

**T.C.  
MARMARA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**MONTE CARLO METODU İLE  
İNCE FİLMLERDE KRİSTAL YAPININ OLUŞMASININ  
İNCELENMESİ**

**Murat TANDOĞAN**  
(141101420070170)

**YÜKSEK LİSANS TEZİ  
FİZİK ANABİLİM DALI  
FİZİK PROGRAMI**

**DANIŞMAN**  
**Doç. Dr. Şahin AKTAŞ**

**İSTANBUL 2009**

**T.C.**  
**MARMARA ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**KABUL ve ONAY BELGESİ**

Murat TANDOĞAN'ın “**Monte Carlo Metodu ile İnce Filmlerde Kristal Yapının Oluşmasının İncelenmesi**” başlıklı lisansüstü tez çalışması, M.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun 01.06.2009 tarih ve 2009/13-08 sayılı kararı ile oluşturulan jüri tarafından Fizik Anabilim Dalı Fizik Programında YÜKSEK LİSANS Tezi olarak kabul edilmiştir.

Danışman	: Doç. Dr. Şahin AKTAŞ	Marmara Üniversitesi
1. Üye	: Yrd. Doç. Dr. Cumali TAV	Marmara Üniversitesi
2. Üye	: Doç. Dr. Sinan KESKİN	Marmara Üniversitesi

Tezin Savunulduğu Tarih : 22.06.2009

**ONAY**

M.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun 14.07.2009 tarih ve 2009/16-03 sayılı kararı ile Murat TANDOĞAN'ın Fizik Anabilim Dalı Fizik Programında Y.Lisans (MSc.) derecesi alması onanmıştır.

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü  
Prof. Dr. Sevil ÜNAL

## TEŐEKKÜR

Tez alıŐmalarım boyunca bana inanan, guvenen, destekleyen ve karŐılaŐtıđım her zorlukla ilgilenen tez danıŐmanım, deđerli hocam Do. Dr. Őahin AKTAŐ baŐta olmak üzere, yksek lisans đrenimim sırasında her konuda fikirlerine baŐvurduđum hocam Prof. Dr. Uđur YAHŐI'ye ve tez alıŐmalarım boyunca birok konuda bilgilerini benimle paylaŐan hocam Do. Dr. Ahmet ALTINDAL'a ok teŐekkr ederim.

Ayrıca lisans eđitimim sırasında, fiziđe olan sevgimi ve merakımı tetikleyen, bana her konuda sayısız yardımda bulunan deđerli hocalarım Do. Dr. Mustafa ZCAN ve Yrd. Do. Dr. Akif SABANER'e teŐekkr ederim.

Son olarak, hayatımın vazgeilmezleri olan annem, babam, kardeŐim ve Gonca ERDEMCI'ye sonsuz teŐekkrler...

# İÇİNDEKİLER

	SAYFA
TEŞEKKÜR.....	i
İÇİNDEKİLER.....	ii
ÖZET.....	iv
ABSTRACT.....	v
YENİLİK BEYANI.....	vi
SEMBOLLER.....	vii
KISALTMALAR.....	viii
ŞEKİLLER.....	iv
TABLolar.....	xii
<b>BÖLÜM I. GİRİŞ ve AMAÇ.....</b>	<b>1</b>
I.1. GİRİŞ.....	1
I.2. AMAÇ.....	2
<b>BÖLÜM II. İNCE FİLM OLUŞUMU ve KAPLAMA TEKNİKLERİ...4</b>	<b>4</b>
II.1. GİRİŞ.....	4
II.2. FİZİKSEL BUHAR BİRİKTİRME YÖNTEMİ (PVD).....5	5
II.2.1. Buharlaştırma Yöntemleri.....6	6
II.2.1.1. Rezistans Isıtıcı ve İndüksiyon Akımı Yöntemi.....6	6
II.2.1.2. Elektron Bombardımanı Yöntemi.....6	6
II.2.1.3. Katodik Ark Yöntemi.....7	7
II.2.2. Püskürtme Yöntemleri.....7	7
II.3. KİMYASAL BUHAR BİRİKTİRME YÖNTEMİ (CVD).....8	8
II.4. CVD ve PVD ARASINDAKİ FARKLAR.....9	9
<b>BÖLÜM III. MONTE CARLO SİMÜLASYON METODU.....11</b>	<b>11</b>
III.1. GİRİŞ.....	11
III.2. MONTE CARLO SİMÜLASYONU.....	11
III.3. MONTE CARLO UYGULAMALARI.....	14

III.4. SİMÜLASYONUN AVANTAJLARI VE DEZAVANTAJLARI.....	15
III.5. MONTE CARLO METODUNUN MATEMATİKSEL ANALİZİ.....	16
III.6. MONTE CARLO METODUNUN ÖRNEKLENMESİ.....	18
III.6.1. Pi Sayısının Hesaplanması.....	18
III.6.2. Bir Nötronun Birim Uzunluktaki Madde İçinde Hareketi.....	19
<b>BÖLÜM IV. TEZ ÇALIŞMALARI.....</b>	<b>21</b>
IV.1. GİRİŞ.....	21
IV.2. PARÇACIKLARIN GELİŞİGÜZEL DAĞILIMI.....	22
IV.3. PARÇACIKLARIN GELİŞİGÜZEL HAREKETİ.....	25
IV.4. PARÇACIKLARIN BELİRLENEN YÖNE HAREKETİ.....	29
IV.5. YÜZEYDEN KOPMA İHTİMALİ.....	40
IV.6. PARÇACIKLARIN DAĞILIMA GÖRE HAREKETİ.....	48
<b>BÖLÜM V. SONUÇLAR ve TARTIŞMA.....</b>	<b>51</b>
<b>BÖLÜM VI. SON DEĞERLENDİRMELER ve ÖNERİLER.....</b>	<b>60</b>
<b>KAYNAKLAR.....</b>	<b>61</b>
<b>EKLER.....</b>	<b>62</b>
<b>ÖZGEÇMİŞ.....</b>	<b>96</b>

## ÖZET

### MONTE CARLO METODU İLE İNCE FİMLERDE KRİSTAL YAPININ OLUŞMASININ İNCELENMESİ

İnce film oluşması Monte Carlo simülasyon tekniği kullanılarak incelenmiştir. İlk aşamada gaz halindeki örneğin yüzeye yapışması ve film oluşumu için gerekli fiziksel model ve sayısal parametreler deneme – yanılma yöntemi ile belirlenerek sayısal simülasyon için (en iyi bilgisayar zamanı) en ideal koşullar elde edilmiştir.

Gaz halindeki örneğin film oluşturması üç temel modelde incelendi. Bunlar; a) parçacıklar gaz halindeyken düşey doğrultuda rastgele hareket ederler (dışsal etki yok), b) dışsal etki (taşıyıcı gaz kullanımı, manyetik alan, elektrik alan) sayesinde aşağı yönlendirme altında film oluşumu, c) gaz halinde kalan parçacıkların kaba düzgün dağılmasını sağlayacak olan modellemedir.

Her üç modelde de yüzeye yapışan parçacıklar için sıcaklığa bağlı aktivasyon enerjisi, parçacığın yüzeyden kopma ihtimali “ $PA$ ” ile temsil edilmiştir. Bu sayede film oluşumunun sıcaklığa bağımlılığı  $PA$  ile doğrudan ilişkilendirilmiştir.

Simülasyon çalışmaları sonucunda, ince film yapımı isteniyorsa üçüncü modelin daha başarılı olacağı görülmüştür. Ancak daha kaliteli fakat daha kalın film isteniyorsa ikinci modelin daha başarılı olduğu belirlenmiştir.

Mayıs, 2009

Murat TANDOĞAN

## **ABSTRACT**

### **THE STUDY OF THIN FILM GROWTH BY USING MONTE CARLO METHOD**

Thin film growth was studied by using Monte Carlo simulation method. In order to construct the simulational model, the physical model with required parameters were determined after some trial and error runs. This was necessary in order to obtain the optimum simulation conditions with a PC model computer.

Three basic models were used in this study. Model a, the gas particles used for the formation of film were under no external effects, thus free to move in three dimension until they stick on the surface or to another particle which already stuck on the surface to form film. Model b, gases were drifted towards the surface by an external agent. Model c, where the gas particles in the closed container were always distributed uniformly for all levels while they are in gas state.

In all three models, the activation energy was represented by a temperature dependent parameter “ $PA$ ” which represents the escape probability from the surface. Thus temperature dependence of the film growth was directly represented by  $PA$ .

The simulations revealed the fact that for an ideal thin film growth model c gave the best result to prepare a thin film while a thicker but a better quality could be obtained by model b.

**May, 2009**

**Murat TANDOĞAN**

# **YENİLİK BEYANI**

## **MONTE CARLO METODU İLE İNCE FİMLERDE KRİSTAL YAPININ OLUŞMASININ İNCELENMESİ**

İnce filmlerde kristal yapının oluşumunun Monte Carlo metodu ile incelendiği çalışmada geliştirilen simülasyon algoritması tarafımızdan geliştirilmiş olup, bu anlamda tamamen yeni bir çalışmadır.

**Mayıs, 2009**

**Doç. Dr. Şahin AKTAŞ**

**Murat TANDOĞAN**

## SEMBOLLER

- $\pi$  : Pi Sayısı  
**PA** : Yüzeyden Kopma İhtimali  
**E<sub>a</sub>** : Aktivasyon Enerjisi  
**k<sub>b</sub>** : Boltzmann Sabiti  
**T** : Sıcaklık

## KISALTMALAR

<b>PVD</b>	: Physical Vapour Deposition (Fiziksel Buhar Biriktirme)
<b>CVD</b>	: Chemical Vapour Deposition (Kimyasal Buhar Biriktirme)
<b>SOL-GEL</b>	: Solution – Gelation (Solüsyon - Jelleşme)
<b>DC</b>	: Direct Current Definition (Doğru Akım)
<b>APCVD</b>	: Atmospheric Pressure Chemical Vapour Deposition (Atmosferik Basınçlı Kimyasal Buhar Biriktirme)
<b>LPCVD</b>	: Low Pressure Chemical Vapour Deposition (Alçak Basınçlı Kimyasal Buhar Biriktirme)
<b>MOCVD</b>	: Metal-Organic Chemical Vapour Deposition Metal-Organik Kimyasal Buhar Biriktirme
<b>PACVD</b>	: Plasma Assisted Chemical Vapour Deposition Plazma Destekli Kimyasal Buhar Biriktirme
<b>LCVD</b>	: Laser Chemical Vapour Deposition Lazer Kimyasal Buhar Biriktirme
<b>PCVD</b>	: Photochemical Vapour Deposition Fotokimyasal Buhar Biriktirme
<b>CVI</b>	: Chemical Vapour Infiltration Kimyasal Buhar İnfiltrasyonu
<b>N</b>	: Parçacık Sayısı
<b>MCS</b>	: Monte Carlo Adımı Sayısı
<b>PM</b>	: Tabana Yönelim İhtimali

# ŞEKİLLER

	<u>SAYFA NO</u>
<b>Şekil III.1</b> Buffon'un İğne Problemi.....	12
<b>Şekil III.2</b> Gelişigüzel Sayıların Frekansa Bağlı Grafiği.....	16
<b>Şekil III.3</b> Gelişigüzel Noktaların Çeyrek Dairesel Bölgeye Dağılımı.....	19
<b>Şekil III.4</b> Nötronun Madde İçindeki Hareketi.....	19
<b>Şekil IV.1</b> Simülasyonun Oluşturulacağı Hacim.....	21
<b>Şekil IV.2</b> 500 Parçacığın Kutu İçine Gelişigüzel Dağılımı.....	23
<b>Şekil IV.3</b> 1000 Parçacığın Kutu İçine Gelişigüzel Dağılımı.....	24
<b>Şekil IV.4</b> 2000 Parçacığın Kutu İçine Gelişigüzel Dağılımı.....	24
<b>Şekil IV.5</b> 500 Parçacığın 200. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	27
<b>Şekil IV.6</b> 500 Parçacığın 400. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	27
<b>Şekil IV.7</b> 500 Parçacığın 600. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	28
<b>Şekil IV.8</b> 500 Parçacığın 800. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	28
<b>Şekil IV.9</b> 500 Parçacığın 1000. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	29
<b>Şekil IV.10</b> %60 İhtimalle -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın İlk Dağılımı.....	30
<b>Şekil IV.11</b> %60 İhtimalle -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 200. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	31
<b>Şekil IV.12</b> %60 İhtimalle -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 400. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	31
<b>Şekil IV.13</b> %60 İhtimalle -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 600. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	32
<b>Şekil IV.14</b> %60 İhtimalle -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 800. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	32
<b>Şekil IV.15</b> %60 İhtimalle -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 1000. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	33
<b>Şekil IV.16</b> %60 İhtimalle -y ve -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın İlk Dağılımı.....	34

<b>Şekil IV.17</b>	%60 İhtimalle -y ve -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 200. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	34
<b>Şekil IV.18</b>	%60 İhtimalle -y ve -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 400. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	35
<b>Şekil IV.19</b>	%60 İhtimalle -y ve -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 600. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	35
<b>Şekil IV.20</b>	%60 İhtimalle -y ve -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 800. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	36
<b>Şekil IV.21</b>	%60 İhtimalle -y ve -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 1000. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	36
<b>Şekil IV.22</b>	%60 İhtimalle -x, -y ve -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın İlk Dağılımı.....	37
<b>Şekil IV.23</b>	%60 İhtimalle -x, -y ve -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 200. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	37
<b>Şekil IV.24</b>	%60 İhtimalle -x, -y ve -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 400. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	38
<b>Şekil IV.25</b>	%60 İhtimalle -x, -y ve -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 600. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	38
<b>Şekil IV.26</b>	%60 İhtimalle -x, -y ve -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 800. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	39
<b>Şekil IV.27</b>	%60 İhtimalle -x, -y ve -z Yönünde Hareket Eden 500 Parçacığın 1000. Monte Carlo Adımındaki Dağılımı.....	39
<b>Şekil IV.28</b>	Yüzeyden Kopma İhtimalinin Sıcaklığa Göre Değişimi.....	40
<b>Şekil IV.29</b>	2000 Parçacığın 2000 Monte Carlo Adımı Sonunda Dağılımı.....	41
<b>Şekil IV.30</b>	2000 Parçacığın 5000 Monte Carlo Adımı Sonunda Dağılımı.....	42
<b>Şekil IV.31</b>	2000 Parçacığın 10000 Monte Carlo Adımı Sonunda Dağılımı...	42
<b>Şekil IV.32</b>	2000 Parçacığın 20000 Monte Carlo Adımı Sonunda Dağılımı...	43
<b>Şekil IV.33</b>	5000 Parçacığın 10000 Monte Carlo Adımı Sonunda Dağılımı...	44
<b>Şekil IV.34</b>	10000 Parçacığın 10000 Monte Carlo Adımı Sonunda Dağılımı..	44
<b>Şekil IV.35</b>	20000 Parçacığın 10000 Monte Carlo Adımı Sonunda Dağılımı..	45
<b>Şekil IV.36</b>	<i>Model 1</i> 'de 20000 Parçacığın 10000 Monte Carlo Adımı Sonunda Dağılımı.....	46

<b>Şekil IV.37</b>	<i>Model 2’de 20000 Parçacığın 10000 Monte Carlo Adımı Sonunda Dağılımı.....</i>	47
<b>Şekil IV.38</b>	<i>Model 3’te 20000 Parçacığın 10000 Monte Carlo Adımı Sonunda Dağılımı.....</i>	49
<b>Şekil V.1</b>	<i>PA=0,05 İken Model 1, Model 2 ve Model 3’ün 20000 Parçacık İçin Kıyaslanması.....</i>	53
<b>Şekil V.2</b>	<i>PA=0,1 İken Model 1, Model 2 ve Model 3’ün 20000 Parçacık İçin Kıyaslanması.....</i>	53
<b>Şekil V.3</b>	<i>PA=0,3 İken Model 1, Model 2 ve Model 3’ün 20000 Parçacık İçin Kıyaslanması.....</i>	54
<b>Şekil V.4</b>	<i>PA=0,5 İken Model 1, Model 2 ve Model 3’ün 20000 Parçacık İçin Kıyaslanması.....</i>	54
<b>Şekil V.5</b>	<i>PA=0,7 İken Model 1, Model 2 ve Model 3’ün 20000 Parçacık İçin Kıyaslanması.....</i>	55
<b>Şekil V.6</b>	<i>PA=0,9 İken Model 1, Model 2 ve Model 3’ün 20000 Parçacık İçin Kıyaslanması.....</i>	55
<b>Şekil V.7</b>	<i>PA=0,05 iken 20000 adımında Model 1, 2 ve 3’ün kıyaslanması.</i>	58
<b>Şekil V.8</b>	<i>PA=0,05 iken 50000 adımında Model 1, 2 ve 3’ün kıyaslanması.</i>	58
<b>Şekil V.9</b>	<i>PA=0,05 iken 100000 adımında Model 1, 2 ve 3’ün kıyaslanması.....</i>	58
<b>Şekil V.10</b>	<i>3 farklı model için ilk 8 seviye dağılımları.....</i>	59

# TABLolar

	<u>SAYFA NO</u>
<b>Tablo II.1</b> Buharın Oluşturulma Şekline Göre PVD Kaplama Yönteminin Sınıflandırılması.....	5
<b>Tablo IV.1</b> Bazı Parçacıkların Koordinatları.....	23
<b>Tablo IV.2</b> $PA=0,05$ İken <i>Model 1</i> 'de 20000 Parçacığın 10000 Monte Carlo Adımı Sonundaki Dağılımı.....	48
<b>Tablo IV.3</b> $PA=0,05$ İken <i>Model 2</i> 'de 20000 Parçacığın 10000 Monte Carlo Adımı Sonundaki Dağılımı.....	48
<b>Tablo IV.4</b> $PA=0,05$ İken <i>Model 3</i> 'te 20000 Parçacığın 10000 Monte Carlo Adımı Sonundaki Dağılımı.....	50
<b>Tablo IV.1</b> $PA=0,05$ İken <i>Model 1</i> , <i>Model 2</i> ve <i>Model3</i> 'te 20000, 50000 ve 100000 Monte Carlo Adımı Sonunda Parçacıkların $z$ Seviyelerine Dağılımları.....	57

# BÖLÜM I

## GİRİŞ ve AMAÇ

### I.1. GİRİŞ

Analitik yaklaşımların aksine simülasyon modelleri, karmaşık problemlerin modellenmesi ve çözümünde daha başarılı olurlar. Değişkenler arasındaki etkileşimi simülasyon modellerinde gözlemlemek daha kolaydır. [1]

Karmaşık sistemler ya da rastgele sistemler de (*random process*) diyebileceğimiz çok değişkenli sistemlerin neden simülasyon modelleri ile çözüldüğüne bakacak olursak, bunu tipik bir difüzyon örneği ile incelemek yararlıdır. Bir bardak koyu kahvenin tam ortasına bir miktar toz krema atıldığında neler olacağını düşünelim. Kahvenin karıştırılmadığını varsayarsak; beyaz krema kütlesi yavaşça yayılarak fincanı dolduracak ve sonuçta kahve tekdüze kahverengimsi bir renk alacaktır. Moleküler seviyede ise bu oluşum aşağıdaki gibi açıklanabilir:

Krema damlası yaklaşık olarak  $10^{23}$  tane molekül içersin. Eğer bir krema molekülünün kahve içersindeki hareketini bir şekilde izleyebilirsek; karmaşık bir yörüngede olacağını anlayabiliriz. Kabaca, diğer kahve ve krema molekülleriyle çarpışarak kısa bir periyot boyunca düz bir çizgide gidecektir (Newton'un ilk yasasına uygun olarak). Her çarpışma krema molekülümüzün hızında anlık bir değişime neden olacak ve bir diğer çarpışmaya kadar bu yeni hızla yoluna devam edecektir.

Amaç kahvenin kremayla karışımını yararlı teorik bir tanımlamayla yapılandırabilmektir. Prensipte bunu bardaktaki tüm kahve moleküllerinin hareket eşitliklerini yazarak başarabiliriz. Bu bize bir bardak kahve için bilmemiz gereken her şeyi açıklayan ve yaklaşık  $10^{23}$  tane, prensipte çözebileceğimiz (belki Euler metoduyla) diferansiyel eşitlik sunar. Fakat bu düşünüş iki nedenden dolayı hatalıdır. İlk olarak prensipte bu hesaplamalar mümkün olsa da, pratikte kesinlikle mümkün değildir. Yakın zamanda bu hesaplamayı yapacak kadar güçlü bir bilgisayarımız olması da olası değildir. İkincisi; böyle bir bilgisayar yapılmış olsa bile hesaplamaların sonuçları, zamana bağlı olarak bizim  $10^{23}$  tane molekülümüzün hız ve konumları olacaktır. Detaylı olarak bu

sayılar kremanın kahveyle nasıl karıştığını açıklamış olsa bile, oluşumun gerçek anlamını veremez. Problemin tam olarak sayısal bir çözümü; karışım problemini anlamamız için gerekli olan ya da istediğimiz bilgiyi bize sunacaktır. Gerçekte istediğimiz ise davranışın istatistiksel bir tanımı ya da teorisidir. Biz her krema molekülünün detaylı bir yörüngesiyle (ya da aldığı yol ile) ilgilenmiyoruz. Bizim için ortalama bir molekülün yörüngesini bilmek yeterlidir. Hesaba katılan parçacık sayısı çok fazla olduğu için bu ortalamadaki istatistiksel değişimler çok küçük olacaktır ve bu değişimler istatistiksel argümanlar kullanılarak tahmin edilebilir.

Kahve içersindeki krema probleminde, her krema molekülü bir diğer molekülle çarpışırken karmaşık bir yolda hareket eder. Bu aşamada rastgelelik konsepti ortaya çıkar ve bu karmaşık yol “*rastgele adım*” (*random walk*) olarak tanımlanır. Bu belli kurallara bağlı olarak parçacığın belli bir zamanda bir adım atması şeklinde bir durumdur. Krema molekülü için uygun olan modelde, yürüyüşünün adımı çarpışmalar arasındaki molekülün hareketine bağlıdır. Her çarpışma molekülün hızının yönelimini değiştirir ve bu da yürüyüşteki her basamağın yönelimini rastgele bir şekilde yaparak gerçekleştirir. Elbette molekülün yönelimi gerçekte rastgele değildir. Prensip, bardaktaki tüm diğer moleküllerin hareketleri de hesaplanmalı ve sonrasında çarpışma zamanları tahmin edilmelidir. Fakat bu mümkün olmadığından bu sistemi modellemek ve çözümünde simülasyon teknikleri kullanmak, bizi problemin çözümüne oldukça yaklaştıracaktır. [2]

Tez çalışmamızda incelenecek olan ince film oluşumu da aynen difüzyon problemi gibi çok sayıda molekül (parçacık) içermektedir. Parçacıkların hareketi, birbirleriyle etkileşimleri veya yüzey oluşturmalarını analitik yöntemlerle incelemek oldukça zordur. Bu çalışmada yapılacak olan modelleme ile parçacık hareketleri oldukça küçük bir hacimde ve farklı sayılarda parçacık kullanılarak incelenmiştir.

## **I.2. AMAÇ**

Gelişen teknoloji sayesinde ince film yapım teknolojileri ve teknikleri de hızla gelişmekte ve farklılaşmaktadır. İstenilen özelliklerde film yapımı için kristal yapıya sahip ince filmlerin oluşum mekanizmasının bilinmesi kritik önem taşımaktadır.

Bilgisayar teknolojisinin gelişmesine paralel olarak bilgisayarlı hesaplama ve simülasyon yöntemleri yaygın olarak kullanılmaya başlanmıştır. İstatistiksel bir simülasyon metodu olan Monte Carlo metodu kristallerin büyütülmesi simülasyon çalışmalarında sıklıkla başvurulan bir yöntemdir.

Bu alıřmada, kristal yapılı ince film oluřumu Monte Carlo metodu yardımıyla simülasyon yapılarak, ince film oluřumuna etkiyen temel faktörler (sıcaklık, elektrik ve manyetik alan, yüzey gerilimi vb.) bilgisayar ortamında incelenmiştir. alıřmaların sonucunda, istenilen özelliklere sahip ince film yapımının bu faktörlerden ne şekilde etkilendiđi belirlenecektir.

Geliřmekte olan nanoteknoloji uygulamaları alanında, istenilen niteliklerde film yapımının stratejik öneme sahip olduđu yadsınamaz gerçektir.

## BÖLÜM II

### İNCE FİLM OLUŞUMU ve KAPLAMA TEKNİKLERİ

#### II.1. GİRİŞ

Günümüzde ince filmler, yarıiletken aletlerin yapımında, manyetik kayıt ve algılama sistemlerinde, optik kaplamalarda ve dekoratif işlerde yaygınlıkla kullanılmaktadır. İnce filmlerin en önemli tercih sebebi, hacimli malzemelerde olmayan özellikleridir. İnce filmlerde, klasik laboratuvar şartlarında elde edilemeyecek seviyede küçük geometrilerin üç boyutta oluşması mümkündür. Ayrıca ince filmlerde, atomik büyüme işleminden ve çok katlı yapılardan kaynaklanan filme özgü malzeme özellikleri ile kristal yönelmesi daha net gözlemlenebilir.

Son yıllarda teknolojiadaki hızlı ilerleme, kullanılacak malzemelerin aranan özellik ve performanslarında da değişime neden olmuştur. Klasik üretim yöntemleriyle üretilmesi, şekillendirilmesi ve istenilen niteliklere sahip olması mümkün olmayan malzemelere olan ihtiyacın artması ile bunların imalini mümkün kılacak üretim yöntemlerine ihtiyaç duyulmaktadır. Bu nedenle üretim yöntemleri de hızla gelişmekte ve çeşitlenmektedir.

İnce film oluşumunda kullanılan teknikleri 3 ana başlık altında inceleyecek olursak şunlardır:

- Fiziksel buhar biriktirme yöntemi (PVD: Physical Vapour Deposition Process)
- Kimyasal buhar biriktirme yöntemi (CVD: Chemical Vapour Deposition Process)
- Solüsyon - jelleşme yöntemi (SOL-GEL: Solution – Gelation Method)

Solüsyon – jelleşme yönteminde kaplama malzemeleri sıvı fazda olduğu için bu bölümde gaz fazda yapılan ve buhar biriktirme yöntemi kullanan iki metoda ayrıntılı olarak yer verilecektir.

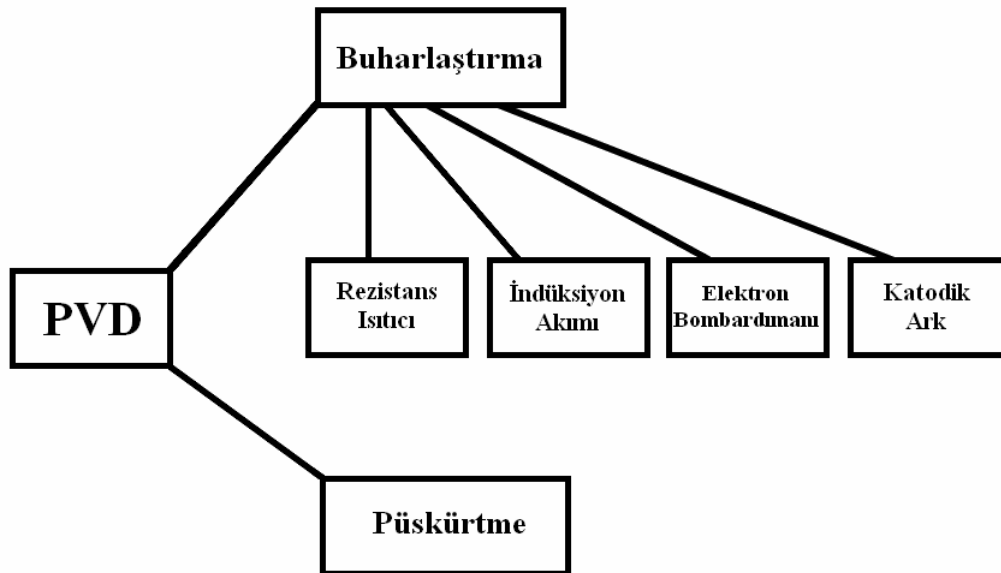
## II.2. FİZİKSEL BUHAR BİRİKTİRME YÖNTEMİ (PVD)

PVD yöntemi uzun zaman önce bilinmesine rağmen son 50 yıldır revaçta olan bir ince film kaplama tekniğidir. Bu yöntemin temel prensibi vakum ortamında kaplanacak metali buharlaştırarak kaplanacak yüzey üzerine biriktirmektir. PVD buharlaşma veya püskürtme ile olabilir. Vakum altında stabilizesini koruyabilen bütün malzemelerin birikmesi bu yöntemle yapılabilir.

Günümüze kadar geliştirilen farklı kaplama işlemleri ile uygulanan bu tekniğin mekanizması basitçe şöyledir. Vakumlu ortamda, bir ısıtıcı (rezistans, lazer, elektron bombardımanı vb.) ile buharlaştırılan kaplayıcı malzeme, kaplanacak olan malzeme üzerinde ince bir film katmanı halinde biriktirilir. PVD kaplama tekniği; katı haldeki ham maddenin yüksek enerji ile plazma haline getirilerek, kontrollü olarak, kaplanacak malzemenin üzerine yapıştırılması işlemi olarak özetlenebilir. Kaplamanın homojen olabilmesi için kaplanacak malzemeye maksimum hareket kazandırılır. Bu sayede kompleks geometrik parçalar bile homojen özelliklerde kaplanabilir.

Bu yöntemin ilk uygulaması, Michael Faraday'ın 1857 yılında bir metal teli vakum altında buharlaştırarak yaptığı kaplama kabul edilmektedir. 1888 yılında ise Alman fizikçi August Adolph Kundt bu yöntem ile üretilmiş ince filmlerin optik özelliklerini incelemiştir. 1970'lerden sonra teknolojinin hızlı gelişimi ile PVD kaplama yöntemi endüstrideki yerini almıştır.

**Tablo II.1:** PVD kaplama yönteminin sınıflandırılması



PVD tekniđi, özellikle korozyona karřı direnç gerektiren uygulamalarda, makine ve diřli parçalarının üretiminde kullanılmaktadır. PVD kaplama yönteminin, CVD kaplama yöntemine göre en büyük avantajı düşük sıcaklıklarda kaplama yapılabilmesidir. PVD kaplama yönteminde, kaplama 200 ile 500 °C arasında yapılır. Oysa CVD kaplama yönteminde sıcaklık 1000 °C'ye kadar çıkabilir. Bu nedenle PVD tekniđi kullanılan kaplamalarda kaplanan malzeme özelliklerini kaybetmez. Bu teknikle kaplanan tabakalarda çok yüksek tutunma kuvvetleri oluşmaktadır. Ayrıca bu yöntemle yapılan kaplamalar sökölerek tekrar kaplama yapılabilir. [3,4]

PVD kaplama yöntemi, buharın oluşturulma řekline göre buharlaştırma ve püskürtme yöntemleri olmak üzere Tablo II.1'deki gibi sınıflandırılabilir.

### **II.2.1. Buharlaştırma Yöntemleri**

Bu yöntemde kaplama malzemesi termal bir ısı kaynađı ile buhar haline getirilmektedir. Buharlaşmanın řekline göre gruplara ayrılmaktadır:

- Rezistans ısıtıcı ve indüksiyon akımı ile buharlaştırma
- Elektron bombardımanı ile buharlaştırma
- Katodik ark yöntemi

#### **II.2.1.1. Rezistans Isıtıcı ve İndüksiyon Akımı Yöntemi**

Isı rezistansı ile indüksiyon akımı kullanılan bu iki farklı yöntem uygulanış olarak oldukça benzerdir. Isı rezistansı kullanılan yöntemde malzeme, etrafına rezistans teli sarılmış yüksek sıcaklığa dayanıklı bir pota içerisinde buharlaştırılmaktadır. İndüksiyon akımı ile yapılan buharlaştırmada ise su sođutmalı bakır tel sarılmış sıcaklığa dayanıklı potalara akım uygulanmaktadır. Bu iki yöntemde diđer tekniklere göre oldukça ucuzdur. Fakat geometrik faktörlerden dolayı büyük çapta üretimler yapılamamaktadır. Bu yöntemler ancak düşük ergime sıcaklığına sahip malzemeler için iyi sonuçlar vermektedir. Riskli yanı ise yüksek sıcaklıklarda potanın da buharlaşp üretilecek filmin özelliklerini bozabilecek olmasıdır.

#### **II.2.1.2. Elektron Bombardımanı Yöntemi**

Elektron bombardımanı yönteminde malzeme, bir elektron kaynađı tarafından elektron bombardımanına tutularak buharlaştırılmaktadır. Elektronlar istenilen yere kolayca gönderilebilmektedir. Bu yüzden yüzeyden homojen buharlaştırma yapmak

mümkündür. 3500 °C'ye kadar ergime sıcaklığına sahip malzemeler dahi bu yöntemle rahatça buharlaştırılabilirler. Elektronlar, elektron tabancası içindeki akım geçirilen filaman telin ısınması sonucu yayılırlar. Yönlendirilmeleri ise manyetik alan yardımıyla sağlanır.

### **II.2.1.3. Katodik Ark Yöntemi**

Bu yöntemde buharlaştırılacak malzeme katot görevindedir. Katot ile vakum çemberinin duvarları arasına düşük voltaj (20 - 300 V) ve yüksek akım (100 – 200 A) özelliğine sahip bir potansiyel uygulanmaktadır. Kısa devre yapılarak anot ile katot arasında akım geçişi sağlanır. Katot yüzeyinde ark izleri oluşmaya başlar. Bununla birlikte, katodun önünde yüksek elektron akışı ile buharlaşan atomların iyonizasyonu sağlanmaktadır. İyonizasyon sayesinde kaplanacak yüzeyde, istenmeyen damlacık oluşum süresi uzayacaktır.

Katodik arka oluşturulan, ark izinin boyutu birkaç mikrometreye ve bu bölgedeki sıcaklık 15000 °C gibi aşırı yüksek değerlere ulaşabilir. Katot üzerinden 10 km/s gibi inanılmaz bir hızla buharlaştırma yapılabilir. Ark izinin bulunduğu yerde daha sonra bir krater meydana gelir. Arkı, yüzey üzerinde hareket ettirmek için, elektromanyetik alandan yararlanır. Eğer ark, buharlaştırma işlemi sırasında buharlaştırma noktasında çok uzun süre kalırsa, makro partiküllerin veya droplet adı verilen büyük sıvı kütlelerinin yüzeyden kopmasına sebep olur. Böyle bir durumda, kaplamanın istenilen özellikleri kaybolur. Katodik ark yöntemi ile yapılan kaplamaların yüzeylerinde, droplet oluşumunu azaltmak için katotların arkasına kuvvetli mıknatıslar yerleştirilmektedir. Mıknatısların oluşturduğu manyetik alan, iyon gibi yüklü partiküllerin üzerinde etkili olurken, yüksüz makro partiküller üzerinde etkisi yoktur. Bu farklılık ile manyetik alan, sistemde iyonlar ile makro partiküller arasında filtre görevi görür. Manyetik alanın iyonlar üzerindeki etkisi, iyonların hızını artırır ve bununla orantılı olarak film biriktirme hızları da artarak, kaplama süresi kısalır. Kısalan kaplama süresi ile film yüzeyine düşen makro partikül sayısı da azalmaktadır.

### **II.2.2. Püskürtme Yöntemleri**

Bu yöntemde kaplama malzemesi pozitif iyonlarla bombardıman edilerek atomların yüzeyden kopması sağlanır. Saçılan atomlar kaplanacak tabaka yüzeyinde film tabakası oluştururlar. Püskürtme işlemlerinde en çok kullanılan yöntem *DC* püskürtme

yöntemidir. Bu yöntemde iki tane düzlem halinde elektrot vardır. Bu elektrotlardan birincisi soğuk katot, diğeri ise anottur. Katodun ön yüzeyi, hedef malzeme ile örtülmüştür. Kaplanacak tabaka ise anot üzerine yerleştirilir. Püskürtme çemberi, argon gazı ile doldurulmuştur. Argon gazının seçilme sebebi diğeri malzemelerle reaksiyona girmeyecek inert bir gaz olmasıdır. Argon iyonları, kaplanacak tabaka üzerinde ince bir film tabakası oluşturmak üzere hedef malzemeyi saçtırır. İyonun yüzeyden atom koparması için kütlelerin oldukça büyük olması gerekmektedir. Bu nedenle argonla yapılan işlemler diğeri gazlara göre çok daha verimli olmaktadır.

### **II.3. KİMYASAL BUHAR BİRİKTİRME YÖNTEMİ (CVD)**

Kapalı bir kap içinde ısıtılmış malzeme yüzeyinin, buhar halindeki taşıyıcı bir gazın kimyasal reaksiyonu sonucu oluşan katı bir malzeme ile kaplanması işlemine kimyasal buhar biriktirme (CVD) denilmektedir. Reaksiyon sonucu çıkan istenmeyen ürünler buhar olarak ortamdan uzaklaştırılır.

Yöntem temelde basıncı istenilen değerlere ayarlanmış bir ortamda kimyasal yöntemle buhar fazından katı kaplama malzemesi üretmeye dayanır. Kimyasal buhar biriktirme yöntemi ile metalik, elementer ve seramik kaplamalar üretilir. Bu yöntem kaplama yapmanın yanı sıra nikel ve titanyum gibi korozyona karşı dayanıklı malzemelerin üretiminde de kullanılmaktadır. Bu sebeple yöntem yeni malzemeler ve yeni kaplamalar elde etme olanağı sunmaktadır. Bu şekilde üretilen kaplamalar gelişmiş korozyon, termal şok direnci, nötron absorpsiyon ve elektriksel özellikleri sayesinde askerlik, bilim, mühendislik, havacılık ve elektronik sanayileri başta olmak üzere birçok alanda önem kazanmışlardır.

Kimyasal buhar biriktirme yönteminin en önemli avantajı kaplamanın kaplanan metali her tarafta homojen (*uniform*) olarak kaplaması, kaplanmayan yer kalmamasıdır. Ayrıca kaplama, kristal yapısı ve yönü gibi bazı kaplama parametreleri değiştirilerek kontrol altına alınabilir. Bazı yüksek ergime noktasına sahip elementler (tungsten, tantal, karbon gibi) sadece bu yöntem ile kaplanabilirler.

Kimyasal yöntemlerde yüzey tabakasının oluşumunda, atomlar kaplanacak malzeme içerisine nüfuz ettirilirken, tabaka sınır yüzeyinde bir difüzyon oluşumu görülür. Difüzyon, maddelerin çok yoğun ortamdan az yoğun ortama göçü anlamına gelmektedir. Fakat fizikokimyada ise moleküllerin kinetik enerjilerine bağlı olarak rastgele hareketlerine denmektedir. Bu yöntemde çöktürülen tabakanın kalınlığı,

genellikle 10 ile 30 µm arasındadır. Kaplama sıcaklığı, yapılan kaplamanın türüne de bağlı olmakla birlikte 900 °C ile 1100 °C arasında, işlem süresi ise oluşturulan tabakanın kalınlığına bağlı olarak 2 ile 4 saat arasında değişmektedir.

CVD yöntemi her geçen gün gelişmekte ve yeni oluşum metotlarını bünyesine dahil etmektedir. En yaygın kullanılan metotlar ise şunlardır:

- Atmosferik basınçlı kimyasal buhar biriktirme (APCVD: Atmospheric Pressure Chemical Vapour Deposition)
- Alçak basınçlı kimyasal buhar biriktirme (LPCVD: Low Pressure Chemical Vapour Deposition)
- Metal-organik kimyasal buhar biriktirme (MOCVD: Metal-Organic Chemical Vapour Deposition)
- Plazma destekli kimyasal buhar biriktirme (PACVD: Plasma Assisted Chemical Vapour Deposition)
- Lazer kimyasal buhar biriktirme (LCVD: Laser Chemical Vapour Deposition)
- Fotokimyasal buhar biriktirme (PCVD: Photochemical Vapour Deposition)
- Kimyasal buhar infiltrasyonu (CVI: Chemical Vapour Infiltration)

#### **II.4. CVD ve PVD ARASINDAKİ FARKLAR**

Kaplama tekniklerinin alışılmış yöntemlerden farklı olması, gün geçtikçe daha gelişmiş donanım ihtiyacı duyması ve üretilen kaplamaların ileri teknoloji nitelikli olması PVD ve CVD yöntemlerini ileri teknoloji malzeme üretim teknikleri arasına sokmaktadır. Özellikle düşük işlem sıcaklıklarda uygulanabilmesi ve geniş kaplama kalınlık aralıklarında kaplama elde edilebilmesi sebebiyle PVD yöntemi daha geniş kullanım alanları sunmaktadır.

Bu iki yöntem temelde benzerlikler içerseler de çeşitli farklılıklara sahiptirler. CVD yöntemi yüksek sıcaklıklara, reaksiyon zincirlerine ve vakum ortamına ihtiyaç duyarken, PVD yönteminde ise yüksek basınç ve düşük sıcaklık vardır. Bu sebeple ergime ısısı düşük maddeler bu yöntemle kaplanabilirler veya kaplama malzemesi olarak kullanılabilirler. CVD yöntemi ile kaplanan malzemeler kullanılan yüksek enerji nedeniyle PVD yöntemiyle kaplanana göre daha dayanıklıdır.

CVD yönteminde yüzeyde difüzyon vardır. Bu da homojen bir dağılıma sebep olur. Oysa PVD yönteminde parçacık çarptığı yere yapışıp kalır ve homojen bir dağılım oluşmayabilir. Bununla birlikte PVD yöntemi ile yapılan kaplamalarda yüzeyde oluşan boşluklar daha fazladır.

## BÖLÜM III

### MONTE CARLO SİMÜLASYON METODU

#### III.1. GİRİŞ

Gelişimi gün geçtikçe ivmelenerek devam eden bilim ve teknoloji, analitik çözümü zor pek çok problemi de yanında getirmektedir. Problemlerin yapısı gelişmekte olan bilim ve teknoloji ile birlikte daha karmaşık hale gelmekte, birbirine bağlı sistemlerin ve parametrelerin sayısı hızla artmaktadır.

Analitik yaklaşımların aksine simülasyon modelleri, karmaşık problemlerin modellenmesi ve çözümünde daha başarılı olurlar. Değişkenler arasındaki etkileşimi simülasyon modellerinde gözlemlemek daha kolaydır. [1]

Gerçek sistemlerden toplanan bilgiler, bilgisayarda geliştirilen modellere uygulanarak sayısal bir takım sonuçlara ulaşmak hedeflenir. Bunların değerlendirilmesi ve yorumlanması yapılarak sistem hakkında tahminlerde bulunulur. Simülasyon modelleri sayesinde çok karmaşık sistemler incelenebilir.

#### III.2. MONTE CARLO SİMÜLASYONU

Monte Carlo metodunu en genel olarak, simülasyonların yapılması için rastgele sayılardan faydalanılan bir yöntem olarak tanımlayabiliriz. Bu metot çok farklı alanlarda kullanılmaktadır. Fizikte olduğu kadar, kimya, matematik, biyoloji, tıp, mühendislik ve hatta sosyal bilimlerde çeşitli deneyler ve olaylarda Monte Carlo metodu ile taklit edilmektedir.

En yaygın uygulaması;

$$\int_0^1 \int_0^1 \dots \int_0^1 f(u_1, u_2, \dots, u_n) du_1 du_2 \dots du_n = \int_{(0,1)^n} f(\mathbf{u}) d\mathbf{u} \quad (\text{III.1})$$

şeklinde çok değişkenli  $f$  fonksiyonunun integre edilmesidir. Burada  $u$ 'lar değişkenleri temsil etmektedir. Böyle çok değişkenli karmaşık integrallerin analitik yollardan çözümü çok zor, kimilerinin ise neredeyse imkansızdır.

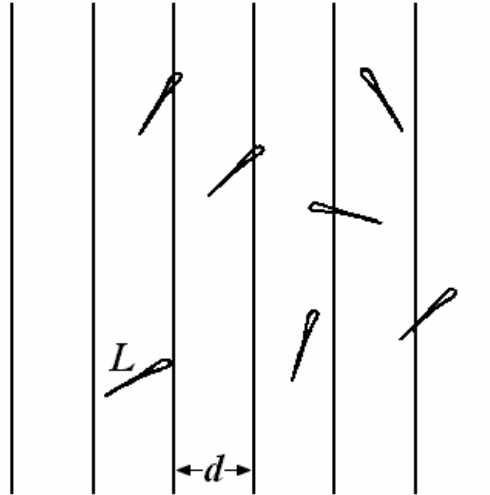
Bu metodun temel fikrinin tarihte ilk kez ‘‘Buffon’un İğne Problemi’’ ile ortaya çıktığı söylenir. 1777 yılında Georges Comte de Buffon’un incelediği problem şöyledir:

Buffon, yatay düzlemde  $d$  aralıklarla paralel doğrular çizmiş ve üzerine  $L$  boyundaki iğneyi gelişigüzel olarak bırakmıştır (Şekil III.1). İğnenin doğrulardan herhangi biri ile kesişme olasılığını analitik yollardan çözerek,

$$p = 2L/\pi d \quad (\text{III.2})$$

olarak hesaplamıştır. Burada  $p$ , kesişme olasılığıdır. [5,6,7]

Aynı deneyi  $N$  defa tekrarlayıp, iğnenin düzlemdeki doğrular ile kaç defa kesiştiğini sayabiliriz. Kesişme sayısına  $n$  dersek  $n/N$  oranının,  $p$  kesişme olasılığına yakın olduğunu bulabiliriz.  $N$  sayısı büyüdükçe, yani gelişigüzel olarak bırakmalarımızın sayısı arttıkça  $n/N$  oranının  $p$  ye yaklaştığı görülecektir. Georges Comte de Buffon’un bu deneyde fark ettiği olgu Monte Carlo metodunun oluşumuna ve 20. yüzyıl olasılık teorisine önemli katkı sağlamıştır.



Şekil III.1: Buffon’un iğne problemi

Monte Carlo metodu, Nicholas Constantine Metropolis tarafından bulunmuştur. Fakat yaygınlaşması ve gelişmesi farklı bilim adamları tarafından farklı deneyler sırasında olmuştur. Bu yöntem 1930’lardan sonra gelişmeye başlamış ve ilk kez Los Alamos Ulusal Laboratuvarı’nda nükleer silah geliştirme çalışmaları sırasında kullanılmıştır. Simülasyon kelimesinin modern anlamda kullanılışı ise 1940 yılı sonlarında John Von Neumann ve Stanislaw Ulam’ın nötron yayılımı problemlerinde kullandıkları bu tekniğe Monte Carlo simülasyonu adı vermeleri ile başlar. [8]

Simülasyon gerçeğin temsil edilmesi şeklinde tanımlanabilir. Simülasyonda, gerçek bir sistemin girdi ve çıktıları matematiksel olarak ifade edilip kurulan model üzerine taşınır. Sistemde değişiklik yapmadan modeldeki parametreler değiştirilerek araştırma ve deneyler yapılabilir. Bu sayede hem analitik işlemleri çok karışık, hem de deneysel işlemleri pahalı birçok problem başarı ile çözülebilir. Bunun ilk örneklerini, ilk atom bombası yapımı aşamasında görebiliriz. 2. Dünya Savaşı süresince Fermi ve seçkin bilim adamları, Los Alamos Ulusal Laboratuvarı'nda Monte Carlo metodunu kullanarak, nötron hareketlerini izlemek için *Fermiac* diye adlandırılan bir alet geliştirmişlerdir. [1]

1950 yılı başlarında sayısal bilgisayarların gelişimi ile simülasyon kelimesi de başka anlamlar kazanmıştır. Örneğin, Josep H. Mice simülasyonu, 'bir sistemin kendisi üzerinde doğrudan denemeler yapmak veya bu sistem ilgili bir problemin analitik çözümünü bulmak yerine sistemin modelini kurup denemelere girişme' anlamında kullanmıştır. [9]

Değişkenler arasındaki etkileşimi simülasyon modellerinde gözlemek daha kolaydır. Ancak yoğun bilgisayar kullanımını gerektirir. Gerçek sistemden toplanan bilgiler, bilgisayarda geliştirilen modellere uygulanarak sayısal birtakım sonuçlara ulaşmak hedeflenir. Bunların değerlendirilmesi ve yorumlanması yapılarak sistem performans ölçütlerine ait birtakım tahminlerde bulunulur. Simülasyon modelleri aracılığı ile en kötü durum senaryoları da incelenebilir. Simülasyon modeli, sadece matematik denklemlerine değil, denemelere dayanır ve model optimum sonuçlar ortaya çıkarmaz fakat simülasyon modelleri yardımı ile alternatif çözümler ortaya konarak, optimum sonuca en yakın çözüm seçilir. [9]

Sonuç olarak, Monte Carlo metotları, analitik yollarla çözülemeyen problemleri simülasyon yöntemiyle yaklaşık olarak çözmemize yarar. Özellikle çok zor bir problemi, analitik yollarla çözebilmek için aşırı basitleştirmek yerine Monte Carlo metotları ile yaklaşık olarak çözmek daha doğru olacaktır. Örnek olarak bir atom reaktörünün çevresine, dışarıya sızacak radyasyonu minimize etmek için yapılacak duvarın kalınlığının hesaplanması problemini düşünelim. Bu problemi analitik yollardan çözemeyiz. Problemin zorluğu reaktördeki nötronların kompleks hareketlerinden kaynaklanmaktadır. Oysa Monte Carlo metotları ile problemi nötronların hareketlerini basitleştirmeye gerek olmadan yaklaşık olarak çözebiliriz. Bu yaklaşık çözüm basitleştirilmiş analitik çözümden daha fazla, gerçeğe yakın sonuçlar verir. Bu problem gibi çok zor problemlerde, Monte Carlo metotları kullanabileceğimiz tek tekniktir. [10]

### III.3. MONTE CARLO UYGULAMALARI

Monte Carlo simülasyon metodu çok farklı alanlarda kullanılmaktadır. Fizik, kimya, matematik, biyoloji, tıp, mühendislik ve hatta sosyal bilimlerde çeşitli modellemeleri yaparken bu yöntemle başvurulur. Bu yüzden simülasyonun uygulama alanları oldukça geniştir. Bu alanları şu şekilde sıralayabiliriz:

- Üretim sistemlerinin tasarım ve analizi
- Montaj hattı dengeleme
- İşgücü planlaması
- Malzeme taşıma sistemleri
- Yeni askeri silah ve sistem taktiklerinin saptanması
- Bir envanter sistemindeki sipariş planlarının incelenmesi
- İletişim sistemlerinin ve bunlar için gerekli mesaj protokollerinin tasarımı
- Otoyollar, havaalanları, metrolar ve limanların tasarım ve işletimi
- Ambulans bulundurma noktalarının ve araç sayılarının saptanması
- Yangın söndürme istasyonlarının yerlerinin ve buralarda bulundurulması gerekli minimum araç sayılarının saptanması
- Finansal veya ekonomik sistemlerin analizi
- Dağıtım kanallarının tasarımı
- Bir bilgisayar sisteminin donanım ve yazılım gereksinimlerinin belirlenmesi
- İşletme yöneticilerinin eğitilmesi (işletme oyunları/firma benzetimi)
- Alınacak riskleri minimize etmek için uzay uçuşları denemeleri

Monte Carlo metodunun fizikteki uygulamaları ise şunlardır:

- Radyasyon taşıma
- Nükleer hassasiyet
- Nükleer reaktör ve silahların tasarımı
- Faz geçişleri
- Atomik dalga fonksiyonları ve özdeğerleri
- Uzun zincir sarımlı polimerler
- Kısmi diferansiyel eşitlikler
- Sayısal integrasyon
- İstatistiksel fizik ve istatistiksel testlerin gelişimi

- Kombinasyonel problemler
- Sinyal algılama
- İnce filmlerin büyütülmesi
- Hücre yoğunluğu çalışmaları

#### **III.4. SİMÜLASYONUN AVANTAJLARI VE DEZAVANTAJLARI**

Simülasyonun avantajları şunlardır:

- Simülasyon esnek bir çözüm yöntemidir.
- Diğer modellere kıyasla anlaşılması daha kolaydır.
- Aşamalı olarak uygulayabilme imkanı vardır.
- Klasik çözüm yöntemlerinin kullanılmadığı büyük karmaşık problemlerin çözümünde oldukça etkilidir.
- Bir başka yöntemde incelenmesi olanaksız olan koşullar ve kısıtlar simülasyon ile rahatça modellenebilir.
- Sonuçları ancak aylar, yıllar sonra alınabilecek durumlarda simülasyon ile çok kısa sürede analiz edilebilir.
- Simülasyon, modellenen sistemi değiştirmeden yeni fikir ve politikaların model üzerinde rahatça uygulamasına olanak verir.
- Kullanıcı simülasyonu istenen zamanda durdurup yeniden başlatabildiğinden deney koşullar üzerinde tam bir kontrole sahiptir.

Simülasyonun dezavantajları ise şunlardır:

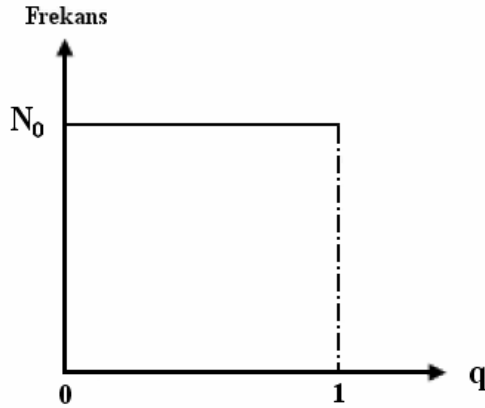
- İyi bir simülasyon modelini geliştirmek vakit alıcı ve pahalıdır.
- Optimum çözüm üretme garantisi yoktur. Bir çeşit deneme-yanılma yöntemidir.
- Modellemede ve verilerin analizinde yapılacak hatalar, yanlış sonuçlara yol açabilir.
- Her simülasyon modeli kendine özgüdür.
- Uygulamasındaki kolaylıklar nedeniyle analitik çözümlerin göz ardı edilmesine neden olabilir.

### III.5. MONTE CARLO METODUNUN MATEMATİKSEL ANALİZİ

Monte Carlo metodunda sayısal olarak bir deneyi veya olayı taklit etmek için temel araç 0 ile 1 arasında değerler alan sayıları kullanmaktır. Bu sayıları  $q$  ile gösterelim. Bu sayılar bir bilgisayar programı ile türetilir. Belli bir ölçü veya deneyde bulunabilecek değerler kümesi bir gelişigüzel sayı kümesi oluşturur. Gelişigüzel sayılar kümesinde herhangi bir sayının gelme olasılığı ötekilerden farklı olabilir. Olasılıklar aynı ise böyle bir kümeye düzgün dağılımlı *gelişigüzel sayılar (random numbers)* kümesi denir. [11]

Gelişigüzel sayılar her bir rakamı aynı olasılıkla seçilmiş ve birbirinden bağımsız sayılardan oluşmuş bir kümenin elemanlarıdır. Monte Carlo metodunda çok sayıda gelişigüzel sayı gerektiğinden bu sayılar bilgisayarda üretilir. Bilgisayarda tümüyle belirli bir yönteme göre ardı ardına oluşturulan bu sayılar gerçekte gelişigüzel olmamakla birlikte gelişigüzel sayıların istatistiksel özelliklerini içerirler. Bu formülden elde edilen gelişigüzel sayı dizisine, *sözde gelişigüzel sayılar* denir.

Şekil III.2’de  $q$  gelişigüzel sayılara karşın, bu sayıların  $N(q)$ , sıklık (frekans) dağılımı görülmektedir. Bu dağılımın bu kadar keskin olabilmesi için çok fazla sayıda gelişigüzel sayı seçmek gerekmektedir.



Şekil III.2: Gelişigüzel sayıların frekansa bağlı grafiği

Gelişigüzel sayılar ‘*Mixed congruential method*’ formülünden elde edilebilir.

$$P_i = \text{tamsayı} \cdot (ax_i / br_i) \quad (\text{III.3})$$

$$x_{i+1} = ax_i - br_i \quad (\text{III.4})$$

$$q_i = x_{i+1}/b \quad (\text{III.5})$$

Bu yöntemin algoritması;

$$x_i = ax_{i-1} \pmod{m} \quad (\text{III.6})$$

matematiksel bağıntısı ile gösterilebilir. Burada  $x_i$ , pozitif tam sayı dizisidir ve başlangıç değeri  $x_0$ 'dır.  $a$  ve  $b$  ise pozitif birer tam sayıdır. Bu sayılardan daha büyük başka bir pozitif tamsayı ise  $m$ 'dir.  $x_i$  pozitif tamsayılar dizisi,  $x_{i-1}a$  ile çarpılıp çıkan sayının  $m$ 'ye göre modu hesaplanarak elde edilir. [1, 12]

$$x_i = (ax_{i-1} + c) \pmod{m} \quad (\text{III.7})$$

'Mixed congruential method' adı verilen yöntemde başlangıç değeri olarak  $x$  pozitif bir tamsayı alınır. Üretilen sayı dizisinin her sayısı  $m$ 'ye bölünerek 0 ile 1 aralığındaki sayılardan yeni bir dizi elde edilir.  $a$  ve  $c$  iki tam sayı  $m$  ise bu sayıların ikisinden de büyük bir tamsayıdır.  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $m$  ve  $x_0$ 'ın farklı değerleriyle üretilen diziler gelişigüze ve bir  $x_i$  dizisi,  $x_0$ ,  $a$ ,  $c$ ,  $m$  ile tümüyle belirlenir. Dizinin en çok  $m$  adet farklı sayıdan oluştuğu ve sonuçta kendisini tekrarlayacağı periyot,  $m$ ,  $a$  ve  $c$ 'nin uygun değerleri seçilerek mümkün olduğunca büyütülebilir.

$a \leq x \leq b$  aralığında, her bir  $x$  sonucunun ortaya çıkma olasılığı,  $f(x)$  sıklık fonksiyonu ile belirlenen bir olayı taklit etmek isteyelim. Olayda sonucun  $x$  ile  $x+dx$  arasında bir değer alma olasılığı,

$$P(x)dx = \frac{f(x)dx}{\int_b f(x)dx} \quad (\text{III.8})$$

şeklindedir ve  $P(x)$  fonksiyonuna *olasılık yoğunluk fonksiyonu* denir.  $Q(x)$  ise *toplam olasılık yoğunluk fonksiyonu* olmak üzere,

$$Q(x) = \int p(x)dx \quad (\text{III.9})$$

şeklinde tanımlanır.

$a \leq x \leq b$  aralığındaki her  $x$  değerine karşılık  $Q(x)$  fonksiyonu 0 ile aralığında gelişigüzel değerler alır.  $Q(x)$  değerlerinin ortaya çıkma sayısı yani sıklık fonksiyonu düzgün bir dağılım gösterir. O halde  $P(x)$ 'i  $T$ 'ye eşitleyebiliriz.

$$T = Q(x) \quad (\text{III.10})$$

III.8, III.9 ve III.10 denklemlerini kullanarak *Temel Monte Carlo İlkesi*'ne ulaşabiliriz.

$$T = \frac{\int_a^x f(x')dx'}{\int_a^b f(x)dx} \quad (\text{III.11})$$

Denklem III.11 *Temel Monte Carlo İlkesi* olarak bilinir.

## III.6. MONTE CARLO METODUNUN ÖRNEKLENMESİ

### III.6.1. Pi Sayısının Hesaplanması

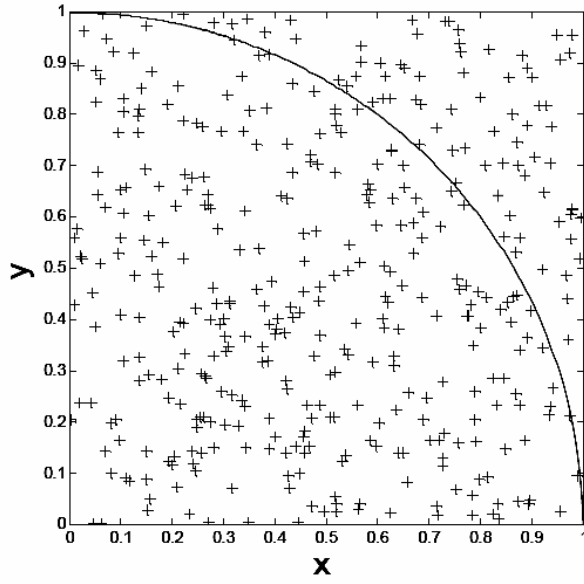
Monte Carlo integrali (III.1), karesel bir alan içinde kalacak şekilde tekdüze (uniform) dağılımdan elde edilen gelişigüzel noktalardan dairesel bir bölgeye düşen noktaları sayma işlemine adapte edilirse aşağıdaki bağıntıları elde edilir:

$$f(x, y) = 1 \quad (\text{III.12})$$

$$g(x, y) = \begin{cases} 1 & x^2 + y^2 \leq 1, \\ 0 & x^2 + y^2 > 1 \end{cases} \quad (\text{III.13})$$

$$\frac{\pi}{4} = \int_0^1 \int_0^1 g(x, y) f(x, y) dx dy \quad (\text{III.14})$$

$f(x, y)$  fonksiyonu karesel bölgenin her yerinde 1'e eşittir. Fakat  $g(x, y)$  fonksiyonu çemberin içinde 1'e eşit, çemberin dışı ile karesel bölgenin sınırladığı alan içinde 0'a eşittir. Daha açık bir ifadeyle ve Şekil III.3 ile gösterecek olursak denklem III.15 ve III.16 elde edilir. Burada  $N$  toplam gelişigüzel nokta sayısıdır. [13]



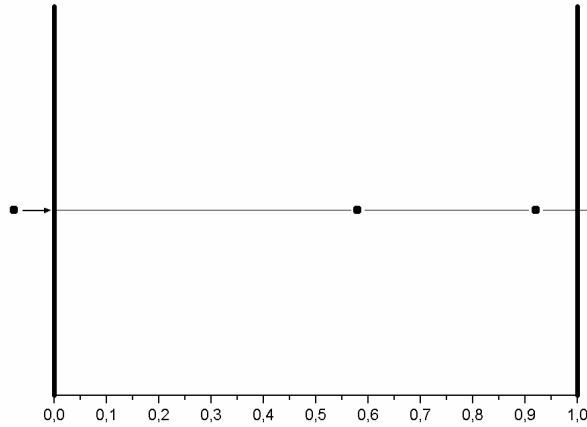
**Şekil III.3:** Gelişigüzel noktaların çeyrek dairesel bölgeye dağılımı

$$\bar{G}_N = \frac{1}{N} \sum_i g(X_i, Y_i) = \frac{\pi}{4} \quad (\text{III.15})$$

$$\frac{\pi}{4} = \frac{\text{Çemberin içindeki nokta sayısı}}{\text{Karenin içindeki nokta sayısı}} \quad (\text{III.16})$$

### III.6.2. Bir Nötronun Birim Uzunluktaki Madde İçinde Hareketi

Bir nötronun ortalama kaç harekette, ele alınan herhangi bir maddenin dışına çıkacağı Monte Carlo metodu ile hesaplanmaya çalışılırsa bir gelişigüzel sayı kaynağına (*random numbers generator*) ihtiyaç vardır.



**Şekil III.4:** Nötronun madde içinde hareketi

Burada üretilen 0 ile 1 arasındaki gelişigüzel sayılar, nötronun hareketlerini simüle etmek için kullanılacaktır. Bunun için, 1 birim uzunluğundaki maddeye nükleer bir kaynaktan nötron Şekil III.4'teki gibi sol yüzeyden girsin. Nötronun sadece ileri (soldan sağa doğru) hareket ettiğini varsayalım. Nötron bir harekette 0 ile 1 arasında değişen gelişigüzel bir sayı kadar mesafe gidecektir.

Üretilen üç gelişigüzel sayı;  $u_1 = 0,58$ ,  $u_2 = 0,34$ ,  $u_3 = 0,57$  olsun. Eğer nötronu simüle etmek için bu sayılar kullanılıyorsa, nötron birinci harekette 0,58 birim mesafe, ikinci harekette 0,34 birim mesafe gidecektir. Yani iki hareketin sonunda nötron toplam  $0,58+0,34=0,92$  birim mesafe gitmiş olacaktır. Maddenin kalınlığı 1 birim olduğu için nötron henüz maddenin dışına çıkmış değildir. Dolayısıyla nötronun bir hareket daha yapması gerekmektedir. Üçüncü harekette aldığı mesafe, üçüncü gelişigüzel sayı olan 0,57 olduğu için, bu hareketin sonunda toplam gidilen mesafe  $0,58+0,34+0,57 = 1,49$  olacaktır.  $1,49 > 1$  olduğundan üçüncü hareketin sonunda nötron maddeyi terk edecektir. Bunun gibi  $N$  tane nötron, gelişigüzel sayılar kullanarak simüle edilebilir. Bu çok kez tekrarlandığında, nötronun maddenin dışına çıkması için  $e$  defa hareket etmesi gerektiği bulunur. ( $e \approx 2,71828$ )

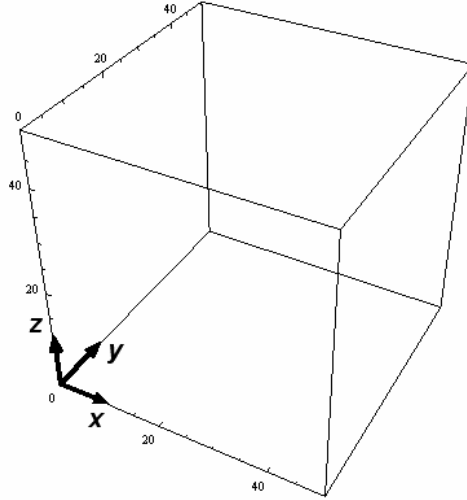
## BÖLÜM IV

### TEZ ÇALIŞMALARI

#### IV.1. GİRİŞ

Tez çalışmamızda, kristal yapılu ince film oluşumu Monte Carlo metodu yardımıyla simüle edilmiştir. Bu simülasyonda programlama yapabilmek için *FORTRAN*, verileri analiz için ise sıklıkla *MATHEMATICA*, *ORIGIN* ve *3D CANVAS* programları kullanılmıştır.

Modelleme işlemi için  $50 \times 50 \times 50$  boyutunda ‘kutu’ olarak adlandırılan bir hacim ele alınmıştır (Şekil IV.1). Belirtilen hacimde, ince film oluşumu sırasındaki parçacık dağılımı Monte Carlo simülasyon metodu ile taklit edilerek incelenmiştir.



Şekil IV.1: Simülasyonun oluşturulacağı hacim

Bu kutu boyutlar  $1 \times 1 \times 1$  olan birim hücrelere bölünmüştür. Parçacıkların yerleşebilmesi için her  $z$  seviyesinde 2500 adet ve toplamda 125000 adet boşluğa sahip olan kutu boyutları ise simülasyonun her aşamasında sabit tutulmuştur. Sadece sisteme sıcaklık, moleküller arası etkileşim, yüzey gerilimi gibi çeşitli fiziksel parametreler eklendiğinde, sistemin doğru çalışıp çalışmadığını kontrol edebilmek için kutunun

boyutları bazen büyütölüp küçültölümüştür. İlk olarak kutu içine, parçacıklar gelişigüzel olarak ve her boşluğa sadece bir parçacık gelebilecek şekilde dağıtılmıştır. Ardından sisteme çeşitli parametreler kademeli olarak eklenerek; bu parametrelerin etkileri ve bu parametreler doğrultusunda parçacık hareketleri gözlemlenmiştir.

Sistemi temsil edecek olan program oldukça modüler olarak yazılmıştır. Bu sebeple sistemin boyutları, parçacık ve Monte Carlo adımı sayısı gibi sayısal değerlerin yanı sıra sisteme etkileyen parametrelerin büyüklükleri de kolayca değiştirilebilmektedir. Fakat sisteme etkileyen parametrelerin tayini ve bunların *FORTRAN* programlama dilinde yazımı oldukça uzun çalışma zamanları almıştır. Sisteme eklenen bir parametrenin doğru çalışıp çalışmadığı, Monte Carlo metodu gereği deneme yanılma yöntemi ve gözlemlerden elde edilen sonuçlar ile kontrol edilmiştir.

#### **IV.2. PARÇACIKLARIN GELİŞİGÜZEL DAĞILIMI**

İlk çalışmada  $50 \times 50 \times 50$  boyutundaki kutunun içine 500 parçacığı gelişigüzel olarak yerleştirecek olan program *FORTRAN* programlama dilinde yazılmıştır. Bunun için her bir parçacık tek tek numaralandırılmış ve her parçacığın  $x$ ,  $y$ ,  $z$  koordinatlarını çıktı olarak veren program oluşturulmuştur.

Kutunun ölçüleri  $LX$ ,  $LY$  ve  $LZ$  olarak tanımlanmıştır. Her bir boyutun 50 eşit parçaya bölündüğü varsayılmıştır. Bu durumda kutu içinde, her  $z$  seviyesine 2500 parçacık olmak üzere maksimum 125000 parçacığın yerleşebileceği kadar boşluk bulunmaktadır. Dağılım, her boşluğa sadece bir parçacık yerleşecek şekilde olmalıdır.

Parçacıkların koordinatlarının tayininde bilgisayarın belirlediği 0 ile 1 arası değerler alan gelişigüzel sayılardan (*random numbers*) yararlanılmıştır. İlk olarak her bir parçacığı tek tek çağırarak bir döngü oluşturulmuştur. Bir parçacık çağırıldığında aynı anda çağrılan  $A$  gelişigüzel sayısı ile  $LX=50$  değeri çarpılarak parçacığın  $x$ , ardından çağrılan farklı bir  $A$  gelişigüzel sayısı ile  $LY=50$  değeri çarpılarak parçacığın  $y$  ve en son da tekrar çağrılan farklı bir  $A$  gelişigüzel sayısı ile  $LZ=50$  değeri çarpılarak parçacığın  $z$  koordinatı belirlenmiştir. Buradaki çarpma işlemi sonunda konum değerlerinin tam sayı olarak çıkması için programda konum değerleri tamsayı (*integer*) olarak tanımlanmıştır. Bu durumda bilgisayar çarpım sonucunun tam sayı kısmını konum değeri olarak belirlemiştir. Parçacık numaralarının  $IN$  olarak adlandırıldığı bu programda, konum değerleri de  $IX$ ,  $IY$ ,  $IZ$  olarak belirtilmiştir.

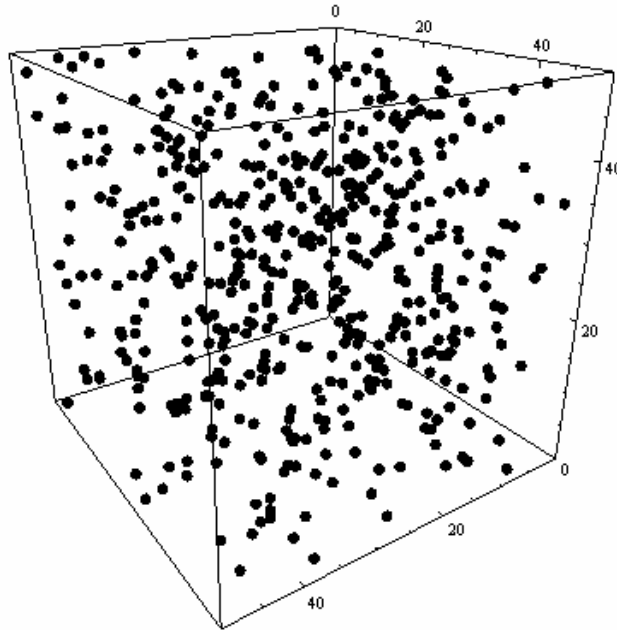
Bu durumda  $IN$  ( $IX$ ,  $IY$ ,  $IZ$ ) ifadesi parçacığın numarasını ve konumunu belirten ifadedir. Örneğin,  $IN(46,44,25)=326$  ifadesi; 326 numaralı parçacığın  $x$  koordinatı 46,  $y$  koordinatı 44,  $z$  koordinatı 25 demektir.

Programın tamamı açıklamalarıyla birlikte Ek 1’de verilmiştir. Birkaç dağılım ise Tablo IV.1’de gösterilmiştir.

**Tablo IV.1:** Bazı parçacıkların koordinatları

Parçacığın numarası	X konumu (IX)	Y konumu (IY)	Z konumu (IZ)
1	0	4	30
2	44	48	9
3	25	19	13
4	37	4	28
5	29	40	29
.	.	.	.
.	.	.	.
.	.	.	.
496	25	17	41
497	20	37	30
498	38	18	44
499	46	44	25
500	40	25	49

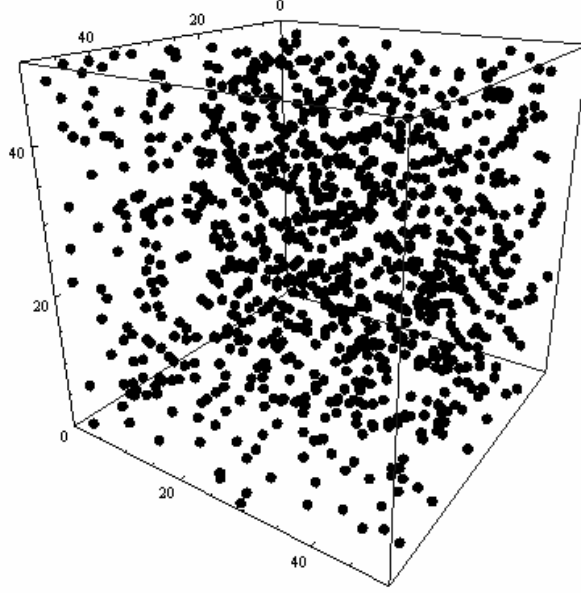
Program çıktıları 3 boyutta görülmek istenirse, dağılım Şekil IV.2’deki gibidir.



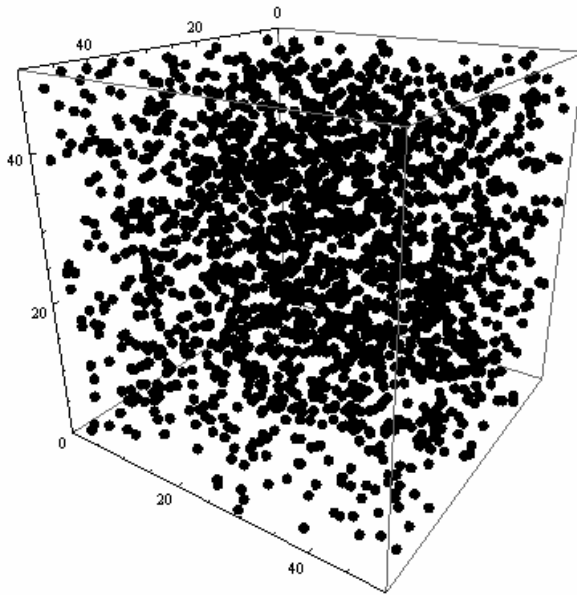
**Şekil IV.2:** 500 parçacığın kutu içine gelişigüzel dağılımı

Şekil IV.2’de görüldüğü gibi dağılım tamamen gelişigüzeledir. Parçacıkların gaz molekülü oldukları düşünülürse, henüz sisteme herhangi bir fiziksel parametre eklediğimizden, parçacık dağılımı ideal gaz denkleminde uymaktadır.

Aynı sonucu 1000 (Şekil IV.3) ve 2000 parçacık (Şekil IV.4) içinde görmek mümkündür.



Şekil IV.3: 1000 parçacığın kutu içine gelişigüzel dağılımı



Şekil IV.4: 2000 parçacığın kutu içine gelişigüzel dağılımı

### IV.3. PARÇACIKLARIN GELİŞİGÜZEL HAREKETİ

Gelişigüzel dağılımdan sonraki adım ise parçacıkları hareket ettirmektir. Bu aşamada Monte Carlo simülasyon metodu ile çalışılmaya başlanmıştır. Tez çalışmamızdaki modelin ana hatları da bu aşamada oluşmuştur.

Monte Carlo simülasyon metoduna göre, parçacıklar hareket etmek için yazılan programın bir döngüsünde sadece *bir adım* atabileceklerdir. Burada *bir adım*, parçacığın komşusu olan 6 boşluktan herhangi birini seçip ona geçmesidir. Bu adımın hangi koordinat ve hangi yönde olacağı ise gelişigüzel sayılar aracılığı ile belirlenecektir. Bütün parçacıklar sırayla *bir adım* attığında ise *bir Monte Carlo adımı* gerçekleşmiş olacaktır. İkinci adıma geçildiğinde program parçacığın birinci adım sonundaki konum değerlerini kullanacaktır. Bu ardı ardına bu şekilde devam edecektir. Monte Carlo adımı sayısını bir döngü kurarak belirlenebilir ve artırıp azaltılabilir.

Hareketin nasıl olacağını anlamak için  $IN=1$  numaralı parçacığı ele alalım. Gelişigüzel dağılım sonunda parçacığın konumu  $(IX, IY, IZ)=(0, 4, 30)$  şeklindedir. Bu parçacığa sıra geldiğinde çağrılan  $A$  gelişigüzel sayısının değeri 0 ile 0,333 arasında ise  $x$ , 0,333 ile 0,666 arasında ise  $y$  ve 0,666 ile 1 arasında ise  $z$  koordinatında bir hareket gerçekleşecektir. Parçacığın hareket eksenini belirlendikten sonra tekrar bir gelişigüzel sayı çağrılarak hareketin yönü tayin edilecektir. Bunu yaparken de çağrılan  $A$  sayısı 0 ile 0,5 arasında ise artı, 0,5 ile 1 arasında ise eksi yön seçilecektir. Örneğin  $IN=1$  numaralı parçacığa sıra geldiğinde ilk gelişigüzel sayı 0,145 ise parçacık hareket eksenini olarak  $x$  eksenini belirleyecek ve ikinci gelişigüzel sayı 0,678 ise hareket yönü artı olacak ve  $x$  eksenine göre konumunu temsil eden  $IX$  değerini 1 arttıracaktır. Böylece parçacığın yeni koordinatı  $(IX, IY, IZ)=(1, 4, 30)$  olacak ve  $+x$  yönünde hareket yapılmış olacaktır. Döngü devam edeceğinden ardından  $IN=2$  numaralı parçacığa geçilecek, aynı işlemler bu parçacık için de yapıldıktan sonra sırayla bütün parçacıklar için yapılarak döngü tamamlanacaktır. Bu şekilde bir Monte Carlo adımı bittiğinde her bir parçacık gelişigüzel olarak komşusu olan boşluğa hareket etmiş olacaktır. Monte Carlo adımları için de bir döngü kurduğumuzda parçacıkların gelişigüzel hareketi sürekli olarak sağlanacaktır.

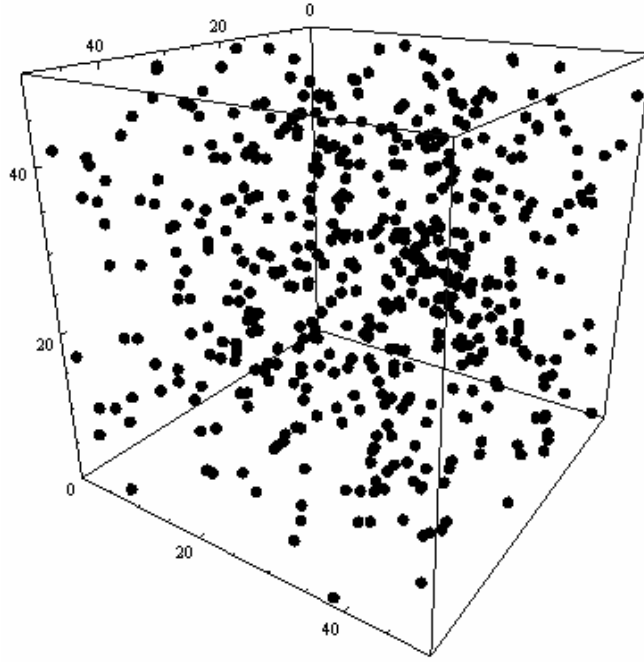
İlk oluşturulan, parçacıkları gelişigüzel dağıtan programa bazı eklemeler yapılarak parçacıkların hareketini sürekli olarak sağlayan program oluşturulmuştur. Bu aşamada modeli yapılacak sistemdeki parçacıkların hareketi sırasında nelerden etkilenebileceği ve bunların programa uygun hale getirilmesi deneme yanılma yoluyla yapılmıştır.

İlk olarak programa  $x$ ,  $y$  ve  $z$  yönünde hareketi temsil edecek olan 3 tane alt program eklenmiştir. Bu programların isimleri sırasıyla *MOVEX*, *MOVEY*, *MOVEZ* dir. Alt programlar bütün simülasyon çalışmaları boyunca belirtilen koordinattaki hareketten sorumlu olacaklardır. Sistemi temsil eden program, eklenen bu alt programlar sayesinde modüler olmuştur. Bu da modele yeni bir kısıtlama veya parametre eklediğimizde, programlama dilindeki yazımını oldukça kolaylaştırmıştır.

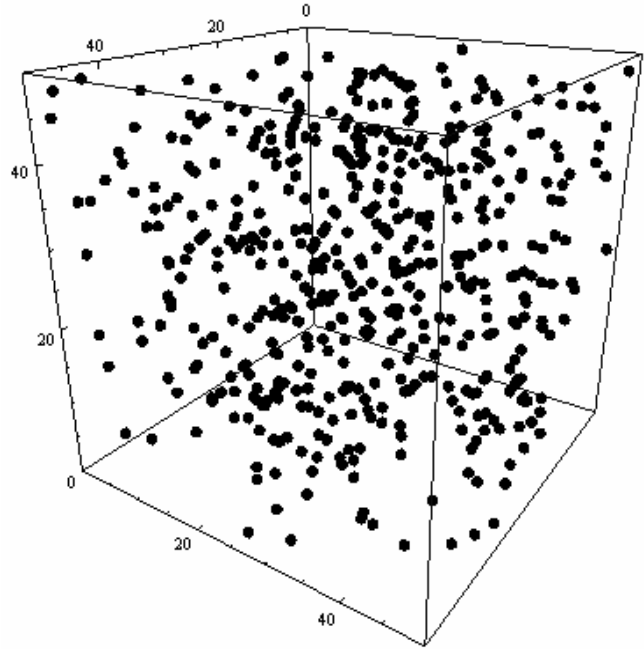
Parçacığın yapacağı hareketin koordinatı ana programda gelişigüzel sayılar vasıtasıyla tayin edilecektir. Daha sonra hangi koordinat seçilmişse onu temsil eden alt programa gidilip hareketin yönü belirlenecek ve parçacığın yeni konumu oluşturulacaktır. Fakat burada bazı kısıtlamalar devreye girecektir. Bunlardan birisi sınırlardır. Parçacıkların kutu dışına çıkması engellenmelidir. Bunun için 0 ile 49 arasında değer alan koordinatların 49 olduğunda artmasına ve 0 olduğunda da azalmasına izin verilmemiştir. Bu durumda modeldeki kutu artık kapalı bir hacim olarak görülebilir. Herhangi bir koordinatın sınırında bulunan parçacık gelişigüzel sayılardan dolayı bu sınırı aşma yönünde bir hareket yapmak isterse program buna izin vermeyecektir (sabit sınır koşulları) ve parçacık sahip olduğu konumu koruyacaktır. Diğer bir ifadeyle parçacık, o Monte Carlo adımında pas geçilecektir.

Diğer bir kısıtlama ise parçacıkların üst üste gelmesini engellemektir. Geliştirilen modele göre her boşlukta sadece bir parçacık bulunabilir. Herhangi bir parçacık komşusu olan parçacığın konumuna gitmek istediğinde, tanımlanan *komşuluk faktörü* devreye girecektir. Komşuluk faktörü  $ID(IX, IY, IZ)$  olarak tanımlanmıştır. Faktörün çalışma prensibi dolu olan hücelere 1, boş olanlara 0 değerini vererek bir sonraki Monte Carlo adımı için dolu ve boş olan hücreleri belirlemektir. Sonraki adıma geçildiğinde, parçacık hareketinin eksenini ve yönünü belirleyecek, fakat gideceği hücre dolu ise ( $ID=1$ ) parçacık konumunu koruyacak; hücre boş ise ( $ID=0$ ) hareket gerçekleşecektir. Komşuluk faktörünün doğru çalıştığı denenerak test edilmiş ve bütün alt programlara eklenmiştir. Programa eklenen bu iki kısıtlama ve Monte Carlo adımı tekniği ile parçacıkların kutu içindeki hareketi doğru olarak sağlanmıştır. Yazılan program Ek 2’de açıklamalı olarak verilmiştir.

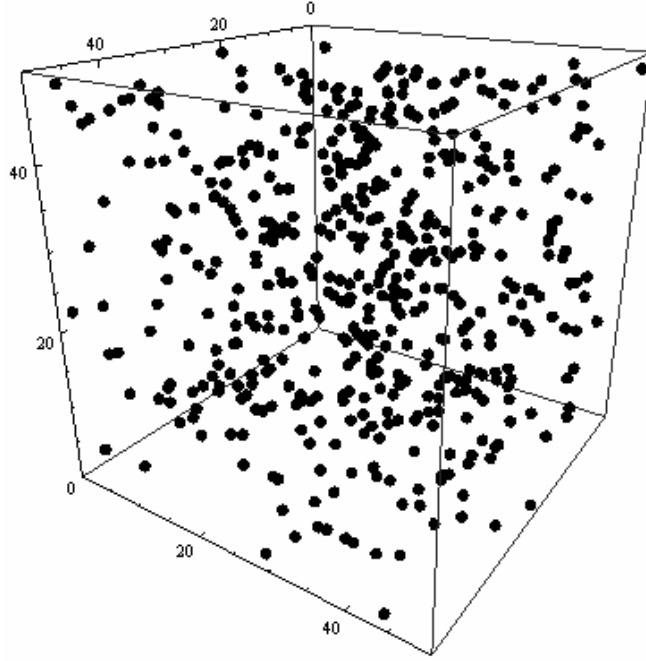
Parçacık sayısı 500 ve Monte Carlo adımı sayısı 1000 seçilip program çalıştırılmıştır. 200, 400, 600, 800 ve 1000. Monte Carlo adımında sistemdeki parçacık dağılımı üç boyutlu olarak, sırasıyla Şekil IV.5, Şekil IV.6, Şekil IV.7, Şekil IV.8 ve Şekil IV.9’da verilmiştir.



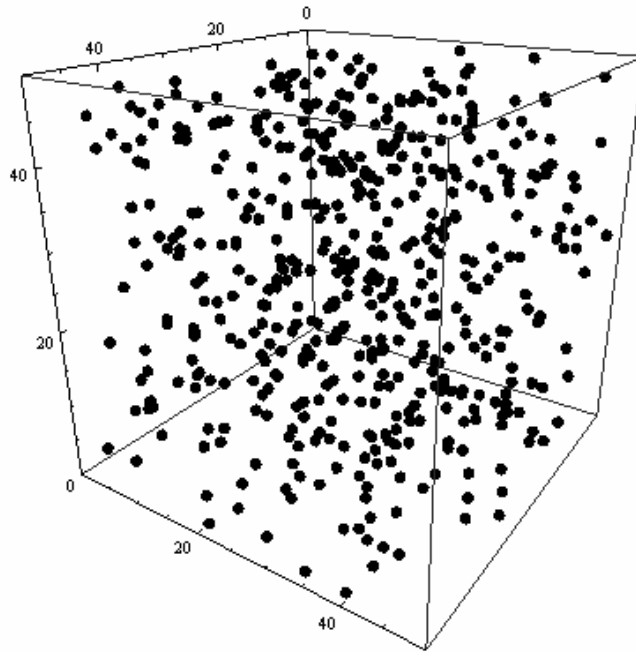
Şekil IV.5: 500 parçacığın 200. Monte Carlo adımıdaki dağılımı



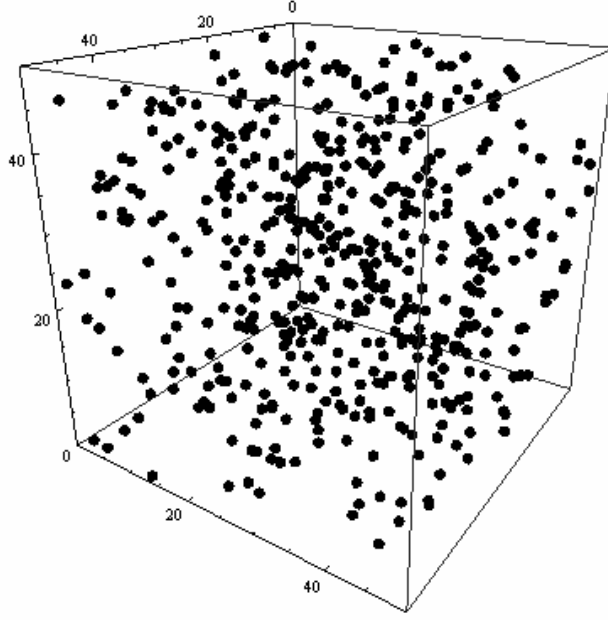
Şekil IV.6: 500 parçacığın 400. Monte Carlo adımıdaki dağılımı



Şekil IV.7: 500 parçacığın 600. Monte Carlo adımıdaki dağılımı



Şekil IV.8: 500 parçacığın 800. Monte Carlo adımıdaki dağılımı



**Şekil IV.9:** 500 parçacığın 1000. Monte Carlo adımındaki dağılımı

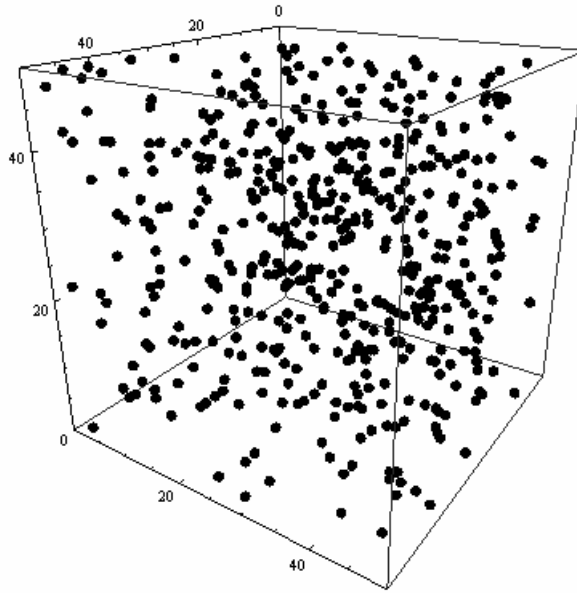
Şekillerde dağılımın gelişigüzel olduğu ve bir önceki aşamadaki 500 parçacığın ilk dağılımına benzediği görülmektedir. Daha sonra 1000, 2000, 5000 ve 10000 parçacık için, Monte Carlo adımı sayısı kademeli olarak 20000'e kadar çıkarılmış ve denemeler yapılmıştır. Elde edilen sonuçlar 500 parçacık için elde edilenlere benzerdir. Her hareket sonunda dağılım gelişigüzel ve oldukça homojendir. Modeldeki parçacıklar ideal bir gaz gibi davranmaktadır. Ayrıca parçacıkların aynı konumda yer alması (üst üste gelmesi) ve sınırların dışına çıkması söz konusu değildir. Bu durumda programın belirlenen sayıda parçacık ve Monte Carlo adımı için doğru çalıştığı söylenebilir.

#### **IV.4. PARÇACIKLARIN BELİRLENEN YÖNE HAREKETİ**

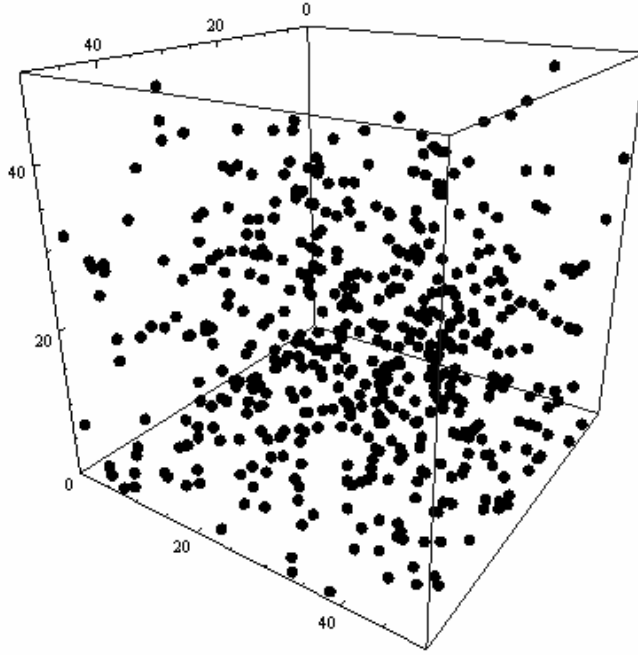
Parçacıkların gelişigüzel hareketinin sürekli olarak sağlandığı önceki çalışmada, sisteme dışarıdan bir faktör etki etmemektedir. Sadece parçacıkların birbiri üstüne gelmesi ve kutu dışına çıkması engellenmiştir. Bu aşamada ise parçacıklara dış bir etkenin (yerçekimi, elektrik alan, taşıyıcı gaz, manyetik alan vb.) etkidiği varsayılarak, parçacıkları istenilen yöne hareket ettirecek olan program yazılmıştır. Yazılan program modüler olduğundan eklenecek olan parametreler, ana programda bir değişiklik yapılmadan sadece hareketin olacağı alt programlarda (*MOVEX*, *MOVEY*, *MOVEZ*) değişiklikler yapılarak modele eklenmiştir.

Parçacığın hareket eksenini ( $x, y, z$ ) ana programda çağrılan gelişigüzel sayı ile tayin edilmektedir. Eksi veya artı yön olmak üzere yapılacak ikinci tercih ise alt programlar tarafından belirlenmektedir. Bir önceki aşamada dağılım gelişigüzel olduğundan, alt programlarda çağrılan  $A$  gelişigüzel sayısı 0,5 ten büyük ise artı küçük ise eksi yönde bir hareket yapılmaktadır. Baraj değer olan 0,5 sayısından dolayı eksi ve artı yönde hareket ihtimali %50 olarak belirlenmiş ve bu da dağılımın gelişigüzel ve homojen olmasını sağlamıştır. Bu durumda alt programdaki 0,5 sayısı değiştirilirse, gelişigüzel  $A$  sayısının bu sayıdan büyük veya küçük olma ihtimali de değişecektir. Örneğin, bu sayıyı 0,7 yaptığımızda, çağrılan gelişigüzel sayının 0,7'den büyük olma ihtimali, 0,5'ten büyük olma ihtimaline göre daha azalacaktır. Bu durumda parçacık %70 ihtimalle eksi yöne, %30 ihtimalle ise artı yöne gidecektir.

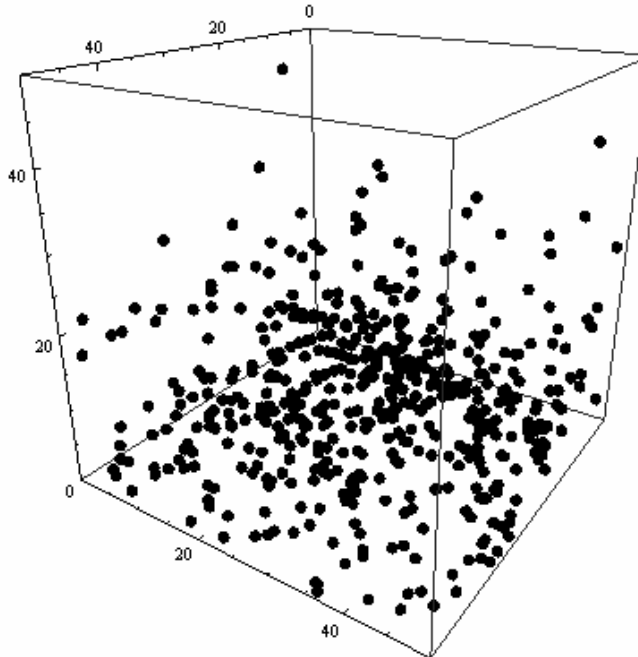
Bu işlem, parçacıkların yerçekimi, herhangi bir kuvvet, elektrik veya manyetik alan gibi bir etki ile zamanla  $-z$  yönünde bir hareket yaparak tabana çökeceği varsayılarak  $z$  eksenine uygulanmıştır. Ana programda bir değişiklik yapılmadan, sadece *MOVEZ* alt programı yapılan değişiklik ile bu sağlanmıştır. Bu alt program Ek 3'te verilmiştir. Parçacık sayısı 500, Monte Carlo adımı sayısı 1000 olarak seçilmiştir. Parçacıkların  $-z$  yönünde hareket etme ihtimalini ise %60 olarak belirlenmiştir. Parçacık dağılımı her 200 adımda veri olarak alınan konum değerleriyle çizilmiş ve şekillerde verilmiştir.



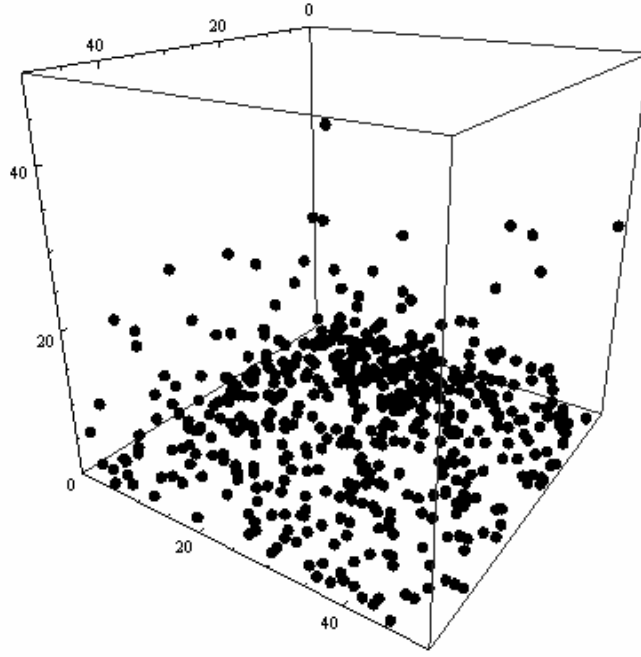
**Şekil IV.10:** %60 ihtimalle  $-z$  yönünde hareket eden 500 parçacığın ilk dağılımı



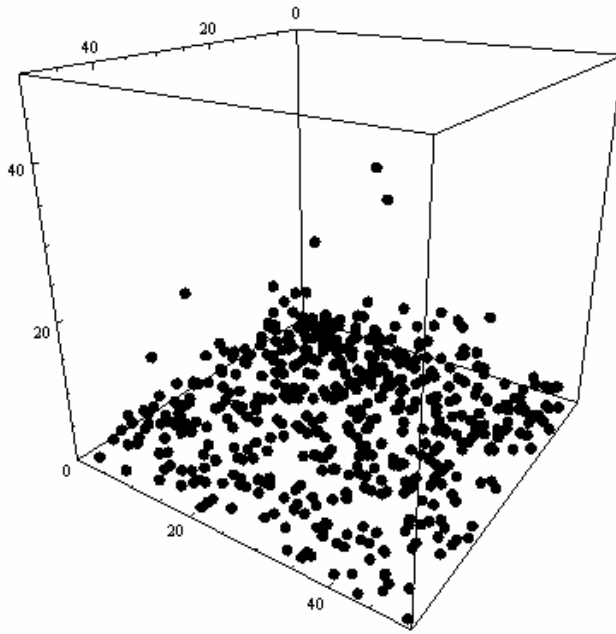
**Şekil IV.11:** %60 ihtimalle -z yönünde hareket eden 500 parçacığın 200. Monte Carlo adımındaki dağılımı



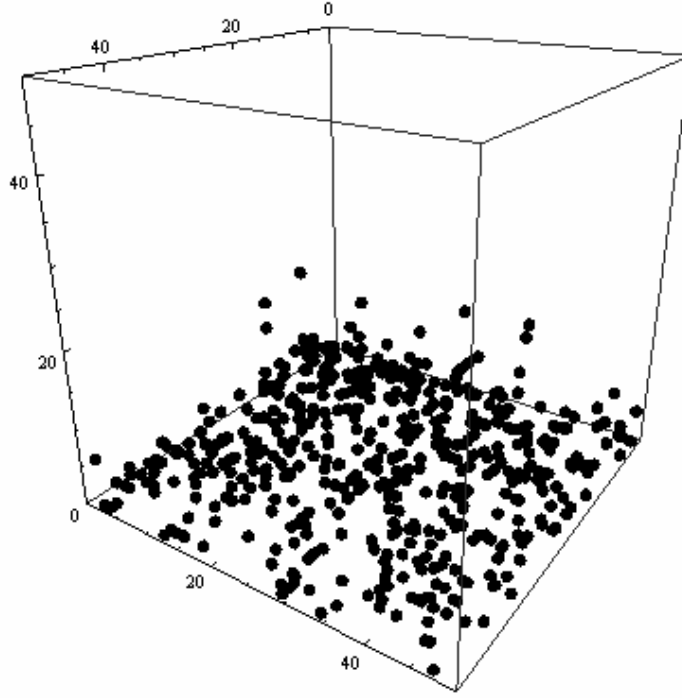
**Şekil IV.12:** %60 ihtimalle -z yönünde hareket eden 500 parçacığın 400. Monte Carlo adımındaki dağılımı



**Şekil IV.13:** %60 ihtimalle -z yönünde hareket eden 500 parçacığın 600. Monte Carlo adımındaki dağılımı



**Şekil IV.14:** %60 ihtimalle -z yönünde hareket eden 500 parçacığın 800. Monte Carlo adımındaki dağılımı



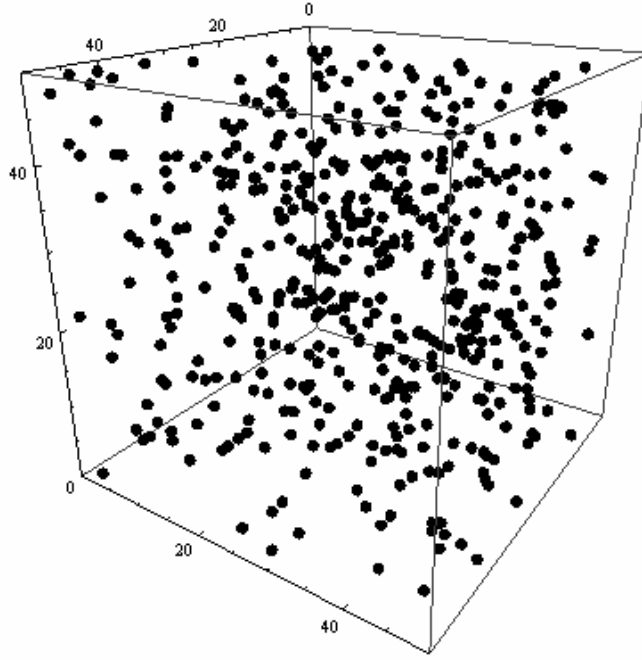
**Şekil IV.15:** %60 ihtimalle -z yönünde hareket eden 500 parçacığın 1000. Monte Carlo adımındaki dağılımı

Gözlemlediğimiz bu çökmeyi yerçekimi başta olmak üzere elektrik alan, manyetik alan veya basınç gibi fiziksel etkilerle özdeşleştirebiliriz.

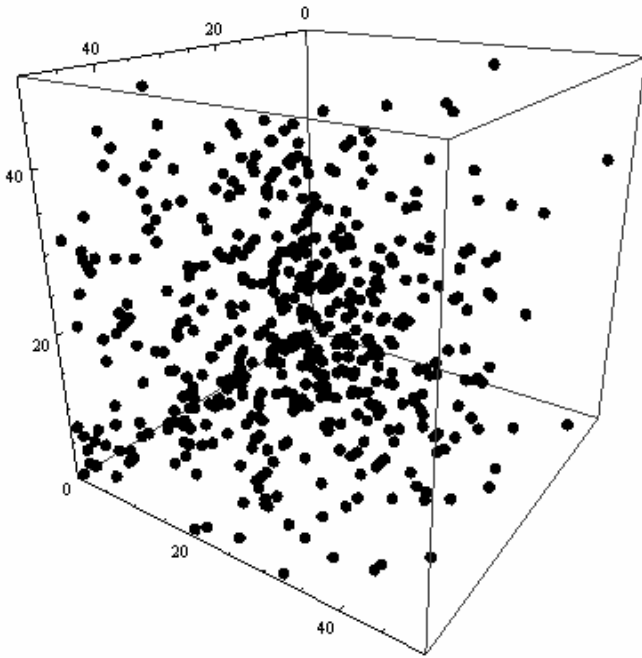
İnce film yapımında ise özellikle yüzey birikiminin bir etkiyle sağlandığı teknikler, bu modele benzemektedir. Fakat henüz model, yüzeydeki oluşumu tam olarak taklit edebilecek ölçüde değildir. Bunun için sonraki aşamalarda sıcaklık, yüzey gerilimi ve parçacıkların birbirine tutunması gibi parametreler eklenerek model daha gerçekçi hale getirilecektir.

-z yönünde simüle edilen hareketin ardından, parçacık ve Monte Carlo adımı sayısı ile hareketin yönünü tayin edecek alt programlardaki sayılar değiştirilerek birçok simülasyon yapılmıştır. Aşağıdaki şekillerde önce %60 ihtimalle aynı anda -y ve -z yönünde ardından %60 ihtimalle aynı anda -x, -y ve -z yönünde harekete zorlanan parçacıkların 200 adımda alınmış verileriyle çizilmiş dağılımları verilmiştir.

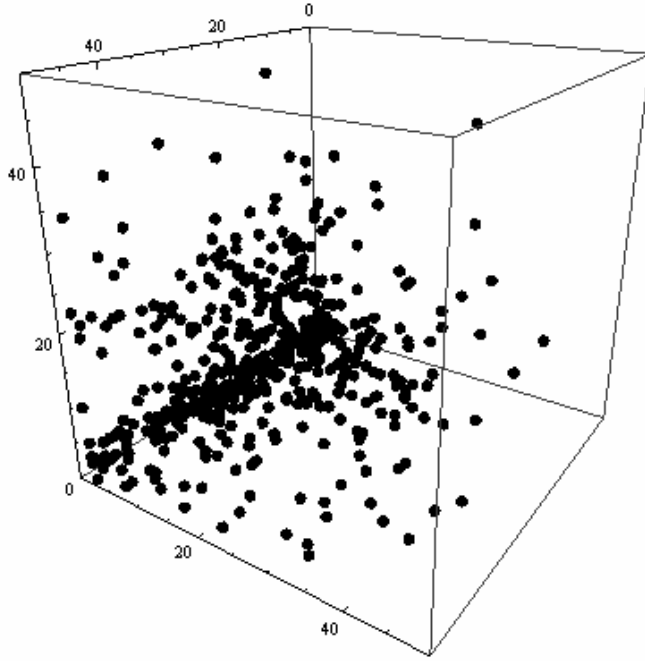
Dağılımlarda açıkça görülmektedir ki, farklı sayıda parçacık istenilen yöne ve istenilen ihtimalde kolaylıkla hareket ettirilebilmektedir. Bu bağlamda program ve model oldukça uyumlu ve doğru çalışmaktadır.



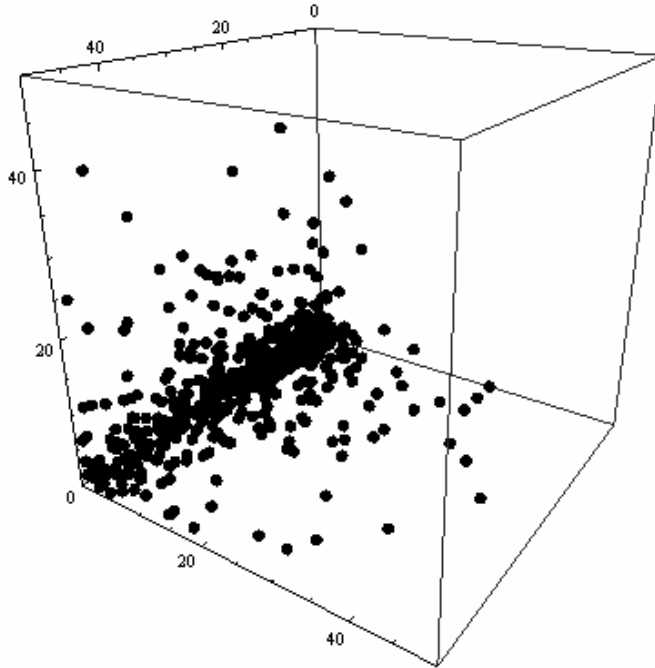
**Şekil IV.16:** %60 ihtimalle -y ve -z yönünde hareket eden 500 parçacığın ilk dağılımı



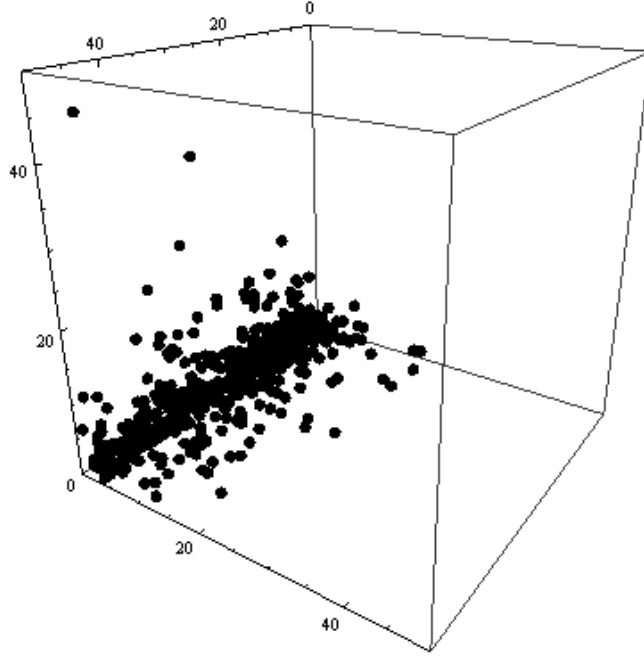
**Şekil IV.17:** %60 ihtimalle -y ve -z yönünde hareket eden 500 parçacığın 200. Monte Carlo adımındaki dağılımı



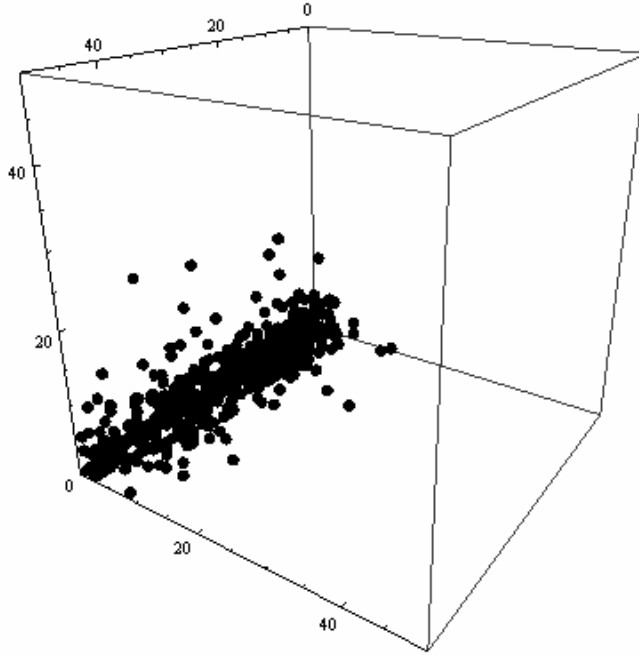
**Şekil IV.18:** %60 ihtimalle -y ve -z yönünde hareket eden 500 parçacığın 400. Monte Carlo adımındaki dağılımı



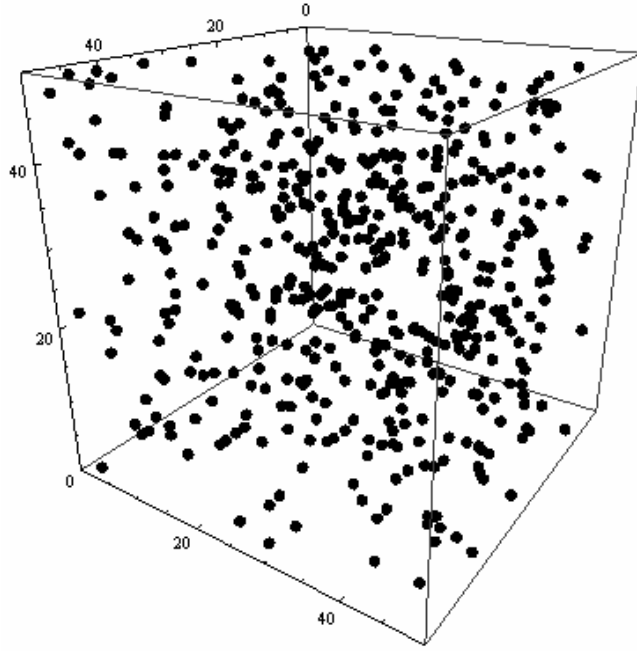
**Şekil IV.19:** %60 ihtimalle -y ve -z yönünde hareket eden 500 parçacığın 600. Monte Carlo adımındaki dağılımı



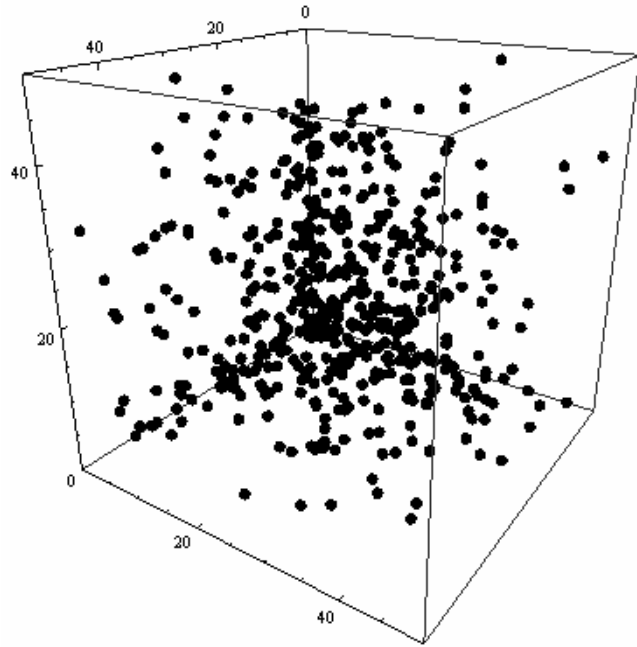
**Şekil IV.20:** %60 ihtimalle -y ve -z yönünde hareket eden 500 parçacığın 800. Monte Carlo adımındaki dağılımı



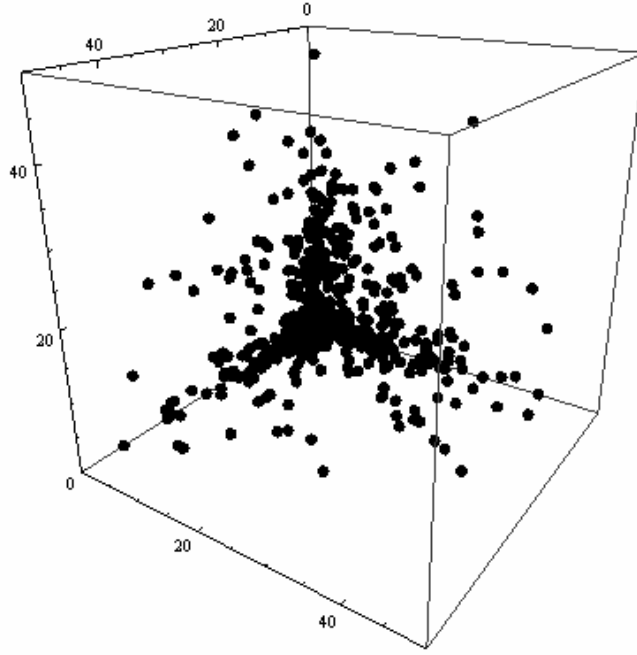
**Şekil IV.21:** %60 ihtimalle -y ve -z yönünde hareket eden 500 parçacığın 1000. Monte Carlo adımındaki dağılımı



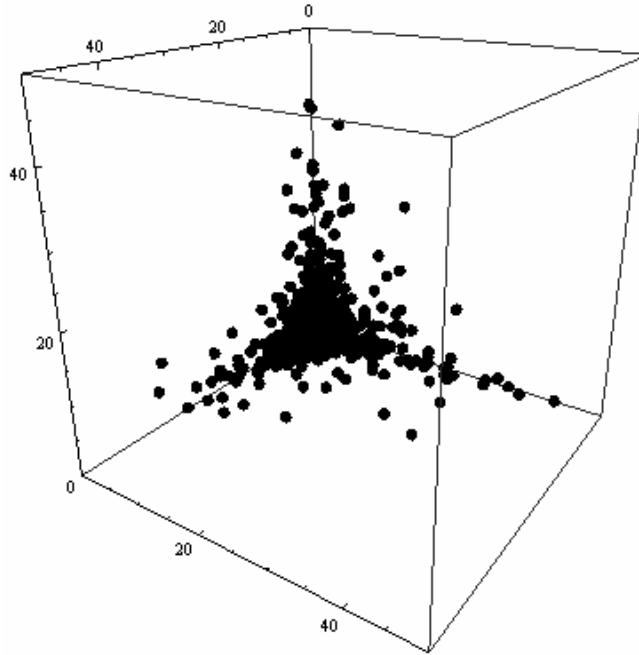
**Şekil IV.22:** %60 ihtimalle  $-x$ ,  $-y$  ve  $-z$  yönünde hareket eden 500 parçacığın ilk dağılımı



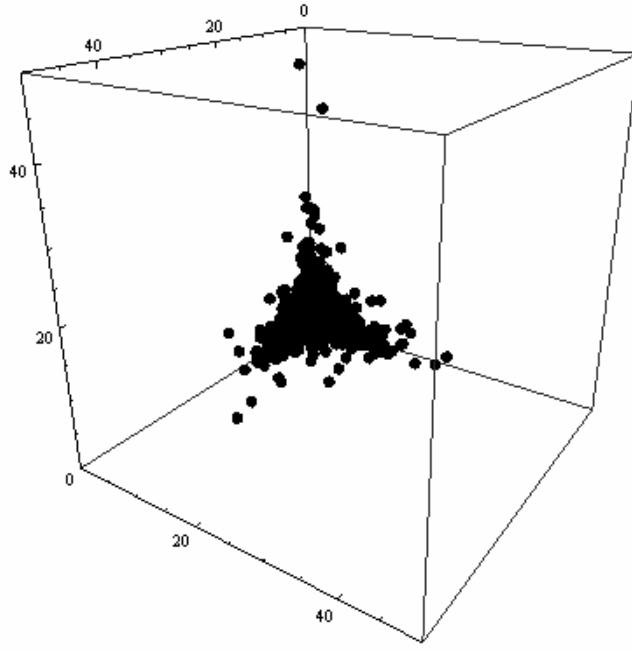
**Şekil IV.23:** %60 ihtimalle  $-x$ ,  $-y$  ve  $-z$  yönünde hareket eden 500 parçacığın 200. Monte Carlo adımındaki dağılımı



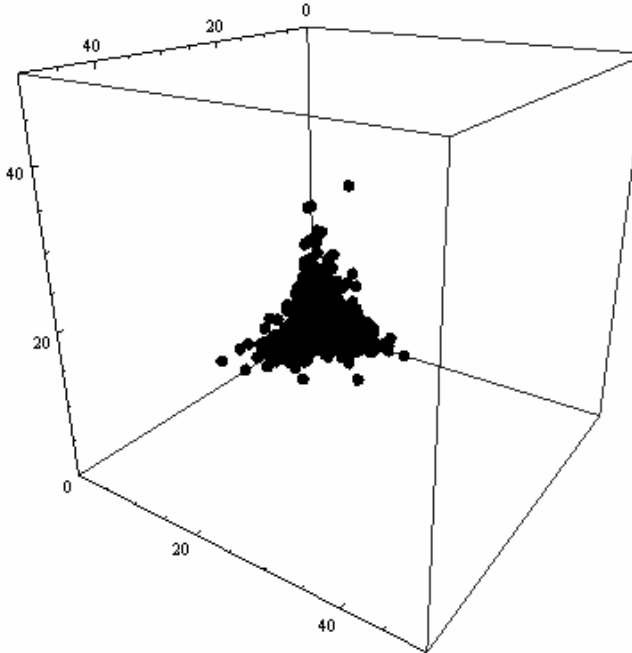
**Şekil IV.24:** %60 ihtimalle  $-x$ ,  $-y$  ve  $-z$  yönünde hareket eden 500 parçacığın 400. Monte Carlo adımındaki dağılımı



**Şekil IV.25:** %60 ihtimalle  $-x$ ,  $-y$  ve  $-z$  yönünde hareket eden 500 parçacığın 600. Monte Carlo adımındaki dağılımı



**Şekil IV.26:** %60 ihtimalle  $-x$ ,  $-y$  ve  $-z$  yönünde hareket eden 500 parçacığın 800. Monte Carlo adımındaki dağılımı



**Şekil IV.27:** %60 ihtimalle  $-x$ ,  $-y$  ve  $-z$  yönünde hareket eden 500 parçacığın 1000. Monte Carlo adımındaki dağılımı

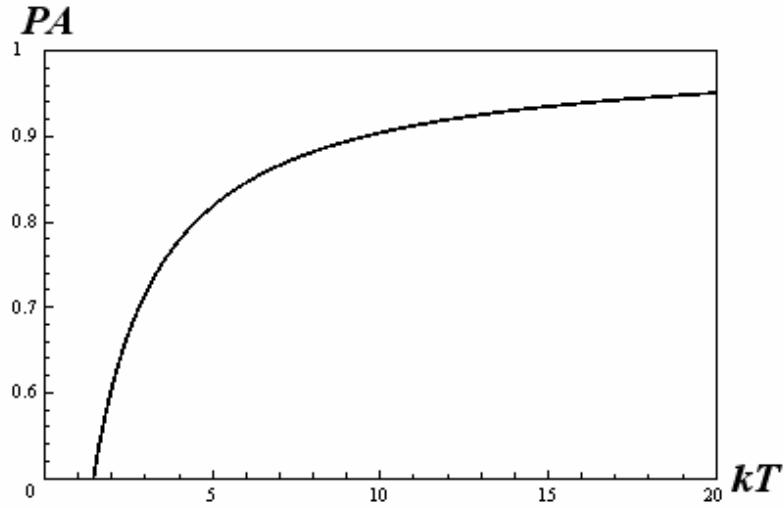
#### IV.5. YÜZEYDEN KOPMA İHTİMALİ

İnce film oluşumunda parçacıkların tabana (alttaşa) bir şekilde tutunması istenir. Bu dışarıdan uygulanan bir kuvvet, sıcaklık, parçacıklara kazandırılan hız veya yüzey gerilimi gibi parametreler sayesinde olabilir. Geliştirilen modelde parçacıklar istenilen yöne hareket ettirilebilmektedir. Fakat parçacıkların tabana tutunmasını sağlayacak bir parametre tanımlanmamış durumdadır. Bu aşamada, parçacıkların yüzeyden kurtulmasına veya tutunmasına etkiyen bir parametre modele dahil edilecektir.

Bu parametre sıcaklığa ve enerjiye bağlı olup *yüzeyden kopma ihtimali* olarak tanımlanmış ve  $PA$  ile gösterilmiştir. Parçacıkların yüzeye tutunmasını sağlayan *yüzey gerilimi* etkisini temsil eder.

$$PA = e^{-E_a/k_B T} \quad (IV.1)$$

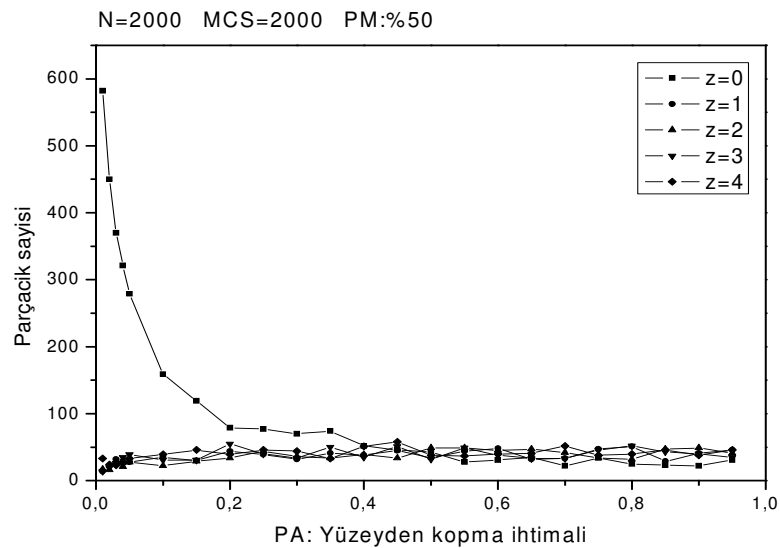
Buradaki  $E_a$  bir tür aktivasyon enerjisi olup değeri bütün denemelerde 1'e ölçeklendirilmiştir. Dolayısıyla  $k_B T$ 'nin birimi  $E_a$  türünden alınmıştır.  $k_B$  Boltzmann sabiti ve  $T$  sıcaklıktır. Bu durumda  $PA$ 'nın  $k_B T$ 'ye göre grafiği Şekil IV.28'de verilmiştir. Grafikte görüldüğü gibi  $PA$ , 0 ile 1 arasında değerler almakta ve sıcaklık arttıkça 1'e yaklaşmaktadır ki bu yüksek sıcaklıkta beklendiği gibi yüzeyden kurtulmayı kolaylaştırmıştır (tutunma gerçekleşmez).



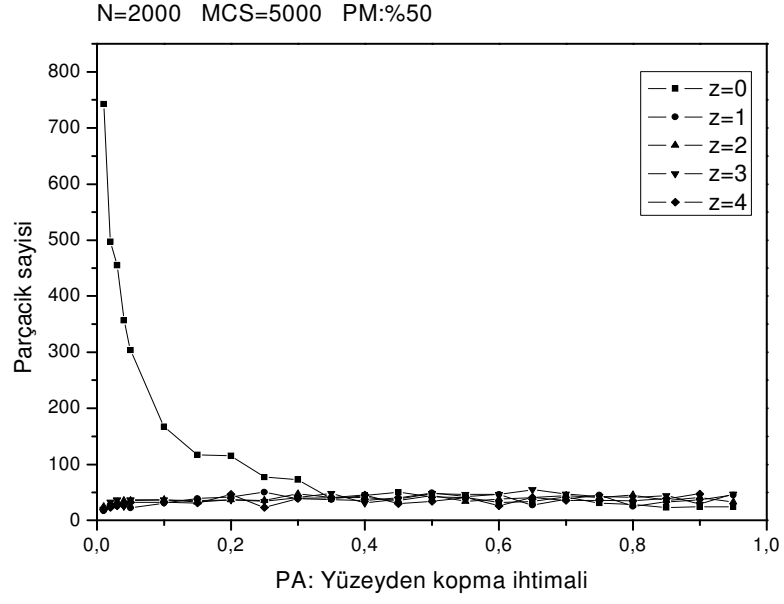
Şekil IV.28: Yüzeyden kopma ihtimalinin sıcaklığa göre değişimi

Modele  $z=0$  ( $IZ=0$ ) seviyesi için özel bir parametre olan yüzeyden kopma ihtimali sadece *MOVEZ* alt programında değişiklik yapılarak eklenmiştir.  $z=0$  seviyesine gelen parçacığın tabanda olduğu varsayılmaktadır. Bu durumda *PA* devreye girmektedir. Monte Carlo adımı sıra  $z=0$  seviyesinde olan bir parçacığı hareket ettirmeye geldiğinde program önce bir gelişigüzel sayı çağıracaktır. Eğer *PA* gelişigüzel sayıdan büyük ise parçacık hareket edecektir. Fakat değilse parçacık konumunu koruyacak ve tabanda parçacık birikimi başlayacaktır. Yani sıcaklık arttıkça parçacığın kinetik enerjisi artmakta ve yüzeyden kopma ihtimali yükselmektedir. Bu ihtimal  $z$  eksenindeki hareketten sorumlu *MOVEZ* alt programına eklenip düzgün çalıştığını görüldükten sonra  $x$  ve  $y$  eksenini yöneten *MOVEX* ve *MOVEY* alt programlarına da eklenmiştir. Bu durumda ise tabandaki parçacığın  $x$  ve  $y$  ekseninde yapacağı hareket de *PA*'ya bağlı olacaktır. Böylece model gerçeğe bir adım daha yaklaştırılmıştır. Program yapılan değişiklikler ve açıklamalarla birlikte Ek 4'te verilmiştir. Programın doğru çalıştığının kontrolünün ardından birçok farklı parçacık ve Monte Carlo adımı sayısı için denemeler yapılmış ve veriler analiz edilmiştir.

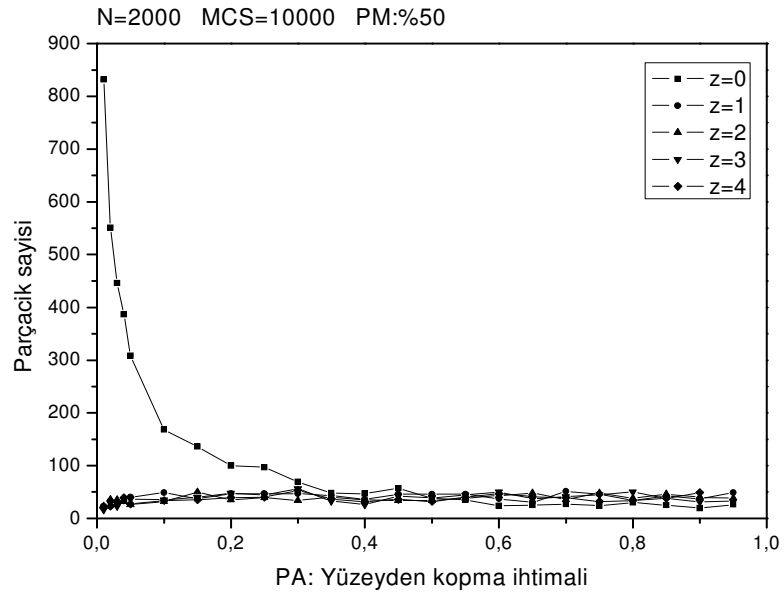
İlk olarak, her yöne hareket ihtimali %50 olarak belirledikten sonra 2000 parçacık ve farklı *PA* değerleri için sırasıyla 2000, 5000, 10000 ve 20000 Monte Carlo adımı sonundaki parçacık dağılım grafikleri ilk 5 seviye için verilmiştir. Grafiklerde  $N$  parçacık sayısını, *MCS* Monte Carlo adımı sayısını, *PA* yüzeyden kopma ihtimalini ve *PM* tabana yönelim ihtimalini göstermektedir.



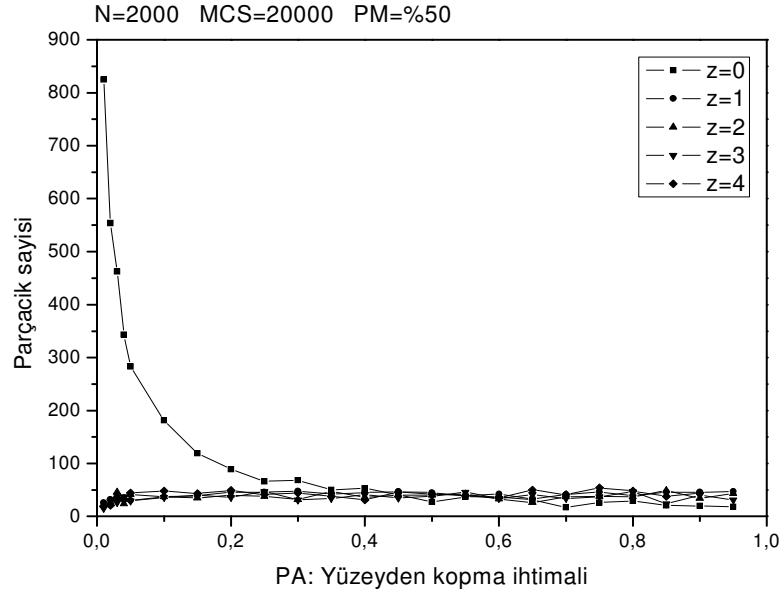
Şekil IV.29: 2000 parçacığın 2000 Monte Carlo adımı sonunda dağılımı



Şekil IV.30: 2000 parçacığın 5000 Monte Carlo adımı sonunda dağılımı



Şekil IV.31: 2000 parçacığın 10000 Monte Carlo adımı sonunda dağılımı

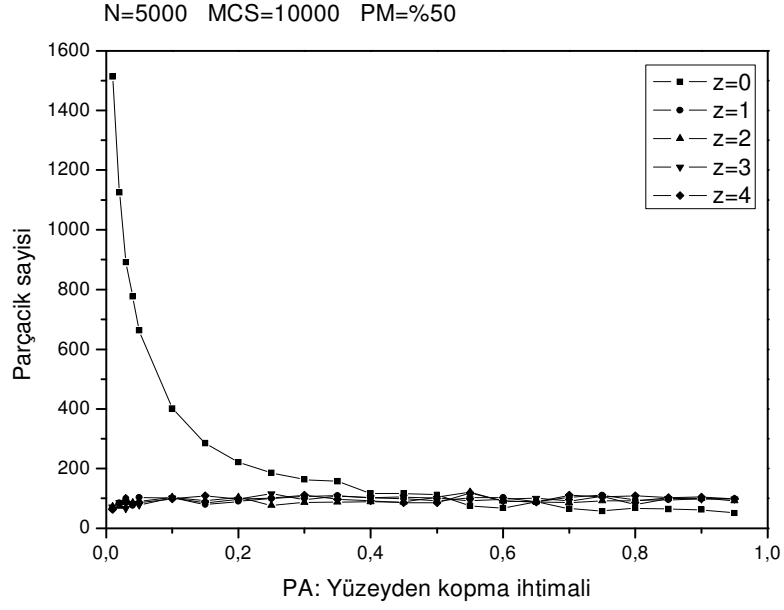


**Şekil IV.32:** 2000 parçacığın 20000 Monte Carlo adımı sonunda dağılımı

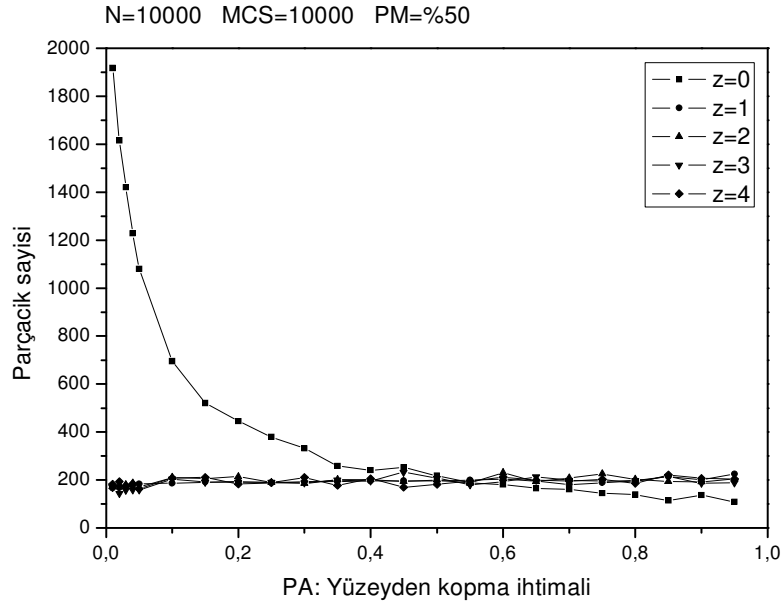
Grafiklerde görüldüğü gibi düşük sıcaklıklarda parçacıklar tabanda daha çok birikmektedir ve sıcaklık arttıkça parçacık dağılımı en baştaki gelişigüzel dağılıma dönmektedir. Model ve modeli temsil eden programın beklenen doğrultuda çalıştığı söylenebilir.

$PA=0,01$  iken, 2000 adımda 582 parçacık, 5000 adımda 742 parçacık, 10000 adımda 832 parçacık ve 20000 adım sonunda da 825 parçacık birikmiştir. Görülüyor ki 10000 ve 20000 Monte Carlo adımı sonunda tabanda biriken parçacık sayısı birbirine oldukça yakındır. Bu da sistemin dengeye ulaşması için 10000 Monte Carlo adımının yeterli olacağını göstermektedir.

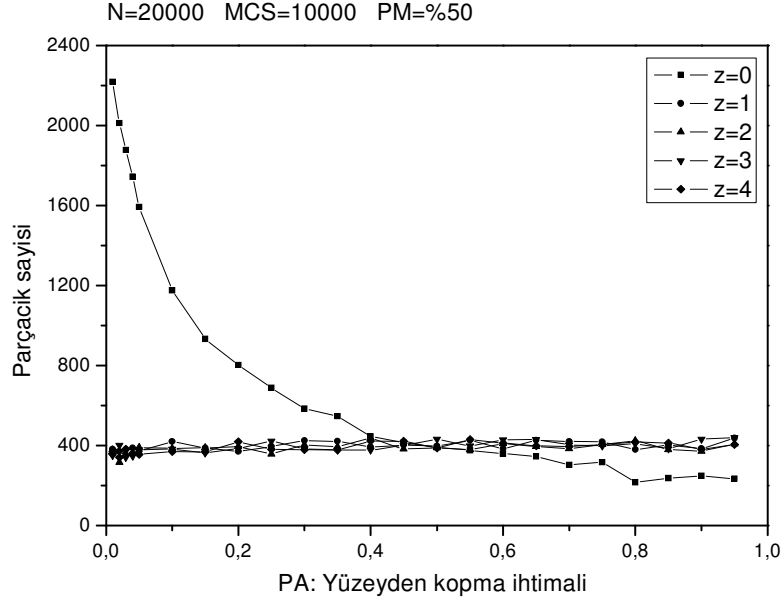
Bundan dolayı, sonraki çalışmalarda Monte Carlo adımı sayısı 10000 olarak sabitlenmiştir. Sırasıyla 5000, 10000 ve 20000 parçacık için 10000 Monte Carlo adımında denemeler yapılmıştır. Bu denemeler sonucu parçacıkların ilk 5 seviye için dağılım grafikleri Şekil IV.33, Şekil IV.34 ve Şekil IV.35'te verilmiştir.



Şekil IV.33: 5000 parçacığın 10000 Monte Carlo adımı sonunda dağılımı



Şekil IV.34: 10000 parçacığın 10000 Monte Carlo adımı sonunda dağılımı



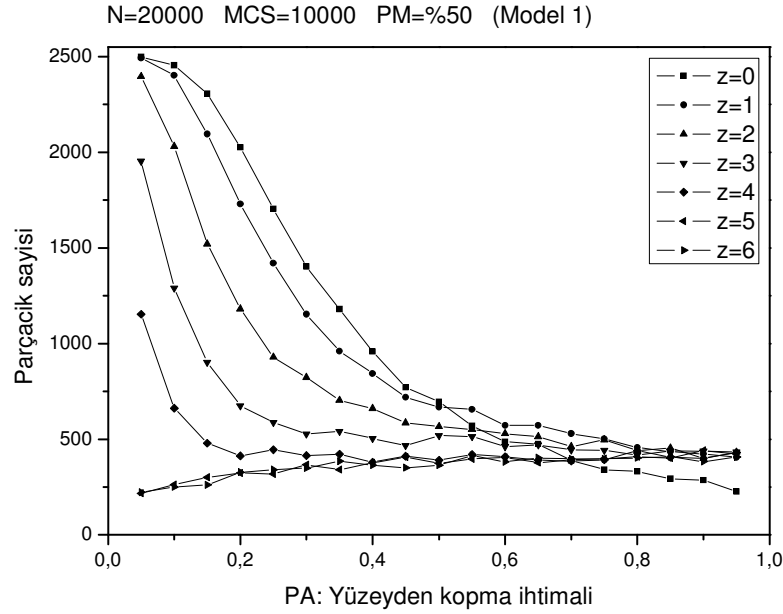
**Şekil IV.35:** 20000 parçacığın 10000 Monte Carlo adımı sonunda dağılımı

Şekil IV.35'te grafiği verilen, denemede 10000 Monte Carlo adımı sonunda tabanda 2218 parçacığın biriktiği ve 282 hücrenin boş kaldığı gözlemlenmiştir. Boş hücrelerin, ince film yapımında ortaya çıkan ve katlı yapıların oluşmasına engel olan boşluklar olduğu düşünülebilir. Bu modelde sadece  $z=0$  seviyesinde yapışma (birikme) görüldüğünden gerçekte tam uyduğu söylenemez. Ancak geliştirilmekte olan modelin bir adım daha gerçeğe yaklaşmasına neden olmuştur.

Bundan sonraki modellerde  $PA$  sadece tabanda ( $z=0$ ) etkili olmayacaktır. Tabana yakın seviyelerde de parçacık birikimini sağlamak için, öncelikle değişiklikler  $z$  ekseninde hareketten sorumlu *MOVEZ* alt programında yapılmıştır. *MOVEZ* programı 3 bloğa ayrılmıştır. Birinci blok  $z=0$  seviyesindeki parçacığın hareketinden sorumludur ve burada önemli bir değişiklik yoktur. Tabanda bulunan parçacıklar yine  $PA$  yüzeyden kopma ihtimaline göre hareketlerini yapacaklardır. İkinci blok sonraki 4 seviyeden ( $0 < z < 5$ ) sorumludur. Bu seviyedeki parçacıkların  $z$  yönünde yapacakları harekette, alt seviyelerinde parçacık olup olmadığı kontrol edilecektir. Hareket yapacak parçacığın altındaki seviyeler dolu ise tabana tutunma vardır. Bu durumda  $PA$  devreye girecektir ve parçacık hareketini ona bağlı olarak yapacaktır. Bu alt programdaki son blok ise  $z=5$  seviyesi ve üstündeki bütün seviyelerdeki ( $z > 4$ ) hareketten sorumludur. Bu seviyelerdeki

parçacıklar ise hareketlerini belirlenen gelişigüzel sayıya göre yapacaklardır. Ardından aynı değişiklikler  $x$  ve  $y$  eksenindeki hareketten sorumlu *MOVEX* ve *MOVEZ* alt programlarında da yapılmıştır. Program son haliyle Ek 5’te verilmiştir.

Geliştirilen bu model, kıyaslamalarda kolaylık sağlamak açısından *Model 1* olarak adlandırılmıştır. *Model 1*’de parçacıkların hareketi her yöne %50 ihtimaldedir. Tabanda ve tabana yakın seviyelerde *PA* etkilidir. *Model 1* ile birçok deneme yapılmış ve veriler analiz edilmiştir. Burada ise parçacık sayısının çok olması ve dengeye ulaşacak kadar adıma sahip olması açısından; 20000 parçacıkla, 10000 Monte Carlo adımında farklı *PA* değerleri ( $0,05 \leq PA \leq 0,95$ ) için yapılan denemenin parçacık dağılımı verileri, üst seviyelerdeki oluşumu da görmek adına ilk 7 seviye için Şekil IV.36 da verilmiştir.



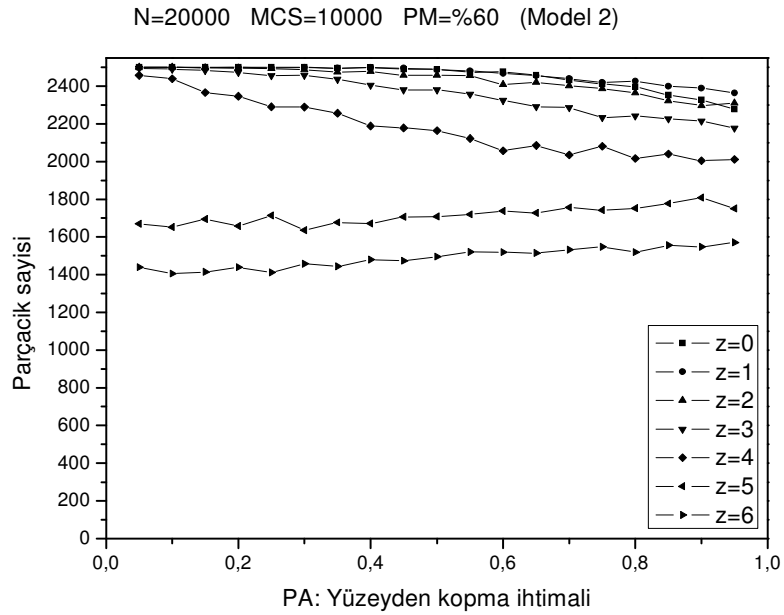
**Şekil IV.36:** *Model 1*’de 20000 parçacığın 10000 Monte Carlo adımı sonunda dağılımı

Grafikte ilk 3 seviye için doluluk oranının oldukça yüksek olduğu görülmektedir. Fakat tamamen dolu bir seviye yoktur. Buna rağmen *Model 1* tabana yakın seviyelerde çok katlı ince film oluşumunun gözlemlendiği ilk gerçekçi modeldir.

Bu aşamadan sonra oluşumun nelere bağlı olarak değişebileceği ile ilgili modeller geliştirilip denemeler yapılmıştır. *Model 1*'de yapılan denemelerin ardından parçacıkların bir etkiyle  $-z$  yönünde harekete zorlanacağı bir model olan *Model 2* geliştirilmiştir.

*Model 2*'nin geliştirilme sebebi tabandaki oluşumun dış bir etkiye (yerçekimi, taşıyıcı gaz, elektrik alan, manyetik alan vs.) bağlılığını incelemektir. *Model 2*'de parçacıklar  $-z$  yönünde %60 ihtimalle harekete zorlanmışlardır. *Model 1*'de olduğu gibi *PA* tabanda ve tabana yakın seviyelerde etkilidir.

*Model 2*'de de birçok deneme yapılmıştır. Fakat burada *Model 1*'de olduğu gibi 20000 parçacıkla ve 10000 Monte Carlo adımında yapılan denemenin grafiği Şekil IV.37'de verilmiştir.



**Şekil IV.37:** *Model 2*'de 20000 parçacığın 10000 Monte Carlo adımı sonunda dağılımı

*Model 2*'de yapılan bu deneme sonucunda  $PA=0,05$  iken ilk 3 seviyenin tamamen dolduğu gözlemlenmiştir. İlk 5 seviyedeki doluluk oranı sıcaklığın artması ile giderek azalsa da  $PA=0,95$  iken dahi %80'in üzerindedir. Çok katlı ince film oluşumu *Model 1*'e göre daha düzgündür. Alt seviyelerde oluşan boşluk sayıları da oldukça azdır. Bu iki deneme için tüm seviyelerdeki parçacık sayıları Tablo IV.2 ve Tablo IV.3'te verilmiştir.

**Tablo IV.2:**  $PA=0,05$  iken *Model 1*'de 20000 parçacığın 10000 Monte Carlo adımı sonundaki dağılımı

$z=0$	2498	$z=10$	199	$z=20$	224	$z=30$	203	$z=40$	205
$z=1$	2494	$z=11$	209	$z=21$	184	$z=31$	209	$z=41$	205
$z=2$	2397	$z=12$	191	$z=22$	180	$z=32$	202	$z=42$	250
$z=3$	1954	$z=13$	230	$z=23$	193	$z=33$	216	$z=43$	195
$z=4$	1153	$z=14$	203	$z=24$	215	$z=34$	215	$z=44$	206
$z=5$	217	$z=15$	235	$z=25$	226	$z=35$	211	$z=45$	215
$z=6$	223	$z=16$	186	$z=26$	202	$z=36$	224	$z=46$	225
$z=7$	190	$z=17$	195	$z=27$	230	$z=37$	228	$z=47$	211
$z=8$	190	$z=18$	211	$z=28$	223	$z=38$	190	$z=48$	224
$z=9$	221	$z=19$	219	$z=29$	223	$z=39$	226	$z=49$	225

**Tablo IV.3:**  $PA=0,05$  iken *Model 2*'de 20000 parçacığın 10000 Monte Carlo adımı sonundaki dağılımı

$z=0$	2500	$z=10$	475	$z=20$	10	$z=30$	0	$z=40$	0
$z=1$	2500	$z=11$	407	$z=21$	7	$z=31$	1	$z=41$	0
$z=2$	2500	$z=12$	268	$z=22$	4	$z=32$	0	$z=42$	0
$z=3$	2495	$z=13$	177	$z=23$	3	$z=33$	0	$z=43$	0
$z=4$	2457	$z=14$	122	$z=24$	3	$z=34$	0	$z=44$	0
$z=5$	1670	$z=15$	73	$z=25$	2	$z=35$	0	$z=45$	0
$z=6$	1440	$z=16$	67	$z=26$	2	$z=36$	0	$z=46$	0
$z=7$	1165	$z=17$	36	$z=27$	0	$z=37$	0	$z=47$	0
$z=8$	870	$z=18$	18	$z=28$	0	$z=38$	0	$z=48$	0
$z=9$	706	$z=19$	22	$z=29$	0	$z=39$	0	$z=49$	0

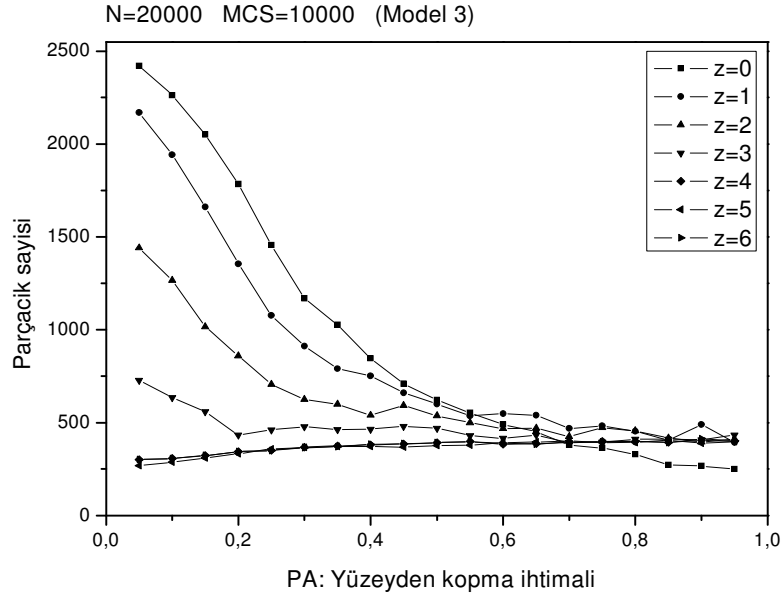
#### IV.6. PARÇACIKLARIN DAĞILIMA GÖRE HAREKETİ

Bu aşamada model eklenen bir parametre ile biraz daha farklılaştırılacaktır. Bir önceki çalışma safhasında, parçacıklar  $-z$  yönünde harekete zorlanarak,  $PA$ 'nın da etkisiyle tabanda ve tabana yakın seviyelerde film oluşumu gözlemlenmiştir. *Model 2*'de parçacıklar  $-z$  yönünde %60 ihtimalle harekete zorlanmış ve ilk 3 seviyenin tamamen dolduğu görülmüştür. Grafiklerde gösterilmeyen fakat Tablo IV.3'te verilen dağılımda görüldüğü gibi kutunun  $z$  eksenine göre üst yarısı ( $z>26$ ) neredeyse boştur.

Bu duruma alternatif olarak düşünülen *Model 3*'te, tabanda biriken ve birbiri üstüne yapışan parçacıklar dışında serbest olanların ideal gaza uygun yani gelişigüzel dağılması istenilmiştir. Bu ilk bakışta *Model 1*'e oldukça benzemektedir. Fakat *Model 3*'te *Model 1*'den farklı olarak,  $z$  yönündeki dağılım için gelişigüzel sayılar kullanmak yerine sistem kendini denetleyerek hareketin yönünü kendisi belirleyecektir. Bunu

sağlayacak olan, Monte Carlo adımıında hareket sırası tabana bağılı olmayan bir parçacığı  $z$  yönünde hareket ettirmeye geldiğinde devreye girecek olan bir faktör olacaktır. Parçacık  $z$  yönündeki hareketini yapmadan önce bulunduğu  $z$  seviyesinin altındaki ve üstündeki seviyede bulunan parçacık sayısını kontrol edecek ve yön seçimini az parçacığın olduğu seviyeye doğru yapacaktır. Böylece tabana ve tabandaki parçalara yapışan parçacıkların (birikenlerin) dışında kalanlar, bütün seviyelere homojen şekilde dağılacaklardır. Seviyelerdeki parçacık sayısı eşit olmayacaktır ama birbirine yakın değerler alacaktır. *Model 3*'te de  $x$  ve  $z$  yönündeki hareket için geçerli olan gelişigüzel sayı seçimi devam edecektir. Çünkü *Model 2*'deki tabanda birikme sadece  $z$  eksenindeki dağılım homojenliğini bozmaktadır.  $x$  ve  $y$  eksenleri bundan etkilenmemektedir. Bu faktörü programımıza eklerken sadece  $z$  eksenindeki hareketten sorumlu *MOVEZ* alt programında değişiklik yaptık. Bu alt program Ek 6'da verilmiştir.

*Model 1* ve *Model 2*'de de karşılaştırdığımız, *PA*'nın farklı değerleri için 20000 parçacığın 10000 Monte Carlo adımıında ilk 7 seviye dağılımı Şekil IV.38'de verilmiştir.



**Şekil IV.38:** *Model 3*'te 20000 parçacığın 10000 Monte Carlo adımı sonunda dağılımı

Son olarak, bu denemede  $PA=0,05$  iken tüm seviyelerdeki parçacık dağılımı Tablo IV.4'te verilmiştir.

**Tablo IV.4:**  $PA=0,05$  iken *Model 3*'te 20000 parçacığın 10000 Monte Carlo adımı sonundaki dağılımı

$z=0$	2422	$z=10$	291	$z=20$	285	$z=30$	285	$z=40$	280
$z=1$	2170	$z=11$	277	$z=21$	282	$z=31$	285	$z=41$	289
$z=2$	1441	$z=12$	292	$z=22$	286	$z=32$	283	$z=42$	279
$z=3$	728	$z=13$	277	$z=23$	284	$z=33$	288	$z=43$	289
$z=4$	301	$z=14$	291	$z=24$	285	$z=34$	278	$z=44$	279
$z=5$	268	$z=15$	278	$z=25$	282	$z=35$	289	$z=45$	294
$z=6$	301	$z=16$	291	$z=26$	286	$z=36$	280	$z=46$	273
$z=7$	276	$z=17$	280	$z=27$	284	$z=37$	291	$z=47$	307
$z=8$	292	$z=18$	288	$z=28$	284	$z=38$	277	$z=48$	262
$z=9$	277	$z=19$	282	$z=29$	285	$z=39$	292	$z=49$	434

## BÖLÜM V

### SONUÇLAR ve TARTIŞMA

Tez çalışmalarımızda, ince film oluşumu Monte Carlo simülasyon metodu ile modellenmiştir. Her çalışma safhasında şartlar değiştirilmiş ve bu şartlar altında, parametrelerin farklı değerleri için denemeler yapılmış, elde edilen veriler analiz edilmiştir.

İlk olarak  $50 \times 50 \times 50$  boyutundaki kutu içine gelişigüzel dağıtılan parçacıklara sırasıyla hareket etme, sabit sınır şartlarına uyma, hareket yönü seçme, tabana ve birbirlerine tutunma, diğer parçacıkların dağılımına göre hareket etme gibi yetenekler adım adım kazandırılmıştır.

Modele parçacıkların yüzeye tutunmasını sağlayan yüzey gerilimini temsil eden  $PA$  yüzeyden kopma ihtimalinin eklenmesi ile (bkz: Bölüm IV.5) model gerçeğe uygun halde çalışmaya başlamıştır. Bundan sonra yapılan denemelerde elde edilen veriler bu sebepten öncekilere nazaran daha önemli sonuçlardır.

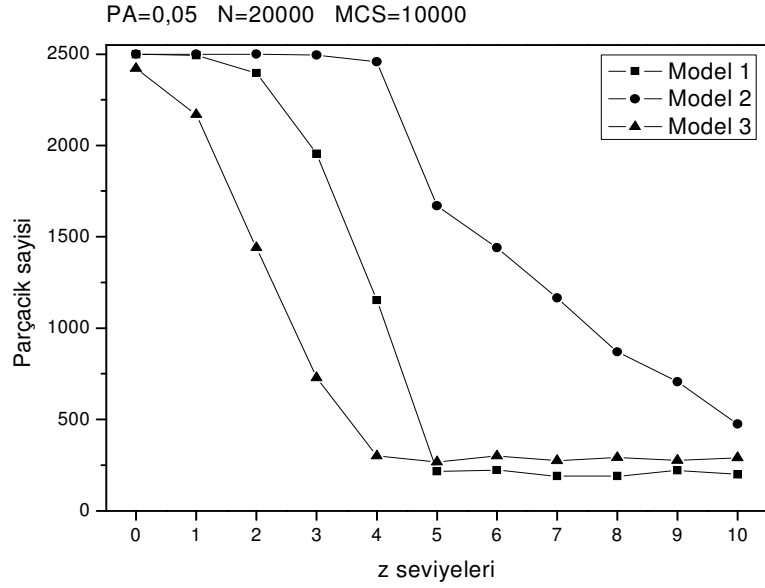
Yüzeyden kopma ihtimali eklendikten sonra yapılan ilk denemelerde parçacıklar her yöne gelişigüzel yani %50 ihtimalle hareket edebilmekteydiler. 20000 parçacıkla, 10000 Monte Carlo adımıyla yapılan ve parçacıkların dağılımının Şekil IV.35'teki grafikte verildiği denemede,  $PA$ 'nın düşük değerleri için tabanda parçacık birikiminin oldukça fazla olduğu gözlemlenmiştir. Tabandaki 2500 hücreden 2218 tanesi yani %88'i dolmuştur. Fakat tabana yakın ve daha üst seviyelerde doluluk oranı oldukça düşük ve %16 civarındadır. Bu yakınlığın sebebi her yöne hareket ihtimalinin %50 olmasıdır.  $PA$  büyüdükçe tabandaki doluluk oranı azalmaktadır.  $PA=0,5$  civarında ise yüzeyden kopma ihtimali ve hareket ihtimali değer olarak birbirine yaklaştığından sistem içindeki parçacık dağılımı homojen olmaktadır.  $PA>0,5$  değerleri için ise yüzeyden kopma ihtimali çok arttığından, tabandaki doluluk oranı diğer seviyelere göre gittikçe azalmaktadır. Bu model sadece tabanda birikmeyi sağladığı için gerçeğe yakın değildir. Bu modeldeki gözlemlere dayanarak *Model 1* geliştirilerek simülasyon gerçeğe daha yakın hale getirilmiştir.

*Model 1*'de hareket ihtimali her yöne %50'dir. Yani parçacıklar gelişigüzel hareket etmektedirler. Fakat *Model 1*'de ve bundan sonraki bütün modellerde tabanda ve tabana yakın seviyelerde *PA* etkilidir. Bu sayede tabana yakın seviyelerde parçacıklar birbirlerine tutunmuşlar ve çok katlı ince film oluşturmuşlardır. Fakat bu modelde oluşan yüzeylerde ( $z$  seviyelerinde) boşluklar olduğu gözlemlenmiştir. Bu yüzden dışsal bir etkinin kullanıldığı *Model 2* geliştirilerek ince film oluşumundaki boşluklar azaltılmıştır.

Yeni tasarlanan modelde parçacıkların tabanda ve tabana yakın seviyelerde daha fazla birikmesi için bir etki (yerçekimi, taşıyıcı gaz, elektrik alan, manyetik alan vb.) altında olduğu varsayılmış ve parçacıkların %60 ihtimalle tabana yönelimi sağlanmıştır. Her iki modelde de  $PA=0,05$  iken yapılan denemelerdeki parçacık dağılımları Tablo IV.2 ve Tablo IV.3'te verilmiştir. Görülmektedir ki *Model 2*'de ilk 5 seviyede doluluk oranı %100 veya %100'e çok yakındır. Bu doluluk oranı Şekil IV.37'deki grafikte açıkça görülmektedir. *Model 2*'de *PA* artsa dahi tabandaki ve tabana yakın seviyelerdeki doluluk oranı azalması oldukça yavaştır. Bunun sebebi parçacıkların %60 ihtimalle tabana yönlendirilmesidir. Hatta *PA*'nın en büyük değeri için ilk 5 seviye için doluluk oranının %80 civarında veya daha büyük olduğu görülmektedir. *Model 2*'de tabanda ve tabana yakın seviyelerde gözlemlenen ince film oluşumu *Model 1*'de oluşana göre oldukça kalitelidir. Fakat *Model 2*'de doluluk oranı üst seviyelere çıkıldıkça düşmekte ve hatta kutunun üst yarısında parçacık bulunmamaktadır. Tablo IV.3'te 20000 parçacığın 10000 Monte Carlo adımı sonundaki bütün  $z$  seviyelerindeki dağılımı ayrıntılı olarak verilmiştir. Bu tabloda da açıkça görülmektedir ki  $z=26$  seviyesinden sonra kutu boştur. Buradan hareketle de *Model 3* geliştirilmiştir (bkz: Bölüm IV.6).

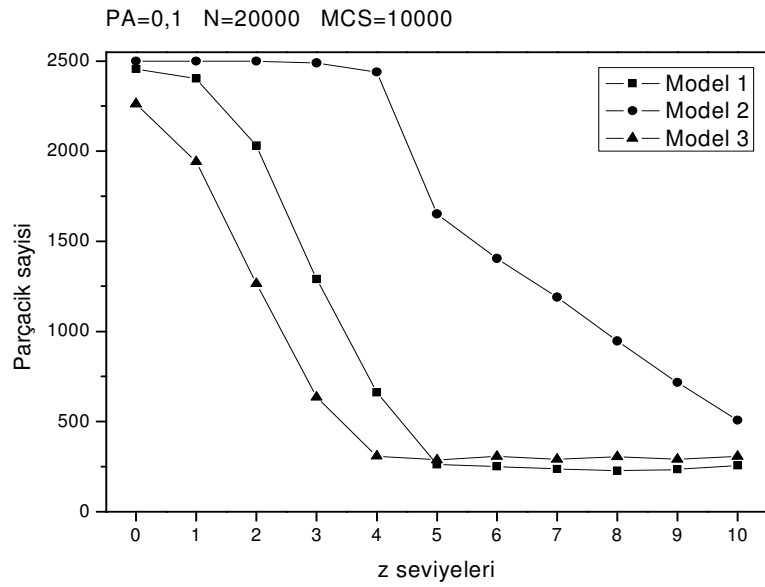
*Model 3*'teki parçacıklar, yüzey oluşturanlar dışında kutu içinde homojen bir dağılıma sahiptirler. *Model 1*'den farklı olarak, homojen dağılımı sağlamak için parçacıkların dağılımı denetleyip ona göre hareket yapmasını sağlayan bir parametre *Model 3*'e dahil edilmiştir. *Model 3*'te 20000 parçacıkla ve 10000 Monte Carlo adımıyla yapılan denemede elde edilen parçacık dağılımı Tablo IV.4'te ve ilk 7 seviye için dağılım grafiği Şekil IV.38'de verilmiştir.

Üç model daha iyi kıyaslamak amacıyla, 3 modelde de  $PA=0,05$  iken 20000 parçacık ve 10000 Monte Carlo adımıyla yapılan denemelerden elde edilen verilerle parçacıkların ilk 11 seviye dağılımlarının grafiği Şekil V.1'de verilmiştir.

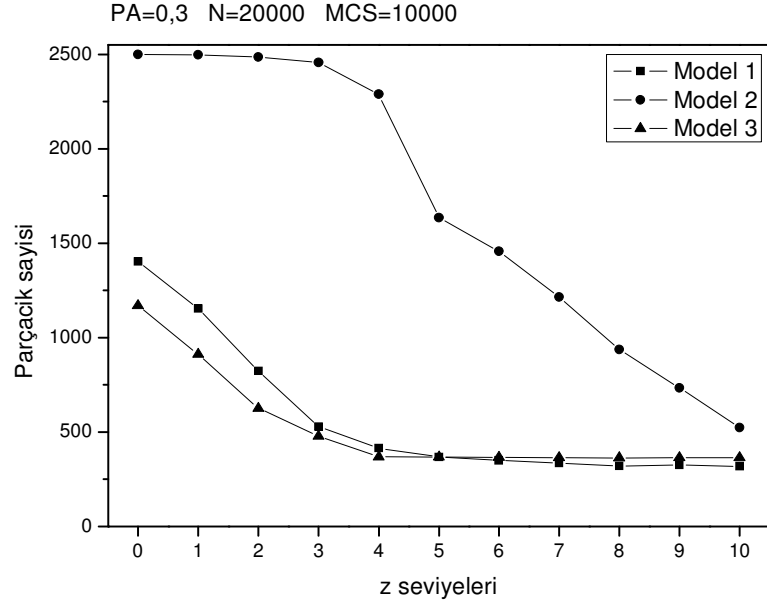


**Şekil V.1:**  $PA=0,05$  iken *Model 1*, *Model 2* ve *Model 3*'ün 20000 parçacık için kıyaslanması

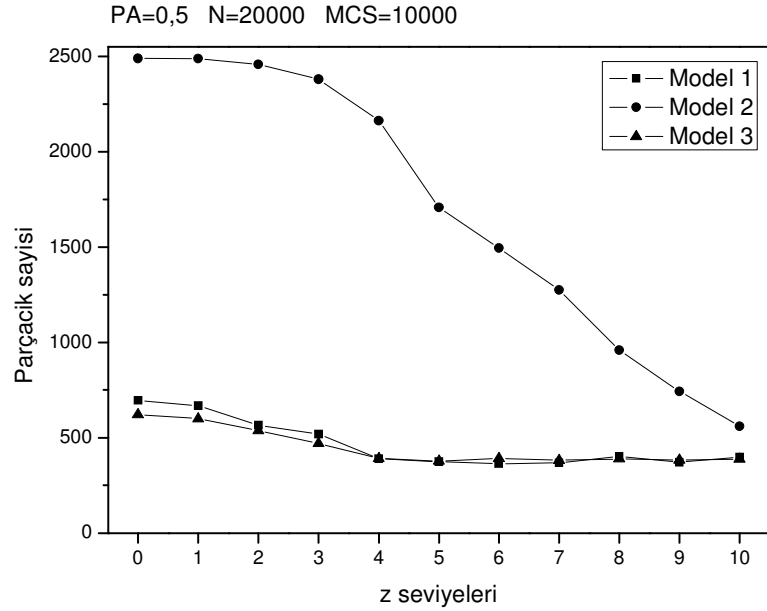
Aynı kıyaslama  $PA=0,1$ ,  $PA=0,3$ ,  $PA=0,5$ ,  $PA=0,7$  ve  $PA=0,9$  değerleri için yapılmış ve dağılım grafikleri aşağıda verilmiştir.



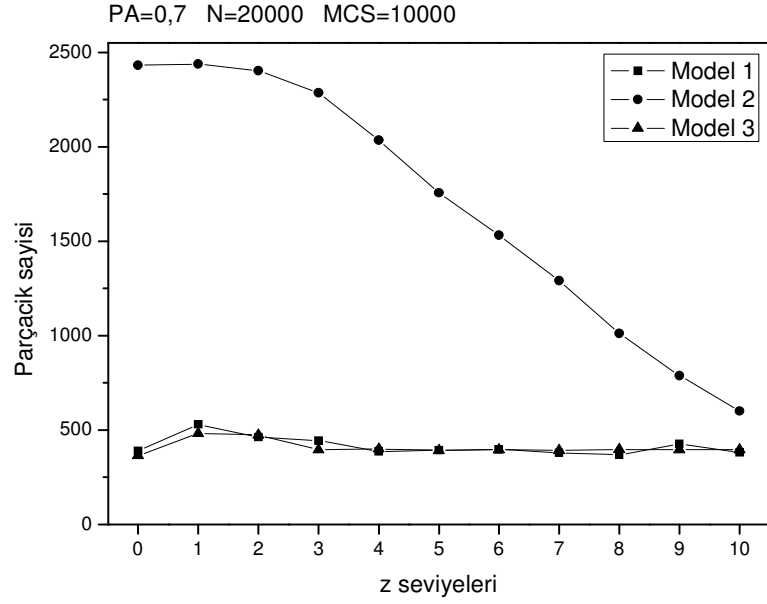
**Şekil V.2:**  $PA=0,1$  iken *Model 1*, *Model 2* ve *Model 3*'ün 20000 parçacık için kıyaslanması



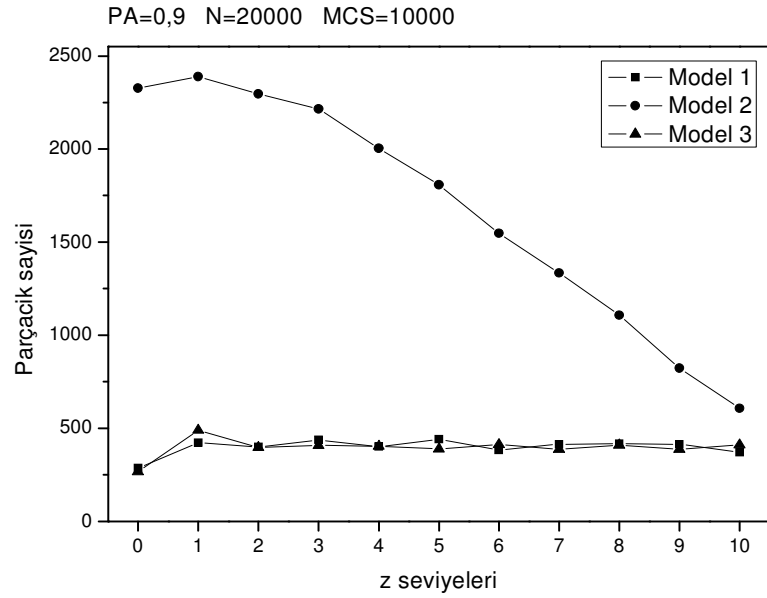
Şekil V.3:  $PA=0,3$  iken *Model 1*, *Model 2* ve *Model 3*'ün 20000 parçacık için kıyaslanması



Şekil V.4:  $PA=0,5$  iken *Model 1*, *Model 2* ve *Model 3*'ün 20000 parçacık için kıyaslanması



Şekil V.5:  $PA=0,7$  iken *Model 1*, *Model 2* ve *Model 3*'ün 20000 parçacık için kıyaslanması



Şekil V.6:  $PA=0,9$  iken *Model 1*, *Model 2* ve *Model 3*'ün 20000 parçacık için kıyaslanması

Grafiklerde ilk görülen,  $PA$  artsa dahi *Model 2*'de seviyelerdeki doluluk oranının bundan fazla etkilenmediğidir. İlk 5 seviyeye baktığımızda doluluk oranının halen %80'in üzerinde olduğu görülmektedir. *Model 2*'nin çok katlı ve az boşluk içeren ince film yapımı için uygun bir yöntem olduğu aşikârdır.

*Model 1* ve *Model 3*'teki parçacıkların dağılımı  $PA$ 'nın artması ile gelişigüzel (homojen) dağılıma yaklaşmaktadır. *Model 1* ve *Model 3*,  $PA$ 'nın düşük seviyelerinde *Model 2* gibi çalışsa da çok katlı film oluşumunda *Model 2* kadar başarılı değildir. *Model 3*'ün *Model 1*'den farkı ise yüzey oluşturan (tabana yapışan) parçacıkların dışındaki parçacıkların  $z$  seviyelerine daha homojen dağılmasıdır.

Bu durumda ulaşılan sonuçların daha doğru olması için *Model 1*, *Model 2* ve *Model 3*'ün kıyaslaması şartlar değiştirilerek de yapılabilir. *Model 1*'de parçacıklar her yöne %50 ihtimalle hareket etmektedirler. *Model 2*'de dışarıdan bir etki uygulanarak parçacıkların tabanda ve tabana yakın seviyelerde birikmesi sağlanmıştır. *Model 3*'te ise parçacıklar tamamen gelişigüzel ve hacimdeki parçacık dağılımını denetleyerek hareket etmektedirler. Üç modelde de tabana ve tabana yapışan parçaların üzerine gelenler  $PA$ 'ya bağlı olarak buraya tutunmakta ve çok katlı ince film oluşmaktadır.

Şartların farklılaştırılmasından kastedilen deneme süresinin uzatılmasıdır. *Model 1* ve *Model 3*'te deneme süresinin uzatılarak doluluk oranının yükseleceği ve oluşan katman sayısının daha artacağı; bu sayede *Model 3*'teki oluşuma benzer bir oluşum gözlenebileceği düşünülebilir. Süreyi uzatmak denemelerdeki Monte Carlo adımı sayısını arttırmak anlamına gelmektedir.

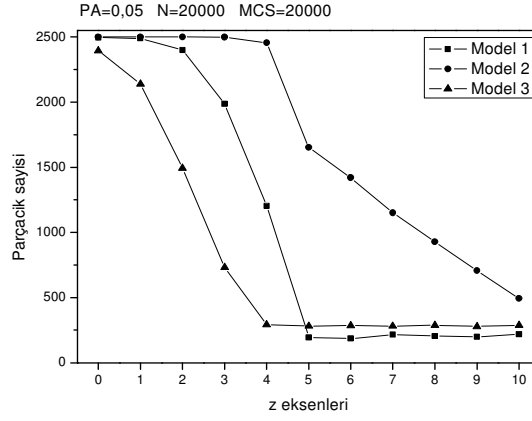
Sırasıyla üç model için de 20000, 50000 ve 100000 Monte Carlo adımında 20000 parçacık için denemeler yapılmıştır.  $PA=0,05$  iken (denemelerin yapıldığı en düşük  $PA$  değeri) *Model 1*, *Model 2* ve *Model 3*'te elde edilen verilerde elde edilen parçacık dağılımları ilk 25 seviye için Tablo V.1'de verilmiştir.

Tablodaki veriler beklentinin aksinedir. *Model 1* ve *Model 3*'te ilk 5 seviyedeki parçacık sayılarında çok düşük artış ve azalışlar vardır. Fakat bu orandaki değişimi çok az etkileyeceğinden önemsizdir. *Model 2*'de ise ilk seviyelerdeki doluluk oranı halen oldukça yüksektir.

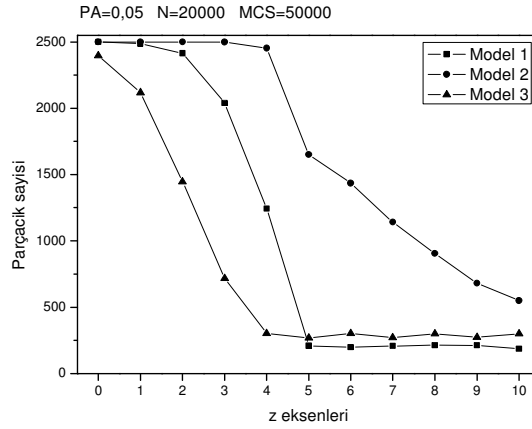
Tablo V.1'deki verilerle, üç model için de farklı Monte Carlo adımlarında ve ilk 11 seviye için çizilen grafikler Şekil V.7, Şekil V.8 ve Şekil V.9'da verilmiştir.

**Tablo V.1:**  $PA=0,05$  iken *Model 1*, *Model 2* ve *Model 3*'te 20000, 50000 ve 100000 Monte Carlo adımı sonunda parçacıkların  $z$  seviyelerine dağılımları

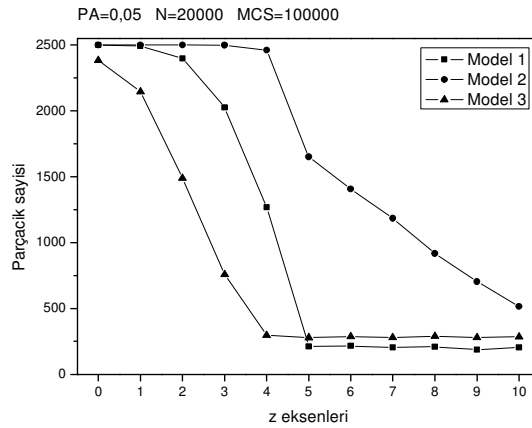
Seviye	20000 adım			50000 adım			100000 adım		
	<i>Model 1</i>	<i>Model 2</i>	<i>Model 3</i>	<i>Model 1</i>	<i>Model 2</i>	<i>Model 3</i>	<i>Model 1</i>	<i>Model 2</i>	<i>Model 3</i>
$z=0$	2495	2500	2395	2500	2500	2396	2499	2500	2384
$z=1$	2489	2500	2140	2487	2500	2118	2492	2500	2146
$z=2$	2399	2500	1492	2415	2500	1445	2398	2500	1489
$z=3$	1986	2498	732	2040	2499	717	2027	2498	758
$z=4$	1204	2455	292	1244	2452	302	1267	2460	298
$z=5$	194	1652	281	210	1650	268	212	1651	279
$z=6$	186	1421	286	199	1435	302	215	1407	288
$z=7$	215	1151	281	208	1142	272	205	1185	280
$z=8$	205	928	287	214	905	299	210	917	289
$z=9$	199	707	279	212	682	273	187	703	280
$z=10$	219	494	287	187	550	300	205	515	285
$z=11$	215	372	283	206	375	273	216	363	283
$z=12$	218	249	286	210	265	298	227	251	286
$z=13$	226	179	284	200	190	275	197	196	283
$z=14$	210	140	287	196	118	300	190	132	284
$z=15$	200	86	281	196	75	279	213	69	283
$z=16$	206	62	287	225	49	294	209	43	284
$z=17$	218	34	281	209	38	282	205	32	282
$z=18$	215	24	288	193	27	290	191	22	283
$z=19$	213	18	283	208	21	281	198	21	283
$z=20$	215	9	287	191	7	291	209	10	286
$z=21$	210	5	283	191	7	284	214	10	280
$z=22$	198	8	288	200	3	290	190	4	291
$z=23$	215	4	282	204	5	287	204	3	275
$z=24$	213	2	287	228	3	283	224	3	290



Şekil V.7:  $PA=0,05$  iken 20000 adımında *Model 1*, *2* ve *3*'ün kıyaslanması

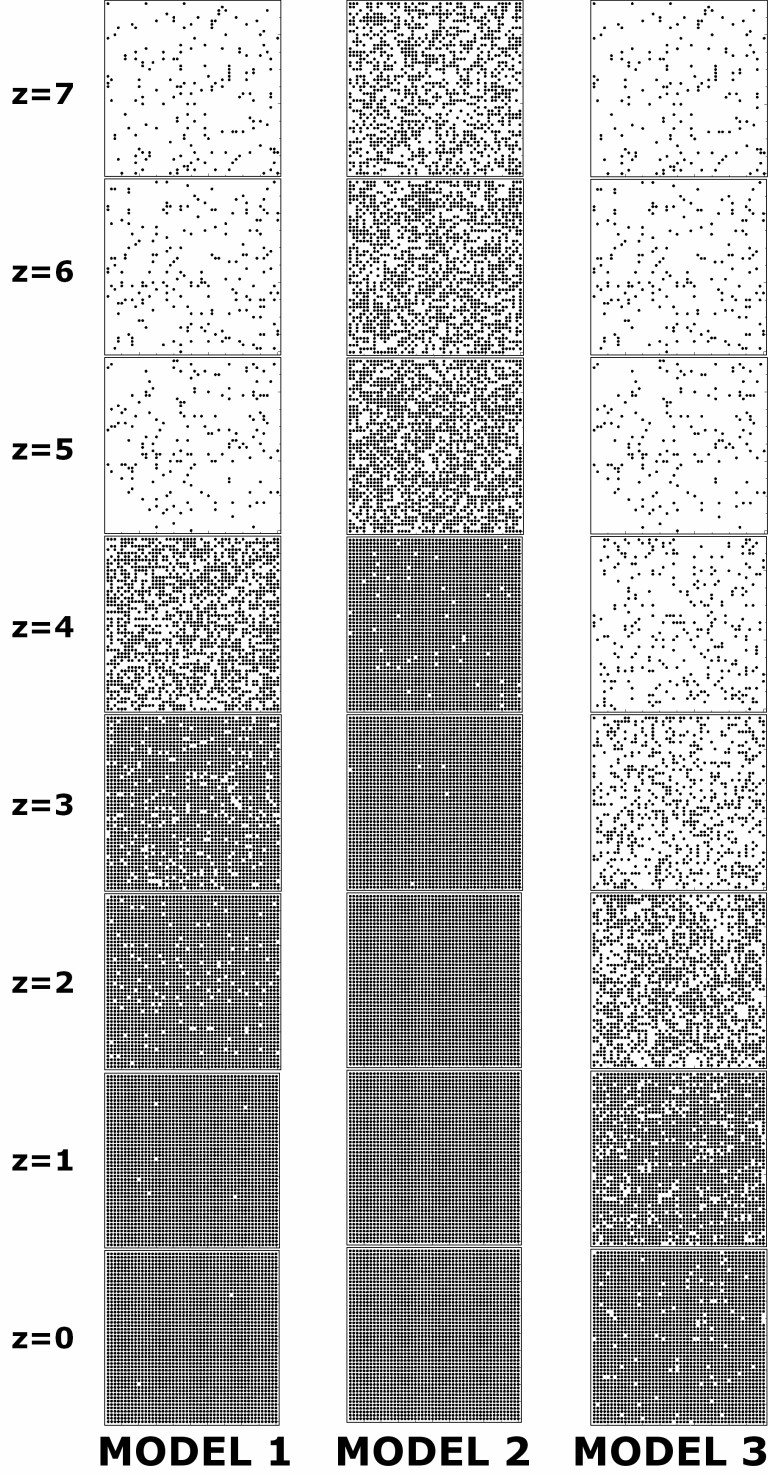


Şekil V.8:  $PA=0,05$  iken 50000 adımında *Model 1*, *2* ve *3*'ün kıyaslanması



Şekil V.9:  $PA=0,05$  iken 100000 adımında *Model 1*, *2* ve *3*'ün kıyaslanması

Son olarak 3 farklı modelde,  $PA=0,05$  iken 10000 Monte Carlo adımında ve 20000 parçacıkla yapılan denemelerde elde edilen verilerle ilk 8 seviye dağılımı Şekil V.10'da verilmiştir.



Şekil V.10: 3 farklı model için ilk 8 seviye dağılımları

## BÖLÜM VI

### SON DEĞERLENDİRMELER ve ÖNERİLER

Tez çalışmamızda ince film oluşumunun, farklı şartlar ve parametreler altında simülasyonu yapılmıştır. İnce film oluşumuna etkiyen faktörler simülasyonun içine adım adım dahil edilmiş ve sonucundaki gözlemlerle modeller geliştirilmiştir.

Modeli temsil etmek için *FORTRAN* programlama dilinde yazılan programın oldukça modüler olması, sisteme etkiyen parametrelerin değerlerinde kolay değişiklikler yapılmasına ve bu sayede de her oluşturulan model için birçok denemeye fırsat vermiştir.

Çalışmanın son bölümlerinde oluşturulan ve gerçeğe en yakın model olarak gözüken üç modelden ilkinde parçacıklar tamamen gelişigüzel hareket etmekteydiler. Dışsal herhangi bir etki yoktur. Fakat ikinci modelde dışsal bir etki olduğu varsayılmıştır. Son modelde ise parçacıklar dağılıma göre hareket etmektedir. Üç modelde de geçerli olan tabanda birikmeyi sağlayan bir faktör etkilidir.

Üç modelle de yapılan birçok deneme sonunda ince film yapımı için üçüncü modelin daha başarılı olduğu görülmüştür. Ancak daha kaliteli fakat daha kalın film isteniyorsa ikinci model daha başarılıdır.

## KAYNAKLAR

- [1] Briesmeister, J.: “RSIC Computer Code Collection MCNP4A, Monte Carlo N-Particle Transport Code System”, Los Alamos National Laboratory, New Mexico, USA, **(1993)**.
- [2] Giardano, N. J.: “Computational Physics”, Prentice Hall, New Jersey, USA, **(1997)**.
- [3] Mattox, D. M.: “Handbook of Physical Vapor Deposition (PVD) Processing: Film Formation, Adhesion, Surface Preparation and Contamination Control”, Noyes Publications, Westwood, New Jersey, USA, **(1998)**.
- [4] Mattox, D. M.: “The Foundations of Vacuum Coating Technology”, Noyes Publications, Norwich, New York, USA, **(2003)**.
- [5] Dorrie, H.: “100 Great Problems of Elementary Mathematics: Their History and Solution”, Dover, New York, USA, **(1989)**.
- [6] Feller, W.: “An Introduction to Probability Theory and Its Applications”, Vol II, Second Edition, Wiley, **(1971)**, 268-269.
- [7] Hardy, G. F.; Wright, E. M.: “An Introduction to the Theory of Numbers”, Fifth Edition, Oxford University Press, **(2007)**, 68-81.
- [8] Ulam, S., Metropolis, N.C.: “The Monte Carlo Method”, J.Amer.Stat.Assoc., 44, 335, **(1949)**.
- [9] Foster, D. G., Artur, D.: “Average Neutronic Properties of ‘Prompt’ Fission Products”, Los Alamos National Laboratory Report, LA, USA, **(1982)**.
- [10] Hançerlioğulları, A.: “APEX Hibrid Reaktör Modellemesi İçin Monte Carlo Yöntemi Kullanılarak Nötron Transport Hesaplamalarının Yapılması”, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi, Ankara, **(2003)**.
- [11] Hammersley, J.M.: “Monte Carlo Methods for Solving Multivariable Problems”, Annals of the New York Academy of Sciences, 86, 844-877, **(2006)**.
- [12] Spanier, J.: “Monte Carlo Methods and Their Application to Neutron Transport Problems”, USAEC Report WAPPD-195, Bettis Atomic Power Laboratory, USA, **(1959)**.
- [13] Ding, C., Haskin, E.: “Monte Carlo Methods in Parallel Computing”, Albuquerque Resource Center, University of New Mexico, USA, **(1995)**.

## **EKLER**

Bu bölümde, modeli temsil etmek için *FORTRAN* programlama dilinde yazılan programlar aşağıdaki sıralamaya göre verilmiştir.

- Ek 1:** 500 parçacığı  $50 \times 50 \times 50$  boyutlu kutuya gelişigüzel dağıtan program
- Ek 2:** 500 parçacığı gelişigüzel hareket ettiren program
- Ek 3:** Parçacıkları  $-z$  yönünde hareket ettiren alt program
- Ek 4:**  $z=0$  için yüzeyden kopma ihtimalinin eklendiği program
- Ek 5:** Yüzeyden kopma ihtimalinin üst seviyelerde etkili olduğu program
- Ek 6:**  $z$  ekseninde homojen dağılımı sağlayan alt program

**Ek 1:** 500 parçacığı  $50 \times 50 \times 50$  boyutlu kutuya gelişigüzel dağıtan program:

```
COMMON /a/ IX(5005),IY(5005),IZ(5005)
OPEN(4,FILE='C:\ DISTRIBUTION.DAT')

A=0.123

* Kutunun boyutları:
LX=50
LY=50
LZ=50

* NP: Parçacık sayısı
NP=500

* Parçacıkları gelişigüzel yerleştiren döngü:
DO 22 IN=1, NP
CALL RANDOM (A)
IX(IN)=LX*A
CALL RANDOM (A)
IY(IN)=LY*A
CALL RANDOM (A)
IZ(IN)=LZ*A

WRITE(4,*) IN, IX(IN), IY(IN), IZ(IN)

22 CONTINUE

END
```

**Ek 2:** 500 parçacığı gelişigüzel hareket ettiren program:

```
COMMON /a/ IX(50000), IY(50000), IZ(50000), ID(55,55,55)
OPEN(10,FILE='C:\STEP0.DAT')
OPEN(11,FILE='C:\STEP200.DAT')
OPEN(12,FILE='C:\STEP400.DAT')
OPEN(13,FILE='C:\STEP600.DAT')
OPEN(14,FILE='C:\STEP800.DAT')
OPEN(15,FILE='C:\STEP1000.DAT')
```

\* *A: Gelişigüzel sayı*  
A=0.123

\* *Kutunun boyutları:*  
LX=50  
LY=50  
LZ=50

\* *NP: Parçacık sayısı*  
NP=500

\* *NM: Monte Carlo adımı sayısı*  
NM=1000

\* *ID: Komşuluk faktörü*  
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=0

\* *Parçacıkları gelişigüzel yerleştiren döngü:*  
DO 22 IN=1,NP  
CALL RANDOM (A)  
IX(IN)=LX\*A  
CALL RANDOM (A)  
IY(IN)=LY\*A

```
CALL RANDOM (A)
IZ(IN)=LZ*A
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
WRITE(10,*)IN,IX(IN),IY(IN),IZ(IN)
22 CONTINUE
```

\* *MC: Parçacıkların atacağı adım sayısı*

```
DO 800 MC=1,NM
```

```
DO 650 K=1,NP
```

```
IN=K
```

\* *Gelişigüzel sayı çağırarak hareketin yapılacağı eksenini belirleyen blok:*

```
CALL RANDOM (A)
IF (A.GE.0.666) THEN
CALL MOVEX (IN,A)
GO TO 650
ELSE IF (A.GE.0.333) THEN
CALL MOVEY (IN,A)
GOTO 650
ELSE
CALL MOVEZ (IN,A)
GO TO 650
END IF
```

```
650 CONTINUE
```

```
IF(MOD(MC,200).GT.0) GOTO 700
```

```
DO 5 K=1, NP
```

```
IF (MC.EQ.200) WRITE(11,*)IX(K),IY(K),IZ(K)
```

```
IF (MC.EQ.400) WRITE(12,*)IX(K),IY(K),IZ(K)
```

```
IF (MC.EQ.600) WRITE(13,*)IX(K),IY(K),IZ(K)
```

```

IF (MC.EQ.800) WRITE(14,*)IX(K),IY(K),IZ(K)
IF (MC.EQ.1000) WRITE(15,*)IX(K),IY(K),IZ(K)

5    CONTINUE
700  WRITE(*,*) ' MC=',MC
800  CONTINUE
      CLOSE(10)
      CLOSE(11)
      CLOSE(12)
      CLOSE(13)
      CLOSE(14)
      CLOSE(15)
      END

*    X koordinatında hareketi sağlayacak alt program:
      SUBROUTINE MOVEX (IN,A)
      COMMON /a/ IX(50000), IY(50000), IZ(50000), ID(55,55,55)
      CALL RANDOM (A)
      IF (A.LT.0.5) GOTO 210
      IF ((IX(IN).EQ.49).OR.(ID(IX(IN)+1,IY(IN),IZ(IN)).EQ.1)) THEN
      IX(IN)=IX(IN)+0
      ELSE
      IX(IN)=IX(IN)+1
      ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
      ID(IX(IN)-1,IY(IN),IZ(IN))=0
      END IF
      GOTO 220
210  CONTINUE
      IF ((IX(IN).EQ.0).OR.(ID(IX(IN)-1,IY(IN),IZ(IN)).EQ.1)) THEN
      IX(IN)=IX(IN)-0
      ELSE
      IX(IN)=IX(IN)-1

```

```

ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN)+1,IY(IN),IZ(IN))=0
END IF
220  END

*   Y koordinatında hareketi sağlayacak alt program:
SUBROUTINE MOVEY (IN,A)
COMMON /a/ IX(50000), IY(50000), IZ(50000), ID(55,55,55)
CALL RANDOM (A)
IF (A.LT.0.5) GOTO 310
IF ((IY(IN).EQ.49).OR.(ID(IX(IN),IY(IN)+1,IZ(IN)).EQ.1)) THEN
IY(IN)=IY(IN)+0
ELSE
IY(IN)=IY(IN)+1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN)-1,IZ(IN))=0
END IF
GOTO 320
310  CONTINUE
IF ((IY(IN).EQ.0).OR.(ID(IX(IN),IY(IN)-1,IZ(IN)).EQ.1)) THEN
IY(IN)=IY(IN)-0
ELSE
IY(IN)=IY(IN)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN)+1,IZ(IN))=0
END IF
320  END

*   Z koordinatında hareketi sağlayacak alt program:
SUBROUTINE MOVEZ (IN,A)
COMMON /a/ IX(50000), IY(50000), IZ(50000), ID(55,55,55)
CALL RANDOM (A)
IF (A.LT.0.5) GOTO 410

```

```

IF ((IZ(IN).EQ.49).OR.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1).EQ.1)) THEN
IZ(IN)=IZ(IN)+0
ELSE
IZ(IN)=IZ(IN)+1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1)=0
END IF
GOTO 420
410 CONTINUE
IF ((IZ(IN).EQ.0).OR.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1).EQ.1)) THEN
IZ(IN)=IZ(IN)-0
ELSE
IZ(IN)=IZ(IN)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1)=0
END IF
420 END

```

**Ek 3:** Parçacıkları -z yönünde hareket ettiren alt program:

\* *Z koordinatında hareketi sağlayacak alt program:*

```
SUBROUTINE MOVEZ (IN,A)
COMMON /a/ IX(50000), IY(50000), IZ(50000), ID(55,55,55)
CALL RANDOM (A)
```

\* *0.6: Hareketin % 60 ihtimalle – z yönünde yapılacağını belirtmektedir*

```
IF (A.LT.0.6) GOTO 410
IF ((IZ(IN).EQ.49).or.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1).EQ.1)) THEN
IZ(IN)=IZ(IN)+0
ELSE
IZ(IN)=IZ(IN)+1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1)=0
END IF
GOTO 420
```

```
410 CONTINUE
IF ((IZ(IN).EQ.0).or.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1).EQ.1)) THEN
IZ(IN)=IZ(IN)-0
ELSE
IZ(IN)=IZ(IN)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1)=0
END IF
```

```
420 END
```

**Ek 4:** z=0 için yüzeyden kopma ihtimalinin eklendiği program:

```
COMMON /a/ IX(50000), IY(50000), IZ(50000), ID(55,55,55), NPZ(10000)
```

```
OPEN(9,FILE='C:\DAGILIM.DAT')
OPEN(10,FILE='C:\STEP0.DAT')
OPEN(11,FILE='C:\STEP200.DAT')
OPEN(12,FILE='C:\STEP400.DAT')
OPEN(13,FILE='C:\STEP600.DAT')
OPEN(14,FILE='C:\STEP800.DAT')
OPEN(15,FILE='C:\STEP1000.DAT')
OPEN(16,FILE='C:\STEP1200.DAT')
OPEN(17,FILE='C:\STEP1400.DAT')
OPEN(18,FILE='C:\STEP1600.DAT')
OPEN(19,FILE='C:\STEP1800.DAT')
OPEN(20,FILE='C:\STEP2000.DAT')
```

```
* PA=exp(-Ea/kT)
* PA: Sıcaklığa ve enerjiye bağlı yüzeyden kopma ihtimali
* Ea: Aktivasyon enerjisi (Ea=1)
```

```
DO 888 PA=0.05, 0.95, 0.05
```

```
* A: Gelişigüzel sayı
```

```
A=0.123
```

```
* Kutunun boyutları:
```

```
LX=50
```

```
LY=50
```

```
LZ=50
```

```
* NP: Parçacık sayısı
```

```
NP=2000
```

```

*   NM: Monte Carlo adımı sayısı
    NM=2000

*   ID: Komşuluk faktörü
        DO 6 NX=0,49
            DO 7 NY=0,49
                DO 8 NZ=0,49
                    ID(NX,NY,NZ)=0
8                CONTINUE
7                CONTINUE
6                CONTINUE

*   NPZ: Seviyelerdeki parçacık sayısı
    DO 15 I=0,49
        NPZ(I)=0
15    CONTINUE

*   Parçacıkları gelişigüzel yerleştiren döngü:
        DO 22 IN=1,NP
            CALL RANDOM (A)
            IX(IN)=LX*A
            CALL RANDOM (A)
            IY(IN)=LY*A
            CALL RANDOM (A)
            IZ(IN)=LZ*A
            NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
            ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
            WRITE(10,*)IN,IX(IN),IY(IN),IZ(IN)
22    CONTINUE

*   MC: Parçacıkların atacağı adım sayısı
        DO 800 MC=1,NM

```

DO 650 K=1,NP

IN=K

\* *Gelişigüzel sayı çağırarak hareketin yapılacağı eksenini belirleyen blok:* CALL

RANDOM (A)

IF (A.GE.0.666) THEN

CALL MOVEX (IN,A,PA)

GO TO 650

ELSE IF (A.GE.0.333) THEN

CALL MOVEY (IN,A,PA)

GOTO 650

ELSE

CALL MOVEZ (IN,A,PA)

GO TO 650

END IF

650 CONTINUE

IF(MOD(MC,200).GT.0) GOTO 700

DO 5 K=1, NP

IF (MC.EQ.200) WRITE(11,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.400) WRITE(12,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.600) WRITE(13,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.800) WRITE(14,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.1000) WRITE(15,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.1200) WRITE(16,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.1400) WRITE(17,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.1600) WRITE(18,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.1800) WRITE(19,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.2000) WRITE(20,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

5 CONTINUE

700 WRITE(\*,\*) ' MC=',MC

800 CONTINUE

\* *Seviyelerdeki parçacık sayıları:*

WRITE(9,\*)PA

WRITE(9,\*)NPZ(0)

WRITE(9,\*)NPZ(1)

WRITE(9,\*)NPZ(2)

WRITE(9,\*)NPZ(3)

WRITE(9,\*)NPZ(4)

WRITE(9,\*)NPZ(5)

WRITE(9,\*)NPZ(6)

WRITE(9,\*)NPZ(7)

WRITE(9,\*)NPZ(8)

WRITE(9,\*)NPZ(9)

WRITE(9,\*)NPZ(10)

WRITE(9,\*)NPZ(11)

WRITE(9,\*)NPZ(12)

WRITE(9,\*)NPZ(13)

WRITE(9,\*)NPZ(14)

WRITE(9,\*)NPZ(15)

WRITE(9,\*)NPZ(16)

WRITE(9,\*)NPZ(17)

WRITE(9,\*)NPZ(18)

WRITE(9,\*)NPZ(19)

WRITE(9,\*)NPZ(20)

WRITE(9,\*)NPZ(21)

WRITE(9,\*)NPZ(22)

WRITE(9,\*)NPZ(23)

WRITE(9,\*)NPZ(24)

WRITE(9,\*)NPZ(25)

WRITE(9,\*)NPZ(26)

WRITE(9,\*)NPZ(27)  
WRITE(9,\*)NPZ(28)  
WRITE(9,\*)NPZ(29)  
WRITE(9,\*)NPZ(30)  
WRITE(9,\*)NPZ(31)  
WRITE(9,\*)NPZ(32)  
WRITE(9,\*)NPZ(33)  
WRITE(9,\*)NPZ(34)  
WRITE(9,\*)NPZ(35)  
WRITE(9,\*)NPZ(36)  
WRITE(9,\*)NPZ(37)  
WRITE(9,\*)NPZ(38)  
WRITE(9,\*)NPZ(39)  
WRITE(9,\*)NPZ(40)  
WRITE(9,\*)NPZ(41)  
WRITE(9,\*)NPZ(42)  
WRITE(9,\*)NPZ(43)  
WRITE(9,\*)NPZ(44)  
WRITE(9,\*)NPZ(45)  
WRITE(9,\*)NPZ(46)  
WRITE(9,\*)NPZ(47)  
WRITE(9,\*)NPZ(48)  
WRITE(9,\*)NPZ(49)

888 CONTINUE

CLOSE(9)  
CLOSE(10)  
CLOSE(11)  
CLOSE(12)  
CLOSE(13)  
CLOSE(14)  
CLOSE(15)

```
CLOSE(16)
CLOSE(17)
CLOSE(18)
CLOSE(19)
CLOSE(20)
END
```

\* *X koordinatındaki hareketi sağlayacak alt program:*

```
SUBROUTINE MOVEX (IN,A,PA)
COMMON /a/ IX(50000), IY(50000), IZ(50000), ID(55,55,55), NPZ(10000)
IF (IZ(IN).EQ.0) GOTO 250
240 CALL RANDOM (A)
IF (A.LT.0.5) GOTO 210
IF ((IX(IN).EQ.49).OR.(ID(IX(IN)+1,IY(IN),IZ(IN)).EQ.1)) THEN
IX(IN)=IX(IN)+0
ELSE
IX(IN)=IX(IN)+1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN)-1,IY(IN),IZ(IN))=0
END IF
GOTO 220
210 CONTINUE
IF ((IX(IN).EQ.0).OR.(ID(IX(IN)-1,IY(IN),IZ(IN)).EQ.1)) THEN
IX(IN)=IX(IN)-0
ELSE
IX(IN)=IX(IN)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN)+1,IY(IN),IZ(IN))=0
END IF
GOTO 220
250 CONTINUE
CALL RANDOM (A)
```

```

        IF (A.GT.PA) GOTO 220
        IF (PA.GT.A) GOTO 240
220   END

*      Y koordinatındaki hareketi sağlayacak alt program:
        SUBROUTINE MOVEY (IN,A,PA)
        COMMON /a/ IX(50000), IY(50000), IZ(50000), ID(55,55,55), NPZ(10000)
        IF (IZ(IN).EQ.0) GOTO 350
340   CALL RANDOM (A)
        IF (A.LT.0.5) GOTO 310
        IF ((IY(IN).EQ.49).OR.(ID(IX(IN),IY(IN)+1,IZ(IN)).EQ.1)) THEN
        IY(IN)=IY(IN)+0
        ELSE
        IY(IN)=IY(IN)+1
        ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
        ID(IX(IN),IY(IN)-1,IZ(IN))=0
        END IF
        GOTO 320
310   CONTINUE
        IF ((IY(IN).EQ.0).OR.(ID(IX(IN),IY(IN)-1,IZ(IN)).EQ.1)) THEN
        IY(IN)=IY(IN)-0
        ELSE
        IY(IN)=IY(IN)-1
        ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
        ID(IX(IN),IY(IN)+1,IZ(IN))=0
        END IF
        GOTO 320
350   CONTINUE
        CALL RANDOM (A)
        IF (A.GT.PA) GOTO 320
        IF (PA.GT.A) GOTO 340
320   END

```

```

*   Z koordinatındaki hareketi sağlayacak alt program:
SUBROUTINE MOVEZ (IN,A,PA)
COMMON /a/ IX(50000), IY(50000), IZ(50000), ID(55,55,55), NPZ(10000)
IF ((IZ(IN)).GT.0) GOTO 409
CALL RANDOM (A)
      IF((A.GT.PA).OR.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1).EQ.1)) THEN
      IZ(IN)=IZ(IN)+0
      NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+0
      ELSE
      IZ(IN)=IZ(IN)+1
      NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
      NPZ(IZ(IN)-1)=NPZ(IZ(IN)-1)-1
      ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
      ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1)=0
      END IF
GOTO 420
409  CONTINUE
CALL RANDOM (A)
IF (A.LT.0.5) GOTO 410
IF ((IZ(IN).EQ.49).OR.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1).EQ.1)) THEN
IZ(IN)=IZ(IN)+0
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+0
ELSE
IZ(IN)=IZ(IN)+1
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
NPZ(IZ(IN)-1)=NPZ(IZ(IN)-1)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1)=0
END IF
GOTO 420
410  CONTINUE
IF ((IZ(IN).EQ.0).OR.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1).EQ.1)) THEN
IZ(IN)=IZ(IN)-0

```

```
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+0
ELSE
IZ(IN)=IZ(IN)-1
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
NPZ(IZ(IN)+1)=NPZ(IZ(IN)+1)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1)=0
END IF
420  END
```

**Ek 5:** Yüzeyden kopma ihtimalinin üst seviyelerde etkili olduğu program

```
COMMON /a/ IX(50000),IY(50000),IZ(50000),ID(55,55,55),NPZ(10000)
```

```
OPEN(9,FILE='C:\DAGILIM.DAT')  
OPEN(10,FILE='C:\STEP0.DAT')  
OPEN(11,FILE='C:\STEP200.DAT')  
OPEN(12,FILE='C:\STEP400.DAT')  
OPEN(13,FILE='C:\STEP600.DAT')  
OPEN(14,FILE='C:\STEP800.DAT')  
OPEN(15,FILE='C:\STEP1000.DAT')  
OPEN(16,FILE='C:\STEP1200.DAT')  
OPEN(17,FILE='C:\STEP1400.DAT')  
OPEN(18,FILE='C:\STEP1600.DAT')  
OPEN(19,FILE='C:\STEP1800.DAT')  
OPEN(20,FILE='C:\STEP2000.DAT')
```

```
* PA=exp(-Ea/kT)  
* PA: Sıcaklığa ve enerjiye bağlı yüzeyden kopma ihtimali  
* Ea: Aktivasyon enerjisi (Ea=1)
```

```
DO 888 PA=0.01,0.95,0.01
```

```
* A: Gelişigüzel sayı  
A=0.123
```

```
* Kutunun boyutları:  
LX=50  
LY=50  
LZ=50
```

```
* NP: Parçacık sayısı  
NP=5000
```

```

*   NM: Monte Carlo adımı sayısı
    NM=2000

*   ID: komşuluk faktörü
        DO 6 NX=0,49
            DO 7 NY=0,49
                DO 8 NZ=0,49
                    ID(NX,NY,NZ)=0
8                CONTINUE
7                CONTINUE
6                CONTINUE

*   NPZ: seviyelerdeki parçacık sayısı
    DO 15 I=0,49
        NPZ(I)=0
15    CONTINUE

*   Parçacıkları gelişigüzel yerleştiren döngü::
        DO 22 IN=1,NP
            CALL RANDOM (A)
            IX(IN)=LX*A
            CALL RANDOM (A)
            IY(IN)=LY*A
            CALL RANDOM (A)
            IZ(IN)=LZ*A
            NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
            ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
            WRITE(10,*)IN,IX(IN),IY(IN),IZ(IN)
22    CONTINUE

*   MC: Parçacıkların atacağı adım sayısı
        DO 800 MC=1,NM

```

DO 650 K=1,NP

IN=K

\* *Gelişigüzel sayı çağırarak hareketin yapılacağı eksenini belirleyen blok:*

CALL RANDOM (A)

IF (A.GE.0.666) THEN

CALL MOVEX (IN,A,PA)

GO TO 650

ELSE IF (A.GE.0.333) THEN

CALL MOVEY (IN,A,PA)

GOTO 650

ELSE

CALL MOVEZ (IN,A,PA)

GO TO 650

END IF

650 CONTINUE

IF(MOD(MC,200).GT.0) GOTO 700

DO 5 K=1, NP

IF (MC.EQ.200) WRITE(11,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.400) WRITE(12,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.600) WRITE(13,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.800) WRITE(14,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.1000) WRITE(15,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.1200) WRITE(16,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.1400) WRITE(17,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.1600) WRITE(18,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.1800) WRITE(19,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

IF (MC.EQ.2000) WRITE(20,\*)IX(K),IY(K),IZ(K)

5 CONTINUE

700 WRITE(\*,\*) ' MC=',MC

800 CONTINUE

\* *Seviyelerdeki parçacık sayıları:*

WRITE(9,\*)PA

WRITE(9,\*)NPZ(0)

WRITE(9,\*)NPZ(1)

WRITE(9,\*)NPZ(2)

WRITE(9,\*)NPZ(3)

WRITE(9,\*)NPZ(4)

WRITE(9,\*)NPZ(5)

WRITE(9,\*)NPZ(6)

WRITE(9,\*)NPZ(7)

WRITE(9,\*)NPZ(8)

WRITE(9,\*)NPZ(9)

WRITE(9,\*)NPZ(10)

WRITE(9,\*)NPZ(11)

WRITE(9,\*)NPZ(12)

WRITE(9,\*)NPZ(13)

WRITE(9,\*)NPZ(14)

WRITE(9,\*)NPZ(15)

WRITE(9,\*)NPZ(16)

WRITE(9,\*)NPZ(17)

WRITE(9,\*)NPZ(18)

WRITE(9,\*)NPZ(19)

WRITE(9,\*)NPZ(20)

WRITE(9,\*)NPZ(21)

WRITE(9,\*)NPZ(22)

WRITE(9,\*)NPZ(23)

WRITE(9,\*)NPZ(24)

WRITE(9,\*)NPZ(25)

WRITE(9,\*)NPZ(26)

WRITE(9,\*)NPZ(27)  
WRITE(9,\*)NPZ(28)  
WRITE(9,\*)NPZ(29)  
WRITE(9,\*)NPZ(30)  
WRITE(9,\*)NPZ(31)  
WRITE(9,\*)NPZ(32)  
WRITE(9,\*)NPZ(33)  
WRITE(9,\*)NPZ(34)  
WRITE(9,\*)NPZ(35)  
WRITE(9,\*)NPZ(36)  
WRITE(9,\*)NPZ(37)  
WRITE(9,\*)NPZ(38)  
WRITE(9,\*)NPZ(39)  
WRITE(9,\*)NPZ(40)  
WRITE(9,\*)NPZ(41)  
WRITE(9,\*)NPZ(42)  
WRITE(9,\*)NPZ(43)  
WRITE(9,\*)NPZ(44)  
WRITE(9,\*)NPZ(45)  
WRITE(9,\*)NPZ(46)  
WRITE(9,\*)NPZ(47)  
WRITE(9,\*)NPZ(48)  
WRITE(9,\*)NPZ(49)

888 CONTINUE

CLOSE(9)  
CLOSE(10)  
CLOSE(11)  
CLOSE(12)  
CLOSE(13)  
CLOSE(14)  
CLOSE(15)

```
CLOSE(16)
CLOSE(17)
CLOSE(18)
CLOSE(19)
CLOSE(20)
```

```
END
```

\* *X koordinatında hareketi sağlayacak alt program:*

```
SUBROUTINE MOVEX(IN,A,PA)
COMMON /a/ IX(50000),IY(50000),IZ(50000),ID(55,55,55),NPZ(10000)
CALL RANDOM (A)
IF (A.LT.0.5) GOTO 211
IF ((IX(IN).EQ.49).OR.(ID(IX(IN)+1,IY(IN),IZ(IN)).EQ.1)) GOTO 220
    IF (IZ(IN).EQ.0) GOTO 230
    IF (IZ(IN).LT.5) GOTO 231
```

\*  *$4 < x < 50$  durumunda  $x$ 'i 1 arttıracak blok:*

```
IX(IN)=IX(IN)+1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN)-1,IY(IN),IZ(IN))=0
GOTO 220
```

\*  *$x=0$  durumunda  $x$ 'i 1 arttıracak blok:*

```
230 CONTINUE
CALL RANDOM (A)
IF (PA.LT.A) THEN
IX(IN)=IX(IN)+0
ELSE
IX(IN)=IX(IN)+1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN)-1,IY(IN),IZ(IN))=0
```

```
END IF
GOTO 220
```

\*  $0 < x < 5$  durumunda  $x$ 'i 1 arttıracak blok:

```
231 CONTINUE
CALL RANDOM (A)
IF ((PA.LT.A).AND.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1).EQ.1)) THEN
IX(IN)=IX(IN)+0
ELSE
IX(IN)=IX(IN)+1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN)-1,IY(IN),IZ(IN))=0
END IF
GOTO 220
```

```
211 CONTINUE
IF ((IX(IN).EQ.0).OR.(ID(IX(IN)-1,IY(IN),IZ(IN)).EQ.1)) GOTO 220
IF (IZ(IN).EQ.0) GOTO 240
IF (IZ(IN).LT.5) GOTO 241
```

\*  $4 < x < 50$  durumunda  $x$ 'i 1 azaltacak blok:

```
IX(IN)=IX(IN)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN)+1,IY(IN),IZ(IN))=0
GOTO 220
```

\*  $x=0$  durumunda  $x$ 'i 1 azaltacak blok:

```
240 CONTINUE
CALL RANDOM (A)
IF (PA.LT.A) THEN
IX(IN)=IX(IN)-0
ELSE
IX(IN)=IX(IN)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
```

```

ID(IX(IN)+1,IY(IN),IZ(IN))=0
END IF
GOTO 220

*   0<x<5 durumunda x'i 1 azaltacak blok:
241 CONTINUE
CALL RANDOM (A)
IF ((PA.LT.A).AND.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1).EQ.1)) THEN
IX(IN)=IX(IN)-0
ELSE
IX(IN)=IX(IN)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN)+1,IY(IN),IZ(IN))=0
END IF
GOTO 220
220 END

*   Y koordinatında hareketi sağlayacak alt program:
SUBROUTINE MOVEY(IN,A,PA)
COMMON /a/ IX(50000),IY(50000),IZ(50000),ID(55,55,55),NPZ(10000)

CALL RANDOM (A)
IF (A.LT.0.5) GOTO 311
IF ((IY(IN).EQ.49).OR.(ID(IX(IN),IY(IN)+1,IZ(IN)).EQ.1)) GOTO 320
IF (IZ(IN).EQ.0) GOTO 330
IF (IZ(IN).LT.5) GOTO 331

*   4<y<50 durumunda y'yi 1 arttıracak blok:
IY(IN)=IY(IN)+1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN)-1,IZ(IN))=0
GOTO 320

```

\* *y=0 durumunda y'yi 1 arttıracak blok:*

```
330 CONTINUE
    CALL RANDOM (A)
    IF (PA.LT.A) THEN
        IY(IN)=IY(IN)+0
    ELSE
        IY(IN)=IY(IN)+1
        ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
        ID(IX(IN),IY(IN)-1,IZ(IN))=0
    END IF
    GOTO 320
```

\* *0<y<5 durumunda y'yi 1 arttıracak blok:*

```
331 CONTINUE
    CALL RANDOM (A)
    IF ((PA.LT.A).AND.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1).EQ.1)) THEN
        IY(IN)=IY(IN)+0
    ELSE
        IY(IN)=IY(IN)+1
        ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
        ID(IX(IN),IY(IN)-1,IZ(IN))=0
    END IF
    GOTO 320
```

```
311 CONTINUE
    IF ((IY(IN).EQ.0).OR.(ID(IX(IN),IY(IN)-1,IZ(IN)).EQ.1)) GOTO 320
    IF (IZ(IN).EQ.0) GOTO 340
    IF (IZ(IN).LT.5) GOTO 341
```

\* *4<y<50 durumunda y'yi 1 azaltacak blok:*

```
IY(IN)=IY(IN)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN)+1,IZ(IN))=0
GOTO 320
```

\* *y=0 durumunda y'yi 1 azaltacak blok:*

```
340 CONTINUE
      CALL RANDOM (A)
      IF (PA.LT.A) THEN
        IY(IN)=IY(IN)-0
      ELSE
        IY(IN)=IY(IN)-1
        ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
        ID(IX(IN),IY(IN)+1,IZ(IN))=0
      END IF
      GOTO 320
```

\* *0<y<5 durumunda y'yi 1 azaltacak blok:*

```
341 CONTINUE
      CALL RANDOM (A)
      IF ((PA.LT.A).AND.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1).EQ.1)) THEN
        IY(IN)=IY(IN)-0
      ELSE
        IY(IN)=IY(IN)-1
        ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
        ID(IX(IN),IY(IN)+1,IZ(IN))=0
      END IF
      GOTO 320
320 END
```

\* *Z koordinatında hareketi sağlayacak alt program:*

```
SUBROUTINE MOVEZ(IN,A,PA)
COMMON /a/ IX(50000),IY(50000),IZ(50000),ID(55,55,55),NPZ(10000)
      IF ((IZ(IN)).EQ.0) GOTO 401
      IF ((IZ(IN)).LT.5) GOTO 411
      IF ((IZ(IN)).GE.5) GOTO 407
```

\*  $z=0$  olması durumunda uygulanacak blok:

```
401 CONTINUE
      CALL RANDOM (A)
      IF ((A.GT.PA).OR.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1).EQ.1)) THEN
      IZ(IN)=IZ(IN)+0
      NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+0
      ELSE
      IZ(IN)=IZ(IN)+1
      NPZ(1)=NPZ(1)+1
      NPZ(0)=NPZ(0)-1
      ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
      ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1)=0
      END IF
      GOTO 420
```

\*  $0 < z < 5$  olması durumunda uygulanacak blok:

```
411 CONTINUE
      CALL RANDOM (A)
      IF (A.LT.0.5) GOTO 430
      IF ((ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1).EQ.1)) GOTO 420
      IF ((ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1).EQ.1)) GOTO 421
      IZ(IN)=IZ(IN)+1
      NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
      NPZ(IZ(IN)-1)=NPZ(IZ(IN)-1)-1
      ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
      ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1)=0
      GOTO 420
421 CONTINUE
      CALL RANDOM (A)
      IF(PA.LT.A) THEN
      IZ(IN)=IZ(IN)+0
      ELSE
      IZ(IN)=IZ(IN)+1
```

```

NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
NPZ(IZ(IN)-1)=NPZ(IZ(IN)-1)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1)=0
END IF
GOTO 420

```

```

430 CONTINUE
IF ((ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1).EQ.1)) GOTO 420
IZ(IN)=IZ(IN)-1
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
NPZ(IZ(IN)+1)=NPZ(IZ(IN)+1)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1)=0
GOTO 420

```

\* *4 < z < 50 olması durumunda uygulanacak blok:*

```

407 CONTINUE
CALL RANDOM (A)
IF (A.LT.0.5) GOTO 410
IF ((IZ(IN).EQ.49).OR.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1).EQ.1)) THEN
IZ(IN)=IZ(IN)+0
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+0
ELSE
IZ(IN)=IZ(IN)+1
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
NPZ(IZ(IN)-1)=NPZ(IZ(IN)-1)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1)=0
END IF
GOTO 420
410 CONTINUE

```

```
IF ((IZ(IN).EQ.0).OR.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1).EQ.1)) THEN
IZ(IN)=IZ(IN)-0
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+0
ELSE
IZ(IN)=IZ(IN)-1
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
NPZ(IZ(IN)+1)=NPZ(IZ(IN)+1)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1)=0
END IF
420  END
```

**Ek 6:** z ekseninde homojen dağılımı sağlayan alt program:

\* *Z koordinatında hareketi sağlayacak alt program:*

```
SUBROUTINE MOVEZ(IN,A,PA)
COMMON /a/ IX(50000),IY(50000),IZ(50000),ID(55,55,55),NPZ(10000)
      IF ((IZ(IN)).EQ.0) GOTO 401
      IF ((IZ(IN)).LT.5) GOTO 411
      IF ((IZ(IN)).GE.5) GOTO 407
```

\* *z=0 olması durumunda uygulanacak blok:*

```
401 CONTINUE
      CALL RANDOM (A)
      IF ((A.GT.PA).OR.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1).EQ.1)) THEN
      IZ(IN)=IZ(IN)+0
      NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+0
      ELSE
      IZ(IN)=IZ(IN)+1
      NPZ(1)=NPZ(1)+1
      NPZ(0)=NPZ(0)-1
      ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
      ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1)=0
      END IF
      GOTO 420
```

\* *0<z<5 olması durumunda uygulanacak blok:*

```
411 CONTINUE
      CALL RANDOM (A)
      IF (A.LT.0.5) GOTO 430
      IF ((ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1).EQ.1)) GOTO 420
      IF ((ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1).EQ.1)) GOTO 421
      IZ(IN)=IZ(IN)+1
      NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
      NPZ(IZ(IN)-1)=NPZ(IZ(IN)-1)-1
```

```

ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1)=0
GOTO 420
421 CONTINUE
CALL RANDOM (A)
IF(PA.LT.A) THEN
IZ(IN)=IZ(IN)+0
ELSE
IZ(IN)=IZ(IN)+1
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
NPZ(IZ(IN)-1)=NPZ(IZ(IN)-1)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1)=0
END IF
GOTO 420

430 CONTINUE
IF ((ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1).EQ.1)) GOTO 420
IZ(IN)=IZ(IN)-1
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
NPZ(IZ(IN)+1)=NPZ(IZ(IN)+1)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1)=0
GOTO 420

* 4 < z < 50 olması durumunda uygulanacak blok:
407 CONTINUE
IF(NPZ(IZ(IN)-1).EQ.NPZ(IZ(IN)+1)) GOTO 408
IF(NPZ(IZ(IN)-1).GT.NPZ(IZ(IN)+1)) GOTO 409
IF ((IZ(IN).EQ.0).or.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1).EQ.1)) THEN
IZ(IN)=IZ(IN)-0
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))-0
ELSE

```

```

IZ(IN)=IZ(IN)-1
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
NPZ(IZ(IN)+1)=NPZ(IZ(IN)+1)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1)=0
END IF
GOTO 420

```

```

409 CONTINUE
IF ((IZ(IN).EQ.49).OR.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1).EQ.1)) THEN
IZ(IN)=IZ(IN)+0
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+0
ELSE
IZ(IN)=IZ(IN)+1
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
NPZ(IZ(IN)-1)=NPZ(IZ(IN)-1)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1)=0
END IF
GO TO 420

```

```

408 CONTINUE
CALL RANDOM (A)
IF (A.LT.0.5) GOTO 410
IF ((IZ(IN).EQ.49).OR.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1).EQ.1)) THEN
IZ(IN)=IZ(IN)+0
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+0
ELSE
IZ(IN)=IZ(IN)+1
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
NPZ(IZ(IN)-1)=NPZ(IZ(IN)-1)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1)=0

```

```

END IF
GOTO 420

410 CONTINUE
IF ((IZ(IN).EQ.0).OR.(ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)-1).EQ.1)) THEN
IZ(IN)=IZ(IN)-0
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))-0
ELSE
IZ(IN)=IZ(IN)-1
NPZ(IZ(IN))=NPZ(IZ(IN))+1
NPZ(IZ(IN)+1)=NPZ(IZ(IN)+1)-1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN))=1
ID(IX(IN),IY(IN),IZ(IN)+1)=0
END IF
GOTO 420

420 END

```

## ÖZGEÇMİŞ

28 Temmuz 1983 yılında İstanbul'da dünyaya geldim. İlköğretimimi Büyükkada İlköğretim Okulu'nda ve ortaöğretimimi de Haydarpaşa Lisesi'nde tamamladım. Lise yıllarında ilginç bir merak duygusu ile başlayan fizik bilimine ilgim üniversitede bu bölümü seçmeme sebep oldu. Trakya Üniversitesi'nde başladığım lisans eğitimini tamamladıktan sonra 2007 yılında Marmara Üniversitesi'nde yüksek lisans eğitimime başladım.