

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

THESE

Présentée

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

Pour obtenir le titre de

DOCTEUR D'ETAT EN GENIE MECANIQUE

Par
Mr MADANI SALAH

*Organisation des nanostructures par des réseaux carrés
de dislocations enterrés sur des substrats de silicium Si
et d'alliage de gallium arséniure GaAs.*

Soutenue publiquement le 03 Décembre 2006, devant le jury composé de :

Dr Kamel GUERGOURI	Professeur, Université de Constantine	Président
Dr Lahbib ADAMI	Professeur, Université de Batna	Encadreur
Dr Toufik OUTTAS	M.Conférences, Université de Batna	Co-encadreur
Dr Abdelaziz ATI	Professeur, Université de Bédjaia	Examineur
Dr Nedjat ROUAG	Professeur, Université de Constantine	Examineur
Dr Belkaçem Aissa BOUZIDA	Professeur, Université de Batna	Examineur
Dr Kamel TAIBI	M.Conférences, USTHB-Alger-	Examineur

Remerciements

Je tiens à remercier ici :

- *Mon encadreur le Professeur Labbib ADAMI pour ses conseils et son constant soutien, je lui exprime ici mon attachement et ma profonde reconnaissance pour la confiance qu'il m'a témoignée.*
- *Le Docteur Toufik Outtas, mon co-encadreur de thèse, qui a suivi ce travail avec un intérêt particulier.*
- *Monsieur Kamel GUERGOURI, Professeur à l'Université de Constantine, d'avoir accepté de présider le jury.*

J'adresse aussi mes sincères remerciements au :

Professeur Abdelaziz Ati de l'Université de Bédjaia;
Professeur Nadjet ROUAG de l'Université de Constantine ;
Professeur Belkaçem Aissa BOUZIDA de l'Université de Batna ;
Docteur Kamel TAIBI de l'USTHB-Alger

de m'avoir fait l'honneur d'accepter de participer à mon jury de thèse.

Mon travail n'aurait pas pu être mené à bien sans le soutien et l'encouragement de nombreuses personnes du département de Mécanique de l'Université de Batna. Je remercie en particulier Wahid Kaddouri, Batache Djamel, Zaouch Boubaker, Derardja Akila, Brinoa Mourad, Benbouta Rachid, Mohamedi Brahim et Abassi Messaoud.

Chapitre 4 Formulation du problème en élasticité anisotrope	48
Introduction.....	48
IV.1. Géométrie du problème.....	49
IV.1.1. Champ des déplacements	50
IV.1.2. Expression finale du champ des déplacements.....	56
IV.1.3. Champ des contraintes.....	57
IV.2. Conditions aux limites.....	59
IV.2.1. Condition de convergence.....	60
IV.2.2. Conditions en déplacements.....	60
IV.2.3. Conditions en contraintes.....	61
IV.3. Système d'équation final à résoudre.....	62
IV.4. Champ élastique d'un réseau carré de dislocation par le principe de superposition.....	64
IV.4.1. Champ des déplacements.....	64
IV.4.2. Champ des contraintes	65
IV.4.3. Energie de déformation élastique.....	66
Chapitre 5 Expérimentation numérique	68
V.1. Validation du programme de calcul élaboré.....	68
V.2. Application numérique.....	70
V.2.1. Matériaux utilisés.....	70
V.2.1.1. le silicium (Si)	70
V.2.1.2. L'arsenic de gallium (GaAs).....	72
V.2.2. Champs et énergie élastiques produits en surface par un réseau de dislocations faiblement enterré accommodant une torsion.....	73
V.2.2.1. Joint de torsion Si/Si(001).....	73
1. Champs des déplacements	73
2. Champs de déformation et de contrainte.....	76
3. Energie	82
V.2.2.2. Joint de torsion GaAs/GaAs (001).....	84
1. Champs des déplacements	84
2. Champs de déformation et de contrainte.....	85
3. Energie	87
V.2.3. Champs élastiques produits en surface par un réseau de dislocations faiblement enterré accommodant une flexion.....	89
V.2.4. Champs élastiques produits en surface par un réseau de dislocations faiblement enterré accommodant un désaccord paramétrique.....	92
Conclusion Générale	96
Perspectives	100
Annexes	
Annexe 1 Le collage moléculaire.....	102
Annexe 2 Qu'est-ce qu'une surface vicinale ?.....	106
Annexe 3 La lithographie.....	108
Bibliographie	

Liste des figures

FIG.1.1 :	Chronologie de miniaturisation des circuits électroniques [3].....	7
FIG.1.2 :	Observations au microscope électronique à balayage de nanotubes de carbone sur un support de silicium (x 150000) [3].....	9
FIG.1.3 :	Protéine greffée sur un nanotube de carbone. [3].....	9
FIG.2.1:	Structures d'hétéroépitaxies accordée en maille, contrainte et relaxée (l'hétéroépitaxie accordée en maille est similaire à l'homoépitaxie).....	11
FIG. 2.2:	Schéma de principe d'une croissance par épitaxie par jets moléculaires [6].....	12
FIG. 2.3:	Croissance d'un film mince semiconducteur III-V cubique. Projection sur le plan (100).....	13
FIG. 2.4:	Puits quantique cohérent de 2 MC de ZnTe (les flèches pointent les interfaces) dans CdTe orienté (001) (image HRTEM dans la direction <110>, [9]).....	14
FIG. 2.5:	Image HRTEM (dans la direction <112>) de l'épitaxie du CdTe ($a = 6,4810 \text{ \AA}$) sur GaAs ($a_{AS} = 5,6533 \text{ \AA}$) orienté-(001) (source : équipe mixte CEA-CNRS Grenoble).	14
FIG. 2.6:	Les différents modes de croissance pour un film mince.....	15
FIG. 2.7:	Mouillage du film sur le substrat.....	18
FIG. 2.8:	Région de stabilité pour les 3 modes de croissance en fonction des tensions de surface, d'interface et du désaccord de maille [12].....	18
FIG. 2.9:	Un exemple de croissance Ge/Si(001), en épitaxie par jets moléculaires. Quantité équivalente de Ge déposée : 9 \AA . Température du substrat : 550°C . Échelle de l'image : $700 \times 700 \text{ nm}$	20
FIG.2.10:	Schéma de principe de l'auto-organisation par des réseaux de dislocation enterrés.	24
FIG.2.11:	Principe du collage moléculaire.....	25
FIG.2.12 :	Les différentes désorientations cristallines possibles lors du collage et les réseaux dislocations qu'engendre le raccordement cristallin.....	26
FIG. 2.13:	a) Définition de l'angle de vicinalité de deux surfaces avant leur mise en contact. b) Formation du réseau de dislocations coin pour relaxer les contraintes dues à la désorientation de flexion entre les deux cristaux.....	28

FIG. 2.14:	a) Image de Moiré obtenue en superposant deux réseaux carré identiques tournés l'un par rapport à l'autre d'un angle $\varphi/2$. b) Appariation du le réseau carré de dislocations vis.....	29
FIG. 2.15:	Périodicité des réseaux de dislocations en fonction de l'angle de désorientation.	30
FIG. 2.16:	Microscopie électronique [34] en transmission en vue plane des réseaux de dislocations.....	31
FIG. 2.17:	Microscopie électronique en transmission [34] en vue en coupe de l'interface de collage, d'un échantillon dont la rotation vaut environ 5°	31
FIG. 3.1:	Image STM (500 x 500 nm) montrant l'alignement d'îlots 3D de germanium sur les marches atomiques d'une surface de silicium désorienté de 2^\pm par rapport au plan (001). (Patella et al. [35]).....	33
FIG. 3.2:	Images de microscopie à force atomique montrant des alignements d'îlots 3D d'InAs sur les accumulations de marches de surfaces de GaAs désorientées de 2^\pm par rapport au plan (001), pour des épaisseurs nominales d'InAs de (a) 2, (b) 2,2, (c) 2,3 et (d) 2,4 MC. (Kim et al. [36]).....	33
FIG. 3.3 :	Images AFM d'îlots cohérents de germanium (les points blancs) auto-assemblés sur des mesas de silicium (les zones grises). (Jin et al.[43]).....	34
FIG. 3.4:	Images AFM (a) d'un substrat de silicium structuré, après croissance de la couche tampon de silicium ; (b) après dépôt de 4 MC de germanium qui forment des îlots auto-assemblés ; (c) zoom sur un îlot de germanium. (Zhong et al. [46]).....	35
FIG. 3.5:	Observation par microscopie électronique in situ de la localisation de boîtes quantiques de Ge près des lignes de dislocations mixtes à 60° (d'après Ross [51]).....	36
FIG. 3.6:	Variation, en fonction du pas des dislocations, de la valeur maximale de la déformation ϵ_{13} à la surface du film de 10nm.....	39
FIG. 3.7:	Variation, en fonction de l'épaisseur du film, de la valeur de la déformation maximale à la surface du film ϵ_{13} en se plaçant avec une distance entre dislocations vis constante, égale à 50nm.....	39
FIG. 3.8:	Vues MET en coupe de deux substrats auto-organisant montrant la très bonne cristallinité des films ultra-minces et la reconstruction parfaite des interfaces de collage [61].....	39
FIG. 3.9:	Collage et interface d'un joint de grains. Vue plane de MET, le pas des dislocations vis est de $50,6 \pm 0,6 \text{ nm}$ ($0,435 \pm 0,005^\circ$) pour 50nm visés [61].....	40

FIG.3.10:	Champ de déplacement à la surface de l'échantillon ($\varphi = 0.44^\circ$, $h = 100\text{\AA}$). Les axes x_1 et x_3 sont gradués en \AA . La longueur des vecteurs est proportionnelle au module des déplacements. Le déplacement maximum, au quart de la diagonale, vaut 0.487\AA ($\approx b/7.88$) [5].....	41
FIG.3.11:	Iso valeurs de la densité d'énergie élastique dans le volume de l'échantillon ($\varphi = 0.44^\circ$, $h = 100 \text{\AA}$), pour trois valeurs de densité : 25 meV/atome, 1 meV/atome, et 0.1 meV/atome [5].....	41
FIG.3.12:	Champ de déplacement u_1 . L'échelle est prise entre le minimum en surface ($x_1=100$) et le maximum entre les dislocations, à l'interface [5].....	41
FIG.3.13:	Croissance du Ge/Si. Etude STM de l'échantillon B5 ($\varphi = 1.0^\circ$, $h = 10\text{nm}$) : surfaces à différentes échelles. Position nominale de la surface : 25 \AA sous l'interface de collage. Les directions $\langle 110 \rangle$ sont données par les directions des tranchées [5].....	43
FIG.3.14:	(a) Composante non nulle du champ de contraintes σ_{31} ; en Pa ; et (b) densité volumique d'énergie élastique respectivement stockée et induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($D=25 \text{ nm}$, $h=20 \text{ nm}$) [62].....	43
FIG.3.15:	Vues planes de MET de l'échantillon 1-a (de type 1). Les lignes blanches sur les images (a) et (b) sont des dislocations vis. Une cavité ou précipité d'interface est encadré sur chacune des images. Sur la figure (c) les lignes sinueuses blanches sont des dislocations mixtes [62].....	45
FIG. 4.1:	Schéma d'une couche monocristalline, d'épaisseur h , collée sur un substrat monocristallin, avec un réseau carré de dislocation vis à l'interface.....	49
FIG. 4.2:	(a) Représentation schématique du déplacement associé à un réseau de dislocation, (b) Courbe en dent scie et en escalier relatives respectivement aux dislocations intrinsèques.....	60
FIG. 4.3:	Représentation et orientation d'un réseau orthogonal de dislocations.....	64
FIG. 5.1:	Représentation du déplacement relatif interfacial.....	69
FIG. 5.2:	La structure diamant du silicium.....	71
FIG. 5.3:	La structure Zinc-blende du GaAs.....	72
FIG. 5.4:	Schéma illustrant les champs des déplacements des unités structurales déformés par un réseau carré de dislocations vis à la surface de l'échantillon Si/Si.....	74
FIG. 5.5:	Variation des déplacements u_k ($k=1,3$) à la surface libre de l'échantillon Si/Si en fonction de X_i ($i=1,3$).....	75

FIG. 5.6:	Variation des déplacements u_1 à la surface libre de l'échantillon Si/Si en fonction de X_3 pour différentes épaisseurs ($h_1=5$ et 20nm).....	76
FIG. 5.7:	Composante non nulle du champ de déformation ϵ_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50$ nm, $h_1=10\text{nm}$).Représentation sur une surface de 2×2 périodes.....	77
FIG. 5.8:	Composante non nulle du champ de contraintes σ_{13} [en GPa] induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50$ nm, $h_1=10\text{nm}$). Représentation sur une surface de 2×2 périodes.....	77
FIG. 5.9:	Iso-valeurs des déformations ϵ_{13} déformation ϵ_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50$ nm, $h_1=10\text{nm}$).Les flèches indiquent les lignes de dislocations vis.....	78
FIG.5.10:	Iso-valeurs des contraintes σ_{13} [en GPa] induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50$ nm, $h_1=10\text{nm}$). Représentation sur une surface de 2×2 périodes.....	78
FIG.5.11:	Variation, en fonction de la période du réseau de dislocations, de la valeur maximale de la déformation ϵ_{13} à la surface du film de 10 nm.....	79
FIG.5.12:	Variation, en fonction de la période du réseau de dislocations, de la valeur maximale de la contrainte σ_{13} à la surface du film de 10 nm.....	79
FIG.5.13:	Variation, en fonction de l'épaisseur de la couche, de la valeur maximale de la déformation ϵ_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis de période 50 nm.....	80
FIG.5.14:	Variation, en fonction de l'épaisseur de la couche, de la valeur maximale de la contrainte σ_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis de période 50 nm.....	80
FIG.5.15:	Evolution de la déformation maximale en surface en fonction de la périodicité du réseau de dislocations vis, pour différentes épaisseurs.....	81
FIG.5.16:	Variation, en fonction de la période du réseau de dislocations, de la valeur maximale de la densité volumique d'énergie élastique stockée à la surface du film de 10 nm.....	83
FIG.5.17:	Variation, en fonction de l'épaisseur de la couche, de la valeur maximale de la densité volumique d'énergie élastique induit en surface par un réseau carré de dislocations vis de période 50 nm.....	83

FIG.5.18:	Schéma illustrant les champs des déplacements des unités structurales déformés par un réseau carré de dislocations vis à la surface de l'échantillon GaAs/GaAs.....	84
FIG.5.19:	Variation des déplacements u_k ($k=1,3$) à la surface libre de l'échantillon GaAs/GaAs en fonction de X_i ($i=1,3$).....	85
FIG.5.20:	Iso-valeurs des déformations ϵ_{13} déformation ϵ_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=25$ nm, $h_1=20$ nm).Les flèches indiquent les lignes de dislocations vis.....	86
FIG.5.21:	Evolution de la contrainte maximale en surface en fonction de la périodicité du réseau de dislocations vis, pour différentes épaisseurs.....	87
FIG.5.22:	Iso valeurs de la densité volumique stockée en surface due à réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=25$ nm, $h_1=20$ nm).(a) 2D, (b) 3D.....	88
FIG.5.23:	Evolution de la densité volumique stockée en surface en fonction de la périodicité du réseau de dislocations vis, pour différentes épaisseurs.....	89
FIG.5.24:	Iso valeurs des champs de déplacement induit par un réseau unidimensionnel de dislocations coins pour un joint de flexion Si/Si ($\Lambda=50$ nm, $h_1=10$ nm). a) suivant u_1 b) suivant u_2	90
FIG.5.25:	Iso valeurs des champs de déplacement induit par un réseau unidimensionnel de dislocations coins pour un joint de flexion GaAs/GaAs ($\Lambda=50$ nm, $h_1=10$ nm). a) suivant u_1 b) suivant u_2	90
FIG.5.26:	Morphologie de la surface libre pour différentes valeurs de l'épaisseur h_1	91
FIG.5.27:	Bilame mince, avec un réseau unidirectionnel de dislocations à l'interface, $1/g$ est la période. C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- sont les constantes élastiques des deux milieux, h^+ et h^- sont les épaisseurs des deux milieux.....	92
FIG.5.28:	Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Al ₂ Cu sous l'effet de dislocation coin interfaciale, C_{ij} anisotropes, $b // O_{x_1}$	94
FIG.5.29:	Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Al ₂ Cu sous l'effet de dislocation coin interfaciale, C_{ij} anisotropes, $b // O_{x_2}$	94
FIG.5.30:	Courbes d'équi-contraintes $\sigma_{11} = \pm 150$ MPa pour une dislocation placée à l'interface d'un bilame mince Al /Al ₂ Cu (a) $b // O_{x_1}$, (b) $b // O_{x_2}$	95

Liste des tableaux

Tableau 2.1:	Paramètre de maille des semiconducteurs III-V cubiques.....	16
Tableau 2.2:	Epaisseur critique et désaccord de maille dans les systèmes auto-organisés.....	17
Tableau 5.1:	Paramètre cristallin, vecteur de burgers et constants élastiques anisotropes du Silicium [63,75].....	72
Tableau 5.2:	Paramètre cristallin, vecteur de burgers et constants élastiques anisotropes pour le GaAs [62,63].....	74

Introduction générale

Les nanotechnologies et les nanostructures font l'objet d'un intérêt croissant dans bien des domaines, un événement crucial à l'origine de cet engouement a sans doute été le discours, intitulé « There's plenty of room at the bottom » (Il y a plein de place tout en bas »), que prononça Richard Feynman [1] (prix Nobel de physique en 1965) en décembre 1959 lors de la conférence annuelle de la Société Américaine de Physique. Dans ce discours, il envisageait ce qui est maintenant la réalité des nanosciences et des nanotechnologies.

En effet, Depuis quelques années, l'enjeu représenté par la réduction de la taille des composants en micro-électronique a conduit à un effort important de recherche sur la synthèse de structures, dont la dimension de quelques nanomètres à quelques dizaines de nanomètres, est particulièrement intéressante pour la réalisation de composants, principalement en microélectronique, en optoélectronique et en photonique. Outre la potentialité d'une très forte intégration, leur taille extrêmement réduite leur confère de nouvelles propriétés dont l'efficacité par rapport à celles du même matériau utilisé à une échelle macroscopique est indéniable. Par exemple, l'extrême confinement des charges à l'intérieur des nanostructures induit de nouvelles propriétés quantiques intéressantes pour la réalisation de composants originaux. Ainsi, des nanostructures 3D de semiconducteurs pourraient constituer les briques de base de futurs transistors de dimensions nanométriques (la surface moyenne d'un transistor est actuellement de $1\mu\text{m}^2$). Plus leurs dimensions seront réduites et plus il sera possible d'en intégrer un grand nombre sur un seul circuit intégré, en vue d'augmenter la puissance de calcul des ordinateurs, entre autre.

Pour pouvoir utiliser ces structures dans des dispositifs, il faut être en mesure d'obtenir des densités suffisantes d'objets. Par exemple, si l'on veut réaliser une mémoire basée sur un effet électronique de boîte quantique, cela nécessite au minimum une boîte par bit d'information. La densité d'information actuelle d'une mémoire commerciale est d'environ 10^{10} bits/cm² (chiffre variable selon le type de

mémoire, et qui augmente rapidement avec le temps et avec les progrès technologiques). Le seuil minimum de densité de boîtes quantiques doit donc être supérieur à $10^{10}/\text{cm}^2$, pour avoir un intérêt par rapport à l'état de l'art actuel.

Il y a donc une interrogation d'ordre technologique : comment va-t-on réussir à faire une grande densité de structures identiques ? Cette interrogation soulève en fait deux questions : quels sont les paramètres dont on dispose pour influencer de manière collective la croissance d'une population de structures de petites tailles ? Quels sont les mécanismes qui pilotent la forme, la taille et la densité de ces structures ? C'est toute la problématique de l'organisation des nanostructures.

Il existe, à l'heure actuelle, plusieurs techniques pour fabriquer et contrôler à la fois, la répartition spatiale à longue distance, la densité, la distribution de la taille et de la forme des nanostructures. Nous décrirons quelques unes d'entre elles dans le troisième chapitre, néanmoins, il est intéressant de noter que, mis à part quelques techniques très particulières utilisant des couples substrats/nanostructures de natures spécifiques, aucune de ces techniques de fabrication ne permet d'obtenir rapidement une grande quantité de nanostructures possédant une taille et une répartition spatiale toutes deux homogènes. En effet, d'une façon générale, soit la technique d'élaboration est lente et précise, soit elle est rapide et les fluctuations de taille et de répartition spatiale sont alors relativement importantes.

Par opposition à la très grande majorité de ces techniques, consistant à maîtriser très finement l'organisation ou l'auto-organisation du dépôt des nanostructures sur des substrats standard, le sujet de notre thèse a été de développer celle que nous estimons être la plus prometteuse, à savoir : l'organisation à longue distance de nanostructures sur des substrats fonctionnels de GaAs et de Si, grâce aux champs de contraintes et de déformations induits en surface par un réseau carré de dislocations (RDs) périodique faiblement enterré.

Dans ce cadre, l'objectif de ce travail est d'étudier l'influence de ces champs élastiques sur l'organisation de nanostructures. Ces champs périodiques, sont précisément créés par collage moléculaire avec notamment une désorientation en

rotation dite de torsion et également appelée "twist" en terminologie anglo-saxonne, entre les deux cristaux mis en contact.

Il sera question de quantifier, dans l'hypothèse d'une élasticité anisotrope, les champs de déformation, de contrainte et la densité d'énergie générés par des réseaux de dislocations faiblement enterrés accommodant une torsion, une flexion et un désaccord paramétrique.

Le premier chapitre est une introduction au monde de la nanotechnologie qui polarise investissements et intérêts des décideurs. Elle recouvre toutes les techniques de miniaturisation extrême qui permettent de fabriquer des objets ou des composants dont les dimensions sont inférieures à 100 nm.

Le deuxième chapitre passe en revue les concepts généraux de l'auto-organisation de nanostructures. Nous essayons dans ce chapitre de montrer quels sont les paramètres qui modifient la croissance cristalline des matériaux sur une surface en citant quelques méthodes et solutions proposées à ce jour pour améliorer les caractéristiques morphologiques des dépôts : distribution des tailles, localisation. Enfin une étude des différents réseaux de dislocations faiblement enterrés utilisés pour l'organisation spatiale à longue distance de nanostructures est présentée.

Dans le troisième chapitre, une synthèse bibliographique recense les récents travaux théoriques et expérimentaux ayant un lien direct avec le sujet.

Le chapitre quatre est consacré à l'étude et la détermination analytique des champs élastiques générés par un réseau carré de dislocations vis et ceci en utilisant la théorie élastique anisotrope.

Dans le cinquième chapitre, des applications numériques pour le calcul des déplacements, des déformations, des contraintes et des énergies sont présentés pour les joints de torsion et flexion suivants : Si/Si et GaAs/GaAs et pour l'hétéro-interphase Al/Al₂Cu accommodant un désaccord paramétrique prenant cette fois-ci en considération les deux surfaces libres des échantillons.

Enfin on présente une conclusion générale regroupant l'essentiel des résultats obtenus.

Chapitre 1

La nanotechnologie

Introduction

Depuis le début des années 1990, le terme nanotechnologies - créé pour désigner les technologies capables d'élaborer des objets structurés à l'échelle du nanomètre (10^{-9} m, milliardième de mètre) a envahi les journaux, les livres, la télévision, et même le domaine publicitaire et le débat éthique. Au-delà d'un effet de mode certain, puisque des objets façonnés à cette échelle nous entourent depuis longtemps sans que nous en ayons toujours conscience, des progrès remarquables ont été effectués dans ce domaine depuis le début des années 1980. Citons, par exemple, l'apparition ou l'amélioration de méthodes de mesure qui permettent d'observer la matière à l'échelle de l'atome ; les nouvelles techniques d'élaboration de matériaux à l'échelle du nanomètre ; la découverte de nouvelles propriétés à cette échelle, qui sont bénéfiques dans de nombreux cas. Enfin, de grands intérêts sont en jeu, qu'il s'agisse de la compétitivité des industries de demain, ou de répondre aux nombreux défis qui se posent à nos sociétés (énergie, environnement, santé).

I.1. Que sont les nanotechnologies ?

Il y a presque autant de définitions des nanotechnologies que d'acteurs. Celle qui est donnée par le programme américain couvre bien le domaine et ses implications [2] : il s'agit de la recherche et développement technologique (R&D) à une échelle comprise approximativement entre 1 et 100 nanomètres (nm), pour, d'une part, constituer un corpus de connaissances des phénomènes et matériaux à cette échelle, et, d'autre part, créer et utiliser des structures, composants et systèmes qui, du fait de leur petite taille, présentent des propriétés et fonctionnalités nouvelles. Celles-ci apparaissent à cette échelle pour diverses raisons : effets quantiques, nature granulaire de l'électricité, nature ondulatoire de la lumière, effets

de confinement, effets fondés sur l'importance des surfaces d'échanges, prédominance de rapports surface-volume, etc.

Comme on souhaite tirer parti de ces objets nanométriques dans un monde à notre échelle, il est nécessaire de transférer à l'échelle macroscopique les propriétés de ces objets. Les nanotechnologies comprennent donc, à côté de la fabrication et de la manipulation d'objets, leur propre intégration dans des matériaux, systèmes et structures plus grands ; celle-ci est souvent obtenue grâce à une hiérarchie d'architectures, de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique..

I.2. Un secteur en plein développement

La réflexion sur les nanotechnologies ne date pas d'hier. En 1959, Richard Feynman - lors d'une conférence sur les limites de la manipulation et du stockage de l'information - avait suggéré que l'atome lui-même pouvait suffire à stocker et manipuler l'information. Cette prédiction ne fut vérifiée que bien plus tard, au début des années 1980, quand fut inventé la microscopie de champ proche (microscope à effet tunnel et microscope à force atomique).

Ce moyen d'observation exceptionnel ainsi que les progrès des autres techniques (microscopes électroniques à balayage ou à transmission, outils à rayons X...) permettent désormais de mieux caractériser la matière à l'échelle atomique afin de mieux maîtriser les nanotechnologies. Aujourd'hui, en mesurant la matière dans ses moindres détails, on peut tester des modèles, les améliorer et faire des prédictions.

Une autre condition indispensable à l'émergence des nanotechnologies est bien évidemment la capacité à élaborer et reproduire des matériaux structurés à cette échelle. Dans les technologies de l'information et des communications (T.I.C.), les matériaux ont été réalisés avec un souci de miniaturisation des composants, miniaturisation rendue possible par des procédés de fabrication de plus en plus fins (dépôts de couches minces et lithographie menant à des dimensions de l'ordre de dizaines de nanomètres dans les trois dimensions). Les

autres types de matériaux résultent de l'extension des procédés classiques (synthèse in situ, en solution ou en phase vapeur, broyage) qui ont permis de fabriquer, de manière contrôlée, des matériaux nanostructurés, voire d'en synthétiser de nouveaux.

I.3. Les nanotechnologies obtenues par miniaturisation :

I.3.1. Miniaturisation du microprocesseur dans les T.I.C.

Les T.I.C. comprennent des éléments de traitement de l'information (microprocesseurs), des systèmes de stockage (mémoires dynamiques à accès aléatoire - DRAM -, disques durs magnétiques, CD-ROM...) et des composants pour communiquer (câbles, signaux radio, liaisons optiques). Ces technologies progressent spectaculairement grâce à la miniaturisation, dans des formes souvent très différentes ; les matériels atteignent aujourd'hui des dimensions nanométriques.

Un microprocesseur est constitué d'un ensemble de circuits comprenant des transistors, des résistances et des condensateurs. Tous ces éléments sont fabriqués souvent de façon simultanée sur un support en matériau semiconducteur, la puce de silicium, ayant typiquement un centimètre de côté.

Grâce à une miniaturisation incessante, une nouvelle génération de circuits intégrés apparaît tous les trois ans, correspondant à une augmentation de la densité des composants sur la puce d'un facteur 4, un circuit intégré actuel intègre déjà plus de 100 millions (pour le microprocesseur) à un milliard (pour les mémoires de type DRAM) de transistors, et on fabrique en parallèle quelques dizaines de ces circuits intégrés sur une même plaquette de silicium, figure 1.1. Cela a été possible grâce à l'existence de techniques de dépôt ou de fabrication in situ de couches minces de très grande précision, accessibles depuis de nombreuses années. La nouveauté dans l'évolution des circuits intégrés est le contrôle de la matière à l'échelle nanométrique dans plusieurs dimensions (largeur et épaisseur de grille, planéité des interfaces). Les transistors fabriqués au début du XXI^e siècle ont une taille typique de l'ordre de 180 nanomètres.



Image du circuit électronique des années 1940

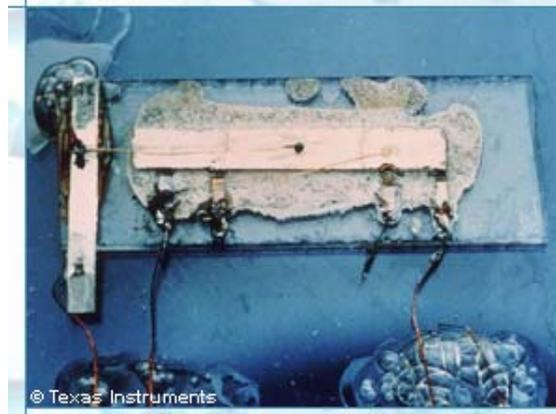


Image du premier circuit intégré 1959

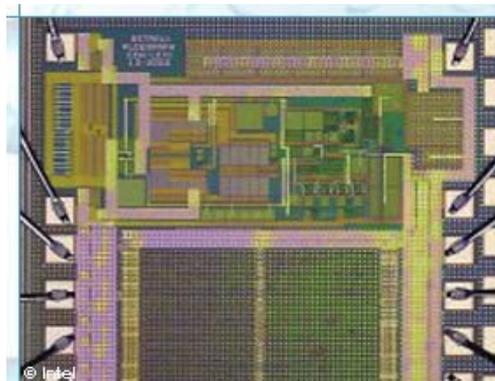


Image d'un récent microprocesseur

FIG. 1.1: Chronologie de miniaturisation des circuits électroniques [3]

I.3.2. Les nanomatériaux structuraux

Dans ce domaine, on espère beaucoup de la nanostructuration. Les propriétés mécaniques, mais pas seulement elles (par exemple la résistance à la corrosion...), sont souvent grandement améliorées - avec certainement de grandes différences dans le changement des lois de comportement entre métaux, céramiques et autres matériaux - lorsqu'on atteint une structuration de la matière à l'échelle du nanomètre. Par exemple, les nanocéramiques sont ductiles - les joints de nanograins bloquant la propagation de fissures, alors que les céramiques microstructurées sont cassantes, donc fragiles, ce qui limite beaucoup leur emploi.

Les composites métalliques nanostructurés, quant à eux, ont des résistances mécaniques à chaud fortement améliorées, ce qui étend leur domaine d'utilisation dans le secteur critique des matériaux à hautes températures. Cet effet est obtenu

par des précipités contrôlés aux joints de grains, qui bloquent ainsi la croissance des grains lors d'une augmentation de température (phénomène responsable de la fragilisation des matériaux). Le domaine des composites est un domaine de choix pour la nanostructuration.

Les plastiques renforcés par des fibres de verre ou de carbone sont largement utilisés dans de nombreuses industries, comme l'automobile, l'aéronautique ou les articles de sport. Les plus courants sont constitués d'une matrice polymère, résine thermodurcissable ou polymère thermoplastique, renforcée par des fibres rigides, en verre ou en carbone, d'un diamètre de quelques micromètres. Les excellentes propriétés de ce matériau composite viennent de ce qu'il allie les « bonnes » propriétés de ses deux constituants, en maîtrisant leurs défauts : les fibres donnent de la rigidité et de la résistance, et la matrice plastique, plus souple, encaisse élastiquement la rupture d'une fibre en se déformant, alors que le verre massif se casserait en masse. Il est établi que, sous réserve que la chimie de l'interface fibre-matrice soit bien maîtrisée, c'est-à-dire que les fibres et la matrice soient solidaires, l'efficacité du renforcement est d'autant meilleure que l'aire totale de l'interface entre fibres renforçantes et matrice est plus grande. Donc, à fraction volumique de fibres donnée, plus les fibres seront fines, plus le renforcement devrait être efficace, idée qui a conduit à de nombreux essais de renforcement des plastiques par des fibres de diamètre nanométrique ou par des nanolamelles minérales. Il est, par exemple, établi que les nanolamelles argileuses améliorent fortement la dureté et la tenue en température des composites.

Une attention toute particulière est portée aux nanotubes de carbone (Figs. 1.2 et 1.3), édifices tout à fait remarquables constitués d'atomes de carbone organisés dans une structure hexagonale, comme dans le graphite. Ce dernier est constitué de plans infinis (du moins à l'échelle des atomes), alors que le nanotube est un tube de diamètre nanométrique, avec une longueur qui peut atteindre des dimensions millimétriques. Le rapport diamètre/longueur atteint alors six ordres de grandeur. Les propriétés mécaniques des nanotubes individuels sont remarquables,

puisque leur résistance mécanique spécifique est cinquante fois celle de l'acier. Retrouver cette performance dans des câbles ou des matériaux composites reste encore un défi, sans doute à cause de la difficulté à obtenir des composites bien organisés et de la nécessité d'une interface fibre-matrice bien maîtrisée. Une équipe de l'université du Texas a réussi, en 2003, à obtenir une fibre composite nanotube-polymère de 50 micromètres de diamètre qui n'est plus éloignée que d'un facteur 10 de la résistance mécanique d'un nanotube individuel, et est égale à celle du fil d'araignée, une référence classique en nanotechnologies.

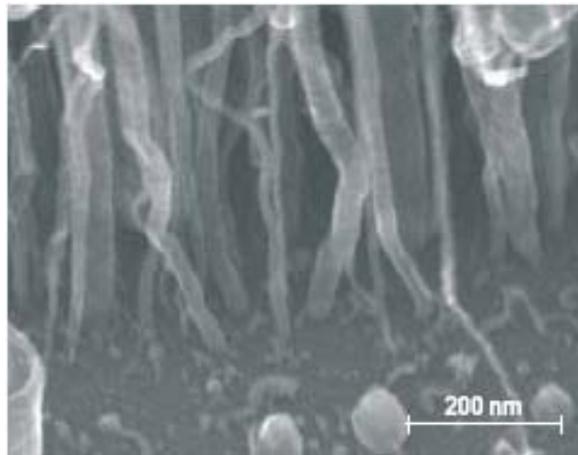


FIG. 1.2: Observations au microscope électronique à balayage de nanotubes de carbone sur un support de silicium ($\times 150000$). [3]

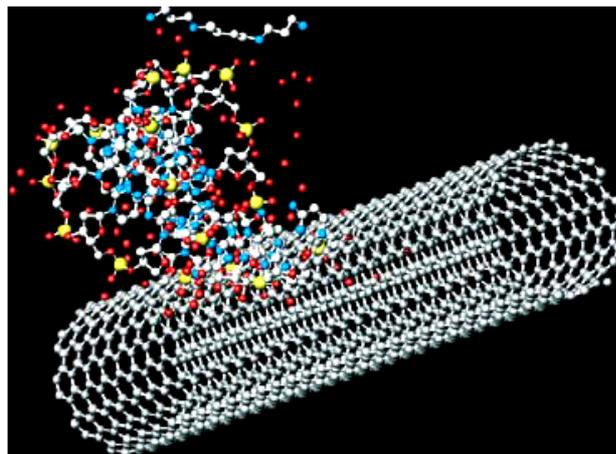


FIG. 1.3: Protéine greffée sur un nanotube de carbone. [3]

Chapitre 2

L'auto-organisation des nanostructures par des réseaux de dislocations

Introduction

Le terme auto-assemblage, appliqué à la croissance de semi-conducteurs, décrit la manière dont la matière se structure de façon spontanée à la surface d'un solide. L'enjeu principal de la croissance auto-organisée de nanostructures est de modifier cette spontanéité pour obtenir les caractéristiques requises en termes de tailles ou de distances entre les structures [5].

On résume ici les mécanismes de croissance ainsi que les paramètres essentiels régissant la morphologie des îlots.

II.1. Epitaxie

II.1.1. Généralités sur l'épitaxie

Deux types d'épitaxie peuvent être distingués et chacune a son importance dans le cadre d'applications différentes. *L'homoépitaxie* se rapporte au cas où le film et le substrat sont du même matériau. Le dépôt de films mince de Si sur un substrat Si en est le meilleur exemple.

Le second type d'épitaxie est par opposition à la précédente *l'hétéroépitaxie*. Elle se réfère au cas où le film et le substrat sont constitués de matériaux différents. L'hétéroépitaxie est couramment utilisée pour développer les dispositifs optoélectroniques ainsi que les diodes électroluminescentes ou les lasers à base d'alliages semiconducteurs. La différence entre les deux types d'épitaxie est représentée sur la figure 2.1 suivante.

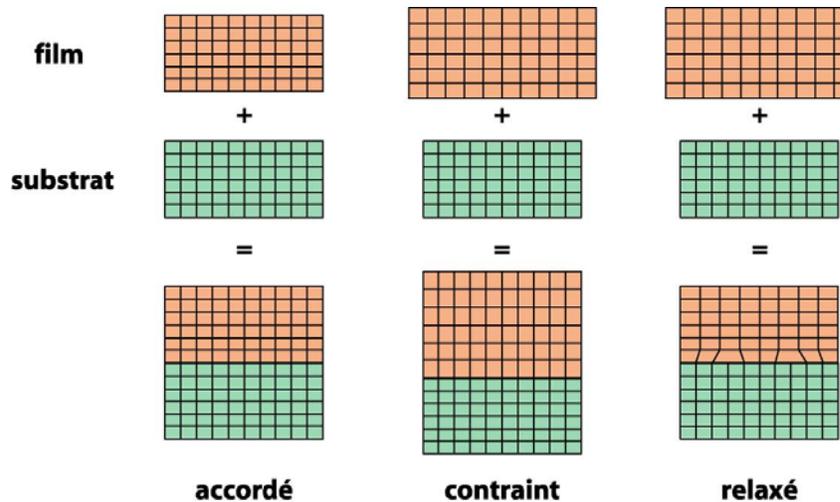


FIG. 2.1: Structures d'hétéroépitaxies accordée en maille, contrainte et relaxée (l'hétéroépitaxie accordée en maille est similaire à l'homoépitaxie).

Pour l'homoépitaxie, les paramètres de mailles sont naturellement accordés et il n'y a pas de contraintes à l'interface. Dans le cas de l'hétéroépitaxie, les paramètres de maille sont désaccordés et en fonction de ce désaccord, on peut distinguer trois régimes différents :

1. Si le désaccord de maille est nul, l'hétérostructure est assez semblable à celles que l'on obtient en homoépitaxie. Toutefois, les propriétés physico-chimiques (coefficient de dilatation thermique, composition chimique,...) des deux matériaux présents peuvent être différentes et influencer les propriétés structurales.
2. Quand le film et le substrat présentent un désaccord de maille non nul, les deux mailles peuvent s'adapter pour accorder leurs paramètres cristallographiques dans le plan de croissance : c'est ce que l'on appelle une croissance pseudomorphique. La croissance pseudomorphique est en général le mécanisme qui prévaut au début de la croissance d'une couche contrainte. Ce phénomène a lieu entre des matériaux différents mais cristallisant dans la même structure cristallographique. Près de l'interface, les premières couches du film s'adaptent à la maille du substrat.

3. Lorsque l'épaisseur de la couche contrainte augmente, l'énergie de contrainte augmente. La relaxation de la contrainte va avoir lieu soit par création de dislocations à l'interface (relaxation plastique), soit par formation d'îlots tridimensionnels (relaxation élastique).

II.1.2. L'épitaxie par jets moléculaires

Elle représente l'état de l'art des techniques de croissance de films minces monocristallins à partir d'une phase vapeur. L'épitaxie par jets moléculaires (EJM ou MBE) implique des processus d'évaporation contrôlés avec précision dans une enceinte placée sous ultravide ($\approx 10^{-10}$ Torr), figure 2.2. Les flux atomiques ou moléculaires des éléments proviennent de la sublimation ou de l'évaporation de l'élément solide contenu dans des creusets chauffés par effet Joule. Ces creusets sont munis de caches obturateurs dont l'ouverture conditionne l'arrivée du flux qui se condensera sur la surface du substrat.

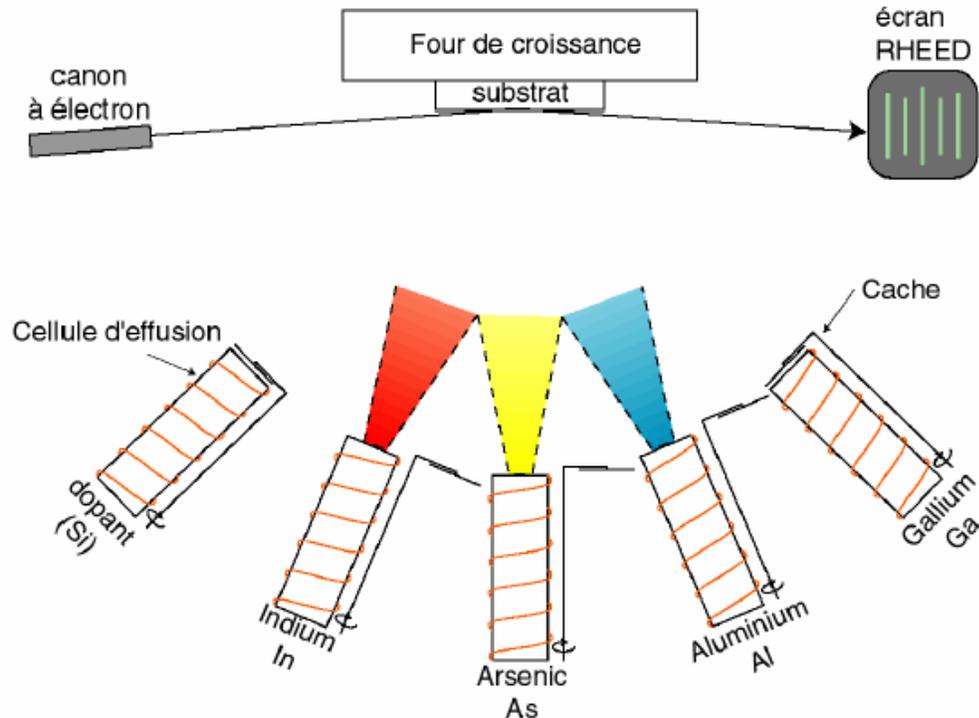


FIG. 2.2: Schéma de principe d'une croissance par épitaxie par jets moléculaires [6]

Étant donnée la précision sur l'épaisseur du dépôt, il est courant de définir l'épaisseur d'un film mince par le nombre de plans atomiques qui le compose. Les épaisseurs déposées sont donc mesurées en *monocouches moléculaires* MC ce qui correspond dans le cas des semiconducteurs III-V à une couche atomique d'élément III (In, Al, Ga) (Fig. 2.3) et une couche atomique d'élément V (As). Dans InAs, une monocouche a une épaisseur d'environ 3 Å.

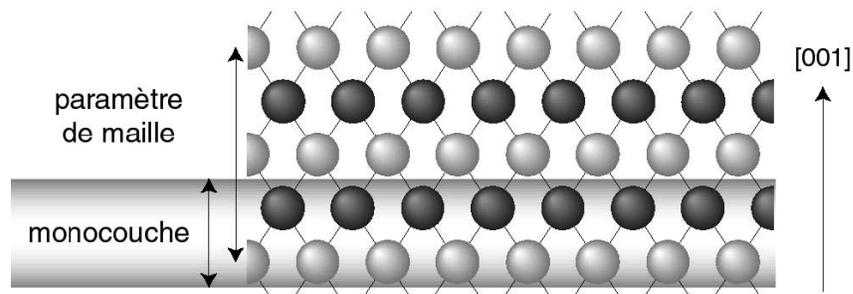


FIG. 2.3: Croissance d'un film mince semiconducteur III-V cubique. Projection sur le plan (100)

Frankenheim [7] fut, sinon le premier, parmi les premiers à rapporter en 1836 l'observation expérimentale du phénomène d'hétéroépitaxie. Il constata en effet que la cristallisation d'un sel sur un amorphe -une plaquette de verre en l'occurrence- se faisait complètement indépendamment de celui-ci, tandis que sur un solide non plus amorphe mais lui aussi cristallin, le sel cristallisait avec cette fois-ci une orientation liée à celle du cristal support ou substrat.

Royer [8] constata pour sa part que «*la différence permise dans les dimensions des deux réseaux qui s'accolent varie suivant les différentes espèces et peut atteindre jusqu'à environ 15% du paramètre (de maille) de l'un des deux sels**».

Qu'en est-il alors de la qualité cristalline de la couche ainsi épitaxiée puisque le moindre désaccord de maille se chiffre rapidement en contraintes mécaniques énormes qu'il va bien falloir que la couche relaxe d'une façon ou d'une autre ?

* Ce n'était à l'époque encore ni des métaux ni encore moins des semiconducteurs...

Cette notion de qualité cristalline est devenue cruciale pour la réalisation de nanostructures semiconductrices-puits (cf. Fig. 2.4) et boîtes-cohérentes, c'est-à-dire exemptes de défauts structuraux tels les dislocations, véritables pièges recombinants pour les porteurs.

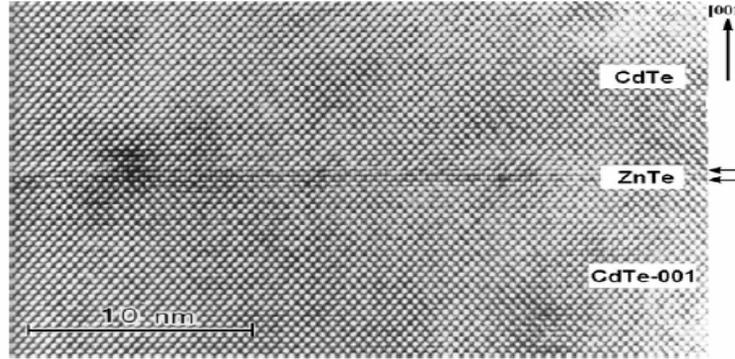


FIG. 2.4: Puits quantique cohérent de 2 MC de ZnTe (les flèches pointent les interfaces) dans CdTe orienté (001) (image HRTEM dans la direction $\langle 110 \rangle$, [9]).

Si le désaccord de maille excède la dizaine de pourcents, la couche ne peut s'épitaxier sur son substrat que si elle présente, sous une autre orientation, un meilleur accord de maille : c'est le cas (Fig. 2.5) du CdTe qui, sur substrat GaAs orienté (001), adopte l'orientation (111) à cause d'un désaccord de maille $\Delta a_{(001)}/a = -12,8\%$ trop important.

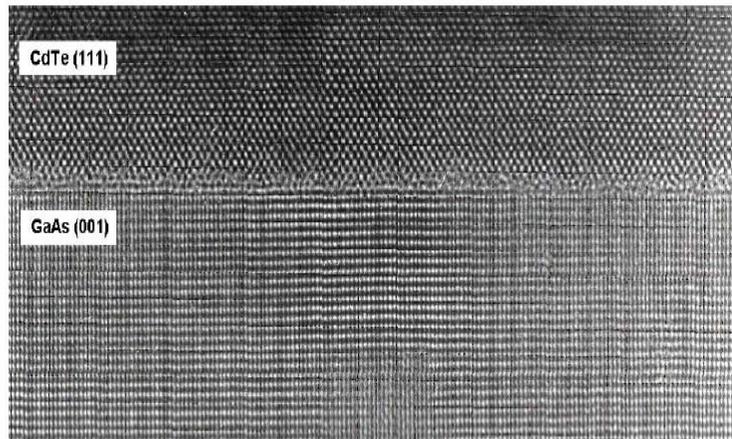


FIG. 2.5: Image HRTEM (dans la direction $\langle 112 \rangle$) de l'épitaxie du CdTe ($a = 6,4810 \text{ \AA}$) sur GaAs ($a = 5,6533 \text{ \AA}$) orienté-(001) (source : équipe mixte CEA-CNRS Grenoble).

II.2. Les différents modes de croissance

Nous allons voir qu'un film mince déposé sur un substrat peut adopter différentes morphologies en fonction de son mode de croissance. Nous allons montrer comment à partir de bilans énergétiques, on peut prévoir ces différents modes de croissance.

Les nombreux travaux dans la croissance des films minces, ont permis de distinguer trois modes de croissance (Fig. 2.6) :

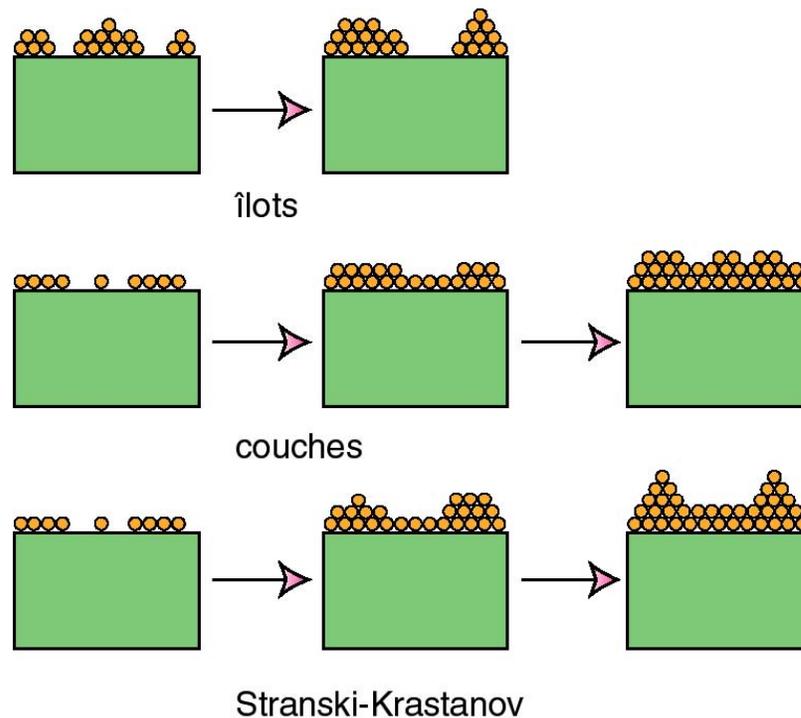


FIG. 2.6: Les différents modes de croissance pour un film mince

- Une croissance de type *Volmer-Weber* [10] qui a lieu lorsque les atomes adsorbés vont nucléer pour former des agrégats. Par la suite, ceux-ci vont croître de façon tridimensionnelle pour former des îlots. Ce mode apparaît lorsque les espèces déposées possèdent des énergies de liaison plus fortes entre elles qu'avec le substrat. Le dépôt de métaux ou de semiconducteurs sur une surface d'oxyde suit généralement ce mode de croissance.

- Une formation monocouche par monocouche ou *Frank-Van der Merwe* [11]. Ce mode est à l'opposé du précédent. Les agrégats de base vont se développer monocouches par monocouches en raison de l'interaction favorable entre le dépôt et le substrat. Ainsi, la croissance de la deuxième couche ne débutera qu'au terme de la croissance de la première.
- Il existe également un mode de croissance mixte : îlots+couches ou *Stranski-Krastanov*. Ce mode est particulièrement intéressant pour la formation d'îlots de faible dimension.

II.2.1. La transition 2D/3D du mode de croissance Stranski-Krastanov des couches contraintes.

II.2.1.1. Désaccord de maille

Une des clefs nécessaire à la compréhension de la transition 2D/3D du mode de croissance réside dans l'effet de ce désaccord de maille défini par :

$$\varepsilon = \frac{a_{\text{substrat}} - a_{\text{film}}}{a_{\text{film}}} \quad (2.1)$$

Avec a_{substrat} le paramètre de maille du substrat et a_{film} le paramètre de maille du matériau déposé (Tab. 2.1). Les valeurs typiques de ces désaccords tournent autour de quelques pour cent pour les systèmes bien étudiés tels que InAs/GaAs (7%) ou Ge/Si (4%).

Semiconducteur III-V	GaAs	AlAs	InP	InAs
Paramètre de maille (Å)	5.6533	5.6600	5.8688	6.0583

Tableau 2.1: Paramètre de maille des semiconducteurs III-V cubiques

II.2.1.2. Energie de contrainte et épaisseur critique

Au début de la croissance hétéroépitaxiale, la maille du matériau déposé s'adapte par déformation élastique à celle du substrat dans le plan d'interface. La couche est donc soumise à une contrainte élastique et son énergie totale augmente. L'épaisseur du substrat étant bien supérieure à celle du film, c'est ce dernier qui va emmagasiner toute l'énergie due à la contrainte. Lorsque l'énergie de contrainte ne peut plus être accommodée élastiquement, la couche a alors atteint une épaisseur dite critique. Au-delà de cette épaisseur, intervient un mécanisme de relaxation des contraintes. Cette relaxation peut se faire de façon plastique à travers la création de dislocations lorsque le désaccord de maille est faible ($\epsilon < 2\%$). Pour des désaccords plus élevés, le processus de relaxation peut intervenir de façon élastique par un passage en mode de croissance tridimensionnel au-dessus d'une épaisseur critique h_{3D} . Dans ce dernier cas, on passe donc d'un mode de croissance 2D à un mode de croissance 3D : c'est le mode de croissance de type "Stranski-Krastanov". Dans le système InAs/GaAs, l'épaisseur critique est d'environ 1,5 à 1,75 monocouches (4,5 - 5,25Å), tableau 2.2.

Système	InAs/GaAs	Ge/Si	InAs/InP	InAs/InAlAs
Désaccord de maille	7%	4%	3,2%	3,2%
Epaisseur critique	1,5 à 1,75 MC	3 à 5 MC	2 MC	2,5 MC

Tableau 2.2: Epaisseur critique et désaccord de maille dans les systèmes auto-organisés

II.2.1.3. Bilan énergétique

Un modèle macroscopique simple permet de prévoir le mode de croissance, à partir de la tension interfaciale γ_{is} et des tensions de surface du substrat γ_s et du film γ_f . Cette approche prend en compte l'existence de contraintes lors de l'épitaxie du film

sur le substrat et suppose que le film déposé est en équilibre avec sa phase vapeur. On définit l'angle de mouillage θ selon le schéma de la figure 2.7:

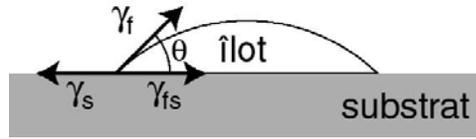


FIG. 2.7: Mouillage du film sur le substrat

L'équation d'Young s'écrit, dans ce modèle :

$$\gamma_s = \gamma_{fs} + \gamma_f \cdot \cos \theta \quad (2.2)$$

Si $\gamma_s < \gamma_{fs} + \gamma_f$ alors $\theta > 0$ et la croissance est tridimensionnelle

Si $\gamma_s \geq \gamma_{fs} + \gamma_f$ alors $\theta = 0$ et la croissance est bidimensionnelle

On peut alors définir des domaines de stabilité pour chaque type de croissance en fonction du désaccord de maille et de la différence de tension de surface entre le film et le substrat (Fig. 2.8).

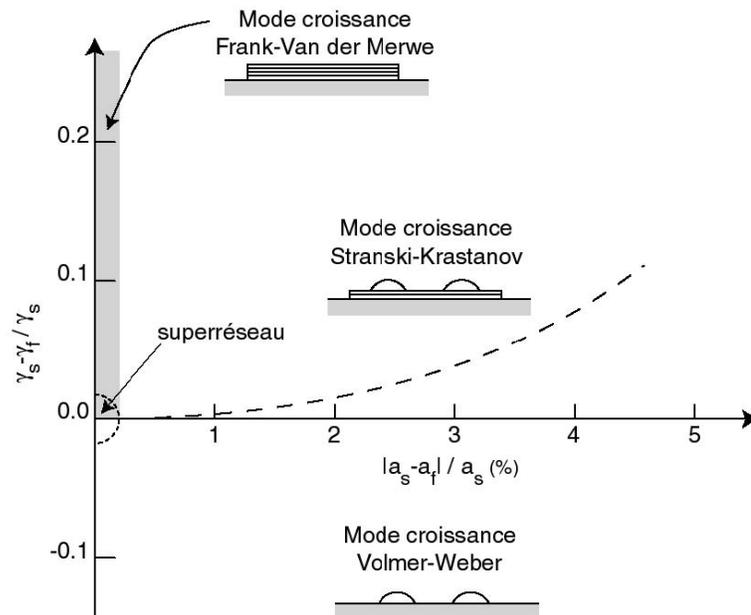


FIG. 2.8: Région de stabilité pour les 3 modes de croissance en fonction des tensions de surface, d'interface et du désaccord de maille [12]

Le bilan énergétique pour un film contraint peut s'exprimer au premier ordre comme la variation de l'énergie totale du système lors du passage 2D/3D:

$$\Delta E_{2D/3D} = \Delta E_{surface} + \Delta E_{élastique} \quad (2.3)$$

On retrouve ainsi les modes de croissance de la couche épitaxiée :

De manière générale, la création de surface libre au moment de la transition 2D/3D implique une augmentation de l'énergie ($\Delta E_{surface} > 0$) alors que la relaxation des contraintes induit une diminution de l'énergie ($\Delta E_{élastique} < 0$).

- Si $\Delta E_{surface} + \Delta E_{élastique} > 0$: le passage d'un mode de croissance 2D à un mode de croissance 3D augmente l'énergie totale du système et donc le mode de croissance 3D est défavorable. Ces conditions sont celles d'une épitaxie couche par couche.
- Si $\Delta E_{surface} + \Delta E_{élastique} < 0$: le mode 3D est alors favorable et l'on peut observer la transition 2D-3D.

La croissance de couches contraintes permet ainsi en une seule étape d'épitaxie (via le mode de croissance Stranski-Krastanov) de fabriquer des îlots tridimensionnels dont les dimensions les apparentent à des fils ou des boîtes quantiques. Ce phénomène entraîne une simplification de mise en oeuvre par rapport aux autres procédés de fabrication des nanostructures utilisant d'autres voies technologiques. Toutefois, le processus étant spontané, il nécessite la maîtrise des différents paramètres de la croissance pour contrôler leurs homogénéités en forme et en taille. L'auto-assemblage d'îlots a été observé pour la première fois dans le système InAs/GaAs par Goldstein et al. [13] et la croissance de Ge sur Si(001) a été intensivement étudiée : voir par exemple [14] pour une des premières études réalisée sur les premiers stades de croissance, et plus récemment [15] pour une étude mettant en oeuvre des dépôts chimiques en phase vapeur. Dans tous les cas, il existe une distribution de la taille des îlots. Cette distribution peut être large, voire bimodale, ce qui signifie qu'il existe deux familles

distinctes d'îlots de tailles moyennes différentes. En outre, les observations STM ou AFM (pour Atomic Force Microscopy) montrent que la répartition des îlots à la surface est régie par des mécanismes de nucléation et de croissance quasi-isotropes, ce qui entraîne simplement l'existence de distances moyennes préférentielles de séparations des îlots (voir Figure 2.9).

La densité des îlots est liée à leur distance moyenne de séparation. Cette distance moyenne est liée à l'interaction qui existe entre les îlots, c'est-à-dire à leur capacité à échanger de la matière, à coalescer ou à avoir des interactions répulsives. Dans certains systèmes (Ag/Pt pour les systèmes métalliques [16], PbSe/PbTe pour les systèmes semi-conducteurs [17]), l'hétéroépitaxie de quelques monocouches (MC) crée un ensemble de dislocations. Les interactions élastiques entre ces dislocations suffisamment mobiles font que les dislocations s'organisent en réseaux périodiques.

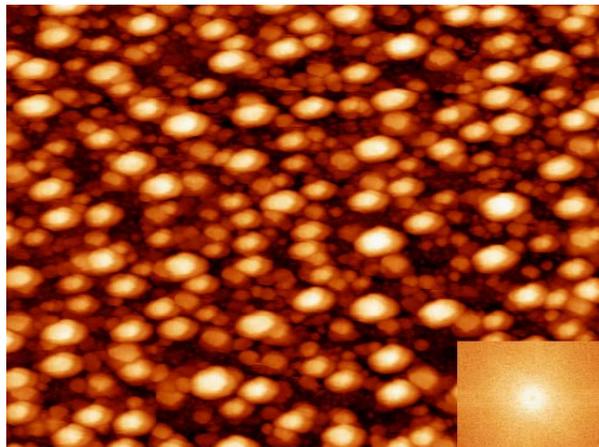


FIG. 2.9: Un exemple de croissance Ge/Si(001), en épitaxie par jets moléculaires. Quantité équivalente de Ge déposée : 9\AA . Température du substrat : 550°C . Échelle de l'image : $700\times 700\text{ nm}$.

La croissance ultérieure d'îlots de petite taille tend à s'organiser d'une façon ordonnée par rapport aux réseaux de dislocations, car les atomes voient, lors de leur déplacement atomique, une modulation du potentiel de surface. La densité de ces îlots dépend ici directement des distances d'équilibre entre les dislocations et de leurs interactions élastiques. En fait, même pour des systèmes où la transition Stranski-Krastanov reste cohérente, c'est-à-dire sans création de dislocations, il existe des

interactions élastiques entre les îlots via le substrat [18, 19]. Les champs de contraintes induits par les îlots modifient localement le potentiel chimique, et donc le transport de matière. La combinaison de contraintes internes aux substrats (par des réseaux de dislocations, par exemple) et des interactions élastiques entre îlots complique la compréhension de la croissance.

Dans le but d'utiliser les propriétés de faible dimensionnalité de ces objets (que ce soit pour des applications magnétiques, optiques ou électroniques), la distribution en taille d'une assemblée d'îlots est une caractéristique essentielle. De fortes densités sont aussi souhaitées, afin de maximiser la densité d'intégration des dispositifs.

Pour contrôler la densité d'îlots, un des moyens est de contrôler le placement individuel de chaque îlot. Il a donc été proposé d'utiliser des défauts sous la surface pour piloter la localisation des îlots.

Avec un bombardement focalisé d'ions Ga^+ sur une surface de Si [20], il est possible d'induire une nucléation préférentielle des îlots de Ge. L'influence sur la nucléation s'explique, à faible dose, par une différence locale de contrainte ou un effet surfactant de Ga. A forte dose, le bombardement induit un changement de morphologie. Le diamètre du faisceau d'irradiation est d'environ 100 nm, ce qui fixe une limite basse à la séparation des sites de nucléation. De plus, les sites sont créés un par un, ce qui limite l'efficacité du processus. Une variante possible de cette technique consiste à utiliser un masque et à implanter un substrat de silicium avec de l'oxygène [21, 22]. Avec cette méthode, l'oxygène implanté forme des inclusions sous la surface aux endroits correspondants aux ouvertures du masque. Ces inclusions induisent des champs de contrainte, qui modifient à la fois l'état de contrainte de la surface et sa morphologie. Des îlots de Ge déposés en épitaxie par jets moléculaires peuvent ensuite être localisés sur ces défauts. Cette technique s'affranchit de l'aspect séquentiel du bombardement focalisé, mais cette fois la résolution est limitée par la résolution limite des techniques de masquage.

A l'utilisation de défauts enterrés pour contrôler la densité, on peut donc ajouter comme condition que ces défauts doivent s'organiser spontanément en réseaux. Le contrôle du placement doit pouvoir s'effectuer de manière parallèle, c'est-à-dire agir à l'échelle de l'ensemble des îlots pour que la création et la mise en ordre de ces îlots ne soient pas trop lentes.

Lors d'une hétéroépitaxie Ge/Si, pour une épaisseur suffisamment grande de Ge, il se forme à l'interface Ge/Si un ensemble de dislocations, appelées dislocations de misfit. Ces dislocations servent à relâcher la contrainte qui apparaît à cause des différences de paramètre de maille entre les matériaux.

Sous certaines conditions expérimentales (en particulier la température de recuit), les dislocations ont suffisamment de mobilité pour s'organiser en lignes droites dans deux directions perpendiculaires. Shiryaev et al. [23] ont utilisé les plans de glissement des dislocations de misfit pour structurer une surface.

Ils ont ensuite observé la corrélation entre les positions de nucléation des îlots et les lignes de dislocations de misfit. Dans une autre étude [24], le Ge s'organise de la même manière, mais sans l'aide de plans de glissement qui viennent intersecter la surface. La croissance a été localisée par le champ de contrainte induit par les lignes de dislocations enterrées. Mais les densités d'îlots obtenues, fixées par les densités de lignes de dislocations, sont faibles, et les îlots ont des tailles importantes.

L'influence quantitative de défauts enterrés a été calculée dans le cadre de l'élasticité continue isotrope : pour des dislocations ou des inclusions [25], et pour le cas de réseaux de dislocations vis, coin, ou mixtes [26].

En pratique, deux méthodes peuvent être utilisées pour créer facilement des réseaux de dislocations enterrées : l'hétéroépitaxie et le collage moléculaire.

II.3. Hétéroépitaxie

La première méthode s'appuie sur l'hétéroépitaxie d'un matériau sur un substrat. L'épaisseur déposée doit être suffisamment grande. La différence de paramètre de maille entre la couche et le substrat induit des contraintes, qui sont relaxées par des dislocations de misfit à l'hétéro-interface, et la couche déposée n'est plus cohérente avec le substrat. Divers systèmes ont été testés pour organiser la croissance d'îlots : des îlots de InP sur $\text{In}_{0.61}\text{Ga}_{0.39}\text{P}/\text{GaAs}$ [27] et des îlots de Ge sur $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ [23, 24, 28]. Les limites de cette méthode sont liées au processus de création de ces dislocations enterrées : pour un système donné, la densité de dislocations est fixée par la différence des paramètres de maille. Il est possible de jouer sur cette densité en modifiant les concentrations relatives de l'alliage de la couche, mais la plage de variation reste restreinte. En outre, l'organisation des dislocations en réseaux n'est pas parfaite. Certaines expériences montrent une distance moyenne préférentielle avec une dispersion assez grande [28]. Le contrôle de la périodicité du réseau et de la cohérence de cette périodicité à grande échelle est le problème principal de cette méthode.

Exposons donc les critères qu'une méthode d'organisation doit remplir pour être efficace et intéressante, par rapport aux méthodes existantes :

- une organisation spontanée, c'est-à-dire une action collective sur l'assemblée d'îlots à l'échelle du substrat, pour éviter la lenteur d'un placement îlot par îlot ;
- un contrôle précis de la périodicité, avec une plage de variation assez grande (de l'ordre de quelques nanomètres à quelques centaines de nanomètres) ;
- des techniques classiques de microélectronique, pour pouvoir utiliser une technologie éprouvée et sur de grandes surfaces.

II.4. Collage moléculaire

Une solution pour répondre aux besoins exprimés auparavant est la création de réseaux de dislocations enterrées par l'utilisation du collage moléculaire. Le collage Si/Si fait en outre appel à des techniques classiques de microélectronique. L'avantage de ce processus de création des réseaux de dislocations est le contrôle précis de la périodicité, et la cohérence à très longue distance des réseaux. Les réseaux de dislocations créés par collage moléculaire induisent des champs élastiques périodiques. Ces champs élastiques périodiques en surfacent modulent le potentiel chimique, ce qui devrait permettre d'induire l'auto-organisation avec un pas contrôlé des îlots en surface. Un schéma de principe est donné à la figure 2.10.

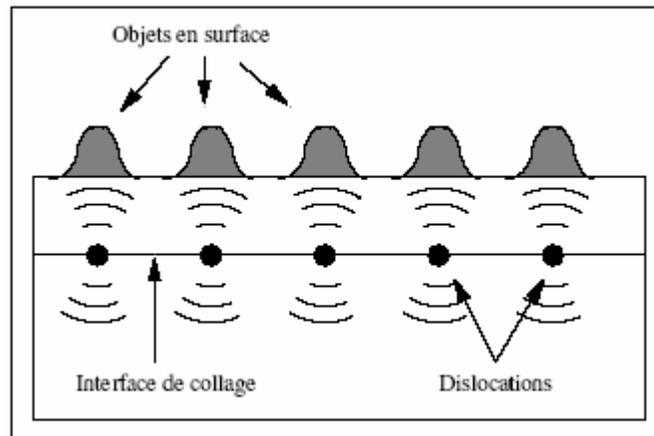


FIG. 2.10: Schéma de principe de l'auto-organisation par des réseaux de dislocation enterrés.

Le collage moléculaire* (Fig. 2.11) de deux cristaux peut produire trois types de réseaux de dislocation :

- un réseau de dislocations coins, lié à la différence de paramètre de maille entre les deux cristaux collés ;
- un réseau de dislocations vis, dont la périodicité est liée à l'angle de rotation dans le plan de collage entre les deux cristaux ;
- un réseau de dislocations mixtes, associé à la flexion entre les deux cristaux.

*Pour plus de détail sur le collage moléculaire, voir annexe 1

1. Silicium
2. oxydation thermique
3. implantation
4. nettoyage et collage moléculaire
5. Smart Cut
6. traitement thermique et polissage fin
8. recyclage de la plaque A

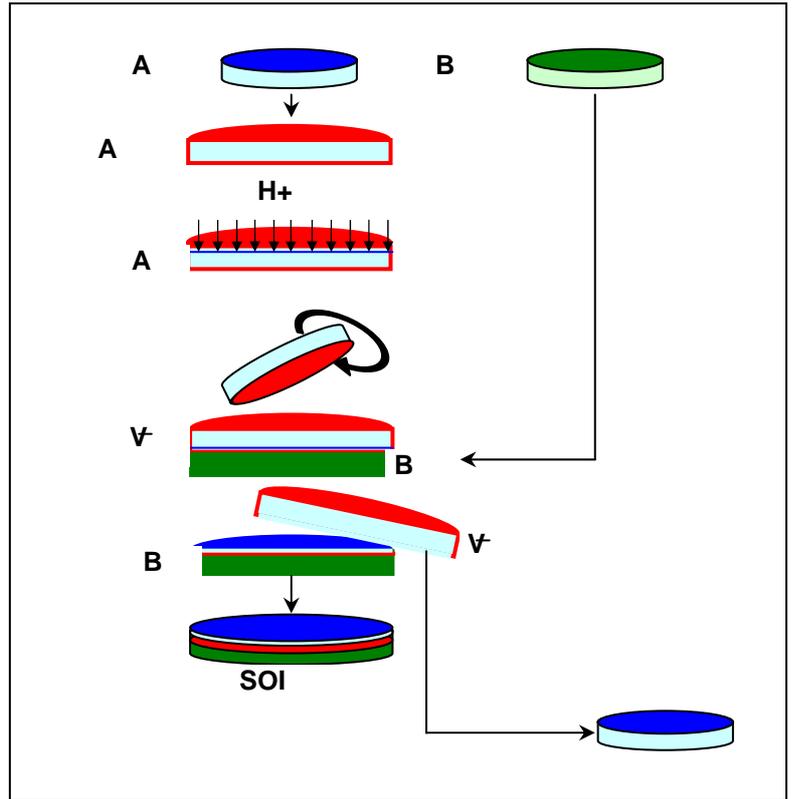


FIG. 2.11: Principe du collage moléculaire

II.5. Les différents types de réseaux de dislocations

L'interface entre deux grains cristallins ayant des orientations ou des paramètres de maille différents est appelée joint de grains. Dans notre cas, les grains en question sont le substrat et la couche cristalline mis en contact lors du collage épitaxial. En général, un joint de grains peut être une interface quelconque, mais à l'équilibre thermique il est plan afin de minimiser sa surface et donc de minimiser l'énergie d'interface. Il est constitué d'un réseau de dislocations qui permet d'accommoder la discontinuité cristalline entre les deux grains.

Les réseaux de dislocations, se formant au niveau de ces joints de grains, peuvent être dus à une flexion entre les deux grains, une torsion ou un désaccord de maille (Fig. 2.12). On parle alors de joints de désaccord paramétrique, de flexion ou de torsion.

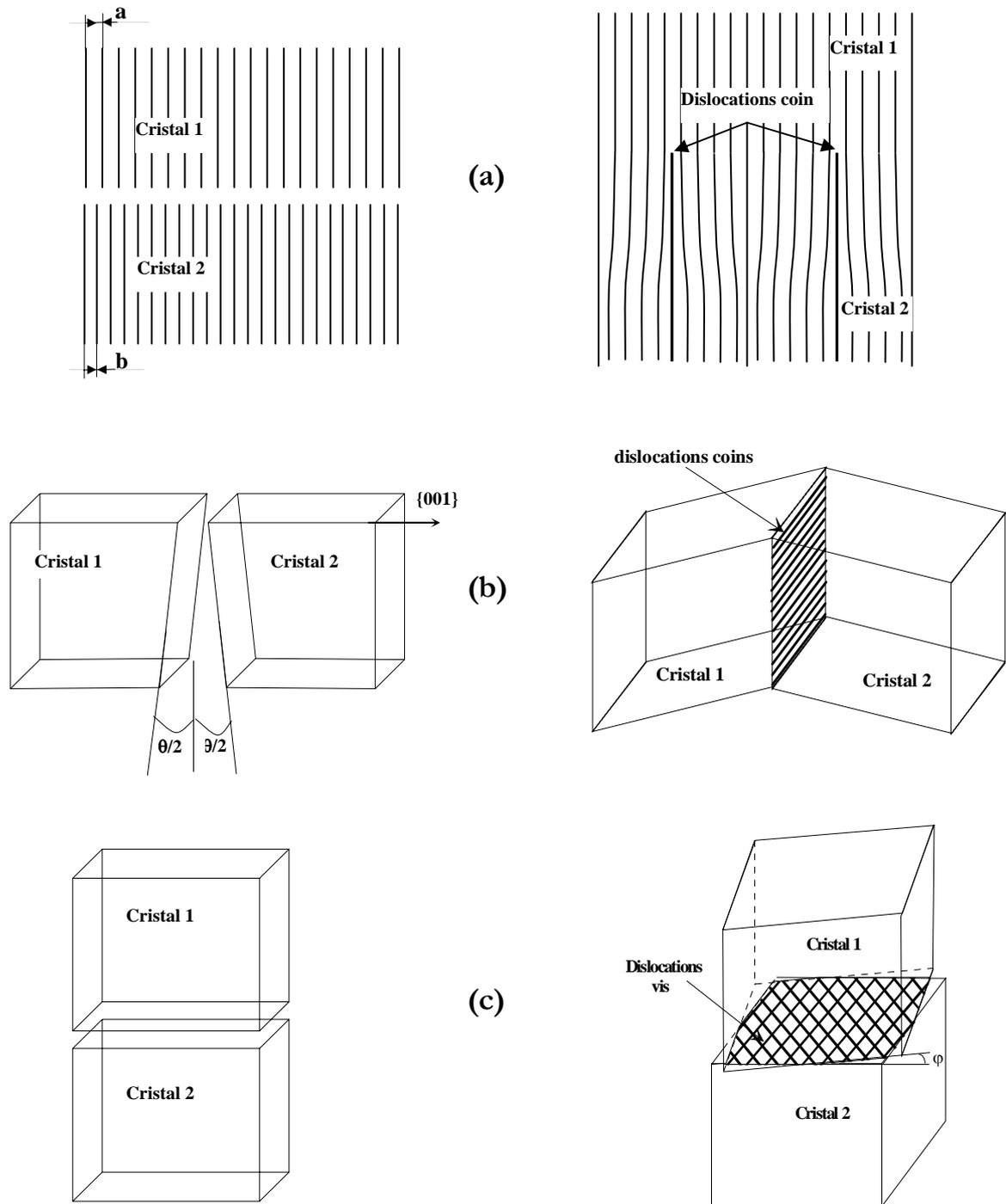


FIG. 2.12 : Les différentes désorientations cristallines possibles lors du collage et les réseaux dislocations qu'engendre le raccordement cristallin.

(a) le désaccord paramétrique : les paramètres de maille a et b des deux cristaux sont différents. Le raccordement engendre la formation d'un réseau uni ou bidimensionnel de dislocations coin.

(b) la flexion : les deux surfaces collées font un angle $\theta/2$. Lors du raccordement, ces deux désorientations produisent un réseau unidimensionnel de dislocations coin.

(c) la torsion : un des deux cristaux est tourné d'un angle φ autour d'un axe perpendiculaire au futur joint de grains. Après le raccordement cristallin, ce dernier type de désorientation engendre un réseau bidimensionnel de dislocations vis.

II.5.1. Un joint de désaccord de paramétrie, figure (2.12.a).

Si les deux paramètres de maille sont différents, un joint de grains composé d'un réseau uni ou bidimensionnel de dislocations coin va apparaître pour relaxer les contraintes de désaccord paramétrique dites, en terminologie anglaise, de « *misfit* ». Le « *misfit* » est bien connu dans le domaine de l'épitaxie, cependant, contrairement à ce qui se passe lors d'un dépôt au dessus de l'épaisseur critique d'un matériau, les dislocations formées ici, sont confinées et très périodiques dans le plan de l'interface de collage. Elles forment un véritable joint de grains entre les deux cristaux, considérés alors comme infiniment épais (c'est la raison pour laquelle les dislocations ne sont pas traversantes et restent confinées à l'interface de collage).

Notons que les premières observations de réseaux de dislocations de désaccord aux interfaces furent faites en microscopie électronique en transmission (TEM) par Matthews [29] sur le système Au sur Ag orienté (001) : $\Delta a/a = -0,2\%$ puis Jesser et Matthews [30] sur les systèmes γ -Fe sur Cu-(001) : $\Delta a/a = +1,6\%$, Co/Cu-(001) : $+2,4\%$ et Cr/Ni-(001) : $-3,1\%$ [31-a,b,c]. Pour tous ces métaux cubiques faces centrées (c.f.c.) orientés (001), les dislocations de désaccord formaient, à l'interface, un réseau carré suivant les directions $\langle 110 \rangle$.

II.5.2. Un joint de flexion, figure (2.12.b).

Une flexion est une rotation entre les plans cristallins des deux cristaux liés dont l'axe est contenu dans le plan de la jonction. Sachant que les deux surfaces que nous mettons en contact ne sont jamais parfaites et qu'elles présentent notamment un certain désalignement, une erreur de coupe ou, en terminologie anglaise, un "*miscut*", par rapport au plan cristallin idéal qui devrait terminer une surface {001}. Alors le raccordement de ces deux cristaux doit prendre en compte ce désalignement caractérisé par un certain angle, θ_s , défini entre le vecteur normal à la surface et le vecteur normal aux plans cristallins (cf. figure 2.13a). Cet angle est appelé angle de vicinalité ou angle d'erreur de coupe.

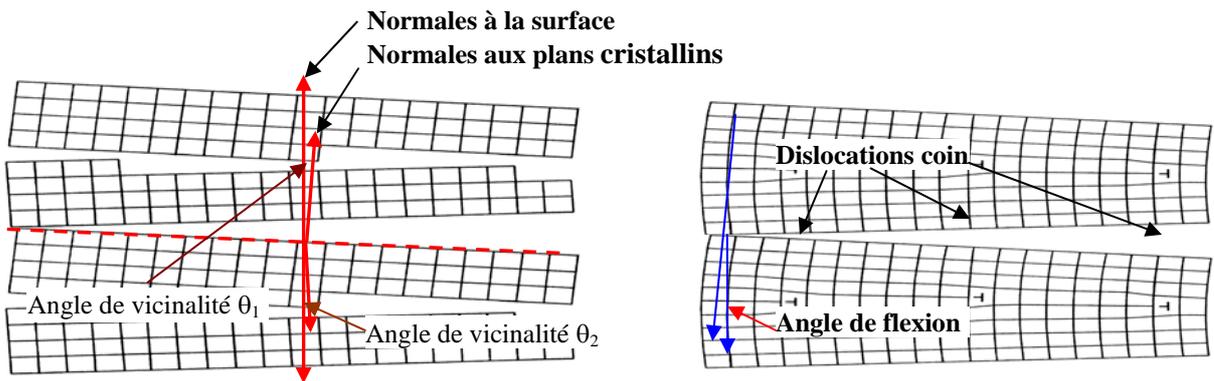


FIG. 2.13: a) Définition de l'angle de vicinalité de deux surfaces avant leur mise en contact. Cet angle correspond à l'angle entre le vecteur normal à la surface et le vecteur normal aux plans cristallins. b) Formation du réseau de dislocations coin pour relaxer les contraintes dues à la désorientation de flexion entre les deux cristaux. La désorientation de flexion correspond cette fois à l'angle entre les vecteurs normaux aux plans cristallins à l'interface de collage.

Cette désorientation de flexion va provoquer l'apparition d'un réseau unidimensionnel de dislocations coin dont le pas est, d'après la formule de Frank [32] :

$$A_{\text{coin}} = \frac{b}{2 \cdot \sin(\theta/2)} \quad (2.4)$$

Où b est le vecteur de burgers des dislocations et θ l'angle de flexion.

II.5.3. Un joint de torsion, figure (2.12.c).

Une torsion est une rotation entre les plans cristallins des deux cristaux liés, mais dont l'axe est perpendiculaire au plan de la jonction.

Lors du raccordement, si les deux cristaux présentent une désorientation en rotation, des contraintes périodiques vont apparaître avec la formation des liaisons covalentes. En effet, il est très facile de se rendre compte, avec une simple figure de Moiré, qu'il existe des zones de coïncidence et des zones où les colonnes atomiques ne sont pas les unes en face des autres lors de la superposition des deux cristaux (cf. figure 2.14a). Dans ces zones de bonne coïncidence, les colonnes atomiques de

chaque cristal vont se décaler élastiquement pour accommoder le décalage cristallin. Cependant, plus on s'éloigne du centre de ces zones, plus l'énergie nécessaire à la déformation des colonnes est importante. A une certaine distance, il est même énergétiquement plus favorable de changer de colonnes atomiques pour continuer le raccordement d'un cristal avec l'autre (cf. figure 2.14b). C'est ce décalage qui provoque l'apparition des dislocations vis.

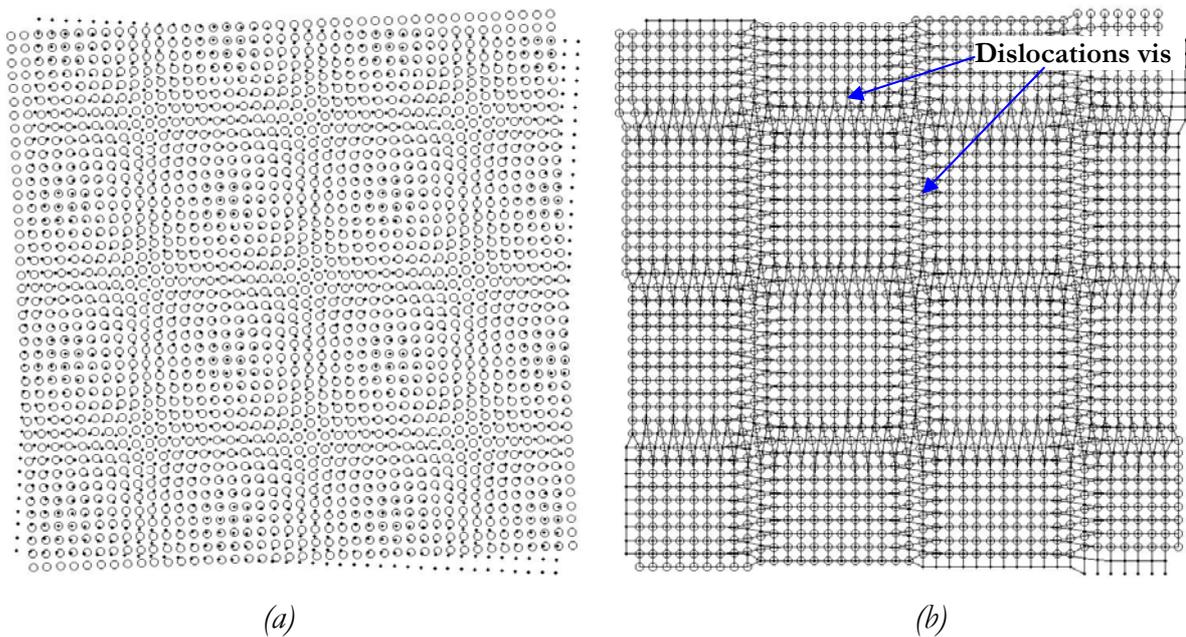


FIG. 2.14: a) Image de Moiré obtenue en superposant deux réseaux carrés identiques tournés l'un par rapport à l'autre d'un angle $\varphi/2$. b) Apparition du réseau carré de dislocations vis.

De même, la périodicité Λ d'un réseau de dislocations induit par une désorientation d'angle φ est donnée par la formule de Frank [33] :

$$A_{vis} = \frac{b}{2 \cdot \sin(\varphi/2)} \quad (2.5)$$

Dans le cas d'un réseau de dislocations vis, en utilisant le vecteur de Burgers des dislocations vis et l'angle de rotation φ , la formule de Frank s'écrit :

$$\Lambda = \frac{a_0}{2\sqrt{2} \cdot \sin(\varphi/2)} \quad (2.6)$$

L'équation (2.6) relie l'angle de rotation φ dans le plan entre les deux cristaux à la périodicité du réseau de dislocations, le long de la direction $\langle 110 \rangle$. Le contrôle de cet angle de rotation détermine donc la précision de la périodicité du réseau.

Dans certains cas de raccordement de deux surfaces, exemple celles du silicium $\{001\}$ qui présentent une désorientation de torsion et de flexion, ce ne sont pas exactement des dislocations coin pures mais des dislocations mixtes. En effet, les dislocations de flexion participent aussi au rattrapage de la désorientation de torsion.

Pour ce dernier cas, c'est-à-dire celui d'un réseau de lignes de dislocations mixtes et pour un angle de flexion φ , la formule de Frank s'écrit :

$$A_{mixte} = \frac{a_0}{2 \cdot \tan \theta} \quad (2.7)$$

en considérant que seule la composante normale à l'interface du vecteur de burgers des dislocations mixtes contribue à la flexion (vecteur effectif $b = a_0/2$). La figure 2.15 donne pour les cas de la rotation et le cas de la flexion, les valeurs de périodicité en fonction de l'angle de désorientation, calculée d'après la formule de Frank.

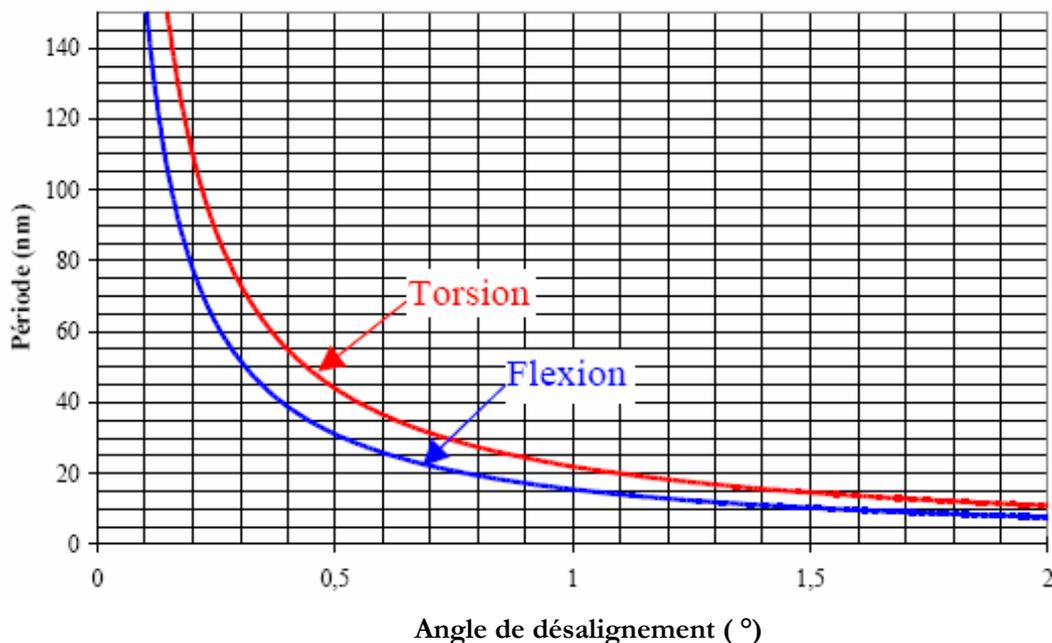
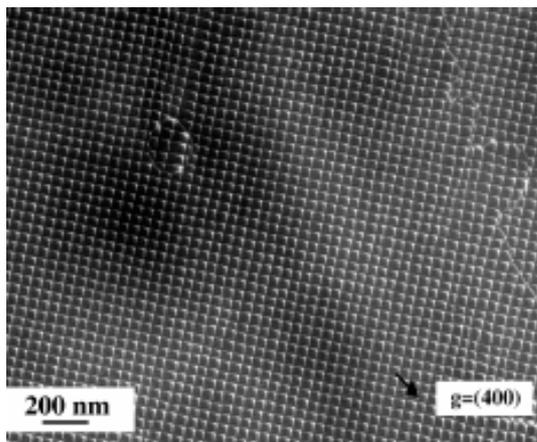


FIG. 2.15: Périodicité des réseaux de dislocations en fonction de l'angle de désorientation.

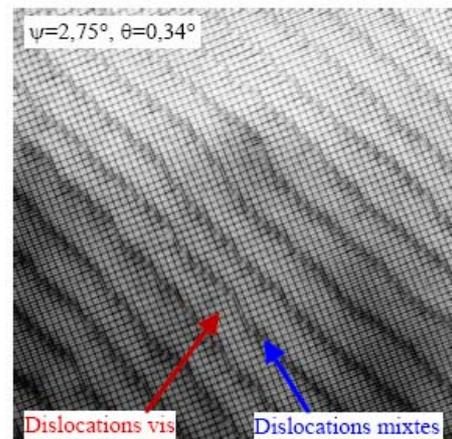
Puisque l'on veut que les cellules de dislocations soient plus grandes que les dimensions latérales des boîtes quantiques usuellement épitaxiées par EPVOM (au minimum 10 nm), on voit qu'il faut des angles de désorientation inférieurs à 1° .

La figure 2.16 montre deux images en TEM [34] de deux types de réseaux de dislocations : un réseau de rotation pure (Fig. 2.16a), et un réseau de flexion et rotation (Fig. 2.16b).

On peut noter sur ces images la grande régularité du réseau de dislocation vis. Les lignes de dislocations vis sont très droites, et orthogonales entre elles. On observe aussi sur l'image (2.16b) que les lignes de dislocations mixtes sont légèrement sinueuses autour d'une direction moyenne. Ces directions moyennes sont parallèles entre elles. De même, la figure 2.17 montre une image TEM de l'interface de collage. On peut observer que l'interface de collage est plane. Les dislocations sont confinées dans le plan d'interface.



(a) Réseau de rotation pure. Angles mesurés $\varphi = 0.43^\circ$, $\theta \approx 0^\circ$.



(b) Présence simultanée du réseau de flexion et du réseau de rotation. Angles mesurés $\varphi = 2.75^\circ$, $\theta = 0.3^\circ \pm 0.06^\circ$

FIG. 2.16: Microscopie électronique [34] en transmission en vue plane des réseaux de dislocations



FIG. 2.17: Microscopie électronique en transmission [34] en vue en coupe de l'interface de collage, d'un échantillon dont la rotation vaut environ 5° .

Chapitre 3

Synthèse bibliographique des récents travaux ayant un lien direct avec le sujet

Introduction

L'obtention d'un ordre à longue distance d'îlots s'obtient en ajoutant une modulation périodique au potentiel chimique de surface. Pour cela, on peut soit utiliser les propriétés intrinsèques des surfaces telles qu'une vicinalité ou bien tirer parti des défauts extrinsèques aux surfaces, tels que des dislocations, pour localiser les îlots. Dans ce cas, il faut trouver un moyen pour imposer l'ordre latéral des défauts qui induira à son tour l'ordre des îlots.

III.1. Organisations sur des surfaces structurées de manière naturelle

L'utilisation des surfaces vicinales [voir annexe 2] se base essentiellement sur le phénomène de la nucléation/croissances préférentielle en bord d'agglomération de marches. Avec de telles marches périodiques il est alors possible d'organiser les îlots [35-36] (Figs.3.1 et 3.2). On peut citer aussi par exemple la croissance de Si/Si vicinal (Schelling et al.,[37]) et celle de InAs sur des surfaces GaAs (Nishi et al., [38]) ou bien encore la croissance sur des réseaux en damiers réguliers qui combinent deux orientations particulières (Martrou et al., [39]). Le problème est alors d'obtenir une régularité à longue distance et à petite échelle des sites de nucléation ou des zones de croissance. Il est en général difficile de couper la surface selon une direction cristallographique précise et d'obtenir des bords de marche linéaires sur de longues distances.

Seules quelques surfaces sont énergétiquement stables (à titre d'exemple, les surfaces stables entre les deux directions (001) et (111) du silicium sont données par A.A. Baski et al., [40]).

La préparation des surfaces vicinales étant assez difficile, elle se cantonne souvent à de petites dimensions ($< 2 \text{ cm}$) ce qui en freine fortement l'utilisation .

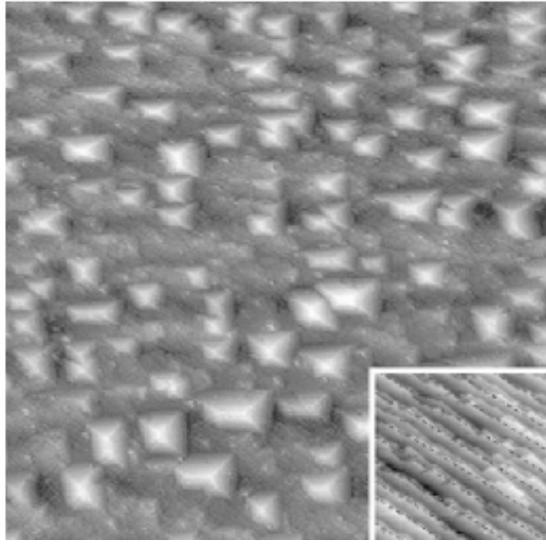


FIG. 3.1: Image STM ($500 \times 500 \text{ nm}$) montrant l'alignement d'îlots 3D de germanium sur les marches atomiques d'une surface de silicium désorienté de 2° par rapport au plan (001). (Patella et al. [35]).

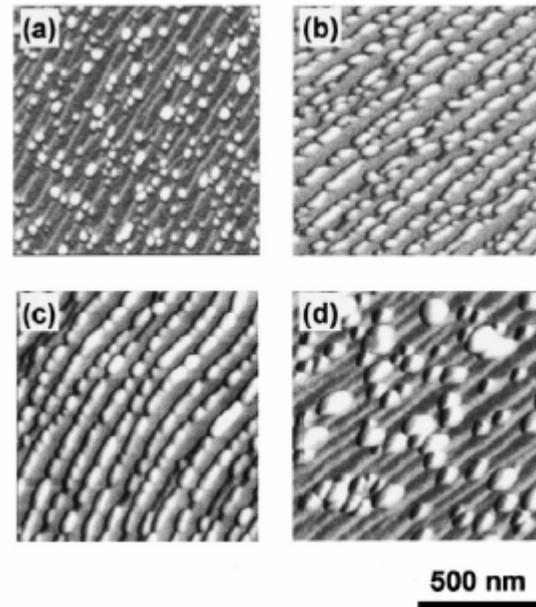


FIG. 3.2: Images de microscopie à force atomique montrant des alignements d'îlots 3D d'InAs sur les accumulations de marches de surfaces de GaAs désorientées de 2° par rapport au plan (001), pour des épaisseurs nominales d'InAs de (a) 2, (b) 2,2, (c) 2,3 et (d) 2,4 MC. (Kim et al. [36]).

III.2. Organisations sur des surfaces structurées de manière artificielle

Plutôt que d'utiliser la structuration naturelle d'un substrat, on peut structurer ce dernier de manière artificielle par lithographie (voir annexe 3).

Ainsi, Jin et al. [41–43] ont fait croître des îlots cohérents de germanium sur des mesas de silicium formés par épitaxie sélective dans les ouvertures périodiques (définies par

lithographie optique) d'une couche de silice formée en surface par oxydation thermique d'un substrat de silicium (Fig. 3.3). En fonction des paramètres de croissance (quantité de germanium déposé et température), un ou plusieurs îlots sont formés sur chaque mesa. Chaque mesa d'un même échantillon possède le même nombre d'îlots. De plus, les auteurs ont montré que dans bien des cas, ils sont ordonnés de la même manière sur chaque mesa (comme on peut le voir pour le cas particulier illustré par la figure 3.3).

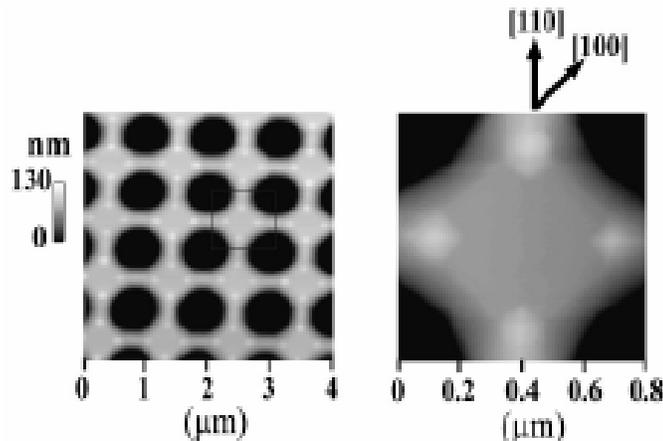


Fig. 3.3 : Images AFM d'îlots cohérents de germanium (les points blancs) auto-assemblés sur des mesas de silicium (les zones grises). (Jin *et al.* [43]).

Lee *et al.* [44] ont exploré une méthode similaire pour des îlots d'InAs sur GaAs. Ils ont fait croître ces îlots par épitaxie sélective dans les ouvertures périodiques (définies par lithographie optique interférométrique) d'une couche de silice déposée préalablement sur le substrat de GaAs. Différents diamètres d'ouvertures ont été étudiés (de 50 à 200 nm), malheureusement des gros îlots relaxés plastiquement sont systématiquement formés avec parfois des îlots cohérents.

Enfin, Zhong *et al.* [45,46] ont ordonné des îlots de germanium sur une surface structurée de silicium sans avoir recours à l'épitaxie sélective. Ils ont défini par lithographie holographique des réseaux 2D de cuvettes (de 500, 400 ou 370 nm de dimensions latérales et de profondeur inférieure à 20 nm) sur des substrats de silicium.

Ils ont ensuite épitaxié une couche tampon de silicium qui reproduit cette structure (Fig. 3.4a). Finalement le germanium est déposé et forme des îlots cohérents auto-assemblés ; un îlot apparaît dans chaque cuvette (Figs. 3.4b et 3.4c).

Il est donc possible d'organiser des îlots auto-assemblés ayant une bonne homogénéité en taille [46] sur des surfaces structurées par lithographie. Néanmoins, comme nous l'avons déjà signalé, il n'est pas possible grâce aux techniques de lithographie optique d'atteindre de fortes densités d'îlots et la lithographie électronique (qui, elle, le permet) est trop lente pour envisager une organisation d'îlots sur une grande surface.

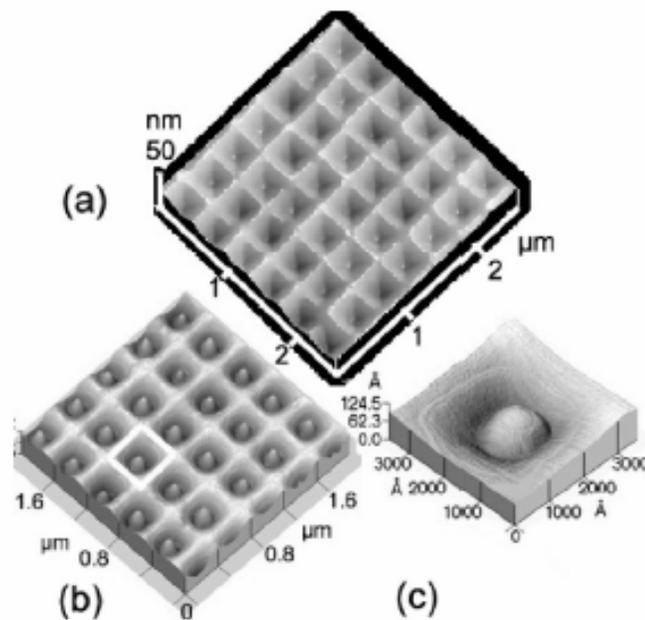


FIG. 3.4: Images AFM (a) d'un substrat de silicium structuré, après croissance de la couche tampon de silicium ; (b) après dépôt de 4 MC de germanium qui forment des îlots auto-assemblés ; (c) zoom sur un îlot de germanium. (Zhong et al. [46]).

III.3. Organisation de nanostructures grâce à des variations spatiales et organisées de la contrainte et de la déformation de surface

Concernant les dislocations d'interface, elles ont déjà été utilisées pour piloter la croissances des systèmes métalliques (Brune et al., [47]). Mais il s'agissait de dislocations de désaccord paramétrique où le pas était entièrement déterminé par les matériaux choisis.

Dans les systèmes semi-conducteurs, des réseaux de dislocations du même type avaient été étudiés par STM et microscopie électronique, mais pas exploités pour l'auto-organisation des boites quantique [Yamaguchi et al., [48], Belk et al., [49] et sprinholtz et al.[50]].

En 2000, Ross [51] a montré par microscopie électronique in situ qu'un champ de déformation de dislocation de type 60° était efficace pour positionner des boites quantiques au voisinage des lignes de dislocations. Ces dislocations résultaient du désaccord paramétrique de dépôts d'un alliage de SiGe sur Si. Hélas comme on le voit sur la figure 3.5, les lignes de dislocations ont des distances peu régulières.

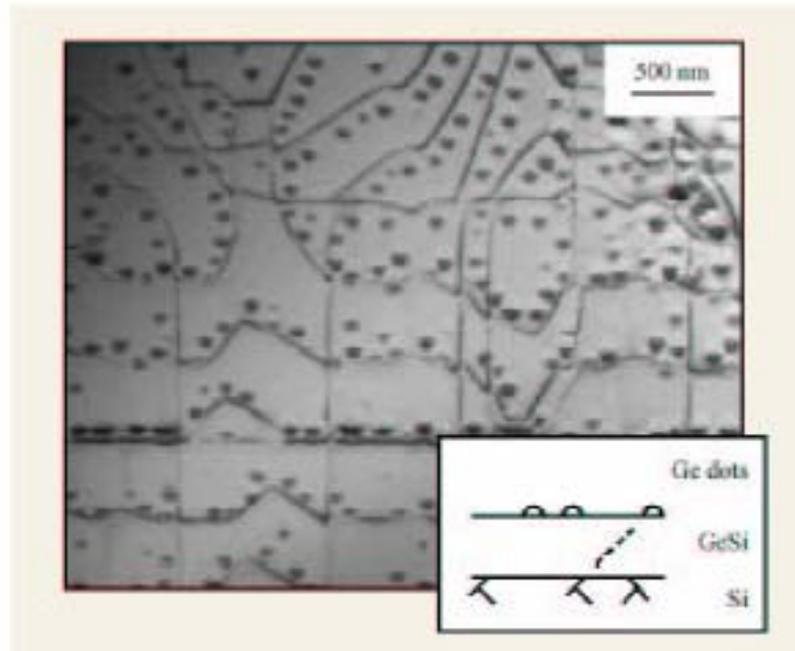


FIG. 3.5: Observation par microscopie électronique in situ de la localisation de boîtes quantiques de Ge près des lignes de dislocations mixtes à 60° (d'après Ross [51]).

Des réseaux de dislocations mieux ordonnées ont été obtenus dans la littérature en utilisant une couche SiGe relaxée sur un substrat Si, ensuite recouverte par du Si en tension (Xie et al., [52] et Shiryaev et al., [53]), ou bien une couche de GaAs relaxée sur un substrat InP (Peng et al., [54]). Ces méthodes induisent un ordre à longue distance des boîtes quantiques (respectivement Ge et InAs pour les deux exemples précédents), mais elles ont deux inconvénients majeurs.

Premièrement la densité est toujours trop faible puisque la distance entre les dislocations est d'environ de 0.2 à quelques microns (Teichert et al., [55]). Deuxièmement, les boîtes contiennent, dans leur très grande majorité, des dislocations émergentes venant des couches relaxées, ce qui annihile complètement les propriétés optiques et électroniques du confinement électronique. Il a été montré que la présence de dislocations atténue grandement les propriétés de photoluminescence car elle constitue une source de recombinaison pour les porteurs.

Pour que l'utilisation du réseau de dislocations soit intéressante d'un point de vue des transitions optiques, il faut que sa présence ne perturbe pas trop les propriétés de confinement des boîtes. Ceci peut être obtenu par des joints de grains de flexion ou bien de torsion faiblement enterrés à l'interface entre deux substrats monocristallins.

Cependant, la réalisation d'un joint de grains :

- ✓ de grande taille pour pouvoir utiliser de substrats de grand diamètre,
- ✓ dont le pas des réseaux de dislocations est parfaitement maîtrisé,
- ✓ et positionné au plus près d'une surface,

nécessite la résolution de plusieurs problèmes technologiques. Une partie de la solution a été réalisée, il y a quelques années, avec la fabrication de joints de grains par collage moléculaire de plaquettes de silicium de 100mm de diamètre, par exemple, par Benamara et al. [56-58] ou Gösele et Tong [59]. Cependant, ces joints de grains

étaient alors à l'interface entre deux plaquettes épaisses de silicium (500 μ m d'épaisseur) et donc très loin de la surface libre.

En 1997, un groupe de chercheur de l'université de Santa Barbara (UCSB) sont arrivés à coller « par fusion » deux plaquettes de GaAs (Eymery, [60]) réalisant ainsi des joints de grains de torsion, avec un angle de désorientation faible et contrôlé au dixième de degré entre les deux cristaux. Les collages GaAs/GaAs se sont avérés plus difficiles à réaliser que ceux Si/Si, essentiellement du fait du caractère binaire du composé.

Depuis plusieurs travaux expérimentaux et théoriques sont succédés pour apporter des solutions plus ou moins convaincantes quant à l'obtention d'un ordre à longue distance des boites quantiques. Citons ici les travaux pilotes de Frank Fournel [61] et Fabien leroy [5] pour le collage moléculaire du Si/Si et récemment celles de José Coelho [62] pour le collage moléculaire du GaAs/GaAs.

Dans ce qui suit nous présentons les principaux résultats obtenus par ces derniers trois chercheurs.

III.4. Principaux travaux expérimentaux et théoriques

III.4.1. Travaux de Frank Fournel 2001

Dans son travail, Frank Fournel [61] commença à tracer, à partir toujours des formules de Bonnet, la variation du déplacement maximal à la surface du film en faisant varier le pas de dislocations vis (Fig. 3.6), et l'épaisseur du film à déposer (Fig. 3.7).

Il constate alors qu'il est à environ 80% de la valeur asymptotique de ϵ_{13} pour une distance entre dislocations égale à 50nm soit 5 fois plus grande que l'épaisseur du film, fixé auparavant à 10nm.

Ce champ de déformation est d'autant plus important que l'épaisseur du film est faible et cela justifie sa tentative de fabrication d'un film ultra-mince.

Expérimentalement, il réussit à contrôler au nanomètre près l'épaisseur finale d'un film ultra-mince de silicium comme nous pouvons le voir sur la figure 3.8. Sur cette dernière figure, nous pouvons aussi constater que ce film a conservé les très bonnes qualités cristallines du film superficiel du SOI de départ et que l'interface de collage est très bien reconstruite.

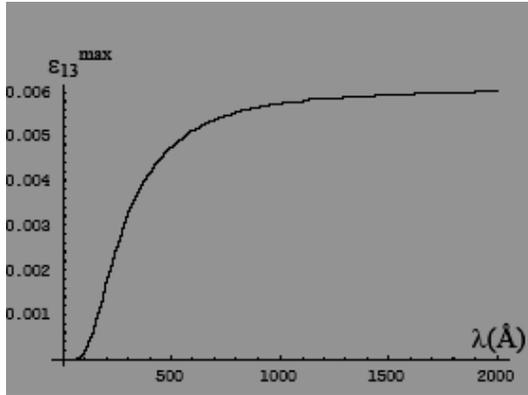


FIG. 3.6: Variation, en fonction du pas des dislocations, de la valeur maximale de la déformation ϵ_{13} à la surface du film de 10nm.

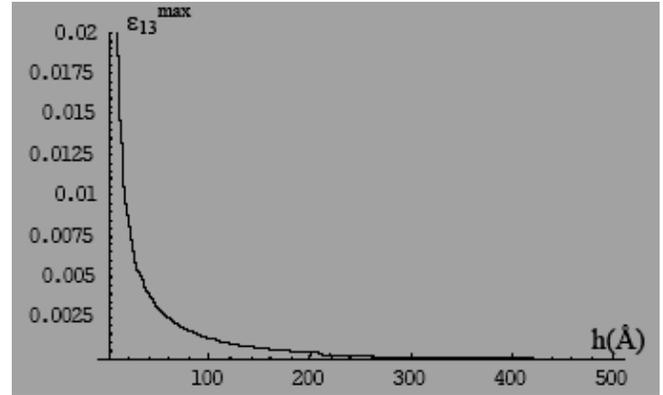


FIG. 3.7: Variation, en fonction de l'épaisseur du film, de la valeur de la déformation maximale à la surface du film ϵ_{13} en se plaçant avec une distance entre dislocations vis constante, égale à 50nm.

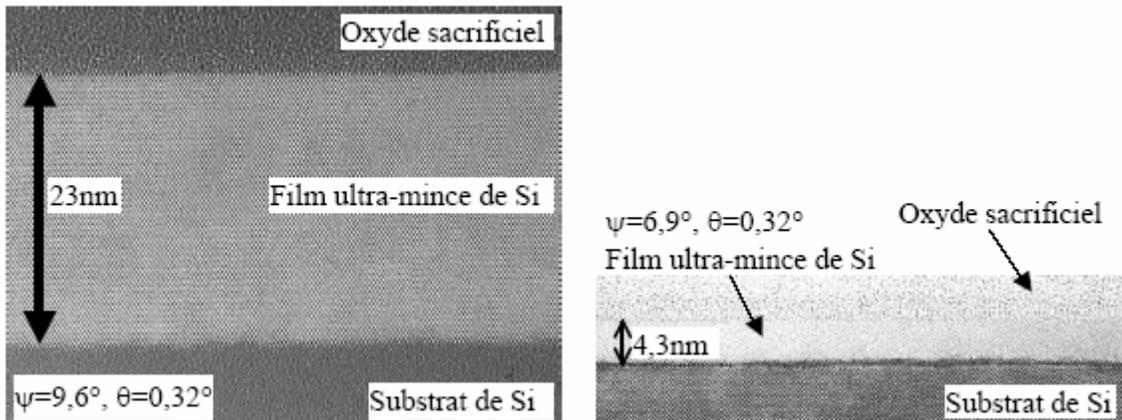


FIG. 3.8: Vues MET en coupe de deux substrats auto-organisant montrant la très bonne cristallinité des films ultra-minces et la reconstruction parfaite des interfaces de collage [61].

Cependant il remarqua la présence du réseau carré de dislocations vis due à la désorientation en rotation des deux plaquettes et la présence du réseau unidimensionnel de dislocations mixtes due à la désorientation flexion.

Il arriva en fin, avec un contrôle bien précis des angles et après stabilisation, à obtenir uniquement des dislocations vis avec un pas de $50,6 \pm 0,6 \text{ nm}$, comme le montre l'image MET (Fig. 3.9), ce qui donne, d'après la formule de Frank (cf. Equ.3.2 du chapitre 3), une désorientation de torsion de $0,435 \pm 0,005^\circ$.

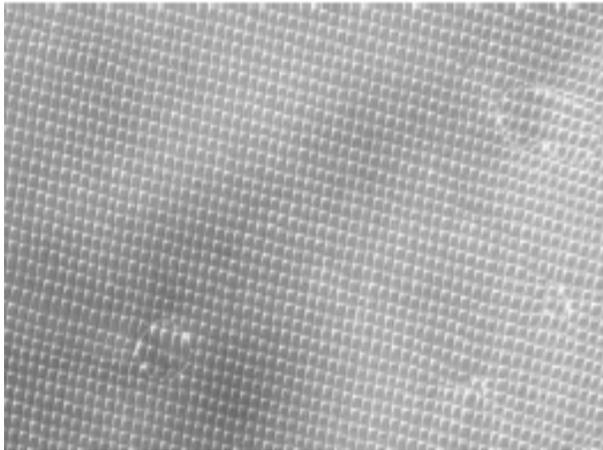


FIG. 3.9: Collage et interface d'un joint de grains. Vue plane de MET, le pas des dislocations vis est de $50,6 \pm 0,6 \text{ nm}$ ($0,435 \pm 0,005^\circ$) pour 50 nm visés [61].

III.4.2. Travaux Fabien Leroy 2003

En 2003, Fabien leroy [5] et partant de la formulation de Bonnet et Verger-Gaugry [63], en élasticité continue isotrope, a pu déterminé les valeurs des champs élastiques en tout point de l'échantillon du Si/Si et ceci dans le cas d'un réseau de dislocations vis (Figs. 3.10 et 3.11), associés à la torsion dans le plan de la couche collée par rapport au substrat, et pour les réseaux de dislocations coins, associés à la flexion (Fig. 3.12).

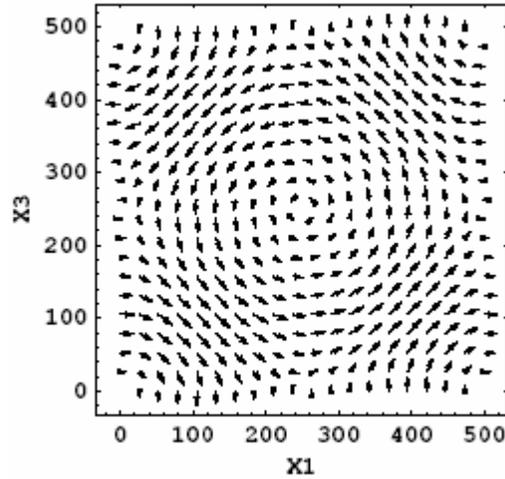


FIG. 3.10: Champ de déplacement à la surface de l'échantillon ($\varphi = 0.44^\circ$, $b = 100 \text{ \AA}$). La longueur des vecteurs est proportionnelle au module des déplacements. Le déplacement maximum, au quart de la diagonale, vaut 0.487 \AA ($\approx b/7.88$) [5].

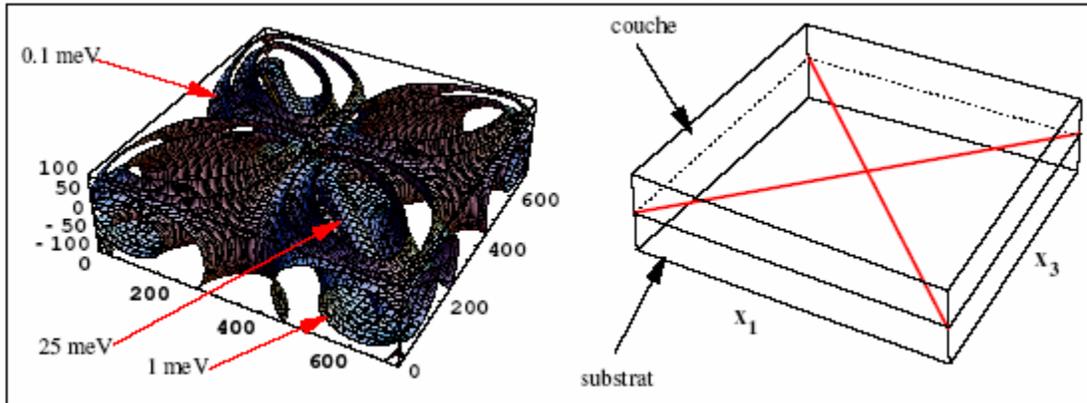


FIG. 3.11: Iso valeurs de la densité d'énergie élastique dans le volume de l'échantillon ($\varphi = 0.44^\circ$, $b = 100 \text{ \AA}$). [5]

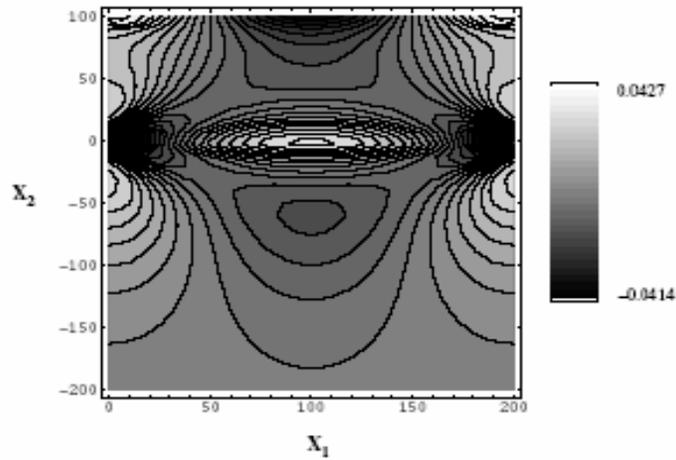


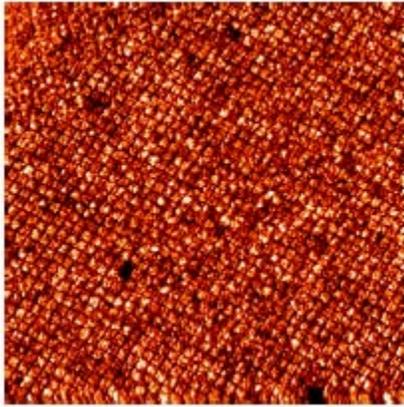
FIG. 3.12: Champ de déplacement u_1 . L'échelle est prise entre le minimum en surface ($x_1 = 100$) et le maximum entre les dislocations, à l'interface [5].

Les résultats obtenus ont permis de réaliser dans le cas de réseaux carrés de dislocations vis des simulations de diffraction de rayons X. Grâce à ces simulations, il a pu comparer les diagrammes de diffraction expérimentaux et simulés.

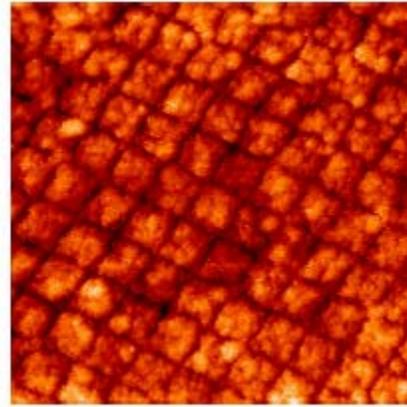
Dans la partie expérimental et après avoir réalisé des substrats auto organisés de Si/Si, par collage moléculaire, il a exposé une méthode pour contrôler précisément la localisation de la nucléation d'îlots en surface. Ce contrôle de la localisation sur un réseau carré permet de contrôler la densité d'objets en surface ainsi un réseau carré de 25 nm de coté donne une densité d'objets de $1.6 \times 10^{11}/\text{cm}^2$. Donc pour obtenir une densité de $1.0 \times 10^{12}/\text{cm}^2$, il faudrait graver des réseaux de 10 nm de coté. On se trouve donc dans des ordres de grandeurs intéressants pour les applications. En outre la méthode proposée est en principe directement applicable à une plaquette entière de silicium (diamètre 300 mm).

En fin, il a étudié les surfaces des échantillons collés et il a montré qu'en fonction de l'épaisseur de la couche collée, on observait deux types distincts de morphologie : aux grandes épaisseurs des surfaces avec des terrasses atomiquement plates, et aux faibles épaisseurs des surfaces rugueuses. Cette différence a été expliquée dans le cadre d'une instabilité morphologique des surfaces sous contrainte. Il a aussi montré que l'épitaxie de germanium sur ces surfaces, que ce soit à faible ou forte épaisseur, ne permettait pas d'avoir une organisation des îlots, avec des corrélations à longue distance.

Pour surmonter ce problème, il a utilisé des préparations chimiques spécifiques pour réaliser des gravures préférentielles des surfaces et il a réussi à obtenir des morphologies périodiques contrôlées, avec des distances de corrélation importantes. Ces morphologies se sont révélées efficaces pour organiser un dépôt d'îlots de Ge comme le montre la figure 3.13.



(a) Echelle : $800 \times 800 \text{ nm}$.
Echelle verticale min/max : 9 nm .



(b) Echelle : $200 \times 200 \text{ nm}$.
Echelle verticale min/max : 6 nm .

FIG. 3.13: Croissance du Ge/Si. Etude STM de l'échantillon B5 ($\varphi = 1.0^\circ$, $h = 10 \text{ nm}$) : surfaces à différentes échelles. Position nominale de la surface : 25 \AA sous l'interface de collage. Les directions $\langle 110 \rangle$ sont données par les directions des tranchées [5].

III.4.3. Travaux José Coelho 2004

Coelho en 2004 [62], arrivera, en utilisant la théorie élastique isotrope, à déterminer les champs élastiques et l'énergie en surface qui reproduisent l'organisation des dislocations faiblement enterrées, figure 3.14 et ce pour un joint de torsion et un joint de flexion de GaAs/GaAs.

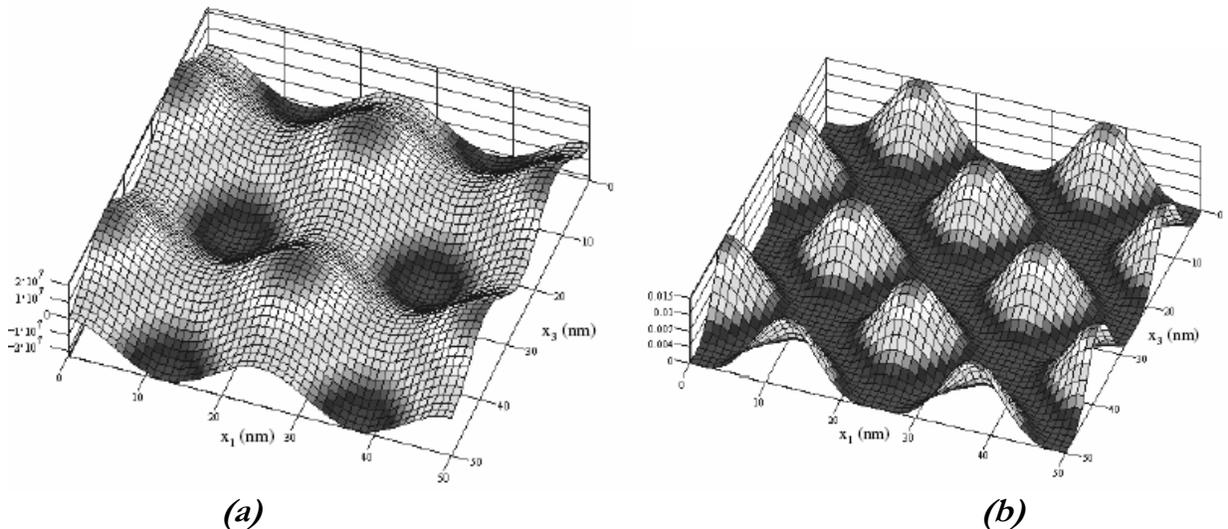


FIG. 3.14: (a) Composante non nulle du champ de contraintes σ_{31} ; en Pa ; et (b) densité volumique d'énergie élastique respectivement stockée et induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($D=25 \text{ nm}$, $h=20 \text{ nm}$)[62]

Il constata alors que leurs modulations sont d'autant plus fortes que l'épaisseur de la couche collée est faible. Il ne faudra donc pas que cette dernière soit trop importante.

D'autre part, pour une épaisseur donnée, en fonction de la périodicité des dislocations et des conditions de croissance, ce sera soit un joint de flexion, soit un joint de torsion qui sera plus favorable à l'organisation de nanostructures auto-assemblées. Cependant, il annonça qu'il est préférable de privilégier ce dernier type de joint car il est susceptible d'induire une organisation 2D. Malheureusement, il est quasiment illusoire de coller deux cristaux sans flexion car ils sont toujours légèrement vicinaux. Des joints mixtes devraient donc systématiquement se former au sein de nos substrats composites.

Dans l'étude expérimentale de son travail, il a utilisé la technique du collage épitaxial pour coller une couche mince de GaAs sur un substrat de GaAs en contrôlant les désorientations cristallines entre eux et obtenir un joint de grains au niveau de l'interface accommodent à la fois une torsion et une flexion entre les deux cristaux collés.

Pour que les champs élastiques des dislocations des joints de grains soient sensibles en surface, Coelho a travaillé avec des couches collées minces de 20 nm car au dessous de cette épaisseur, Patriarche *et al.* [64] ont observé des disparitions locales (sur plusieurs dizaines de nm²) du joint de grains.

Dans son travail, il s'attendait à ce que ces joints soient une simple superposition des réseaux de dislocations idéaux c'est-à-dire : un réseau 2D carré de dislocations vis pour l'accommodation de la torsion et un réseau 1D de dislocations mixtes pour l'accommodation de la flexion.

Et c'est bien ce qu'il a observé pour de nombreux échantillons. Ainsi, les images de la figure 3.15 montrent les différents réseaux de dislocations d'un même échantillon pour lequel l'angle de flexion est très inférieur à l'angle de torsion. Des cavités d'interface ou

des précipités résultant respectivement de la non planéité des surfaces mises en contact ou de la présence d'impuretés sont également visibles. Ce réseau 2D de dislocations vis accommode une torsion de $2,5^\circ$. Cet angle a été mesuré sur des clichés de diffraction électronique.

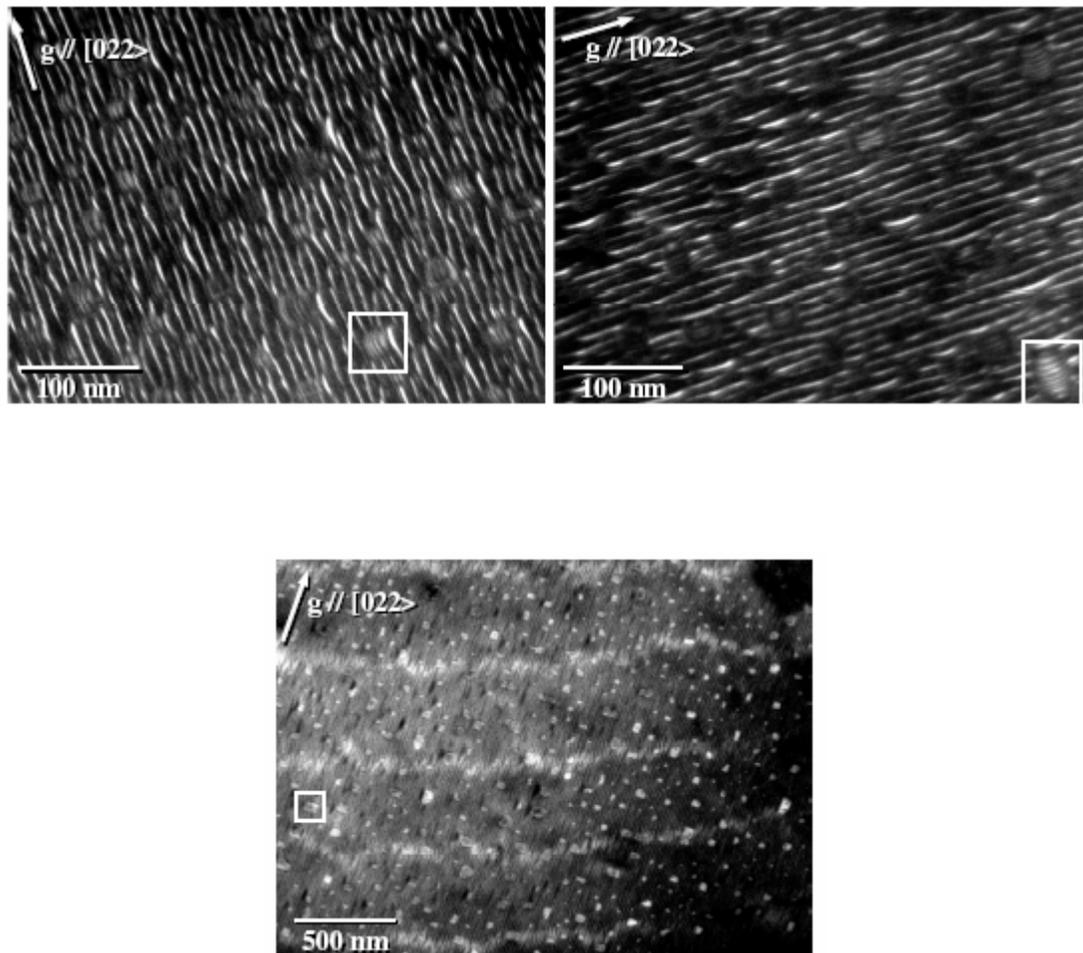


FIG. 3.15: Vues planes de MET de l'échantillon 1-a (de type 1). Les lignes blanches sur les images (a) et (b) sont des dislocations vis. Une cavité ou précipité d'interface est encadré sur chacune des images. Sur la figure (c) les lignes sinueuses blanches sont des dislocations mixtes [62]

III.5. Limites de la théorie élastique utilisée

Tous les travaux théoriques antérieurement cités [5,61,62] se sont basés sur la théorie élastique isotrope pour le calcul des champs élastiques de déformation (déplacement, déformation, contrainte et énergie). Mais il faut rester très prudent quant à la validité de ces calculs. Tout d'abord ils ont considéré des matériaux isotropes, or, les cristaux réels sont, par essence, anisotropes. Appliquer ces calculs dans des matériaux comme de l'argent, par exemple, dont le coefficient d'anisotropie $A=C_{44}/(2(C_{11}-C_{12}))$ vaut 6 (les C_{ij} sont les coefficients d'élasticité du matériau), ce qui en fait un matériau relativement anisotrope, demanderait de prendre beaucoup de précautions et notamment d'utiliser une théorie anisotrope. Nous pensons que cette remarque est toujours valable pour le silicium et le GaAs dont les coefficients d'anisotropie sont respectivement 1,56 et 1.82. A titre de comparaison, le coefficient d'anisotropie du tungstène vaut 1, ce qui en fait un matériau parfaitement isotrope.

Deuxièmement, et du fait que la théorie présentée se base sur une élasticité isotrope alors les résultats obtenus sont généralement approximatifs. Il y a deux bonnes raisons pour ces approximations. D'abord, les mathématiques et en particuliers les calculs numériques, deviennent de plus en plus compliqués quand l'anisotropie est considérée. Deuxièmement, dans de nombreux cas les erreurs impliquées dans l'approximation isotrope sont environ 20 à 30 pour cent et ceux-ci sont submergés par d'autres approximations dans la théorie de dislocation ou par des erreurs d'observation expérimentale [65]. Cependant, il y a un nombre croissant d'observations d'exactitude suffisante pour garantir une comparaison plus précise avec des calculs anisotropes.

Notons que la complexité du traitement anisotrope est considérablement réduite pour certaines configurations de dislocation rectilignes. De la il est plus commode d'utiliser la théorie anisotrope pour de telles dislocations.

III.6. Objectif principal du travail:

III.6.1. Hypothèses de travail

Dans notre étude, nous nous sommes basés sur les hypothèses suivantes :

- 1- Moyen d'organisation des nanostructures : les réseaux de dislocations enterrés
- 2- Les types de réseaux de dislocation utilisés :
 - a. Un réseau carré de dislocations vis accommodant une torsion ce qui correspond à un joint de torsion.
 - b. Un réseau unidirectionnel de dislocations coin accommodant une flexion ce qui correspond à un joint de flexion.
 - c. Un réseau unidirectionnel de dislocations coin accommodant un désaccord paramétrique ce qui correspond à une hétérointerphase.
- 3- L'interface couche/substrat est considérée parfaitement plane.

III.6.2. Objectifs à atteindre:

- 1- Détermination des champs de déformation élastique (déformation, contrainte et énergie) générés par ces réseaux de dislocations enterrés en utilisant pour la première fois la théorie d'élasticité anisotrope.
- 2- Interprétation et comparaison des résultats obtenus dans notre cas à ceux obtenus dans le cas d'une élasticité isotrope.

Chapitre 4

Formulation du problème

Introduction

Hormis les joints à bas angle, la description des interfaces est complexe et nécessite souvent un vocabulaire approprié pour décrire les défauts interfaciaux. En effet, face à la variété et à la complexité des observations, il est nécessaire de disposer de modèles mathématiques aussi réalistes que possible, qui puissent décrire correctement les champs élastiques inaccessibles à la mesure expérimentale.

En adoptant le formalisme d'Eshelby [66] et Stroh[67-a,b], Tucker[68] est parvenu le premier à exprimer, dans le cadre de l'élasticité anisotrope, le champ des déplacements d'une dislocation rectiligne sur un joint plan. Par la suite, Humble et Forwood [69] corrigent certaines erreurs typographiques de la formule (27) de Tucker [68] et vérifient la validité de leurs expressions en simulant le contraste de telle dislocation.

En général, la mise en équation d'un tel problème aboutit toujours à un polynôme d'ordre six dont les solutions ne sont exactes que pour certains cas particuliers ayant une haute symétrie, Head, [70].

Pour résoudre le problème d'une dislocation rectiligne à l'interface de deux milieux anisotropes de nature différente, Bonnet et Dupeux [71], et partant d'une analyse différente de celle de Tucker [68], arrivent à obtenir une expression analytique équivalente à celle de Humble et Forwood [69]. Une application numérique est alors proposée pour le système Al/Al₂Cu dont le but d'examiner la contribution élastique de l'énergie de ligne et le champ de dilatation.

L'analyse du problème devient plus difficile lorsque les surfaces libres des bicristaux sont prises en considération comme le prouve le nombre réduit d'articles à ce sujet. Citons que Chou [72] a exprimé le champ des contraintes pour une dislocation vis dans un matériau à trois couches et que Nabarro et Kostlan [73] et

Moss et Hoover [74] ont considéré le cas d'une dislocation coin placée sur le plan moyen d'une lame élastiquement homogène.

Dans ce chapitre, et en se basant sur analyse en série de Fourier des champs de déformations, nous allons présenter en utilisant la théorie élastique anisotrope, les résultats d'une investigation des champs élastiques (déplacement, contrainte et énergie) générés par un réseau carré de dislocations vis situé à l'interface de collage d'une couche mince monocristalline sur un substrat monocristallin.

IV.1. Géométrie du problème:

La figure 4.1, montre en détail, la géométrie du problème pour un réseau carré de dislocations vis, qui se développent périodiquement dans le plan d'une interface de collage d'une couche monocristalline mince, d'épaisseur h , sur un substrat monocristallin. Les deux milieux $+$ ($x_2 > 0$) et $-$ ($x_2 < 0$) sont élastiquement anisotropes et caractérisés respectivement par les constantes élastiques C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- . Cet arrangement bi-périodique de défauts linéaires est parallèle au plan Ox_1x_3 d'un repère cartésien $Ox_1x_2x_3$ convenablement choisi, tel que Ox_2 est perpendiculaire à l'interface de collage. La période des dislocations interfaciales est Λ .

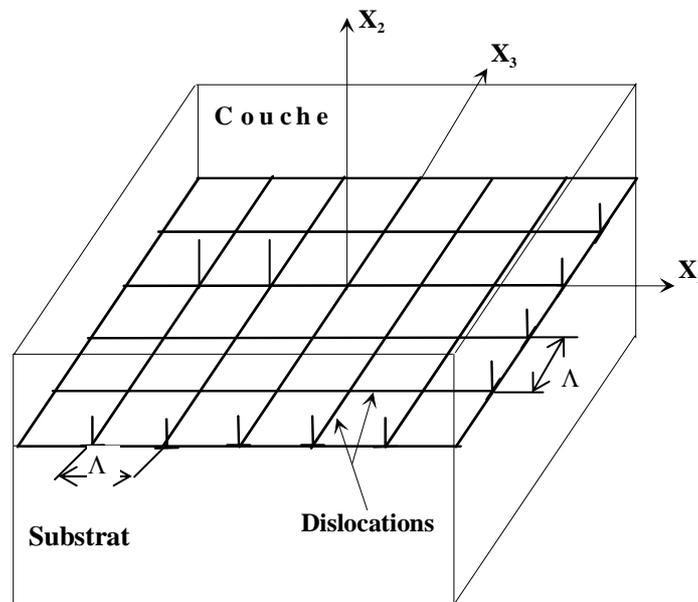


FIG. 4.1: Schéma d'une couche monocristalline, d'épaisseur h , collée sur un substrat monocristallin, avec un réseau carré de dislocation vis à l'interface.

Remarque importante : Dans un premier temps, considérons un seul réseau de dislocations vis, périodique selon Ox_1 , dont le vecteur de burger est orienté selon Ox_3 .

IV.1.1. Champ des déplacements

Comme la déformation est supposée périodique le long de l'axe Ox_1 , elle peut être développée en série de Fourier en tout point des deux milieux hors des régions de discontinuité (c'est-à-dire hors du cœur des dislocations) :

$$\varepsilon_{ij}(x_1, x_2) = \sum_G \varepsilon_{ij}^{(G)}(x_2) \cdot \exp\left(\frac{2i\pi \cdot n}{\Lambda} \cdot x_1\right) \quad (4.1)$$

pour $|x_2|$ tendant vers l'infini tous les coefficients tendent vers zéro (préservation des unités structurales), sauf $\varepsilon_{ij}^{(G=0)}(x_2)$ qui est supposé constant.

L'intégration de (4.1) donne le champ de déplacement u_k qui s'écrit:

$$u_k = u_k^0 + v_{k1}^0 \cdot x_1 + v_{k2}^0 \cdot x_2 + \sum_{n \neq 0} U_k^{(n)}(x_2) \cdot \exp(2i\pi \cdot g \cdot n \cdot x_1) \quad k=1,2,3 \quad (4.2)$$

Avec $1/g = \Lambda$

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

Dans le cas des dislocations intrinsèques v_{k1}^0 et v_{k2}^0 doivent être égales à zéro pour éviter qu'il y ai des contraintes à longue distance. u_k^0 est une constante choisie égale à zéro par commodité.

Donc l'expression du champ de déplacement s'écrit:

$$u_k = \sum_{n \neq 0} U_k^{(n)}(x_2) \cdot \exp(2i\pi \cdot g \cdot n \cdot x_1) \quad k=1,2,3 \quad (4.3)$$

Ce champ des déplacements u_k doit satisfaire la loi de Hooke généralisée, reliant contraintes et déformations et qui s'écrit, pour un matériau cubique (faces centrées, centré ou blende), élastiquement anisotrope de la façon suivante :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl} \quad (4.4)$$

où σ_{ij} est le tenseur des contraintes ('*stress tensor*'),
 C_{ijkl} le tenseur des rigidités ('*stiffness tensor*') et
 ε_{kl} celui des déformations ('*strain tensor*').

$$\text{Avec} \quad \varepsilon_{kl} = \frac{1}{2}(u_{k,l} + u_{l,k}) \quad (i, j, k, l = 1, 2, 3) \quad (4.5)$$

En substituant (4.5) dans (4.4), nous obtenons :

$$\varepsilon_{ij} = 1/2 (C_{ijk l} \cdot u_{k,l}) + 1/2 (C_{ijkl} \cdot u_{l,k}) \quad (4.6)$$

Comme le 3^{ème} et le 4^{ème} indice des constantes élastiques peuvent être interchangés,

et en tenant compte de la symétrie des C_{ijkl} ($C_{ijkl} = C_{ijlk}$) on peut avoir donc:

$$\varepsilon_{ij} = 1/2 (C_{ijk l} \cdot u_{k,l}) + 1/2 (C_{ijlk} \cdot u_{l,k}) \quad (4.7)$$

Etant donné que les indices muets k et l prendront les mêmes valeurs, donc les

deux termes à droites sont égaux et par conséquent :

$$\varepsilon_{ij} = C_{ijk l} \cdot u_{k,l} \quad (4.8)$$

Dans la région des distorsions, l'état d'équilibre des contraintes s'écrit :

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (4.9)$$

$$\Rightarrow C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} = 0 \quad (4.10)$$

En remplaçant u_k par son expression (4.3) dans (4.10), nous obtenons trois équations différentielles qui peuvent s'écrire de la façon suivante:

$$C_{j1k1}(-4\pi^2 g^2 n^2) U_k^{(n)} + (C_{j1k2} + C_{j2k1})(2.i.\pi.n.g) U_{k,2}^{(n)} + C_{j2k2} U_{k,22}^{(n)} = 0 \quad (4.11)$$

La solution générale de cette équation s'écrit sous forme:

$$U_k^{(n)}(x_2) = \lambda'_{\alpha_k} \cdot \exp(2.i.\pi.g.n.p_\alpha.x_2) \quad (4.12)$$

Où les λ'_{α_k} et p_α sont des constantes complexes à déterminer à l'aide du système à 3 équations linéaires suivant, obtenu en remplaçant (4.12) dans (4.11):

$$[C_{j1k1} + (C_{j1k2} + C_{j2k1})p_\alpha + C_{j2k2}p_\alpha^2] \cdot \lambda'_{\alpha_k} = 0 \quad (4.13)$$

$$\text{et qui s'écrit:} \quad A_{jk} \lambda'_{\alpha_k} = 0 \quad (4.14)$$

$$\text{où } A_{jk} = [C_{j1k1} + (C_{j1k2} + C_{j2k1})p_\alpha + C_{j2k2} \cdot p_\alpha^2]$$

sachant que :

en notation tensorielle on a : ij ou $kl = 11, 22, 33, 23$ ou $32, 13$ ou $31, 12$ ou 21 .

et en notation matricielle on a : m ou $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$.

En adoptant donc pour les constantes élastiques la convention à deux indices, l'équation (4.13) s'écrit, sous forme explicite, de la manière suivante :

$$\begin{pmatrix} C_{11} + (C_{16} + C_{61})p_\alpha + C_{66}p_\alpha^2 & C_{16} + (C_{12} + C_{66})p_\alpha + C_{62}p_\alpha^2 & C_{15} + (C_{14} + C_{65})p_\alpha + C_{64}p_\alpha^2 \\ C_{61} + (C_{66} + C_{21})p_\alpha + C_{26}p_\alpha^2 & C_{66} + (C_{62} + C_{26})p_\alpha + C_{22}p_\alpha^2 & C_{65} + (C_{64} + C_{25})p_\alpha + C_{24}p_\alpha^2 \\ C_{51} + (C_{56} + C_{41})p_\alpha + C_{46}p_\alpha^2 & C_{56} + (C_{52} + C_{46})p_\alpha + C_{42}p_\alpha^2 & C_{55} + (C_{54} + C_{45})p_\alpha + C_{44}p_\alpha^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda'_{\alpha 1} \\ \lambda'_{\alpha 2} \\ \lambda'_{\alpha 3} \end{pmatrix} = 0$$

Ce système est similaire à celui obtenu par Eshelby et col [49] dans le cas d'une dislocation rectiligne ($\Lambda > h$) placée dans un milieu homogène en élasticité anisotrope. Il admet pour chaque p_α des solutions $\lambda'_{\alpha k}$ non triviales si le déterminant de A_{jk} est égal à zéro :

$$\det(A_{jk}) = \left| C_{j1k1} + (C_{j1k2} + C_{j2k1}) \cdot p_\alpha + C_{j2k2} \cdot p_\alpha^2 \right| = 0 \quad (4.15)$$

En calculant ce déterminant, nous obtenons une équation du sixième degré en p_α ($\alpha = 1, \dots, 6$) et qui s'écrit :

$$K_0 + K_1 p + K_2 p^2 + K_3 p^3 + K_4 p^4 + K_5 p^5 + K_6 p^6 = 0 \quad (4.16)$$

où $K_0, K_1, K_2, K_3, K_4, K_5$ et K_6 sont fonctions des constantes élastiques C_{ij} , leurs expressions sont :

$$K_0 = C_{11}C_{66}C_{55} - C_{11}C_{56}^2 - C_{55}C_{16}^2 + 2 \cdot C_{16}C_{15}C_{56} - C_{66}C_{15}^2.$$

$$K_1 = C_{15}C_{16}(C_{56} + 2 \cdot C_{25} + C_{46}) + 2 \cdot C_{55}(C_{11} \cdot C_{26} - C_{16}C_{12}) + C_{11}(C_{66}(C_{45} + C_{35}) - 2C_{56}(C_{46} + C_{25})) + 2C_{56}(C_{15}C_{12} + C_{16}C_{14}) - 2C_{45}C_{16}^2 - 2C_{26}C_{15}^2$$

$$K_2 = C_{11}C_{22}C_{55} + 2C_{16}C_{26}C_{55} + 2C_{11}C_{26}(C_{45} + C_{35}) - 2C_{16}C_{66}(C_{45} - C_{35}) + C_{44}C_{11}C_{66} - 2C_{11}C_{24}C_{56} - C_{16}C_{56}(2C_{46} + 3C_{25} + C_{15}) - C_{25}C_{11}(2C_{46} - C_{25}) - 4C_{45}C_{16}C_{12} - C_{55}C_{12}(2C_{66} + C_{12}) - C_{11}C_{46}^2 -$$

$$C_{44}C_{16}^2 + 2C_{15}C_{16}C_{24} + C_{15}C_{66}(C_{56} + 2C_{25}) + C_{15}C_{12}(2C_{25} + C_{46}) - \\ 2C_{15}C_{26}(C_{25} + C_{14}) + C_{12}C_{14}(C_{25} + C_{56}) + C_{12}C_{25}C_{56} - C_{46}C_{15}C_{66} + C_{46}C_{12}(C_{14} + C_{56}) - \\ C_{66}(C_{14}^2 + C_{56}^2)$$

$$K_3 = 2C_{55}C_{22}C_{16} + (C_{45} + C_{33})(C_{11}C_{22} + C_{66}^2) - 2C_{45}C_{66}^2 + 4C_{33}C_{16}C_{26} + 2C_{44}C_{11}C_{26} + \\ 4C_{24}C_{16}C_{14} + 2(C_{56} + C_{14})(C_{12}C_{25} - C_{24}C_{16}) - C_{46}C_{56}(C_{66} - 3C_{12} - C_{16}) - \\ 2(C_{46} + C_{25})(C_{11}C_{24} + C_{16}C_{25}) - C_{16}C_{46}^2 - 2C_{55}C_{26}C_{12} - 2C_{44}C_{16}C_{12} + \\ (C_{12} + 2C_{66})(C_{15}C_{24} + C_{56}^2 + C_{56}C_{14} - 2C_{45}C_{12}) + C_{15}C_{12}C_{24} - 2C_{26}C_{14}^2 + \\ C_{15}C_{26}(2C_{25} - 3C_{46}) - C_{66}C_{56}^2 - 2C_{56}C_{14}C_{26} + 2C_{66}C_{56}^2 + C_{14}C_{66}(2C_{25} - C_{46}) + \\ C_{14}C_{12}C_{46} - (C_{14} + C_{56})(C_{66}C_{56} + 2C_{22}C_{15})$$

$$K_4 = C_{22}C_{55}C_{66} + 2C_{45}C_{16}C_{22} + 2C_{35}C_{22}C_{16} + 2C_{35}C_{26}C_{66} + C_{44}C_{11}C_{22} + 2C_{44}C_{16}C_{26} - \\ 4C_{16}C_{25}C_{24} - 2C_{16}C_{24}C_{46} - C_{11}C_{24}^2 - C_{55}C_{26}^2 - 4C_{12}C_{26}C_{45} - 2C_{45}C_{26}C_{66} - 2C_{44}C_{12}C_{66} - \\ C_{44}C_{12}^2 + 2C_{15}C_{26}C_{24} + 2C_{12}C_{24}C_{56} + 2C_{12}C_{14}C_{24} + 2C_{14}C_{24}C_{66} + C_{26}C_{56}^2 + \\ 2C_{56}C_{25}C_{26} + C_{14}C_{26}C_{56} + 2C_{14}C_{24}C_{25} + C_{12}C_{46}C_{56} + C_{46}C_{56}C_{66} + 2C_{12}C_{46}C_{25} - C_{26}C_{46}C_{56} - \\ 3C_{14}C_{46}C_{26} + C_{12}C_{46}^2 - 2C_{22}C_{15}C_{46} - C_{22}C_{14}^2 - 2C_{22}C_{14}C_{56} - C_{22}C_{56}^2$$

$$K_5 = C_{66}C_{22}(C_{45} + C_{35}) + 2C_{44}C_{22}C_{16} + 2C_{44}C_{66}(C_{22} - C_{26}) - 2C_{66}C_{24}C_{25} - 2C_{16}C_{24}^2 - 2C_{45}C_{26}^2 - \\ 2C_{44}C_{26}C_{12} + 2C_{12}C_{24}C_{46} + C_{46}C_{26}(C_{56} + 2C_{25} - C_{46}) - 2C_{22}C_{45}(C_{56} + C_{14}) + \\ 2(C_{56} + C_{14})(C_{24}C_{26} - C_{22}C_{45})$$

$$K_6 = -C_{22}C_{46}^2 - C_{66}C_{24}^2 - C_{44}C_{26}^2 + C_{66}C_{22}C_{44} + 2C_{46}C_{26}C_{24}$$

Donc pour résoudre le problème il faut calculer les six racines du polynôme (4.16).

Ces racines sont d'après Eshelby [66] complexes puisque la densité d'énergie doit être toujours positive.

Ainsi comme les coefficients du polynôme sont réels les racines complexes considérées ici sont : p_α ($\alpha=1,3$) et leurs paires conjuguées: $\overline{p_\alpha}$ ($\alpha=1,3$).

Dans la suite du problème, seules les racines à partie imaginaire positive sont choisies. Ces racines s'écrivent: $p_\alpha^{(n)} = p_\alpha^r(n) \pm ip_\alpha^i(n)$ (4.17)

avec $\alpha = 1, 2, 3$ et $p_\alpha^i(n) > 0$

Pour chacune des six racines p_α , données en (4.17), on résout le système en $\lambda'_{\alpha k}$ suivant:

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} \\ F_{21} & F_{22} & F_{23} \\ F_{31} & F_{32} & F_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda'_{\alpha 1} \\ \lambda'_{\alpha 2} \\ \lambda'_{\alpha 3} \end{pmatrix} = 0 \quad (4.18)$$

Avec :

$$F_{11} = C_{11} + 2C_{16}p + C_{66}p^2$$

$$F_{22} = C_{66} + 2C_{26}p + C_{22}p^2$$

$$F_{33} = C_{55} + 2C_{45}p + C_{44}p^2$$

$$F_{12} = F_{21} = C_{61} + (C_{66} + C_{12})p + C_{26}p^2$$

$$F_{13} = F_{31} = C_{51} + (C_{14} + C_{56})p + C_{46}p^2$$

$$F_{23} = F_{32} = C_{56} + (C_{25} + C_{46})p + C_{42}p^2$$

Les $\lambda'_{\alpha k}$ obtenus sont exprimés donc en fonction des C_{ij} et sont complexes, ils s'écrivent: $\lambda'_{\alpha k}^{(n)} = \lambda'_{\alpha k}^r(n) \pm i\lambda'_{\alpha k}^i(n)$ (4.19)

La théorie rapporte que les déplacements et les contraintes ne dépendent que des valeurs relatives de $\lambda'_{\alpha k}^{(n)}$ ($k=1,3$).

En posant arbitrairement $\lambda'_{\alpha 3} = 1$ on peut à partir de (4.18) calculer :

$$\lambda'_{\alpha 1} = \frac{F_{12}F_{23} - F_{13}F_{22}}{F_{11}F_{22} - F_{12}F_{21}} \quad (4.20.a)$$

$$\lambda'_{\alpha 2} = \frac{-(F_{11}F_{23} - F_{13}F_{21})}{F_{11}F_{22} - F_{12}F_{21}} \quad (4.20.b)$$

$$\lambda'_{\alpha 3} = 1 \quad (4.20.c)$$

La troisième équation du système (4.18) est toujours vérifiée car en remplaçant λ'_{α_1} et λ'_{α_2} par leurs valeurs obtenues en (4.20a) et (4.20b), on retrouve l'expression du déterminant de la matrice F_{jk} qui est égal à zéro.

Les λ_{α_k} choisis pour le calcul des déplacements et des contraintes s'expriment en fonction des λ'_{α_k} par:

$$\lambda_{\alpha_1} = \frac{\lambda'_{\alpha_1}}{(\lambda_{\alpha_1}^{2'} + \lambda_{\alpha_2}^{2'} + \lambda_{\alpha_3}^{2'})^{1/2}} \quad (4.21.a)$$

$$\lambda_{\alpha_2} = \frac{\lambda'_{\alpha_2}}{(\lambda_{\alpha_1}^{2'} + \lambda_{\alpha_2}^{2'} + \lambda_{\alpha_3}^{2'})^{1/2}} \quad (4.21.b)$$

$$\lambda_{\alpha_3} = \frac{\lambda'_{\alpha_3}}{(\lambda_{\alpha_1}^{2'} + \lambda_{\alpha_2}^{2'} + \lambda_{\alpha_3}^{2'})^{1/2}} \quad (4.21.c)$$

$$\text{tel que : } \lambda_{\alpha_1}^2 + \lambda_{\alpha_2}^2 + \lambda_{\alpha_3}^2 = 1 \quad (4.22)$$

Les combinaisons linéaires des solutions trouvées pour chaque valeur de α , représentent la solution générale pour les équations différentielles (4.11), autrement dit :

$$U_k^{(n)}(x_2) = \sum_{\alpha=1}^6 C_{\alpha}^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k} \cdot \exp(2.i.\pi.g.n.p_{\alpha}.x_2) \quad (4.23)$$

Où les $C_{\alpha}^{(n)}$ sont des constantes complexes qui peuvent être déterminées par les conditions aux limites.

Dans le but de simplifier la résolution du problème, considérons arbitrairement six constantes complexes:

$$\begin{cases} X_{\alpha}^{(n)} / 2.i.\pi.n \\ Y_{\alpha}^{(n)} / 2.i.\pi.n \end{cases} \quad (\alpha = 1, 2, 3) \quad (4.24)$$

Et sachant que pour $\alpha = 4, 5, 6$

$$p_{\alpha k} = \bar{p}_{(\alpha-3)k} \quad \text{et} \quad \lambda_{\alpha k} = \bar{\lambda}_{(\alpha-3)k}$$

alors $U_k^{(n)}(x_2)$ peut s'écrire donc de la manière suivante:

$$U_k^{(n)}(x_2) = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{X_\alpha^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k}}{2.i.\pi.n} \cdot \exp(2.i.\pi.g.n.p_\alpha \cdot x_2) + \frac{Y_\alpha^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}}{2.i.\pi.n} \cdot \exp(2.i.\pi.g.n.\bar{p}_\alpha \cdot x_2) \quad (4.25)$$

Où les constantes complexes $X_\alpha^{(n)}$ et $Y_\alpha^{(n)}$ seront déterminées à l'aide des conditions aux limites relatives au problème.

La combinaison de (4.3) avec (4.25) nous permet d'écrire le champ des déplacements sous la forme suivante :

$$u_k = \sum_{n \neq 0} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{X_\alpha^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k}}{2.i.\pi.n} \cdot \exp[(2.i.\pi.g.n.(x_1 + p_\alpha \cdot x_2))] + \frac{Y_\alpha^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}}{2.i.\pi.n} \cdot \exp[(2.i.\pi.g.n.(x_1 + \bar{p}_\alpha \cdot x_2))] \quad (4.26)$$

IV.1.2. Expression finale du champ des déplacements:

Pour plus de performance sur le plan numérique, il est convenable d'écrire l'équation (4.26) sous une forme où la sommation ne tient compte que des valeurs positives de l'entier n.

On peut l'écrire sous la forme :

$$u_k = \sum_{n > 0} \sum_{\alpha=1}^3 C_{\alpha k}^{(n)} \cdot \exp[2.i.\pi.g.n(x_1 + r_\alpha \cdot x_2)] \quad (4.27)$$

Où les $C_{\alpha k}^{(n)}$ sont faciles à déterminer et puisque u_k est une fonction réelle

$$\Rightarrow C_{\alpha k}^{(-n)} = \bar{C}_{\alpha k}^{(n)}$$

Donc la double somme (27) devient:

$$2 \sum_{n > 0} \sum_{\alpha=1}^3 \text{Re}(C_{\alpha k}^n) \cdot \cos[2.\pi.g.n(x_1 + r_\alpha \cdot x_2)] + \text{Re}(i.C_{\alpha k}^n) \cdot \sin[2.\pi.g.n(x_1 + r_\alpha \cdot x_2)] \quad (4.28)$$

En posant $\omega = 2\pi.g$, l'expression finale de u_k sera:

$$u_k = \sum_{n > 0} \left(\frac{1}{\pi.n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 \{ [\cos[n.\omega(x_1 + r_\alpha \cdot x_2)]] \times \text{Re}[-i.X_\alpha^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k}] \cdot \exp(-n.\omega.s_\alpha \cdot x_2) + (-i.Y_\alpha^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}) \cdot \exp(n.\omega.s_\alpha \cdot x_2) \} + \{ \sin[n.\omega(x_1 + r_\alpha \cdot x_2)]] \times \text{Re}[X_\alpha^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k}] \cdot \exp(-n.\omega.s_\alpha \cdot x_2) + (Y_\alpha^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}) \cdot \exp(n.\omega.s_\alpha \cdot x_2) \} \quad (4.29)$$

$k=1,2,3$

IV.1.3. Champ des contraintes :

Le champ des contraintes est obtenu à partir de l'équation (4.29) en utilisant la loi de Hooke qui s'écrit :

$$\sigma_{kl} = C_{kl ij} \cdot \varepsilon_{ij}$$

$$\sigma_{kl} = C_{kl ij} \cdot u_{i,j} = C_{kli1} \cdot u_{i,1} + C_{kli2} \cdot u_{i,2} + C_{kli3} \cdot u_{i,3} \quad (4.30)$$

Sachant que dans ce cas (un seul réseau de dislocations parallèle à Ox_3) u_i ne dépend pas de x_3 , on aura donc:

$$\sigma_{kl} = C_{kli1} \cdot u_{i,1} + C_{kli2} \cdot u_{i,2} \quad (4.31)$$

d'où enfin

$$\sigma_{kl} = C_{kl11} \cdot u_{1,1} + C_{kl21} \cdot u_{2,1} + C_{kl12} \cdot u_{1,2} + C_{kl22} \cdot u_{2,2} \quad (4.32)$$

Avec

$$u_1 = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi \cdot n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 \{ [\cos [n \cdot \omega (x_1 + r_\alpha \cdot x_2)]] \times \text{Re} [(-i \cdot X_\alpha^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha 1}) \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) + (-i \cdot Y_\alpha^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha 1}) \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2)] \} + \{ \sin [n \cdot \omega (x_1 + r_\alpha \cdot x_2)] \times \text{Re} [(X_\alpha^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha 1}) \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) + (Y_\alpha^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha 1}) \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2)] \} \quad (4.33)$$

Et

$$u_2 = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi \cdot n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 \{ [\cos [n \cdot \omega (x_1 + r_\alpha \cdot x_2)]] \times \text{Re} [(-i \cdot X_\alpha^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha 2}) \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) + (-i \cdot Y_\alpha^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha 2}) \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2)] \} + \{ \sin [n \cdot \omega (x_1 + r_\alpha \cdot x_2)] \times \text{Re} [(X_\alpha^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha 2}) \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) + (Y_\alpha^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha 2}) \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2)] \} \quad (4.34)$$

En posant

$$A = n \cdot \omega (x_1 + r_\alpha \cdot x_2)$$

$$C = X_\alpha \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2)$$

$$D = Y_\alpha \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2)$$

On aura:

$$u_1 = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi \cdot n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 \{ \cos (A) \cdot \text{Re} [(-i \lambda_{\alpha 1} \cdot C) + (-i \bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D)] + \sin (A) \cdot \text{Re} [(\lambda_{\alpha 1} \cdot C) + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D)] \} \quad (4.35)$$

Et

$$u_2 = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \cdot \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \cos(A) \cdot \text{Re} \left[(-i\lambda_{\alpha 2} \cdot C) + (-i\bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) \right] + \sin(A) \text{Re} \left[(\lambda_{\alpha 2} \cdot C) + (\bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) \right] \right\} \quad (4.36)$$

D'où

$$C_{kl11} \cdot u_{1,1} = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \sin(A) \cdot \text{Re} \left[(i\lambda_{\alpha 1} \cdot C) \cdot C_{kl11} + (i\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) C_{kl11} \right] + \cos(A) \cdot \text{Re} \left[(\lambda_{\alpha 1} \cdot C) \cdot C_{kl11} + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) C_{kl11} \right] \right\} \quad (4.37)$$

Et

$$C_{kl21} \cdot u_{2,1} = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \sin(A) \cdot \text{Re} \left[(i\lambda_{\alpha 2} \cdot C) \cdot C_{kl21} + (i\bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) C_{kl21} \right] + \cos(A) \cdot \text{Re} \left[(\lambda_{\alpha 2} \cdot C) \cdot C_{kl21} + (\bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) C_{kl21} \right] \right\} \quad (4.38)$$

La sommation des expressions (4.37) et (4.38) donne :

$$\left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \text{Re} \left[(\lambda_{\alpha 1} \cdot C + \bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) \cdot C_{kl11} + (\lambda_{\alpha 2} \cdot C + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) \cdot C_{kl21} \right] \cdot (\cos(A) + i \sin(A)) \quad (4.39)$$

De même

$$C_{kl12} \cdot u_{1,2} = \frac{\omega}{\pi} \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \text{Re} \left\{ (\lambda_{\alpha 1} \cdot C + \bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot r_{\alpha} \cdot C_{kl12} + (\lambda_{\alpha 1} \cdot C - \bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot s_{\alpha} \cdot C_{kl12} \right\} \quad (4.40)$$

Et

$$C_{kl22} \cdot u_{2,2} = \frac{\omega}{\pi} \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \text{Re} \left\{ (\lambda_{\alpha 2} \cdot C + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot r_{\alpha} \cdot C_{kl22} + (\lambda_{\alpha 2} \cdot C - \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot s_{\alpha} \cdot C_{kl22} \right\} \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow C_{kl12} \cdot u_{1,2} + C_{kl22} \cdot u_{2,2} = & \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \{ (\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C \cdot r_{\alpha} + \\ & (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot D \cdot r_{\alpha} + (\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) \\ & (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C \cdot s_{\alpha} - (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot D \cdot s_{\alpha} \} \end{aligned} \quad (4.42)$$

Et sachant que: $p_{\alpha} = r_{\alpha} + i s_{\alpha}$ et $\bar{p}_{\alpha} = r_{\alpha} - i s_{\alpha}$, alors

$$\begin{aligned} C_{kl12} \cdot u_{1,2} + C_{kl22} \cdot u_{2,2} = & \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \{ (\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C \cdot p_{\alpha} \\ & + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot D \cdot p_{\alpha} \} \end{aligned} \quad (4.43)$$

D'ou

$$\begin{aligned} \sigma_{kl} = & \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \{ (\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl11} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl21}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl11} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl21}) \\ & (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot D + (\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C \cdot p_{\alpha} + \\ & (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C \cdot \bar{p}_{\alpha} \} \end{aligned} \quad (4.44)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{kl} = & \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \cos(A) \cdot \operatorname{Re} \{ [\lambda_{\alpha 1} (C_{kl11} + p_{\alpha} C_{kl12}) + \lambda_{\alpha 2} (C_{kl21} + p_{\alpha} C_{kl22})] \cdot C + \\ & [\bar{\lambda}_{\alpha 1} (C_{kl11} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl12}) + \bar{\lambda}_{\alpha 2} (C_{kl21} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl22})] \cdot D \} + \\ & \sin(A) \cdot \operatorname{Re} \{ [\lambda_{\alpha 1} (C_{kl11} + p_{\alpha} C_{kl12}) + \lambda_{\alpha 2} (C_{kl21} + p_{\alpha} C_{kl22})] \cdot C + \\ & [\bar{\lambda}_{\alpha 1} (C_{kl11} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl12}) + \bar{\lambda}_{\alpha 2} (C_{kl21} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl22})] \cdot D \} \end{aligned} \quad (4.45)$$

On obtient finalement l'expression suivante pour la contrainte:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = & 2 \cdot g \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \{ \cos[n \cdot \omega (x_1 + r_{\alpha} x_2)] + \times \operatorname{Re} [X_{\alpha}^{(n)} \cdot L_{\alpha ij} \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_{\alpha} \cdot x_2) + \\ & Y_{\alpha}^{(n)} \cdot \bar{L}_{\alpha ij} \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_{\alpha} \cdot x_2) \} + \{ \sin[n \cdot \omega (x_1 + r_{\alpha} x_2)] + \times \operatorname{Re} [i \cdot X_{\alpha}^{(n)} \cdot L_{\alpha ij} \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_{\alpha} \cdot x_2) \\ & + i \cdot Y_{\alpha}^{(n)} \cdot \bar{L}_{\alpha ij} \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_{\alpha} \cdot x_2) \} \quad \text{avec } L_{\alpha kl} = \lambda_{\alpha j} [C_{klj1} + p_{\alpha} C_{klj2}] \quad (i, j=1, 2, 3 \quad , l=1, 2) \end{aligned} \quad (4.46)$$

IV.2. Conditions aux limites:

Dans notre travail, on considère le fait qu'une série périodique de dislocations produit dans chaque milieu un champ de déplacement u_k et de contrainte σ_{jk} dont les composantes peuvent être développées en série de Fourier. Pour déterminer la valeur des constantes complexes X_α^+ , Y_α^+ , X_α^- et Y_α^- ($\alpha=1,2,3$), on applique les conditions aux limites suivantes :

IV.2.1. Condition de convergence

Nous admettons que dans le substrat ($x_2 < 0$), l'énergie élastique stockée par unité de surface demeure finie. Nous imposons alors une condition aux limites sur la convergence des déplacements u_k , dans le substrat, qui doivent rester finis quand x_2 tend $-\infty$. Et par conséquent notre problème se réduit à la détermination de 9 inconnues complexes (X_α^+ , Y_α^+ et Y_α^- ($\alpha = 1,2,3$)) puisque $X_\alpha^- = 0$.

IV.2.2. Conditions en déplacement:

Nous avons admis auparavant que l'interface est plane avec une seule famille de dislocations intrinsèques réparties périodiquement et que le champ des déplacements est périodique (période Λ). A partir d'un état non déformé obtenu en coupant les liaisons atomiques le long de l'interface, on peut obtenir l'état final en raccordant les plans réticulaires de façon que u_k^+ (couche) et u_k^- (substrat) soient périodiques le long de Ox_1 (Fig. 4.2) et nuls à mi-chemin entre deux coeurs de dislocations.

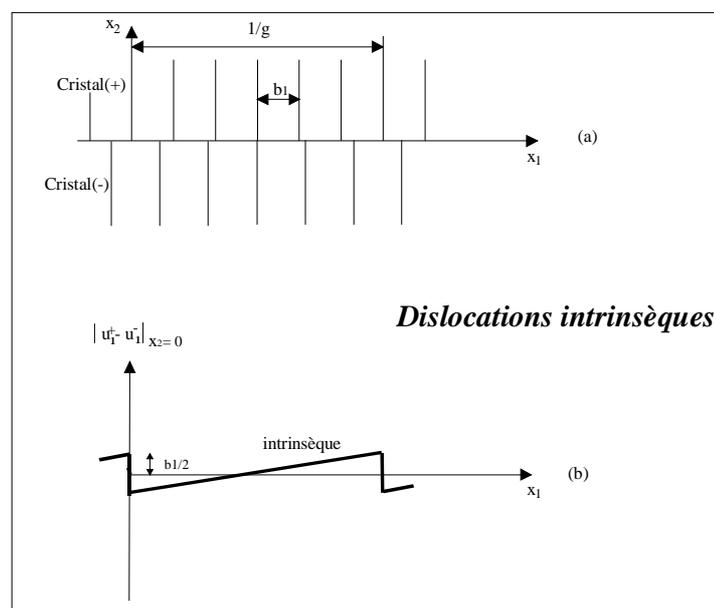


FIG. 4.2: (a) Représentation schématique du déplacement associé à un réseau de dislocation
(b) Courbe en dent scie et en escalier relatives respectivement aux dislocations
Intrinsèques.

Ce déplacement relatif peut être décrit par une courbe en dents de scie notée "int" (Fig. 4.2b). Cette hypothèse traduit, au niveau atomique, le rétablissement des unités structurales le long d'une facette interfaciale.

On note ici que cette hypothèse a permis l'interprétation, avec une bonne précision, d'une série d'images à haute résolution dans le cas de joints interphases.

La linéarité du déplacement relatif à l'interface peut être exprimée par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[u_k^+ - u_k^- \right]_{x_2=0} = \left(\frac{b_k}{\Lambda} \right) x_1 - \frac{b_k}{2} \quad (a) \\ \left[u_k^+ - u_k^- \right]_{x_2=0} = -\frac{b_k}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} (1/n) \cdot \sin(n \cdot \omega \cdot x_1) \quad (b) \end{array} \right. \quad (4.47)$$

Où (+) et (-) désignent respectivement la couche et le substrat.

IV.2.3. Conditions en contraintes:

L'interface définie précédemment doit aussi satisfaire les conditions aux limites en contraintes suivantes:

a/ à travers l'interface les forces sont continues, ce qui se traduit par l'équilibre des contraintes normales σ_{2k} :

$$\sigma_{2k}^+ (x_2 = 0) = \sigma_{2k}^- (x_2 = 0) \quad (4.48)$$

b/ la surface libre de la couche mince étant en équilibre, ce qui nous permet de considérer que les contraintes normales sont nulles pour $x_2 = h$ ce qui donne :

$$\left[\sigma_{2k}^+ \right]_{x_2=h} = 0 \quad (4.49)$$

IV.3. Système d'équations final à résoudre:

En omettant l'exposant n , les 9 inconnues complexes X_α^+ , Y_α^+ et Y_α^- , sont donc les solutions du système linéaire à 18 équations réelles obtenues par combinaison des expressions des déplacements (4.29) et des contraintes (4.46) avec les conditions aux limites (4.47) à (4.49).

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[-\left(X_\alpha^+ \cdot \lambda_{\alpha k}^+ + Y_\alpha^+ \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}^+ \right) + \left(Y_\alpha^- \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}^- \right) \right] = b_k \\ \text{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_\alpha^+ \cdot \lambda_{\alpha k}^+ + Y_\alpha^+ \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}^+ \right) - \left(Y_\alpha^- \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}^- \right) \right] = 0 \\ \text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_\alpha^+ \cdot L_{\alpha 2k}^+ + Y_\alpha^+ \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^+ \right) - \left(Y_\alpha^- \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^- \right) \right] = 0 \\ \text{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_\alpha^+ \cdot L_{\alpha 2k}^+ + Y_\alpha^+ \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^+ \right) - \left(Y_\alpha^- \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^- \right) \right] = 0 \\ \text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 (Ainter.AC) + \text{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 (Ainter.AS) = 0 \\ \text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 -(Ainter.AS) + \text{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 (Ainter.AC) = 0 \end{array} \right. \quad (4.50)$$

Avec $Ainter = X_\alpha^+ \cdot L_{\alpha 2k}^+ \cdot EXPON1(\alpha) + Y_\alpha^+ \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^+ \cdot EXPON2(\alpha)$

$$AC(\alpha) = \cos(n.w. r_\alpha^+ \cdot h)$$

$$EXPON1(\alpha) = \exp(-n.w. s_\alpha^+ \cdot h)$$

$$AS(\alpha) = \sin(n.w. r_\alpha^+ \cdot h)$$

$$EXPON2(\alpha) = \exp(n.w. s_\alpha^+ \cdot h)$$

Pour mieux exprimer les conditions aux limites, il est commode d'utiliser des grandeurs réelles. Pour cela posons:

$$\begin{aligned}
 X_\alpha^+ &= A_\alpha^+ + iB_\alpha^+, & Y_\alpha^+ &= C_\alpha^+ + iD_\alpha^+, & Y_\alpha^- &= C_\alpha^- + iD_\alpha^- \\
 \lambda_{\alpha k}^+ &= \lambda_{\alpha k}^{r+} + i\lambda_{\alpha k}^{i+}, & \lambda_{\alpha k}^- &= \lambda_{\alpha k}^{r-} + i\lambda_{\alpha k}^{i-}, & \bar{\lambda}_{\alpha k}^+ &= \lambda_{\alpha k}^{r+} - i\lambda_{\alpha k}^{i+}, & \bar{\lambda}_{\alpha k}^- &= \lambda_{\alpha k}^{r-} - i\lambda_{\alpha k}^{i-} \\
 L_{\alpha kl}^+ &= L_{\alpha kl}^{r+} + iL_{\alpha kl}^{i+}, & L_{\alpha kl}^- &= L_{\alpha kl}^{r-} + iL_{\alpha kl}^{i-}, & \bar{L}_{\alpha kl}^+ &= L_{\alpha kl}^{r+} - iL_{\alpha kl}^{i+}, & \bar{L}_{\alpha kl}^- &= L_{\alpha kl}^{r-} - iL_{\alpha kl}^{i-}
 \end{aligned}$$

On obtient ainsi le système d'équations suivant:

$$\left\{ \begin{aligned}
 & \sum_{\alpha=1}^3 -A_\alpha^+ \lambda_{\alpha k}^{r+} + B_\alpha^+ \lambda_{\alpha k}^{i+} - C_\alpha^+ \lambda_{\alpha k}^{r+} - D_\alpha^+ \lambda_{\alpha k}^{i+} + C_\alpha^- \lambda_{\alpha k}^{r-} + D_\alpha^- \lambda_{\alpha k}^{i-} = b_k \\
 & \sum_{\alpha=1}^3 -A_\alpha^+ \lambda_{\alpha k}^{i+} - B_\alpha^+ \lambda_{\alpha k}^{r+} + C_\alpha^+ \lambda_{\alpha k}^{i+} - D_\alpha^+ \lambda_{\alpha k}^{r+} - C_\alpha^- \lambda_{\alpha k}^{i-} + D_\alpha^- \lambda_{\alpha k}^{r-} = 0 \\
 & \sum_{\alpha=1}^3 A_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{r+} - B_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{i+} + C_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{r+} + D_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{i+} - C_\alpha^- L_{\alpha 2k}^{r-} - D_\alpha^- L_{\alpha 2k}^{i-} = 0 \\
 & \sum_{\alpha=1}^3 -A_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{i+} - B_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{r+} + C_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{i+} - D_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{r+} - C_\alpha^- L_{\alpha 2k}^{i-} + D_\alpha^- L_{\alpha 2k}^{r-} = 0 \tag{4.51} \\
 & \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ [(A_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{r+} - B_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{i+}) \cdot AC(\alpha) - (A_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{i+} + B_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{r+}) \cdot AS(\alpha)] EXPON1(\alpha) \right. \\
 & \quad \left. + [(C_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{r+} + D_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{i+}) \cdot AC(\alpha) + (C_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{i+} - D_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{r+}) \cdot AS(\alpha)] EXPON2(\alpha) \right\} = 0 \\
 & \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ [(-A_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{r+} + B_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{i+}) \cdot AS(\alpha) - (A_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{i+} + B_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{r+}) \cdot AC(\alpha)] EXPON1(\alpha) \right. \\
 & \quad \left. + [-(C_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{r+} + D_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{i+}) \cdot AS(\alpha) + (C_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{i+} - D_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^{r+}) \cdot AC(\alpha)] EXPON2(\alpha) \right\} = 0
 \end{aligned} \right.$$

IV.4. Champ élastique d'un réseau carré de dislocation par le principe de superposition

En se basant sur la technique de superposition, le champ élastique de deux réseaux parallèles de dislocations sur la même interface peut être résolu simplement. La deuxième famille II peut être déduite de la première famille I par rotation de $+\pi/2$, figure 4.3.

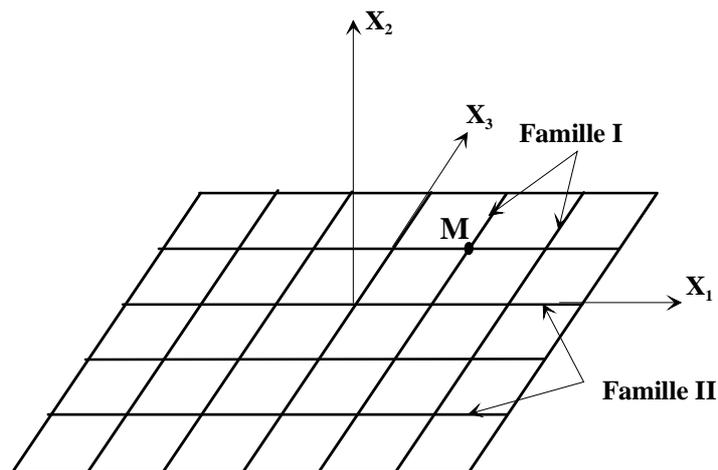


FIG. 4.3: Représentation et orientation d'un réseau orthogonal de dislocations.

IV.4.1. Champ des déplacements

En notant $u_k(x_1, x_2, x_3)$ le champ des déplacements lié au réseau de dislocations de la famille I (figure 3) pour laquelle les dislocations ont un vecteur de burgers b_k . Construisons une autre famille II de dislocations, déduite de la précédente par rotation de $+\pi/2$ autour de Ox_2 . Au point $M'(-x_3, x_2, x_1)$ correspond donc le point $M(x_1, x_2, x_3)$. Le champ des déplacement total u_k^T se déduit de l'addition des champs des famille I et II.

La contribution de la famille II est donnée par l'équation matricielle suivante :

$$[u_k''(M)] = [R] [u_k''(M')] \quad (4.52)$$

Avec : [R] Matrice de passage du système I (famille de dislocations I) au système II.

$$[R] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.53)$$

Et comme $[u_k''(M')]$ n'est rien d'autre que u_k défini au point $M'(-x_3, x_2, x_1)$.

Alors on écrit : $[u_k''(M')] = [u_k'(M')]$

Ainsi on aura $[u_k''(M)] = [R] [u_k'(M')]$

$$\text{D'où } [u_k''(M)] = \begin{bmatrix} u_3'(M') \\ u_2'(M') \\ -u_1'(M') \end{bmatrix} \quad \text{Avec : } \begin{cases} u_1''(x_1, x_2, x_3) = u_3'(-x_3, x_2, x_1) \\ u_2''(x_1, x_2, x_3) = u_2'(-x_3, x_2, x_1) \\ u_3''(x_1, x_2, x_3) = -u_1'(-x_3, x_2, x_1) \end{cases} \quad (4.54)$$

Donc le champ total des déplacements s'écrit sous forme matricielle comme suit :

$$\begin{bmatrix} u_1^T \\ u_2^T \\ u_3^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1(M) + u_3(M') \\ u_2(M) + u_2(M') \\ u_3(M) - u_1(M') \end{bmatrix} \quad (4.55)$$

avec :

$u_k(M)$ est donné par (4.29) et calculé pour la 1^{ère} famille de dislocations.

$u_k(M')$ est donné par la même expression (4.29) mais calculé pour la 2^{ème} famille de dislocations.

IV.4.2. Champ des contraintes

Pour les champs des contraintes, la contribution de la famille II est calculée de façon analogue. En notant $\sigma'_{ij}(M)$ ($i,j=1,2,3$) le champ des contraintes en $M(x_1, x_2, x_3)$ de la famille I, nous obtenons :

$$[\sigma''_{ij}(M)] = [R] [\sigma'_{ij}(M')] [R]^{-1} = \begin{bmatrix} \sigma'_{33}(M') & \sigma'_{23}(M') & -\sigma'_{13}(M') \\ \sigma'_{23}(M') & \sigma'_{22}(M') & -\sigma'_{12}(M') \\ -\sigma'_{13}(M') & -\sigma'_{12}(M') & \sigma'_{11}(M') \end{bmatrix} \quad (4.56)$$

Enfin nous obtenons le champ des contraintes total.

$$[\sigma^T_{ij}(M)] = \begin{bmatrix} \sigma'_{11}(M) + \sigma'_{33}(M') & \sigma'_{12}(M) + \sigma'_{23}(M') & \sigma'_{13}(M) - \sigma'_{13}(M') \\ \sigma'_{12}(M) + \sigma'_{23}(M') & \sigma'_{22}(M) + \sigma'_{22}(M') & \sigma'_{23}(M) - \sigma'_{12}(M') \\ \sigma'_{13}(M) - \sigma'_{13}(M') & \sigma'_{23}(M) - \sigma'_{12}(M') & \sigma'_{33}(M) + \sigma'_{11}(M') \end{bmatrix} \quad (4.57)$$

IV.4.3. Energie de déformation élastique

Un milieu élastique contraint emmagasine de l'énergie. Cette énergie élastique E de déformation exprimée par unité de volume est donnée par :

$$E = \frac{1}{2} \sigma^T \cdot \varepsilon^T = \frac{1}{2} \sum_{ij} \sigma^T_{ij} \cdot \varepsilon^T_{ij} \quad (4.58)$$

$$E = \frac{1}{2} \left[\sigma_{11} \cdot \varepsilon_{11} + \sigma_{21} \cdot \varepsilon_{21} + \sigma_{31} \cdot \varepsilon_{31} + \sigma_{12} \cdot \varepsilon_{12} + \sigma_{22} \cdot \varepsilon_{22} + \sigma_{32} \cdot \varepsilon_{32} + \sigma_{13} \cdot \varepsilon_{13} + \sigma_{23} \cdot \varepsilon_{23} + \sigma_{33} \cdot \varepsilon_{33} \right] \quad (4.59)$$

En omettant l'exposant T on aura :

$$E = \frac{1}{2} \sigma \cdot \varepsilon = \frac{1}{2} [\sigma_{i1} \cdot \varepsilon_{i1} + \sigma_{i2} \cdot \varepsilon_{i2} + \sigma_{i3} \cdot \varepsilon_{i3}] \quad (4.60)$$

Dans un premier temps, nous avons considéré un réseau de dislocations vis, périodique selon Ox_1 , dont le vecteur de Burger est orienté selon Ox_3 . Alors, seule la composante σ_{13} du champ de contrainte est non nulle, et la seule composante de déplacement non nulle est u_3 . Si maintenant on ajoute un second réseau de

dislocations, tourné de $\pi/2$ par rapport au premier, les composantes non nulles seront σ_{13} et σ_{31} , ainsi que u_3 et u_1 . Le déplacement selon u_2 (vertical) est nul puisque l'on est dans une géométrie de cisaillement pur.

Alors cette énergie peut s'écrire comme suit :

$$E = \sigma_{31}^T \cdot \varepsilon_{31}^T \quad (4.61)$$

Et sachant que la déformation est :

$$\varepsilon_{13}^T = \frac{1}{2} (u_{1,3}^T + u_{3,1}^T) \quad (4.62)$$

D'où

$$\begin{aligned} \varepsilon_{13}^T = \sum_{n>0} \frac{\omega}{2\pi} \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left[\operatorname{Re} \left((-iX_{\alpha} \lambda_{\alpha 3}) \cdot \exp(-n.w. s_{\alpha}.h) + (-iY_{\alpha} \bar{\lambda}_{\alpha 3}) \cdot \exp(n.w. s_{\alpha}.h) \right) \right] \left(\sin n\omega(-x_3 + r_{\alpha}.x_2) - \right. \right. \\ \left. \left. \sin n\omega(-x_1 + r_{\alpha}.x_2) \right) + \left[\operatorname{Re} \left((X_{\alpha} \lambda_{\alpha 3}) \cdot \exp(-n.w. s_{\alpha}.h) + (Y_{\alpha} \bar{\lambda}_{\alpha 3}) \cdot \exp(n.w. s_{\alpha}.h) \right) \right] \cdot \left(\cos n\omega(x_1 + r_{\alpha}.x_2) - \right. \right. \\ \left. \left. \cos n\omega(-x_3 + r_{\alpha}.x_2) \right) \right] \end{aligned} \quad (4.63)$$

En fin, l'expression finale de l'énergie E emmagasinée est:

$$\begin{aligned} E = \sum_{n>0} \frac{\omega}{2\pi} \sum_{\alpha=1}^3 \sigma_{31}^T \left[\left[\operatorname{Re} \left((-iX_{\alpha} \lambda_{\alpha 3}) \cdot \exp(-n.w. s_{\alpha}.h) + (-iY_{\alpha} \bar{\lambda}_{\alpha 3}) \cdot \exp(n.w. s_{\alpha}.h) \right) \right] \left(\sin n\omega(-x_3 + r_{\alpha}.x_2) - \right. \right. \\ \left. \left. \sin n\omega(-x_1 + r_{\alpha}.x_2) \right) + \left[\operatorname{Re} \left((X_{\alpha} \lambda_{\alpha 3}) \cdot \exp(-n.w. s_{\alpha}.h) + (Y_{\alpha} \bar{\lambda}_{\alpha 3}) \cdot \exp(n.w. s_{\alpha}.h) \right) \right] \cdot \left(\cos n\omega(x_1 + r_{\alpha}.x_2) - \right. \right. \\ \left. \left. \cos n\omega(-x_3 + r_{\alpha}.x_2) \right) \right] \end{aligned} \quad (4.64)$$

Chapitre 5

Expérimentation numérique

Pour la résolution du problème, nous avons élaboré un programme FORTRAN qui nous permet :

1. la détermination de la matrice de passage du système cristallin au système de travail et par conséquent la détermination des valeurs des constantes élastiques C_{ij} de chaque cristal dans le nouveau repère.
2. le calcul des parties réelles et imaginaires des six racines complexes p_α du polynôme du sixième degré obtenu en combinant la loi de Hooke et la condition d'équilibre.
3. le calcul, pour chaque p_α , des constantes complexes $\lambda_{\alpha k}$ ($k = 1,3$) ainsi que les $L_{\alpha 2k}$.
4. l'inversion numérique du système (4.51), obtenue à partir des conditions aux limites.
5. le calcul des constantes inconnues X_α^+ , Y_α^+ et Y_α^- .
6. la réinjection de ces constantes dans les expressions des déplacements, des déformations, des contraintes et de l'énergie pour les calculer numériquement.

V.1. Validation du programme de calcul élaboré

La concrétisation de notre travail ne pourra se faire qu'à la lumière d'applications numériques adéquates, qui nous permettront d'un côté de valider notre approche analytique et d'un autre côté de rendre crédible notre modèle mathématique en vue des perspectives recommandées. Avant d'entamer cela, il est nécessaire de procéder tout d'abord à la validation de notre programme numérique, en comparant les résultats obtenus par le programme avec l'expression

analytique du déplacement relatif $\Delta u = f(x_1)$ donnée par (Equ.5.47a). Pour cela nous avons représenté en figure 5.1 le déplacement relatif Δu à travers l'interface en faisant varier le nombre d'harmoniques n ($n=20,40,60,100$).

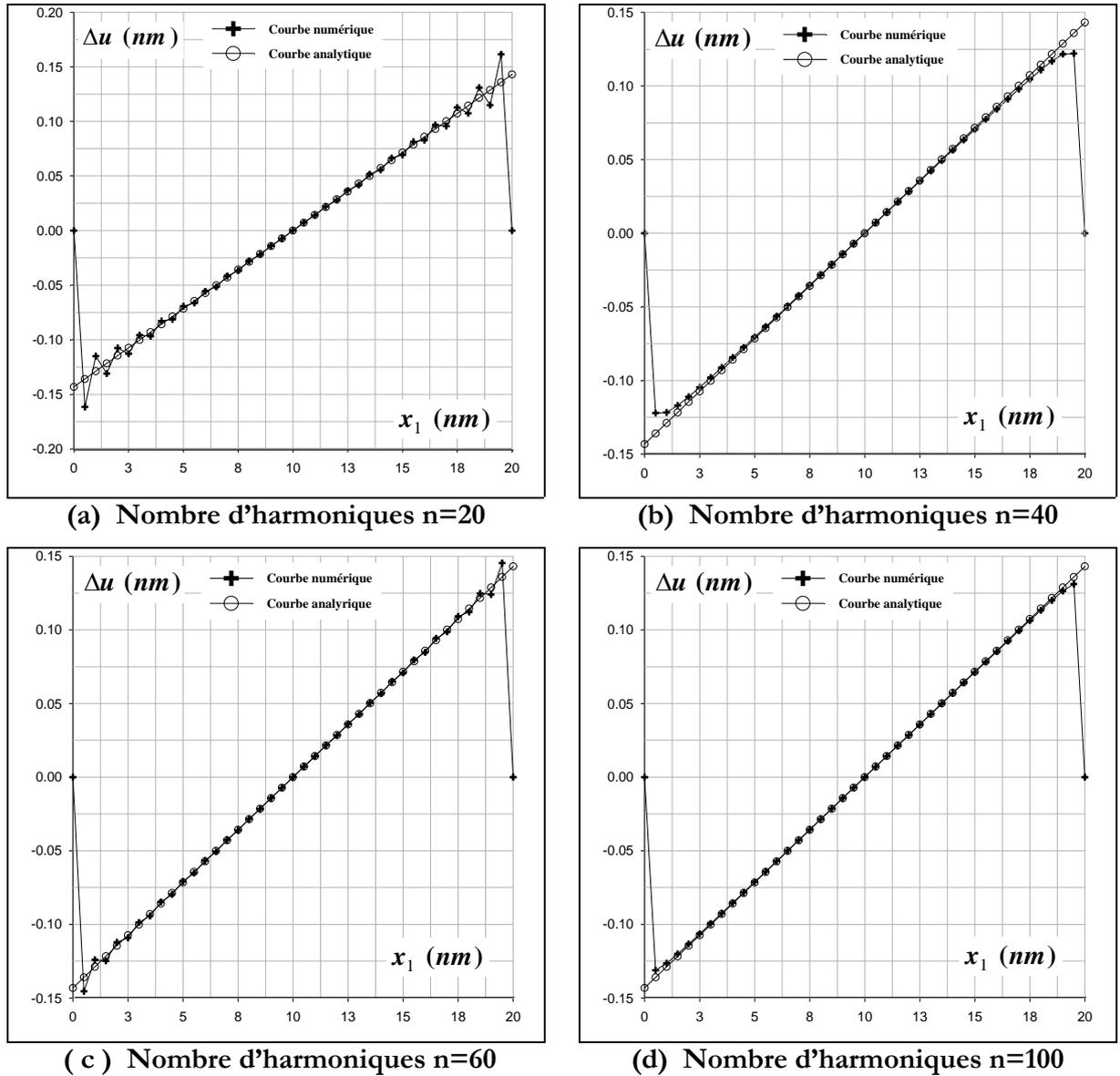


FIG. 5.1: Représentation du déplacement relatif interfacial

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 $x_1 = 20$ nm correspondant à une période. Il est à noter que la

comparaison entre les deux courbes doit se faire loin des coeurs des dislocations pour lesquels les valeurs de Δu obtenues à partir du programme divergent. En réalité les calculs effectués près de la dislocation, tout en évitant le cœur, ne permettent pas de donner de bons résultats par suite de la convergence très lente des séries.

Cette parfaite superposition des courbes le long d'une période est due à la méthode théorique utilisée, au nombre d'harmoniques choisis et à la double précision des calculs utilisés dans le programme.

V.2. Application numérique

Le but de ces applications est d'obtenir des ordres de grandeur en fonction des différents paramètres (angles de désorientation, épaisseur de la couche collée, période,...), et une visualisation spatiale des différents champs élastiques (déplacement, déformation, contrainte, énergie) et ce pour différents matériaux largement utilisés en industrie électronique.

Dans ce qui suit, nous allons voir l'influence des réseaux de dislocations faiblement enterré et parallèle à la surface sur les propriétés élastiques de cette surface.

Rappelons que lorsque l'on considère la contrainte ou la déformation, le signe de ces champs (compression ou dilatation) entre en compte, mais si on considère la densité d'énergie élastique, qui est toujours positive, il n'y a plus de distinction entre des zones en compression et des zones en dilatation.

V.2.1. Matériaux utilisés : nous commençons par présenter les matériaux sur lesquels notre travail s'est essentiellement basé, à savoir le silicium (Si) et l'Arsenic de Gallium (GaAs).

V.2.1.1. le silicium (Si)

Depuis le début des années 1960, le silicium a été le semi-conducteur de choix. Sa dominance ne peut pas être attribuée à ses propriétés électroniques, car la mobilité médiocre de ses électrons le pénalise dans la course aux circuits électroniques ultra-rapides et sa bande interdite indirecte lui interdit l'accès au domaine des composants optiques, limitant ainsi sévèrement son efficacité comme un photo-

détecteur. Le silicium possède, par contre, d'indéniables qualités liées à certaines de ses propriétés physiques (mécanique, thermique, aptitude à l'oxydation..) et un avantage économique incontestable.

Le silicium cristallise dans la structure dite diamant, constituée de deux structures cubiques à faces centrées (c.f.c) de mêmes atomes et décalées l'une par rapport à l'autre de $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, figure 5.2.

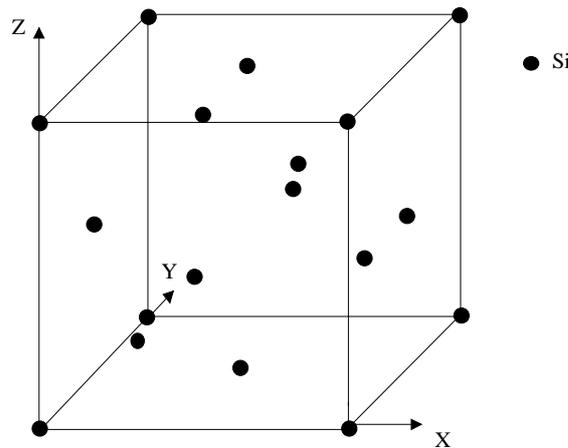


FIG. 5.2: La structure diamant du silicium

Les données expérimentales relatives au Si d'après [63,75], utilisées dans les différents calculs, sont présentées au tableau 5.1.

Désignation	Paramètres	valeurs
Paramètre de maille	a (nm)	0.5428
Vecteur de burgers	b (nm)	0.3838
Constantes élastiques Anisotropes	C_{11} (GPa)	165.7
	C_{12} (GPa)	63.9
	C_{44} (GPa)	79.6

Tableau 5.1: Paramètre cristallin, vecteur de burgers et constantes élastiques anisotropes du Silicium d'après [63,75].

V.2.1.2. L'arsenic de gallium (GaAs)

Le gallium arsenic est un très bon semi-conducteur employé de plus en plus dans la fabrication des dispositifs opto-électroniques comme les diodes électroluminescentes à infrarouges ou des diodes laser. Le GaAs a quelques propriétés électroniques qui sont supérieures à celle du silicium. Ainsi sa grande mobilité lui permet de fonctionner aux fréquences supérieures à 250 GHz. Cependant ses propriétés physiques sont médiocres et son élaboration est très coûteuse.

Le GaAs cristallise dans la structure dite zinc-blende, constituée, elle aussi, de deux structures cubiques à faces centrées (c.f.c) décalées l'une par à l'autre de $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, sauf que cette fois-ci l'une est constituée d'atomes de Ga et l'autre d'atomes de As, figure 5.3.

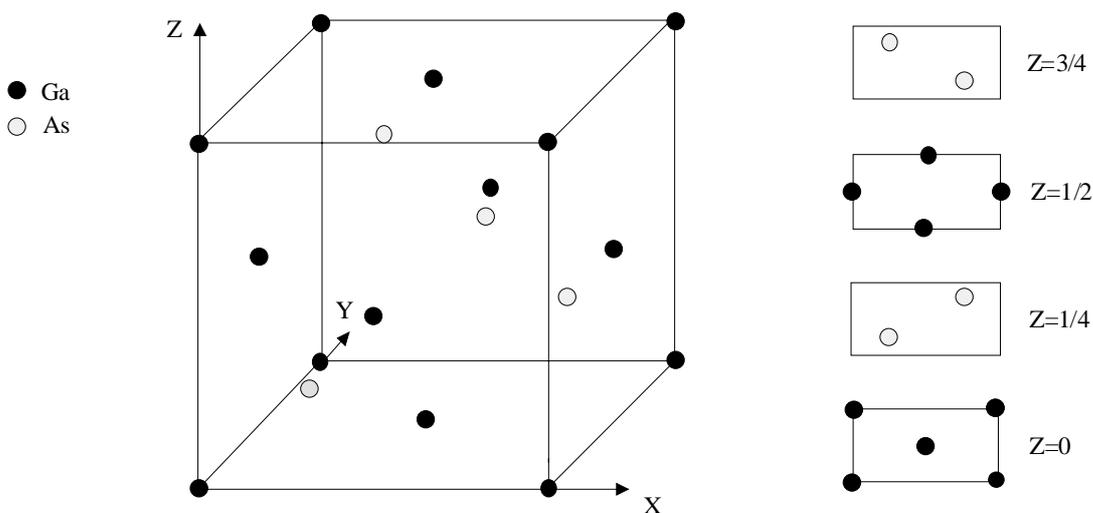


FIG. 5.3: La structure Zinc-blende du GaAs

Les données expérimentales relatives au GaAs d'après [62,63], utilisées dans les différents calculs, sont présentées au tableau 5.2.

Désignations	Paramètres	Valeurs
Paramètre de maille	a (nm)	0.56533
Vecteur de burgers	b (nm)	0.3997
Constantes élastiques Anisotropes	C_{11} (GPa)	118
	C_{12} (GPa)	53.5
	C_{44} (GPa)	59.4

Tableau 5.2: Paramètre cristallin, vecteur de burgers et constantes élastiques anisotropes pour le GaAs d'après [62,63].

V.2.2. Champs et énergie élastiques produits en surface par un réseau de dislocations faiblement enterré accommodant une torsion.

V.2.2.1. Joint de torsion Si/Si(001)

Depuis quelques années, les bicristaux obtenus par collage moléculaire de faces (001) de silicium sont de plus en plus étudiés car ils permettent de réaliser des motifs très réguliers à l'échelle nanométrique [5,75,76,77].

On va simuler dans cette section des échantillons de silicium obtenus déjà par collage moléculaire [5-61] et dont les différents paramètres sont technologiquement accessibles. L'angle de torsion nominal est de 0.4407° , et l'épaisseur de la couche collée est $h = 10$ nm. L'angle de rotation correspond à une période de 50 nm.

1. Champs des déplacements :

Puisque l'on est dans une géométrie de cisaillement pur où les composantes non nulles sont seulement u_1 et u_3 (le déplacement selon u_2 (vertical) est nul), alors pour visualiser la répartition horizontale des déplacements des unités structurales nous devons présenter le champ de déplacement dans un plan (x_1, x_3) à une altitude fixée. La figure 5.4 est une représentation de ce champ déplacement, tracé à l'altitude $x_2 = 10$ nm, c'est-à-dire à la surface de l'échantillon. Les lignes de dislocations vis sont dans le plan $x_2 = 0$, et sont confondues avec les droites $x_1 = 0$, $x_1 = \Lambda$, $x_3 = 0$ et $x_3 = \Lambda$.

Notons que les déplacements u_k ont été multipliés en chaque point par 20 et ce pour mieux montrer les déformations de cette surface.

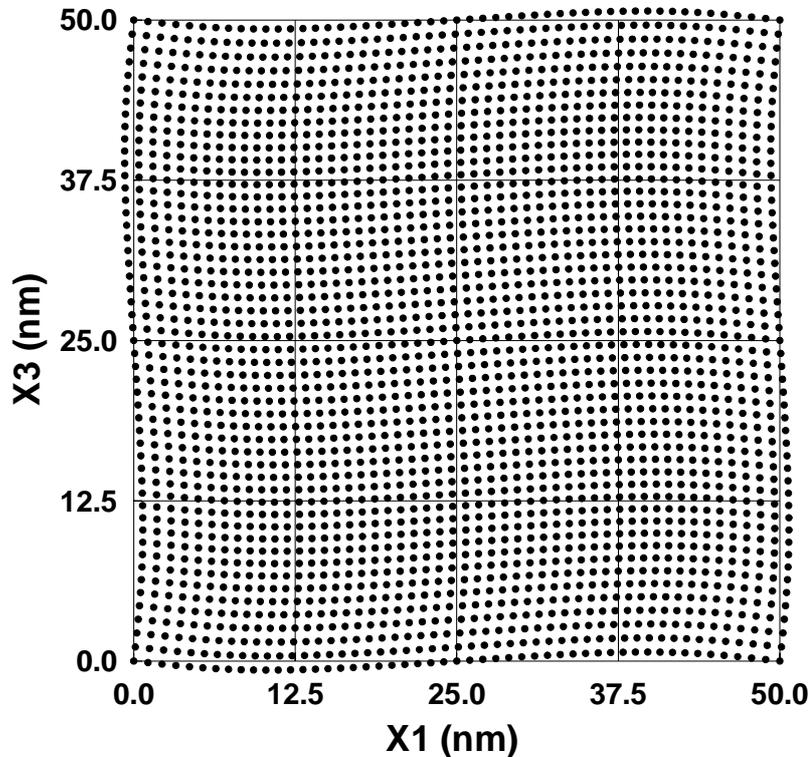
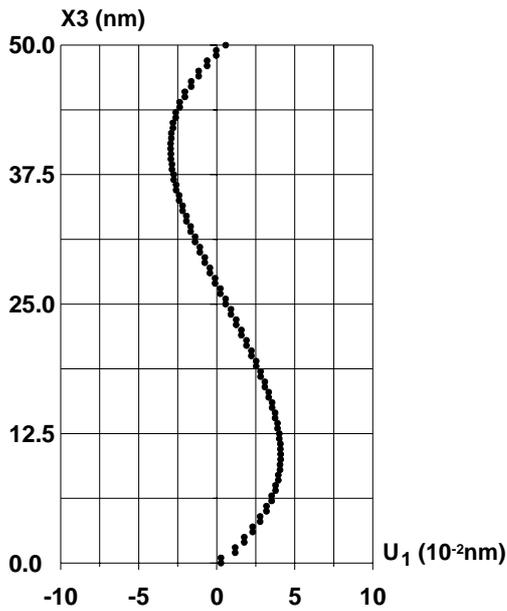


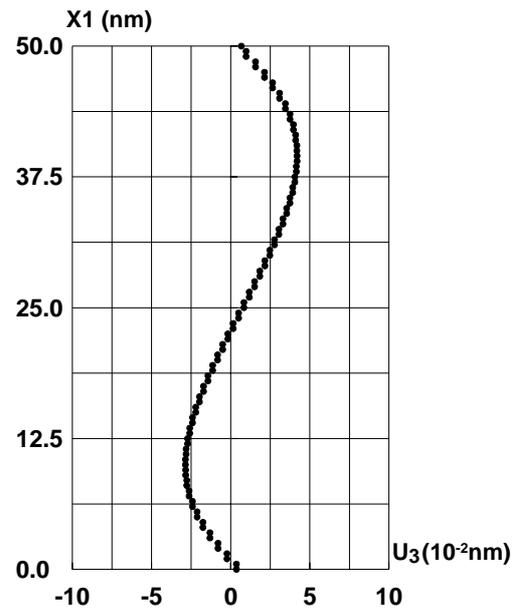
FIG. 5.4: Schéma illustrant les champs des déplacements des unités structurales déformés par un réseau carré de dislocations vis à la surface de l'échantillon Si/Si.

La figure 5.5 présente la variation des déplacement $u_1(u_3)$ en fonction de x_3 (x_1) respectivement pour x_1 (x_3) = $\Lambda/4=12.5$ nm et x_1 (x_3) = $\Lambda/2=25$ nm. Ces figures reflètent bien la symétrie géométrique de notre problème. En comparant les valeurs des modules des déplacements pour chaque cas de figures, on remarque que les déplacements maximaux à la surface se situent aux coordonnées $(\Lambda/4, \Lambda/4)$, $(\Lambda/4, 3\Lambda/4)$, $(3\Lambda/4, \Lambda/4)$, $(3\Lambda/4, 3\Lambda/4)$, et à ces coordonnées le module du déplacement vaut 0.419 nm, valeur inférieure à celle obtenue par leroy [5] en isotropie. De même, on peut constater que le déplacement s'annule à la fois au centre de la figure 5.4, et à l'aplomb du croisement des lignes de dislocations. Cette dernière constatation est confirmée par la nullité des déplacements u_1 (u_3), sur les figures c et d de la figure 5.5, c'est-à-dire à x_1 (x_3) = $\Lambda/2$.



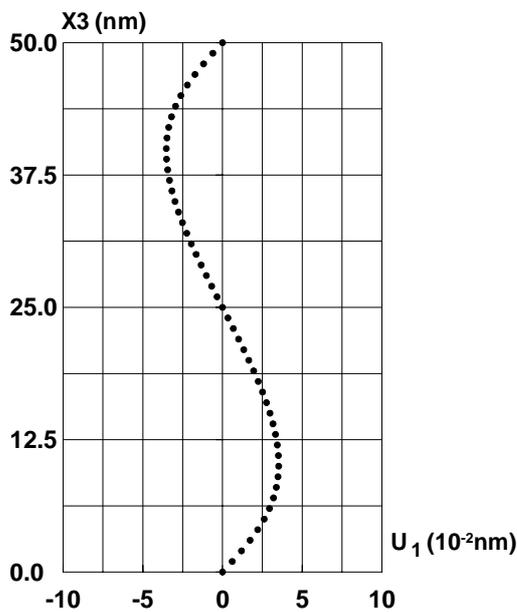
(a) $X_1 = \Lambda/4 = 12.5$ nm

Déplacement maxi = 0.0419 nm



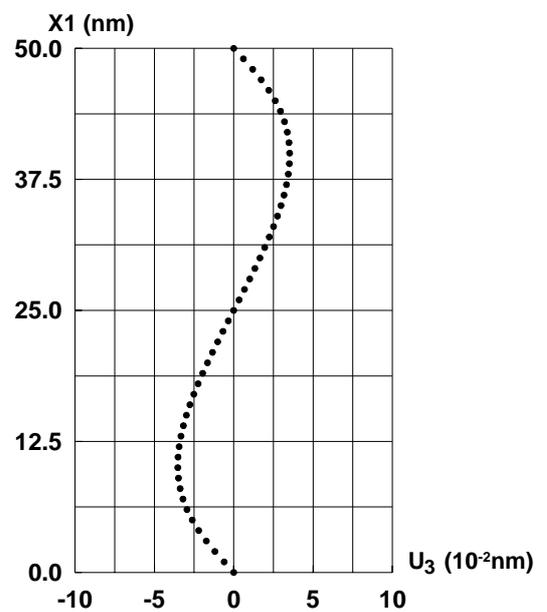
(b) $X_3 = \Lambda/4 = 12.5$ nm

Déplacement maxi = 0.0419 nm



(c) $X_1 = \Lambda/2 = 25$ nm

Déplacement maxi = 0.0352 nm



(d) $X_3 = \Lambda/2 = 25$ nm

Déplacement maxi = 0.0352 nm

FIG. 5.5: Variation des déplacements u_k ($k=1,3$) à la surface libre de l'échantillon Si/Si en fonction de X_i ($i=1,3$)

Pour voir l'influence de l'épaisseur de la couche mince sur les valeurs des déplacements, nous avons tracé la variation des déplacement u_1 en fonction de x_3

à $x_1 = \Lambda/2$, respectivement pour $h_1 = 5$ et 20 nm, figure 5.6. On peut constater que, dans ce cas précis, l'amplitude décroît exponentiellement avec l'épaisseur.

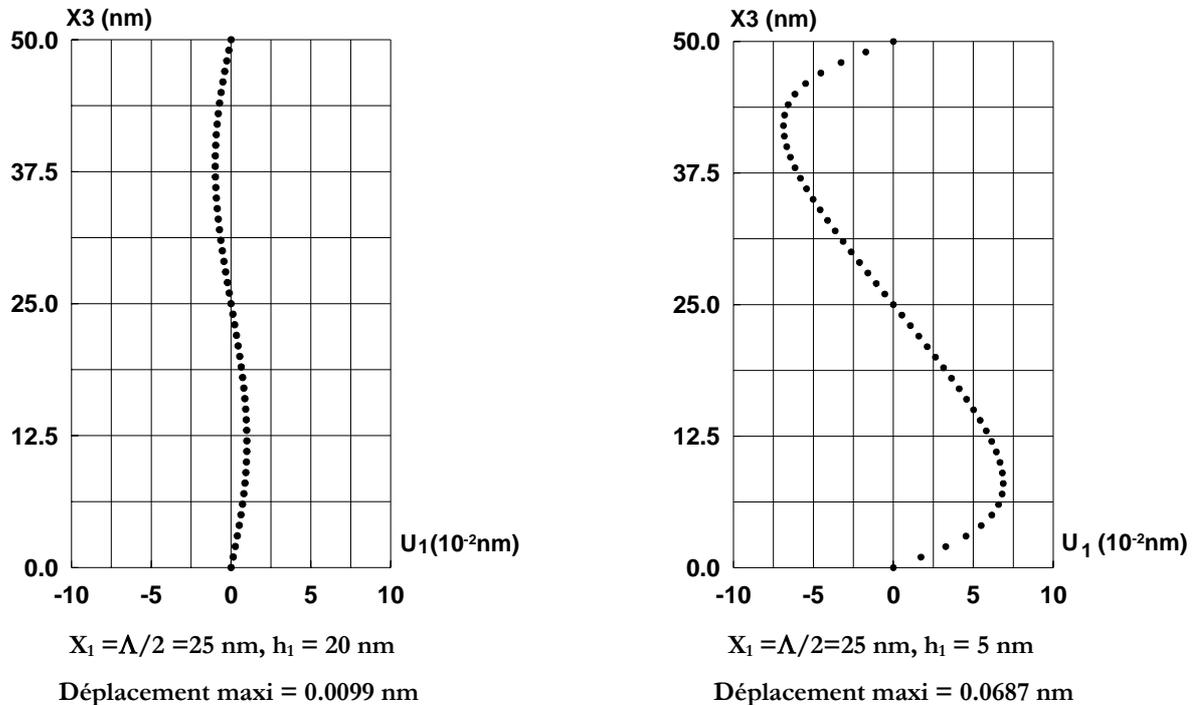


FIG. 5.6: Variation des déplacements u_1 à la surface libre de l'échantillon Si/Si en fonction de X_3 pour différentes épaisseurs ($h_1=5$ et 20 nm).

2. Champs de déformation et de contrainte:

Nous rappelons que les conditions aux limites relatives à notre problème, précédemment défini, imposent que les contraintes et les déformations normales à la surface libre de l'échantillon soient nulles à la surface. La matrice des déformations est donc une matrice de cisaillement quand on la calcule à $x_2 = h_1$ donc les seules composantes non nulles des champs de déformations et de contraintes sont respectivement les composantes de cisaillement ϵ_{13} et σ_{13} (par symétrie ϵ_{31} et σ_{31}). Les variations en surface de ces déformations et de ces contraintes sont représentées respectivement, en figure 5.7 et 5.8, pour un réseau carré de dislocation vis de 50 nm de période, enterré à 10 nm de profondeur ; Les extrema de ces champs sont logiquement situés à l'aplomb du milieu des segments de dislocations. Au centre des cellules définies par ces dernières et sur les

diagonales du réseau carré, les contraintes et déformations sont nulles (voir, par exemple, la figure 5.9 pour la déformation et la figure 3.10 pour la contrainte).

La déformation maximale calculée à la surface est 1,5% (en isotropie 0.48%) alors que la contrainte maximale calculée en surface est de l'ordre de 0.75 GPa (en isotropie 5 GPa).

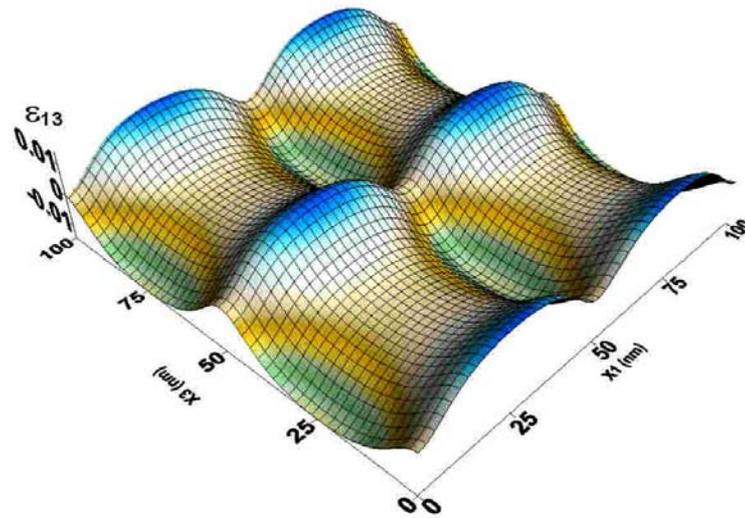


FIG. 5.7: Composante non nulle du champ de déformation ε_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50$ nm, $b_1=10$ nm). Représentation sur une surface de 2×2 périodes.

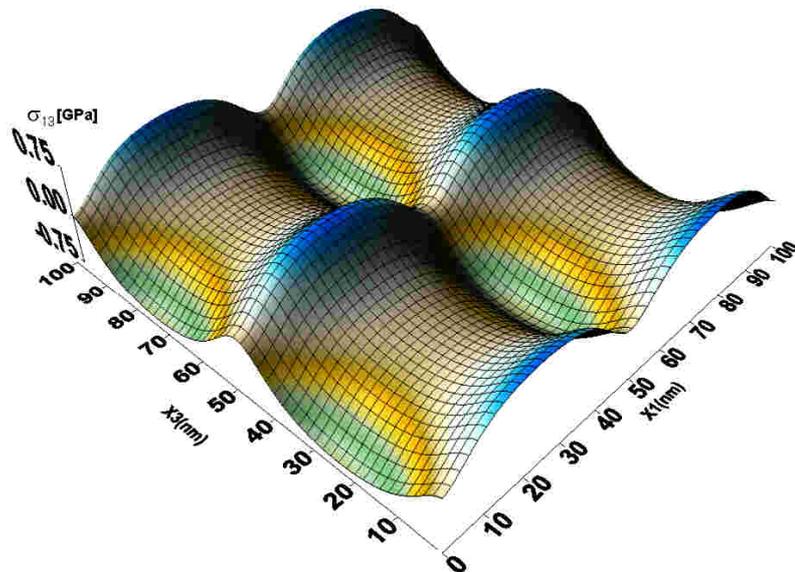


FIG. 5.8: Composante non nulle du champ de contraintes σ_{13} [en GPa] induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50$ nm, $b_1=10$ nm). Représentation sur une surface de 2×2 périodes.

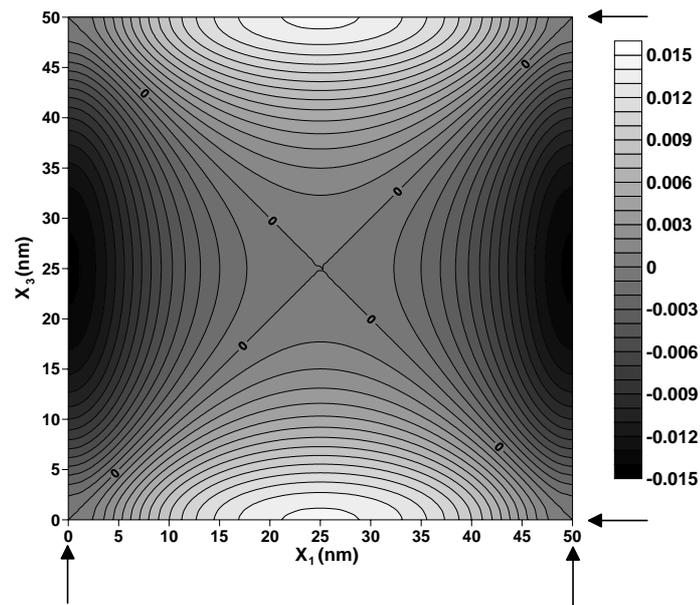


FIG. 5.9: Iso-valeurs des déformations ε_{13} déformation ε_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50 \text{ nm}$, $h_1=10\text{nm}$). Les flèches indiquent les lignes de dislocations vis.

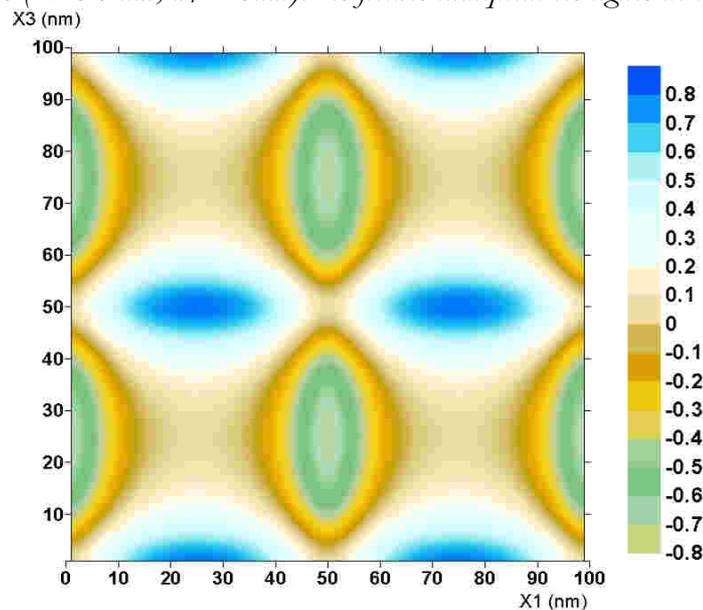


FIG. 5.10: Iso-valeurs des contraintes σ_{13} [en GPa] induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50 \text{ nm}$, $h_1=10\text{nm}$). Représentation sur une surface de 2×2 périodes.

Si nous traçons la variation de la déformation maximale et de contrainte maximale à la surface du film en faisant varier la période du réseau de dislocations vis (cf. figures 5.11 et 5.12), nous pouvons nous apercevoir que les courbes obtenues tendent de manière monotone vers un palier et que quantitativement nous sommes

à environ 80% de la valeur asymptotique de ϵ_{13} pour une distance entre dislocations égale à 50nm soit 5 fois plus grande que l'épaisseur du film que nous avons fixé ici à 10nm. Le rapport entre l'épaisseur du film et le pas des dislocations doit donc être suffisamment faible pour que les champs élastiques de déformation (déformation et contrainte) induits par les dislocations soit les plus importants possibles.

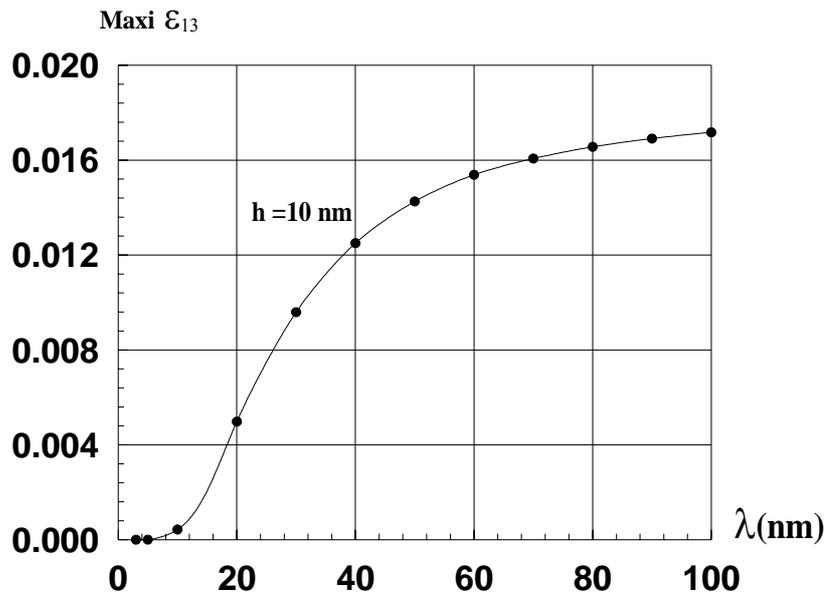


FIG. 5.11: Variation, en fonction de la période du réseau de dislocations, de la valeur maximale de la déformation ϵ_{13} à la surface du film de 10 nm.

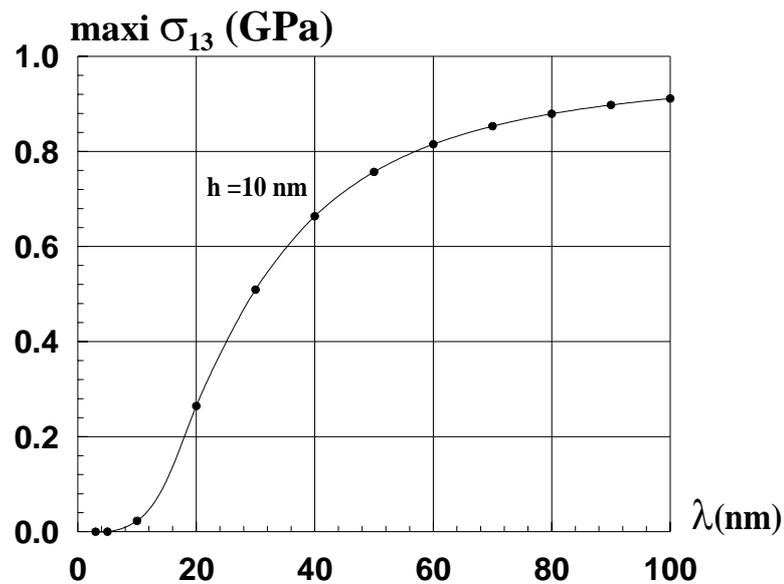


FIG. 5.12: Variation, en fonction de la période du réseau de dislocations, de la valeur maximale de la contrainte σ_{13} à la surface du film de 10 nm.

Les figures 5.13 et 5.14 présentent la variation, en fonction de l'épaisseur de la couche, de la valeur maximale de la déformation ϵ_{13} et de la contrainte σ_{13} , induits en surface par un réseau carré de dislocations vis de période 50 nm. Nous pouvons voir que ces champs sont d'autant plus importants que l'épaisseur de la couche est faible. Ce qui justifie la tentative des chercheurs à fabriquer des films ultraminces.

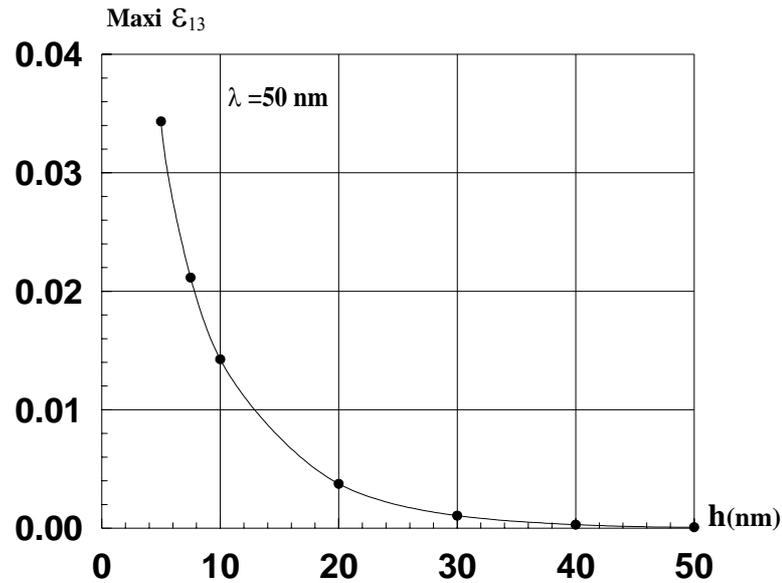


FIG. 5.13: Variation, en fonction de l'épaisseur de la couche, de la valeur maximale de la déformation ϵ_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis de période 50 nm.

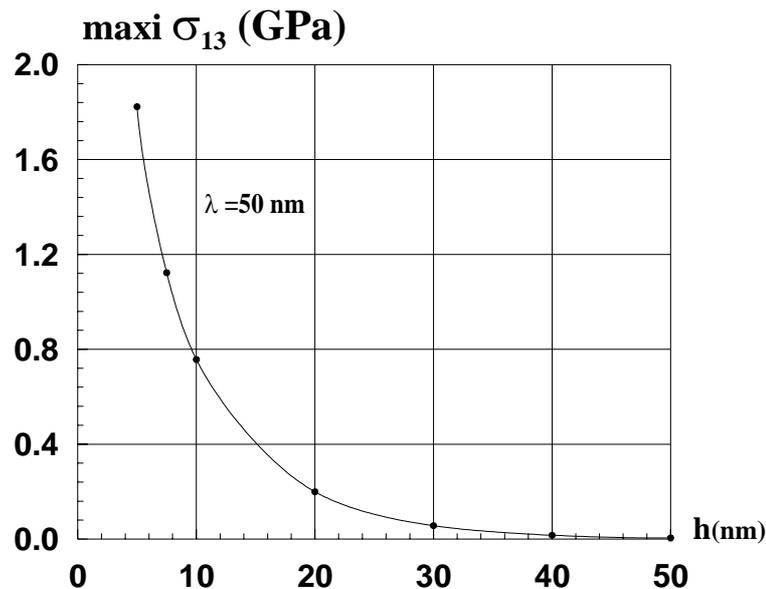


FIG. 5.14: Variation, en fonction de l'épaisseur de la couche, de la valeur maximale de la contrainte σ_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis de période 50 nm.

Dans ce qui suit, on veut essayer de définir une plage d'épaisseur, en fonction de la période, qui serait intéressante à contrôler la disposition des nanostructures. Il faut que la déformation maximale soit importante.

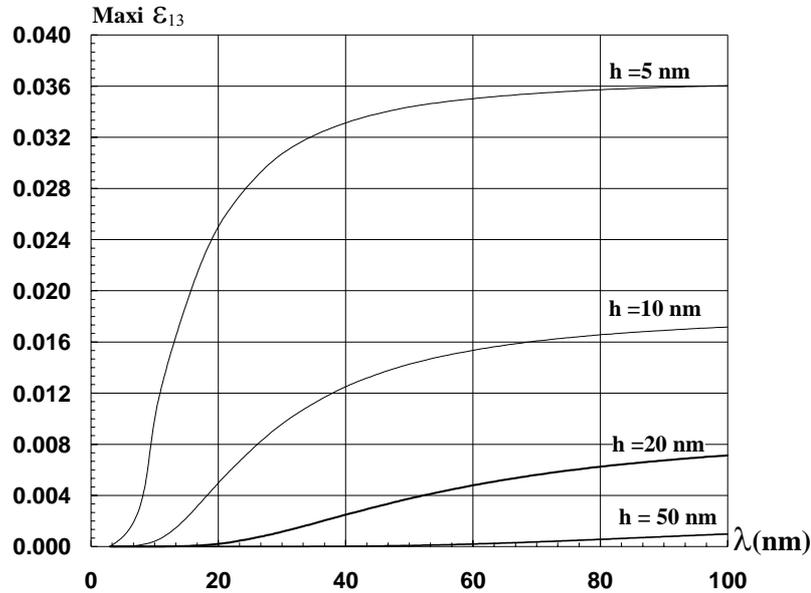


FIG. 5.15: Evolution de la déformation maximale en surface en fonction de la périodicité du réseau de dislocations vis, pour différentes épaisseurs.

Pour cela nous avons tracé à la figure 5.15, l'évolution de la déformation maximale en surface en fonction de la périodicité des réseaux de dislocations, pour différentes épaisseurs de couche collée.

- 1- A période fixe, la déformation maximale augmente quand l'épaisseur diminue. Cette évolution est exponentielle. Il semble donc naturel, et comme nous l'avons déjà signalé auparavant, d'amincir au maximum la couche collée pour bénéficier au maximum en surface des effets des champs élastiques.
- 2- Pour une épaisseur fixée, la déformation maximale augmente avec la périodicité du réseau de dislocations, jusqu'à atteindre une valeur limite. D'après la figure 5.15, pour $h = 10 \text{ nm}$, le domaine de périodicité compris approximativement entre 15 et 25 nm est intéressant. Au delà de 25 nm, la pente de la courbe est faible, et il faut une augmentation importante de la périodicité pour gagner en champ élastique. De plus, des problèmes de stabilité

de la couche peuvent se poser [5]. La même analyse peut être faite pour les autres épaisseurs ainsi et à titre d'exemple pour $h = 5$ nm, le domaine de périodicité compris entre 10 et 20 nm paraît le plus intéressant.

Pour obtenir des champs élastiques suffisamment importants en surface, un critère approximatif est donc que l'épaisseur doit être comprise entre le quart et la moitié de la périodicité. Ceci est en accord avec le critère d'efficacité avancé par Bourret [26] : l'épaisseur de la couche collée doit être inférieure à la période des dislocations.

Remarque : Notons que les valeurs trouvées ci-dessus, en élasticité anisotrope, sont tous approximativement trois fois plus grandes que celles obtenues par Leroy [5] en élasticité isotrope.

3. Energie

L'amplitude maximale de la densité volumique d'énergie élastique stockée en surface due à un réseau carré de dislocations vis est représentée en figures 5.16 et 5.17. On constate que son amplitude maximale à épaisseur h constante tend elle aussi vers un palier de manière monotone. Sur la figure 5.17, on constate que son amplitude maximale à période D constante décroît exponentiellement quand l'épaisseur h augmente.

Donc pour que l'effet en surface de ces champs soit notable, il ne faut donc pas que le rapport h/D soit trop grand.

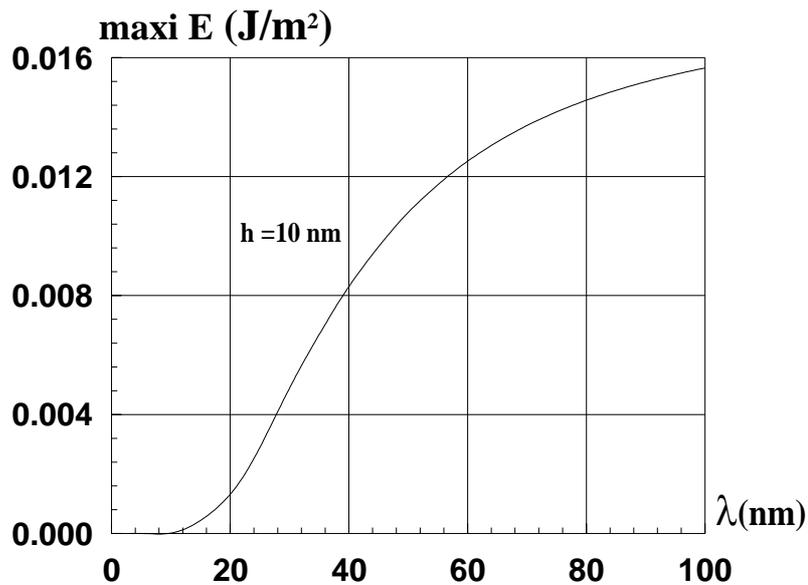


FIG. 5.16: Variation, en fonction de la période du réseau de dislocations, de la valeur maximale de la densité volumique d'énergie élastique stockée à la surface du film de 10 nm.

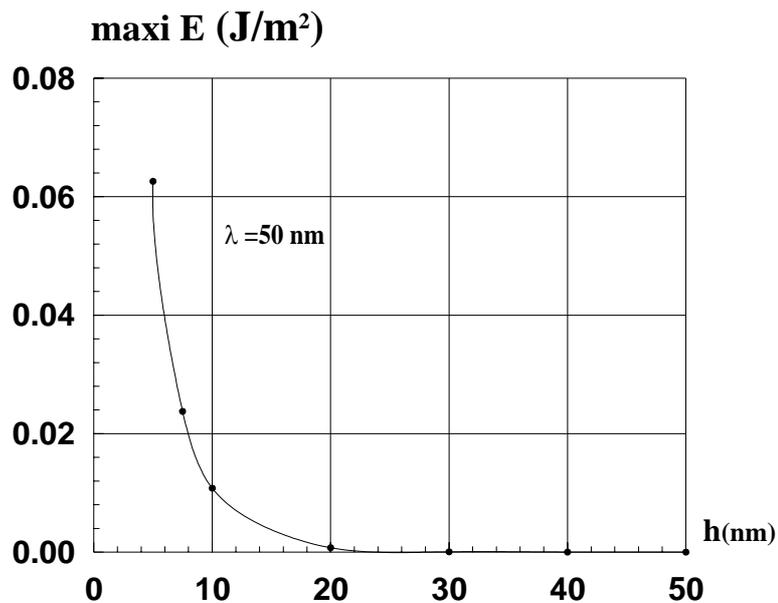


FIG. 5.17: Variation, en fonction de l'épaisseur de la couche, de la valeur maximale de la densité volumique d'énergie élastique induit en surface par un réseau carré de dislocations vis de période 50 nm.

V.2.2.2. Joint de torsion GaAs/GaAs (001)

Le matériau considéré maintenant sera le joint de torsion GaAs/GaAs (001). Ce type de joint est composé d'un réseau 2D carré de dislocations vis de 25 nm de période et enterré à 20 nm de profondeur. Un tel réseau permet d'accommoder une torsion de $0,92^\circ$ (ce choix est justifié par des résultats expérimentaux [78]).

Nous supposons de même que les dislocations sont orientées selon des directions $\langle 011 \rangle$ et que leurs vecteurs de Burgers sont donc de type $a/2 \langle 011 \rangle$. Il s'agit d'une orientation naturelle pour les lignes de dislocations vis dans les matériaux III-V.

1. Champs des déplacements :

Comme pour le joint de torsion de Si/Si, nous commençons par présenter dans un plan (x_1, x_3) , à une altitude fixée $x_2 = 20$ nm (surface libre de l'échantillon), le champ de déplacement des unités structurales, figure 5.18.

Notons que les déplacements u_k ont été aussi multipliés en chaque point par 20.

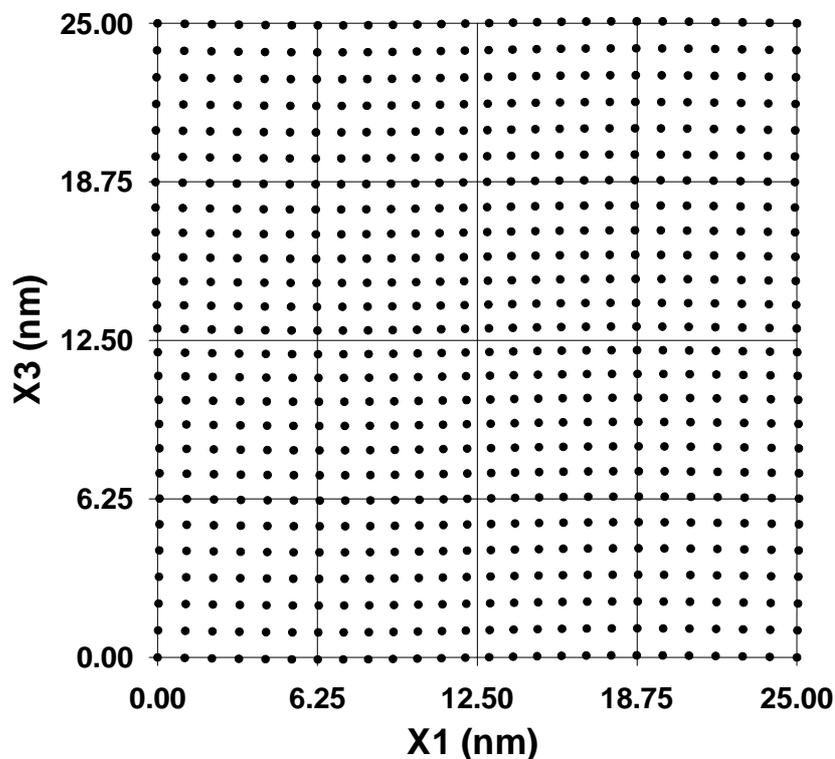


FIG. 5.18: Schéma illustrant les champs des déplacements des unités structurales déformés par un réseau carré de dislocations vis à la surface de l'échantillon GaAs/GaAs.

On notera cette fois-ci la diminution des valeurs des déplacements en comparaison avec celles obtenues pour le silicium. De même, on peut constater que le déplacement s'annule à la fois au centre de la cellule, et à l'aplomb du croisement des lignes de dislocations. Cette dernière constatation est confirmée par la nullité des déplacements u_1 (u_3), sur la figure 5.19 à x_1 (x_3) = $\Lambda/2$.

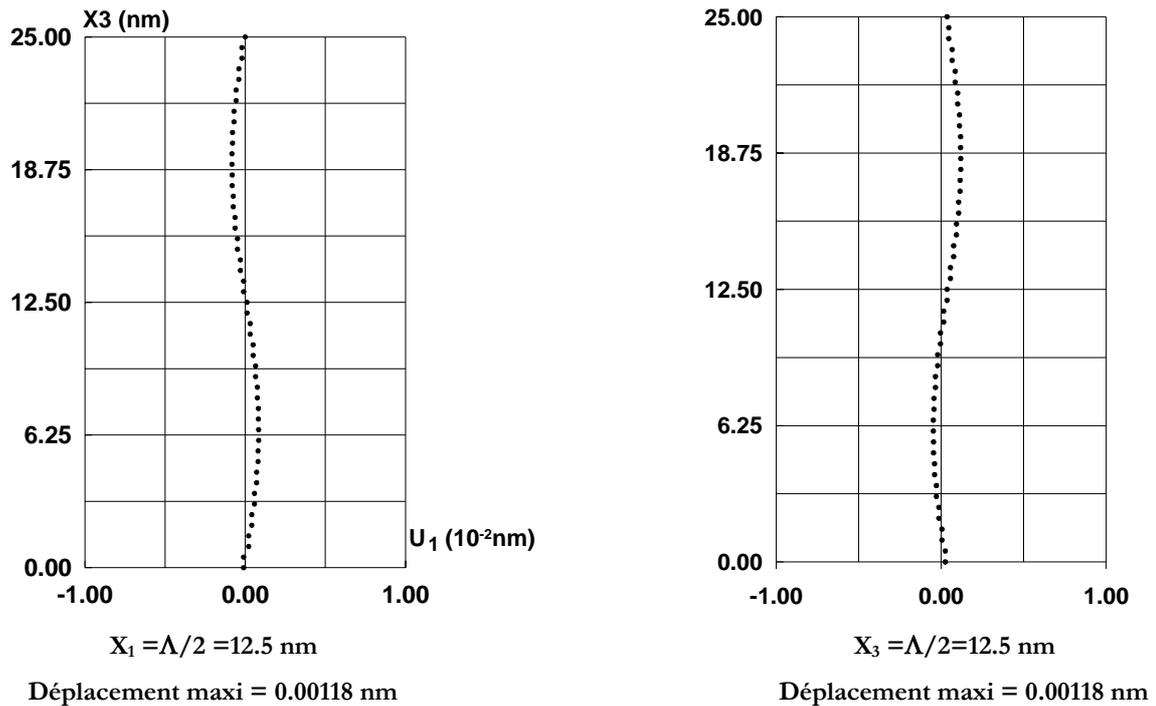


FIG. 5.19: Variation des déplacements u_k ($k=1,3$) à la surface libre de l'échantillon GaAs/GaAs en fonction de X_i ($i=1,3$)

2. Champs de déformation et de contrainte:

Comme seules les composantes non nulles des champs de déformations et de contraintes sont respectivement les composantes de cisaillement ϵ_{13} et σ_{13} (par symétrie ϵ_{31} et σ_{31}) alors nous représentons, en premier, la variation en surface de ϵ_{13} , figure 5.20, induit par un réseau carré de dislocation vis de 25 nm de période, enterré à 20 nm de profondeur. On observe sur cette figure que la déformation est nulle sur les diagonales du réseau carré, et que les extrema se trouvent à l'aplomb

du milieu des segments de dislocations. Cette fois-ci, La déformation maximale calculée à la surface est estimée à environ 0.065 %.

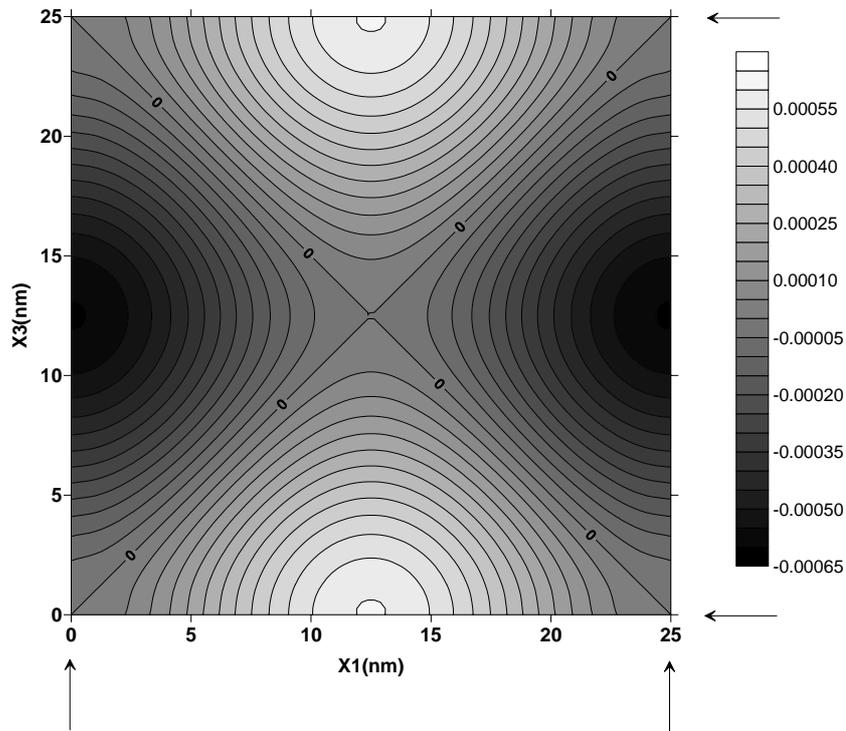


FIG. 5.20: Iso-valeurs des déformations ϵ_{13} déformation ϵ_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=25 \text{ nm}$, $b_1=20\text{nm}$). Les flèches indiquent les lignes de dislocations vis.

Dans les calculs présentés ci-dessus (déplacements, déformations, contraintes), la périodicité du réseau de dislocations et l'épaisseur de la couche collée étaient fixées. Que se passe-t-il lorsque ces paramètres varient ?

Pour cela nous avons tracé à la figure 5.21, l'évolution de la contrainte maximale en surface en fonction de la périodicité des réseaux de dislocations, pour différentes épaisseurs de couche collée.

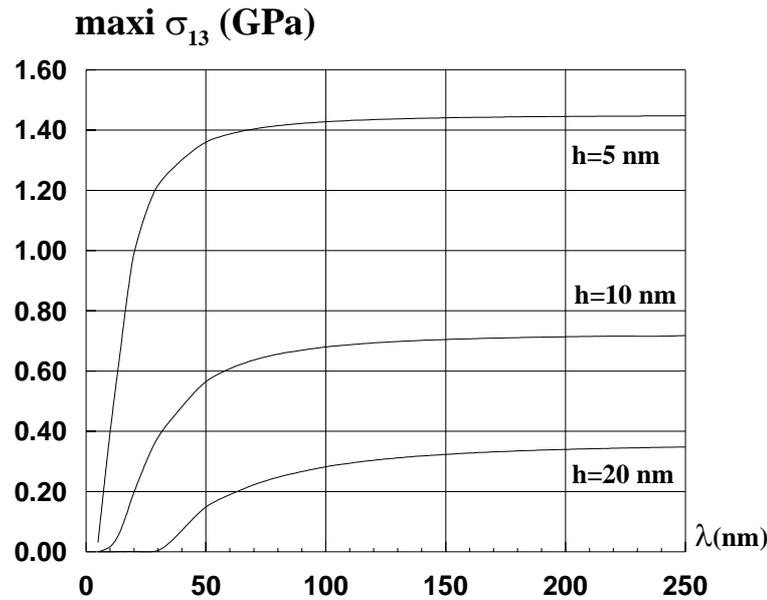


FIG. 5.21: Evolution de la contrainte maximale en surface en fonction de la périodicité du réseau de dislocations vis, pour différentes épaisseurs.

Les remarques suivantes peuvent être faites

- 1- A période fixe, la contrainte maximale augmente quand l'épaisseur diminue. Cette évolution est exponentielle.
- 2- Pour une épaisseur fixée, la contrainte maximale augmente avec la périodicité du réseau de dislocations, jusqu'à atteindre une valeur limite. Ainsi et à titre d'exemple pour $h = 10$ nm, le domaine de périodicité compris entre 20 et 50 nm, c'est-à-dire entre deux à cinq fois l'épaisseur h , paraît le plus intéressant.

Les valeurs des contraintes maximales obtenues cette fois-ci sont approximativement la moitié des valeurs obtenues par coehlo [62] en élasticité isotrope.

3. Energie

L'amplitude maximale de la densité volumique d'énergie élastique stockée pour une période de 25nm et $h_l = 20$ nm, est représentée en 2D et 3D le long de 2x2 périodes, figure 5.22. On constate que les modulations (tout comme celles des champs de contraintes et de déformations) reproduisent la périodicité du réseau de dislocations.

Nous avons constaté aussi que les amplitudes maximales de la densité volumique d'énergie élastique stockée en surface, à période Λ constante, décroissent elles aussi exponentiellement quand l'épaisseur h_1 augmente, figure 5.23. De même, elles tendent vers un palier de manière monotone dont le niveau est plus inférieur que celui atteint pour un joint de torsion du silicium.

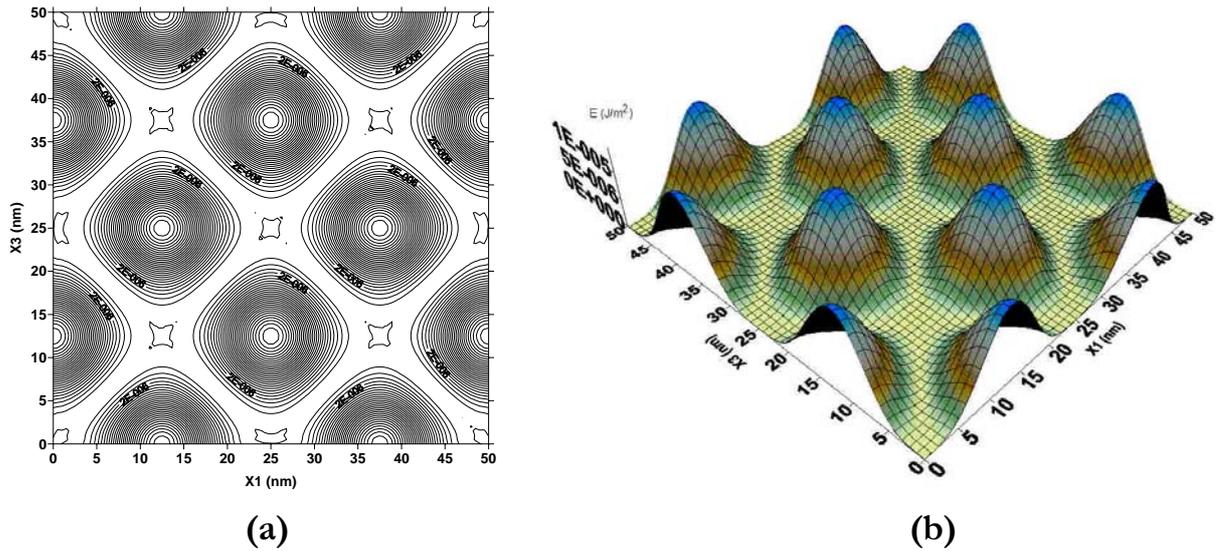


FIG. 5.22: Iso valeurs de la densité volumique stockée en surface due à réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=25$ nm, $h_1=20$ nm). (a) 2D, (b) 3D

En fin, la plage de périodes Λ qui paraît intéressante vis à vis des modulations de la densité volumique (pour ce joint de torsion) est aussi comprise entre deux et cinq fois l'épaisseur h_1 ; au-delà la densité volumique stockée en surface varie peu. En d'autres termes, un rapport h_1/D petit est avantageux pour avoir de fortes variations des champs élastiques induits en surface par un réseau carré de dislocations vis.

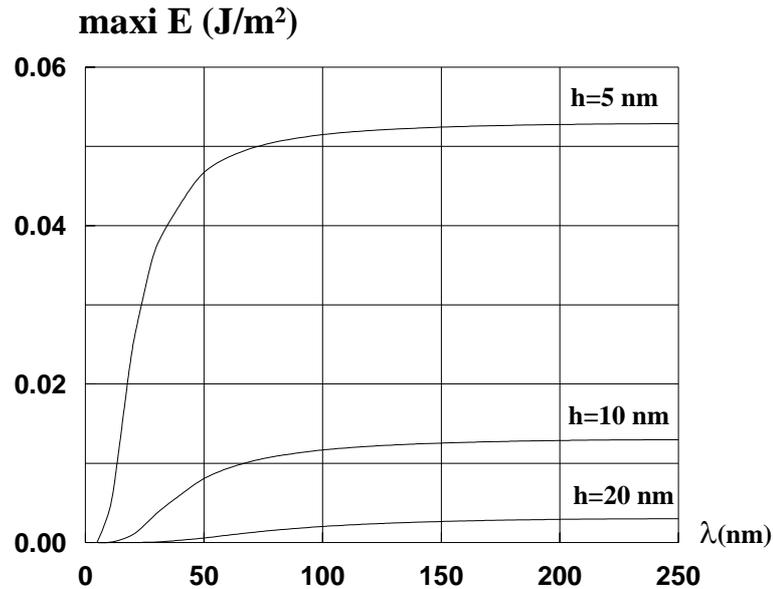


FIG. 5.23: Evolution de la densité volumique stockée en surface en fonction de la périodicité du réseau de dislocations vis, pour différentes épaisseurs.

V.2.3. Champs élastiques produits en surface par un réseau de dislocations faiblement enterré accommodant une flexion.

Considérons maintenant un joint de flexion composé d'un réseau de dislocation de période Λ et qui sont parallèles à l'axe (Ox_3) d'un repère orthonormé direct $(Ox_1x_2x_3)$; cet axe est confondu avec l'une des dislocations (voir figure 3.1e). Dans ce cas précis, et en l'absence de rotation, le rattrapage de la flexion se ferait uniquement par des dislocations coins pures.

On va donc calculer les champs élastiques, pour un réseau de dislocations coins, dont le vecteur de burger est normal à Ox_3 et la ligne de dislocation dans le plan de l'interface de collage.

Les résultats pour le champ de déplacement sont présentés sur les figures 5.24 et 5.25 pour des joint de flexion de Si/Si et de GaAs/GaAs respectivement. Notons que le problème est invariant selon Ox_3 .

Ces calculs montrent en particulier que les extrema des champs de déplacement en surface ne sont pas situés à l'aplomb des lignes de dislocations. Sur la figure 5.24, les extrema (positif et négatif) en surface sont situés entre les lignes de dislocations, à environ 25% et 75% de la période.

Nous pouvons remarquer que la symétrie des champs de déplacement respecte bien la symétrie linéaire du réseau de dislocations coin.

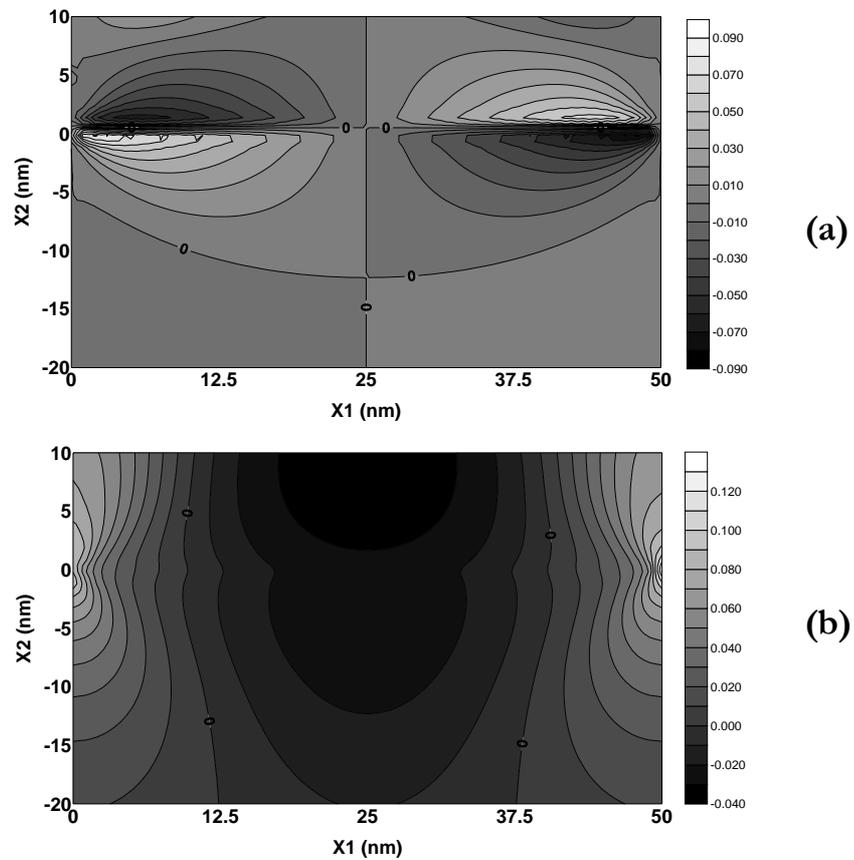


FIG. 5.24: Iso valeurs des champs de déplacement induit par un réseau unidimensionnel de dislocations coins pour un joint de flexion Si/Si ($\Lambda=50$ nm, $b_1=10$ nm). a) suivant u_1 b) suivant u_2 .

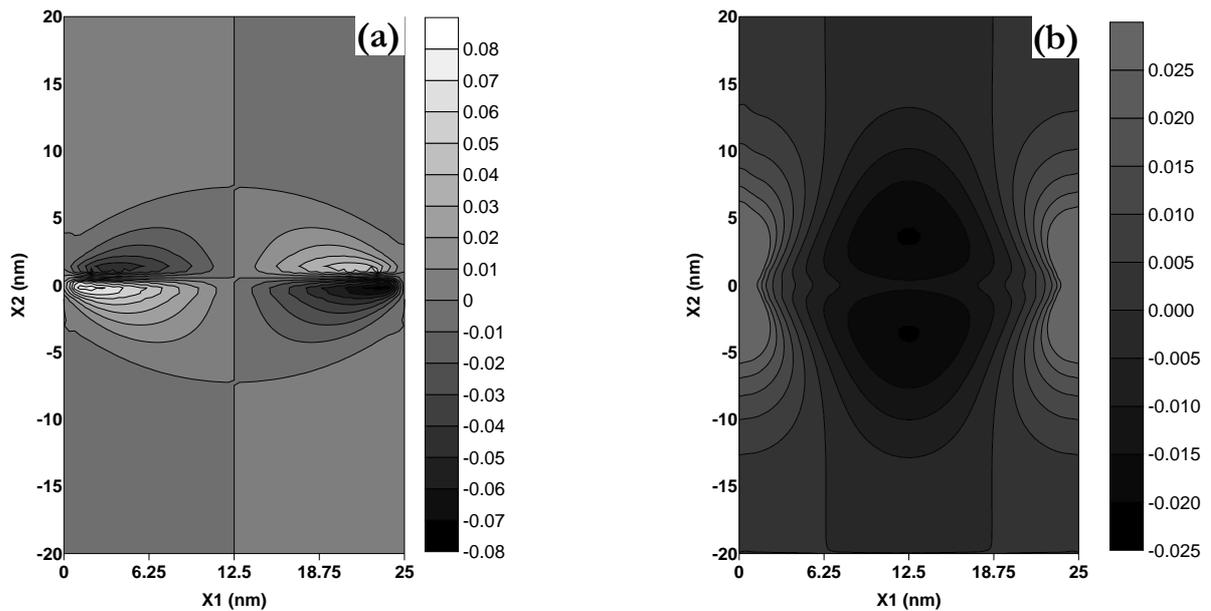


FIG. 5.25: Iso valeurs des champs de déplacement induit par un réseau unidimensionnel de dislocations coins pour un joint de flexion GaAs/GaAs ($\Lambda=50$ nm, $b_1=10$ nm). a) suivant u_1 b) suivant u_2 .

Pour une meilleure représentation des effets des champs élastiques sur les surfaces libres, nous avons tracé, pour le cas du joint de flexion GaAs/GaAs, la morphologie de la surface libre pour différentes valeurs de l'épaisseur h_1 ($h_1=5,10$ et 20 nm), figure 5.26.

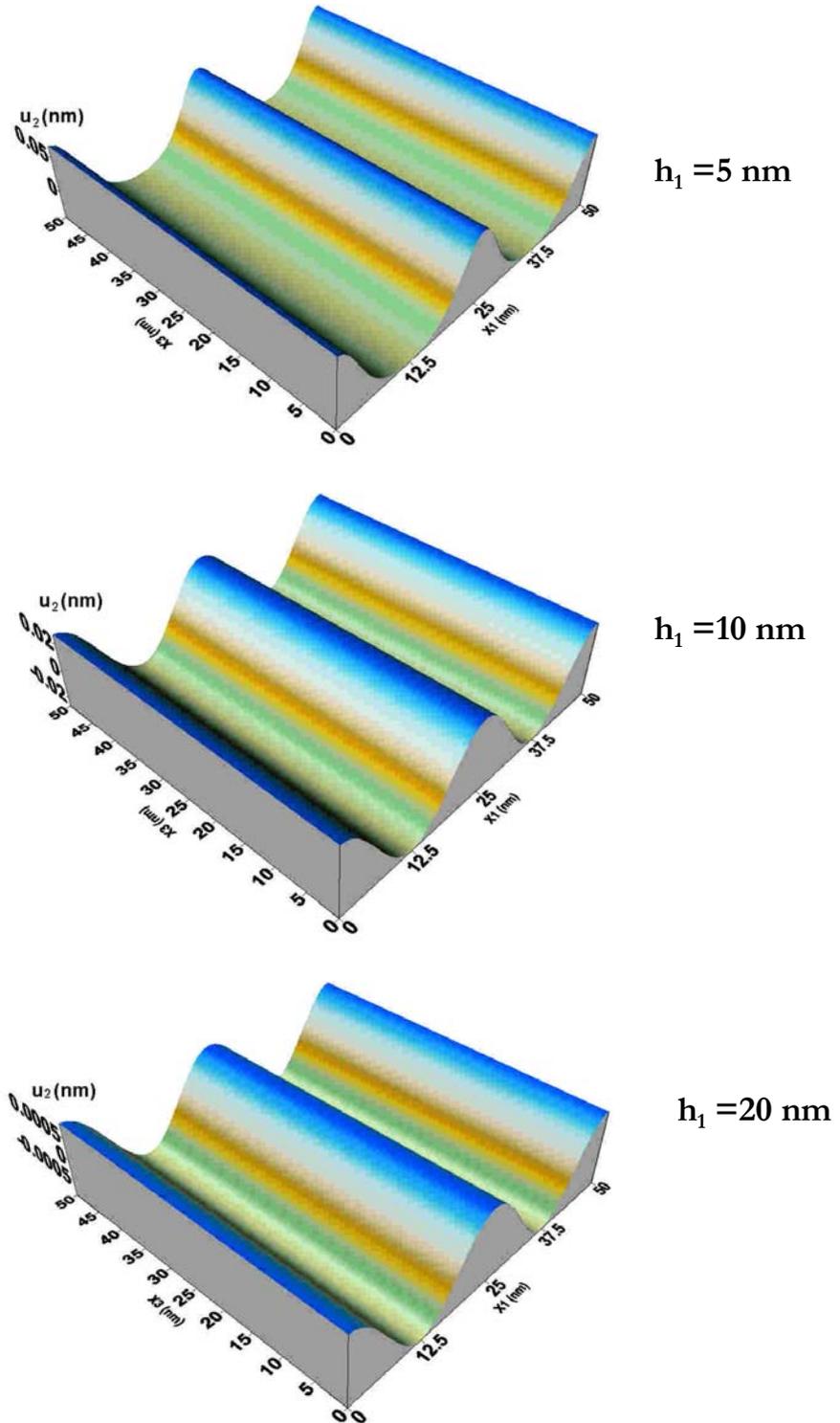


FIG. 5.26: Morphologie de la surface libre pour différentes valeurs de l'épaisseur h_1

V.2.4. Champs élastiques produits en surface par un réseau de dislocations faiblement enterré accommodant un désaccord paramétrique.

Depuis l'avènement de la microscopie électronique à transmission (M.E.T), l'étude des premiers stades de la précipitation d'une phase cristalline dans une matrice n'a cessé de faire des progrès, e.g. Dahmen et col ([79-80], Sagoe-Crentsil et col [81]. Récemment, la microscopie électronique à très haute résolution a permis de visualiser des marches atomiques associées au coeur des dislocations d'hétéro-interfaces, e.g. Loubradou et col [82]. Pour cela, nous avons jugé utile de présenter pour la première fois l'influence des deux surfaces libres simultanément sur les champs élastiques (déplacements et contraintes) induits par un réseau unidirectionnel de dislocations de misfit accommodant un désaccord paramétrique, figure 5.27.

Donc l'analyse du problème devient plus difficile puisque les deux surfaces libres de la lame mince sont prises en considération comme le prouve le nombre très réduit d'articles à ce sujet.

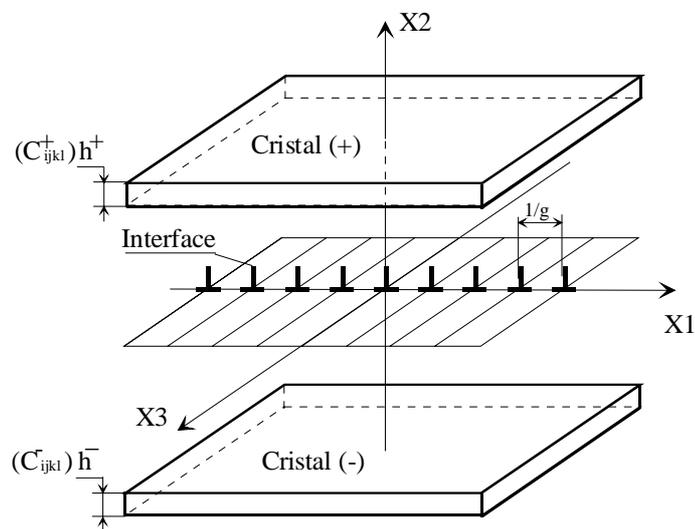


FIG. 5.27: Bilame mince, avec un réseau unidirectionnel de dislocations à l'interface, $1/g$ est la période. C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- sont les constantes élastiques des deux milieux, h^+ et h^- sont les épaisseurs des deux milieux.

Pour pouvoir comparer les résultats obtenus en élasticité anisotrope avec ceux de l'élasticité isotrope nous avons traité comme exemple l'hétéro-interphase Al/Al₂Cu dont les champs de déformation (déplacement et contrainte) sont disponibles dans la littérature [83].

Après introduction à l'origine du système O_{x₁x₂} d'une dislocation de translation coin, les résultats présentés en figures 5.28 et 5.29 sont obtenus. Ces résultats correspondent au cas d'un précipité mince Al₂Cu (θ'), quadratique, parfaitement cohérent avec une matrice de solution solide de Cu dans Al.

Ce modèle a fait l'objet de plusieurs études dans l'approximation d'une élasticité isotrope notamment celles de R. Bonnet [83]. Le repère cartésien est tel que O_{x₁}//[010]Al//[010]Al₂Cu et O_{x₂}//[001]Al//[001]Al₂Cu.

Le cristal positif est choisi du côté de Al avec une épaisseur de $h^+ = 2.5$ nm. De même le cristal négatif est choisi du côté de Al₂Cu dont l'épaisseur est $h^- = 5$ nm. Cette épaisseur (7.5 nm) est couramment rencontrée en M.E.T.H.R. La période est choisie égale à 10 fois l'épaisseur du bilame soit 75 nm. En pratique, pour avoir une bonne représentation des champs élastiques (u_k, σ_{jk}) au voisinage d'une dislocation de translation, il suffira de choisir pour les calculs une période très grande devant l'épaisseur du bilame.

Les constantes d'élasticité anisotropes sont données par [84] et valent (en GPa)

- Pour Al₂Cu $C_{11} = 159,$ $C_{12} = 63,$ $C_{44} = 29$
- Pour Al $C_{11} = 108.2,$ $C_{12} = 61.3,$ $C_{44} = 28.5$

Remarque: D'après [83] aucun renseignement n'étant disponible dans la littérature sur les constantes élastiques anisotropiques de Al₂Cu (θ'), alors nous les avons assimilées à celles de Al₂Cu (θ).

Les déformations des cristaux sont visualisées par des réseaux pseudo-carrés de points noirs (Al₂Cu) et de croix (Al). La figure 5.28 correspond à $a_{Al} / 2$ [110] soit dans le repère de travail $b_1 = a_{Al} / \sqrt{2} = 0.2863$ nm, $b_2 = 0$, tandis que la figure

5.29 correspond à $b = a_{Al} / 2 [101]$ soit $b_1 = 0$, $b_2 = a_{Al} / \sqrt{2} = 0.2863$ nm avec $a_{Al} = 0.405$ nm.

Sur les figures 5.28 et 5.29 le long de chaque hétéro-interface, les réseaux déformés de croix et de points sont discontinus. En effet, les discontinuités interfaciales de u , de module $a_{Al} / 2$ sont bien visibles à gauche et à droite du coeur des dislocations. Ces figures illustrent bien la déformabilité du cristal Al par rapport à Al_2Cu , plus rigide en particulier pour la figure 5.29 où la surface libre de la phase Al est nettement plus déformée que pour la phase Al_2Cu .

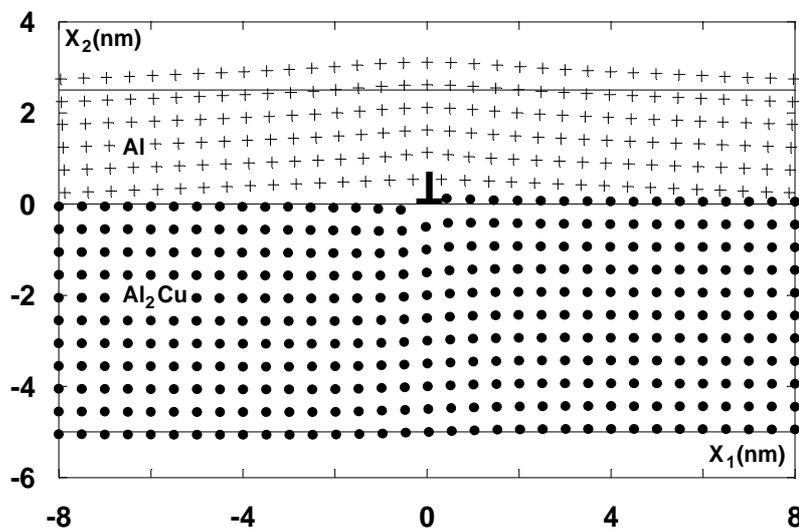


FIG. 5.28: Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/ Al₂Cu sous l'effet de dislocation coin interfaciale, C_{ij} anisotropes, $b // Ox_1$

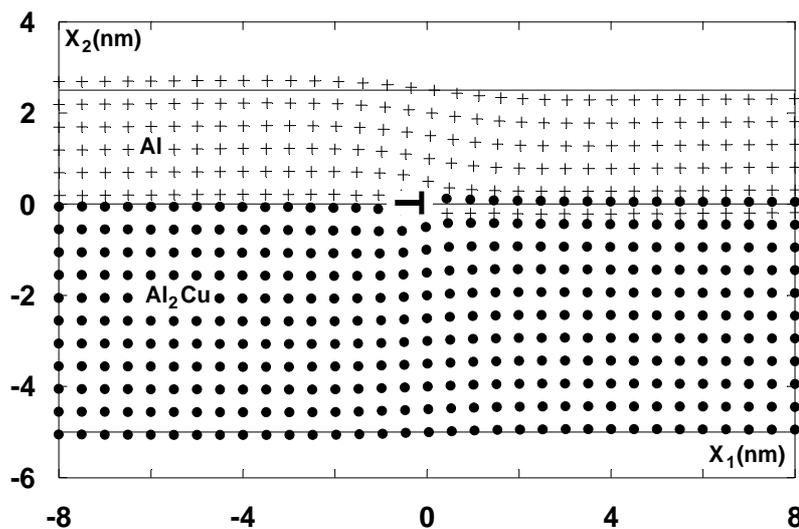


FIG. 5.29: Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/ Al₂Cu sous l'effet de dislocation coin interfaciale, C_{ij} anisotropes, $b // Ox_2$

Nous présentons ci-dessous la distribution des iso-contraintes $\sigma_{11} = \pm 150$ MPa autour d'une dislocation coin, pour deux orientations du vecteur de burgers b ,

On remarque que la présence d'un cristal de seconde nature (hétéro-structure) modifie considérablement la distribution du champ de contrainte autour de la dislocation. Ces iso-contraintes révèlent un effet de surface qui n'a pas été mentionné dans le cas de l'élasticité isotrope.

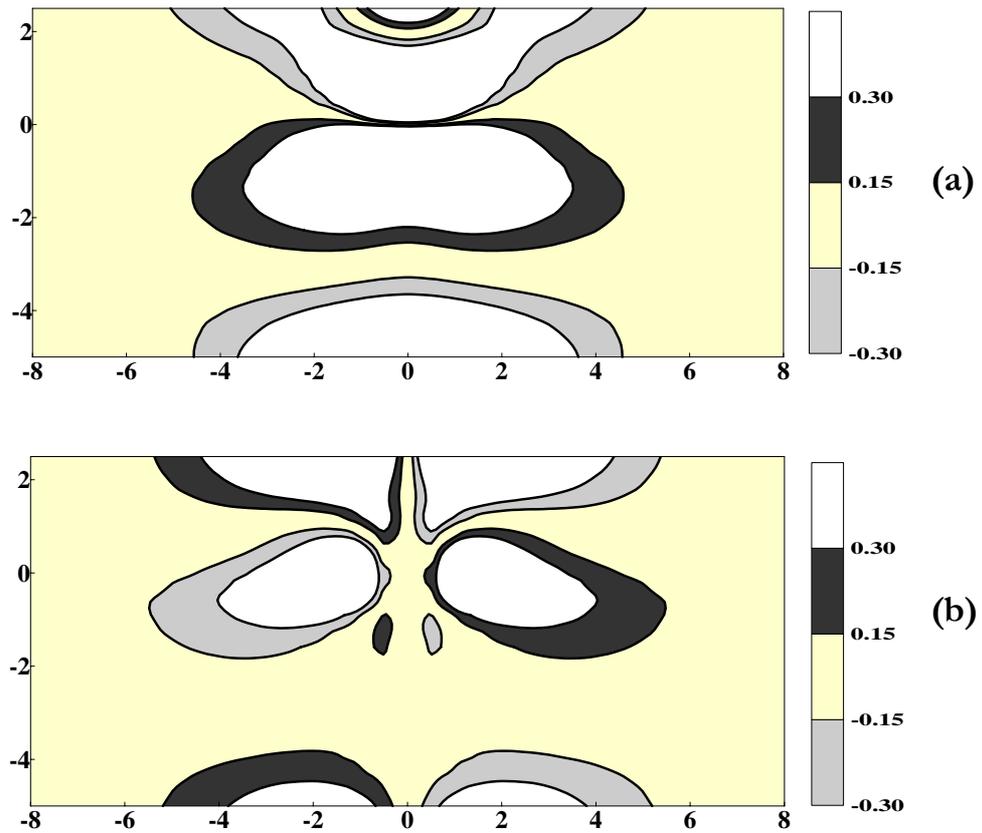


FIG. 5.30: Courbes d'équi-contraintes $\sigma_{11} = \pm 150$ MPa pour une dislocation placée à l'interface d'un bilame mince Al/Al_2Cu (a) $b // Ox_1$, (b) $b // Ox_2$

Conclusion Générale

Elaborer de nouveaux matériaux et des composants toujours plus petits, construire atome par atome de nouvelles molécules et les assembler pour réaliser de nouvelles fonctions, exploiter les nouveaux phénomènes qui apparaissent à l'échelle du nanomonde, tels sont les défis à relever dans les années à venir.

Ces défis demanderont de considérables efforts de recherche fondamentale et appliquée. Différentes disciplines sont appelées à coopérer pour comprendre ces nouveaux phénomènes et développer les nanosciences.

L'impact des nanotechnologies sur l'économie est très prometteur, car les applications industrielles seront nombreuses et concerneront les domaines les plus variés, de l'électronique à la médecine en passant par l'aéronautique, la défense, l'environnement et les matériaux de construction.

Dans ce contexte et à travers notre travail, nous avons voulu répondre à quelques questions soulevées récemment par plusieurs chercheurs à savoir:

- 1. Comment va-t-on réussir à faire une grande densité de nanostructures identiques ?*
- 2. Quels sont les paramètres dont on dispose pour influencer de manière collective la croissance d'une population de structures de taille nanométriques ?*
- 3. Quels sont les mécanismes qui pilotent la forme, la taille et la densité de ces nanostructures ?*

Répondre déjà à ces questions, c'est contribuer largement à résoudre une partie de la problématique de l'organisation des nanostructures.

Le but de cette étude était donc de démontrer que, premièrement des réseaux de dislocations enterrés ont la capacité d'organiser dans le plan, de manière contrôlée, ces objets de taille nanométriques et deuxièmement que l'effet de l'anisotropie sur les

champs élastiques (déplacement, déformation, contrainte et énergie), générés par ces derniers (réseaux de dislocations), est considérable et par conséquent, non négligeable.

En effet, l'énergie et les champs élastiques en surface reproduisent l'organisation des dislocations faiblement enterrées. Leurs modulations sont d'autant plus fortes que l'épaisseur de la couche collée est faible. Il ne faudra donc pas que cette dernière soit trop importante.

D'autre part, pour une épaisseur donnée, en fonction de la périodicité des dislocations et des conditions de croissance, ce sera, soit un joint de flexion (une rotation entre les directions cristallines des deux cristaux collés dont l'axe est contenu dans leur interface), soit un joint de torsion (une rotation entre les directions cristallines des deux cristaux collés dont l'axe est normal à leur interface), qui sera plus favorable à l'organisation de nanostructures auto-assemblées. Cependant, il est préférable de privilégier ce dernier type de joint car il est susceptible d'induire une organisation 2D (on ne s'attend qu'à une organisation 1D avec un joint de flexion).

La démarche adoptée dans ce manuscrit a été la suivante : Après avoir donné un aperçu sur les défis de la nanotechnologie dans le monde moderne, nous avons présenté dans un premier temps, les concepts généraux de croissance cristalline de petits objets (les îlots). Cette présentation soulève le problème de l'organisation en surface de ces objets, et du contrôle de leurs propriétés morphologiques : tailles, positionnements, densités. Cette question est un enjeu majeur de la croissance de nanostructures, puisque leur utilisation présuppose que l'on contrôle leurs propriétés physiques, liées à leurs caractéristiques morphologiques. La solution étudiée ici pour répondre à ce besoin de contrôle est l'utilisation de réseaux de dislocations enterrées pour piloter l'organisation des nanostructures et plus spécifiquement un réseau carré de dislocations vis obtenus par collage moléculaire avec une désorientation en rotation dite aussi de torsion et également appelé "twist" en terminologie anglo-saxonne, entre

les deux cristaux mis en contact.

Des calculs en élasticité anisotrope ont été abordés pour résoudre premièrement le problème lié à une seule famille de dislocation vis parallèle à l'axe Ox_3 d'un repère convenablement choisi. Par la suite, et en utilisant le principe de superposition, tous les champs élastiques ont pu être calculés : contraintes, déformations, déplacements et densité d'énergie élastique. Ces calculs ont permis de quantifier les différents champs élastiques (en particulier en surface), et d'étudier l'influence des paramètres tels que : les angles de collage et l'épaisseur de la couche collée sur ces champs.

Des applications numériques ont été présentées pour trois types de joint accommodant respectivement une torsion, une flexion et enfin un désaccord paramétrique.

Les résultats montrent que les champs élastiques obtenus, soit pour le joint de torsion Si/Si ou bien celui de GaAs/GaAs, reproduisent exactement l'organisation des dislocations faiblement enterrées et que leurs amplitudes sont d'autant plus fortes que l'épaisseur de la couche collée est faible.

Nous avons remarqué que les déplacements maximums à la surface se situent à un quart, de part et d'autre des lignes de dislocations et que leurs valeurs sont inférieures à celles obtenues par Leroy [5] en isotropie. De même, nous avons constaté que le déplacement s'annule à la fois au centre de la cellule carré et à l'aplomb du croisement des lignes de dislocations.

Quant aux extremas des champs de déformation et de contraintes, ils sont situés à l'aplomb du milieu des lignes de dislocations. Au centre des cellules définies par ces dernières et sur les diagonales du réseau carré, les contraintes et déformations sont nulles.

Concernant la densité volumique d'énergie élastique stockée en surface due à un réseau carré de dislocations vis, on a constaté que son amplitude maximale à épaisseur

constante, tend vers un palier de manière monotone et que son amplitude maximale à période constante, décroît exponentiellement quand l'épaisseur augmente.

Quantitativement, les valeurs des déformations obtenus pour le Si/Si sont trois fois plus grandes que celles obtenues en isotropie.

Nous avons par la suite défini des plages d'épaisseurs, en fonction de la période, qui seraient intéressantes pour contrôler la disposition des nanostructures. Pour cela l'évolution de la déformation maximale en surface en fonction de la périodicité des réseaux de dislocations, pour différentes épaisseurs de couche collée a montré que :

- 1- A période fixe, la déformation maximale augmente quand l'épaisseur diminue. Cette évolution est exponentielle. Il semble donc naturel, et comme nous l'avons déjà signalé auparavant, d'amincir au maximum la couche collée pour bénéficier au maximum en surface des effets des champs élastiques.
- 2- Pour une épaisseur fixée, la déformation maximale augmente avec la périodicité du réseau de dislocations, jusqu'à atteindre une valeur limite.

Donc, pour obtenir des champs élastiques suffisamment importants en surface, un critère approximatif est donc nécessaire, il faut que l'épaisseur soit comprise entre le quart et la moitié de la périodicité. Ceci est en accord avec le critère d'efficacité avancé par Bourret [26].

En résumé, les dislocations sont à l'origine de champs élastiques de déplacements, de déformations et de contraintes, ainsi que d'une énergie de déformation élastique. Intuitivement, on peut donc penser que la présence de dislocations à proximité de la surface d'un cristal va influencer la croissance et notamment la croissance d'îlots. Si de plus les dislocations sont organisées en réseaux, on peut s'attendre à ce que les îlots reproduisent la même organisation.

Perspectives

Différents points peuvent être évoqués, qui se situent dans la continuité du travail présenté ici :

P1. Simulation de la diffraction de rayons X

Appliquer les calculs théoriques en élasticité anisotrope à la simulation de la diffraction de rayons X par des réseaux carrés de dislocations vis et comparer ainsi l'expérience et la simulation.

P2. Etude des dépôts sur des substrats auto-organisés

Le silicium et le germanium cristallisent dans une structure cubique diamant. Le paramètre de maille du silicium vaut 0.5428 nm, celui du germanium vaut 0.566nm. Le désaccord paramétrique est donc de 4%. De même le désaccord paramétrique entre le GaAs et le InAs est de 7%.

Donc l'étude des systèmes Ge/Si, InGaAs/GaAs ou InAs/GaAs sera très intéressante pour voir l'influence des dépôts sur les joints de grains (spécifiquement sur la périodicité des réseaux de dislocations) lors de l'hétéroépitaxie.

Pour cela nous envisageons de superposer le premier cas, c'est-à-dire une couche sur un substrat avec un réseau carré de dislocation vis, avec le troisième cas concernant un bilame mince dont le réseau de dislocations est unidirectionnel et accommodant un désaccord paramétrique.

Expérimentalement on pourrait observer nos échantillons par microscopie à effet tunnel (scanning tunneling microscope : STM) pour avoir une idée plus précise de la topologie de surface après croissance des nanostructures.

P3. Une approche de la dissociation des dislocations

Il a été observé que les dislocations vis du réseau carré de rotation sont dissociées. Cette dissociation consiste à séparer la dislocation initiale en deux dislocations partielles, séparées par une faute d'empilement. La partielle du bas est généralement fixée à l'interface de collage. La dissociation permet de minimiser l'énergie du coeur de la dislocation.

Pour les dislocations vis, les partielles sont des dislocations mixtes à 30° séparées par une faute d'empilement le long d'un plan $\{111\}$ (Fig. P1).

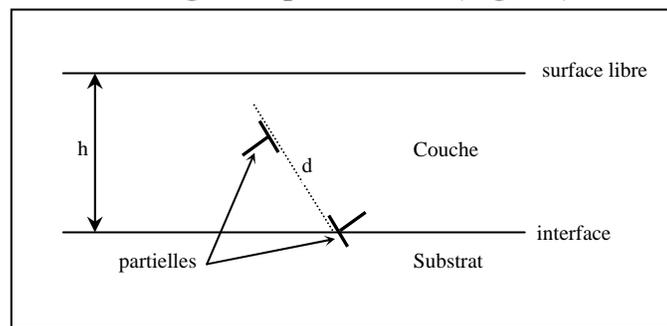


FIG. P1: Schéma de la dissociation des dislocations vis. La faute d'empilement (ligne pointillée) se trouve le long d'un plan $\{111\}$.

Contrairement aux dislocations vis non dissociées, on aura cette fois un déplacement perpendiculaire à la surface u_2 non nul.

Donc un calcul élastique exact devrait prendre en compte cette dissociation et l'effet de la faute d'empilement sur les champs élastiques.

Annexe 1

Le collage moléculaire

L'élaboration de structures SOI (silicium sur isolant) pour réalisation de circuits intégrés, le transfert de circuits sur différents supports, la fabrication de capteurs et de microsystèmes, la réalisation de composants hybrides s'appuient largement sur le collage par adhérence moléculaire. L'intérêt de cette technique repose sur la possibilité de coller deux surfaces en les mettant en contact direct et sur la maîtrise de technologies des surfaces à l'échelle nanométrique.

Les premières applications du collage par adhérence moléculaire à de grandes surfaces sont apparues dans les années 1980 dans les domaines de la micro-électronique et des microtechnologies. De nombreuses technologies ont été développées depuis une vingtaine d'années. Parmi elles, la technologie originale Smart Cut. Basée sur une implantation ionique de gaz et sur le collage moléculaire (figure A1.1), cette technologie permet l'élaboration d'une couche fine monocristalline de silicium sur une plaque support de silicium *via* un film d'oxyde.

1. Silicium
2. oxydation thermique
3. implantation
4. nettoyage et collage moléculaire
5. Smart Cut
6. traitement thermique et polissage fin
7. recyclage de la plaque A

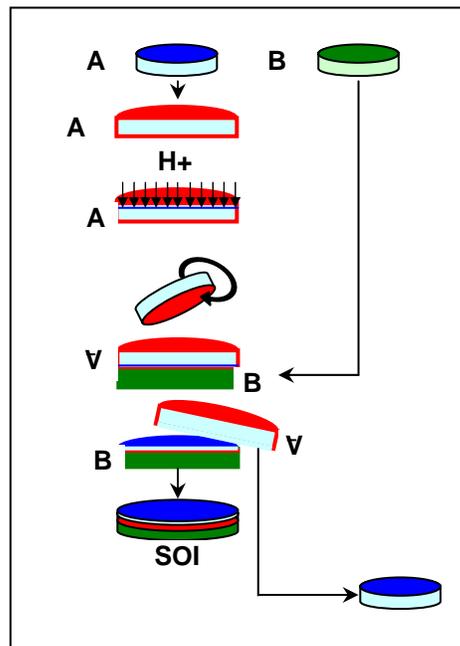


Fig.A1.1: Technologie Smart Cut appliquée à la réalisation de structures SOI.

A.1. Principe

Le principe du collage par adhérence moléculaire est basé sur la mise en contact direct de deux surfaces, c'est-à-dire sans l'utilisation d'un matériau spécifique (colle, cire, métal à basse température de fusion...). Une telle opération nécessite que les surfaces à coller soient suffisamment lisses, exemptes de particules ou de contamination (en particulier par des hydrocarbures), et qu'elles soient suffisamment rapprochées pour permettre d'initier un contact, typiquement à une distance inférieure à quelques nanomètres. Dans ce cas, les forces attractives entre les deux surfaces sont assez élevées pour provoquer l'adhérence moléculaire. Le collage moléculaire est induit initialement par l'ensemble des forces attractives (forces de Van der Waals) d'interaction électronique entre atomes ou molécules des deux surfaces à coller. Ces forces attractives sont d'autant plus importantes que la distance entre les deux surfaces est faible. En outre, elles dépendent de la nature des surfaces et du milieu qui les sépare. Pour la plupart des collages moléculaires, on est ainsi amené à considérer deux familles de surfaces : les *hydrophiles* et les *hydrophobes*. La différence principale existant entre ces surfaces est la présence de films d'eau, correspondant à quelques monocouches moléculaires, adsorbée sur les surfaces hydrophiles. Dans bon nombre d'applications, les collages sont réalisés à température et à pression ordinaires, après un nettoyage chimique des surfaces. De façon générale, le renforcement des énergies de collage est obtenu par la mise en œuvre d'un traitement thermique. Plus la température sera haute, plus les énergies de collage seront fortes (figure A1.2). Au-delà d'une certaine température dépendant en particulier du nettoyage avant collage des surfaces (hydrophiles ou hydrophobes), la majorité des liaisons entre les deux surfaces sera des liaisons covalentes.

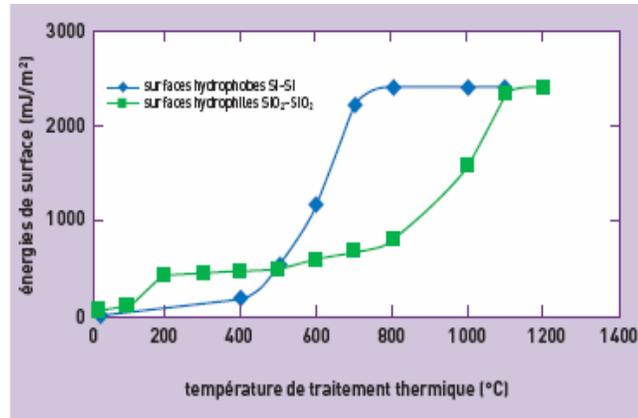
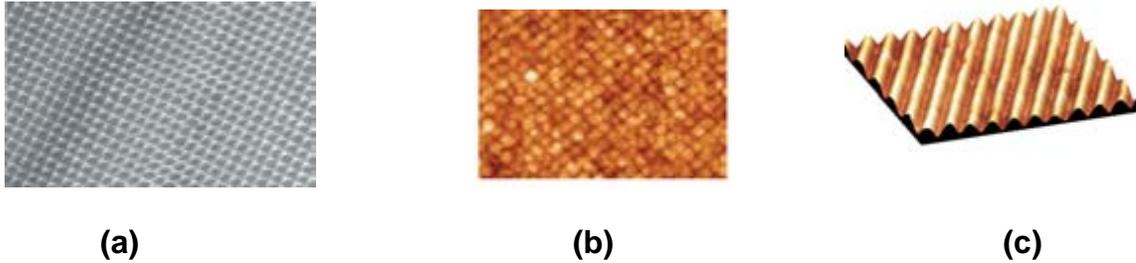


Fig.A1.2: Énergies de surface typiques pour des collages “hydrophobes” (cas du collage de deux plaques de silicium Si-Si) et des collages “hydrophiles” (cas du collage de deux plaques de silicium oxydées SiO₂-SiO₂).

A.2. Le collage “hydrophobe” : application au collage silicium-silicium

Le collage de deux plaques de silicium (Si) monocristallin est un bon exemple de collage de surfaces hydrophobes. L’objectif est de réaliser un raccord cristallin tout en s’affranchissant de l’oxyde natif présent sur les plaques de silicium. Il faut remarquer que les énergies de collage de surfaces hydrophobes sont faibles à température ambiante (figure A1.2). Pour obtenir un collage fort, il est nécessaire de former des liaisons covalentes Si-Si. Ceci est possible lors d’un traitement thermique au-delà de 600°C. Des structures collées Si-Si sont actuellement réalisées suivant un procédé original, avec une très bonne maîtrise de la désorientation cristalline, induite lors du collage. Ces structures dites “collées-tournées” présentent des réseaux de dislocations (vis, mixtes) enterrées à proximité de leur surface (figure A1.3a). Elles sont alors aptes à induire une organisation latérale, à échelle nanométrique, lors de dépôts d’îlots (*nanodots*) de tailles nanométriques.

Parmi diverses autres applications, ces structures collées-tournées ont également permis des nanostructurations des surfaces de plaques de silicium, par gravure chimique (figure A1.3b), avec des périodicités nanométriques, et des réalisations de fils de germanium alignés (figure A1.3c) de tailles et avec des espacements nanométriques.



(a) **(b)** **(c)**
 Fig. A1.3: Observations (a) en microscopie électronique à transmission (MET) d'un réseau unique de dislocations vis, enterrées quelques nanomètres sous la surface de la structure, de période 49,4 nm, (b) par microscopie à effet tunnel (STM) d'une surface de Si, structurée par gravure et présentant une périodicité de 20 nm, (c) en microscopie à force atomique (AFM) de fils de germanium alignés à l'aplomb des dislocations mixtes enfouies sous la surface. La hauteur et la largeur des fils sont respectivement de 1 nm et 25 nm.

A. 1.3. Le collage "hydrophile" : cas du collage silicium oxydé-silicium oxydé

Pour les collages de surfaces hydrophiles, des interactions par liaisons hydrogène, plus fortes que l'attraction de Van der Waals, peuvent être mises en jeu, dès lors que les surfaces sont constituées d'atomes présentant une grande affinité pour les électrons (électronégatifs) liés à des atomes d'hydrogène (comme O–H). Le collage de deux plaques de silicium oxydées (film de SiO₂ en surface) en est un bon exemple. Des traitements thermiques effectués à des températures supérieures à 150° C favorisent les liaisons hydrogène entre les deux surfaces (figure A1.4). De plus, il faut atteindre des températures plus élevées, par exemple 700° C dans la figure A1.2, pour créer des liaisons fortes covalentes Si–O–Si et obtenir un collage intime.

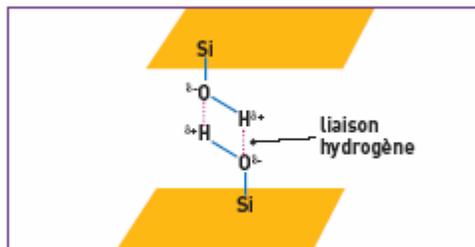


Fig. A1.4 : Principe de collage moléculaire de deux surfaces d'oxyde par liaisons hydrogène entre des liaisons silanols (SiOH–SiOH) de surface.

Annexe 2

Qu'est-ce qu'une surface vicinale ?

Dans un réseau cristallin, on distingue des plans denses où l'empilement des atomes est compact. Dans un réseau cubique à faces centrées (c'est le cas de l'or, du platine et du cuivre), il y a trois types de faces denses (figure A2.1).

Chaque face est nommée par les indices de Miller, ou direction de sa normale. L'orientation (100) présente un réseau carré. La face (111) est la face la plus dense avec un arrangement hexagonal des atomes. La face (110) est la plus ouverte et la plus anisotrope.

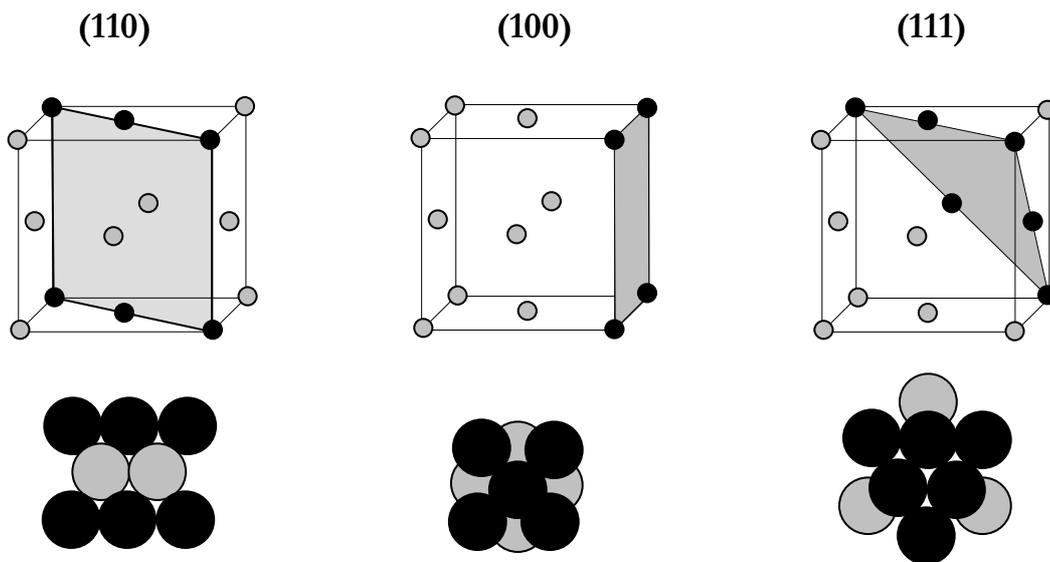


Fig.A2.1 : Faces denses d'un réseau cristallin cubique à faces centrées (en haut, localisée dans le cube élémentaire du réseau ; en bas, vue de dessus montrant l'arrangement atomique de la surface) : (a) face(110), (b) face (100), (c) face (111).

Une surface vicinale est une surface dont l'orientation est voisine d'une orientation cristalline dense (voir les orientations denses définies sur la figure A2.1). La désorientation par rapport à la face dense est de 0 à 15° environ. Comme la position des atomes en surface est imposée de façon discrète par le réseau cristallin,

la surface des atomes n'est plus un plan mais s'organise en un réseau de marches dont la hauteur correspond à la distance entre deux plans cristallographiques (figure A2.2). La taille des terrasses et donc la densité des marches sont directement reliées à l'angle de désorientation θ . Depuis longtemps, on sait préparer de telles surfaces en coupant un cristal bien orienté par la technique d'électroérosion (un fil métallique vient couper le cristal dans la direction voulue avec une précision d'environ $0,25^\circ$, un peu comme un fil à couper le beurre).

Il ne reste plus alors qu'à polir mécaniquement et chimiquement la surface, puis à la préparer par des cycles d'abrasion ionique et de recuit sous ultra-vide.

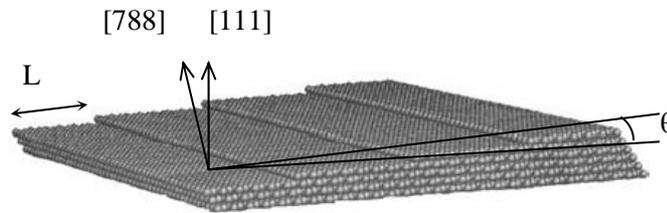


Fig. A2.2 - Face vicinale ; schéma d'une face vicinale de la face (111) dont la normale est (788).
 L'angle θ est l'angle de désorientation de la face vicinale par rapport à la face dense.
 La densité des marches est fixée par cet angle $n = 1/L = \tan \theta / b$, où b est la hauteur d'une marche et L la largeur des terrasses.

Annexe 3

La lithographie

La plupart des techniques de micro/nano fabrication ont leurs racines dans les méthodes de fabrication standard développées pour l'industrie de semi-conducteur. Donc, une compréhension claire de ces techniques est nécessaire pour chaque personne s'engageant dans un chemin de recherche et développement dans le secteur de la nanotechnologie. Dans cette section, nous présentons la lithographie qui est le procédé traditionnel de fabrication des circuits intégrés. Cette technique est la plus employée dans la fabrication de micro/nanostructures.

La lithographie est la technique utilisée pour transférer une image d'un circuit sur un substrat (silicium, le verre, GaAs, etc). L'opération consiste en l'*exposition via* une optique réductrice d'une résine photosensible à des particules énergétiques, depuis les photons ultraviolet (UV) actuellement utilisés jusqu'aux électrons en passant par les photons X et les ions, au travers d'un masque représentant le dessin d'un circuit.

Le but ? Transférer cette image sur l'empilement de couches isolantes ou conductrices qui le constitueront, déposées précédemment (phase de *cochage*) sur une plaquette (*wafers*) de matériau semi-conducteur, en général de silicium. Ce processus est suivi de la dissolution de la résine exposée à la lumière (*développement*). Les parties exposées de la couche initiale peuvent être alors gravées sélectivement, puis la résine est retirée chimiquement avant le dépôt de la couche suivante. Cette étape de lithographie peut intervenir plus d'une vingtaine de fois au cours de la fabrication d'un circuit intégré (figure A3.1).

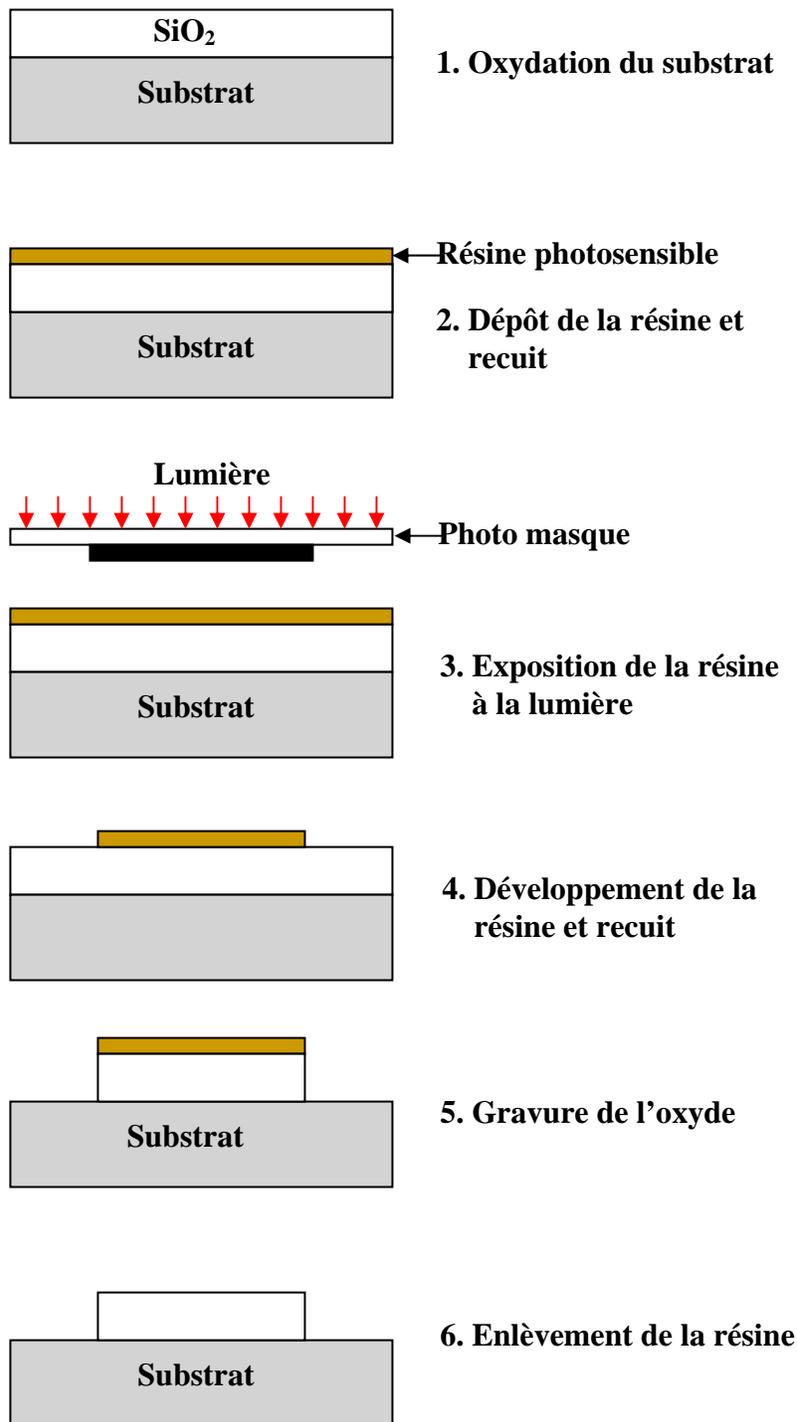


Fig. A3.1 : Etapes de la lithographie

Communications et publications

1- COMMUNICATIONS

[1] : MADANI.S ADAMI, L et BONNET. R, Déformation d'une lame mince biphasée par une dislocation interfaciale en élasticité anisotrope, Partie I, 6^{ème} Séminaire de Mécanique, M'Sila (1996).

[2] : MADANI.S ADAMI, L et BONNET. R, Déformation d'une lame mince biphasée par une dislocation interfaciale en élasticité anisotrope, Partie II - Congrès International en Sciences et Génie des Matériaux, U.S.T.H.B- Alger (1999).

[3] : MADANI.S, OUTTAS, T, ADAMI, L et BONNET. R, Effet élastiques anisotropes sur le comportement d'un bilame mince déformé par une dislocation interfaciale, 7^{èmes} Journées Maghrébines des Sciences des Matériaux, Kenitra 20-21 Sept.2000, Maroc.

[4] : MADANI.S, ADAMI, L et BONNET. R, Effet de l'anisotropie sur les champs des déplacements d'un réseau unidirectionnel de dislocations de misfit à l'interface d'un bilame mince, application aux cas CdTe/GaAs ET GaSb/GaAs, J.N.M 2000- BLIDA, 2-4 Mai 2000.

[5] : T.OUTTAS, S.MADANI, L. ADAMI AND R.BONNET, interfacial stress field generate by a biperiodic hexagonal network of misfit dislocations in a thin bicristal InAs/(111)GaAs, VII Congreso Nacional de Materiales, Madrid 16-18 Octubre 2002.

[6] : S.MADANI, M.BRIOUA, T.OUTTAS, L. ADAMI AND R.BONNET, A Thin Two-Phase Foil Deformed By An Interfacial Dislocation in Anisotropic Elasticity, VII Congreso Nacional de Materiales, Madrid 16-18 Octubre 2002.

[7] : S. MADANI, T.OUTTAS, L. ADAMI, M.BRIOUA & R. BONNET, Numerical simulation of stress field generated by a network of misfit dislocations located at the interface of a two-layers plates, VII Congreso Nacional de Materiales, Madrid 16-18 Octubre 2002.

[8] : T.OUTTAS, S. MADANI, L. ADAMI & R. BONNET, Numerical Simulation of displacement field relative to the free surfaces of an ultrathin bicrystal foil formed by InAs/(111)GaAs system, 11th International Metallurgy Congress, 05-08 june 2002 CNR Exhibition Center Stanbul-Turkey.

[9] : T.OUTTAS, S. MADANI, L. ADAMI & R. BONNET, Numerical Simulation of displacement field relative to the free surfaces of an ultrathin bicrystal foil formed by InAs/(111)GaAs system, 11th International Metallurgy Congress, 05-08 june 2002 CNR Exhibition Center Stanbul-Turkey.

2- PUBLICATION INTERNATIONALES

[1] : T.OUTTAS, L.ADAMI, A.DERARDJA, S.MADANI and R.BONNET, *Anisotropic Elastic Field of a Thin bicrystal Deformed by a biperiodic Network of Misfit Dislocations, Phys. Stat. Sol. (a), 188, No 3, 1041-1045 (2001).*

[2] : T.OUTTAS , S.MADANI,L. ADAMI AND R.BONNET, *interfacial stress field generate by a biperiodic hexagonal network of misfit dislocations in a thin bicristal InAs/(111)GaAs, Bol.Soc.Esp.Ceram. V., 43 [2] 497-500 (2004).*

[3] : M.BRIOUA, R.BENBOUTA, S.MADANI, L.ADAMI, *Numerical simulation of the anisotropic elastic field generated by a misfit dislocation along a NiSi₂/Si(001)GaAs heterowin interface, J. Of Colloid and interface Science, Vol.282 [1], pp.120-123.*

[4] : R.BENBOUTA, A.MIHI, M.BRIOUA, S.MADANI, L.ADAM, *The stress field of a dislocation array in an ultra thin anisotropic heterogeneous bicristal, Phys. Stat. Sol. (a),202, No1 3, 2462-2466.*

[5] : S.MADANI, M.BRIOUA, T.OUTTAS , ,L. ADAMI AND R.BONNET, *A thin two-phase foils deformed by an interfacial dislocation in anisotropic elasticity, Bol.Soc.Esp.Ceram. V., 44 [2] 127-129 (2005).*

Bibliographie

- [1] R.Feynman, There's Plenty of Room at the Bottom, <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>.
- [2] Encyclopédie Universalis 10, 2006.
- [3] A la découverte du nanomonde, <http://www.cps.ens.fr/nanomonde/>.
- [4] F.Trison, G. Bidan, Clefs Cea, Le nanomonde de la science aux applications, Rev. N°52, 2005.
- [5] F.Leroy, Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier, Grenoble 1, 2003.
- [6] F. Fossard, Thèse de doctorat, Université de Paris-Sud, UFR Scientifique d'Orsay, 2003.
- [7] M.L.Frankenheim, Ann., Physic 37, 16-522, 1836.
- [8] M.L. Royer, Bull. Soc. Fr. Minéralogie, librairie Masson et Cie (Paris), 1928
- [9] P.H. Jouneau, A. Tardot, G. Feuillet, H. Mariette, J. Cibert, , J. Appl. Phys. 75, 7310-7316, 1994
- [10] M. Volmer, Z. Phys. Chim. Vol 119, 277, 1926
- [11] F. Van Der Merwe, Physical Review B, 39, 3632 , 1989
- [12] M. Ohring, Material science of thin films (2nde édition), Academic Press , 2002
- [13] L. Goldstein et al., Applied-Physics-Letters., vol.47, No.10, 1099, 1985
- [14] Y. W. Mo, D. E. Savage, B. S. Swartzentruber, et M. G. Lagally. Kinetic pathway in Stranski Krastanov growth of Ge on Si(001). Phys. Rev. Lett., 65(8) :1020, 1990.
- [15] V. Le Thanh, P. Boucaud, D. Débarre, Y. Zheng, D. Bouchier, et J. M. Lourtioz. Nucleation and growth of self assembled Ge/Si(001) quantum dots. Phys. Rev. B, 58(19) :13115, 1998
- [16] H. Brune, M. Giovannini, K. Bromann, et K. Kern. Self-organized growth of nanostructures arrays on strain-relief patterns. Nature, 394 :451, 1998.
- [17] G. Springholz et K. Wiesauer., Nanoscale dislocation patterning in PbTe/PbSe(001) latticemismatched heteroepitaxy, Phys. Rev. Lett., 88(1) :015507, 2002.
- [18] F. Liu, A. H. Li, et M. G. Lagally. Self-assembly of two-dimensionnal islands via strain mediated coarsening. Phys. Rev. Lett., 87(12) :126103, 2001.
- [19] T. T. Ngo, P. M. Petroff, H. Sakaki, et J. L. Merz. Simulation model for self-ordering of strained islands in molecular beam epitaxy. Phys. Rev. B, 53(15) :9618, 1996.

- [20] M. Kammler, R. Hull, M. C. Reuter, et F. M. Ross. Lateral control of self-assembled island nucleation by focused-ion-beam micropatterning. *Appl. Phys. Lett.*, 82(7) :1093, 2003.
- [21] H. Omi, D. J. Bottomley, et T. Ogino. Strain distribution control on the silicon wafer scale for advanced nanostructure fabrication. *Appl. Phys. Lett.*, 80(6) :1073, 2002.
- [22] H. Omi, D. J. Bottomley, Y. Homma, et T. Ogino. Wafer-scale engineering on silicon for fabrication of ultimately controlled nanostructures. *Phys. Rev. B*, 67(11) :115302, 2003.
- [23] S. Yu Shiryayev, F. Jensen, J. L. Hansen, J. W. Petersen, et A. N. Larsen. Nanoscale structuring by misfit dislocations in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ epitaxial systems. *Phys. Rev. Lett.*, 78(3) :503, 1997.
- [24] Y. H. Xie, S. B. Samavedam, M. Bulsara, T. A. Langdo, et E. A. Fitzgerald. Relaxed template for fabricating regularly distributed quantum dots arrays. *Appl. Phys. Lett.*, 71(24) :3586, 1997.
- [25] A. E. Romanov, P. M. Petroff, et J. S. Speck. Lateral ordering of quantum dots by periodic subsurface stressors. *Appl. Phys. Lett.*, 74(16) :2280, 1999.
- [26] A. Bourret. How to control the self-organization of nanoparticles by bonded thin layers. *Surf. Sci.*, 432(1-2) :37, 1999.
- [27] K. Häusler, K. Eberl, F. Noll, et A. Trampert. Strong alignment of self-assembling InP quantum dots. *Phys. Rev. B*, 54(7) :4913, 1996.
- [28] F.M. Ross. Growth processes and phase transformations studied by in situ transmission electron Microscopy. *IBM J. Res. Develop*, 44(4) :489, 2000.
- [29] J.W. Matthews, Accomodation of misfit across the interface between single-crystal films of various face-centred cubic metals, *Phil. Mag.* 13 1207-1221, 1966.
- [30] W.A. Jesser, J.W. Matthews, Evidence for pseudomorphic growth of iron on copper, *Phil. Mag.* 15 1097-1106, 1967.
- [31a] W.A. Jesser, J.W. Matthews, Pseudomorphic deposits of cobalt on copper, *Phil. Mag.*, 17, 461-473, 1968.
- [31b] W.A. Jesser, J.W. Matthews, Pseudomorphic deposits of chromium on nickel, *Phil. Mag.*, 17, 475-479, 1968
- [31c] W.A. Jesser, J.W. Matthews, Pseudomorphic growth of iron on hot copper, *Phil. Mag.*, 17 , 595-602, 1968.
- [32] "Conference on plastic deformation of crystalline solids", F. C. Frank, Carnegie Institute of Tech. and Office of Naval Research, p.150, 1950.
- [33] F. C. Frank. *Defects in crystalline solids*, page 159. London : Physical Society, 1954.
- [34] Karine Rousseau. Etude géométrique, structurale et chimique par microscopie électronique en transmission de joints de grains de surface de Si. Thèse, Université Paris VI, 2002.

- [35] F. Patella, A. Sgarlata, F. Arciprete, S. Nuftris, P. D. Szkutnik, E. Placidi, M. Fanfoni, N. Motta and A. Balzarotti, «Self-assembly of InAs and Si/Ge quantum-dots on structured surfaces», *J. Phys. : Cond. Matter* 16, S1503, 2004.
- [36] H. J. Kim, Y. J. Park, Y. M. Park, E. K. Kim, and T. W. Kim, Fabrication of wirelike InAs quantum dots on $2\pm$ -off GaAs (100) substrates by changing the thickness of the InAs layer, *Appl. Phys. Lett.* 78, 3253, 2001.
- [37] C. Schelling, G. Springholz et F. Schäffler, *Phys. Rev. Lett.* 83, 995, 1999.
- [38] K. Nishi, T. Anan, A. Gomuo, S. Kohmoto et S. Sugou, *Appl. Phys. Lett.* 70 (6), 3579, 1997.
- [39] Martrou, J. Eymery, P. Gentile, et N. Magnéa, *J. of Cryst. Growth*, 184-185 203-207, 1998.
- [40] A.A. Baski, S.C. Erwin, et L.J. Whitman, *Surf. Sci.* 392, 69, 1997.
- [41] G. Jin, J.L. Liu, S. G. Thomas, Y. H. Luo, K. L. Wang, and B. Y. Nguyen, Controlled arrangement of self-organized Ge islands on patterned Si (001) substrates, *Appl. Phys. Lett.* 75, 2752, 1999.
- [42] G. Jin, J. L. Liu, and K. L. Wang, Regimented placement of self-assembled Ge dots on selectively grown Si mesas, *Appl. Phys. Lett.* 76, 3591, 2000.
- [43] G. Jin, J.Wan, Y. H.Luo, J. L. Liu and K. L. Wang, Uniform and ordered selfassembled Ge dots on patterned Si substrates with selectively epitaxial growth technique, *J. Cryst. Growth* 227, 1100, 2001.
- [44] S. C. Lee, A. Stintz and S. R. J. Brueck, «Nanoscale limited area growth of InAs islands on GaAs(001) by molecular beam epitaxy», *J. Appl. Phys.* 91, 3282, 2002.
- [45] Z.Zhong, A.Halilovic, T.Fromherz, F.Schäffler and G.Bauer, Two-dimensional periodic positioning of self-assembled Ge islands on prepatterned Si (001) substrates, *Appl. Phys. Lett.* 82, 4779, 2003.
- [46] Z. Zhong and G. Bauer, Site-controlled and size-homogeneous Ge islands on prepatterned Si (001) substrates, *Appl. Phys. Lett.* 84, 1922, 2004.
- [47] H. Brune, M. Giovannini, K. Broman, et K. Kern, *Nature* 394, 451, 1998.
- [48] H. Yamaguchi, J.G. Belk et al, *Phys. Rev. B* 55, 1337, 1997.
- [49] J.G. Belk, D.W. Pashley, B.A. Joyce, et T.S. Jones, *Phys. Rev. B* 58, 16194, 1998.
- [50] G. Springholz et K. Wiesauer, *Phys. Rev. Lett.* 88, 015507, 2002.
- [51] F. Ross, *IBM J. Res. Develop.* 44, 489, 2000.

- [52] Y.H. Xie, S.B.Samavedam, M.Bulsara, T.A.Langdo et E.A.Fitzgerald, *Appl.Phys.Lett.* 71, 3567, 1997.
- [53] S.Y. Shiryaev, F. Jensen, J.L. Hansen, J.W. Petersen, A.N. Larsen, *Phys. Rev. Lett.* 78, 503, 1997.
- [54] Y. Peng, B. Wang, W. Chen, et S. Liu, *Optical and Quantum Electronics* 29, 985, 1997.
- [55] C. Teichert, C. Hofer, K. Lyutovich, M. Bauer, E. Kasper, *Thin Solid Films* 25-28, 380 , 2000.
- [56] M. Benamara, A. Rocher, L. Laanab, A. Claverie, A. Laporte, G. Sarabayrouse, L. Lescouzères, and A. Peyre-Lavigne, *Interfacial structure of bonded silicon on silicon wafers, Comptes-Rendus-de-l'Academie-des-Sciences Serie-II* 318-11 p.1459, 1994.
- [57] M. Benamara, *Contribution à l'étude des interfaces de soudure directe dans le silicium, Thèse université Paul Sabatier Toulouse*, 1996.
- [58] M. Benamara, A. Rocher, P. Sopéna, A. Claverie, A. Laporte, G. Sarabayrouse, L. Lescouzère, A. P. Lavigne, *Structural and electrical investigations of silicon wafer bonding interfaces, Mat. Sci. Eng. B42* , p.164, 1996.
- [59] U. Gösele and Q. Y. Tong, *Semiconductor Wafer Bonding : Science and Technology, The Electrochem. Society series*, ed. Wiley Inter-Science, 1999.
- [60] J. Eymery, *Réalisation d'un détecteur infrarouge à base de boîtes quantiques auto organisées InAs dans GaAs, Rapport DGA. ERE/SC N°97-1048/A000/DSP/SREA/SC/PROSP*, 1998.
- [61] F.Fournel, *Doctorate Thesis, University of Grenoble I, Joseph Fourier*, 2001.
- [62] J.Coelho. *Thèse de doctorat, Université de Paris XI, UFR Scientifique d'Orsay*, 2004.
- [63] R.Bonnet, J.L. Verger-Gaugry, *Phil.Mag.* A66, 849, 1992
- [64] G. Patriarche, C. Mériadec, G. Le Roux, C. Deparis, I. Sagnes, J.-C. Harmand and F. Glas, *GaAs/GaAs twist-bonding for compliant substrates : interface structure and epitaxial growth, Appl. Surf. Sci.* 164, 15, 2000.
- [65] J.P. Hirth, J. Lothe, *Theory of dislocations* (2ed., Wiley, 1982
- [66] J.D. Eshelby, W.T. Read, et W. Shockley, *Acta. Met.*, 1, 251, 1953
- [67a] A.N. Stroh, *Phil. Mag.*, 3, 625, 1958.
- [67b] A.N. Stroh, *J.Math.Phys.*, 41, 77, 1962
- [68] M. O.Tucker, , *Phil. Mag.*, 19, 1141, 1969.
- [69] P. Humble, C.T. Forwood, *Phil. Mag.*, 31, 1011, 1975.
- [70] A.K. Head, *Phys., Stat., Solidi.*,6, 461, 1964.

- [71] M. Dupeux et R. Bonnet, *Acta. Met.*, 28, 721, 1980.
- [72] Y. T. Chou, Screw dislocation in and near lamellar inclusions, *Phys. Stat. Sol.*, 17, p: 509-516, 1966.
- [73] F.R. N. Nabarro, et E. J. Kostlan, *J. Appl. Phys.* 49, 5445, 1978.
- [74] W. C. Moss et W. G. Hoover, , *J. Appl. Phys.* 49, 5449, 1978.
- [75] R. Bonnet, K. Rousseau et F. Fournel, *C.R.Phys.* 3, 657-663, 2002.
- [76] F. Leroy, J. Eymery, P. Gentile, et F. Fournel, *Appl. Phys. Lett.* 80 (17), 3078, 2002.
- [77] F. Fournel, H. Moriceau, N. Magnéa, J. Eymery, J. L. Rouviere, et K. Rousseau, *Appl. Phys. Lett.* 80(5), 793, 2002.
- [78] G. Patriarche, C. Mériadec, G. Le Roux, C. Deparis, I. Sagnes, J.-C. Harmand and F. Glas, GaAs/GaAs twist-bonding for compliant substrates : interface structure and epitaxial growth, *Appl. Surf. Sci.* 164, 15, 2000.
- [79] U. Dahmen, K. H. Westmacott, et M.J. Wtcomb, A study of precipitation in interstitial alloys-III coherent and semi-coherent growth mechanisms, *Acta. Met.* 31, p: 475-482, 1983.
- [80] U. Dahmen, K. H. Westmacott, et M.J. Wtcomb,, Aspects of faceting in the study of precipitate interfaces, *J. Phys, Suppl. N° 1*, 51, p: C1-737 à C1-743, 1990.
- [81] K.K. Sagoe-Crentsil, et L.C. Brown, The effect of lattice misfit on the interface structure of equilibrated γ - Ag_2Al precipitates, *Phil. Mag. A*, 61, p: 451 - 468, 1990.
- [82] M. Loubradou, J.M. Penisson, et R. Bonnet, Structural ledges at precipitates/matrix interfaces in a (Ni, Co) Superalloy: atomic structures and elastic fields, *Ultramicros.*, 51, p: 270 -281, 1993.
- [83] R. Bonnet, *C. R. Acad. Sci. Paris*, t.318, serie II, p: 289-295, 1994.
- [84] N.Fribourg.Blanc, M.Dupeux, G.Guenin et R.Bonnet, Détermination par extensométrie et mesures ultrasonores des six constantes élastiques du cristal $\text{Al}_2\text{Cu}(\theta)$, *J.Appl. Cryst.* 12. p:151-155, 1979.

Si/Si

GaAs/GaAs

Résumé

Dans ces dernières années, les nanotechnologies et les nanostructures font l'objet d'un intérêt croissant car leurs applications industrielles sont nombreuses et concernent les domaines les plus variés, de l'électronique à la médecine en passant par l'aéronautique, la défense, l'environnement.

L'objectif de ce travail est d'étudier la possibilité d'organiser à longue distance des nanostructures auto-assemblées sur des substrats, grâce aux champs élastiques produits en surface par des réseaux de dislocations périodiques faiblement enterrés.

Un modèle mathématique basé sur les séries de Fourier a permis de calculer numériquement les champs élastiques anisotropes dans le cas d'un joint de torsion générant un réseau carré de dislocation vis.

Des applications numériques pour le calcul des déplacements, des déformations, des contraintes et des énergies ont été présentées, soit pour le joint de torsion Si/Si ou bien celui de GaAs/GaAs. Ces champs élastiques montrent qu'elles reproduisent exactement l'organisation des dislocations faiblement enterrées et que leurs amplitudes sont d'autant plus fortes que l'épaisseur de la couche collée est faible.

Mots clés : nanostructures, réseaux de dislocations, couches minces, auto organisation, boîtes quantiques, élasticité anisotrope, surface libre, interface.

Abstract

Semiconductor nanostructures are interesting objects for many microelectronic and optoelectronic applications. Nevertheless, to use them, it is necessary to control their size, their density and their spatial distribution. In the last decade, many researches have been done to control these parameters. One of these researches is the elaboration of a functional substrate inducing a lateral self-organization of nanostructures. The organization driving force is the strain field induced on the surface by a buried dislocations network.

Because of the lack of analytical solutions corresponding to the elasticity problems involved, the only explicit solutions, for the strain field, at present are derived from isotropic elasticity theory.

In the present work, the needed strain and stress fields, generated by a square network of screw dislocations located between a thin layer bonded onto a semi infinite substrate, are calculate using anisotropic elasticity. Numerical applications for the calculation of displacements, strains, stresses and energies were presented, for the twist boundary Si/Si and GaAs/GaAs.

Keywords : nanostructures, dislocations arrays, thin layer, self organization, quantum dots, anisotropic elasticity, free surface, interface