Санкт-Петербургский государственный университет

**Кафедра вычисленных методов механики деформируемого тела**

**Соколова Дарья Сергеевна**

**Выпускная квалификационная работа бакалавра**

**Морфологическая неустойчивость цилиндрической микропоры в напряженном твердом теле**

Направление 010400

Прикладная математика и информатика

Научный руководитель,  
кандидат физ.-мат. наук,

доцент

Костырко С.А.

Санкт-Петербург

2016

Содержание

[Введение 3](#_Toc449951864)

[Глава 1. Аналитическое решение 7](#_Toc449951865)

[1.1. Постановка задачи 7](#_Toc449951866)

[1.2. Метод возмущений 9](#_Toc449951867)

[1.3. Эволюционное уравнение 12](#_Toc449951868)

[Глава 2. Численное решение 16](#_Toc449951869)

[2.1. Молекулярное моделирование 16](#_Toc449951870)

[Заключение 20](#_Toc449951871)

[Литература 22](#_Toc449951872)

# Введение

Создание бездефектных полупроводниковых пленок и оптических волокон является одним из приоритетных направлений современной микро- и оптоэлектроники. Однако, многие экспериментальные и теоретические исследования отмечают, что уже на стадии выращивания образуются микропоры и трещины [1-3]. В дальнейшем, в процессе эксплуатации данные дефекты эволюционируют, что непременно приводит к ухудшению свойств и снижению срока службы приборов [4]. Изучение пористых материалов также вызывает интерес в связи с использованием их при создании фильтров и детекторов в наноэлектронике. Кроме того, такого рода материалы зачастую находят применение в имплантологии. Их свойства близки к параметрам человеческой кости, что приводит к хорошей интеграции с биологическими тканями [5]. При этом стоит отметить, что увеличение пористости ведет к деградации прочностных и упругих характеристик. Таким образом, исследование эволюции пористой структуры при различных схемах нагружения представляет значительный интерес с точки зрения механики разрушения.

Хорошо известно, что дефекты в материалах могут возникать не только на стадии их создания, но и в ходе эксплуатации. Однако, классические модели механики разрушения не позволяют описать процесс их зарождения и роста, что стимулировало целый ряд исследований по разработке новых теоретических моделей. Так, к примеру, зарождение трещин на поверхности твердого тела, в первую очередь, связывают с морфологическими изменениями ее формы, которые происходят в результате действия поля механических напряжений. Основной движущей силой таких преобразований является стремление системы к минимизации упругой и поверхностной энергии, что в силу пониженной устойчивости поверхностных атомных слоев приводит к диффундированию атомов вдоль поверхности. Этот процесс приводит к образованию микрорельефа, который в дальнейшем при определенных условиях эволюционирует в острые трещинообразные впадины.

В работах Азаро и Тиллера был сформулирован подход, при котором свободная поверхность твердого тела рассматривалась как фазовая граница между материалом и средой [6]. При этом предполагалось изменение ее формы со временем, что позволило вывести эволюционное уравнение и получить условия неустойчивости поверхности к малым синусоидальным возмущениям. В качестве основного механизма потери устойчивости рассматривалась поверхностная диффузия, движимая разностью химических потенциалов на вершине и дне впадин. При этом было отмечено, что критическое значение длины волны прямопропорционально отношению поверхностной энергии к упругой энергии деформации, вычисленной на возмущенной поверхности. Этот факт в дальнейшем был подтвержден Гринфельдом и Сроловитцем независимо друг от друга [7, 8]. В работах Грилье и Пыткина благодаря учету постоянного поверхностного напряжения выявлена чувствительность процесса волнообразования поверхности тела к изменению знака действующих продольных напряжений [9-10].

В дальнейшем подход, разработанный Азаро и Тиллером, был использован для исследования поверхностной потери устойчивости пленочных покрытий в предположении, что форма потери устойчивости захватывает лишь верхнюю часть поверхностного слоя [6]. Как и следовало ожидать, морфология поверхности в этом случае зависела от толщины пленки и относительной жесткости пленочной системы. Стоит также отметить совместные работы Кима и Влассака, а также Костырко и Шувалова, в которых предложенный ранее метод был обобщен для многослойного пленочного покрытия [11-13]. Однако, существует и другой подход к моделированию потери устойчивости пленочных структур, при котором предполагается, что поверхностное покрытие ведет себя как пластина, лежащая на упругом основании. Таким образом, происходит искривление не только свободной, но и межфазной поверхности. Данный подход был реализован в работах Морозова, Паукшто, Товстика, Семенова, где рассмотрены вопросы устойчивости однослойных и многослойных пластин, лежащих на упругом основании, с учетом термодинамических характеристик [14-16].

Поверхностная диффузия является ведущим, но не единственным механизмом формирования рельефа поверхности. Маллинз в своих работах сделал предположение, что при высоких температурах благодаря капиллярному эффекту возникает движение атомов вглубь материала, т. е. в приповерхностном слое имеет место объемная диффузия, также влияющая на изменение формы поверхности тела [17]. Им было показано, что эффект этого влияния зависит от уровня температуры и неоднородности распределения напряжений из-за искривления поверхности. В исследованиях Пэнэта, Шиа, Кэхилла проведен анализ совместного влияния объемной и поверхностной диффузии на морфологическую устойчивость поверхности твердого тела [18].

Если же говорить о зарождении микротрещин в объеме материала, то здесь также может быть предложена модель, основанная на термодинамическом подходе. Так, микропоры в твердом теле могут формироваться при слиянии вакансий. На стадии роста их форма подвержена различным флуктуациям: в результате действия механической нагрузки происходит перераспределение атомов на поверхности зародыша, в силу чего он начинает расти и менять свою форму. В работе Гао путем минимизации полной энергии системы было показано, что цилиндрическая пора может менять свою форму на менее симметричную при действия критической нагрузки [19]. Чуть позже были получены аналогичные результаты, но уже с учетом уравнений термодинамики [20]. Далее этот подход был применен для исследования кинетики роста зародыша [21]. В исследовании Хе и Хуанга была предложена конечно-элементная модель развития эллипсоидальной трещины, основанная на использовании диффузионных уравнений [22].

Заметим, что во всех вышеперечисленных работах не учитывался тот факт, что физико-механические свойства приповерхностных слоев существенно отличаются от аналогичных свойств в глубине тела. Стоит отметить, что на макроуровне это различие практически не отражается на свойствах и поведении всего тела в целом. Однако, в случае наноразмерных структур это различие проявляется, в частности, в заметном влиянии поверхностных напряжений на физические свойства материала [23]. Кроме того, поверхностные напряжения являются причиной размерных эффектов, т.е. зависимости характеристик материала от параметра размерности дефектов [24].

Цель настоящей работы заключается в исследовании процесса морфологической трансформации микропор цилиндрической формы под действием диффузионных процессов с использованием метода, который был разработан ранее для пленочных покрытий [25, 26]. Считается, что напряженное твердое тело находится в условиях плоской деформации. В результате действия механической нагрузки происходит перераспределение атомов на поверхности поры, в силу чего она начинает расти и менять свою форму. На основе уравнений термодинамики и полученного ранее в работе [27] решения о напряженно-деформированном состоянии твердого тела с почти круговым отверстием проанализировано влияние физических и геометрических параметров на устойчивость дефектов. С использованием метода молекулярной динамики исследована кинетика диффузионного роста.

# Глава 1. Аналитическое решение

## Постановка задачи

В качестве модели твердого тела с отдельно взятым зародышем рассмотрим упругую плоскость комплексного переменного с круговым вырезом радиуса . Здесь , – полярная система координат, – мнимая единица.

Морфологическое изменение поверхности микропоры со временем будем описывать следующей функцией

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

Рис. 1. Модель твердого тела с круговым отверстием



Устойчивому состоянию цилиндрической формы будут отвечать те значения входящих в решение задачи параметров, при которых амплитуда возмущения со временем стремиться к нулю

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

Предполагается, что поверхность микропоры свободна от действия нормальных и касательных усилий

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3) |

а на бесконечности заданы напряжения в декартовой прямоугольной системе координат (ДПСК) и угол поворота

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4) |

На рис. 2 построены границы отверстия , которые определяются следующим соотношением:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (5) |

где , – малый параметр, равный максимальному отклонению границы отверстия от единичной окружности, при , или если сделать небольшие преобразования .

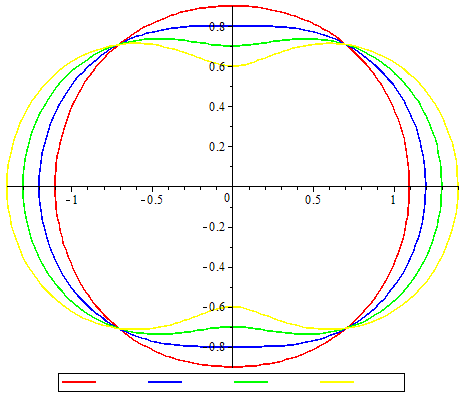


Рис. 2. Границы круговых отверстий при различных значениях параметра.

## Метод возмущений

Для решения задачи используем комплексные потенциалы Гурса-Колосова и метод Мусхелишвили [28]. Согласно работам [28, 29] вектор напряжений на площадке с нормалью выражается через две голоморфные вне отверстия (область ) функции , при помощи равенства

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6) |

где , , – угол между площадкой и осью .

Следуя [27], введем новую функцию , голоморфную в конечной области с границей , которая симметрична кривой относительно единичной окружности,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (7) |

Сделаем подстановку (7) уравнения в (6), осуществим предельный переход при , и, как показано в [30], приходим к следующему равенству:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (8) |

В (8) вдоль касательной к возьмем приращение . С учетом (5), получим , где В результате получим краевое условие, которому должны удовлетворять функции и :

|  |  |
| --- | --- |
|  | (9) |

В уравнениях (8) – (9) приняты следующие обозначения: при , при , .

Так как форма границы зависит от малого параметра , то функции должны зависеть от этого параметра, и их можно представить в виде сходящихся степенных рядом по [31]

|  |  |
| --- | --- |
|  | (10) |

В свою очередь разложим граничные значения функции на и функции в соответствующие ряды Тейлора в окрестности окружности . Тогда, как показано в [30], получим разложения для всех функций в (9) при :

|  |  |
| --- | --- |
|  | (11) |

Принимая во внимание разложения (10), (11) собираем в (9) коэффициенты при . Тогда для каждого приближения проходим к краевой задаче Римана – Гильберта о скачке функции , голоморфной вне единичной окружности :

|  |  |
| --- | --- |
|  | (12) |
|  | (13) |

Здесь , – известные функции, зависящие при от всех предыдущих приближений.

Согласно Мусхелишвили Н. И. [28] решение задачи (12) имеет вид

|  |  |
| --- | --- |
|  | (14) |

где а в свою очередь

|  |  |
| --- | --- |
| , | (15) |

что следует из условий на бесконечности (4)

Тогда в нулевом и первом приближениях функции в (12) и (14) равны:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16) |

Из (13) и (14) получаем комплексные потенциалы в нулевом приближении, которые отвечают решению соответствующей краевой задачи для кругового отверстия единичного радиуса

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17) |

Для нахождения первого приближения рассмотрим отверстие, форма которого определяется функцией (5). Для этого подставим (17) в (16) и затем в (14). Учитывая уравнение (13) после интегрирования получим выражения для комплексных потенциалов в первом приближении

|  |  |
| --- | --- |
|  | (18) |

С учетом (10), (15), (17) из последнего равенства следующее выражение для окружного напряжения на границе в первом приближении

|  |  |
| --- | --- |
|  | (19) |

Для случая границы отверстия, определяемой функцией при , выражения для комплексных потенциалов примут вид

|  |  |
| --- | --- |
|  | (20) |

Тогда выражение для окружного напряжения на границе

|  |  |
| --- | --- |
|  | (21) |

## Эволюционное уравнение

В качестве основного механизма волнообразования рассматривается поверхностная диффузия. В соответствии с работами [6, 33, 34] выражение для скорости движения точек поверхности в нормальном направлении имеет вид

|  |  |
| --- | --- |
|  | (22) |
|  |  |

Следуя работам [12, 13], будем считать, что эволюция поверхности микропоры происходит под действием поверхностной диффузии, определяемой производной химического потенциала. При этом в выражении для химического потенциала

|  |  |
| --- | --- |
|  | (23) |

мы пренебрегаем температурным слагаемым и в качестве полной энергии системы рассматриваем сумму упругой энергии деформации и поверхностной энергии , в данном случае она постоянна. Таким образом, на основе первого закона Фика

|  |  |
| --- | --- |
|  | (24) |
|  |  |

и закона сохранения масс запишем выражение для скорости роста зародыша

|  |  |
| --- | --- |
|  | (25) |

В (22) - (25) приняты обозначения: – атомный объем, – коэффициент поверхностной диффузии, – концентрация вакансий вблизи возмущенной поверхности поры, – постоянная Больцмана, – абсолютная температура, – локальная кривизна поверхности . Дифференцирование по параметру означает дифференцирование по направлению, касательному к поверхности.

Для интегрирования эволюционного уравнения (25) необходимо определить упругую энергию деформации на искривленной поверхности (1) при действии усилий на бесконечности (4) и граничных условий (3), а также вычислить кривизну . Следуя методу возмущений [27], функции и находим в первом приближении. Напомним, что в качестве малого параметра рассматривается максимальное отклонение возмущенной границы микропоры от окружности радиуса (1)

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26) |

здесь , – параметры Ламе.

Таким образом, задача сводится к вычислению на возмущенной поверхности микропоры окружных напряжений нулевого и первого приближения , соответственно. Стоит заметить, что процесс морфологической потери устойчивости зародыша рассматривается нами в квазистатической постановке, в силу чего напряженное состояние твердого тела определяется в ходе решения статической задачи плоской теории упругости (1), (3), (4) при фиксированном значении времени . Как было показано выше, решение соответствующей краевой задачи [27] основывается на использовании комплексных потенциалов Гурса-Колосова [35] и соотношений Мусхелишвили [28]

|  |  |
| --- | --- |
|  | (27) |

С учетом соотношений (1), (26), (27) интегрирование уравнения (25) при условии приводит к следующей зависимости амплитуды от времени , физических и геометрических параметров задачи

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28) |

Принимая во внимание условие (2), приходим к критерию устойчивости формы микропоры к возмущениям вида (1)

|  |  |
| --- | --- |
|  | (29) |

Критерий (29) позволяет определить критическое значение радиуса микропоры при фиксированном значении усилий , а также критическое значение усилий при фиксированном значении радиуса , соответственно

Так, например, при конкретных взятых данных для кристаллита меди , () получаем значение . Усилия при заданных параметрах Ламе равны , где , а критическое значение радиуса соответственно В таком случае наблюдается качественное совпадение с полученными результатами Gao [21]. Количественное расхождение может быть из-за применения разных методов, в данном случае относительная разность равна 20%.

# Глава 2. Численное решение

## 2.1. Молекулярное моделирование

Рассмотренный выше подход позволяет лишь определить значение параметров, при которых происходит потеря морфологической устойчивости поверхности зародыша. Однако, в силу того, что задача рассматривается в линейной постановке, мы не можем проследить кинетику данного процесса.

Существует две основные группы методов, которые позволяют моделировать поведение материала на молекулярном уровне:

* Метод Монте-Карло – генерирует структуры со случайными параметрами, на основе оптимизации которых делается некоторое обобщение.
* Молекулярная динамика – из численного решения системы уравнений классической Ньютоновской механики определяется траектория каждого атома рассматриваемой структуры.

Для того, чтобы изучить эволюцию формы микропоры, было предложено использовать метод молекулярной динамики.

Молекулярная динамика (МД) является одним из наиболее мощных вычислительных методов, эффективно применяемых для моделирования физических и биологических систем [36].

В рамках указанного метода численно решается система уравнений Ньютона, при этом для описания движения частиц могут быть использованы различные потенциалы взаимодействия.

Обычно, выделяют три типа потенциалов межатомного и межмолекулярного взаимодействия:

* Эмпирические (Морзе, Леннарда-Джонса, Борна-Майера), в которых межатомное взаимодействие представлено дифференцируемой функцией, где в качестве аргумента выступает расстояние между двумя атомами, а параметры определяются из условий соответствия рассчитанных и экспериментальных данных.
* Полуэмпирические (Финиста-Синклейра, Бреннера, Терсоффа), вывод которых основан на решении уравнения Шредингера при определенных приближениях и упрощениях. При этом используются некоторые параметры, полученные в эксперименте.
* Неэмпирические (ab initio, Хоэнберга-Кона, Кона-Шэма), вывод которых полностью основан на уравнениях квантовой механики, при этом не используются параметры, полученные эмпирическим путем.

Методы МД позволяют вычислять классические траектории отдельных атомов и полимерных цепей, исследовать динамику взаимодействия частиц в конденсированных системах на молекулярном уровне [37-40]. МД обладает высоким пространственно-временным разрешением и позволяет получить информацию о процессах, происходящих в атомно-молекулярных масштабах и на временах порядка нескольких наносекунд [41, 42]. Эти методы особенно эффективны для исследования физических систем и биологических макромолекул в масштабах, где квантовые эффекты менее существенны, чем электростатические взаимодействия [43-45].

Впервые о методе молекулярной динамики было упомянуто в [46]. Современное развитие вычислительной техники позволяет моделировать динамику молекулярных систем, состоящих из огромного числа частиц (от десятков тысяч вплоть до миллионов), с большим набором параметров и разнообразных условий, имитирующих физический эксперимент [47]. Основой расчетов являются: непосредственный учет парного взаимодействия отдельных атомов и развитые на этой базе методы молекулярной динамики [39, 48, 49]. Благодаря бурному развитию и применению компьютерных технологий и графических методов анализа эффективность применяемых методов МД-моделирования неуклонно возрастает. Моделирование реальных физических систем, например кристаллов, или огромных биологических молекул на базе методов МД представляет определяющее перспективное направление в ближайшем будущем [50, 51]. Нетривиальным аспектом применения методов МД является оптимальный выбор потенциалов взаимодействия, который определяет эволюцию системы [32, 52].

МД-вычисления производились в пакете LAMMPS. В качестве моделируемого образца был рассмотрен кристаллит меди, содержащий 256000 атомов и имеющий форму куба размером , где нм – расстояние между атомами меди. Ориентация кристоллита задавалась следующим образом: ось ДПСК совпадает с кристаллографическим направлением (100), ось – (010), ось – (001). Межатомные взаимодействия описывались эмпирическим потенциалом, а именно потенциалом Морзе (применяется при моделировании металлов и полупроводников)

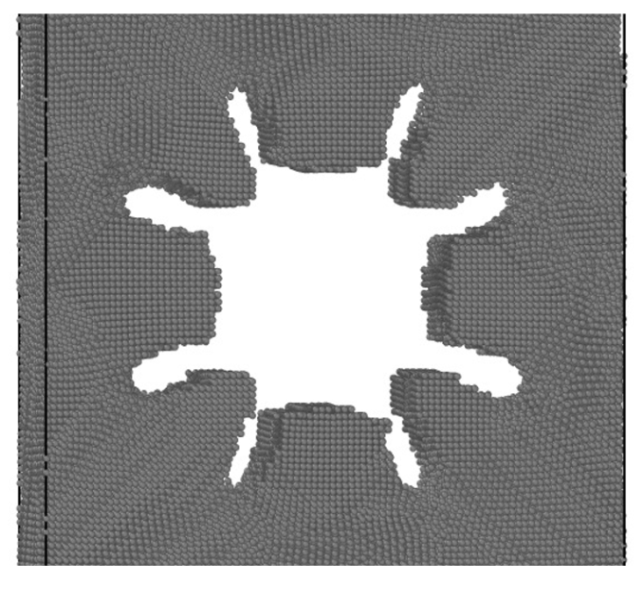
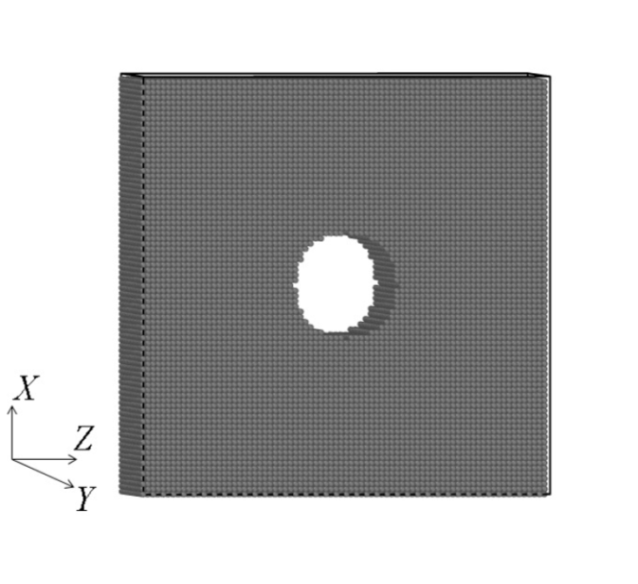
|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

здесь , – константы материала, – расстояние между атомами после деформирования.

Для минимизации влияния малого размера моделируемой области использовались периодические граничные условия, т.е. предполагалось, что частица, вышедшая из моделируемой ячейки через одну грань, тут же возвращается в нее через противоположную без изменения вектора скорости.

Цилиндрическая микропора создавалась удалением соответствующих атомов вдоль оси (рис. 1(а)). После создания микропоры проводилась структурная релаксация путем минимизации потенциальной энергии системы. Шаг интегрирования по времени выбирался равным . После чего размер ячейки изменялся в направлении оси и и также проводилась релаксация. В ходе численных экспериментов было исследовано влияние деформации, а также различных значений радиуса микропоры на процесс потери устойчивости. Так, к примеру, при значениях компонентов тензора деформации и радиусе наблюдалось образование глубоких выемок, как это показано на рис. 2(б).

Рис. 2. Эволюция формы микропоры.



(а) (б)

Аналогичная форма рельефа была получена в работе Salac D. и Lu W. [53].

## Заключение

В настоящей работе на основе уравнений термодинамики и плоской теории упругости разработана теоретическая модель, которая позволяет исследовать процесс роста зародыша микропоры в изотропном твердом теле. Так, в предположении, что в результате действия механической нагрузки происходит перераспределение атомов на поверхности поры, получено эволюционное уравнение, описывающее изменение формы поверхности зародыша в случае малого начального возмущения. Используя решение задачи о напряженно-деформированном состоянии твердого тела с почти круговым отверстием [27], получен и проанализирован критерий морфологической потери устойчивости формы зародыша. Так, данный критерий позволяет определить критическое значение радиуса микропоры в изотропном материале, упругое поведение которого описывается параметрами Ламе, при фиксированном значении усилий, а также критическое значение усилий при фиксированном значении радиуса. Однако, в силу того, что в основу решения задачи морфологической потери устойчивости легло первое приближение метода возмущений по малому параметру, представленная модель позволяет лишь предсказывать рост зародыша.

В силу того, что в процессе роста форма микропоры может флуктуировать, было решено исследовать кинетику данного феномена. Для этого было предложено использовать метод молекулярной динамики. На основании полученного критерия были выбраны физические и геометрические параметры образца, при которых происходит рост зародыша. С использованием программного пакета LAMMPS была построена численная модель, позволяющая описать особенности перестройки атомной структуры кристаллита меди вблизи цилиндрического отверстия при механическом нагружении.

Разработанный подход позволяет точно спрогнозировать рост и изменение формы микропор, находящихся в твердом упругом теле. Таким образом, он может быть использована для формирования управляемых дефектов при производстве пористых материалов. Использование предложенной модели на практике поможет улучшить имеющиеся или разработать новые методики производства устройств и материалов в областях имплантологии, микро- и оптоэлектроники.

В дальнейшем предполагается обобщить модель на случай изменения поверхностной энергии при деформировании, что позволит рассмотреть влияние поверхностных напряжений, а также учесть размерный эффект при переходе от микропор к макроотверстиям.

# Литература

1. Freund L. B. Evolution of waviness on the surface of a strained elastic solid due to stressdriven diffusion // Int. J. Solids and Struct., 1995. V. 32. № 6/7. Р. 911–923.
2. Пронина Ю. Г. Оценка устойчивости упругой трубы под давлением коррозионных сред // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 10: Прикладная математика. Информатика. Процессы управления, 2006. № 3. С. 55-63.
3. Pronina Y. G. Thermoelastic stress analysis for a tube under general mechanochemical corrosion conditions // Proceedings of the 4th International

Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and

Engineering, COUPLED PROBLEMS 2011, 2011. P. 1408-1415.

1. Пронина Ю.Г. Исследование возможности образования и развития пор в твердых телах в рамках деформационной теории Девиса–Надаи // Известия РАН. Механика твердого тела. 2014. № 3. C. 79-92.
2. Фандеев В.П., Самохина К.С. Формирование пористой структуры поверхности материала межпозвонкового диска лазерной обработкой // Фундаментальные исследования. – 2015. – № 3. – С. 148-152;
3. Asaro R. J., Tiller W. A. Interface morphology development during stress corrosion cracking: Part I. Via surface diffusion // Metallurgical Transactions, 1972. Vol. 3. P. 1789–1796.
4. Grinfeld M. A. The stress driven instabilities in elastic crystals: mathematical models and physical manifestation // Journal of Nonlinear Science // 1993. Vol. 3. No 1. P. 35–83. Srolovitz D. J. On the stability of surfaces of stressed solids // Acta Metallurgica, 1989. Vol. 37. No 2. P. 621–625.
5. Srolovitz D. J. On the stability of surfaces of stressed solids // Acta Metallurgica, 1989. Vol. 37. No 2. P. 621–625.
6. Grilhe J. Study of roughness formation induced by homogeneous stress at the free surfaces of solids // Acta Metallurgica and Materialia, 1993. Vol. 41, No 3. p. 909–913.
7. Пыткин А. В. Формирование микрорельефа на свободной поверхности твердого тела под действием самодиффузии // Вестник молодых ученых. СПб., 2000. С. 86–90.
8. 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. No 44. P. 7924-7937.
9. Костырко С. А., Шувалов Г. М. Образование дефектов поверхности многослойного пленочного покрытия при диффузионных процессах // Процессы управления и устойчивость, 2014. Т. 1. № 1. С. 169-174.
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. Морозов Н. Ф., Паукшто М. В., Товстик П. Е. О депланации грани кристалла в условиях поверхностной диффузии. Изв. РАН. Серия: Механика тв. тела, 1999. № 2. С. 53–57.
12. Морозов Н. Ф., Паукшто М. В., Товстик П. Е. О влиянии объемной диффузии на потерю устойчивости поверхностного слоя при термонагружении // Изв. РАН. Серия: Механика тв. тела, 1999. № 4. С. 97–101.
13. Морозов Н.Ф., Семенов Б.Н., Товстик П.Е. Континуальные и дискретные модели в задаче устойчивости трехслойной нанопластины // Теоретическая и прикладная механика. Минск. Вып. 19. 2005. С. 37-41.
14. Mullins W. W. Solid surface morphologies governed by capillarity // Metal Surfaces: Structure, Energetics and Kinetics / W. D. Robertson, N. A.Gjostein eds., 1963. P. 17–66.
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 97, 013521. 2005.
16. Gao H. A boundary perturbation analysis for elastic inclusions and interfaces // International Journal of Solids and Structures, 1991. Vol. 28, No 6. P. 703–725.
17. Gao H. Morphological instabilities along surfaces of anisotropic solids // Modern theory of anisotropic elasticity and applications, 139-150
18. Gao H. Stress analysis of holes in anisotropic elastic solids - conformal mapping and boundary perturbation, 1991.
19. He D., Huang P. A finite-element analysis of intragranular microcracks in metal interconnects due to surface diffusion induced by stress migration // Computational Materials Science, 2014. No 87. P. 65-71
20. Grekov M. A., Kostyrko S. A. Surface defect formation in nanosized film coatings due to diffusion // International Conference on Mechanics Seventh Polyakhov's Reading. P. 1-4. 2015.
21. Grekov M.A., Yazovskaya A.A. 2014. Effect of surface elasticity and residual surface stress in an elastic body weakened by an elliptic hole of a nanometer size. Journal of Applied Mathematics and Mechanics 78, 172--180.
22. Греков М.А., Костырко С.А. Концентрация напряжений у слабо искривленного участка поверхности упругого тела // Изв. РАН. Механика твердого тела. 2004. № 6. С. 53-61.
23. Греков М.А., Костырко С.А. Потеря устойчивости плоской формы пленочного покрытия при поверхностной диффузии // Вестник С.-Петерб. ун-та Сер. 10. 2007. Вып. 1. С. 46-54.
24. Башканкова Е.А., Вакаева А.Б., Греков М.А. Метод возмущений в задаче о почти круговом отверстии в упругой плоскости // Известия РАН. Механика твердого тела. 2015. № 2. C. 106-117.
25. Мусхелишвили Н.И. Некоторые основные задачи математической теории упругости. М.: Наука, 1966. 707 с.
26. Греков М. А. Сингулярная плоская задача теории упругости. СПб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2001. 192 c.
27. Вакаева А. Б., Греков М. А. Метод возмущений в задаче о криволинейном отверстии в упругой плоскости // Процессы управления и устойчивость: Труды 44-й международной научной конференции аспирантов и студентов / под ред. Н. В. Смирнова, Т. Е. Смирновой. СПб.: Издат. Дом С.-Петерб. гос. ун-та, 2013. С. 159–164.
28. Греков М. А., Макаров С. Н. Концентрация напряжений у слабо искривленного участка поверхности упругого тела // Изв. РАН. Механика твердого тела. 2004. № 6. С. 53–61.
29. Brenner D.W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films // Phys. Rev. B. 1990. V. 42, No. 15. P. 9458-9471.
30. Гринфельд М. А. Неустойчивость границы раздела между негидростатически напряженным упругим телом и расплавом // Доклады АН СССР, 1986. Т. 290. № 6. С. 1358–1363.
31. Freund L. B., Jonsdottir F. Instability of a biaxially stressed thin film on a substrate due to material diffusion // J. Mechanics and Physics of Solids, 1993. Vol. 41. No 7. P. 1245–1264.
32. Колосов Г.В. Применение комплексных диаграмм и теории функций комплексной переменной к теории упругости. Л.; М.: ОНТИ. 1935. 224с.
33. Allen M. P., Tildesley D. J. Computer simulation of liquids. Oxford: Clarendon Press, 1989.
34. Балабаев Н.К., Гривцов А.Г., Шноль Э.Э. Численное моделирование движения линейной полимерной цепочки // Докл. АН СССР. 1975. Т.220, вып. 5. С. 1096-1098.
35. Лагарьков А.Н., Сергеев В.М. Метод молекулярной динамики в статической физике // УФН. 1978. Т.125, вып. 3. С. 409-448.
36. Stillinger F.H., Weber Th. A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon // Phys. Rev. B. 1985. V. 31, No. 8. P. 5262-5271.
37. Ihara S., Itoh S., Kitakami J. Mechanisms of cluster implantation in silicon: A molecular dynamic study // Phys. Rev. B. 1998. V. 58, No. 16. P. 10736-10744.
38. Cheng H.-P. Cluster-surface collisions: Characteristics of Xe55- and C20-Si[111] surface bombardment // J. Chem. Phys. 1999. V. 111, No. 16. P. 7583-7592.
39. Qi L., Young W. L., Sinnott S. B. Effect of surface reactivity on the nucleation of hydrocarbon thin film through molecular-cluster beam deposition // Surf. Sci. 1999. V. 426. P. 83.
40. Narumi T. et al. Molecular dynamics machine: Special-purpose computer for molecular dynamics simulations // Molec. Simulation. 1999. V. 21. P. 401.
41. Pan Zh. Molecular dynamics simulation of slow gold clusters impacting on gold // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 1992. V. 66, No. 3. P. 325-332.
42. Qi L., Sinnott S. B. Effect of cluster size on the reactivity of organic molecular clusters: Atomistic simulations // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 1998. V. 140, No. 1-2. P. 39-46.
43. Alder B. J., Wainwright T. E. Transport processes in statistical mechanics / Ed. I. Prigogine. N.Y., 1958.
44. Qi L., Young W. L., Sinnott S. B. Polymerization via cluster Е solid surface impacts: molecular dynamics simulations // J. Phys. Chem. B. 1997. V. 101. P. 6883.
45. Stinett J. A., Madix J. Molecular adsorption of alkanes on platinium surfaces: a preditive theoretical model // J. Chem. Phys. 1996. V. 105, No. 4. P. 1609-1620.
46. Smith W., Forester T. R. Parallel macromolecular simulations and the replicated data strategy I. Computation of atomic forces // Comp. Phys. Commun. 1994. V. 79. P. 52-62.
47. Журкин В.Б., Полтев В.И., Флорентьев В.Л. Атом-атомные потенциальные функции для конформационных расчетов нуклеиновых кислот // Молекул. биология. 1980. Т. 14, вып. 5. С. 1116-1130.
48. Lewis J. P., Sankey O. F. Geometry and energetics of DNA basepairs and triplets from first principles quantum molecular relaxations // Biophis. J. 1995. V. 69. P. 1068-1076.
49. Alfonso D. R., Ulloa S. E., Brenner D.W. Hydrocarbon adsorption on a diamond (100) stepped surface // Phys. Rev. B. 1994. V. 49, No. 7. P. 4948-4953.
50. Salac D., Lu W. Stability and shape evolution of voids and channels due to surface misfit, 2007.