

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Шувалов Глеб Михайлович

**Влияние поверхностных напряжений на образование  
топологических дефектов в слоистых структурах**

Научная специальность 1.1.8. Механика деформируемого твердого тела

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
кандидат физико-математических наук  
Костырко С. А.

Санкт-Петербург

2021

## Оглавление

<b>Введение</b> . . . . .	4
<b>Глава 1 Морфологическая устойчивость поверхности</b>	
<b>многослойного плёночного покрытия</b> . . . . .	18
1.1 Постановка задачи . . . . .	18
1.2 Химический потенциал и скорость изменения границы твёрдого тела . . . . .	21
1.3 Линейный анализ эволюции рельефа свободной поверхности многослойного плёночного покрытия . . . . .	24
1.4 Численные результаты . . . . .	34
1.5 Выводы . . . . .	38
<b>Глава 2 Морфологическая устойчивость</b>	
<b>наноструктурированной поверхности твёрдого тела</b> . . . . .	40
2.1 Постановка задачи . . . . .	40
2.2 Линейный анализ эволюции рельефа свободной поверхности твёрдого тела . . . . .	45
2.3 Численные результаты . . . . .	49
2.4 Выводы . . . . .	54
<b>Глава 3 Морфологическая устойчивость поверхности</b>	
<b>ультратонкого плёночного покрытия</b> . . . . .	56
3.1 Постановка задачи . . . . .	56
3.2 Линейный анализ эволюции рельефа свободной поверхности плёнки . . . . .	59
3.3 Численные результаты . . . . .	66
3.4 Выводы . . . . .	73
<b>Глава 4 Морфологическая устойчивость</b>	
<b>наноструктурированной границы соединения двух материалов</b> . . . . .	75

4.1	Постановка задачи . . . . .	75
4.2	Линейный анализ эволюции рельефа границы соединения материалов . . . . .	79
4.3	Численные результаты . . . . .	83
4.4	Выводы . . . . .	88
	<b>Заключение . . . . .</b>	<b>90</b>
	<b>Список литературы . . . . .</b>	<b>93</b>

## Введение

Одной из ключевых задач в области материаловедения является изготовление материалов с улучшенными свойствами. При этом большое внимание уделяется изучению тонкоплёночных покрытий, поскольку серьёзные успехи в разработке и исследовании таких материалов стали ключом современного технологического прогресса [55]. Плёночные покрытия используются, например, при создании микроэлектронных устройств, микроэлектромеханических систем, оптических покрытий, декоративных деталей и упрочняющих покрытий для инструментов [116]. Однако, несмотря на значительный успех применения таких структур, проблема разрушения плёнок, используемых при создании устройств микроэлектронной промышленности, остаётся актуальной.

Наличие остаточных напряжений в плёнках, нанесённых на подложки, и влияние напряжённого состояния на расслаивание и растрескивание было обнаружено ещё на заре их использования. Механические повреждения изделий часто являются результатом хрупкого разрушения или пластической деформации, вызванных поверхностными дефектами и неоднородностями, которые образуются в процессе производства и эксплуатации устройств. Таким образом, технология производства микро- и наноразмерных устройств требует, чтобы наличие дефектов в них было сведено к минимуму, иначе их рабочие характеристики будут неудовлетворительными [55].

Один из основных процессов, ведущих к формированию дефектов в тонкоплёночных покрытиях, связан с морфологической неустойчивостью, которая приводит к шероховатости поверхности плёнки вследствие диффузионных процессов во время выращивания или отжига плёнки [15; 16], а также при других фазовых изменениях [117; 118]. Кроме того, из-за рассогласования параметров кристаллических решёток материалов, в плёночном покрытии возникают достаточно большие напряжения несоответствия, которые могут достигать 1–2,5 ГПа [57]. Один из механизмов их релаксации связан с возникновением дислокаций вблизи раздела «плёнка–подложка» [24]. Однако, существуют и другие механизмы: например, перераспределение атомов свободной поверхности либо межфазной границы посредством диффузионных процессов. В отли-

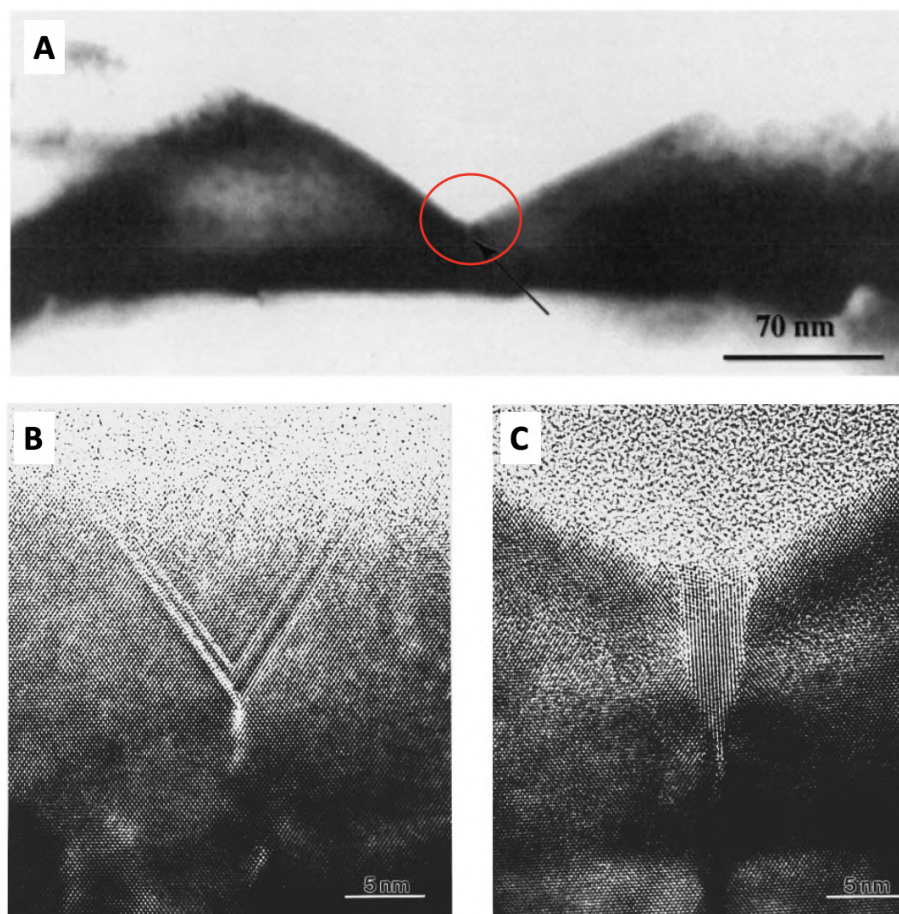


Рисунок 1 — ПЭМ–изображения поперечного сечения плёнки  $Si_{0.78}Ge_{0.22}$  толщиной 50 нм (А), V–образный дефект (В), клиновидный дефект (С) [57; 113]

чие от макромасштабных материалов, в тонкоплёночных покрытиях — структурах с очень малыми линейными размерами, высокими напряжениями и температурами — диффузионные процессы оказывают существенное влияние на эволюцию поверхности системы [55]. Действие диффузии заключается в перемещении поверхностных атомов, молекул и кластеров, что может приводить к изменению рельефа поверхности. Шероховатость поверхности и напряжения несоответствия приводят к возникновению концентрации напряжений, из-за чего во впадинах могут образовываться микротрещины. На Рис. 1 представлено полученное методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) изображение плёночного покрытия [57; 113], демонстрирующее зарождение дефектов.

Необходимо отметить, что существуют и положительные стороны волнообразования поверхности твёрдых тел. Шероховатость, возникающая на поверхностях и границах наноструктур, является фундаментальной в ряде при-

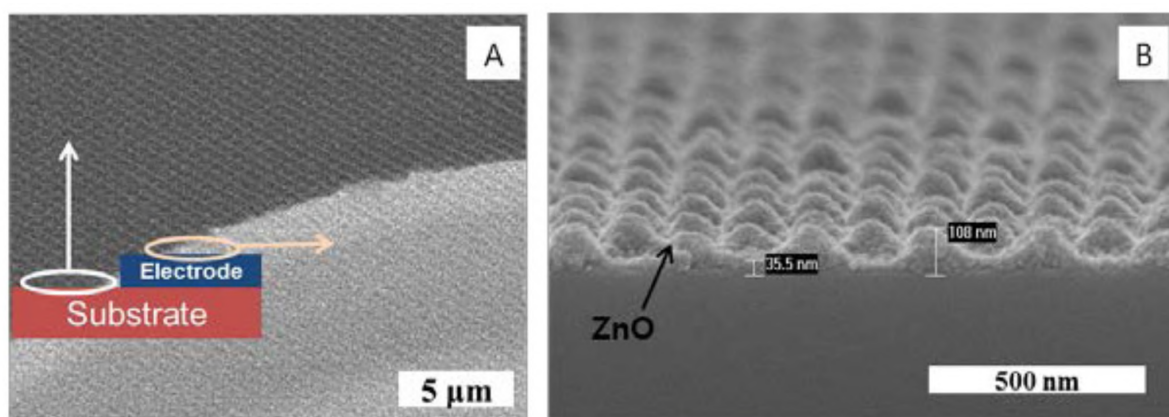


Рисунок 2 — СЭМ–изображение наноструктур  $ZnO$ , изготовленных на неровной поверхности светодиода, включая металлический электрод (А); рельеф поверхности плёнки  $ZnO$  на подложке  $In_2O_5Sn$  (В) [87]

кладных задач. Так, например, рельеф поверхности оказывает существенное влияние на антибликовые свойства оптических устройств [77]. Формирование рельефа поверхности может быть использовано при производстве квантовых точек [29; 57], обладающих уникальными электрическими и оптическими свойствами. Данные структуры являются основой для разработки множества новых микроэлектронных устройств, таких как одноэлектронные транзисторы, квантовые полупроводниковые лазеры, светодиоды и фотоэлектрические элементы [43] (на Рис. 2 представлено полученное методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) изображение гофрированной поверхности покрытия светодиода, обеспечивающей улучшенный вывод света). При изготовлении гибкой электроники посредством специальных методов формируют определённый рельеф на поверхности основания, для улучшения сцепления компонентов схем [97; 144]. Возможность управлять ростом рельефа поверхности позволяет создавать гидрофобные покрытия, получившие сегодня широкое применение в машиностроении и строительстве [121]. При производстве биоматериалов необходимо учитывать, что микрорельеф поверхности играет важную роль в определении клеточной адгезии, влияя таким образом на биосовместимость материалов. В настоящее время особый интерес представляют также имплантационные покрытия, которые за счёт заданной специальными методами шероховатости позитивно сказываются на прикреплении и дальнейшем нарастании клеток [120]. Таким образом, проблема самоорганизации поверхности твёрдых

тел и плёночных покрытий представляет как практический, так и фундаментальный интерес.

Существует два основных подхода для описания термодинамики поверхностных явлений: диффузный интерфейс и «резкая» граница. Идея о том, что межфазный слой имеет ненулевую толщину, т.е. является диффузным, используется в теории неравновесных фазовых переходов Кана–Хилларда. Границы промежуточной фазы задают в областях, в которых плотность каждой среды совпадает с плотностью определённой на большом удалении от границы раздела. Уравнения Кана–Хилларда используются при моделировании различных процессов: спиnodального распада [36;102], кристаллизации [98], роста и укрупнения зёрен [42;145]. Кроме того, теория Кана–Хилларда нашла применение в медицине при моделировании роста опухоли [79;146], а также в графике при восстановлении повреждённых бинарных изображений [35;136]. Также другие применения модели Кана–Хилларда представлены в [86]. Однако более простой подход следует из термодинамики поверхности Гиббса [58], который представил границу раздела как слой с нулевой толщиной, т.е. как «резкую» границу. Маллинз и Секерка с использованием термодинамического подхода Гиббса исследовали феномен морфологической неустойчивости поверхностей твёрдых тел под действием поверхностной диффузии [107;108;124]. В их работах рассматривалось искривление свободных и межфазных поверхностей, связанное с изменением химического потенциала вдоль них во время роста моно- и поликристаллов. При этом градиент химического потенциала, вызывающий массоперенос, был связан с кривизной свободной/межфазной поверхности. Модель морфологической неустойчивости Маллинза–Секерки нашла применение в различных областях науки. В работах [112;148] был предложен подход для описания процесса проникновения расплавленного железа (ядра Земли) в мантию, приводящего к аномальным геофизическим явлениям. Исследовалось разрушение эритроцитов вследствие механического взаимодействия с растущими кристаллами льда при замораживании [80]. Аналогично механизму морфологической неустойчивости Маллинза–Секерки, в исследовании [119] предложена модель для описания неустойчивости эпителиальной ткани при росте опухоли. Также были предприняты попытки связать механизм роста ветвей деревьев с формированием сложных структур при росте кристаллов [53]. Следует отметить,

что результаты, полученные с использованием модели диффузной и «резкой» границы раздела, хорошо согласуются, когда толщина поверхностного слоя в модели диффузной границы стремится к нулю [99; 137].

Морфологическая неустойчивость в твёрдых телах может возникать не только в процессе фазового превращения. Используя модель «резкой» границы раздела, Азаро и Тиллер [30] обнаружили, что поверхность твёрдого тела, подверженного одноосному нагружению, неустойчива по отношению к диффузионным возмущениям с длинами волн, превышающими некоторое критическое значение. При этом поток атомов считался пропорциональным градиенту химического потенциала вдоль поверхности. Аналогичный результат был позже независимо получен Гринфельдом [69] и Сроловицем [133]. Некоторые теоретические результаты относительно упругой энергии деформации, вызывающей морфологическую неустойчивость поверхности тела, были подтверждены экспериментально. В работе Тории и Балибар [139] была проведена серия экспериментов с негидростатически напряжённым кристаллом гелия. Они обнаружили, что при напряжениях, превышающих некоторое критическое значение, на поверхности кристалла образуются большие канавки. Аналогичное наблюдение было сделано Беррехаром [32], который показал, что при продольных напряжениях, действующих в твёрдом теле с плёночным покрытием, на поверхности плёнки образуются канавки или квазипериодические трещины. Эксперименты также свидетельствуют о том, что наряду со слабой волнистостью [147], возможно образование острых выступов и впадин [83], а в некоторых случаях плёнка может распадаться на островки [50] (Рис. 3 демонстрирует образование островков при длительном отжиге [57; 113]). Другие результаты экспериментальных исследований, посвящённых формированию рельефа поверхности тонкоплёночных покрытий, могут быть найдены в работах Панина, Шугурова, Бетехтина и др. [7; 33; 115].

В оригинальной модели Азаро–Тиллера–Гринфельда (АТГ) градиент химического потенциала был связан с изменением кривизны и упругой энергии деформации вдоль искривлённой поверхности. Однако, существуют и другие факторы, влияющие на эволюцию формы свободных/межфазных границ в твёрдых телах. Морфологическая неустойчивость поверхности, вызванная электростатическими силами, исследовалась в работах [39; 47; 70]. В



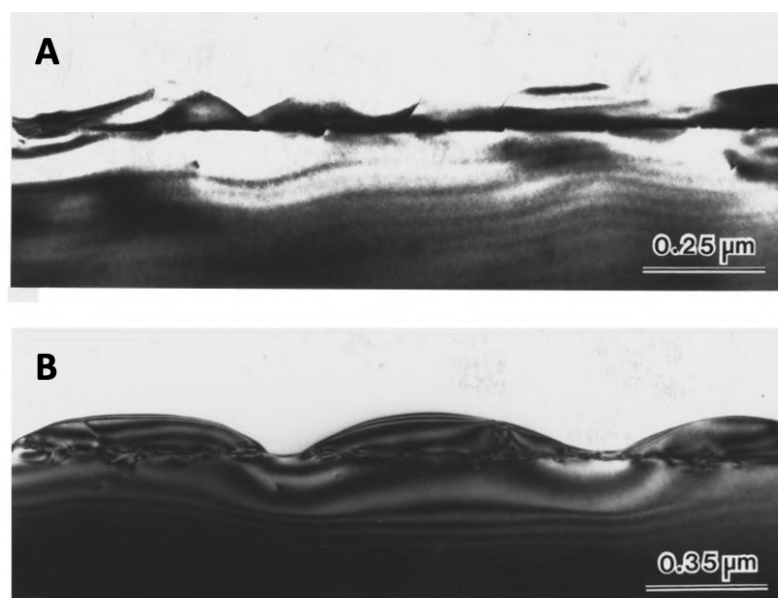


Рисунок 3 — ПЭМ-изображения поперечного сечения плёнки  $Si_{0,78}Ge_{0,22}$  толщиной 50 нм после отжига при 800 °С в течение 20 минут (А) и в течение 1 часа (В) [57; 113]

[59; 60; 88] была разработана теоретическая модель, описывающая морфологическую неустойчивость границы соединения двух материалов при совместном действии электрического тока и механических напряжений, возникающих из-за искривления межфазной границы. Также исследовалось влияние смачивающего слоя на морфологическую неустойчивость плёночного покрытия [123]. В работах [5; 8; 11; 114; 129] помимо массопереноса вдоль поверхности учитывалось влияние объёмной диффузии, связанной с капиллярным эффектом, роль которой возрастает при высоких температурах.

На сегодняшний день разработано множество подходов, расширяющих АТГ-модель для описания эволюции рельефа свободных/межфазных поверхностей в твёрдых телах с пустотами и микроканалами, неоднородностями цилиндрической и сферической формы, гетерогенными системами ядро-оболочка, моно- и многослойными плёночными покрытиями [28; 40; 41; 49; 54; 56; 85; 130]. Неустойчивость когерентных границ соединения материалов обсуждалась в [25–27; 68; 84]. Обзор других исследований по этой тематике представлен в [71]. Однако, в большинстве перечисленных выше работ влиянием поверхностной и межфазной упругости пренебрегалось, так как считалось, что оно мало по сравнению с объёмным упругим поведением. Тем не менее, в наноструктурированных материалах отношение поверхностности к объёму увеличивает

ся, в связи с чем возрастает влияние поверхностных и межфазных напряжений [11; 37; 52; 65; 89; 95; 109; 110].

Исследования в области поверхностной и межфазной упругости привлекли значительное внимание в последние годы из-за растущего числа инженерных приложений, связанных с наноразмерными структурами, такими как топологические элементы интегральных схем, квантовые точки, пористые полупроводники. Для изучения влияния свободных и межфазных поверхностей в твёрдых телах разработан ряд математических подходов.

Херринг и Шаттлворт установили явную связь между поверхностным напряжением и поверхностной энергией, при этом разность величин этих характеристик равна изменению поверхностной энергии, связанному с упругой деформацией поверхности. В ряде работ [1; 4; 9; 38] предполагалось, что такие изменения очень малы, и поверхностное напряжение приравнивалось к поверхностной энергии. Для учёта упругого деформирования свободных и межфазных поверхностей, Гёртин и Мёрдок [73; 74] предложили моделировать поверхность твёрдого тела как упругую мембрану, идеально связанную с объёмной фазой. При этом в качестве поверхностных напряжений принимались напряжения, действующие в мембране. Результаты, полученные в [105] на основе непрерывной модели, включающей определяющие соотношения Гёртина–Мёрдока, сравнивались с результатами молекулярного моделирования. При этом было показано, что оба подхода хорошо согласуются. Позже модель Гёртина–Мёрдока была расширена Штегманом и Огданом, которые учли влияние жёсткости поверхности на изгиб [134; 135]. При решении задачи о плоской деформации гетерогенной структуры Бенвенисте и Милох рассматривали межфазную область как тонкий изогнутый упругий слой, свойства которого отличаются от основных материалов [31]. Также они показали, что при уменьшении толщины межфазного слоя их подход даёт те же результаты, что и при использовании моделей Гёртина–Мёрдока и Штегманна–Огдена. Другие подходы для учёта влияния поверхностной и межфазной упругости можно найти в [38; 48; 101; 128]. Однако, в силу своей простоты, модель Гёртина–Мёрдока остаётся одной из наиболее широко применяемых моделей, описывающих влияние поверхности на общее поведение твёрдого тела.

Так, модель Гёртина–Мёрдока успешно применяется для изучения влияния поверхностной/межфазной упругости на механические свойства наноразмерных твёрдых тел и наноструктурированных материалов [23; 34; 45; 61; 63; 66; 127]. Обзор исследований по этой теме представлен в [51; 81; 82; 106; 143]. В [72; 75; 76; 103] были разработаны теоретические подходы для описания перестройки свободных и межфазных поверхностей твёрдого тела, при этом рассматривалось совместное действие диффузии и упругое взаимодействие между объёмными фазами и свободными/межфазными поверхностями.

В данной работе также рассматривается перестройка свободных и межфазных поверхностей, однако в отличие от вышеперечисленных работ, здесь проводится анализ морфологической устойчивости на основе модели Азаро–Тиллера–Гринфельда. При этом с использованием соотношений Гёртина–Мёрдока будет учитываться изменение поверхностной/межфазной энергии, связанное с деформацией материалов. Это позволит проанализировать, помимо других параметров, влияние упругих постоянных, характеризующих механическое поведение свободных/межфазных поверхностей.

### **Актуальность темы**

Экспериментальные данные свидетельствуют от том, что ещё на стадии изготовления плёночных покрытий на их свободных и межфазных поверхностях могут образовываться шероховатости, эволюционирующие при дальнейшей эксплуатации устройств, что негативно сказывается на сроках службы приборов. Таким образом, исследование поверхностей раздела двух материалов и свободных поверхностей слоистых структур является важной технологической задачей. Стоит отметить, что в большинстве теоретических работ, направленных на изучение процесса формирования поверхностных структур в твёрдых телах и слоистых структурах, влиянием поверхностной упругости пренебрегали, поскольку оно считалось относительно малым по сравнению с объёмным упругим поведением. В то же время многочисленные экспериментальные и теоретические результаты показывают, что влияние поверхностных напряжений становится существенным в механике наноразмерных материалов.

### **Цель работы и задачи**

Основная цель исследования — на основе соотношений термодинамики и теории упругости разработать и проанализировать математические модели

морфологической неустойчивости свободных и межфазных поверхностей твёрдых тел и плёночных покрытий.

В качестве основных задач можно выделить следующие:

- Вывести эволюционные уравнения, описывающие кинетику развития рельефа свободной поверхности твёрдого тела и плёночного покрытия, а также границы соединения материалов при диффузионном массопереносе вдоль рассматриваемых поверхностей.
- Получить условия термодинамической устойчивости поверхности рассматриваемых систем и определить соответствующие им критические значения размера топологических дефектов.
- Исследовать влияние физических и геометрических параметров задачи на рост рельефа свободных и межфазных поверхностей.

#### **Основные положения, выносимые на защиту**

- Модель морфологической неустойчивости поверхности многослойного плёночного покрытия при поверхностной диффузии с учётом постоянных поверхностных напряжений.
- Модель морфологической неустойчивости наноструктурированной поверхности твёрдого тела при поверхностной диффузии с учётом поверхностной упругости.
- Модель морфологической неустойчивости поверхности ультратонкого плёночного покрытия при поверхностной диффузии с учётом поверхностной и межфазной упругости.
- Модель морфологической неустойчивости наноструктурированной границы соединения двух материалов при поверхностной диффузии с учётом межфазной упругости.

#### **Методы исследования**

Предлагаемые методы и подходы к изучению влияния поверхностного напряжения на образование поверхностных дефектов твёрдых тел и тонкоплёночных покрытий связаны с построением аналитического решения сопряжённой задачи механики и термодинамики. В данном проекте учитывается влияние поверхностной упругости на основе соотношений Гёртина – Мёрдока. Таким образом, разработаны новые математические модели, описывающие процесс эволюции свободной поверхности твёрдых тел, плёночных покрытий и границы

соединения материалов. При выводе дифференциального уравнения изменения рельефа поверхности используется термодинамический подход Гиббса, теория поверхностной и объёмной упругости, метод возмущений, математический аппарат теории функций комплексного переменного и дифференциальных уравнений. Численные результаты получены в программном комплексе Maple. Для визуализации результатов использовалась библиотека Matplotlib языка Python.

### **Научная новизна**

- Впервые при анализе термодинамической неустойчивости свободной поверхности плёночного покрытия и границы раздела двух материалов учтено влияние упругих свойств свободных и межфазных поверхностей.
- Исследовано влияние поверхностной диффузии на эволюцию наноструктурированной поверхности твёрдого тела.
- Проанализировано влияние толщины плёночного покрытия, длины волны начального рельефа поверхности, упругих постоянных, определяющих механическое поведение объёмных и поверхностных фаз плёночного покрытия, остаточных поверхностных напряжений, а также напряжений несоответствия на морфологическую устойчивость поверхности плёночного покрытия.
- Исследовано влияние длины волны синусоидального рельефа границы раздела двух материалов, упругих постоянных, определяющих механическое поведение межфазного слоя, остаточных межфазных напряжений, а также напряжений несоответствия в объёмных фазах на рост амплитуды рельефа межфазной границы

### **Научная и практическая значимость**

В силу того, что задачи формулируются в достаточно общей постановке, результаты исследования имеют множество приложений. Создание композитных структур с заданными топологическими свойствами является одной из основных задач в электронной промышленности. Например, при производстве гибкой электроники посредством специальных методов формируют определённый рельеф на поверхности основания, для улучшения сцепления компонентов схем. А при изготовлении биоматериалов микрорельеф поверхности играет важную роль в определении клеточной адгезии, влияя таким образом на биосовместимость материалов. Фундаментальный аспект актуальности работы за-

ключается в том, что исследования самоорганизации свободных и межфазных поверхностей дают много важной информации о физико-механическом поведении всего композита.

### **Достоверность полученных результатов**

Достоверность результатов обеспечена корректностью постановки задачи с учётом современных представлений о механике деформируемого тела, а также обоснована публикацией оригинальных результатов в научных журналах и обсуждением результатов на международных конференциях и научных семинарах. Качественные теоретические результаты совпадают с известными экспериментальными, и в целом отражают адекватное представление о поведении поверхностей напряжённых твёрдых тел при диффузионном массопереносе.

### **Апробация работы**

Результаты диссертационной работы были представлены на научных семинарах Кафедры вычислительных методов механики деформируемого твёрдого тела Санкт-Петербургского государственного университета и на следующих международных конференциях:

- XLV международная научная конференция аспирантов и студентов «Процессы управления и устойчивость» (CPS'14), 1–4 апреля 2014, Санкт-Петербург, Россия;
- XLVI международная научная конференция аспирантов и студентов «Процессы управления и устойчивость» (CPS'15), 6–9 апреля 2015, Санкт-Петербург, Россия;
- III международная конференция «Устойчивость и процессы управления», посвященная 85-летию со дня рождения профессора, чл.-корр. РАН В. И. Зубова (SCP), 5–9 октября 2015, Санкт-Петербург, Россия;
- XLVII международная научная конференция аспирантов и студентов «Процессы управления и устойчивость» (CPS'16), 4–7 апреля 2016, Санкт-Петербург, Россия;
- XXII международная конференция «Петербургские чтения по проблемам прочности», 12–14 апреля 2016, Санкт-Петербург, Россия;
- 44 международная летняя школа — конференция «Advanced Problems in Mechanics» (APM 2016), 27 июня – 2 июля 2016, Санкт-Петербург, Россия;

- XLVIII международная конференция «Процессы управления и устойчивость» (CPS'17), 3–6 апреля 2017, Санкт-Петербург, Россия;
- VIII международная школа «Физическое материаловедение» с элементами научной школы для молодёжи, 3–8 сентября 2017, Тольятти, Россия;
- Международная конференция «Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надёжных конструкций», 9-13 октября 2018, Томск, Россия;
- Международная научная конференция по механике «VIII Поляховские чтения», 30 января – 2 февраля 2018, Санкт-Петербург, Россия.
- XLIX международная конференция «Процессы управления и устойчивость» (CPS'18), 2–5 апреля 2018, Санкт-Петербург, Россия;
- 10 европейская конференция по механике твёрдого тела (ESMC), 2–6 июля 2018, Болонья, Италия;
- L международная конференция «Процессы управления и устойчивость» (CPS'19), 8–11 апреля 2019, Санкт-Петербург, Россия;
- LI международная конференция «Процессы управления и устойчивость» (CPS'20), 20–24 апреля 2020, Санкт-Петербург, Россия;
- IV международная конференция «Устойчивость и процессы управления», посвященная 90-летию со дня рождения профессора, чл.-корр. РАН В. И. Зубова (SCP), 5–9 октября 2020, Санкт-Петербург, Россия;
- Международная научная конференция по механике «XIX Поляховские чтения», 9 – 11 марта 2021, Санкт-Петербург, Россия;
- LII международная конференция «Процессы управления и устойчивость» (CPS'21), 5–9 апреля 2021, Санкт-Петербург, Россия;

### **Публикации**

Основные результаты по теме диссертации изложены в девятнадцати научных публикациях [9–13; 19–22; 90; 91; 93; 94; 129–132; 140; 141], три из которых изданы в журналах, включённых в перечень ВАК [11; 131; 132], девять — в изданиях индексируемые SCOPUS и Web Of Science [90; 93; 94; 129–132; 140; 141].

### **Личный вклад**

Диссертация является самостоятельным научным исследованием, свидетельствующем о профессиональной квалификации её автора. Постановка задач

принадлежит С. А. Костырко. Консультации по методам решения проводились М. А. Грековым и С. А. Костырко. Личный вклад соискателя заключается в непосредственном участии во всех этапах диссертационного исследования. Автор диссертации осуществлял реализацию разработанных методов решения поставленных задач и написание компьютерных программ. Обработка и анализ полученных результатов также выполнялись соискателем.

### **Поддержка**

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-31-90024 и РНФ в рамках проекта № 19-71-00062.

### **Объём и структура работы**

Структура диссертационной работы состоит из введения, четырёх глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 108 страниц с 22 рисунками и 11 таблицами. Список литературы содержит 148 наименований.

### **Содержание работы**

Во **введении** представлен анализ современного состояния исследований по изучаемой тематике, раскрыта актуальность работы, её научная и практическая значимость. Также сформулированы цель и задачи исследования, приведены основные положения, выносимые на защиту, и методы исследования. В конце введения приводится краткое содержание работы по каждой главе.

В **Главе 1** на основе термодинамического подхода Гиббса, разработана математическая модель самоорганизации поверхности многослойного плёночного покрытия. С использованием соотношений Херринга–Шаттлворта и обобщённого закона Лапласа–Юнга введено в рассмотрение поверхностное напряжение. На основе первого приближения в методе разложения по малому параметру проведён анализ морфологической устойчивости плоской формы поверхности двухслойного плёночного покрытия при использовании уравнений, описывающих влияние поверхностной диффузии. Построена зависимость изменения относительной амплитуды от длины волны возмущения при различных значениях геометрических и физических параметров плёночного покрытия.

**Глава 2** посвящена исследованию морфологической устойчивости наноструктурированной поверхности твёрдого тела. Предполагалось, что упругие свойства поверхности и основного материала различны. С использованием термодинамического подхода Гиббса, модели Азаро–Тиллера–Гринфельда, соот-



ношений поверхностной упругости Гёртина–Мёрдока, метода возмущений, комплексных потенциалов Гурса–Колосова и соотношений Мухелишвили получена явная зависимость изменения амплитуды синусоидального возмущения от времени, физических и геометрических параметров задачи.

В **Главе 3** модель Азаро–Тиллера–Гринфельда расширена для анализа морфологической устойчивости поверхности ультратонкого плёночного покрытия. Как и в Главе 3, на основе модели поверхностной упругости Гёртина–Мёрдока учитывается влияние упругих свойств свободных и межфазных поверхности плёночного покрытия. Было получено эволюционное уравнение, описывающее изменение амплитуды рельефа поверхности со временем. Для решения эволюционного уравнения необходимо было найти распределение напряжений вдоль искривлённой поверхности. На основе полученного решения был проведён анализ влияния физических и геометрических параметров задачи на морфологическую устойчивость свободной поверхности плёночного покрытия.

В **Главе 4** разработан теоретический подход для анализа устойчивости наноразмерного рельефа границы соединения двух материалов с учётом ее упругих свойств. С использованием термодинамического подхода Гиббса получено дифференциальное уравнение, описывающее изменение формы поверхности со временем. При этом скорость роста дефектов зависит от поля объёмных и поверхностных напряжений. Для определения напряжённо-деформированного состояния композита использовался асимптотический метод, описанный в работах Грекова и Костырко. Проанализировано влияние относительной жёсткости системы, упругих параметров межфазной границы, остаточного поверхностного напряжения, действующих продольных усилий, диффузионных коэффициентов на морфологическую устойчивость границы соединения материалов.

В **заключении** сформулированы основные результаты работы.

## Глава 1

### Морфологическая устойчивость поверхности многослойного плёночного покрытия

В данной главе описана математическая модель самоорганизации слабо искривлённой поверхности многослойного тонкоплёночного покрытия, находящегося в условиях плоской деформации. Экспериментально было установлено, что в процессе самоорганизации поверхности покрытия наряду со слабой волнистостью [147] возможно образование острых выступов и впадин [83], а в некоторых случаях плёнка может распадаться на островки [50]. В рамках данной работы процесс образования топологических дефектов плёночного покрытия рассматривается как эволюция периодического рельефа поверхности при условии, что изменяется только его амплитуда.

В силу рассогласования параметров кристаллических решёток материалов, плёночная система находится в напряжённом состоянии. Исходя из предположения, что для минимизации полной энергии композита может происходить самоорганизация свободной поверхности путём массопереноса, в качестве основного механизма потери морфологической устойчивости поверхности плёнки рассматривается поверхностная диффузия [90]. Считается, что поток атомов вдоль поверхности пропорционален градиенту химического потенциала. Уравнение смещения границы твёрдого тела в нормальном направлении выводится из закона сохранения масс.

#### 1.1 Постановка задачи

Модель многослойного плёночного покрытия толщины  $h_f = \sum_{j=1}^N h_j$ , осаждённого на подложку толщины  $h_s \gg h_f$  и находящегося в условиях плоской деформации, представим в виде неоднородной упругой полу-



слоёв ведётся снизу),  $a$  — длина волны искривления,  $b = 2\pi/a$  — волновое число и  $A(\tau)$  — амплитуда периодического рельефа межфазной поверхности в момент времени  $\tau$ .

В соответствии с термодинамическим подходом Гиббса [58] при решении задачи учитывается поверхностное напряжение  $\sigma^s$ , которое считается постоянным и независимым от деформации поверхности [67]. Тогда условие механического равновесия поверхности могут быть записаны в виде обобщённого закона Лапласа–Юнга, который в данном случае имеет вид [4; 38]

$$\sigma_{nn}(\zeta_1) = \kappa(\zeta_1)\sigma^s, \quad \sigma_{nt}(\zeta_1) = 0, \quad \zeta_1 \in S_1, \quad (1.3)$$

где  $\kappa$  — локальная кривизна искривлённой границы  $S_1$ ,  $\sigma_{nn}$ ,  $\sigma_{nt}$  — компоненты вектора напряжения, вычисленные на площадке с нормалью  $\mathbf{n}$  в локальной прямоугольной системе координат  $n, t$ .

На межфазных границах  $S_j$  ( $j = \overline{2, N+1}$ ) отсутствуют разрывы вектора перемещений  $u = u_1 + iu_2$  и вектора напряжений  $\sigma = \sigma_{11} + i\sigma_{12}$  [11]:

$$\Delta u(z_j) = \lim_{z \rightarrow z_j + iH_j} u(z) - \lim_{z \rightarrow z_j - iH_j} u(z) = 0, \quad (1.4)$$

$$\Delta \sigma(z_j) = \lim_{z \rightarrow z_j + iH_j} \sigma(z) - \lim_{z \rightarrow z_j - iH_j} \sigma(z) = 0,$$

где  $u_1$  и  $u_2$  — перемещения вдоль соответствующих координат  $x_1, x_2$ ;  $\sigma_{11}$  и  $\sigma_{12}$  — компоненты вектора напряжений, вычисленные на площадке с нормалью, параллельной оси  $x_1$ .

В рамках линейной теории упругости компоненты тензора деформации  $\varepsilon_{jk}$  выражаются через вектор перемещения  $u$  с помощью соотношений Коши [18]. В случае плоской задачи запишем:

$$\varepsilon_{11} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1}, \quad \varepsilon_{22} = \frac{\partial u_2}{\partial x_2}, \quad \varepsilon_{12} = \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1}. \quad (1.5)$$

Компоненты тензора деформаций  $\varepsilon_{jk}$  и напряжений  $\sigma_{jk}$  упругого тела связаны обобщённым законом Гука. Для изотропного линейно-упругого материала

будем иметь [18]:

$$\begin{aligned}\sigma_{nn}(z) &= (\lambda_j + 2\mu_j)\varepsilon_{nn}(z) + \lambda_j\varepsilon_{tt}(z), \\ \sigma_{tt}(z) &= (\lambda_j + 2\mu_j)\varepsilon_{tt}(z) + \lambda_j\varepsilon_{nn}(z), \quad \sigma_{nt}(z) = 2\mu_j\varepsilon_{nt}(z), \\ \sigma_{zz}(z) &= \frac{\lambda_j}{2(\lambda_j + \mu_j)} [\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z)], \quad z \in B_j, \quad j = \overline{1, N+1},\end{aligned}\tag{1.6}$$

здесь  $\lambda_j, \mu_j$  — модули упругости Ламе среды  $B_j$ .

Предполагается, что из-за рассогласования параметров кристаллических решёток материалов, в плёночной системе действуют продольные напряжения несоответствия. Тогда на бесконечности напряжения  $\sigma_{\alpha\beta}$  ( $\alpha, \beta = \{1, 2\}$ ) и угол поворота материальной частицы  $\omega$  должны удовлетворять условиям:

$$\lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{22} = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{12} = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \omega = 0, \quad \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{11} = \sigma_{N+1}.\tag{1.7}$$

Задача заключается в определении зависимости амплитуды  $A$  искривления поверхности плёночного покрытия (1.1), (1.2) от времени  $\tau$  при учёте поверхностной диффузии и упругого деформирования тела с поверхностным слоем переменной толщины. При этом предполагается, что самоорганизация напряжённой поверхности плёночного покрытия происходит вследствие действия поверхностной диффузии, определяемой производной химического потенциала вдоль поверхности.

## 1.2 Химический потенциал и скорость изменения границы твёрдого тела

Понятие химического потенциала было введено Гиббсом [58] при рассмотрении термодинамического равновесия деформируемого твёрдого тела, находящегося в контакте с таким же материалом в растворенной форме. В течение последних нескольких десятилетий, данный подход получил применение в ряде других исследований. В данной работе, как и в [4; 15; 16; 30; 71], под химическим

потенциалом понимается увеличение свободной энергии на единицу добавляемого объёма.

В соответствии с подходом, предложенным Гиббсом [58], для учёта массопереноса на поверхности твёрдого тела под действием поверхностной диффузии, вызванной полем напряжений, основной материал и приповерхностный слой рассматриваются как различные фазы одного и того же материала. При этом, приповерхностный слой рассматривается как упругая мембрана, когерентно связанная с основным материалом.

При постоянной температуре в качестве свободной энергии основного материала учитывается упругая энергия деформации, измеряемая в единице объёма, и поверхностная энергия, измеряемая на единице площади. Тогда полная свободная энергия может быть записана в виде:

$$E(\tau) = \int_B U dB + \int_S U_s dS, \quad (1.8)$$

где  $B$  — объём, занятый основным материалом,  $S$  — поверхность, соответствующая этому объёму,  $U_s$  — поверхностная энергия и  $U$  — энергия упругой деформации, вычисляемая в приповерхностном слое.

Время, необходимое для того, чтобы деформированная система достигла механического равновесия, как правило, очень мало по сравнению со временем, характерным для механизмов массопереноса, поэтому будем считать, что в каждый момент времени тело находится в механическом равновесии. Однако при этом, тело необязательно находится в химическом равновесии, определяемом как состояние с минимальной свободной энергией.

Согласно второму закону термодинамики система, не находящаяся в химическом равновесии, стремится к уменьшению своей свободной энергии. Скорость изменения свободной энергии тела, описываемая локальной нормальной скоростью  $V_n$  изменения границы, может быть записана следующим образом:

$$\dot{E}(\tau) = \int_B \frac{\partial U}{\partial \tau} dB + \int_S UV_n dS + \int_S \frac{\partial U_s}{\partial \tau} dS - \int_S \kappa U_s V_n dS, \quad (1.9)$$

где  $\kappa$  — локальная кривизна поверхности.

Физический смысл разных членов в выражении (1.9) следующий: первое слагаемое учитывает изменение полной энергии, вызванное изменением упругой

энергии деформации объёмной фазы со временем; второе — вызванное изменением формы поверхности объёмной фазы; третий член описывает изменение полной энергии через изменение энергии свободной поверхности; а последний — через искривление свободной поверхности [55].

Считается, что не происходит никакого обмена энергией с окружающей средой. Тогда мгновенное изменение работы, выполняемой в объёмной фазе, должно быть равным, но противоположным по знаку мгновенному изменению работы, выполняемой в поверхностной фазе. Другими словами, сумма первого и третьего слагаемых в (1.9) равна нулю.

Тогда скорость изменения свободной энергии описывается следующим образом:

$$\dot{E}(\tau) = \int_S (U - \kappa U_s) V_n dS. \quad (1.10)$$

Произведение  $V_n dS$  можно толковать как локальную скорость добавления ( $V_n > 0$ ) или удаления ( $V_n < 0$ ) материала. Из (1.10) следует выражение для химического потенциала приповерхностных атомов:

$$\chi = (U - \kappa U_s) \Omega. \quad (1.11)$$

Если химический потенциал в некоторой области меньше чем в соседней, то атомы будут диффундировать в область более низкого химического потенциала, тем самым снижая свободную энергию системы. Иными словами, поток атомов вдоль поверхности пропорционален градиенту химического потенциала. В таком случае имеем [30; 55]:

$$J = -\frac{D_s C_s}{k_b T} \frac{\partial \chi}{\partial s}, \quad (1.12)$$

где  $D_s$  — коэффициент поверхностной диффузии,  $C_s$  — концентрация поверхностных дефектов,  $k_b$  — постоянная Больцмана,  $T$  — абсолютная температура. Дифференцирование по параметру  $s$  означает дифференцирование по направлению, касательному к поверхности.

Отметим, что равномерность распределения химического потенциала является одним из условий термодинамического равновесия системы.

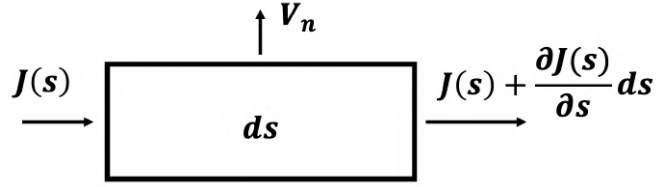


Рисунок 1.2 — Диффузия вдоль приповерхностного элемента

Для вычисления скорости смещения границы рассмотрим поток объёма на поверхности, как показано на Рис. 1.2. Из закона сохранения массы выводится скорость смещения границы в нормальном направлении

$$V_n = -\Omega \frac{\partial J}{\partial s}. \quad (1.13)$$

### 1.3 Линейный анализ эволюции рельефа свободной поверхности многослойного плёночного покрытия

Выражение (1.13) может быть записано в форме эволюционного уравнения, описывающего изменение профиля границы тела (1.1) со временем [11; 90]

$$\frac{\partial g(x_1, \tau)}{\partial \tau} = K_s h(x_1, \tau) \frac{\partial^2}{\partial s^2} [U(\zeta_1, \tau) - \kappa(x_1, \tau) U_s(\zeta_1, \tau)], \quad \zeta_1 \in S_1, \quad (1.14)$$

$$g(x_1, \tau) = H_1 + \varepsilon(\tau) f(x_1), \quad K_s = \frac{D_s C_s \Omega^2}{k_b T},$$

где  $h$  — метрический коэффициент [18],  $s$  — длина дуги кривой  $S_1$ .

Как отмечалось выше, на поверхности плёнки действует поверхностное напряжение  $\sigma^s$ , которое связано с поверхностной энергией  $U_s$  соотношением Херринга – Шаттлворта [1; 78; 128]

$$\sigma^s(\zeta_1, \tau) = U_s(\zeta_1, \tau) + \frac{\partial U_s(\zeta_1, \tau)}{\partial \varepsilon_{tt}(\zeta_1, \tau)}. \quad (1.15)$$

Так как изменения поверхности малы, а процесс диффузии протекает медленно, в данной главе, как и в работе [4], будем считать, что  $U_s$  практически не



меняется вдоль поверхности при деформации. Тогда из равенства (1.15) получаем:

$$U_s(\zeta_1, \tau) = \sigma^s, \quad \zeta_1 \in S_1. \quad (1.16)$$

Для того, чтобы проинтегрировать уравнение (1.14), остаётся определить удельную энергию деформации  $U$ . В силу того, что в работе исследуется слабое изменение рельефа поверхности, компоненты тензора напряжений и деформаций определяются в первом приближении метода возмущений

$$\sigma_{nn}(z, \tau) = \varepsilon(\tau)\sigma_{nn(1)}(z), \quad \sigma_{nt}(z, \tau) = \varepsilon(\tau)\sigma_{nt(1)}(z),$$

$$\varepsilon_{nn}(z, \tau) = \varepsilon_{nn(0)} + \varepsilon(\tau)\varepsilon_{nn(1)}(z), \quad \varepsilon_{nt}(z, \tau) = \varepsilon(\tau)\varepsilon_{nt(1)}(z), \quad (1.17)$$

$$\sigma_{tt}(z, \tau) = \sigma_{tt(0)} + \varepsilon(\tau)\sigma_{tt(1)}(z), \quad \varepsilon_{tt}(z, \tau) = \varepsilon_{tt(0)} + \varepsilon(\tau)\varepsilon_{tt(1)}(z).$$

Отметим, что  $\sigma_{nn(0)}(z) = \sigma_{nt(0)}(z) = \varepsilon_{nt(0)}(z) = 0$  в соответствии с (1.6) и (1.7).

Энергию упругой деформации  $U$  определим по формуле Клапейрона

$$U(z, \tau) = \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}(z, \tau)\varepsilon_{\alpha\beta}(z, \tau), \quad (1.18)$$

где ведётся суммирование по повторяющимся индексам  $\alpha, \beta = \{1, 2\}$ .

Выражения для метрического коэффициента  $h$  и кривизны  $\kappa$  искривлённой поверхности  $S_1$  также запишем в первом приближении метода возмущений [129]

$$\kappa(x_1, \tau) = \varepsilon(\tau)f''(x_1), \quad h(x_1, \tau) = 1. \quad (1.19)$$

Подставляя выражения (1.17) и (1.19) в (1.14) приходим к обыкновенному дифференциальному уравнению, описывающему изменение амплитуды искривления поверхности со временем:

$$\begin{aligned} \frac{dA(\tau)}{d\tau}f(x_1) = \frac{1}{2}A(\tau)K_s \frac{d^2}{dx_1^2} [\varepsilon_{nn(0)}\sigma_{nn(1)}(x_1) + \\ + \sigma_{tt(0)}\varepsilon_{tt(1)}(x_1) + \varepsilon_{tt(0)}\sigma_{tt(1)}(x_1) - \sigma^s f''(x_1)]. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Как отмечалось выше, для интегрирования уравнения (1.20) необходимо определить напряжённо – деформированное состояние композита (1.1), (1.2). Решение соответствующей плоской задачи было предложено Грековым и Костырко [64]. В соответствии с их подходом, решение исходной задачи для многослойной структуры с подложкой представим в виде суммы решения задачи для полуплоскости с искривлённой свободной границей  $S_1$  с упругими свойствами верхнего слоя покрытия и решений  $N$  задач для двухкомпонентных плоскостей с прямолинейными межфазными границами  $S_j$ ,  $j = \overline{2, N+1}$ . В первой задаче на границе действует неизвестная нагрузка, а в остальных задачах имеются неизвестные скачки напряжений и перемещений при переходе от одной среды к другой.

Решение поставленной задачи (1.1) – (1.7), а именно комплексные векторы перемещений  $u = u_1 + iu_2$  и напряжений  $\sigma = \sigma_{nn} + i\sigma_{nt}$  в точке комплексной плоскости  $z = x_1 + ix_2$ , запишем в виде

$$G(z) = \begin{cases} G_k^k(z) + G_k^{k+1}(z), & z \in B_k, \quad k = \overline{1, N}, \\ G_{N+1}^{N+1}(z), & z \in B_{N+1}, \end{cases} \quad (1.21)$$

$$G_j^k(z, \eta_j) = \begin{cases} \sigma^k(z), & \eta_j = 1 \\ -2\mu_j \frac{du^k}{dz}, & \eta_j = -\varkappa_j \end{cases}, \quad z \in B_j, \quad k, j = \overline{1, N+1}, \quad (1.22)$$

где в случае плоской деформации  $\varkappa_j = 3 - 4\nu_j$ ;  $\nu_j$  – коэффициент Пуассона среды  $B_j$ .

В первой задаче (1.21), (1.22) предполагается, что на криволинейной границе  $S_1$  однородной полуплоскости  $D_1$  с упругими свойствами среды  $B_1$  действует неизвестная самоуравновешенная нагрузка  $p(z_1)$ :

$$\sigma^1(\zeta_1) = p(\zeta_1), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} p(\xi) d\xi = 0, \quad \zeta_1 \in S_1. \quad (1.23)$$

Напряжения  $\sigma_{\alpha\beta}^1$  ( $\alpha\beta \in \{1,2\}$ ) и угол поворота  $\omega^1$  материальной частицы удовлетворяют следующим условиям на бесконечности:

$$\lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{11}^1 = \sigma_1^1, \quad \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{22}^1 = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{12}^1 = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \omega^1 = 0. \quad (1.24)$$

Комплексные векторы напряжений  $\sigma^k$  и перемещений  $u^k$  — решение задачи о совместной деформации двух соединённых полуплоскостей  $D_{k-1} \cup D_k$  с упругими свойствами сред  $B_{k-1}$  и  $B_k$ , соответственно ( $k = \overline{2, N+1}$ ), вызванной неизвестными скачками напряжений  $\Delta\sigma^k$  и перемещений  $\Delta u^k$  вдоль прямолинейной межфазной границы  $S_k$  под действием продольных усилий  $\sigma_j^k$  в  $D_j$  ( $j = \overline{k-1, k}$ ):

$$\Delta\sigma^k = \sigma^{k+}(z_k) - \sigma^{k-}(z_k), \quad \Delta u^k = u^{k+}(z_k) - u^{k-}(z_k),$$

$$\lim_{x_2 \rightarrow +\infty} \sigma_{11}^k = \sigma_{k-1}^k, \quad \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{11}^k = \sigma_k^k, \quad (1.25)$$

$$\lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{22}^k = \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{12}^k = \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \omega^k = 0.$$

Согласно [64], величины  $\sigma_1^1$ ,  $\sigma_{k-1}^k$ ,  $\sigma_k^k$  ( $k = \overline{2, N+1}$ ) в выражении (1.25) определяются из рекуррентных соотношений, которые вытекают из (1.4) и равенства  $\Delta\sigma^k = \Delta u^k = 0$ , что соответствует случаю плёночного покрытия с прямолинейной поверхностью

$$\sigma_{N+1}^{N+1} = \sigma_{N+1}, \quad \sigma_{N-2r}^{N-2r+1} = \frac{\mu_{N-2r}(1 + \varkappa_{N-2r+1})}{\mu_{N-2r+1}(1 + \varkappa_{N-2r})} \sigma_{N-2r+1}^{N-2r+1},$$

$$\sigma_{N-2r-1}^{N-2r-1} = \frac{\mu_{N-2r-1}(1 + \varkappa_{N-2r})}{\mu_{N-2r}(1 + \varkappa_{N-2r-1})} \sigma_{N-2r}^{N-2r+1} \quad (N - 2r > 1), \quad (1.26)$$

$$\sigma_{N-2r}^{N-2r} = \sigma_{N-2r+1}^{N-2r} = 0 \quad (N - 2r > 0), \quad r = 0, 1, \dots$$

Граничные условия (1.4), (1.23), заданные на  $S_k$ , приводят к  $2N+1$  уравнению относительно неизвестной нагрузки  $p(\zeta_1)$ , скачков напряжений  $\Delta\sigma^k$  и перемещений  $\Delta u^k$

$$p(\zeta_1) + \sigma^2(\zeta_1) = \sigma(\zeta_1),$$

$$\Delta\sigma^2(z_2) + \sigma^1(p, z_2) - \sigma^3(\Delta\sigma^3, \Delta u^{3'}, z_2) = 0,$$

$$\Delta u^2(z_2) + u^1(p, z_2) - u^3(\Delta\sigma^3, \Delta u^{3'}, z_2) = 0,$$

...

$$\Delta\sigma^{N+1}(z_{N+1}) - \sigma^N(\Delta\sigma^N, \Delta u^{N'}, z_{N+1}) = 0,$$

$$\Delta u^{N+1}(z_{N+1}) + u^N(\Delta\sigma^N, \Delta u^{N'}, z_{N+1}) = 0.$$

(1.27)

Таким образом, решение задачи упругости сводится к решению системы уравнений (1.27).

В соответствии с [2;64], напряжения  $\sigma^k(z)$  и перемещения  $u^k(z)$  могут быть определены через комплексные потенциалы Гурса–Колосова  $\Phi_j^k$  и  $\Upsilon_j^k$

$$\begin{aligned} G_j^k(z, \eta_j) = & \eta_j \Phi_j^k(w_k) + \overline{\Phi_j^k(w_k)} - \left( \Upsilon_j^k(\overline{w_k}) + \overline{\Phi_j^k(w_k)} - \right. \\ & \left. - (w_k - \overline{w_k}) \overline{\Phi_j^{k'}(w_k)} \right) e^{-2i\alpha}, \quad w_1 = z + i(\varepsilon f(x_1) - H_1), \end{aligned} \quad (1.28)$$

$$w_k = z - iH_k, \quad j = \{k-1, k\}, \quad k = \overline{2, N+1},$$

где  $\alpha$  — угол между направлением площадки с нормалью  $n$  и осью  $x_1$ ,  $\Phi_1^1$  и  $\Upsilon_1^1$  — функции, голоморфные в областях  $D_1$  и  $\widetilde{D}_1 = \{z : x_1 \in R^1, x_2 > H_1 - \varepsilon f(x_1)\}$  соответственно, и  $\Phi_j^k, \Upsilon_j^k$  — функции, голоморфные в полуплоскостях  $D_j$  и  $D_r$ , ( $r = \{k-1, k\}, r \neq j$ ) соответственно. В формуле (1.28) черта сверху означает комплексное сопряжение, штрих — производную по аргументу.

Полагая в (1.28)  $\alpha = 0$  и  $\alpha = \pi/2$  при  $x_2 \rightarrow -\infty$  и учитывая (1.24) и (1.25), будем иметь:

$$\lim_{\operatorname{Im}w_1 \rightarrow -\infty} \Phi_1^1(w_1) = \lim_{\operatorname{Im}w_1 \rightarrow +\infty} \Upsilon_1^1(w_1) = \frac{\sigma_1^1}{4},$$

$$\lim_{|\operatorname{Im}w_k| \rightarrow \infty} \Phi_j^k(w_k) = \frac{\sigma_j^k}{4}, \quad w_k \in D_j, \quad j = \{k-1, k\}, \quad (1.29)$$

$$\lim_{|\operatorname{Im}w_k| \rightarrow \infty} \Upsilon_j^k(w_k) = \frac{\sigma_j^k}{4}, \quad w_k \in D_r, \quad r = \{k-1, k\}, \quad r \neq j.$$

В соответствии с первым приближением метода возмущений [2–6; 62], представим функции  $\Phi_j^k$ ,  $\Upsilon_j^k$  и  $p$  в следующем виде:

$$\Psi(z) = \Psi_{(0)}(z) + \varepsilon \Psi_{(1)}(z). \quad (1.30)$$

Граничные значения функций  $\Phi_{1(n)}^1$ ,  $\Upsilon_{1(n)}^1$  и  $p_{(n)}$  представим в виде ряда Тейлора в окрестности прямой  $\operatorname{Im}w_1 = 0$ , рассматривая вещественную переменную  $x_1$  как параметр. В первом приближении метода возмущений получим [129]

$$\Psi_{(m)}(\zeta_1) = \Psi_{(m)}(x_1) + i\varepsilon f(x_1) \Psi'_{(m)}(x_1), \quad m = \{0, 1\}, \quad (1.31)$$

где  $\Psi_{(m)}$  — любая из вышеупомянутых функций.

Учитывая соотношение  $\varepsilon f'(x_1) = \operatorname{tg}\alpha$ , можно записать выражение для функции  $e^{-2i\alpha}$ , входящей в правую часть (1.28):

$$e^{-2i\alpha} = 1 - 2i\varepsilon f'(x_1). \quad (1.32)$$

Принимая во внимание граничное условие (1.23) с учётом выражений (1.28), (1.30), (1.31) и приравнивая коэффициенты при  $\varepsilon^m$  ( $m = \{0, 1\}$ ), приходим к следующей последовательности краевых задач:

$$\Upsilon_{1(m)}^1(x_1) - \Phi_{1(m)}^1(x_1) = -p_{(m)}(x_1) + F_{(m)}^1(x_1), \quad (1.33)$$

где

$$F_0^1(x_1) = 0,$$

$$\begin{aligned} F_1^1(x_1) = & -if(x_1) \left[ \Phi_{1(0)}^{1'}(x_1) + \Upsilon_{1(0)}^{1'}(x_1) + 2\overline{\Phi_{1(0)}^{1'}(x_1)} \right] + \\ & + 2if'(x_1) \left[ \overline{\Phi_{1(0)}^1(x_1)} + \Upsilon_{(0)}^1(x_1) \right] - if(x_1)p_0'(x_1). \end{aligned} \quad (1.34)$$

В соответствии с [64], решение краевой задачи (1.33), (1.34) можно записать, используя замену

$$\Theta_{(m)}(w_1) = \begin{cases} \Upsilon_{1(m)}^1(w_1), & \text{Im } w_1 > 0, \\ \Phi_{1(m)}^1(w_1), & \text{Im } w_1 < 0. \end{cases} \quad (1.35)$$

Таким образом, в каждом приближении мы получаем задачу Римана-Гильберта, где искомые функции представимы в виде [4;5;8;17]:

$$\Theta_{(m)} = \Theta_{(m)}^{1u} + \Theta_{(m)}^{1d} + C_{(m)}, \quad m = \{0,1\}, \quad (1.36)$$

где  $C_0 = \sigma_1^1$ ,  $C_1 = 0$ .

При этом функции  $\Theta_{(m)}^{1u}$  и  $\Theta_{(m)}^{1d}$  определены следующим образом:

$$\Theta_k^{1u} = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p_k(\tau)}{\tau - w_1} d\tau, \quad (1.37)$$

$$\Theta_k^{1d} = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{F_k^1(\tau)}{\tau - w_1} d\tau.$$

Отметим, что поскольку функции  $F_{(m)}^1(x_1)$  определяются по рекуррентным формулам (1.34), то в каждом приближении функция  $\Theta_{(m)}^{1d}$  известна, а функцию  $\Theta_{(m)}^{1u}$  необходимо определить.

Функции  $\Phi_j^k$  и  $\Upsilon_j^k$  в задачах о совместной деформации двух однородных полуплоскостей при условиях (1.25) также определяются из решения задач Римана-Гильберта

$$\Sigma^{k+}(\xi_k^k) - \Sigma^{k-}(\xi_k^k) = \Delta\sigma^k(z_k), \quad (1.38)$$

$$V^{k+}(\xi_k^k) - V^{k-}(\xi_k^k) = 2\mu_{k-1}\mu_k\Delta u^{k'}(z_k),$$

где  $\Sigma^{k\pm}(\xi_k^k) = \lim_{z \rightarrow z_k \pm i0} \Sigma^k(w_k)$ ,  $V^{k\pm}(\xi_k^k) = \lim_{z \rightarrow z_k \pm i0} V^k(w_k)$ .

Соответствующие краевые уравнения (1.38) получены из граничных условий

$$G_{k-1}^{k+}(\xi_k^k, 1) - G_r^{k-}(\xi_k^k, 1) = \Delta\sigma^k(z_k),$$

$$\mu_2 G_{k-1}^{k+}(\xi_k^k, -\kappa_{k-1}) - \mu_1 G_r^{k-}(\xi_k^k, -\kappa_k) = -2\mu_1\mu_2\Delta u^{k'}(z_k), \quad (1.39)$$

$$G_j^{k\pm}(\xi_k^k) = \lim_{z \rightarrow z_k \pm i0} G_j^i(w_r), \quad \xi_k^k = w_k(z_k),$$

при использовании вспомогательных функций

$$\Sigma^k(w_k) = \begin{cases} \Phi_k^k(w_k) + \Upsilon_{k-1}^k(w_k), & \text{Im } w_k > 0, \\ \Phi_{k-1}^k(w_k) + \Upsilon_k^k(w_k), & \text{Im } w_k < 0, \end{cases} \quad (1.40)$$

$$V^k(w_k) = \begin{cases} \mu_{k-1}\Phi_k^k(w_k) - \mu_k\kappa_{k-1}\Upsilon_{k-1}^k(w_k), & \text{Im } w_k > 0, \\ \mu_k\Phi_{k-1}^k(w_k) - \mu_{k-1}\kappa_k\Upsilon_k^k(w_k), & \text{Im } w_k < 0. \end{cases} \quad (1.41)$$

Следуя [2; 8; 17], решение обеих задач Римана-Гильберта (1.38) находим в виде

$$\Sigma^k(w_k) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta\sigma^k(z_k)}{\tau - w_k} d\tau + s_k, \quad (1.42)$$

$$V^k(w_k) = -\frac{\mu_k}{\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta u^{k'}(z_k)}{\tau - w_k} d\tau + v_k,$$

где  $s_k = a_k^{k-1} + a_{k-1}^{k-1} = a_{k-1}^k + a_k^k$ ,  $v_k = \mu_{k-1} a_k^{k-1} - \mu_k \varkappa_{k-1} a_{k-1}^{k-1} = \mu_k a_{k-1}^k - \mu_{k-1} \varkappa_k a_k^k$ .

Выражения для комплексных потенциалов  $\Phi_j^k$ ,  $\Upsilon_j^k$  определяются из формул (1.40), (1.41):

$$\Phi_j^k(w_k) = \frac{\mu_j \Sigma^k(w_k) - V^k(w_k)}{\mu_j + \mu_k \varkappa_j}, \quad (1.43)$$

$$\Upsilon_j^k(\overline{w_k}) = \frac{\mu_j \varkappa_k \Sigma^k(\overline{w_k}) + V^k(\overline{w_k})}{\mu_k + \mu_j \varkappa_k}.$$

После чего приходим к системе интегральных уравнений Фредгольма (СИУФ) второго рода

$$\begin{aligned} & \Delta\sigma_m^k(x_1) + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k1}(x_1, \tau) \Delta\sigma_m^i(\tau) d\xi + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k2}(x_1, \tau) \overline{\Delta\sigma_m^k(\tau)} d\tau + \\ & + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k3}(x_1, \tau) \Delta u_m^{k'}(\tau) d\xi + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k4}(x_1, \tau) \overline{\Delta u_m^{k'}(\tau)} d\tau = H_{1(m)}^k(x_1), \end{aligned} \quad (1.44)$$

$$\begin{aligned} & \Delta u_m^{k'}(x_1) + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k5}(x_1, \tau) \Delta\sigma_m^k(\tau) d\tau + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k6}(x_1, \tau) \overline{\Delta\sigma_m^k(\tau)} d\tau + \\ & + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k7}(x_1, \tau) \Delta u_m^{k'}(\tau) d\tau + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k8}(x_1, \tau) \overline{\Delta u_m^{k'}(\xi)} d\tau = H_{2(m)}^k(x_1). \end{aligned}$$

Стоит отметить, что система интегральных уравнений (1.44) имеет единственное решение на классе непрерывных функций при любой непрерывной правой части. Так, решение системы в нулевом приближении ( $H_{1(0)}^k = H_{2(0)}^k$ ) имеет тривиальное решение



$$\Delta\sigma_{(0)}^k(x_1) = \Delta u_{(0)}^k(x_1) = 0, \quad k = \overline{1, N}, \quad (1.45)$$

что следует из физических соображений [64].

Из выражений (1.29), (1.42), (1.43) и (1.33) получим комплексные потенциалы в нулевом приближении:

$$\Phi_{j(0)}^k(w_k) = \Upsilon_{j(0)}^k(\overline{w_k}) = \sigma_j^k/4 \quad (k = \overline{1, N+1}, j = \{k, k-1\}). \quad (1.46)$$

Данные потенциалы соответствуют кусочно–равномерному напряжённому состоянию композита с плоской поверхностью [64]:

$$\begin{aligned} \sigma_{11(0)}(z) &= \sigma_{N+1}, \quad z \in B_{N+1}, \\ \sigma_{11(0)}(z) &= \sigma_j = \frac{\mu_j(1 + \varkappa_{j+1})}{\mu_{j+1}(1 + \varkappa_j)} \sigma_{j+1}, \quad z \in B_j, \quad j = \overline{1, N}. \end{aligned} \quad (1.47)$$

Поскольку форма свободной границы определяется выражением (1.1), решение задачи в первом приближении будем искать в следующем виде:

$$\Delta\sigma_{(1)}^k(x_1) = P_1^k \sin(bx_1) + Q_1^k \cos(bx_1), \quad (1.48)$$

$$\Delta u_{(1)}^{k'}(x_1) = P_2^k \sin(bx_1) + Q_2^k \cos(bx_1).$$

Тогда СИУФ в каждом приближении на основании свойств интеграла типа Коши сводится к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) относительно неизвестных коэффициентов  $P_1^k, P_2^k, Q_1^k, Q_2^k$ , где в качестве свободных членов выступают коэффициенты Фурье  $C_{1(1)}^k, C_{2(1)}^k, D_{1(1)}^k, D_{2(1)}^k$  известных функций  $H_{1(1)}^k(x_1), H_{2(1)}^k(x_1)$ :

$$\begin{aligned} H_{1(1)}^k(x_1) &= C_{1(1)}^k \sin(bx_1) + D_{1(1)}^k \cos(bx_1), \\ H_{2(1)}^k(x_1) &= C_{2(1)}^k \sin(bx_1) + D_{2(1)}^k \cos(bx_1). \end{aligned} \quad (1.49)$$

Используя разложения (1.48), (1.49), система  $2N-2$  интегральных уравнений (1.44) сводится к СЛАУ относительно коэффициентов  $P_r^k, Q_r^k$  ( $r = \{1, 2\}$ ).

Явные аналитические соотношения между коэффициентами  $P_r^k$ ,  $Q_r^k$  и  $C_{r(m)}^k$ ,  $D_{r(m)}^k$  ( $r = \{1,2\}$ ) получены в программном комплексе Maple и не приводятся здесь в силу громоздкости.

С учётом полученного решения СЛАУ, выражения (1.21), (1.22), (1.28), (1.35), (1.36), (1.37), (1.42), (1.43) позволяют определить напряжённо – деформированное состояние многослойной плёночной системы в любом приближении, а следовательно, найти удельную энергию упругой деформации  $U$  по формулам (1.17), (1.18).

## 1.4 Численные результаты

Интегрирование эволюционного уравнения (1.20) приводит к следующей зависимости амплитуды возмущения от времени, длины волны начального возмущения, толщин плёнок, упругих параметров материалов, диффузионного коэффициента, поверхностного напряжения и действующих продольных напряжений

$$\ln \left( \frac{A(\tau)}{A_0} \right) = R(a, h_1 \dots h_N, \lambda_1 \dots \lambda_N, \mu_1 \dots \mu_N, K_s, \sigma^s, \sigma_0) \tau. \quad (1.50)$$

Отметим, что правая часть выражения (1.50), определена в явном виде согласно описанному выше подходу. С этой целью разработана программа в пакете символьных вычислений Maple. Однако, в силу громоздкости полученного выражения, в работе оно не приводится.

В качестве примера рассмотрим двухслойное ( $N = 2$ ) плёночное покрытие. Упругие параметры верхней плёнки  $\lambda_1 = 58,17$  ГПа и  $\mu_1 = 26,13$  ГПа соответствуют алюминию. Для простоты рассматривается металлическая система, т.е. предполагается, что коэффициенты Пуассона материалов сред  $B_j$  ( $j = \overline{1,3}$ ) равны  $\nu_j = 0,3$  ( $j = \overline{1,3}$ ). В качестве второго независимого параметра изотропных упругих сред рассматриваются модули сдвига  $\mu_j$  ( $j = \overline{1,3}$ ), связанные следующим образом:  $\mu_1/\mu_2 = r_1$ ,  $\mu_2/\mu_3 = r_2$ ;  $r_1, r_2$  — отношения жёсткостей материалов.

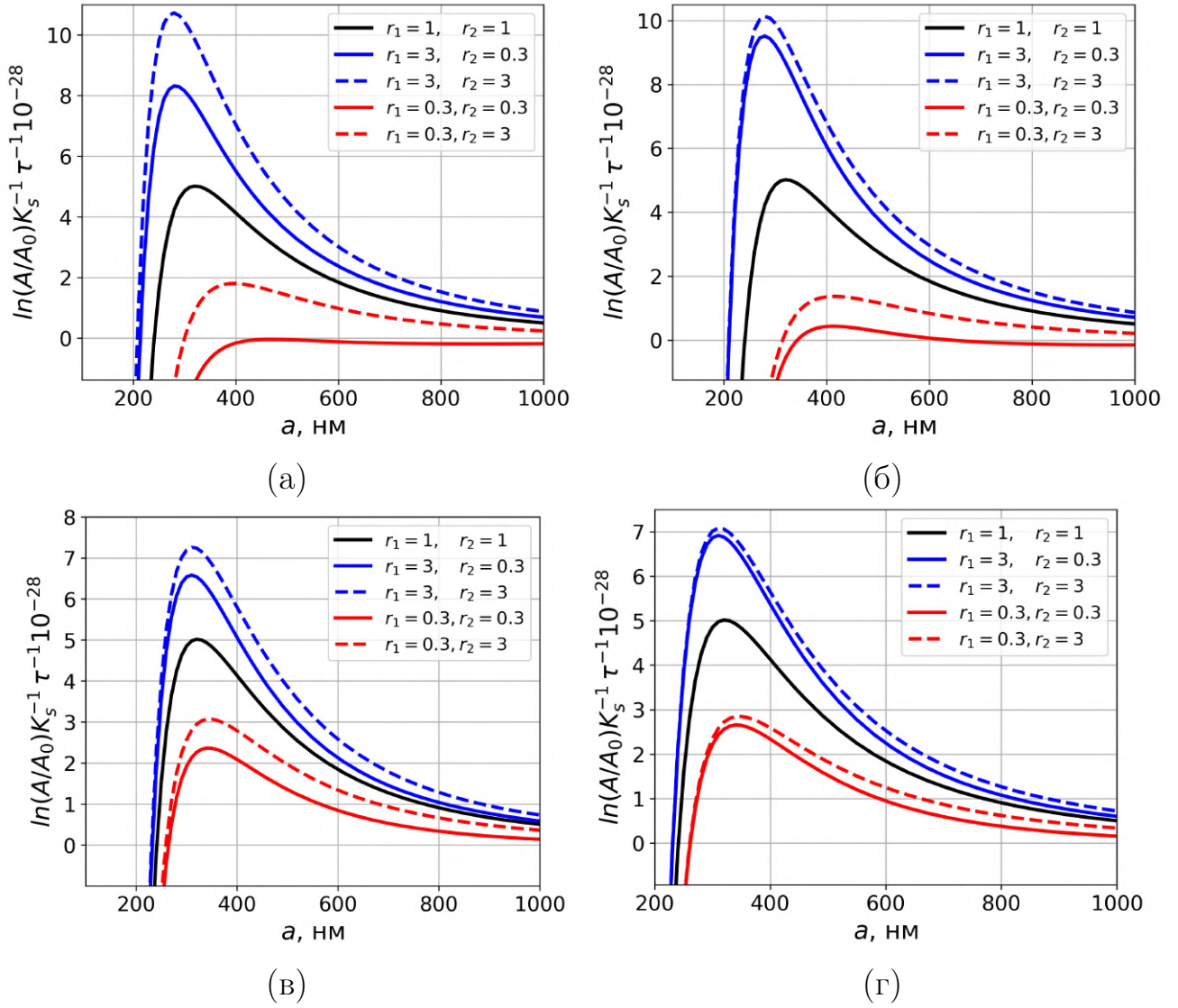


Рисунок 1.3 — Зависимость относительной амплитуды  $A(\tau)/A_0$  периодического рельефа поверхности многослойного плёночного покрытия от длины волны искривления  $a$  при  $h_1 = 50$  нм,  $h_2 = 50$  нм (а),  $h_1 = 50$  нм,  $h_2 = 100$  нм (б),  $h_1 = 100$  нм,  $h_2 = 50$  нм (в) и  $h_1 = 100$  нм,  $h_2 = 100$  нм (г)

На Рис. 1.3 представлена зависимость относительной амплитуды  $A(\tau)/A_0$  рельефа свободной поверхности многослойного плёночного покрытия от длины волны возмущения  $a$  при различных значениях параметров системы. Продольные усилия в плёнке равны  $\sigma_1 = 1$  ГПа. Устойчивому состоянию соответствует такая длина волны  $a = a_{cr}$ , при которой  $\ln(A(\tau)/A_0) = 0$ . При  $a < a_{cr}$  амплитуда рельефа убывает со временем, т. е. происходит сглаживание поверхности. В случае  $a > a_{cr}$  амплитуда возмущения увеличивается со временем. Значение

длины волны  $a_{max}$ , при котором  $\ln(A(\tau)/A_0)$  достигает своего наибольшего положительного значения, соответствует наибольшей скорости роста волнистости. Значения длин волн  $a_{cr}$  и  $a_{max}$ , соответствующие рассмотренным параметрам системы, представлены в Таблицах 1.1, 1.2.

Таблица 1.1

Критические значения  $a_{cr}$  длин волн искривления межфазной границы, определённые при растягивающих усилиях

$r_1$		0,3	0,3	3,0	3,0
$r_2$		0,3	3,0	0,3	3,0
$h_1$ , нм	$h_2$ , нм	$a_{cr}$ , нм			
50	50	—	300	213	208
50	100	343	314	210	210
100	50	264	259	232	231
100	100	261	261	231	231

Таблица 1.2

Длины волн  $a_{max}$ , соответствующие наибольшей скорости роста амплитуды рельефа межфазной границы, определённые при растягивающих усилиях

$r_1$		0,3	0,3	3,0	3,0
$r_2$		0,3	3,0	0,3	3,0
$h_1$ , нм	$h_2$ , нм	$a_{max}$ , нм			
50	50	—	396	282	279
50	100	413	416	279	281
100	50	343	345	309	312
100	100	342	346	310	312

Полученные результаты показывают, что с увеличением толщины верхней плёнки критическое значение длины волны возмущения для двухслойного плёночного покрытия стремится к значению, соответствующему устойчивому состоянию поверхности твёрдого тела без плёночного покрытия с упругими свойствами верхней плёнки [56]. Также, с увеличением толщины второго слоя, влияние подложки становится пренебрежимо малым, а критические значения стремятся к значениям, соответствующим однослойному плёночному покрытию [4].

Кроме того, видно, что увеличение значений относительной жёсткости приводит к уменьшению критического значения длины волны возмущения [11; 129].

В плёночной системе с параметрами  $h_1 = h_2 = 50$  нм,  $r_1 = r_2 = 0,3$  максимальное значение  $\ln(A(\tau)/A_0)$  отрицательное, следовательно при любых длинах волн начального искривления поверхность плёночного покрытия будет сглаживаться со временем.

Таблица 1.3

Критические значения  $a_{cr}$  длин волн искривления межфазной границы, определённые при сжимающих усилиях

$r_1$		0,3	0,3	3,0	3,0
$r_2$		0,3	3,0	0,3	3,0
$h_1$ , нм	$h_2$ , нм	$a_{cr}$ , нм			
50	50	331	276	205	201
50	100	299	286	203	202
100	50	244	241	221	221
100	100	243	242	221	221

Таблица 1.4

Длины волн  $a_{max}$ , соответствующие наибольшей скорости роста амплитуды рельефа межфазной границы, определённые при сжимающих усилиях

$r_1$		0,3	0,3	3,0	3,0
$r_2$		0,3	3,0	0,3	3,0
$h_1$ , нм	$h_2$ , нм	$a_{cr}$ , нм			
50	50	398	365	271	269
50	100	371	379	269	271
100	50	318	321	296	299
100	100	318	321	297	299

Отметим, что в данной работе, в отличие от [56; 85], принято во внимание поверхностное напряжение. Это позволило оценить влияние знака продольных усилий. В Таблицах 1.3, 1.4 представлены значения длин волн  $a_{cr}$  и  $a_{max}$ , определённые при действии сжимающих усилий. Относительные разности  $|a_{cr}^+ - a_{cr}^-|/a_{cr}^-$  между критическими значениями длин волн соответствующими

разным знакам продольных усилий представлены в Таблице 1.5 ( $a_{cr}^+$  соответствуют растягивающим усилиям,  $a_{cr}^-$  — сжимающим).

Таблица 1.5

## Влияние знака продольных усилий

$r_1$		0,3	0,3	3,0	3,0
$r_2$		0,3	3,0	0,3	3,0
$h_1$ , нм	$h_2$ , нм	$ a_{cr}^+ - a_{cr}^- /a_{cr}^-$			
50	50	—	0,087	0,039	0,035
50	100	0,147	0,098	0,034	0,04
100	50	0,082	0,075	0,05	0,045
100	100	0,074	0,079	0,045	0,045

## 1.5 Выводы

В данной главе предложен подход к анализу морфологической устойчивости свободной поверхности многослойного плёночного покрытия. На основе уравнений Шаттлворта – Херринга и Юнга – Лапласа учтено постоянное поверхностное напряжение, что позволило учесть влияние знака продольных усилий. Предполагалось, что в начальный момент времени форма свободной поверхности отлична от плоской и описывается периодической функцией. Также считалось, что плёночная система находится в напряжённом состоянии, обусловленном несоответствием параметров кристаллических решёток материалов или внешними усилиями. В процессе релаксации напряжений рельеф поверхности может изменяться в результате самодиффузии приповерхностных атомов. При этом, поток атомов вдоль поверхности плёночного покрытия вызван неравномерным распределением напряжений. Для определения напряжённо – деформированного состояния получено решение статической задачи теории упругости с использованием подхода Грекова и Костырко [64]. На основе первого приближения в методе разложения по малому параметру получена зависимость изменения амплитуды периодического рельефа от времени, физических

и геометрических параметров задачи. В качестве примера рассмотрено двух-слойное плёночное покрытие. Построена зависимость изменения амплитуды от длины волны начального возмущения со временем при различных относительных жёсткостях и толщинах плёнок. На основе полученных результатов можно сделать следующие выводы:

- критические значения длины волны возрастают с уменьшением отношения жёсткостей верхней и нижней плёнок, а также нижней плёнки и подложки;
- влияние относительной жёсткости на морфологическую устойчивость свободной поверхности многослойного плёночного покрытия возрастает с уменьшением толщин плёнок;
- в многослойной плёночной системе с увеличением толщины одного из слоев снижается влияние нижележащих слоёв;
- влияние знака продольных усилий увеличивается с уменьшением толщины слоя, в случае когда его жёсткость меньше жёсткости нижележащего слоя;
- влияние знака продольных усилий снижается с уменьшением толщины слоя, в случае когда его жёсткость больше жёсткости нижележащего слоя.

Отметим, что в рамках данной главы поверхностное напряжение считалось постоянным, независящим от упругих свойств приповерхностного слоя. В следующих главах на основе модели поверхностной/межфазной упругости Гёртина–Мёрдока будет учтено влияние упругих свойств свободных и межфазных границ на их морфологическую устойчивость.

## Глава 2

### Морфологическая устойчивость наноструктурированной поверхности твёрдого тела

В данной главе представлен теоретический подход, позволяющий прогнозировать зарождение топологических дефектов на поверхности твёрдого тела с учётом её упругих свойств. Предполагая, что при определённых условиях атомы приповерхностного слоя могут диффундировать, здесь рассматривается самоорганизация рельефа поверхности твёрдого тела в случае диффузионного массопереноса, вызываемого неоднородным полем напряжений. Скорость изменения рельефа свободной поверхности зависит от поля объёмных и поверхностных напряжений, а также термодинамических свойств поверхности. Для определения напряжённо-деформированного состояния твёрдого тела строится решение соответствующей задачи теории упругости в первом приближении метода возмущений. Далее, из решения линеаризованного эволюционного уравнения определяются условия, при которых наблюдается рост, сглаживание или устойчивость рельефа поверхности твёрдого тела.

#### 2.1 Постановка задачи

В качестве модели твёрдого тела, находящегося в условиях плоской деформации, рассмотрим однородную полуплоскость  $B$  комплексной переменной  $z = x_1 + ix_2$  ( $i^2 = -1$ ) с криволинейной границей  $S$  (см. Рис. 2.1). В соответствии с моделью поверхностной упругости Гёртина – Мёрдока [73; 74], предполагается, что упругие свойства приповерхностного слоя и основного материала различны. При этом приповерхностный слой рассматривается как упругая



мембрана  $S$ , когерентно связанная с  $B$

$$S = \{z : z \equiv \zeta = x_1 + i\varepsilon(\tau)f(x_1)\}, \quad B = \{z : x_2 < \varepsilon(\tau)f(x_1)\},$$

$$\varepsilon(\tau) = \frac{A(\tau)}{a} \ll 1 \quad \forall \tau, \quad A(0) = A_0, \quad f(x_1) = a \cos(bx_1),$$
(2.1)

где  $b = 2\pi/a$  — волновое число,  $a$  — длина волны периодического рельефа поверхности и  $A(\tau)$  — амплитуда искривления, которая может меняться со временем.

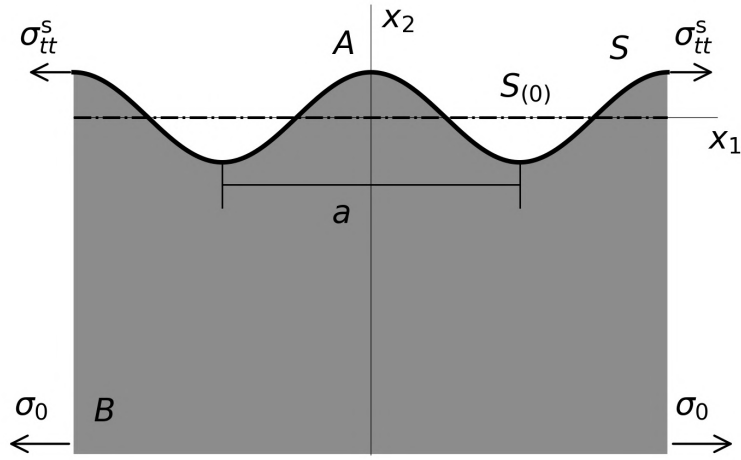


Рисунок 2.1 — Модель твёрдого тела со слабоискривлённой границей под действием продольных усилий

Для описания упругого поведения поверхности твёрдого тела используются упрощённые определяющие соотношения теории поверхностной упругости Гёртина – Мёрдока. Предполагается, что поверхностная энергия зависит только от поверхностных напряжений и не зависит от градиента вектора перемещений

$$\sigma_{tt}^s(\zeta) = \gamma^0 + (\lambda^s + 2\mu^s)\varepsilon_{tt}^s(\zeta), \quad \sigma_{33}^s(\zeta) = \gamma^0 + (\lambda^s + \gamma^0)\varepsilon_{tt}^s(\zeta), \quad \zeta \in S, \quad (2.2)$$

где  $\sigma_{tt}^s$  — нормальное тангенциальное поверхностное напряжение,  $\varepsilon_{tt}^s$  — нормальная тангенциальная поверхностная деформация,  $\gamma^0$  — остаточное поверхностное напряжение,  $\lambda^s$  и  $\mu^s$  — модули поверхностной упругости, аналогичные коэффициентам Ламе.

Закон Гука для объёмной фазы в случае плоской деформации запишем в терминах постоянных Ламе

$$\begin{aligned}\sigma_{nn}(z) &= (\lambda + 2\mu)\varepsilon_{nn}(z) + \lambda\varepsilon_{tt}(z), & \sigma_{tt}(z) &= (\lambda + 2\mu)\varepsilon_{tt}(z) + \lambda\varepsilon_{nn}(z), \\ \sigma_{nt}(z) &= 2\mu\varepsilon_{nt}(z), & \sigma_{33}(z) &= \frac{\lambda}{\lambda + \mu} [\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z)], & z \in B.\end{aligned}\tag{2.3}$$

Здесь  $\sigma_{nn}, \sigma_{tt}, \sigma_{nt}$  и  $\varepsilon_{nn}, \varepsilon_{tt}, \varepsilon_{nt}$  — компоненты тензора деформаций и тензора напряжений Коши в локальной декартовой прямоугольной системе координат  $n, t$  (ось  $\mathbf{n}$  направлена по нормали к границе  $S$ ),  $\lambda$  и  $\mu$  — упругие параметры Ламе.

На бесконечности в области  $B$  действуют постоянные продольные напряжения  $\sigma_0$ . При этом все остальные напряжения, а также угол поворота материальной частицы  $\omega$  на бесконечности равны нулю

$$\lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{11} = \sigma_0, \quad \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{22} = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{12} = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \omega = 0.\tag{2.4}$$

Стоит отметить, что предлагаемая модель может использоваться при рассмотрении плёночного покрытия, при условии, что подложка не влияет на деформацию приповерхностного слоя (например, в случае, когда толщина плёнки больше длины волны возмущения). В таком случае, в качестве продольных напряжений  $\sigma_0$  могут выступать напряжения несоответствия.

Условия равновесия на границе формулируются в терминах обобщённого закона Юнга – Лапласа и в рамках упрощённой модели Гёртина – Мёрдока могут быть записаны в виде

$$\sigma(\zeta) = \kappa\sigma_{tt}^s(\zeta) - i\frac{1}{h}\frac{d\sigma_{tt}^s(\zeta)}{dx_1}, \quad \sigma = \sigma_{nn} + i\sigma_{nt}, \quad \zeta \in S,\tag{2.5}$$

где  $h$  и  $\kappa$  — метрический коэффициент и кривизна искривлённой границы  $S$  соответственно.

Поскольку считается, что поверхностная и объёмная фазы идеально связаны, должно выполняться условие равенства деформаций на границе  $S$ :

$$\varepsilon_{tt}^s(\zeta) = \varepsilon_{tt}(\zeta), \quad \zeta \in S.\tag{2.6}$$

Предполагается, что в каждый момент времени  $\tau$  система (2.1)–(2.6) находится в механическом равновесии, однако при этом она необязательно находится в состоянии термодинамического равновесия. Одним из условий термодинамического равновесия для изолированной системы при постоянной температуре является равномерность распределения химического потенциала.

Локальный химический потенциал  $\chi$  свободной поверхности  $S$  запишем в следующем виде [93]:

$$\chi(\zeta, \tau) = [U(\zeta, \tau) - \kappa(\zeta, \tau)U_s(\zeta, \tau)] \Omega, \quad \zeta \in S, \quad (2.7)$$

где  $\Omega$  — атомный объём,  $U$  — удельная энергия деформации вдоль поверхности  $S$  и  $U_s$  — удельная поверхностная энергия. Отметим, что здесь, в соответствии с моделью Гёртина–Мёрдока, в качестве удельной поверхностной энергии рассматривается энергия деформации мембраны.

Аналогично Главе 1, из закона сохранения массы находится скорость перемещения границы  $S$  в нормальном направлении. Запишем ее в виде эволюционного уравнения, описывающего изменение формы границы тела  $g(x_1, \tau) = \varepsilon(\tau)f(x_1)$  со временем [93; 130]

$$\frac{\partial g(x_1, \tau)}{\partial \tau} = K_s h(x_1, \tau) \frac{\partial^2}{\partial s^2} [U(\zeta, \tau) - \kappa(x_1, \tau)U_s(\zeta, \tau)], \quad K_s = \frac{D_s C_s \Omega^2}{k_b T}. \quad (2.8)$$

Для того чтобы проинтегрировать дифференциальное уравнение (2.8) и определить условия, при которых будет наблюдаться устойчивость рельефа поверхности, необходимо найти распределение удельной энергии деформации  $U$  и удельной поверхностной энергии  $U_s$  вдоль поверхности твёрдого тела. Поскольку в данной работе рассматривается слабое изменение рельефа свободной поверхности, учитывая ограничение  $A(\tau) \ll a \forall \tau$ , накладываемое на искривление поверхности (2.1), компоненты тензоров напряжений и деформаций объёмной и поверхностной упругости определяются в первом приближении метода

возмущений:

$$\begin{aligned}
\sigma_{nn}(z, \tau) &= \varepsilon(\tau)\sigma_{nn(1)}(z), \quad \sigma_{nt}(z, \tau) = \varepsilon(\tau)\sigma_{nt(1)}(z), \\
\varepsilon_{nn}(z, \tau) &= \varepsilon_{nn(0)} + \varepsilon(\tau)\varepsilon_{nn(1)}(z), \quad \varepsilon_{nt}(z, \tau) = \varepsilon(\tau)\varepsilon_{nt(1)}(z), \\
\sigma_{tt}(z, \tau) &= \sigma_{tt(0)} + \varepsilon(\tau)\sigma_{tt(1)}(z), \quad \varepsilon_{tt}(z, \tau) = \varepsilon_{tt(0)} + \varepsilon(\tau)\varepsilon_{tt(1)}(z), \\
\sigma_{tt}^s(z, \tau) &= \sigma_{tt(0)}^s + \varepsilon(\tau)\sigma_{tt(1)}^s(z), \quad \varepsilon_{tt}^s(z, \tau) = \varepsilon_{tt(0)}^s + \varepsilon(\tau)\varepsilon_{tt(1)}^s(z).
\end{aligned} \tag{2.9}$$

Отметим, что  $\sigma_{nn(0)}(z) = \sigma_{nt(0)}(z) = \varepsilon_{nt(0)}(z) = 0$  в соответствии с (2.3) и (2.4).

Удельная энергия упругой деформации определяется по формуле (1.18). Поверхностная энергия в случае упрощённой модели Гёртина – Мёрдока имеет вид [122]

$$U_s(z, \tau) = \gamma^0(1 + \varepsilon_{tt}^s(z, \tau)) + \frac{1}{2}(\lambda^s + 2\mu^s - \gamma^0)\varepsilon_{tt}^{s2}(z, \tau). \tag{2.10}$$

Выражения для метрического коэффициента  $h$  и кривизны  $\kappa$  искривлённой поверхности также запишем в первом приближении метода возмущений

$$\kappa(x_1, \tau) = \varepsilon(\tau)f''(x_1), \quad h(x_1, \tau) = 1. \tag{2.11}$$

Подставляя выражения (1.18), (2.10) и (2.11) в уравнение (2.8), приходим к обыкновенному дифференциальному уравнению, описывающему изменение амплитуды искривления поверхности со временем [93]

$$\begin{aligned}
\frac{dA(\tau)}{d\tau}f(x_1) &= \frac{1}{2}A(\tau)K_s \frac{d^2}{dx_1^2} [\varepsilon_{nn(0)}\sigma_{nn(1)}(x_1) + \\
&+ \sigma_{tt(0)}\varepsilon_{tt(1)}(x_1) + \varepsilon_{tt(0)}\sigma_{tt(1)}(x_1) - \\
&- \left\{ \gamma^0(1 + \varepsilon_{tt(0)}^s(z, \tau)) + \frac{1}{2}(\lambda^s + 2\mu^s - \gamma^0)\varepsilon_{tt(0)}^{s2}(z, \tau) \right\} f''(x_1) \Big].
\end{aligned} \tag{2.12}$$

## 2.2 Линейный анализ эволюции рельефа свободной поверхности твёрдого тела

Для того, чтобы проинтегрировать эволюционное уравнение (2.12), необходимо решить плоскую задачу теории упругости (2.1) – (2.6). Используя метод решения соответствующей задачи [65], определим компоненты тензора напряжений и тензора деформаций объёмной и поверхностной фаз.

В соответствии с [17; 65], комплексный вектор напряжений  $\sigma = \sigma_{nn} + i\sigma_{nt}$  на площадке с нормалью  $\mathbf{n}$  и касательной  $\mathbf{t}$  в точке  $z$  определяются через комплексные потенциалы Гурса – Колосова  $\Phi$  и  $\Upsilon$  по формуле

$$\sigma(z) = \Phi(z) + \overline{\Phi(z)} - \left[ \Upsilon(\bar{z}) + \overline{\Phi(z)} - (z - \bar{z}) \overline{\Phi'(z)} \right] e^{-2i\alpha}, \quad z \in B, \quad (2.13)$$

где  $\alpha$  — угол наклона площадки с нормалью  $\mathbf{n}$  относительно  $x_1$ ,  $\Phi$  и  $\Upsilon$  — функции голоморфные в  $B$  и  $\tilde{B} = \{z : x_2 > -\varepsilon f(x_1)\}$  соответственно, черта сверху означает комплексное сопряжение, штрих — производную по аргументу.

Значения комплексных потенциалов  $\Phi$  и  $\Upsilon$  на бесконечности определяются из условий (2.4) и формулы (2.13), если принять  $\alpha = 0$  и  $\alpha = \pi/2$

$$\lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \Phi(z) = \lim_{x_2 \rightarrow +\infty} \Upsilon(z) = \sigma_0/4. \quad (2.14)$$

В соответствии с первым приближением метода возмущений [65], неизвестные функции  $\Phi$  и  $\Upsilon$  следует искать в виде

$$\Phi(z) = \Phi_{(0)}(z) + \varepsilon \Phi_{(1)}(z), \quad \Upsilon(z) = \Upsilon_{(0)}(z) + \varepsilon \Upsilon_{(1)}(z), \quad (2.15)$$

В свою очередь, граничные значения функций  $\Phi_{(m)}$ ,  $\Upsilon_{(m)}$  и  $\sigma_{tt(m)}^s$  на криволинейной границе  $S$  раскладываются в ряд Тейлора в окрестности прямой  $x_2 = 0$ , при этом вещественная переменная  $x_1$  рассматривается как параметр. В связи с тем, что решение строится в первом приближении метода возмущений, в данном случае рассматривается только линейная часть ряда Тейлора

$$\Psi_{(m)}(\zeta) = \Psi_{(m)}(x_1) + i\varepsilon f(x_1) \Psi'_{(m)}(x_1), \quad m = \{0, 1\}, \quad (2.16)$$

где  $\Psi_{(m)}$  означает любую из вышеуказанных функций.

С учётом равенства  $\varepsilon f'(x_1) = \operatorname{tg}\alpha$ , получим следующее выражение для функции  $e^{-2i\alpha}$ , входящей в правую часть (2.12):

$$e^{-2i\alpha} = 1 - 2i\varepsilon f'(x_1). \quad (2.17)$$

Подставляя выражения (2.11), (2.13), (2.15)–(2.17) в граничное условие (2.5) и приравнивая коэффициенты при соответствующих степенях  $\varepsilon$ , приходим к последовательности задач Римана–Гильберта

$$\Xi_{(m)}^+(x_1) - \Xi_{(m)}^-(x_1) = i\sigma_{tt(m)}^{s'}(x_1) + F_m(x_1), \quad m = \{0,1\}, \quad (2.18)$$

где вспомогательные функции  $\Xi_{(m)}$  и  $F_m$  задаются следующим образом [65]:

$$\Xi_{(m)}(z) = \begin{cases} \Upsilon_{(m)}(z), & \operatorname{Im} z > 0, \\ \Phi_{(m)}(z), & \operatorname{Im} z < 0, \end{cases} \quad (2.19)$$

$$\Xi_{(m)}^\pm(x_1) = \lim_{z \rightarrow x_1 \pm i0} \Xi_{(m)}(z),$$

$$\begin{aligned} F_0(x_1) = 0, \quad F_1(x_1) = -if(x_1) \left[ \Phi'_{(0)}(x_1) + \Upsilon'_{(0)}(x_1) + 2\overline{\Phi'_{(0)}(x_1)} \right] + \\ + 2if'(x_1) \left[ \overline{\Phi_{(0)}(x_1)} + \Upsilon_{(0)}(x_1) \right] - f(x_1)\sigma_{tt(0)}^{s''}(x_1) - f''(x_1)\sigma_{tt(0)}^s(x_1). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Решение уравнений (2.18) записывается в терминах интегралов типа Коши [17; 65] и определяет интегральную зависимость комплексных потенциалов Гурса–Колосова через неизвестные функции  $\sigma_{tt(m)}^{s'}$

$$\Xi_{(m)}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i\sigma_{tt(m)}^{s'}(\xi)}{z - \xi} d\xi + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F_m(\xi)}{z - \xi} d\xi + C_m, \quad (2.21)$$

где  $C_0 = \sigma_0/4$  и  $C_1 = 0$  в соответствии с выражением (2.14).

Используя определяющие соотношения (2.2) и (2.3), перепишем условие неразрывности через компоненты тензоров поверхностных и объёмных напряжений

$$\sigma_{tt}^s(\zeta) = \frac{\lambda^s + 2\mu^s}{4\mu(\lambda + \mu)} [(\lambda + 2\mu)\sigma_{tt}(\zeta) - \lambda\sigma_{nn}(\zeta)] + \gamma_0. \quad (2.22)$$

Выражения для определения компонент тензора напряжений  $\sigma_{tt}$  и  $\sigma_{nn}$  находятся из (2.13)

$$\sigma_{nn}(z) + i\sigma_{nt}(z) = \Phi(z) + \overline{\Phi(z)} - \left[ \Upsilon(\bar{z}) + \overline{\Phi(z)} - (z - \bar{z}) \overline{\Phi'(z)} \right] e^{-2i\alpha}, \quad (2.23)$$

$$\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z) = 4\text{Re}\Phi(z).$$

Подставляя выражения (2.15)–(2.17) и (2.23) в (2.22) и приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях  $\varepsilon^m$ ,  $m = \{0, 1\}$ , перепишем граничное условие (2.6) через неизвестные комплексные потенциалы  $\Phi_{(m)}$ ,  $\Upsilon_{(m)}$  в каждом приближении метода разложения по малому параметру

$$\sigma_{tt(m)}^s(x_1) = \frac{M}{2\mu} \text{Re} [\varkappa\Phi_{(m)}(x_1) + \Upsilon_{(m)}(x_1)] + V_m(x_1). \quad (2.24)$$

В выражении (2.24) приняты следующие обозначения:

$$\begin{aligned} M &= (\lambda^s + 2\mu^s), \quad \varkappa = (\lambda + 3\mu)/(\lambda + \mu), \quad V_0(x_1) = \gamma^0, \\ V_1(x_1) &= \frac{M}{2\mu} \text{Re} \left\{ if(x_1) \left[ \varkappa\Phi'_{(0)}(x_1) - \Upsilon'_{(0)}(x_1) - 2\overline{\Phi'_{(0)}(x_1)} \right] - \right. \\ &\quad \left. - 2if'(x_1) \left[ \overline{\Phi_{(0)}(x_1)} + \Upsilon_{(0)}(x_1) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Решение задачи в нулевом приближении метода возмущений ( $m = 0$ ) соответствует однородному напряжённому состоянию твёрдого тела с плоской поверхностью. Тогда из условий (2.14) получим

$$\Phi_{(0)}(z) = \Upsilon_{(0)}(z) = \sigma_0/4. \quad (2.26)$$

Далее, из выражения (2.25) находится поверхностное напряжение в нулевом приближении

$$\sigma_{tt(0)}^s(\zeta) = \gamma^0 + \frac{M(1 + \varkappa)}{8\mu} \sigma_0. \quad (2.27)$$

Компоненты тензора напряжений определяются по формуле (2.23) с учётом (2.26)

$$\sigma_{tt(0)}(z) = \sigma_0, \quad \sigma_{nn(0)}(z) = 0, \quad \sigma_{nt(0)}(z) = 0. \quad (2.28)$$

Поверхностное напряжение в первом приближении метода возмущений ( $m = 1$ ) будем искать в следующем виде:

$$\sigma_{tt(1)}^{s'}(x_1) = P \sin(bx_1) + Q \cos(bx_1). \quad (2.29)$$

Пользуясь свойствами интегралов типа Коши, уравнение (2.24) в первом приближении ( $m = 1$ ) с учётом (2.21) сводится к системе линейных алгебраических уравнений с неизвестными коэффициентами  $P$  и  $Q$ , решение которой имеет вид [65]:

$$P = \frac{Mab^2 \left[ (\varkappa + 1)\sigma_{tt(0)} + (\varkappa - 1)b\sigma_{tt(0)}^s \right]}{4\mu + M(\varkappa + 1)b}, \quad Q = 0. \quad (2.30)$$

Подставляя выражение (2.29) с найденными коэффициентами (2.30) в (2.21), получаем комплексные потенциалы в первом приближении метода возмущений

$$\Upsilon_{(1)}(z) = \frac{1}{2} \left[ P - ba(\sigma_{tt(0)} - b\sigma_{tt(0)}^s) \right] e^{ibz}, \quad z \in \tilde{B}, \quad (2.31)$$

$$\Phi_{(1)}(z) = \frac{1}{2} \left[ P - ba(\sigma_{tt(0)} + b\sigma_{tt(0)}^s) \right] e^{-ibz}, \quad z \in B.$$

Данные комплексные потенциалы определяют изменение однородного поля напряжений (2.27), (2.28) вследствие искривления свободной поверхности (2.1), описанного в терминах первого приближения



$$\sigma_{tt(1)}^s(\zeta) = - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{P_k}{b_k} \cos(b_k x_1), \quad \zeta \in S,$$

$$\sigma_{nn(1)}(z) + i\sigma_{nt(1)}(z) = \Phi_{(1)}(z) + \overline{\Phi_{(1)}(z)} -$$

$$- \left[ \Upsilon_{(1)}(\bar{z}) + \overline{\Phi_{(1)}(z)} - (z - \bar{z}) \overline{\Phi'_{(1)}(z)} \right] e^{-2i\alpha},$$

$$\sigma_{tt(1)}(z) + \sigma_{nn(1)}(z) = 4\text{Re}\Phi_{(1)}(z), \quad z \in B.$$
(2.32)

В следующем разделе на основе полученного решения будет проинтегрировано дифференциальное уравнение (2.12), описывающее изменение амплитуды  $A$  периодического возмущения свободной границы напряжённого твёрдого тела со временем  $\tau$ .

### 2.3 Численные результаты

Решив задачу теории упругости (2.1)–(2.6) и определив объёмную энергию деформации  $U$  и поверхностную энергию  $U_s$  по формулам (1.18) и (2.10), определим изменение амплитуды  $A$  рельефа поверхности твёрдого тела со временем  $\tau$ . Принимая во внимание выражения (2.2), (2.3), (2.27), (2.31) и (2.32), решение уравнения (2.12) запишем в виде

$$\ln \left( \frac{A(\tau)}{A_0} \right) = R_1 (R_2 \sigma_0 - R_3 \gamma_0) \tau, \quad (2.33)$$

где

$$R_1 = \frac{\sigma_0 \pi^3 K_s}{8a^3 \mu^2 ((\varkappa + 1) M \pi + 2\mu_2 a)},$$

$$R_2 = 2M^2 \varkappa (\varkappa + 1)^2 \pi^2 + M \pi a \mu (\varkappa + 1) (3\varkappa^2 + 6\varkappa - 5) +$$

$$+ 4a^2 (\varkappa + 1) \mu^2 (3\varkappa + 5),$$

$$R_3 = -16M\kappa(\kappa + 1)\mu\pi^2 - 8a\pi\mu^2(3\kappa^2 + 6\kappa - 5).$$

В качестве примера рассмотрим алюминий с объёмными упругими параметрами Ламе  $\lambda = 58,17$  ГПа и  $\mu = 26,13$  ГПа. Упругие свойства поверхности некоторых материалов получены методом молекулярного моделирования в ряде работ [104; 105; 126]. Для алюминия с кристаллографической ориентацией (111) остаточное поверхностное напряжение  $\gamma^0 = 1$  Н/м и поверхностные параметры Ламе  $\lambda^s = 6,851$  Н/м и  $\mu^s = -0,376$  Н/м [105]. Им соответствует поверхностная продольная жёсткость  $M = \lambda^s + 2\mu^s = 6,099$  Н/м. Отметим, что упругие параметры, как и остаточное поверхностное напряжение зависят от ориентации кристаллической решётки и других факторов [126], поэтому для исследования влияния данных параметров будем изменять их в некотором диапазоне.

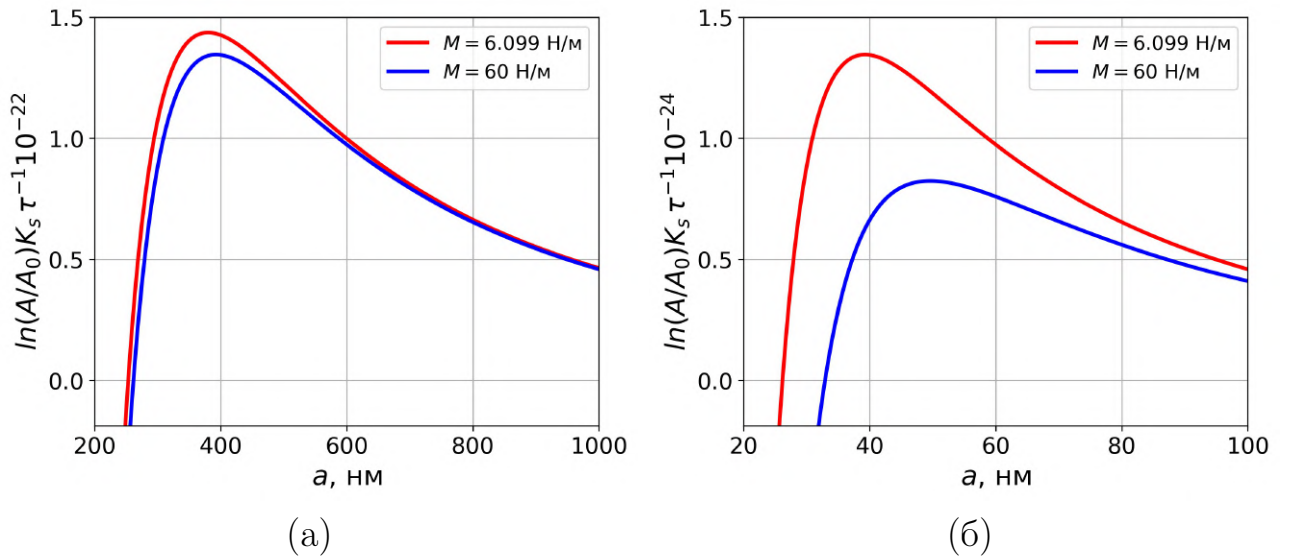


Рисунок 2.2 — Зависимость относительной амплитуды  $A(\tau)/A_0$  периодического рельефа поверхности твёрдого тела от длины волны искривления  $a$  при  $\gamma^0 = 1$  Н/м (а) и  $\gamma^0 = 0,1$  Н/м (б)

Зависимость относительной амплитуды  $A(\tau)/A_0$  от длины волны возмущения  $a$  представлена на Рис. 2.2 при  $\sigma_0 = 1$  ГПа,  $M = \{6,099; 60\}$  Н/м (красные и синие линии соответственно),  $\gamma^0 = 1$  Н/м (а) и  $\gamma^0 = 0,1$  Н/м (б). Результаты показывают разные скорости и характер изменения (рост и сглаживание) амплитуды рельефа поверхности твёрдого тела для разных длин волн возмущения. Критическое значение длин волн возмущения  $a_{cr}$ , при которых рельеф устойчив (т.е.  $\ln(A(\tau)/A_0) = 0$ ), определяются из пересечения кри-

вых с осью абсцисс. Рельеф поверхности с длиной волны меньше критического значения  $a_{cr}$  будет сглаживаться под действием поверхностной диффузии (т.е.  $\ln(A(\tau)/A_0) < 0$ ), тогда как амплитуда искривления с длиной волны больше критического значения будет увеличиваться со временем (т.е.  $\ln(A(\tau)/A_0) > 0$ ). Максимумы каждой кривой соответствуют длинам волн  $a_{max}$ , при которых будет наблюдаться наибольшая скорость роста амплитуды рельефа. Значения длин волн  $a_{cr}$  и  $a_{max}$  определённые при рассматриваемых параметрах системы представлены в Таблицах 2.1, 2.2. Критические значения длин волн вычисленные при  $\gamma^0 = 1$  Н/м слабо зависят от поверхностной жёсткости  $M$ . Для исследования влияния упругих параметров поверхности, в дальнейшем будет принимать  $\gamma^0 = 0,1$  Н/м.

Таблица 2.1

Критические значения длин волн  $a_{cr}$ , определённые при различных параметрах задачи

$M$ , Н/м	6,099	60
$\gamma^0$ , Н/м	$a_{cr}$ , нм	
1	253,2	261,6
0,1	26,1	32,9

Таблица 2.2

Значения длин волн  $a_{max}$ , соответствующие наибольшей скорости роста амплитуды рельефа поверхности твёрдого тела

$M$ , Н/м	6,099	60
$\gamma^0$ , Н/м	$a_{max}$ , нм	
1	379,8	392,4
0,1	39,3	49,7

На Рис. 2.3 представлен график распределения химического потенциала  $\chi(x_1)/\chi_0$  вдоль искривлённой поверхности твёрдого тела в пределах одного периода, где  $\chi_0$  – химический потенциал в равновесном состоянии. Пунктирная линия, соответствующая длине волны возмущения  $a = a_{cr}$ , отражает равномерное распределение химического потенциала: в данном случае поверхность

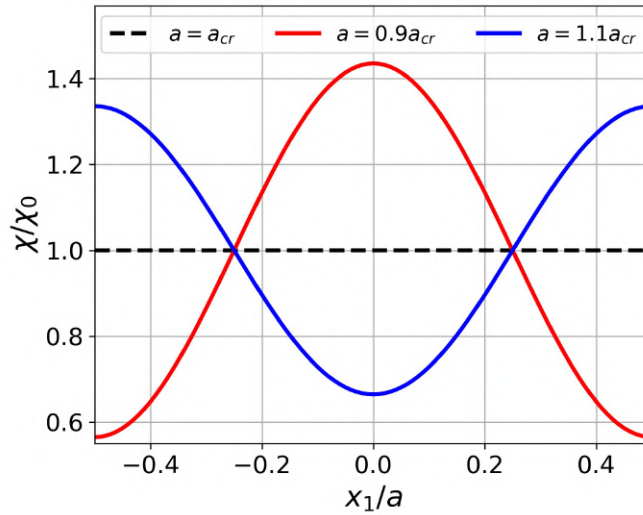


Рисунок 2.3 — Распределение химического потенциала  $\chi$  при различных длинах волн периодического искривления

твёрдого тела находится в состоянии термодинамического равновесия. Отметим, что в случае плоской поверхности химический потенциал также принимает постоянное значение. Красная кривая соответствует случаю  $a < a_{cr}$ . Как видно из рисунка химический потенциал имеет максимум в области выступа ( $x_1 = 0$ ) и минимум во впадине ( $x_1 = a$ ), следовательно, атомы будут диффундировать из выступа во впадину, тем самым выравнивая поверхность твёрдого тела. В случае  $a > a_{cr}$  (синяя кривая), система также не находится в состоянии термодинамического равновесия: поток атомов будет направлен от впадины к выступу, и амплитуда искривления будет увеличиваться со временем.

На Рис. 2.4 представлен график зависимости критического значения длины волны возмущения  $a_{cr}$  от остаточного поверхностного напряжения  $\gamma^0$  при  $M = 6,099$  Н/м (красные линии) и  $M = 60$  Н/м (синие линии). Результаты показывают, что критическое значение длины волны возрастает с увеличением остаточного поверхностного напряжения  $\gamma^0$ . Относительная разница между критическими значениями длин волн, полученными при  $\gamma^0 = 0,1$  Н/м и  $\gamma^0 = 0,2$  Н/м, составила 97% и 79% при  $M = 6,099$  Н/м и  $M = 60$  Н/м соответственно.

График зависимости критического значения длины волны возмущения  $a_{cr}$  поверхности твёрдого тела от поверхностной жёсткости  $M$  при  $\gamma^0 = \{0,08; 0,1; 0,12\}$  Н/м (красные, зелёные и синие линии соответственно) и  $\sigma_0 = 1$  ГПа изображён на Рис. 2.5 а. Из графика видно, что  $a_{cr}$  возрастает с увеличе-

нием  $M$ . Критические значения длин волн, определённые при  $M = 6,099$  Н/м и  $M = 60$  Н/м, отличаются на 30%, 25% и 22% при  $\gamma^0 = \{0,08; 0,1; 0,12\}$  Н/м соответственно.

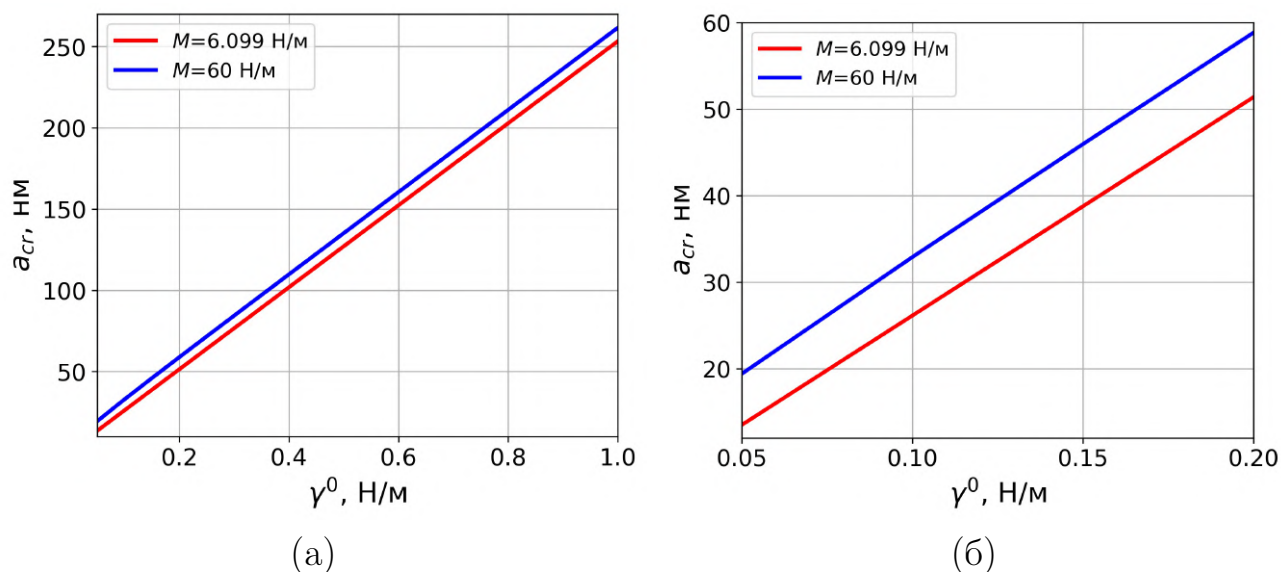


Рисунок 2.4 — Зависимость критического значения длины волны возмущения  $a_{cr}$  поверхности твёрдого тела от остаточного поверхностного напряжения  $\gamma^0$  при  $\gamma^0 \in [0,05; 1,0]$  Н/м (а) и  $\gamma^0 \in [0,05; 0,2]$  Н/м (б)

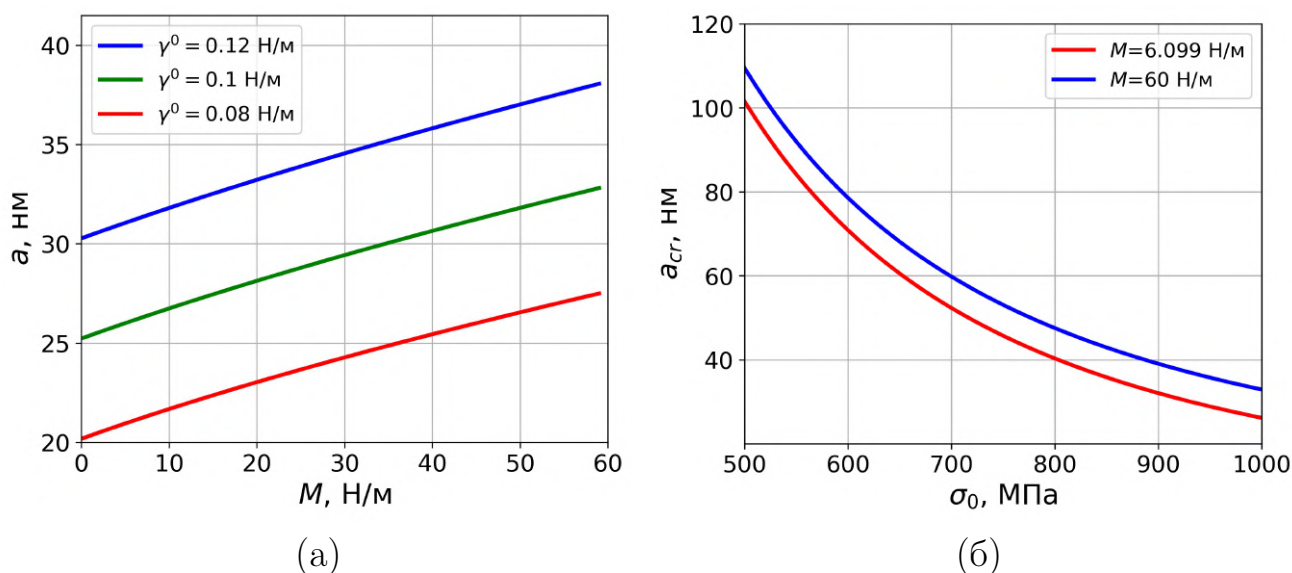


Рисунок 2.5 — Зависимость критического значения длины волны возмущения  $a_{cr}$  поверхности твёрдого тела от поверхностной жёсткости  $M$  (а) и продольных усилий  $\sigma_0$  (б)

На Рис. 2.5б представлена зависимость критического значения длины волны возмущения от величины продольных усилий  $\sigma_0$ . При увеличении продоль-

ных усилий  $\sigma_0$  с 0,5 ГПа до 1 ГПа критические значения длин волн уменьшаются на 74% и 69% при  $M = 6,099$  Н/м и  $M = 60$  Н/м соответственно, из чего можно заключить, что влияние продольных усилий на морфологическую устойчивость поверхности твёрдого тела незначительно выше при меньших значениях  $M$ . В отличие от Главы 1, в которой учитывалось постоянное поверхностное напряжение, здесь выявлено слабое влияние знака продольных усилий на морфологическую устойчивость свободной поверхности твёрдого тела. В дальнейшем предполагается исследовать влияние знака усилий приняв во внимание объёмную диффузию, как это было сделано в [5; 11; 114].

## 2.4 Выводы

В представленной главе разработан теоретический подход к анализу морфологической устойчивости поверхности твёрдого тела с учётом её упругих свойств на основе модели Гёртина – Мёрдока. Данный подход разработан исходя из того, что эволюция наряженной криволинейной поверхности происходит под действием поверхностной диффузии, определяемой производной химического потенциала. При этом неравномерное распределение химического потенциала обусловлено изменением упругой энергии и поверхностной энергии деформации вдоль границы тела.

Отметим, что в отличие от других работ по тематике исследования, в которых поверхностная энергия считалась постоянной, здесь, в силу рассмотрения наноразмерного рельефа поверхности, в качестве поверхностной энергии принималась энергия деформации поверхностного слоя, которая наряду с объёмной энергией деформацией определялась из решения плоской задачи о деформации твёрдого тела с искривлённой границей. В качестве основного соотношения получена явная зависимость амплитуды синусоидального рельефа поверхности твёрдого тела от времени, диффузионных параметров, поверхностных и объёмных упругих свойств материала, остаточных поверхностных напряжений и действующих продольных усилий.

В качестве примера проведён анализ морфологической устойчивости поверхности алюминия. Исследовано влияние физических параметров задачи на критическое значение длины волны искривления и получены следующие результаты:

- критическое значение длины волны искривления поверхности твёрдого тела возрастает с увеличением остаточного поверхностного напряжения и поверхностной продольной жёсткости, а также с уменьшением продольных усилий;
- влияние остаточных поверхностных напряжений на морфологическую устойчивость практически не зависит от поверхностной жёсткости;
- влияние продольных усилий возрастает при уменьшении поверхностной жёсткости;
- влияние поверхностной жёсткости увеличивается с уменьшением остаточных напряжений и продольных усилий.

Отметим, что полученные результаты справедливы также для наноструктурированной поверхности плёночного покрытия, при толщине плёнки намного большей амплитуды искривления. В этом случае подложка не влияет на распределение напряжений вблизи поверхности [89], а следовательно и на изменение химического потенциала вдоль искривлённой поверхности слоистой структуры. Влияние толщины плёночного покрытия на морфологическую устойчивость его поверхности будет рассмотрено в следующей главе.

## Глава 3

### Морфологическая устойчивость поверхности ультратонкого плёночного покрытия

Как отмечалось выше, с увеличением толщины плёночного покрытия влияние подложки на морфологическую устойчивость поверхности плёнки снижается. Следовательно, зависимость относительной амплитуды от длины волны возмущения, полученная с использованием подхода, описанного в Главе 2, будет справедлива при амплитуде и длине волны возмущения, меньшей чем толщина плёнки. Однако, например, в случае тонкой плёнки, критическое значение длины волны искривления поверхности может быть меньше толщины плёночного покрытия. В связи с чем в данной главе будет исследовано влияние толщины плёнки на устойчивость ее поверхности. С этой целью упругая энергия деформации и поверхностная энергия, входящие в эволюционное уравнение, будут определяться из решения задачи о совместной деформации плёнки и подложки. Аналогично предыдущей главе, с использованием модели поверхностной и межфазной упругости Гёртина – Мёрдока будет учтено влияние упругих свойств поверхности плёночного покрытия, а также границы соединения материалов. Для удобства читателя некоторые выражения, записанные в предыдущих главах, будут повторяться.

#### 3.1 Постановка задачи

Модель ультратонкого плёночного покрытия толщиной  $h_f$  в диапазоне 1 – 100 нм, осаждённого на подложку толщины  $h_s \gg h_f$  и находящегося в условиях плоской деформации, представим в виде неоднородной упругой полуплоскости  $B = B_1 \cup B_2$  комплексной переменной  $z = x_1 + ix_2$  ( $i^2 = -1$ ) с криволинейной свободной границей  $S_1$  и прямолинейной межфазной границей  $S_2$



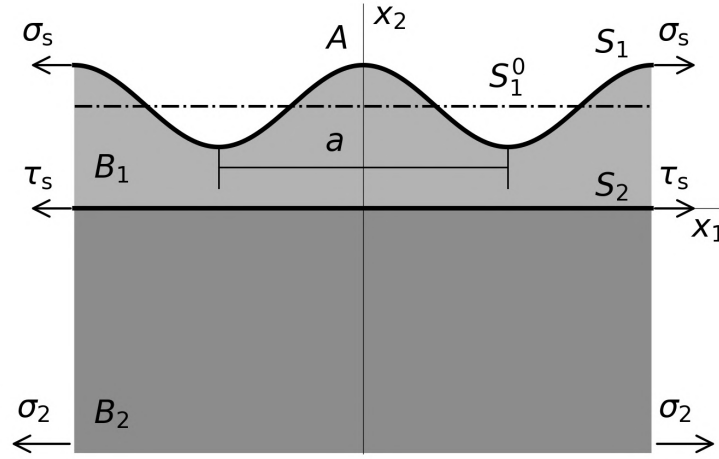


Рисунок 3.1 — Модель ультратонкого плёночного покрытия со слабоискривлённой свободной поверхностью под действием продольных усилий

$$S_1 = \{z : z \equiv \zeta_1 = x_1 + i[h_f + \varepsilon(\tau)f(x_1)]\}, \quad (3.1)$$

$$S_2 = \{z : z \equiv \zeta_2 = x_1\}, \quad \varepsilon(\tau) = \frac{A(\tau)}{a} \ll 1 \quad \forall \tau, \quad A(0) = A_0,$$

$$B_1 = \{z : 0 < x_2 < h_f + \varepsilon(\tau)f(x_1)\}, \quad B_2 = \{z : x_2 < 0\}. \quad (3.2)$$

В соответствии с моделью поверхностной/межфазной упругости Гёртина–Мёрдока свободная и межфазная границы представляются в виде пренебрежимо тонких слоёв, идеально сцепленных с объёмными фазами [73; 74]. Для описания их упругого поведения используются упрощённые определяющие соотношения поверхностной упругости в предположении, что поверхностная энергия не зависит от градиента вектора перемещений

$$\sigma_{tt}^s(\zeta_j) = \gamma_j^0 + (\lambda_j^s + 2\mu_j^s)\varepsilon_{tt}^s(\zeta_j), \quad \sigma_{33}^s(\zeta_j) = \gamma_j^0 + (\lambda_j^s + \gamma_j^0)\varepsilon_{tt}^s(\zeta_j), \quad \zeta \in S_j, \quad (3.3)$$

где  $\sigma_{tt}^s$  — окружное поверхностное/межфазное напряжение,  $\varepsilon_{tt}^s$  — окружная поверхностная/межфазная деформация,  $\gamma_j^0$  — остаточное поверхностное/межфазное напряжение,  $\lambda_j^s$  и  $\mu_j^s$  — модули поверхностной ( $j = 1$ ) и межфазной ( $j = 2$ ) упругости, аналогичные упругим параметрам Ламе.

Напряжения и деформации в объёмных фазах  $B_1$  и  $B_2$  связаны законом Гука, который в случае плоской деформации имеет вид

$$\begin{aligned}\sigma_{nn}(z) &= (\lambda_j + 2\mu_j)\varepsilon_{nn}(z) + \lambda_j\varepsilon_{tt}(z), & \sigma_{nt}(z) &= 2\mu_j\varepsilon_{nt}(z), \\ \sigma_{tt}(z) &= (\lambda_j + 2\mu_j)\varepsilon_{tt}(z) + \lambda_j\varepsilon_{nn}(z),\end{aligned}\tag{3.4}$$

$$\sigma_{33}(z) = \frac{\lambda_j}{\lambda_j + \mu_j} [\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z)], \quad z \in B_j.$$

В формулах (3.4)  $\sigma_{\alpha\beta}$  и  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  — компоненты тензора деформаций и тензора напряжений Коши соответственно, определённые на площадке с нормалью  $\mathbf{n}$  в локальной прямоугольной системе координат  $(n, t)$ ,  $\lambda_j$  и  $\mu_j$  — параметры Ламе среды  $B_j$ .

Согласно обобщённому закону Юнга–Лапласа условия механического равновесия на свободных и межфазных границах имеют вид

$$\sigma(\zeta_1) = \kappa(x_1)\sigma_s(x_1) - i\frac{1}{h}\frac{d\sigma_s(x_1)}{dx_1}, \quad \zeta_1 \in S_1,\tag{3.5}$$

$$\Delta\sigma(\zeta_2) = \sigma^+(\zeta_2) - \sigma^-(\zeta_2) = i\frac{d\tau_s(x_1)}{dx_1}, \quad \zeta_2 \in S_2,\tag{3.6}$$

где  $\sigma_s(x_1) = \sigma_{tt}^s(\zeta_1)$  — поверхностное напряжение на криволинейной границе  $S_1$ ,  $\tau_s(x_1) = \sigma_{tt}^s(\zeta_2)$  — межфазное напряжение на прямолинейной границе  $S_2$ ,  $\sigma = \sigma_{nn} + i\sigma_{nt}$  — вектор напряжений,  $\sigma^\pm = \lim_{z \rightarrow \zeta_2 \pm i0} \sigma(z)$ ,  $h$  и  $\kappa$  — метрический коэффициент и кривизна границы  $S_1$  соответственно.

Напряжения  $\sigma_{\alpha\beta}$  ( $\alpha, \beta = \{1, 2\}$ ) в декартовой прямоугольной системе координат  $(x_1, x_2)$  и угол поворота материальной частицы  $\omega$  на бесконечности удовлетворяют условиям

$$\lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{11} = \sigma_2, \quad \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{22} = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{12} = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \omega = 0.\tag{3.7}$$

Отметим, что продольные напряжения могут возникать вследствие рассогласования кристаллических решёток материалов [57]. Хотя они также могут быть обусловлены другими факторами, например механическими растягивающими усилиями [14].

В силу того, что в рамках используемого подхода предполагается, что поверхностная/межфазная и объёмные фазы идеально связаны [55; 73], на границах должны соблюдаться условия неразрывности

$$\varepsilon_{tt}^s(\zeta_1) = \varepsilon_{tt}(\zeta_1), \quad \zeta_1 \in S_1, \quad (3.8)$$

$$\Delta u(\zeta_2) = u^+(\zeta_2) - u^-(\zeta_2) = 0, \quad \zeta_2 \in S_2,$$

где  $u = u_1 + iu_2$  — вектор перемещений,  $u_1$  и  $u_2$  — перемещения вдоль декартовых осей  $(x_1, x_2)$  и  $u^\pm = \lim_{z \rightarrow \zeta_2 \pm i0} u(z)$ .

При релаксации напряжений рельеф свободной поверхности плёнки может меняться. Требуется определить зависимость амплитуды рельефа  $A$  от времени  $\tau$  при учёте поверхностной диффузии и упругого деформирования твёрдого тела с ультратонким плёночным покрытием переменной толщины.

### 3.2 Линейный анализ эволюции рельефа свободной поверхности плёнки

Уравнение, описывающее скорость изменения свободной границы  $S_1$  под действием поверхностной диффузии, имеет тот же вид, что и в Главе 2

$$\frac{\partial g(x_1, \tau)}{\partial \tau} = K_s h(x_1, \tau) \frac{\partial^2}{\partial s^2} [U(\zeta, \tau) - \kappa(x_1, \tau) U_s(\zeta, \tau)], \quad (3.9)$$

$$g(x_1, \tau) = \varepsilon(\tau) f(x_1), \quad K_s = \frac{D_s C_s \Omega^2}{k_b T}.$$

Отметим, что в уравнении (3.9) объёмная энергия деформации  $U$  и поверхностная энергия  $U_s$  определяются по формулам (1.18) и (2.10) из решения задачи (3.1) – (3.7) о совместной деформации подложки и плёночного покрытия.

Как и в предыдущих главах, здесь исследуется слабое изменение рельефа свободной поверхности, компоненты тензора напряжений и тензора деформаций объёмных и поверхностных фаз будем искать в первом приближении метода

возмущений. Тогда с учётом (1.18), (1.19), (2.9), (2.10) и уравнение (3.9) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{dA(\tau)}{d\tau} f(x_1) = & \frac{1}{2} A(\tau) K_s \frac{d^2}{dx_1^2} [\varepsilon_{nn(0)} \sigma_{nn(1)}(x_1) + \\ & + \sigma_{tt(0)} \varepsilon_{tt(1)}(x_1) + \varepsilon_{tt(0)} \sigma_{tt(1)}(x_1) - \\ & - \left\{ \gamma^0 (1 + \varepsilon_{tt(0)}^s(z, \tau)) + \frac{1}{2} (\lambda^s + 2\mu^s - \gamma^0) \varepsilon_{tt(0)}^{s2}(z, \tau) \right\} f''(x_1) \Big]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Компоненты тензоров напряжений и деформаций объёмных и поверхностных фаз в каждом приближении, входящие в правую часть уравнения (3.10), определяются из решения краевую задачу (3.1)–(3.8). Для этого будет использоваться подход, предложенный Грековым и Костырко [92].

В соответствии с принципом суперпозиции [2; 92] представим решение задачи для плёночного покрытия, осаждённого на подложку, в виде суммы решений задачи для однородной полуплоскости с искривлённой границей и с упругими свойствами плёнки и задачи о деформации двухкомпонентной плоскости с прямолинейной границей раздела. При этом считается, что в первой задаче на свободной границе  $S_1$  действует неизвестная нагрузка, а во второй на межфазной границе  $S_2$  имеются неизвестные скачки напряжений и перемещений.

Таким образом, решение поставленной задачи (3.1)–(3.8), а именно комплексные векторы перемещений  $u = u_1 + iu_2$  и напряжений  $\sigma = \sigma_{nn} + i\sigma_{nt}$  в точке комплексной плоскости  $z = x_1 + ix_2$ , запишем в виде:

$$G(z, \eta_j) = \begin{cases} G_1^1(z, \eta_1) + G_1^2(z, \eta_1), & z \in B_1, \\ G_2^2(z, \eta_2), & z \in B_2, \end{cases} \quad (3.11)$$

$$G_j^r(z, \eta_j) = \begin{cases} \sigma^r(z), \eta_j = 1 \\ -2\mu_j \frac{du^r}{dz}, \eta_j = -\varkappa_j \end{cases}, \quad z \in B_j, \quad r, j = \overline{1, 2}, \quad (3.12)$$

где в случае плоской деформации  $\varkappa_j = 3 - 4\nu_j$ ;  $u_1, u_2$  — перемещения вдоль соответствующих осей  $x_1, x_2$ .

В первой задаче (3.11), (3.12) предполагается, что на криволинейной границе  $S_1$  однородной полуплоскости  $D_1^1 = \{z : x_2 < h + \varepsilon(\tau)f(x_1)\}$  с упругими свойствами среды  $B_1$  действует неизвестная самоуравновешенная нагрузка  $p(z_1)$  и поверхностное напряжение  $v(z_1)$ :

$$\sigma^1(z_1) = p(z_1) + \kappa(x_1)v^s(x_1) - i\frac{1}{h}\frac{dv^s(x_1)}{dx_1}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} p(\xi)d\xi = 0, \quad z_1 \in S_1. \quad (3.13)$$

Напряжения  $\sigma_{\alpha\beta}^1$  ( $\alpha, \beta \in \{1,2\}$ ) и угол поворота  $\omega^1$  материальной частицы на бесконечности равны нулю

$$\lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{11}^1 = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{22}^1 = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{12}^1 = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \omega^1 = 0. \quad (3.14)$$

Векторы напряжений  $\sigma^2$  и перемещений  $u^2$  находятся из решения задачи о совместной деформации двух соединённых полуплоскостей  $D_1^2 = \{z : x_2 > 0\}$  и  $D_2^2 = \{z : x_2 > 0\}$  с упругими свойствами сред  $B_1$  и  $B_2$  соответственно.

Вдоль прямолинейной межфазной границы  $S_2$  имеют место неизвестные скачки векторов напряжений  $\Delta\sigma^2$  и  $\Delta u^2$

$$\Delta\sigma^2 = \lim_{z \rightarrow \zeta_2 + i0} \sigma(z) - \lim_{z \rightarrow \zeta_2 - i0} \sigma^2(z), \quad (3.15)$$

$$\Delta u^2 = \lim_{z \rightarrow \zeta_2 + i0} u^2(z) - \lim_{z \rightarrow \zeta_2 - i0} u^2(z), \quad \zeta_2 \in S_1.$$

Условия на бесконечности в полуплоскостях  $D_j^2$  ( $j = \{1,2\}$ ) можно сформулировать следующим образом

$$\lim_{x_2 \rightarrow +\infty} \sigma_{11}^2 = \sigma_1, \quad \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{11}^2 = \sigma_2, \quad \sigma_1 = \frac{\mu_1(\varkappa_2 + 1)}{\mu_2(\varkappa_1 + 1)}\sigma_2, \quad (3.16)$$

$$\lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{22}^2 = \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{12}^2 = \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \omega^2 = 0. \quad (3.17)$$

Таким образом, граничные условия (3.5), (3.6) и (3.8), заданные на  $S_1$  и  $S_2$ , с учётом (3.11) приводят к системе уравнений относительно неизвестной нагрузки  $p(z_1)$ , поверхностного напряжения  $v$ , действующего на грани-

це твёрдого тела в задаче о деформации однородной полуплоскости (3.13), (3.14), поверхностного напряжения  $\sigma_s$ , действующего в плёнке, и межфазного напряжения  $\tau_s$ :

$$\sigma^1(\zeta_1) = p(\zeta_1) + \kappa(x_1)v^s(x_1) - i\frac{1}{h}\frac{dv^s(x_1)}{dx_1}, \quad (3.18)$$

$$\Delta\sigma^2(\zeta_2) = i\tau'_s(\zeta_2) - \sigma_1(\zeta_2), \quad \Delta u^2(\zeta_2) = -u^1(\zeta_2), \quad (3.19)$$

$$\sigma^1(\zeta_1) + \sigma^2(\zeta_1) = \kappa(x_1)\sigma^s(x_1) - i\frac{1}{h}\frac{d\sigma^s(x_1)}{dx_1}, \quad (3.20)$$

$$v(\zeta_1) = \gamma_1^0 + (\lambda_1^s + 2\mu_1^s)\varepsilon_{tt}^1, \quad (3.21)$$

$$\sigma_s(\zeta_1) = \gamma_1^0 + (\lambda_1^s + 2\mu_1^s) [\varepsilon_{tt}^1(\zeta_1) + \varepsilon_{tt}^2(\zeta_1)], \quad (3.22)$$

$$\tau_s(\zeta_2) = \gamma_2^0 + (\lambda_2^s + 2\mu_2^s)\varepsilon_{tt}^2. \quad (3.23)$$

В итоге, решение задачи о нахождении напряжённо–деформированного состояния ультратонкой плёнки осаждённой на подложку, сводится к решению системы уравнений (3.18) – (3.23).

Согласно [17; 92; 142], напряжения  $\sigma^k$  и перемещения  $u^k$ , возникающие в упругом теле под действием нагрузки, можно выразить через комплексные потенциалы Гурса–Колосова  $\Phi_j^k, \Upsilon_j^k$

$$\begin{aligned} G_j^k(z, \eta_j) = & \eta_j \Phi_j^k(w_j) + \overline{\Phi_j^k(w_j)} - \left( \Upsilon_j^k(\overline{w_j}) + \overline{\Phi_j^k(w_j)} - \right. \\ & \left. - (w_j - \overline{w_j}) \overline{\Phi_j^{k'}(w_j)} \right) e^{-2i\alpha}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

где  $w_1 = z - ih_f$  и  $w_2 = z$ ,  $\alpha$  — угол между направлением площадки с нормалью  $n$  и осью  $x_1$ ;  $\Phi_1^1$  и  $\Upsilon_1^1$  — функции, голоморфные в областях  $D_1$  и  $\widetilde{D}_1 = \{z : x_2 > h - \varepsilon\lambda f(x_1)\}$  соответственно;  $\Phi_1^2$  и  $\Upsilon_1^2$  — функции, голоморфные в области  $D_1^2$ , и  $\Phi_2^2$  и  $\Upsilon_1^2$  — функции, голоморфные в области  $D_1^2$ .

Полагая в (3.24)  $\alpha = 0$  и  $\alpha = \pi/2$  при  $x_2 \rightarrow -\infty$  и учитывая (3.7), получим значения комплексных потенциалов на бесконечности

$$\begin{aligned} \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \Phi_1^1(z) &= \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \Upsilon_1^1(z) = 0, \\ \lim_{|x_2| \rightarrow \infty} \Phi_2^j(z) &= \lim_{|x_2| \rightarrow \infty} \Upsilon_2^j(z) = \frac{\sigma_j}{4}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

В соответствии с первым приближением метода возмущений, неизвестные функции  $\nu$ ,  $\Phi_j^k$  и  $\Upsilon_j^k$  будем искать в виде

$$\Psi(z) = \Psi_{(0)}(z) + \varepsilon \Psi_{(1)}(z), \quad (3.26)$$

где  $\Psi$  означает любую из перечисленных выше функций.

В свою очередь, граничные значения функций  $\Psi_{(m)}$  представим в виде линейного полинома Тейлора в окрестности прямой  $x_2 = 0$

$$\Psi_{(m)}(\zeta) = \Psi_{(m)}(x_1) + i\varepsilon f(x_1) \Psi'_{(m)}(x_1), \quad m = \{0,1\}. \quad (3.27)$$

Подставляя выражения (1.32), (3.24), (3.26)–(3.27) в уравнения (3.18), (3.19) и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях  $\varepsilon$ , приходим к задачам Римана–Гильберта, из решения которых следуют выражения для определения комплексных потенциалов [92]

$$\begin{cases} \Upsilon_{1(m)}^1(z) = \Xi_{(m)}(z), \operatorname{Im} z > 0, \\ \Phi_{1(m)}^1(z) = \Xi_{(m)}(z), \operatorname{Im} z < 0, \end{cases} \quad (3.28)$$

$$\begin{cases} \Phi_{1(m)}^2(z) = -\Upsilon_{2(m)}^2(z) + \Sigma_m(z) + O_m^1, \operatorname{Im} z > 0, \\ \Upsilon_{1(m)}^2(z) = -\Phi_{2(m)}^2(z) + \Sigma_m(z) + O_m^1, \operatorname{Im} z < 0, \end{cases} \quad (3.29)$$

$$\begin{cases} \Upsilon_{2(m)}^2(z) = \frac{\mu_2 \varkappa_1 \Sigma_m(z) + V_m(z)}{\mu_1 + \mu_2 \varkappa_1} + O_m^2, & \text{Im } z > 0, \\ \Phi_{2(m)}^2(z) = \frac{\mu_2 \Sigma_m(z) - V_m(z)}{\mu_2 + \mu_1 \varkappa_2} + O_m^2, & \text{Im } z < 0, \end{cases} \quad (3.30)$$

где

$$\begin{aligned} \Xi_{(m)}(z) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{i v'_{(m)}(\tau)}{\tau - z} d\tau + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p_{(m)}(\tau)}{\tau - z} d\tau + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{F_{1(m)}^1(\tau)}{\tau - z} d\tau, \\ \Sigma(z) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i \tau^{s'}(t)}{z - t} dt - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sigma^1(t)}{z - t} dt, \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$V_m(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v^1(t)}{z - t} dt,$$

$$F_0(x_1) = 0, \quad F_1(x_1) = -if(x_1) \left[ \Phi'_{(0)}(x_1) + \Upsilon'_{(0)}(x_1) + 2\overline{\Phi'_{(0)}(x_1)} \right] + \quad (3.32)$$

$$+ 2if'(x_1) \left[ \overline{\Phi_{(0)}(x_1)} + \Upsilon_{(0)}(x_1) \right] - f(x_1) \sigma_{tt(0)}^{s''}(x_1) - f''(x_1) \sigma_{tt(0)}^s(x_1).$$

Граничные условия (3.20) – (3.23) с использованием (3.24) выражаются через комплексные потенциалы  $\Phi_j^k$ ,  $\Upsilon_j^k$

$$p_{(m)}(x_1) - i v'_{s(m)}(x_1) + i \sigma'_{s(m)}(x_1) - \Upsilon_{1(m)}^2(x_1) + \Phi_{1(m)}^2(x_1) = W_m^1(x_1),$$

$$v_{s(m)}(x_1) - \frac{M_1}{2\mu_1} \text{Re} \left[ \varkappa_1 \Phi_{1(m)}^1(x_1) + \Upsilon_{1(m)}^1(x_1) \right] = W_m^2(x_1),$$

$$\sigma_{s(m)}(x_1) - \frac{M_1}{2\mu_1} \text{Re} \left[ \varkappa_1 \left\{ \Phi_{1(m)}^1(x_1) + \Phi_{1(m)}^2(x_1) \right\} + \quad (3.33)$$

$$+ \left\{ \Upsilon_{1(m)}^1(x_1) + \Upsilon_{1(m)}^2(x_1) \right\} \right] = W_m^3(x_1),$$

$$\tau_{s(m)}(x_1) - \frac{M_2}{2\mu_2} \text{Re} \left[ \varkappa_2 \Phi_{2(m)}^2(x_1) + \Upsilon_{2(m)}^2(x_1) \right] = W_m^4(x_1),$$



где  $W_0^1 = 0$ ,  $W_0^2 = \gamma_1^0$ ,  $W_0^3 = \gamma_1^0$ ,  $W_0^4 = \gamma_2^0$ ,  $W_1^4 = 0$ ;  $W_1^1$ ,  $W_1^2$ ,  $W_1^3$  — функции, зависящие от нулевых приближений комплексных потенциалов, определённые в [92].

Принимая во внимание (3.25), запишем комплексные потенциалы в нулевом приближении:

$$\Phi_1^1(z) = \Upsilon_1^1(z) = 0, \quad z \in B_1, \quad (3.34)$$

$$\Phi_2^j(z) = \Upsilon_2^j(z) = \frac{\sigma_j}{4}, \quad z \in B_j, \quad j = \{1, 2\}.$$

Подставляя в (3.24) угол между осью  $x_1$  и  $t$  сперва равным  $\alpha$ , затем  $\alpha + \pi/2$  и суммируя результаты, получим выражения для определения компонент тензоров деформаций в каждом приближении в задачах о деформации полуплоскости с искривлённой границей (3.13), (3.14) и о совместной деформации двух полуплоскостей (3.15)–(3.17)

$$\begin{aligned} \sigma_{nn}(z) + i\sigma_{nt}(z) &= \Phi_j(z) + \overline{\Phi_j(z)} - \\ &- \left[ \Upsilon_j(\bar{z}) + \overline{\Phi_j(z)} - (z - \bar{z}) \overline{\Phi_j'(z)} \right] e^{-2i\alpha}, \end{aligned} \quad (3.35)$$

$$\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z) = 4\operatorname{Re}\Phi_j(z), \quad z \in B_j, \quad j = \{1, 2\},$$

Тогда из (3.11), (3.34), (3.35) с учётом (3.4) и (3.5), (3.6) следует решение задачи (3.1)–(3.8) в нулевом приближении метода возмущений, которое соответствует кусочно-однородному напряжённому состоянию плёночного покрытия с плоской поверхностью

$$\begin{aligned} \sigma_{tt(0)}(z) &= \sigma_j, \quad z \in B_j; \quad \sigma_{s(0)}(z_1) = \gamma_1^0 + \frac{M_1(1 + \varkappa_1)}{8\mu_1} \sigma_1, \\ \tau_{s(0)}(z_2) &= \gamma_2^0 + \frac{M_2(1 + \varkappa_2)}{8\mu_2} \sigma_2, \quad \sigma_1 = \frac{\mu_1(\varkappa_2 + 1)}{\mu_2(\varkappa_1 + 1)} \sigma_2, \end{aligned} \quad (3.36)$$

где  $M_j = \lambda_j^s + 2\mu_j^s$ , ( $j = \{1, 2\}$ ) — поверхностная/межфазная продольная жёсткость.

В первом приближении метода возмущений неизвестные функции следует искать в виде [92]:

$$\begin{aligned}
 p_{(1)}(x_1) &= P_1 \cos(bx_1) + Q_1 \sin(bx_1), \\
 v_{(1)}(x_1) &= P_2 \cos(bx_1) + Q_2 \sin(bx_1), \\
 \sigma_{s(1)}(x_1) &= P_3 \cos(bx_1) + Q_3 \sin(bx_1), \\
 \tau_{s(1)}(x_1) &= P_4 \cos(bx_1) + Q_4 \sin(bx_1),
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

где  $P_i$  и  $Q_i$  — неизвестные комплексные коэффициенты.

Подставляя выражения (3.28)–(3.30) в систему (3.33), с учётом (3.31), (3.32), (3.37) и свойств интеграла типа Коши приходим к системе линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов  $P_i$  и  $Q_i$ . После определения этих коэффициентов, комплексные потенциалы в первом приближении метода возмущений находятся по формулам (3.28)–(3.30), (3.37). Затем, подставляя найденные комплексные потенциалы в первом приближении в формулу (3.35), принимая во внимание (3.11), получим выражения для компонент тензора напряжений в задаче (3.1)–(3.8). Компоненты тензора деформаций определяются из системы (3.4). Следуя изложенному алгоритму для определения напряжений и деформаций, написана программа в системе компьютерной математики Maple. В силу громоздкости полученных выражений в работе они не приводятся.

### 3.3 Численные результаты

Подставляя полученные выражения для компонент тензора напряжений и тензора деформаций в (3.10), получаем обыкновенное дифференциальное уравнение. Решение этого уравнения даёт скорость изменения амплитуды периодического рельефа поверхности ультратонкого плёночного покрытия со временем как функцию, зависящую от физических и геометрических параметров задачи

$$\ln \left( \frac{A(\tau)}{A_0} \right) = R(a, h_f, \lambda_1, \mu_1, \lambda_2, \mu_2, \lambda_1^s, \mu_1^s, \gamma_1^0, \lambda_2^s, \mu_2^s, \gamma_2^0, \sigma_2) \tau. \quad (3.38)$$

В качестве примера рассмотрим металлическую систему. Будем считать, что коэффициенты Пуассона материалов плёнки и подложки совпадают, т.е.  $\nu_1 = \nu_2$ . Такое предположение позволит проанализировать влияние подложки всего лишь через один параметр — относительную жёсткость  $r = \mu_1/\mu_2$ . Объёмные параметры Ламе верхней плёнки  $\lambda_2 = 58,17$  ГПа и  $\mu_2 = 26,13$  ГПа соответствуют алюминию. Для анализа влияния поверхностной упругости рассмотрим поверхностную/межфазную жёсткость  $M_j = \lambda_j^s + 2\mu_j^s$ . Поверхностные параметры Ламе для алюминия с ориентацией кристаллической решётки (111) определены методом молекулярного моделирования [105]: им соответствует продольная поверхностная жёсткость  $M_1 = 6,099$  Н/м. Стоит отметить, что поверхностные упругие постоянные зависят от ориентации кристаллической решётки и прочих факторов [126], в связи с чем здесь будут рассматриваться различные значения поверхностной/межфазной жёсткости.

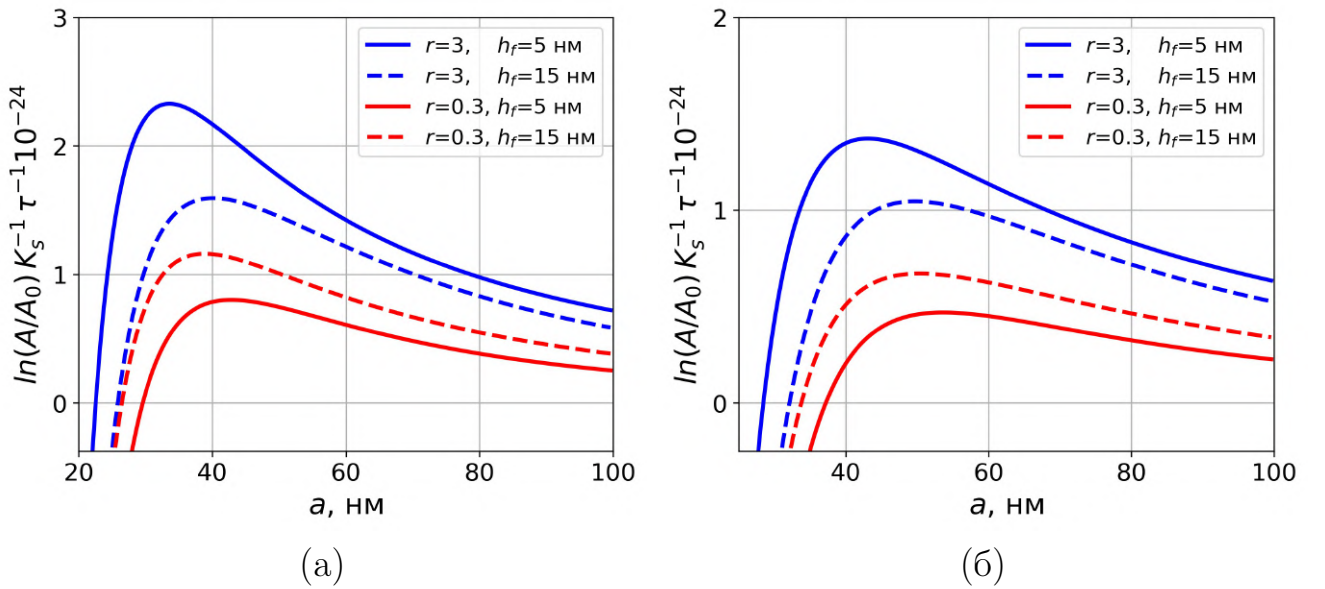


Рисунок 3.2 — Зависимость изменения относительной амплитуды  $A(\tau)/A_0$  периодического рельефа поверхности ультратонкого плёночного покрытия от длины волны искривления  $a$  при  $M_1 = 6,099$  Н/м (а) и  $M_1 = 60$  Н/м (б)

На Рис. 3.2 приведена зависимость относительной амплитуды  $A(\tau)/A_0$  периодического рельефа поверхности ультратонкого плёночного покрытия от дли-

ны волны искривления  $a$  при относительных жёсткостях  $r = \{0,3; 3\}$  (красные и синие линии соответственно), толщинах плёнки  $h_f = \{5; 15\}$  нм (сплошные и пунктирные линии соответственно) и продольных жёсткостях поверхностного слоя  $M_1 = 6,099$  Н/м (а) и  $M_1 = 60$  Н/м (б). В силу того, что здесь исследуется влияние поверхностных упругих параметров, для наглядности остаточное поверхностное напряжение принято равным  $\gamma_1^0 = 0,1$  Н/м. Межфазная жёсткость и остаточное межфазное напряжение приняты равными  $M_2 = 6,099$  Н/м и  $\gamma_2^0 = 1$  Н/м соответственно. Критические значения  $a_{cr}$ , при которых система находится в термодинамическом равновесии, соответствуют пересечению кривых с осью абсцисс. В случае когда  $a < a_{cr}$  амплитуда возмущения будет убывать со временем, то есть будет происходить сглаживание рельефа, в то время как при длинах волн больше критического значения (т.е.  $a > a_{cr}$ ) будет наблюдаться увеличение амплитуды искривления со временем. Длины волн  $a = a_{max}$ , при которых кривые достигают максимума, определяют состояние плёночной системы, когда скорость роста рельефа наибольшая. Значения  $a_{cr}$  и  $a_{max}$ , определённые для рассматриваемых конфигураций системы, представлены в Таблицах 3.1, 3.2.

Таблица 3.1

Критические значения длин волн  $a_{cr}$ , определённые при различных параметрах задачи

$M_1$ , Н/м	6,099	6,099	60	60
$r$	0,3	3	0,3	3
$h_f$ , нм	$a_{cr}$ , нм			
5	29,6	22,6	37,1	28,6
15	26,6	26,1	33,6	32,1

Результаты показывают, что в случае жёсткой относительно плёнки подложки (т.е. при  $r < 1$ ) критические значения длины волны больше чем в случае, когда подложка мягче плёнки (т.е.  $r > 1$ ). Видно, что влияние относительной жёсткости увеличивается по мере увеличения толщины плёночного покрытия. При  $M_1 = 6,099$  Н/м и  $h_f = 15$  нм влияние относительное жёсткости на критическое значение длины волны возмущения практически незаметно. Также стоит отметить, что значения длин волн  $a_{max}$  больше в случае  $M_1 = 60$  Н/м.

Значения длин волн  $a_{max}$ , соответствующие наибольшей скорости роста амплитуды рельефа поверхности плёнки

$M_1$ , Н/м	6,099	6,099	60	60
$r$	0,3	3	0,3	3
$h_f$ , нм	$a_{max}$ , нм			
5	42,6	33,6	53,6	43,1
15	39,1	40,1	50,6	49,6

Влияние свойств межфазной границы, а именно продольной жёсткости  $M_2$  и остаточного напряжения  $\gamma_2^0$ , на морфологическую устойчивость свободной поверхности плёнки представлено на Рис. 3.3. Видно, что критическое значение длины волны возмущения поверхности ультратонкого плёночного покрытия практически не зависит от рассматриваемых параметров. В связи с этим, при дальнейших вычислениях в текущей главе межфазная продольная жёсткость и остаточное напряжение будут приняты равными нулю:  $\gamma_2^0 = 0$ ,  $M_2 = 0$ .

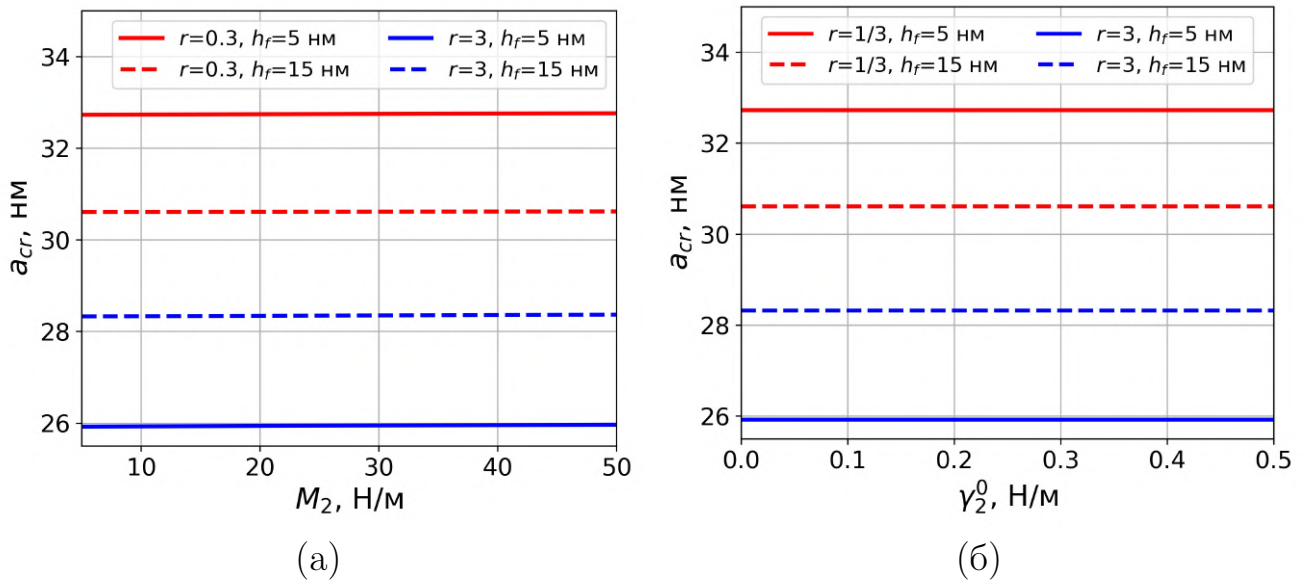


Рисунок 3.3 — Зависимость критического значения длины волны искривления  $a_{cr}$  ультратонкого плёночного покрытия от межфазной жёсткости  $M_2$  (а) и остаточного межфазного напряжения  $\gamma_2^0$  (б)

На Рис. 3.4 представлена зависимость критического значения длины волны искривления  $a_{cr}$  поверхности ультратонкого плёночного покрытия от поверхностной жёсткости  $M_1$  и относительной жёсткости системы  $r$ . Из рисунка

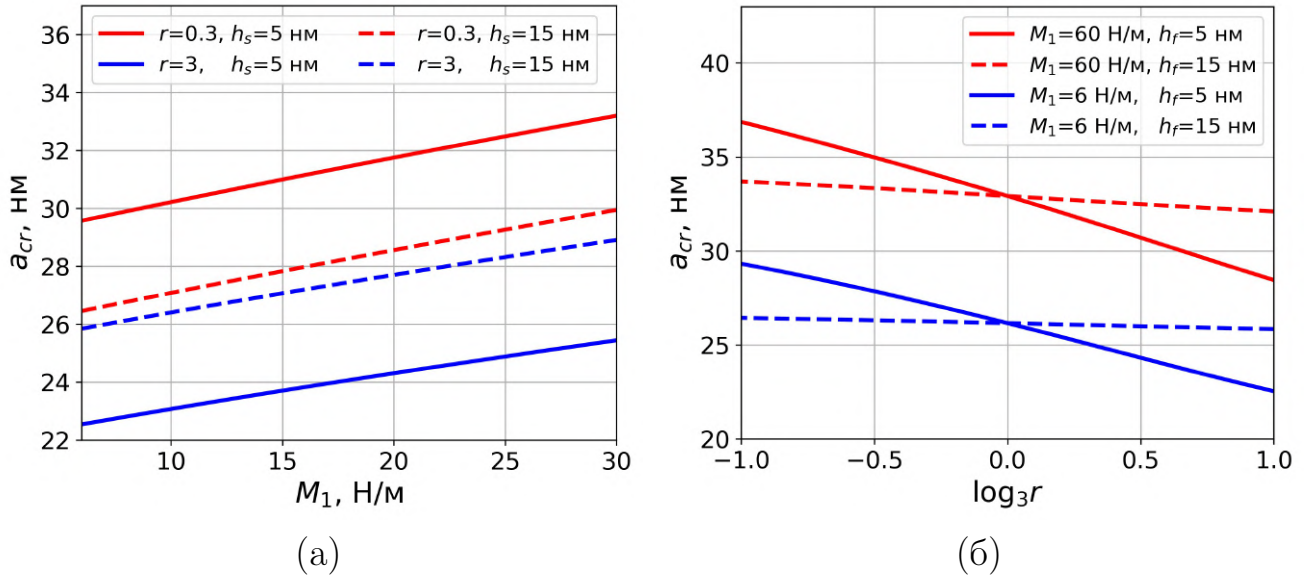


Рисунок 3.4 — Зависимость критического значения длины волны искривления  $a_{cr}$  ультратонкого плёночного покрытия от поверхностной жёсткости  $M_1$  (а) и относительной жёсткости системы  $r$  (б)

видно, что при увеличении поверхностной продольной жёсткости  $M_1$  критические значения длины волны  $a_{cr}$  увеличиваются, при этом влияние поверхностной жёсткости  $M_1$  проявляется сильнее в случае мягкой относительно плёнки подложки ( $r = 3$ ) с уменьшением толщины плёночного покрытия. Зависимость от относительной жёсткости больше в случае меньших толщины и поверхностной жёсткости плёнки. Отметим, что в случае когда жёсткости материалов плёнки и подложки совпадают (т.е.  $r = 1$  или что то же  $\log_3 r = 0$ ), критические значения длины волны искривления не зависят от толщины плёночного покрытия. В этом случае критические значения длин волн возмущения совпадают с результатами, полученными в Главе 2.

Зависимость критического значения длины волны искривления  $a_{cr}$  ультратонкого плёночного покрытия от остаточного поверхностного напряжения  $\gamma_1^0$  представлена на Рис. 3.5 при  $r = 0,3$  (а) и  $r = 3$  (б). Критические значения  $a_{cr}$  увеличиваются с ростом  $\gamma_1^0$ . При этом зависимость от поверхностного остаточного напряжения сильнее в случае жёсткой относительно плёнки подложки (т.е. при  $r = 0,3$ , Рис. 3.5 а). Также в этом случае влияние остаточного поверхностного напряжения усиливается с уменьшением толщины плёнки. В случае когда жёсткость материала подложки меньше жёсткости плёнки влияние остаточно-

го поверхностного напряжения практически не зависит от толщины плёночного покрытия и поверхностной жёсткости.

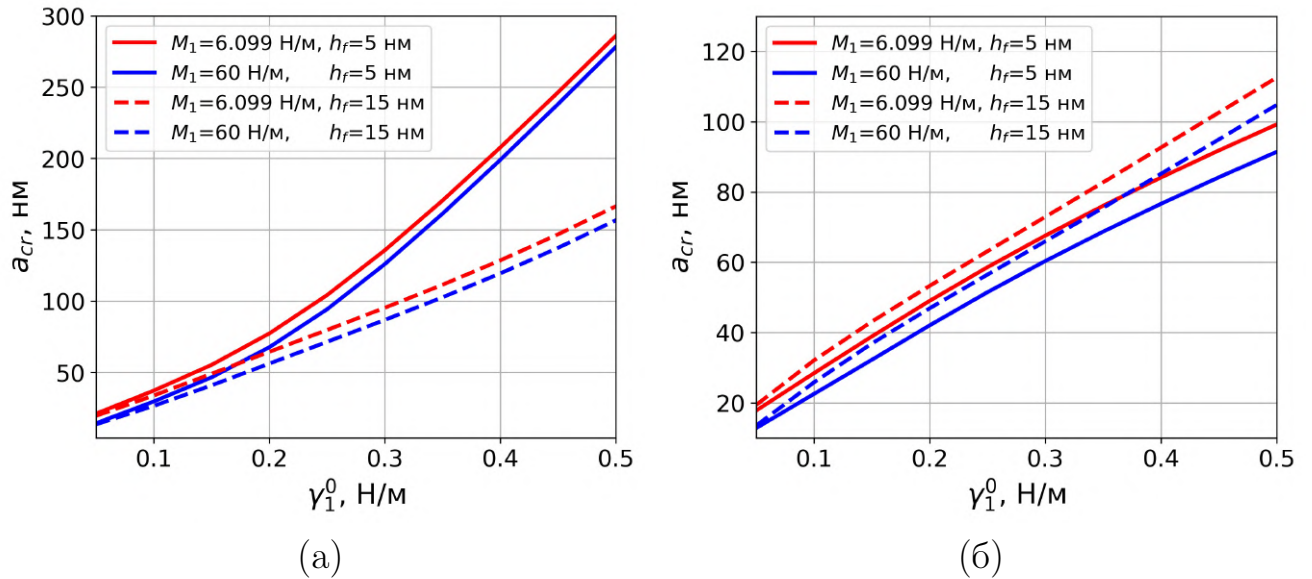


Рисунок 3.5 — Зависимость критического значения длины волны искривления  $a_{cr}$  ультратонкого плёночного покрытия от остаточного поверхностного напряжения  $\gamma_1^0$  при  $r = 0,3$  (а) и  $r = 3$  (б)

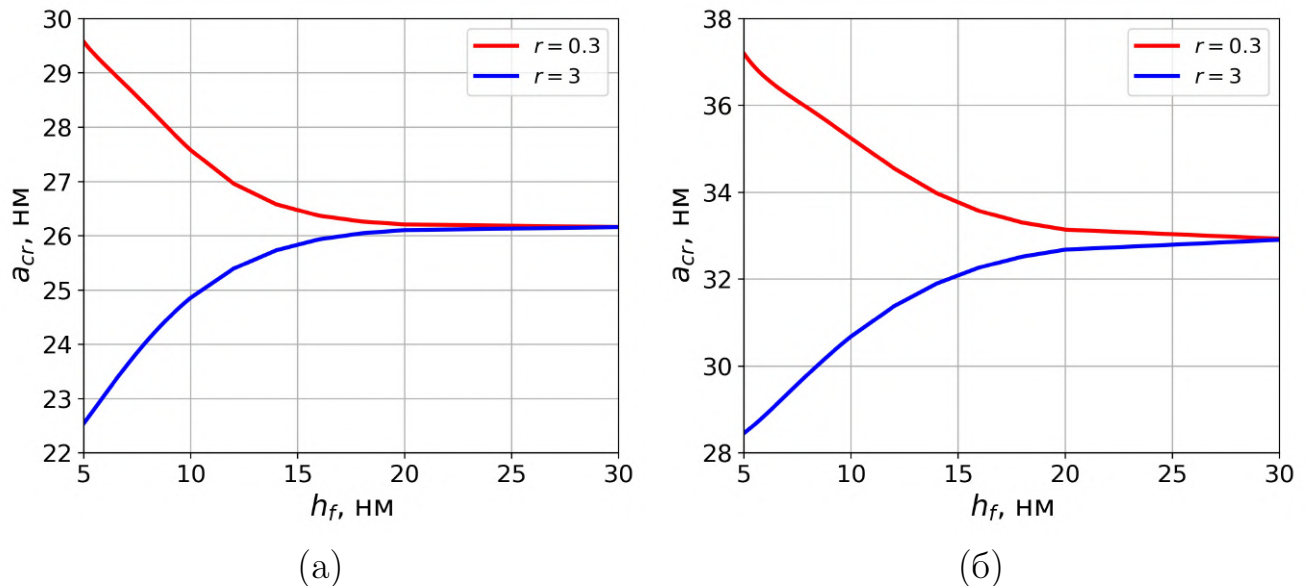


Рисунок 3.6 — Зависимость критического значения длины волны искривления  $a_{cr}$  ультратонкого плёночного покрытия от его толщины  $h_f$  при  $M_s = 6,099$  Н/м (а) и  $M_1 = 60$  Н/м (б)

Влияние толщины плёночного покрытия на морфологическую устойчивость его поверхности представлено на Рис. 3.6. Графические зависимости получены при  $r = 0,3$  и  $r = 3$  (синие и красные линии соответственно) и

$M_1 = 6,099$  Н/м (а) и  $M_1 = 60$  Н/м (б). Результаты показывают, что с увеличением толщины плёночного покрытия, жёсткость которого больше/меньше подложки, критические значения длины волны увеличиваются/уменьшаются и стремятся к значениям, определённым для поверхности твёрдого тела с упругими свойствами плёнки. Отметим, что наибольшее влияние толщины плёночного покрытия проявляется при большей поверхностной жёсткости  $M_1$ . Толщина плёночного покрытия, при превышении которой относительная жёсткость системы перестаёт влиять на критическое значение длины волны возмущения, также больше в случае большей поверхностной жёсткости.

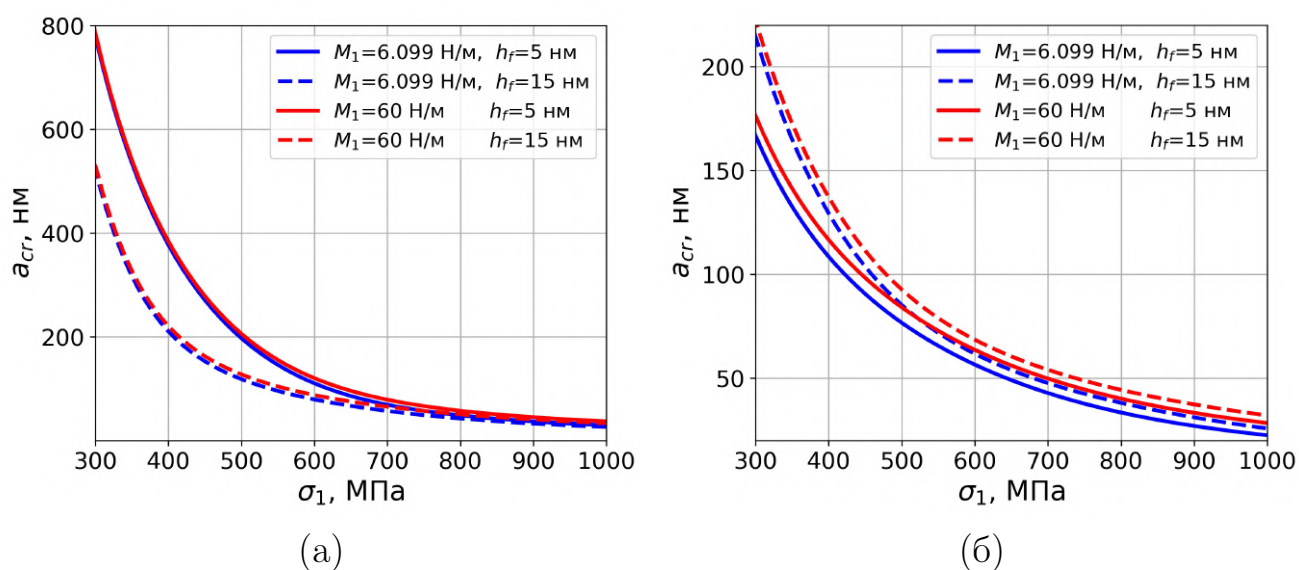


Рисунок 3.7 — Зависимость критического значения длины волны искривления  $a_{cr}$  ультратонкого плёночного покрытия от продольных усилий  $\sigma_1$  при  $r = 0,3$  (а) и  $r = 3$  (б)

На Рис. 3.7 представлена зависимость критического значения длины волны искривления  $a_{cr}$  ультратонкого плёночного покрытия от продольных усилий  $\sigma_1$  при жёсткостях поверхностного слоя  $M_1 = \{6,099; 60\}$  Н/м (синие и красные линии соответственно), толщинах плёнки  $h_f = \{5; 15\}$  нм (сплошные и пунктирные линии) и относительных жёсткостях системы  $r = 0,3$  (а) и  $r = 3$  (б). Из рисунка видно, что с увеличением  $\sigma_1$  критические значения длин волн убывают. При этом влияние продольных усилий наиболее сильно проявляется при меньших толщинах в случае, когда подложка жёстче плёнки (Рис. 3.7 а) и при больших толщинах, если жёсткость материала подложки меньше жёсткости плёнки. Влияние поверхностной продольной жёсткости возрастает с увеличением продольных усилий.



### 3.4 Выводы

В данной главе разработан теоретический подход для анализа морфологической устойчивости поверхности ультратонкого плёночного покрытия. На основе модели поверхностной/межфазной упругости Гёртина – Мёрдока учтено влияние упругих свойств свободной поверхности плёночного покрытия и границы соединения «плёнка – подложка». Предполагалось, что эволюция рельефа поверхности плёночного покрытия происходит под действием поверхностной диффузии, вызванной неравномерным распределением химического потенциала вдоль искривлённой поверхности напряжённого композита. При этом считалось, что неравномерность распределения химического потенциала вдоль обусловлена изменением поля напряжений, поверхностной энергии и кривизны поверхности. Эволюция рельефа поверхности рассматривалась как изменение амплитуды периодического искривления. Для решения эволюционного уравнения необходимо было определить напряжённо – деформированное состояние рассматриваемой системы. С этой целью была решена плоская задача теории упругости о совместной деформации полуплоскости и полосы с искривлённой границей. Решение краевой задачи было получено в первом приближении метода возмущений с использованием подхода, предложенного в работе [92].

Исследовано влияние относительной жёсткости системы, упругих параметров границы соединения «плёнка – подложка» и свободной границы, толщины покрытия, остаточных поверхностного и межфазного напряжений и продольных усилий. Получены следующие результаты:

- межфазная продольная жёсткость и остаточное напряжение практически не влияют на морфологическую устойчивость свободной поверхности плёночного покрытия;
- критическое значение длины волны возрастает с увеличением поверхностной продольной жёсткости, поверхностных остаточных напряжений и с уменьшением продольных усилий и относительной продольной жёсткости;
- влияние поверхностной жёсткости уменьшается с увеличением остаточного поверхностного напряжения и уменьшением продольных усилий;

- в случае жёсткой/мягкой относительно подложки плёнки критическое значение длины волны увеличивается/уменьшается с ростом толщины плёночного покрытия, при этом снижается влияние относительной жёсткости системы;
- толщина плёночного покрытия, при которой можно не учитывать влияние подложки возрастает с увеличением поверхностной жёсткости.

Отметим, что эволюция рельефа вследствие диффузионных процессов может происходить не только на свободных поверхностях плёночных покрытий, но и на границах соединений двух материалов [68;96;132]. В связи с этим в следующей главе будет описан подход для анализа морфологической устойчивости межфазной поверхности.

## Глава 4

### Морфологическая устойчивость наноструктурированной границы соединения двух материалов

Глава посвящена исследованию морфологической устойчивости наноструктурированной границы соединения материалов. Принимая во внимание тот факт, что при определённых условиях атомы вблизи межфазной границы находятся в термодинамически неустойчивом состоянии, получено уравнение, описывающее кинетику образования рельефа. Скорость роста рельефа межфазной границы зависит от изменения химических потенциалов каждой среды вдоль неё. При этом химический потенциал выражается через упругую энергию деформации и межфазную энергию. Распределение напряжений вдоль межфазной границы находится из решения плоской задачи теории упругости о совместной деформации двух полуплоскостей с искривлённой границей раздела. При этом используются соотношения поверхностной/межфазной теории упругости Гёртина — Мёрдока, в которой межфазная область представляется в виде пренебрежимо тонкого слоя, когерентно связанного с объёмными фазами. С использованием первого приближения метода граничных возмущений решение линеаризованного эволюционного уравнения приводит к определению условий, при которых будет иметь место морфологическая устойчивость межфазной поверхности.

#### 4.1 Постановка задачи

Рассмотрим гетерогенную систему, образованную соединением двух изотропных однородных материалов, находящуюся в условиях плоской деформации. Предполагается, что форма границы соединения материалов меняется с течением времени вследствие диффузионного массопереноса вдоль межфазной границы. Таким образом, приходим к плоской задаче теории упругости

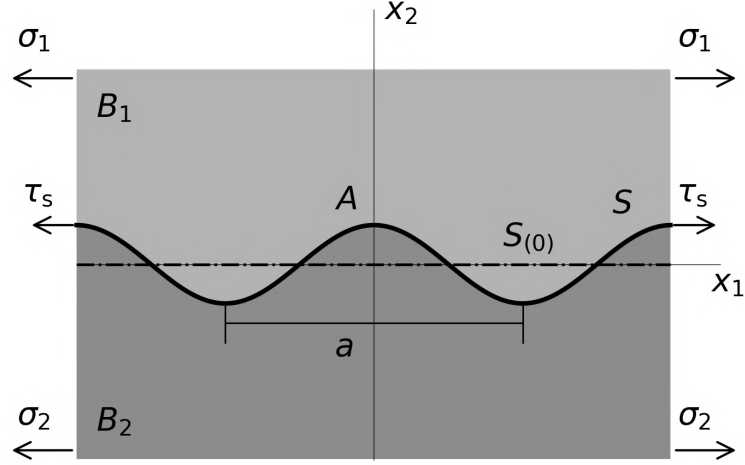


Рисунок 4.1 — Модель гетерогенного твёрдого тела с искривлённой межфазной границей под действием продольных усилий

для бесконечной плоскости  $B_1 \cup B_2$  комплексной переменной  $z = x_1 + ix_2$ , где  $i^2 = -1$ , а оси  $x_1, x_2$  определяют декартову прямоугольную систему координат. В соответствии с моделью поверхностной/межфазной упругости Гёртина–Мёрдока [73; 74], межфазная граница рассматривается как упругая мембрана  $S$ , идеально связанная с объёмными фазами  $B_1$  и  $B_2$

$$S = \{z : z \equiv \zeta = x_1 + i\varepsilon(\tau)f(x_1)\}, \quad (4.1)$$

$$B_1 = \{z : x_2 > \varepsilon(\tau)f(x_1)\}, \quad B_2 = \{z : x_2 < \varepsilon(\tau)f(x_1)\}, \quad (4.2)$$

$$f(x_1) = a \cos(bx_1), \quad b = 2\pi/a, \quad \varepsilon(\tau) = A(\tau)/a, \quad A(0) = A_0,$$

где  $a$  — длина волны синусоидального искривления,  $A(\tau)$  — амплитуда искривления межфазной поверхности в момент времени  $\tau$ . В рамках линейного анализа морфологической устойчивости межфазной границы требуется определить критическое значение длины волны возмущения  $a_{cr}$ , при превышении которого амплитуда рельефа будет увеличиваться со временем. При этом предполагается, что  $\varepsilon(\tau) \ll 1 \quad \forall \tau > 0$ .

Напряжения и деформации упругой границы соединения материалов связаны соотношениями Гёртина – Мёрдока [73; 74]:

$$\sigma_{tt}^s(\zeta) = \gamma^0 + (\lambda^s + 2\mu^s)\varepsilon_{tt}^s(\zeta), \quad \sigma_{33}^s(\zeta) = \gamma^0 + (\lambda^s + \gamma^0)\varepsilon_{tt}^s(\zeta), \quad \zeta \in S, \quad (4.3)$$

где  $\varepsilon_{tt}^s$  и  $\sigma_{tt}^s$  — компоненты тензора межфазных деформаций и тензора межфазных напряжений соответственно;  $\lambda^s$  и  $\mu^s$  — модули упругости, аналогичные параметрам Ламе и  $\gamma^0$  — остаточное межфазное напряжение. Отметим, что здесь рассматриваются упрощённые соотношения поверхностной/межфазной упругости, в предположении, что поверхностная энергия не зависит от градиента вектора перемещений.

Обобщённый закон Гука для изотропного объёмного материала в случае плоской деформации имеет вид

$$\sigma_{nn}(z) = (\lambda_j + 2\mu_j)\varepsilon_{nn}(z) + \lambda_j\varepsilon_{tt}(z),$$

$$\sigma_{tt}(z) = (\lambda_j + 2\mu_j)\varepsilon_{tt}(z) + \lambda_j\varepsilon_{nn}(z), \quad \sigma_{nt}(z) = 2\mu_j\varepsilon_{nt}(z), \quad (4.4)$$

$$\sigma_{33}(z) = \frac{\lambda_j}{2(\lambda_j + \mu_j)} [\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z)], \quad z \in B_j, \quad j = \{1,2\},$$

здесь  $\sigma_{nn}$ ,  $\sigma_{tt}$ ,  $\sigma_{nt}$  и  $\varepsilon_{nn}$ ,  $\varepsilon_{tt}$ ,  $\varepsilon_{nt}$  — компоненты тензора напряжений и тензора деформаций соответственно, определённые в локальной декартовой прямоугольной системе координат  $(n, t)$  ( $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{t}$  — нормаль и касательная межфазной границы  $S$ ), и  $\lambda_j$  и  $\mu_j$  — параметры Ламе объёмных фаз  $B_j$ .

На бесконечности напряжения  $\sigma_{\alpha\beta}$  ( $\alpha, \beta = \{1,2\}$ ) в глобальных координатах  $(x_1, x_2)$  и угол поворота материальной частицы  $\omega$  заданы следующим образом:

$$\lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{22} = \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{12} = \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \omega = 0, \quad \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{11} = \sigma_j, \quad j = \{1,2\}. \quad (4.5)$$

Отметим, что рассматриваемые здесь продольные напряжения могут быть связаны с рассогласованием кристаллических решёток материалов.

Условие механического равновесия искривлённой межфазной поверхности  $S$  в случае упрощённых соотношений Гёртина – Мёрдока (4.3) записываются в

терминах обобщённого закона Юнга – Лапласа [89]

$$\Delta\sigma(\zeta) = \sigma^+(\zeta) - \sigma^-(\zeta) = -\kappa(\zeta)\sigma_{tt}^s(\zeta) + i\frac{1}{h(\zeta)}\frac{d\sigma_{tt}^s(\zeta)}{dx_1}, \quad \zeta \in S, \quad (4.6)$$

где  $\sigma(z) = \sigma_{nn}(z) + i\sigma_{nt}(z)$  — вектор напряжений и  $\sigma^\pm = \lim_{z \rightarrow \zeta \pm i0} \sigma(z)$ ,  $\kappa$  и  $h$  — локальная кривизна и метрический коэффициент искривлённой границы  $S$  соответственно.

Так как считается, что межфазный слой идеально сцеплен с обоими объёмными материалами, на межфазной границе должно выполняться условие непрерывности перемещений

$$\Delta u(\zeta) = u^+(\zeta) - u^-(\zeta) = 0, \quad \zeta \in S, \quad (4.7)$$

здесь  $u = u_1 + iu_2$  — вектор перемещений,  $u^\pm = \lim_{z \rightarrow \zeta \pm i0} u(z)$ ,  $u_1$  и  $u_2$  — перемещения вдоль осей декартовой прямоугольной системы координат  $(x_1, x_2)$ .

Чтобы минимизировать полную свободную энергию, рельеф межфазной границы будет меняться вследствие диффузионного массопереноса. Поток атомов материала  $B_j$  вдоль границы соединения материалов пропорционален градиенту химического потенциала  $\chi_j$  [30; 88]

$$J_j(\zeta, \tau) = -\frac{D_j C_j}{k_b T} \frac{\partial \chi_j(\zeta, \tau)}{\partial s}, \quad (4.8)$$

где  $D_j$  и  $C_j$  — коэффициент межфазной самодиффузии и количество диффундирующих атомов на единицу площади для среды  $B_j$  соответственно,  $k_b$  — постоянная Больцмана,  $T$  — абсолютная температура.

Локальный химический потенциал  $\chi_j$  определяется как увеличение свободной энергии на единицу добавляемого объёма [60; 88]

$$\chi_j(\zeta, \tau) = [U_j(\zeta, \tau) + (-1)^{j+1} \kappa(\zeta, \tau) U_s(\zeta, \tau)] \Omega_j, \quad \zeta \in S, \quad j = \{1, 2\}. \quad (4.9)$$

В выражении (4.9)  $\Omega_j$  и  $U_j$  — атомный объем и плотность энергии деформации материалов  $B_j$ ,  $U_s$  — плотность межфазной энергии.

Изменение профиля границы соединения материалов со временем описывается следующим уравнением [60; 88]

$$\frac{\partial g(x_1, \tau)}{\partial \tau} = h(\zeta, \tau) \frac{\partial}{\partial s} \left[ \frac{r}{1+r} J_1(\zeta, \tau) - \frac{1}{r+1} J_2(\zeta, \tau) \right], \quad (4.10)$$

где  $g(x_1, \tau) = \varepsilon(\tau) f(x_1)$ ,  $r = \mu_1/\mu_2$  — отношение жёсткостей материалов.

Диффузионные потоки  $J_j$  определяются по формуле (4.8), принимая во внимание выражение (4.9)

$$J_j(\zeta, \tau) = -K_j \frac{\partial}{\partial s} [U_j(\zeta, \tau) + (-1)^{j+1} \kappa(\zeta, \tau) U_s(\zeta, \tau)], \quad K_j = \frac{D_j C_j \Omega_j^2}{k_b T}. \quad (4.11)$$

## 4.2 Линейный анализ эволюции рельефа границы соединения материалов

Поскольку в данной работе рассматривается слабое искривление межфазной границы, компоненты тензоров напряжений и перемещений определяются в первом приближении метода возмущений (1.17). Межфазная энергия определяется по формуле (2.10).

Выражения для плотности удельной энергии упругой деформации вдоль межфазной границы  $U_j$  могут быть записаны в виде [94]

$$U_2 = \frac{1}{2} \left( \sigma_{tt(0)}^+ \varepsilon_{tt(0)} + \varepsilon \left[ \sigma_{nn(1)}^+ \varepsilon_{nn(0)} + \sigma_{tt(0)}^+ \varepsilon_{tt(1)} + \sigma_{tt(1)}^+ \varepsilon_{tt(0)} \right] \right), \quad (4.12)$$

$$U_2 = \frac{1}{2} \left( \sigma_{tt(0)}^- \varepsilon_{tt(0)} + \varepsilon \left[ \sigma_{nn(1)}^- \varepsilon_{nn(0)} + \sigma_{tt(0)}^- \varepsilon_{tt(1)} + \sigma_{tt(1)}^- \varepsilon_{tt(0)} \right] \right).$$

Локальная кривизна поверхности  $\kappa$  и метрический коэффициент  $h$ , входящие в формулы (4.6), (4.9), в первом приближении метода возмущений имеют вид (1.19).

Подставляя выражения (1.19), (4.11) – (4.12) в (4.10), получим обыкновенное дифференциальное уравнение, описывающее изменение рельефа

межфазной границы со временем [132]

$$\begin{aligned} \frac{dA(\tau)}{d\tau} f(x_1) = & \frac{A(\tau)}{2(1+r)} \frac{d^2}{dx_1^2} \left\{ K_1 r \left[ \sigma_{nn(1)}^+ \varepsilon_{nn(0)} + \sigma_{tt(0)}^+ \varepsilon_{tt(1)}(x_1) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \sigma_{tt(1)}^+(x_1) \varepsilon_{tt(0)} \right] - K_2 \left[ \sigma_{nn(1)}^- \varepsilon_{nn(0)} + \sigma_{tt(0)}^- \varepsilon_{tt(1)}(x_1) + \sigma_{tt(1)}^-(x_1) \varepsilon_{tt(0)} \right] + \right. \\ & \left. + \left[ \gamma^0 (1 + \varepsilon_{tt(0)}^s(z, \tau)) + \frac{1}{2} (\lambda^s + 2\mu^s - \gamma^0) \varepsilon_{tt(0)}^{s2}(z, \tau) \right] (K_1 + K_2) f''(x_1) \right\}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Чтобы проинтегрировать уравнение (4.13), необходимо определить входящие в его правую часть компоненты тензоров объёмных и межфазных напряжений и деформаций. Для этого необходимо решить краевую задачу о совместной деформации двух полуплоскостей (4.1) – (4.7).

В соответствии с [2; 17; 89], компоненты тензора напряжений могут быть выражены через комплексные потенциалы Гурса–Колосова  $\Phi_j$  и  $\Upsilon_j$ :

$$\begin{aligned} \sigma_{nn}(z) + i\sigma_{nt}(z) = & \Phi_j(z) + \overline{\Phi_j(z)} - \\ & - \left[ \Upsilon_j(\bar{z}) + \overline{\Phi_j(z)} - (z - \bar{z}) \overline{\Phi_j'(z)} \right] e^{-2i\alpha}, \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z) = 4\operatorname{Re}\Phi_j(z), \quad z \in B_j, \quad j = \{1, 2\},$$

где  $\Phi_j$ ,  $\Upsilon_1$  и  $\Upsilon_2$  – функции голоморфные в  $B_j$  ( $j = \{1, 2\}$ ),  $\widetilde{B}_1 = \{z : x_2 > -\varepsilon f(x_1)\}$  и  $\widetilde{B}_2 = \{z : x_2 < -\varepsilon f(x_1)\}$  соответственно и  $\alpha$  – угол между касательной  $t$  к кривой  $S$  и осью  $x_1$ .

Значения функций  $\Phi_j$  и  $\Upsilon_j$  на границе  $S$  следуют из формул (4.5), (4.14)

$$\lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \Phi_j(z) = \lim_{x_2 \rightarrow +\infty} \Upsilon_j(z) = \sigma_j^0/4.$$

Комплексные потенциалы  $\Phi_j$  и  $\Upsilon_j$  и межфазное напряжение  $\sigma_{tt}^s$  в первом приближении метода возмущений представляются в следующем виде [131]:

$$\Phi_j(z) = \Phi_{j(0)}(z) + \varepsilon \Phi_{j(1)}(z), \quad \Upsilon_j(z) = \Upsilon_{j(0)}(z) + \varepsilon \Upsilon_{j(1)}(z),$$

$$\sigma_{tt}^s(\zeta) = \sigma_{tt(0)}^s(\zeta) + \varepsilon \sigma_{tt(1)}^s(\zeta).$$



Граничные значения функций  $\Phi_{j(m)}$ ,  $\Upsilon_{j(m)}$  и  $\sigma_{tt(m)}^s$  раскладываются в виде ряда Тейлора в окрестности прямой  $x_2 = 0$ , рассматривая вещественную переменную  $x_1$  как параметр. В первом приближении метода возмущений будем иметь

$$\Psi_{(m)}(\zeta) = \Psi_{(m)}(x_1) + i\varepsilon f(x_1)\Psi'_{(m)}(x_1), \quad m = \{0,1\},$$

где  $\Psi_{(m)}$  — любая из вышеупомянутых функций.

Комплексные потенциалы  $\Phi_{j(m)}$ ,  $\Upsilon_{j(m)}$  определяются из решения задач Римана–Гильберта о скачках аналитических функций на прямой  $x_2 = 0$  [89]

$$\begin{cases} \Phi_{1(m)}(z) = -\Upsilon_{2(m)}(z) + \Sigma_m(z) + O_m^1, & \text{Im } z > 0, \\ \Upsilon_{1(m)}(z) = -\Phi_{2(m)}(z) + \Sigma_m(z) + O_m^1, & \text{Im } z < 0, \end{cases} \quad (4.15)$$

$$\begin{cases} \Upsilon_{2(m)}(z) = \frac{\mu_2 \varkappa_1 \Sigma_m(z) + V_m(z)}{\mu_1 + \mu_2 \varkappa_1} + O_m^2, & \text{Im } z > 0, \\ \Phi_{2(m)}(z) = \frac{\mu_2 \Sigma_m(z) - V_m(z)}{\mu_2 + \mu_1 \varkappa_2} + O_m^2, & \text{Im } z < 0, \end{cases}$$

где

$$\Sigma_m(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i\sigma_{tt(m)}^s(t)}{z-t} dt + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F_m^1(t)}{z-t} dt, \quad V_m(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F_m^2(t)}{z-t} dt,$$

$\varkappa_j = 4\nu_j - 3$ ,  $\nu_j$  — коэффициент Пуассона среды  $B_j$ ;  $O_0^j = \sigma_j^0/4$ ;  $O_1^j = 0$ ;  $F_0^j = 0$ ,  $F_1^j$  — известные функции, которые могут быть найдены в [89].

Решение задачи в нулевом приближении метода возмущений соответствует совместной деформации двух полуплоскостей с прямолинейной границей раздела  $S_{(0)}$ . В этом случае комплексные потенциалы постоянны в каждой полуплоскости. Тогда с учётом (4.2) получим

$$\Phi_{j(0)}(z) = \Upsilon_{j(0)}(z) = \sigma_j/4. \quad (4.16)$$

Зная комплексные потенциалы, можно записать поверхностные и объёмные напряжения в нулевом приближении метода возмущений

$$\sigma_{tt(0)}^s(x_1) = \gamma^0 + \frac{M(\varkappa_2 + 1)\sigma_2}{8\mu_2}, \quad (4.17)$$

$$\sigma_{11(0)}(z) = \sigma_j, \quad \sigma_1 = \frac{\mu_1(\varkappa_2 + 1)}{\mu_2(\varkappa_1 + 1)}\sigma_2, \quad z \in B_j, \quad j = \{1, 2\}.$$

Межфазное напряжение  $\sigma^s$  в первом приближении метода возмущений ищется в виде

$$\sigma_{tt(1)}^s(x_1) = P \sin(bx_1) + Q \cos(bx_1). \quad (4.18)$$

Принимая во внимание свойства интеграла типа Коши, из (4.15) находятся коэффициенты  $P$  и  $Q$

$$P = \frac{Mab^2 \left[ (L_1 + L_2)(1 - r)\sigma_2 - (L_1 - L_2)\sigma_{tt(0)}^s b \right]}{4\mu_2 + M(L_1 + L_2)b}, \quad Q = 0, \quad (4.19)$$

$$L_1 = \frac{\varkappa_1}{(r + \varkappa_1)}, \quad L_2 = \frac{\varkappa_2}{(1 + r\varkappa_2)}.$$

Комплексные потенциалы в первом приближении принимают вид [89]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi_{1(1)} = \frac{rL_1}{2} \left[ P + ba\{\sigma_2^0 L_4 + b\sigma_{tt(0)}^s\} \right] e^{ibz}, \quad \text{Im } z > 0, \\ \Upsilon_{1(1)} = \frac{rL_2}{2} \left[ P - ba\{\sigma_2^0 L_3 - b\sigma_{tt(0)}^s\} \right] e^{-ibz}, \quad \text{Im } z < 0, \end{array} \right. \quad (4.20)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Upsilon_{2(1)} = \frac{L_1}{2} \left[ P - ba\{\sigma_2^0(1 - rL_5) - b\sigma_{tt(0)}^s\} \right] e^{ibz}, \quad \text{Im } z > 0, \\ \Phi_{2(1)} = \frac{L_2}{2} \left[ P - ba\{\sigma_2^0(1 - r) + b\sigma_{tt(0)}^s\} \right] e^{-ibz}, \quad \text{Im } z < 0, \end{array} \right.$$

где

$$L_3 = -\frac{(\kappa_2 + 1)(r^2\kappa_2 + r - \kappa_1 - 1)}{(\kappa_1 + 1)\kappa_2},$$

$$L_4 = \left[ \frac{r(\kappa_2 + 1)}{\kappa_1 + 1} - \frac{\kappa_1^2 + \kappa_2}{\kappa_1(\kappa_2 + 1)} \right] \kappa_1 + \frac{r^2(\kappa_2 + 1)}{\kappa_1 + 1} - 1, \quad L_5 = \frac{\kappa_1^2 + \kappa_2}{\kappa_1(\kappa_2 + 1)}.$$

Компоненты тензоров напряжений и деформаций в первом приближении метода возмущения определяются по формулам (4.4) и (4.14).

### 4.3 Численные результаты

Принимая во внимание форму начального искривления межфазной границы и интегрируя линеаризованное эволюционное уравнение (4.13), получим выражение, описывающее экспоненциальный рост или уменьшение амплитуды  $A$  со временем

$$\ln \left( \frac{A(\tau)}{A_0} \right) = R_1 \{ (rK_1R_{21} + K_2R_{22})\sigma_0 - (rK_1R_{31} + K_2R_{32})\gamma^0 \} \tau, \quad (4.21)$$

где

$$R_1 = \frac{\sigma_2^0 \pi^3}{8a^3 \mu_2^2 ((L_1 + L_2)M\pi + 2\mu_2 a)(1 + r)},$$

$$\begin{aligned} R_{21} = & -M^2 r L_2 (3L_1 + L_2) \pi^2 (\varkappa_2 + 1)^2 - \\ & - Mr \mu_2 \pi a (\varkappa_2 + 1) \{ 3(2 - 2r + 2L_4) L_1^2 + [(8 - 8r - 2L_3 + 6L_4) L_2 + \\ & + 3\varkappa_2 + 4L_6 + 3] L_1 + [(-2r - 2L_3 + 2) L_2 + \varkappa_2 - 4L_6 + 1] L_2 \} - \\ & - 4r \mu_2^2 a^2 \{ [4(r - 1) L_6 + 3L_4 (\varkappa_2 + 1)] L_1 + [4(r - 1) L_6 - L_3 (\varkappa_2 + 1)] L_2 \}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R_{22} &= -2M^2L_1L_2\pi^2(\varkappa_2 + 1)^2 + Ma\mu_2\pi(\varkappa_2 + 1)\{2r(L_5 - 1)L_1^2 + \\
&\quad + (2r(L_5 - 1)L_2 + \varkappa_2 + 5)L_1 - (3\varkappa_2 + 7)L_2\} + \\
&\quad + 4\mu_2^2a^2\{[(L_5\varkappa_2 + L_5 + 4)r - \varkappa_2 - 5]L_1 + (3\varkappa_2 + 7)L_2(r - 1)\}, \\
R_{31} &= 8Mr\pi^2\mu_2L_2(3L_1 + L_2)(\varkappa_2 + 1) + \\
&\quad + 8r\pi\mu_2^2a\{(4L_6 + 3\varkappa_2 + 3)L_1 - (4L_6 - \varkappa_2 - 1)L_2\}, \\
R_{32} &= 16M(\varkappa_2 + 1)\pi^2L_1L_2\mu_2 - \\
&\quad - 8\pi\mu_2^2a\{(L_1 - 3L_2)\varkappa_2 + 5L_1 - 7L_2\}.
\end{aligned}$$

Отметим, что при  $r = 0$  выражение (4.21) вырождается в уравнение (2.33), описывающее изменение амплитуды рельефа свободной границы твёрдого тела.

В качестве примера рассмотрим подложку, покрытую плёночным покрытием, толщина которого намного превышает амплитуду возмущения межфазной границы. Для простоты рассматривается структура «металл-металл» с равными коэффициентами Пуассона материалов, т.е.  $\nu_1 = \nu_2$ . Это предположение позволяет анализировать влияние подложки с помощью единственного параметра — относительной жёсткости  $r$ . Объёмные параметры Ламе нижнего слоя соответствуют алюминию:  $\lambda_2 = 58,17$  ГПа и  $\mu_2 = 26,13$  ГПа. Поверхностные упругие постоянные для алюминия  $\lambda^s = 6,851$  Н/м,  $\mu^s = -0,376$  Н/м (т.е.  $M = 6,099$  Н/м) были определены методом молекулярного моделирования [105]. Необходимо отметить, что упругие свойства поверхностного слоя зависят от кристаллографической ориентации поверхности, а также других факторов [126]. Также понятно, что свойства интерфейса дополнительно должны зависеть от свойств обоих связанных материалов, и изменение одного из них приведёт к изменению упругих параметров межфазной границы. Однако среди авторов, изучающих упругие поля в композитных материалах при учёте

межфазной межфазной упругости, сложилась практика принимать в качестве параметров межфазной границы соответствующие параметры свободной поверхности [63; 89; 106; 111; 125; 127; 131; 138]. Конечно, существует и другой подход, в котором межфазная граница рассматривается как совокупность двух поверхностных фаз, принадлежащих связанным материалам [44; 46]. Соответственно, свойства интерфейса описываются упругими параметрами, учитывающими упругое поведение двухкомпонентного интерфейса. В силу того, что в данной работе численные результаты имеют качественный характер, влияние межфазного слоя анализируется посредством изменения относительной жёсткости материалов и жёсткости межфазной границы [94; 132].

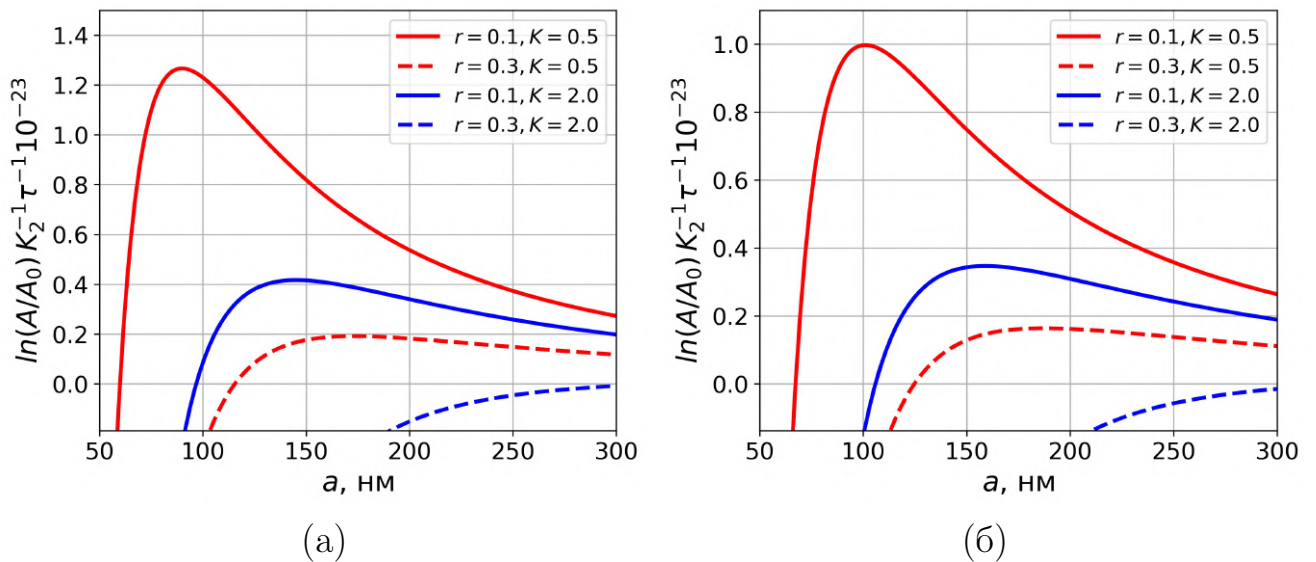


Рисунок 4.2 — Зависимость относительной амплитуды  $A(\tau)/A_0$  периодического рельефа межфазной поверхности от длины волны искривления  $a$  при  $M = 6,099$  Н/м (а) и  $M = 60$  Н/м (б)

На Рис. 4.2 представлена зависимость относительной амплитуды  $A(\tau)/A_0$  рельефа межфазной поверхности от длины волны возмущения  $a$  при остаточном межфазном напряжении  $\gamma^0 = 0,1$  Н/м, различных относительных диффузионных коэффициентах  $K = \{0,5; 2\}$  (красные и синие линии соответственно), относительных жёсткостях системы  $r = \{0,1; 0,3\}$  (сплошные и пунктирные линии соответственно) и межфазных продольных жёсткостях  $M = 6,099$  Н/м (а) и  $M = 60$  Н/м (б). Продольные усилия в подложке  $\sigma_2 = 1$  ГПа. Точки пересечения кривых с осью абсцисс определяют критические значения длин волн возмущения  $a_{cr}$ , в этих случаях рассматриваемая система будет находиться в

термодинамическом равновесии. Рельеф межфазной поверхности будет сглаживаться со временем при длинах волн  $a < a_{cr}$ . В случае, если форма межфазной границы описывается периодической функцией с длиной волны  $a > a_{cr}$ , амплитуда будет увеличиваться со временем. Длины волн  $a_{max}$ , при которых кривые достигают максимума, определяют состояние с наибольшей скоростью роста амплитуды рельефа. Значения длин волн  $a_{cr}$  и  $a_{max}$ , соответствующие рассмотренным параметрам системы представлены в Таблицах 4.1, 4.2.

Таблица 4.1

Критические значения  $a_{cr}$  длин волн искривления межфазной границы, определённые при различных параметрах задачи

$M$ , Н/м	6,099	6,099	60	60
$r$	0,1	0,3	0,1	0,3
$K$	$a_{cr}$ , нм			
0,5	59,9	115,5	67,3	124,7
1,0	70,9	161,5	78,9	172,7
2,0	96,7	322,5	105,9	340,5

Таблица 4.2

Длины волн  $a_{max}$ , соответствующие наибольшей скорости роста амплитуды рельефа межфазной границы

$M$ , Н/м	6,099	6,099	60	60
$r$	0,1	0,3	0,1	0,3
$K$	$a_{max}$ , нм			
0,5	89,9	173,1	101,1	187,1
1,0	106,5	242,3	118,5	259,1
2,0	145,1	483,7	158,9	510,9

Как показывают результаты, критические значения длин волн увеличиваются с увеличением относительной жёсткости  $r$ , относительных диффузионных коэффициентах  $K$  и межфазной продольной жёсткости  $M$ . Более подробный анализ влияния рассматриваемых параметров представлен ниже.

Влияние межфазной продольной жёсткости  $M$  на морфологическую устойчивость границы соединения материалов при различных относительных

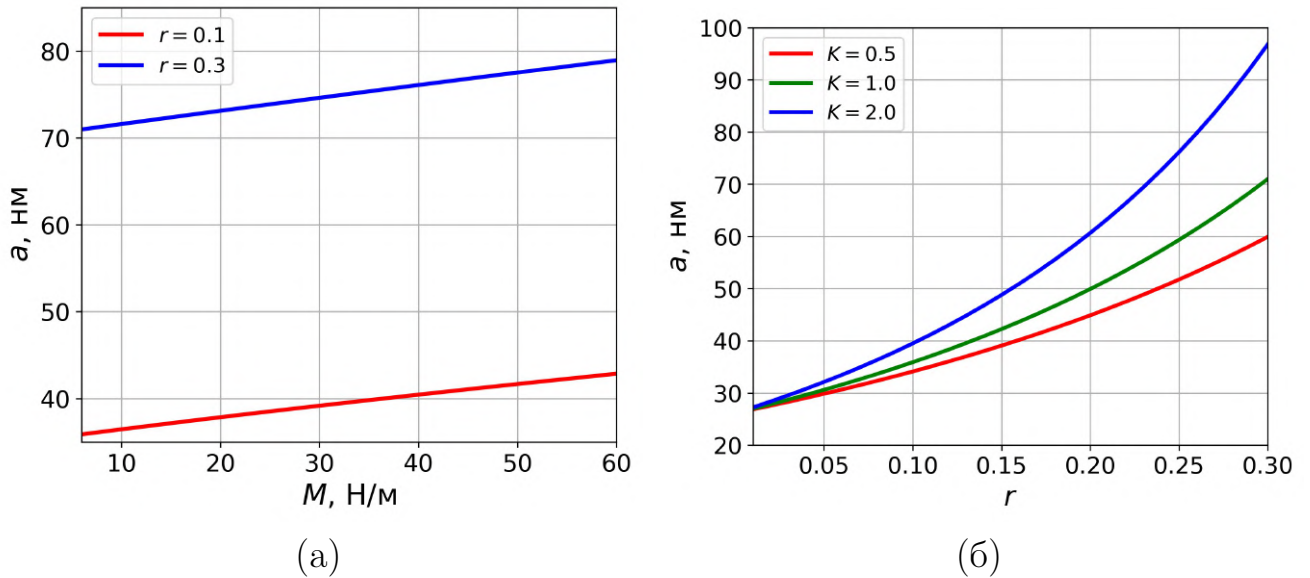


Рисунок 4.3 — Зависимость критического значения длины волны искривления  $a_{cr}$  границы соединения двух материалов от межфазной жёсткости  $M$  (а) и относительной жёсткости  $r$  (б)

жёсткостях  $r = \{0,1; 0,3\}$  (красная и синяя линии соответственно),  $K = 1$  и  $\sigma_2 = 1$  ГПа представлено на Рис. 4.3а. Как видно из рисунка, критические значения линейно возрастают с увеличением относительной жёсткости. При увеличении жестокости в 10 раз (с 6 Н/м до 60 Н/м), критические значения увеличились на 20% при  $r = 0,1$  и 11% при  $r = 0,3$ , относительная разность между критическими значениями  $a_{cr}$  соответствующими  $r = 0,1$  и  $r = 0,3$  уменьшилась с 98% до 84%. Таким образом влияние межфазной продольной жёсткости сильнее выражено при меньшей относительной жёсткости.

На Рис. 4.3б представлен график зависимости критического значения длины волны возмущения  $a_{cr}$  от относительной жёсткости  $r$  при различных относительных диффузионных коэффициентах  $K = \{0,5; 1; 2\}$  (красные, зелёные и синие линии соответственно). Обнаружено, что с увеличением относительной жёсткости критические значения длин волн возрастают. При этом влияние относительной жёсткости композита становится сильнее при увеличении относительного диффузионного коэффициента. Отметим, что при стремлении относительной жёсткости системы к нулю критические значения стремятся к значениям, соответствующим устойчивому состоянию свободной поверхности твёрдого тела (см. Главу 2).

Зависимость критического значения длины волны возмущения межфазной поверхности от величины остаточного межфазного напряжения и продольных усилий при  $r = \{0,1; 0,3\}$  (сплошные и пунктирные линии соответственно) представлена на рисунке Рис. 4.4. Критические значения длин волн возрастают при увеличении остаточного межфазного напряжения и уменьшении продольных усилий.

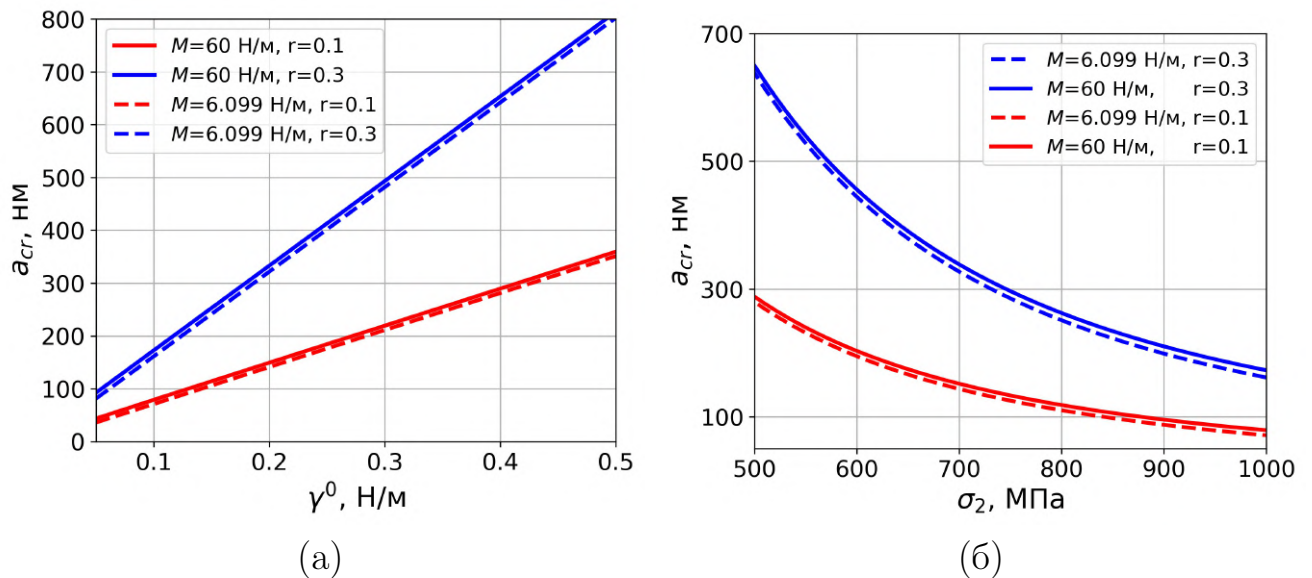


Рисунок 4.4 — Зависимость критического значения длины волны искривления  $a_{cr}$  границы соединения двух материалов от остаточного межфазного напряжения  $\gamma^0$  (а) и продольных усилий  $\sigma_2$  (б)

#### 4.4 Выводы

В данной главе был представлен теоретический подход для анализа устойчивости наноразмерного рельефа границы соединения двух материалов. Новизна исследования заключается в том, что при анализе морфологической устойчивости границы соединения двух материалов было учтено влияние упругих свойств межфазной поверхности на основе соотношений поверхностной упругости Гёртина–Мёрдока. В качестве модели гетерогенной системы рассмотрена двухкомпонентная плоскость, при этом межфазная граница описывалась синусоидальной функцией. С использованием термодинамического подхода



Гиббса получено дифференциальное уравнение, описывающее изменение формы поверхности со временем. При этом скорость роста рельефа зависит от поля объёмных и поверхностных напряжений. Для определения напряжённо-деформированного состояния композита использовался асимптотический метод, описанный в работе Грекова и Костырко [89]. Интегрирование эволюционного уравнения с учётом полученных выражений для компонент тензора напряжений позволило определить условия, при которых будет происходить дальнейший рост или сглаживание рельефа границы соединения материалов.

На основе полученного решения проведён анализ влияния физических и геометрических параметров задачи на морфологическую устойчивость границы соединения двух материалов. Проанализировано влияние относительной жёсткости системы, упругих параметров межфазной границы, остаточного поверхностного напряжения, действующих продольных усилий и диффузионных коэффициентов. В результате сделаны следующие выводы:

- критическое значение длины волны возрастает с увеличением межфазной продольной жёсткости, межфазных остаточных напряжений, относительного диффузионного коэффициента и относительной жёсткости, а также с уменьшением продольных усилий;
- влияние относительной жёсткости на морфологическую устойчивость межфазной границы увеличивается при увеличении отношения диффузионных коэффициентов;
- влияние остаточных межфазных напряжений увеличивается при увеличении относительной жёсткости системы, и слабо зависит от поверхностной жёсткости;
- влияние продольных усилий становится более существенным при увеличении относительной жёсткости;
- влияние межфазной продольной жёсткости возрастает по мере увеличения продольных усилий и уменьшения остаточных межфазных напряжений.

## Заключение

Представленная диссертационная работа является дальнейшим развитием исследований, направленных на изучение процессов, приводящих к образованию топологических дефектов на свободных и межфазных поверхностях слоистых сред. В рамках данного исследования эволюция рельефа поверхностей рассматривалась как изменение амплитуды начального периодического возмущения. Предполагалось, что для минимизации свободной энергии приповерхностные атомы могут перемещаться вдоль поверхности. При этом диффузионный поток атомов пропорционален градиенту химического потенциала, который должен иметь равномерное распределение в состоянии термодинамического равновесия. Изменение химического потенциала вдоль поверхности связано с изменением поля напряжений, а также кривизны и поверхностной энергии. При определении напряжённо – деформированного состояния рассматриваемых сред использовался подход, описанный в работах [64;65;89;92]. В данной работе решён ряд новых задач:

- разработан подход для анализа морфологической неустойчивости свободной поверхности многослойного плёночного покрытия с учётом поверхностного напряжения на основе соотношения Шаттлворта – Херринга;
- получена явная зависимость изменения амплитуды наноразмерного рельефа поверхности твёрдого тела от длины волны искривления, продольных усилий, действующих вдали от поверхности, упругих свойств объёмной и поверхностной фаз материала;
- предложен подход для исследования влияния толщины ультратонкого плёночного покрытия и других физических и геометрических параметров гетерогенной системы на образование устойчивых периодических структур на поверхности плёнки;
- получена явная зависимость изменения амплитуды искривления границы соединения двух материалов от длины волны периодического искривления, отношения диффузионных коэффициентов материалов,

упругих свойств материалов, действующих нагрузок, а также от межфазных остаточных напряжений и межфазной жёсткости.

Отметим, что при анализе морфологической устойчивости поверхности многослойного плёночного покрытия поверхностная энергия считалась постоянной. Однако на наномасштабном уровне необходимо учитывать изменение поверхностной энергии. Так, при рассмотрении наноструктурированных свободных и межфазных поверхностей в Главах 2–4 поверхностная энергия определялась с использованием модели поверхностной/межфазной упругости Гёртина–Мёрдока. В рамках этого подхода поверхность между средами рассматривалась как упругая мембрана, идеально сцепленная с объёмными фазами. По результатам исследования сделаны следующие выводы:

- критическое значение длин волн искривления свободной/межфазной поверхности плёночного покрытия возрастают с увеличением остаточного поверхностного/межфазного напряжения и поверхностной/межфазной продольной жёсткости, а также с уменьшением продольных усилий;
- влияние поверхностной/межфазной упругости на морфологическую устойчивость свободной/межфазной поверхности возрастает с уменьшением величины остаточных напряжений и увеличением продольных усилий;
- критическое значение длины волны искривления свободной поверхности плёночного покрытия практически не зависит от продольной жёсткости и остаточного напряжения на границе соединения «плёнка – подложка»;
- влияние нижних слоёв на морфологическую устойчивость свободной поверхности плёнки уменьшается при увеличении толщины плёночного покрытия;
- толщина плёночного покрытия, при которой можно не учитывать деформацию нижних слоёв, возрастает с увеличением поверхностной жёсткости и остаточных напряжений;
- влияние относительной жёсткости материалов на морфологическую устойчивость границы их соединения увеличивается при увеличении относительных диффузионных коэффициентов.

В дальнейшем предполагается расширить разработанные модели для анализа самоорганизации свободных и межфазных поверхностей в многослойных ультратонких плёночных покрытиях. Также при выводе эволюционного уравнения планируется учесть жёсткость поверхностного слоя на изгиб, для этого при формулировке краевых условий будет использоваться модель поверхностной упругости Штегманна – Огдена. Стоит заметить, что геометрически линейный анализ, проведённый в данной работе, не позволяет проследить изменение формы профиля поверхности. Чтобы проанализировать динамику развития рельефа, необходимо учесть нелинейные слагаемые в эволюционных уравнениях. Для этого будет учтено второе приближение в методе разложения по малому параметру.

## Список литературы

1. Гегузин Я. Е. Диффузионные процессы на поверхности кристалла. М.: Наука, 1984. 124 с.
2. Греков М. А. Сингулярная плоская задача теории упругости. СПб.: Издательство Санкт-Петербургского университета, 2001. 192 с.
3. Греков М. А., Костырко С. А. Многослойное пленочное покрытие под действием периодической системы поверхностных сосредоточенных сил // Труды Центрального научно-исследовательского института имени академика А. Н. Крылова. 2010. Т. 53. С. 29–36.
4. Греков М. А., Костырко С. А. Потеря устойчивости плоской формы пленочного покрытия при поверхностной диффузии // Вестник Санкт-Петербургского университета. Сер. 10. 2007. №1. С. 46–54.
5. Греков М. А., Костырко С. А. Формирование рельефа поверхности пленочного покрытия при поверхностной и объемной диффузии // Вестник Санкт-Петербургского университета. Сер. 1. 2008. №1. С. 106–113.
6. Греков М. А., Макаров С. Н. Двухкомпонентная упругая среда с волнистой межфазной поверхностью // Нелинейные проблемы механики и физики деформируемого твердого тела. СПб.: СПбГУ, 2003. Вып. 7. С. 275–285.
7. Шугуров А. Р. Влияние кривизны границы раздела пленка/подложка на закономерности деформации и разрушения тонких металлических пленок и керамических покрытий при внешних воздействиях: дис. ... д-ра. физ.-мат. наук. Томск, 2016.
8. Костырко С. А. Влияние формы возмущения на устойчивость плоской поверхности пленочного покрытия при диффузионных процессах // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 10: Математика. Механика. Астрономия. 2011. № 3. С. 101–111.

9. Костырко С. А., Шувалов Г. М. Влияние поверхностного напряжения на морфологическую устойчивость многослойного пленочного покрытия при поверхностной диффузии // Молодой ученый. 2015. № 9 (89). С. 14–17.
10. Костырко С. А., Шувалов Г. М. Влияние поверхностной диффузии на морфологическую устойчивость поверхности многослойного пленочного покрытия // Процессы управления и устойчивость. 2015. Т. 2. № 1. С. 190–195.
11. Костырко С. А., Шувалов Г. М. Влияние диффузионных процессов на самоорганизацию поверхности многослойного пленочного покрытия // Вектор науки Тольяттинского государственного университета. 2017. № 42. С. 46–50.
12. Костырко С. А., Шувалов Г. М. Влияние упругих свойств поверхности твердого тела на процесс ее реорганизации под действием напряжений // Процессы управления и устойчивость. 2018. Т. 5. № 1, С. 224–228.
13. Костырко С. А., Шувалов Г. М. Образование наноразмерного рельефа на межфазной границе гетероэпитаксиального материала // Процессы управления и устойчивость. 2019. Т. 6. № 1. С. 143–147.
14. Лукьяненко А. С., Бетехтин В. И., Горобей Н. Н. и др. Формирование рельефа механически деформируемой поверхности как канал релаксации упругой энергии // XIV Петербургские чтения по проблемам прочности. Санкт-Петербург, 2003. С. 171–172.
15. Морозов Н. Ф., Паукшто М. В., Товстик П. Е. О влиянии объемной диффузии на потерю устойчивости поверхностного слоя при термонагрузении // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. 1999. № 4. С. 97–101.
16. Морозов Н. Ф., Паукшто М. В., Товстик П. Е. О депланации грани кристалла в условиях поверхностной диффузии // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. 1999. № 2. С. 53–57.

17. Мусхелишвили Н. И. Некоторые основные задачи математической теории упругости. М.: Наука, 1966. 707 с.
18. Новожилов В. В. Теория упругости. СПб.: Судпромгиз, 1958. 370 с.
19. Шувалов Г. М., Костырко С. А. Образование дефектов поверхности многослойного пленочного покрытия при диффузионных процессах // Процессы управления и устойчивость. 2014. Т. 1. № 1. С. 169–174.
20. Шувалов Г. М., Костырко С. А. Влияние формы возмущения на морфологическую устойчивость поверхности многослойного пленочного покрытия при поверхностной диффузии // Процессы управления и устойчивость. 2016. Т. 3. № 1. С. 301–305.
21. Шувалов Г. М., Костырко С. А. Второе приближение метода возмущений в задаче о твердом теле со слабоискривленной границей // Процессы управления и устойчивость. 2017. Т. 4. № 1. С. 256–260.
22. Шувалов Г. М. Влияние упругих свойств гетероэпитаксиальной системы на устойчивость границы соединения двух материалов // Процессы управления и устойчивость. 2020. Т. 7. № 1. С. 133–137.
23. Altenbach H., Eremeyev V., Morozov N. Surface viscoelasticity and effective properties of thin-walled structures at the nanoscale // International Journal of Engineering Science. 2012. Vol. 59. P. 83–89.
24. Andrews A. M., Speck J. S., Romanov A. E., Bobeth M., Pompe W. Modeling crosshatch surface morphology in growing mismatched layers // Journal of Applied Physics. 2002. Vol. 91. № 4. P. 1933–1943.
25. Angheluta L., Jettestuen E., Mathiesen J. Thermodynamics and roughening of solid-solid interfaces // Physical Review E. 2009. Vol. 79. P. 031601.
26. Angheluta L., Jettestuen E., Mathiesen J., Renard F., Jamtveit B. Stress-driven phase transformation and the roughening of solid-solid interfaces // Physical Review Letters. 2008. Vol. 100. P. 096105.

27. Angheluta L., Mathiesen J. Thermodynamics of stressed solids: Slow deformation and roughening of material interfaces // *The European Physical Journal Special Topics*. 2009. Vol. 178. P. 123-132.
28. Aqua J.-N., Favre L., Ronda A., Benkouider A., Berbezier I. Configurable Compliant Substrates for SiGe Nanomembrane Fabrication // *Crystal Growth and Design*. 2015. Vol. 15. P. 3399–3406.
29. Aqua J.-N., Xu X. Growth of quantum dots on pit-patterns // *Surface Science*. 2015. Vol. 639. P. 20–24.
30. Asaro R. J., Tiller W. A. Interface morphology development during stress-corrosion cracking: Part I. Via surface diffusion // *Metallurgical and Materials Transactions B*. 1972. Vol. 3. P. 1789–1796.
31. Benveniste Y., Miloh T. Imperfect soft and stiff interfaces in two-dimensional elasticity // *Mechanics of Materials*. 2001. Vol. 33(6). P. 309–323.
32. Berrehar J. et. al. Surface patterns on single-crystal films under uniaxial stress: Experimental evidence for the Grinfeld instability // *Physical Review B*. 1992. Vol. 46. P. 13487–13495.
33. Betehtin V. I., Gorobey N. N., Korsukov V. E., Lukyanenko A. S., Obidov B. A. Peculiarities of the defect formation on deformed Si(111) surface // *Proceedings of Sixth International Workshop on Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and Engineering*. 2003. P. 5127.
34. Bochkarev A. O., Grekov M. A. Influence of surface stresses on the nanoplate stiffness and stability in the Kirsch problem // *Physical Mesomechanics*. 2019. Vol. 22(3). P. 209–223.
35. Burger M., He L., Schönlieb C.-B. Cahn-Hilliard Inpainting and a Generalization for Grayvalue Images // *SIAM Journal on Imaging Sciences*. 2009. Vol. 2. P. 1129–1167.
36. Cahn J. W. On spinodal decomposition // *Acta Metallurgica*. 1961. Vol. 9(9). P. 795–801.



37. Cahn J. W., Larche F. Surface stress and the chemical-equilibrium of small crystals. II. Solid particles embedded in a solid matrix // *Acta Metallurgica*. 1982. Vol. 30. P. 51–56.
38. Cammarata R. C.: Surface and interface stress effects in thin films // *Progress in Surface Science*. 1994. Vol. 46(1). P. 1–38.
39. Chiu C.-H., Poh C. T., Huang, Z. Morphological stability of the Stranski-Krastanow systems under an electric field // *Applied Physics Letters*. 2006. Vol. 88. P. 241906.
40. Colin J., Grilhe J., Junqua N. Morphological instabilities of a stressed pore channel // *Acta Materialia*. 1997. Vol. 45, P. 3835–3841.
41. Colin J., Thilly L., Lecounturier F., Peyrade J. P., Grilhé J., Askenazy, S. Axial and radial interface instabilities of copper/tantalum cylindrical conductors // *Acta Metallurgica*. 1999. Vol. 47. P. 2761–2768.
42. Collins J. B., Levine H. Diffuse interface model of diffusion-limited crystal growth // *Physical Review B*. 1985. Vol. 31(9). P. 6119(R).
43. Cotta M. A. Quantum Dots and Their Applications: What Lies Ahead? // *ACS Applied Nano Materials* 2020. 2020. Vol. 3(6). P. 4920–4924.
44. Dai M., Gharahi A., Schiavone P. Analytic solution for a circular nano-inhomogeneity with interface stretching and bending resistance in plane strain deformations // *Applied Mathematical Modelling*. 2018. Vol. 55. P. 160–170.
45. Dai M., Li M., Schiavone P. Plane deformations of an inhomogeneity-matrix system incorporating a compressible liquid inhomogeneity and complete Gurtin–Murdoch interface model // *Journal of Applied Mechanics*. 2018. Vol. 85(12). P. 121010.
46. Dai M., Schiavone P. Edge dislocation interacting with a Steigmann–Ogden interface incorporating residual tension // *International Journal of Engineering Science*. 2019. Vol. 139. P. 62–69.

47. Du D., Srolovitz D. Electrostatic field-induced surface instability // Applied Physics Letters. 2004. Vol. 85. P. 4917.
48. Duan H. L., Wang J., Karihaloo B.L. Theory of elasticity at the nanoscale // Advances in Applied Mechanics. 2008. Vol. 42. P. 1–68.
49. Duan H. L., Weissmüller J., Wang Y. Instabilities of core–shell heterostructured cylinders due to diffusions and epitaxy: spheroidization and blossom of nanowires // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2008. Vol. 56. P. 1831–1851.
50. Eaglesham D. J., Cerullo M. Dislocation-free Stranski–Krastanov growth of Ge on Si // Physical Review Letters. 1990. Vol. 64. № 16. P. 1943.
51. Eremeyev V. A. On effective properties of materials at the nano- and microscales considering surface effects // Acta Mechanica. 2016. Vol. 227. P. 29–42.
52. Fischer F. D., Waitz T., Vollath D., Simha N. K. On the role of surface energy and surface stress in phase-transforming nanoparticles // Progress in Materials Science. 2008. Vol. 53. P. 481–527.
53. Fleury V. Un possible lien entre la croissance dendritique en physique et la morphogenese des plantes // Comptes Rendus de l Académie des Sciences - Series III. 1999. Vol. 322. P. 725–734.
54. Freund L. B. Evolution of waviness on the surface of a strained elastic solid due to stress-driven diffusion // International Journal of Solids and Structures. 1995. Vol. 28. P. 911–923.
55. Freund L. B., Suresh S. Thin film materials: stress, defect formation and surface evolution. Cambridge University Press, 2004.
56. Gao H. Some general properties of stress-driven surface evolution in a heteroepitaxial thin film structure // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1994. Vol. 42. P. 741–772.

57. Gao H., Nix W.D. Surface roughening of heteroepitaxial thin films // Annual Review of Material Science. 1999. Vol. 29. P. 73–209.
58. Gibbs J.W. The Scientific papers of J. Willard Gibbs, Vol.1. London: Longmans-Green, 1906. 434 p.
59. Goldstein R.V., Makhviladze T.M., Sarychev M.E. Electromigration-induced instability of the interface between solid conductors // Physical Mesomechanics. 2018. Vol. 21. P. 275–282.
60. Goldstein R. V., Makhviladze T. M., Sarychev M. E. Instability of the interface between joint conducting materials under electrical current // Materials Letters. 2016. Vol. 6. P. 98–101.
61. Gorbushin N., Eremeyev V. A., Mishuris G. On the stress singularity near the tip of a crack with surface stresses // International Journal of Engineering Science. 2020. Vol. 146. P. 103183.
62. Grekov M. A., Makarov S. N. Stress concentration near a slightly curved part of an elastic body surface // Solid Mechanics, 2004. Vol. 39 (6). P. 40–46.
63. Grekov M. A., Sergeeva T.S. Interaction of edge dislocation array with bimaterial interface incorporating interface elasticity // International Journal of Engineering Science. 2020. Vol. 149. P. 103233.
64. Grekov M. A., Kostyrko S. A. A multilayer film coating with slightly curved boundary // International Journal of Engineering Science, 2015. No 89. P. 61–74.
65. Grekov M. A., Kostyrko S. A. Surface effects in an elastic solid with nanosized surface asperities // International Journal of Solids and Structures. 2016. Vol. 96. P. 153–161.
66. Grekov M. A., Sergeeva T. S., Pronina Y. G., Sedova O.S. A periodic set of edge dislocations in an elastic solid with a planar boundary incorporating surface effects // Engineering Fracture Mechanics. 2017. Vol. 186. P. 423–435.

67. Grilhe J. Study of roughness formation induced by homogeneous stress at the free surfaces of solids // *Acta Metallurgica and Materialia*. 1993. Vol. 41. № 3. P. 909–913.
68. Grinfeld M. A., Hazzledine P. M. Rearrangement at coherent interfaces in heterogeneous solids // *Philosophical Magazine Letters*. 1996. Vol. 74. P. 17–23.
69. Grinfeld M. Instability of the equilibrium of a nonhydrostatically stressed body and a melt // *Fluid Dynamics*. 1987. Vol. 22. P. 169–173.
70. Grinfeld M., Grinfeld P. Towards thermodynamics of elastic electric conductors // *Philosophical Magazine, Part A*. 2001. Vol. 81. P. 1341–1354.
71. Grinfeld, M. A. Thermodynamic methods in the theory of heterogeneous systems. Sussex, UK: Longman, 1991. P. 399.
72. Gurtin M. E., Jabbour M. E. Interface evolution in three dimensions with curvature-dependent energy and surface diffusion: Interface-controlled evolution, phase transitions, epitaxial growth of elastic films // *Archive for Rational Mechanics and Analysis*. 2002. Vol. 163. P. 171–208.
73. Gurtin M. E., Murdoch A. I. A continuum theory of elastic material surfaces // *Archive for Rational Mechanics and Analysis*. 1975. Vol. 57. P. 291–323.
74. Gurtin M. E., Murdoch A. I. Surface stress in solids // *International Journal of Solids and Structures*. 1978. Vol. 14. P. 431–440.
75. Gurtin M. E., Voorhees P. W. The continuum mechanics of coherent two-phase elastic solids with mass transport // *Proceedings of the Royal Society A*. 1993. Vol. 440. P. 323–343.
76. Gurtin M. E., Voorhees P. W. The thermodynamics of evolving interfaces far from equilibrium // *Acta Materialia*. 1996. Vol. 44. P. 235–247.
77. Han Z. W., Wang Z., Feng X. M., Li B., Mu Z. Z., Zhang J. Q., Niu S. C., Ren L. Q. Antireflective surface inspired from biology: A review // *Biosurface and Biotribology*. 2016. Vol. 2(4). P. 137–150.

78. Herring C. Some Theorems on the Free Energies of Crystal Surfaces // *Physical Review*. 1951. Vol. 82. P. 87.
79. Hilhorst D., Kampmann J., Nguyen T., Van Der Zee K. G. Formal asymptotic limit of a diffuse-interface tumor-growth model // *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*. 2015. Vol. 25(6). P. 1011–1043.
80. Ishiguro H., Rubinsky B. Mechanical Interactions between ice crystals and red blood cells during directional solidification // *Cryobiology*. 1994. Vol. 31. P. 483–500.
81. Javili A., McBride A., Steinmann P. Thermomechanics of solids with lowerdimensional energetics: On the importance of surface, interface, and curve structures at the nanoscale. A Unifying Review // *Applied Mechanics Reviews*. 2013. Vol. 65. P. 010802.
82. Javili A., Ottosen N. S., Ristinmaa M., Mosler J. Aspects of interface elasticity theory // *Mathematics and Mechanics of Solids*. 2018. Vol. 23. P. 1004–1024.
83. Jesson D. E., Pennycook S. J., Baribeau J. M. Direct imaging of surface cusp evolution during strained-layer epitaxy and implications for strain relaxation // *Physical Review Letters*. 1993. Vol. 71. P. 1744–1747.
84. Junqua N., Grilhé J. Instabilities of planar interfaces between two stressed materials // *Philosophical Magazine Letters*. 1994. Vol. 69. P. 61–70.
85. Kim J.-H., Vlassak J. J. Perturbation analysis of an undulating free surface in a multi-layered structure // *International Journal of Solids and Structures*. 2007. Vol. 44. P. 7924–7937.
86. Kim J., Lee S., Choi Y, Lee S.-M., Jeong D. Basic Principles and Practical Applications of the Cahn–Hilliard Equation // *Mathematical Problems in Engineering*. 2016. Vol. 2016. P. 9532608.
87. Kim S., Kim S. M., Park H.-H., Choi D.-G., Jung J.-W., Jeong J.-H., Jeong J.-R. Conformally direct imprinted inorganic surface corrugation for light extraction enhancement of light emitting diodes // *Optics express*. 2012. Vol. 20(5). P. A713–A721.

88. Klinger L., Levin L., Srolovitz D. Morphological stability of a heterophase interface under electromigration conditions // Journal of Applied Physics. 1996. Vol. 79. P. 6834–6839.
89. Kostyrko S. A., Grekov M. A. Elastic field at a rugous interface of a bimaterial with surface effects // Engineering Fracture Mechanics. 2019. Vol. 216. P. 106507.
90. Kostyrko S. A., Shuvalov G. M. Morphological stability of multilayer film surface during diffusion processes // Proceedings of the 2015 International Conference "Stability and Control Processes" in Memory of V. I. Zubov (SCP). 2015. P. 392–395.
91. Kostyrko S. A., Shuvalov G. M. Morphological stability of thin film materials during annealing // Proceedings of the XLIV International Summer School-Conference APM 2016. 2016. P. 230–237.
92. Kostyrko S. A., Altenbach H., Grekov M. A. Stress concentration in ultra-thin coating with undulated surface profile // Proceedings of the 7th International conference on coupled problems in science and engineering. 2017. P. 1183–1192.
93. Kostyrko S. A., Shuvalov G. M. Surface elasticity effect on diffusional growth of surface defects in strained solids // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2019. Vol. 31. P. 1795–1803.
94. Kostyrko S. A., Shuvalov G. M. On the role of interfacial elasticity in morphological instability of a heteroepitaxial interface // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2021. 10.1007/s00161-021-01010-6
95. Kostyrko S., Grekov M., Altenbach H. Stress concentration analysis of nanosized thin-film coating with rough interface // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2019. Vol. 31. P. 1863–1871.
96. Krishnamurthy R., Srolovitz D. J. Film/substrate interface stability in thin films // Journal of Applied Physics. 2006. Vol. 99. P. 043504.
97. Lacour S. P., Wagner S., Huang Z. Y., Suo Z. Stretchable gold conductors on elastomeric substrates // Applied Physics Letters. 2003. Vol. 82(15). P. 2404.

98. Larche F. C., Cahn, J. W. The interaction of composition and stress in crystalline solids // *Acta Metallurgica*. 1985. Vol. 33(3). P. 331–357.
99. Leo P. H., Lowengrub J. S., Jou H. J. A diffuse interface model for microstructural evolution in elastically stressed solids // *Acta Materialia*. 1998. Vol. 46(6). P. 2113–2130.
100. Linkov A. M. Boundary integral equations in elasticity theory. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht-Boston-London. 2002.
101. Lurie S., Belov P.: Gradient effects in fracture mechanics for nano-structured materials // *Engineering Fracture Mechanics*. 2014. Vol. 130. P. 3–11.
102. Maraldi M., Molari L., Grandi D. A unified thermodynamic framework for the modelling of diffusive and displacive phase transitions // *International Journal of Engineering Science*. 2012. Vol. 50(1). P. 31–45.
103. McBride A. T., Javili A., Steinmann P., Bargmann S. Geometrically nonlinear continuum thermomechanics with surface energies coupled to diffusion // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2011. Vol. 59. P. 2116–2133.
104. Mi C., Jun S., Kouris D. A., Sung Kim S. Y. Atomistic calculations of interface elastic properties in noncoherent metallic bilayers // *Physical Review B*. 2008. Vol. 77. P. 075425.
105. Miller R. E., Shenoy V. B. Size-dependent elastic properties of nanosized structural elements // *Nanotechnology*. 2000. Vol. 11, P. 139–147.
106. Mogilevskaya S. G., Crouch S. I., Stolarski H. K. Multiple interacting circular nano-inhomogeneities with surface/interface effects // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2008. Vol. 56. P. 2298–2327.
107. Mullins W. W. Theory of thermal grooving // *Journal of Applied Physics*. 1957. Vol. 28. P. 333–339.
108. Mullins W. W., Sekerka R. F. Morphological stability of a particle growing by diffusion or heat flow // *Journal of Applied Physics*. 1963. Vol. 34. P. 323–329.

109. Nazarenko L., Bargmann S., Stolarski H. Closed-form formulas for the effective properties of random particulate nanocomposites with complete Gurtin–Murdoch model of material surfaces // *Continuum Mechanics and Thermodynamics*. 2017. Vol. 29(1). P. 77–96.
110. Nazarenko L., Chirkov A. Y., Stolarski H., Altenbach H. On the modeling of carbon nanotubes reinforced materials and on influence of carbon nanotubes spatial distribution on mechanical behavior of structural elements // *International Journal of Engineering Science*. 2019. Vol. 143. P. 1–13.
111. Nazarenko L., Stolarski H., Altenbach H. Effective properties of short-fiber composites with Gurtin-Murdoch model of interphase // *International Journal of Solids and Structures*. 2016. Vol. 97–98. P. 75–88.
112. Otsuka K., Karato S. Deep penetration of molten iron into the mantle caused by a morphological instability // *Nature*. 2012. Vol. 492. P. 243–246.
113. Ozkan C. S., William D., Nix W. D., Gao H. Strain relaxation and defect formation in heteroepitaxial  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  films via surface roughening induced by controlled annealing experiments // *Applied Physics Letters*. 1997. Vol. 70(17). P. 2247.
114. Panat R., Hsia K. J., Cahill D. G. Evolution of surface waviness in thin films via volume and surface diffusion // *Journal of Applied Physics*. 2005. Vol. 97. P. 013521.
115. Panin A. V., Shugurov A. R. Effect of local curvature of internal and external interfaces on mass transfer responsible for thin film degradation // *Physical Mesomechanics*. 2013. Vol. 16. P. 348–354.
116. Pelliccione M., Lu T. -M. *Evolution of Thin Film Morphology: Modeling and Simulations*. New-York, 2008.
117. Pronina Y. G., Khryashchev S. M. Mechanochemical growth of an elliptical hole under normal pressure // *Materials Physics and Mechanics*. 2017. Vol. 31(1-2). P. 52–55.



118. Pronina Y., Sedova O., Grekov M., Sergeeva T. On corrosion of a thin-walled spherical vessel under pressure // *International Journal of Engineering Science*. 2018. Vol. 130. P. 115–128.
119. Risler T., Basan M. Morphological instabilities of stratified epithelia: a mechanical instability in tumour formation // *New Journal of Physics*. 2013. Vol. 15. P. 065011.
120. Roach P., Eglin D., Rohde K., Perry C. Modern biomaterials: a review – bulk properties and implications of surface modifications // *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*. 2007. Vol. 18. P. 1263–1277.
121. Roach P., Shirtcliffe N. J., Newton M. I. Progress in superhydrophobic surface development // *The Royal Society of Chemistry*. 2008. Vol. 4, P. 224–240.
122. Ru C. Q. Simple geometrical explanation of Gurtin-Murdoch model of surface elasticity with clarification of its related versions // *Science China: Physics, Mechanics and Astronomy*. 2010. Vol. 53(3). P. 536–544.
123. Savina, T., Voorhees P., Davis, S. The effect of surface stress and wetting layers on morphological instability in epitaxially strained films // *Journal of Applied Physics*. 2004. Vol. 96. P. 3127–3133.
124. Sekerka R. F. Morphological stability // *Journal of Crystal Growth*. 1968. Vol. 3. P. 71–81.
125. Sharma P., Ganti S., Bhate N. Effect of surfaces on the size-dependent elastic state of nano-inhomogeneities // *Applied Physics Letters*. 2003. Vol. 82(4). P. 535–537.
126. Shenoy V. B. Atomistic calculations of elastic properties of metallic fcc crystal surfaces // *Physical Review B*. 2005. Vol. 71(9). P. 094104.
127. Shodja H. M., Ahmadzadeh-Bakhshayesh H., Gutkin M. Y. Size-dependent interaction of an edge dislocation with an elliptical nano-inhomogeneity incorporating interface effects // *International Journal of Solids and Structures*. 2012. Vol. 49. P. 759–770.

128. Shuttleworth R. The surface tension of solids. // Proceedings of the Physical Society, Section A. 1950. Vol. 63(5). P. 444–457.
129. Shuvalov G. M., Kostyrko S. A. Surface self-organization in multilayer film coatings // AIP Conference Proceedings. 2017. Vol. 1909. P. 020196.
130. Shuvalov G. M., Kostyrko S. A. Stability analysis of nanoscale surface patterns in stressed solids // AIP Conference Proceedings. 2018. Vol. 1959(1). P. 070016.
131. Shuvalov G. M., Vakaeva A. B., Shamsutdinov D. A., Kostyrko S. A. The effect of nonlinear terms in boundary perturbation method on stress concentration near the nanopatterned bimaterial interface // Vestnik Saint Petersburg State University. Applied Mathematics. Computer Sciences. Control Processes. 2020. Vol. 16. 165–176.
132. Shuvalov G. M., Kostyrko S. A. Stability analysis of a nanopatterned biomaterial interface // Vestnik of Saint Petersburg University. Applied Mathematics. Computer Science. Control Processes. 2021. Vol. 17(1). P. 97–104.
133. Srolovitz D. J. On the stability of surfaces of stressed solids // Acta Metallurgica. 1989. Vol. 37(2). P. 621–625.
134. Steigmann D. J., Ogden R. W. Elastic surface-substrate interactions // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 1999. Vol. 455. P. 437–474.
135. Steigmann D. J., Ogden R. W. Plane deformations of elastic solids with intrinsic boundary elasticity // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 1997. Vol. 453(1959). P. 853–877.
136. Theljani A., Houichet H., Mohamed A. An adaptive Cahn-Hilliard equation for enhanced edges in binary image inpainting // Journal of Algorithms and Computational Technology. 2020. Vol. 14. P. 1–10.
137. Thornton K., Ågren J., Voorhees P. W. Modeling the evolution of phase boundaries in solids at the meso- and nano-scales // Acta Materialia. 2003. Vol. 51. P. 5675–5710.

138. Tian L., Rajapakse R. K. N. D. Elastic field of an isotropic matrix with nanoscale elliptical inhomogeneity // *International Journal of Solids and Structures*. Vol. 44(24). P. 7988–8005.
139. Torii R. H., Balibar S. Helium crystals under stress: the Grinfeld instability // *Journal of Low Temperature Physics*. 1992. Vol. 89(1-2). P. 391–400.
140. Vakaeva A. B., Shuvalov G. M., Kostyrko S. A. Interfacial stresses in bimaterial composites with nanosized interface relief // *Proceedings of the 8th International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering. Coupled Problems 2019*. 2019. P. 679–688.
141. Vakaeva A. B., Shuvalov G. M., Kostyrko S. A., Grekov M. A. The finite element modeling of an elastic body with a nanometer surface relief // *Proceedings of the International Conference on Numerical Analysis and Applied Mathematics, ICNAAM 2018*. 2019. Vol. 2116(1). P. 290008.
142. Vikulina Y. I., Grekov M. A., Kostyrko S. A. Model of film coating with weakly curved surface // *Mechanics of solids*. 2010. Vol. 45(6). C. 16–28.
143. Wang J., Huang Z., Duan H., Yu S. W., Wang G., Zhang W., Wang T. Surface stress effect in mechanics of nanostructured materials // *Acta Mechanica Sinica*. 2011. Vol. 24. P. 52–82.
144. Watanabe M., Shirai H., Hirai T. Wrinkled polypyrrole electrode for electroactive polymer actuators // *Journal of Applied Physics*. 2002. Vol. 92 (8). P. 4631.
145. Watson J. S. Crystal Growth, Coarsening and the Convective Cahn–Hilliard Equation // *Free Boundary Problems: Theory and Applications*. Basel: Birkhäuser. 2004. P. 329–341.
146. Wise S. M., Lowengrub J. S., Frieboes H. B., Cristini V. Three-dimensional multispecies nonlinear tumor growth: model and numerical method // *Journal of Theoretical Biology*. 2008. Vol. 253(3). P. 524–543.

147. Yao J.Y., Andersson T.G., Dunlop G.L. Microstructures and critical thicknesses of  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  strained-layer structures // *Semiconductor Science and Technology*. 1994. Vol. 9. P.1086–1095.
148. Yoshino T. Penetration of molten iron alloy into the lower mantle phase // *Comptes Rendus Geoscience*. 2019. Vol. 351. P.171–181.

SAINT PETERSBURG STATE UNIVERSITY

Manuscript copyright

Gleb M. Shuvalov

**The effect of surface stresses  
on topological defects formation in layered structures**

Scientific specialization 1.1.8. Solid Mechanics

Dissertation is submitted for the degree  
of Candidate of Physical and Mathematical Sciences

Translation from Russian

Scientific supervisor:  
Candidate of Physical and Mathematical Sciences  
Sergey A. Kostyrko

Saint Petersburg

2021

## Contents

<b>Introduction</b> . . . . .	111
<b>Chapter 1 Morphological stability of multilayer film surface</b> . . . . .	123
1.1 Problem formulation . . . . .	123
1.2 Chemical potential and growth rate of topological defects . . . . .	126
1.3 Linear analysis of surface morphological evolution . . . . .	128
1.4 Numerical results . . . . .	138
1.5 Chapter conclusions . . . . .	142
<b>Chapter 2 Morphological stability of nanopatterned solid surface</b> . . . . .	144
2.1 Problem formulation . . . . .	145
2.2 Linear analysis of surface morphological evolution . . . . .	148
2.3 Numerical results . . . . .	152
2.4 Chapter conclusions . . . . .	157
<b>Chapter 3 Morphological stability of ultrathin film surface</b> . . . . .	158
3.1 Problem Formulation . . . . .	159
3.2 Linear analysis of surface morphological evolution . . . . .	161
3.3 Numerical results . . . . .	167
3.4 Chapter conclusions . . . . .	173
<b>Chapter 4 Morphological stability of a nanostructured interface</b> . . . . .	175
4.1 Problem formulation . . . . .	175
4.2 Linear analysis of interface morphological evolution . . . . .	179
4.3 Numerical results . . . . .	183
4.4 Chapter conclusions . . . . .	187
<b>Conclusion</b> . . . . .	189
<b>References</b> . . . . .	191

## Introduction

The development of materials with improved properties is an important material science problem. The priority is given to the research of thin-film coatings because the great achievements in the development and study of such structures are the key to modern technological progress [55]. For example, thin-film coatings are used to create microelectronic devices, microelectromechanical systems, optical instruments, decorative elements and special protective coatings [116]. Nevertheless, there is the possibility of the failure of films used in the microelectronic devices, which is a significant barrier to improving their functional properties.

The effect of a stress state on their debonding and fracture was detected at the very beginning of the use of film coatings. Mechanical damages to products are often the result of brittle fracture or plastic deformation caused by surface defects and heterogeneities that are formed during the production or further operation of devices. Thus, it is necessary to minimize the number of defects in micro and nanosized structures otherwise their performance will be insufficient [55].

One of the main processes leading to surface defect formation is the mechanism of morphological instability. This results in the formation of roughness on the film surface due to diffusion processes during film growth or annealing [15;16] as well as other phase changes [117;118]. Due to the lattice mismatch, misfit stresses arise in the film-substrate system and can reach values of 1–2.5 GPa [57]. One of the stress relaxation mechanisms is associated with the nucleation of dislocations near the interfacial boundary [24]. However, there are other stress relaxation mechanisms, for example, diffusion of atoms along free or interfacial surfaces. In contrast to macroscale materials, in thin-film coatings — structures with very small linear size, large stress and temperatures — diffusion processes have a significant effect on the evolution of the film surface. [55]. Surface diffusion involves the motion of atoms and atomic clusters along the film surface, which can lead to a change in surface profile. The surface roughness and misfit stresses lead to the stress concentration and cracking. The Fig. 1 shows transmission electron microscopy image (TEM) of the film coating, demonstrating the nucleation of defects.

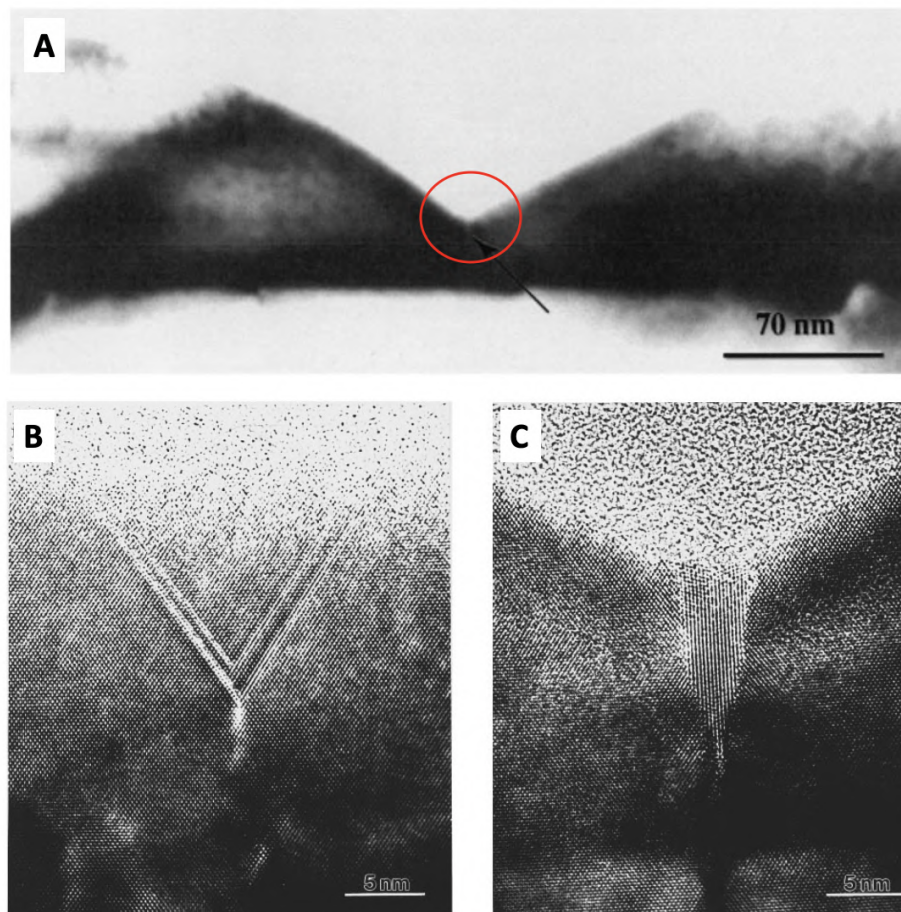


Figure 1 — Cross-section TEM image of 50-nm-thick a  $Si_{0.78}Ge_{0.22}$  (A), V-shaped defect (B), wedge-shaped defect (C) [57; 113]

It should be noted that there are also positive aspects of surface patterns formation. The roughness of the free surface and interphase is fundamental in some applications. For example, the surface relief has a positive effect on the anti-reflective properties of optical devices [77]. Formation of surface relief can be used in the production of quantum dots [29; 57], which have unique electrical and optical properties. These structures serve as a foundation for developing a plurality of new microelectronic devices such as single-electron transistors, quantum semiconductor lasers, light-emitting diodes (LED) and photoelectric elements [43] (Fig. 2 shows the scanning electron microscopy image (SEM) of the patterned surface of the LED coating, which allows to improve the light output). To fabricate flexible electronic devices, a special relief is formed on the substrate to improve the adhesion of the circuit components [97; 144]. Control of surface relief formation allows to produce the hydrophobic coatings, which are widely used in engineering and construction [121]. The microrelief of the surface plays an important role in determining cell



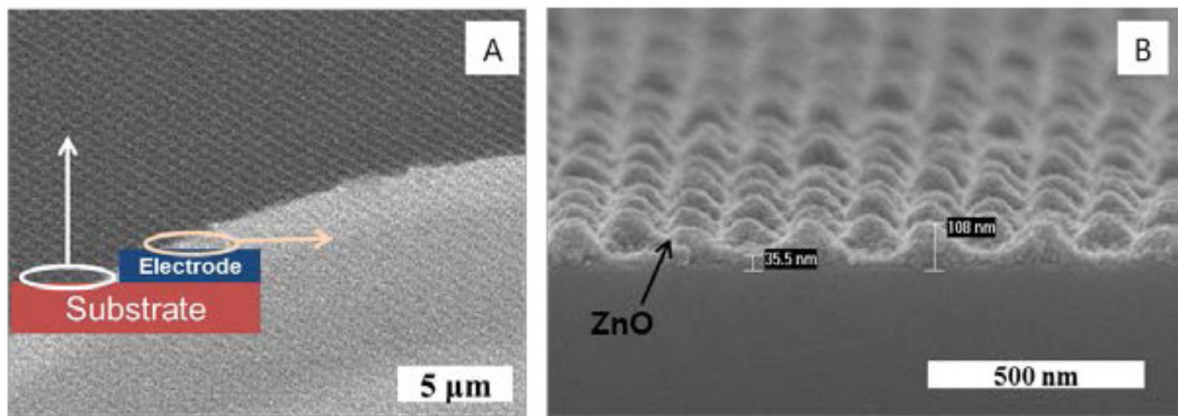


Figure 2 — SEM images of  $ZnO$  nanopatterns fabricated on the uneven LED surface including metal electrode (A) and tilted view of  $ZnO$  corrugations on  $In_2O_5Sn$  layer [87]

adhesion and affects the biocompatibility of materials. Recently, special coatings with predetermined relief were used for improving cell adhesion [120]. Thus, the surface evolution problem has interest from both applied and fundamental points of view.

There are two main approaches to describe the thermodynamics of surface/interface phenomena: diffuse interface and sharp interface model. The idea that the interfacial layer has a non-zero thickness is used in the Cahn–Hilliard theory of non-equilibrium phase transitions. The boundaries of the diffuse interface are determined in the constant density areas of each material. This approach was widely used to study solidification [36; 102], solid phase transformation [98], grain growth and coarsening [42; 145]. Moreover, the Cahn–Hilliard theory was used for modeling tumor growth [79; 146] as well as in the recovery of corrupted binary image [35; 136]. Some other applications of the Cahn–Hilliard model can be found in [86]. Another approach follows from the Gibbs surface thermodynamics [58]. Gibbs considered the material boundary as a layer with a zero thickness. Based on Gibbs thermodynamics, Mullins and Sekerka [107; 108; 124] investigated the phenomenon of morphological instability in solids controlled by surface diffusion. They examined the surface and interface perturbations during growth of mono- and polycrystals considering the variation of chemical potential along the curved boundaries. Thus, the chemical potential gradient driving the mass transport process was associated with the surface/interface curvature. Later, the Mullins–Sekerka model of the morphological instability was applied in different fields of science. In [112; 148], the

approach was proposed for the description of the process of molten iron penetration into the mantle leading to extraordinary geophysical phenomena. Destruction of red blood cells was also investigated due to mechanical interaction with growing ice crystals during freezing [80]. Similarly to Mullins–Sekerka morphological instability mechanism, in [119] there is a model proposed to describe the epithelium instability during tumor growth. Also, the mechanism of branch growth in plants was considered similar to the formation of structures during the crystal growth [53]. It is worth to note that the results of diffuse and sharp interface models are in a good agreement if the interface thickness in the diffuse interface model is sufficiently small [99;137].

Morphological instability in solids may occur not only during the phase transitions. Based on sharp interface model, Asaro and Tiller [30] found that the surface of a solid subjected to uniaxial stress is unstable against diffusional perturbations with wavelengths larger than a critical value. In their model, the flow of atoms was considered proportional to the gradient of chemical potential along the surface. Later, their result was replicated independently of each other by Grinfeld and Srolovitz [69;133]. The theoretical results were confirmed by a number of experiments. Torii and Balibar [139] made a series of experiments with a nonhydrostatically stress crystal helium. They found that when stress reaches some critical value, large grooves are formed on the crystal surface. The similar study was conducted by Berrehar [32]. It was shown that the grooves or quasi-periodic cracks are formed on the film surface under uniaxial tension. Experiments also showed that in addition to slight waviness [147], the sharp cusps and valley are formed on the film surface [83] and in some cases the film can decay into the islands [50] (Fig. 3 shows the island formation during annealing). Some other results of experimental studies devoted to the formation of thin-film coatings surface relief can be found in the works of Panin, Shugurov, Betehtin and others [7;33;115].

In the original Asaro–Tiller–Grinfeld (ATG) instability model, the gradient of chemical potential, additionally to surface curvature, was associated with the stress variation along the perturbed surface. However, there are other factors affecting the evolution of free/interfacial boundaries in solids. The morphological instability of the solid surface caused by electric current was studied in [39;47;70]. In the works [59;60;88], a theoretical model was developed describing the interfacial morphological instability under the electric current and a non-uniform field of mechanical stresses.

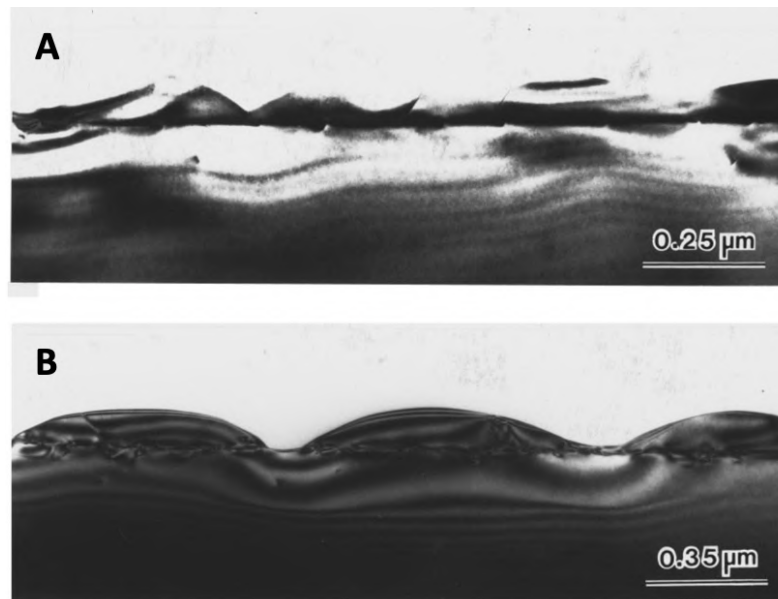


Figure 3 — Cross-section TEM image of 50-nm-thick a  $Si_{0.78}Ge_{0.22}$  annealed at 800 °C for 20 min (A) and 1 h (B) [113]

The effect of the wetting layer on the morphological instability of the film coating was also investigated [123]. In [5;8;11;114;129], the influence of the volume diffusion associated with the capillary effect was taken into account in addition to mass transfer along the surface.

To date, extensive studies have been carried out extending ATG model to describe the surface/interface morphological evolution in solids with voids and microchannels, inhomogeneities of cylindrical and spherical shape, core-shell heterostructures, mono- and multilayered film coatings [28; 40; 41; 49; 54; 56; 85; 130]. The instability of coherent interfaces between two joined materials were discussed in [25–27; 68; 84]. Other references on this topic could be found in [71]. However, most of these works have ignored the effect of surface/interface elasticity, assuming that it is relatively small in comparison with the bulk elastic behavior. Nonetheless, the impact of surface/interface stress becomes significant in mechanics and thermodynamics of nanostructured materials [11; 37; 52; 65; 89; 95; 109; 110].

The research works in the field of surface/interface elasticity have attracted considerable attention in the recent years due to the increasing number of engineering applications involving nanoscale structures, such as, topological elements of integrated circuits, quantum dots, porous semiconductors. Several mathematical methods and techniques have been developed to study the surface/interface phenomenon in solids. Herring and Shuttleworth found that the difference between

the surface stress and surface energy is equal to the change in surface energy associated with the elastic deformation of the surface. In the works [1; 4; 9; 38], it was assumed that such changes are very small and surface stress was taken equal to surface energy. To take into account the elastic deformation of free and interfacial surfaces, Gurtin and Murdoch [73; 74] developed a model in which surface domain was presented as elastic membrane ideally adhering to the underlying bulk phase. The stress resultants acting in membrane were defined as surface stresses and the constitutive relations were formulated coupling surface stress tensor and the surface strain measure. In [105], the results, derived on the basis of the continuum model including the Gurtin–Murdoch constitutive equations, have been compared with atomistic simulations based on the embedded atom method. The comparison showed a good agreement between both modelling approaches. Later, Gurtin–Murdoch model was expanded by Steigmann and Ogden, taking into account the influence of the surface/interface bending stiffness [134; 135]. Considering the deformation of the heterogeneous structure, Benveniste and Miloh modeled the interfacial region as a thin elastic layer with the properties different from the bulk materials [31]. It was also shown that with a decrease in the thickness of the interfacial layer, this approach gives the same results as Gurtin–Murdoch and Steigmann–Ogden models. Other approaches to study the effect of surface and interfacial elasticity can be found in [38; 48; 101; 128]. Nevertheless, due to its simplicity, the Gurtin–Murdoch’s model remains one of the most widely used models describing the influence of the surface on the overall behavior of a solid.

Recently, the Gurtin–Murdoch (GM) model has been successfully applied to study the effect of surface/interface elasticity on the mechanical properties of nanosized specimens and nanostructured materials [23; 34; 45; 61; 63; 66; 127]. Comprehensive review of research literature on this subject is given in [51; 81; 82; 106; 143]. In [72; 75; 76; 103], the theoretical frameworks, which described rearrangement of solid surface/interface coupling diffusion and bulk-surface/interface elastic interactions, were developed.

The current work is also devoted to the rearrangement of free and interfacial surfaces. However, in contrast to the above works, here we investigate morphological stability based on ATG–model. Using GM–model, the change in surface/interface energy associated with the deformation of materials will be taken into account. This

allows to analyze the effect of the elastic constants characterizing the mechanical behavior of free/interfacial surfaces, among other parameters

### **Relevance of the topic**

Experimental studies have shown that roughness can be already formed on free surfaces and interfaces of film coatings at the stage of fabrication. Later, in the process of exploitation, these defects evolve resulting in a deterioration in the quality of devices created on their basis. Therefore, investigation of the processes leading to the growth of surface and interfacial defects in film coatings is an important technological problem. It should be noted that in most of the theoretical works which have been aimed to understand the surface pattern formation in solids, the surface elasticity effect was neglected since it was believed to be relatively small in comparison with the bulk elastic behavior. However, numerous experimental and theoretical results demonstrate that the impact of surface stress become important in the mechanics and thermodynamics of nanostructured materials.

### **The aim and objectives of the research**

The main aim of this study is to develop and analyze mathematical models of morphological instability of free and interfacial surfaces of solids and film coatings based on constitutive equations of thermodynamics and the theory of elasticity.

To achieve this aim, the following objectives were set:

- Derive evolution equations describing the kinetics of the self-organization of the surface/interface of the solid and the film coating during diffusion mass transfer along the surface/interface.
- Obtain thermodynamic stability conditions of the surface/interface and determine the corresponding critical size of topological defects.
- Examine the effect of physical and geometric parameters of the problem on the roughness growth on surface/interface.

### **Thesis statements to be defended**

- A model of morphological instability of the multilayer film surface coating during surface diffusion taking into account constant surface stresses.
- A model of the morphological instability of a nanostructured solid surface under surface diffusion taking into account the surface elasticity.
- A model of the morphological instability of the ultrathin film surface under surface diffusion taking into account the surface and interface elasticity.

- A model of the morphological instability of a nanostructured interface between two materials under surface diffusion taking into account the interface elasticity.

### **Methods of research**

The proposed methods and approaches for studying the effect of surface/interface stress on the formation of surface defects in solids and thin-film coatings are related to the construction of an analytical solution of the coupled problem of mechanics and thermodynamics. Based on the Gurtin – Murdoch constitutive equations, the influence of surface/interface elasticity is taken into account. New mathematical models describing the process of self-organization of the free surface of solids, film coatings, and the interfacial boundaries are developed. To derive the evolution equation giving the velocity of topological defect growth, we use the Gibbs thermodynamic approach, the theory of surface/interface and bulk elasticity, the boundary perturbation method, complex variable method and differential equations. Numerical results are obtained in the Maple software package. Visualization of the results is carried out using the Matplotlib library of the Python language.

### **Scientific novelty**

- For the first time, the influence of the surface/interface elastic properties is taken into account in the analysis of the thermodynamic instability of the free surfaces and interfaces in layered materials.
- The effect of surface diffusion on the evolution of the nanostructured solid surface is investigated.
- The influence of film thickness, initial surface undulation wavelength, surface/interface and bulk elastic parameters, longitudinal stress and the residual surface/interface stress on morphological stability of film surface is analyzed.
- The impact of the wavelength of interface undulation between two materials, elastic of interphase and bulk domains, residual interface stress and longitudinal stress on the growth of the interfacial topological defects is studied.

### **Theoretical and practical significance of the work**

Due to the fact that the problems are formulated in a general formulation, the results of the study have many applications. The production of composite structures with specified topological properties is one of the main directions of development in the electronics industry. For example, a special relief is formed on the substrate to improve the adhesion of the circuit components for the fabrication of flexible electronics devices. Also, the microrelief of the implant surface plays an important role in determining cell adhesion and affects the biocompatibility of materials. The fundamental aspect of the significance of the work is that the studies of the self-organization of free and interfacial surfaces of film coatings give many important information on the physico-mechanical behavior of the composite.

### **Reliability of the results**

The reliability of the obtained results is ensured by the correctness of the problem formulation taking into account current concepts of solid mechanics. It is also confirmed by the publication of new results in scientific journals and discussion of the results at international conferences and scientific seminars. The qualitative theoretical results are in good agreement with the known experimental ones and, in general, show an adequate behavior of the stressed solid surfaces under diffusion mass transfer.

**Approbation of work** The results of the work were presented at the seminars of the Department of Computational Methods in Continuum Mechanics of Saint Petersburg State University and international conferences:

- The XLV annual international conference «Control Processes and Stability» (CPS'14), April 1–4, 2014, St. Petersburg, Russia;
- The XLVI annual international conference «Control Processes and Stability» (CPS'15), April 6–9, 2015, St. Petersburg, Russia;
- The III international conference «Stability and Control Processes Conference» in memory of Prof. Vladimir Zubov, October 5–9 2015, St. Petersburg, Russia;
- The XLVII annual international conference «Control Processes and Stability» (CPS'16), April 4–7, 2016, St. Petersburg, Russia;
- The XXII international conference «Saint Petersburg readings on strength problems», April 12–14, 2016, St. Petersburg, Russia

- 44<sup>th</sup> International Summer School — Conference «Advanced Problems in Mechanics» (APM 2016), June 27–July 2, 2016, St. Petersburg, Russia;
- The XLVIII annual international conference «Control Processes and Stability» (CPS'17), April 3–6, 2017, St. Petersburg, Russia;
- The VIII International School “Physical Materials Science” with elements of a scientific school for youth, September 3–8, Tolyatti, Russia, 2017;
- International Conference «Advanced Materials with Hierarchical Structure for New Technologies and Reliable Structures», October 1–5, 2018, Tomsk, Russia;
- International scientific conference on mechanics «The Eighth Polyakhov’s Reading», January 30–February 2, 2018, St. Petersburg, Russia;
- The XLIX annual international conference «Control Processes and Stability» (CPS'18), April 2–8, 2018, St. Petersburg, Russia;
- The 10<sup>th</sup> European Solid Mechanics Conference (ESMC), July 2–6, 2018, Bologna, Italy;
- The L annual international conference «Control Processes and Stability» (CPS'19), April 8–9, 2019, St. Petersburg, Russia;
- The LI annual international conference «Control Processes and Stability» (CPS'20), April 20–24, 2020, St. Petersburg, Russia;
- The IV international conference «Stability and Control Processes Conference» in memory of Prof. Vladimir Zubov, October 5–9 2021, St. Petersburg, Russia;
- International scientific conference on mechanics «The Ninth Polyakhov’s Reading», March 9–11, 2021, St. Petersburg, Russia;
- The LII annual international conference «Control Processes and Stability» (CPS'21), April 5–9, 2021, St. Petersburg, Russia.

### **Publications**

The main results related to the dissertation topic are presented in 19 papers [9–13;19–22;90;91;93;94;129–132;140;141], 3 of which are published in journals included in the list of the Higher Attestation Commission [11;131;132], 9 indexed by SCOPUS and Web Of Science [90;93;94;129–132;140;141].



## **Personal contribution of the author**

The presented dissertation is a scientific research that proves the professional qualification of its author. The problems are formulated by S. A. Kostyrko. M. A. Grekov and S. A. Kostyrko advised on the solution methods. G. M. Shuvalov singlehandedly solved problems using the suggested approaches. The analysis of the obtained results was also carried out by applicant.

## **Supporting**

The work is supported by Russian Foundation for Basic Research under Grant 19-31-90024 and Russian Science Foundation under Grant № 19-71-00062.

## **Structure and scope of work**

The work consists of the introduction, four chapters and conclusion, and contains 98 pages, 22 figures and 11 tables. The list of references contains 148 items.

## **Content of the work**

**The introduction** presents the analysis of modern research on the subject matter. The relevance of work, its scientific and practical significance is discussed. Also, the aim and objectives of the research are formulated. The methods of research as well as thesis statements are given. At the end of the introduction, a summary of work on each chapter is given.

In **Chapter 1** a mathematical model of self-organization of the surface of a multilayer film coating has been developed based on the Gibbs thermodynamic approach. Using the Herring–Shuttleworth and Young–Laplace equations, the constant surface stress is taken into account. Based on the first-order approximation of boundary perturbation technique, the morphological stability of the multilayer film coating surface was studied. The dependence of amplitude change on perturbation wavelength for different geometric and physical parameters is obtained.

**Chapter 2** is devoted to the study of the morphological stability of the nanostructured solid surface. It was assumed that the elastic properties of the surface and the bulk material are different. Using Gibbs thermodynamic approach, Asaro–Tiller–Grinfeld model, Gurtin–Murdoch surface elasticity theory, boundary perturbation technique, Goursat–Kolosov complex potentials and Muschelishvili representation, the explicit dependence of the amplitude change of sinusoidal perturbation on time, physical and geometric parameters of the task is obtained.

In **Chapter 3** Asaro–Tiller–Grinfeld model is extended for the analysis of the morphological stability of the surface of the ultrathin film coating. Similarly to Chapter 2, the influence of the elastic properties of the free and interfacial surfaces in ultrathin film coating are taken into account using the Gurtin–Murdoch model of surface elasticity. An evolution equation describing the change of surface profile amplitude with time is derived. To solve this equation, it was necessary to find out the stress distribution along the undulated boundary. Based on the obtained solution, the effect of the physical and geometric parameters on the morphological stability of film surface coating is analyzed.

In **Chapter 4** a theoretical method for analysis of heteroepitaxial interface stability is developed taking into account its elastic properties. Based on Gibbs thermodynamics, we derive the evolution equation, which describes the change of interface profile with time. In this study, the change of interface relief is driven by bulk and interface stress fields as well as interface curvature. To find the stress distribution along the boundary, we use the asymptotic method described in the works of Grekov and Kostyrko. The effect of coating-to-substrate stiffness ratio, interface elastic parameters, residual interface stress, longitudinal stress and diffusion coefficients on the interface morphological stability is investigated.

In **conclusion**, the main results of work are given.

## Chapter 1

### Morphological stability of multilayer film surface

This chapter describes the mathematical model of the morphological instability process associated with the multilayer thin-film coating loaded under plane strain conditions. The experimental results show that surface morphology can form a range of configurations including a weak undulation [147], sharp hills and grooves [83] and islands [50]. In this study, the process of formation of topological defects in the multilayer film coating is considered as the evolution of the periodic surface relief under the assumption that only its amplitude changes.

Due to the lattices mismatch, the film structure subjects to misfit stress. It is assumed that the free surface can change the shape due to mass transfer in order to minimize the total energy. Surface diffusion is considered as the main mechanism of the morphological instability of the film surface [90]. It is supposed that the atomic flow along the surface is proportional to the gradient of the chemical potential. The equation describing the movement of the solid boundary in the normal direction is derived from the mass conservation law.

#### 1.1 Problem formulation

Consider an isotropic multilayer film coating of a total thickness  $h_f = \sum_{j=1}^N h_j$ , which consists of  $N$  dissimilar layers and deposited on a substrate under plane strain conditions (see Fig. 1.1). This system is modeled as an elastic inhomogeneous half-plane  $B = \bigcup_{j=1}^{N+1} B_j$  with undulated boundary  $S_1$  and rectilinear boundaries  $S_j$

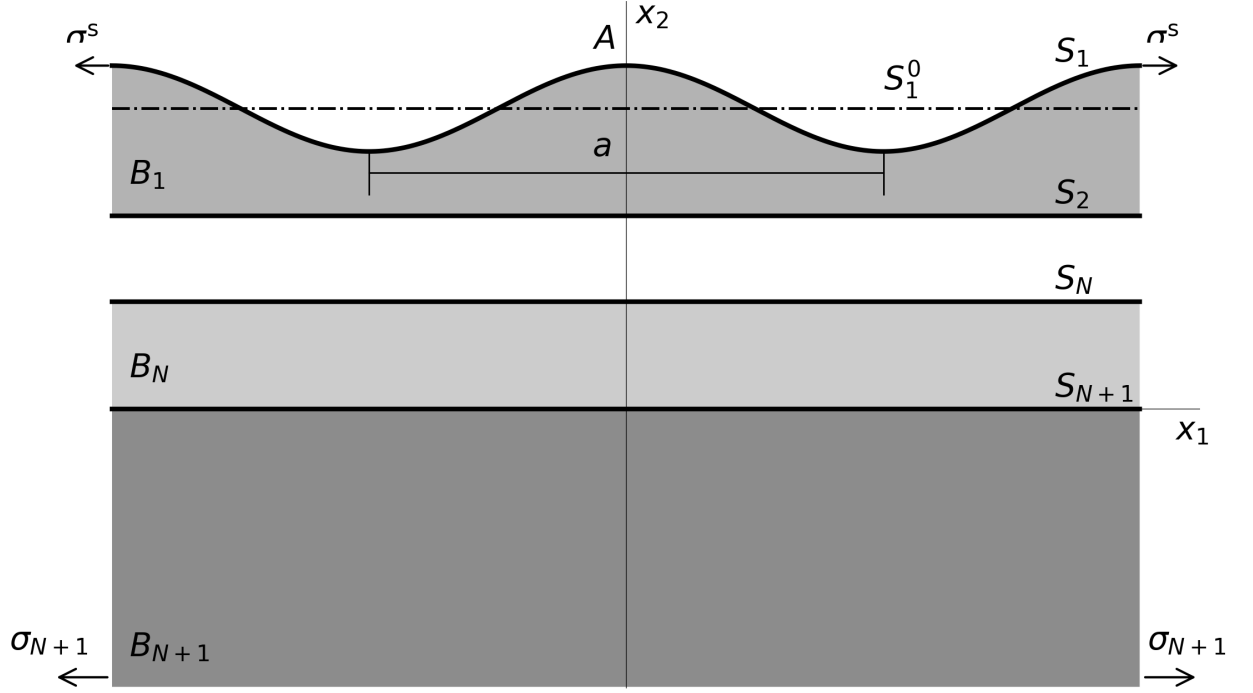


Figure 1.1 — A model of multilayer film coating with undulated surface

$$S_1 = \{z : z \equiv \zeta_1 = x_1 + i[h_f + \varepsilon(\tau)f(x_1)]\}, \quad f(x_1) = a \cos(bx_1),$$

$$S_j = \{z : z \equiv \zeta_j = x_1 + iH_j\}, \quad j = \overline{2, N+1}, \quad \varepsilon(\tau) = A(\tau)/a, \quad (1.1)$$

$$H_i = H_{i+1} + h_i, \quad i = \overline{1, N}, \quad H_N = h_N, \quad H_{N+1} = 0, \quad H_1 = h_f,$$

$$B_1 = \{z : H_2 < x_2 < h_f + \varepsilon(\tau)f(x_1)\}, \quad (1.2)$$

$$B_j = \{z : H_{j+1} < x_2 < H_j\}, \quad j = \overline{2, N}, \quad B_{N+1} = \{z : x_2 < 0\},$$

where  $z = x_1 + ix_2$  is a complex variable,  $x_1$  and  $x_2$  are axes of Cartesian coordinates,  $h_N$  is thickness of the  $N$ -th layer,  $a$  is the undulation wavelength,  $b = 2\pi/a$  is the wavenumber, and  $A(\tau)$  is the amplitude of the periodic relief of the surface  $S_1$  at time  $\tau$ .

In accordance with the Gibbs thermodynamics [58], we take into account the surface stress  $\sigma^s$ , which is assumed to be constant and independent of the

surface deformation [67]. The condition of the mechanical equilibrium of the surface is formulated in terms of the generalized Young–Laplace law. In the case of the constant surface stress, it has the following form [4; 38]

$$\sigma_{nn}(\zeta_1) = \kappa(\zeta_1)\sigma^s, \quad \sigma_{nt}(\zeta_1) = 0, \quad \zeta_1 \in S_1, \quad (1.3)$$

where  $\kappa$  is a local curvature of the boundary  $S_1$ .

The conditions at interfaces  $S_j$  ( $j = \overline{2, N+1}$ ) are as following [11]

$$\Delta u(z_j) = \lim_{z \rightarrow z_j + iH_j} u(z) - \lim_{z \rightarrow z_j - iH_j} u(z) = 0, \quad (1.4)$$

$$\Delta \sigma(z_j) = \lim_{z \rightarrow z_j + iH_j} \sigma(z) - \lim_{z \rightarrow z_j - iH_j} \sigma(z) = 0,$$

where  $u = u_1 + iu_2$ ,  $\sigma = \sigma_{nn} + i\sigma_{nt}$ ;  $u_1, u_2$  are displacements along corresponding axes of Cartesian coordinates  $x_1, x_2$ ;  $\sigma_{nn}, \sigma_{nt}$  are components of the stress vector  $\sigma$  at the area with unit normal  $\mathbf{n}$  in the local Cartesian coordinate system  $(n, t)$  (vector  $\mathbf{n}$  is perpendicular to the boundary  $S_1$  and the interface  $S_j$  in n Eq. (1.1));

In linear elasticity theory, the components of the strain tensor  $\varepsilon_{jk}$  and the displacement  $u$  are related by the Cauchy relations [18]

$$\varepsilon_{11} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1}, \quad \varepsilon_{22} = \frac{\partial u_2}{\partial x_2}, \quad \varepsilon_{12} = \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1}. \quad (1.5)$$

The components of the strain tensor  $\varepsilon_{jk}$  and the stress tensor  $\sigma_{jk}$  of an elastic body are related by the generalized Hooke's law

$$\sigma_{nn}(z) = (\lambda_j + 2\mu_j)\varepsilon_{nn}(z) + \lambda_j\varepsilon_{tt}(z),$$

$$\sigma_{tt}(z) = (\lambda_j + 2\mu_j)\varepsilon_{tt}(z) + \lambda_j\varepsilon_{nn}(z), \quad \sigma_{nt}(z) = 2\mu_j\varepsilon_{nt}(z), \quad (1.6)$$

$$\sigma_{33}(z) = \frac{\lambda_j}{2(\lambda_j + \mu_j)} [\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z)], \quad z \in B_j, \quad j = \overline{1, N+1},$$

where  $\lambda_j, \mu_j$  are the Lamé constants of the phase  $B_j$ .

It is assumed that due to the lattice mismatch between different layers the film structure is stressed. Then, the conditions at infinity are as following

$$\lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{22} = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{12} = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \omega = 0, \quad \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{11} = \sigma_{N+1}, \quad (1.7)$$

where  $\omega$  is the rotation angle of a material particle.

It is necessary to determine the dependence of the amplitude change  $A$  of the film coating relief (1.1) and (1.2) on time  $\tau$  via surface diffusion. It is assumed that the morphological evolution of the stressed film surface occurs due to the surface diffusion caused by the non-uniform distribution of the chemical potential along the surface.

## 1.2 Chemical potential and growth rate of topological defects

The concept of chemical potential was introduced by Gibbs when he investigated the chemical equilibrium of a deformable solid in contact with the same material in a dissolved form. Later, this approach was applied in a number of other studies. In the presented research the chemical potential is considered as an increase in free energy per unit of added volume, as in the works [4; 15; 16; 30; 71].

In accordance with the Gibbs [58] approach, the bulk material and its surface are considered as different phases. Specifically, the solid surface is modeled as an elastic membrane that is coherently connected to the bulk material.

Considering constant temperature, the total free energy is equal to the sum of the elastic strain energy and the surface energy

$$E(\tau) = \int_B U dB + \int_S U_s dS. \quad (1.8)$$

In Eq. (1.8) ,  $B$  is the volume of the bulk material,  $S$  is the surface corresponding to this volume,  $U$  is a strain energy and  $U_s$  is surface energy calculated on the surface.

It is assumed that the solid is in mechanical equilibrium at any moment of time. However, it is not necessarily in thermodynamic equilibrium, which is defined as a state with minimal free energy.

According to the second law of thermodynamics, a system that is not in thermodynamic equilibrium tends to reduce its free energy. The rate of free energy change, described by the local normal rate  $V_n$  of the boundary movement, can be written as follows:

$$\dot{E}(\tau) = \int_B \frac{\partial U}{\partial \tau} dB + \int_S U V_n dS + \int_S \frac{\partial U_s}{\partial \tau} dS - \int_S \kappa U_s V_n dS, \quad (1.9)$$

where  $\kappa$  is the local curvature of the surface.

In Eq. (1.9), the first term is the change in the total energy caused by the change in the elastic strain energy; the second term is associated with a change in the boundary of the bulk phase; the third term is related to the change in the energy of the free surface, and the last one is associated with the curvature of the free surface [55].

Since we consider an isolated system, the sum of the first and third terms in (1.9) is equal to zero.

Then the rate of free energy change can be written as follows:

$$\dot{E}(\tau) = \int_S (U - \kappa U_s) V_n dS. \quad (1.10)$$

The term  $V_n dS$  can be interpreted as the local rate of adding ( $V_n > 0$ ) or removing ( $V_n < 0$ ) material. Following Freund [55], the local chemical potential for the surface can be defined as

$$\chi = (U - \kappa U_s) \Omega, \quad (1.11)$$

where  $\Omega$  is the atomic volume.

If the chemical potential in some region is less than in the neighboring one, the atoms diffuse into the region of the lower chemical potential, thereby reducing the free energy of the system. Thus, the flow of atoms along the surface is proportional to the gradient of the chemical potential [30; 55]

$$J = -\frac{D_s C_s}{k_b T} \frac{\partial \chi}{\partial s}, \quad (1.12)$$

where  $D_s$  is the surface self-diffusivity,  $C_s$  is the number of diffusing atoms per unit area,  $k_b$  is the Boltzmann constant and  $T$  is the absolute temperature. Differentiation by the parameter  $s$  means differentiation in the direction tangent to the surface.

It should be noted that the uniformity of the chemical potential distribution is one of the conditions of the thermodynamic equilibrium.

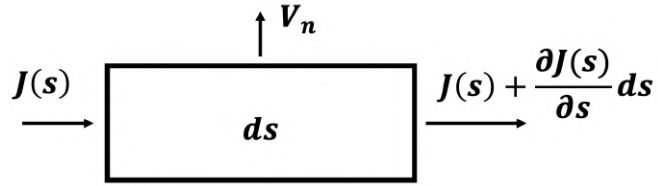


Figure 1.2 — Diffusion along the surface element

To determine the rate of boundary displacement, consider the volume flow near the surface, as it is shown in Fig. 1.2. Due to the conservation of mass, the velocity in normal direction of the surface element is proportional to the atomic flux divergence

$$V_n = -\Omega \frac{\partial J}{\partial s}. \quad (1.13)$$

### 1.3 Linear analysis of surface morphological evolution

Equation (1.13) may be rewritten as the evolution equation which gives the change of surface profile (1.1) with time [11;90]

$$\frac{\partial g(x_1, \tau)}{\partial \tau} = K_s h(x_1, \tau) \frac{\partial^2}{\partial s^2} [U(\zeta_1, \tau) - \kappa(x_1, \tau) U_s(\zeta_1, \tau)], \quad \zeta_1 \in S_1, \quad (1.14)$$

$$g(x_1, \tau) = H_1 + \varepsilon(\tau) f(x_1), \quad K_s = \frac{D_s C_s \Omega^2}{k_b T},$$

where  $h$  is the metric coefficient [18] and  $s$  is the length of the arc along  $S_1$ .



The surface stress  $\sigma^s$  is related with the surface energy  $U_s$  by the Herring–Shuttleworth relation [1; 78; 128]

$$\sigma^s(\zeta_1, \tau) = U_s(\zeta_1, \tau) + \frac{\partial U_s(\zeta_1, \tau)}{\partial \varepsilon_{tt}(\zeta_1, \tau)}. \quad (1.15)$$

Since we consider a weak change in the surface profile and assume that diffusion in solids is a slow process, it is expected that the surface energy  $U_s$  does not change along the surface during deformation in this chapter, as in [4]. Then the Eq. (1.15) gives

$$U_s(\zeta_1, \tau) = \sigma^s, \quad \zeta_1 \in S_1. \quad (1.16)$$

In order to integrate the equation (1.14), the strain energy  $U$  should be found. Since we study a weak change in the surface relief, the components of the stress and strain tensor are seeking in the first-order approximation of boundary perturbation technique

$$\sigma_{nn}(z, \tau) = \varepsilon(\tau)\sigma_{nn(1)}(z), \quad \sigma_{nt}(z, \tau) = \varepsilon(\tau)\sigma_{nt(1)}(z),$$

$$\varepsilon_{nn}(z, \tau) = \varepsilon_{nn(0)} + \varepsilon(\tau)\varepsilon_{nn(1)}(z), \quad \varepsilon_{nt}(z, \tau) = \varepsilon(\tau)\varepsilon_{nt(1)}(z), \quad (1.17)$$

$$\sigma_{tt}(z, \tau) = \sigma_{tt(0)} + \varepsilon(\tau)\sigma_{tt(1)}(z), \quad \varepsilon_{tt}(z, \tau) = \varepsilon_{tt(0)} + \varepsilon(\tau)\varepsilon_{tt(1)}(z).$$

It should be noted that  $\sigma_{nn(0)}(z) = \sigma_{nt(0)}(z) = \varepsilon_{nt(0)}(z) = 0$ , according to (1.6) and (1.7).

The elastic strain energy  $U$  is found by the Clapeyron formula

$$U(z, \tau) = \frac{1}{2} \sigma_{\alpha\beta}(z, \tau) \varepsilon_{\alpha\beta}(z, \tau), \quad (1.18)$$

where is the summation by repeated indexes  $\alpha\beta = \{1, 2\}$  performed.

The expressions for the metric coefficient  $h$  and the local curvature  $\kappa$  of the undulated surface  $S_1$  are also written in the first-order approximation of the boundary perturbation method [129]

$$\kappa(x_1, \tau) = \varepsilon(\tau)f''(x_1), \quad h(x_1, \tau) = 1. \quad (1.19)$$

Substituting (1.17) and (1.19) into (1.14), we obtain an ordinary differential equation describing the change of the surface amplitude profile with time:

$$\begin{aligned} \frac{dA(\tau)}{d\tau} f(x_1) = \frac{1}{2} A(\tau) K_s \frac{d^2}{dx_1^2} [\varepsilon_{nn(0)} \sigma_{nn(1)}(x_1) + \\ + \sigma_{tt(0)} \varepsilon_{tt(1)}(x_1) + \varepsilon_{tt(0)} \sigma_{tt(1)}(x_1) - \sigma^s f''(x_1)]. \end{aligned} \quad (1.20)$$

As noted above, to integrate the equation (1.20), it is necessary to find the stress–strain state of the system (1.1)–(1.7). The corresponding boundary value problem was considered by Grekov and Kostyrko [64]. In accordance with [64], the solution of the original problem for a multilayer structure is represented as the sum of the problem solution for a half-plane with a undulated boundary  $S_1$  and the solutions of  $N$  problems for two-component planes with rectilinear interfaces  $S_j$ ,  $j = \overline{2, N+1}$ . In the first problem, the boundary is subjected to an unknown load, and in the other problems, there are unknown jumps in the stress and displacement vectors.

In accordance with the superposition technique [2; 64], the solution of formulated problem of linear elasticity (1.1)–(1.7) is represented as

$$G(z) = \begin{cases} G_k^k(z) + G_k^{k+1}(z), & z \in B_k, \quad k = \overline{1, N}, \\ G_{N+1}^{N+1}(z), & z \in B_{N+1}, \end{cases} \quad (1.21)$$

$$G_j^k(z, \eta_j) = \begin{cases} \sigma^k(z), & \eta_j = 1 \\ -2\mu_j \frac{du^k}{dz}, & \eta_j = -\varkappa_j \end{cases}, \quad z \in B_j, \quad k, j = \overline{1, N+1}. \quad (1.22)$$

Here,  $\varkappa_j = 3 - 4\nu_j$ ;  $\nu_j$  is Poisson's ratio of the  $B_j$ ,  $\sigma^k$  and  $u^k$  are the stress and displacement vectors in the problem with number  $k$ , similar to  $\sigma$  and  $u$ ;  $k, j = \overline{1, N+1}$ . The derivative is taken along the area with normal  $\mathbf{n}$ , i.e. in the direction of the axis  $t$ .

In the first problem (1.21) and (1.22), it is supposed that unknown self-balanced periodic load  $p$  is applied to the periodic curvilinear boundary  $S_1$  of the homogeneous half-plane

$$\sigma^1(\zeta_1) = p(\zeta_1), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} p(\xi)d\xi = 0, \quad \zeta_1 \in S_1. \quad (1.23)$$

The stress tensor components  $\sigma_{\alpha\beta}^1$  ( $\alpha\beta \in \{1,2\}$ ) and the rotation angle of a material particle  $\omega^1$  is specified as follows:

$$\lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{11}^1 = \sigma_1^1, \quad \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{22}^1 = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{12}^1 = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \omega^1 = 0. \quad (1.24)$$

In the problem  $k$  ( $k = \overline{2, N+1}$ ), the coupled deformation of two dissimilar half-planes  $D_{k-1} \cup D_k$  with elastic properties of the corresponding phases  $B_{k-1}$  and  $B_k$  is caused by the unknown jumps of stresses  $\Delta\sigma^k$  and displacements  $\Delta u^k$  at the rectilinear interface  $S_k$  under longitudinal remote load  $\sigma_j^k$  in  $D_j$  ( $j = \overline{k-1, k}$ )

$$\Delta\sigma^k = \sigma^{k+}(z_k) - \sigma^{k-}(z_k), \quad \Delta u^k = u^{k+}(z_k) - u^{k-}(z_k),$$

$$\lim_{x_2 \rightarrow +\infty} \sigma_{11}^k = \sigma_{k-1}^k, \quad \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{11}^k = \sigma_k^k, \quad (1.25)$$

$$\lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{22}^k = \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{12}^k = \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \omega^k = 0.$$

According to [64], quantities  $\sigma_1^1$ ,  $\sigma_{k-1}^k$ ,  $\sigma_k^k$  ( $k = \overline{2, N+1}$ ) are found from recurrence relations which follow from conditions (1.4) in the case of the coating with the flat surface

$$\sigma_{N+1}^{N+1} = \sigma_{N+1}, \quad \sigma_{N-2r}^{N-2r+1} = \frac{\mu_{N-2r}(1 + \varkappa_{N-2r+1})}{\mu_{N-2r+1}(1 + \varkappa_{N-2r})} \sigma_{N-2r+1}^{N-2r+1},$$

$$\sigma_{N-2r-1}^{N-2r-1} = \frac{\mu_{N-2r-1}(1 + \varkappa_{N-2r})}{\mu_{N-2r}(1 + \varkappa_{N-2r-1})} \sigma_{N-2r}^{N-2r+1} \quad (N - 2r > 1), \quad (1.26)$$

$$\sigma_{N-2r}^{N-2r} = \sigma_{N-2r+1}^{N-2r} = 0 \quad (N - 2r > 0), \quad r = 0, 1, \dots$$

Boundary conditions (1.4) and (1.23) at  $S_k$  lead to the system of boundary equations for unknown functions  $p$ ,  $\Delta\sigma^k$  and  $\Delta u^k$ .

$$\begin{aligned}
p(\zeta_1) + \sigma^2(\zeta_1) &= \sigma(\zeta_1), \\
\Delta\sigma^2(z_2) + \sigma^1(p, z_2) - \sigma^3(\Delta\sigma^3, \Delta u^{3'}, z_2) &= 0, \\
\Delta u^2(z_2) + u^1(p, z_2) - u^3(\Delta\sigma^3, \Delta u^{3'}, z_2) &= 0, \\
&\dots \\
\Delta\sigma^{N+1}(z_{N+1}) - \sigma^N(\Delta\sigma^N, \Delta u^{N'}, z_{N+1}) &= 0, \\
\Delta u^{N+1}(z_{N+1}) + u^N(\Delta\sigma^N, \Delta u^{N'}, z_{N+1}) &= 0.
\end{aligned} \tag{1.27}$$

Thus, the solution of the elasticity problem is reduced to solving the system (1.27).

According to [64], the stresses  $\sigma^k(z)$  and displacements  $u^k(z)$  are related to Goursat–Kolosov complex potentials  $\Phi_j^k$  and  $\Upsilon_j^k$  by the equality

$$\begin{aligned}
G_j^k(z, \eta_j) &= \eta_j \Phi_j^k(w_k) + \overline{\Phi_j^k(w_k)} - \left( \Upsilon_j^k(\overline{w_k}) + \overline{\Phi_j^k(w_k)} - \right. \\
&\left. - (w_k - \overline{w_k}) \overline{\Phi_j^{k'}(w_k)} \right) e^{-2i\alpha}, \quad w_1 = z + i(\varepsilon f(x_1) - H_1), \tag{1.28}
\end{aligned}$$

$$w_k = z - iH_k, \quad j = \{k-1, k\}, \quad k = \overline{2, N+1},$$

where  $\alpha$  is the angle between axis  $t$  of the local coordinates  $n, t$  and axis  $x_1$ ;  $\Phi_1^1$  и  $\Upsilon_1^1$  are functions that are holomorphic in domains  $D_1$  and  $\widetilde{D}_1 = \{z : x_1 \in R^1, x_2 > H_1 - \varepsilon f(x_1)\}$ , respectively;  $\Phi_j^k, \Upsilon_j^k$  are are functions that are holomorphic in half-planes  $D_j$  and  $D_r$ , ( $r = \{j-1, j\}, r \neq j$ ), respectively; the prime denotes differentiation with respect to the argument.

Substituting  $\alpha = 0$  and  $\alpha = \pi/2$  in (1.28) for  $x_2 \rightarrow -\infty$  and taking into account (1.24) and (1.25), we get the values of complex potentials at infinity

$$\lim_{\operatorname{Im} w_1 \rightarrow -\infty} \Phi_1^1(w_1) = \lim_{\operatorname{Im} w_1 \rightarrow +\infty} \Upsilon_1^1(w_1) = \frac{\sigma_1^1}{4},$$

$$\lim_{|\operatorname{Im} w_k| \rightarrow \infty} \Phi_j^k(w_k) = \frac{\sigma_j^k}{4}, \quad w_k \in D_j, \quad j = \{k-1, k\}, \quad (1.29)$$

$$\lim_{|\operatorname{Im} w_k| \rightarrow \infty} \Upsilon_j^k(w_k) = \frac{\sigma_j^k}{4}, \quad w_k \in D_r, \quad r = \{k-1, k\}, \quad r \neq j.$$

In accordance with the first-order approximation of the boundary perturbation method [2–6; 62], we represent the functions  $\Phi_j^k$ ,  $\Upsilon_j^k$ , and  $p$  in the following form:

$$\Psi(z) = \Psi_{(0)}(z) + \varepsilon \Psi_{(1)}(z). \quad (1.30)$$

Boundary values of functions  $\Phi_{1n}^1$ ,  $\Upsilon_{1n}^1$  and  $p_n$  at  $\Gamma_1$  are expanded into Taylor series in the vicinity of the line  $\operatorname{Im} w_1 = 0$ , i.e.  $z = iH_1$ , considering  $x_1$  as parameter [129]

$$\Psi_{(m)}(\zeta_1) = \Psi_{(m)}(x_1) + i\varepsilon f(x_1) \Psi'_{(m)}(x_1), \quad m = \{0, 1\}, \quad (1.31)$$

where  $\Psi_{(m)}$  is any of the above functions.

In view of relation  $\varepsilon f'(x_1) = \operatorname{tg} \alpha$ , one can write the following linearization of an exponential function from (1.28):

$$e^{-2i\alpha} = 1 - 2i\varepsilon f'(x_1). \quad (1.32)$$

Taking into account the boundary condition (1.23) and Eqs. (1.28), (1.30) and (1.31) and equating the coefficients of  $\varepsilon$ , we come to the following sequence of boundary value problems:

$$\Upsilon_{1(m)}^1(x_1) - \Phi_{1(m)}^1(x_1) = -p_{(m)}(x_1) + F_{(m)}^1(x_1), \quad (1.33)$$

where

$$F_0^1(x_1) = 0,$$

$$\begin{aligned} F_1^1(x_1) = & -if(x_1) \left[ \Phi_{1(0)}^{1'}(x_1) + \Upsilon_{1(0)}^{1'}(x_1) + 2\overline{\Phi_{1(0)}^{1'}(x_1)} \right] + \\ & + 2if'(x_1) \left[ \overline{\Phi_{1(0)}^1(x_1)} + \Upsilon_{1(0)}^1(x_1) \right] - if(x_1)p_0'(x_1). \end{aligned} \quad (1.34)$$

According to [64], the solution of the boundary value problem (1.33) and (1.34) can be written using the substitution

$$\Theta_{(m)}(w_1) = \begin{cases} \Upsilon_{1(m)}^1(w_1), & \text{Im } w_1 > 0, \\ \Phi_{1(m)}^1(w_1), & \text{Im } w_1 < 0. \end{cases} \quad (1.35)$$

Thus, in each approximation of boundary perturbation technique, we get the Riemann–Hilbert problem, where the unknown functions are represented as [4; 5; 8; 17]:

$$\Theta_{(m)} = \Theta_{(m)}^{1u} + \Theta_{(m)}^{1d} + C_{(m)}, \quad m = \{0, 1\}, \quad (1.36)$$

where  $C_0 = \sigma_1^1$ ,  $C_1 = 0$ .

The functions  $\Theta_{(m)}^{1u}$  and  $\Theta_{(m)}^{1d}$  are defined as follows:

$$\begin{aligned} \Theta_k^{1u} &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p_k(\tau)}{\tau - w_1} d\tau, \\ \Theta_k^{1d} &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{F_k^1(\tau)}{\tau - w_1} d\tau. \end{aligned} \quad (1.37)$$

It should be noted that since the functions  $F_{(m)}^1(x_1)$  are expressed by the recurrent formulas (1.34), the function  $\Theta_{(m)}^{1d}$  is known and the function  $\Theta_{(m)}^{1u}$  should be defined in each approximation.

The functions  $\Phi_j^k$  and  $\Upsilon_j^k$  related to the problems of joint deformation of two homogeneous half-planes under the conditions (1.25) are also found from the solution of the Riemann–Hilbert problems

$$\Sigma^{k+}(\xi_k^k) - \Sigma^{k-}(\xi_k^k) = \Delta\sigma^k(z_k), \quad (1.38)$$

$$V^{k+}(\xi_k^k) - V^{k-}(\xi_k^k) = 2\mu_{k-1}\mu_k\Delta u^{k'}(z_k),$$

where  $\Sigma^{k\pm}(\xi_k^k) = \lim_{z \rightarrow z_k \pm i0} \Sigma^k(w_k)$ ,  $V^{k\pm}(\xi_k^k) = \lim_{z \rightarrow z_k \pm i0} V^k(w_k)$ .

The corresponding boundary value relations (1.38) are obtained from the following boundary conditions

$$G_{k-1}^{k+}(\xi_k^k, 1) - G_r^{k-}(\xi_k^k, 1) = \Delta\sigma^k(z_k),$$

$$\mu_2 G_{k-1}^{k+}(\xi_k^k, -\kappa_{k-1}) - \mu_1 G^{k-}(\xi_k^k, -\kappa_k) = -2\mu_1\mu_2\Delta u^{k'}(z_k), \quad (1.39)$$

$$G_j^{k\pm}(\xi_k^k) = \lim_{z \rightarrow z_k \pm i0} G_j^i(w_r), \quad \xi_k^k = w_k(z_k),$$

using auxiliary functions

$$\Sigma^k(w_k) = \begin{cases} \Phi_k^k(w_k) + \Upsilon_{k-1}^k(w_k), & \text{Im } w_k > 0, \\ \Phi_{k-1}^k(w_k) + \Upsilon_k^k(w_k), & \text{Im } w_k < 0, \end{cases} \quad (1.40)$$

$$V^k(w_k) = \begin{cases} \mu_{k-1}\Phi_k^k(w_k) - \mu_k\kappa_{k-1}\Upsilon_{k-1}^k(w_k), & \text{Im } w_k > 0, \\ \mu_k\Phi_{k-1}^k(w_k) - \mu_{k-1}\kappa_k\Upsilon_k^k(w_k), & \text{Im } w_k < 0. \end{cases} \quad (1.41)$$

According to [2; 8; 17], the solution of both Riemann-Hilbert problems (1.38) is found in the following form:

$$\Sigma^k(w_k) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta\sigma^k(z_k)}{\tau - w_k} d\tau + s_k, \quad (1.42)$$

$$V^k(w_k) = -\frac{\mu_k}{\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta u^{k'}(z_k)}{\tau - w_k} d\tau + v_k,$$

where  $s_k = a_k^{k-1} + a_{k-1}^{k-1} = a_{k-1}^k + a_k^k$ ,  $v_k = \mu_{k-1}a_k^{k-1} - \mu_k\mathfrak{A}_{k-1}a_{k-1}^{k-1} = \mu_k a_{k-1}^k - \mu_{k-1}\mathfrak{A}_k a_k^k$ .

The complex potentials  $\Phi_j^k$ ,  $\Upsilon_j^k$  are found from the Eqs. (1.40) and (1.41)

$$\Phi_j^k(w_k) = \frac{\mu_j \Sigma^k(w_k) - V^k(w_k)}{\mu_j + \mu_k \mathfrak{A}_j}, \quad (1.43)$$

$$\Upsilon_j^k(\overline{w_k}) = \frac{\mu_j \mathfrak{A}_k \Sigma^k(\overline{w_k}) + V^k(\overline{w_k})}{\mu_k + \mu_j \mathfrak{A}_k}.$$

The problem is reduced to a system of Fredholm integral equations of the second kind

$$\begin{aligned} & \Delta\sigma_m^k(x_1) + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k1}(x_1, \tau) \Delta\sigma_m^i(\tau) d\xi + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k2}(x_1, \tau) \overline{\Delta\sigma_m^k(\tau)} d\tau + \\ & + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k3}(x_1, \tau) \Delta u_m^{k'}(\tau) d\xi + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k4}(x_1, \tau) \overline{\Delta u_m^{k'}(\tau)} d\tau = H_{1(m)}^k(x_1), \end{aligned} \quad (1.44)$$

$$\begin{aligned} & \Delta u_m^{k'}(x_1) + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k5}(x_1, \tau) \Delta\sigma_m^k(\tau) d\tau + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k6}(x_1, \tau) \overline{\Delta\sigma_m^k(\tau)} d\tau + \\ & + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k7}(x_1, \tau) \Delta u_m^{k'}(\tau) d\tau + \int_{-\infty}^{+\infty} K_{k8}(x_1, \tau) \overline{\Delta u_m^{k'}(\xi)} d\tau = H_{2(m)}^k(x_1). \end{aligned}$$



It should be noted that the system of integral equations (1.44) has a unique solution on the class of continuous functions for any continuous right-hand side. So, in the zero-order approximation ( $H_{1(0)}^k = H_{2(0)}^k$ ) the system (1.44) has a trivial solution

$$\Delta\sigma_{(0)}^k(x_1) = \Delta u_{(0)}^k(x_1) = 0, \quad k = \overline{1, N}, \quad (1.45)$$

that follows from physical considerations [64].

Taking into account (1.29), (1.33), (1.42) and (1.43), we obtain complex potentials in the zero-order approximation of boundary perturbation method:

$$\Phi_{j(0)}^k(w_k) = \Upsilon_{j(0)}^k(\overline{w_k}) = \sigma_j^k/4 \quad (k = \overline{1, N+1}, j = \{k, k-1\}). \quad (1.46)$$

These potentials correspond to the piecewise uniform stress state of a composite with a flat surface [64]

$$\begin{aligned} \sigma_{11(0)}(z) &= \sigma_{N+1}, \quad z \in B_{N+1}, \\ \sigma_{11(0)}(z) &= \sigma_j = \frac{\mu_j(1 + \varkappa_{j+1})}{\mu_{j+1}(1 + \varkappa_j)} \sigma_{j+1}, \quad z \in B_j, \quad j = \overline{1, N}. \end{aligned} \quad (1.47)$$

Since the boundary profile is defined by (1.1), the solution to the problem in the first-order approximation of boundary perturbation method can be found in the form

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_{(1)}^k(x_1) &= P_1^k \sin(bx_1) + Q_1^k \cos(bx_1), \\ \Delta u_{(1)}^{k'}(x_1) &= P_2^k \sin(bx_1) + Q_2^k \cos(bx_1). \end{aligned} \quad (1.48)$$

Taking into account the properties of the Cauchy integral, the system of Fredholm equations in each approximation of the boundary perturbation method is reduced to a system of linear algebraic equations with respect to unknown coefficients  $P_1^k, P_2^k, Q_1^k, Q_2^k$ , where the free terms  $C_{1(1)}^k, C_{2(1)}^k, D_{1(1)}^k, D_{1(1)}^k$  are the Fourier

coefficients of known functions  $H_{1(1)}^k(x_1)$ ,  $H_{2(1)}^k(x_1)$

$$H_{1(1)}^k(x_1) = C_{1(1)}^k \sin(bx_1) + D_{1(1)}^k \cos(bx_1), \quad (1.49)$$

$$H_{2(1)}^k(x_1) = C_{2(1)}^k \sin(bx_1) + D_{2(1)}^k \cos(bx_1).$$

Using the expansions (1.48) and (1.49), the system of  $2N - 2$  integral equations (1.44) is reduced to a system of linear algebraic equations with respect to the coefficients  $P_r^k$ ,  $Q_r^k$  ( $r = \{1,2\}$ ). Explicit analytical relations between the coefficients  $P_r^k$ ,  $Q_r^k$  and  $C_{r(m)}^k$ ,  $D_{r(m)}^k$  ( $r = \{1,2\}$ ) are obtained using the Maple Software, and are not given here due to enormous size.

Taking into account the obtained solution of the system of algebraic equations, the Eqs. (1.21), (1.22), (1.28), (1.35)–(1.37), (1.42), (1.43) allow us to define stress–strain state of a multilayer film composite in any approximation, and hence, find the elastic strain energy  $U$  by the formulas (1.18).

## 1.4 Numerical results

The solution of the evolution equation (1.20) leads to the following dependence of the perturbation amplitude on time, initial perturbation wavelength, layer thicknesses, elastic parameters of layers, diffusion coefficient, surface and longitudinal stresses

$$\ln \left( \frac{A(\tau)}{A_0} \right) = R(a, h_1 \dots h_N, \lambda_1 \dots \lambda_N, \mu_1 \dots \mu_N, K_s, \sigma^s, \sigma_0) \tau. \quad (1.50)$$

Note that based on the described approach, the right-hand side of the expression (1.50) is defined explicitly. However, due to the enormous size of the resulting expression, it is not given in the work.

As an example, consider a two–layer ( $N = 2$ ) film coating. The elastic parameters of the top layer  $\lambda_1 = 58.17$  GPa and  $\mu_1 = 26.13$  GPa correspond to aluminum. For simplicity, we consider a metal-on-metal system, i.e. it is assumed that the Poisson coefficients of the media materials  $B_j$  ( $j = \overline{1,3}$ ) are equal to each

other  $\nu_j = 0.3$  ( $j = \overline{1,3}$ ). As the second independent parameter of isotropic elastic solid, we consider the shear modules  $\mu_j$  ( $j = \overline{1,3}$ ), related as follows:  $\mu_1/\mu_2 = r_1$ ,  $\mu_2/\mu_3 = r_2$ ;  $r_1, r_2$  are stiffness ratios.

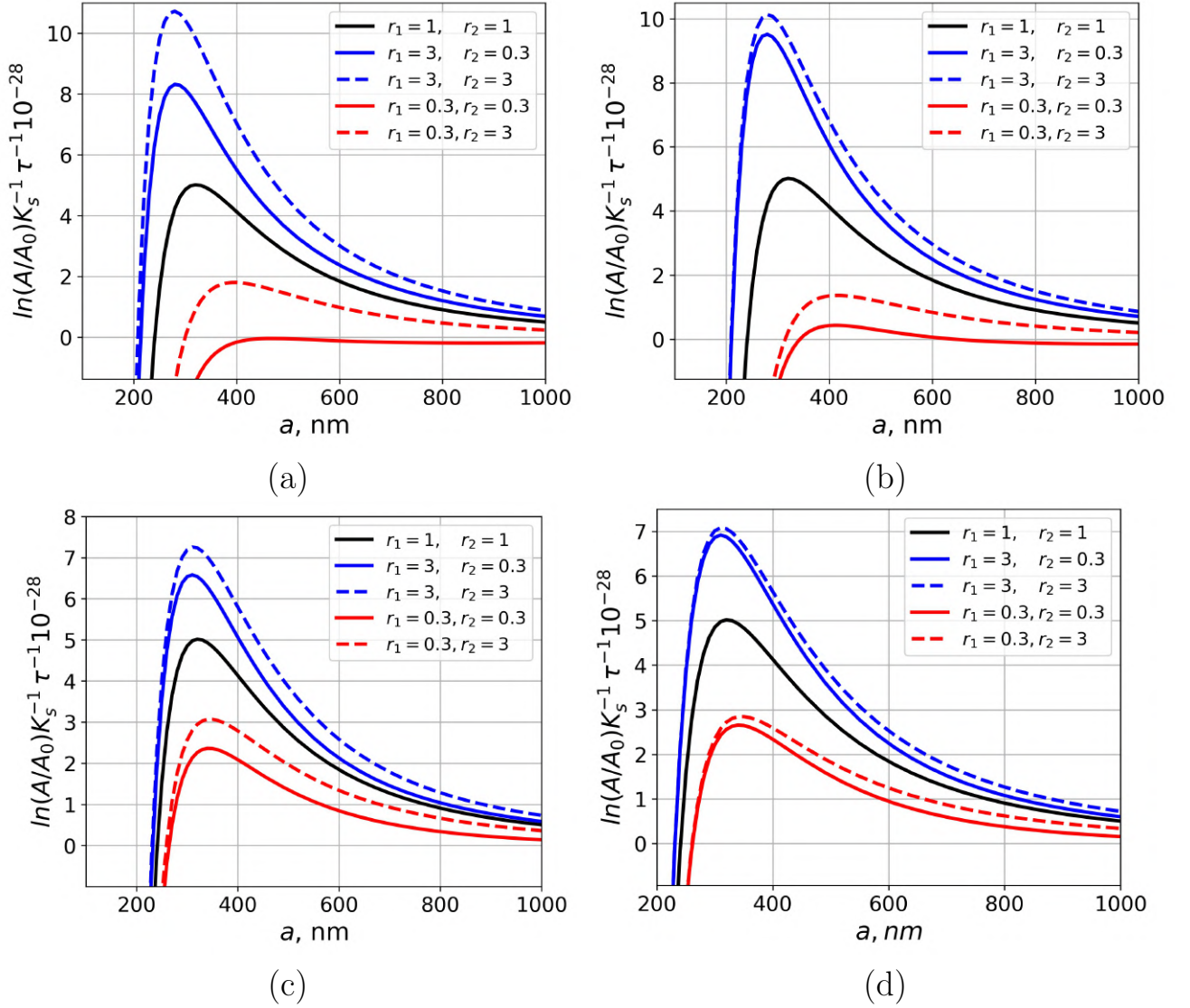


Figure 1.3 — The dependence of normalized amplitude change  $A(\tau)/A_0$  on the perturbation wavelength  $a$  for  $h_1 = 50$  nm,  $h_2 = 50$  nm (a),  $h_1 = 50$  nm,  $h_2 = 100$  nm (b),  $h_1 = 100$  nm,  $h_2 = 50$  nm (c) and  $h_1 = 100$  nm,  $h_2 = 100$  nm (d)

Fig. 1.3 shows the dependence of normalized amplitude change  $A(\tau)/A_0$  on the perturbation wavelength  $a$  of free multilayered film surface for different parameters. The longitudinal stress in top layer is equal to  $\sigma_1 = 1$  GPa and surface stress  $\sigma^s = 1$  N/m. The wavelength  $a = a_{cr}$  corresponds to the equilibrium state when rate of growth is equal to zero, i. e.  $\ln(A(\tau)/A_0) = 0$ . When  $a < a_{cr}$  the relief amplitude

decreases with time, i.e. the surface is smoothed out. In the case of  $a > a_{cr}$ , the perturbation amplitude increases with time. The wavelength  $a_{max}$  corresponds to the maximum amplitude change. The wavelengths  $a_{cr}$  and  $a_{max}$  are presented in the Tables 1.1 and 1.2.

Table 1.1

The critical wavelength  $a_{cr}$  of multilayered film coating under tension for various geometrical and physical parameters

$r_1$		0.3	0.3	3.0	3.0
$r_2$		0.3	3.0	0.3	3.0
$h_1, \text{ nm}$	$h_2, \text{ nm}$	$a_{cr}, \text{ nm}$			
50	50	—	300	213	208
50	100	343	314	210	210
100	50	264	259	232	231
100	100	261	261	231	231

Table 1.2

The wavelength  $a_{max}$  of multilayered film coating under tension for various geometrical and physical parameters

$r_1$		0.3	0.3	3.0	3.0
$r_2$		0.3	3.0	0.3	3.0
$h_1, \text{ nm}$	$h_2, \text{ nm}$	$a_{max}, \text{ nm}$			
50	50	—	396	282	279
50	100	413	416	279	281
100	50	343	345	309	312
100	100	342	346	310	312

The results show that the critical perturbation wavelength of multilayered film surface tends to a value corresponding to the equilibria state for a solid without a film [56] when the top layer thickness increases. With increasing of the second layer thickness, the effect of the substrate is negligible, and the critical wavelength corresponds to the case of a monolayer film coating [4]. In addition, it can be seen that increasing of stiffness ratios leads to decrease of the critical wavelength [11;129].

In the considered system with the parameters  $h_1 = h_2 = 50 \text{ nm}$ ,  $r_1 = r_2 = 0.3$  for any undulation wavelengths film surface smoothing with time.

Note that in this paper, in contrast to [56; 85], surface stress is taken into account. This allowed us to estimate the effect of the character of longitudinal stress. The Tables 1.3 and 1.4 show the wavelengths  $a_{cr}$  and  $a_{max}$  corresponding to compression.

Table 1.3

The critical wavelength  $a_{cr}$  of multilayered film coating under compression for various geometrical and physical parameters

$r_1$		0.3	0.3	3.0	3.0
$r_2$		0.3	3.0	0.3	3.0
$h_1$ , nm	$h_2$ , nm	$a_{cr}$ , nm			
50	50	331	276	205	201
50	100	299	286	203	202
100	50	244	241	221	221
100	100	243	242	221	221

Table 1.4

The wavelength  $a_{max}$  of multilayered film coating under compression for various geometrical and physical parameters

$r_1$		0.3	0.3	3.0	3.0
$r_2$		0.3	3.0	0.3	3.0
$h_1$ , nm	$h_2$ , nm	$a_{cr}$ , nm			
50	50	398	365	271	269
50	100	371	379	269	271
100	50	318	321	296	299
100	100	318	321	297	299

The relative differences between the critical wavelengths, calculated for different characters of the longitudinal stress, are presented in the Table 1.5 ( $a_{cr}^{\pm}$  corresponds to tension/compression, respectively).

Effect of the longitudinal stress sign

$r_1$		0.3	0.3	3.0	3.0
$r_2$		0.3	3.0	0.3	3.0
$h_1, \text{ nm}$	$h_2, \text{ nm}$	$ a_{cr}^+ - a_{cr}^- /a_{cr}^-$			
50	50	—	0.087	0.039	0.035
50	100	0.147	0.098	0.034	0.040
100	50	0.082	0.075	0.050	0.045
100	100	0.074	0.079	0.045	0.045

### 1.5 Chapter conclusions

This chapter is devoted to the analysis of the morphological stability of the free surface of a multilayer film coating, taking into account the constant surface stress. It was assumed that at the initial moment of time, the shape of the free surface is different from the flat one and described by a periodic function. It was also considered that the film system is stressed due to the lattice mismatch of different layers. During stress relaxation, the surface relief may change due to surface diffusion. The flow of atoms along the surface of the film coating is caused by a nonuniform stress distribution. To find the stress–strain state, the solution of the static problem of elasticity is obtained using the approach developed by Grekov and Kostyrko [64]. Based on the first-order approximation of the boundary perturbation method, the dependence of perturbation amplitude change on time, physical and geometric parameters of the problem is obtained. As an example, a two-layer film coating is considered. The dependence of the normalized amplitude change on the initial perturbation wavelength for different stiffness ratios and layers thicknesses is plotted. Based on the obtained results, the following conclusions can be formulated:

- the critical wavelength increases with decreasing of stiffness ratios;
- the effect of stiffness ratio on the surface morphological stability of a multilayer film coating increase with decreasing of layers thicknesses;
- the impact of the bottom layers decreases when the thickness of top layers increases;

- the difference in critical wavelength under compressive and tensile stresses increase with decreasing of top layer thickness in the case of a stiff layer, and, vice versa, decrease in the case of a soft layer.

It should be noted, that in this chapter the surface stress was considered constant, i. e. independent of the elastic properties of the surface layer. In the following chapters, the effect of the elastic properties of free and interfacial boundaries on their morphological stability are taken into account based on the Gurtin – Murdoch surface/interface elasticity model.

## Chapter 2

### Morphological stability of nanopatterned solid surface

This chapter presents a theoretical approach that allows to predict the nucleation of surface topological defects under the mechanical loading taking into account the thermodynamic and elastic properties of solid surface as well as its geometrical characteristics. Assuming that the surface atomic layers are thermodynamically unstable under certain conditions, we obtain the evolution equation which describes the kinetics of the relief formation in the case of diffusion mass transport activated by the nonuniform stress field. The rate of growth of surface defects depends on the field of bulk and surface stresses, which vary with the shape and size of the considered defects. To find the stress state, we use the first-order perturbation solution of a 2D boundary value problem formulated in the terms of the constitutive equations of bulk and surface elasticity. The solution of linearized evolution equation gives the critical values of the perturbation wavelength and the initial level of stresses which stabilize surface profile.

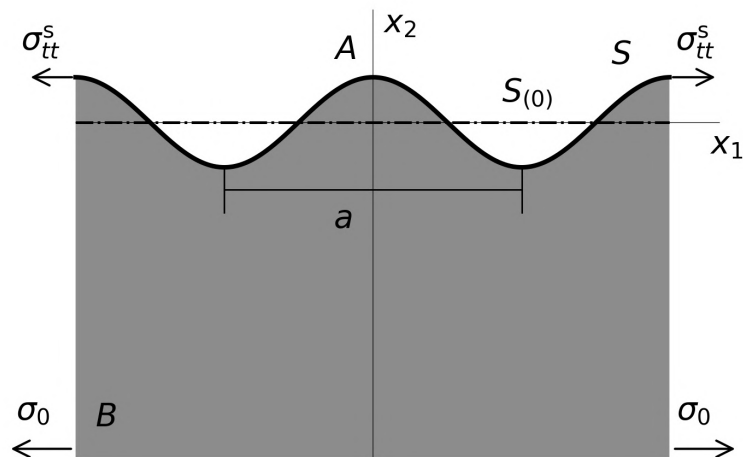


Figure 2.1 — The model of solid with curved surface under longitudinal stress



## 2.1 Problem formulation

Considering solid with a slightly perturbed surface under the uniaxial tension, we arrive at a 2D boundary value problem for a half-plane of the complex variable  $z = x_1 + ix_2$  ( $i^2 = -1$ ) and  $x_1, x_2 \in \mathbf{R}^1$ ) with a boundary  $S$  (see Fig. 2.1). According to Gurtin–Murdoch model of surface elasticity [73; 74], the elastic properties of surface domain differ from those of the bulk material and it is represented as a negligibly thin layer  $S$  adhering to the bulk phase  $B$  without slipping:

$$S = \{z : z \equiv \zeta = x_1 + i\varepsilon(\tau)f(x_1)\}, \quad B = \{z : x_2 < \varepsilon(\tau)f(x_1)\}, \quad (2.1)$$

$$\varepsilon(\tau) = \frac{A(\tau)}{a} \ll 1 \quad \forall \tau, \quad A(0) = A_0, \quad f(x_1) = a \cos(bx_1),$$

where  $b = 2\pi/a$  is the wavenumber,  $a$  is the perturbation wavelength, and  $A(\tau)$  is the perturbation amplitude, which can change over time.

To describe the elastic behavior of surface layer, simplified constitutive equations of the Gurtin–Murdoch model of surface elasticity are used. It is assumed that the surface energy depends only on surface strains and does not depend on displacement gradients

$$\sigma_{tt}^s(\zeta) = \gamma^0 + (\lambda^s + 2\mu^s)\varepsilon_{tt}^s(\zeta), \quad \sigma_{33}^s(\zeta) = \gamma^0 + (\lambda^s + \gamma^0)\varepsilon_{tt}^s(\zeta), \quad \zeta \in S, \quad (2.2)$$

where  $\sigma_{tt}^s$  is the normal surface stress,  $\varepsilon_{tt}^s$  is the normal surface strain,  $\gamma^0$  is residual surface stress,  $\lambda^s$  and  $\mu^s$  are surface Lamé constants.

Hooke's law for bulk material in the case of plane strain can be written as

$$\sigma_{nn}(z) = (\lambda + 2\mu)\varepsilon_{nn}(z) + \lambda\varepsilon_{tt}(z), \quad \sigma_{tt}(z) = (\lambda + 2\mu)\varepsilon_{tt}(z) + \lambda\varepsilon_{nn}(z), \quad (2.3)$$

$$\sigma_{nt}(z) = 2\mu\varepsilon_{nt}(z), \quad \sigma_{33}(z) = \frac{\lambda}{\lambda + \mu} [\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z)], \quad z \in B.$$

Here  $\sigma_{nn}, \sigma_{tt}, \sigma_{nt}$  and  $\varepsilon_{nn}, \varepsilon_{tt}, \varepsilon_{nt}$  are the components of bulk stress and strain tensors, respectively, defined in the local Cartesian coordinates  $(n, t)$ , and  $\lambda$  and  $\mu$  are the Lamé constants of the bulk phase  $B$ .

At infinity, the stresses  $\sigma_{\alpha\beta}$  ( $\alpha, \beta = \{1, 2\}$ ) in coordinates  $(x_1, x_2)$  and the rotation angle  $\omega$  are specified as

$$\lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{11} = \sigma_0, \quad \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{22} = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{12} = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \omega = 0. \quad (2.4)$$

It is important to note that the proposed model can be used to analyze the morphological stability of the film coating when the elastic properties of the substrate do not affect the deformation of the near-surface layer (for example, when the film thickness is larger than the perturbation wavelength). Then the longitudinal stress  $\sigma_0$  can be considered as misfit stress.

A kinematic boundary condition is formulated in the terms of the generalized Young–Laplace equation and, in the case of simplified constitutive equations of Gurtin–Murdoch model, can be written as

$$\sigma(\zeta) = \kappa \sigma_{tt}^s(\zeta) - i \frac{1}{h} \frac{d\sigma_{tt}^s(\zeta)}{dx_1}, \quad \sigma = \sigma_{nn} + i\sigma_{nt}, \quad \zeta \in S, \quad (2.5)$$

where  $h$  and  $\kappa$  are the metric coefficient and the curvature of the undulated boundary  $S$ , respectively.

Since we assume that the surface and bulk phases are coherent bonded, the inseparability condition can be defined as follows:

$$\varepsilon_{tt}^s(\zeta) = \varepsilon_{tt}(\zeta), \quad \zeta \in S. \quad (2.6)$$

It is assumed that each time  $\tau$  the system (2.1)–(2.6) is in mechanical equilibrium but it is not necessarily in a state of thermodynamic equilibrium. One of the conditions of thermodynamic equilibrium for an isolated system at a constant temperature is the uniform distribution of chemical potential.

The local chemical potential  $\chi$  for the surface  $S$  can be defined as [93]

$$\chi(\zeta, \tau) = [U(\zeta, \tau) - \kappa(\zeta, \tau)U_s(\zeta, \tau)] \Omega, \quad \zeta \in S, \quad (2.7)$$

where  $\Omega$  is the atomic volume,  $U_j$  is the strain energy density along the surface  $S$ , and  $U_s$  is the surface energy density.

Similarly to Chapter 1, we determine the normal rate of moving the boundary from the mass conservation law. It can be written in the form of evolution equation as follows [93; 130]:

$$\frac{\partial g(x_1, \tau)}{\partial \tau} = K_s h(x_1, \tau) \frac{\partial^2}{\partial s^2} [U(\zeta, \tau) - \kappa(x_1, \tau) U_s(\zeta, \tau)], \quad K_s = \frac{D_s C_s \Omega^2}{k_b T}. \quad (2.8)$$

To integrate the partial differential equation (2.8) and derive the stability conditions, the elastic strain energy  $U$  and surface energy  $U_s$  along the surface of solid should be determined. In this paper, our attention is focused on a slight change of a surface profile amplitude, so, considering the limitation  $A(\tau) \ll a \forall \tau$  in Eq. (2.1), we seek the components of stress and strain tensors of bulk and surface elasticity in the first-order approximation of boundary perturbation method

$$\sigma_{nm}(z, \tau) = \varepsilon(\tau) \sigma_{nn(1)}(z), \quad \sigma_{nt}(z, \tau) = \varepsilon(\tau) \sigma_{nt(1)}(z),$$

$$\varepsilon_{nn}(z, \tau) = \varepsilon_{nn(0)} + \varepsilon(\tau) \varepsilon_{nn(1)}(z), \quad \varepsilon_{nt}(z, \tau) = \varepsilon(\tau) \varepsilon_{nt(1)}(z), \quad (2.9)$$

$$\sigma_{tt}(z, \tau) = \sigma_{tt(0)} + \varepsilon(\tau) \sigma_{tt(1)}(z), \quad \varepsilon_{tt}(z, \tau) = \varepsilon_{tt(0)} + \varepsilon(\tau) \varepsilon_{tt(1)}(z),$$

$$\sigma_{tt}^s(z, \tau) = \sigma_{tt(0)}^s + \varepsilon(\tau) \sigma_{tt(1)}^s(z), \quad \varepsilon_{tt}^s(z, \tau) = \varepsilon_{tt(0)}^s + \varepsilon(\tau) \varepsilon_{tt(1)}^s(z),$$

where  $\sigma_{nn(0)}(z) = \sigma_{nt(0)}(z) = \varepsilon_{nt(0)}(z) = 0$  according to Eqs. (2.3) and (2.4).

The specific energy of the elastic deformation is determined by the formula (1.18). Surface energy in the case of the simplified Gurtin–Murdoch model take the form [122]

$$U_s(z, \tau) = \gamma^0 (1 + \varepsilon_{tt}^s(z, \tau)) + \frac{1}{2} (\lambda^s + 2\mu^s - \gamma^0) \varepsilon_{tt}^{s2}(z, \tau). \quad (2.10)$$

The linearization in the space of the parameter  $\varepsilon$  for the metric coefficient  $h$  and the curvature  $\kappa$  can be written as

$$\kappa(x_1, \tau) = \varepsilon(\tau) f''(x_1), \quad h(x_1, \tau) = 1. \quad (2.11)$$

Substituting Eqs.(1.18), (2.10) and (2.11) into Eq. (2.8), we obtain an ordinary differential equation that gives the amplitude change of surface perturbation with time [93]:

$$\begin{aligned} \frac{dA(\tau)}{d\tau} f(x_1) = & \frac{1}{2} A(\tau) K_s \frac{d^2}{dx_1^2} [\varepsilon_{nn(0)} \sigma_{nn(1)}(x_1) + \\ & + \sigma_{tt(0)} \varepsilon_{tt(1)}(x_1) + \varepsilon_{tt(0)} \sigma_{tt(1)}(x_1) - \\ & - \left\{ \gamma^0 (1 + \varepsilon_{tt(0)}^s(z, \tau)) + \frac{1}{2} (\lambda^s + 2\mu^s - \gamma^0) \varepsilon_{tt(0)}^{s2}(z, \tau) \right\} f''(x_1) \Big]. \end{aligned} \quad (2.12)$$

## 2.2 Linear analysis of surface morphological evolution

In order to integrate Eq. (2.12), we use the solution of the corresponding boundary value problem of plane elasticity (2.1)–(2.6) derived in [65] and define the components of stress and strain tensors for surface and bulk phases.

Based on Muskhelishvili's representation [17], the complex stress vector  $\sigma = \sigma_{nn} + i\sigma_{nt}$  in the area with normal  $\mathbf{n}$  at the point  $z$  is related to the Goursat–Kolosov complex potentials  $\Phi$  and  $\Upsilon$ :

$$\sigma(z) = \Phi(z) + \overline{\Phi(\bar{z})} - \left[ \Upsilon(\bar{z}) + \overline{\Phi(\bar{z})} - (z - \bar{z}) \overline{\Phi'(z)} \right] e^{-2i\alpha}, \quad z \in B, \quad (2.13)$$

where  $\alpha$  is the angle between axes  $t$  and  $x_1$ , a bar over a symbol denotes the complex conjugation, the prime denotes differentiation with respect to the argument,  $\Phi$  and  $\Upsilon$  are the functions holomorphic in  $B$  and  $\tilde{B} = \{z : x_2 > -\varepsilon f(x_1)\}$ , respectively.

At infinity, the values of complex potentials  $\Phi$  and  $\Upsilon$  are determined from the conditions (2.4) and the representation (2.13), taking  $\alpha = 0$  и  $\alpha = \pi/2$

$$\lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \Phi(z) = \lim_{x_2 \rightarrow +\infty} \Upsilon(z) = \sigma_0/4. \quad (2.14)$$

In accordance with the first-order approximation, the unknown functions  $\Phi$  and  $\Upsilon$  take the following form:

$$\Phi(z) = \Phi_{(0)}(z) + \varepsilon\Phi_{(1)}(z), \quad \Upsilon(z) = \Upsilon_{(0)}(z) + \varepsilon\Upsilon_{(1)}(z). \quad (2.15)$$

The values of the functions  $\Phi_{(m)}$ ,  $\Upsilon_{(m)}$  and  $\sigma_{tt(m)}^s$  on the curvilinear boundary  $S$  are presented by the linear Taylor polynomial in the vicinity of the line  $x_2 = 0$ , treating the real variable  $x_1$  as a parameter

$$\Psi_{(m)}(\zeta) = \Psi_{(m)}(x_1) + i\varepsilon f(x_1)\Psi'_{(m)}(x_1), \quad m = \{0,1\}, \quad (2.16)$$

where  $\Psi_{(m)}$  could be any of the above-listed functions.

Taking into account an equality  $\varepsilon f'(x_1) = \operatorname{tg}\alpha$ , we derive the following linearization of an exponential function:

$$e^{-2i\alpha} = 1 - 2i\varepsilon f'(x_1). \quad (2.17)$$

Substituting Eqs. (2.11), (2.13), (2.15)–(2.17) into boundary condition (2.5) and equating the corresponding coefficients of  $\varepsilon$ , we arrive at a sequence of Riemann–Hilbert problems:

$$\Xi_{(m)}^+(x_1) - \Xi_{(m)}^-(x_1) = i\sigma_{tt(m)}^{s'}(x_1) + F_m(x_1), \quad m = \{0,1\}, \quad (2.18)$$

where the auxiliary functions  $\Xi_{(m)}$  and  $F_m$  are defined as follows [65]:

$$\Xi_{(m)}(z) = \begin{cases} \Upsilon_{(m)}(z), & \operatorname{Im} z > 0, \\ \Phi_{(m)}(z), & \operatorname{Im} z < 0, \end{cases} \quad (2.19)$$

$$\Xi_{(m)}^\pm(x_1) = \lim_{z \rightarrow x_1 \pm i0} \Xi_{(m)}(z),$$

$$\begin{aligned} F_0(x_1) = 0, \quad F_1(x_1) = -if(x_1) \left[ \Phi'_{(0)}(x_1) + \Upsilon'_{(0)}(x_1) + 2\overline{\Phi'_{(0)}(x_1)} \right] + \\ + 2if'(x_1) \left[ \overline{\Phi_{(0)}(x_1)} + \Upsilon_{(0)}(x_1) \right] - f(x_1)\sigma_{tt(0)}^{s''}(x_1) - f''(x_1)\sigma_{tt(0)}^s(x_1). \end{aligned} \quad (2.20)$$

The solution of Eq. (2.18) is written in the terms of the Cauchy-type integrals [17; 65] and gives the integral dependencies of Goursat–Kolosov complex potentials on the unknown functions  $\sigma_{tt(m)}^{s'}$

$$\Xi_{(m)}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i\sigma_{tt(m)}^{s'}(\xi)}{z - \xi} d\xi + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F_m(\xi)}{z - \xi} d\xi + C_m, \quad (2.21)$$

where  $C_0 = \sigma_0/4$  and  $C_1 = 0$  in accordance with Eq. (2.14).

Using the constitutive relations (2.2) and (2.3), we rewrite the inseparability condition (2.6) in the terms of surface and bulk stresses

$$\sigma_{tt}^s(\zeta) = \frac{\lambda^s + 2\mu^s}{4\mu(\lambda + \mu)} [(\lambda + 2\mu)\sigma_{tt}(\zeta) - \lambda\sigma_{nn}(\zeta)] + \gamma_0. \quad (2.22)$$

The expressions for the stress tensor components  $\sigma_{tt}$  and  $\sigma_{nn}$  can be found from Eq. (2.13)

$$\sigma_{nn}(z) + i\sigma_{nt}(z) = \Phi(z) + \overline{\Phi(z)} - \left[ \Upsilon(\bar{z}) + \overline{\Phi(z)} - (z - \bar{z}) \overline{\Phi'(z)} \right] e^{-2i\alpha}, \quad (2.23)$$

$$\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z) = 4\text{Re}\Phi(z).$$

Substituting Eqs. (2.15)–(2.17) and (2.23) into (2.22) and equating corresponding coefficients of  $\varepsilon$ , we rewrite the boundary condition (2.6) in terms of the unknown complex potentials  $\Phi_{(m)}$ ,  $\Upsilon_{(m)}$  in each approximation of the boundary perturbation method

$$\sigma_{tt(m)}^s(x_1) = \frac{M}{2\mu} \text{Re} \left[ \varkappa \Phi_{(m)}(x_1) + \Upsilon_{(m)}(x_1) \right] + V_m(x_1). \quad (2.24)$$

The expression (2.24) uses the following notations:

$$\begin{aligned}
M &= (\lambda^s + 2\mu^s), \quad \varkappa = (\lambda + 3\mu)/(\lambda + \mu), \quad V_0(x_1) = \gamma^0, \\
V_1(x_1) &= \frac{M}{2\mu} \operatorname{Re} \left\{ i f(x_1) \left[ \varkappa \Phi'_{(0)}(x_1) - \Upsilon'_{(0)}(x_1) - 2\overline{\Phi'_{(0)}(x_1)} \right] - \right. \\
&\quad \left. - 2i f'(x_1) \left[ \overline{\Phi_{(0)}(x_1)} + \Upsilon_{(0)}(x_1) \right] \right\}. \tag{2.25}
\end{aligned}$$

In the zero-order approximation (i.e.  $m = 0$ ), solution of the problem corresponds to a homogeneous stress state of a solid with a flat surface. Then, taking into account (2.14), we obtain

$$\Phi_{(0)}(z) = \Upsilon_{(0)}(z) = \sigma_0/4. \tag{2.26}$$

After that, we define surface stress in the zero-order approximation from the Eq. (2.25)

$$\sigma_{tt(0)}^s(\zeta) = \gamma^0 + \frac{M(1 + \varkappa)}{8\mu} \sigma_0. \tag{2.27}$$

The stress tensor components are defined taking into account (2.23) and (2.26)

$$\sigma_{tt(0)}(z) = \sigma_0, \quad \sigma_{nn(0)}(z) = 0, \quad \sigma_{nt(0)}(z) = 0. \tag{2.28}$$

For the first-order approximation ( $m = 1$ ), we seek the surface stress in the following form

$$\sigma_{tt(1)}^{s'}(x_1) = P \sin(bx_1) + Q \cos(bx_1). \tag{2.29}$$

According to the properties of Cauchy-type integrals, we reduce Eq. (2.24) to the linear system of algebraic equations for the unknown coefficients  $P$  and  $Q$ , the solution of which is derived as follows [65]:

$$P = \frac{Mab^2 \left[ (\varkappa + 1)\sigma_{tt(0)} + (\varkappa - 1)b\sigma_{tt(0)}^s \right]}{4\mu + M(\varkappa + 1)b}, \quad Q = 0. \tag{2.30}$$

Substituting Eq. (2.29) with the defined coefficients (2.30) into Eq. (2.21), we obtain the complex potentials of the first-order approximation:

$$\begin{aligned}\Upsilon_{(1)}(z) &= \frac{1}{2} \left[ P - ba(\sigma_{tt(0)} - b\sigma_{tt(0)}^s) \right] e^{ibz}, \quad z \in \tilde{B}, \\ \Phi_{(1)}(z) &= \frac{1}{2} \left[ P - ba(\sigma_{tt(0)} + b\sigma_{tt(0)}^s) \right] e^{-ibz}, \quad z \in B.\end{aligned}\tag{2.31}$$

They correspond to the modification of the stress field from the uniform state (2.27) and (2.28) due to undulation of the surface profile (2.1) described in the terms of the linear perturbation technique:

$$\begin{aligned}\sigma_{tt(1)}^s(\zeta) &= - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{P_k}{b_k} \cos(b_k x_1), \quad \zeta \in S, \\ \sigma_{nn(1)}(z) + i\sigma_{nt(1)}(z) &= \Phi_{(1)}(z) + \overline{\Phi_{(1)}(z)} - \\ &- \left[ \Upsilon_{(1)}(\bar{z}) + \overline{\Phi_{(1)}(z)} - (z - \bar{z}) \overline{\Phi'_{(1)}(z)} \right] e^{-2i\alpha}, \\ \sigma_{tt(1)}(z) + \sigma_{nn(1)}(z) &= 4\text{Re}\Phi_{(1)}(z), \quad z \in B.\end{aligned}\tag{2.32}$$

Based on the obtained solution, the differential equation (2.12), describing the amplitude change of solid surface perturbation over time  $\tau$ , will be solved in the following section.

### 2.3 Numerical results

Since the elasticity problem (2.1)–(2.6) is solved, we can determine the amplitude of surface perturbation as a function of time. Taking into account Eqs. (2.2), (2.3), (2.27) and (2.31), (2.32), the solution of Eq. (2.12) is written as

$$\ln \left( \frac{A(\tau)}{A_0} \right) = R_1 (R_2 \sigma_0 - R_3 \gamma_0) \tau,\tag{2.33}$$



where

$$R_1 = \frac{\sigma_0 \pi^3 K_s}{8a^3 \mu^2 ((\varkappa + 1) M \pi + 2\mu_2 a)},$$

$$R_2 = 2M^2 \varkappa (\varkappa + 1)^2 \pi^2 + M \pi a \mu (\varkappa + 1) (3\varkappa^2 + 6\varkappa - 5) + \\ + 4a^2 (\varkappa + 1) \mu^2 (3\varkappa + 5),$$

$$R_3 = -16M \varkappa (\varkappa + 1) \mu \pi^2 - 8a \pi \mu^2 (3\varkappa^2 + 6\varkappa - 5).$$

As an example, we consider aluminum with the elastic Lamé parameters  $\lambda = 58.17$  GPa and  $\mu = 26.13$  GPa. Surface elastic properties of some metals are obtained by molecular modeling in [104; 105; 126]. For aluminum with crystallographic orientation (111) the residual surface stress is  $\gamma^0 = 1$  N/m and Lamé parameters are  $\lambda^s = 6.851$  N/m and  $\mu^s = -0.376$  N/m [105]. It corresponds to the surface longitudinal stiffness  $M = \lambda^s + 2\mu^s = 6.099$  N/m. It should be noted that the elastic parameters, as well as the residual surface stress, depend on the orientation of the crystal lattice and other factors [126]. Therefore, to study the effect of these parameters, we will change them in some range.

The normalized amplitude change  $A(\tau)/A_0$  as a function of wavelength  $a$  is plotted in Fig. 2.2 for  $\sigma_0 = 1$  GPa,  $M = \{6.099, 60\}$  N/m (red and blue lines, respectively),  $\gamma^0 = 1$  N/m (a) and  $\gamma^0 = 0.1$  N/m (b). The results show different rates of amplitude change for different perturbation wavelengths. The intersection of lines with abscissa gives the critical wavelength values  $a_{cr}$  which stabilize the initial surface profile (i.e.  $\ln(A(\tau)/A_0) = 0$ ). Surface relief with wavelength smaller than  $a_{cr}$  is smoothed via surface diffusion (i.e.  $\ln(A(\tau)/A_0) < 0$ ), whereas perturbations with longer wavelengths grow unstably (i.e.  $\ln(A(\tau)/A_0) > 0$ ). The maximum amplitude change occurs at a wavelength  $a_{max}$  which define the maximally unstable modes. The wavelengths  $a_{cr}$  and  $a_{max}$  defined for the considered parameters of the problem are presented in Tables 2.1 and 2.2. When the surface residual stress is equal to  $\gamma^0 = 1$  N/m, the critical wavelengths  $a_{cr}$  are weakly dependent on the surface

stiffness  $M$ . In order to investigate the effect of elastic surface parameters, we take  $\gamma^0 = 0.1$  N/m.

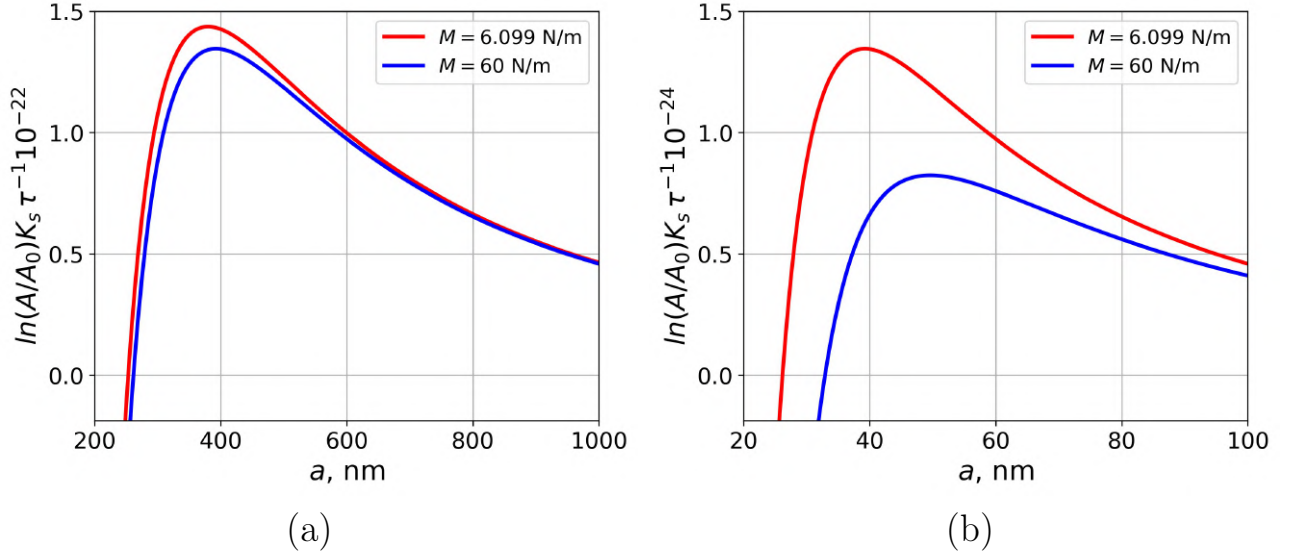


Figure 2.2 — The dependence of normalized amplitude change  $A(\tau)/A_0$  on the perturbation wavelength  $a$  for  $\gamma^0 = 1$  N/m (a) and  $\gamma^0 = 0.1$  N/m (b)

Table 2.1

The critical wavelength  $a_{cr}$  for various system parameters

$M$ , N/m	6.099	60
$\gamma^0$ , N/m	$a_{cr}$ , nm	
1	253.2	261.6
0.1	26.1	32.9

Table 2.2

The wavelength  $a_{max}$  for various system parameters

$M$ , N/m	6.099	60
$\gamma^0$ , N/m	$a_{max}$ , nm	
1	379.8	392.4
0.1	39.3	49.7

Fig. 2.3 shows the distribution of the normalized chemical potential  $\chi(x_1)/\chi_0$  along the perturbed solid surface within the period, where  $\chi_0$  calculated for thermodynamic equilibrium state. The dashed line corresponds to the critical

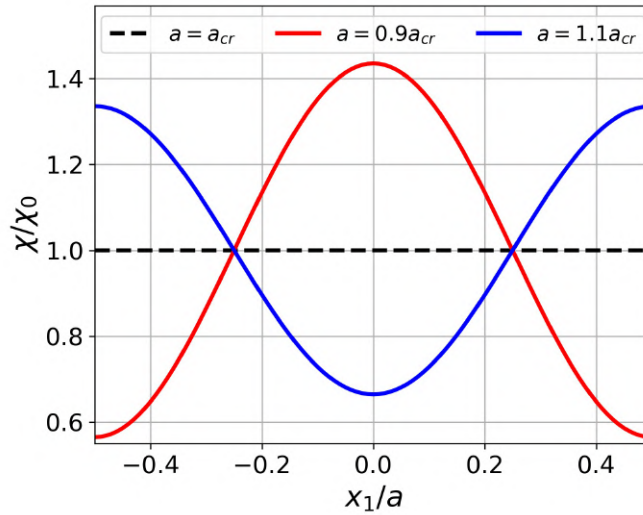


Figure 2.3 – Distribution of chemical potential  $\chi$  for various wavelengths  $a$

wavelength  $a = a_{cr}$  and demonstrates the uniform distribution of chemical potential. It should be noted, that in the case of a plane surface, the chemical potential also has a uniform distribution. Red line corresponds to wavelengths  $a < a_{cr}$ . As can be seen from the figure, the chemical potential has a maximum in the peak ( $x_1 = 0$ ) and a minimum in the valley ( $x_1 = a$ ), which means that it is preferable for atoms to move from the peaks into the valleys smoothing the surface. When  $a > a_{cr}$  (blue line), atoms diffuse towards a peak and the relief amplitude is increases with time.

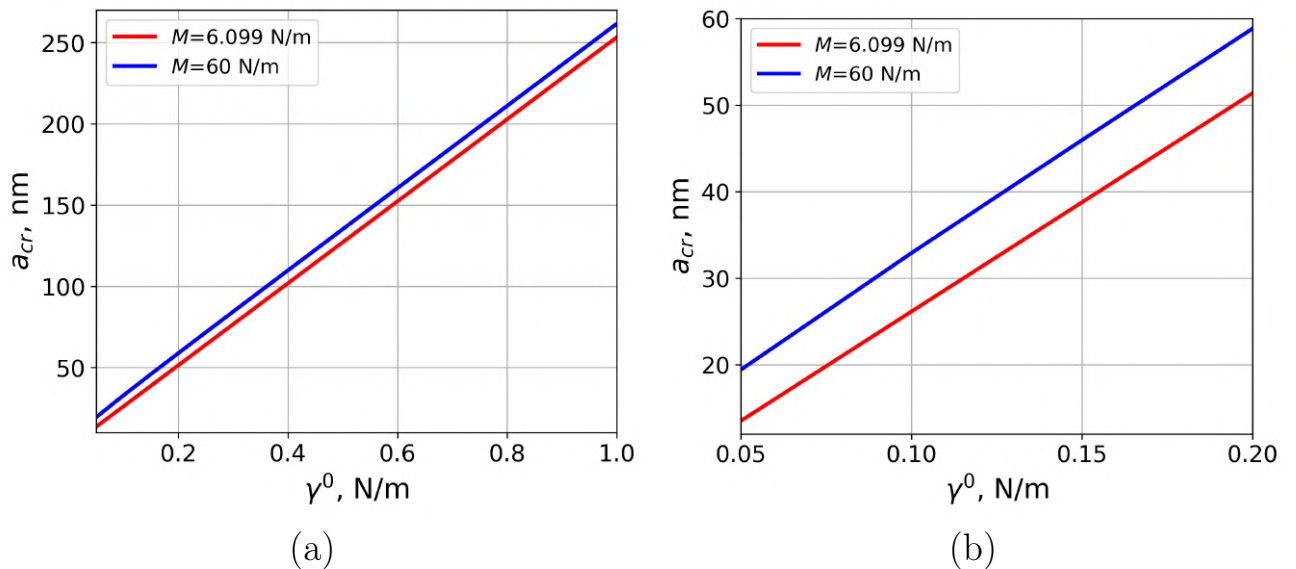


Figure 2.4 – The dependence of critical undulation wavelength  $a_{cr}$  on residual surface stress  $\gamma^0$  for  $\gamma^0 \in [0,05; 1,0]$  N/m (a) and  $\gamma^0 \in [0,05; 0,2]$  N/m (b)

The dependence of the critical perturbation wavelength on the residual surface stress  $\gamma^0$  for different surface stiffness  $M = 6.099, 60$  N/m (red and blue lines,

respectively) is plotted on Fig. 2.4. The results show that the critical wavelengths increases with increasing residual surface stress  $\gamma^0$ . The relative difference between the critical wavelengths calculated for  $\gamma^0 = 0.1$  N/m and  $\gamma^0 = 0.2$  N/m is 97% and 79% for  $M = 6.099$  N/m and  $M = 60$  N/m, respectively.

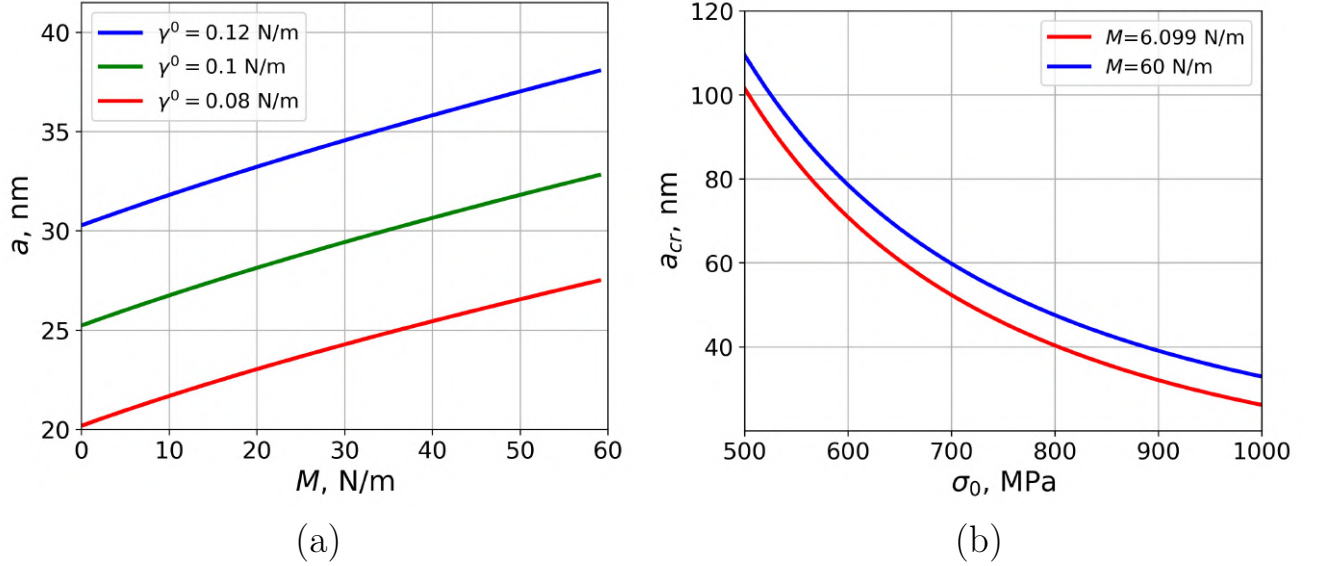


Figure 2.5 – The dependence of critical undulation wavelength  $a_{cr}$  on surface stiffness  $M$  (a) and longitudinal stress  $\sigma_0$  (b)

The dependence of the critical perturbation wavelength  $a_{cr}$  on the surface stiffness  $M$  for different surface residual stress  $\gamma^0 = \{0.08; 0.1; 0.12\}$  N/m (red, green, and blue lines, respectively) and longitudinal stress  $\sigma_0 = 1$  GPa is presented in Fig. 2.5a. The critical wavelengths, calculated for  $M = 6.099$  N/m and  $M = 60$  N/m, differ from each other by 30%, 25% and 22% for  $\gamma^0 = \{0.08; 0.1; 0.12\}$  N/m, respectively.

The Fig. 2.5b shows the dependence of the critical wavelength  $a_{cr}$  on the longitudinal stress  $\sigma_0$ . With an increasing of  $\sigma_0$  from 0.5 GPa to 1 GPa, the critical wavelengths decrease by 74% and 69% for  $M = 6.099$  N/m and  $M = 60$  N/m, respectively. This allows us to conclude that the effect of longitudinal stress on the morphological stability of the solid surface is slightly higher at lower values of  $M$ . In contrast to Chapter 1, where constant surface stress was taken into account, significant dependency of critical wavelength on the longitudinal stress sign has not been revealed in the current chapter. In prospect, to analyze the effect of longitudinal stress sign, the volume diffusion is planning to be taken into account.

## 2.4 Chapter conclusions

In this chapter, we have presented a theoretical approach for the analysis of morphological stability of solid surface taking into account its elastic properties based on the Gurtin-Murdoch model. It was assumed that the evolution of the curvilinear surface was caused by surface diffusion determined by derivative of chemical potential. The nonuniform distribution of chemical potential is associated with a change in the elastic deformation energy and surface energy along a solid surface.

It should be noted that, in contrast to other works, surface energy is determined taking into account the deformation of the surface layer here. The dependence of the perturbation amplitude on time, diffusion parameters, elastic properties, residual surface stresses and longitudinal stress was obtained. As an example, an analysis of the morphological stability of the aluminum surface has been carried out. The influence of the physical parameters of the problem on the critical value of the curvature wavelength is investigated and the following results have been obtained:

- the critical wavelength of the solid surface increases with increasing of residual surface stress and surface longitudinal stiffness, as well as with decreasing of longitudinal stress;
- the effect of residual surface stress on morphological stability is marginally dependent on surface stiffness;
- the influence of longitudinal stress increases with decreasing of surface stiffness;
- the effect of surface stiffness increases with decreasing residual surface stress and longitudinal stress.

It should be noted that the obtained results are also valid for the nanostructured surface of the film coating, with a thickness larger than perturbation amplitude. In this case, the substrate does not affect the distribution of stresses near the surface [89], and consequently, on the change in the chemical potential along the curvilinear surface of the layered structure. The effect of the film thickness on the surface morphological stability will be considered in the next chapter.

## Chapter 3

### Morphological stability of ultrathin film surface

As previously noted, an increase in the thickness of the film coating leads to a decrease in the influence of the substrate on the morphological stability of the film surface. Therefore, the derived in Chapter 2 dependence of the normalized amplitude on the undulation wavelength is correct for a wavelength smaller than the film thickness. However, the critical wavelength may exceed the film thickness, for example in the case of the nanosized film coating. Therefore, this chapter is devoted to the influence of film thickness on the stability of its surface. To this end, the elastic strain energy and the surface energy contained in the evolution equation should be found from the solution of the problem for joint deformation of the film on the substrate. Similarly to the previous chapter, using the Gurtin – Murdoch model of surface/interfacial elasticity, the effect of the elastic properties of the free surface as well as the film – substrate interface will be taken into account. For the reader's convenience, some of the expressions presented in the previous chapters are given again.

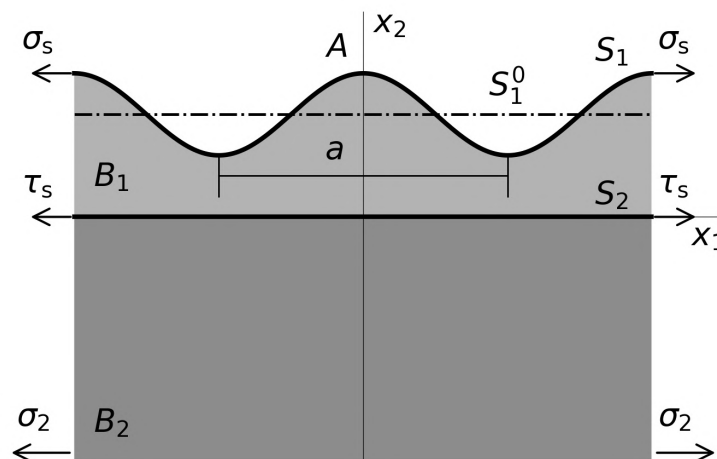


Figure 3.1 — The model of an ultrathin film coating with slightly undulated surface

### 3.1 Problem Formulation

The model of an ultrathin film coating of thickness  $h_f$  in range 1 – 100 nm deposited on a substrate of thickness  $h_s \gg h_f$  under plain strain conditions is represented as an inhomogeneous elastic half-plane  $B = B_1 \cup B_2$  of the complex variable  $z = x_1 + ix_2$  ( $i^2 = -1$ ) with a curvilinear surface  $S_1$  and a rectilinear interface  $S_2$

$$S_1 = \{z : z \equiv \zeta_1 = x_1 + i[h_f + \varepsilon(\tau)f(x_1)]\}, \quad (3.1)$$

$$S_2 = \{z : z \equiv \zeta_2 = x_1\}, \quad \varepsilon(\tau) = \frac{A(\tau)}{a} \ll 1 \quad \forall \tau, \quad A(0) = A_0,$$

$$B_1 = \{z : 0 < x_2 < h_f + \varepsilon(\tau)f(x_1)\}, \quad B_2 = \{z : x_2 < 0\}. \quad (3.2)$$

In accordance with the Gurtin–Murdoch surface/interface elasticity model, the surface and interphase domains are represented as negligibly thin layers adhering to the bulk without slipping [73;74]. The constitutive equations of surface/interface elasticity model are used in the assumption that the normal component of the surface gradient tensor in the constitutive equation is neglected:

$$\sigma_{tt}^s(\zeta_j) = \gamma_j^0 + (\lambda_j^s + 2\mu_j^s)\varepsilon_{tt}^s(\zeta_j), \quad \sigma_{33}^s(\zeta_j) = \gamma_j^0 + (\lambda_j^s + \gamma_j^0)\varepsilon_{tt}^s(\zeta_j), \quad \zeta_j \in S_j, \quad (3.3)$$

where  $\sigma_{tt}^s$  is tangential surface/interfacial stress  $\varepsilon_{tt}^s$  is tangential surface/interfacial strain,  $\gamma_j^0$  residual surface/interfacial stress,  $\lambda_j^s$  and  $\mu_j^s$  are the Lamé parameters for surface/interface domain.

The elastic behavior in the bulk phases of  $B_1$  and  $B_2$  is related by Hooke's law, which in the case of plane deformation take the form

$$\begin{aligned} \sigma_{nn}(z) &= (\lambda_j + 2\mu_j)\varepsilon_{nn}(z) + \lambda_j\varepsilon_{tt}(z), \quad \sigma_{nt}(z) = 2\mu_j\varepsilon_{nt}(z), \\ \sigma_{tt}(z) &= (\lambda_j + 2\mu_j)\varepsilon_{tt}(z) + \lambda_j\varepsilon_{nn}(z), \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\sigma_{33}(z) = \frac{\lambda_j}{\lambda_j + \mu_j} [\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z)], \quad z \in B_j.$$

In Eq. (3.4),  $\sigma_{\alpha\beta}$  and  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  are the components of bulk stress and strain tensors, respectively, defined in the Cartesian coordinates  $(n,t)$  ( $\mathbf{n}$  is a normal to  $S_j$ ), and  $\lambda_j$  and  $\mu_j$  are the Lamé constants of the bulk phase  $B_j$ .

The conditions of mechanical equilibrium is formulated in the terms of the generalized Young–Laplace equation and in the case of simplified constitutive equations of Gurtin–Murdoch model can be written as

$$\sigma(\zeta_1) = \kappa(x_1)\sigma_s(x_1) - i\frac{1}{h}\frac{d\sigma_s(x_1)}{dx_1}, \quad \zeta_1 \in S_1, \quad (3.5)$$

$$\Delta\sigma(\zeta_2) = \sigma^+(\zeta_2) - \sigma^-(\zeta_2) = i\frac{d\tau_s(x_1)}{dx_1}, \quad \zeta_2 \in S_2, \quad (3.6)$$

where  $\sigma_s(x_1) = \sigma_{tt}^s(\zeta_1)$  is the surface stress,  $\tau_s(x_1) = \sigma_{tt}^s(\zeta_2)$  is the interfacial stress,  $\sigma = \sigma_{nn} + i\sigma_{nt}$  is the complex stress vector,  $\sigma^\pm = \lim_{z \rightarrow \zeta_2 \pm i0} \sigma(z)$ ,  $h$  and  $\kappa$  are the metric coefficient and local curvature of  $S_1$ , respectively.

At infinity,  $\sigma_{\alpha\beta}$  ( $\alpha, \beta = \{1,2\}$ ) in Cartesian coordinates  $(x_1, x_2)$  and the rotation angle of the material particle  $\omega$  are specified as

$$\lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{11} = \sigma_2, \quad \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{22} = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{12} = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \omega = 0. \quad (3.7)$$

It should be noted that the longitudinal stress can be a result of the lattice mismatch between the film and substrate materials [57]. Although it may also be caused by other factors, such as mechanical loading [14].

Since the surface/interface and bulk phases are assumed to be coherent, the boundary conditions are as follows

$$\varepsilon_{tt}^s(\zeta_1) = \varepsilon_{tt}(\zeta_1), \quad \zeta_1 \in S_1, \quad (3.8)$$

$$\Delta u(\zeta_2) = u^+(\zeta_2) - u^-(\zeta_2) = 0, \quad \zeta_2 \in S_2,$$

where  $u = u_1 + iu_2$  is complex displacement vector,  $u_1$  and  $u_2$  are displacement along axes  $(x_1, x_2)$  and  $u^\pm = \lim_{z \rightarrow \zeta_2 \pm i0} u(z)$ .

During stress relaxation, the relief of the film surface may change. It is necessary to define the dependence of the relief amplitude  $A$  on the time  $\tau$  taking into account the surface diffusion and elastic deformation of film coating.



### 3.2 Linear analysis of surface morphological evolution

The equation describing the shape change of the free boundary  $S_1$  under surface diffusion has the same form as in Chapter 2

$$\frac{\partial g(x_1, \tau)}{\partial \tau} = K_s h(x_1, \tau) \frac{\partial^2}{\partial s^2} [U(\zeta, \tau) - \kappa(x_1, \tau) U_s(\zeta, \tau)], \quad (3.9)$$

$$g(x_1, \tau) = \varepsilon(\tau) f(x_1), \quad K_s = \frac{D_s C_s \Omega^2}{k_b T}.$$

In the Eq. (3.9), the surface energy  $U_s$  and the elastic strain energy  $U$  are defined by the formulas (1.18) and (2.10) using the solution of the problem (3.1) – (3.7) related to the joint deformation of the half-plane  $B_2$  and strip  $B_1$ .

As in the previous chapters, we study a weak change of the surface relief, therefore, the components of the stress and the strain tensors of the bulk and surface phases are defined using the first-order approximation of the boundary perturbation method. Taking into account (1.18), (1.19), (2.9) and (2.10), the Eq. (3.9) can be represented as

$$\begin{aligned} \frac{dA(\tau)}{d\tau} f(x_1) = & \frac{1}{2} A(\tau) K_s \frac{d^2}{dx_1^2} [\varepsilon_{nn(0)} \sigma_{nn(1)}(x_1) + \\ & + \sigma_{tt(0)} \varepsilon_{tt(1)}(x_1) + \varepsilon_{tt(0)} \sigma_{tt(1)}(x_1) - \\ & - \left\{ \gamma^0 (1 + \varepsilon_{tt(0)}^s(z, \tau)) + \frac{1}{2} (\lambda^s + 2\mu^s - \gamma^0) \varepsilon_{tt(0)}^{s2}(z, \tau) \right\} f''(x_1) \right]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

The components of the stress and strain tensors of the bulk and surface phases are determined from the solution of the boundary value problem (3.1) – (3.8) considered using general formulation in [92].

In accordance with the superposition principle [2; 92], we find the solution of the original boundary value problem as the sum of the solutions of the problem for

a homogeneous half-plane with a curved boundary and the problem for deformation of a two-component plane with a rectilinear interface.

Thus, the solution to the problem (3.1)–(3.8) can be written as [2;92]:

$$G(z, \eta_j) = \begin{cases} G_1^1(z, \eta_1) + G_1^2(z, \eta_1), & z \in B_1, \\ G_2^2(z, \eta_2), & z \in B_2, \end{cases} \quad (3.11)$$

$$G_j^r(z, \eta_j) = \begin{cases} \sigma^r(z), & \eta_j = 1 \\ -2\mu_j \frac{du^r}{dz}, & \eta_j = -\varkappa_j \end{cases}, \quad z \in B_j, \quad r, j = \overline{1, 2}, \quad (3.12)$$

where in the case of plane strain  $\varkappa_j = 3 - 4\nu_j$ .

In the first problem (3.11) and (3.12), it is supposed that unknown self-balanced periodic load  $p$  and surface stress  $v$  are applied to the periodic curvilinear boundary  $S_1$  of the homogeneous half-plane  $D_1^1 = \{z : x_2 < h + \varepsilon(\tau)f(x_1)\}$

$$\sigma^1(z_1) = p(z_1) + \kappa(x_1)v^s(x_1) - i \frac{1}{h} \frac{dv^s(x_1)}{dx_1}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} p(\xi)d\xi = 0, \quad z_1 \in S_1. \quad (3.13)$$

The components  $\sigma_{\alpha\beta}^1$  ( $\alpha, \beta \in \{1, 2\}$ ) of the stress tensor and the rotation angle  $\omega^1$  of the material particle at infinity are equal to zero

$$\lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{11}^1 = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{22}^1 = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{12}^1 = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \omega^1 = 0. \quad (3.14)$$

In the second problem, the coupled deformation of two dissimilar half-planes  $D_1^2 = \{z : x_2 > 0\}$  and  $D_2^2 = \{z : x_2 > 0\}$  with elastic properties of the corresponding phases  $B_1$  and  $B_2$  is caused by the unknown jumps of stresses  $\Delta\sigma^r$  and displacements  $\Delta u^r$  at the rectilinear interface  $S_2$  and longitudinal stress  $\sigma_j$ :

$$\Delta\sigma^2 = \lim_{z \rightarrow \zeta_2 + i0} \sigma(z) - \lim_{z \rightarrow \zeta_2 - i0} \sigma^2(z), \quad (3.15)$$

$$\Delta u^2 = \lim_{z \rightarrow \zeta_2 + i0} u^2(z) - \lim_{z \rightarrow \zeta_2 - i0} u^2(z), \quad \zeta_2 \in S_1.$$

The conditions at infinity can be specified as follows

$$\lim_{x_2 \rightarrow +\infty} \sigma_{11}^2 = \sigma_1, \quad \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{11}^2 = \sigma_2, \quad \sigma_1 = \frac{\mu_1(\varkappa_2 + 1)}{\mu_2(\varkappa_1 + 1)} \sigma_2, \quad (3.16)$$

$$\lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{22}^2 = \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{12}^2 = \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \omega^2 = 0. \quad (3.17)$$

Taking into account (3.11), the boundary conditions (3.5), (3.6) and (3.8) we derive a system of boundary equations for the unknown function  $p(z_1)$ ,  $v$ ,  $\sigma_s$  and  $\tau_s$

$$\sigma^1(\zeta_1) = p(\zeta_1) + \kappa(x_1)v^s(x_1) - i \frac{1}{h} \frac{dv^s(x_1)}{dx_1}, \quad (3.18)$$

$$\Delta \sigma^2(\zeta_2) = i\tau_s'(\zeta_2) - \sigma_1(\zeta_2), \quad \Delta u^2(\zeta_2) = -u^1(\zeta_2), \quad (3.19)$$

$$\sigma^1(\zeta_1) + \sigma^2(\zeta_1) = \kappa(x_1)\sigma^s(x_1) - i \frac{1}{h} \frac{d\sigma^s(x_1)}{dx_1}, \quad (3.20)$$

$$v(\zeta_1) = \gamma_1^0 + (\lambda_1^s + 2\mu_1^s)\varepsilon_{tt}^1, \quad (3.21)$$

$$\sigma_s(\zeta_1) = \gamma_1^0 + (\lambda_1^s + 2\mu_1^s) [\varepsilon_{tt}^1(\zeta_1) + \varepsilon_{tt}^2(\zeta_1)], \quad (3.22)$$

$$\tau_s(\zeta_2) = \gamma_2^0 + (\lambda_2^s + 2\mu_2^s)\varepsilon_{tt}^2. \quad (3.23)$$

As a result, the solution of boundary value problem is reduced to the solution of the system of boundary equations (3.18) – (3.23).

According to [17; 92; 142], the stress tensor components  $\sigma^k$  and the displacements  $u^k$  can be expressed in terms of the complex potentials Goursat–Kolosov  $\Phi_j^k, \Upsilon_j^k$

$$\begin{aligned} G_j^k(z, \eta_j) = & \eta_j \Phi_j^k(w_j) + \overline{\Phi_j^k(w_j)} - \left( \Upsilon_j^k(\overline{w_j}) + \overline{\Phi_j^k(w_j)} - \right. \\ & \left. - (w_j - \overline{w_j}) \overline{\Phi_j^{k'}(w_j)} \right) e^{-2i\alpha}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

where  $w_1 = z - ih_f$  and  $w_2 = z$ ,  $\alpha$  where  $\alpha$  is the angle between axes  $t$  and  $x_1$ ;  $\Phi_1^1$  and  $\Upsilon_1^1$  are the functions holomorphic in  $D_1$  and  $\widetilde{D}_1 = \{z : x_2 > h - \varepsilon\lambda f(x_1)\}$ , respectively;  $\Phi_1^2$  and  $\Upsilon_2^2$  are the functions holomorphic in  $D_1^2$ ;  $\Phi_2^2$  and  $\Upsilon_1^2$  are the functions holomorphic in  $D_2^2$ .

Assuming  $\alpha = 0$  and  $\alpha = \pi/2$  in Eq. (3.24) for  $x_2 \rightarrow -\infty$  and taking into account (3.7), we get the values of the complex potentials at infinity

$$\begin{aligned} \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \Phi_1^1(z) &= \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \Upsilon_1^1(z) = 0, \\ \lim_{|x_2| \rightarrow \infty} \Phi_2^j(z) &= \lim_{|x_2| \rightarrow \infty} \Upsilon_2^j(z) = \frac{\sigma_j}{4}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

According to the first-order approximation of the boundary perturbation method, the unknown functions  $v$ ,  $\Phi_j^k$  and  $\Upsilon_j^k$  are represented as follows

$$\Psi(z) = \Psi_{(0)}(z) + \varepsilon\Psi_{(1)}(z), \quad (3.26)$$

where  $\Psi$  means any of the above listed functions.

Boundary values of the functions  $\Psi_{(m)}$  are represented as a linear Taylor polynomial in the vicinity of the line  $x_2 = 0$

$$\Psi_{(m)}(\zeta) = \Psi_{(m)}(x_1) + i\varepsilon f(x_1)\Psi'_{(m)}(x_1), \quad m = \{0,1\}. \quad (3.27)$$

Substituting the Eqs. (1.32), (3.24), (3.26)–(3.27) into the (3.18), (3.19) and equating the coefficients for the same powers of  $\varepsilon$ , we arrive to the Riemann–Hilbert problems. The complex potentials are found in [92]

$$\begin{cases} \Upsilon_{1(m)}^1(z) = \Xi_{(m)}(z), \quad \text{Im } z > 0, \\ \Phi_{1(m)}^1(z) = \Xi_{(m)}(z), \quad \text{Im } z < 0, \end{cases} \quad (3.28)$$

$$\begin{cases} \Phi_{1(m)}^2(z) = -\Upsilon_{2(m)}^2(z) + \Sigma_m(z) + O_m^1, \quad \text{Im } z > 0, \\ \Upsilon_{1(m)}^2(z) = -\Phi_{2(m)}^2(z) + \Sigma_m(z) + O_m^1, \quad \text{Im } z < 0, \end{cases} \quad (3.29)$$

$$\begin{cases} \Upsilon_{2(m)}^2(z) = \frac{\mu_2 \varkappa_1 \Sigma_m(z) + V_m(z)}{\mu_1 + \mu_2 \varkappa_1} + O_m^2, & \text{Im } z > 0, \\ \Phi_{2(m)}^2(z) = \frac{\mu_2 \Sigma_m(z) - V_m(z)}{\mu_2 + \mu_1 \varkappa_2} + O_m^2, & \text{Im } z < 0, \end{cases} \quad (3.30)$$

where

$$\begin{aligned} \Xi_{(m)}(z) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{i v'_{(m)}(\tau)}{\tau - z} d\tau + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p_{(m)}(\tau)}{\tau - z} d\tau + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{F_{1(m)}^1(\tau)}{\tau - z} d\tau, \\ \Sigma(z) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i \tau^{s'(t)}}{z - t} dt - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sigma^1(t)}{z - t} dt, \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$V_m(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v^1(t)}{z - t} dt,$$

$$F_0(x_1) = 0, \quad F_1(x_1) = -i f(x_1) \left[ \Phi'_{(0)}(x_1) + \Upsilon'_{(0)}(x_1) + 2\overline{\Phi'_{(0)}(x_1)} \right] + \quad (3.32)$$

$$+ 2i f'(x_1) \left[ \overline{\Phi_{(0)}(x_1)} + \Upsilon_{(0)}(x_1) \right] - f(x_1) \sigma_{tt(0)}^{s''}(x_1) - f''(x_1) \sigma_{tt(0)}^s(x_1).$$

Taking into account (3.24), the boundary conditions (3.20)–(3.23) are represented in terms of the complex potentials  $\Phi_j^k, \Upsilon_j^k$

$$p_{(m)}(x_1) - i v'_{s(m)}(x_1) + i \sigma'_{s(m)}(x_1) - \Upsilon_{1(m)}^2(x_1) + \Phi_{1(m)}^2(x_1) = W_m^1(x_1),$$

$$v_{s(m)}(x_1) - \frac{M_1}{2\mu_1} \text{Re} \left[ \varkappa_1 \Phi_{1(m)}^1(x_1) + \Upsilon_{1(m)}^1(x_1) \right] = W_m^2(x_1),$$

$$\sigma_{s(m)}(x_1) - \frac{M_1}{2\mu_1} \text{Re} \left[ \varkappa_1 \left\{ \Phi_{1(m)}^1(x_1) + \Phi_{1(m)}^2(x_1) \right\} + \quad (3.33)$$

$$+ \left\{ \Upsilon_{1(m)}^1(x_1) + \Upsilon_{1(m)}^2(x_1) \right\} \right] = W_m^3(x_1),$$

$$\tau_{s(m)}(x_1) - \frac{M_2}{2\mu_2} \text{Re} \left[ \varkappa_2 \Phi_{2(m)}^2(x_1) + \Upsilon_{2(m)}^2(x_1) \right] = W_m^4(x_1),$$

where  $W_0^1 = 0$ ,  $W_0^2 = \gamma_1^0$ ,  $W_0^3 = \gamma_1^0$ ,  $W_0^4 = \gamma_2^0$ ,  $W_1^4 = 0$ ;  $W_1^1$ ,  $W_1^2$ ,  $W_1^3$  are functions that depend on zero approximations of complex potentials [92].

The complex potentials for the zero-order approximation of the boundary perturbation technique follow from the Eq. (3.25)

$$\Phi_1^1(z) = \Upsilon_1^1(z) = 0, \quad z \in B_1, \quad (3.34)$$

$$\Phi_2^j(z) = \Upsilon_2^j(z) = \frac{\sigma_j}{4}, \quad z \in B_j, j = \{1, 2\}.$$

Substituting  $\alpha = 0$  and  $\alpha = \pi/2$  in Eq. (3.24) and summing the results, we obtain following relation for stress tensor components in the problems (3.13), (3.14) and (3.15)–(3.17)

$$\begin{aligned} \sigma_{nn}(z) + i\sigma_{nt}(z) &= \Phi_j(z) + \overline{\Phi_j(z)} - \\ &- \left[ \Upsilon_j(\bar{z}) + \overline{\Phi_j(z)} - (z - \bar{z}) \overline{\Phi_j'(z)} \right] e^{-2i\alpha}, \end{aligned} \quad (3.35)$$

$$\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z) = 4\text{Re}\Phi_j(z), \quad z \in B_j, \quad j = \{1, 2\}.$$

Taking into account (3.4)–(3.6), the Eqs. (3.11), (3.34) and (3.35) lead to the solution of the problem (3.1)–(3.8) in the zero-order approximation of the boundary perturbation method. This solution describes the piecewise uniform stress state of a film coating with a flat surface

$$\begin{aligned} \sigma_{tt(0)}(z) &= \sigma_j, \quad z \in B_j; \quad \sigma_{s(0)}(z_1) = \gamma_1^0 + \frac{M_1(1 + \varkappa_1)}{8\mu_1} \sigma_1, \\ \tau_{s(0)}(z_2) &= \gamma_2^0 + \frac{M_2(1 + \varkappa_2)}{8\mu_2} \sigma_2, \quad \sigma_1 = \frac{\mu_1(\varkappa_2 + 1)}{\mu_2(\varkappa_1 + 1)} \sigma_2, \end{aligned} \quad (3.36)$$

where  $M_j = \lambda_j^s + 2\mu_j^s$ , ( $j = \{1, 2\}$ ) is surface/interface stiffness.

In the first-order approximation of boundary perturbation method, the unknown functions are seeking in the following form [92]:

$$\begin{aligned}
p_{(1)}(x_1) &= P_1 \cos(bx_1) + Q_1 \sin(bx_1), \\
v_{(1)}(x_1) &= P_2 \cos(bx_1) + Q_2 \sin(bx_1), \\
\sigma_{s(1)}(x_1) &= P_3 \cos(bx_1) + Q_3 \sin(bx_1), \\
\tau_{s(1)}(x_1) &= P_4 \cos(bx_1) + Q_4 \sin(bx_1),
\end{aligned} \tag{3.37}$$

where  $P_i$  и  $Q_i$  are unknown complex coefficients.

Substituting Eqs. (3.28)–(3.30) into the (3.33), and taking into account Eqs. (3.31), (3.32) and (3.37) and the properties of the Cauchy-type integral, we arrive at a system of linear algebraic equations for unknown coefficients  $P_i$  and  $Q_i$ . After solving the system, the complex potentials in the first-order approximation of the boundary perturbation method are found from the Eqs. (3.28)–(3.30), (3.37). Then, substituting the obtained complex potentials in (3.35), we find the stress tensor components. The components of the strain tensor can be found from the Eq. (3.4).

### 3.3 Numerical results

Substituting the obtained components of the stress tensor and strain tensor in (3.10), we derive an ordinary differential equation. The solution of this equation leads to the amplitude of surface perturbation as a function of time, physical and geometric parameters of the problem

$$\ln \left( \frac{A(\tau)}{A_0} \right) = R(a, h_f, \lambda_1, \mu_1, \lambda_2, \mu_2, \lambda_1^s, \mu_1^s, \gamma_1^0, \lambda_2^s, \mu_2^s, \gamma_2^0, \sigma_2) \tau. \tag{3.38}$$

As an example, consider a metal-on-metal system. We assume that the Poisson coefficients of the film and substrate materials are equal, i.e.  $\nu_1 = \nu_2$ . This simplification allows us to analyze the effect of the substrate through the only one

parameter, coating-to-substrate stiffness ratio  $r = \mu_1/\mu_2$ . The bulk Lamé parameters of the film coating correspond to aluminum and are equal to  $\lambda_2 = 58.17$  GPa and  $\mu_2 = 26.13$  GPa. To analyze the effect of surface/interface elasticity, we consider the surface/interface stiffness  $M_j = \lambda_j^s + 2\mu_j^s$ . The surface Lamé parameters for aluminum with the crystal lattice orientation (111) are obtained by molecular modelling in [105] and corresponds to the longitudinal surface stiffness  $M_1 = 6.099$  N/m. However, the surface elastic constants depend on the crystallographic orientation and other factors [126], therefore, different values of surface/interface stiffness are considered below.

The Fig. 3.2 shows the dependence of the normalized amplitude change  $A(\tau)/A_0$  of the film surface relief on the perturbation wavelength  $a$  for different stiffness ratio  $r = \{0.3; 3\}$  (red and blue lines, respectively), film thickness  $h_f = \{5; 15\}$  nm (solid and dashed lines, respectively) and surface stiffness  $M_1 = 6.099$  N/m (a) and  $M_1 = 60$  N/m (b). As it was shown in the previous chapter, it is necessary to take an underestimated value of the residual surface stress to conduct qualitative analysis of the influence of the surface elastic parameters. Thus, the residual surface stress is assumed to be equal to  $\gamma_1^0 = 0.1$  N/m. The interface stiffness and residual stress are equal to  $M_2 = 6.099$  N/m and  $\gamma_2^0 = 1$  N/m, respectively. The critical wavelength  $a_{cr}$  corresponding to the thermodynamic equilibrium are found from the intersection of the lines with the abscissa. When the initial wavelength is less than the critical wavelength (i.e.  $a < a_{cr}$ ) the perturbation amplitude decreases with time and the relief is smoothed out with time. If the initial wavelength is greater than the critical wavelength (i.e.  $a > a_{cr}$ ), the undulation amplitude increases with time. The maximum amplitude change corresponds to a wavelengths  $a_{max}$  which define the maximally unstable modes. The wavelengths  $a_{cr}$  and  $a_{max}$  are presented in the Tables 3.1 and 3.2.

The critical wavelength is greater when the substrate is stiffer than the film (i.e., at  $r < 1$ ). As it can be seen from the Fig. 3.2, the effect of stiffness ratio increases when the thickness of the film coating decreases. When  $M_1 = 6.099$  N/m and  $h_f = 15$  nm, the influence of stiffness on the critical perturbation wavelength is insignificant. The wavelengths  $a_{max}$  increase with increasing surface stiffness  $M_1$ .



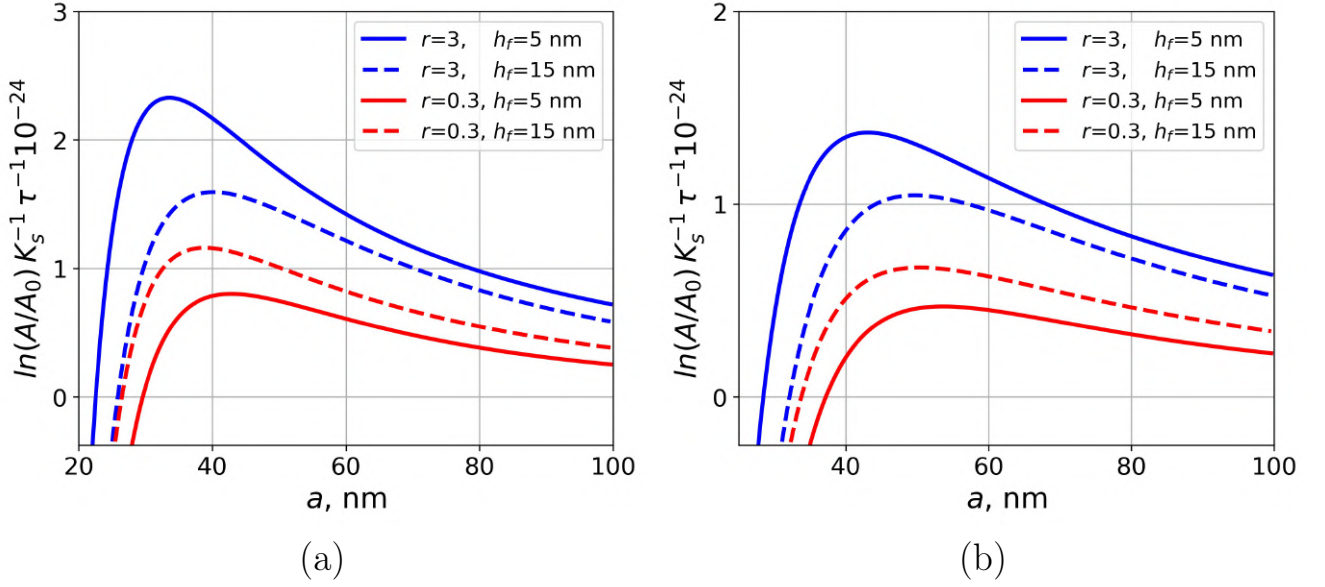


Figure 3.2 — The dependence of normalized amplitude change  $A(\tau)/A_0$  on the perturbation wavelength  $a$  for  $M_1 = 6.099$  N/m (a) and  $M_1 = 60$  N/m (b)

Table 3.1

The critical wavelength  $a_{cr}$  of film coating for various physical and geometrical parameters

$M_1$ , N/m	6.099	6.099	60	60
$r$	0.3	3	0.3	3
$h_f$ , nm	$a_{cr}$ , nm			
5	29.6	22.6	37.1	28.6
15	26.6	26.1	33.6	32.1

Table 3.2

The wavelength  $a_{max}$  of film coating for various physical and geometrical parameters

$M_1$ , N/m	6.099	6.099	60	60
$r$	0.3	3	0.3	3
$h_f$ , nm	$a_{max}$ , nm			
5	42.6	33.6	53.6	43.1
15	39.1	40.1	50.6	49.6

The effect of the interface stiffness  $M_2$  and residual interface stress  $\gamma_2^0$  on the morphological stability of the film surface is shown in the Fig. 3.3. The

results indicate that the critical wavelength of the film surface undulation is almost independent from interface parameters. In this regard, in further analysis in the current chapter, the interface stiffness and residual stress is assumed to be zero:  $\gamma_2^0 = 0$ ,  $M_2 = 0$ .

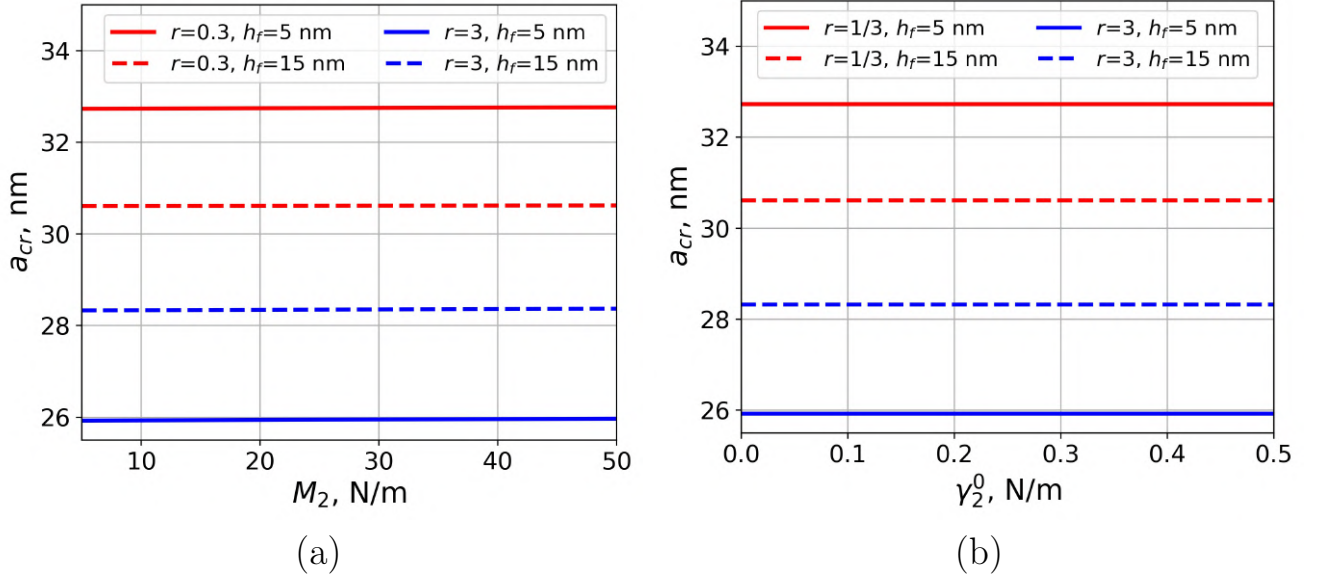


Figure 3.3 — The dependence of critical undulation wavelength  $a_{cr}$  on interface stiffness  $M_2$  (a) and interface residual stress  $\gamma_2^0$  (b)

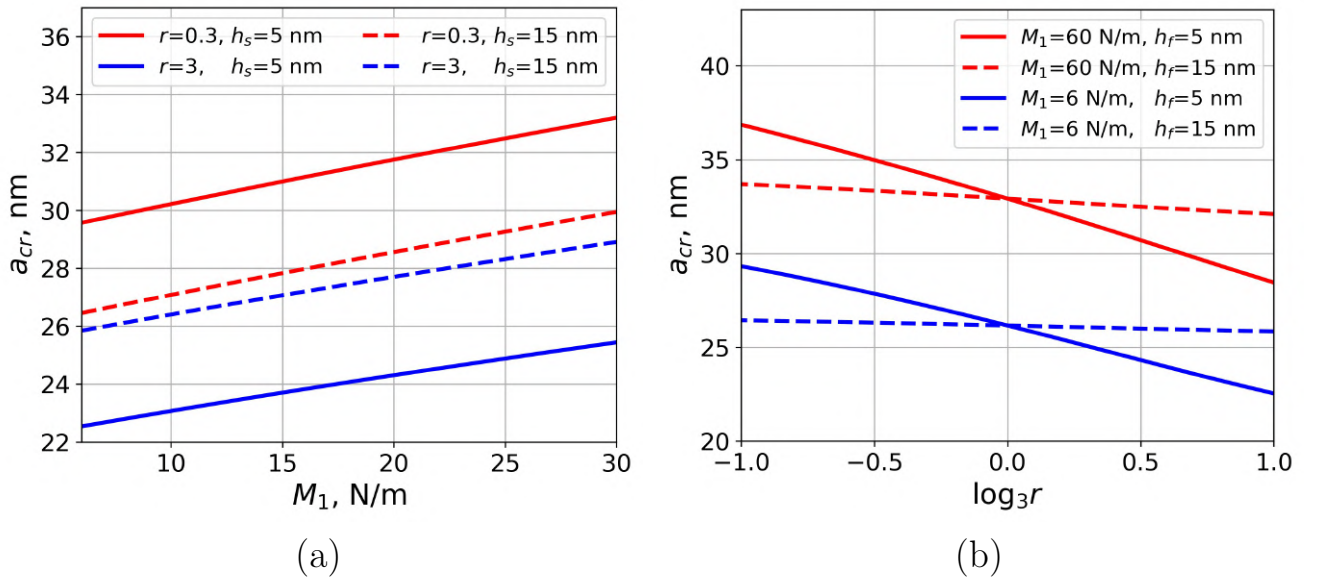


Figure 3.4 — The dependence of critical undulation wavelength  $a_{cr}$  on surface stiffness  $M_1$  (a) and stiffness ratio  $r$  (b)

The dependence of the critical surface perturbation wavelength  $a_{cr}$  on surface stiffness  $M_1$  (a) and coating-to-substrate stiffness ratio  $r$  (b) is shown in the Fig. 3.4. The critical wavelength  $a_{cr}$  increases with increasing of surface stiffness  $M_1$ . The

effect of surface stiffness on morphological stability of ultrathin film surface with increasing film thickness is more significant when substrate softer than film ( $r = 3$ ). The impact of the stiffness ratio is greater for smaller film thickness and surface stiffness.

The critical wavelength do not depend on the film thickness when the stiffness of the film and substrate materials are equal to each other (i.e.,  $r = 1$  or, equivalently,  $\log_3 r = 0$ ). In this case, the critical perturbation wavelengths correspond to the results obtained in Chapter 2.

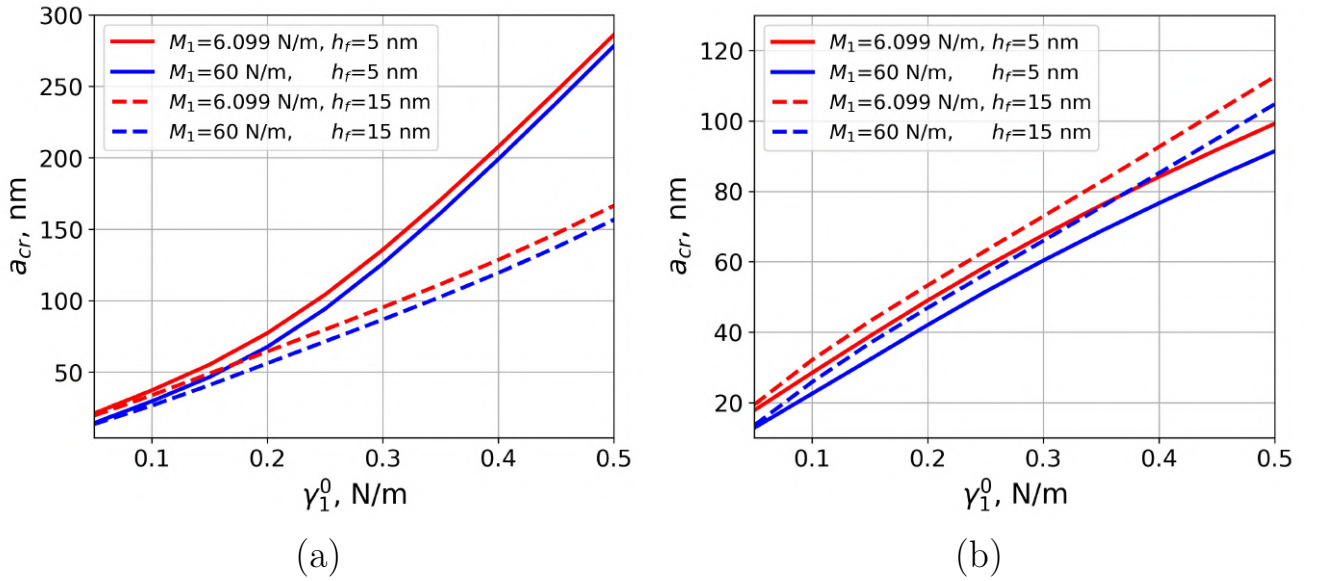


Figure 3.5 — The dependence of critical undulation wavelength  $a_{cr}$  on residual surface stress  $\gamma_1^0$  for  $r = 0.3$  (a) and  $r = 3$  (b)

The dependence of critical undulation wavelength  $a_{cr}$  on residual surface stress  $\gamma_1^0$  for  $r = 0.3$  (a) and  $r = 3$  (b) is plotted on Fig. 3.5. The critical wavelength  $a_{cr}$  increase with increasing of  $\gamma_1^0$ . In addition, the effect of residual surface stress on the morphological stability of the film surface is greater when the film is stiffer than the substrate (i.e., when  $r = 0.3$ ). Also in this case, the impact of the residual surface stress increases with decreasing of film thickness. If the substrate stiffness is less than the film stiffness (i.e.  $r > 1$ ), the influence of the residual surface stress on critical wavelength is marginally dependent on film thickness and the surface stiffness.

Fig. 3.6 demonstrates the dependence of critical undulation wavelength  $a_{cr}$  on its thickness  $h_f$  for different stiffness ratio  $r = \{0.3, 3\}$  (blue and red lines, respectively)  $M_1 = 6.099$  N/m (a) and  $M_1 = 60$  N/m (b). The results show that the critical wavelength increase/decrease and tend to the critical wavelength

corresponding to solid surface (see Chapter 2) with an increasing thickness of the film coating, which stiffness is greater/less than the substrate stiffness. The influence of the film thickness increases with an increasing surface stiffness  $M_1$ . The threshold thickness, exceeding which we can ignore the impact of a substrate, increases with increasing surface stiffness.

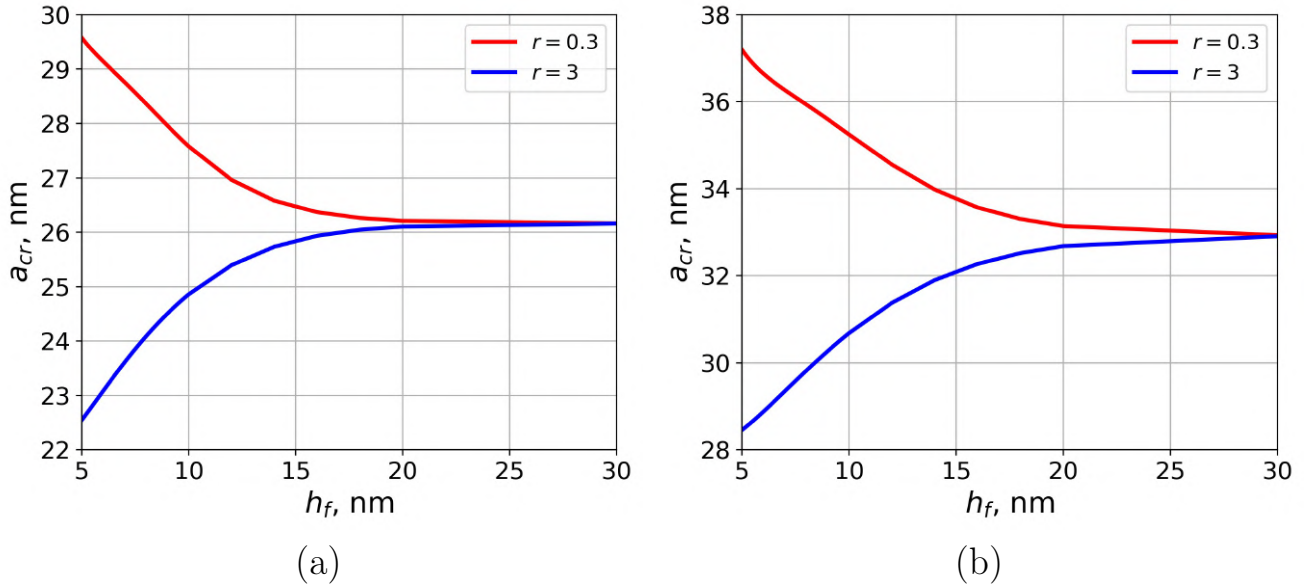


Figure 3.6 — The dependence of critical undulation wavelength  $a_{cr}$  on its thickness  $h_f$  for  $M_1 = 6.099$  N/m (a) and  $M_1 = 60$  N/m (b)

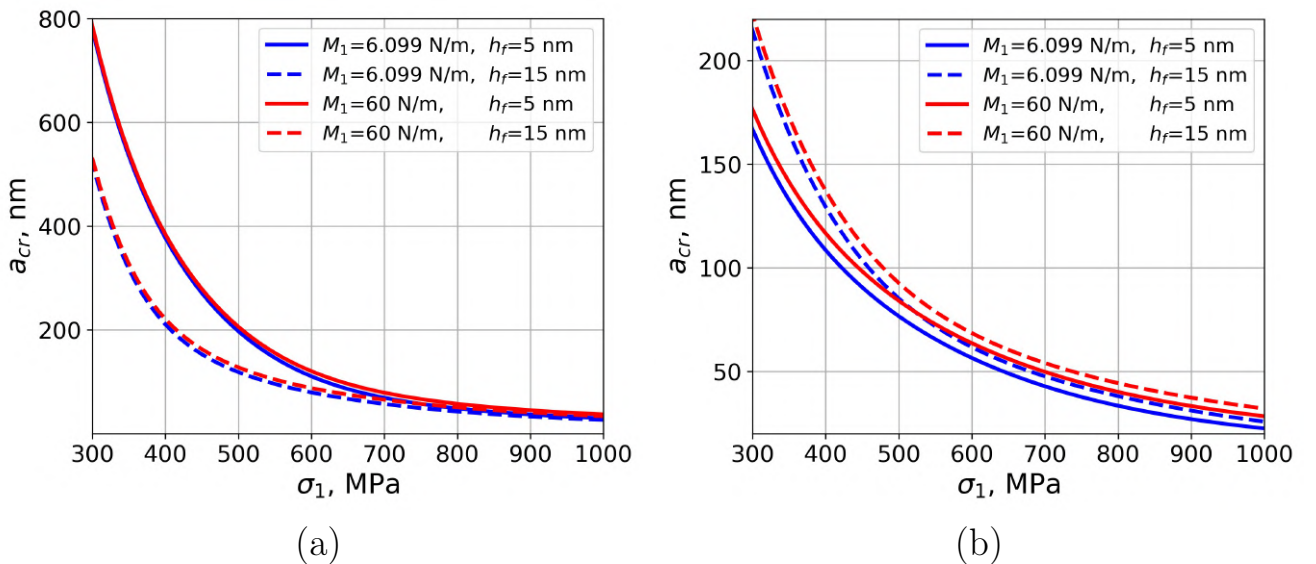


Figure 3.7 — The dependence of critical undulation wavelength  $a_{cr}$  on longitudinal stress  $\sigma_1$  for  $r = 0.3$  (a) and  $r = 3$  (b)

The dependence of critical undulation wavelength  $a_{cr}$  on longitudinal stress  $\sigma_1$  for different surface stiffness  $M_1 = \{6.099; 60\}$  N/m (blue and red lines,

respectively), film thickness  $h_f = \{5; 15\}$  nm (solid and dashed lines, respectively) and stiffness ratios  $r = 0.3$  (a) and  $r = 3$  (b) is shown in Fig. 3.7. The figure shows that with increasing  $\sigma_1$ , the critical wavelengths decrease. The impact of surface stiffness increases with increasing of longitudinal stress.

### 3.4 Chapter conclusions

In this chapter, a theoretical approach to the analysis of the surface morphological stability of the film coating is developed. The impact of the surface/interface elastic properties is taken into account based on the Gurtin–Murdoch surface/interface elasticity model. It was assumed that the surface evolution of the film coating occurs due to surface diffusion driven by a nonuniform distribution of the chemical potential along the undulated surface. It was also postulated that the nonuniform distribution of the chemical potential along surface is caused by changes in the stress field, surface energy and surface curvature. The evolution of the surface relief was considered as a change in the amplitude of the periodic undulation. To solve the evolution equation, it was necessary to find the stress–strain state of the system under consideration. To this end, the plane elasticity problem of the joint deformation of a half-plane and a strip with a curved boundary is solved. The solution of the boundary value problem was found in the first-order approximation of the boundary perturbation method using the approach proposed in [92].

The effect of coating-to-substrate stiffness ratio, elastic parameters of surface and interface, film thickness, residual surface/interface stress and longitudinal stress were investigated. The following results was obtained:

- the interface stiffness and residual interface stress do not affect the morphological stability of film coating surface;
- the critical perturbation wavelength increases with increasing of surface stiffness, residual surface stress as well as with decreasing longitudinal stress and coating-to-substrate stiffness ratio;

- the effect of surface stiffness decreases with an increasing of residual surface stress and a decreasing of longitudinal stress;
- the critical perturbation wavelength increases/decreases with increasing of film thickness when the film is stiffer/softer than substrate;
- the impact of substrate decreases with increasing of film thickness;
- the threshold coating thickness, exceeding which it is possible to ignore the substrate, increases with an increasing of surface stiffness and surface residual stress.

It is important to note that the relief changes due to diffusion processes can also occur at the interfaces [68;96;132]. In this regard, the next chapter is devoted to the analysis of the morphological stability of the heteroepitaxial interface.

## Chapter 4

### Morphological stability of a nanostructured interface

The chapter is devoted to the study of the morphological stability of the nanostructured interface between materials. Taking into account the fact that the atomic arrangement of solid-solid interfaces is thermodynamically unstable under certain conditions, the evolution equation describing the kinetics of the relief formation is obtained. The growth rate of interface roughness depends on the variation of the chemical potential along the curved interface, which is a function of interface and bulk stresses. To define the stress distribution along the curved interface, we use constitutive equations of bulk and surface/interface elasticity modeling the interphase domain as a negligibly thin layer adhering to the bulk phases. Using the the first-order approximation of the boundary perturbation method, the solution of the linearized evolution equation leads to the conditions of the interface morphological stability.

#### 4.1 Problem formulation

We consider an isotropic bimaterial elastic body under plane strain conditions, the interface of which has a small periodic undulation (Fig. 4.1). It is assumed that the interface relief changes over time due to the diffusion mass transfer along the interface. Taking into account the plane strain conditions, we come to the 2-D problem of morphological instability for the two-phase infinite plane  $B_1 \cup B_2$  of the complex variable  $z = x_1 + ix_2$ , where  $i^2 = -1$  and  $(x_1, x_2)$  are the global Cartesian coordinates. According to the Gurtin–Murdoch model of surface/interface elasticity, the interface region is considered as a negligibly thin layer  $S$  between the bulk phases  $B_1$  and  $B_2$ :

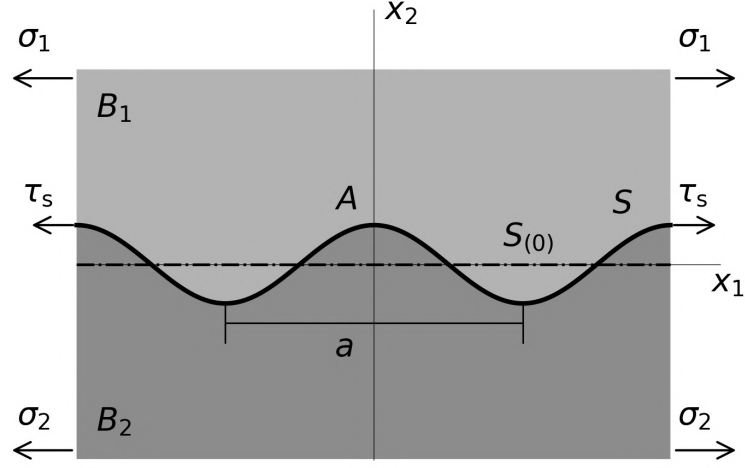


Figure 4.1 — A model of a bimaterial with slightly perturbed interface under the uniaxial tension

$$S = \{z : z \equiv \zeta = x_1 + i\varepsilon(\tau)f(x_1)\}, \quad (4.1)$$

$$B_1 = \{z : x_2 > \varepsilon(\tau)f(x_1)\}, \quad B_2 = \{z : x_2 < \varepsilon(\tau)f(x_1)\}, \quad (4.2)$$

$$f(x_1) = a \cos(bx_1), \quad b = 2\pi/a, \quad \varepsilon(\tau) = A(\tau)/a, \quad A(0) = A_0,$$

where  $a$  and  $A$  are the perturbation wavelength and amplitude, respectively. Linear stability analysis aims to define the critical wavelength  $a_{cr}$  above which a perturbation amplitude will grow with time  $\tau$ .

The stress and strain of the elastic interface are related by the Gurtin–Murdoch relations [73; 74]:

$$\sigma_{tt}^s(\zeta) = \gamma^0 + (\lambda^s + 2\mu^s)\varepsilon_{tt}^s(\zeta), \quad \sigma_{33}^s(\zeta) = \gamma^0 + (\lambda^s + \gamma^0)\varepsilon_{tt}^s(\zeta), \quad \zeta \in S, \quad (4.3)$$

where  $\varepsilon_{tt}^s$  and  $\sigma_{tt}^s$  are the components of the interface strain tensor and interface stress tensor, respectively;  $\lambda_s$  and  $\mu_s$  are the interface Lamé constants, and  $\gamma_0$  is residual interface stress. It should be noted that simplified surface/interfacial elasticity relations are considered here, assuming that the surface energy does not depend on the gradient of the displacement vector.



Hooke's law for bulk isotropic materials in the case of plane strain can be written as

$$\begin{aligned}\sigma_{nn}(z) &= (\lambda_j + 2\mu_j)\varepsilon_{nn}(z) + \lambda_j\varepsilon_{tt}(z), \\ \sigma_{tt}(z) &= (\lambda_j + 2\mu_j)\varepsilon_{tt}(z) + \lambda_j\varepsilon_{nn}(z), \quad \sigma_{nt}(z) = 2\mu_j\varepsilon_{nt}(z), \\ \sigma_{33}(z) &= \frac{\lambda_j}{2(\lambda_j + \mu_j)} [\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z)], \quad z \in B_j, \quad j = \{1,2\},\end{aligned}\tag{4.4}$$

where  $\sigma_{nn}, \sigma_{tt}, \sigma_{nt}$  and  $\varepsilon_{nn}, \varepsilon_{tt}, \varepsilon_{nt}$  are the components of bulk Cauchy stress and strain tensors, respectively, defined in the local Cartesian coordinates  $(n, t)$  ( $\mathbf{n}$  and  $\mathbf{t}$  are normal and tangential to the interface),  $\lambda_j$  and  $\mu_j$  are the Lamé constants of the bulk phase  $B_j$ .

At infinity, the stresses  $\sigma_{\alpha\beta}$  ( $\alpha, \beta = \{1,2\}$ ) in the global coordinates  $(x_1, x_2)$  and the rotation angle  $\omega$  are specified as follows:

$$\lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{22} = \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{12} = \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \omega = 0, \quad \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{11} = \sigma_j, \quad j = \{1,2\}.\tag{4.5}$$

It should be noted that the longitudinal stresses  $\sigma_j$  may be related to the lattice mismatch between materials of the considered system.

According to the generalized Young–Laplace law, the conditions of mechanical equilibrium of undulated interface  $S$  are represented as [89]

$$\Delta\sigma(\zeta) = \sigma^+(\zeta) - \sigma^-(\zeta) = -\kappa(\zeta)\sigma_{tt}^s(\zeta) + i\frac{1}{h(\zeta)}\frac{d\sigma_{tt}^s(\zeta)}{dx_1}, \quad \zeta \in S,\tag{4.6}$$

where  $\sigma(z) = \sigma_{nn}(z) + i\sigma_{nt}(z)$  is the stress complex vector and  $\sigma^\pm = \lim_{z \rightarrow \zeta \pm i0} \sigma(z)$ ,  $\kappa$  and  $h$  are the local principal curvature and metric coefficient on the curved interface  $S$ , respectively.

Since that the interphase layer and the bulk materials are assumed to be coherently bonded, the complex displacement vector  $u = u_1 + iu_2$  is continuous at the interface:

$$\Delta u(\zeta) = u^+(\zeta) - u^-(\zeta) = 0, \quad \zeta \in S,\tag{4.7}$$

where  $u^\pm = \lim_{z \rightarrow \zeta \pm i0} u(z)$ ,  $u_1$  and  $u_2$  are the displacements along axes of the Cartesian coordinates  $(x_1, x_2)$ .

In order to minimize the total free energy, system change the relief shape via diffusion mass transfer. The diffusion flux in phase  $B_j$  is proportional to the gradient of the chemical potential  $\chi_j$  along the curved interface [30;88]

$$J_j(\zeta, \tau) = -\frac{D_j C_j}{k_b T} \frac{\partial \chi_j(\zeta, \tau)}{\partial s}, \quad (4.8)$$

where  $D_j$  and  $C_j$  are the interface self-diffusivity coefficient and the number of diffusion atoms of material per unit area for the phase  $B_j$ , respectively;  $k_b$  is the Boltzmann's constant,  $T$  is the absolute temperature, and  $s$  is arc length along  $S$ .

The chemical potential  $\chi_j$  is defined as the increase of free energy per unit of added volume [60;88]

$$\chi_j(\zeta, \tau) = [U_j(\zeta, \tau) + (-1)^{j+1} \kappa(\zeta, \tau) U_s(\zeta, \tau)] \Omega_j, \quad \zeta \in S, \quad j = \{1, 2\}. \quad (4.9)$$

In the Eq. (4.9)  $\Omega_j$  and  $U_j$  are an atomic volume and the strain energy density along the interface, respectively, for material  $B_j$ ,  $U_s$  is the interface energy density.

The change in the interface profile over time is described by the following equation [60;88]

$$\frac{\partial g(x_1, \tau)}{\partial \tau} = h(\zeta, \tau) \frac{\partial}{\partial s} \left[ \frac{r}{1+r} J_1(\zeta, \tau) - \frac{1}{r+1} J_2(\zeta, \tau) \right], \quad (4.10)$$

where  $g(x_1, \tau) = \varepsilon(\tau) f(x_1)$  and  $r = \mu_1/\mu_2$  is a stiffness ratio.

The diffusion fluxes  $J_j$  are obtained from (4.8), taking into account the Eq. (4.9)

$$J_j(\zeta, \tau) = -K_j \frac{\partial}{\partial s} [U_j(\zeta, \tau) + (-1)^{j+1} \kappa(\zeta, \tau) U_s(\zeta, \tau)], \quad K_j = \frac{D_j C_j \Omega_j^2}{k_b T}. \quad (4.11)$$

## 4.2 Linear analysis of interface morphological evolution

Since we consider a slightly perturbed interface, the components of stress and strain tensors of bulk and interface elasticity are specified in terms of the first-order approximation of boundary perturbation method (1.17) in this chapter. The interfacial energy is given by the formula (2.10).

The strain energy density along the interface  $U_j$  can be expressed as [94]

$$U_2 = \frac{1}{2} \left( \sigma_{tt(0)}^+ \varepsilon_{tt(0)} + \varepsilon \left[ \sigma_{nn(1)}^+ \varepsilon_{nn(0)} + \sigma_{tt(0)}^+ \varepsilon_{tt(1)} + \sigma_{tt(1)}^+ \varepsilon_{tt(0)} \right] \right), \quad (4.12)$$

$$U_2 = \frac{1}{2} \left( \sigma_{tt(0)}^- \varepsilon_{tt(0)} + \varepsilon \left[ \sigma_{nn(1)}^- \varepsilon_{nn(0)} + \sigma_{tt(0)}^- \varepsilon_{tt(1)} + \sigma_{tt(1)}^- \varepsilon_{tt(0)} \right] \right).$$

The local curvature  $\kappa$  and the metric coefficient  $h$  included in the formulas (4.6) and (4.9) in the first-order approximation of boundary perturbation method take the form (1.19).

Substituting the Eqs. (1.19), (4.11) – (4.12) into (4.10), we obtain an ordinary differential equation describing the amplitude change of interface relief with time [132]

$$\begin{aligned} \frac{dA(\tau)}{d\tau} f(x_1) = & \frac{A(\tau)}{2(1+r)} \frac{d^2}{dx_1^2} \left\{ K_1 r \left[ \sigma_{nn(1)}^+ \varepsilon_{nn(0)} + \sigma_{tt(0)}^+ \varepsilon_{tt(1)}(x_1) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \sigma_{tt(1)}^+(x_1) \varepsilon_{tt(0)} \right] - K_2 \left[ \sigma_{nn(1)}^- \varepsilon_{nn(0)} + \sigma_{tt(0)}^- \varepsilon_{tt(1)}(x_1) + \sigma_{tt(1)}^-(x_1) \varepsilon_{tt(0)} \right] + \right. \\ & \left. + \left[ \gamma^0 (1 + \varepsilon_{tt(0)}^s(z, \tau)) + \frac{1}{2} (\lambda^s + 2\mu^s - \gamma^0) \varepsilon_{tt(0)}^{s2}(z, \tau) \right] (K_1 + K_2) f''(x_1) \right\}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

In order to solve the Eq. (4.13), we need to define the components of stress and strain tensors for surface and bulk phases. to this end, it is necessary to solve the boundary value problem of two-component elastic plane with perturbed interface (4.1)–(4.7).

According to [17;89], the stress tensor components are expressed through the following representations:

$$\begin{aligned} \sigma_{nn}(z) + i\sigma_{nt}(z) &= \Phi_j(z) + \overline{\Phi_j(z)} - \\ &- \left[ \Upsilon_j(\bar{z}) + \overline{\Phi_j(z)} - (z - \bar{z}) \overline{\Phi'_j(z)} \right] e^{-2i\alpha}, \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z) = 4\text{Re}\Phi_j(z), \quad z \in B_j, \quad j = \{1,2\},$$

where  $\Phi_j$ ,  $\Upsilon_1$  and  $\Upsilon_2$  are the functions holomorphic in  $B_i$ ,  $\widetilde{B}_1 = \{z : x_2 > -\varepsilon f(x_1)\}$  and  $\widetilde{B}_2 = \{z : x_2 < -\varepsilon f(x_1)\}$ , respectively, and  $\alpha$  is the angle between axes  $t$  and  $x_1$ .

The values of  $\Phi_j$  and  $\Upsilon_j$  at infinity are follows from Eq. (4.5) and (4.14):

$$\lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \Phi_j(z) = \lim_{x_2 \rightarrow +\infty} \Upsilon_j(z) = \sigma_j^0/4.$$

The complex potentials  $\Phi_j$  and  $\Upsilon_j$  and the interfacial stress  $\sigma_{tt}^s$  are represented as follows [131]:

$$\Phi_j(z) = \Phi_{j(0)}(z) + \varepsilon\Phi_{j(1)}(z), \quad \Upsilon_j(z) = \Upsilon_{j(0)}(z) + \varepsilon\Upsilon_{j(1)}(z),$$

$$\sigma_{tt}^s(\zeta) = \sigma_{tt(0)}^s(\zeta) + \varepsilon\sigma_{tt(1)}^s(\zeta).$$

We expand the boundary values of the functions  $\Phi_{j(m)}$ ,  $\Upsilon_{j(m)}$  and  $\sigma_{tt(m)}^s$  into the first-order Taylor polynomial in the vicinity of the line  $x_2 = 0$ , considering  $x_1$  as a parameter

$$\Psi_{(m)}(\zeta) = \Psi_{(m)}(x_1) + i\varepsilon f(x_1)\Psi'_{(m)}(x_1), \quad m = \{0,1\},$$

where  $\Psi_{(m)}$  is any of the above mentioned functions.

Based on the solutions of the Riemann–Hilbert problems on the jumps of analytical functions at the line  $x_2 = 0$ , the complex potentials are obtained as it follows [89]:

$$\begin{cases} \Phi_{1(m)}(z) = -\Upsilon_{2(m)}(z) + \Sigma_m(z) + O_m^1, & \text{Im } z > 0, \\ \Upsilon_{1(m)}(z) = -\Phi_{2(m)}(z) + \Sigma_m(z) + O_m^1, & \text{Im } z < 0, \end{cases}$$

$$\begin{cases} \Upsilon_{2(m)}(z) = \frac{\mu_2 \varkappa_1 \Sigma_m(z) + V_m(z)}{\mu_1 + \mu_2 \varkappa_1} + O_m^2, & \text{Im } z > 0, \\ \Phi_{2(m)}(z) = \frac{\mu_2 \Sigma_m(z) - V_m(z)}{\mu_2 + \mu_1 \varkappa_2} + O_m^2, & \text{Im } z < 0, \end{cases} \quad (4.15)$$

where

$$\Sigma_m(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i\sigma_{tt(m)}^s(t)}{z-t} dt + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F_m^1(t)}{z-t} dt, \quad V_m(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F_m^2(t)}{z-t} dt,$$

$\varkappa_j = 4\nu_j - 3$ ,  $\nu_j$  is the Poisson ratio of elastic domain  $B_j$ ;  $O_0^j = \sigma_j^0/4$ ;  $O_1^j = 0$ ;  $F_0^j = 0$ , functions  $F_1^j = 0$  are known and can be found in [89].

The solution of the problem in the zero-order approximation of the boundary perturbation method corresponds to the joint deformation of two half-planes with a planar interface  $S_{(0)}$ . In this case, the complex potentials are constant in each half-plane. Then, taking into account (4.2), we arrive to

$$\Phi_{j(0)}(z) = \Upsilon_{j(0)}(z) = \sigma_j/4. \quad (4.16)$$

Then, we can write the surface and bulk stress tensor components in the zero-order approximation of the boundary perturbation method

$$\sigma_{tt(0)}^s(x_1) = \gamma^0 + \frac{M(\varkappa_2 + 1)\sigma_2}{8\mu_2}, \quad (4.17)$$

$$\sigma_{11(0)}(z) = \sigma_j, \quad \sigma_1 = \frac{\mu_1(\varkappa_2 + 1)}{\mu_2(\varkappa_1 + 1)}\sigma_2, \quad z \in B_j, \quad j = \{1, 2\}.$$

For the first-order approximation, the interfacial stress  $\sigma^s$  is derived in trigonometric form

$$\sigma_{tt(1)}^s(x_1) = P \sin(bx_1) + Q \cos(bx_1). \quad (4.18)$$

Taking into account the properties of Cauchy-type integrals, we define the unknown coefficients  $P$  and  $Q$  from the Eq. (4.15)

$$P = \frac{Mab^2 \left[ (L_1 + L_2)(1 - r)\sigma_2 - (L_1 - L_2)\sigma_{tt(0)}^s b \right]}{4\mu_2 + M(L_1 + L_2)b}, \quad Q = 0, \quad (4.19)$$

$$L_1 = \frac{\varkappa_1}{(r + \varkappa_1)}, \quad L_2 = \frac{\varkappa_2}{(1 + r\varkappa_2)}.$$

The complex potentials take the form [89]:

$$\begin{cases} \Phi_{1(1)} = \frac{rL_1}{2} \left[ P + ba\{\sigma_2^0 L_4 + b\sigma_{tt(0)}^s\} \right] e^{ibz}, & \text{Im } z > 0, \\ \Upsilon_{1(1)} = \frac{rL_2}{2} \left[ P - ba\{\sigma_2^0 L_3 - b\sigma_{tt(0)}^s\} \right] e^{-ibz}, & \text{Im } z < 0, \end{cases} \quad (4.20)$$

$$\begin{cases} \Upsilon_{2(1)} = \frac{L_1}{2} \left[ P - ba\{\sigma_2^0(1 - rL_5) - b\sigma_{tt(0)}^s\} \right] e^{ibz}, & \text{Im } z > 0, \\ \Phi_{2(1)} = \frac{L_2}{2} \left[ P - ba\{\sigma_2^0(1 - r) + b\sigma_{tt(0)}^s\} \right] e^{-ibz}, & \text{Im } z < 0, \end{cases}$$

where

$$L_3 = -\frac{(\kappa_2 + 1)(r^2\kappa_2 + r - \kappa_1 - 1)}{(\kappa_1 + 1)\kappa_2},$$

$$L_4 = \left[ \frac{r(\kappa_2 + 1)}{\kappa_1 + 1} - \frac{\kappa_1^2 + \kappa_2}{\kappa_1(\kappa_2 + 1)} \right] \kappa_1 + \frac{r^2(\kappa_2 + 1)}{\kappa_1 + 1} - 1, \quad L_5 = \frac{\kappa_1^2 + \kappa_2}{\kappa_1(\kappa_2 + 1)}.$$

Then, one can obtain the components of stress and strain tensors from Eqs. (4.4) and (4.14), respectively.

### 4.3 Numerical results

Taking into account the form of initial interface undulation and integrating linearized evolution equation (4.13) over the time, we obtain the governing equation which gives the exponential growth or decay of amplitude  $A$  with time:

$$\ln \left( \frac{A(\tau)}{A_0} \right) = R_1 \{ (rK_1R_{21} + K_2R_{22})\sigma_0 - (rK_1R_{31} + K_2R_{32})\gamma^0 \} \tau, \quad (4.21)$$

where

$$\begin{aligned} R_1 &= \frac{\sigma_2^0 \pi^3}{8a^3 \mu_2^2 ((L_1 + L_2)M\pi + 2\mu_2 a)(1+r)}, \\ R_{21} &= -M^2 r L_2 (3L_1 + L_2) \pi^2 (\varkappa_2 + 1)^2 - \\ &\quad - Mr \mu_2 \pi a (\varkappa_2 + 1) \{ 3(2 - 2r + 2L_4) L_1^2 + [(8 - 8r - 2L_3 + 6L_4) L_2 + \\ &\quad + 3\varkappa_2 + 4L_6 + 3] L_1 + [(-2r - 2L_3 + 2) L_2 + \varkappa_2 - 4L_6 + 1] L_2 \} - \\ &\quad - 4r \mu_2^2 a^2 \{ [4(r - 1) L_6 + 3L_4 (\varkappa_2 + 1)] L_1 + [4(r - 1) L_6 - L_3 (\varkappa_2 + 1)] L_2 \}, \\ R_{22} &= -2M^2 L_1 L_2 \pi^2 (\varkappa_2 + 1)^2 + Ma \mu_2 \pi (\varkappa_2 + 1) \{ 2r(L_5 - 1) L_1^2 + \\ &\quad + (2r(L_5 - 1) L_2 + \varkappa_2 + 5) L_1 - (3\varkappa_2 + 7) L_2 \} + \\ &\quad + 4\mu_2^2 a^2 \{ [(L_5 \varkappa_2 + L_5 + 4)r - \varkappa_2 - 5] L_1 + (3\varkappa_2 + 7) L_2 (r - 1) \}, \\ R_{31} &= 8Mr \pi^2 \mu_2 L_2 (3L_1 + L_2) (\varkappa_2 + 1) + \\ &\quad + 8r \pi \mu_2^2 a \{ (4L_6 + 3\varkappa_2 + 3) L_1 - (4L_6 - \varkappa_2 - 1) L_2 \}, \\ R_{32} &= +16M (\varkappa_2 + 1) \pi^2 L_1 L_2 \mu_2 - \\ &\quad - 8\pi \mu_2^2 a \{ (L_1 - 3L_2) \varkappa_2 + 5L_1 - 7L_2 \}. \end{aligned}$$

It should be noted, that the Eq. (4.21) reduces to the (2.33) describing the free solid surface amplitude change when  $r = 0$ .

As an example, we consider a substrate covered by a film coating whose thickness is much greater than the interface undulation wavelength. For simplicity, the metal-on-metal heteroepitaxial structure is considered with the equal Poisson's ratios, i.e.  $\nu_1 = \nu_2$ . This assumption allows us to analyze the effect of the substrate through the only one parameter, coating-to-substrate stiffness ratio  $r$ . The bulk elastic parameters of the lower layer correspond to aluminum:  $\lambda_2 = 58.17$  GPa and  $\mu_2 = 26.13$  GPa. The interface effect is presented by the parameters  $\lambda^s = 6.851$  N/m,  $\mu^s = -0.376$  N/m (i.e.,  $M = 6.099$  N/m), which were determined for free aluminum surface by atomistic simulations based on the embedded atom method in [105]. It should be noted, that surface elastic properties depend on the crystallographic orientation of surface as well as other factors [126]. It is recognized that the interface properties additionally should depend on properties of both bonded materials, and varying one of these materials will lead to varying of the interface properties. However, authors studying elastic fields in composite materials with the interface effect generally assume that the corresponding interface parameters could be specified by surface parameters [63; 89; 106; 111; 125; 127; 131; 138]. According to another approach, the interface is considered as the assembly of two surface phases belonging to bonded materials [44; 46]. Consequently, the interface parameters are treated as the effective parameters of the assembly of these two surface layers. Since the numerical results in the presented work are qualitative and the effect of interface elasticity is analyzed through variation of coating-to-substrate stiffness ratio and interface stiffness [94; 132].

The normalized amplitude change  $A(\tau)/A_0$  as a function of wavelength  $a$  from Eq. (4.13) is plotted in Fig. 4.2 for different coating-to-substrate mobility ratios  $K = K_1/K_2 = \{0.5; 2\}$  (red and blue lines, respectively), coating-to-substrate stiffness ratios  $r = \{0.1; 0.3\}$  (solid and dashed line, respectively) and interface stiffness  $M = 6.099$  (a), and  $M = 60$  (b). The longitudinal stress in substrate is taken equal to  $\sigma_2^0 = 1$  GPa. The intersection of lines with abscissa gives the critical wavelength values  $a_{cr}$  corresponding to the state of equilibria. The amplitude of interface undulation decrease with time when  $0 < a < a_{cr}$ . Undulations with wavelengths  $a > a_{cr}$  are unstable and their amplitude increase with time.



The maximum amplitude change occurs at a wavelength  $a_{max}$  which defines the maximally unstable modes. The corresponding values of  $a_{cr}$  and  $a_{max}$  are given in the Tables 4.1 and 4.2, respectively.

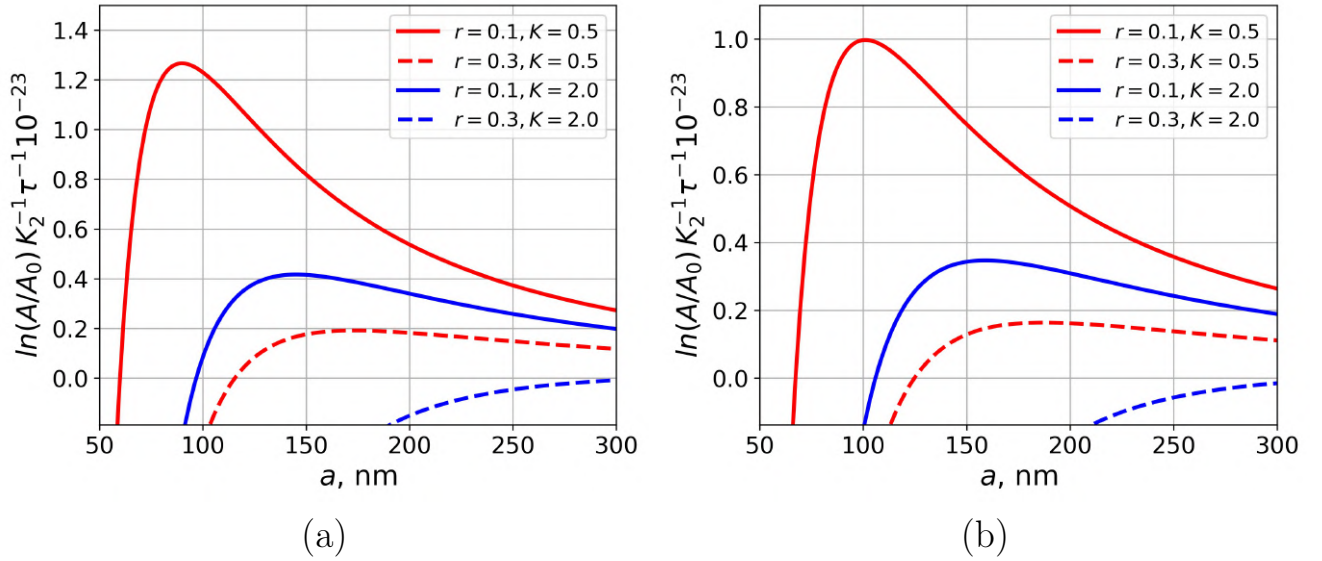


Figure 4.2 – The dependence of normalized amplitude change  $A(\tau)/A_0$  on the perturbation wavelength  $a$  for  $M = 6.099$  (a), and  $M = 60$  (b)

Table 4.1

The critical wavelength  $a_{cr}$  for various system parameters

$M, \text{N/m}$	6.099	6.099	60	60
$r$	0.1	0.3	0.1	0.3
$K$	$a_{cr}, \text{nm}$			
0.5	59.9	115.5	67.3	124.7
1.0	70.9	161.5	78.9	172.7
2.0	96.7	322.5	105.9	340.5

Table 4.2

The wavelength  $a_{max}$  for various system parameters

$M, \text{N/m}$	6.099	6.099	60	60
$r$	0.1	0.3	0.1	0.3
$K$	$a_{max}, \text{nm}$			
0.5	89.9	173.1	101.1	187.1
1.0	106.5	242.3	118.5	259.1
2.0	145.1	483.7	158.9	510.9

One can see from presented results, the increasing of interface stiffness  $M_s$ , stiffness and mobility ratios  $r$  and  $K$ , respectively, lead to increasing of critical wavelength  $a_{cr}$ . Below, we analyze the effects of these parameters more carefully.

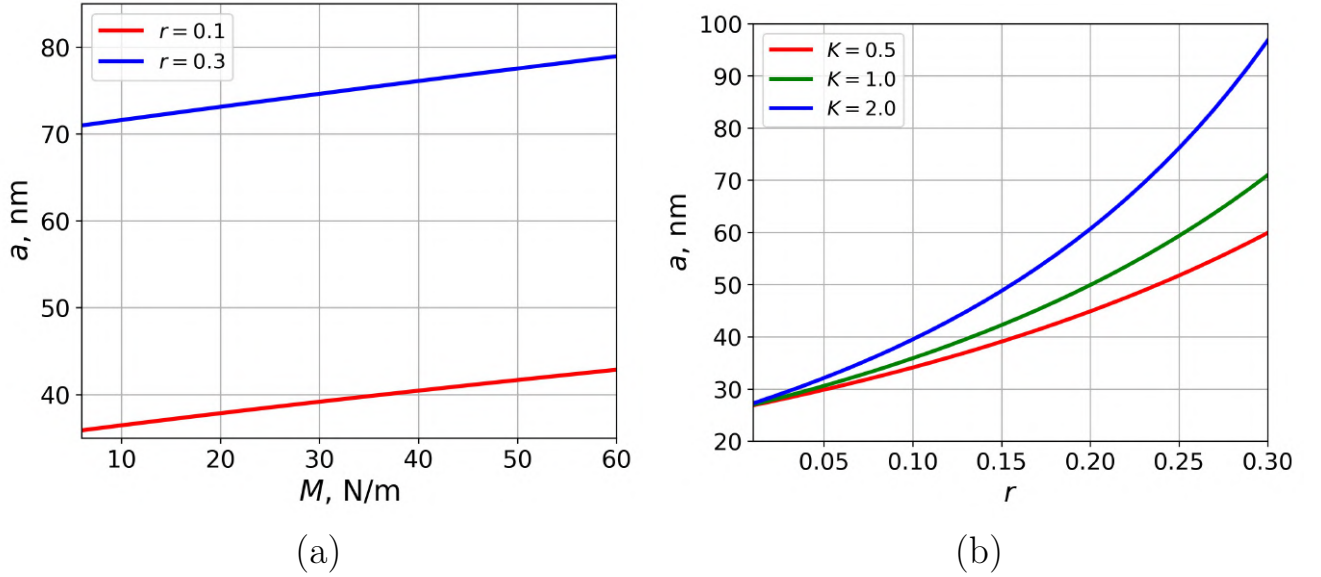


Figure 4.3 — The dependence of critical undulation wavelength  $a_{cr}$  on interface stiffness  $M$  (a) and coating-to-substrate stiffness ratio  $r$  (b)

Effect of the interface stiffness  $M$  of interface in heteroepitaxial system for different stiffness ratio  $r = \{0.1; 0.3\}$  (red and blue lines, respectively),  $K = 1$  and  $\sigma_2 = 1$  GPa is shown in the Fig. 4.3 a. As it can be seen from the figure, the critical values increase linearly with increasing of relative stiffness. When increasing the interface stiffness  $M$  from 6 N/m to 60 N/m, the critical values increased by 20% for  $r = 0.1$  and 11% for  $r = 0.3$ ; the relative difference between the critical wavelength  $a_{cr}$  corresponding to  $r = 0.1$  and  $r = 0.3$  decreased from 98% to 84%.

The Fig. 4.3 b demonstrates the dependence of critical wavelength  $a_{cr}$  on coating-to-substrate stiffness ratio  $r$  for different mobility ratios  $K = \{0.5; 1; 2\}$  (red, green and blue lines, respectively). It is found that the critical wavelengths increase with increasing of stiffness ratio. Thus, the influence of the coating-to-substrate stiffness ratio increases with an increasing the mobility ratio.

It should be noted that the critical wavelength tends to the value corresponding to stability of nanopatterned free solid surface (see Chapter 2), when the coating-to-substrate stiffness ratio  $r$  tends to zero.

The dependence of critical undulation wavelength  $a_{cr}$  on interface residual stress  $\gamma^0$  and longitudinal stress  $\sigma_2$  for different stiffness ratio  $r = \{0.1; 0.3\}$  (solid

and dashed lines, respectively) is shown in the Fig. 4.4. The critical wavelengths increase with an increase of the residual interfacial stress and a decrease of the longitudinal stress.

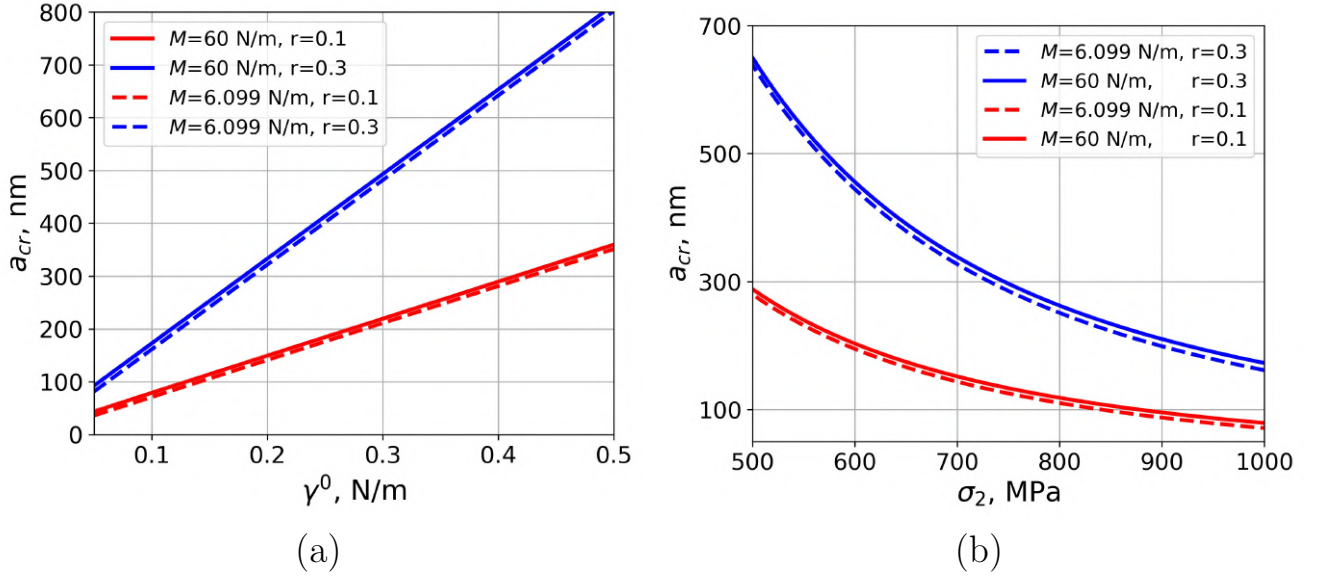


Figure 4.4 — The dependence of critical undulation wavelength  $a_{cr}$  on interface residual stress  $\gamma^0$  (a) and longitudinal stress  $\sigma_2$  (b)

#### 4.4 Chapter conclusions

This chapter presents a theoretical approach to morphological instability analysis of the coherent interphase boundaries in strained heterostructures. A novel feature of the present study is the implementation of constitutive equations of interface elasticity, in the framework of which the interphase domain is modelled as a negligibly thin layer adhering to the bulk phases. A two-component plane is considered as a model of a heteroepitaxial system and the interphase boundary is described by a sinusoidal function. Taking into account the fact that the atomic arrangement of solid-solid interfaces is thermodynamically unstable under certain conditions, the evolution equation describing the kinetics of the relief formation is obtained. It was assumed that the rate of relief growth depends on the field of elastic strain energy and surface stresses. To define the stress–strain state of the heteroepitaxial system, the asymptotic approach of Grekov and Kostyrko [89] is

used. The solution of the evolution equation, taking into account the stress state, allowed us to find the parameters for which the interface relief is stable.

Based on the obtained solution, the influence of the physical and geometric parameters of the problem is analyzed. The influence of stiffness ratio, interface stiffness, residual surface stress, longitudinal stress and mobility ratio is investigated. The following conclusions are formulated:

- critical wavelength of initial interface perturbation increases with increasing of interface stiffness, coating-to-substrate stiffness and mobility ratio, as well as with decreasing of longitudinal stress;
- the influence of coating-to-substrate stiffness ratio on critical wavelength increases with increasing of mobility ratio;
- the effect of longitudinal stress on critical wavelength increases with increasing of parameter;
- the influence of residual interfacial stress increases with increasing of coating-to-substrate stiffness ratio, and marginally depend on the interface stiffness;
- the effect of coating-to-substrate stiffness ratio on the interface morphological stability increases when the mobility ratio increases;
- the impact of interface stiffness increases with increasing of longitudinal stress and with decreasing of residual interface stress.

## Conclusion

The presented thesis is a further development of research aimed at the study of the processes leading to the formation of topological defects on the free and interfacial surfaces of layered structures. In this study, the evolution of the surface relief was considered as a change in the initial undulation amplitude via diffusional mass transport. It was assumed that to minimize the free energy, the atoms on the surface can move along it, and the atomic flux is proportional to the gradient of the chemical potential. The uniform distribution of the chemical potential is used as a condition for the thermodynamic equilibrium of the surface. The variation of the chemical potential along the surface is related to the variation of the stress field, as well as the curvature and surface energy. To find the stress–strain state, the approach described in [64;65;89;92] was used. In this dissertation, a number of new problems have been solved

- the approach for analysis of the morphological instability of a multilayer film surface is developed, where surface stress are taken into account based on the Shuttleworth–Herring relation,
- the explicit dependence of nanopatterned solid surface amplitude on perturbation wavelength, the longitudinal stress and bulk and surface elastic properties is obtained;
- the method for analyzing the influence of the film thickness as well as other physical and geometric parameters of the film coating on the formation of stable periodic structures at the film surface is proposed;
- the explicit dependence of heteroepitaxial interface undulation amplitude change on initial undulation wavelength, mobility ratio, elastic properties of the bulk and interface domains is derived.

It should be noted that in the analysis of the morphological stability of the surface of a multilayer film coating in Chapter 1, the surface energy was considered constant. However, it is necessary to take into account the change in surface energy due to deformation at the nanoscale. Therefore, in the study of nanostructured solid surfaces/interfaces in Chapters 2–4, the surface energy was calculated using the Gurtin–Murdoch surface/interface elasticity model. According

to this approach, the surface layer and interphase domain were modeled by elastic membranes, coherently coupled with the bulk phases. According to the present study, the following conclusions are formulated:

- the critical wavelength of initial interface perturbation increases with increasing of surface/interface stiffness and residual surface/interface stress, as well as with decreasing of longitudinal stress;
- the impact of surface/interface elasticity increases when the residual surface/interface stress decreases and the longitudinal stress increases;
- the morphological stability of the film surface almost independent of the interface film–substrate elastic parameters;
- the impact of the lower layers on the morphological stability of multilayered film surface decreases with an increasing of top film thickness;
- the film coating thickness, exceeding which it is possible to ignore the substrate, increases with increasing surface stiffness and surface residual stress;
- the effect of the stiffness ratio on the morphological stability of heteroepitaxial interface increase with increasing mobility ratios.

In the future, it is planned to expand the developed models for studying the self-organization of surface and interfaces in multilayer ultrathin film coatings. Also, it is planned to take into account the surface bending stiffness in the evolution equation. For this purpose, the Stegman–Ogden surface elasticity model will be used to formulate the boundary conditions. It should be noted that geometrically linear analysis does not allowed us to analyze the change in the shape of the surface profile in this study. To study the dynamics of surface rearrangement, it is necessary to take into account the nonlinear terms in the evolution equations. To do this, the second approximation the boundary perturbation method will be taken into account.

## References

1. Geguzin Y. E. Diffuzionnye processy na poverhnosti kristalla [Diffusion processions on the crystal surface]. Moscow: Science, 1984. 124 p. (in Russian)
2. Grekov M. A. Singulyarnaya ploskaya zadacha teorii uprugosti [Singular plane problem of elasticity theory]. Saint Petersburg: SPBU Publ., 2001. 192 p. (in Russian)
3. Grekov M. A., Kostyrko S. A. Mnogoslojnoe plenochnoe pokrytie pod dejstviem periodicheskoy sistemy poverhnostnyh sosredotochennyh sil [Multilayer film coating influenced by periodic system of surface forces] // Transactions of the Krylov State Research Centre. 2010. Vol. 53. P. 29–36. (in Russian)
4. Grekov M. A., Kostyrko S. A. Poteria ustojchivosti ploskoj formy plenochnogo pokrytiya pri poverhnostnoj diffuzii [Instability of fiat surface of a film coating due to surface diffusion] // Vestnik Sankt-Peterburgskogo Universiteta. Seriya 10. 2007. No 1. P. 46–54. (in Russian)
5. Grekov M. A., Kostyrko S. A. Formirovanie rel'efa poverhnosti plenochnogo pokrytiya pri poverhnostnoj i objemnoj diffuzii [Generation of a relief on the surface of a film coating under the surface and volume diffusion] // Vestnik Sankt-Peterburgskogo Universiteta. Seriya 1. 2008. No 1. P. 106–113. (in Russian)
6. Grekov M. A., Makarov S. N. Dvuhkomponentnaya uprugaya sreda s volnistoj mezhfaznoj poverhnost'yu [Two-component elastic medium with wavy interface] // Nonlinear problems of mechanics and physics of a deformable solid. Saint Petersburg: SPBU Publ., 2003. No 7. P. 275–285. (in Russian)
7. Shugurov A. R. Vliyanie krivizny granicy razdela plenka/podlozhka na zakonomernosti deformacii i razrusheniya tonkih metallicheskih plenok i keramicheskikh pokrytij pri vneshnih vozdeystviyah [Influence of the curvature of the film/substrate interface on the laws of deformation and destruction of

- thin metal films and ceramic coatings under external influences]: dis. ... d-r. f.-m. nauk. Tomsk, 2016. (in Russian)
8. Kostyrko S.A. Vliyanie formy vozmushcheniya na ustojchivost' ploskoj poverhnosti plenochnogo pokrytiya pri diffuzionnyh processah [Effect of the undulation shape on the flat film surface stability under diffusion processes] // Vestnik Sankt-Peterburgskogo Universiteta. Seriya 10. 2011. No 3. P. 101–111. (in Russian)
  9. Kostyrko S.A., Shuvalov G.M. Vliyanie poverhnostnogo napryazheniya na morfologicheskuyu ustojchivost' mnogoslojnogo plenochnogo pokrytiya pri poverhnostnoj diffuzii [Influence of surface stress on the morphological stability of a multilayer film coating during surface diffusion] // Molodoy uchenyy. 2015. Vol. 9 (89). P. 14–17. (in Russian)
  10. Kostyrko S.A., Shuvalov G.M. Vliyanie poverhnostnoj diffuzii na morfologicheskuyu ustojchivost' poverhnosti mnogoslojnogo plenochnogo pokrytiya [Influence of surface diffusion on morphological stability of multilayer film surface] // Control processes and stability. 2015. Vol. 2. P. 190–195. (in Russian)
  11. Kostyrko S.A., Shuvalov G.M. Vliyanie diffuzionnyh processov na samoorganizaciyu poverhnosti mnogoslojnogo plenochnogo pokrytiya [The influence of diffusion processes on the surface self-organization in the multilayer film coating] // Science Vector of Togliatti State University. 2017. No 42. P. 46–50. (in Russian)
  12. Kostyrko S.A., Shuvalov G.M. Vliyanie uprugih svojstv poverhnosti tverdogo tela na process ee reorganizacii pod dejstviem napryazhenij [Effect of surface elasticity on reconstruction of stressed solid surface] // Control processes and stability. 2018. Vol. 5. P. 224–228. (in Russian)
  13. Kostyrko S.A., Shuvalov G.M. Obrazovanie nanorazmernogo rel'efa na mezhfaznoj granice geteroepitaksial'nogo materiala [Nanoscale relief formation at heteroepitaxial material interface] // Control processes and stability. 2019. Vol. 6. P. 143–147. (in Russian)



14. Lukyanenko A. S., Betekhtin V. I., Gorobey N. N. et al. Formirovaniye rel'yefa mekhanicheskoi deformiruyemoy poverkhnosti kak kanal relaksatsii uprugoy energii [Formation of the relief of a mechanically deformed surface as a channel for relaxation of elastic energy] // XIV Peterburgskiyechteniya po problemam prochnosti. Sankt-Peterburg, 2003. P. 171–172. (in Russian)
15. Morozov N. F., Paukshto M. V., Tovstik P. E. O vliyaniy ob'yemnoy diffuzii na poteryu ustoychivosti poverkhnostnogo sloya pri termonagruzhении [On the influence of volumetric diffusion on the loss of stability of the surface layer under thermal loading] // Izvestiya Rossiyskoy akademii nauk. Mekhanika tverdogo tela. 1999. No 4. P. 97–101. (in Russian)
16. Morozov N. F., Paukshto M. V., Tovstik P. E. O deplanatsii grani kristalla v usloviyakh poverkhnostnoy diffuzii [On the deplanation of a crystal face under conditions of surface diffusion] // Izvestiya Rossiyskoy akademii nauk. Mekhanika tverdogo tela. 1999. No 2. P. 53–57. (in Russian)
17. Muskhelishvili N. I. Nekotoryye osnovnyye zadachi matematicheskoy teorii uprugosti [Some basic problems of the mathematical theory of elasticity]. Moscow: Science, 1966. 707 p. (in Russian)
18. Novozhilov V. V. Teoriya uprugosti [Theory of elasticity]. Saint Petersburg: Sudpromgiz, 1958. 370 p. (in Russian)
19. Shuvalov G. M., Kostyrko S. A. Obrazovanie defektov poverhnosti mnogoslojnogo plnochnogo pokrytiya pri diffuzionnyh processah [Surface defect formation in multilayer film coating due to diffusion processes] // Control processes and stability. 2014. Vol. 1. P. 169–174. (in Russian)
20. Shuvalov G. M., Kostyrko S. A. Vliyanie formy vozmushcheniya na morfologicheskuyu ustojchivost' poverhnosti mnogoslojnogo plnochnogo pokrytiya pri poverhnostnoj diffuzii [Effect of perturbation form on morphological stability of multilayer film surface during surface diffusion] // Control processes and stability. 2016. Vol. 3. P. 301–305. (in Russian)
21. Shuvalov G. M., Kostyrko S. A. Vtoroe priblizhenie metoda vozmushchenij v zadache o tverdom tele so slaboiskrivlennoj granicej [Second-order perturbation

- method for elastic solid with slightly curved boundary] // Control processes and stability. 2017. Vol. 4. P. 256–260. (in Russian)
22. Shuvalov G.M., Vliyanie uprugih svoystv geteroepitaksial'noj sistemy na ustojchivost' granicy soedineniya dvuh materialov [Effect of the heteroepitaxial system elastic properties on interface stability] // Control processes and stability. 2020. Vol. 7. P. 133–137. (in Russian)
  23. Altenbach H., Eremeyev V., Morozov N. Surface viscoelasticity and effective properties of thin-walled structures at the nanoscale // International Journal of Engineering Science. 2012. Vol. 59. P. 83–89.
  24. Andrews A. M., Speck J. S., Romanov A. E., Bobeth M., Pompe W. Modeling crosshatch surface morphology in growing mismatched layers // Journal of Applied Physics. 2002. Vol. 91. № 4. P. 1933–1943.
  25. Angheluta L., Jettestuen E., Mathiesen J. Thermodynamics and roughening of solid-solid interfaces // Physical Review E. 2009. Vol. 79. P. 031601.
  26. Angheluta L., Jettestuen E., Mathiesen J., Renard F., Jamtveit B. Stress-driven phase transformation and the roughening of solid-solid interfaces // Physical Review Letters. 2008. Vol. 100. P. 096105.
  27. Angheluta L., Mathiesen J. Thermodynamics of stressed solids: Slow deformation and roughening of material interfaces // The European Physical Journal Special Topics. 2009. Vol. 178. P. 123-132.
  28. Aqua J.-N., Favre L., Ronda A., Benkouider A., Berbezier I. Configurable Compliant Substrates for SiGe Nanomembrane Fabrication // Crystal Growth and Design. 2015. Vol. 15. P. 3399–3406.
  29. Aqua J.-N., Xu X. Growth of quantum dots on pit-patterns // Surface Science. 2015. Vol. 639. P. 20–24.
  30. Asaro R. J., Tiller W. A. Interface morphology development during stress-corrosion cracking: Part I. Via surface diffusion // Metallurgical and Materials Transactions B. 1972. Vol. 3. P. 1789–1796.

31. Benveniste Y., Miloh T. Imperfect soft and stiff interfaces in two-dimensional elasticity // *Mechanics of Materials*. 2001. Vol. 33(6). P 309–323.
32. Berrehar J. et. al. Surface patterns on single-crystal films under uniaxial stress: Experimental evidence for the Grinfeld instability // *Physical Review B*. 1992. Vol. 46. P. 13487–13495.
33. Betehtin V. I., Gorobey N. N., Korsukov V. E., Lukyanenko A. S., Obidov B. A. Peculiarities of the defect formation on deformed Si(111) surface // *Proceedings of Sixth International Workshop on Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and Engineering*. 2003. P. 5127.
34. Bochkarev A. O., Grekov M. A. Influence of surface stresses on the nanoplate stiffness and stability in the Kirsch problem // *Physical Mesomechanics*. 2019. Vol. 22(3). P. 209–223.
35. Burger M., He L., Schönlieb C.-B. Cahn-Hilliard inpainting and a Generalization for Grayvalue Images // *SIAM Journal on Imaging Sciences*. 2009. Vol. 2. P. 1129–1167.
36. Cahn J. W. On spinodal decomposition // *Acta Metallurgica*. 1961. Vol. 9(9). P. 795–801.
37. Cahn J. W., Larche F. Surface stress and the chemical-equilibrium of small crystals. II. Solid particles embedded in a solid matrix // *Acta Metallurgica*. 1982. Vol. 30. P. 51–56.
38. Cammarata R. C.: Surface and interface stress effects in thin films // *Progress in Surface Science*. 1994. Vol. 46(1). P. 1–38.
39. Chiu C.-H., Poh C. T., Huang, Z. Morphological stability of the Stranski-Krastanow systems under an electric field // *Applied Physics Letters*. 2006. Vol. 88. P. 241906.
40. Colin J., Grilhe J., Junqua N. Morphological instabilities of a stressed pore channel // *Acta Materialia*. 1997. Vol. 45, P. 3835–3841.

41. Colin J., Thilly L., Lecounturier F., Peyrade J. P., Grilhé J., Askenazy, S. Axial and radial interface instabilities of copper/tantalum cylindrical conductors // *Acta Metallurgica*. 1999. Vol. 47. P. 2761–2768.
42. Collins J. B., Levine H. Diffuse interface model of diffusion-limited crystal growth // *Physical Review B*. 1985. Vol. 31(9). P. 6119(R).
43. Cotta M. A. Quantum Dots and Their Applications: What Lies Ahead? // *ACS Applied Nano Materials* 2020. 2020. Vol. 3(6). P. 4920–4924.
44. Dai M., Gharahi A., Schiavone P. Analytic solution for a circular nano-inhomogeneity with interface stretching and bending resistance in plane strain deformations // *Applied Mathematical Modelling*. 2018. Vol. 55. P. 160–170.
45. Dai M., Li M., Schiavone P. Plane deformations of an inhomogeneity-matrix system incorporating a compressible liquid inhomogeneity and complete Gurtin–Murdoch interface model // *Journal of Applied Mechanics*. 2018. Vol. 85(12). P. 121010.
46. Dai M., Schiavone P. Edge dislocation interacting with a Steigmann–Ogden interface incorporating residual tension // *International Journal of Engineering Science*. 2019. Vol. 139. P. 62–69.
47. Du D., Srolovitz D. Electrostatic field-induced surface instability // *Applied Physics Letters*. 2004. Vol. 85. P. 4917.
48. Duan H. L., Wang J., Karihaloo B. L. Theory of elasticity at the nanoscale // *Advances in Applied Mechanics*. 2008. Vol. 42. P. 1–68.
49. Duan H. L., Weissmüller J., Wang Y. Instabilities of core–shell heterostructured cylinders due to diffusions and epitaxy: spheroidization and blossom of nanowires // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2008. Vol. 56. P. 1831–1851.
50. Eaglesham D. J., Cerullo M. Dislocation-free Stranski–Krastanov growth of Ge on Si // *Physical Review Letters*. 1990. Vol. 64. № 16. P. 1943.

51. Eremeyev V.A. On effective properties of materials at the nano- and microscales considering surface effects // *Acta Mechanica*. 2016. Vol.227. P.29–42.
52. Fischer F.D., Waitz T., Vollath D., Simha N. K. On the role of surface energy and surface stress in phase-transforming nanoparticles // *Progress in Materials Science*. 2008. Vol. 53. P. 481 – 527.
53. Fleury V. Un possible lien entre la croissance dendritique en physique et la morphogenese des plantes // *Comptes Rendus de l Académie des Sciences - Series III*. 1999. Vol. 322. P. 725 – 734.
54. Freund L. B. Evolution of waviness on the surface of a strained elastic solid due to stress-driven diffusion // *International Journal of Solids and Structures*. 1995. Vol. 28. P. 911 – 923.
55. Freund L. B., Suresh S. *Thin film materials: stress, defect formation and surface evolution*. Cambridge University Press, 2004.
56. Gao H. Some general properties of stress-driven surface evolution in a heteroepitaxial thin film structure // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1994. Vol. 42. P. 741 – 772.
57. Gao H., Nix W.D. Surface roughening of heteroepitaxial thin films // *Annual Review of Material Science*. 1999. Vol. 29. P. 73 – 209.
58. Gibbs J.W. *The Scientific papers of J. Willard Gibbs*, Vol.1. London: Longmans-Green, 1906. 434 p.
59. Goldstein R.V., Makhviladze T.M., Sarychev M.E. Electromigration-induced instability of the interface between solid conductors // *Physical Mesomechanics*. 2018. Vol. 21. P. 275 – 282.
60. Goldstein R. V., Makhviladze T. M., Sarychev M. E. Instability of the interface between joint conducting materials under electrical current // *Materials Letters*. 2016. Vol. 6. P. 98 – 101.

61. Gorbushin N., Eremeyev V. A., Mishuris G. On the stress singularity near the tip of a crack with surface stresses // *International Journal of Engineering Science*. 2020. Vol. 146. P. 103183.
62. Grekov M. A., Makarov S. N. Stress concentration near a slightly curved part of an elastic body surface // *Solid Mechanics*, 2004. Vol. 39 (6). P. 40–46.
63. Grekov M. A., Sergeeva T. S. Interaction of edge dislocation array with bimaterial interface incorporating interface elasticity // *International Journal of Engineering Science*. 2020. Vol. 149. P. 103233.
64. Grekov M. A., Kostyrko S. A. A multilayer film coating with slightly curved boundary // *International Journal of Engineering Science*, 2015. No 89. P. 61–74.
65. Grekov M. A., Kostyrko S. A. Surface effects in an elastic solid with nanosized surface asperities // *International Journal of Solids and Structures*. 2016. Vol. 96. P. 153–161.
66. Grekov M. A., Sergeeva T. S., Pronina Y. G., Sedova O. S. A periodic set of edge dislocations in an elastic solid with a planar boundary incorporating surface effects // *Engineering Fracture Mechanics*. 2017. Vol. 186. P. 423–435.
67. Grilhe J. Study of roughness formation induced by homogeneous stress at the free surfaces of solids // *Acta Metallurgica and Materialia*. 1993. Vol. 41. № 3. P. 909–913.
68. Grinfeld M. A., Hazzledine P. M. Rearrangement at coherent interfaces in heterogeneous solids // *Philosophical Magazine Letters*. 1996. Vol. 74. P. 17–23.
69. Grinfeld M. Instability of the equilibrium of a nonhydrostatically stressed body and a melt // *Fluid Dynamics*. 1987. Vol. 22. P. 169–173.
70. Grinfeld M., Grinfeld P. Towards thermodynamics of elastic electric conductors // *Philosophical Magazine, Part A*. 2001. Vol. 81. P. 1341–1354.

71. Grinfeld, M. A. Thermodynamic methods in the theory of heterogeneous systems. Sussex, UK: Longman, 1991. P. 399.
72. Gurtin M. E., Jabbour M. E. Interface evolution in three dimensions with curvature-dependent energy and surface diffusion: Interface-controlled evolution, phase transitions, epitaxial growth of elastic films // Archive for Rational Mechanics and Analysis. 2002. Vol. 163. P. 171 – 208.
73. Gurtin M. E., Murdoch A. I. A continuum theory of elastic material surfaces // Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1975. Vol. 57. P. 291 – 323.
74. Gurtin M. E., Murdoch A. I. Surface stress in solids // International Journal of Solids and Structures. 1978. Vol. 14. P. 431 – 440.
75. Gurtin M. E., Voorhees P. W. The continuum mechanics of coherent two-phase elastic solids with mass transport // Proceedings of the Royal Society A. 1993. Vol. 440. P. 323 – 343.
76. Gurtin M. E., Voorhees P. W. The thermodynamics of evolving interfaces far from equilibrium // Acta Materialia. 1996. Vol. 44. P. 235 – 247.
77. Han Z. W., Wang Z., Feng X. M., Li B., Mu Z. Z., Zhang J. Q., Niu S. C., Ren L. Q. Antireflective surface inspired from biology: A review // Biosurface and Biotribology. 2016. Vol. 2(4). P. 137 – 150.
78. Herring C. Some Theorems on the Free Energies of Crystal Surfaces // Physical Review. 1951. Vol. 82. P. 87.
79. Hilhorst D., Kampmann J., Nguyen T., Van Der Zee K. G. Formal asymptotic limit of a diffuse-interface tumor-growth model // Mathematical Models and Methods in Applied Sciences. 2015. Vol. 25(6). P. 1011 – 1043.
80. Ishiguro H., Rubinsky B. Mechanical Interactions between ice crystals and red blood cells during directional solidification // Cryobiology. 1994. Vol. 31. P. 483 – 500.
81. Javili A., McBride A., Steinmann P. Thermomechanics of solids with lowerdimensional energetics: On the importance of surface, interface, and curve

- structures at the nanoscale. A Unifying Review // Applied Mechanics Reviews. 2013. Vol. 65. P. 010802.
82. Javili A., Ottosen N. S., Ristinmaa M., Mosler J. Aspects of interface elasticity theory // Mathematics and Mechanics of Solids. 2018. Vol. 23. P. 1004–1024.
83. Jesson D. E., Pennycook S. J., Baribeau J. M. Direct imaging of surface cusp evolution during strained-layer epitaxy and implications for strain relaxation // Physical Review Letters. 1993. Vol. 71. P. 1744–1747.
84. Junqua N., Grilhé J. Instabilities of planar interfaces between two stressed materials // Philosophical Magazine Letters. 1994. Vol. 69. P. 61–70.
85. Kim J.-H., Vlassak J. J. Perturbation analysis of an undulating free surface in a multi-layered structure // International Journal of Solids and Structures. 2007. Vol. 44. P. 7924–7937.
86. Kim J., Lee S., Choi Y, Lee S.-M., Jeong D. Basic Principles and Practical Applications of the Cahn–Hilliard Equation // Mathematical Problems in Engineering. 2016. Vol. 2016. P. 9532608.
87. Kim S., Kim S. M., Park H.-H., Choi D.-G., Jung J.-W., Jeong J.-H., Jeong J.-R. Conformally direct imprinted inorganic surface corrugation for light extraction enhancement of light emitting diodes // Optics express. 2012. Vol. 20(5). P. A713–A721.
88. Klinger L., Levin L., Srolovitz D. Morphological stability of a heterophase interface under electromigration conditions // Journal of Applied Physics. 1996. Vol. 79. P. 6834–6839.
89. Kostyrko S. A., Grekov M. A. Elastic field at a rugous interface of a bimaterial with surface effects // Engineering Fracture Mechanics. 2019. Vol. 216. P. 106507.
90. Kostyrko S. A., Shuvalov G. M. Morphological stability of multilayer film surface during diffusion processes // Proceedings of the 2015 International Conference "Stability and Control Processes" in Memory of V. I. Zubov (SCP). 2015. P. 392–395.



91. Kostyrko S. A., Shuvalov G. M. Morphological stability of thin film materials during annealing // Proceedings of the XLIV International Summer School-Conference APM 2016. 2016. P. 230–237.
92. Kostyrko S.A., Altenbach H., Grekov M.A. Stress concentration in ultra-thin coating with undulated surface profile // Proceedings of the 7th International conference on coupled problems in science and engineering. 2017. P. 1183–1192.
93. Kostyrko S. A., Shuvalov G. M. Surface elasticity effect on diffusional growth of surface defects in strained solids // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2019. Vol. 31. P. 1795–1803.
94. Kostyrko S. A., Shuvalov G. M. On the role of interfacial elasticity in morphological instability of a heteroepitaxial interface // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2021. 10.1007/s00161-021-01010-6
95. Kostyrko S., Grekov M., Altenbach H. Stress concentration analysis of nanosized thin-film coating with rough interface // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2019. Vol. 31. P. 1863–1871.
96. Krishnamurthy R., Srolovitz D. J. Film/substrate interface stability in thin films // Journal of Applied Physics. 2006. Vol. 99. P. 043504.
97. Lacour S. P., Wagner S., Huang Z. Y., Suo Z. Stretchable gold conductors on elastomeric substrates // Applied Physics Letters. 2003. Vol. 82(15). P. 2404.
98. Larche F. C., Cahn, J. W. The interaction of composition and stress in crystalline solids // Acta Metallurgica. 1985. Vol. 33(3). P. 331–357.
99. Leo P. H., Lowengrub J. S., Jou H. J. A diffuse interface model for microstructural evolution in elastically stressed solids // Acta Materialia. 1998. Vol. 46(6). P. 2113–2130.
100. Linkov A. M. Boundary integral equations in elasticity theory. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht-Boston-London. 2002.
101. Lurie S., Belov P.: Gradient effects in fracture mechanics for nano-structured materials // Engineering Fracture Mechanics. 2014. Vol. 130. P. 3–11.

102. Maraldi M., Molari L., Grandi D. A unified thermodynamic framework for the modelling of diffusive and displacive phase transitions // *International Journal of Engineering Science*. 2012. Vol. 50(1). P. 31–45.
103. McBride A. T., Javili A., Steinmann P., Bargmann S. Geometrically nonlinear continuum thermomechanics with surface energies coupled to diffusion // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2011. Vol. 59. P. 2116–2133.
104. Mi C., Jun S., Kouris D. A., Sung Kim S. Y. Atomistic calculations of interface elastic properties in noncoherent metallic bilayers // *Physical Review B*. 2008. Vol. 77. P. 075425.
105. Miller R. E., Shenoy V. B. Size-dependent elastic properties of nanosized structural elements // *Nanotechnology*. 2000. Vol. 11, P. 139–147.
106. Mogilevskaya S. G., Crouch S. I., Stolarski H. K. Multiple interacting circular nano-inhomogeneities with surface/interface effects // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2008. Vol. 56. P. 2298–2327.
107. Mullins W. W. Theory of thermal grooving // *Journal of Applied Physics*. 1957. Vol. 28. P. 333–339.
108. Mullins W. W., Sekerka R. F. Morphological stability of a particle growing by diffusion or heat flow // *Journal of Applied Physics*. 1963. Vol. 34. P. 323–329.
109. Nazarenko L., Bargmann S., Stolarski H. Closed-form formulas for the effective properties of random particulate nanocomposites with complete Gurtin–Murdoch model of material surfaces // *Continuum Mechanics and Thermodynamics*. 2017. Vol. 29(1). P. 77–96.
110. Nazarenko L., Chirkov A. Y., Stolarski H., Altenbach H. On the modeling of carbon nanotubes reinforced materials and on influence of carbon nanotubes spatial distribution on mechanical behavior of structural elements // *International Journal of Engineering Science*. 2019. Vol. 143. P. 1–13.
111. Nazarenko L., Stolarski H., Altenbach H. Effective properties of short-fiber composites with Gurtin–Murdoch model of interphase // *International Journal of Solids and Structures*. 2016. Vol. 97–98. P. 75–88.

112. Otsuka K., Karato S. Deep penetration of molten iron into the mantle caused by a morphological instability // *Nature*. 2012. Vol. 492. P. 243–246.
113. Ozkan C.S., William D., Nix W.D., Gao H. Strain relaxation and defect formation in heteroepitaxial  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  films via surface roughening induced by controlled annealing experiments // *Applied Physics Letters*. 1997. Vol. 70(17). P. 2247.
114. Panat R., Hsia K. J., Cahill D. G. Evolution of surface waviness in thin films via volume and surface diffusion // *Journal of Applied Physics*. 2005. Vol. 97. P. 013521.
115. Panin A. V., Shugurov A. R. Effect of local curvature of internal and external interfaces on mass transfer responsible for thin film degradation // *Physical Mesomechanics*. 2013. Vol. 16. P. 348–354.
116. Pelliccione M., Lu T.-M. *Evolution of Thin Film Morphology: Modeling and Simulations*. New-York, 2008.
117. Pronina Y. G., Khryashchev S. M. Mechanochemical growth of an elliptical hole under normal pressure // *Materials Physics and Mechanics*. 2017. Vol. 31(1-2). P. 52–55.
118. Pronina Y., Sedova O., Grekov M., Sergeeva T. On corrosion of a thin-walled spherical vessel under pressure // *International Journal of Engineering Science*. 2018. Vol. 130. P. 115–128.
119. Risler T., Basan M. Morphological instabilities of stratified epithelia: a mechanical instability in tumour formation // *New Journal of Physics*. 2013. Vol. 15. P. 065011.
120. Roach P., Eglin D., Rohde K., Perry C. Modern biomaterials: a review – bulk properties and implications of surface modifications // *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*. 2007. Vol. 18. P. 1263–1277.
121. Roach P., Shirtcliffe N. J., Newton M. I. Progress in superhydrophobic surface development // *The Royal Society of Chemistry*. 2008. Vol. 4, P. 224–240.

122. Ru C. Q. Simple geometrical explanation of Gurtin-Murdoch model of surface elasticity with clarification of its related versions // *Science China: Physics, Mechanics and Astronomy*. 2010. Vol. 53(3). P. 536–544.
123. Savina, T., Voorhees P., Davis, S. The effect of surface stress and wetting layers on morphological instability in epitaxially strained films // *Journal of Applied Physics*. 2004. Vol. 96. P. 3127–3133.
124. Sekerka R. F. Morphological stability // *Journal of Crystal Growth*. 1968. Vol. 3. P. 71–81.
125. Sharma P., Ganti S., Bhate N. Effect of surfaces on the size-dependent elastic state of nano-inhomogeneities // *Applied Physics Letters*. 2003. Vol. 82(4). P. 535–537.
126. Shenoy V. B. Atomistic calculations of elastic properties of metallic fcc crystal surfaces // *Physical Review B*. 2005. Vol. 71(9). P. 094104.
127. Shodja H. M., Ahmadzadeh-Bakhshayesh H., Gutkin M. Y. Size-dependent interaction of an edge dislocation with an elliptical nano-inhomogeneity incorporating interface effects // *International Journal of Solids and Structures*. 2012. Vol. 49. P. 759–770.
128. Shuttleworth R. The surface tension of solids. // *Proceedings of the Physical Society, Section A*. 1950. Vol. 63(5). P. 444–457.
129. Shuvalov G. M., Kostyrko S. A. Surface self-organization in multilayer film coatings // *AIP Conference Proceedings*. 2017. Vol. 1909. P. 020196.
130. Shuvalov G. M., Kostyrko S. A. Stability analysis of nanoscale surface patterns in stressed solids // *AIP Conference Proceedings*. 2018. Vol. 1959(1). P. 070016.
131. Shuvalov G. M., Vakaeva A. B., Shamsutdinov D. A., Kostyrko S. A. The effect of nonlinear terms in boundary perturbation method on stress concentration near the nanopatterned bimaterial interface // *Vestnik Saint Petersburg State University. Applied Mathematics. Computer Sciences. Control Processes*. 2020. Vol. 16. 165–176.

132. Shuvalov G.M., Kostyrko S.A. Stability analysis of a nanopatterned biomaterial interface // Vestnik of Saint Petersburg University. Applied Mathematics. Computer Science. Control Processes. 2021. Vol.17(1). P.97–104.
133. Srolovitz D.J. On the stability of surfaces of stressed solids // Acta Metallurgica. 1989. Vol.37(2). P.621–625.
134. Steigmann D.J., Ogden R.W. Elastic surface-substrate interactions // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 1999. Vol.455. P.437–474.
135. Steigmann D. J., Ogden R. W. Plane deformations of elastic solids with intrinsic boundary elasticity // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 1997. Vol.453(1959). P.853–877.
136. Theljani A., Houichet H., Mohamed A. An adaptive Cahn-Hilliard equation for enhanced edges in binary image inpainting // Journal of Algorithms and Computational Technology. 2020. Vol.14. P.1–10.
137. Thornton K., Ågren J., Voorhees P.W. Modeling the evolution of phase boundaries in solids at the meso- and nano-scales // Acta Materialia. 2003. Vol.51. P.5675–5710.
138. Tian L., Rajapakse R.K.N.D. Elastic field of an isotropic matrix with nanoscale elliptical inhomogeneity // International Journal of Solids and Structures. Vol.44(24). P.7988–8005.
139. Torii R. H., Balibar S. Helium crystals under stress: the Grinfeld instability // Journal of Low Temperature Physics. 1992. Vol.89(1-2). P.391–400.
140. Vakaeva A. B., Shuvalov G. M., Kostyrko S. A. Interfacial stresses in bimaterial composites with nanosized interface relief // Proceedings of the 8th International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering. Coupled Problems 2019. 2019. P.679–688.
141. Vakaeva A. B., Shuvalov G. M., Kostyrko S. A., Grekov M. A. The finite element modeling of an elastic body with a nanometer surface relief // Proceedings of

- the International Conference on Numerical Analysis and Applied Mathematics, ICNAAM 2018. 2019. Vol. 2116(1). P. 290008.
142. Vikulina Y. I., Grekov M. A., Kostyrko S. A. Model of film coating with weakly curved surface // *Mechanics of solids*. 2010. Vol. 45(6). C. 16–28.
143. Wang J., Huang Z., Duan H., Yu S. W., Wang G., Zhang W., Wang T. Surface stress effect in mechanics of nanostructured materials // *Acta Mechanica Sinica*. 2011. Vol. 24. P. 52–82.
144. Watanabe M., Shirai H., Hirai T. Wrinkled polypyrrole electrode for electroactive polymer actuators // *Journal of Applied Physics*. 2002. Vol. 92 (8). P. 4631.
145. Watson J. S. Crystal Growth, Coarsening and the Convective Cahn–Hilliard Equation // *Free Boundary Problems: Theory and Applications*. Basel: Birkhäuser. 2004. P. 329–341.
146. Wise S. M., Lowengrub J. S., Frieboes H. B., Cristini V. Three-dimensional multispecies nonlinear tumor growth: model and numerical method // *Journal of Theoretical Biology*. 2008. Vol. 253(3). P. 524–543.
147. Yao J. Y., Andersson T. G., Dunlop G. L. Microstructures and critical thicknesses of  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  strained-layer structures // *Semiconductor Science and Technology*. 1994. Vol. 9. P. 1086–1095.
148. Yoshino T. Penetration of molten iron alloy into the lower mantle phase // *Comptes Rendus Geoscience*. 2019. Vol. 351. P. 171–181.