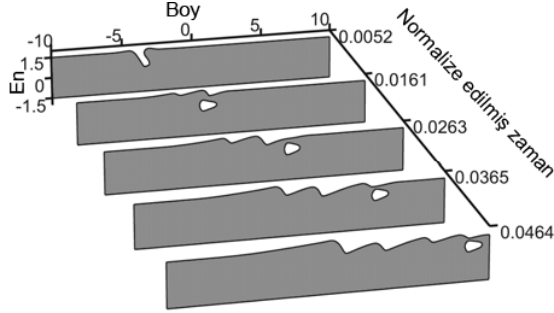
Şekil 4.1.1.5. EWI karşı kısa devre zamanı.

Doğrusal regresyon analizleri sonucunda, dönme açısının sıfır olduğu durumlarda yan duvar ölümcül hata oluşma zamanı $\bar{t}_F \cong 27[(1+A)\chi]^{-1}$ fonksiyonu ile ifade edilmiştir. Bu formül açıldığında aşağıdaki formu almaktadır:

$$t_F \cong 3 \frac{w^2}{(1+A)} \left[\frac{\tilde{D}_\sigma^0 h_\sigma}{kT} e|Z| \rho_b J_b \right]^{-1} \quad (\text{SFT}; C_4; \phi = 0) \quad (90)$$

45 derecelik dönme açısında ve yüksek EWI değerlerinde $\chi \geq 25$ içeriye giren üçgen şekilli boşluk katot yönüne doğru düzgün bir rotada göç etmektedir. Yüzey ise

içeriye boşluk bıraktıktan sonra testere dişi benzeri bir yapıya bürünmektedir (Şekil 4.1.1.6).

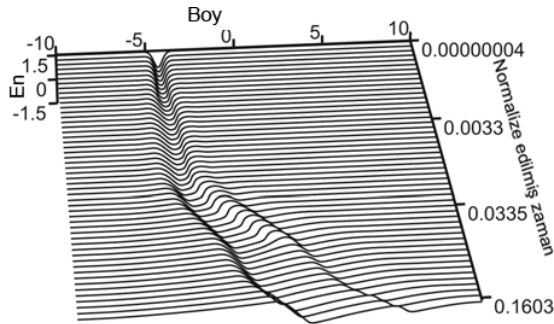


Şekil 4.1.1.6. Üçgen şekilli iç boşluğun katot yönünde hareketi

Altı bükümlü simetri düzlemlı {111} ince filmler açık devre bozulmasına neden olsalarda bu oluşumun gerçekleşmesi diğer iki simetri sistemine göre çok uzun zaman almaktadır. Bozulma zamanları gözlemlendiğinde $5 \leq \chi \leq 25$ aralığı için $\bar{t}_F \cong 19[(1+A)\chi]^{-1}$ bağıntısı elde edilir. Ters normalizasyon yaparsak bu formül aşağıdaki formu alır:

$$t_F \cong 2.1 \frac{w^2}{(1+A)} \left[\frac{\tilde{D}_\sigma h_\sigma}{kT} e |Z_\sigma| \rho_b J_b \right]^{-1} \quad (\text{SFT}; C_6; \phi = 0) \quad (91)$$

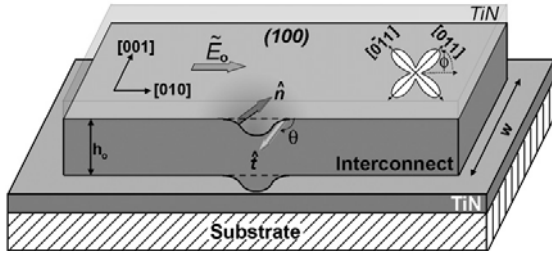
30 derece açılı sistemde (Şekil 4.1.1.7), $25 > \chi \geq 10$ aralığında uygulanan EWI değerlerinde kenar boşluğu kıvrım (kink) oluşturup katoda doğru harekete başlar. Zamanla filmin kalınlığını düşürmektedir, dolayısıyla Joule ısınmasına ve arabağlantı elemanının görevini yapamaz hale gelmesi sebebiyet vermesi hayli olasıdır.



Şekil 4.1.1.7. Yüzeyde kıvrım oluşumu ve katot yönünde hareketi.

4.1.2. Tek kristal filmlerde yüzey tepeciklerinin kapiler ve elektrogöç kuvvetlerinin etkisi altında, kuvvetli sürüklenme difüzyonu eşyönsüzlüğünde şekilsel evrimi

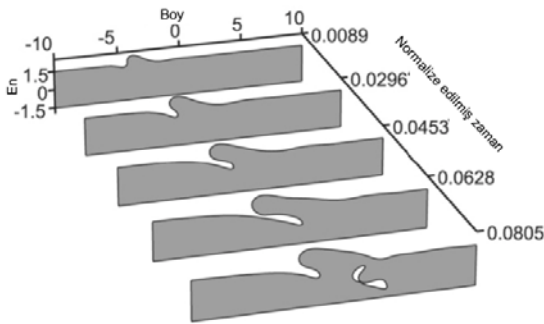
Bu çalışmada (Oğurtanı, Çelik, Ören, 2007) bir öncekinden farklı olarak yüzeyde boşluk yerine tepecik yaratılmış ve bu tepeciğin davranışı gözlenmiştir (Şekil 4.1.2.1).



Şekil 4.1.2.1. Başlangıç sistemi.

İki bükümlü kristal simetri düzlemlerinde $\{110\}$ yapılan deneylerde dönme açısı $\phi = 0^\circ$ olan arabağlantı elemanları iki farklı morfoloji evrimi sergilemektedir. Düşük EWI değerlerinde tepecik tamamen yok olurken, yüksek EWI değerlerinde çeşitli kink yapıları oluşturmaktadır.

Orta EWI değerlerinde $\chi \geq 10$, tepeciğin ucu rüzgar altında kalan tarafa doğru eğilir (Şekil 4.1.2.2). Diğer tarafa muhafazalı tarafı filmin içine doğru 45° açı ile ilerler ve dar boğaz yaratır. İleride içeri doğru giren kısım dar boğazın olduğu yerden kopar ve içeriye boşluk bırakır. Bu boşluğun boyutlarının uygulanan EWI ile ters orantılı olduğu gözlenmiştir. Oluşan iç boşluk katota doğru yol alırken, yüzeydeki tepecik içeriye yeni boşluklar bırakma eğilimi göstermektedir.



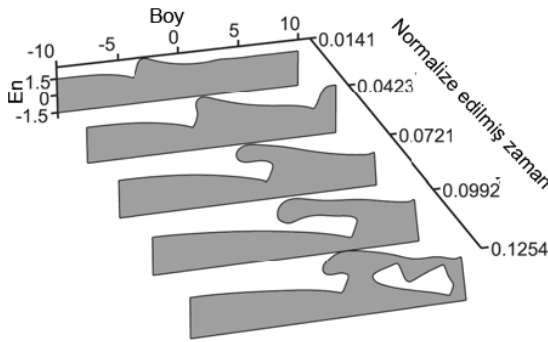
Şekil 4.1.2.2. Orta dereceli EWI değerlerinde yan duvarlarındaki tepeciğin morfolojik evrimi.

Hız ile EWI arasındaki doğrusal bağlantısı aşağıdaki şekilde ifade edilebilir:

$$V = \frac{Dh}{kT} \left\{ R \frac{3e|Z|\rho J_o}{w} - C \frac{9\Omega g_\sigma}{w^2} \right\} \quad (92)$$

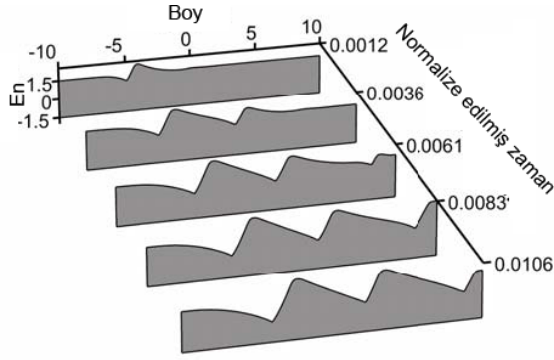
ρ özgül direnç, g_σ özgül yüzey Gibbs serbest enerjisi, ve J_o uygulanan akım yoğunluğunu ifade eder. Bu eşitlik aynı zamanda iç boşluk oluşumunun eşik değerini ifade eder : $E_o^{Thrs.} \equiv \rho J^{Thrs.} = (C/R) \left\{ 3\Omega g_\sigma / (e|Z|w) \right\}$.

Dört bükümlü kristal simetriye sahip örneklerde $\phi = 0^\circ$ açılı örneklerle baktığımızda, tüm EWI değerleri için yüzey tepeliğinin kink benzeri dalga şeklini aldığını görüyoruz. Eğer açığı 45° ye getirsek yüzey tepeliğinin içeriye boşluk bıraktığını görmekteyiz. Bu dev boyutlardaki boşluk çok sıradışı bir forma sahip ve karşı yüzeye ulaştığında kesinlikle ölümcül bozulmaya sebebiyet verir (Şekil 4.1.2.3).



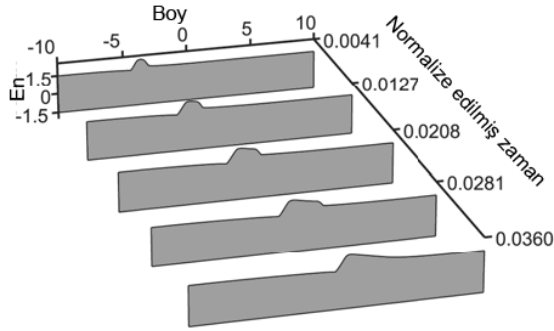
Şekil 4.1.2.3. Yüzeyin orta derecede EWI değerindeki morfolojik evrimi

Yüksek EWI değerlerinde $\chi \geq 50$, kısa zaman zarfında difüzyon eşyönsüzlüğünün değerine bağlı olmaksızın testere dişi formundaki dalgaların genliği kararlı hal alır. Ve bu oluşan kararlı dalgalar solitary dalga gurubunu oluşturur(Şekil 4.1.2.4).



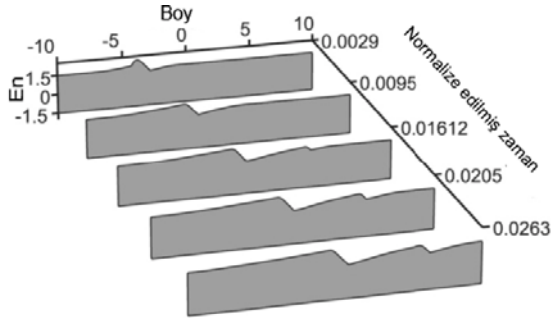
Şekil 4.1.2.4. Testere dişi formundaki solitari dalgaların oluşumu.

Son olarak $\{111\}$ düzleminden oluşan 6 bükümlü simetriye sahip yüzeyin evrimini inceleyelim. 15° açılı $\{111\}$ düzleminde yüzey tepesi basamak şeklinde bir dalga formu oluşturur ve katota doğru hareketi süresince yavaşça söner. Fakat, orta EWI değeri ve üstünde $\chi \geq 25$ basamak formu büyümeye başlar ve sabit bir hızla katot yönünde yol alır. En sonunda alt köşesi diğer yüzeye değerek sistemin bozulmasına neden olabilir (Şekil 4.1.2.5).



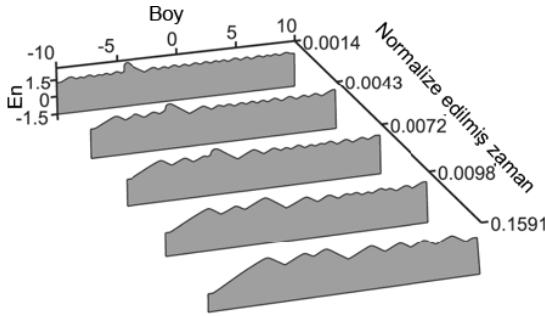
Şekil 4.1.2.5. Yüzeyde kıvrım şeklinde dalga oluşumu.

$\chi \geq 50$ gibi yüksek EWI değerlerinde, dalga sayısında artış olur ve sistem birden fazla pozitif yönlü yönlü dalga oluşumuna sahne olur. Şekil 4.1.2.6' dan da görüleceği gibi testere dişi benzeri bir yapı katot yönünde hareket ederken dalganın alt köşesi kısımda karşı yüzeye yaklaşmaktadır. Bu dalgada yine ölümcül hataya sebebiyet verecektir.



Şekil 4.1.2.6. İkili kıvrım dalgasının yüzey boyunca hareketi.

Dönme açısını 45° yaptığımızda ise sistemin oldukça kararsız bir hal alarak yüzey boyunca her iki yönde yalpalanma (oscillatory) hareketine benzer bir yapı oluşturduğu gözlemlenir (Şekil 4.1.2.7).



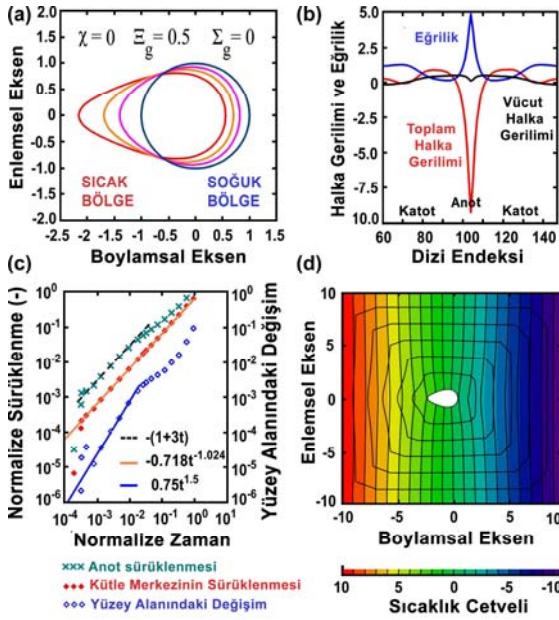
Şekil 4.1.2.7. Yüzeydeki yalpalanan dalgaların evrimi.

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

Nispeten dengeli ısı akışından (steady state heat flow) kaynaklanan ısıl gerilme gradyanının (thermal stress gradient, TSG) hesabında sadece alışılmış elastik gerilme enerji yoğunluğunun etkisi değil (elastic strain energy density, ESED) bununla birlikte indüklenmiş ısıl gerilme alanı ile hareketli atomik türlerin elastik iki kutuplu tensörel etkileşimleri (elastic dipole tensor interaction, EDTI) birleştirilmiş doğrusal istikrarsızlık kuramında kurulan kavramlar kullanılarak dikkatlice hesaba katılmıştır. Silindirik yapıdaki tane içi boşluklar üzerinde etrafıca yapılan bilgisayar deneylerine göre, durgunumsu durumdaki (quasi-stationary state) boşluk yüzeyinin morfolojik gelişiminde yüksek elektrogöç (electromigration, EM) tatbik edildiğinde dahi değişmeyen tamamen farklı iki ayrı senaryo gözlenmiştir. Bu morfolojilerin boşluk

yüzeyi ile ara bağlantı elemanının yan yüzeyleri arasında yalıtkan yüzeylere yakınlığı nedeniyle oluşan ısı akısı kalabalıklaşmasına (heat flux crowding) son derece bağlı olduğu gözlenmiştir (Oğurtanı, Akyıldız, 2007).

En boy oranının ısı kalabalıklaşmasına izin vermeyecek derecede yüksek olduğu durumda gerçekleştirilen deneyin sonuçları Şekil 4.1.3.1 ve 4.1.3.2'de verilmiştir.

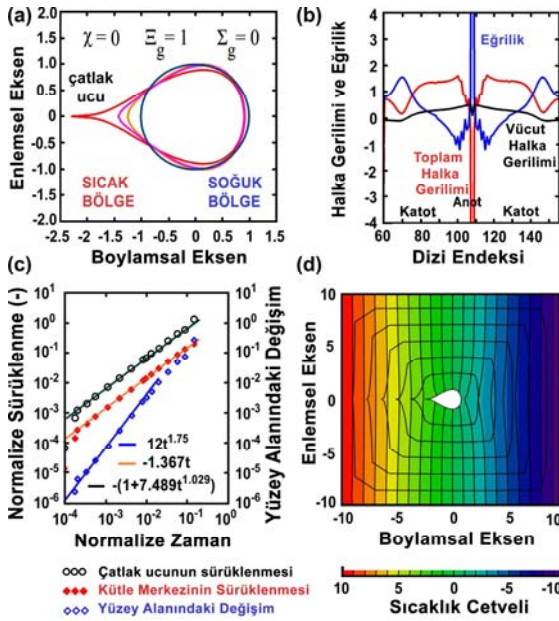


Şekil 4.1.3.1. En boy oranı yüksek olan, $\bar{w} = w_o / r_o = 10$, durumda ısısal gerilme gradyanının $\Xi_{\text{grad}}^{Al} = 0.5 \Rightarrow 3 \times 10^5 K/m$ değeri için boşluk hareketi. Boşluk sabit sürüklenme hızı ile yüksek sıcaklık bölgesinden (anot), düşük sıcaklık bölgesine doğru, herhangi bir çatlak oluşumuna sebebiyet vermeden yumurta şeklini alarak ilerler.

Tane içi boşluklar için tipik olan bu hareket Kraft and Arzt'ın (1995) yaptığı sonlu elemanlar analizi çalışmasında, $1\mu m$ boyundaki Al filmde yer alan $0.6\mu m$ boyundaki boşluk (ısı kalabalıklaşması durumu) için, uygulanan $2 \times 10^{10} A/m^2$ elektrik akımı yoğunluğundan kaynaklı Joule ısınmasının sonucu olarak rapor edilmiştir. Şekil 4.1.3.1'de verilen deneyde uygulanan elektrik akımı sıfırdır, Kraft and Arzt'ın (1995) rapor ettiği bu durumun ısı kalabalıklaşması olmadan da ortaya çıkabileceği gözlenmiştir. Şekil 4.1.3.1'de boşluk etrafındaki sıcaklık ve gerilme dağılımlarının yanında hareketi karakterize eden denklemler de verilmiştir. Boşluk merkezinin hareket hızı için ters normalizasyondan sonra aşağıdaki denklem bulunur $\alpha \cong 1.384$:

$$V_{CM} = \alpha \frac{(1+\nu)\Omega_\sigma |Tr \lambda_\sigma^V|}{3r_o} \frac{\tilde{D}_\sigma(T_{CM}) h_\sigma}{kT_{CM}} [-\beta grad(T - T_o)] \quad (93)$$

EDTI değeri biraz artılığında, (Şekil 4.1.3.2) yukarıda tanımlanan sistemin belirli bir zamandan sonra, yüksek sıcaklık bölgesinde çatlak oluşumuna ve ilerlemesine sebebiyet verdiği gözlenmiştir. Sürüklenmenin yukarıda verilen denkleme parametresi değiştirildiğinde uyduğu bulunmuştur. ($\alpha = 1.367$) Çatlağın ilerleme hızı ise tamamen farklı bir denklem ile ifade edilebilir (Oğurtanı, Akyıldız, 2007).



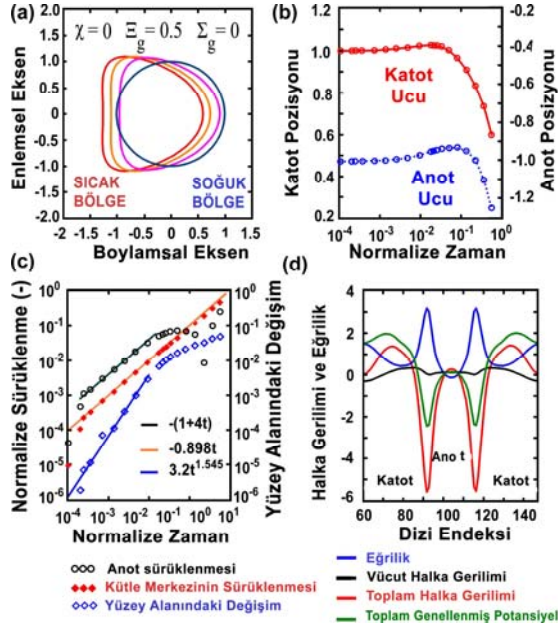
Şekil 4.1.3.2. En boy oranı yüksek olan, $\bar{w} = w_o / r_o = 10$, durumda ısı gerilme gradyanının:

$$\Xi_{grd} = 1.0 \Rightarrow \left[\begin{array}{l} Cu, Al, Sn, Pb, 37Pb63Sn \\ \cong \{9.3, 6.1, 6.0, 4.1, 4.6\} \times 10^5 K/m \end{array} \right]$$

değeri için çatlak oluşumu ve ilerlemesi.

Isı kalabalıklaşması yokken, elektrogöç ve ısı gerilme gradyanının eş zamanlı etkilerini görmek için de bir dizi deney düzenlenmiştir. EM baskın rejimde boşluk hareketinin beklendiği gibi anottan katoda doğru sürüklendiği gözlenmiş, birbirine ters yönde etki eden bu kuvvetlerin eşik değerleri ortaya çıkarılmış $\left\{ \chi = 1 \Rightarrow \Xi_{grd}^{Thr} \cong 1.0; \chi = 5 \Rightarrow \Xi_{grd}^{Thr} \cong 2.0; \chi = 10 \Rightarrow \Xi_{grd}^{Thr} \cong 2.10 \right\}$, yine yukarıda olduğu gibi yüksek EDTI değerlerinde çatlak oluşumu gözlenmiştir. TSG baskın rejim durumunda, doğrusal istikrarsızlık analizinde öngörüldüğü üzere boşluk ağırlık merkezi indüklenmiş TSG ile orantılı ve ters yönde sabit ve tekdüze sürüklenme hızı görülmüştür. Fakat her iki morfolojik yapıda da, iki iyi şekilde tanımlanmış rejim gözlemlenebilir: bunlar EM-EDTI parametrik uzayında EM ve TSG baskın bölgelerdir.

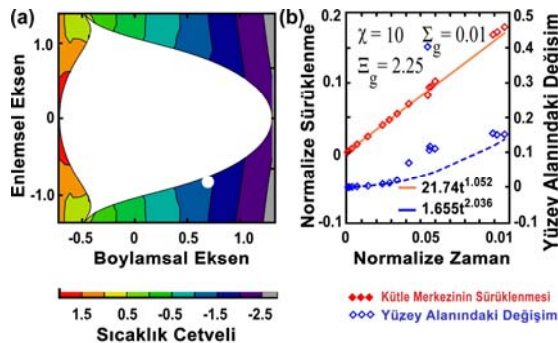
Aygıt güvenilirliği söz konusu olduğu sürece, normalize numune eninin boşluk yarıçapına oranı belli bir değerin dışında ise ki bu aynı zamanda ısı akısı kalabalıklaşması başlangıcı için bir ön belirtidir kritik yapılandırma düşük termal gerilme düzeylerinde bile karşımıza çıkar.



Şekil 4.1.3.3. Alüminyum ara bağlantısında $[r_o = 1\mu m]$, ısı kalabalıklaşması durumunda $\bar{w}_o = 4$, TSG değeri $[4 \times 10^5 \text{ } ^\circ K/m]$ iken ortaya çıkan yaba şekilli kesikler.

EM yokken bu rejim kendini malzemedeki süper doymuş boşluk yoğunlaşması nedeniyle boşluk yüzeyi rüzgâr alan üst ve alt omuzlarında iki simetrik parmak şekilli ekstrüzyon (yaba şekilli kesik) oluşumu gelişimi ile gösterir (Şekil 4.1.3.3). Bu ekstrüzyon malzemenin yüzeyine 54° derecelik bir açı ile ve yüksek ısıl gerilimlerde yerini difüzyonsal-çatlak oluşumu ve gelişmesine bırakır.

Şekil 4.1.3.4'te yüksek EM ve EDTI altında mikro çatlak oluşumu gösterilmiştir.



Şekil 4.1.3.4. Alüminyum filmde EDTI eşik değerinin hemen üstündeki TSG değeri tarafından indüklenen mikro çatlak oluşumu. $\Xi_g^{Al} = 2.25 \rightarrow 1.4 \times 10^6 \text{ } ^\circ K/m$ ve $\chi_{Al} = 10 \rightarrow 8.9 \times 10^9 \text{ } A/m^2$.

Genel olarak konuşmak gerekirse kritik TSG düzeyi altındaki ısı akısı yoğunlaşması dışındaki rejimde, boşluk yüksek sıcaklıktaki malzeme kenarına yönelip yumurta şeklini alır ve sabit hızla ısı akısına karşı, tane boyunca (transgranular) herhangi bir hataya sebebiyet vermeden sürüklenir. Fakat TSG eşiğinin üstünde, yerini hızla ilerleyen keskin-yırtılmaya bırakır, bu da en sonunda elektrik devresinin bozulmasına neden olur.

4.2. Çift kristal ince filmler ve tane sınırı oluklaşması

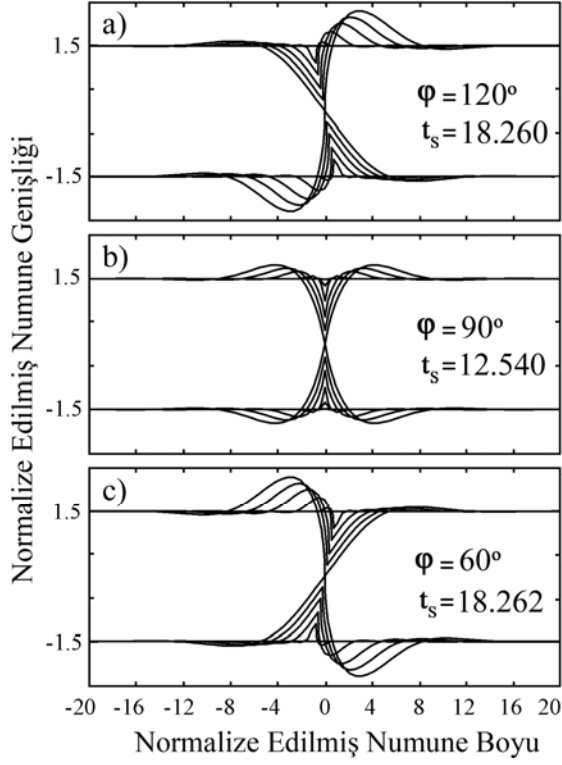
4.2.1. Bambu benzeri metalik ara bağlantılarda kapiler ve elektrogöç kuvvetlerinin etkisi altında yüzey sürükleme difüzyonu ile gerçekleşen tane sınırı oluklaşması ve katot boşalması

Bu çalışma ile mikro elektronik devrelerde transistörleri birbirlerine bağlayan iletkenlerin yaşam sürelerini belirlemekte büyük öneme sahip olan tane sınırı oluklaşması ve katot bölgesi boşluk oluşumu olayları, dönüşümsüz termodinamiğin temel ön doğrularını temel alan yeni bir matematik modelleme yöntemi ile incelenip, çok zengin bilgisayar benzetim sonuçları elde edilmiştir. (Oğurtanı, Akyıldız, 2005; 2006)

Benzetim sonuçları elektrik alanın yokluğunda, üçlü kavşak hareketinin geçiş süresi boyunca birinci derece reaksiyon kinetiğine uyup, kararlı halde ise alışıla geldik zaman kanununa ($t^{1/4}$) uyduğunu göstermiştir. Şekil 4.2.1.1'de verilen sonuçlarda ıslanma parametresi, $\lambda = 0.8$, malzemenin en boy oranı, $\beta = 40/3$ 'dir. Deneyler değişik ıslanma parametreleri ve en boy oranları için tekrar edilmiş, oluklaşma derinliği ve hızı için regresyon analizi ile aşağıdaki denklemler bulunmuştur:

$$H_{gb} = \frac{4\lambda}{5} \left[\frac{D_{\sigma} h_{\sigma} \Omega_{\sigma} g_{\sigma}}{kT} \right]^{1/4} \left(t^{1/4} - 0.01^{1/4} \right) + \left[0.459\lambda^2 + 0.17\lambda + 0.028 \right] \quad (94)$$

$$V_{gb}(t, \lambda) = \frac{\lambda}{5} \frac{\ell_o}{\tau_o} \left[\frac{t}{\tau_o} \right]^{-3/4} \equiv \frac{\lambda}{5} \left[\frac{D_{\sigma} h_{\sigma} \Omega_{\sigma} g_{\sigma}}{kT} \right]^{1/4} t^{-3/4} \quad (95)$$

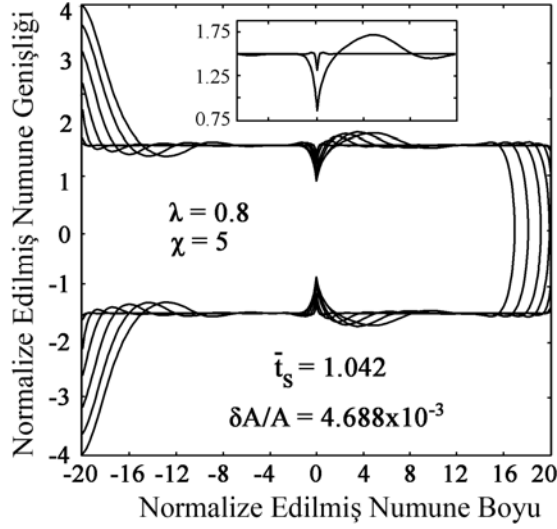


Şekil 4.2.1.1. Eşyönlü malzeme için kapiler kuvvetler altında tane sınırı oluşmasının zamanla gelişimi. İslanma parametresi, $\lambda = 0.8$. Tane sınırı eğimleri: a) $\varphi = 120^\circ$ b) $\varphi = 90^\circ$ c) $\varphi = 60^\circ$.

Bu denklemler Mullins'in (1957) yaptığı analiz sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Derinlik için verilen denklemdeki ilk terim Mullins'in makalesinde küçük eğim ve dihedral açılarının dengede olduğu varsayımları ile elde ettiği (36) numaralı denklem ile neredeyse aynıdır. Bizim denklemimizde köşeli parantez içinde verilen terimse Mullins denkleminin büyük ıslanma parametreleri için kullanıldığında neden başarısız olduğunu gösterir, bu terim Mullins'in analitik denklemine büyük ıslanma parametreleri için bir düzeltme getirmektedir.

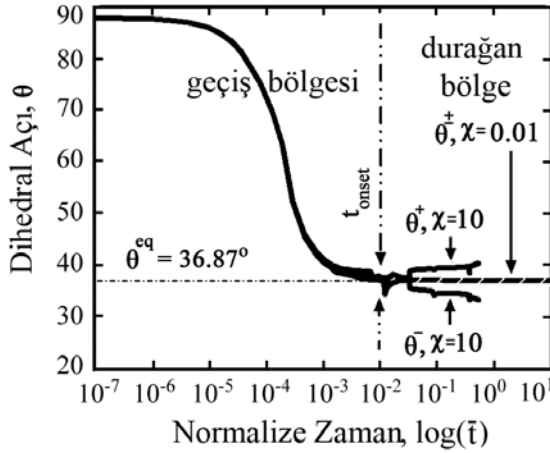
Elektrik alanın devreye girmesi zaman kanununu çok fazla değiştirmeyip, oluk derinliği için bir üst sınırın ortaya çıktığı ve bunun gerçekleşmesi için geçen zamanın elektron rüzgâr kuvveti ile ters orantılı olduğu gözlemlenmiştir.

Şekil 4.2.1.3.'de verilen dihedral açı değişimlerinden, ilk bakışta açılarının tane sınırı eğiminden bağımsız olarak dengeye geldiği ve malzemeyi iki parçaya ayırana kadar değişmediği görülür, fakat yakından (zooming) bakıldığında denge açısı etrafında durağan (\pm) dalgalanmalar gözlemlenir.



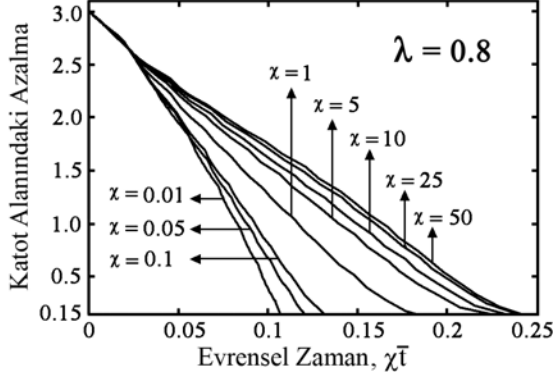
Şekil 4.2.1.2. Eşyönlü malzeme için kapiler ve eletrogöç kuvvetler altında tane sınırı oluklaşmasının zamanla gelişimi. Bu deneylerde katot kopuşu gerçekleşene kadar sabit voltaj daha sonra sabit akım ve serbest sınır koşulları kullanılmıştır.

Bu rasgele düzensizlik üçlü kavşaktaki dâhili entropi üretimi ile ilintili olduğu gibi, doğrusal olmayan deterministik diferansiyel denklemlerin genel bir özelliğini gösterir (Oğurtani ve Güngör, 1994). Elektrogöçün baskın olduğu durumda ise sağ ve sol dihedral açılar bu dengemsi durumdan aradaki açı farkını değiştirmeyerek ayrılırlar. Bu enteresan davranış tane sınırı oluklaşması nispeten dengeli hale (steady state) geçmeden hemen önce gerçekleşir.



Şekil 4.2.1.3. 90° eğimli bir tane sınırında dihedral açılarının sabit akım altında, iki farklı durumda (kapiler baskın, $\chi = 0.01$ ve EM baskın $\chi = 10$), zamanla değişimi.

Yan duvarlarda meydana gelen yüzey difüzyonunun yol açtığı katot ucundaki sürüklenme, sabit akım altında benzetilip (simulated) bu olayı betimleyen analitik bir formül ortaya koyulmuştur. Şekil 4.2.1.4'de sunulan bulgular sabit voltaj ve yansıtıcı sınır koşullarının uygulandığı deneylerden elde edilmiştir.



Şekil 4.2.1.4. Katot alanındaki azalmanın, elektron rüzgarı kuvveti ve zamanın çarpımından elde edilen, evrensel zaman ile değişimi. Kapiler ve EM baskın rejimler $\chi=1$ sınırı ile net olarak birbirlerinden ayrılırlar.

$$\begin{aligned} \bar{A}_{CV}(\bar{t}, \chi) &\cong 3(1 - 4.5\chi\bar{t}) \quad \chi > 1 \quad \text{EM baskın rejim} \\ &\cong 3(1 - 8\chi\bar{t}) \quad \chi \leq 0.1 \quad \text{Kapileri baskın rejim} \end{aligned} \quad (96)$$

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:

$$t_{CFT}(j, w, f) = \frac{f}{1+f} \frac{w^2}{9} \left[\alpha \frac{D_\sigma h_\sigma}{kT} e^{\hat{Z}} \frac{\Delta g}{L} \right]^{-1} \quad (97)$$

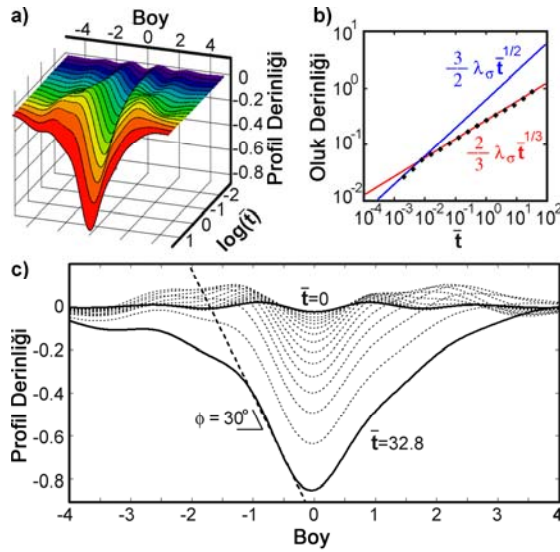
Burada j elektrik akımının yoğunluğu, w malzemenin eni, f ise katot bozulması için referans alınan yüzde direnç değişimidir (fractional resistance variation). f A.B.D. mikro elektronik sanayinde lehim ek yerleri (solder joints) için 5% (dirençte 5% oranında değişim) olarak kabul edilir.

4.2.2. Kuvvetli eşyönsüz yüzey özgül Gibbs serbest erkesine sahip nano boyutlu ara bağlantı elemanlarında ısı tane sınırı oluşması

Burada verilen sonuçlar değişkenler hesabının işlendiği makalenin (Oğurtanı, 2006-3) sayısal uygulama kısmını içerir. Şekil 4.2.2.1'de çift kristal ara bağda ısı tane sınır oluşmasının yarı logaritmik ölçekte gelişimi görülür. Benzetim deneylerinde yüzey profilini iyi şekilde orataya çıkardığı görülen ilk 15 Hermite fonksiyonu açılımı kullanılmıştır. Doğrusal istikrarsızlık analizinde verilen sınırların

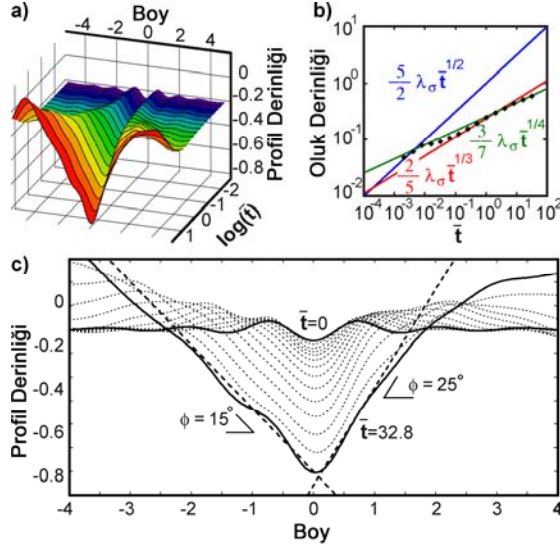
içinde kalarak Dirac delta fonksiyonu tipi tekillik rejimlerine girmemek için yüzey katılığını şiddeti $B = 0.1 \leq 1/7$ olarak alınmıştır. Yüzey profilindeki eğimlerin değişime bakarak tane sınırı üçlü kavşağının 30° açılı ile yumuşak faset oluşturma eğiliminde olduğu gözlemlenir ki bu deneyde $\hat{\phi} = 30^\circ$ olarak verilen tane sınırı eğilimi ile uyum içinde bir sonuçtur. Aynı durum $\hat{\phi} = 15^\circ$ lik tane sınırı eğiliminde de gözlemlenir.

Şekil 4.2.2.1 b) de verilen oluk derinliği – zaman grafiğinde $\bar{t} = 0.01$ zamanında keskin diz noktası görülür, Oğurtanı ve Akyıldız (2005) ön izleme metodunu (front tracking method) kullandıkları çalışmalarında bu durumu oluklaşma nispeten dengeli rejime girmeden hemen önce gözlemlenmişlerdir. Nispeten dengeli rejim $\Delta\bar{t} \approx 10^{-4}$ zamanında kendini gösterir. Logaritmik ölçekte, ilk başlarda $\sqrt{\bar{t}}$ olan zaman bağıntısı, daha sonra $\sqrt[3]{\bar{t}}$ şeklini alır, bu durumun Mullins'in (1957) eşyönlü zaman kanunu ile açıklanamayacağı aşikârdır.



Şekil 4.2.2.1. Eşyönsüz yüzey katılığında sahip tane sınırı oluşunun şekilsel evrimi. Her iki tane de, (001) düzleminde [100] yönünde $\hat{\phi} = 30^\circ$ açısıyla döndürülmüş dört bükümlü rotasyonal simetri ile tanımlanan aynı dokuya sahiptir. Sistem parametleri: $B = 0.1$, $\bar{M}^{long} = 10-1000$, $\bar{M}^{trans} = 0.1$, $M^\pm = 0.1$, $h_\sigma = 0.01$, ve $\lambda_\sigma = 0.6$.

Şekil 4.2.2.2'de yüzey merkezli küp yapısındaki, 300 nm eninde ($\bar{h}_\sigma = 0.001$), çift kristal metalik ara bağ için yapılan deneyin bulguları verilmektedir. Yüksek tane sınırı yer değiştirme mobilitesi $\bar{M}^{trans} = 100$, zaman kanununun $\bar{t}_{knee} = 1$ zamanında, $\sqrt[3]{\bar{t}}$ 'ten $\sqrt[4]{\bar{t}}$ 'e dönüşmesine yol açar.



Şekil 4.2.2.2. Wulf yapılanmasında $\phi + n\pi / 2$, $n = 0, 1, 2, \dots$ noktalarında zirve yapan eşyönsüz yüzey katılıđına sahip tane sınırı oluđunun şekilsel evrimi. Sistem parametreleri:

$$c = 0.4, \bar{M}^{long} = 100, \bar{M}^{trans} = 100,$$

$$M^{\pm} = 0.001, h_{\sigma} = 0.001, \text{ ve } \lambda_{\sigma} = 0.6.$$

Bu deney açıkça göstermektedir ki uzun tavlama (annealing) sürelerinde ve yüksek enlemesine mobilitelerde Mullins'in (1957) eşyönlü durum için çıkardığı zaman kanuna bir dönüş söz konusudur. Sol taraf faset açısına ($\phi L = 165^{\circ}$), sağ tarafa göre çok daha hızlı erişir. Bunun nedeni sağ tarafın düzgün yüzey tarafından 45° yerine $\phi R \cong 25^{\circ}$ 'lik faset açısı ile yakalanmasıdır. Bu alışılmadık ilginç olay Ramasubramaniam ve Shenoy'un (2005) yaptığı deneylerde de rapor edilmiştir.

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 çok detaylı ve sistematik bir şekilde ele alınmıştır ve özetlenmiştir. Bütün dergi hakemlerinin raporlarında belirttiği, bu kadar kapsamlı ve güçlü kuramsal temele dayalı çalışma literatürde nadiren kendini göstermektedir. Araştırmaya konu olan elektronik malzemeler mikro yapı bakımından genellikle tek kristal, çift kristal ve bambu yapısındaki çok kristal ince filmler olarak sınıflandırılmışlardır. Tane sınırlarının ısıl oluklaşması ile ilgili değişkenler hesabı ile ısıldevingen modele dayalı çalışmaların sonuçları çok daha geniş kapsamlı olup bütün konvansiyonel malzemeleri içermektedir. Burada sadece teknolojik uygulama bakımından önemli olan bulgular kısaca sunulacaktır.

Elektrogöç etkisi altındaki tek kristal metalik ince film arabağlar, gerek yüzey morfolojileri ve gerekse yaşam süreçleri bakımından iki temel mikro yapı parametresi tarafından kontrol edilirler. Bunlardan birincisi film yüzeyinin ait olduğu kristalografik yapısal simetri grubu (rotational fold number), ikincisi ise yüzey difüzyon katsayı tensörünün ana eksenin eğiklik açısıdır (tilt angle). Bu konuda yapılan detaylı çalışma (192 farklı yapı) bize en güvenilir üst yüzey yapısının $\{110\}$ düzlemi oluşunu ve difüzyon eşyönsüzlük eksenini ile 45° eğimli olması gerektiği yönündedir. Bu mikro yapıda olan metalik arabağların yüksek akımlarda ve sıcaklıklarda bile yan yüzeylerinin stabilitelelerini korudukları görülmüştür. En tehlikeli yüzey mikro yapısı $\{111\}$ düzlemi olup, bu yapıda hiç bir difüzyon eşyönsüzlüğü eğim açısı metalik arabağın yan yüzeylerini stabilize etmeye yeterli değildir (Oğurtanı, Çelik, 2006; Oğurtanı, Çelik, Ören, 2007). Bu mikro yapıda yan yüzeylerde oluşan boşluklar (voids) veya tümsekler (hillocks) belirli bir akım değerinin üstünde (threshold level) kısa sürede sisteme dalarak ölümcül devre kırılmalarına sebep olurlar. Bu konuyla

ilgili iki analitik denklem benzetim yoluyla bulunmuştur. Bunlardan birincisi, ince film arabağların tane içi (transgranular) boşluklar vasıtasıyla ve yan duvarlar difüzyonu yoluyla tahrip olma zamanını vermektedir. İkincisi, ise yan yüzeylerde süratle yayılan üretken dalgaların sebep olduğu ölümcül bozulma zamanını ifade etmektedir. Bambu mikro yapısındaki metalik arabağlarda mevcut taneler arası sınırların yüzeyde meydana getirdikleri olukların içeri dalma kinetikleri ile katot bölgesinde oluşan boşluklar arasındaki ilişki geniş bir elektrogöç etki spektrumu altında benzetilmiştir. En önemli bulgu elektrogöçün tane sınırı oluklaşma hızını azaltması ve hatta belirlenen eşik değerinden sonra tamamen durdurmasıdır (Oğurtanı, Akyıldız 2005; 2006). Sıcaklık gradyanı etkisi ile ortaya çıkan gerilmeler altında yapılan benzetim deneylerinde elde edilen sonuçlar, arabağların 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 2007).

Özellikle yüksek sıcaklıklarda edilgenleştirilmiş metalik arabağlarda ortaya çıkan ısıl-mekanik gerilmelerin (hydrostatic and biaxial stresses), difüzyon ve elektröç ile etkileşimli olarak dış yüzey morfolojisine (tane sınırı oluklarının sebep oldukları kırılma mekanizmaları, yüzeydeki çukur ve tepeciklerin davranışları) olan etkilerinin sistemin tahribatı ile ilişkilendirilmesi ileride ayrıntılı olarak ele alınması gereken en önemli konu olarak görünmektedir.

REFERANSLAR

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

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

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

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

OGURTANI, 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).

OGURTANI, 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).

OGURTANI, 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).

OGURTANI, 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).

OGURTANI, 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).

OGURTANI, 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).

OGURTANI 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).

OGURTANI , 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).

OGURTANI, 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).

OGURTANI, 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

OGURTANI, T.O., AKYILDIZ, O., Morphological evolution of intragranular void by surface drift-diffusion driven by the capillary, electromigration and thermal-stress gradient generated by the steady state heat flow in encapsulated metallic films: Special reference to flip chip solder joints, submitted (2007).

OGURTANI, 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).

OGURTANI, 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).

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., OGURTANI, 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., *Etüde Thermodynamique des phenomenes irreversibles*, Dunod, Paris, and Desoer, Liege, (1947).

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).

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).

TÜBİTAK
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje No: 104M399
Proje Başlığı: Mikro elektronik Devrelerde Metalik İletişim Bağlarının Elektro göç Sonucu Tahribatının Bilgisayar Modellemesi: Özellikle Difüzyon Anisotropisinin ve Termal Streslerin Yüzey Morfolojisine ve Katot Tahribatına Etkileri
Proje Yürütücüsü ve Araştırmacılar: Prof. Dr. Tarık Ömer OĞURTANI, Doç. Dr. Mehmet Kadri AYDINOL, 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: 01.07.2005 – 31.06.2007
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: Elektro göç, ısıl göç, ince film mekaniği, tahribat mekaniği, boşluk büyümesi, ara yüz ve yüzeyler, difüzyon.
Projeden Yapılan Yayınlar: T. O. OGURTANI, Mesoscopic nonequilibrium thermodynamics of solid surfaces and interfaces with triple junction singularities under the capillary and electromigration forces in anisotropic three-dimensional space. Journal of Chemical Physics, Volume 124, 144706 April 14, 2006. T. O. OGURTANI, Variational formulation of irreversible thermodynamics of surfaces and interfaces with triple junction singularities under the capillary and electromigration forces in anisotropic two-dimensional space. Physical Review B, Volume 73, 235408 June 13, 2006. T. O. OGURTANI and A. CELIK, Surface morphological evolution on single crystal films by strong anisotropic drift diffusion under capillary and electromigration forces. Journal of Applied Physics, Volume 100, 043504 Aug 17, 2006.

T. O. OGURTANI, Unified theory of linear instability of anisotropic surfaces and interfaces under capillary, electrostatic and elastostatic forces: The regrowth of epitaxial amorphous silicon.
[Physical Review B, Volume 74, 155422 October 20, 2006.](#)

T. O. OGURTANI and O. AKYILDIZ, 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](#)
[Editors: T.Y. Tsui, Y-C. Joo, A.A. Volinsky, M. Lane, L. Michaelson](#)
[Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 914, Warrendale, PA, 2006, 0914-F09-22.](#)

T. O. OGURTANI, A. CELIK and E. E. OREN, 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 January 2007, Pages 2974-2983.](#)

T. O. OGURTANI and O. AKYILDIZ, Morphological evolution of intragranular void by surface drift-diffusion driven by the capillary, electromigration and thermal-stress gradient generated by the steady state heat flow in encapsulated metallic films: Special reference to flip chip solder joints
[Manuscript submitted for publication. Journal of Applied Physics 2007, April.](#)