

ВЛИЯНИЕ ДИФфуЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ НА САМООРГАНИЗАЦИЮ ПОВЕРХНОСТИ МНОГОСЛОЙНОГО ПЛЕНОЧНОГО ПОКРЫТИЯ

© 2017

С.А. Костырко, кандидат физико-математических наук, доцент

Г.М. Шувалов, аспирант

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург (Россия)

Ключевые слова: тонкопленочное покрытие; морфологическая устойчивость; диффузия; концентрация напряжений.

Аннотация: Многослойные пленочные покрытия получили широкое применение в электронной и оптоэлектронной промышленности. Однако технология производства устройств требует, чтобы наличие дефектов в них было сведено к минимуму, в противном случае их рабочие свойства будут неудовлетворительными. В последние годы принято считать, что основной причиной образования дефектов в пленочных покрытиях является формирование рельефа поверхности пленки. Шероховатость поверхности пленки может образовываться как при ее осаждении, так и при последующей термической обработке. Моделирование процесса самоорганизации поверхности тонкопленочного покрытия позволит улучшить понимание данного явления.

В статье рассмотрена двумерная модель твердого тела с многослойным пленочным покрытием. Малое возмущение формы поверхности пленки описывается произвольной периодической функцией. На основе термодинамического подхода Гиббса получено эволюционное уравнение поверхности пленки при комбинированном действии поверхностной диффузии, определяемой производной химического потенциала вдоль поверхности, и объемной диффузии, связанной с изменением напряжений вдоль криволинейной поверхности и капиллярным эффектом.

На основе первого приближения метода возмущений проведен численный анализ морфологической устойчивости плоской формы поверхности двухслойного пленочного покрытия при действии диффузионных процессов. В качестве основных параметров задачи рассматривались длина волны начального возмущения, относительные модули упругости материалов пленочной системы, доля поверхностной и объемной диффузии в процессе массопереноса, остаточные напряжения. Важной особенностью представленного исследования является то, что посредством учета объемной диффузии был проведен анализ влияния знака напряжений. Было показано, что при увеличении доли объемной диффузии происходит сглаживание рельефа в случае растягивающих усилий. Для сжимающих усилий объемная диффузия, как и поверхностная, является дестабилизирующим процессом.

ВВЕДЕНИЕ

С развитием технического прогресса возрастает интенсивность режимов работы приборов, увеличиваются эксплуатационные температуры и давления. Чтобы удовлетворить необходимым требованиям, нужно использовать новые материалы с улучшенными функциональными свойствами. Один из вариантов получения подобных материалов – использование тонкопленочных покрытий.

Несмотря на значительный успех применения тонкопленочных покрытий, существует возможность разрушения материалов, используемых при создании устройств микроэлектронной промышленности, что является существенным барьером при совершенствовании их функциональных свойств. Наличие остаточных напряжений в пленках, нанесенных на подложки, и влияние напряженного состояния на расслаивание и растрескивание были обнаружены еще 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, а также при различных фазовых превращениях [1–3]. Таким образом, технология производства микроустройств требует, чтобы наличие дефектов в них было сведено к минимуму, иначе их рабочие характеристики будут неудовлетворительными.

В последние годы установлено, что основной причиной формирования дефектов в пленочных покрытиях является образование рельефа поверхности. Самоорга-

низация поверхности твердого тела, вызванная полем напряжений, является темой многочисленных исследований ввиду ее важности при изготовлении материалов с малыми линейными размерами. Установлено, что первоначально плоская форма поверхности при определенных условиях является неустойчивой к малым возмущениям. Проблема морфологической неустойчивости поверхности твердого тела, находящегося в напряженном состоянии, впервые была рассмотрена R.J. Asaro и W.A. Tiller [4] при анализе роли поверхностной диффузии в процессе коррозионного растрескивания. Однако в их анализе не учитывалось действие объемной диффузии, так как считалось, что она протекает достаточно медленно при температурах, характерных для процесса коррозионного растрескивания. Стоит заметить, что подобного рода исследования проводились также M.A. Grinfeld [5] и D.J. Srolovitz [6] независимо друг от друга.

Феномен морфологической потери устойчивости подтверждается и многими экспериментальными исследованиями [7; 8], в которых рассматривались различные формы возмущения. При помощи нелинейного анализа в работах W.H. Yang, D.J. Srolovitz [9] и B.J. Spencer, D.I. Meiron [10] было показано, что при потере морфологической устойчивости форма искривления поверхности напряженного твердого тела с течением времени переходит от слабой волнистости к острым трещинообразным впадинам. В случае эпитаксиальных и гетероэпитаксиальных пленочных покрытий развитие такого рельефа может привести к тому, что

пленка распадется на отдельные островки [11]. В работе [12] исследовалась проблема потери устойчивости плоской формы поверхности пленочного покрытия в результате действия поверхностной диффузии, при этом учитывалось влияние поверхностных напряжений, что позволило выявить зависимость критической длины волны возмущения от знака продольных усилий.

Поверхностная диффузия является одним из основных, но не единственным механизмом образования регулярных структур на поверхности твердых тел. Так, в работе [13] было показано, что вклад объемной диффузии в искривление поверхности однослойного пленочного покрытия зависит от знака продольных усилий. Однако наибольший интерес с точки зрения как практического, так и фундаментального аспекта рассматриваемой проблематики представляет исследование причин образования рельефа на поверхности многослойных пленочных покрытий.

Цель работы – обобщение решенной ранее задачи о морфологической устойчивости предварительно напряженного пленочного покрытия к малым диффузионным возмущениям на случай многослойных структур. На основе полученного решения предполагается изучить влияние физических и геометрических параметров двухслойного пленочного покрытия на процесс самоорганизации поверхности в ходе релаксации возникших при напылении напряжений несоответствия.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Хорошо известно, что многослойные пленочные структуры находятся в напряженном состоянии ввиду рассогласования параметров кристаллических решеток разных слоев. Для релаксации возникших напряжений такого рода системы могут перераспределять материал на поверхности путем диффузионного массопереноса как вдоль поверхности, так и вглубь материала, что приводит к образованию рельефа и минимизации полной свободной энергии. Таким образом, в качестве основных механизмов потери морфологической устойчивости поверхности пленки будем рассматривать поверхностную и объемную диффузии.

Модель многослойного пленочного покрытия толщины $h_f = \sum_{l=1}^N h_l$, осажденного на подложку толщины $h_s \gg h_f$ и находящегося в условиях плоской деформации, представим в виде неоднородной упругой плоскости $\Omega = \bigcup_{l=1}^{N+1} \Omega_l$ комплексной переменной $z = x_1 + ix_2$ с прямолинейными межфазными границами Γ_j .

$$\Omega_l = \{z : H_{l+1} < \text{Im}z < H_l, \text{Re}z \in \mathbb{R}^1\},$$

$$H_N = h_N, H_{N+1} = 0, H_l = H_{l+1} + h_l, l = \overline{1, N},$$

$$\Omega_{N+1} = \{z : \text{Im}z < 0, \text{Re}z \in \mathbb{R}^1\}, \quad (1)$$

$$\Gamma_j = \{z : z \equiv z_j = x_1 + iH_j\}, i^2 = -1, j = \overline{2, N+1}.$$

Морфологию поверхности пленки будем описывать посредством синусоидальной функции:

$$\Gamma_1 = \{z : z \equiv z_1 = x_1 + i[H_1 + A(\tau) \cos kx_1]\}, \quad (2)$$

$$\max |A(\tau)| / \lambda = \varepsilon(\tau) \ll 1 \forall \tau, k = 2\pi / \lambda, A(0) = a.$$

Пусть поверхность Γ_1 свободна от нормальных σ_{nn} и касательных σ_{nt} усилий, а на межфазных границах отсутствуют скачки напряжений $\sigma = \sigma_{nn} + i\sigma_{nt}$ и перемещений $u = u_1 + iu_2$, где u_1 и u_2 – компоненты вектора перемещений вдоль осей x_1 и x_2 соответственно.

$$\sigma(z_1) = 0, z_1 \in \Gamma_1,$$

$$\Delta u(z_j) = u^+ - u^- = 0, \Delta \sigma(z_j) = \sigma^+ - \sigma^-, \quad (3)$$

$$u^\pm = \lim_{z \rightarrow z_j \pm iH_j} u(z), \sigma^\pm = \lim_{z \rightarrow z_j \pm iH_j} \sigma(z), z_j \in \Gamma_j.$$

В подложке Ω_{N+1} действует постоянное продольное напряжение σ_{N+1} , при этом все остальные напряжения, а также угол поворота ω материальной частицы на бесконечности равны нулю.

$$\sigma_{22}^\infty - i\sigma_{12}^\infty = 0, \sigma_{11}^\infty = \sigma_{N+1}, \omega^\infty = 0, \quad (4)$$

$$\sigma_{ij}^\infty = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \sigma_{ij}, \omega^\infty = \lim_{x_2 \rightarrow -\infty} \omega.$$

Задача состоит в нахождении зависимости амплитуды A от времени τ при учете поверхностной диффузии и упругого деформирования тела с поверхностным слоем переменной толщины. Значения параметров задачи, при которых $\lim_{\tau \rightarrow \infty} A(\tau) = 0$, будут соответствовать устойчивому состоянию пленки к морфологически возмущениям вида (2).

ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПОДХОДЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Следуя работам [12–14], эволюционное уравнение формы поверхности пленки запишем следующим образом:

$$\frac{\partial h(x_1, \tau)}{\partial \tau} = -\Omega \frac{\partial J_s}{\partial s} + \Omega(-J_v), \quad (5)$$

где J_s – поток массы вещества вдоль поверхности; J_v – поток массы по нормали к поверхности:

$$J_s = -\frac{D_s C_s}{k_b T} \frac{\partial}{\partial s} (U - \kappa \gamma) \Omega, \quad (6)$$

$$J_v = -D_v \frac{\partial}{\partial n} \frac{C(x_1, x_2)}{\Omega} \Big|_{x_2 = h_f}.$$

В (5) и (6) введены обозначения:

Ω – атомный объем;

U – плотность упругой энергии на поверхности пленки;

γ – плотность поверхностной энергии;
 k – кривизна поверхности;
 D_s – коэффициент поверхностной диффузии;
 C_s – поверхностная плотность диффундирующих атомов;
 k_b – постоянная Больцмана;
 T – абсолютная температура;
 D_v – коэффициент объемной диффузии.

Концентрация вакансий в объеме тела, источники и стоки которых находятся на криволинейной поверхности, определяется следующим соотношением [15]:

$$C(x_1, x_2) = C_v + \frac{C_v \Omega}{k_b T} [\kappa \gamma + \Delta P(x_1, \tau)] e^{k(x_2 - h_f)}, \quad (7)$$

где C_v – концентрация вакансий в приповерхностном слое многослойного пленочного покрытия с плоской границей, находящихся в равновесном состоянии при заданной температуре и действии остаточного напряжения σ_1 ;

$\Delta P(x_1, \tau)$ – вариация гидростатического давления на поверхности в результате искривления последней, равная

$$\Delta P = \frac{1}{3}(1 + \nu_1)[\sigma_{11}(z) - \sigma_1], \quad z \in \Gamma_1. \quad (8)$$

Благодаря слабому искривлению поверхности пленки, из (5)–(8) при $\partial/\partial s \approx \partial/\partial x_1$, $\partial/\partial n \approx \partial/\partial x_2$, $|\partial h/\partial x_1| \ll 1$ приходим к линеаризованному уравнению движения точек поверхности Γ_1 :

$$\frac{\partial h(x_1, \tau)}{\partial \tau} = \frac{D_s C_s \Omega^2}{k_b T} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \left[U(x_1, \tau) - \gamma \frac{\partial^2 h(x_1, \tau)}{\partial x_1^2} \right] + \frac{D_v C_v \Omega}{k_b T} k \left[\gamma \frac{\partial^2 h(x_1, \tau)}{\partial x_1^2} + \Delta P(x_1, \tau) \right]. \quad (9)$$

В силу того, что процесс поверхностной потери устойчивости рассматривается нами в квазистатической постановке, функции U и ΔP для каждого момента времени находятся в первом приближении решения статической краевой задачи о напряженно-деформированном состоянии многослойного композита с искривленной поверхностью. На основании комплексных потенциалов Гурса – Колосова, соотношений Мухелишвили [16], принципа суперпозиции и метода возмущений [17] решение сводится к системе интегральных уравнений Фредгольма второго рода [18]. Поскольку форма свободной границы определяется выражением (2), решение задачи в каждом приближении находится в виде рядов Фурье, аналогично тому, как это было сделано в работах [19; 20].

ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Решив соответствующую задачу теории упругости (1)–(4) и определив упругую энергию деформации U и вариацию гидростатического напряжения ΔP , можем проинтегрировать уравнение (9). При этом получим зависимость амплитуды возмущения от времени, геометрических и физических параметров задачи [14]:

$$\ln\left(\frac{A(\tau)}{a}\right) = P(\lambda, h_1, \dots, h_N, \mu_1, \dots, \mu_{N+1}, \nu_1, \dots, \nu_{N+1}, \gamma, D, \sigma_1) \tau.$$

Критическое значение длины волны возмущения λ_{cr} определяется из условия:

$$P(\lambda, h_1, \dots, h_N, \mu_1, \dots, \mu_{N+1}, \nu_1, \dots, \nu_{N+1}, \gamma, D, \sigma_1) = 0,$$

$$D = \frac{D_v C_v}{D_s C_s}.$$

При $\lambda > \lambda_{cr}$ будет наблюдаться потеря морфологической устойчивости. Таким образом, практический интерес представляет анализ зависимости λ_{cr} от параметров задачи.

Важная особенность представленного здесь анализа состоит в том, что в отличие от работ, в которых рассматривалось только действие поверхностной диффузии [12; 15], учет объемной диффузии позволяет оценить влияние знака продольных усилий на процесс морфологической потери устойчивости. В качестве примера рассмотрим двухслойное пленочное покрытие $N=2$. В таблице 1 приведены относительные разности критических значений длин волн для усилий разных знаков (λ_{cr}^+ соответствует растягивающим усилиям, λ_{cr}^- – сжимающим) для различных конфигураций системы при $\sigma_1=700$ МПа; $\gamma=1$ Н/м; $\mu_1=100$ ГПа; $\nu_1=\nu_2=\nu_3=0,3$; $D=10^{-25}$ м²; $\Omega=4,29 \cdot 10^{-29}$ м³. Из таблицы 1 видно, что знак продольных усилий σ_1 оказывает большее влияние для случая с мягкой верхней пленкой (относительная разность критических значений длин волн в случае растягивающих и сжимающих усилий составила 36,5%), хотя и в остальных случаях влияние знака напряжений оказалось существенным (относительная разность составила больше 18%).

Таблица 1. Влияние знака продольных усилий

μ_1/μ_2	0,3	0,3	3	3	
μ_2/μ_3	0,3	3	0,3	3	
h_1 , мкм	h_2 , мкм	$(\lambda_{cr}^- - \lambda_{cr}^+) / \lambda_{cr}^+ \cdot 100\%$			
0,6	0,6	36,50 %	30,65 %	18,46 %	17,97 %
1,2	0,6	24,20 %	24,06 %	21,49 %	21,42 %
0,6	1,2	33,07 %	32,22 %	18,17 %	18,14 %

Стоит отметить, что влияние параметров, рассматриваемых в таблице 1, зависит также от величины действующей нагрузки σ_1 и коэффициента D , определяющего долю объемной диффузии.

На рис. 1 а представлен график зависимости критического значения длины волны возмущения λ_{cr} от величины усилий σ_1 при различных значениях относительных жесткостей пленочной системы μ_1/μ_2 , μ_2/μ_3 (кривым 1, 2 соответствуют значения $\mu_1/\mu_2=0,3$, $\mu_2/\mu_3=0,3$ и $\mu_1/\mu_2=3$, $\mu_2/\mu_3=0,3$) для сжимающих (пунктирные линии) и растягивающих (сплошные) продольных усилий. При этом $h_1=h_2=0,08$ мкм; $\gamma=1$ Н/м; $\mu_1=100$ ГПа; $\nu_1=\nu_2=\nu_3=0,3$; $D=10^{-25}$ м²; $\Omega=4,29 \cdot 10^{-29}$ м³. Случаю, когда верхняя пленка жестче нижней пленки, соответствует меньшее значение λ_{cr} . Также в случае действия

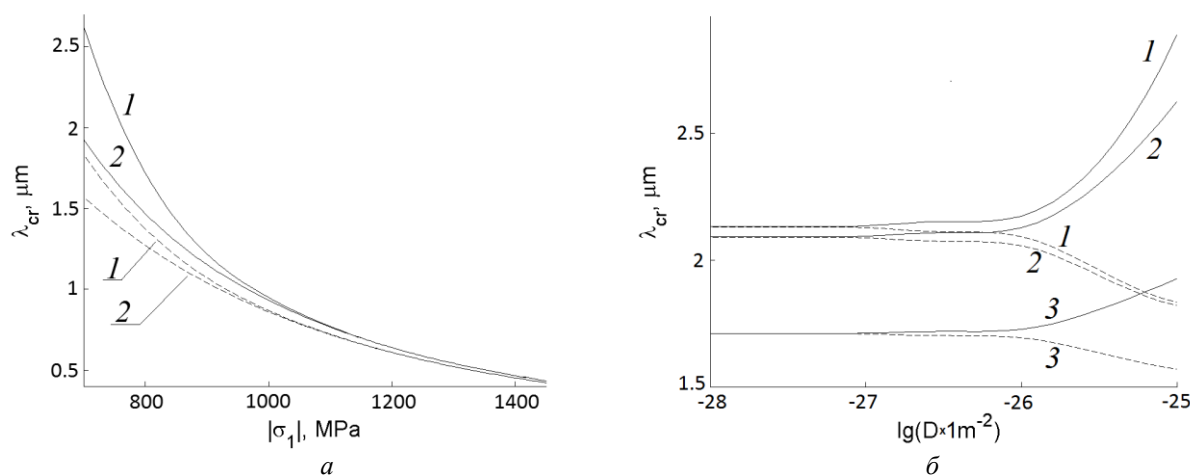


Рис. 1. Зависимость критического значения длины волны возмущения λ_{cr} от величины продольных усилий σ_1 (а) и доли объемной диффузии D (б)

объемной диффузии пленочное покрытие является морфологически более устойчивым при растягивающих усилиях. Из графиков видно, что при $\sigma_1 > 910$ МПа влияние знака усилий становится незначительным (относительная разность меньше 5 %). Кроме того, при $\sigma_1 > 1175$ МПа перестает влиять относительная жесткость системы.

Зависимость λ_{cr} от доли объемной диффузии представлена на рис. 1 б. Относительные жесткости системы $\mu_1/\mu_2=0,3$, $\mu_2/\mu_3=0,3$; $\mu_1/\mu_2=0,3$, $\mu_2/\mu_3=3$ и $\mu_1/\mu_2=3$, $\mu_2/\mu_3=0,3$ соответствуют кривым 1–3, пунктирные линии соответствуют сжимающим продольным усилиям, сплошные – растягивающим. При этом в качестве параметров пленочного покрытия выбраны: $h_1=h_2=0,08$ мкм; $\gamma=1$ Н/м; $\mu_1=100$ ГПа; $\nu_1=\nu_2=\nu_3=0,3$; $\Omega=4,29 \cdot 10^{-29}$ м³; $\sigma_1=\pm 700$ МПа. Здесь, как и ранее, случаю, когда верхняя пленка жестче нижней, соответствуют меньшие критические значения длины волны возмущения. При этом в случае растягивающих усилий λ_{cr} возрастает при увеличении доли объемной диффузии, а в случае сжимающих усилий λ_{cr} убывает.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Представлено решение задачи о морфологической устойчивости многослойного пленочного покрытия к малым диффузионным возмущениям. В качестве основного соотношения получена явная зависимость амплитуды синусоидального возмущения от времени, физических и геометрических параметров задачи. В ходе анализа полученного соотношения сформулировано условие морфологической устойчивости, при котором начальная амплитуда рассматриваемого возмущения уменьшается со временем.

В качестве численного примера исследован процесс образования рельефа на поверхности двухслойного пленочного покрытия при совместном влиянии объемной и поверхностной диффузии. Получена зависимость критической длины волны возмущения от толщины и упругих свойств каждого слоя пленки, а также диффузионных коэффициентов и знака остаточных напряжений, возникающих в пленочной системе в силу несогласования параметров кристаллических решеток различных слоев.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 14-01-00260.

Статья подготовлена по материалам докладов участников VIII Международной школы «Физическое материаловедение» с элементами научной школы для молодежи, Тольятти, 3–12 сентября 2017 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Pronina Y.G. Mechanochemical corrosion: Modeling and analytical benchmarks for initial boundary value problems with unknown boundaries // Springer Proceedings in Mathematics and Statistics. 2016. Vol. 171. P. 301–309.
2. Sedova O.S. Stress distribution in the neighborhood of a corrosion pit on the outer surface of an elastic spherical shell // 2nd International Conference on Emission Electronics (ICEE). Selected papers. Proceedings. Saint Petersburg, 2014. P. 78–81.
3. Sedova O.S., Pronina Yu.G. Calculation of the optimal initial thickness of a spherical vessel operating in mechanochemical corrosion conditions // 2015 International Conference “Stability and Control Processes” in Memory of V.I. Zubov (SCP). Moscow, 2015. P. 436–439.
4. Asaro R.J., Tiller W.A. Interface morphology development during stress corrosion cracking: Part I. Via surface diffusion // Metallurgical transactions. 1972. Vol. 3. № 7. P. 1789–1796.
5. Grinfeld M.A. The stress driven instabilities in elastic crystals: mathematical models and physical manifestation // Journal of Nonlinear Science. 1993. Vol. 3. № 1. P. 35–83.
6. Srolovitz D.J. On the stability of surfaces of stressed solids // Acta Metallurgica. 1989. Vol. 37. № 2. P. 621–625.
7. 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.
8. Berrehar J., Caroli C., Lapersonne-Meyer C., Schott M. Surface patterns on single-crystal films under uniaxial stress: experimental evidence for the Grinfeld instability // Physical Review B. 1992. Vol. 46. № 20. P. 13487–13495.
9. Yang W.H., Srolovitz D.J. Cracklike surface instabilities in stressed solids // Physical Review Letters. 1993. Vol. 71. № 10. P. 1593–1596.

10. Spencer B.J., Meiron D.I. Nonlinear evolution of the stress-driven morphological instability in a two-dimensional semi-infinite solid // *Acta Metallurgica et Materialia*. 1993. Vol. 42. № 11. P. 3629–3641.
11. Pang Y., Huang R. Nonlinear effect of stress and wetting on surface evolution of epitaxial thin films // *Physical Review*. 2006. Vol. 74. № 7. P. 075413.
12. Греков М.А., Костырко С.А. Устойчивость плоской формы пленочного покрытия при поверхностной диффузии // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 10. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. 2007. № 1. С. 46–54.
13. Костырко С.А. Влияние формы возмущения на устойчивость плоской поверхности пленочного покрытия при диффузионных процессах // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 1. Математика. Механика. Астрономия. 2011. № 3. С. 101–111.
14. Kostyrko S.A., Shuvalov G.M. Morphological stability of multilayer film surface during diffusion processes // 2015 International Conference “Stability and Control Processes” in Memory of V.I. Zubov (SCP). Moscow, 2015. P. 392–395.
15. 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. № 1. P. 013521.
16. Мухелишвили Н.И. Некоторые основные задачи математической теории упругости. М.: Наука, 1966. 707 с.
17. Греков М.А. Сингулярная плоская задача теории упругости. СПб.: Изд-во СПб. гос. ун-та, 2001. 192 с.
18. Grekov M.A., Kostyrko S.A. A multilayer film coating with slightly curved boundary // *International Journal of Engineering Science*. 2015. Vol. 89. P. 61–74.
19. Grekov M.A., Vakaeva A.B. Effect of nanosized asperities at the surface of a nanohole // *Proceedings of the 7th European Congress on Computational Method in Applied Science and Engineering*. Athens, 2016. Vol. VI. P. 7875–7885.
20. Вакаева А.Б., Греков М.А. Напряженно-деформированное состояние упругого тела с почти круговым отверстием при учете поверхностного напряжения // *Процессы управления и устойчивость*. 2015. Т. 2. № 1. С. 125–130.
- face diffusion. *Metallurgical transactions*, 1972, vol. 3, no. 7, pp. 1789–1796.
5. Grinfeld M.A. The stress driven instabilities in elastic crystals: mathematical models and physical manifestation. *Journal of Nonlinear Science*, 1993, vol. 3, no. 1, pp. 35–83.
6. Srolovitz D.J. On the stability of surfaces of stressed solids. *Acta Metallurgica*, 1989, vol. 37, no. 2, pp. 621–625.
7. Torii R.H., Balibar S. Helium crystals under stress: the Grinfeld instability. *Journal of Low Temperature Physics*, 1992, vol. 89, no. 1-2, pp. 391–400.
8. Berrehar J., Caroli C., Lapersonne-Meyer C., Schott M. Surface patterns on single-crystal films under uniaxial stress: experimental evidence for the Grinfeld instability. *Physical Review B*, 1992, vol. 46, no. 20, pp. 13487–13495.
9. Yang W.H., Srolovitz D.J. Cracklike surface instabilities in stressed solids. *Physical Review Letters*, 1993, vol. 71, no. 10, pp. 1593–1596.
10. Spencer B.J., Meiron D.I. Nonlinear evolution of the stress-driven morphological instability in a two-dimensional semi-infinite solid. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1993, vol. 42, no. 11, pp. 3629–3641.
11. Pang Y., Huang R. Nonlinear effect of stress and wetting on surface evolution of epitaxial thin films. *Physical Review*, 2006, vol. 74, no. 7, pp. 075413.
12. Grekov M.A., Kostyrko S.A. Instability of flat surface of a film coating due to surface diffusion. *Vestnik of Saint Petersburg University. Applied mathematics. Computer science. Control processes*, 2007, no. 1, pp. 46–54.
13. Kostyrko S.A. Effect of the undulation shape on the flat film surface stability under diffusion processes. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2011, no. 3, pp. 101–111.
14. Kostyrko S.A., Shuvalov G.M. Morphological stability of multilayer film surface during diffusion processes. 2015 International Conference “Stability and Control Processes” in Memory of V.I. Zubov (SCP). Moscow, 2015, pp. 392–395.
15. 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, no. 1, pp. 013521.
16. Muskhelishvili N.I. *Nekotorye osnovnye zadachi matematicheskoy teorii uprugosti* [Some basic problems of the mathematical theory of elasticity]. Moscow, Nauka Publ., 1966. 707 p.
17. Grekov M.A. *Singulyarnaya ploskaya zadacha teorii uprugosti* [Singular plane problem of the theory of elasticity]. Saint Petersburg, SPbGU Publ., 2001. 192 p.
18. Grekov M.A., Kostyrko S.A. A multilayer film coating with slightly curved boundary. *International Journal of Engineering Science*, 2015, vol. 89, pp. 61–74.
19. Grekov M.A., Vakaeva A.B. Effect of nanosized asperities at the surface of a nanohole. *Proceedings of the 7th European Congress on Computational Method in Applied Science and Engineering*. Athens, 2016, vol. VI, pp. 7875–7885.
20. Vakaeva A.B., Grekov M.A. Stress-strain of an elastic body with a nearly circular hole incorporating surface stress. *Protsessy upravleniya i ustoychivost'*, 2015, vol. 2, no. 1, pp. 125–130.

REFERENCES

1. Pronina Y.G. Mechanochemical corrosion: Modeling and analytical benchmarks for initial boundary value problems with unknown boundaries. *Springer Proceedings in Mathematics and Statistics*, 2016, vol. 171, pp. 301–309.
2. Sedova O.S. Stress distribution in the neighborhood of a corrosion pit on the outer surface of an elastic spherical shell. *2nd International Conference on Emission Electronics (ICEE). Selected papers. Proceedings*. Saint Petersburg, 2014, pp. 78–81.
3. Sedova O.S., Pronina Yu.G. Calculation of the optimal initial thickness of a spherical vessel operating in mechanochemical corrosion conditions. 2015 International Conference “Stability and Control Processes” in Memory of V.I. Zubov (SCP). Moscow, 2015, pp. 436–439.
4. Asaro R.J., Tiller W.A. Interface morphology development during stress corrosion cracking: Part I. Via sur-

**THE INFLUENCE OF DIFFUSION PROCESSES ON THE SURFACE SELF-ORGANIZATION
IN THE MULTILAYER FILM COATING**

© 2017

S.A. Kostyrko, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor

G.M. Shuvalov, postgraduate student

St. Petersburg State University, St. Petersburg (Russia)

Keywords: thin-film coating; morphological stability; diffusion; stress concentration.

Abstract: The multilayer film coatings are widely used in the electronic and optoelectronic industry. However, a high device quality can only be maintained if the defects in films are kept to minimum. In recent years, surface roughness coupled with internal stresses is considered to be one of the main reasons for defect nucleation in thin film materials. During film deposition and subsequent thermal processing the surface pattern formation becomes energetically preferable and surface evolves into an undulating profile. The mathematical modeling for self-organized multilayer films can lead to better understanding of this phenomena. In this paper, the 2D model of solid body with a multilayer film coating is developed. A small perturbation of film surface is described by an arbitrary periodic function. Based on Gibbs thermodynamics, a governing equation that gives the amplitude change of surface perturbation due to surface and volume diffusion is obtained. The surface diffusion is driven by the gradient of chemical potential associated with an elastic and surface energy. The volume diffusion is determined by the concentration gradient of vacancies in the direction normal to the film surface associated with surface tension and residual stresses. Taking into account the first-order approximation derived by perturbation technique, we analyze the morphological stability of film surface against the diffusional perturbations. A parametric study is carried out that takes into account the perturbation wavelength, the elastic constants of film layers and substrate, the surface and volume diffusion constants, the residual stresses and the thicknesses of film layers. The key feature of this study is that we were able to discover the effect of the sign of the residual stress. The compressive stresses with the main contribution of volume diffusion promoting the surface smoothing. In the case of tensile stresses, the volume diffusion as well as surface diffusion leads to the surface roughening.