

Epitaksiyel Olarak Gerilmiş İzotropik İnce Filmlerde Elastik Etkileşim Nedenli Morfolojik Değişimin Doğrusal Kararlılık ve Sayısal Analizi

Aytaç ÇELİK 

Sinop Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Metalurji ve Malzeme Mühendisliği, 57000, Sinop, TÜRKİYE

Sorumlu Yazar/Corresponding Author
E-mail: acelik@sinop.edu.tr

Araştırma Makalesi/Research Article
Geliş Tarihi/Received: 16.03.2022
Kabul Tarihi/Accepted: 20.05.2022

ÖZ

Bu sistematik sayısal analiz çalışmasında ince film yüzeyinin kararlılığı, elastik dipol etkileri de göz önünde bulunduran matematiksel model ile farklı çeki kuvvetleri altında kararlılığı incelenmiştir. Bu modelde yüzey difüzyonuna gerilmenin etkisi birinci ve ikinci dereceden iki terim ile ifade edilmektedir. İnce film yüzeyinin sinüs dalgası şeklinde olduğu varsayılmış ve bu dalga yapısının yüzeydeki gerilme nedenli difüzyon ile sönümlenme veya büyüme dinamikleri incelenerek kararlılığı test edilmiştir. Elastik dipol etkileşimlerin basma ve çekme gerilmeleri altında farklı yüzey dinamiklerine sebep olduğu, bu farkın kritik basma gerilmesi ($\sigma > 100 \text{ MPa}$) üzerindeki basma gerilmesi durumunda çatlak benzeri yapıların oluşmasına neden olduğu gösterilmiştir. Çekme gerilmesine maruz kalan yüzeydeki dalgalı yapının sönümlendiği gözlemlenmiştir. Çatlak yapıların oluşumu sonrası yüzey kinetiği doğrusal kararlılık analizlerinden uzaklaşmaktadır. Uygulanan gerilmeye göre 3 farklı davranış saptanmıştır. Bunlar; sönümlenmenin gerçekleştiği ($\Xi > 0$) çekme kuvveti uygulanan bölge, düşük basma kuvveti ($-1,12 > \Xi > 0$) uygulanan yüzeyin karalı olduğu bölge ve çatlak benzeri oluşumların gözlemlendiği yüksek basma gerilmesinin ($\Xi < -1,12$) uygulandığı bölgedir. Yapılan simülasyonlarda, çatlak oluşumu sürecinde, çatlak bölgeden difüzyon ile kaçan maddenin tepelerde birikerek yeni tepeler oluşturduğu gözlemlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: İnce film, Difüzyon, Elastik etkileşimler, Uyumsuzluk gerilmesi

Linear Instability and Numerical Analysis of Surface Morphology Changes of Epitaxially Strained Thin Films Due to Elastic Interactions

ABSTRACT

In this systematic simulation study, thin-film surface stability has been investigated with consideration of elastic dipole interactions under compression and tension. In this model, the effect of stress on surface diffusion is introduced by first and second-order parameters. Preexistent sinusoidal wave formed surface of the thin films is assumed and decay or growth of this form due to the diffusion is investigated with the combined effect of capillary, stress, and elastic dipole interactions. It has been shown that elastic dipole interactions cause the different surface dynamics under the compression and the tension, and this difference caused crack like formations on the surface over critical compression stress ($\sigma > 100 \text{ MPa}$). On the other hand, wave-formed thin film surface decays with tensile stress. Three different regions were observed according to the applied stress; the area where decaying has occurred ($\Xi > 0$) under tensile load, the region the surface is stable where the low compression force ($-1,12 > \Xi > 0$) is applied, and the high compressive stress ($\Xi < -1,12$), where crack-like formations are observed. After the crack formation, surface kinetics deviates from the linear instability analysis. During the crack formation, mass flow due to the diffusion results in creating new crests at the surface or filling in the trough.

Keywords: Thin films, Difüzyon, Elastic interactions, Misfit stress

Cite as;

Çelik, A. (2022). Epitaksiyel Olarak Gerilmiş İzotropik İnce Filmlerde Elastik Etkileşim Nedenli Morfolojik Değişimin Doğrusal Kararlılık ve Sayısal Analizi, *Recep Tayyip Erdogan University Journal of Science and Engineering*, 3(1), 21-33. Doi:10.53501/rteufemud.1088954
Orcid ID: A.Çelik, 0000-0002-7867-9506

1. Giriş

İnce filmler, mikro-elektro-mekanik sistemler (MEMS) veya nano-elektro-mekanik sistemler (NEMS) gibi birçok mühendislik sisteminde kullanılan temel elemanlardır. Bu mühendislik sistemlerinin kararlı bir şekilde çalışmasını sağlamak, söz konusu mikro ve nano ölçeklerdeki malzeme sistemlerine etki eden kuvvetleri ve bunların sonuçlarını tahmin etmek için gerekli teorik çerçeveyi oluşturmak ile mümkündür. Günümüzde halen gerilme nedeni ile yüzeyde malzeme difüzyonu sonucu gerçekleşen yüzey şekil değişimi önemli bir problem olarak karşımıza çıkmakta ve teknolojiyi sınırlayan bir engel olmaktadır. Yüzey alanının hacme oranının büyük olduğu nano elektronik sistemlerde özellikle yüksek çalışma sıcaklıklarında malzemeye etki eden gerilmeler ince film yüzeyinin morfolojik değişiminde etken rol oynamaktadır. Bu problem küçük boyut, yüksek sıcaklık, büyük gerilme ve yüksek akım yoğunluklarına maruz kalan nano-elektronik sistemlerde bilimsel ve pratik öneme sahiptir (Suo, 2000).

Elektronik aygıtların üretim süreçlerinde ince filmler altlık malzemesi ile kafes parametresi farklılıkları ve termal uyumsuzluk nedeni ile ön gerilme altında kalırlar. Xie ve arkadaşları ince filmlerdeki basma ön gerilme alanlarının yüzey pürüzlülüğüne sebebiyet verdiğini ve bu yüzey pürüzlülüğünün basma kuvveti altındaki yüzeylerde düzlemsel oluşum enerjisinin düşmesi sebebiyle oluştuğunu rapor etmişlerdir (Xie vd., 1994). Yüksek sıcaklıkta basma gerilmesi altındaki tek kristal bir malzemede mikroskobik çatlakların oluşumu ise deneysel olarak ilk Sun ve arkadaşları tarafından 1994'te rapor edildikten sonra Jesson ve arkadaşları tarafından 1995'de, Barvosa-Carter tarafından da 1998'de rapor edilmiştir (Sun vd., 1994; Jesson vd., 1995; Barvosa-Carter vd., 1998). Aygıt elemanlarına etki eden gerilme kuvvetleri ince filmler gibi nano telleri de benzer şekilde etkileyerek, bu nano tellerin kullanıldığı elektronik aygıtların performansı ve güvenilirliği üzerinde

büyük etkiye sahiptir (Ramachandramoorthy vd., 2017). Ramachandramoorthy ve arkadaşları yaptıkları deneysel ve teorik çalışmada nano tellerin yüzeylerinin gerilme nedeni yüzey difüzyonu sonucu kararsızlığını gözlemlemişlerdir. Bu kararsızlık sonrası oluşan hasar için gerekli süreyi elastik enerji ile yüzey enerjisi arasındaki rekabetin belirlediğini göstermişlerdir.

Yüzey kararsızlığı üzerine yapılan teorik çalışmalara baktığımızda, Srolovitz (1989) katıya nominal olarak ara yüz düzleminde uygulanan bir gerilmeyi ele almış ve gerilme destekli tane sınırı difüzyonu üzerine yapılmış çalışmaları yüzey kimyasal potansiyeli ve yüzey difüzyonu hesabına uyarlamaya çalışmıştır (Srolovitz, 1989). Bu modelde elastik gerinim enerji yoğunluğunun karesi ile etkilendiğinden, çekme ve basma altındaki katılar için aynı davranışı göstererek dalga yapı sönümlenmektedir. Deneysel gözlemlenen farkın teoride eksik olması, araştırmacıların teorilerini bu eksikliği giderecek şekilde değiştirme çabalarına sebep olmuştur. Lu ve arkadaşları hidrostatik olmayan gerilme sistemi altında kristal ve amorf silikon (100) arasındaki ara yüzeyin difüzyon nedeni hareketini inceledikleri çalışmalarında elastik olarak bükülmüş levhalarda çeki etkisine maruz kalan taraftaki büyüme hızının, basma etkisindeki tarafa göre daha büyük olduğunu gözlemlemişlerdir (Lu vd., 1991). Bu davranış farkını açıklamak için Rice (1981) tarafından savunulan bir tekniği kullanarak kinetik ifade ile bağlantılı olarak bir aktivasyon gerilme tensörü konseptini geliştirmişlerdir. Benzer şekilde Chuang ve Fuller (1992), elastik gerinim enerji yoğunluğu nedeniyle kimyasal potansiyele gelen bu ikinci dereceden katkının deneysel bulguları açıklamaktaki yetersizliğini çözmek için yapay aktivasyon enerji gerekliliği olduğunu varsayarak kendi kinetik teorilerini öne sürmüşlerdir (Chuang ve Fuller, 1992). Fakat bu koyulan yapay aktivasyon enerjisinin termodinamik olarak tutarlı bir nedenini sunamamışlardır. Bu noktada daha önce diğer mekanizmalara nazaran daha önemsiz

olduğu varsayılan elastik etkileşimler göz önüne alınarak bu fenomen tekrar tanımlanmaya çalışılmıştır.

Yüzeyde var olan basamak yapılar veya kristal yüzeye tutunmuş atomların yarattığı gerilmeler malzemeye etki eden diğer gerilmeler ile etkileşim halindedir, bu durum elastik etkileşimler olarak adlandırılır. Sürekli ortam seviyesinde elastik etkilerin noktasal hata modelini ilk çalışanlardan biri Kukta'dır (Kukta vd., 2002). 2000'lerin başlarında birçok araştırmacı yüzeye tutunmuş atomların yarattıkları dipol etkileşimler nedeniyle gerilme altındaki yüzey davranışlarının temellerini çalışmıştır (Polop vd., 2003; Kukta vd., 2003; Muller ve Saul, 2004; Clouet vd., 2018). Günümüzde de özellikle moleküler dinamik çalışmaları ile yüzeye tutunmuş atomların elastik dipol tensörleri (Agarwal ve Trinkle, 2016; Dudarev ve Sutton, 2017; Varvenne ve Clouet, 2017; Connétable ve Maugis, 2020) ve bu elastik dipol etkileşimlerden kaynaklanan yüzey difüzyonu nedenli kararsızlıkları inceleyen birçok çalışma bulunmaktadır. Bu çalışmalardan, Tomar ve arkadaşları 2008'de yaptıkları çalışmada gerilme ve elektrik alan kuvvetleri altındaki anizotropik ince film yüzeyinin değişimini kararsızlık analizi ve modelleme çalışması ile incelemişlerdir. Bu çalışmaları sonucunda $\langle 111 \rangle$ yönlü yüzeylerin daha uzun çalışma ömrüne sahip olduğunu göstermişlerdir. Aynı grup 2009'da yaptıkları çalışmada ise kritik bir değerin üstünde gerilmenin yüzeyde oluşan dalgalanmanın (rippling) daha ileride çatlaklara neden olabileceğini öngörmüşler ve elektrik alan uygulamanın bunu engelleyebileceğini göstermişlerdir. (Tomar vd., 2008, 2009). Ogurtani ve arkadaşları (2010) ıslatma katmanı olarak bilinen ince film ile altlık arasındaki etkileşimleri de göz önüne alan çalışmalarında, rastgele pürüzlüğe sahip yüzeylerde oluşan kararsızlıkları incelemişlerdir. Çalışmaları gerilme uygulanan ince filmlerin yüzeylerinde oluşan kararsızlıkların Stranski-Krastanow yapılarına sebebiyet verdiğini göstermişlerdir (Ogurtani vd.,

2010). Kostyrko ve Shuvalov'un 2015'de Gibbs'in termodinamik modelini kullanarak yaptıkları çalışmada çok katmanlı ince filmlerin morfolojik kararlılığı incelemişlerdir. Çalışmaları sonunda ara yüzey gerilmelerine maruz kalan düz ince film yüzeyinin elastik etkiler nedeniyle difüzyon sonucu dalgalı bir yapıda kararlı hale geldiğini göstermişlerdir (Kostyrko ve Shuvalov, 2015). Benzer şekilde Zhou ve Li (2019) yaptıkları çalışmada lokal olmayan elastik etkileri de dahil ederek yüzey kararlılığını incelemişlerdir. Gerilmeye maruz kalmış çukur bölgelerin yüksek kimyasal potansiyele sahip oldukları bu nedenle bu bölgelerden yüzey difüzyonu ile madde kaçıışı olduğunu ve kritik dalga boyunu veren bağıntılar elde ettiklerini rapor etmişlerdir (Zhou ve Li, 2019). Guin ve arkadaşları (2021) ise yüzeylerin detaylı bir kararlılık analizi yapmış ve kararlılık haritaları sunmuşlardır (Guin vd., 2021a, 2021b). Ogurtani ve arkadaşlarının çalışması hariç, bu çalışmaların ortak noktası yüzeyi bir değişkene bağlı birebir fonksiyon ($\mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R}$) ile ifade etmeleridir.

Bu çalışmanın temel amacı, sınırlı elemanlar yöntemini kullanarak uygulanan gerilmenin elastik dipol etkileşimler ile yüzey morfolojisi üzerindeki birleşik etkilerini ve bunun cihaz hasarına sebep olma süresine etkisini tahmin etmektir. Bu çalışmanın literatürden farkı, literatürde yüzeyi tanımlamak için kullanılan birebir fonksiyonlar yerine sınırlı elemanlar yöntemi gibi karmaşık yüzey morfolojilerine olanak veren bir yöntem ile hareketli sınırlar tanımlanacak olmasıdır. Bu yöntem kinetik sürecin neden olabileceği karmaşık yüzey şekillerinin saptanmasına olanak verecek esnekliğe ve sadece yüzeyde hesap yapılmasına olanak vererek hesaplama sürelerini düşürmeyi sağlayacaktır (Brebbia ve Dominguez, 1994).

2. Fiziksel ve Matematiksel Model

Bu çalışmada sıcaklık, entropi, serbest enerjinin malzeme içinde homojen ve izotropik olduğu varsayılmıştır. Kimyasal potansiyelinin yüzey boyunca değişmesine dolayısıyla difüzyona

sebebiyet veren etmenler yüzey eğriliği nedenli kılcal kuvvetler (capillary forces), yüzeydeki kristal yüzeye tutunmuş atom nedenli dipol etkileşimler ve malzeme uyumsuzluk gerilmesi olarak alınmıştır (Balluffi vd., 2005). Tanımlanan hareketli sınır problemi sonlu elemanlar yöntemi kullanılarak yüzey morfolojik değişimi yüzeyin normal yönündeki hız bileşeni (V_{norm}) hesaplanacaktır. Bu iki boyutlu çözümde yüzey hareketli olup sonlu elemanlara bölünüp, her elemandaki hız normalize boyutta hesaplanarak yüzey hareket ettirilecek ve sonuç olarak yüzeyin maruz kaldığı kuvvetler altında morfolojik süreci gözlemlenecektir. Yüzey normalinin birimsiz parametrelerden oluşan formülü aşağıdaki şekilde verilebilir:

$$V_{norm} = \bar{D} \frac{\partial^2}{\partial \bar{\ell}^2} [\Xi \bar{\sigma}_h - \Sigma \bar{\sigma}_h^2 + \bar{\kappa}] \quad (1)$$

Burada D , malzemenin difüzyon sabiti olup, yönden bağımsız olarak alınmıştır. Ξ elastik dipol tensör etkileşimlerinin görece etkisini verirken, Σ ise elastik birim şekil değişimi enerjisi yoğunluğunun yüzey eğriliğine görece etkisini tanımlamaktadır. κ yüzey eğriliğinin sebep olduğu kılcal kuvveti (capillary force) ifade etmektedir. Karakterlerin üzerindeki bar ($\bar{\quad}$) parametrelerin normalize edildiğini ifade etmektedir. Denklem 1'de ℓ yüzey boyunca eğrisel koordinattır, normalizasyonda kullanılacak ℓ_0 ince film kalınlığı olan ω_0 'ya eşit olarak alınmış ve gerekli normalizasyonlar sonrası birimsiz parametreler elde edilmiştir ($\bar{\ell} = \ell/\ell_0, \bar{\kappa} = \kappa\ell_0, \bar{\omega}_0 = \omega_0/\ell_0, \bar{\sigma}_h = \sigma_h/\sigma_0$). Bu çalışmada normalizasyon sonucu temel birimsiz parametreler (Ξ, Σ, τ_0) aşağıdaki şekilde hesaplanır:

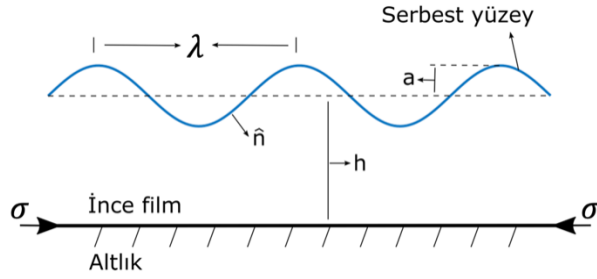
$$\Xi = (1 + \nu) \frac{\ell_0 \sigma_0}{3g_s} |Tr \lambda_s| \quad (2)$$

$$\Sigma = \frac{(1-\nu^2)\ell_0 \sigma_0^2}{2Eg_\sigma} \quad (3)$$

$$\tau_0 = \frac{kT\ell_0^4}{\Omega_\sigma D_\sigma h_\sigma g_\sigma^0} \quad (4)$$

Denklem 1'de σ_0 ince filme kenarlardan tek ekseninde uygulanan gerilmedir ve $\sigma_0 = E\varepsilon_0(1 - \nu_0)$ ifadesi ile verilir (Ogurtani, 2006). Burada ε_0 ; uygulanan uyumsuzluk birim şekil değişimi, E ; malzemenin elastisite modülü, ν_0 ; Poisson oranıdır. Çevresel gerilme ise düzlem gerilme hali durumunda $\sigma_h = \hat{t} \cdot \sigma_s \cdot \hat{t}$ ifadesi ile tanımlanır. Burada \hat{t} birim yüzey teğet vektördür, σ_s ise iki boyutta yüzeyde hesaplanmış gerilme tensörüdür. Yüzey gerilmesi olmayan yüzeylerde $n \cdot \sigma_s \cdot n = 0$ eşitliği geçerli olduğundan, çevresel gerilme şu şekilde verilebilir: $\sigma_h = Tr(\sigma_s)$. Modellemede pozitif yön ince film yüzeyinden içeri doğru alınmıştır. τ_0 birimsiz yeni zaman boyutunu ifade etmektedir. Ω_σ yüzeydeki ortalama atomik hacmi, h_σ yüzeyi oluşturan bölgenin kalınlığını verirken D_σ buradaki izotropik difüzyon sabitini verir. g_σ^0 ise malzemenin Gibbs serbest enerjisini ifade eder. Bu bilgiler ışığında örneğin; bakır bir ince film için atomik yapısal değerler olan $\Omega_\sigma \cong 1,66 \cdot 10^{-29} m^3$ ve $h_\sigma \cong 2,56 \cdot 10^{-10} m$ alınıp, yüzey difüzyonu $D_{Cu}^\sigma = 5,85 \cdot 10^{-5} \exp(-0,95eV/kT)$ ile ifade edilirken, Gibbs serbest enerjisi $g_\sigma^0 = 1,6 J/m^2$ ve elastisite modülü $E_{Cu} = 130 GPa$ alınarak normalize uzayda yapılan deneylerin sonuçları gerçek uzaya çevrilebilir.

İnce film yüzeyleri farklı boyutlarda yüzey pürüzlüğüne sahiptirler, bu çalışmada bu pürüzlüğü kontrollü bir şekilde modele tanımlamak için yüzeyin sinüs dalgası şeklinde olduğu farz edilmektedir. Bu sayede Şekil 1'deki gibi bir ince filmin yüzeyinin morfolojik değişimini matematiksel olarak tanımladıktan sonra yüzeyin hareket halinde bir sinüs dalgasına sahip olduğunu farz etmek, bu yüzeyin doğrusal kararlılık analizini (DKA) analitik olarak yapma imkânı tanır (Ogurtani, 2006; Krishnamurty ve Srolovitz, 2006; Tomar vd., 2008; Çelik, 2011).



Şekil 1. İnce film ve altlıktan oluşan sistemin gösterimi.

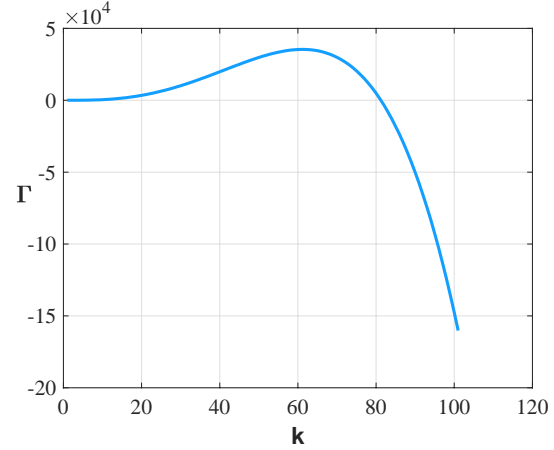
Figure 1. Representation of thin film and substrate.

Burada, yüzeydeki dalga boyu λ , dalga genliği a ile ifade edilirken, dalga numarası ise $k = 2\pi/\lambda$ ile ifade edilir. h ise ince film kalınlığıdır. Bu analiz sonucu yüzeydeki dalga yapısının büyümesi veya sönümlenmesi için gerekli kritik değerleri ve büyüme hızını (Γ) hesaplayabilmemizi sağlayan aşağıdaki formüle ulaşılır:

$$\Gamma = (2\Sigma - \Xi)2k^3 - k^4 \quad (5)$$

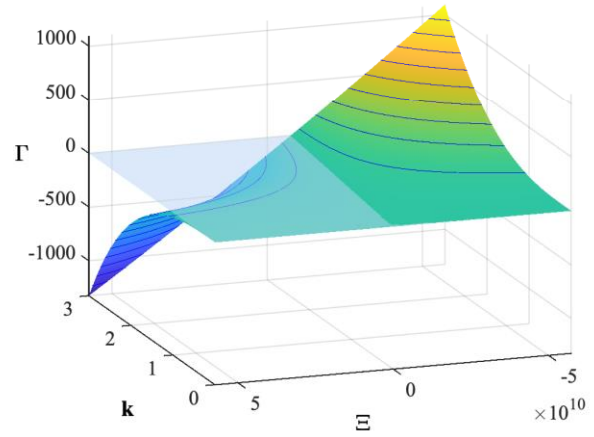
Büyüme hızının işareti yüzeye etki eden gerilmenin işaretine bağlıdır. Elastik dipol etkileşimlerin sıfırdan büyük olması ($\Xi > 0$) çekmeyi ifade ederken, sıfırdan küçük olması $\Xi < 0$ ise basmayı ifade eder. Denklem 5 göstermektedir ki; çekme gerilmesi yüzeydeki dalgaların sönümlenmesini sağlarken, basma gerilmesi yüzeyi kararsızlaştırır ve yüzeydeki dalga yapısı büyümeye başlar. Bakır için $\sigma = 100\text{MPa}$ ($E = 130\text{GPa}$, $\nu = 0,34$) basma kuvvetine maruz kalan yüzeyin büyüme hızının dalga sayısına bağımlılığı grafiği Şekil 2'deki gibidir. Büyüme hızı farklı elastik dipol etkileşimler için incelendiğinde ise Şekil 3'teki üçboyutlu yüzey elde edilir. Grafikte büyümenin (Γ) sıfıra eşit olduğu yerler kararlı olduğu yerleri gösterir.

Dalga sayısı (k) arttıkça malzeme yüzeyinin kararlı kalabildiği, çekme gerilmesinin artış gösterdiği Şekil 3'te görülmektedir. Burada yüzey eğriliğinin artışının kimyasal potansiyele getirdiği katkının buna karşılık gelecek çekme gerilmesi ile dengelendiği düşünülmektedir.



Şekil 2. Büyüme hızının dalga sayısına göre değişimi ($\sigma = 100\text{MPa}$, $E = 130\text{GPa}$, $\nu = 0,34$).

Figure 2. Variation of growth rate versus wave number. ($\sigma = 100\text{MPa}$, $E = 130\text{GPa}$, $\nu = 0.34$) (Çelik, 2011).



Şekil 3. İnce film için yüzey büyüme hızının dalga sayısı ve elastik dipol tensör etkileşimlerine bağlı grafiği: ($E = 130\text{GPa}$, $\nu = 0,34$, $g^0_\sigma = 1,6\text{ J}/\text{m}^2$, $|\text{Tr } \lambda_\sigma| = 0,4$) (Çelik, 2011).

Figure 3. 3D Plot for variation of growth rate against wave number and elastic dipole interaction intensity: $E = 130\text{GPa}$, $\nu = 0.34$, $g^0_\sigma = 1.6\text{ J}/\text{m}^2$, $|\text{Tr } \lambda_\sigma| = 0.4$) (Çelik, 2011).

Doğrusal kararlılık analizi sonrası elde edilen denklem 5 incelendiğinde aşağıdaki kritik dalga boyları hesaplanabilir:

$$\lambda_k = \frac{\pi}{2\Sigma - \Xi} \quad (6)$$

$$\lambda_m = \frac{4\pi}{6\Sigma - 3\Xi} \quad (7)$$

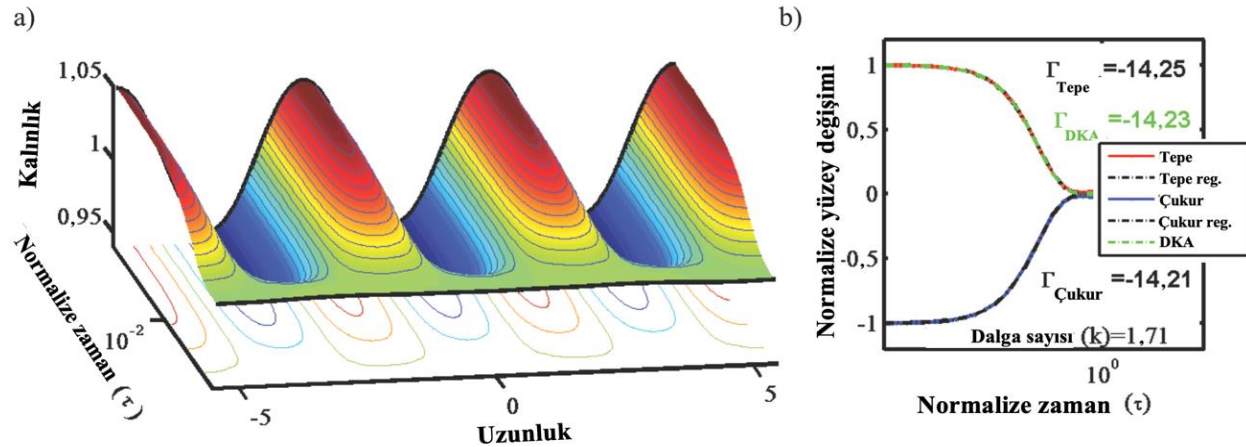
λ_k yüzey dalgalarının büyümesi için gerekli kritik dalga boyunu verirken, λ_m ise maksimum büyüme hızına sahip dalga boyunu vermektedir. Basma kuvvetine maruz kalan bakır ince film için ($\sigma = 100 \text{ MPa} - 1000 \text{ MPa}$) kritik dalga boyu 280 nm ile 27 nm arasına değişmektedir. Bu değerler Maroutian ve arkadaşlarının (2001) gözlemleri ile uyusmaktadır (Maroutian vd., 2001).

3. Bulgular ve Tartışma

Simülasyonlarda serbest olarak hareket etme kabiliyetine sahip ince film yüzeyinin başta sinüs dalgası şeklinde olduğu varsayılmış ve bu yüzeyde altlık ile uyumsuzluktan doğan ön gerilmeler sınır elemanları yöntemi (indirect boundary element method) ile hesaplanmıştır. Modelde yüzeyi oluşturan noktaların hızı denklem 1 ile bulunduktan sonra yüzey noktaları yüzey normali doğrultusunda hareket ettirilerek yeni yüzey oluşturulmaktadır. Bu çalışmada dalga genliği, dalga sayısı ve gerilme

kuvvetinin (sırasıyla $4 \times 3 \times 12 = 72$ farklı kombinasyonda yapılmış simülasyonlardan belli karakteristik sonuçları ortaya koyan deneyler sunulacaktır.

Bu sonuçlardan en geneli çekme gerilmesine maruz kalan ince filmlerin yüzey dinamikleridir. Literatürde de belirtildiği gibi çekme gerilmesi nedeni ile ince film yüzeyinin pürüzsüzleştiği ve yüzeydeki dalgalı yapının sönümlendiği gözlemlenmektedir. Şekil 4’de sunulan 50 MPa’lık gerilmeye denk gelen çekme kuvvetine maruz kalan dalga sayısı $k = 1,71$ olan ince film yüzeyindeki dalgalı yapının DKA analizi ile uyumlu bir şekilde sönümlenerek kaybolmaktadır. Deney sonucu elde edilen tepe noktalar $\Gamma_{tepe} = -14,26$ ve $\Gamma_{çukur} = -14,21$ çukur noktaların hızları, DKA ile hesaplanan değer olan $\Gamma = -14,23$ ile uyumluluk göstermektedir. Çekme gerilmesinin uygulandığı birçok deney bu deneyin benzeri şekilde sönümlenerek DKA ile uyumlu hareket etmektedir.



Şekil 4. Dalga sayısı $k = 1,71$, dalga genliği $a = 0,05$, çekme gerilmesi $\Xi = 0,56$ olan izotropik yüzey difüzyonuna sahip bakır ince filmin morfolojik evriminin zamana bağlı grafiği: a) Morfolojik evrimin üç boyutlu grafiği, b) Tepe ve çukur noktaların normalize zamana bağlı değişimi (Çelik, 2011).

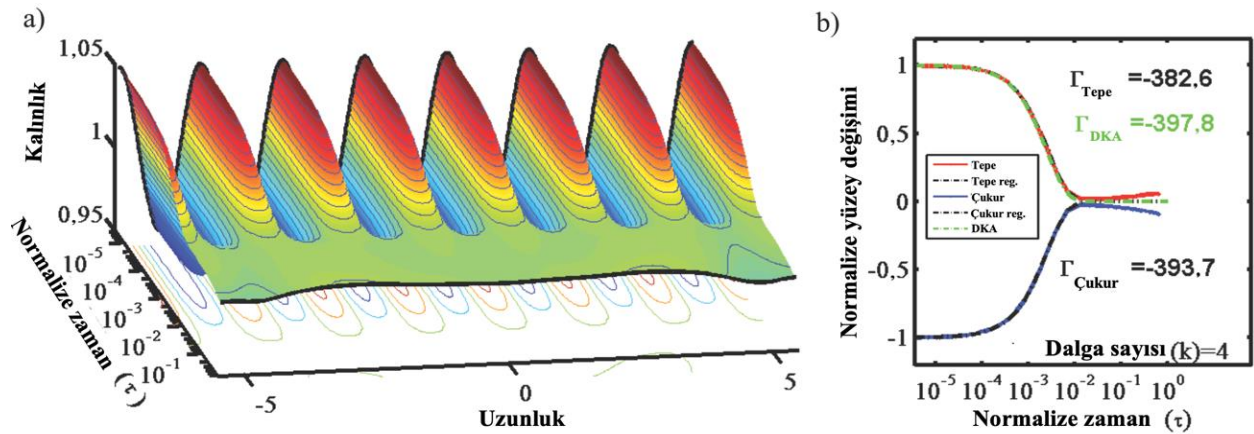
Figure 4. Shape evolution of the isotropic thin film with $k=1.71$ wavenumber and $a=0.05$ amplitude under tensile stress with $\Xi = 0.56$: a) Shape evolution of the thin film, b) Trough and crest change with normalized time (Çelik, 2011).

Dalga sayısı $k = 5,14$ olan ince filme kritik değer altındaki 10 MPa ($\Xi = -0,11$) şiddetinde basma kuvveti uyguladığımızda da yüzeydeki dalga formu sönümlenmektedir. Şekil 5’den de görüleceği üzere DKA analizinin tahmin ettiği hızlarda

sönümlenerek yüzeyin pürüzsüz hale gelişini gözlemlenmektedir. Kararlılık analizinden de anlaşılacağı üzere dalga sayısındaki artış yüzeyin kararlılığını arttırmaktadır. Dolayısıyla dalga sayısı arttıkça ince filmlerin yüzey dalgalarını sönümleme

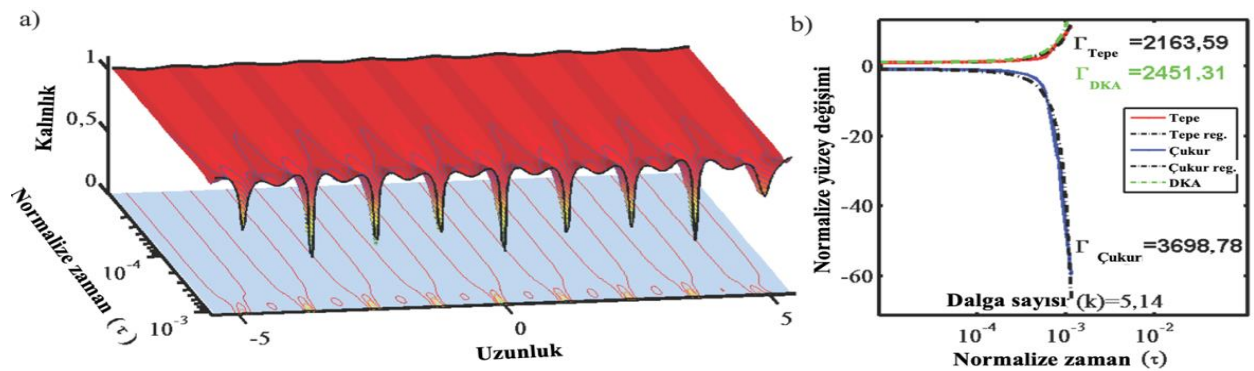
eğiliminde olduğu gözlemlenmektedir. Burada yüzey eğriliğinin yüzey kimyasal potansiyeline katkısının daha yüksek olduğu söylenebilir, bu nedenle yüzey bu eğriliğin sebep olduğu kimyasal enerjiyi dalga yapıyı sönmüleyerek azaltmaya çalışır. DKA ve simülasyonlar göstermektedir ki $-0,56 < \Xi < 11,16$ aralığındaki gerilmelerde genliği $a = 0,1$ altında olan dalgalar sönmülenerek yok olmaktadır.

Şekil 6'da kritik basma gerilmesinin çok üstünde gerilmeye maruz kalan ($\Xi = -11,6 \cong 1000$ MPa) yüzeydeki dalga formunun çukurlarında çatlaklar oluşurken tepelerde de oluk oluşumu görülmektedir. Burada tepelerde oluşan oluklu yapı kimyasal süreçleri oldukça benzer olan faz oluşumları literatürde uç çatallanması (tip splitting) olarak tanımlanmaktadır (Chen vd., 2014).



Şekil 5. Dalga sayısı $k = 5,14$, dalga genliği $a = 0,05$, basma gerilmesi $\Xi = -0,11$ olan izotropik yüzey difüzyonuna sahip bakır ince filmin morfolojik evriminin zamana bağlı grafiği: a) Morfolojik evrimin üç boyutlu grafiği, b) Tepe ve çukur noktaların normalize zamana bağlı değişimi (Çelik, 2011).

Figure 5. Shape evolution of the isotropic thin film with $k=5.14$ wavenumber and $a=0.05$ amplitude under compression stress with $\Xi = -0.11$: a) Shape evolution of the thin film, b) Trough and crest change with normalized time (Çelik, 2011).



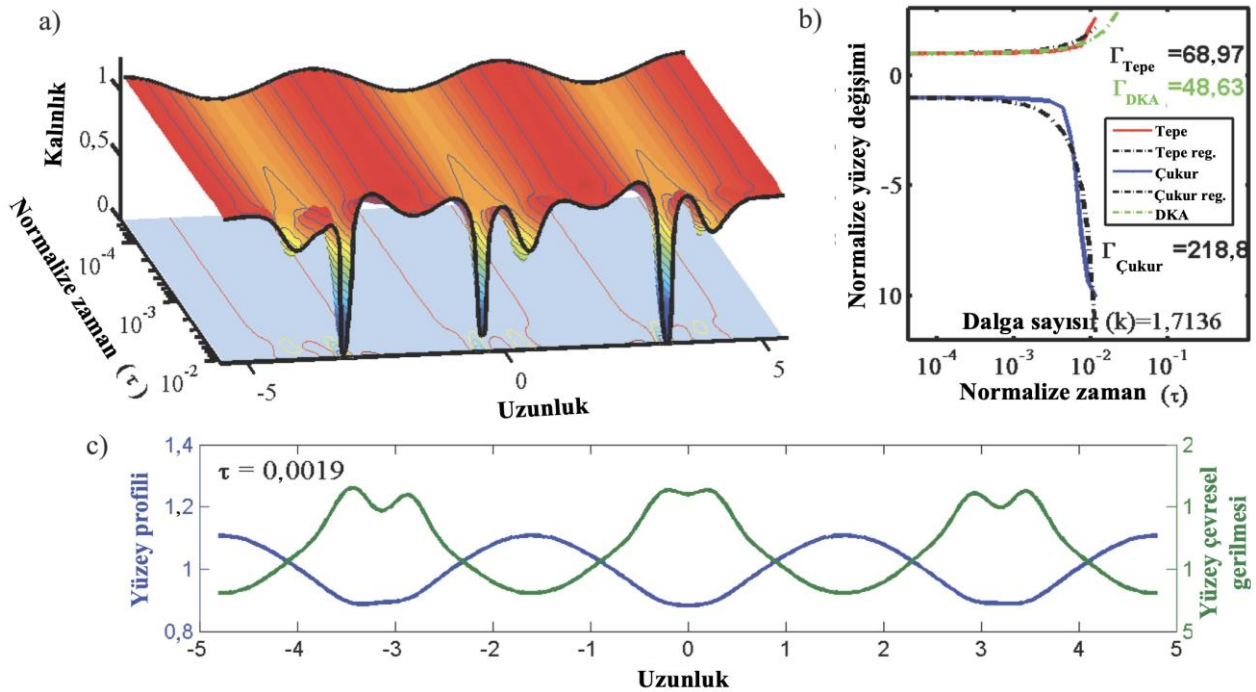
Şekil 6. Dalga sayısı $k=5,14$, dalga genliği $a=0,01$, çekme gerilmesi $\Xi=-11,6$ olan izotropik yüzey difüzyonuna sahip bakır ince filmin morfolojik evriminin zamana bağlı grafiği çatlak benzeri oluşumları göstermektedir. a) Morfolojik evrimin üç boyutlu grafiği, b) Tepe ve çukur noktaların normalize zamana bağlı değişimi (Çelik, 2011).

Figure 6. Shape evolution of the isotropic thin film with $k=5.14$ wavenumber and $a=0.01$ amplitude under compression stress with $\Xi=-11.6$: a) Shape evolution of the thin film, b) Trough and crest change with normalized time (Çelik, 2011).

Bu çatallanma $\tau = 5,8 \cdot 10^{-4}$ normalize zamanında başlamaktadır; ve bu andan itibaren tepeler ile çukurlar arasında hız farkı gözlemlenebilir olmaktadır. Bu noktadan sonra çukur çatlak benzeri form almakta ve hareket kinetiği DKA'dan ayrılmaktadır. Burada gerilmenin biriktiği çukur bölgedeki kimyasal enerjinin artması ve bu bölgedeki yüzey atomlarının yüzey difüzyonu ile daha düşük kimyasal enerjili bölgelere doğru difüzyon ile hareket etmesi söz konusudur. DKA büyüme hızını $\Gamma = 2451$ olarak verirken, simülasyonda çukurun hızı $\Gamma = 3698,78$ olarak gözlemlenmektedir.

Şekil 7'de dalga sayısı $k=1,71$ ve basma kuvveti $\Xi = -5.58$ olan gerilmeye maruz kalan ince filmde

uç çatallanmasının hem tepelerde hem de çukurlarda gerçekleştiği görülmektedir. Tepelerdeki çatallanmanın nedeni difüzyon hızı iken, çukurlardaki çatallanmanın nedeninin ise gerilme dağılımı olduğu düşünülmektedir. Yüzey difüzyonu ile şekil değişimi çalışmalarında ilk kez gözlemlenen bu sürecin dalga genliğinin dalga boyuna oranı ile alakalı olduğu düşünülmektedir. Bu oran düştükçe gerilme birikmesinin olduğu yüzey boyutu artmakta dolayısıyla birden fazla çatlak oluşumu ihtimali artmaktadır. Ters durumda bu oran arttığında çukurların ucundaki yüzey eğriliği artmakta dolayısıyla gerilme birikmesi çok daha dar bir bölgede etki etmektedir. Şekil 7c'de yeşil ile gösterilmiş çevresel gerilmesinin çukur bölgelerde ikili tepe yaptığı görülmektedir.



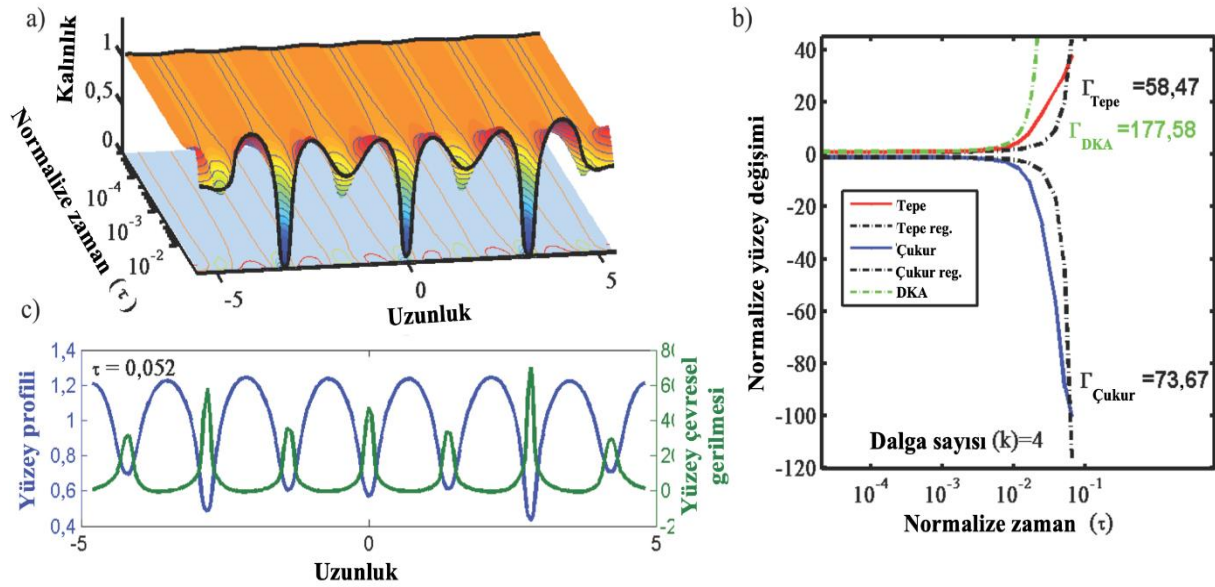
Şekil 7. Dalga sayısı $k = 1,74$, dalga genliği $a = 0,1$, çekme gerilmesi $\Xi = -5,58$ olan izotropik yüzey difüzyonuna sahip bakır ince filmin morfolojik evriminin zamana bağlı grafiği çatlak benzeri oluşumları göstermektedir. a) Morfolojik evrimin üç boyutlu grafiği, b) Tepe ve çukur noktaların normalize zamana bağlı değişimi, c) $(\tau =)19 \times 10^{-4}$ zamanında yüzey morfolojisi ve yüzeyde oluşan çevresel gerilmeleri (Çelik, 2011).

Figure 7. Shape evolution of the isotropic thin film with $k=1.74$ wavenumber and $a=0.1$ amplitude under compression stress with $\Xi = -5.58$: a) Shape evolution of the thin film, b) Trough and crest change with normalized time (Çelik, 2011).

Bir diğer gözlem ise 300 MPa ($\varepsilon = -3,35$) basma kuvveti uygulanan dalga sayısı $k = 3,99$ ve dalga genliği $a = 0,01$ olan ince film yüzeyinde çatlakların her çukurda oluşmadığıdır. Burada ilk başta tüm çukurlar büyümeye başlarken ve süreç ilerledikçe kinetik değişmekte, birer atlayarak çukurlar oluk oluşumuna ilerlerken, arada kalan çukurlar ise kapanmaya başlamaktadır (Şekil 8). Bu süreç literatürde ilk kez gözlemlenmektedir ve dalga genliğinin yeterince büyük olmaması nedeniyle yüzey eğriliğinin baskın gelerek aradaki çukurların kapanması için gerekli yüzey difüzyonuna sebep olduğu düşünülmektedir. Yüzeydeki çevresel gerilmeye bakıldığında çatlak oluşan çukurlardaki gerilme miktarının daha yüksek olduğu gözlemlenmektedir. Bu deney DKA analizlerinden oldukça sapmakta, bunun temel nedeninin analitik hesaptaki dalga sayısı ile

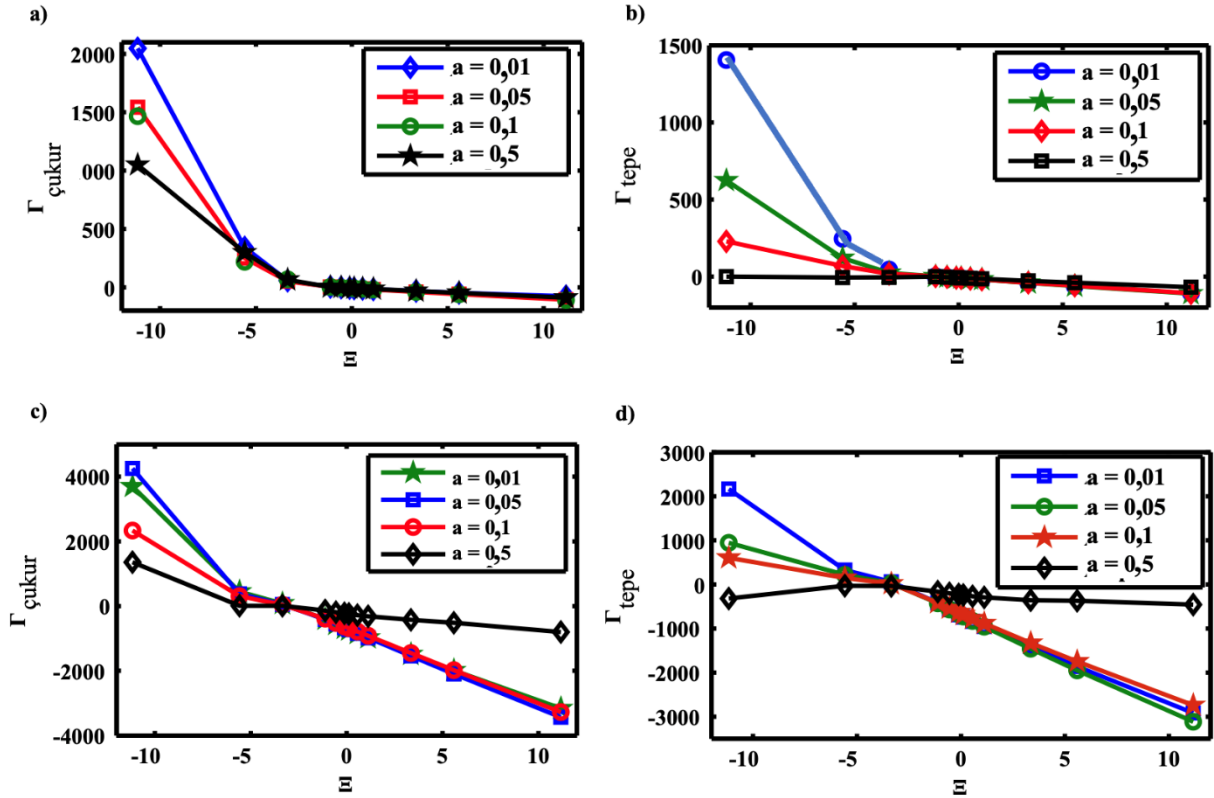
deneyde büyümeye katılan dalga sayısındaki fark olduğu düşünülmektedir.

Genele bakıldığında düşük dalga sayısına $k = 1,71$ sahip yüzeylerde yüzey büyüme hızı $\varepsilon \geq -1,16$ değerler için birbirine oldukça yakın seyretmektedir (Şekil 9a, 9b). Diğer yandan yüksek basma kuvvetinin etkin olduğu durumlarda dalga genliğine bağlı olarak hızlar birbirinden ayrılmaktadır. Dalga sayısının $k = 5,14$ olduğu durumlarda ise dalga genliği $a = 0,5$ olan yüzey diğerlerinden ve DKA analizinden de ayrılmaktadır (Şekil 9c, 9d). DKA analizindeki temel varsayımlardan biri yüzey tanjantının altlık ile yaptığı açının sifira yakın olmasıdır, bu nedenle yüksek genliğe sahip deneylerin bu analizden uzaklaşması beklenebilir.



Şekil 8. Dalga sayısı $k = 3,99$, dalga genliği $a = 0,1$, çekme gerilmesi $\varepsilon = -3,35$ olan izotropik yüzey difüzyonuna sahip bakır ince filmin morfolojik evriminin zamana bağlı grafiği çatlak benzeri oluşumları göstermektedir. a) Morfolojik evrimin üç boyutlu grafiği, b) Tepe ve çukur noktaların normalize zamana bağlı değişimi, c) ($\tau = 52 \cdot 10^{-3}$ zamanında yüzey morfolojisi ve yüzeyde oluşan çevresel gerilmeler (Çelik, 2011).

Figure 8. Shape evolution of the isotropic thin film with $k=3.99$ wavenumber and $a=0.1$ amplitude under compression stress with $\varepsilon = -3.35$: a) Shape evolution of the thin film, b) Trough and crest change with normalized time (Çelik, 2011).



Şekil 9. Büyüne hızını EDTİ'ye karşı değişimi: a) Dalga sayısı 1,71 ince filmde çukur yüzey hızı, b) Dalga sayısı 1,71 ince filmde tepe yüzey hızı, c) Dalga sayısı 5,14 ince filmde çukur yüzey hızı, d) Dalga sayısı 5,14 ince filmde tepe yüzey hızı. (Çelik, 2011).

Figure 9. Change of growth rate with EDTI: a) Trough growth rate with $k=1.71$, b) Crest growth rate with $k=1.71$, c) Trough growth rate with $k=5.14$, d) Crest growth rate with $k=5.14$. (Çelik, 2011).

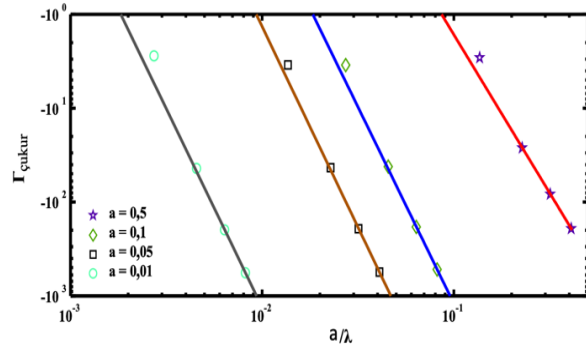
Dalga genliğinin dalga boyuna oranı üzerinden yüzey hızlarını regresyon ile analiz ettiğimizde $a=0,1$ ve altındaki genlikteki dalgaların üstel terimin yaklaşık olduğunu fakat dalga genliğinin $a = 0,5$ olduğu durumda bu değer farklılık gösterdiği gözlemlenmiştir. Bu da yüzey şeklinin kinetik davranışının bu dalga genliğinde diğerlerinden ayrıştığını göstermektedir. Bir diğer bulgu ise yüzey dalga genliğinin dalga boyuna oranı küçüldükçe yüzey hızının regresyon değerinden saparak daha yüksek bir değer almasıdır (Şekil 10).

$$\Gamma_{\text{çukur}}^{a=0,5} = -3923(a/\lambda)^{3,337} \quad (8)$$

$$\Gamma_{\text{çukur}}^{a=0,1} = -1,889 \cdot 10^7 (a/\lambda)^{4,192} \quad (9)$$

$$\Gamma_{\text{çukur}}^{a=0,05} = -4,839 \cdot 10^8 (a/\lambda)^{4,277} \quad (10)$$

$$\Gamma_{\text{çukur}}^{a=0,5} = -3.874 \cdot 10^{11} (a/\lambda)^{4,233} \quad (11)$$



Şekil 10. Yüzey hızının a/λ 'ya göre değişimi (Çelik, 2011).

Figure 10. Surface growth rate with respect to a/λ (Çelik, 2011).

Çatlağın altlığa ulaşması ile deneyin sonlandığı varsayılarak hasar süresi hesaplanmıştır. Bu sürenin analizi ile yüzeydeki dalga yapının çatlak oluşturarak ince filmi parçalara bölme süresini veren denklemlere ulaşılır (denklem 12-15). Benzer şekilde yüzeydeki dalgaların sönümlenme sürelerini veren formüller de çekme gerilmesine maruz kalan yüzeyler incelenerek elde edilmiştir

(denklem 16-19). Şekil 11’de sunulan veriler üstel regresyon yöntemi ile analiz edildiğinde aşağıdaki denklemlere ulaşılmaktadır:

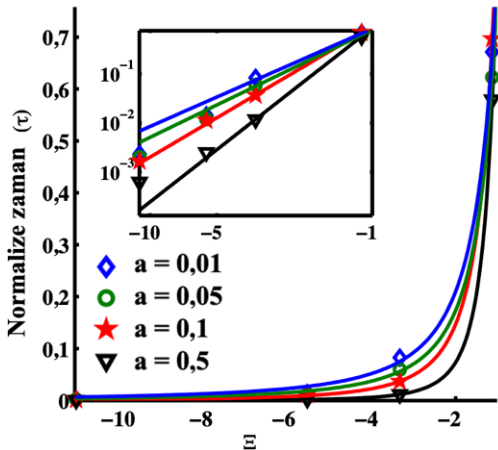
$$\tau_{a=0,5} = 0,8567|\Xi|^{-3,543} \quad (12)$$

$$\tau_{a=0,1} = 0,9349|\Xi|^{-2,668} \quad (13)$$

$$\tau_{a=0,05} = 0,7934|\Xi|^{-2,193} \quad (14)$$

$$\tau_{a=0,01} = 0,8372|\Xi|^{-1,995} \quad (15)$$

Şekil 11 incelendiğinde dalga genliğinin $a = 0.1$ olduğu durumda malzeme davranışının gerilmeye diğer genliklerdeki dalga yapılarından daha hassas olduğunu göstermektedir. Düşük gerilmelerde en uzun deney süresine sahipken, gerilim $\Xi = -3.13$ değerine getirildiğinde deney süresi en kısa ikinci dalga genliği olmaktadır.



Şekil 11. Çatlak oluşumunun gözlemlendiği $\Xi < -1$ değerlerinde dalga sayısı $k=1,71$ olan yüzeylerdeki deney süreleri (Çelik, 2011).

Figure 11. Experiment times for $\Xi < -1$ with $k=1.71$ (Çelik, 2011).

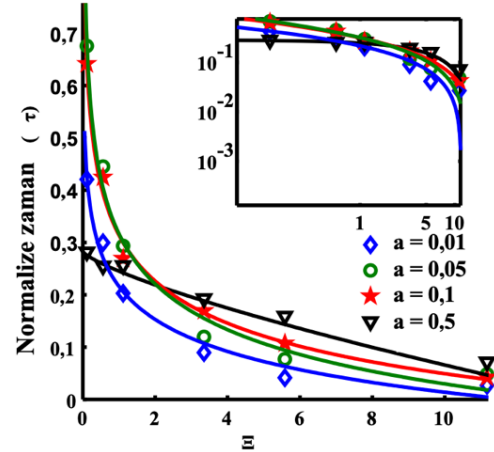
Benzer bir analiz çekme gerilmesi yapılmış deneylere uygulandığında, $a=0.5$ dalga genliğine sahip yüzeylerin diğer yüzeylerden ayrıştığı gözlemlenmektedir. Şekil 12 incelendiğinde dalga genliğinin $a = 0.5$ olduğu durumda düşük çekme gerilme değerlerinde $\Xi < 2$ diğer genliklere göre hızla yüzeydeki dalga yapısının sönümlendiği, aynı genlikteki dalga şekline sahip yüzeye yüksek çekme gerilmesi ($\Xi > 2$) uygulandığında ise en yavaş sönümlenmeye sahip olduğu gözlemlenmektedir.

$$\tau_{a=0,5} = 0,283 - |\Xi|^{-0,759} \quad (16)$$

$$\tau_{a=0,1} = 1,077|\Xi|^{-0,1227} - 0,763 \quad (17)$$

$$\tau_{a=0,05} = 1,071|\Xi|^{-0,1356} - 0,7543 \quad (18)$$

$$\tau_{a=0,01} = 2,027|\Xi|^{-0,0457} - 1,811 \quad (19)$$



Şekil 12. Çatlak oluşumunun gözlemlenmediği $\Xi > 0$ değerlerinde dalga sayısı 1,71 olan yüzeylerdeki deney süreleri (Çelik, 2011).

Figure 12. Experiment durations for $\Xi > 0$ with $k=1.71$ (Çelik, 2011).

Bulgular genel olarak incelendiğinde; yüksek basma gerilmesinin ($\Xi < -1,12$) uygulandığı durumlarda yüzey hızla kararsızlaşarak çatlak oluşup hızla filmi birkaç parçaya bölerken, düşük basma kuvveti ($-1,12 > \Xi > 0$) ve çekme kuvveti ($\Xi > 0$) uygulandığı durumlarda ise yüzey dalgalarının sönümlendiği gözlemlenmektedir. Düşük basma kuvveti ($-1,12 > \Xi > 0$) uygulandığında halen yüzeyin kararlı kalması yüzeyde çatlak benzeri oluşumların gelişmesi için aşılması gereken kritik bir değere işaret etmektedir.

4. Sonuçlar

Bu çalışmada sinüs dalgası şeklindeki izotropik fiziksel özelliklere sahip ince film yüzeyinin uygulanan gerilme nedeniyle geçirdiği morfolojik değişim incelenmiştir. Bu süreçte sürekli medya mekaniği modeline elastik etkileşimler de dahil edilmiş ve ince filmin tamamen elastik bölgede kaldığı varsayılmıştır. Elastik dipol etkileşimlerin basma ve çekme kuvvetlerinin yüzey morfolojik değişimi üzerindeki etkilerini ortaya koymada başarılı olduğu gözlemlenmiştir.

Deneyler göstermektedir ki çekme gerilmesi uygulanan ince filmlerde yüzey dalgaları sönümlenme eğiliminde iken, kritik değer üzerinde basma gerilmesine maruz kalan ince film yüzeyinde ise dalgaların çukur bölgelerinde çatlak benzeri oluşumlara sebebiyet vermektedir. Bu gözlemler literatürdeki fiziksel gözlemler ile de uyumludur (Jesson vd., 1995).

Uygulanan gerilmeye göre 3 farklı bölge gözlemlenmiştir. Bunlar; Sönümlenmenin gerçekleştiği ($\bar{\epsilon} > 0$) çekme kuvveti uygulanan bölge, düşük basma kuvveti ($-1,12 > \bar{\epsilon} > 0$) uygulanan yüzeyin karalı olduğu bölge ve çatlak benzeri oluşumların gözlemlendiği yüksek basma gerilmesinin ($\bar{\epsilon} < -1,12$) uygulandığı bölgedir.

Bu genel sonuçların yanında doğrusal kararlılık analizi sonucunda yüzeyin kararlılığını belirleyen kritik dalga boyu (λ_k) belirlenmiştir. Çatlak oluşumu ile birlikte yüzey hızı çatlak bölgelerde doğrusal kararlılık analizinden sapmaktadır. Çatlak oluşumu ile tepe bölgelere doğru difüzyon gerçekleşmekte ve tepenin etkin itici kuvvet olan gerilme birikmesinden yoksun olması nedeni ile kimyasal potansiyel değişimini azaltmakta bu da birikmelere sebebiyet vermektedir. Bu süreç faz yapıları literatüründe uç çatalanması olarak adlandırılan sürecin benzeri bir süreçtir (Chen vd., 2014).

Ek olarak ince film yüzeyindeki dalga formunun sönümlenmesi ve yüzeyde oluşan çatlak benzeri yapının ince filmi parçalara bölmesi için geçen süreler birimsiz deney parametreleri üzerinden değerlendirilmiştir. Bu sayede malzeme parametreleri bilinen gerilme maruz kalan herhangi bir ince film ile yapılacak aygıtların ömürleri hakkında bilgi verebilecek fonksiyonlar elde edilmiştir. Genel davranıştan kinetik olarak sapan yüzey yapıları dalga genlikleri ve dalga boyları cinsinden belirlenmiştir (Denklem 8-19).

Bu çıkarımların ve kritik değerlerin gerilmeye maruz kalan ince filmlerin yüzey davranışlarını tahmin etmede kullanılması ve olası cihaz hatalarının önüne geçilmesinde fayda sağlaması olasıdır.

Kaynaklar

- Agarwal, R., Trinkle, D.R. (2016). Light-element diffusion in Mg using first-principles calculations: Anisotropy and elastodiffusion. *Physical Review B*, 94, 054106. DOI:10.1103/PhysRevB.94.054106
- Balluffi, R.W., Allen, S.M., Carter, W.C. (2005). *Kinetics of Materials*, John Wiley & Sons, Inc., ISBN: 0471246891, Hoboken, New Jersey.
- Barvosa-Carter, W., Aziz, M.J., Gray, L.J., Kaplan, T. (1998). Kinetically driven growth instability in stressed solids. *Physical Review Letters*, 81, 1445. DOI:10.1103/PhysRevLett.81.1445
- Brebbia, C.A., Dominguez, J. (1994). *Boundary Elements: An Introductory Course*, WIT Press., ISBN: 1853123498, Southampton.
- Çelik, A. (2011). Investigation of Electromigration and Stress Induced Surface Dynamics on The Interconnect by Computer Simulation. Ph.D. Thesis, Middle East Technical University, Ankara, Turkey.
- Chen, Y., Billia, B., Li, D.Z., Nguyen-Thi, H., Xiao, N.M., Bogno, A. (2014). Tip-splitting instability and transition to seaweed growth during alloy solidification in anisotropically preferred growth direction. *Acta Materialia*, 66, 219–231. DOI:10.1016/j.actamat.2013.11.069
- Chuang, T., Fuller, Jr. E.R. (1992). Extended Charles–Hillig theory for stress corrosion cracking of glass. *Journal of the American Ceramic Society*, 75(3), 540–545. DOI:10.1111/j.1151-2916.1992.tb07839.x
- Clouet, E., Varvenne, C., Jourdan, T. (2018). Elastic modeling of point-defects and their interaction. *Computational Materials Science*, 147, 49-63. DOI:10.1016/j.commatsci.2018.01.053
- Connétable, D., Maugis, P. (2020). Effect of stress on vacancy formation and diffusion in fcc systems: Comparison between DFT calculations and elasticity theory. *Acta Materialia*, 200, 869–882. DOI:10.1016/j.actamat.2020.09.053
- Dudarev, S.L., Sutton, A.P. (2017). Elastic interactions between nano-scale defects in irradiated materials. *Acta Materialia*, 125, 425-430. DOI:10.1016/j.actamat.2016.11.060
- Ogurtani, T.O., Çelik, A., Ören E.E. (2014). Stranski-Krastanow islanding initiated on the stochastic rough surfaces of the epitaxially strained thin films. *Journal of Applied Physics*, 115, 224307. DOI:10.1063/1.4883295
- Guin, L., Jabbour, M.E., Triantafyllidis, N. (2021a). Revisiting step instabilities on crystal surfaces. Part I: The quasistatic approximation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 156, 104574. DOI:10.1016/j.jmps.2021.104574

- Guin, L., Jabbour, M.E., Shaabani-Ardali, L., Triantafyllidis, N. (2021b). Revisiting step instabilities on crystal surfaces. Part II: General theory. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 156, 104582. DOI: 10.1016/j.jmps.2021.104582
- Jesson, D.E., Chen, K.M., Pennycook, S.J., Thundat, T., Warmack R.J. (1995). Crack-like sources of dislocation nucleation and multiplication in thin films. *Science*, 268, 1161-1663. DOI:10.1126/science.268.5214.1161
- Kostyrko, S.A., Shuvalov, G.M. (2015). Morphological stability of multilayer film surface during diffusion processes, *International Conference "Stability and Control Processes" in Memory of V.I. Zubov (SCP)*, 5-9 October 2015, Russia, Saint-Petersburg, DOI:10.1109/SCP.2015.7342172.
- Krishnamurty, R., Srolovitz, D.J. (2006). Film/substrate interface stability in thin films. *Journal of Applied Physics*, 99, 043504. DOI: 10.1063/1.2173047
- Kukta, R.V., Peralta, A., Kouris, D. (2002). Elastic interaction of surface steps: effect of atomic-scale roughness. *Physical Review Letters*, 88(18), 186102. DOI:10.1103/PhysRevLett.88.186102
- Kukta, R.V., Kouris, D., Sieradzki, K. (2003). Adatoms and their relation to surface stress. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 51, 1243-1266. DOI:10.1016/S0022-5096(03)00024-3
- Lu, G.Q., Nygren, E., Aziz, M.J. (1991). Pressure-enhanced crystallization kinetics of amorphous Si and Ge: Implications for point-defect mechanisms. *Journal of Applied Physics*, 70, 5323. DOI:10.1063/1.350243
- Maroutian, T., Douillard, L., Ernst, H.J. (2001). Morphological instability of Cu vicinal surfaces during step-flow growth. *Physical Review B*, 83, 165401. DOI:10.1103/PhysRevB.64.165401
- Muller, P., Saul, A. (2004). Elastic effects on surface physics. *Surface Science Reports*, 54, 157-258. DOI:10.1016/j.surfrep.2004.05.001
- Ogurtani, T.O. (2006). 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*, 74, 155422. DOI:10.1103/PhysRevB.74.155422
- Ogurtani, T.O., Celik, A., Oren, E.E. (2010). Generic role of the anisotropic surface free energy on the morphological evolution in a strained-heteroepitaxial solid droplet on a rigid substrate. *Journal of Applied Physics*, 108(10), 103516. DOI:10.1063/1.3512970
- Polop, C., Hansen, H., Busse, C., Michely, T. (2003). Relevance of nonlocal adatom-adatom interactions in homoepitaxial growth. *Physical Review B*, 193405. DOI:10.1103/PhysRevB.67.193405
- Ramachandramoorthy, R., Wang, Y., Agheai, A., Richter, G., Cai, W., Espinosa, E.H. (2017). Reliability of single crystal silver nanowire-based systems: stress assisted instabilities. *ACS nano*, 11(5), 4768-4776. DOI: 10.1021/acsnano.7b01075
- Rice, J.R., Chuang, T.J. (1981). Energy variations in diffusive cavity growth. *Journal of the American Ceramic Society* vol. 64 (1) pp. 46-53. DOI: 10.1111/j.1151-2916.1981.tb09557.x
- Srolovitz, D. (1989). On the stability of surfaces of stressed solids. *Acta Metallurgica*, 37(2), 621-625. DOI:10.1016/0001-6160(89)90246-0
- Sun, B., Suo, Z., Evans, A.G. (1994). Emergence of cracks by mass transport in elastic crystals stressed at high temperatures. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 42(11), 1653-1677. DOI:10.1016/0022-5096(94)90066-3
- Suo, Z. (2000). Evolving material structures of small feature sizes. *International Journal of Solids and Structures*, 37, 367-378. DOI: 10.1016/S0020-7683(99)00100-6
- Tomar, V., Gungor, M.R., Maroudas, D. (2008). Theoretical analysis of texture effects on the surface morphological stability of metallic thin films. *Applied Physics Letters*, 92, 181905. DOI: 10.1063/1.2912037
- Tomar, V., Gungor, M.R., Maroudas, D. (2009). Rippling instability on surfaces of stressed crystalline conductors. *Applied Physics Letters*, 94, 181911. DOI:10.1063/1.3130742
- Varvenne, C., Clouet, E. (2017). Elastic dipoles of point defects from atomistic simulations. *Physical Review B*, 96, 224103. DOI:10.1103/PhysRevB.96.224103
- Xie, Y.H., Gilmer, G.H., Roland, C., Silverman, P.J., Buratto, S.K., Cheng, J.Y., Fitzgerald, E.A., Kortan, A.R., Schuppler, S., Marcus, M.A., Citrin, P.H. (1994). Semiconductor surface roughness: dependence on sign and magnitude of bulk strain. *Physical Review Letters*, 73, 3006. DOI:10.1103/PhysRevLett.73.3006
- Zhou, W., Li, W. (2019). Instability of Epitaxially Strained Thin Films Based on Nonlocal Elasticity. *Chinese Physical Letters*, 36(1), 016801. DOI:10.1088/0256-307X/36/1/0168