

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

جامعة باتنة

MEMOIRE

Présenté

AU DEPARTEMENT DE MECANIQUE
FACULTE DES SCIENCES DE L'INGENIEUR
UNIVERSITE DE BATNA

Pour obtenir le titre de

MAGISTERE EN GENIE MECANIQUE

Option : Science des matériaux

Par

Mr BAROURA LAZHAR

Détermination analytique des champs élastiques isotropes

Soutenu publiquement le 01/07/2010, devant le jury composé de :

Dr Toufik Outtas	Professeur, Université de Batna	Président
Dr Akila Derardja	M.Conférences, Université de Batna	Rapporteur
Dr Mourad Brioua	M.Conférences, Université de Batna	Co-Rapporteur
Dr Salah Madani	M.Conférences, Université de Batna	Examineur
Dr Hamid Djebaili	M.Conférences, C. U. Khenchela	Examineur
Dr Aissa Belgacem Bouzida	Professeur, Université de Batna	Invité

Remerciements

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à mon encadreur Dr A. Derardja; maitre de conférences à l'université de Batna; pour la confiance qu'elle m'a témoignée, les conseils, les orientations et sa constante disponibilité pour l'achèvement de ce modeste travail.

Je remercie spécialement Dr Mourad Brioua, mon co- encadreur de mémoire pour ses encouragements et ses précieux conseils qui m'ont permis de concrétiser ce travail.

Je suis très sensible à l'honneur que me fait le Professeur Toufik Outtas de l'Université de Batna, en acceptant de présider le jury de ce mémoire.

J'adresse aussi mes sincères remerciements au :

- Docteur Salah Madani, maitre de conférences à l'université de Batna;*
- Docteur Hamid Djebaili, maitre de conférences au C. U. Khenchela*

Pour l'honneur qu'ils me font en participant à ce jury et en acceptant la charge d'être examinateurs .

Je remercie aussi le professeur Aissa Belgacem Bouzida d'avoir accepté d'être membre invité et d'enrichir par ses connaissances la discussion de ce modeste travail.

Je tiens à remercier vivement mes chers amis R. Makhloufi et S. Djarallah pour leur aide, soutien et encouragement.

Table des matières

Introduction générale	1
Chapitre I Synthèse bibliographique	3
I.1 Introduction.....	3
I.2 Aperçu sur quelques travaux théoriques	5
I.3 Observations microscopiques	6
Chapitre II Généralités sur les dislocations	13
II.1. Introduction	13
II.2. Définition.....	13
II.3. Défauts linéaire (Dislocations).....	13
II.4. Les différents types de dislocations.....	14
II.4.1. Dislocation coin.....	14
II.4.2. Dislocation vis.....	15
II.4.3. Dislocation mixte.....	15
II.5. Le vecteur de Burgers d'une dislocation.....	16
II.6. Quelques propriétés des dislocations.....	16
II.7. Etat du cristal réel	18
II.8. Les différents types de réseaux de dislocations.....	18
II. 8. 1. Réseau unidirectionnel.....	18
II. 8. 2. Réseau carré.....	18
II. 8. 3. Réseau hexagonal.....	18
Chapitre III Formulation analytique en élasticité isotrope	20
III. 1. Géométrie du problème.....	20
III. 2. Formulation du problème	20
III. 3. Champ de déplacements	22
III. 4. Champ de contraintes	22
III. 5. Conditions aux limites relatives à un bilame mince	23
III. 5. 1. Condition sur les déplacements	23
III. 5. 2. Condition sur les contraintes	24
III. 6. Application des conditions aux limites	24

1. La linéarité du déplacement relatif interfacial ($x_2=0$)	24
2. la continuité des contraintes σ_{2k} à l'interface ($\sigma_{2k}^+ = \sigma_{2k}^-$ pour $x_2=0$).....	25
3. la nullité des contraintes σ_{2k} à la surface libre(cristal+).....	27
4. la nullité des contraintes σ_{2k} à la surface libre (cristal -).....	28
III. 7. Détermination explicite du champ des déplacements et des contraintes	29
III. 7. 1. Détermination des constantes complexes	29
III. 7. 2. Expressions analytiques du champ des déplacements	32
III. 7. 3. Expressions analytiques du champ des contraintes	33
Chapitre IV Applications numériques	39
IV. 1. Introduction	39
IV. 2. Données expérimentales.....	39
IV. 3. Résultats et interprétation.....	40
IV. 3. 1. Calcul de l'erreur relative au niveau de l'interface	40
IV. 3. 2. Déplacement relatif interfacial	40
IV. 4. Champs des déplacements	44
IV. 4. 1. Représentation graphique du bilame	44
IV. 4. 2. Influence de la variation du nombre d'harmoniques sur le champ des déplacements.....	46
IV. 4. 3. Influence de la variation de l'épaisseur des couches (h^+ et h^-) sur le champ des déplacements.....	48
IV. 4. 4. Iso valeurs des champs de déplacements	51
1. cas d'un réseau de dislocation.....	52
2. Cas d'une seule dislocation	52
IV. 5. Evolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} dans le bilame en fonction de x_2	52
IV. 5. 1. Evolution des contraintes σ_{11} en fonction des épaisseurs h^+ et h^-	53
IV. 5. 2. Evolution des contraintes σ_{22} en fonction des épaisseurs h^+ et h^-	56
IV. 6. Etude comparative	59
a. Effet de l'hétérogénéité	59
b. Comparaison avec les résultats obtenus en anisotrope.....	61
c. comparaison avec les résultats obtenus en quasi-isotropie dans le cas du bilame Al/(001)Al ₂ Cu.....	63

Table des matières

Conclusion	65
Annexe I	67
Annexe II	74
Références Bibliographiques	

Introduction générale

La conception de matériaux dont les propriétés doivent être optimales devient d'une exigence accrue dans la technologie avancée du fait qu'il faut, d'une part, rassembler un maximum de propriétés et, d'autre part, prédire le comportement de ces matériaux. Beaucoup de questions sont, alors, posées dans la réalité et c'est comme dans la réalité que beaucoup de chercheurs tentent d'y répondre, c'est-à-dire par un mélange d'intuition, de données expérimentales, d'utilisation de l'acquis antérieur et d'hypothèses parfois risquées. Ainsi progresse la connaissance scientifique de bourrasques en bonaces, d'accumulation pointilliste de données éparses en vision unificatrices et réciproquement d'idées puissantes et centrales en développements et applications multiples. A l'origine de notre compréhension, relativement récente, de la nature et du rôle des dislocations dans les solides, il y a la rencontre de deux démarches distinctes.

L'une à la fois théorique et fondamentale, consistant à étudier d'un point de vue mathématique les lignes de singularité dans les milieux continus pour diverses conditions aux limites.

La seconde, expérimentale et intuitive a pour objectif de découvrir les phénomènes liés à la présence des dislocations.

Toutefois, il faut noter que malgré de gros efforts d'une pléiade de chercheurs, on a bien peu de données utilisables pour nos applications.

Au cours de cette étude et en nous inspirant des travaux antérieurs, l'objectif est de mettre en place, valider et exploiter un programme en langage Mathematica. En effet, le nouveau programme, qui détermine les expressions analytiques des coefficients de Fourier, intègre de façon explicite les champs de déplacements et de contraintes en élasticité isotrope. Ce code de calcul présente l'avantage d'avoir une précision très satisfaisante avec un temps de calcul très économique.

L'approche théorique reprise dans ce travail est basée sur une formulation en séries de Fourier avec une définition de conditions aux limites propres au cas du bilame mince dont l'hétéro interface est tapissée d'un réseau parallèle de dislocations de désaccord « misfit » de type coins.

Nous avons apporté une attention particulière à la relaxation du bilame mince en nous basant sur les prédictions de la théorie élastique. Dans cet axe, le travail est segmenté en quatre chapitres.

- Le premier chapitre constitue une revue des travaux récents sur la détermination des champs élastiques causés par les dislocations incluant quelques observations microscopiques.
- Le deuxième chapitre est un rappel sur la théorie de dislocations.
- Le troisième chapitre consiste en une définition de la géométrie du problème et des conditions aux limites.
- Le quatrième chapitre regroupe les applications numériques avec interprétation des résultats obtenus.

Le bicristal mince Cu/(001) Fe est considéré dans ce travail étant donné que ce système épitaxial présente un intérêt particulier pour des applications faisant intervenir à la fois les propriétés magnétiques et de conduction des matériaux.

Chapitre I

Synthèse bibliographique

Chapitre I

Synthèse bibliographique

I. 1. Introduction

Le concept de dislocation a un historique propre, certains auteurs s'accordent à dire que les premières observations de ces défauts remontent au 19^{ème} siècle. En effet, et grâce à la découverte des rayons X et de la nature cristalline des métaux, Volterra (1907) [1] combine la nature cristalline des métaux à l'étude du comportement élastique de milieux homogènes et arrive à définir les discontinuités des propriétés élastiques dans un cylindre homogène, Burgers par la suite introduit le défaut de fermeture qui porte son nom [2].

Ainsi naît puis se développe la théorie des dislocations. Elle utilise la théorie de l'élasticité pour les milieux isotropes ou anisotropes. La théorie des dislocations prend d'autant plus d'intérêt que les interfaces cristallines sont elle-même constituées de défauts linéaires. La nature cristalline et périodique des métaux, entre autres facteurs impose une certaine organisation des défauts présents dans les interfaces cristallines, sous forme de réseaux plus ou moins complexe et caractérisés parfois par une périodicité stricte. Comme les interfaces jouent un rôle important dans l'optimisation des propriétés physiques des matériaux, des recherches intenses se sont données pour but, pendant plusieurs décennies de caractériser et de modéliser ces défauts à l'échelle microscopique et macroscopique. Dans ce qui suit, nous présentons les travaux les plus récents concernant les investigations expérimentales tout en sachant que les résultats sont conditionnés par l'évolution des techniques de caractérisation ainsi que les travaux numérique.

I. 2. Aperçu sur quelques travaux théoriques

J. Bastecka [3] a utilisé la méthode d'Eshelby Read et Schockley pour calculer les champs des contraintes anisotropes autour d'une dislocation coin et autour d'une dislocation vis. Il constate que pour une dislocation vis, l'énergie de dislocation est plus petite que pour une dislocation coin et presque la même dans le cas isotrope. En calculant les contraintes dans le fer α et dans d'autres matériaux, il arrive au fait que

l'énergie élastique dans le fer $_{\alpha}$ dans le cas d'une dislocation coin vaut presque deux fois celle calculée dans le cas d'une dislocation vis.

Sur le plan théorique, R. Bonnet et J. L. Verger-Gaugret [4] présentent une étude analytique sur le champ des déformations élastique associée à un cristal mince en épitaxie sur un cristal de nature différente, monocristallin et semi infini, en élasticité isotrope. Deux hypothèses de calcul sont envisagées dans le cadre de la déformation plane. L'une admet la présence de dislocations de désaccord paramétrique (ou dislocations intrinsèques) régulièrement réparties; l'autre suppose la présence de dislocations de translation (ou dislocations extrinsèques) introduites par déformation plastique. Le même auteur [5] propose une solution analytique qui permet de calculer le champ élastique d'un réseau plan, bipériodique, de dislocations de misfit parallèles aux deux surfaces libres d'un bicristal mince; en admettant une élasticité isotrope pour chaque cristal. En 2003, l'auteur établit une nouvelle approche pour le calcul des champs élastiques (déplacements, contraintes) d'une dislocation rectiligne parallèle aux deux surfaces libres d'une lame mince isotrope [6].

Par ailleurs, le système Fe/Cu(001) a attiré l'attention de plusieurs chercheurs, J. V. Barth et al. [7] essayent d'expliquer la présence de la propriété du ferromagnétisme dans les matériaux cfc tels que les films de fer et de comprendre l'effet d'anisotropie, due à ce ferromagnétisme qui dépend des conditions de croissance du fer.

S. Nedelcu et al. [8] calculent, en utilisant la dynamique moléculaire, l'interaction entre des dislocations coins en mouvement dans le cristal de Fe $_{\alpha}$ et le précipité de cuivre. Dans le cristal de Fe $_{\alpha}$, ils considèrent deux dislocations coins dans le même plan de glissement avec des vecteurs de Burgers opposés. Ils calculent la contrainte de cisaillement critique du fer et ils déterminent l'influence de la taille du précipité de cuivre sur la mobilité des dislocations coins en sachant que l'une des deux dislocations attire le précipité.

S. Y. Hu et al. [9] trouvent que la présence des dislocations interfaciales modifie localement la température de transition ferroélectrique et conduit à une formation préférentielle de domaines ferroélectriques autour des dislocations de misfit.

D. Spišák et J. Hafner [10] rapportent des investigations sur la structure et la reconstruction magnétique des couches épitaxiales minces de fer (Fe $_{\gamma}$) sur un substrat de cuivre Cu(001) c'est-à-dire : Fe $_{\gamma}$ / (001) Cu. Ils constatent que la variation de l'épaisseur des couches épitaxiales minces de Fe $_{\gamma}$ sur le cuivre comme substrat change les caractéristiques magnétiques Fe $_{\gamma}$ / (001) Cu.

R. Bonnet et S. Youssef [11] montrent qu'une dislocation dissociée dans un cristal mince, élastiquement anisotrope, trouve un équilibre mécanique qui dépend de façon critique de la position des dislocations partielles. Une analyse à deux dimensions est proposée, basée sur la connaissance du champ élastique d'une seule dislocation dans ce milieu confiné. Elle est appliquée à la détermination de la distance de séparation de deux partielles dans un alliage cuivre-aluminium à forte anisotropie.

Jae-Hyeok Shim et al. [12] étudient par simulation dynamique moléculaire l'interaction du précipité de cuivre dans le fer avec la présence d'une dislocation vis. Ces auteurs indiquent que le champ des contraintes causé par la présence de la dislocation favorise la transformation martensitique. Cette dislocation devient une boucle d'Orowan par la suite.

S. P. Fitzgerald et al. [13] appliquent le modèle de Franck et Nabarro au cristal cubique, dans l'hypothèse d'anisotropie. Le modèle est repris pour prédire le déplacement plastique généré par une source de dislocations pendant l'ancrage de celles-ci. Les résultats sont appliqués au fer à une température voisine de la température de transition de phase $\alpha \rightarrow \gamma$, les résultats obtenus diffèrent beaucoup de ceux prévus par l'isotropie.

Soon-Gun Lee et Young-chae Chung [14] utilisent la simulation de dynamique moléculaire pour une caractérisation structurale d'un bilame mince de Cu/ (001) Fe. Dans le cas de la couche épitaxiale mince de cuivre sur le substrat semi fini de (001)Fe, aucun mélange n'a été observé à l'interface de la partie du dépôt de la couche mince, et la croissance se fait, généralement, couche-par-couche. Par contre ; dans le cas inverse ; Fe/ (001) Cu, les auteurs remarquent un mélange confiné à une seule couche atomique sur la surface de substrat (001) Cu qui s'est formée à la température ambiante tandis que les films montrent la croissance des îlots. Ils observent, également, que la croissance de la couche épitaxiale mince de fer sur un substrat fini de cuivre (Fe/ (001) Cu) change pour une énergie incidente de 6 eV. Les différents aspects de la morphologie de surface entre les deux systèmes de Fe/(001) Cu et Cu/(001) Fe sont expliqués en termes de diffusion et de l'énergie de la surface libre. Dans le but d'investiguer la morphologie de croissance et la qualité du film à l'échelle atomique, le dépôt est réalisé en utilisant l'énergie des atomes incidents. Ils remarquent que la rugosité de surface augmente entre 5 et 10 monocouches. Le mode de croissance du fer sur le cuivre dépend fortement de l'énergie incidente.

V.G Myagkov et al. [15] étudient la formation du Fe_γ dans un bilame Cu(001)/Fe(001) à des températures variables au cours de recuit. En utilisant la diffraction par rayon X, ils font une analyse magnétique, une caractérisation structurale et chimique de l'interface entre le cuivre et le fer. Ils constatent que la phase Fe_γ apparaît dans le bilame mince sous forme de précipité quand la température de recuit est supérieure à 850°C.

I. 3. Observations microscopiques

Ces dernières années, les observations microscopiques des dislocations à l'interface des cristaux (couche/substrat) sont nombreuses dans les revues en sciences des matériaux, surtout celles relatives à la microscopie électronique conventionnelle (M. E. T) à haute résolution (M. E. T. H. R) ou encore à la microscopie à effet tunnel (S.T. M).

Dans ce sens, G. Sainfort et al. [16] présentent une analyse des joints de grains dans des bicristaux d'acier inoxydable, de nickel et de cuivre. Les microstructures intergranulaires mettent en évidence des réseaux de dislocations qui ont été interprétés sur la base de la théorie du réseau 0 (Le réseau 0 est le lieu de tous les points en bon accord entre le cristal 1 et le cristal 2 séparés par des régions de mauvais accord).

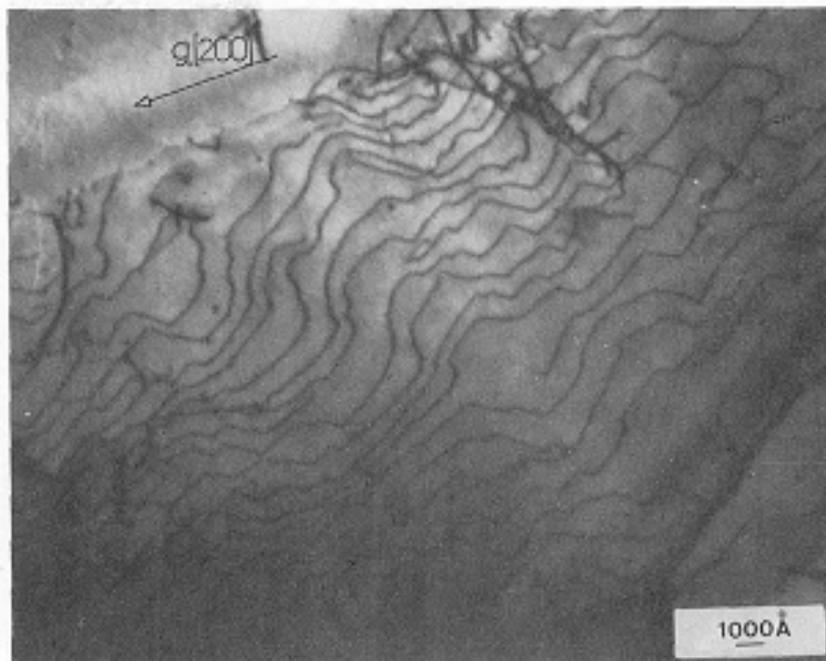


Fig. 1. a. Joint de flexion autour de l'axe [001] dans un bicristal de cuivre

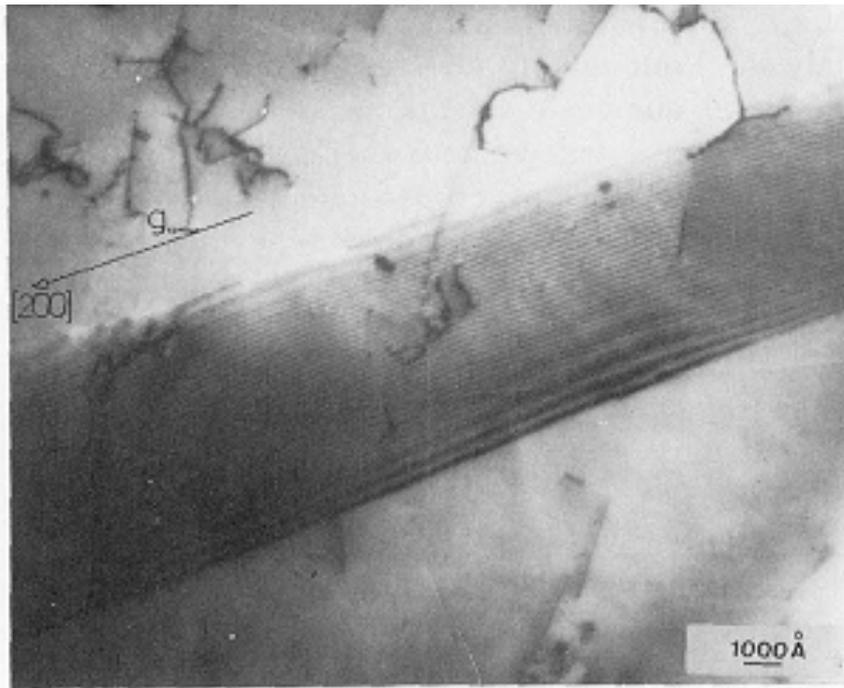


Fig. 1. b. joint de flexion autour de l'axe [001] dans un bicristal de nickel.

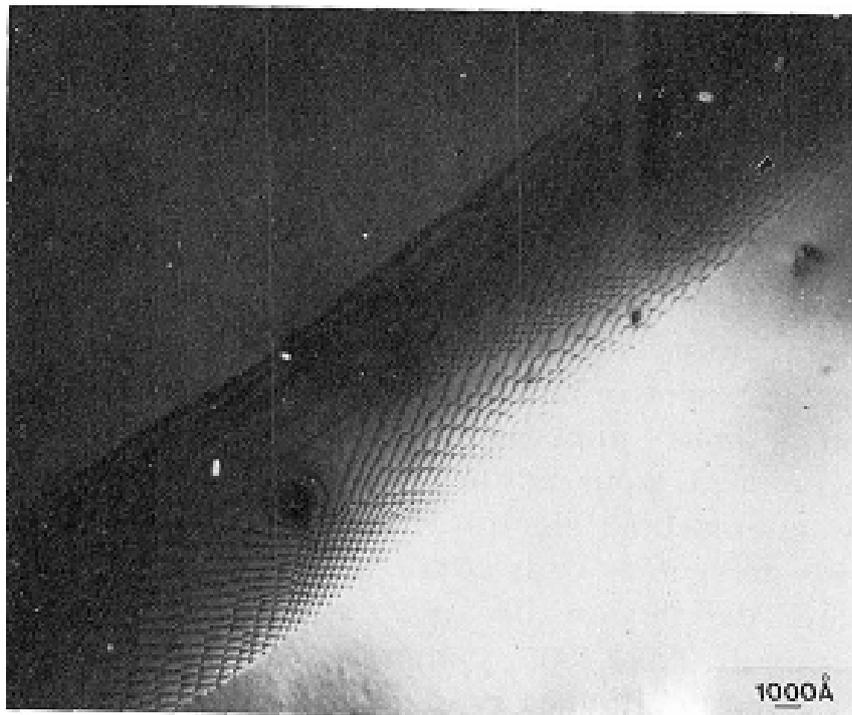


Fig. 1. c. Influence de précipités sur les réseaux de dislocations intergranulaires (acier inoxydable).

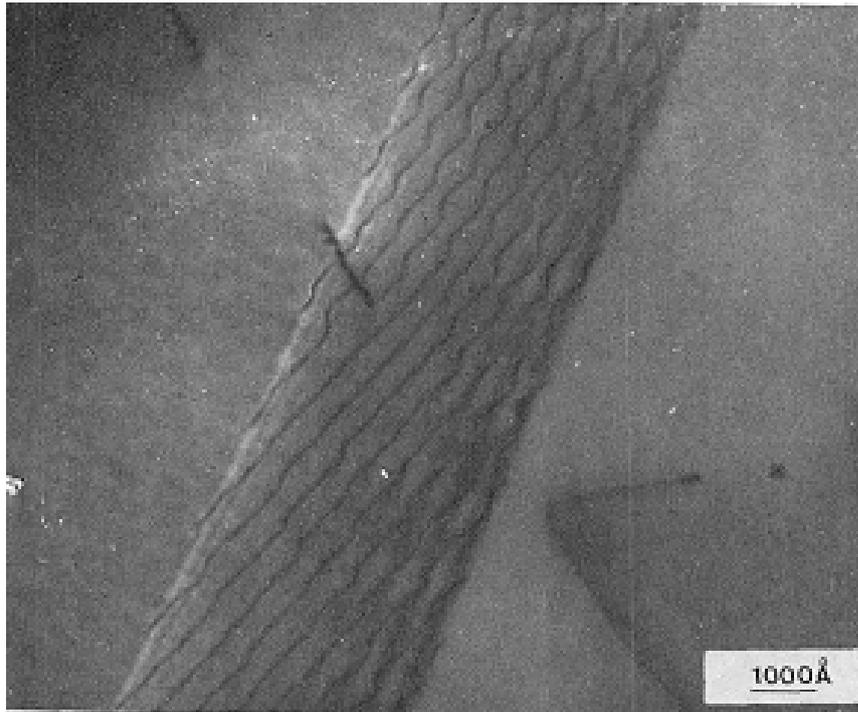


Fig. 1. d. Interaction d'une dislocation de matrice avec ce réseau de dislocations intergranulaires (acier inoxydable).

B. G. Demczyk et al. [17] examinent les bilames $(001)/\text{Fe}/(001)$ Cu, (110) Fe/ (200) Cu et ils trouvent qu'ils sont équivalents respectivement aux systèmes (111) Fe/ (011) Cu et (110) Fe/ (100) Cu. Ils trouvent également une corrélation entre la rugosité d'interface et la rugosité de surface indiquant que l'interface se propage à travers le film durant la croissance.

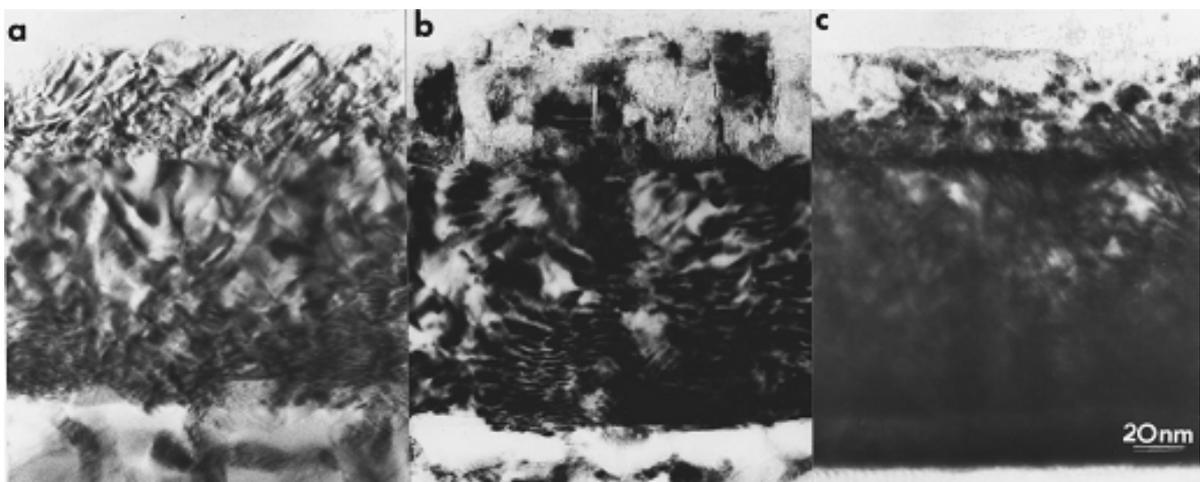


Fig.2. section micrographique électronique de: (a) Co, (b) Fe, et (c) couches minces de Ni / Cu/Si(100)

De leur côté Bonnet et al. [18] ont fait une analyse du contraste d'un sous-joint de torsion (001) du silicium, obtenue en MET à deux ondes qui est interprétée de façon quantitative au moyen de la théorie dynamique de la diffraction des électrons. Les caractéristiques du contraste sont discutées en fonction de l'épaisseur de la lame mince et des effets éventuels de relaxation élastique du sous-joint dans la lame mince.

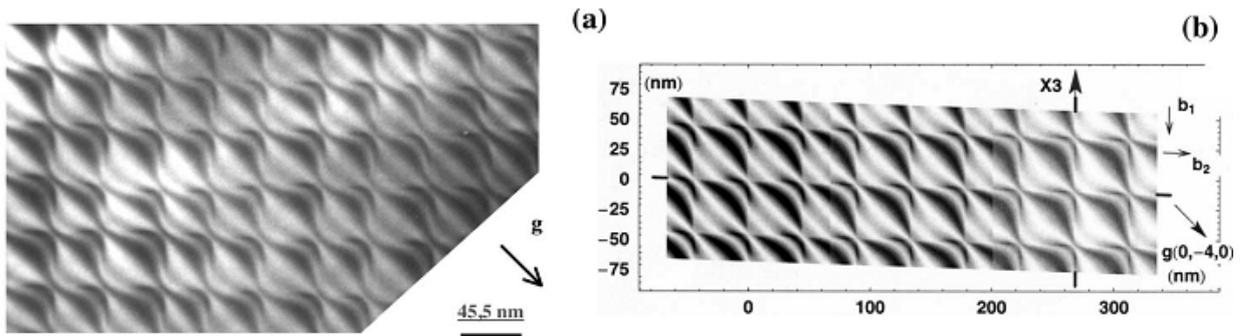


Fig.3. Sous-joint de torsion (001) dans le silicium. Comparaison des contrastes obtenus : (a) pour une image expérimentale d'un réseau carré de dislocations de misfit vis (période = 45,5 nm). Désorientation : 0,48°; (b) pour trois images calculées ($d = 25, 17,5$ et 10 nm, de gauche à droite). Le plus bas (haut) des trois minimums (maximums) d'intensité, soit 0,346 (0,910) est représenté par un contraste noir (blanc).

Ahlem Boussaid et al. [19] observent, en microscopie électronique à transmission à deux ondes, une interface tapissée d'un réseau dense de dislocations de Somigliana dans un sous-joint de torsion (001) Si. Les auteurs proposent alors une méthode basée sur le contraste à deux ondes, qui tient compte de l'hétérogénéité élastique du matériau et de la surface libre pour les joints de grains.

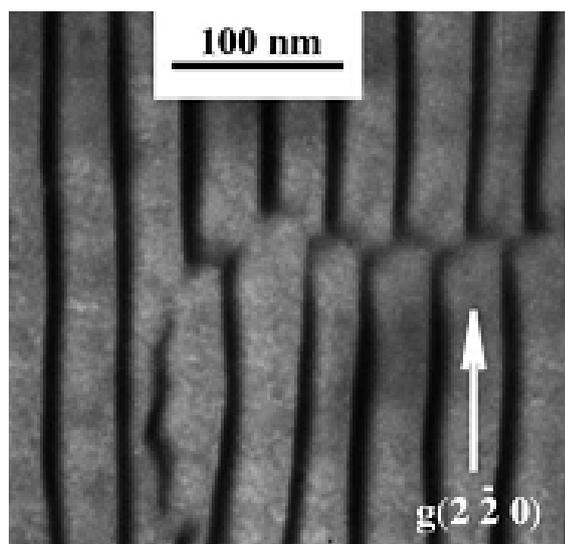


Fig.5. Géométrie d'une ligne zigzag coudée dans un sous-joint de torsion imparfait (001) Si, micrographie électronique (200 kV) prise en condition deux ondes avec g .

Sami Youssef et al. [20] montrent que les dislocations filantes des hétérostructures du film mince sur substrat interagissent élastiquement avec les surfaces libres. Dans le cas de la relaxation plastique de l'hétérostructure $\text{Si}_{0.68}\text{Ge}_{0.32}/\text{Si}$ (001) par exemple, et grâce à un programme de simulation en contraste, ils montrent que les parties d'une dislocation filante ont un caractère vis, ce qui explique la production des dislocations interfaciales anguleuses de 60° par de multiples glissements des parties.

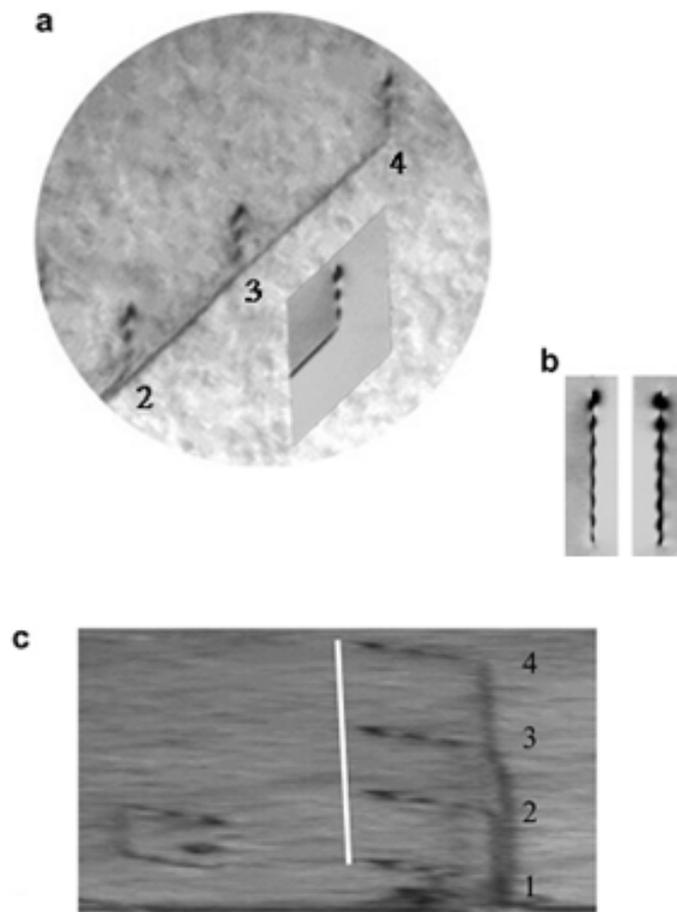


Fig. 6. (a) Contraste simulation, le vecteur b de la dislocation filante principale $b = -1/2 [0 11]$.
 (b) Les dislocations droites calculées qui relaxent aux deux surfaces libres avec un vecteur de burgers $b = -1/2 [0 11]$ (à gauche) et $1/2 [0 11]$ (droite).
 (c) Les parties de la dislocation filante notées respectivement 1, 2, 3 et 4

D'autres systèmes épitaxiaux ont été observés également tel que l'interface d'un film de NiSi_2 épitaxie sur un substrat de silicium par recuit. La structure atomique de l'interface est explorée par microscopie électronique à transmission. Des dislocations sont mises en évidence au voisinage des facettes $\{111\}$. [21]

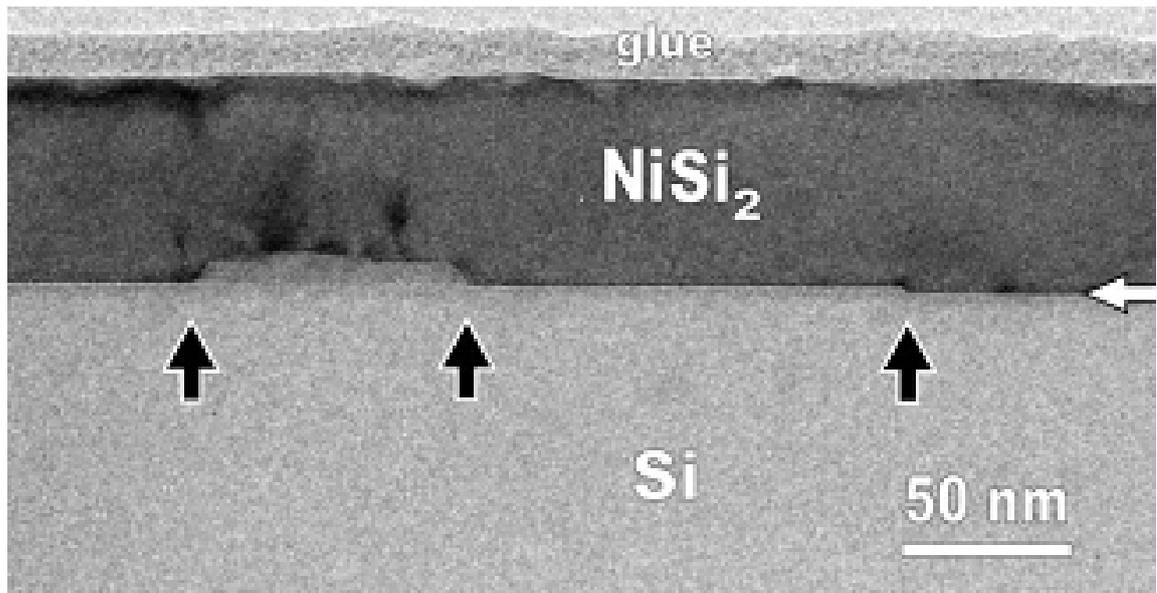


Fig. 7. Une image de MET en coupe de NiSi₂/Si le long de direction $\langle 011 \rangle$. Les interfaces (100) sont indiquées par une flèche horizontale. Les facettes {111} sont indiquées par les flèches verticales.

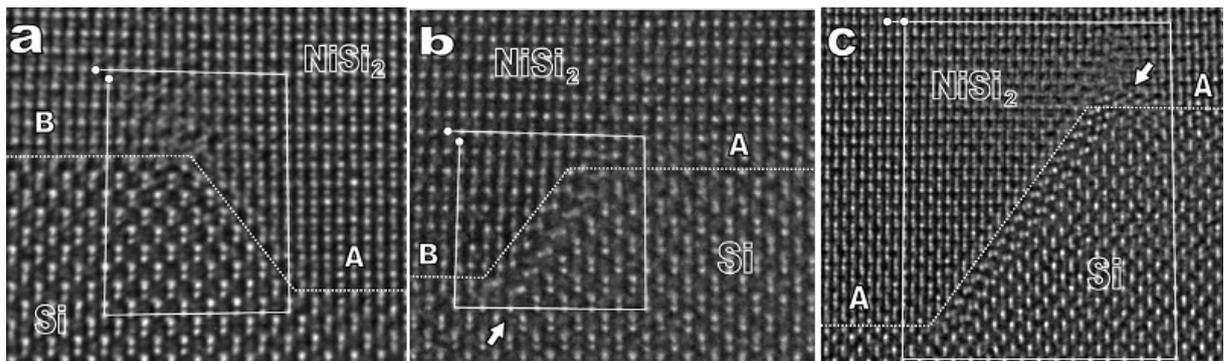


Fig. 8. (a et b) images de METHR des facettes {111} entre deux variantes d'interfaces (100), A et B. (c) facette A {111} entre deux variantes de segments. La ligne pointillée trace l'interface. Joint de mode{111} dans le silicium indique par une flèche en (b) et (c).

En utilisant un dépôt par jet moléculaire de PbSe/(100) GaAs et PbSe/(211) GaAs, une croissance bidimensionnelle et une morphologie lisse de surface ont été mises en évidence par des modèles de diffraction. Le PbSe monocristallin en croissance par épitaxie à jet moléculaire sur un substrat (100) de GaAs présente une relaxation de la déformation qui s'accompagne de l'apparition de dislocation de misfit [22].

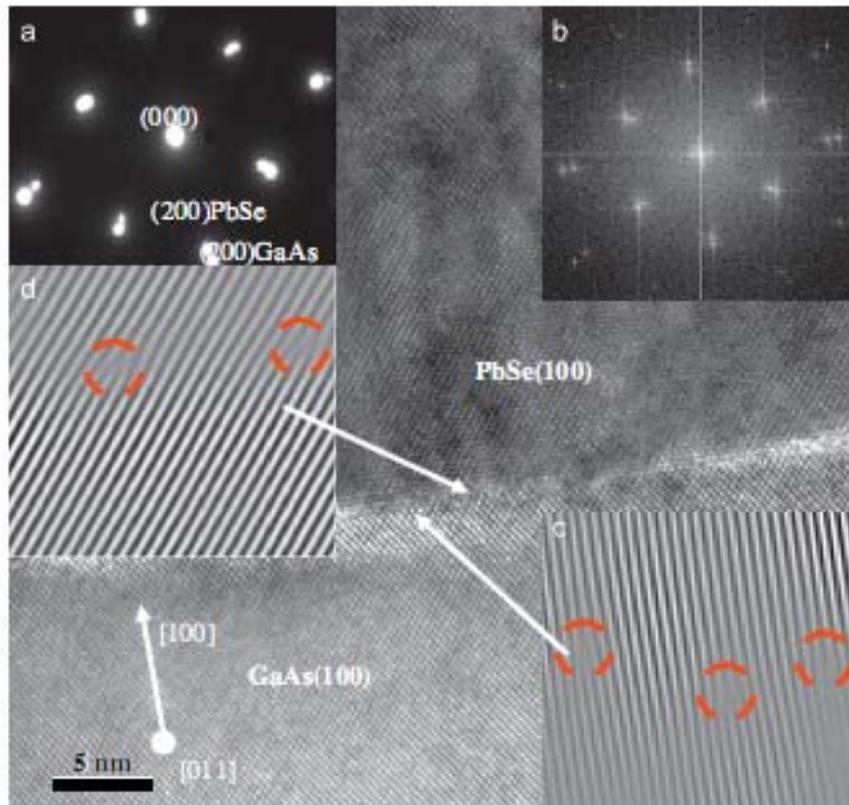


Fig. 9. Image de METHR d'une couche épitaxiale de PbSe (10 0) déposée sur GaAs (100).

Chapitre II

Généralités sur les dislocations

Chapitre II

Généralités sur les dislocations

II. 1. Introduction

La théorie des dislocations est sans doute un des domaines de la physique où les aspects géométriques jouent un rôle déterminant. L'objet de la cristallographie est l'étude du cristal parfait, formé d'un motif atomique répété dans les trois dimensions, défini par son groupe de symétrie, tandis que la théorie des dislocations étudie le cristal imparfait, c'est-à-dire le cristal réel, où l'on a su reconnaître que les défauts plans, linéaires, ou ponctuels, sont liés à des cassures spécifiques de la symétrie.

Durant l'année 1930, on a formulé une théorie selon laquelle la différence entre les valeurs calculées et mesurées de la résistance mécanique s'expliquait par la présence d'un défaut cristallin linéaire, nommé « Dislocation ». Cependant, il a fallu attendre jusqu'à 1950 pour que soit confirmée, par observation directe au microscope électronique, l'existence des dislocations.

II. 2. Définition

Une dislocation est un défaut à une dimension, ou défaut linéaire du réseau cristallin, au voisinage duquel certains atomes sont mal alignés. La dislocation permet une déformation plastique du matériau lorsqu'elle se déplace.

II. 3. Défauts linéaires (Dislocations)

Les dislocations jouent un rôle très important dans le comportement mécanique des matériaux. La géométrie d'une dislocation est difficile à décrire. Pour cette raison nous allons considérer le cas d'un cristal cubique simple avec deux cas (dislocation coin et vis).

Lorsqu' on applique une contrainte de cisaillement à un cristal sans défaut (voir la figure 2. 1. a) on peut, si elle dépasse une valeur critique, entraîner la déformation plastique ϵ_p de ce cristal (voir la figure 2. 1. b). La figure 2. 1. c suggère que la déformation plastique résulte du glissement d'un plan atomique par rapport au plan voisin.

Le calcul de la contrainte de cisaillement effectué, en tenant compte de la loi de Hooke, conduit à l'existence de défauts dans l'arrangement cristallin des atomes, ces défauts appelés « **dislocations** » peuvent donc se déplacer facilement sous l'effet des contraintes entraînant ainsi la déformation plastique du cristal.

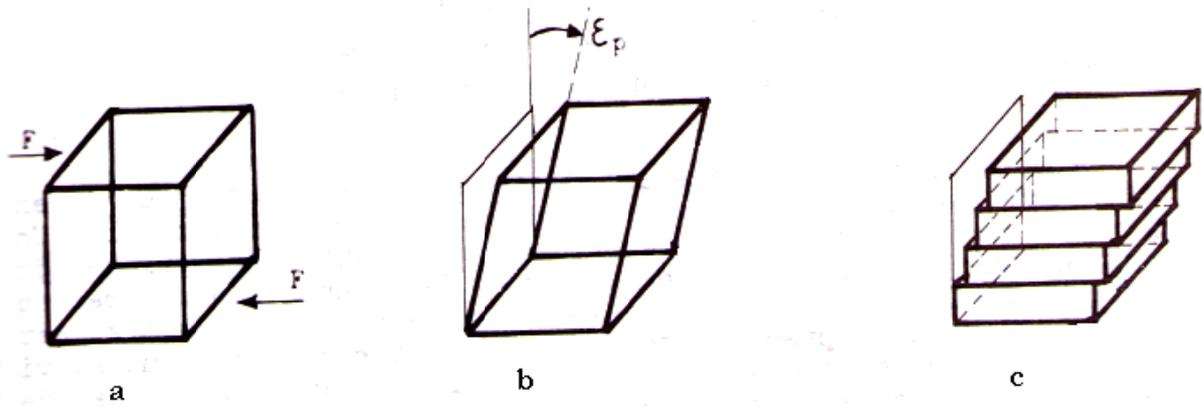


FIG. 2. 1: déformation d'un cristal

II. 4. Les différents types de dislocations

II. 4. 1. Dislocation coin

Lorsqu'on insère ou on retranche une portion de plan atomique, on obtient une dislocation de type coin caractérisée par sa ligne AB et son vecteur de Burgers \vec{b} perpendiculaire à sa ligne (voir la figure 2. 2)

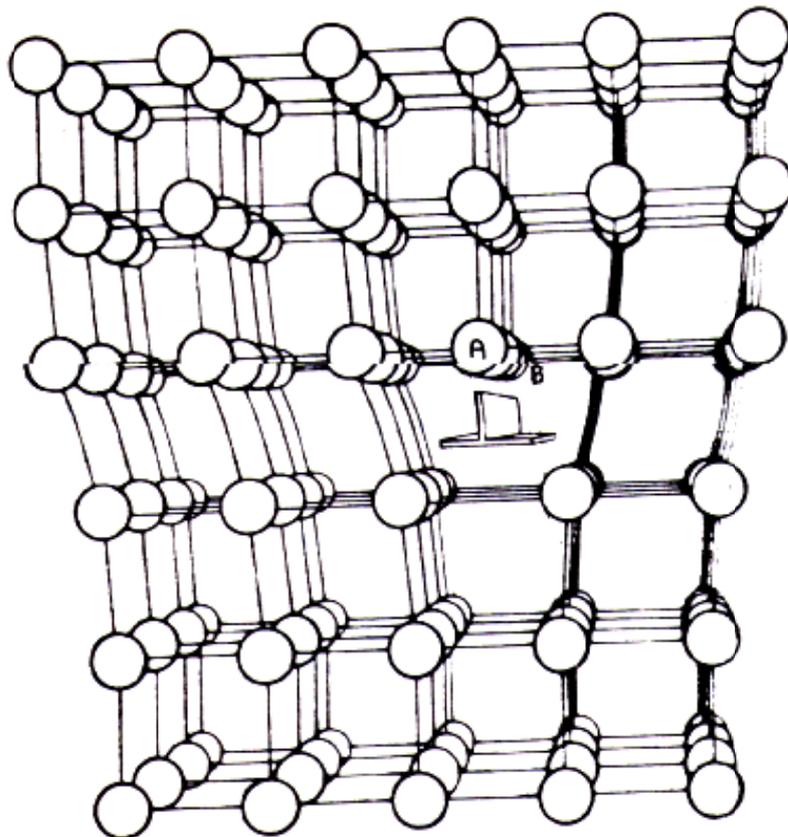


FIG. 2. 2: Représentation en perspective de la position des atomes au voisinage d'une dislocation coin

II. 4. 2. Dislocation vis

La dislocation vis se représente comme si on a cisailé une partie du cristal par rapport à l'autre (voir la Figure 2. 3).

La ligne de dislocation AB est l'axe du cylindre à l'intérieur duquel il y a perturbation du réseau cristallin (valable aussi pour la dislocation coin). La notion du circuit de Burgers révèle que la ligne de dislocation vis est parallèle à son vecteur de Burgers.

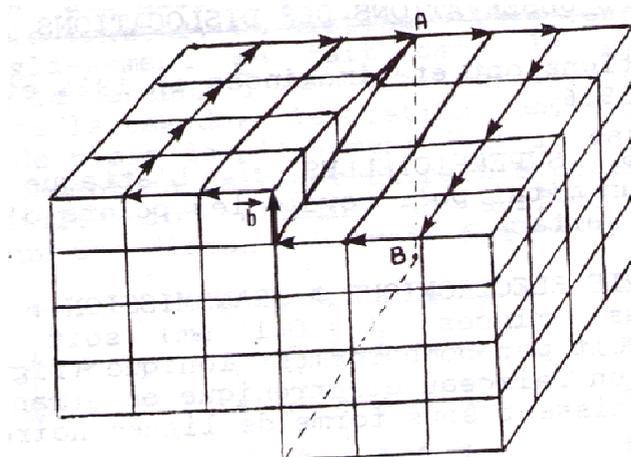


FIG. 2. 3 : Dislocation vis dans un réseau cristallin

II. 4. 3. Dislocations mixtes

Les deux cas précédents concernaient des lignes de dislocations droites. Si on considère une région de glissement plane de forme quelconque, la dislocation est alors une courbe plane quelconque. Sur la figure 2. 4, la dislocation (courbe AB) est vis au voisinage de A, coin au voisinage de B et intermédiaire entre les deux points A et B.

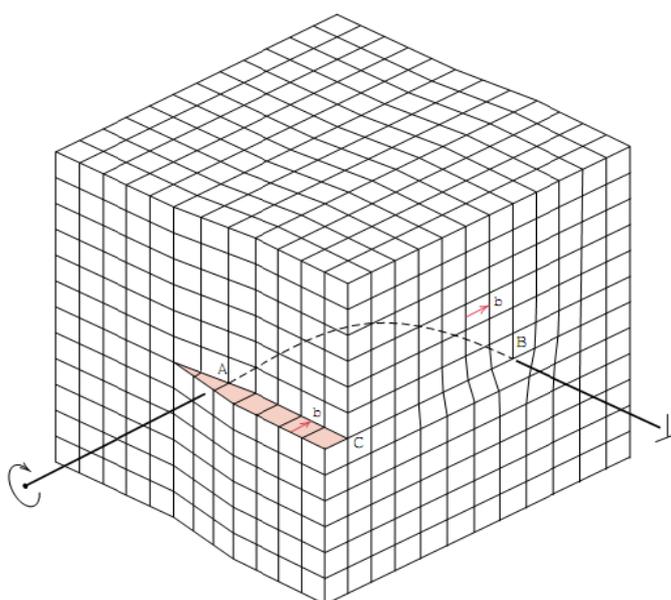


FIG. 2. 4 : Représentation schématique d'une dislocation non rectiligne, tenant à la fois des trois types de dislocations (coin, mixte et vis)

II. 5. Le vecteur de Burgers d'une dislocation

Une dislocation est caractérisée par son vecteur de Burgers \vec{b} , qui est un vecteur du réseau cristallin. Le type de dislocation (coin, vis ou mixte) est déterminé par l'orientation de ce vecteur par rapport à la ligne de dislocation: perpendiculaire pour une dislocation-coin, parallèle pour une dislocation-vis. Pour une dislocation mixte, le vecteur de Burgers et la ligne de dislocation ne sont ni perpendiculaires ni parallèles. On détermine le vecteur de Burgers en dessinant, autour de la dislocation et suffisamment loin du cœur, un circuit fermé passant par les nœuds du réseau cristallin. Lorsqu'on enlève le défaut constitué par la dislocation du réseau cristallin, le vecteur de Burgers est la différence de chemin définie en parcourant le circuit définie par Figure 2. 5.

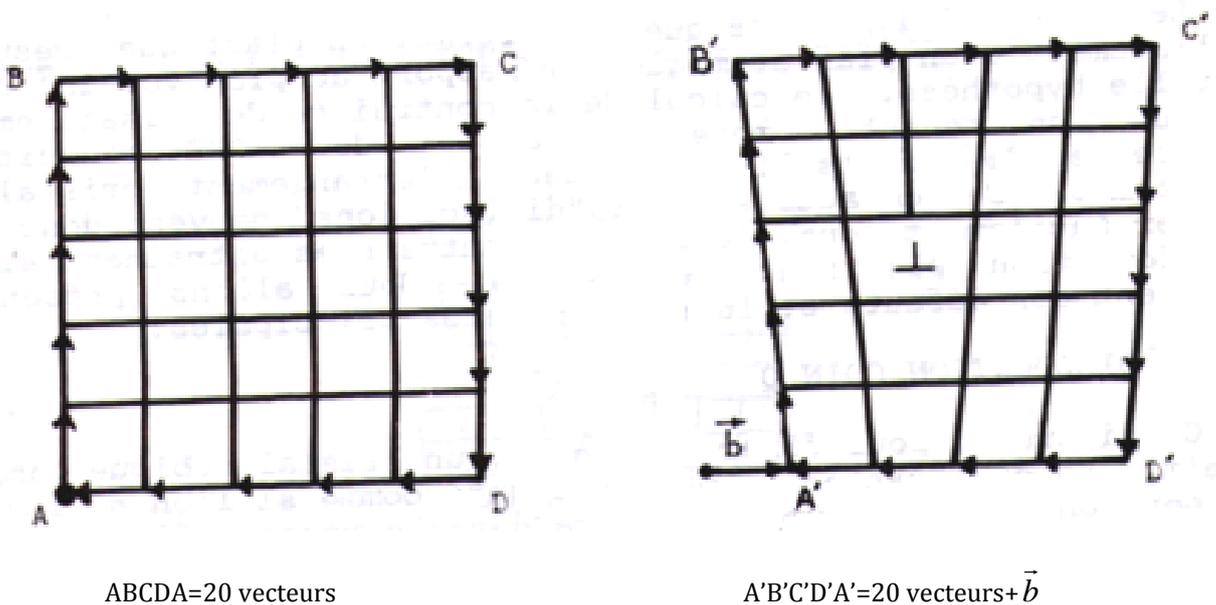


FIG. 2. 5 : Représentation du circuit et du vecteur de Burgers

II. 6. Quelques propriétés des dislocations

- Les dislocations peuvent se combiner ou se décomposer. Lors d'une combinaison, la dislocation obtenue a pour vecteur de Burgers, la somme géométrique des vecteurs de Burgers des dislocations composantes.
- Une ligne de dislocation doit ou bien se terminer à la surface du cristal, ou bien être fermée. Dans ce dernier cas on obtient une boucle de dislocation.
- Mouvement des dislocations : les dislocations peuvent se déplacer dans le cristal. On distingue le glissement et la montée

a/ Le glissement se fait dans le plan contenant la dislocation et le vecteur \vec{b} . On voit que l'on définit un plan de glissement dans le cas des dislocations coin, alors qu'il y a une infinité de plans de glissement dans le cas des dislocations vis. Le glissement se fait par un faible déplacement d'atomes. Lorsque la dislocation atteint la surface, on obtient un cisaillement sur une distance b .

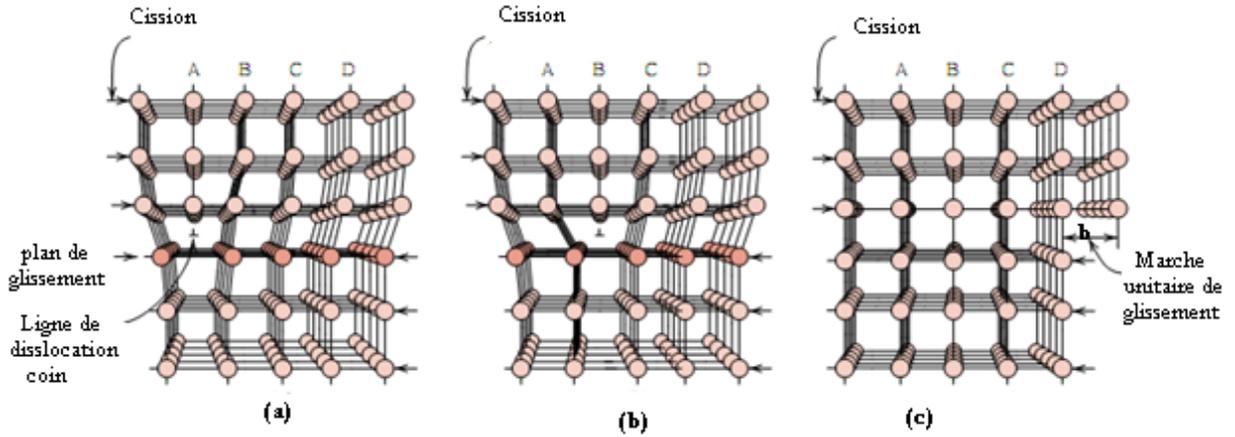


FIG. 2. 6 : Représentation atomique du mouvement d'une dislocation coin par suite de l'application d'une contrainte de cission

- a- A représente le demi plan d'atomes supplémentaire
- b- la dislocation se déplace d'une distance atomique vers la droite. A se lie à la partie inférieure du plan B, et la partie supérieure de B devient le demi plan supplémentaire.
- c- une marche se forme à la surface du cristal lorsque demi plan supplémentaire émerge

b/ La montée ou la descente : Dans le cas des dislocations coins, elles se font dans le plan contenant la dislocation et perpendiculairement au vecteur de Burgers.

Ce mécanisme correspond à un enlèvement d'atomes au bord du demi-plan Supplémentaire dans le cas de la montée, ou bien à l'addition d'atomes dans le cas de la descente.

Ce phénomène est liée à la diffusion, par conséquent il dépend fortement de la température.

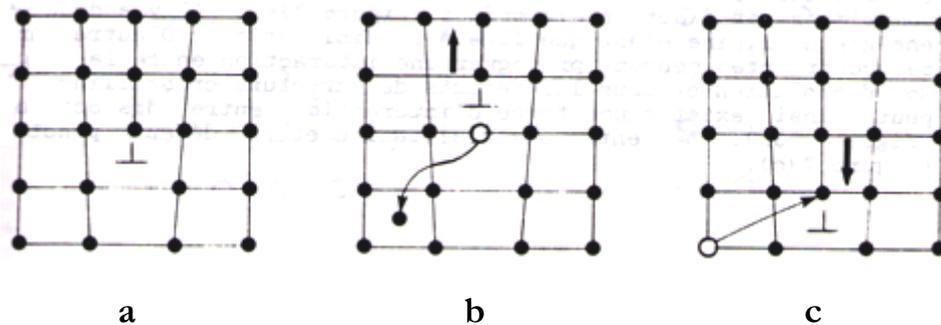


FIG. 2. 7 (a) le cas d'une dislocation coin initiale ;
 (b) mécanisme de montée ; (c) mécanisme de descente

II. 7. Etat du cristal réel

Il a été mentionné que la dislocation est l'axe d'un cylindre de matière perturbée. On conçoit alors que l'état des contraintes soit lui-même perturbé : on trouve ainsi des zones comprimées et d'autres détendues

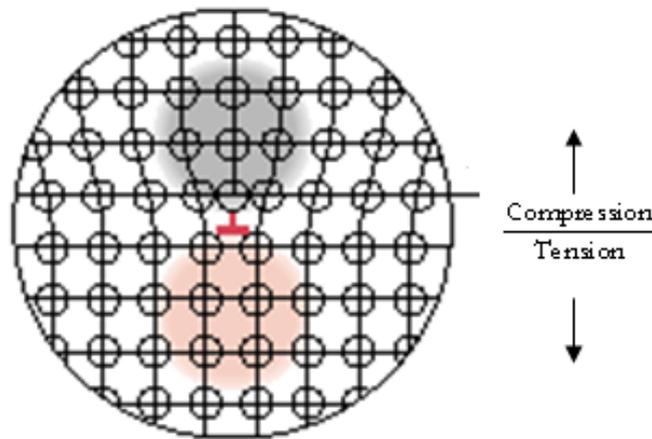


FIG. 2. 8: Région en compression et en tension situées à proximité d'une dislocation coin.

II. 8. Les différents types de réseaux de dislocations

On peut citer 3 types de réseaux de dislocations

II. 8. 1. Réseau unidirectionnel

La figure (2. 9) montre la géométrie d'un réseau unidirectionnel de dislocations coins (flexion) qui se développent dans le plan d'une interface séparant deux milieux. Les lignes de dislocations sont parallèles à l'axe ox_3 d'un repère cartésien $Ox_1x_2x_3$ convenablement choisi, Ox_1 est la normale commune aux deux surfaces libres.

II. 8. 2. Réseau carré

La figure (2. 10) montre une simulation de deux dislocations; un réseau carré (torsion) se développe périodiquement dans le plan d'une interface séparant deux cristaux ; il y a un arrangement bi-périodique de défauts linéaires. On peut modéliser le réseau carré en utilisant deux réseaux unidirectionnel qu'on superpose en effectuant une rotation de $\pi/2$.

II. 8. 3. Réseau hexagonal

Les lignes de dislocations se rencontrent en six nœuds d'une cellule hexagonale. Les cellules peuvent être soit régulières soit irrégulières (figure 2. 11).

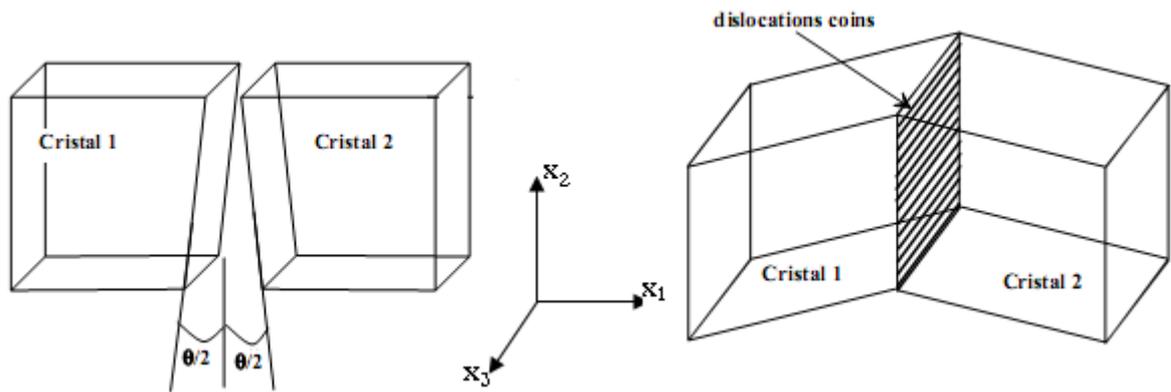


FIG 2. 9: l'interface des deux surfaces produit un réseau unidirectionnel de dislocations coins (flexion).

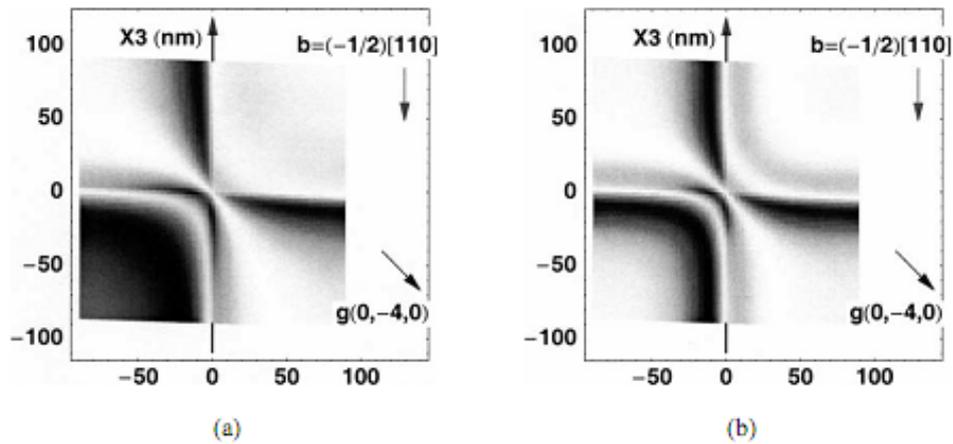


FIG 2.10. Simulation de deux dislocations vis dans le silicium, sécantes à 90° dans le plan moyen de la lame mince. Calcul dans deux hypothèses : (a) le champ u s'applique à un milieu infini ; (b) u s'applique à une lame mince limitée par deux faces parallèles. [18]

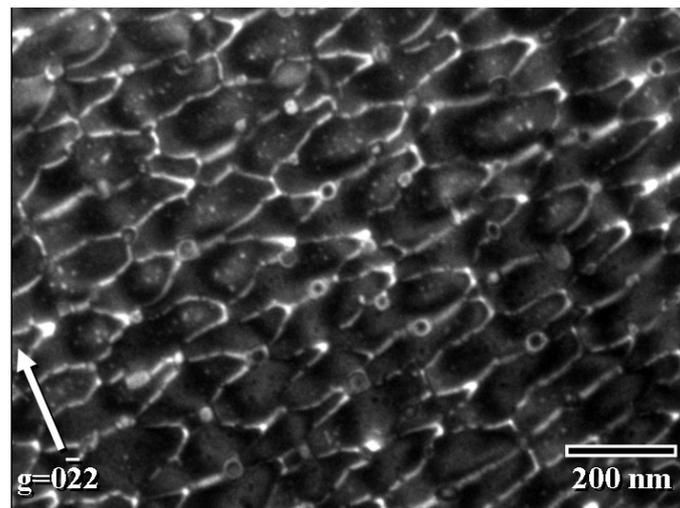


FIG 2.11: Cellules hexagonales d'un réseau de dislocations obtenu à l'interface de deux cristaux de GaAs entre lesquels il est établi une torsion (image de MET en état de faible-faisceau). [23]

Chapitre III

Formulation analytique en élasticité isotrope

Chapitre III

Formulation analytique en élasticité isotrope

(Cas du réseau unidirectionnel de dislocations de misfit)

III. 1. Géométrie du problème

La figure 3. 1, ci-dessous, montre en détail la géométrie du problème pour un réseau de dislocations coins unidirectionnel, qui se développent périodiquement dans le plan d'une interface séparant deux couches d'épaisseurs respectives h^+ et h^- . Les deux milieux $+$ ($x_2 > 0$) et $-$ ($x_2 < 0$) sont élastiquement isotropes et caractérisés respectivement par les constantes élastiques C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- . Cet arrangement périodique de défauts linéaires est parallèle à l'axe Ox_3 d'un repère cartésien $Ox_1x_2x_3$ convenablement choisi, tel que Ox_2 est perpendiculaire à l'interface. La période des dislocations interfaciales est Ω .

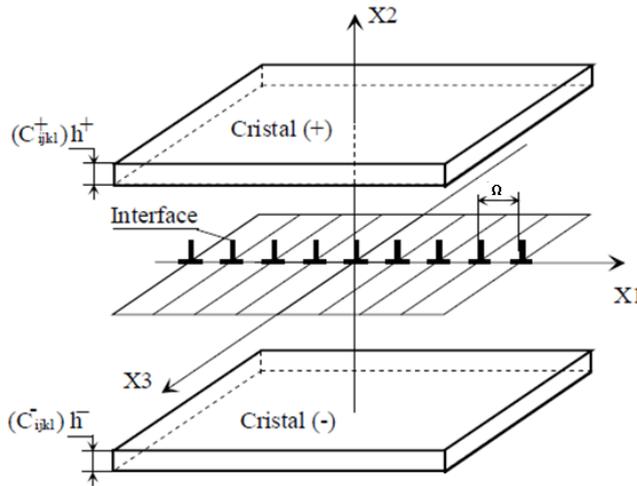


FIG. 3.1 : Description du modèle géométrique considéré, d'épaisseurs h^+ et h^- , avec un réseau unidirectionnel de dislocations coin à l'interface.

III. 2. Formulation du problème

En combinant les équations d'équilibre d'un élément de volume aux équations linéaires de Hooke, nous obtenons l'équation différentielle classique de l'élasticité, où u_k représente les trois composantes du champ des déplacements.

$$(\lambda + \mu) u_{i,ik} + \mu u_{k,ii} = 0 \quad (3.1)$$

Où λ et μ sont les coefficients de Lamé du milieu déformé et $i, k=1, 2, 3$.

La déformation est plane et supposée être strictement périodique, de période notée Ω le long de l'axe ox_1 (Fig. 3. 1). Le repère cartésien est centré sur le cœur d'une dislocation

interfaciale. Posons $\omega=2\pi/\Omega$, et adoptons Re et Im comme symboles signifiant respectivement "partie réelle" et "partie complexe". Les composantes du champ des déplacements u_k peuvent s'écrire sous forme d'une série de Fourier double comme suit :

$$u_k = \sum_{n=-\infty}^{\infty} U_k^{(n)} \exp(i n \omega) \quad (3.2)$$

$$u_k = U_k^0 + V_{k1}^0 x_1 + V_{k2}^0 x_2 + \sum_{n=-\infty}^{\infty} [2 \operatorname{Re}(U_k^{(n)}) \cos(n \omega x_1) - 2 \operatorname{Im}(U_k^{(n)}) \sin(n \omega x_1)] \quad (3.3)$$

Dans le cas des dislocations intrinsèques V_{k1}^0 et V_{k2}^0 doivent être égales à zéro pour éviter qu'il y ait des contraintes à longue distance. U_k^0 est une constante choisie égale à zéro par commodité. Donc l'expression du champ de déplacements s'écrit:

$$u_k = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [2 \operatorname{Re}(U_k^{(n)}) \cos(n \omega x_1) - 2 \operatorname{Im}(U_k^{(n)}) \sin(n \omega x_1)] \quad (3.4)$$

Où les termes de rang $n=0$, pour $k=1, 2, 3$ sont des fonctions linéaires réelles de x_1 et où les U_k^n ne dépendent que de x_2 .

En insérant l'équation (3.2) dans l'équation (3.1), nous obtenons, pour chaque harmonique de rang n non nul,

Pour $k=1$: $i=1, 2, 3$

$$\begin{cases} (\lambda+\mu)u_{1,11}+\mu u_{1,11}=(\lambda+2\mu)(-n^2\omega^2)U_1 \\ (\lambda+\mu)u_{2,21}+\mu u_{1,22}=(\lambda+\mu)(in\omega)U_1+\mu u_{1,22} \\ (\lambda+\mu)u_{3,31}+\mu u_{1,33}=0 \end{cases} \quad (3.5)$$

$$(\lambda+2\mu)(-n^2\omega^2)U_1+(\lambda+\mu)(in\omega)U_{2,2}+\mu U_{1,22}=0$$

Pour $k=2$: $i=1, 2, 3$

$$\begin{cases} (\lambda+\mu)u_{1,12}+\mu u_{2,11}=(\lambda+\mu)(in\omega)U_{1,2}+\mu(-n^2\omega^2)U_2 \\ (\lambda+\mu)u_{2,21}+\mu u_{2,22}=(\lambda+2\mu)U_{1,22} \\ (\lambda+\mu)u_{3,31}+\mu u_{1,33}=0 \end{cases} \quad (3.6)$$

$$\mu(-n^2\omega^2)U_{2,2}+(\lambda+\mu)(in\omega)U_{1,2}+(\lambda+2\mu)U_{2,22}=0$$

Pour $k=3$: $i=1,2,3$

$$\begin{cases} (\lambda+\mu)u_{1,13}+\mu u_{3,11}=0 & + \mu(-n^2\omega^2)U_3 \\ (\lambda+\mu)u_{2,21}+\mu u_{2,22}=0 & + \mu U_{3,22} \\ (\lambda+\mu)u_{3,31}+\mu u_{1,33}=0 & \\ & (-n^2\omega^2)U_3+U_{3,22}=0 \end{cases} \quad (3.7)$$

La solution générale du système (3.5), (3.6) et (3.7) est donnée par :

$$U_1=(A+Bn\omega x_2) e^{(-n\omega x_2)}+(C+Dn\omega x_2) e^{(n\omega x_2)} \quad (3.8)$$

$$U_2=i[A+B(3-4\nu)+Bn\omega x_2] e^{(-n\omega x_2)}-i[C-D(3-4\nu)+Dn\omega x_2] e^{(n\omega x_2)} \quad (3.9)$$

$$U_3=E e^{(-n\omega x_2)} +F e^{(n\omega x_2)} \quad (3.10)$$

Les constantes complexes A, B, C, D, E et F dépendent des conditions aux limites.

III. 3. Champ de déplacements

Les composantes du champ de déplacements sont donc :

$$u_1 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [(A + Bn\omega x_2)e^{(-n\omega x_2)} + (C + Dn\omega x_2)e^{(n\omega x_2)}]e^{(in\omega x_1)} \quad (3.11)$$

$$u_2 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [(A + B(3 - 4\nu) + Bn\omega x_2)e^{(-n\omega x_2)} - i(C - D(3 - 4\nu) + Dn\omega x_2)e^{(n\omega x_2)}] e^{(in\omega x_1)} \quad (3.12)$$

$$u_3 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [E e^{(-n\omega x_2)} + F e^{(n\omega x_2)}]e^{(in\omega x_1)} \quad (3.13)$$

III. 4. Champ de contraintes

Dans le cas d'une déformation plane

$$\sigma_{ij}=\lambda\delta_{ij}u_{kk}+\mu(u_{i,j}+u_{j,i}) \quad \lambda \text{ et } \mu \text{ sont les coefficients de Lamé} \quad (3.14)$$

$$\delta_{ij} \text{ (symbole de Kronecker)} = \begin{cases} 1 & \text{si } i=j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

δ_{ij} a une propriété de distribution, telle que:

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} a_i \delta_{ij} = a_j$$

Dans la suite de l'analyse, on s'intéressera seulement aux contraintes normales σ_{2j} avec $j=1, 2, 3$

$$\sigma_{2j} = \lambda \delta_{2j} u_{k,k} + \mu (u_{2,j} + u_{j,2}) \quad (3.15)$$

si $j \neq 2$ donc $j=1$ ou $j=3$, l'équation précédente se réduit à :

$$\sigma_{2j} = \mu (u_{2,j} + u_{j,2}) \quad j=1,3 \quad (3.16)$$

$$\text{et } \sigma_{22} = \lambda u_{\theta} + \mu (u_{2,2} + u_{2,2}) ; \text{ tel que } u_{\theta} = u_{1,1} + u_{2,2} + u_{3,3} \quad (3.17)$$

$$\text{alors : } \sigma_{22} = \lambda (u_{1,1} + u_{3,3}) + (\lambda + 2\mu) u_{2,2} \quad (3.18)$$

Eliminons le paramètre λ , en utilisant la relation classique (Hirth et Lothe)

$$\lambda + 2\mu = 2\mu (1 - \nu) / (1 - 2\nu) \Rightarrow \lambda = 2\mu\nu / (1 - 2\nu) \quad (3.19)$$

En insérant (3.19) dans l'équation (3.18) on obtient :

$$\sigma_{22} = \frac{2\mu}{1 - 2\nu} [(1 - \nu)u_{2,2} + \nu (u_{1,1} + u_{3,3})] \quad \text{tel que: } u_{3,3} = 0 \quad (3.20)$$

Les contraintes nécessaires pour le calcul sont donc :

$$\sigma_{21} = \mu (u_{1,2} + u_{2,1}) \quad (3.21)$$

$$\sigma_{22} = \frac{2\mu}{1 - 2\nu} [(1 - \nu)u_{2,2} + \nu u_{1,1}] \quad (3.22)$$

$$\sigma_{23} = \mu (u_{2,3} + u_{3,2}) \quad (3.23)$$

III. 5. Conditions aux limites relatives à un bilame mince

Dans notre travail, on considère le fait qu'une série périodique de dislocations produit dans chaque milieu un champ de déplacements u_k et un champ de contraintes σ_{jk} dont les composantes peuvent être développées en série de Fourier double.

Le champ des déplacements u est bipériodique parallèlement à l'hétéro-interface, dans des milieux notés respectivement + et -. L'étude du modèle géométrique passe obligatoirement par l'établissement de conditions aux limites. Ces conditions sont résumées dans ce qui suit :

III. 5. 1. Conditions sur les déplacements

Le déplacement relatif Δu varie linéairement entre deux lignes de dislocation tel que :

$$\Delta u_k = u_k^+ - u_k^- = \sum_{n=1}^{\infty} (-b_k / \pi n) \sin(n\omega x_1)$$

$$\text{où encore } u_k^+ - u_k^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i b_k / 2\pi n e^{in\omega x_1} \quad (3.24)$$

III. 5. 2. Conditions sur les contraintes

a/ la continuité des contraintes σ_{2k} à l'interface

$$\sigma_{2k}^+ = \sigma_{2k}^- \quad \text{pour } x_2 = 0 \quad (3.25)$$

b/ la nullité des contraintes σ_{2k} à la surface libre (cristal(+))

$$\sigma_{2k}^+ = 0 \quad \text{pour } x_2 = h^+ \quad (3.26)$$

c/ la nullité des contraintes σ_{2k} à la surface libre (cristal(-))

$$\sigma_{2k}^- = 0 \quad \text{pour } x_2 = h^- \quad (3.27)$$

III. 6. Application des conditions aux limites

1- la linéarité du déplacement relatif interfacial ($x_2=0$)

Les équations (3.11) ; (3.12) ; (3.13) et (3.24) donnent dans les trois directions du repère cartésien $OX_1X_2X_3$:

a/

$$u_1^+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (A^+ + C^+) e^{(in\omega x_1)} \quad \text{et} \quad u_1^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (A^- + C^-) e^{(in\omega x_1)}$$

$$u_1^+ - u_1^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (A^+ + C^+ - A^- - C^-) e^{(in\omega x_1)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{i b_1}{2\pi n} e^{(in\omega x_1)}$$

$$u_1^+ - u_1^- = A^+ + C^+ - A^- - C^- = \frac{i b_1}{2\pi n} \quad (3.28)$$

b/

$$u_2^+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i(A^+ + B^+(3 - 4\nu^+) - C^+ + D^+(3 - 4\nu^+)) e^{(in\omega x_1)}$$

$$u_2^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i(A^- + B^-(3 - 4\nu^-) - C^- + D^-(3 - 4\nu^-)) e^{(in\omega x_1)}$$

$$u_2^+ - u_2^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [A^+ + B^+(3 - 4\nu^+) - C^+ + D^+(3 - 4\nu^+) - (A^- + B^-(3 - 4\nu^-) - C^- +$$

$$D^-(3 - 4\nu^-)) e^{(in\omega x_1)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{i b_2}{2\pi n} e^{(in\omega x_1)}$$

$$u_2^+ - u_2^- = A^+ + B^+(3 - 4\nu^+) - C^+ + D^+(3 - 4\nu^+) - A^- - B^-(3 - 4\nu^-) + C^- - D^-(3 - 4\nu^-) = \frac{b_2}{2\pi n} \quad (3.29)$$

c/

$$u_3^+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (E^+ + F^+)e^{in\omega x_1} \quad \text{et} \quad u_3^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (E^- + F^-)e^{in\omega x_1}$$

$$u_3^+ - u_3^- = E^+ + F^+ - E^- - F^- = \frac{ib_3}{2\pi n} \quad (3.30)$$

2. la continuité des contraintes σ_{2k} à l'interface $\sigma_{2k}^+ = \sigma_{2k}^-$ (pour $x_2=0$; $k=1, 2, 3$):

a/ $\sigma_{21}^+ = \sigma_{21}^-$ pour $k = 1$

$$\sigma_{21}^+ = \mu^+(u_{1,2}^+ + u_{2,1}^+) \quad \text{et} \quad \sigma_{21}^- = \mu^-(u_{1,2}^- + u_{2,1}^-)$$

$$u_{2,1}^+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} -n\omega [(A^+ + B^+(3 - 4\nu^+) + B^+n\omega x_2)e^{(-n\omega x_2)} - (C^+ - D^+(3 - 4\nu^+) + D^+n\omega x_2)e^{(n\omega x_2)}] e^{in\omega x_1} \quad (3.31)$$

$$u_{2,1}^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} -n\omega [(A^- + B^-(3 - 4\nu^-) + B^-n\omega x_2)e^{(-n\omega x_2)} - (C^- - D^-(3 - 4\nu^-) + D^-n\omega x_2)e^{(n\omega x_2)}] e^{in\omega x_1} \quad (3.32)$$

$$u_{1,2}^+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n\omega [(-A^+ - B^+n\omega x_2 + B^+)e^{(-n\omega x_2)} + (C^+ + D^+n\omega x_2 + D^+)e^{(n\omega x_2)}] e^{in\omega x_1} \quad (3.33)$$

$$u_{1,2}^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n\omega [(-A^- - B^-n\omega x_2 + B^-)e^{(-n\omega x_2)} + (C^- + D^-n\omega x_2 + D^-)e^{(n\omega x_2)}] e^{in\omega x_1} \quad (3.34)$$

Pour $x_2=0$; on obtient :

$$u_{2,1}^+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} -n\omega [(A^+ + B^+(3 - 4\nu^+) - (C^+ - D^+(3 - 4\nu^+))] e^{in\omega x_1}$$

$$u_{2,1}^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} -n\omega [(A^- + B^-(3 - 4\nu^-) - (C^- - D^-(3 - 4\nu^-))] e^{in\omega x_1}$$

$$u_{1,2}^+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n\omega [-A^+ + B^+ + C^+ + D^+] e^{(in\omega x_1)}$$

$$u_{1,2}^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n\omega [-A^- + B^- + C^- + D^-] e^{(in\omega x_1)}$$

Après le calcul ; et on notant $k = \mu^+/\mu^-$ on déduit :

$$\begin{aligned} -kA^+ - k(1 - 2\nu^+)B^+ + kC^+ - k(1 - 2\nu^+)D^+ + A^- + (1 - 2\nu^-)B^- - C^- \\ + (1 - 2\nu^-)D^- = 0 \end{aligned} \quad (3.35)$$

b/ $\sigma_{22}^+ = \sigma_{22}^-$ pour $k = 2$

De l'équation (3.20):

$$\sigma_{22}^+ = \frac{2\mu^+}{1 - 2\nu^+} [(1 - \nu^+)u_{2,2}^+ + \nu^+(u_{1,1}^+ + u_{3,3}^+)]$$

$$\sigma_{22}^- = \frac{2\mu^-}{1 - 2\nu^-} [(1 - \nu^-)u_{2,2}^- + \nu^-(u_{1,1}^- + u_{3,3}^-)]$$

$$u_{1,1}^+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} in\omega [(A^+ + B^+ n\omega x_2)e^{(-n\omega x_2)} + (C^+ + D^+ n\omega x_2)e^{(n\omega x_2)}] e^{(in\omega x_1)} \quad (3.36)$$

$$u_{1,1}^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} in\omega [(A^- + B^- n\omega x_2)e^{(-n\omega x_2)} + (C^- + D^- n\omega x_2)e^{(n\omega x_2)}] e^{(in\omega x_1)} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} u_{2,2}^+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} in\omega [(-A^+ - 2B^+(1 - 2\nu^+ + n\omega x_2))e^{(-n\omega x_2)} - (C^+ - D^+(1 - 2\nu^+ + \\ n\omega x_2))e^{(n\omega x_2)}] e^{(in\omega x_1)} \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} u_{2,2}^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} in\omega [(-A^- - 2B^-(1 - 2\nu^- + n\omega x_2))e^{(-n\omega x_2)} - (C^- - D^-(1 - 2\nu^- + \\ n\omega x_2))e^{(n\omega x_2)}] e^{(in\omega x_1)} \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$u_{3,3}^+ = 0 \quad \text{et} \quad u_{3,3}^- = 0$$

A l'interface $x_2=0$

$$u_{1,1}^+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} in\omega [A^+ + C^+] e^{(in\omega x_1)}$$

$$u_{1,1}^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} in\omega [A^- + C^-] e^{(in\omega x_1)}$$

$$u_{2,2}^+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} in\omega [-A^+ - 2B^+ (1 - 2\nu^+) - (C^+ - 2D^+ (1 - 2\nu^+))] e^{(in\omega x_1)}$$

$$u_{2,2}^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} in\omega [-A^- - 2B^- (1 - 2\nu^-) - (C^- - 2D^- (1 - 2\nu^-))] e^{(in\omega x_1)}$$

On trouve ; après le calcul :

$$-kA^+ - 2k(1 - \nu^+)B^+ - kC^+ + 2k(1 - \nu^+)D^+ + A^- + 2(1 - \nu^-)B^- + C^- - 2(1 - \nu^-)D^- = 0 \quad (3.40)$$

$$\mathbf{c/} \quad \sigma_{23}^+ = \sigma_{23}^- \quad \text{pour } \mathbf{k=3} \quad (3.41)$$

$$\sigma_{23}^+ = \mu^+ (u_{3,2}^+ + u_{2,3}^+) \quad \text{et} \quad \sigma_{23}^- = \mu^- (u_{3,2}^- + u_{2,3}^-)$$

$$u_{3,2}^+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n\omega [F^+ e^{(n\omega x_2)} - E^+ e^{(-n\omega x_2)}] e^{(in\omega x_1)} \quad (3.42)$$

$$u_{3,2}^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n\omega [F^- e^{(n\omega x_2)} - E^- e^{(-n\omega x_2)}] e^{(in\omega x_1)} \quad (3.43)$$

$$u_{3,2}^+ = 0 \quad \text{et} \quad u_{3,2}^- = 0$$

On remplace les équations ci-dessus dans l'équation (3.41); on trouve finalement :

$$-kE^+ + kF^+ + E^- - F^- = 0 \quad (3.44)$$

3. la nullité des contraintes σ_{2k} à la surface libre(cristal(+))

a/ $\sigma_{21}^+=0$ pour $x_2=h^+$ et $k=1$

$$\sigma_{21}^+ = \mu^+ (u_{1,2}^+ + u_{2,1}^+) = 0 \quad \mu^+ \neq 0$$

$$\text{Alors : } u_{1,2}^+ + u_{2,1}^+ = 0$$

On remplace $x_2=h^+$ dans les équations (3.31) et (3.33); on obtient:

$$A^+ + B^+(n\omega h^+ + 1 - 2\nu^+) - C^+ e^{2n\omega h^+} - D^+(n\omega h^+ - 1 + 2\nu^+) e^{2n\omega h^+} = 0 \quad (3.45)$$

b/ $\sigma_{22}^+ = 0$ pour $x_2=h^+$ et $k=2$

$$\sigma_{22}^+ = \frac{2 \mu^+}{1 - 2 \nu^+} [(1 - \nu^+) u_{2,2}^+ + \nu^+ (u_{1,1}^+ + u_{3,3}^+)] = 0 \quad ; \quad u_{3,3}^+ = 0$$

$$\Rightarrow \frac{2 \mu^+}{1 - 2 \nu^+} [(1 - \nu^+) u_{2,2}^+ + \nu^+ u_{1,1}^+] = 0$$

On remplace $x_2=h^+$ dans les équations (3.36) et (3.38); on arrive à l'expression suivante:

$$A^+ + B^+(2 - 2 \nu^+ + n \omega h^+) + C^+ e^{2n\omega h^+} + D^+(-2 + 2 \nu^+ + n \omega h^+) e^{2n\omega h^+} = 0 \quad (3.46)$$

c/ $\sigma_{23}^+ = 0$ pour $x_2=h^+$ et $k=3$

$$\sigma_{23}^+ = \mu^+ (u_{3,2}^+ + u_{2,3}^+) = 0 \quad \mu^+ \neq 0 \quad \text{et} \quad u_{2,3}^+ \neq 0 \quad \Rightarrow \quad u_{3,2}^+ = 0$$

On remplace $x_2=0$ dans l'équation (3.41); on trouve :

$$F^+ e^{2n\omega h^+} - E^+ = 0 \quad (3.47)$$

4. la nullité des contraintes σ_{2k} à la surface libre(cristal(-))

a/ $\sigma_{21}^- = 0$ pour $x_2=h^-$ et $k=1$

$$\sigma_{21}^- = \mu^- (u_{1,2}^- + u_{2,1}^-) = 0 \quad \mu^- \neq 0$$

$$\Rightarrow u_{1,2}^- + u_{2,1}^- = 0$$

On remplace $x_2=h^-$ dans les équations (3.32) et (3.34); on obtient, après les calculs ;

l'expression suivante :

$$A^- + B^-(n \omega h^- + 1 - 2 \nu^-) - C^- e^{2n\omega h^-} - D^-(n\omega h^- - 1 + 2 \nu^-) e^{2n\omega h^-} = 0 \quad (3.48)$$

b/ $\sigma_{22}^- = 0$ pour $x_2=h^-$ et $k=2$

$$\sigma_{22}^- = \frac{2 \mu^-}{1 - 2 \nu^-} [(1 - \nu^-) u_{2,2}^- + \nu^- (u_{1,1}^- + u_{3,3}^-)] = 0 \quad ; \quad u_{3,3}^- = 0$$

$$\Rightarrow \frac{2 \mu^-}{1 - 2 \nu^-} [(1 - \nu^-) u_{2,2}^- + \nu^- u_{1,1}^-] = 0$$

On remplace $x_2=h^-$ dans les équations (3.37) et (3.39) :

$$A^- + B^-(2 - 2 \nu^- + n \omega h^-) + C^- e^{2n\omega h^-} + D^-(-2 + 2 \nu^- + n \omega h^-) e^{2n\omega h^-} = 0 \quad (3.49)$$

c/ $\sigma_{23}^- = 0$ pour $x_2=h^-$ et $k=3$

$$\sigma_{23}^- = \mu^- (u_{3,2}^- + u_{2,3}^-) = 0 \quad \mu^- \neq 0 \quad \text{et} \quad u_{2,3}^- \neq 0 \quad \Rightarrow \quad u_{3,2}^- = 0$$

On remplace $x_2=h^-$ dans l'équation (3.42); on obtient:

$$F^- e^{2n\omega h^-} - E^- = 0 \quad (3.50)$$

Le système d'équations donné par (3. 28, 3. 29, 3. 30, 3. 35, 3. 40, 3. 44, 3. 45, 3. 46, 3. 47, 3. 48, 3. 49, 3. 50) est réécrit sous la forme compacte suivante :

$$1/ \quad A^+ + C^+ - A^- - C^- = \frac{ib_1}{2\pi n}$$

$$2/ \quad A^+ + B^+(3 - 4\nu^+) - C^+ + D^+(3 - 4\nu^+) - A^- - B^-(3 - 4\nu^-) + C^- - D^-(3 - 4\nu^-) \\ = \frac{b_2}{2\pi n}$$

$$3/ \quad E^+ + F^+ - E^- - F^- = \frac{ib_3}{2\pi n}$$

$$4/ \quad -kA^+ - k(1 - 2\nu^+)B^+ + kC^+ - k(1 - 2\nu^+)D^+ + A^- + (1 - 2\nu^-)B^- - C^- \\ + (1 - 2\nu^-)D^- = 0$$

$$5/ \quad -kA^+ - 2k(1 - \nu^+)B^+ - kC^+ + 2k(1 - \nu^+)D^+ + A^- + 2(1 - \nu^-)B^- + C^- - \\ 2(1 - \nu^-)D^- = 0$$

$$6/ \quad -kE^+ + kF^+ + E^- - F^- = 0$$

$$7/ \quad A^+ + B^+(n\omega h^+ + 1 - 2\nu^+) - C^+e^{2n\omega h^+} - D^+(n\omega h^+ - 1 + 2\nu^+)e^{2n\omega h^+} = 0$$

$$8/ \quad A^+ + B^+(2 - 2\nu^+ + n\omega h^+) + C^+e^{2n\omega h^+} + D^+(-2 + 2\nu^+ + n\omega h^+)e^{2n\omega h^+} = 0$$

$$9/ \quad F^+e^{2n\omega h^+} - E^+ = 0$$

$$10/ \quad A^- + B^-(n\omega h^- + 1 - 2\nu^-) - C^-e^{2n\omega h^-} - D^-(n\omega h^- - 1 + 2\nu^-)e^{2n\omega h^-} = 0$$

$$11/ \quad A^- + B^-(2 - 2\nu^- + n\omega h^-) + C^-e^{2n\omega h^-} + D^-(-2 + 2\nu^- + n\omega h^-)e^{2n\omega h^-} = 0$$

$$12/ \quad F^-e^{2n\omega h^-} - E^- = 0$$

III. 7. Détermination explicite du champ des déplacements et des contraintes

III. 7. 1. Détermination des constantes complexes

Pour trouver explicitement chacun des coefficients de Fourier $U_k^{(n)}$ du champ des déplacements (3.12), il faut résoudre analytiquement les équations (3.11), (3.24) et (3.25).

Il demeure donc à résoudre un système linéaire de douze équations à douze inconnues complexes $A^+, B^+, C^+, D^+, E^+, F^+, A^-, B^-, C^-, D^-, E^-$ et F^- .

Ce système se découple en fait en deux sous-systèmes indépendants. Le premier comporte seulement les inconnues E^+, F^+, E^- et F^- , il s'écrit:

$$E^+ = \frac{ib_3 e^{2n\omega h^+} (e^{2n\omega h^-} + k)}{2 \left(-e^{2n\omega(h^-+h^+)} (-1 + k) + 2k + e^{2n\omega h^-} (1 + k) \right) n\pi} \quad (3.51)$$

$$F^+ = \frac{ib_3(e^{2n\omega h^-} + k)}{2(-e^{2n\omega(h^-+h^+)})(-1+k) + 2k + e^{2n\omega h^-}(1+k)} n\pi \quad (3.52)$$

$$E^- = \frac{ib_3 e^{2n\omega h^-} (-1 + e^{2n\omega h^+}) k}{2(-e^{2n\omega(h^-+h^+)})(-1+k) + 2k + e^{2n\omega h^-}(1+k)} n\pi \quad (3.53)$$

$$F^- = \frac{ib_3(-1 + e^{2n\omega h^+})k}{2(-e^{2n\omega(h^-+h^+)})(-1+k) + 2k + e^{2n\omega h^-}(1+k)} n\pi \quad (3.54)$$

Les solutions sont purement complexes. La composante du champ des déplacements parallèlement aux dislocations dépend donc du vecteur de Burgers \mathbf{b} , du coefficient \mathbf{v} et du rapport \mathbf{k} des modules de cisaillement.

L'autre système d'équations comporte les huit inconnues $A^+, B^+, C^+, D^+, A^-, B^-, C^-,$ et D^- . Il s'écrit sous la forme d'un produit matriciel, ou la matrice colonne X ($A^+, B^+, C^+, D^+, A^-, B^-, C^-,$ et D^-) renferme ces huit inconnues complexes écrites dans le même ordre de haut en bas.

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{B} \quad (3.55)$$

Dans cette équation, les matrices \mathbf{A} et \mathbf{B} sont respectivement une matrice carrée complexe 8×8 et une matrice colonne.

Cette équation a été résolue analytiquement en utilisant le logiciel de calcul formel **MATHEMATICA**.

Les expressions des constantes complexes sont :

$$\blacksquare X^+ = \frac{b_2 x_{re}^+ + b_1 x_{im}^+}{2 n \pi \Delta} \quad \text{pour cristal(+)}$$

$$\blacksquare X^- = \frac{b_2 x_{re}^- + b_1 x_{im}^-}{2 n \pi \Delta} \quad \text{pour cristal(-)}$$

$b_1; b_2$ et b_3 les composantes du vecteur de Burgers \mathbf{b}

x_{re}^\pm : la partie réelle ; x_{im}^\pm : la partie imaginaire

On pose :

$$n\omega h^+ = \alpha \quad \text{et} \quad n\omega h^- = \beta$$

$$A^+ = e^{2\alpha} (2 b_2 a_{re}^+ - i b_1 a_{im}^+)$$

$$a_{re}^+ = a_{10}^+ + a_{11}^+ v^+ - 4 a_{12}^+ (v^+)^2 + k v^- (a_{13}^+ - 4 a_{14}^+ v^+)$$

$$a_{im}^+ = a_{20}^+ + 2 a_{21}^+ v^+ + 8 a_{22}^+ (v^+)^2 + 2 k v^- (a_{23}^+ - 4 a_{24}^+ v^+)$$

$$B^+ = e^{2\alpha} (-b_2 b_{re}^+ + i b_1 b_{im}^+)$$

$$b_{re}^+ = b_{10}^+ + 4 b_{11}^+ v^+$$

$$b_{im}^+ = b_{20}^+ - 4 b_{21}^+ v^+$$

$$C^+ = 2 b_2 c_{re}^+ - i b_1 c_{im}^+$$

$$c_{re}^+ = c_{10}^+ + c_{11}^+ v^+ + 4 c_{12}^+ (v^+)^2 + k v^- (c_{13}^+ - 4 c_{14}^+ v^+)$$

$$c_{im}^+ = -(c_{20}^+ + 2 c_{21}^+ v^+ - 8 c_{22}^+ (v^+)^2 + 2 k v^- (c_{23}^+ + 4 c_{24}^+ v^+))$$

$$D^+ = b_2 d_{re}^+ + i b_1 d_{im}^+$$

$$d_{re}^+ = d_{10}^+ + 4 k d_{11}^+ v^- - 4 d_{12}^+ v^+$$

$$d_{im}^+ = d_{20}^+ + 4 d_{21}^+ v^- - 4 d_{22}^+ v^+$$

$$A^- = e^{2\beta} k(2 b_2 a_{re}^- + i b_1 a_{im}^-)$$

$$a_{re}^- = a_{10}^- + 4 k a_{11}^- (v^-)^2 + a_{12}^- v^+ + v^- (a_{13}^- - 4 a_{14}^- v^+)$$

$$a_{im}^- = a_{20}^- - 8 k a_{21}^- (v^-)^2 - a_{22}^- + 2 v^- (a_{23}^- - 4 a_{24}^- v^+)$$

$$B^- = e^{2\beta} k(-b_2 b_{re}^- + i b_1 b_{im}^-)$$

$$b_{re}^- = b_{10}^- - 4 k b_{11}^- v^- + 4 b_{12}^- v^+$$

$$b_{im}^- = b_{20}^- - 4 k b_{21}^- v^- - 4 b_{22}^- v^+$$

$$C^- = k(2 b_2 c_{re}^- - i b_1 c_{im}^-)$$

$$c_{re}^- = c_{10}^- (v^-)^2 + c_{11}^- v^+ + v^- c_{12}^- v^+$$

$$c_{im}^- = c_{20}^- + c_{21}^- + 2 v^- (c_{22}^- - 4 c_{23}^- v^+)$$

$$D^- = k(-b_2 d_{re}^- + i b_1 d_{im}^-)$$

$$d_{re}^- = d_{10}^- v^- + 4 d_{11}^- v^+$$

$$d_{im}^- = d_{20}^- + 4 d_{21}^- v^+$$

$$\Delta = (\gamma - \delta + \chi v^+ + \varphi - 2 v^- (\gamma + 4 \Omega))$$

Remarque

Les expressions des coefficients de Fourier sont détaillées dans l'annexe I en notant h l'épaisseur du cristal (+) et l celle du cristal (-).

$$e_{re}^+ = 0; f_{re}^+ = 0; e_{re}^- = 0; f_{re}^- = 0$$

$$e_{im}^+ = e^{2n\omega h^+} (e^{2n\omega h^-} + k); f_{im}^+ = e^{2n\omega h^-} + k$$

$$e_{im}^- = e^{2n\omega h^+} (e^{2n\omega h^-} + k); f_{im}^- = e^{2n\omega h^-} + k$$

$$\gamma = -e^{2n\omega(h^++h^-)}(-1+k+e^{2n\omega h^-}(1+k))$$

III. 7. 2. Expressions analytiques du champ des déplacements

En insérant les équations (3. 6) ; (3. 7) et (3. 8) dans l'expression des solutions trouvées ci-dessus (3.2 c), nous obtenons les expressions explicites du champ des déplacements pour les deux milieux :

$$u_1^+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_2 ((a_{re}^+ + n\omega b_{re}^+ x_2) e^{-n\omega x_2} + (c_{re}^+ + n\omega d_{re}^+ x_2) e^{n\omega x_2}) \frac{\cos(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} - b_1((a_{im}^+ + n\omega b_{im}^+ x_2) e^{-n\omega x_2} + (c_{im}^+ + n\omega d_{im}^+ x_2) e^{n\omega x_2}) \frac{\sin(n\omega x_1)}{n\pi\Delta}] \quad (3.55)$$

$$u_2^+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_1 ((a_{im}^+ + (n\omega x_2 + 3 - 4v^+) b_{im}^+) e^{-n\omega x_2} - (c_{im}^+ - d_{im}^+(-n\omega x_2 + 3 - 4v^+)) e^{n\omega x_2}) \frac{\cos(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} - b_2((a_{re}^+ + (n\omega x_2 + 3 - 4v^+) b_{re}^+) e^{-n\omega x_2} - (c_{re}^+ + d_{re}^+(-n\omega x_2 + 3 - 4v^+)) e^{n\omega x_2}) \frac{\sin(n\omega x_1)}{n\pi\Delta}] \quad (3.56)$$

$$u_3^+ = -\frac{b_3}{\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} [(f_{im}^+ e^{n\omega x_2} + e_{im}^+ e^{-n\omega x_2}) \frac{\sin(n\omega x_1)}{n\gamma}] \quad (3.57)$$

$$u_1^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_2 ((a_{re}^- + n\omega b_{re}^- x_2) e^{-n\omega x_2} + (c_{re}^- + n\omega d_{re}^- x_2) e^{n\omega x_2}) \frac{\cos(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} - b_1((a_{im}^- + n\omega b_{im}^- x_2) e^{-n\omega x_2} + (c_{im}^- + n\omega d_{im}^- x_2) e^{n\omega x_2}) \frac{\sin(n\omega x_1)}{n\pi\Delta}] \quad (3.58)$$

$$u_2^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_1 ((a_{im}^- + (n\omega x_2 + 3 - 4v^-) b_{im}^-) e^{-n\omega x_2} - (c_{im}^- - d_{im}^-(-n\omega x_2 + 3 - 4v^-)) e^{n\omega x_2}) \frac{\cos(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} - b_2((a_{re}^- + (n\omega x_2 + 3 - 4v^-) b_{re}^-) e^{-n\omega x_2} - (c_{re}^- + d_{re}^-(-n\omega x_2 + 3 - 4v^-)) e^{n\omega x_2}) \frac{\sin(n\omega x_1)}{n\pi\Delta}] \quad (3.59)$$

$$u_3^- = -\frac{b_3}{\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} [(f_{im}^- e^{n \omega x_2} + e_{im}^- e^{-n \omega x_2}) \frac{\sin(n \omega x_1)}{n \gamma}] \quad (3.60)$$

III.7.3. Expressions analytiques du champ des contraintes

Dans la suite de l'analyse ; on s'intéressera seulement aux contraintes normales σ_{2j} et les contraintes σ_{11} .

Remplaçons le paramètre λ par:

$$\lambda = 2\mu\nu / (1-2\nu)$$

Donc les contraintes nécessaires pour les calculs sont :

$$1- \quad \sigma_{11} = \frac{2\mu\nu}{1-2\nu} [(1-\nu)u_{1,1} + \nu u_{2,2}]$$

$$2- \quad \sigma_{22} = \frac{2\mu\nu}{1-2\nu} [(1-\nu)u_{2,2} + \nu u_{1,1}]$$

$$3- \quad \sigma_{21} = \mu (u_{2,1} + u_{1,2})$$

$$4- \quad \sigma_{23} = \mu (u_{2,3} + u_{3,2}); \quad u_{2,3} = 0 \Rightarrow \sigma_{23} = \mu u_{3,2}$$

Sachant que :

$$\bullet \quad u_{1,1} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i n \omega [(A + B n \omega x_2) e^{(-n \omega x_2)} + (C + D n \omega x_2) e^{(n \omega x_2)}] e^{(i n \omega x_1)}$$

$$\bullet \quad u_{2,2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i n \omega [(-A - B(2 + n \omega x_2 - 4\nu)) e^{(-n \omega x_2)} + (-C + D(2 - 4\nu + n \omega x_2)) e^{(n \omega x_2)}] e^{(i n \omega x_1)}$$

$$\bullet \quad u_{3,2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n \omega [F e^{(n \omega x_2)} - E e^{(-n \omega x_2)}] e^{(i n \omega x_1)}$$

$$\bullet \quad u_{1,2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n \omega [(-A - B n \omega x_2 + B) e^{(-n \omega x_2)} + (C + D n \omega x_2 + D) e^{(n \omega x_2)}] e^{(i n \omega x_1)}$$

$$\bullet \quad u_{2,1} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} -n \omega [(A + B(3 - 4\nu) + B n \omega x_2) e^{(-n \omega x_2)} - (C - D(3 - 4\nu) + D n \omega x_2) e^{(n \omega x_2)}] e^{(i n \omega x_1)}$$

1- Contrainte σ_{11}

$$\sigma_{11} = \frac{2 \mu \nu}{1 - 2 \nu} [(1 - \nu) \sum_{n=-\infty}^{\infty} i n \omega \{(A + B n \omega x_2) e^{-n \omega x_2} + (C + D n \omega x_2) e^{n \omega x_2}\} e^{i n \omega x_1} + \nu \sum_{n=-\infty}^{\infty} i n \omega \{(-A - B(2 + n \omega x_2 - 4 \nu)) e^{-n \omega x_2} + (-C + D(2 - n \omega x_2 - 4 \nu)) e^{n \omega x_2}\} e^{i n \omega x_1}]$$

$$\sigma_{11} = \frac{2 \mu \nu n \omega}{1 - 2 \nu} \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} i \{((1 - \nu)A + (1 - \nu)B n \omega x_2) e^{-n \omega x_2} + ((1 - \nu)C + (1 - \nu)D n \omega x_2) e^{n \omega x_2}\} e^{i n \omega x_1} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} i \{(-\nu A - \nu B(2 + n \omega x_2 - 4 \nu)) e^{-n \omega x_2} + (-\nu C - D(2 - n \omega x_2 - 4 \nu)) e^{n \omega x_2}\} e^{i n \omega x_1} \right]$$

$$\sigma_{11} = \frac{2 \mu \nu n \omega}{1 - 2 \nu} \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} i \{((1 - 2 \nu)A + (1 - 2 \nu)B(n \omega x_2 - 2 \nu)) e^{-n \omega x_2} + \{(1 - 2 \nu)C + (1 - 2 \nu)D(n \omega x_2 + 2 \nu)\} e^{n \omega x_2}\} e^{i n \omega x_1} \right]$$

$$\sigma_{11} = 2 \mu \nu n \omega \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} i \{(A + B(n \omega x_2 - 2 \nu)) e^{-n \omega x_2} + \{C + D(n \omega x_2 + 2 \nu)\} e^{n \omega x_2}\} e^{i n \omega x_1} \right]$$

2- Contrainte σ_{22}

$$\sigma_{22} = \frac{2 \mu \nu}{1 - 2 \nu} [(1 - \nu) \sum_{n=-\infty}^{\infty} i n \omega \{(-A - B(2 + n \omega x_2 - 4 \nu)) e^{-n \omega x_2} + (-C + D(2 - n \omega x_2 - 4 \nu)) e^{n \omega x_2}\} e^{i n \omega x_1} + \nu \sum_{n=-\infty}^{\infty} i n \omega \{(A + B n \omega x_2) e^{-n \omega x_2} + (C + D n \omega x_2) e^{n \omega x_2}\} e^{i n \omega x_1}]$$

$$\sigma_{22} = \frac{2 \mu \nu n \omega}{1 - 2 \nu} \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} i \left[\{(-(1 - \nu)A - B(1 - \nu)(2 + n \omega x_2 - 4 \nu)) e^{-n \omega x_2} + (-C(1 - \nu) + D(1 - \nu)(2 - n \omega x_2 - 4 \nu)) e^{n \omega x_2}\} e^{i n \omega x_1} + \{(v A + v B n \omega x_2) e^{-n \omega x_2} + (v C + v B n \omega x_2) e^{n \omega x_2}\} e^{i n \omega x_1} \right] \right]$$

$$\sigma_{22} = \frac{2 \mu \nu n \omega}{1 - 2 \nu} \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} i \left[\{(-(1 - 2 \nu)A - B(1 - 2 \nu)(2 + n \omega x_2 - 2 \nu)) e^{-n \omega x_2} + (- (1 - 2 \nu)C - D(1 - 2 \nu)(-2 + n \omega x_2 + 2 \nu)) e^{n \omega x_2}\} e^{i n \omega x_1} \right] \right]$$

$$\sigma_{22} = -2 \mu \nu n \omega \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} i \{ (A + B(2 + n \omega x_2 - 2 \nu)) e^{-n \omega x_2} + (C + D(n \omega x_2 - 2 + 2 \nu)) e^{n \omega x_2} \} e^{in \omega x_1} \right]$$

3- Contrainte σ_{21}

$$\sigma_{21} = \mu \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} n \omega \{ (-A - B(n \omega x_2 - 1)) e^{-n \omega x_2} + (C + D(n \omega x_2 + 1)) e^{n \omega x_2} \} e^{in \omega x_1} - \sum_{n=-\infty}^{\infty} n \omega \{ (A + (3 - 4 \nu)B + B n \omega x_2) e^{-n \omega x_2} - (C - (3 - 4 \nu)D + D n \omega x_2) e^{n \omega x_2} \} e^{in \omega x_1} \right]$$

$$\sigma_{21} = \mu n \omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} [(-A - B(n \omega x_2 - 1) - A - (3 - 4 \nu)B - B n \omega x_2) e^{-n \omega x_2} + (C + D(n \omega x_2 + 1) + C - (3 - 4 \nu)D + D n \omega x_2) e^{n \omega x_2}] e^{in \omega x_1}$$

$$\sigma_{21} = 2 \mu n \omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} [(-A - B(n \omega x_2 + 1 - 2 \nu)) e^{-n \omega x_2} + (C + D(n \omega x_2 - 1 + 2 \nu)) e^{n \omega x_2}] e^{in \omega x_1}$$

4- Contrainte σ_{23}

$$\sigma_{23} = \mu \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} n \omega (F e^{n \omega x_2} - E e^{-n \omega x_2}) e^{in \omega x_1} \right]$$

$$\sigma_{23} = \mu n \omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} (F e^{n \omega x_2} - E e^{-n \omega x_2}) e^{in \omega x_1}$$

Les contraintes σ_{2k} ($k=1, 2$ et 3) et σ_{11} (réelles) ont donc les expressions (en termes réels) suivantes :

1- Contrainte σ_{11}

$$\sigma_{11} = 2 n \omega \mu \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[b_1 \{ (a_{im} - b_{im}(n \omega x_2 - 2 \nu)) e^{-n \omega x_2} + (c_{im} + d_{im}(n \omega x_2 + 2 \nu)) e^{n \omega x_2} \} \frac{\cos(n \omega x_1)}{2 n \pi \Delta} - b_2 \{ (a_{re} - b_{re}(n \omega x_2 - 2 \nu)) e^{-n \omega x_2} + (c_{re} + d_{re}(n \omega x_2 + 2 \nu)) e^{n \omega x_2} \} \frac{\sin(n \omega x_1)}{2 n \pi \Delta} \right]$$

- $$\sigma_{11} = \omega \mu 2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_1 \{(a_{im} - b_{im}(n \omega x_2 - 2 \nu))e^{-n\omega x_2} + (c_{im} + d_{im}(n \omega x_2 + 2 \nu))e^{n \omega x_2}\} \frac{\cos(n \omega x_1)}{\pi \Delta} - b_2 \{(a_{re} - b_{re}(n \omega x_2 - 2 \nu))e^{-n\omega x_2} + (c_{re} + d_{re}(n \omega x_2 + 2 \nu))e^{n \omega x_2}\} \frac{\sin(n \omega x_1)}{\pi \Delta}]$$

2- Contrainte σ_{22}

$$\sigma_{22} = 2 n \omega \mu 2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_1 \{(a_{im} + b_{im}(n \omega x_2 + 2 - 2 \nu))e^{-n\omega x_2} + (c_{im} + d_{im}(n \omega x_2 - 2 + 2 \nu))e^{n \omega x_2}\} \frac{\cos(n \omega x_1)}{2 n \pi \Delta} - b_2 \{(a_{re} + b_{re}(n \omega x_2 + 2 - 2 \nu))e^{-n\omega x_2} + (c_{re} + d_{re}(n \omega x_2 - 2 + 2 \nu))e^{n \omega x_2}\} \frac{\sin(n \omega x_1)}{\pi \Delta}]$$

- $$\sigma_{22} = 2 \omega \mu \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_1 \{(a_{im} + b_{im}(n \omega x_2 + 2 - 2 \nu))e^{-n\omega x_2} + (c_{im} + d_{im}(n \omega x_2 - 2 + 2 \nu))e^{n \omega x_2}\} \frac{\cos(n \omega x_1)}{\pi \Delta} - b_2 \{(a_{re} + b_{re}(n \omega x_2 + 2 - 2 \nu))e^{-n\omega x_2} + (c_{re} + d_{re}(n \omega x_2 - 2 + 2 \nu))e^{n \omega x_2}\} \frac{\sin(n \omega x_1)}{\pi \Delta}]$$

3- Contrainte σ_{21}

$$\sigma_{21} = 2 n \omega \mu 2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_2 \{(-a_{re} - b_{re}(n \omega x_2 + 1 - 2 \nu))e^{-n\omega x_2} + (c_{re} + d_{re}(n \omega x_2 - 1 + 2 \nu))e^{n \omega x_2}\} \frac{\cos(n \omega x_1)}{2 n \pi \Delta} - b_1 \{(-a_{im} - b_{im}(n \omega x_2 + 2 - 2 \nu))e^{-n\omega x_2} + (c_{im} + d_{im}(n \omega x_2 - 1 + 2 \nu))e^{n \omega x_2}\} \frac{\sin(n \omega x_1)}{2 n \pi \Delta}]$$

- $$\sigma_{21} = 2 \omega \mu \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_2 \{(-a_{re} - b_{re}(n \omega x_2 + 1 - 2 \nu))e^{-n\omega x_2} + (c_{re} + d_{re}(n \omega x_2 - 1 + 2 \nu))e^{n \omega x_2}\} \frac{\cos(n \omega x_1)}{\pi \Delta} - b_1 \{(-a_{im} - b_{im}(n \omega x_2 + 2 - 2 \nu))e^{-n\omega x_2} + (c_{im} + d_{im}(n \omega x_2 - 1 + 2 \nu))e^{n \omega x_2}\} \frac{\sin(n \omega x_1)}{\pi \Delta}]$$

4- Contrainte σ_{23}

$$\sigma_{23} = 2 \mu n \omega 2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_2 (f_{re} e^{-n \omega x_2} - e_{re} e^{n \omega x_2}) \frac{\cos(n \omega x_1)}{2 n \pi \Delta} - b_1 (f_{im} e^{-n \omega x_2} - e_{im} e^{n \omega x_2}) \frac{\sin(n \omega x_1)}{2 n \pi \Delta}]$$

$$\bullet \sigma_{23} = 2 \mu \omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_2 (f_{re} e^{-n \omega x_2} - e_{re} e^{n \omega x_2}) \frac{\cos (n \omega x_1)}{\pi \Delta} - b_1 (f_{im} e^{-n \omega x_2} - e_{im} e^{n \omega x_2}) \frac{\sin (n \omega x_1)}{\pi \Delta}]$$

Le développement des expressions des contraintes conduit finalement aux expressions suivantes :

■ Pour le cristal (+)

$$\bullet \sigma_{11}^+ = 2 \omega \mu^+ \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_1 \{(a_{im}^+ - b_{im}^+ (n \omega x_2 - 2 v^+)) e^{-n \omega x_2} + (c_{im}^+ + d_{im}^+ (n \omega x_2 + 2 v^+)) e^{n \omega x_2}\} \frac{\cos (n \omega x_1)}{\pi \Delta} - b_2 \{(a_{re}^+ - b_{re}^+ (n \omega x_2 - 2 v^+)) e^{-n \omega x_2} + (c_{re}^+ + d_{re}^+ (n \omega x_2 + 2 v^+)) e^{n \omega x_2}\} \frac{\sin (n \omega x_1)}{\pi \Delta}]$$

$$\bullet \sigma_{22}^+ = 2 \omega \mu^+ \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_1 \{(a_{im}^+ + b_{im}^+ (n \omega x_2 + 2 - 2 v^+)) e^{-n \omega x_2} + (c_{im}^+ + d_{im}^+ (n \omega x_2 + 2 + 2 v^+)) e^{n \omega x_2}\} \frac{\cos (n \omega x_1)}{\pi \Delta} - b_2 \{(a_{re}^+ - b_{re}^+ (n \omega x_2 - 2 v^+)) e^{-n \omega x_2} + (c_{re}^+ + d_{re}^+ (n \omega x_2 - 2 + 2 v^+)) e^{n \omega x_2}\} \frac{\sin (n \omega x_1)}{\pi \Delta}]$$

$$\bullet \sigma_{21}^+ = 2 \omega \mu^+ \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_2 \{(-a_{re}^+ - b_{re}^+ (n \omega x_2 + 1 - 2 v^+)) e^{-n \omega x_2} + (c_{re}^+ + d_{re}^+ (n \omega x_2 - 1 + 2 v^+)) e^{n \omega x_2}\} \frac{\cos (n \omega x_1)}{\pi \Delta} - b_1 \{(a_{im}^+ + b_{im}^+ (n \omega x_2 + 1 - 2 v^+)) e^{-n \omega x_2} + (c_{im}^+ + d_{im}^+ (n \omega x_2 - 1 + 2 v^+)) e^{n \omega x_2}\} \frac{\sin (n \omega x_1)}{\pi \Delta}]$$

$$\bullet \sigma_{23}^+ = 2 \mu^+ \omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} [b_2 (f_{re}^+ e^{-n \omega x_2} - e_{re}^+ e^{n \omega x_2}) \frac{\cos (n \omega x_1)}{\pi \Delta} - b_1 (f_{im}^+ e^{-n \omega x_2} - e_{im}^+ e^{n \omega x_2}) \frac{\sin (n \omega x_1)}{\pi \Delta}]$$

■ Pour le cristal (-)

$$\bullet \quad \sigma_{11}^- = 2 \omega \mu^- \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[b_1 \{ (a_{im}^- - b_{im}^- (n \omega x_2 - 2 v^-)) e^{-n \omega x_2} + (c_{im}^- + d_{im}^- (n \omega x_2 + 2 v^-)) e^{n \omega x_2} \} \frac{\cos (n \omega x_1)}{\pi \Delta} - b_2 \{ (a_{re}^- - b_{re}^- (n \omega x_2 - 2 v^-)) e^{-n \omega x_2} + (c_{re}^- + d_{re}^- (n \omega x_2 + 2 v^-)) e^{n \omega x_2} \} \frac{\sin (n \omega x_1)}{\pi \Delta} \right]$$

$$\bullet \quad \sigma_{22}^- = 2 \omega \mu^- \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[b_1 \{ (a_{im}^- + b_{im}^- (n \omega x_2 + 2 - 2 v^-)) e^{-n \omega x_2} + (c_{im}^- + d_{im}^- (n \omega x_2 + 2 + 2 v^-)) e^{n \omega x_2} \} \frac{\cos (n \omega x_1)}{\pi \Delta} - b_2 \{ (a_{re}^- - b_{re}^- (n \omega x_2 - 2 v^-)) e^{-n \omega x_2} + (c_{re}^- + d_{re}^- (n \omega x_2 - 2 + 2 v^-)) e^{n \omega x_2} \} \frac{\sin (n \omega x_1)}{\pi \Delta} \right]$$

$$\bullet \quad \sigma_{21}^- = 2 \omega \mu^- \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[b_2 \{ (-a_{re}^- - b_{re}^- (n \omega x_2 + 1 - 2 v^-)) e^{-n \omega x_2} + (c_{re}^- + d_{re}^- (n \omega x_2 - 1 + 2 v^-)) e^{n \omega x_2} \} \frac{\cos (n \omega x_1)}{\pi \Delta} - b_1 \{ (a_{im}^- + b_{im}^- (n \omega x_2 + 1 - 2 v^-)) e^{-n \omega x_2} + (c_{im}^- + d_{im}^- (n \omega x_2 - 1 + 2 v^-)) e^{n \omega x_2} \} \frac{\sin (n \omega x_1)}{\pi \Delta} \right]$$

$$\bullet \quad \sigma_{23}^- = 2 \mu^- \omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[b_2 (f_{re}^- e^{-n \omega x_2} - e_{re}^- e^{n \omega x_2}) \frac{\cos (n \omega x_1)}{\pi \Delta} - b_1 (f_{im}^- e^{-n \omega x_2} - e_{im}^- e^{n \omega x_2}) \frac{\sin (n \omega x_1)}{\pi \Delta} \right]$$

Chapitre IV

Applications numériques

Chapitre IV

Applications numériques

IV. 1. Introduction

Les développements analytiques obtenus dans le chapitre précédent ont été traduits en un programme MATHEMATICA, qui permet de calculer, dans le cas du réseau parallèle de dislocations de misfit de type coin :

1/- Les coefficients de Fourier avec une exactitude très satisfaisante.

2/- Les champs de déplacements et de contraintes en introduisant les coefficients de Fourier calculées en première étape.

Après validation du programme, plusieurs applications numériques peuvent être envisagées. Dans ce travail, nous nous sommes limités à l'examen des propriétés élastiques du bilame mince Cu/(001) Fe.

IV. 2. Données expérimentales

Les constantes élastiques isotropes des deux monocristaux utilisés sont résumés dans le tableau suivant:

Cristal	C_{11}	C_{12}	C_{44}	ν	μ
Fe (GPa)	232	136	117	0.2546	117.0
Cu (GPa)	168.4	121.4	75.4	0.3217	75.4

Tableau 4. 1: Constantes d'élasticité pour Fe et Cu [24]

Sachant que : $C_{11}=\lambda+2\mu$; $C_{12}=\lambda$; $C_{44}=\mu$ et $\lambda=2\nu\mu/(1-2\nu) \rightarrow \nu=\lambda/2(\lambda+\mu)$ [25]

La période du réseau indispensable à l'application est calculée par la formule :

$$\Omega = P = \frac{a_{Cu} \cdot a_{Fe}}{(a_{Cu} - a_{Fe})\sqrt{2}} \quad [26]$$

Pour le système épitaxial Cu/(001) Fe, la période calculée : $P=15.1032$ nm

Les paramètres de maille sont, pour le cuivre $a_{Cu}=0.361$ nm

et pour le fer $a_{Fe}=0.355$ nm

La valeur absolue du vecteur de Burgers est :

$$|b|=0.25344 \text{ nm} \quad \text{tel que : } b=(a_{Cu}+a_{Fe})/2.2^{1/2} [001] \quad [26]$$

IV. 3. Résultats et interprétation

IV. 3. 1. Calcul de l'erreur relative au niveau de l'interface

La convergence des séries de Fourier est vérifiée numériquement pour le système épitaxial Cu/(001) Fe. Dans ce sens, nous avons calculé l'erreur relative sur le déplacement relatif interfacial après avoir enregistré la linéarité de celui-ci.

Notant que l'expression de calcul d'erreur ΔR est donnée par:

$$\Delta R = \left| (\Delta u_{\text{programme}} - \Delta u_{\text{exp. analytique}}) / \Delta u_{\text{exp. analytique}} \right|$$

Le calcul a été réalisé près du cœur de la dislocation ($b/10$) et loin du cœur de la dislocation (b) en faisant varier le nombre d'harmoniques N , les résultats sont représentés sur le tableau suivant :

	N=10	N=100	N=500	N=1000
X1=b=0.253 nm	35.42 %	3.0 %	0.92 %	0.32 %
X1=b/2=0.1265 nm	66.52 %	4.6 %	0.96 %	0.88 %
X1=b/4=0.06325 nm	83.18 %	15.28 %	4.17 %	0.98 %
X1=b/10=0.0253 nm	93.3 %	36.8 %	4.37 %	3.16 %

Tableau 4. 2: calcul d'erreur ΔR en fonction de N et de x_1 pour l'hétérostructure Cu/ Fe

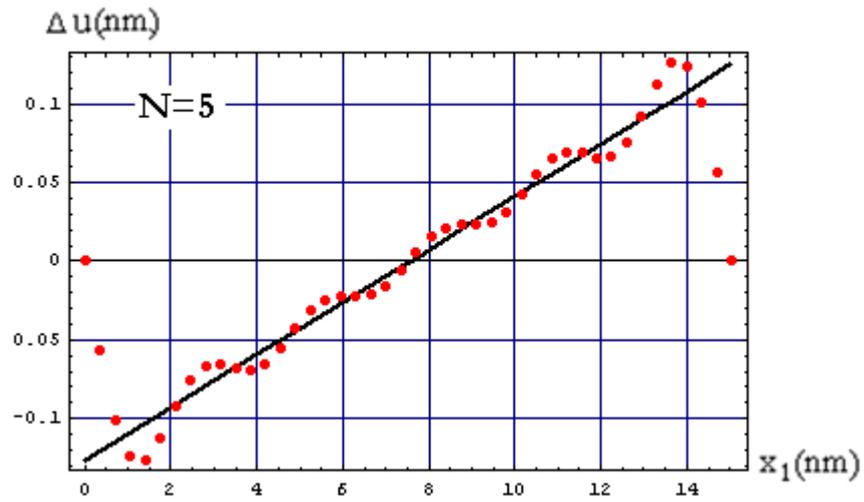
Ce calcul donne pour des dislocations coins dans le cas isotrope des erreurs qui n'excèdent pas 3.16% près du cœur pour un nombre d'harmonique égal à $N=1000$. Loin de cœur, cette erreur n'excède pas 3 % pour un nombre d'harmoniques $N=100$ et elle ne dépasse pas 0.32% pour $N=1000$.

IV. 2. 2. Déplacement relatif interfacial

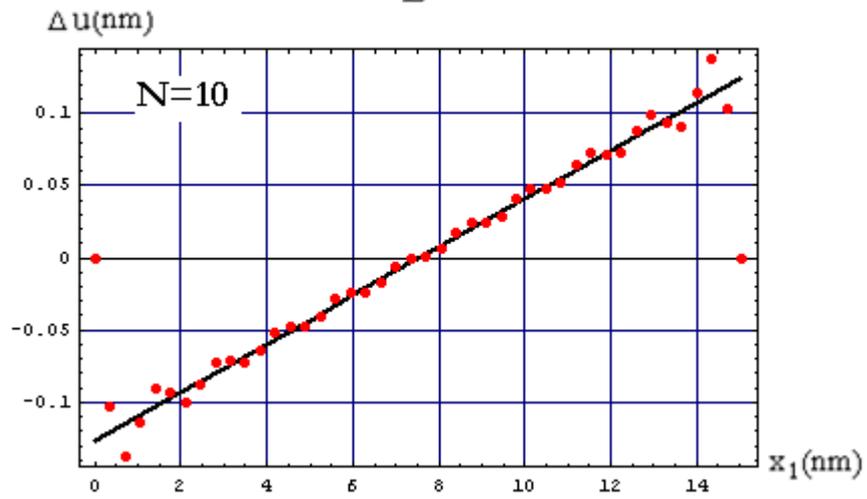
Dans le but de valider le programme de calcul, nous avons comparé l'allure du déplacement relatif obtenue numériquement à partir du programme mettant en jeu un nombre d'harmoniques variable et celle donnée par l'expression analytique simple (1) et exprimée dans le repère cartésien $Ox_1x_2x_3$ comme suit.

$$U_k^+ - U_k^- = \left(\frac{b_k}{\Omega} \right) x_1 - \frac{b_k}{2} \quad (1)$$

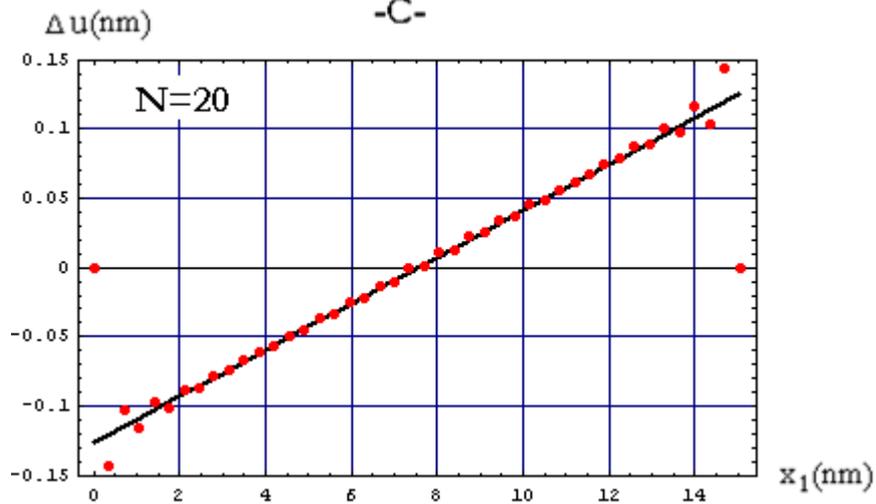
-A-

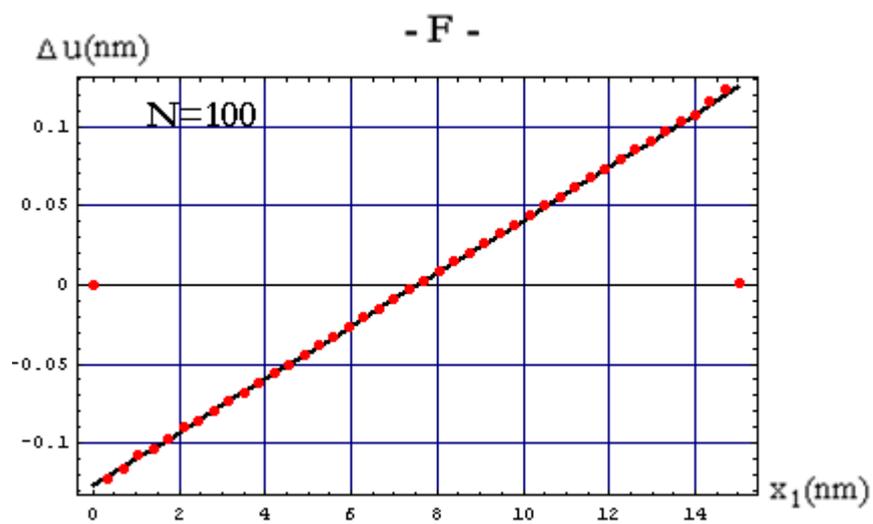
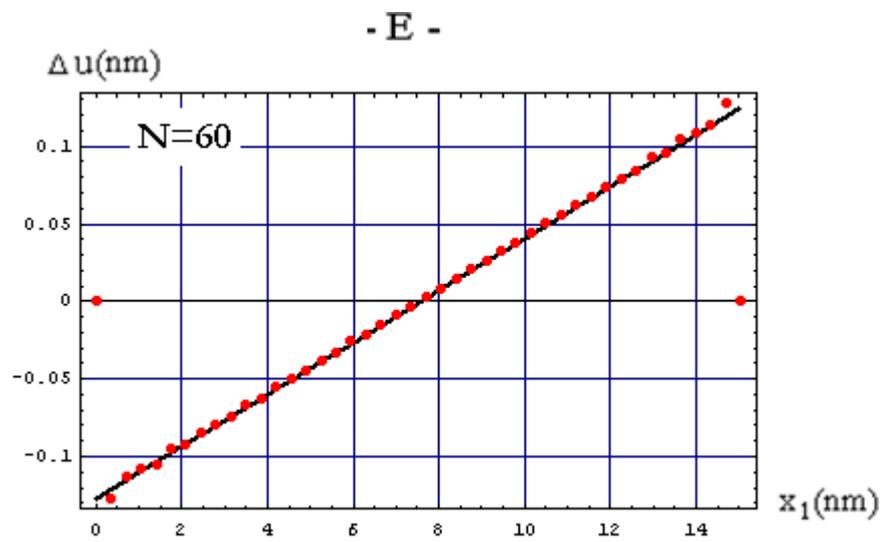
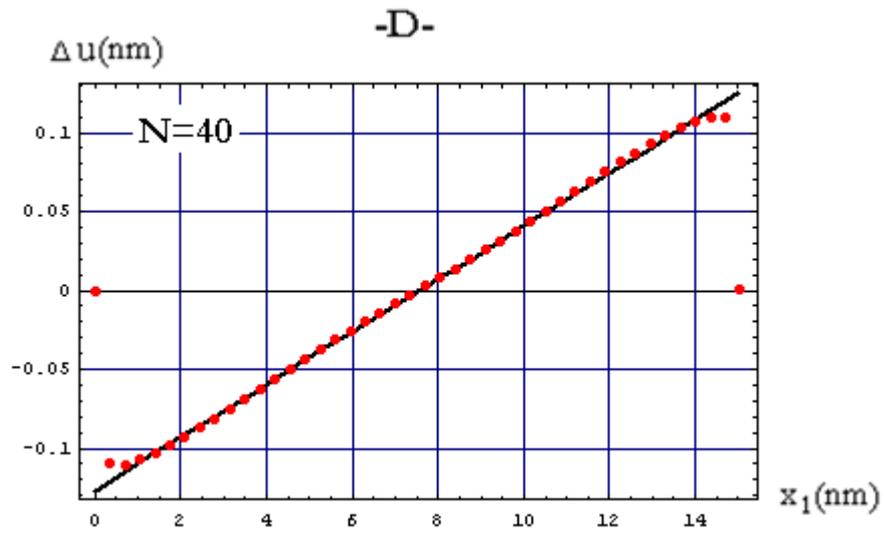


-B-



-C-





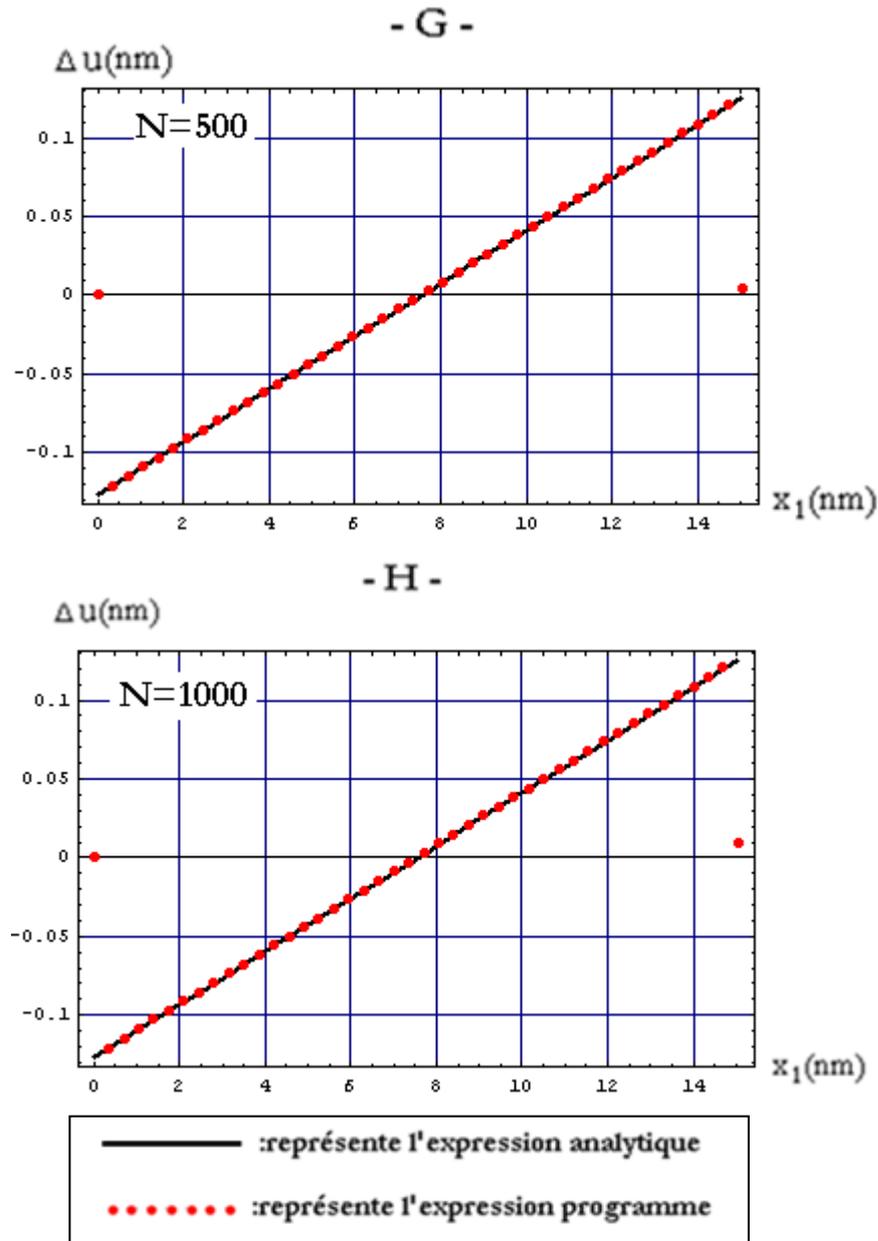


FIG. 4. 3: Représentation du déplacement relatif interfacial

La comparaison entre les deux courbes est faite loin des cœurs des dislocations car au niveau des cœurs, la théorie de l'élasticité n'est pas valable. On note que la linéarité du déplacement relatif est satisfaisante pour un nombre d'harmoniques $N=100$, les courbes sont confondues (FIG 4. 3. f). La superposition des deux courbes devient parfaite pour $N=500$.

En effet, on constate qu'en augmentant le nombre d'harmoniques N , les courbes obtenues numériquement deviennent plus rectilignes en se superposant de plus en plus à celles obtenues analytiquement et ceci dans le domaine de validité de l'expression analytique qui se situe entre la première dislocation placée à $x_1 = 0$ et la deuxième dislocation placée à $x_1 = 15.12$ nm correspondant à une période.

La précision des calculs pour ce nombre d'harmonique ($N=500$) étant très bonne, celui-ci est considéré pour le reste des investigations numériques.

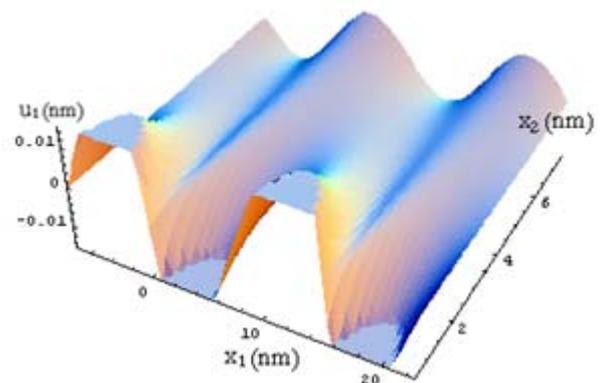
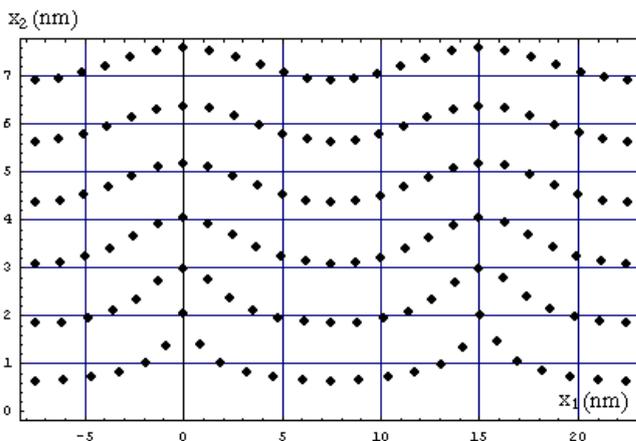
IV. 4. Champs des déplacements

Le réseau parallèle est étudié en considérant que les dislocations sont réparties de part et d'autre de l'origine o du repère cartésien $ox_1x_2x_3$, en sachant qu'une dislocation est située à l'origine des axes. Dans une première étape, le réseau parallèle est unidirectionnel tel que le vecteur de Burgers est orienté parallèlement à l'axe ox_1 ($b//ox_1$). Le monocristal de cuivre est choisi du côté positif, il représente la couche déposée tandis que le fer est choisi du côté négatif et représente donc un substrat. L'épaisseur totale du bilame est prise en fonction des épaisseurs des deux couches (h^+ et h^-).

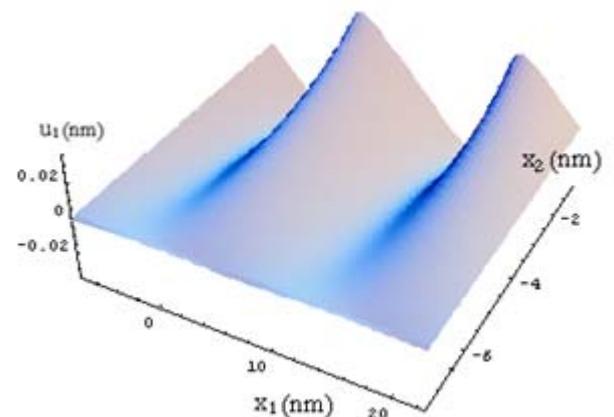
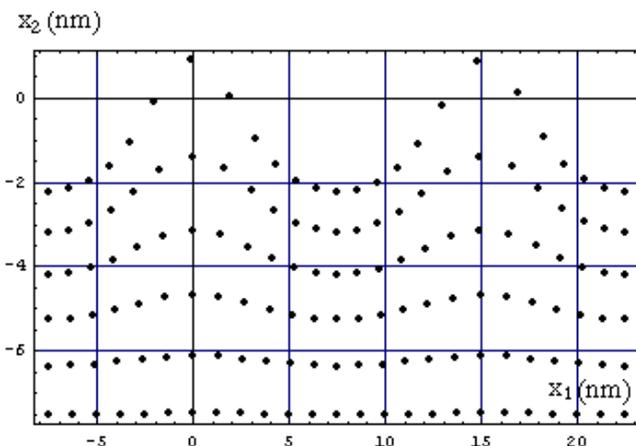
IV. 4. 1. Représentation graphique du bilame Cu/(001) Fe

a) Cas d'un réseau de dislocations

La couche supérieure (Fig. a):



La couche inférieure (Fig. b):



La superposition des deux couches (Fig. c):

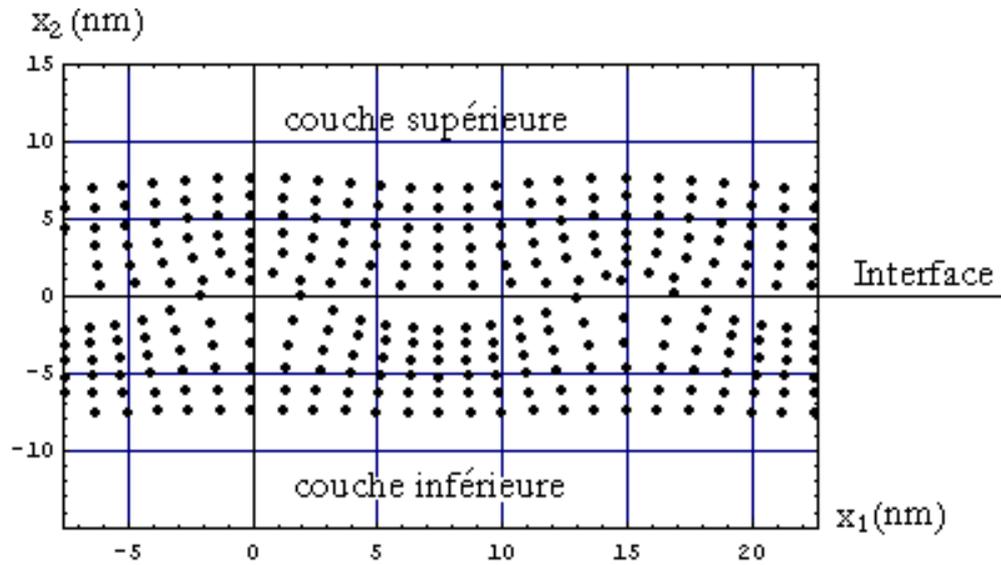
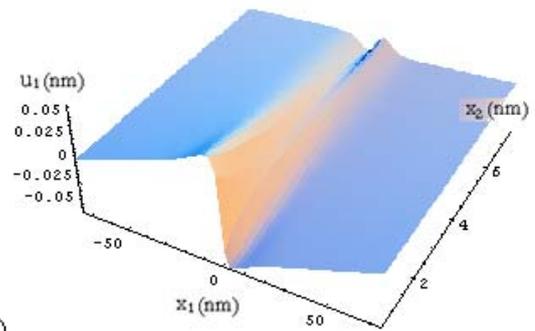
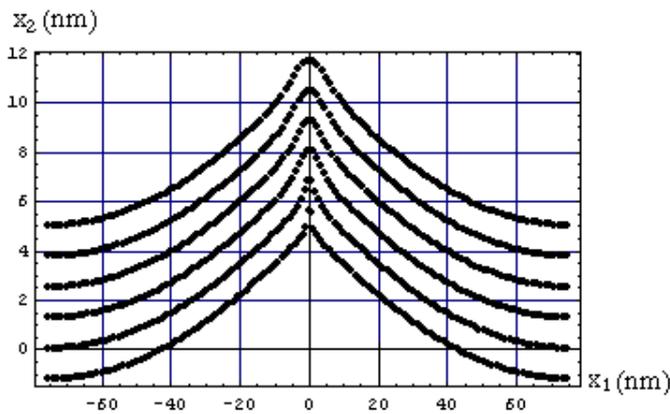


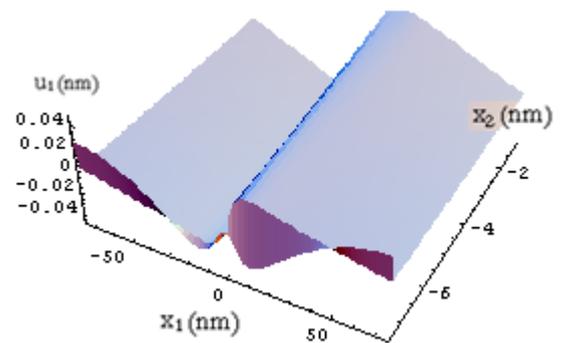
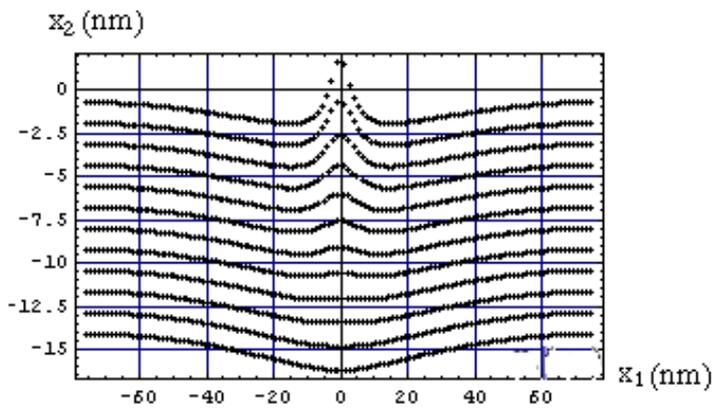
FIG. 4. a. b. c. Représentation graphique du bilame Cu/(001) Fe en 2D et 3D

b) Cas d'une seule dislocation

La couche supérieure (Fig. e)



La couche inférieure (Fig. f)



La superposition des deux couches (Fig. g):

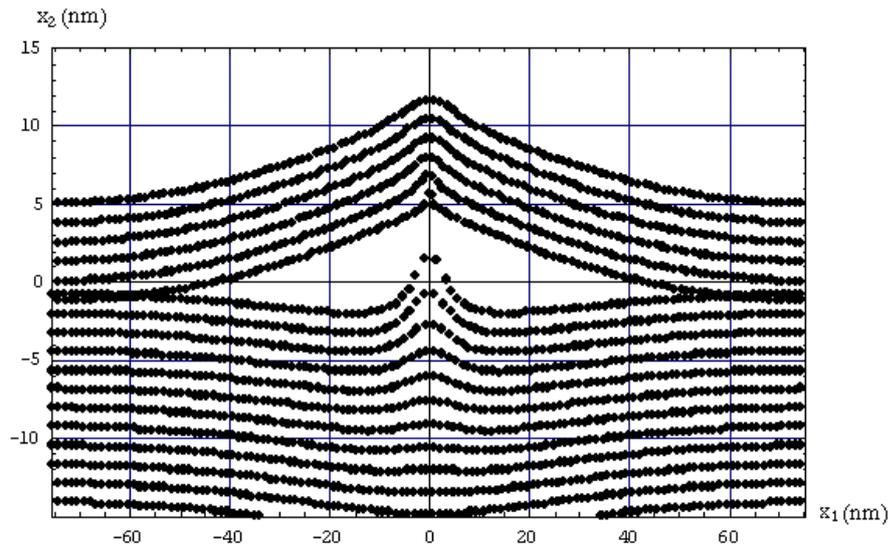
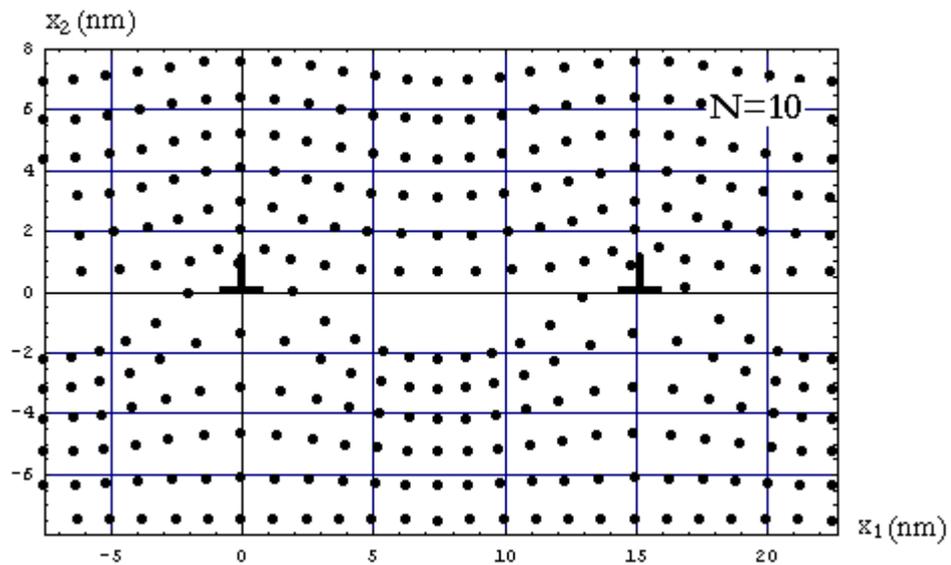


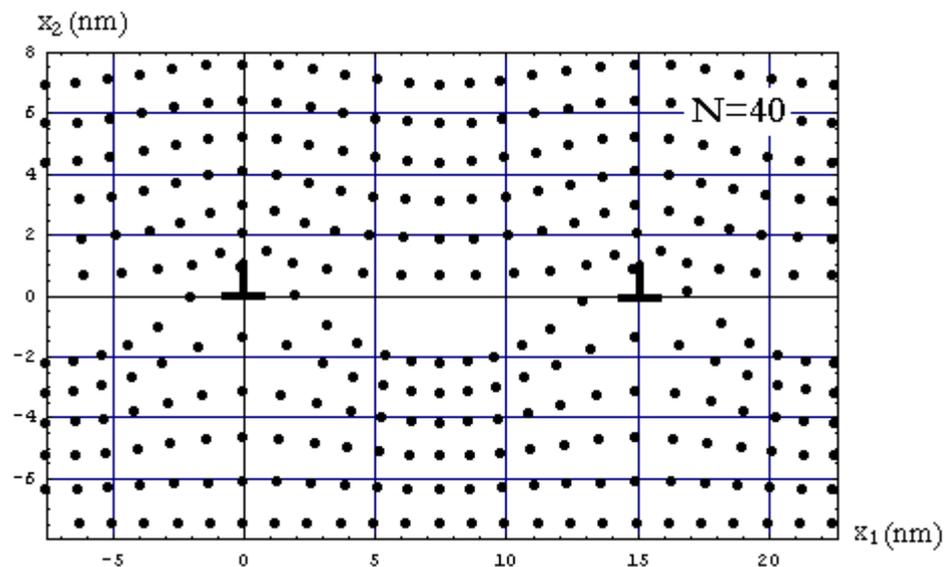
FIG. 4. e. f. g. Représentation graphique du bilame Cu/(001) Fe en 2D et 3D

IV. 4.2 Influence de la variation du nombre d'harmoniques sur le champ des déplacements

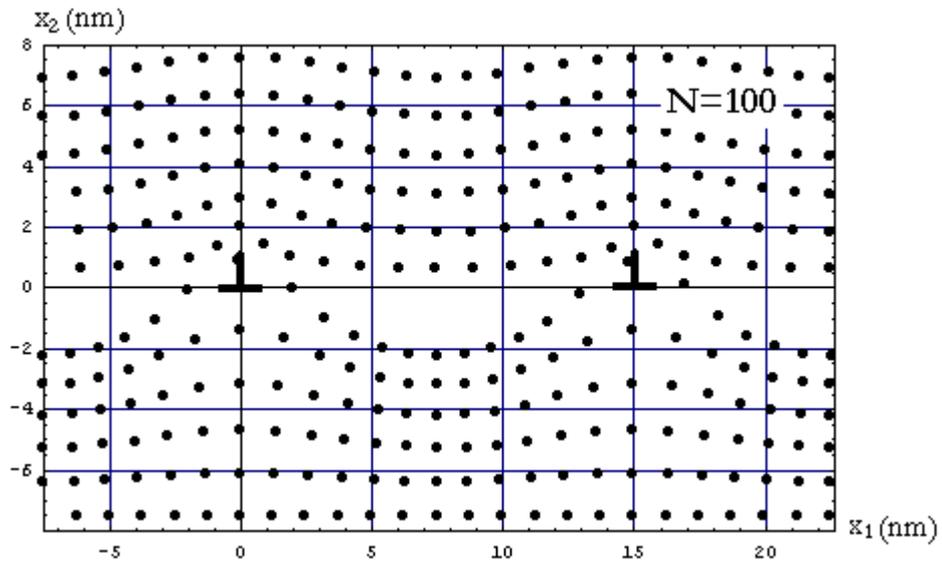
a/



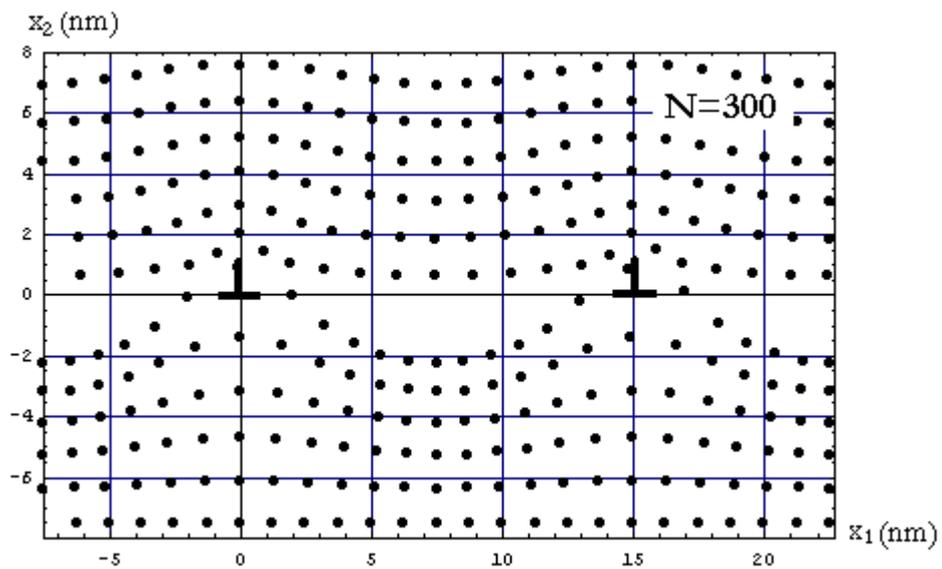
b/



c/



d/



e/

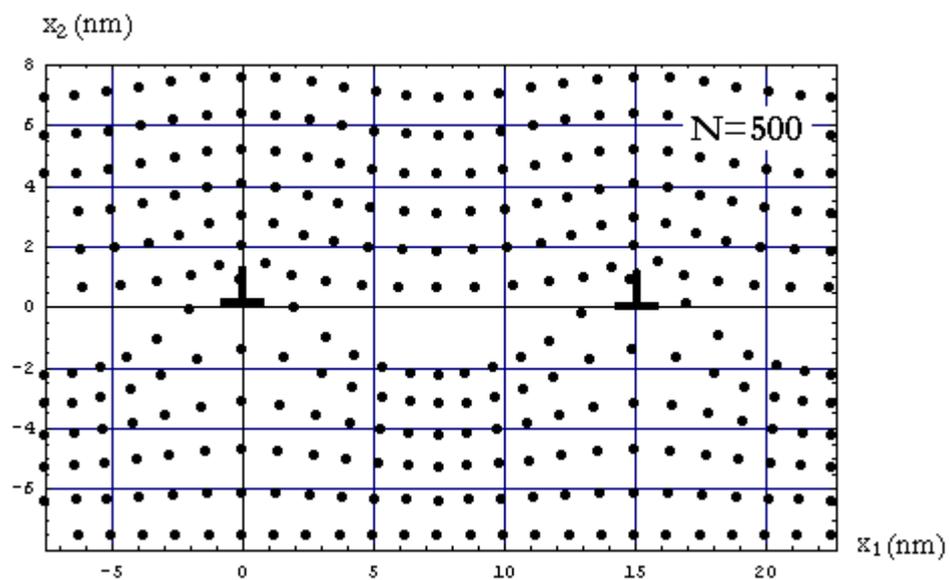


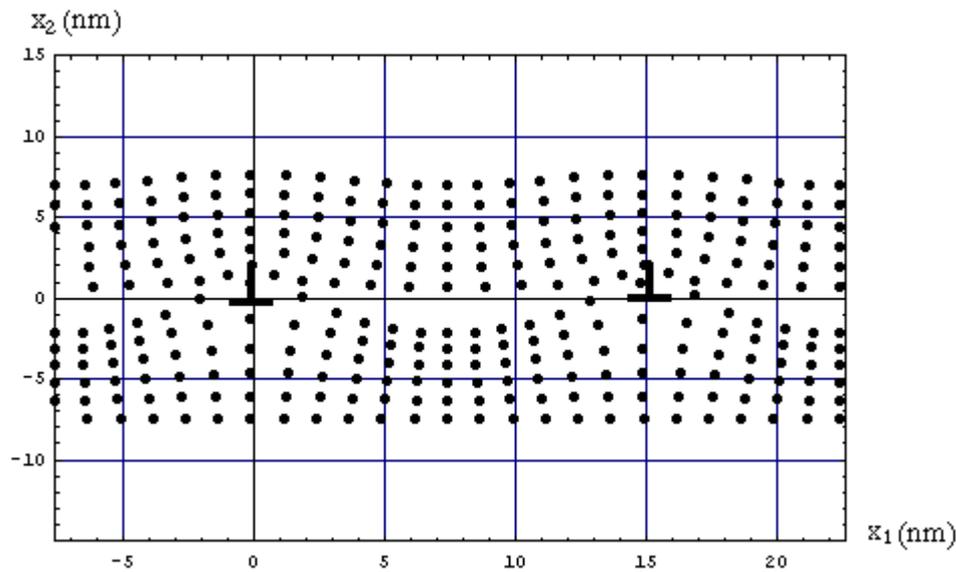
FIG. 4. 4: courbes illustrant les champs des déplacements du bilame Cu/Fe en fonction de nombre harmoniques sous l'effet de dislocation coin interfaciale, $b_1 // O_1x_1$

La figure (4. 4) indique qu'il n'y a pas une grande influence de la variation de N sur les valeurs des déplacements. Cependant, il faut noter que même si cet effet n'est pas visible sur les courbes, les valeurs des déplacements calculées sont différentes. L'examen de ces valeurs nous conduit à confirmer que le nombre d'harmoniques $N=500$ donne la meilleure précision.

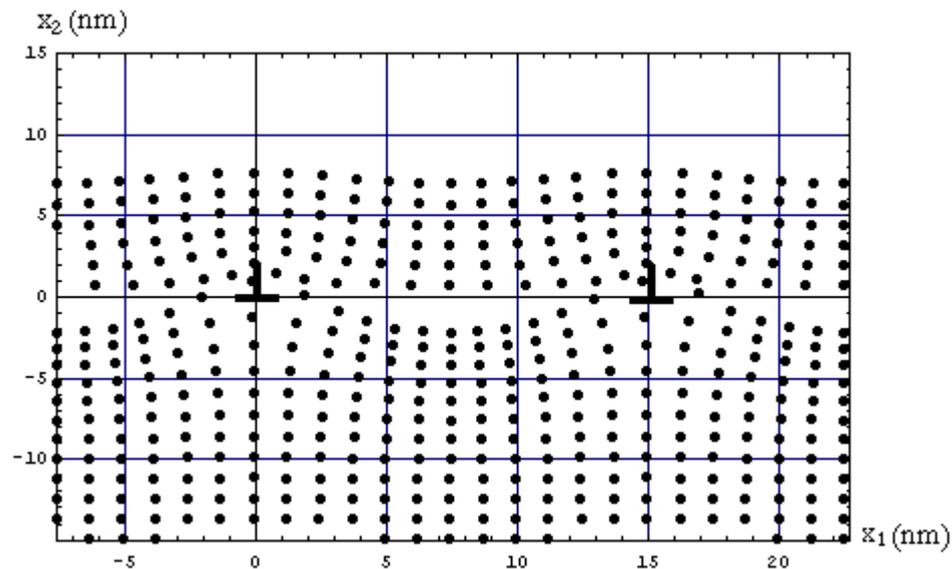
IV. 4 .3 Influence de la variation de l'épaisseur des couches (h^+ et h^-) sur le champ des déplacements

a/ Effet de l'épaisseur pour le système hétérogène

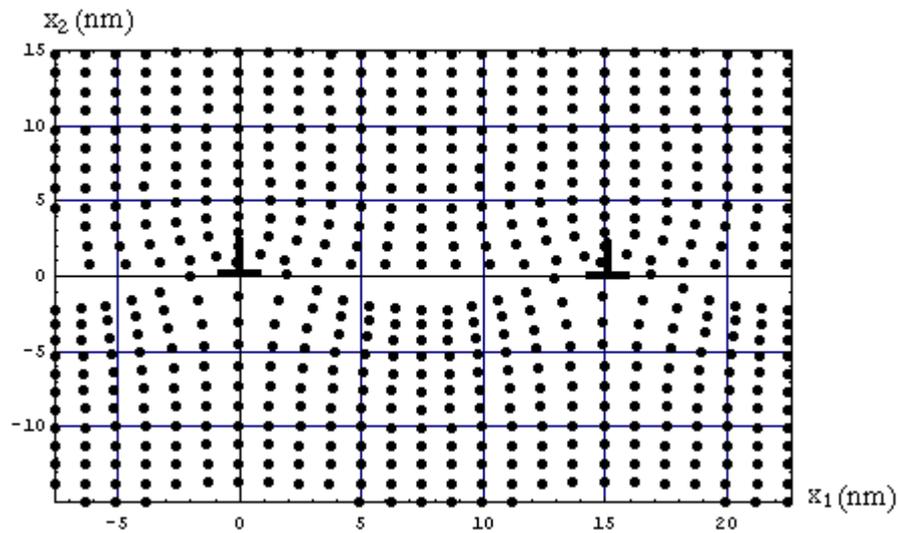
1°/ h^+ (cuivre) = h^- (fer) ($h^+=7,5$ nm et $h^- =7,5$ nm)



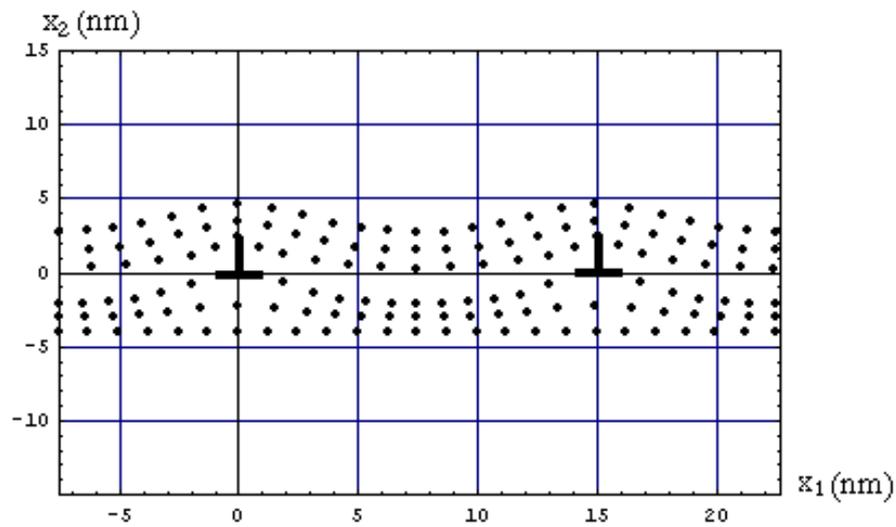
2°/ h^+ (cuivre) = h^- (fer) ($h^+=7.5$ nm et $h^- =15$ nm)



3°/ h^+ (cuivre) = h^- (fer) ($h^+=15$ nm et $h^-=15$ nm)



4°/ h^+ (cuivre) = h^- (fer) ($h^+=4$ nm et $h^-=4$ nm)



5°/ h^+ (cuivre) = h^- (fer) ($h^+=4$ nm et $h^-=8$ nm)

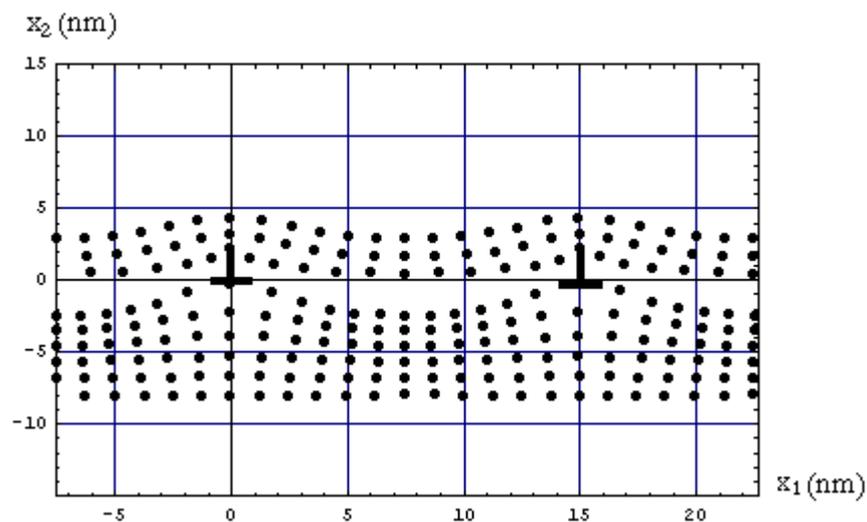
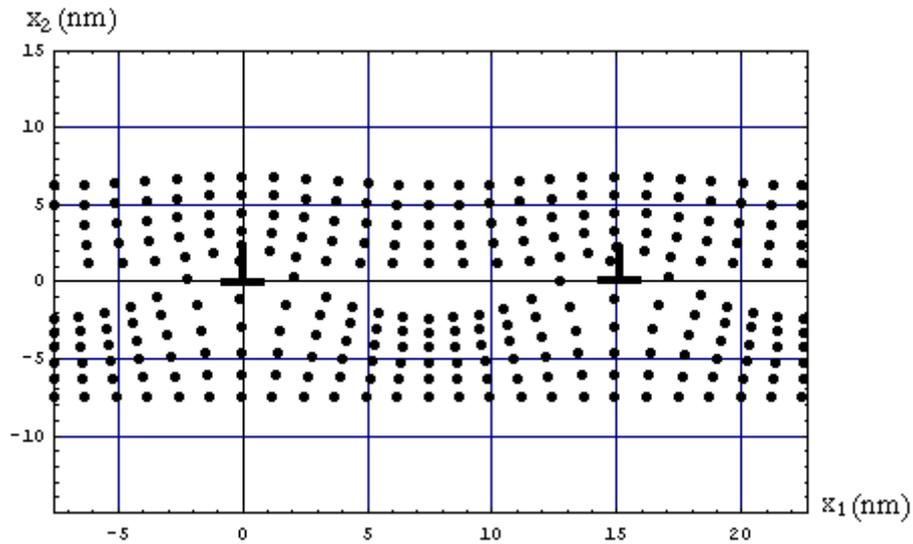


FIG. 4. 5: Topologie des surfaces du bilame Cu/(001) Fe en fonction l'épaisseur des couches sous l'effet de dislocation coin interfaciale, $b_1 // O_x1$

b/ Effet de l'épaisseur pour le système homogène

► Cas du bilame Cu/Cu

1°/ h^+ (cuivre) = h^- (cuivre) ($h^+=7.5$ nm et $h^-=7.5$ nm)



2°/ $2h^+$ (cuivre) = h^- (cuivre) ($h^+=7.5$ nm et $h^-=15$ nm)

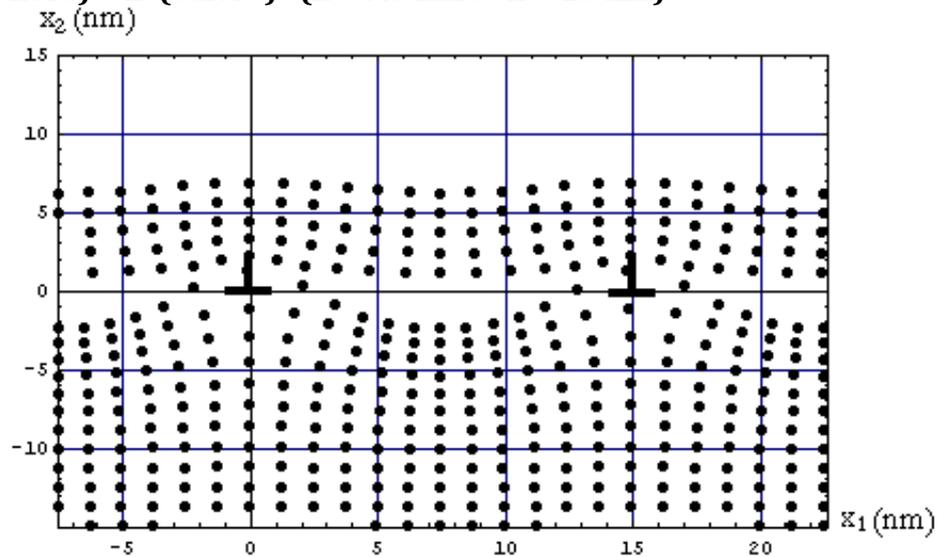
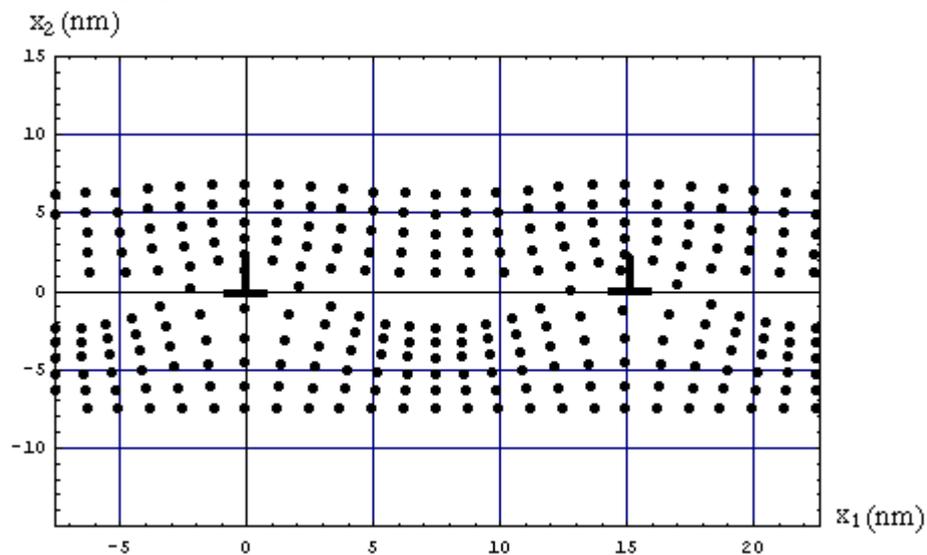


FIG. 4. 6: Topologie des surfaces du bilame Cu/(001)Cu en fonction de l'épaisseur des couches sous l'effet de dislocation coin interfaciale, $b_1 // O_x1$

► Cas du bilame Fe/Fe

1°/ h^+ (fer) = h^- (fer) ($h^+=7.5$ nm et $h^-=7.5$ nm) :



$2^\circ / 2h^+ (\text{fer}) = h^+ (\text{fer})$ ($h^+ = 7.5 \text{ nm}$ et $h^- = 15 \text{ nm}$)

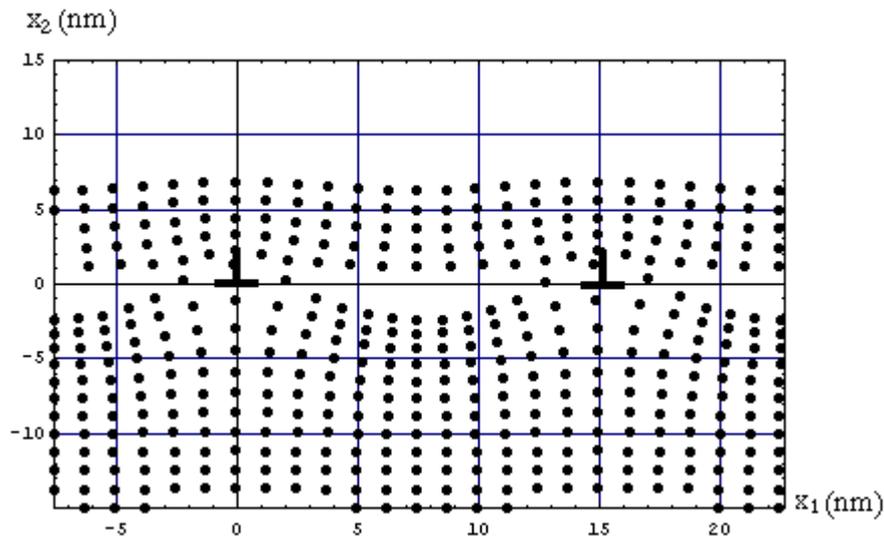


FIG. 4.7: Topologie des surfaces du bilame Fe/(001) Fe en fonction de l'épaisseur des couches sous l'effet de dislocation coin interfaciale, $b_1 // O x_1$

Les figures (4. 5, 4. 6 et 4. 7) décrivent la forme topologique des surfaces libres et leur changement quand l'épaisseur est variable. La couche d'épaisseur h^+ apparaît comme une onde ascendante le long de ox_1 pour les première couches déposées, ce qui reflète le comportement des séries de Fourier. Les épaisseurs ont été choisies telles que le bilame est très fin avec des épaisseurs h^+ et h^- égales, légèrement épais et finalement h^+ est égale à la moitié de h^- . Nous constatons que la couche de cuivre se relaxe de façon meilleure quand son épaisseur vaut la moitié de celle du Fe.

La même conclusion peut être noté si on considère des systèmes épitaxiaux homogènes Cu/(001) Cu ou Fe/(001) Fe, malgré que la déformation dans ce derniers cas n'est pas aussi prononcé que pour le système hétérogène Cu/(001) Fe.

IV. 4. 4. Iso valeurs des champs de déplacements

Nous avons illustré les iso valeurs des champs de déplacement autours de deux dislocations appartenant au réseau parallèle. Les figures (4.8 et 4.9) exhibent un contraste avec des valeurs variant de : -0.039 nm à $+0.039 \text{ nm}$ pour le bilame Fe/(001) Fe et -0.048 nm à 0.047 nm pour le bilame Cu/(001) Cu et pour le système hétérogène le contraste indique que la couche d'épaisseur h^+ est en tension tandis que la couche d'épaisseur h^- est en compression. Aussi, ces couches renseignent sur un effet d'hétérogénéité, qui sera visible sur la représentation de la distribution des contraintes.

Bilame mince hétérogène Cu/(001) Fe

Nous représentons ci- dessous l'évolution des Iso valeurs des champs de déplacements u_1 pour un réseau parallèle de dislocations et pour une seule dislocation

A/ Cas d'un réseau de dislocations ($p=15.1032$)

$$\underline{2h^+=h ; h^+=7.5nm, h^-=15nm}$$

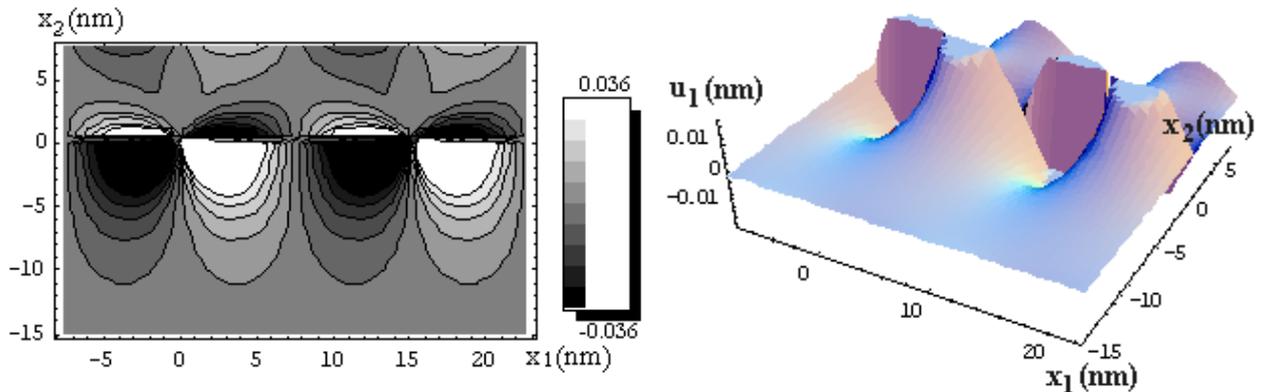


FIG. 4. 10 Iso valeurs des champs de déplacements du bilame Cu/(001) Fe, cas d'un réseau, en fonction de l'épaisseur des couches sous l'effet de dislocation coin interfaciale, $b_1 // Ox_1$

B/ Cas d'une seule dislocation ($p=151.032$)

$$\underline{2h^+=h ; h^+=7.5nm, h^-=15nm}$$

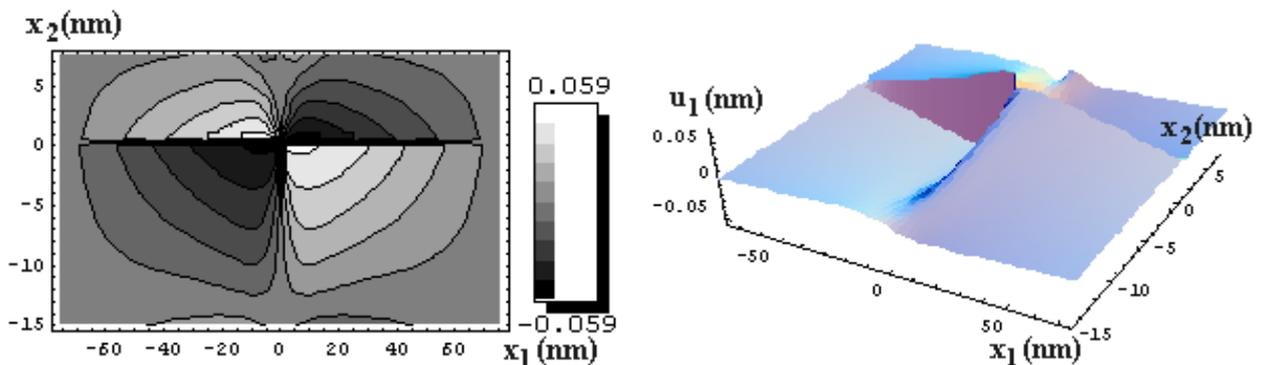


FIG. 4. 11 : Iso valeurs des champs de déplacements du bilame Cu/(001) Fe, cas d'une seule dislocation, en fonction de l'épaisseur des couches sous l'effet de dislocation coin interfaciale, $b_1 // Ox_1$

IV. 5 Evolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} dans le bilame en fonction de x_2

En vue de quantifier la distribution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction des épaisseurs h^+ et h^- , de chaque côté de l'interface, les bicristaux Cu/(001)Cu, Fe/(001)Fe et Cu/(001)Fe sont considérés. Deux cas sont examinés, celui du réseau parallèle de dislocations coins et celui d'une seule dislocation coin. Les calculs sont réalisés pour $x_1=b$ et $x_1=p/2$.

Dans ces conditions remarquons que la contrainte σ_{11} change de signe dans les couches, qu'il y a une nette discontinuité près de l'interface et que celle-ci est importante lorsqu'elle est calculée près du cœur de la dislocation ($x_1=b$).

Cette contrainte devient négligeable lorsqu'elle est calculée à mi-distance entre deux dislocations et le signe de la contrainte s'inverse figures (4.12 et 4.13). L'évolution de σ_{22} est donnée en figures (4.14 et 4.15).

Conformément aux conditions aux limites, la valeur de σ_{22} s'annule au niveau des surfaces libres et elle est continue à travers l'interface. La valeur négative de σ_{22} correspond à une compression de la couche d'épaisseur h^- et la valeur positive de σ_{22} correspond à une tension. Le même phénomène est relevé, le signe de σ_{22} s'inverse à mi-distance entre deux dislocations et sa valeur devient très faible.

Dans le cas d'une seule dislocation, les contraintes σ_{11} et σ_{22} s'annulent à une distance de quelques nanomètres du cœur cédant la place à une parfaite relaxation. Compte tenu des valeurs des constantes élastiques des cristaux, nous observons que les contraintes sont plus élevées dans le cas du système Cu/(001)Fe que dans le cas des systèmes Cu/(001)Cu et Fe/(001)Fe.

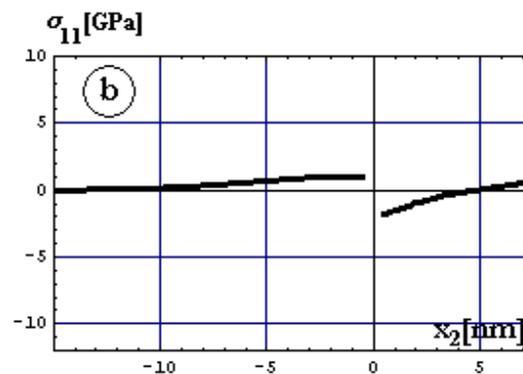
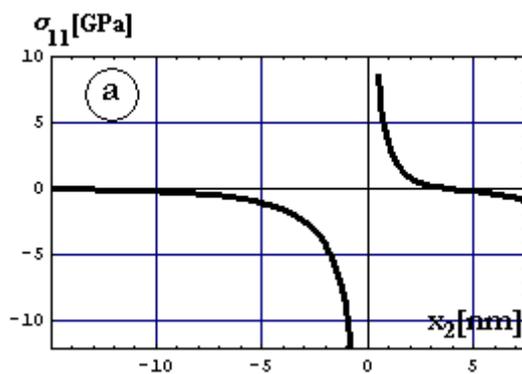
IV. 5. 1 Evolution des contraintes σ_{11} en fonction des épaisseurs h^+ et h^- hétérostructure Cu/(001) Fe

A/ cas du réseau parallèle $p=15.1032$ nm

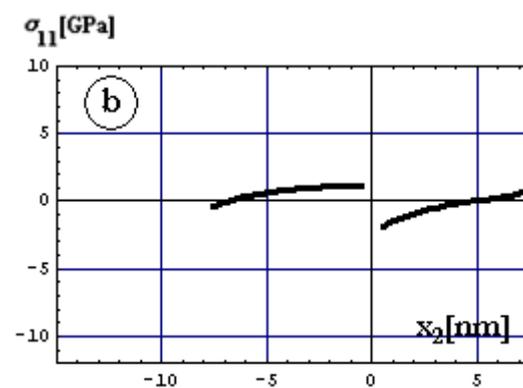
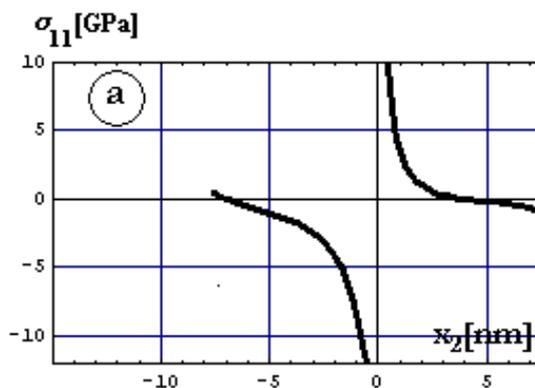
(a) $x_1=b=0.253$ nm

(b) $x_1=7.55$ nm

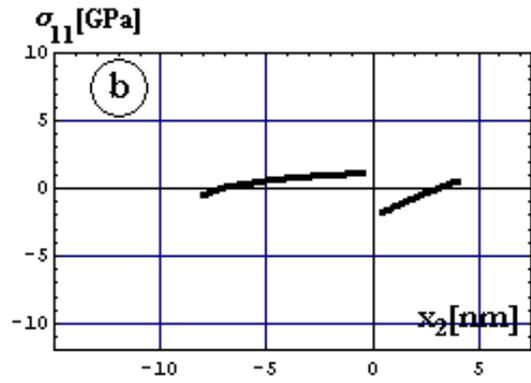
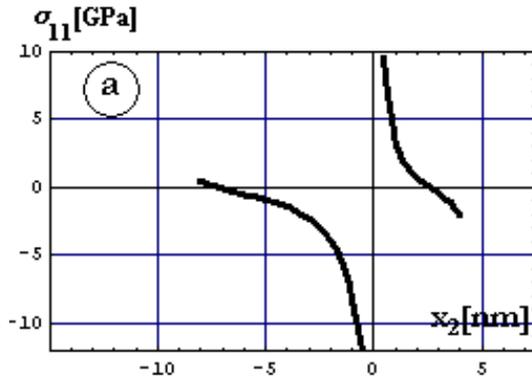
1°/ pour $h^+=7.5$ nm et $h^-=15$ nm



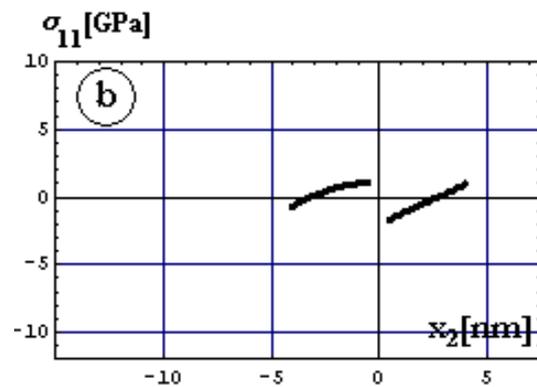
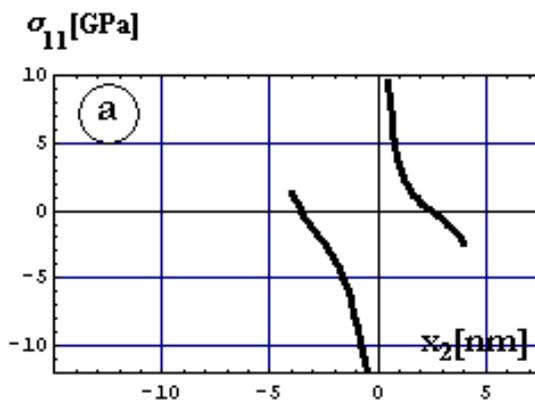
2°/ pour $h^+=7.5$ nm et $h^-=7.5$ nm



3°/ pour $h^+=4nm$ et $h^-=8nm$



4°/ pour $h^+=4nm$ et $h^-=4nm$

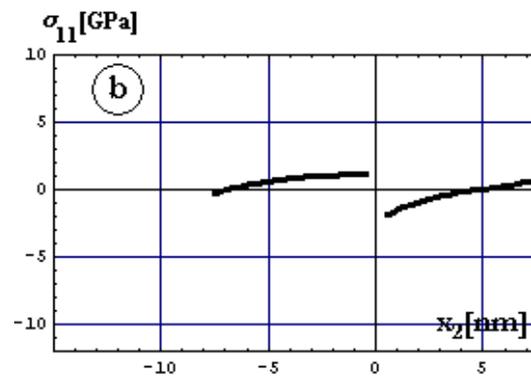
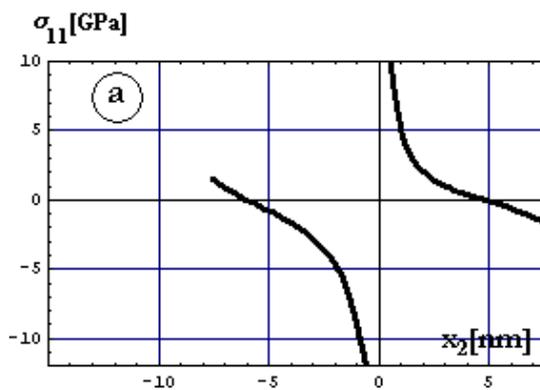


B/ p=151.032 nm

(a) $x_1 = b = 0.253nm$

(b) $x_1 = 75.5nm$

1°/ $h^+=7.5nm$ et $h^-=7.5nm$



2°/ $h^+=7.5\text{nm}$ et $h^-=15\text{nm}$

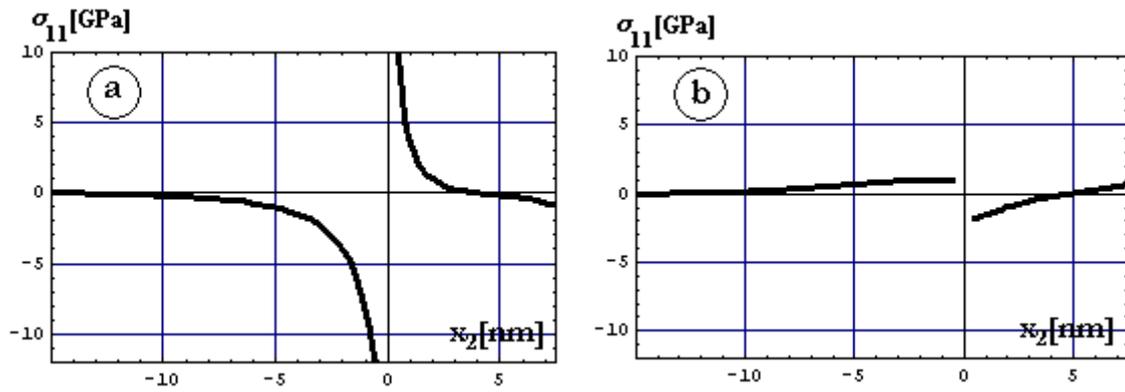


FIG. 4.12 La distribution de contrainte σ_{11} en fonction des épaisseurs h^+ et h^- pour une hétérostructure

$\text{Cu}/(001)\text{Fe}$

-A/ $p=15.1032\text{nm}$

-B/ $p=151.032\text{nm}$

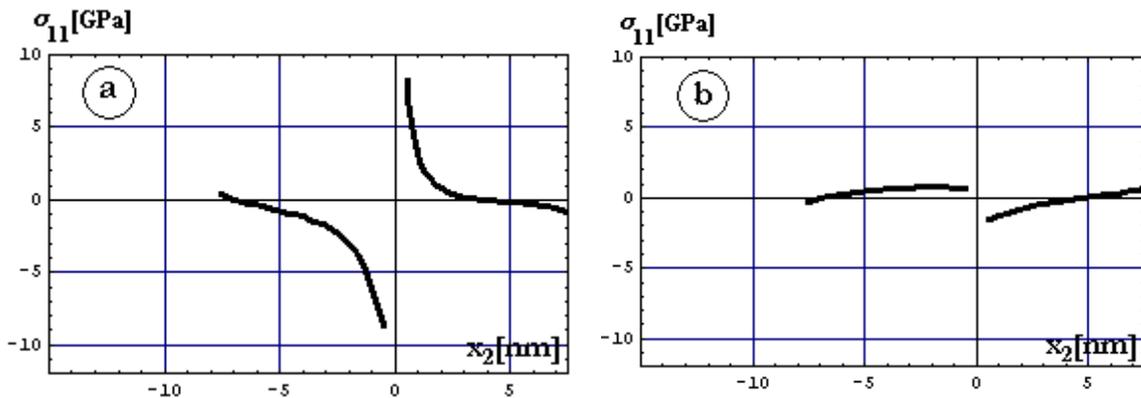
► structure homogène $\text{Cu}/(001)\text{Cu}$ et $\text{Fe}/(001)\text{Fe}$

A/ $\text{Cu}/(001)\text{Cu}$

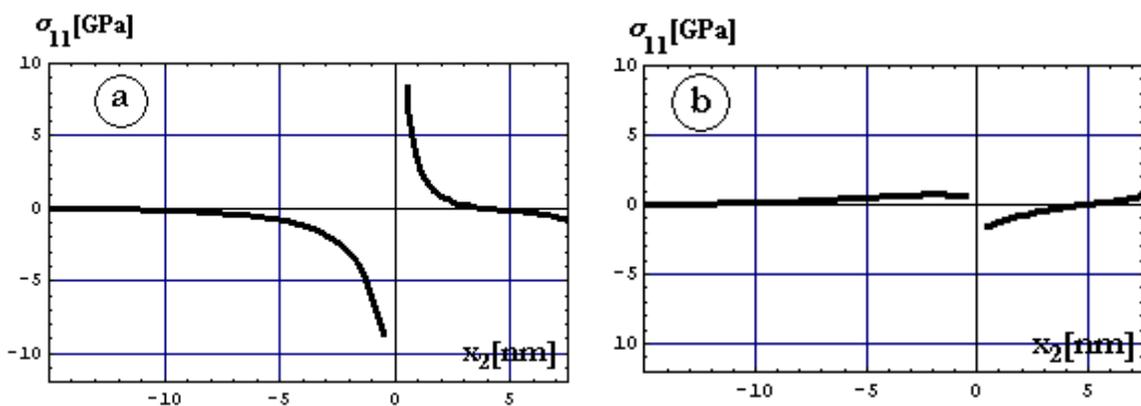
(a) $x_1=b=0.253\text{nm}$

(b) $x_1=75.5\text{nm}$

1°/ pour $h^+=7.5\text{nm}$ et $h^-=7.5\text{nm}$



2°/ $h^+=7.5\text{nm}$ et $h^-=15\text{nm}$

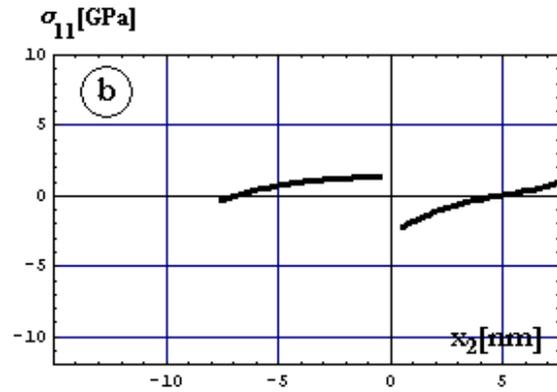
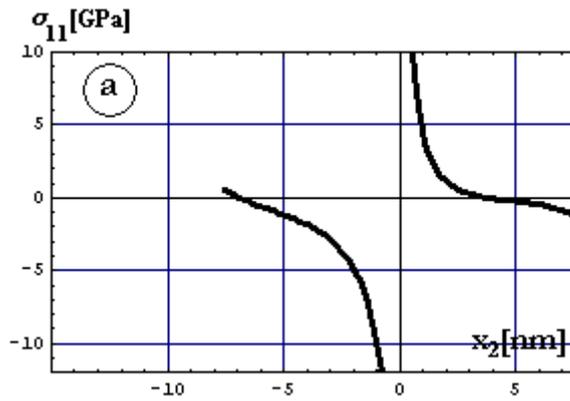


B/ $Fe/(001)Fe$

(a) $x_1=b=0.253nm$

(b) $x_1=75.5nm$

1°/ pour $h^+=7.5nm$ et $h^-=7.5nm$



2°/ $h^+=7.5nm$ et $h^-=15nm$

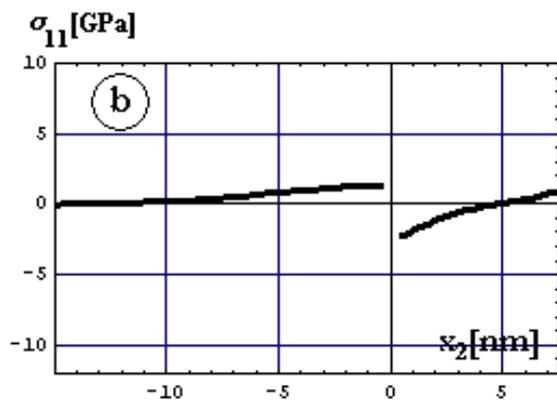
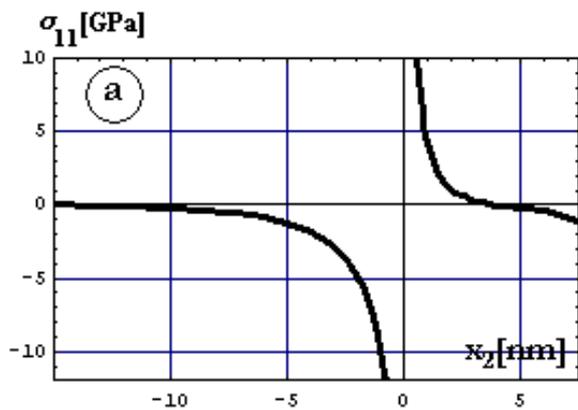


FIG. 4. 13 : La distribution de contrainte σ_{11} en fonction des épaisseurs h^+ et h^- pour une structure homogène et une période $p=15.1032$

-A/ $Cu/(001) Cu$

-B/ $Fe/(001) Fe$

IV. 5. 2 Evolution des contraintes σ_{22} en fonction des épaisseurs h^+ et h^-

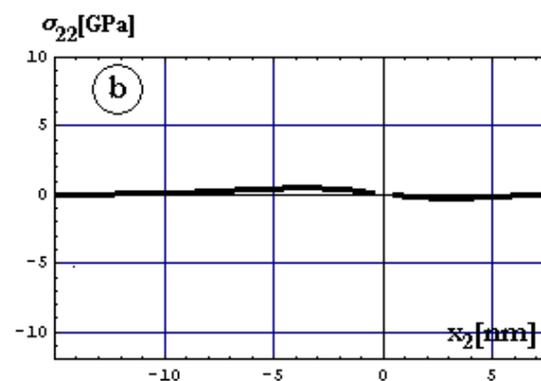
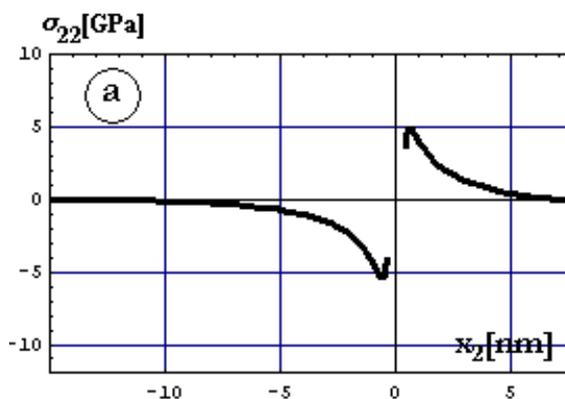
► **hétérostructure $Cu/(001) Fe$**

A/ $p=15.1032 nm$

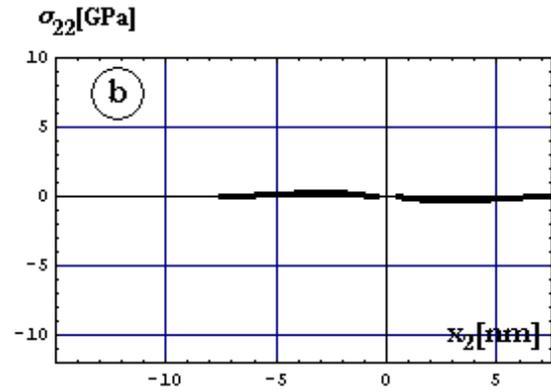
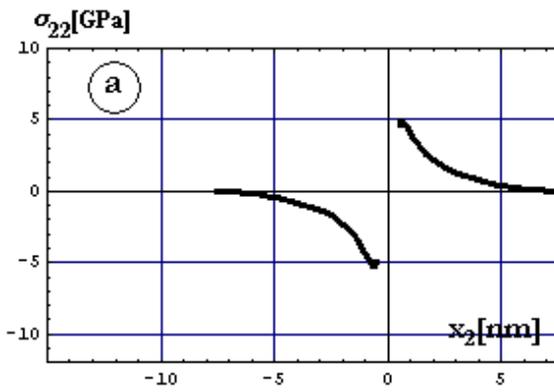
(a) $x_1=b=0.253nm$

(b) $x_1=7.55nm$

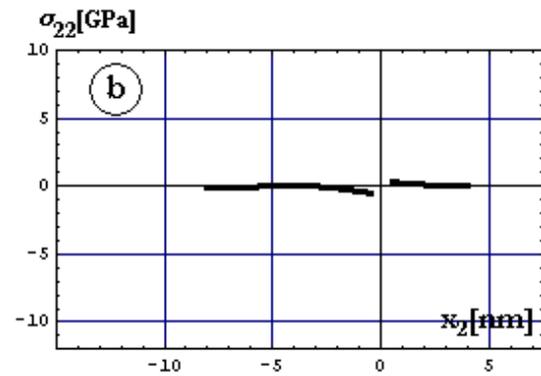
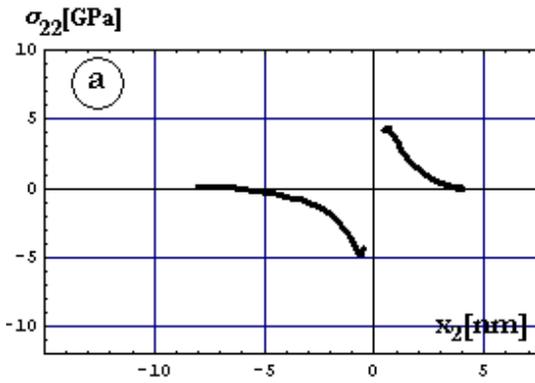
1°/ pour $h^+=7.5nm$ et $h^-=15nm$



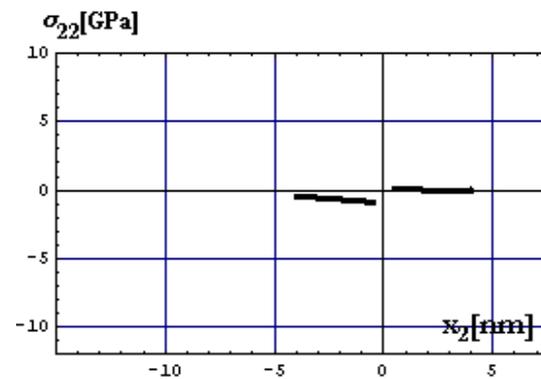
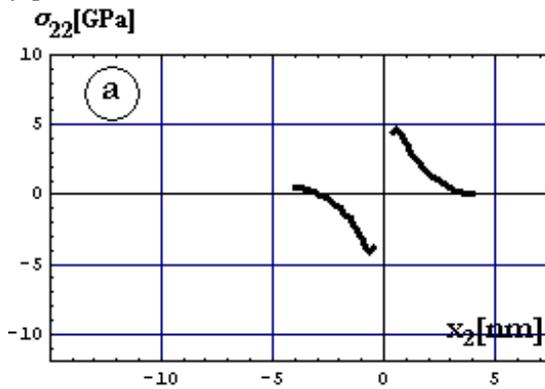
2°/ pour $h^+=7.5nm$ et $h^-=7.5nm$



3°/ pour $h^+=4nm$ et $h^-=8nm$



4°/ pour $h^+=4nm$ et $h^-=4nm$

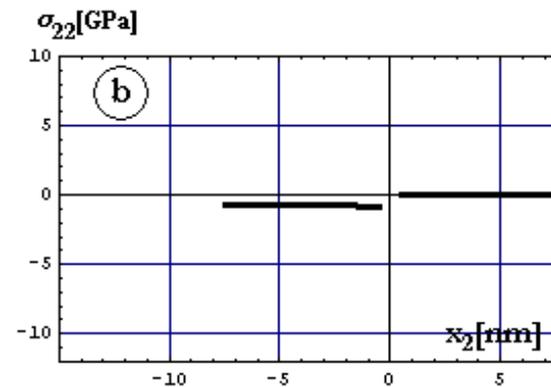
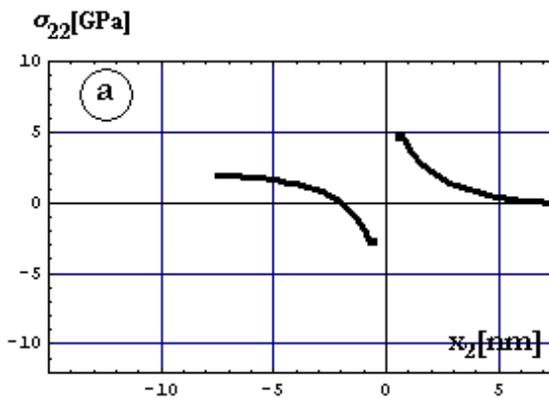


B/ $p=151.032 nm$

1°/ $h^+=7.5nm$ et $h^-=7.5nm$

(a) $x_1 = b = 0.253nm$

(b) $x_1 = 75.5nm$



2°/ $h^+=7.5\text{nm}$ et $h^-=15\text{nm}$

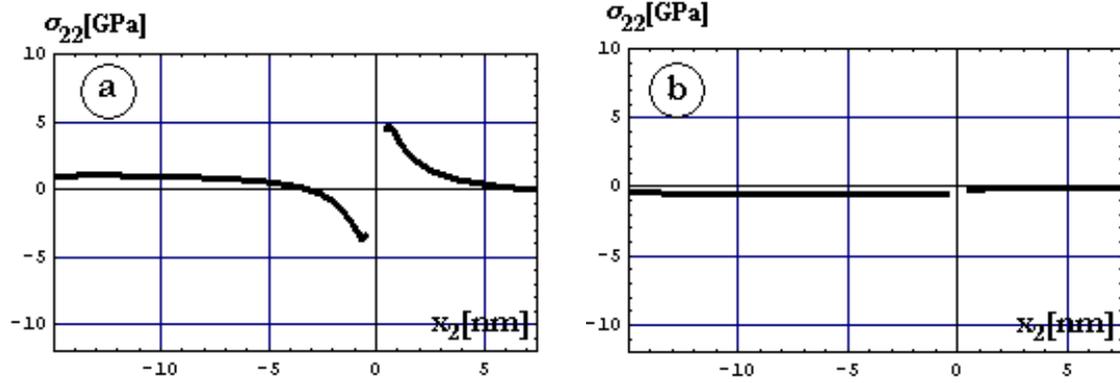


FIG. 4. 14 La distribution de contrainte σ_{22} en fonction des épaisseurs h^+ et h^- pour une hétérostructure Cu/(001)Fe

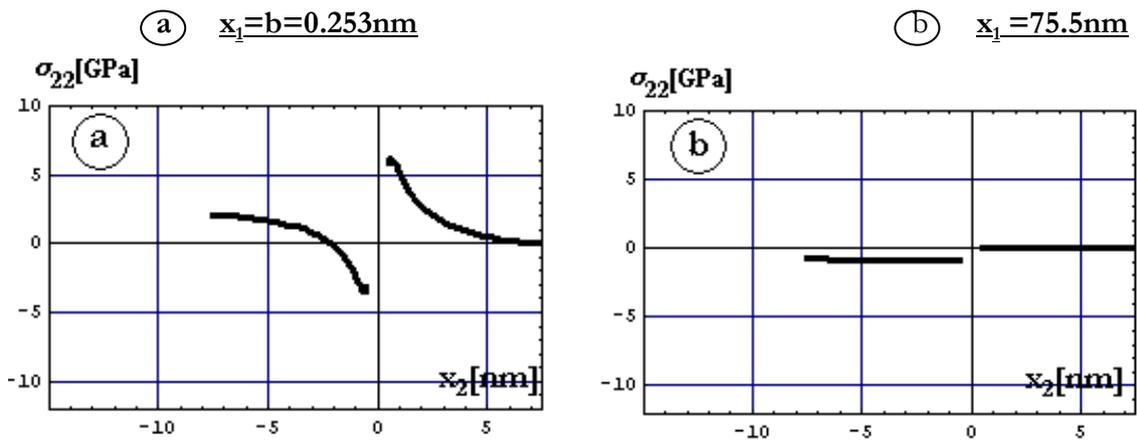
-A/ $\rho=15.1032\text{nm}$

-B/ $\rho=151.032\text{nm}$

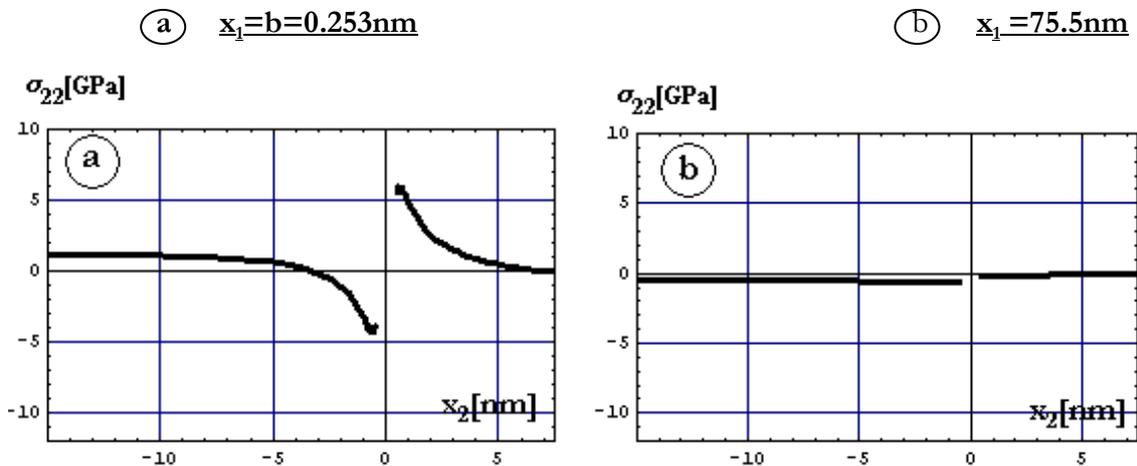
► structure homogène Cu/(001)Cu et Fe/(001)Fe

A/ Cu/(001)Cu

1°/ pour $h^+=7.5\text{nm}$ et $h^-=7.5\text{nm}$

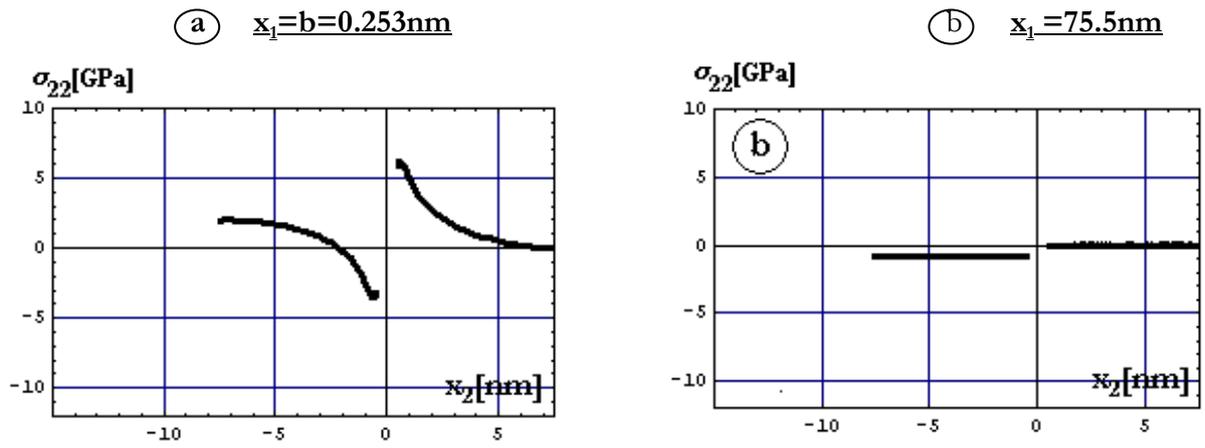


2°/ pour $h^+=7.5\text{nm}$ et $h^-=15\text{nm}$



B/ Fe/(001)Fe

1°/ pour $h^+=7.5nm$ et $h^-=7.5nm$



2°/ pour $h^+=7.5nm$ et $h^-=15nm$

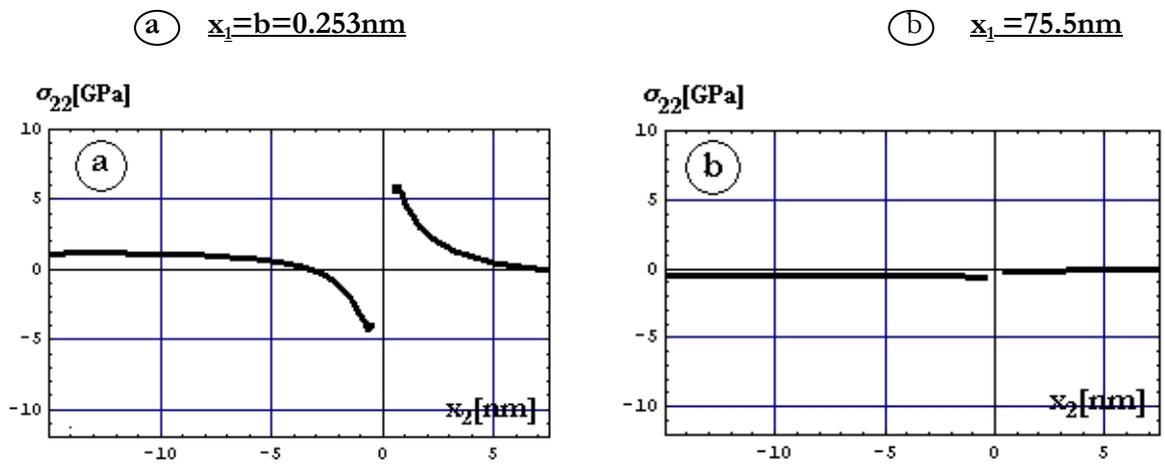


FIG. 4. 15 : La distribution de contrainte σ_{22} en fonction des épaisseurs h^+ et h^- pour une structure homogène et une période $p=15.1032$

-A/ Cu/(001) Cu

-B/ Fe/(001) Fe

IV. 6. Etude comparative

a/ **Effet de l'hétérogénéité**

Pour observer l'effet de l'hétérogénéité du matériau sur la distribution des contraintes σ_{11} et σ_{22} le long de x_1 et en fonction de (x_2).

Nous avons tracé les courbes des figures 4. 16,, 4.19 pour des épaisseurs choisies

Cu/(001)Fe	
Cu/(001)Cu	
Fe/(001)Fe	

1°/ pour $h^+ = 7.5\text{nm}$ et $h^- = 15\text{nm}$

$$x_1 = b = 0.253\text{nm}$$

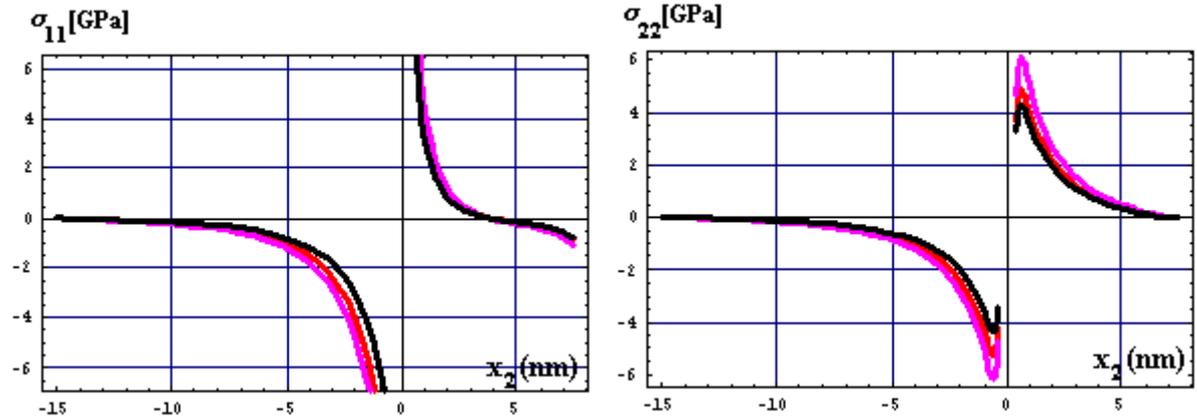


FIG. 4. 16 : Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 ($h^+ = 7.5\text{nm}$ et $h^- = 15\text{nm}$) pour les matériaux bicouches Cu/Cu, Fe/Fe et Cu/(001)Fe pour $x_1 = 0.253\text{ nm}$ et $b//Ox_1$

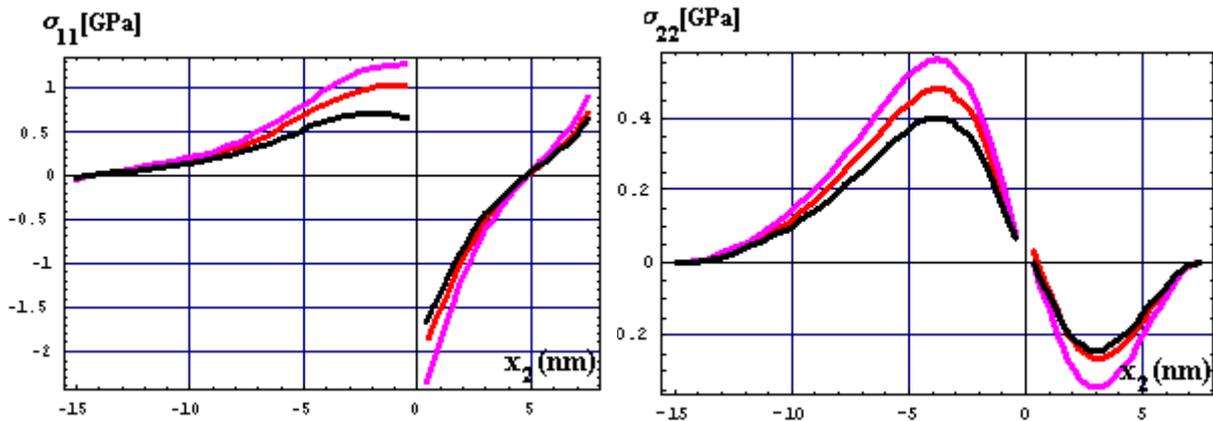
 $x_1 = 7.55\text{nm}$ 

FIG. 4. 17 : Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 ($h^+ = 7.5\text{nm}$ et $h^- = 15\text{ nm}$) pour les matériaux bicouches Cu/Cu, Fe/Fe et Cu/(001)Fe pour $x_1 = 0.253\text{ nm}$ et $b//Ox_1$

2°/ pour $h^+ = 7.5\text{nm}$ et $h^- = 7.5\text{nm}$

$$x_1 = b = 0.253\text{nm}$$

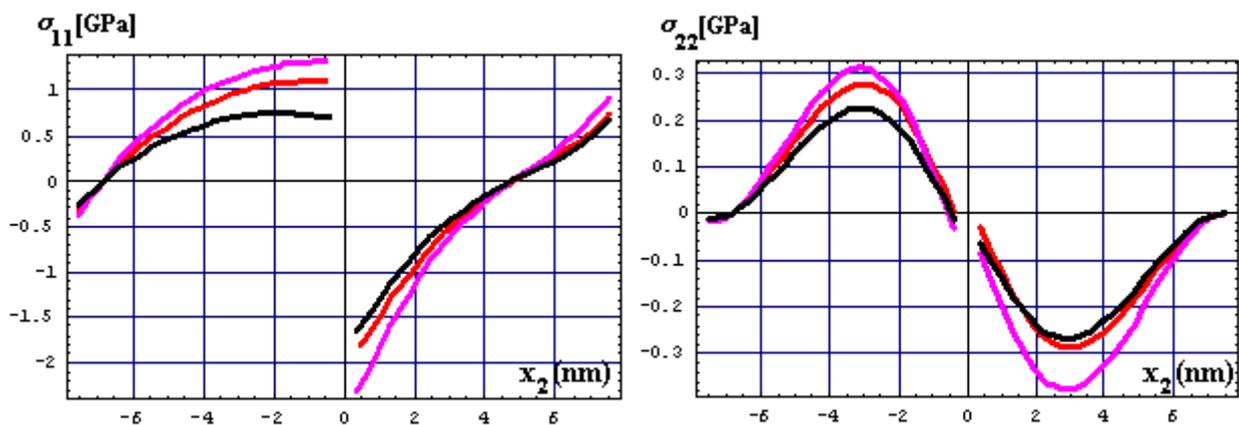


FIG. 4. 18 : Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 ($h^+ = 7.5\text{nm}$ et $h^- = 7.5\text{ nm}$) pour les matériaux bicouches Cu/Cu, Fe/Fe et Cu/(001)Fe pour $x_1 = 0.253\text{ nm}$ et $b//Ox_1$

$$x_1 = 7.55 \text{ nm}$$

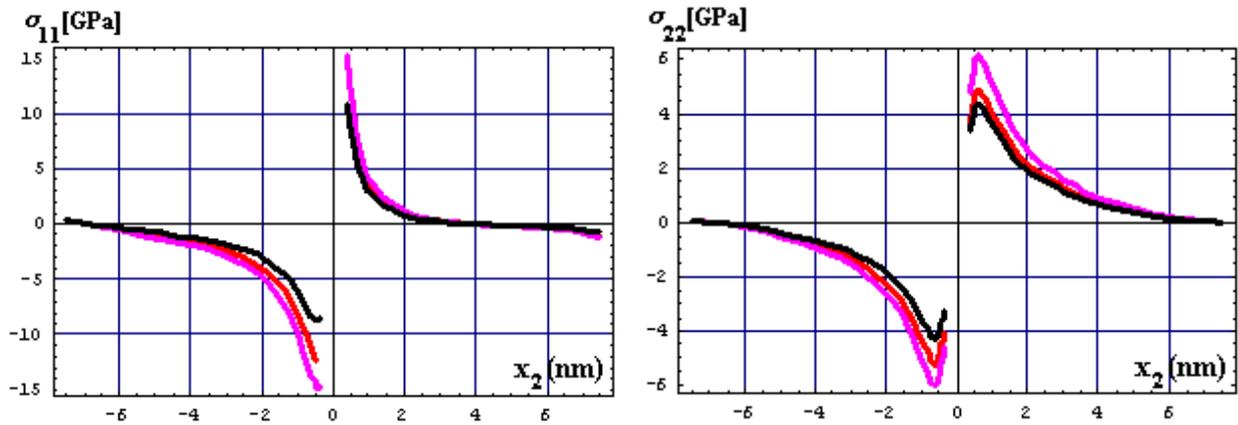


FIG. 4. 19 : Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 ($h^+ = 7.5 \text{ nm}$ et $h^- = 7.5 \text{ nm}$) pour les matériaux bicouches Cu/Cu , Fe/Fe et Cu/(001)Fe pour $x_1 = 7.55 \text{ nm}$ et $b // 0x_1$

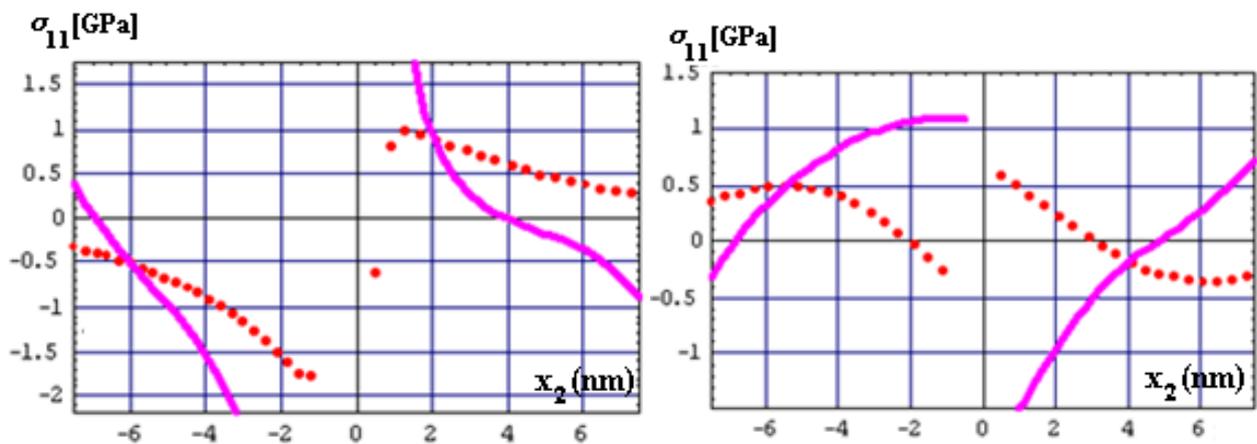
b/ comparaison avec les résultats obtenus en anisotropie

Dans l'objectif de comparer le comportement élastique du bilame dans le cas de l'isotropie et de l'anisotropie, une comparaison des résultats obtenus par mon collègue R. Makhloufi [24] en élasticité anisotrope et nos propres résultats pour le même bilame Cu/(001)Fe pris dans les mêmes conditions est réalisé. Notons une nette différence qui permet de conclure que l'effet d'anisotropie est important pour le bicristal choisie (figures 4. 20 et 4. 21)

1°/ pour $h^+ = 7.5 \text{ nm}$ et $h^- = 7.5 \text{ nm}$

$$x_1 = b = 0.253 \text{ nm}$$

$$x_1 = 7.55 \text{ nm}$$



$x_1=b=0.253nm$

$x_1=7.55nm$

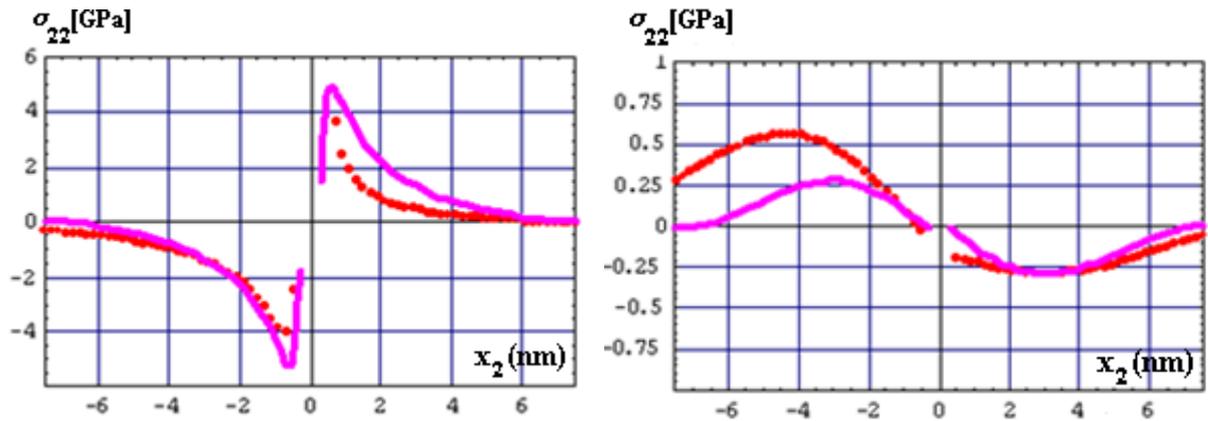


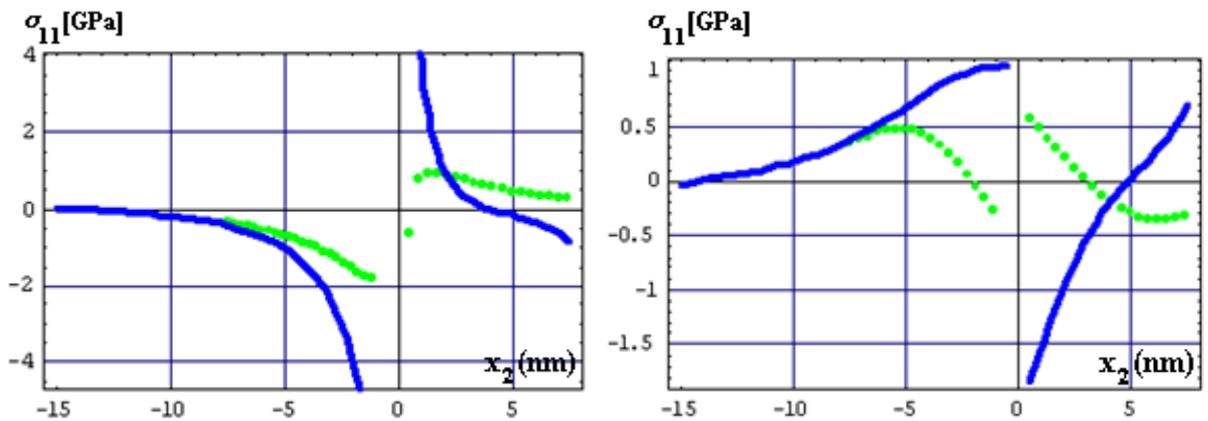
FIG. 4. 20 : Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} anisotrope et isotrope en fonction de x_2 ($h^+=7.5$ et $h^-=7.5$) pour le bilame mince Cu/(001) Fe, b// ox_1

	isotrope	anisotrope
Cu/(001)Fe	—	⋯

2°/ pour $h^+=7.5nm$ et $h^-=15$

$x_1=b=0.253nm$

$x_1=7.55nm$



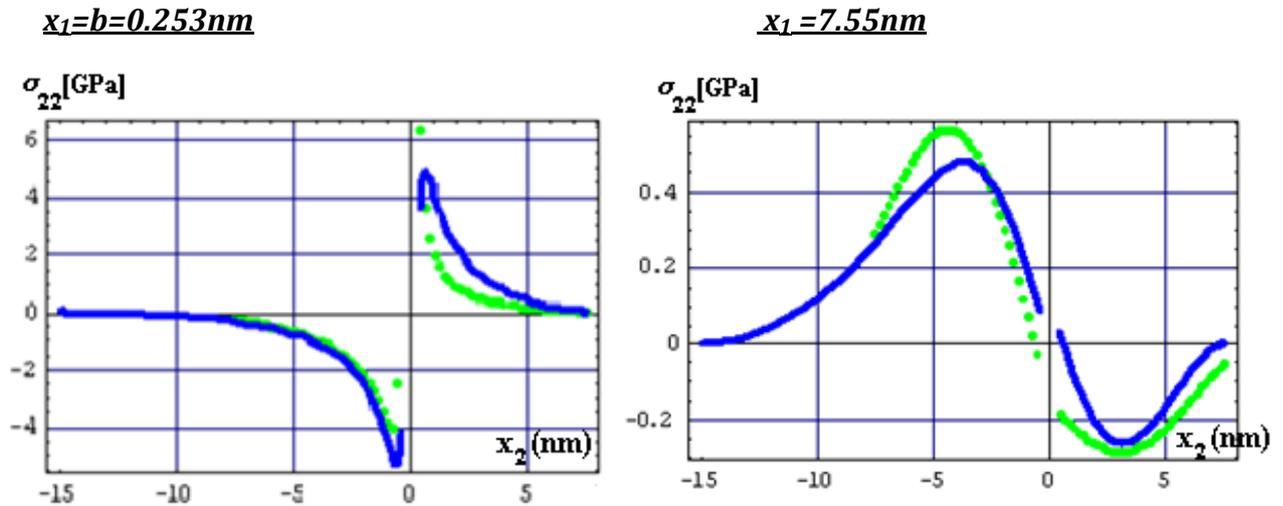


FIG. 4. 21 : Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} anisotrope et isotrope en fonction de x_2 ($h^+=7.5$ et $h^-=-15$) pour le bilame mince Cu/(001)Fe , $b//ox_1$



c/ comparaison avec les résultats obtenus en quasi- isotropie dans le cas du bilame Al/(001) Al₂Cu

Le bilame Al/Al₂Cu a été traité numériquement par S. Madani [27] en en élasticité anisotrope. Afin de relever un effet d’anisotropie, l’auteur a introduit dans son programme des constantes élastiques quasi-isotropes par approximation. Nous avons repris cette application afin de vérifier la validité du test choisi.

En effet, les résultats obtenus en élasticité isotrope pour le même bilame indiquent une différence en terme de valeurs pour les champs de déplacements (figure 4. 22 et 4. 23).

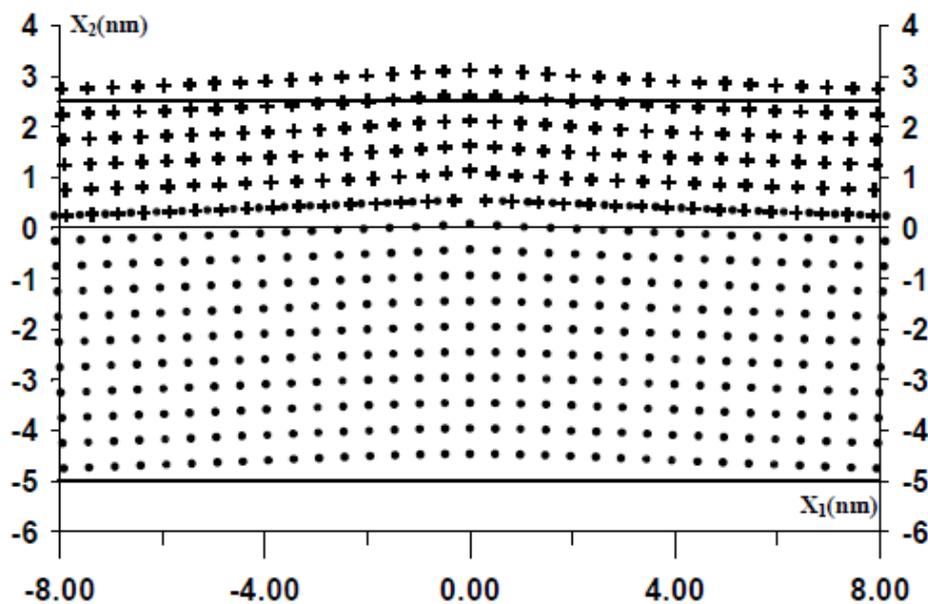


FIG. 4.22 : Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Al₂Cu sous l’effet de dislocation coin interfaciale, C_{ij} quasi-isotropes, $b_1//Ox_1$

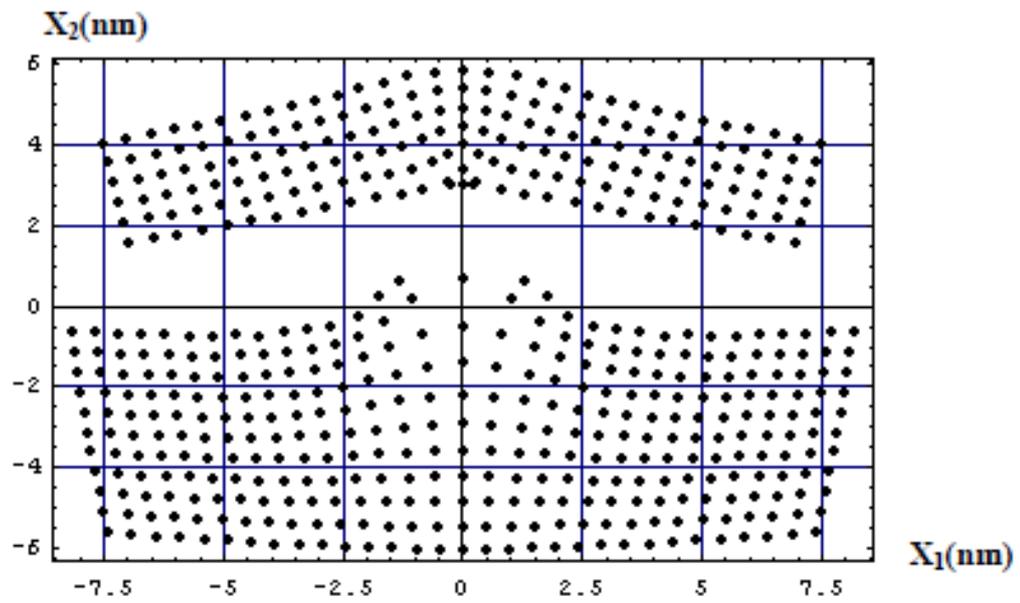


FIG. 4. 23 : Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Al₂Cu sous l'effet de dislocation coin interfaciale, C_{ij} isotropes, $b_1 // O x_1$

Conclusion Générale

Le présent travail, soumis aux rudes exigences de l'évolution technologique, suscite une envie de savoir plus dans le domaine des dislocations, qui devient chaque jour plus vaste et plus ramifié et constitue une initiation à la recherche dans ce domaine. Nous nous sommes intéressés au cas du bilame mince dont l'interface est pavée d'une famille de dislocations de désaccord appelées « misfit » de type coin réparties périodiquement. L'objectif est d'examiner le comportement élastique isotrope du bilame mince. Les champs élastiques sont déterminés en se basant sur une formulation analytique en séries de Fourier développée antérieurement par R. Bonnet.

Les expressions analytiques des coefficients de Fourier sont déterminées numériquement à l'aide d'un programme construit en langage MATHEMATICA. Ces expressions sont ensuite réutilisées par le programme pour calculer les champs des déplacements et de contraintes le plus précisément possible. Le langage MATHEMATICA présente, en effet, une précision qui atteint 32 chiffres et un coût de calcul relativement bas.

La démarche entreprise pour déterminer les interactions élastiques entre les surfaces libres et le réseau parallèle de dislocations de misfit débouche sur des résultats qui confirment une théorie déjà établie. Cette démarche passe obligatoirement par l'illustration du déplacement relatif interfacial et la vérification des conditions aux limites en déplacement et en contraintes. Ce qui a permis de valider le programme de calcul. Par la suite, nos investigations numériques montrent que, pour tous les systèmes considérés, la forme topologique des surfaces libres correspond à celles des séries de Fourier. Cette forme varie selon l'épaisseur de la couche considérée. Les déformations des couches sont plus prononcées pour des épaisseurs allant de -0.01nm à $+0.01\text{nm}$.

En effet, et concernant le champ de déplacements nous avons constaté qu'il n'y a pas une grande influence de la variation de N sur la topologie des surfaces du bilame. On remarque, cependant, qu'il y a une influence de la variation de l'épaisseur telle que la couche de cuivre se relaxe de façon meilleure quand son épaisseur vaut la moitié de celle du fer.

Pour la distribution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction des épaisseurs, remarquons que la contrainte σ_{11} change de signe dans les couches, elle est discontinue près de l'interface et que celle-ci est importante lorsqu'elle est calculée près du cœur de la dislocation ($x_1=b$) et devient négligeable lorsqu'elle est calculée à mi-distance entre deux dislocations. La valeur de σ_{22} s'annule au niveau des surfaces libres et elle est continue à travers l'interface. Pour une seule dislocation, les contraintes σ_{11} et σ_{22} s'annulent à une distance de quelques nanomètres du cœur cédant la place à une parfaite relaxation.

Par ailleurs, en considérant les systèmes homogènes Cu/(001) Cu et Fe/(001) Fe, nous avons remarqué un effet d'hétérogénéité du matériau sur la distribution des contraintes normales σ_{11} et σ_{22} .

Enfin, dans l'objectif de montrer une nécessité d'avoir à la disposition deux programmes, l'un en isotropie et l'autre en anisotropie, nous avons repris l'application pour le bilame Al/Al₂Cu traité numériquement par S. Madani en utilisant le langage Fortran. En effet, l'auteur a introduit dans son programme des constantes élastiques quasi-isotropes pour se rapprocher de l'élasticité isotrope. Nous avons constaté une nette différence entre les résultats obtenus en isotropie par le langage Mathematica et les résultats obtenus en quasi-isotropie.

En conclusion, ce travail nous a permis d'acquérir des connaissances sur la méthode théorique utilisée, d'apprendre la programmation avec tous ce qu'elle requiert. Aussi, ce travail constitue une contribution dans la connaissance de la dispersion des contraintes dans les hétérostructures pour laquelle il n'existe pas de formule analytique.

ANNEXE I

Les expressions des paramètres

$$a_{10}^+ = -2 + 4e^{2\beta} - 2e^{4\beta} + 2k - 2e^{2\alpha}k - 2e^{2\beta}k + 2e^{2(\alpha+\beta)}k - 4e^{2\beta}k\alpha + 4e^{4\beta}k\alpha + \alpha^2 - 2e^{2\beta}\alpha^2 + e^{4\beta}\alpha^2 - k\alpha^2 - 2e^{2\beta}k\alpha^2 + 3e^{4\beta}k\alpha^2 + 4e^{2\beta}k\beta - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\beta - 8e^{2\beta}k\alpha\beta - 8e^{2\beta}k\alpha^2\beta + 8e^{2\beta}\beta^2 + 4e^{2\beta}k\beta^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\beta^2 + 8e^{2\beta}k\alpha\beta^2 - 4e^{2\beta}\alpha^2\beta^2 + 4e^{2\beta}k\alpha^2\beta^2$$

$$a_{11}^+ = (6 + 3e^{2\alpha}k - e^{2\alpha+4\beta}k + k(-3 + 2\alpha) + e^{4\beta}(6 + k - 6k\alpha) + 2e^{2(\alpha+\beta)}k(-1 + 4\beta + 2\beta^2) - 2e^{2\beta}(6 + 12\beta^2 + k(-1 + 4\beta + 2\beta^2 + \alpha(-2 - 8\beta + 4\beta^2))))$$

$$a_{12}^+ = (1 + e^{4\beta} - 2e^{2\beta}(1 + 2\beta^2))$$

$$a_{13}^+ = -3 + 3e^{2\alpha} + e^{2\alpha+4\beta} - 2\alpha - e^{4\beta}(1 + 6\alpha + 4\alpha^2) + 4e^{2(\alpha+\beta)}(-1 + \beta) + 4e^{2\beta}(1 - \beta + 2\alpha(1 + \beta) + \alpha^2(1 + 2\beta))$$

$$a_{14}^+ = (-1 + e^{2\alpha} - 2e^{4\beta}\alpha + e^{2(\alpha+\beta)}(-1 + 2\beta) + e^{2\beta}(1 + 2\alpha - 2\beta + 4\alpha\beta))$$

$$a_{20}^+ = 5 + 3e^{2\alpha} - 10e^{2\beta} + 5e^{4\beta} - 6e^{2(\alpha+\beta)} + 3e^{2\alpha+4\beta} - 5k + 5e^{2\alpha}k + 2e^{2\beta}k + 3e^{4\beta}k - 2e^{2(\alpha+\beta)}k - 3e^{2\alpha+4\beta}k + 6\alpha - 12e^{2\beta}\alpha + 6e^{4\beta}\alpha - 6k\alpha - 4e^{2\beta}k\alpha + 10e^{4\beta}k\alpha + 2\alpha^2 - 4e^{2\beta}\alpha^2 + 2e^{4\beta}\alpha^2 - 2k\alpha^2 - 4e^{2\beta}k\alpha^2 + 6e^{4\beta}k\alpha^2 + 16e^{2\beta}k\beta - 16e^{2(\alpha+\beta)}k\beta + 32e^{2\beta}k\alpha\beta + 16e^{2\beta}k\alpha^2\beta - 20e^{2\beta}\beta^2 - 12e^{2(\alpha+\beta)}\beta^2 - 4e^{2\beta}k\beta^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}k\beta^2 - 24e^{2\beta}\alpha\beta^2 + 8e^{2\beta}k\alpha\beta^2 - 8e^{2\beta}\alpha^2\beta^2 + 8e^{2\beta}k\alpha^2\beta^2$$

$$a_{21}^+ = (e^{2\alpha+4\beta}(-2 + k) - e^{2\alpha}(2 + 3k) + (-2 + k)(3 + 2\alpha) - e^{4\beta}(6 + k + 4\alpha + 6k\alpha) + e^{2(\alpha+\beta)}(4 + 8\beta^2 + k(2 + 8\beta - 4\beta^2)) - 2e^{2\beta}(-2(3 + 2\alpha)(1 + 2\beta^2) + k(1 + 4\beta - 2\beta^2 + \alpha(-2 + 8\beta + 4\beta^2))))$$

$$a_{22}^+ = (1 + e^{4\beta} - 2e^{2\beta}(1 + 2\beta^2))$$

$$a_{23}^+ = 3 - 3e^{2\alpha} + e^{2\alpha+4\beta} + 2\alpha - e^{4\beta}(1 + 6\alpha + 4\alpha^2) + e^{2(\alpha+\beta)}(2 + 8\beta) - 2e^{2\beta}(1 + 4\beta + \alpha^2(-2 + 4\beta) + \alpha(-2 + 8\beta))$$

$$a_{24}^+ = (1 - e^{2\alpha} - 2e^{4\beta}\alpha + e^{2(\alpha+\beta)}(1 + 2\beta) - e^{2\beta}(1 - 2\alpha + 2\beta + 4\alpha\beta))$$

$$b_{10}^+ = -3 - e^{2\alpha} + 6e^{2\beta} - 3e^{4\beta} + 2e^{2(\alpha+\beta)} - e^{2\alpha+4\beta} + 3k - 3e^{2\alpha}k - 2e^{2\beta}k - e^{4\beta}k + 2e^{2(\alpha+\beta)}k \\ + e^{2\alpha+4\beta}k + 2\alpha - 4e^{2\beta}\alpha + 2e^{4\beta}\alpha - 2k\alpha - 4e^{2\beta}k\alpha + 6e^{4\beta}k\alpha + 8e^{2\beta}k\beta - 8e^{2(\alpha+\beta)}k\beta - \\ 16e^{2\beta}k\alpha\beta + 12e^{2\beta}\beta^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}\beta^2 + 4e^{2\beta}k\beta^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\beta^2 - 8e^{2\beta}\alpha\beta^2 + 8e^{2\beta}k\alpha\beta^2$$

$$b_{11}^+ = k(-1 + e^{2\alpha} - 2e^{4\beta}\alpha + e^{2(\alpha+\beta)}(-1 + 2\beta) + e^{2\beta}(1 + 2\alpha - 2\beta + 4\alpha\beta))v^- + 4(1 + e^{4\beta} - 2e^{2\beta}(1 + 2\beta^2))$$

$$b_{20}^+ = -3 - e^{2\alpha} + 6e^{2\beta} - 3e^{4\beta} + 2e^{2(\alpha+\beta)} - e^{2\alpha+4\beta} + 3k - 3e^{2\alpha}k - 2e^{2\beta}k - e^{4\beta}k + 2e^{2(\alpha+\beta)}k \\ + e^{2\alpha+4\beta}k - 2\alpha + 4e^{2\beta}\alpha - 2e^{4\beta}\alpha + 2k\alpha + 4e^{2\beta}k\alpha - 6e^{4\beta}k\alpha - 8e^{2\beta}k\beta + 8e^{2(\alpha+\beta)}k\beta - \\ 16e^{2\beta}k\alpha\beta + 12e^{2\beta}\beta^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}\beta^2 + 4e^{2\beta}k\beta^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\beta^2 + 8e^{2\beta}\alpha\beta^2 - 8e^{2\beta}k\alpha\beta^2$$

$$b_{21}^+ = k(1 - e^{2\alpha} - 2e^{4\beta}\alpha + e^{2(\alpha+\beta)}(1 + 2\beta) - e^{2\beta}(1 - 2\alpha + 2\beta + 4\alpha\beta))v^- + 4(1 + e^{4\beta} - 2e^{2\beta}(1 + 2\beta^2))$$

$$c_{10}^+ = 2e^{2\alpha} - 4e^{2(\alpha+\beta)} + 2e^{2\alpha+4\beta} - 2e^{2\beta}k + 2e^{4\beta}k + 2e^{2(\alpha+\beta)}k - 2e^{2\alpha+4\beta}k \\ + 4e^{2\alpha}k\alpha - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha - e^{2\alpha}\alpha^2 + 2e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2 - e^{2\alpha+4\beta}\alpha^2 - 3e^{2\alpha}k\alpha^2 \\ + 2e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2 + e^{2\alpha+4\beta}k\alpha^2 - 4e^{2\beta}k\beta + 4e^{2(\alpha+\beta)}k\beta + 8e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha\beta - \\ 8e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2\beta - 8e^{2(\alpha+\beta)}\beta^2 + 4e^{2\beta}k\beta^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\beta^2 + 8e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha\beta^2 \\ + 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2\beta^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2\beta^2$$

$$c_{11}^+ = (k - 3e^{4\beta}k - e^{2\alpha}(6 + k + 6k\alpha) + e^{2\alpha+4\beta}(-6 + k(3 + 2\alpha)) - 2e^{2\beta}k(-1 - 4\beta + 2\beta^2) \\ - 2e^{2(\alpha+\beta)}(-6(1 + 2\beta^2) + k(1 + 4\beta - 2\beta^2 + \alpha(-2 + 8\beta + 4\beta^2))))$$

$$c_{12}^+ = e^{2\alpha}(1 + e^{4\beta} - 2e^{2\beta}(1 + 2\beta^2))$$

$$c_{13}^+ = -1 - 3e^{4\beta} + e^{2\alpha+4\beta}(3 - 2\alpha) + e^{2\alpha}(1 - 6\alpha + 4\alpha^2) + 4e^{2\beta}(1 + \beta) + \\ e^{2(\alpha+\beta)}(-8\alpha(-1 + \beta) - 4(1 + \beta) + \alpha^2(-4 + 8\beta))$$

$$c_{14}^+ = (-e^{4\beta} + e^{2\alpha+4\beta} - 2e^{2\alpha}\alpha + e^{2\beta}(1 + 2\beta) - e^{2(\alpha+\beta)}(1 - 2\alpha + 2\beta + 4\alpha\beta))$$

$$c_{20}^+ = -3 - 5e^{2\alpha} + 6e^{2\beta} - 3e^{4\beta} + 10e^{2(\alpha+\beta)} - 5e^{2\alpha+4\beta} + 3k - 3e^{2\alpha}k + 2e^{2\beta}k \\ - 5e^{4\beta}k - 2e^{2(\alpha+\beta)}k + 5e^{2\alpha+4\beta}k + 6e^{2\alpha}\alpha - 12e^{2(\alpha+\beta)}\alpha + 6e^{2\alpha+4\beta}\alpha + 10e^{2\alpha}k\alpha \\ - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha - 6e^{2\alpha+4\beta}k\alpha - 2e^{2\alpha}\alpha^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2 - 2e^{2\alpha+4\beta}\alpha^2 - \\ 6e^{2\alpha}k\alpha^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2 + 2e^{2\alpha+4\beta}k\alpha^2 - 16e^{2\beta}k\beta + 16e^{2(\alpha+\beta)}k\beta - 32e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha\beta + \\ 16e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2\beta + 12e^{2\beta}\beta^2 + 20e^{2(\alpha+\beta)}\beta^2 - 4e^{2\beta}k\beta^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}k\beta^2 - 24e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta^2 \\ + 8e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha\beta^2 + 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2\beta^2 - 8e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2\beta^2$$

$$c_{21}^+ = (2 - k + e^{4\beta} (2 + 3k) + e^{2\alpha+4\beta} (-2 + k) (-3 + 2\alpha) + e^{2\alpha} (6 + k - 4\alpha - 6k\alpha) + e^{2\beta} (-4 - 8\beta^2 + k(-2 + 8\beta + 4\beta^2)) - 2e^{2(\alpha+\beta)} (-2(-3 + 2\alpha)(1 + 2\beta^2) + k(-1 + 4\beta + 2\beta^2 + \alpha(-2 - 8\beta + 4\beta^2))))$$

$$c_{22}^+ = e^{2\alpha} (1 + e^{4\beta} - 2e^{2\beta} (1 + 2\beta^2))$$

$$c_{23}^+ = -1 + 3e^{4\beta} + e^{2\alpha+4\beta} (-3 + 2\alpha) + e^{2\alpha} (1 - 6\alpha + 4\alpha^2) + e^{2\beta} (-2 + 8\beta) + e^{2(\alpha+\beta)} (2 - 8\beta - 4\alpha^2 (1 + 2\beta) + 4\alpha (1 + 4\beta))$$

$$c_{24}^+ = (-e^{4\beta} + e^{2\alpha+4\beta} + 2e^{2\alpha}\alpha + e^{2\beta} (1 - 2\beta) - e^{2(\alpha+\beta)} (1 + 2\alpha - 2\beta + 4\alpha\beta))$$

$$d_{10}^+ = 1 + 3e^{2\alpha} - 2e^{2\beta} + e^{4\beta} - 6e^{2(\alpha+\beta)} + 3e^{2\alpha+4\beta} - k + e^{2\alpha}k - 2e^{2\beta}k + 3e^{4\beta}k + 2e^{2(\alpha+\beta)}k - 3e^{2\alpha+4\beta}k + 2e^{2\alpha}\alpha - 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha + 2e^{2\alpha+4\beta}\alpha + 6e^{2\alpha}k\alpha - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha - 2e^{2\alpha+4\beta}k\alpha - 8e^{2\beta}k\beta + 8e^{2(\alpha+\beta)}k\beta + 16e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha\beta - 4e^{2\beta}\beta^2 - 12e^{2(\alpha+\beta)}\beta^2 + 4e^{2\beta}k\beta^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\beta^2 - 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta^2 + 8e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha\beta^2$$

$$d_{11}^+ = (-e^{4\beta} + e^{2\alpha+4\beta} - 2e^{2\alpha}\alpha + e^{2\beta} (1 + 2\beta) - e^{2(\alpha+\beta)} (1 - 2\alpha + 2\beta + 4\alpha\beta))$$

$$d_{12}^+ = e^{2\alpha} (1 + e^{4\beta} - 2e^{2\beta} (1 + 2\beta^2))$$

$$d_{20}^+ = 1 + 3e^{2\alpha} - 2e^{2\beta} + e^{4\beta} - 6e^{2(\alpha+\beta)} + 3e^{2\alpha+4\beta} - k + e^{2\alpha}k - 2e^{2\beta}k + 3e^{4\beta}k + 2e^{2(\alpha+\beta)}k - 3e^{2\alpha+4\beta}k - 2e^{2\alpha}\alpha + 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha - 2e^{2\alpha+4\beta}\alpha - 6e^{2\alpha}k\alpha + 4e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha + 2e^{2\alpha+4\beta}k\alpha + 8e^{2\beta}k\beta - 8e^{2(\alpha+\beta)}k\beta + 16e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha\beta - 4e^{2\beta}\beta^2 - 12e^{2(\alpha+\beta)}\beta^2 + 4e^{2\beta}k\beta^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\beta^2 + 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta^2 - 8e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha\beta^2$$

$$d_{21}^+ = k(-e^{4\beta} + e^{2\alpha+4\beta} + 2e^{2\alpha}\alpha + e^{2\beta} (1 - 2\beta) - e^{2(\alpha+\beta)} (1 + 2\alpha - 2\beta + 4\alpha\beta))$$

$$d_{22}^+ = e^{2\alpha} (1 + e^{4\beta} - 2e^{2\beta} (1 + 2\beta^2))$$

$$a_{10}^- = -2 + 2e^{2\alpha} + 2e^{2\beta} - 2e^{2(\alpha+\beta)} + 2k - 4e^{2\alpha}k + 2e^{4\alpha}k - 4e^{2\alpha}\alpha + 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha - 4e^{2\alpha}\alpha^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2 - 8e^{2\alpha}k\alpha^2 + 4e^{2\alpha}\beta - 4e^{4\alpha}\beta + 8e^{2\alpha}\alpha\beta - 8e^{2\alpha}\alpha^2\beta + \beta^2 + 2e^{2\alpha}\beta^2 - 3e^{4\alpha}\beta^2 - k\beta^2 + 2e^{2\alpha}k\beta^2 - e^{4\alpha}k\beta^2 + 8e^{2\alpha}\alpha\beta^2 - 4e^{2\alpha}\alpha^2\beta^2 + 4e^{2\alpha}k\alpha^2\beta^2$$

$$a_{11}^- = (1 + e^{4\alpha} - 2e^{2\alpha} (1 + 2\alpha^2))$$

$$a_{12}^- = (3 - 3e^{2\beta} - e^{4\alpha+2\beta} - 4e^{2(\alpha+\beta)} (-1 + \alpha) + 2\beta + e^{4\alpha} (1 + 6\beta + 4\beta^2) - 4e^{2\alpha} ((1 + \beta)^2 + \alpha(-1 + 2\beta + 2\beta^2)))$$

$$a_{13}^- = 3 - 3 e^{2\beta} + e^{4\alpha+2\beta} - 6k + e^{2(\alpha+\beta)} (2 - 8\alpha - 4\alpha^2) - 2\beta + e^{4\alpha} (-1 - 6k + 6\beta) + 2e^{2\alpha} (-1 + 6k(1 + 2\alpha^2) + \alpha(4 - 8\beta) - 2\beta + \alpha^2(2 + 4\beta))$$

$$a_{14}^- = (1 - e^{2\beta} + e^{2(\alpha+\beta)} (1 - 2\alpha) + 2e^{4\alpha} \beta - e^{2\alpha} (1 + 2\beta + \alpha(-2 + 4\beta)))$$

$$a_{20}^- = 5 - 2e^{2\alpha} - 3e^{4\alpha} - 5e^{2\beta} + 2e^{2(\alpha+\beta)} + 3e^{4\alpha+2\beta} - 5k + 10e^{2\alpha}k - 5e^{4\alpha}k - 3e^{2\beta}k + 6e^{2(\alpha+\beta)}k - 3e^{4\alpha+2\beta}k - 16e^{2\alpha}\alpha + 16e^{2(\alpha+\beta)}\alpha + 4e^{2\alpha}\alpha^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2 + 20e^{2\alpha}k\alpha^2 + 12e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2 + 6\beta + 4e^{2\alpha}\beta - 10e^{4\alpha}\beta - 6k\beta + 12e^{2\alpha}k\beta - 6e^{4\alpha}k\beta - 32e^{2\alpha}\alpha\beta - 8e^{2\alpha}\alpha^2\beta + 24e^{2\alpha}k\alpha^2\beta + 2\beta^2 + 4e^{2\alpha}\beta^2 - 6e^{4\alpha}\beta^2 - 2k\beta^2 + 4e^{2\alpha}k\beta^2 - 2e^{4\alpha}k\beta^2 - 16e^{2\alpha}\alpha\beta^2 - 8e^{2\alpha}\alpha^2\beta^2 + 8e^{2\alpha}k\alpha^2\beta^2$$

$$a_{21}^- = (1 + e^{4\alpha} - 2e^{2\alpha} (1 + 2\alpha^2))$$

$$a_{22}^- = 6v^+ + 4e^{2\alpha}v^+ + 2e^{4\alpha}v^+ + 6e^{2\beta}v^+ - 4e^{2(\alpha+\beta)}v^+ - 2e^{4\alpha+2\beta}v^+ + 16e^{2(\alpha+\beta)}\alpha v^+ - 16e^{2\alpha}\alpha v^+ - 4\beta v^+ - 8e^{2\alpha}\beta v^+ + 12e^{4\alpha}\beta v^+ + 32e^{2\alpha}\alpha\beta v^+ - 8e^{2\alpha}\beta^2 v^+ + 8e^{4\alpha}\beta^2 v^+ + 16e^{2\alpha}\alpha\beta^2 v^+$$

$$a_{23}^- = e^{4\alpha+2\beta}(-1 + 2k) + e^{2\beta}(3 + 2k) - 2e^{2(\alpha+\beta)}(1 + 4\alpha - 2\alpha^2 + k(2 + 4\alpha^2)) + (-1 + 2k)(3 + 2\beta) - 2e^{2\alpha}(-1 + \alpha^2(2 - 4\beta) + 2\beta - 4\alpha(1 + 2\beta) + 2k(1 + 2\alpha^2)(3 + 2\beta)) + e^{4\alpha}(1 + 6\beta + k(6 + 4\beta))$$

$$a_{24}^- = (-1 + e^{2\beta} - e^{2(\alpha+\beta)}(1 + 2\alpha) + 2e^{4\alpha}\beta + e^{2\alpha}(1 - 2\beta + \alpha(2 + 4\beta)))$$

$$b_{10}^- = -3 + 2e^{2\alpha} + e^{4\alpha} + 3e^{2\beta} - 2e^{2(\alpha+\beta)} - e^{4\alpha+2\beta} + 3k - 6e^{2\alpha}k + 3e^{4\alpha}k + e^{2\beta}k - 2e^{2(\alpha+\beta)}k + e^{4\alpha+2\beta}k - 8e^{2\alpha}\alpha + 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha - 4e^{2\alpha}\alpha^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2 - 12e^{2\alpha}k\alpha^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2 + 2\beta + 4e^{2\alpha}\beta - 6e^{4\alpha}\beta - 2k\beta + 4e^{2\alpha}k\beta - 2e^{4\alpha}k\beta + 16e^{2\alpha}\alpha\beta - 8e^{2\alpha}\alpha^2\beta + 8e^{2\alpha}k\alpha^2\beta$$

$$b_{11}^- = (1 + e^{4\alpha} - 2e^{2\alpha} (1 + 2\alpha^2))$$

$$b_{12}^- = (1 - e^{2\beta} + e^{2(\alpha+\beta)}(1 - 2\alpha) + 2e^{4\alpha}\beta - e^{2\alpha}(1 - 2\alpha + 2\beta + 4\alpha\beta))$$

$$b_{20}^- = -3 + 2e^{2\alpha} + e^{4\alpha} + 3e^{2\beta} - 2e^{2(\alpha+\beta)} - e^{4\alpha+2\beta} + 3k - 6e^{2\alpha}k + 3e^{4\alpha}k + e^{2\beta}k - 2e^{2(\alpha+\beta)}k + e^{4\alpha+2\beta}k + 8e^{2\alpha}\alpha - 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha - 4e^{2\alpha}\alpha^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2 - 12e^{2\alpha}k\alpha^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2 - 2\beta - 4e^{2\alpha}\beta + 6e^{4\alpha}\beta + 2k\beta - 4e^{2\alpha}k\beta + 2e^{4\alpha}k\beta + 16e^{2\alpha}\alpha\beta + 8e^{2\alpha}\alpha^2\beta - 8e^{2\alpha}k\alpha^2\beta$$

$$b_{21}^- = (1 + e^{4\alpha} - 2e^{2\alpha} (1 + 2\alpha^2))$$

$$b_{22}^- = (-1 + e^{2\beta} - e^{2(\alpha+\beta)}(1 + 2\alpha) + 2e^{4\alpha}\beta + e^{2\alpha}(1 + 2\alpha - 2\beta + 4\alpha\beta))$$

$$\begin{aligned}
c_{rc}^- = & 2k(2e^{2\alpha} - 2e^{4\alpha} - 2e^{2(\alpha+\beta)} + 2e^{4\alpha+2\beta} - 2e^{2\beta}k + 4e^{2(\alpha+\beta)}k - 2e^{4\alpha+2\beta}k + 4e^{2\alpha}\alpha \\
& - 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha - 4e^{2\alpha}\alpha^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2 + 8e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2 - 4e^{2\beta}\beta + 4e^{2(\alpha+\beta)}\beta - 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta \\
& - 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2\beta + 3e^{2\beta}\beta^2 - 2e^{2(\alpha+\beta)}\beta^2 - e^{4\alpha+2\beta}\beta^2 + e^{2\beta}k\beta^2 - 2e^{2(\alpha+\beta)}k\beta^2 + e^{4\alpha+2\beta}k\beta^2 \\
& + 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2\beta^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2\beta^2 - 4e^{2\beta}k(1 + e^{4\alpha} - 2e^{2\alpha}(1 + 2\alpha^2)) \\
& (v^-)^2 + (1 + 3e^{4\alpha} - 4e^{2\alpha}(1 + \alpha) + e^{4\alpha+2\beta}(-3 + 2\beta) + e^{2\beta}(-1 + 6\beta - 4\beta^2) + 4e^{2(\alpha+\beta)} \\
& ((-1 + \beta)^2 + \alpha(1 + 2\beta - 2\beta^2)))v^+ + v^-(-1 + 3e^{4\alpha} + e^{2\alpha}(-2 - 8\alpha + 4\alpha^2) + e^{4\alpha+2\beta} \\
& (-3 + 6k - 2\beta) + e^{2\beta}(1 + 6k + 6\beta) + 2e^{2(\alpha+\beta)}(1 - 6k(1 + 2\alpha^2) - 2\beta + \alpha^2(-2 + 4\beta) \\
& + \alpha(4 + 8\beta)) + 4(-e^{4\alpha} + e^{4\alpha+2\beta} + e^{2\alpha}(1 + 2\alpha) - 2e^{2\beta}\beta - e^{2(\alpha+\beta)}(1 - 2\beta + \alpha(2 + 4\beta)))v^+)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_{10}^- = & 2e^{2\alpha} - 2e^{4\alpha} - 2e^{2(\alpha+\beta)} + 2e^{4\alpha+2\beta} - 2e^{2\beta}k + 4e^{2(\alpha+\beta)}k - 2e^{4\alpha+2\beta}k + 4e^{2\alpha}\alpha \\
& - 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha - 4e^{2\alpha}\alpha^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2 + 8e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2 - 4e^{2\beta}\beta + 4e^{2(\alpha+\beta)}\beta - \\
& 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta - 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2\beta + 3e^{2\beta}\beta^2 - 2e^{2(\alpha+\beta)}\beta^2 - e^{4\alpha+2\beta}\beta^2 + e^{2\beta}k\beta^2 - 2e^{2(\alpha+\beta)}k\beta^2 + \\
& e^{4\alpha+2\beta}k\beta^2 + 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2\beta^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2\beta^2 - 4e^{2\beta}k(1 + e^{4\alpha} - 2e^{2\alpha}(1 + 2\alpha^2))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_{11}^- = & (1 + 3e^{4\alpha} - 4e^{2\alpha}(1 + \alpha) + e^{4\alpha+2\beta}(-3 + 2\beta) + e^{2\beta}(-1 + 6\beta - 4\beta^2) + 4e^{2(\alpha+\beta)}((-1 + \beta)^2 \\
& + \alpha(1 + 2\beta - 2\beta^2)))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_{12}^- = & -1 + 3e^{4\alpha} + e^{2\alpha}(-2 - 8\alpha + 4\alpha^2) + e^{4\alpha+2\beta}(-3 + 6k - 2\beta) + e^{2\beta}(1 + 6k + 6\beta) + \\
& 2e^{2(\alpha+\beta)}(1 - 6k(1 + 2\alpha^2) - 2\beta + \alpha^2(-2 + 4\beta) + \alpha(4 + 8\beta)) + 4(-e^{4\alpha} + e^{4\alpha+2\beta} + \\
& e^{2\alpha}(1 + 2\alpha) - 2e^{2\beta}\beta - e^{2(\alpha+\beta)}(1 - 2\beta + \alpha(2 + 4\beta)))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_{20}^- = & -3 - 2e^{2\alpha} + 5e^{4\alpha} + 3e^{2\beta} + 2e^{2(\alpha+\beta)} - 5e^{4\alpha+2\beta} + 3k - 6e^{2\alpha}k + 3e^{4\alpha}k + 5e^{2\beta}k \\
& - 10e^{2(\alpha+\beta)}k + 5e^{4\alpha+2\beta}k + 16e^{2\alpha}\alpha - 16e^{2(\alpha+\beta)}\alpha + 4e^{2\alpha}\alpha^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2 - 12e^{2\alpha}k\alpha^2 \\
& - 20e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2 - 10e^{2\beta}\beta + 4e^{2(\alpha+\beta)}\beta + 6e^{4\alpha+2\beta}\beta - 6e^{2\beta}k\beta + 12e^{2(\alpha+\beta)}k\beta - 6e^{4\alpha+2\beta}k\beta \\
& + 32e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta - 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2\beta + 24e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2\beta + 6e^{2\beta}\beta^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}\beta^2 - 2e^{4\alpha+2\beta}\beta^2 \\
& + 2e^{2\beta}k\beta^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\beta^2 + 2e^{4\alpha+2\beta}k\beta^2 - 16e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta^2 + 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2\beta^2 - 8e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2\beta^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_{21}^- = & 8e^{2\beta}k(1 + e^{4\alpha} - 2e^{2\alpha}(1 + 2\alpha^2))(v^-)^2 + 2v^+ + 4e^{2\alpha}v^+ - 6e^{4\alpha}v^+ - 2e^{2\beta}v^+ - 4e^{2(\alpha+\beta)}v^+ + \\
& 6e^{4\alpha+2\beta}v^+ - 16e^{2\alpha}\alpha v^+ + 16e^{2(\alpha+\beta)}\alpha v^+ + 12e^{2\beta}\beta v^+ - 8e^{2(\alpha+\beta)}\beta v^+ - 4e^{4\alpha+2\beta}\beta v^+ - \\
& 32e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta v^+ - 8e^{2\beta}\beta^2 v^+ + 8e^{2(\alpha+\beta)}\beta^2 v^+ + 16e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta^2 v^+
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_{22}^- = & 1 - 2k - e^{4\alpha}(3 + 2k) + e^{2\alpha}(2 - 8\alpha - 4\alpha^2 + k(4 + 8\alpha^2)) + e^{4\alpha+2\beta}(-1 + 2k)(-3 + 2\beta) + e^{2\beta} \\
& (-1 + 6\beta + k(-6 + 4\beta)) - 2e^{2(\alpha+\beta)}(1 + 2\beta + 2k(1 + 2\alpha^2)(-3 + 2\beta) - 2\alpha^2(1 + 2\beta) + \alpha(-4 + 8\beta))
\end{aligned}$$

$$c_{23}^- = (-e^{4\alpha} + e^{4\alpha+2\beta} + e^{2\alpha}(1 - 2\alpha) + 2e^{2\beta}\beta - e^{2(\alpha+\beta)}(1 + 2\beta + \alpha(-2 + 4\beta)))$$

$$\begin{aligned} d_{10}^- = & -1 - 2e^{2\alpha} + 3e^{4\alpha} + e^{2\beta} + 2e^{2(\alpha+\beta)} - 3e^{4\alpha+2\beta} + k - 2e^{2\alpha}k + e^{4\alpha}k + 3e^{2\beta}k - 6e^{2(\alpha+\beta)}k \\ & + 3e^{4\alpha+2\beta}k - 8e^{2\alpha}\alpha + 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha + 4e^{2\alpha}\alpha^2 - 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2 - 4e^{2\alpha}k\alpha^2 - 12e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2 \\ & + 6e^{2\beta}\beta - 4e^{2(\alpha+\beta)}\beta - 2e^{4\alpha+2\beta}\beta + 2e^{2\beta}k\beta - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\beta + 2e^{4\alpha+2\beta}k\beta + 16e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta \\ & + 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2\beta - 8e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2\beta - 4e^{2\beta}k(1 + e^{4\alpha} - 2e^{2\alpha}(1 + 2\alpha^2)) \end{aligned}$$

$$d_{11}^- = (-e^{4\alpha} + e^{4\alpha+2\beta} + e^{2\alpha}(1 + 2\alpha) - 2e^{2\beta}\beta - e^{2(\alpha+\beta)}(1 + 2\alpha - 2\beta + 4\alpha\beta))$$

$$\begin{aligned} d_{20}^- = & 1 + 2e^{2\alpha} - 3e^{4\alpha} - e^{2\beta} - 2e^{2(\alpha+\beta)} + 3e^{4\alpha+2\beta} - k + 2e^{2\alpha}k - e^{4\alpha}k - 3e^{2\beta}k + 6e^{2(\alpha+\beta)}k \\ & - 3e^{4\alpha+2\beta}k - 8e^{2\alpha}\alpha + 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha - 4e^{2\alpha}\alpha^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2 + 4e^{2\alpha}k\alpha^2 + 12e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2 + \\ & 6e^{2\beta}\beta - 4e^{2(\alpha+\beta)}\beta - 2e^{4\alpha+2\beta}\beta + 2e^{2\beta}k\beta - 4e^{2(\alpha+\beta)}k\beta + 2e^{4\alpha+2\beta}k\beta - 16e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta + \\ & 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2\beta - 8e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2\beta \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_{21}^- = & (1 + e^{4\alpha} - 2e^{2\alpha}(1 + 2\alpha^2))v^- - 4(-e^{4\alpha} + e^{4\alpha+2\beta} + e^{2\alpha}(1 - 2\alpha) + 2e^{2\beta}\beta - e^{2(\alpha+\beta)} \\ & (1 - 2\alpha + 2\beta + 4\alpha\beta)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \gamma = & 3 + 8e^{2\alpha} - 3e^{4\alpha} - 9e^{2\beta} + 6e^{4\beta} - 24e^{2(\alpha+\beta)} - 6e^{4(\alpha+\beta)} + 9e^{4\alpha+2\beta} \\ & + 16e^{2\alpha+4\beta} - 9k - 11e^{2\alpha}k + 8e^{4\alpha}k + 8e^{2\beta}k - 3e^{4\beta}k + 48e^{2(\alpha+\beta)}k + \\ & 12e^{4(\alpha+\beta)}k - 32e^{4\alpha+2\beta}k - 21e^{2\alpha+4\beta}k + 9k^2 + 3e^{4\alpha}k^2 + 9e^{2\beta}k^2 + \\ & 2e^{4\beta}k^2 - 48e^{2(\alpha+\beta)}k^2 - 6e^{4(\alpha+\beta)}k^2 + 23e^{4\alpha+2\beta}k^2 + 8e^{2\alpha+4\beta}k^2 - 3k^3 \\ & + 3e^{2\alpha}k^3 - 8e^{2\beta}k^3 + 3e^{4\beta}k^3 + 8e^{2(\alpha+\beta)}k^3 - 3e^{2\alpha+4\beta}k^3 + 12e^{2\alpha}\alpha - \\ & 36e^{2(\alpha+\beta)}\alpha + 24e^{2\alpha+4\beta}\alpha - 26e^{2\alpha}k\alpha + 80e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha - 38e^{2\alpha+4\beta}k\alpha + \\ & 20e^{2\alpha}k^2\alpha - 28e^{2(\alpha+\beta)}k^2\alpha + 8e^{2\alpha+4\beta}k^2\alpha - 6e^{2\alpha}k^3\alpha - 16e^{2(\alpha+\beta)}k^3\alpha \\ & + 6e^{2\alpha+4\beta}k^3\alpha - 4e^{2\alpha}\alpha^2 + 12e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2 - 8e^{2\alpha+4\beta}\alpha^2 + 16e^{2\alpha}k\alpha^2 - \\ & 12e^{2\alpha}k^2\alpha^2 - 44e^{2(\alpha+\beta)}k^2\alpha^2 + 8e^{2\alpha+4\beta}k^2\alpha^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta = & 6e^{2\beta}\beta - 16e^{2(\alpha+\beta)}\beta + 6e^{4\alpha+2\beta}\beta - 4e^{2\beta}k\beta + 20e^{2(\alpha+\beta)}k\beta - 16e^{4\alpha+2\beta}k\beta \\ & + 22e^{2\beta}k^2\beta - 16e^{2(\alpha+\beta)}k^2\beta + 10e^{4\alpha+2\beta}k^2\beta - 12e^{2\beta}k^3\beta + 12e^{2(\alpha+\beta)}k^3\beta - \\ & 24e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta + 56e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha\beta + 56e^{2(\alpha+\beta)}k^2\alpha\beta - 24e^{2(\alpha+\beta)}k^3\alpha\beta + 8e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2\beta \\ & + 32e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2\beta - 40e^{2(\alpha+\beta)}k^2\alpha^2\beta - 12e^{2\beta}\beta^2 - 32e^{2(\alpha+\beta)}\beta^2 + 12e^{4\alpha+2\beta}\beta^2 + \\ & 20e^{2\beta}k\beta^2 + 4e^{2(\alpha+\beta)}k\beta^2 - 8e^{4\alpha+2\beta}k\beta^2 - 12e^{2\beta}k^2\beta^2 - 4e^{4\alpha+2\beta}k^2\beta^2 + 4e^{2\beta}k^3\beta^2 \\ & - 4e^{2(\alpha+\beta)}k^3\beta^2 - 48e^{2(\alpha+\beta)}\alpha\beta^2 + 56e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha\beta^2 - 16e^{2(\alpha+\beta)}k^2\alpha\beta^2 + 8e^{2(\alpha+\beta)}k^3\alpha\beta^2 \\ & + 16e^{2(\alpha+\beta)}\alpha^2\beta^2 - 32e^{2(\alpha+\beta)}k\alpha^2\beta^2 + 16e^{2(\alpha+\beta)}k^2\alpha^2\beta^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi = & 2(-2 + e^{4\alpha}(2 - 6k) + 5k - 6k^2 + 3k^3 + 2e^{4(\alpha+\beta)}(2 - 3k + k^2) + \\ & e^{4\beta}(-4 + k - 2k^2 - 3k^3) + e^{2\alpha}(-4(3 + 2\alpha) - 4k^2(3 + 5\alpha) + \\ & k^3(-3 + 6\alpha) + k(19 + 14\alpha)) + e^{2\alpha+4\beta}(-6k^2 + k^3(3 - 6\alpha) \\ & - 8(3 + 2\alpha) + k(23 + 22\alpha)) + 2e^{4\alpha+2\beta}(-3 - 3k^2 - 2\beta - 4\beta^2 \\ & + 2k(4 + \beta + 2\beta^2)) - 2e^{2\beta}(-3 - 2\beta - 4\beta^2 + k^2(2 + 6\beta - 4\beta^2) \\ & + 2k^3(-2 - 3\beta + \beta^2) + k(1 - 2\beta + 6\beta^2)) - 2e^{2(\alpha+\beta)}(2k^3(-1 + 2\alpha) \\ & (-2 - 3\beta + \beta^2) - 2(3 + 2\alpha)(3 + 2\beta + 4\beta^2) - k^2(17 - 6\beta + 8\beta^2 + \\ & \alpha(2 - 28\beta + 8\beta^2)) + k(25 + 4\beta + 10\beta^2 + 2\alpha(9 + 8\beta + 10\beta^2))) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi = & 8e^{2\alpha}(2 - 3k + 3k^2 + e^{4\beta}(4 - 3k + k^2) - 2e^{2\beta}(3 + 2\beta + 4\beta^2 + \\ & 2k^2(1 - \beta + \beta^2) - k(3 + 2\beta^2))) (v^+)^2 + 8e^{2\beta}k(v^-)^2(1 + 3k - 2k^2 \\ & + e^{4\alpha}(-5 + 7k) - 2e^{2\alpha}(k^2(-1 + 2\alpha) - 2(1 + 3\alpha + \alpha^2) \\ & + k(5 + 4\alpha + 6\alpha^2))) + 4(-1 + k)(-e^{4\alpha} + k + e^{2\alpha}(1 - k + 2\alpha + 2k\alpha))v^+ \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Y = & 2e^{4\alpha}k(3 + k) + e^{4(\alpha+\beta)}(-3 + 8k - 5k^2) - 2k(2 - 3k + k^2) + \\ & e^{4\beta}(3 - 4k + 3k^2 + 2k^3) - 2e^{2\alpha}k(5 + 8\alpha - 4\alpha^2 + 2k\alpha(-3 + 2\alpha) \\ & + k^2(-1 + 2\alpha)) + 2e^{2\alpha+4\beta}(4 + 6\alpha - 2\alpha^2 + k^3(-1 + 2\alpha) - \\ & 2k(3 + 7\alpha) + k^2(1 + 6\alpha + 2\alpha^2)) + e^{4\alpha+2\beta}(3 + 6\beta - 12k(3 + \beta) + \\ & k^2(37 + 6\beta)) + e^{2\beta}(-3 - 6\beta - 4k^3(3 + 2\beta) + k(6 + 8\beta) + k^2(17 + 14\beta)) - \\ & 2e^{2(\alpha+\beta)}(-2(-2 - 3\alpha + \alpha^2)(1 + 2\beta) + 2k^3(-1 + 2\alpha)(3 + 2\beta) - k(23 + 2\beta + \\ & 8\alpha^2(1 + \beta) + 14\alpha(3 + 2\beta)) + k^2(31 + 2\beta - 4\alpha(-5 + 4\beta) + 2\alpha^2(17 + 6\beta))) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Omega = & (e^{4(\alpha+\beta)}(-1 + k)^2 - 2e^{4\alpha}k + (-1 + k)^2k - e^{4\beta}(1 - k + k^2 + k^3) + \\ & e^{2\alpha}k(7 + 4\alpha + k^2(-1 + 2\alpha) - 2k(2 + 3\alpha)) + e^{2\alpha+4\beta}(-6 + k^3(1 - 2\alpha) \\ & - 4\alpha - 2k^2\alpha + k(7 + 8\alpha)) + e^{4\alpha+2\beta}(-1 - 5k^2 - 2\beta + 2k(4 + \beta)) \\ & + e^{2\beta}(1 + 2\beta - 2k\beta - k^2(5 + 4\beta) + k^3(6 + 4\beta)) + 2e^{2(\alpha+\beta)}((3 + 2\alpha)(1 + 2\beta) \\ & + k^3(-1 + 2\alpha)(3 + 2\beta) - 4k^2(-2 + \beta + 2\alpha\beta) - 2k(5 + 4\alpha(1 + \beta))))v^+ \\ & + 16e^{2\alpha}(-1 + k)(-e^{4\beta} + k + e^{2\beta}(1 + 2\beta + k(-1 + 2\beta))) (v^+)^2 \end{aligned}$$

Annexe II

Etapes de calcul du programme

Dans cette annexe, on présente une partie du programme élaboré pour le calcul et la simulation des différents champs élastiques.

Le vecteur de Burgers est défini par $b = (b_1, b_2, b_3)$.

On note la période par p , l'épaisseur de la couche supérieure par h , l'épaisseur de la couche inférieure par l .

On commence par la détermination des paramètres complexes pour la couche supérieure ($A^+, B^+, C^+, D^+, E^+, F^+$), pour la couche inférieure ($A^-, B^-, C^-, D^-, E^-, F^-$)

Le système d'équations

Le système d'équations est :

$$01/ A^+ + C^+ - A^- - C^- = i b_1 / 2 n \pi$$

$$02/ A^+ + (3 - 4 \nu^+) B^+ - C^+ + (3 - 4 \nu^+) D^+ - A^- - (3 - 4 \nu^-) B^- + C^- - (3 - 4 \nu^-) D^- = b_2 / 2 n \pi$$

$$03/ E^+ + F^+ - E^- - F^- = i b_3 / 2 n \pi$$

$$04/ k A^+ + k(1 - 2\nu^+) B^+ - k C^+ + k(1 - 2\nu^+) D^+ - A^- - (1 - 2\nu^-) B^- + C^- - (1 - 2\nu^-) D^- = 0$$

$$05/ -k A^+ - 2k(1 - \nu^+) B^+ - k C^+ + 2k(1 - \nu^+) D^+ + A^- + 2(1 - \nu^-) B^- + C^- - 2(1 - \nu^-) D^- = 0$$

$$06/ E^+ - F^+ - E^- + F^- = 0$$

$$07/ -A^+ - B^+(n\omega h^+ + 1 - 2\nu^+) + C^+ e^{2n\omega h^+} + D^+(n\omega h^+ - 1 + 2\nu^+) e^{2n\omega h^+} = 0$$

$$08/ E^+ - F^+ e^{2n\omega h^+} = 0$$

$$09/ A^+ + B^+(n\omega h^+ + 2 - 2\nu^+) + C^+ e^{2n\omega h^+} + D^+(n\omega h^+ - 2 + 2\nu^+) e^{2n\omega h^+} = 0$$

$$10/ -A^- - B^-(n\omega h^- + 1 - 2\nu^-) + C^- e^{2n\omega h^-} + D^-(n\omega h^- - 1 + 2\nu^-) e^{2n\omega h^-} = 0$$

$$11/ A^- + B^-(n\omega h^- + 2 - 2\nu^-) + C^- e^{2n\omega h^-} + D^-(n\omega h^- - 2 + 2\nu^-) e^{2n\omega h^-} = 0$$

$$12/ E^- - F^- e^{2n\omega h^-} = 0$$

$$\text{on pose : } e^{n\omega h^+} = e^\alpha, e^{n\omega h^-} = e^\beta, \alpha = n\omega h^+, \beta = n\omega h^-$$

II. 1. Etapes de calcul du programme

L'exécution de notre programme permet de faire les calculs suivants:

1°/ détermination des paramètres $A^+, B^+, C^+, D^+, E^+, F^+, A^-, B^-, C^-, D^-, E^-$ et F^- .

2°/ calculer les parties réelles et les parties imaginaires de ces paramètres.

3°/ Les paramètres qui nous avons déjà calculé sont injectés dans les expressions de déplacements pour calculer :

- a/ l'erreur relative à l'interface ($x_2 = 0$).
- b/ l'évolution du déplacement relatif Δu à l'interface en fonction de x_1 ($x_2 = 0$) en faisant varier le nombre harmonique n ($n=5,10, 20,40, 80, 500,1000,2000$).
- c/ le déplacement des unités structurales autour de la dislocation dans un plan (x_1, x_2)
- d/la vérification de superposition graphique de Δu en fonction de x_1 (théorique et numérique)
- e/la dispersion des iso-déplacements dans le plan (x_1, x_2)
- 4°/ à partir de la loi de Hooke et en connaissant le champ des déplacements, le programme permet aussi de calculer:
- a/ l'évolution des contraintes en fonction de x_2
- b/ l'évolution graphique des contraintes en fonction de x_2 (quelque variantes)
- c/ la dispersion des iso-contraintes dans le plan (x_1, x_2)

II 2. Le calcul des paramètres ci-dessous par le code Mathématica

Le système d'équations s'écrit sous la forme d'un produit matriciel :

$$A.X=B$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 3-4\nu^+ & -1 & 3-4\nu^+ & -1 & -3+4\nu^- & 1 & -3+4\nu^- \\ -k & k(-1+2\nu^+) & k & k(-1+2\nu^+) & 1 & 1-2\nu^- & -1 & 1-2\nu^- \\ -k & -2k(1-\nu^+) & -k & 2k(1-\nu^+) & 1 & 2(1-\nu^-) & 1 & -2(1-\nu^-) \\ 1 & 1+\alpha-2\nu^+ & -e^{2\alpha} & e^{2\alpha}(1-\alpha-2\nu^+) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2+\alpha-2\nu^+ & e^{2\alpha} & e^{2\alpha}(-2+\alpha+2\nu^+) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1+\beta-2\nu^- & -e^{2\beta} & e^{2\beta}(1-\beta-2\nu^-) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2+\beta-2\nu^- & e^{2\beta} & e^{2\beta}(-2+\beta+2\nu^-) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^+ \\ B^+ \\ C^+ \\ D^+ \\ A^- \\ B^- \\ C^- \\ D^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i b_1/2n\pi \\ b_2/2n\pi \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

A **X**

II 3. Les données de solution

$$\begin{aligned} \nu^+ (\text{cuivre}) &= 0.2546; \nu^- (\text{fer}) = 0.3217; \mu^+ (\text{cuivre}) = 117.; \mu^- (\text{fer}) = 75.4; \\ \alpha &= n \omega h; \beta = n \omega l; k = \frac{\mu^+}{\mu^-}; \{\omega, p, h, l, x1, x2, x3, b1, b2, b3\} \in \text{Reals}; \\ a_{rd}^+[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; a_{im}^+[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; b_{rd}^+[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; b_{im}^+[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; \\ c_{rd}^+[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; c_{im}^+[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; d_{rd}^+[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; d_{im}^+[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; \\ a_{rd}^-[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; a_{im}^-[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; b_{rd}^-[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; b_{im}^-[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; \\ c_{rd}^-[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; c_{im}^-[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; d_{rd}^-[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; d_{im}^-[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; \\ \Delta &= \text{del}[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; \\ e_{rd}^+[\omega_-, h_-, l_-, n_-] &= 0; f_{rd}^+[\omega_-, h_-, l_-, n_-] = 0; \\ e_{rd}^-[\omega_-, h_-, l_-, n_-] &= 0; f_{rd}^-[\omega_-, h_-, l_-, n_-] = 0; e_{im}^+[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; \\ f_{im}^+[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; e_{im}^-[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; f_{im}^-[\omega_-, h_-, l_-, n_-]; \\ \text{gam}[\omega_-, h_-, l_-, n_-] &= -e^{2n\omega(1+h)} (-1 + k) + 2k + e^{2n\omega l} (1 + k); \end{aligned}$$

II 4. Champs des déplacements pour la couche supérieure

$$\begin{aligned} \mathbf{u1p}[\omega_-, h_-, l_-, y_-, \mathbf{x2}_-, \mathbf{b1}_-, \mathbf{b2}_-, \mathbf{b3}_-] &:= \text{Simplify}[\text{Sum}[b2 ((a_{rd}^+[\omega, h, l, n] + \\ n \omega b_{rd}^+[\omega, h, l, n] x2) \text{Exp}[-n \omega x2] + (c_{re}^+[\omega, h, l, n] + n \omega d_{rd}^+[\omega, h, l, n] x2) \\ \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Cos}[n \omega y b1] / (n \text{Pi} \text{del}[\omega, h, l, n]) - b1 ((a_{im}^+[\omega, h, l, n] + \\ n \omega b_{im}^+[\omega, h, l, n] x2) \text{Exp}[-n \omega x2] + (c_{im}^+[\omega, h, l, n] + n \omega d_{im}^+[\omega, h, l, n] x2) \\ \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Sin}[n \omega y b1] / n \text{Pi} \text{del}[\omega, h, l, n] , \{\mathbf{n}, 1, 100\}], \text{TimeConstraint} \rightarrow 300] \\ \mathbf{u2p}[\omega_-, h_-, l_-, \mathbf{x1}_-, \mathbf{x2}_-, \mathbf{b1}_-, \mathbf{b2}_-, \mathbf{b3}_-] &:= \text{Simplify}[\text{Sum}[b1 ((a_{im}^+[\omega, h, l, n] + \\ (n \omega x2 + 3 - 4 \nu^+) b_{im}^+[\omega, h, l, n]) \text{Exp}[-n \omega x2] - (c_{im}^+[\omega, h, l, n] - d_{im}^+[\omega, h, l, n] \\ (-n \omega x2 + 3 - 4 \nu^+)) \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Cos}[n \omega x1] / (n \text{Pi} \text{del}[\omega, h, l, n]) - b2 ((a_{re}^+[\omega, h, l, n] \\ + (n \omega x2 + 3 - 4 \nu^+) b_{re}^+[\omega, h, l, n]) \text{Exp}[-n \omega x2] - (c_{rd}^+[\omega, h, l, n] + d_{rd}^+[\omega, h, l, n] \\ (-n \omega x2 + 3 - 4 \nu^+)) \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Sin}[n \omega x1] / n \text{Pi} \text{del}[\omega, h, l, n] , \{\mathbf{n}, 1, 100\}], \\ \text{TimeConstraint} \rightarrow 300] \end{aligned}$$

II. 5. Champs des déplacements pour la couche inférieure

$u1m[\omega_ , h_ , l_ , y_ , x2_ , b1_ , b2_ , b3_] := \text{Simplify}[\text{Sum}[b2 ((a_{rd}^-[\omega, h, l, n] + n \omega b_{rd}^-[\omega, h, l, n] x2) \text{Exp}[-n \omega x2] + (c_{re}^-[\omega, h, l, n] + n \omega d_{rd}^-[\omega, h, l, n] x2) \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Cos}[n \omega y b1] / (n \text{Pi del}[\omega, h, l, n]) - b1 ((a_{im}^-[\omega, h, l, n] + n \omega b_{im}^-[\omega, h, l, n] x2) \text{Exp}[-n \omega x2] + (c_{im}^-[\omega, h, l, n] + n \omega d_{im}^-[\omega, h, l, n] x2) \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Sin}[n \omega y b1] / n \text{Pi del}[\omega, h, l, n] , \{n, 1, 100\}], \text{TimeConstraint} \rightarrow 300]$

$u2m[\omega_ , h_ , l_ , x1_ , x2_ , b1_ , b2_ , b3_] := \text{Simplify}[\text{Sum}[b1 ((a_{im}^-[\omega, h, l, n] + (n \omega x2 + 3 - 4 \nu^-) b_{im}^-[\omega, h, l, n]) \text{Exp}[-n \omega x2] - (c_{im}^-[\omega, h, l, n] - d_{im}^-[\omega, h, l, n] (-n \omega x2 + 3 - 4 \nu^-)) \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Cos}[n \omega x1] / (n \text{Pi del}[\omega, h, l, n]) - b2 ((a_{re}^+[\omega, h, l, n] + (n \omega x2 + 3 - 4 \nu^-) b_{re}^-[\omega, h, l, n]) \text{Exp}[-n \omega x2] - (c_{rd}^-[\omega, h, l, n] + d_{rd}^-[\omega, h, l, n] (-n \omega x2 + 3 - 4 \nu^-)) \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Sin}[n \omega x1] / n \text{Pi del}[\omega, h, l, n] , \{n, 1, 100\}], \text{TimeConstraint} \rightarrow 300]$

II .6. Calcul d'erreur

$b = \Delta u[\omega_ , h_ , l_ , x1_ , x2_ , b1_ , b2_ , b3_] := u1p[\omega, h, l, y, x2, b1, b2, b3] - u1m[\omega, h, l, y, x2, b1, b2, b3]$

$a = \Delta w[x1_ , b1_] := \text{Simplify}[(b1 / 15.1032) * x1 - b1 / 2]$

$\text{Abs}[\Delta R = (b - a) / a]$

II. 7. Champs des contraintes pour la couche Supérieure

$\sigma11p[\omega_ , h_ , l_ , x1_ , x2_ , b1_ , b2_ , b3_] := \text{Simplify}[2 \omega \mu^+ \text{Sum}[b1 ((a_{im}^+[\omega, h, l, n] + b_{im}^+[\omega, h, l, n] (n \omega x2 - 2 \nu^+)) \text{Exp}[-n \omega x2] + (c_{im}^+[\omega, h, l, n] + d_{im}^+[\omega, h, l, n] (n \omega x2 + 2 \nu^+)) \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Cos}[n \omega x1] / (\text{Pi del}[\omega, h, l, n]) - b2 ((a_{rd}^+[\omega, h, l, n] + b_{rd}^+[\omega, h, l, n] (n \omega x2 - 2 \nu^+)) \text{Exp}[-n \omega x2] + (c_{re}^+[\omega, h, l, n] + d_{re}^+[\omega, h, l, n] (n \omega x2 + 2 \nu^+)) \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Sin}[n \omega x1] / (\text{Pi del}[\omega, h, l, n]), \{n, 1, 100\}], \text{TimeConstraint} \rightarrow 300]$

$\sigma22p[\omega_ , h_ , l_ , x1_ , x2_ , b1_ , b2_ , b3_] := \text{Simplify}[-2 \omega \mu^+ \text{Sum}[b1 ((a_{im}^+[\omega, h, l, n] + b_{im}^+[\omega, h, l, n] (n \omega x2 + 2 - 2 \nu^+)) \text{Exp}[-n \omega x2] + (c_{im}^+[\omega, h, l, n] + d_{im}^+[\omega, h, l, n] (n \omega x2 - 2 + 2 \nu^+)) \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Cos}[n \omega x1] / (\text{Pi del}[\omega, h, l, n]) - b2 ((a_{rd}^+[\omega, h, l, n] + b_{rd}^+[\omega, h, l, n] (n \omega x2 + 2 - 2 \nu^+)) \text{Exp}[-n \omega x2] + (c_{re}^+[\omega, h, l, n] + d_{re}^+[\omega, h, l, n] (n \omega x2 - 2 + 2 \nu^+)) \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Sin}[n \omega x1] / (\text{Pi del}[\omega, h, l, n]), \{n, 1, 100\}], \text{TimeConstraint} \rightarrow 300]$

II. 8. Champs des contraintes pour la couche inferieure

$\sigma_{11m}[\omega, h, l, x1, x2, b1, b2, b3] := \text{Simplify}[2 \omega \mu^- \text{Sum}[b1 ((a_{im}^-[\omega, h, l, n] + b_{im}^-[\omega, h, l, n] (n \omega x2 - 2 \nu^-)) \text{Exp}[-n \omega x2] + (c_{im}^-[\omega, h, l, n] + d_{im}^-[\omega, h, l, n] (n \omega x2 + 2 \nu^-)) \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Cos}[n \omega x1] / (\text{Pi del}[\omega, h, l, n]) - b2 ((a_{re}^-[\omega, h, l, n] + b_{re}^-[\omega, h, l, n] (n \omega x2 - 2 \nu^-)) \text{Exp}[-n \omega x2] + (c_{re}^-[\omega, h, l, n] + d_{re}^-[\omega, h, l, n] (n \omega x2 + 2 \nu^-)) \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Sin}[n \omega x1] / (\text{Pi del}[\omega, h, l, n]), \{n, 1, 100\}], \text{TimeConstraint} \rightarrow 300]$

$\sigma_{22m}[\omega, h, l, x1, x2, b1, b2, b3] := \text{Simplify}[-2 \omega \mu^- \text{Sum}[b1 ((a_{im}^-[\omega, h, l, n] + b_{im}^-[\omega, h, l, n] (n \omega x2 + 2 - 2 \nu^-)) \text{Exp}[-n \omega x2] + (c_{im}^-[\omega, h, l, n] + d_{im}^-[\omega, h, l, n] (n \omega x2 - 2 + 2 \nu^-)) \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Cos}[n \omega x1] / (\text{Pi del}[\omega, h, l, n]) - b2 ((a_{re}^-[\omega, h, l, n] + b_{re}^-[\omega, h, l, n] (n \omega x2 + 2 - 2 \nu^-)) \text{Exp}[-n \omega x2] + (c_{re}^+[\omega, h, l, n] + d_{re}^-[\omega, h, l, n] (n \omega x2 - 2 + 2 \nu^-)) \text{Exp}[n \omega x2]) \text{Sin}[n \omega x1] / (\text{Pi del}[\omega, h, l, n]), \{n, 1, 100\}], \text{TimeConstraint} \rightarrow 300]$

Références Bibliographiques

- [1] V. Volterra, Ann. Ecole Norm. Sup., 24, 400 (1907).
- [2] Burgers J. M., Proc. K. Ned. Aked. West. Amst., 42, 293 (1939).
- [3] J. Bastecka, Czech. J. phys. B15, p : 595-601 (1965).
- [4] R. Bonnet et J. L. Verger-Gaugret, phil. Mag. A. Vol., 66, N° 5, p: 849-871 (1992).
- [5] R. Bonnet, C. R., Acad. Sci. Paris, t. 327, Série II b, p: 1331-1336 (1999).
- [6] R. Bonnet, C. R. Physique 4 p : 961-966, (2003).
- [7] J. V. Barth et D. E. Fowier, Phys. Rev. B, Vol. 52, N°15, p: 432 – 440 (1995).
- [8] S. Nedelcu, p. Kizlert, S. Schmauder et N. Moldovan, Mod. Simul. Mater. Sci. Eng.8 p: 181 -191 (2000).
- [9] S. Y. Hu, Y.L. Li, et L. Q. Chen, J. Appl. Pysi. Vol. 94, N°4, p: 2542 – 2547 (2003).
- [10] D. Spišák et J. Hafner, J. Mag. and Magn. Mater. 272-276, p :1184 – 1185 (2004).
- [11] R. Bonnet et S. Youssef, C. R. Physique 7 p : 567-572, (2006).
- [12] Jae-Hyeok Shim et Young Whan Cho, J. Appl. Phys. Let. 90, 021906 (2007).
- [13] S. P. Fitzgerald et S. L. Dudarev, Proc. R. Soc. A 464 p : 2549 – 2559 (2008).
- [14] Soon-Gun Lee et Young-chaе Chung, J. Vac. Sci. Technol. A 26 (6) p : 1392 – 1396 (2008).
- [15] V.G Myagkov, O. A. Bayukov, L. E. Bykova et G. N.Bondarenko, J. Mag. and Magn. Mater.321p: 2260 – 2264 (2009).
- [16] G. Sainfort, J. J. Bacmann, G. Silvestre et B. Michaut, J. Phys. C4, sup. au n°10, Tome 36 p : 35 – 41 (1975).
- [17] B. G. Demczyk, V. M. Naik, G. W. Auner, A. Lukaszew and R. Naik, J. Appl. Phys. 80 N°9, p: 5035 - 5038 (1996).
- [18] R. Bonnet, Karine Rousseau et Frank Fournel, C. R. Physique 3 p : 657-663, (2002)
- [19] Ahlem Boussaid, Mustapha Fnaiech et R. Bonnet, C. R. Physique 6 p: 145-150, (2005)
- [20] S. Youssef, Salem Neily, Anton K. Gutakowskii et R. Bonnet, Scripta Mater. 58 p:1 – 4 (2008).
- [21] S. B. Mi, C. L. Jia, Q. T. Zhao, S. Mantl et K. Urban, Acta Materialia 57 p:232 – 236 (2009).
- [22] X.J. Wang, Y. B. Hou, Y. Chang, C. R. Becker, R. F. Klie, T. W. Kang, R. Sporcken et S. Sivananthan, J. Cry. Growth 311 p: 2359 -2362 (2009).
- [23] J. Coelho, G. Patriarche, F. Glas, G. Saint-Girons, I. Sagnes, and L. Largeau, Phys. Rev. B 70, 155329 (2004)

- [24]** Makhloufi R., Mémoire de Magistère de l'université de Batna, (2010).
- [25]** J. P. Hirht and J. Lothe, Theory of dislocations, 2nd. Ed., Wiley. New York p.837 (1982)
- [26]** Brioua M. Thèse de doctorat de l'université de Batna, (2005)
- [27]** Madani, S.,Thèse de Magistère de l'université de Batna, (1997).

ملخص

في إطار تحديد مجالات المرنة الضرورية في الأبحاث التجريبية المعمقة ، بما في ذلك المشاهدات بالمجهر الإلكتروني (MET و METHR)، قمنا بإعداد برنامج بلغة « Mathematica » لحساب الحقول المرنة في حالة وجود شبكة خلوع متوازية غير متطابقة من نوع "misfit" والتي تقع في واجهة ثنائية بلورية رقيقة ذات مرونة متماثلة الخواص. نستعمل سلاسل "فورييه Fourier" في صياغة طريقة التحليل المعتمدة. وقد تمكن تطبيقها على المحاكاة لحقول الانتقال، والاجهادات النسبية الحاصلة لثنائية رقيقة Cu/(001) Fe. النتائج المحصل عليها مطابقة لمضمون نظرية طبقت آنفا.

كلمات البحث : ثنائية رقيقة، مرونة متماثلة الخواص، شبكات الخلوع، واجهة

Résumé

Dans le cadre de la détermination des champs élastiques indispensables aux investigations expérimentales, notamment les observations en microscopie électronique (MET et METHR), nous avons élaboré un programme en langage MATHEMATICA qui calcule les champs élastiques dans le cas d'un réseau parallèle de dislocations de désaccord appelées « misfit » de type coins situé à l'interface d'un bicristal mince en élasticité isotrope. La méthode analytique adoptée est une formulation en séries de Fourier. Son application a permis la simulation des champs de déplacements, de contraintes relatifs à un bilame mince Cu/(001) Fe. Les résultats obtenus confirment une théorie déjà bien établie.

Mots-clés: bilame, élasticité isotrope, réseaux de dislocations, interface

Abstract

In order to determine the elastic fields, essential for the experimental investigations, particularly for the microscopic observations such as TEM or HRTEM, we built a MATHEMATICA program which can calculate the isotropic elastic fields in the case of bifoil. The interface between the two layers of the epitaxial system is covered by a parallel network of misfit edge dislocations. In this aim, the analytical method use is a formulation in a Fourier series. This method seems to be rigorous in the simulation of the displacement and stress fields. Through an application to the thin bilayer Cu/(001) Fe, it can be noted that the results confirm an established theory

Keywords: bifoil, isotropic elasticity, dislocation networks, interface