

# Дефекты и отслаивание аморфных нанопленок от кристаллических подложек

© С.В. Бобылев\*, И.А. Овидько<sup>\*,\*\*</sup>, А.Е. Романов<sup>\*\*\*</sup>, А.Г. Шейнерман\*

\* Институт проблем машиноведения Российской академии наук,  
199178 Санкт-Петербург, Россия

\*\* Санкт-Петербургский государственный университет,  
198504 Санкт-Петербург, Россия

\*\*\* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: ovidko@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 8 апреля 2005 г.)

В окончательной редакции 15 апреля 2005 г.)

Теоретически исследованы условия отслаивания аморфной нанопленки от кристаллической подложки. Теоретический анализ проведен с помощью представлений дисклинационно-дислокационной модели межфазной границы „кристалл–стекло“, в рамках которой такая межфазная граница характеризуется высокой плотностью дисклинаций и дислокаций. Получен критерий отслаивания аморфной нанопленки от кристаллической подложки. Рассчитана зависимость критической толщины нанопленки (при превышении которой начинается ее отслаивание) от характеристик дисклинационно-дислокационной системы и дилатационного несоответствия.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 04-01-00211), ИНТАС (грант N 03-51-3779), программы РАН „Структурная механика материалов и элементов конструкций“, программ развития потенциала высшей школы и физики твердотельных наноструктур Министерства образования и науки РФ, Санкт-Петербургского научного центра РАН, Офиса морских исследований США (Office of US Naval Research, грант N 00014-05-1-0217) и Фонда содействия отечественной науке.

PACS: 62.20.Mk, 62.25.+g

Аморфно-кристаллические композиты (кристаллиты в аморфной матрице, аморфные частицы в кристаллической матрице, аморфные пленки на кристаллических подложках, кристаллические пленки на аморфных подложках и др.) являются предметом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований, что обусловлено широким кругом их использования в современных высоких технологиях (см., например, [1–9]). Физические и механические свойства таких композитов существенно зависят от структуры межфазных границ раздела между кристаллическим и аморфным материалами. Роль границ „кристалл–стекло“ исключительно высока в физических процессах, происходящих в нанокompозитах [9], где значительная доля общего объема материала занята межфазными границами. Все это обуславливает значимый интерес к исследованию особенностей структуры и поведения межфазных границ „кристалл–стекло“.

В технологических процессах получения аморфно-кристаллических композитов, в частности, аморфных нанопленок на кристаллических подложках, часто сталкиваются с таким явлением, как отслаивание фаз (зарождение и рост несплошностей на межфазных границах), которое серьезно нарушает функциональные свойства композитов. Одним из важнейших факторов, влияющих на возможность отслаивания, является геометрическое несоответствие между фазами на границе между ними. Поскольку границы „кристалл–стекло“ образованы

сильно отличающимися друг от друга кристаллической и аморфной фазами, значительное несоответствие является отличительной чертой таких границ. Как следствие, они характеризуются высокой плотностью дефектов несоответствия.

В работах [10,11] предложено описание ориентационного несоответствия между аморфной и кристаллической фазами с помощью дисклинаций несоответствия. Недавно этот подход был развит и использован для оценки энергии границы раздела „кристалл–стекло“ [12]. В настоящей работе используются результаты работы [12] для оценки критической толщины аморфной нанопленки (пленки наноскопической толщины), при превышении которой начинается ее отслаивание от подложки.

## 1. Модель межфазной границы в аморфно-кристаллических композитах

Модель межфазной границы „кристалл–стекло“ подробно изложена в работе [12]. Поэтому здесь ограничимся сжатым изложением основных положений модели, которые необходимы для предмета настоящей работы — исследования процессов отслаивания аморфных нанопленок от кристаллических подложек.

Такие особенности структуры металлических и ковалентных стекол, как отсутствие дальнего трансляционного порядка, существование ближнего ориентационного порядка, однородность структуры на среднемасштабном уровне и локальные искажения структуры, эффективно описываются в рамках дисклинационных моделей [13–15]. Последние представляют стекла как сплошные среды с беспорядочно распределенными дисклинационными дефектами, нарушающими дальний ориентационный порядок и ответственными за локальные искажения структуры. При этом выделяют два типа дисклинационных дефектов [14]: непрерывно распределенные дисклинации отрицательной мощности и изолированные дисклинации с большой положительной мощностью. Непрерывно распределенные дисклинации отвечают за непрерывную кривизну структуры стекол [14], а изолированные дисклинации компенсируют эту кривизну. Такое дисклинационное представление аморфной фазы в виде сплошной среды, содержащей дисклинационные дефекты, удобно для теоретического описания упругих полей и процессов пластической деформации в аморфных структурах [12,14,15].

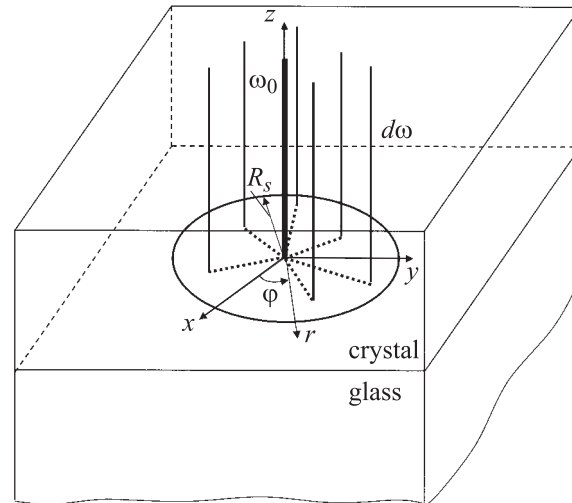
На основе дисклинационных моделей [13–15] аморфной структуры в работе [12] было предложено следующее описание границ „кристалл–стекло“ в аморфно-кристаллических композитах. Согласно закону сохранения дисклинационного заряда [14,15], линии дисклинаций не могут заканчиваться внутри сплошной среды: они обязаны либо выходить на свободную поверхность, либо образовывать петли. Поэтому линии дисклинаций, которые выходят на межфазную границу, не обрываются на ней, а продолжают в ее плоскости. Дисклинационные сегменты, лежащие в плоскости межфазной границы, приводят к возникновению ориентационного несоответствия между аморфной и кристаллической фазами (подробнее см. [12]), а сами дисклинационные сегменты трактуются как дефекты несоответствия [12].

Следуя [12], при рассмотрении аморфно-кристаллического композита будем использовать следующие упрощающие предположения.

1) Обе фазы являются упругоизотропными средами с одинаковыми значениями модуля сдвига  $\mu$  и коэффициента Пуассона  $\nu$ .

2) Аморфная фаза содержит прямые клиновые дисклинации, нормальные к поверхности раздела „кристалл–стекло“ (рис. 1).

3) Клиновые дисклинации, расположенные в аморфной фазе, подразделяются на две категории [13–15]: дисклинации с отрицательной мощностью  $\omega_0 \approx -0.5$  и непрерывно распределенные дисклинации с бесконечно малой положительной мощностью  $d\omega$  (рис. 1). Дисклинации мощностью  $d\omega$  (обозначаемые в дальнейшем как  $d\omega$ -дисклинации) непрерывно распределены в цилиндрической области наноскопического радиуса  $R_s$ , ось которой совпадает с линией дисклинации мощностью  $\omega_0$  (рис. 1), и обеспечивают полное экранирование полей напряжений, создаваемых этой дисклинацией.



**Рис. 1.** Клиновая дисклинация большой мощности  $\omega_0$  (сплошная жирная линия), окруженная непрерывно распределенными клиновыми дисклинациями мощностью  $d\omega$  в аморфной пленке на кристаллической подложке. Некоторые из  $d\omega$ -дисклинаций показаны прямыми тонкими линиями. Дисклинации  $\omega_0$  и  $d\omega$  соединены сегментами дисклинаций кручения (штриховые) в плоскости границы „кристалл–стекло“. Клиновые дисклинации и дисклинации кручения образуют П-образные полупетли. В цилиндрической области радиуса  $R_s$  осуществляется полное экранирование полей напряжений дисклинаций  $\omega_0$  и  $d\omega$ .

Суммарная мощность отрицательной дисклинации  $\omega_0$  и положительных дисклинаций  $d\omega$  равна нулю.

4) Дисклинации мощностью  $\omega_0$  однородно распределены в аморфной фазе со средней плотностью  $\sim R_s^{-2}$ . Как следствие дисклинационный ансамбль аморфной фазы вблизи границы „кристалл–стекло“ может быть разбит на экранированные конфигурации, содержащиеся внутри наномасштабных цилиндрических областей, которые в первом приближении не перекрываются и занимают практически весь аморфный материал.

Для удобства расчетов каждая дисклинация мощностью  $\omega_0$  представляется в виде ансамбля отрицательных дисклинаций бесконечно малой мощности  $-d\omega$ , линии которых совпадают с линией этой дисклинации. При этом суммарная мощность дисклинаций мощностью  $-d\omega$  равна  $\omega_0$ . Таким образом, суммарная мощность отрицательных ( $-d\omega$ ) и положительных ( $d\omega$ ) дисклинаций равна нулю, а средние плотности их распределений равны. Поэтому отрицательные дисклинации мощностью  $\omega_0$  и ансамбль окружающих их положительных дисклинаций мощностью  $d\omega$  представимы в виде ансамбля диполей дисклинаций  $d\omega$  и  $-d\omega$ . При этом дисклинации  $d\omega$  смещены относительно оси цилиндрической области, занимаемой дисклинациями, а дисклинации  $-d\omega$  расположены на оси цилиндра.

Как уже упоминалось ранее, введенные таким образом дисклинационные диполи должны продолжаться в плоскости межфазной границы „кристалл–стекло“. Поскольку внутри аморфной фазы предполагается на-

личие клиновых дисклинаций, перпендикулярных межфазной границе, дисклинационные сегменты, лежащие в плоскости границы (дисклинации несоответствия), являются дисклинациями кручения. Будем полагать, что исходный ансамбль прямолинейных клиновых дисклинаций аморфной фазы замыкается дисклинациями кручения (штриховые линии на рис. 1) в П-образные полупетли. В работе [12] показано, что введенные таким образом дефекты имеют не только дисклинационную, но и дислокационную составляющую, т.е. дефектная конфигурация внутри цилиндрической области в аморфной фазе вблизи межфазной границы представляет собой непрерывное распределение П-образных дисклинационно-дислокационных полупетель (дислокаций Вольтерра). В следующем разделе используем изложенную здесь модель межфазной границы „кристалл–стекло“ и результаты работы [12] для расчета условий отслаивания аморфных нанопленок от кристаллических подложек.

## 2. Критерий отслаивания аморфной и кристаллической фаз

Для простоты рассмотрим сначала аморфно-кристаллический композит, состоящий из двух полубесконечных фаз (аморфной и кристаллической) с одинаковым средним расстоянием  $a_0$  между атомами в плоскости межфазной границы. Для оценки условий отслаивания аморфной и кристаллической областей материала сравним энергию такого композита с суммарной энергией отслоившихся друг от друга аморфной и кристаллической фаз. При этом аморфно-кристаллический композит будем характеризовать распределениями дисклинационно-дислокационных полупетель, а аморфный материал, отслоившийся от кристалла, будем описывать распределениями двусосных дисклинационных диполей, перпендикулярных свободной поверхности этого материала (рис. 2, *a*). Запишем выражения для энергий системы „кристалл–стекло“ до и после отслаивания контактирующих фаз.

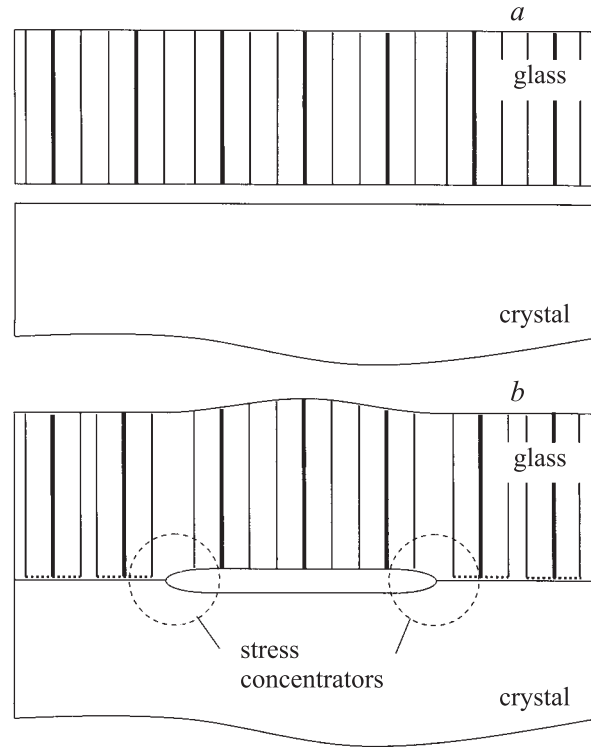
Запишем сначала выражение для энергии (на единицу площади поверхности)  $w_{A+B}$  аморфно-кристаллического композита. Энергия  $w_{A+B}$  представима в виде

$$w_{A+B} = w_0 + \gamma_i + \gamma_{AB}, \quad (1)$$

где  $w_0$  — поверхностная плотность энергии  $W_0$ , запаасаемой распределением дисклинационных диполей (по объему цилиндра радиуса  $R_s$ ) во фрагменте некоторого объема бесконечного аморфного материала,  $\gamma_i$  — поверхностная плотность энергии  $W_i$  межфазной границы, обусловленная замыканием дисклинационных диполей в полупетли,  $\gamma_{AB}$  — химическая энергия границы  $A$  (кристалл)– $B$  (стекло). Величина  $\gamma_i$ , входящая в формулу (1), определяется выражением [12]

$$\gamma_i = \frac{W_i}{\pi R_s^2} = \frac{D\omega_0^2 R_s}{144\pi} \{ (1 + 4\nu)A + 2B + (1 - 4\nu)C \}, \quad (2)$$

где  $D = \mu/[2\pi(1 - \nu)]$ ,  $A \approx 2.76$ ,  $B \approx 0.72$ ,  $C \approx 0.44$ .



**Рис. 2.** Отслаивание аморфной пленки от кристаллической подложки по всей площади межфазной границы (*a*) или на участке межфазной границы (*b*). Линиями показаны дисклинации аморфной фазы, обрывающиеся на образовавшейся в результате отслаивания свободной поверхности или замыкающиеся в полупетли на межфазной границе. Цилиндрические экранированные конфигурации условно изображены тройками дисклинаций (жирные линии соответствуют центральной  $\omega_0$ -дисклинации).

Запишем выражения для удельных энергий (на единицу площади поверхности)  $w_A$  и  $w_B$  отслоившихся друг от друга аморфной и кристаллической фаз. Удельная энергия  $w_A$  кристалла, отслоившегося от аморфного слоя, включает в себя лишь его химическую поверхностную энергию  $\gamma_A$  ( $w_A = \gamma_A$ ). Удельная энергия  $w_B$  полубесконечного аморфного слоя, отслоившегося от кристалла, представима в виде  $w_B = w_0 + \gamma_s + \gamma_B$ . Здесь  $\gamma_B$  — химическая поверхностная энергия, а  $\gamma_s$  — дополнительный отрицательный вклад свободной поверхности в упругую энергию распределения дисклинационных диполей (на единицу площади этой поверхности). Удельная энергия  $\gamma_s$  для полубесконечного аморфного слоя является аналогом удельной энергии  $\gamma_i$  для аморфно-кристаллического композита, только в отличие от последней энергия  $\gamma_s$  обуславливается не замыканием дисклинационных диполей в полупетли, а их выходом на свободную поверхность.

Будем считать, что отслаивание аморфного и кристаллического слоев возможно, если оно приводит к уменьшению энергии системы, т.е. если  $w_A + w_B - w_{A+B} < 0$ . Учитывая записанные выше выражения для  $w_A$ ,  $w_B$  и

$w_{A+B}$ , критерий отслаивания можно переписать в виде

$$\Delta\gamma < \gamma_c, \quad (3)$$

где  $\Delta\gamma = \gamma_A + \gamma_B - \gamma_{AB}$  — разность между суммарной химической поверхностной энергией кристаллического и аморфного слоев и химической энергией границы их раздела, а  $\gamma_c = \gamma_i - \gamma_s$ .

Здесь следует особо отметить, что предложенная модель описывает процесс отслаивания несколько упрощенно. Действительно, формула (3) представляет собой критерий отслаивания пленки от подложки целиком, т.е. сразу по всей площади границы раздела (рис. 2, *a*). В реальности же отслаивание происходит на некотором участке межфазной границы с образованием трещины конечных размеров, как показано на рис. 2, *b*. При описании зарождения такой трещины дополнительно необходимо учитывать эффект концентрации напряжений у краев трещины, а в случае сжатой пленки конечной толщины еще и энергию, связанную с изгибом пленки из-за ее „выпучивания“ над трещиной (рис. 2, *b*). Учет этих факторов является достаточно сложной задачей, выходящей за рамки нашей работы, поэтому мы ограничимся упрощенным описанием процесса отслаивания пленки как целого на основе критерия (3).

Удельную энергию  $\gamma_s$  можно определить соотношением  $\gamma_s = W_s/(\pi R_s^2)$ , где  $W_s$  — дополнительный упругий вклад в энергию одного распределения диполей клиновидных дисклинаций, описывающих аморфную структуру материала (по цилиндрической области радиуса  $R_s$ ), обусловленный наличием свободной поверхности. Энергия  $W_s$ , рассчитанная в Приложении, задается следующей формулой:

$$W_s = -\frac{v^2 D \omega_0^2 R_s^3}{18} (A - 2B + C). \quad (4)$$

Параметры  $A$ ,  $B$  и  $C$  здесь имеют те же значения, что и в формуле (2). Отсюда удельная энергия  $\gamma_s$  записывается как

$$\gamma_s = -\frac{v^2 D \omega_0^2 R_s}{18\pi} (A - 2B + C). \quad (5)$$

Теперь, учитывая выражения (2) и (5) для  $\gamma_i$  и  $\gamma_s$ , получаем следующее выражение для удельной энергии  $\gamma_c$ , входящей в критерий отслаивания (3)

$$\gamma_c = \frac{D \omega_0^2 R_s}{144\pi} q(v), \quad (6)$$

где

$$q(v) = A + 2B + C + 4v(A - C) + 8v^2(A - 2B + C) \\ \approx 4.64 + 9.28v + 14.08v^2. \quad (7)$$

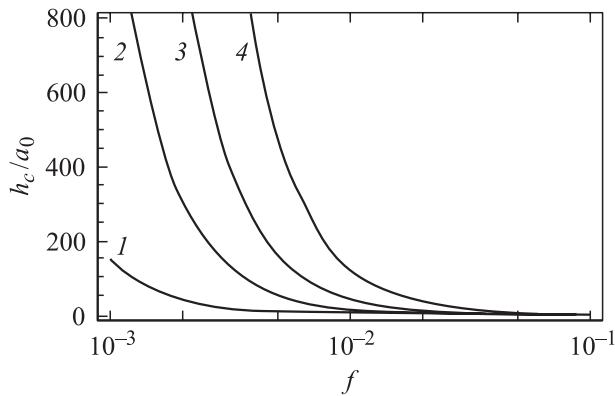
Все записанные выше удельные энергии ( $\gamma_c$ ,  $\gamma_i$  и  $\gamma_s$ ) существенным образом зависят от параметра  $R_s$  — радиуса экранирования полей напряжений дисклинаций. С физической точки зрения  $R_s$  можно трактовать как характерный масштаб структурных неоднородностей в аморфных металлических сплавах [16].

В книге [15] и работе [17] приведены следующие оценки:  $R_s \approx 5a_0$  (где  $a_0$  — среднее межатомное расстояние),  $\omega_0 = -2 \arcsin(1/\sqrt{3}) \approx -70.5^\circ$  для аморфных металлов и  $R_s \approx 5a_0$ ,  $\omega_0 \approx -0.5$  для аморфных сплавов. Тогда при  $\nu = 0.3$  получаем следующие оценки для  $\gamma_c$ :  $\gamma_c/(\mu a_0) = 0.54 \cdot 10^{-2}$  в случае  $\omega_0 \approx -0.5$ , и  $\gamma_c/(\mu a_0) = 3.31 \cdot 10^{-2}$  при  $\omega_0 \approx -70.5^\circ$ .

Рассмотрим теперь случай, когда аморфно-кристаллический композит состоит из полубесконечной кристаллической подложки и аморфной нанопленки толщины  $h \gg R_s$ . В этом случае как в аморфно-кристаллическом композите, так и в аморфной нанопленке, отслоившейся от подложки, появляется (новая) свободная поверхность. (Новую) свободную поверхность аморфной фазы можно рассматривать как источник дополнительных напряжений, необходимых для удовлетворения на ней граничных условий. Поскольку мы предполагаем, что  $h \gg R_s$ , взаимодействием (новой) свободной поверхности с границей раздела в аморфно-кристаллическом композите и со второй свободной поверхностью в аморфной нанопленке, отслоившейся от кристаллической подложки, можно пренебречь. Тогда наличие (новой) свободной поверхности изменяет энергии аморфно-кристаллического композита и аморфной нанопленки, отслоившейся от подложки, на одну и ту же величину  $\gamma_s + \gamma_B$  (где, как и ранее,  $\gamma_s$  и  $\gamma_B$  — удельные упругая и химическая поверхностные энергии). Следовательно, конечная толщина аморфной нанопленки не изменяет условие ее отслаивания.

Пусть теперь среднее межатомное расстояние  $a_g$  в аморфной нанопленке толщины  $h$  отличается от расстояния  $a_c$  между атомами полубесконечной кристаллической подложки в плоскости межфазной границы. Поскольку аморфная фаза моделируется как кристалл, содержащий дисклинационные дефекты, а дисклинации не изменяют объем материала [15] (а значит, и среднее межатомное расстояние), границу „кристалл-стекло“ можно описывать как границу кристаллов с различными параметрами кристаллической решетки  $a_c$  и  $a_g$ . Такая граница характеризуется дилатационным несоответствием [18]  $f = (a_c - a_g)/a_g$ , которое создает в нанопленке однородные упругие деформации  $\epsilon_{xx}^f = \epsilon_{yy}^f = f$  и соответствующие им упругие напряжения (напряжения дилатационного несоответствия)  $\sigma_{xx}^f = \sigma_{yy}^f = 4\pi D(1 + \nu)f$ . Напряжения  $\sigma_{ij}^f$  изменяют энергию аморфно-кристаллического композита на величину  $\Delta W^f = W^f + W^{\Delta-f}$ , где  $W^f$  — собственная энергия напряжений дилатационного несоответствия, а  $W^{\Delta-f}$  — энергия их взаимодействия с полем напряжений  $\tilde{\sigma}_{ij}$  распределения дисклинационно-дислокационных петель, моделирующих структуру аморфной фазы в аморфно-кристаллическом композите.

Расчет  $W^{\Delta-f}$  с помощью выражений [12] для  $\tilde{\sigma}_{ij}$  приводит к следующему результату:  $W^{\Delta-f} = 0$ . Следовательно, приращение энергии  $\Delta W^f$  аморфно-кристаллического композита, вызванное напряжениями  $\sigma_{ij}^f$ , равно  $W^f$ . Поверхностная плотность  $w^f$  энергии  $W^f$  определяется выражением  $w^f = 4\pi D(1 + \nu)f^2 h$ .



**Рис. 3.** Зависимости критической толщины  $h_c$  аморфной пленки, при превышении которой начинается ее отслаивание от кристаллической подложки, от дилатационного несоответствия  $f$  для  $\nu = 0.3$ ,  $R_s = 5a_0$ ,  $\omega_0 = -0.5$ ;  $\Delta\gamma/(\mu a_0) = 0.6 \cdot 10^{-2}$ ,  $10^{-2}$ ,  $2 \cdot 10^{-2}$  и  $5 \cdot 10^{-2}$  (кривые 1–4 соответственно).

Таким образом, поверхностная плотность энергии аморфно-кристаллического композита при наличии дилатационного несоответствия увеличивается на величину  $w^f$ . Условие отслаивания аморфной нанопленки тогда получается аналогично неравенству (2) и имеет вид  $\Delta\gamma < \gamma_c + 4\pi D(1 + \nu)f^2h$ . Как следует из последнего неравенства, при  $\Delta\gamma < \gamma_c$  отслаивание может происходить при любой толщине  $h$  аморфной нанопленки. При  $\Delta\gamma > \gamma_c$  отслаивание энергетически выгодно при превышении толщиной нанопленки  $h$  критического значения  $h_c$  ( $h > h_c$ ). Из последнего соотношения, условия  $\Delta\gamma < \gamma_c + 4\pi D(1 + \nu)f^2h$  и формулы (6) получаем критическую толщину аморфной пленки

$$h_c = \frac{144\pi\Delta\gamma - D\omega_0^2 R_s q(\nu)}{576\pi^2 D(1 + \nu)f^2}. \quad (8)$$

На рис. 3 представлены зависимости критической толщины  $h_c$  от дилатационного несоответствия  $f$  для различных значений  $\Delta\gamma/(\mu a_0)$  и следующих значений параметров:  $\nu = 0.3$ ,  $R_s = 5a_0$ ,  $\omega_0 = -0.5$ . (Выше для таких же значений параметров была получена следующая оценка для  $\gamma_c$ :  $\gamma_c/(\mu a_0) = 0.54 \cdot 10^{-2}$ . Поэтому при построении зависимостей на рис. 3 использовались значения  $\Delta\gamma/(\mu a_0) > 0.54 \cdot 10^{-2}$ ). Из рис. 3 следует, что критическая толщина  $h_c$  уменьшается с ростом дилатационного несоответствия  $f$  и/или уменьшения параметра  $\Delta\gamma$ .

Формула (8) может быть использована при описании взаимосвязи материальных и структурных характеристик аморфной пленки с ее макроскопическим механическим поведением (сопротивлением отслаиванию). Эти структурные характеристики (дисклинационная мощность  $\omega_0$ , дилатационное несоответствие  $f$ , радиус экранирования  $R_s$  полей напряжений дисклинаций), влияющие согласно формуле (8) на критическую толщину  $h_c$ ,

чувствительны к выбору материалов подложки и аморфной нанопленки, а также к параметрам технологических процессов изготовления и обработки нанокompозитов „кристалл–аморфная нанопленка“. Так, выбор подложки позволяет варьировать дилатационное несоответствие. Если пленка и подложка имеют разные коэффициенты термического расширения, несоответствие можно также регулировать, изменяя температуру подложки. Технологии изготовления аморфных пленок позволяют влиять на структурные параметры  $\omega_0$  и  $R_s$  и сцепление аморфных пленок с кристаллическими подложками. В рамках дисклинационного описания аморфных сред величина  $R_s$  близка к характерному масштабу длины, на котором в экспериментах по дифракции нейтронов [16] наблюдаются короткодействующие поля напряжений [17]. Современные экспериментальные методики, однако, не позволяют измерить дисклинационную мощность  $\omega_0$ . Поэтому ее приходится оценивать при помощи результатов компьютерных моделей и теоретического анализа аморфных структур.

### 3. Заключение

На основе модели [12] межфазной границы раздела в двухфазном аморфно-кристаллическом композите, описываемой как полукогерентная граница с высокой плотностью дисклинаций несоответствия, был проведен теоретический анализ условий отслаивания аморфной пленки от кристаллической подложки. Получено выражение (8), определяющее критическую толщину  $h_c$  пленки, при превышении которой отслаивание становится энергетически выгодным. Указанное выражение связывает толщину пленки с дилатационным несоответствием и характеристиками дисклинационного ансамбля пленки (дисклинационной мощностью  $\omega_0$  и радиусом экранирования  $R_s$  полей напряжений дисклинаций). Полученные результаты могут быть использованы для развития технологий производства аморфных пленок на кристаллических подложках с высокими адгезивными свойствами, а также для оценки стабильности структуры и служебных свойств аморфно-кристаллических нанокompозитов.

### Приложение. Вклад свободной поверхности в энергию распределения дисклинационных диполей

Получим выражение для энергии  $W_s$  — вклада свободной поверхности в энергию одного распределения диполей клиновидных дисклинаций. Для расчета энергии  $W_s$  необходимо получить выражения для поля напряжений  $\sigma_{ij}$ , создаваемых распределением дисклинационных диполей, перпендикулярных плоской свободной поверхности  $z = 0$ . Поле напряжений  $\sigma_{ij}$  можно получить непосредственным интегрированием выражений [15,19,20] для полей напряжений изолированных дисклинационных

диполей, перпендикулярных свободной поверхности. Однако воспользуемся другим, более простым способом вычислений и рассчитаем  $\sigma_{ij}$  с помощью выражений для поля напряжений  $\sigma_{ij}^\infty$ , создаваемых распределением дисклинационных диполей в бесконечной среде [12] (система координат здесь и далее связана с цилиндрической областью, как показано на рис. 1):

$$\sigma_{rr}^\infty = -\frac{D\omega_0}{4} \times \left\{ (\tilde{r}^2 - 4 \ln \tilde{r})\Theta(1 - \tilde{r}) + \frac{1}{\tilde{r}^2} \Theta(\tilde{r} - 1) \right\}, \quad (\text{П.1})$$

$$\sigma_{\varphi\varphi}^\infty = -\frac{D\omega_0}{4} \times \left\{ (3\tilde{r}^2 - 4 \ln \tilde{r} - 4)\Theta(1 - \tilde{r}) - \frac{1}{\tilde{r}^2} \Theta(\tilde{r} - 1) \right\}, \quad (\text{П.2})$$

$$\sigma_{zz}^\infty = -\nu D\omega_0 (\tilde{r}^2 - 2 \ln \tilde{r} - 1)\Theta(1 - \tilde{r}), \quad (\text{П.3})$$

$$\sigma_{rz}^\infty = \sigma_{z\varphi}^\infty = \sigma_{\varphi z}^\infty = 0, \quad (\text{П.4})$$

где  $\tilde{r} = r/R_s$ ,  $\Theta(t)$  — функция Хевисайда, равная 1 при  $t > 0$  и нулю при  $t < 0$ .

Для расчета  $\sigma_{ij}$  представим это поле напряжений в виде  $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^\infty + \sigma_{ij}^s$ , где  $\sigma_{ij}^s$  — дополнительное поле напряжений, необходимое для удовлетворения граничных условий на свободной поверхности  $z = 0$ . В русле общего метода [19] будем искать  $\sigma_{ij}^s$  как поле напряжений, создаваемое в бесконечной среде виртуальными круговыми призматическими дислокационными петлями, распределенными по поверхности  $z = 0$ . Пусть эти дислокационные петли имеют общий центр  $r = 0$  (совпадающий с осью цилиндрической области радиуса  $R_s$ ), различные радиусы  $a$  и одинаковые векторы Бюргерса  $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_z$ . Тогда напряжение  $\sigma_{ij}^s$  представимо в виде

$$\sigma_{ij}^s(r, z) = \int_0^\infty \rho(a) \sigma_{ij}^l(r, z, a) da, \quad (\text{П.5})$$

где  $\rho(a)$  — плотность распределения петель, а  $\sigma_{ij}^l(r, z, a)$  — поле напряжений виртуальной дислокационной петли радиуса  $a$ . Напряжения  $\sigma_{ij}^l$  даются следующими выражениями [19,21]:

$$\sigma_{rr}^l = -M \left[ \frac{1-2\nu}{r} J(1, 1; 0) + \frac{|z|}{a^2} J(1, 0; 2) - \frac{1}{a} J(1, 0; 1) - \frac{|z|}{ar} J(1, 1; 1) \right], \quad (\text{П.6})$$

$$\sigma_{\varphi\varphi}^l = -M \left[ \frac{2\nu-1}{r} J(1, 1; 0) - \frac{2\nu}{a} J(1, 0; 1) + \frac{|z|}{ar} J(1, 1; 1) \right], \quad (\text{П.7})$$

$$\sigma_{zz}^l = M \left[ \frac{1}{a} J(1, 0; 1) + \frac{|z|}{a^2} J(1, 0; 2) \right], \quad (\text{П.8})$$

$$\sigma_{rz}^l = M \frac{z}{a^2} J(1, 1; 2), \quad (\text{П.9})$$

$$\sigma_{r\varphi}^l = \sigma_{z\varphi}^l = 0, \quad (\text{П.10})$$

где  $M = \mu b / [2(1 - \nu)]$ , а  $J(m, n; p) = \int_0^\infty J_m(t) J_n\left(\frac{r}{a} t\right) t^p \times \exp\left(-\frac{|z|}{a} t\right) dt$  — интегралы Лифшица-Ханкеля [22],  $J_\nu(t)$  — функции Бесселя. В дальнейшем будем использовать другую форму записи этих интегралов, получаемую из последнего выражения заменой переменной  $t = \kappa a$ :  $J(m, n; p) = a^{p+1} \int_0^\infty J_m(\kappa a) J_n(\kappa r) \kappa^p \exp(-\kappa |z|) d\kappa$ .

Граничные условия на свободной поверхности  $z = 0$  имеют вид:  $\sigma_{rz}^s(r, z = 0) = -\sigma_{rz}^\infty(r)$ ,  $\sigma_{zz}^s(r, z = 0) = -\sigma_{zz}^\infty(r)$ . Как следует из формул (П.4), (П.5) и (П.9), первое из этих условий автоматически удовлетворяется при любых значениях  $r$ . Подставляя выражения (П.3), (П.5) и (П.8) во второе граничное условие и меняя порядок интегрирования, получаем

$$\int_0^\infty H_1(\kappa) J_0(\kappa r) \kappa d\kappa = \frac{\nu D\omega_0}{M} (\tilde{r}^2 - 2 \ln \tilde{r} - 1) \Theta(1 - \tilde{r}), \quad (\text{П.11})$$

где  $H_1(\kappa) = \int_0^\infty \rho(a) J_1(\kappa a) a da$  — преобразование Ханкеля [23] функции  $\rho(a)$  с ядром  $J_1(\kappa a)$ . Формула (П.11) представляет собой интегральное уравнение относительно функции  $H_1(\kappa)$ . Выражение в левой части этого уравнения представляет собой преобразование Ханкеля [23]  $H_0(r) = \int_0^\infty H_1(\kappa) J_0(\kappa r) \kappa d\kappa$  функции  $H_1(\kappa)$  с ядром  $J_0(\kappa r)$ . Обратное преобразование имеет вид [23]  $H_1(k) = \int_0^\infty H_0(r) J_0(kr) r dr$ , т.е. совпадает с прямым преобразованием Ханкеля функции  $H_0(r)$ . Таким образом, применяя к обеим частям равенства (П.11) преобразование Ханкеля с ядром  $J_0(kr)$ , получаем

$$H_1(k) = \frac{\nu D\omega_0 R_s^2}{3M} [f_1(kR_s) - f_2(kR_s)], \quad (\text{П.12})$$

где

$$f_1(t) = -\frac{2[tJ_1(t) + J_2(t)]}{t^2} + 2 {}_1F_2(1/2; 1, 3/2; -t^2/4), \quad (\text{П.13})$$

$$f_2(t) = \frac{2[t(J_0(t) - 3) + (t^2 + 4)J_1(t)]}{t^3} + \frac{t^2}{12} {}_1F_2(3/2; 5/2, 3; -t^2/4), \quad (\text{П.14})$$

а  ${}_1F_2(a_1; b_1, b_2; p)$  — обобщенные гипергеометрические ряды [23].



Для расчета напряжений  $\sigma_{ij}^s$  подставим выражение для интегралов  $J(m, n; p)$  и формулы (П.6)–(П.10) в формулу (П.5) и изменим в получившихся выражениях для напряжений  $\sigma_{ij}^s$  порядок интегрирования. Подставляя в эти выражения равенство  $H_1(\kappa) = \int_0^\infty \rho(a) J_1(\kappa a) a da$  и формулу (П.12), получаем следующие формулы для  $\sigma_{ij}^s$ :

$$\sigma_{rr}^s = -\frac{\nu D \omega_0}{3} \int_0^\infty [f_1(k) - f_2(k)] e^{-k|\tilde{z}|} k dk \times \left\{ (k|\tilde{z}| - 1) J_0(k\tilde{r}) - [k|\tilde{z}| - (1 - 2\nu)] \frac{J_1(k\tilde{r})}{k\tilde{r}} \right\}, \quad (\text{П.15})$$

$$\sigma_{\varphi\varphi}^s = -\frac{\nu D \omega_0}{3} \int_0^\infty [f_1(k) - f_2(k)] e^{-k|\tilde{z}|} k dk \times \left\{ 2\nu J_0(k\tilde{r}) - [k|\tilde{z}| - (1 - 2\nu)] \frac{J_1(k\tilde{r})}{k\tilde{r}} \right\}, \quad (\text{П.16})$$

$$\sigma_{zz}^s = -\frac{\nu D \omega_0}{3} \int_0^\infty [f_1(k) - f_2(k)] J_0(k\tilde{r}) (k|\tilde{z}| + 1) e^{-k|\tilde{z}|} k dk, \quad (\text{П.17})$$

$$\sigma_{rz}^s = -\frac{\nu D \omega_0}{3} \tilde{z} \int_0^\infty [f_1(k) - f_2(k)] J_1(k\tilde{r}) e^{-k|\tilde{z}|} k^2 dk, \quad (\text{П.18})$$

$$\sigma_{r\varphi}^s = \sigma_{z\varphi}^s = 0, \quad (\text{П.19})$$

где  $\tilde{z} = z/R_s$ .

Полное поле напряжений  $\sigma_{ij}$ , создаваемое распределением двусосных дисклинационных диполей, перпендикулярных свободной поверхности, равно сумме полей напряжений  $\sigma_{ij}^\infty$  и  $\sigma_{ij}^s$ , определяемых формулами (П.1)–(П.4) и (П.15)–(П.19) соответственно.

Теперь энергия  $W_0 + W_s$  распределения дисклинационных диполей, перпендикулярных свободной поверхности, рассчитывается по формуле [24]  $W_0 + W_s = -\frac{1}{2} \int_{V_g} \sigma_{ij} \beta_{ji}^* dV$ , где  $\beta_{ji}^*$  — суммарная пластическая дисторсия, создаваемая ансамблем дисклинационных диполей, а  $V_g$  — объем аморфного материала. Учитывая, что  $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^\infty + \sigma_{ij}^s$ , а  $W_0 = -(1/2) \int_{V_g} \sigma_{ij}^\infty \beta_{ji}^* dV$  [12], получаем

$$W_s = -\frac{1}{2} \int_{V_g} \sigma_{ij}^s \beta_{ji}^* dV. \quad (\text{П.20})$$

В цилиндрической системе координат  $(r, \varphi, z)$  пластическая дисторсия  $\beta_{ji}^*$  имеет единственную ненулевую компоненту [12]  $\beta_{\varphi\varphi}^* = [\omega_0(\tilde{r}^3 - 3\tilde{r} + 2)] / (6\pi\tilde{r}) \times \Theta(1 - \tilde{r})\Theta(\tilde{z})$ .

Подстановка в (П.20) последнего выражения для  $\beta_{\varphi\varphi}^*$  и формулы (П.16) для  $\sigma_{\varphi\varphi}^s$  и интегрирование получившегося выражения приводит нас к формуле (4).

## Список литературы

- [1] В.Е. Пуха, В.В. Варганов, И.Ф. Михайлов, А.Н. Дроздов. ФТТ **46**, 8, 1526 (2004).
- [2] Ю.Е. Калинин, А.Н. Ремизов, А.В. Ситников. ФТТ **46**, 11, 2076 (2004).
- [3] I.A. Ovid'ko. J. Phys. D **27**, 5, 999 (1994).
- [4] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovidk'ko. Phys. Rev. B **61**, 6, 064 515 (2001).
- [5] R.J. Herbert, J.H. Perepezko. Nanomaterials for structural applications. MRS Symp. Proc. Vol. 740 / Eds C.C. Berndt, T. Fischer, I.A. Ovid'ko, T. Tsakalagos, G. Skandan. MRS, Pittsburg (2003). P. 267.
- [6] H. Zeng, J. Qui, X. Jiang, C. Zhu, F. Gan. J. Phys.: Condens. Matter **16**, 16, 2901 (2004).
- [7] М.С. Бреслер, О.Ю. Гусев, Е.И. Теруков, А. Froitzheim, W. Fuhs. ФТТ **46**, 1, 18 (2004).
- [8] С.В. Гайслер, О.И. Семенова, Р.Г. Шарафутдинов, Б.А. Колесов. ФТТ **46**, 8, 1484 (2004).
- [9] S. Veprek. Rev. Adv. Mater. Sci. **5**, 1, 6 (2003).
- [10] I.A. Ovid'ko. Phil. Mag. Lett. **79**, 9, 709 (1999).
- [11] И.А. Овидько. ФТТ **41**, 9, 1637 (1999).
- [12] S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko, A.E. Romanov, A.G. Sheinerman. J. Phys.: Condens. Matter **17**, 4, 619 (2005).
- [13] D.R. Nelson. Phys. Rev. B **28**, 10, 5515 (1983).
- [14] N. Rivier. Adv. Phys. **36**, 95 (1987).
- [15] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. Дисклинации в кристаллах. Наука, Л. (1986). 224 с.
- [16] E. Nold, S. Steeb, P. Lamparter. Zeit. Naturforsch. A **35**, 610 (1980).
- [17] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, A.E. Romanov. Rad. Eff. Def. Solids **129**, 3–4, 239 (1994).
- [18] L.B. Freund, S. Suresh. Thin film materials: Stress, defect formation and surface evolution. Cambridge University Press (2004). 768 p.
- [19] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. ФТТ **45**, 9, 1626 (2003).
- [20] А.Е. Романов. Поверхность **12**, 121 (1982).
- [21] J. Dundurs, N.J. Salamon. Phys. Stat. Sol. (b) **50**, 1, 125 (1972).
- [22] G. Eason, B. Noble, I.N. Sneddon. Phil. Trans. Roy. Soc. London **247**, 935, 529 (1955).
- [23] В.А. Диткин, А.П. Прудников. Интегральные преобразования и операционное исчисление. Наука, М. (1974). 544 с.
- [24] T. Mura. Micromechanics of Defects in Solids. Martinus Nijhoff, Dordrecht (1987). 587 p.