

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTRE 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

Option : Construction Mécanique

Par

Mr BRIOUA MOURAD

**ETUDE DU CHAMP ELASTIQUE D'UN RESEAU UNIDIMENSIONNEL DE
DISLOCATIONS INTERFACIALES DANS UN MATERIAU TRICOUCHES EN
ELASTICITE ANISOTROPE (COUCHES/SUBSTRAT)**

Soutenue publiquement en novembre 2005 devant le jury composé de :

Dr K.Guergouri	Professeur, Université de Constantine	Président.
Dr L.Adami	Professeur, Université de Batna	Rapporteur.
Dr A.Boumaaza	Professeur, C.Univ. de Khenchela	Examineur.
Dr B.Bouzida	Professeur, Université de Batna	Examineur.
Dr T.Outtas	M. de Conférence, Université de Batna	Examineur.
Dr K.Zidani	M.de Conférence, Université de Batna	Examineur.

Remerciements

J'exprime toute ma gratitude à mon directeur de thèse le professeur **L.Adami** pour la confiance qu'il m'a témoigné et pour la liberté d'initiative qu'il m'a toujours accordé, sa constante disponibilité ainsi que l'intérêt qu'il a porté à l'achèvement dans les meilleures conditions possibles de ce travail.

Je remercie spécialement mon ami **S.Madani**, enseignant, qui n'a jamais hésité à répondre à toutes les questions.

Je remercie vivement le professeur **K.Guergouri**, de l'université de Constantine, d'avoir accepté de présider le jury de cette thèse, ainsi que le Dr **A.Boumaaza**, de l'université de kenchela, d'avoir accepté de juger ce travail.

Ma gratitude va également aux docteurs **B.Bouzida, K. Zidani et T.Outtas** qui ont également accepté de juger ce travail et de nous honorer de leur présence.

Pour trouver la motivation et le courage nécessaire pour mener à terme ce travail, il est impérativement que cela soit dans une équipe de recherche, je remercie **Mr T.Outtas**, chef d'équipe, **Mlle A.Derardja** et **Mr S.Madani**.

Je suis extrêmement redevable aux amis et collègues, **W. Kaddouri, R. Benbouta, S.Deradji, A.Mihi, F.Dekhinet, M.Masmoudi, N.Melakhssou, M.Ghodbane, A. Debache , R. Firas , L. Benyahia, C. Rebai et S. Fentous** pour leur disponibilité permanente.

Je tiens spécialement à remercier Mr **R.Bonnet**, directeur de recherche au C.N.R.S de Grenoble, de l'accueil qu'il nous a réservé lors de notre séjour à son laboratoire de recherche.

Table Des Matières

Introduction générale	1
Chapitre I : Synthèse Bibliographique	
I.1.Introduction	3
I.2.Travaux dans les couches minces épitaxiales.....	3
I.2.1. Travaux expérimentaux	3
I.2.2. Travaux théoriques :.....	9
Chapitre II : Présentation du Problème et Solution en Elasticité Anisotrope	
Introduction	14
II.1.Géométrie du problème.....	15
II.1.1. les dislocations intrinsèques ou de misfit.....	15
II.1.2. Les dislocations de translation ou extrinsèques.....	16
II.2.Solution en élasticité anisotrope	18
Introduction.....	18
II.2.1. Champ des déplacements.....	18
II.2.1.1 Expression finale du champ des déplacements.....	23
II.2.2. Champ des contraintes	24
II.2.3. Conditions aux limites.....	27
II.2.3.1 Conditions en déplacement.....	27
II.2.3.2 Conditions en contraintes.. ..	27
II.3. Système 30 x 30 et matrice associée.....	28
Chapitre III : Applications Numériques	
III.1. Organigramme de calcul.....	34
III.2. Etapes de calcul du programme.....	34
III.3. Matériaux utilisés	37
III.4. Calcul d'erreur à l'interface	38
III.5. Champ des déplacements	40
III.5.1. Influence de la variation de l'épaisseur de la couche intermédiaire sur la déformation de la couche capot.....	41
III.5.2. Comparaison et interprétation des résultats	47

III.5.3. Influence de la variation de l'épaisseur de la couche capot sur la déformation de la couche intermédiaire	50
III.5.4. Comparaison avec les résultats obtenus en élasticité isotrope	51
III.6. Evolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} dans le composite en fonction de x_2	55
III.6.1. Effet de l'Hétérogénéité du matériau	58
III.6.2. Effet de l'épaisseur de la couche capot	59
III.6.3. Effet de l'anisotropie	60
IV.7. Cas des iso-contraintes	66
III.8. Champs de déformation au voisinage d'une seule dislocation du réseau	65
Conclusion générale et Perspectives	72

Références bibliographiques.

Annexe.

RESUME

Le but de ce travail est la résolution numérique, dans le cas d'élasticité anisotrope, du problème d'un réseau de dislocations interfaciales localisées entre un substrat infini et un composé à deux couches. Les champs élastiques de déplacements et de contraintes sont calculés pour différentes orientations du vecteur de burgers, par l'inversion d'une matrice de 30x30. Avant ce calcul, nous avons évalué la précision des résultats du programme en comparant le déplacement relatif interfacial obtenu, aux résultats de l'expression analytique décrivant ce même déplacement.

Le composé NiSi₂/Si/(001)GaAs, qui a fait l'objet de plusieurs études, est traité comme exemple.

Mots-clés : dislocation, misfit, interface, réseaux

ABSTRACT

The purpose of this work is the numerical resolution, in the case of anisotropic elasticity, of the problem of a misfit dislocation located between an infinite substrate and two-layer composite. The elastic fields of displacement and stress are calculated for various orientations of the burgers vector, by inversion of 30x30 array of linear equations. Before this calculation, we tested the precision of the results of the program by comparing the interfacial relative displacement obtained from this one to the results of the analytical expression describing this same displacement. The composite NiSi₂/Si/(001)GaAs, that made the object of several investigations, is treated like example.

Keywords : dislocation, misfit, interface, networks

Introduction Générale

Dans les couches minces, les interfaces cristallines jouent un rôle important dans l'optimisation des propriétés physiques, électriques et optiques des matériaux, pour cela beaucoup de chercheurs se sont penchés sur la caractérisation et la modélisation des défauts interfaciaux, à l'échelle microscopique et macroscopique.

Un nombre important de ces défauts interfaciaux se résumait essentiellement en des dislocations disposées plus ou moins régulièrement suivant l'orientation cristallographique de la face du substrat et les traitements de recuit subis par l'échantillon.

La densité et le caractère de ces dislocations dépendent des écarts paramétriques et angulaires entre les cristaux le long de l'interface, mais aussi de la rapidité avec laquelle a été refroidi l'échantillon.

D'un autre côté, le développement des multicouches dans l'industrie des semi-conducteurs s'est accompagné de l'analyse des contraintes internes dans les différentes couches cristallines à l'échelle des dislocations. Plusieurs tentatives ont été proposées pour résoudre les problèmes difficiles posés par les milieux à n couches élastiquement hétérogènes. Pour simplifier les calculs, presque tous les travaux antérieurs supposent que chaque milieu est élastiquement isotrope.

Le cas d'une dislocation purement vis a surtout retenu l'attention lorsque n est supérieur à 2 : Chou [1], considère une plaquette prise en sandwich entre deux milieux semi infinis ($n=3$), Oveçoglu et al [2], parviennent à retenir compte de trois couches minces déposées sur un substrat semi infini ($n=4$) ; Koehler [3], propose une solution au premier ordre pour un composite formé de couches alternatives de deux phases (n est infini).

R.Bonnet et col [4] en 1994 reprennent le problème de Chou [1], mais pour une dislocation coin. En 2000, R.Bonnet [5] a proposé une solution analytique pour la détermination du champ élastique isotrope (déplacement, contrainte et énergie) d'un composite A/B/C déformé par un réseau rectiligne de dislocations de misfit, localisé à l'hétérointerface B/C. Des applications sur le composite $\text{SiO}_2/\text{Si}/(001)\text{GaAs}$ ont permis de présenter le champ des contraintes et l'énergie dans le composite.

L'originalité de notre présent travail est de fournir un moyen d'exprimer explicitement, dans l'élasticité anisotrope, le champ de déplacement ainsi que le champ de contrainte pour un réseau unidirectionnel de dislocations intrinsèques situé à l'une des interfaces d'un matériau à trois couches. Pour cela, on utilise une approche basée sur une périodicité stricte du déplacement relatif à l'interface moyennant une analyse par série de Fourier, ce qui nous conduira, dans l'hypothèse de l'élasticité anisotrope, à la résolution numérique d'un polynôme du sixième degré, dont les racines permettent l'inversion numérique d'un système de 30×30 .

Ce travail est présenté en trois chapitres. Après l'introduction, le premier chapitre expose une synthèse bibliographique sur le sujet. Dans le deuxième chapitre, le problème est entièrement défini, sa géométrie, ses conditions aux limites, les hypothèses du modèle de calcul, la mise en équation du problème ainsi que les développements mathématiques nécessaires et l'écriture du système globale à résoudre. Le dernier chapitre est réservé aux applications numériques qui sont proposées pour les matériaux tricouches suivants : $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$; $\text{NiSi}_2/\text{NiSi}_2/\text{GaAs}$; $\text{Si}/\text{Si}/\text{GaAs}$.

En fin, une conclusion générale est présentée regroupant l'essentiel de nos résultats obtenus.

Chapitre I

Synthèse Bibliographique

I.1.Introduction	3
I.2.Travaux dans les couches minces épitaxiales.....	3
I.2.1. Travaux expérimentaux	3
I.2.2. Travaux théoriques	9



I.1. Introduction :

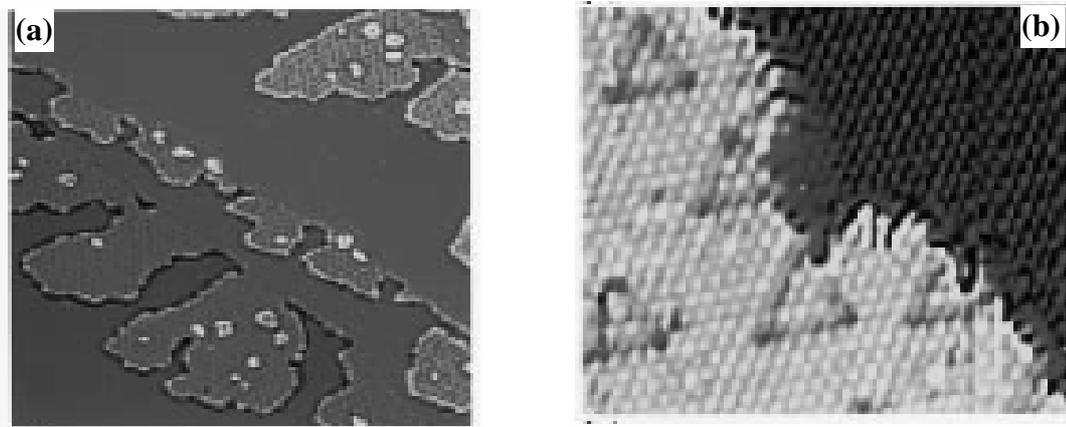
Dans ce chapitre, nous présentons une synthèse bibliographique des travaux les plus récents portant sur les dislocations interfaciales et particulièrement les réseaux de dislocations de Misfit (MDs) tapissant les interfaces cristallines.

Par abondance de bibliographie et souci de précision, nous nous sommes limités à la présentation des travaux théoriques et expérimentaux portant essentiellement sur les dislocations de misfit qui font l'objet de notre travail.

I.2. Travaux dans les couches minces épitaxiales :

I.2.1. Travaux expérimentaux :

Les études des interfaces cristallines sont nombreuses dans les revues de sciences des matériaux, surtout celles relatives aux observations en microscopie électronique conventionnelle (M.E.T), à haute résolution (M.E.T.H.R) ou encore en microscopie à effet tunnel (S.T.M). En 1995, J.Jacobsen et al.[6], en étudiant la croissance d'une monocouche de Au croissante sur Ni(111), ont montré que cette croissance conduit à la formation d'un réseau ordonné de boucles de dislocations de misfit en dessous du substrat Ni(111). Ces auteurs ont remarqué que la nouvelle structure de l'interface présente trois aspects différents par rapport à une structure normale de DMs, le premier aspect, c'est qu'elle se forme déjà pendant la croissance d'une seule monocouche de Au figure (I.1.a), en second, elle se forme dans le substrat et non pas dans la couche figure (I.1.b), et le troisième aspect, c'est qu'elle est contrôlée par l'énergie de l'interface plutôt que par le champ de déformation des deux phases figure (I.2).



*Figure I.1. Topographies des images S.T.M. observées à l'interface de Au/ (111) Ni.
 (a) naissance d'îlots Au aux premières étapes de la croissance dans le substrat Ni.
 (b) Apparition de la structure triangulaire dans le substrat.*

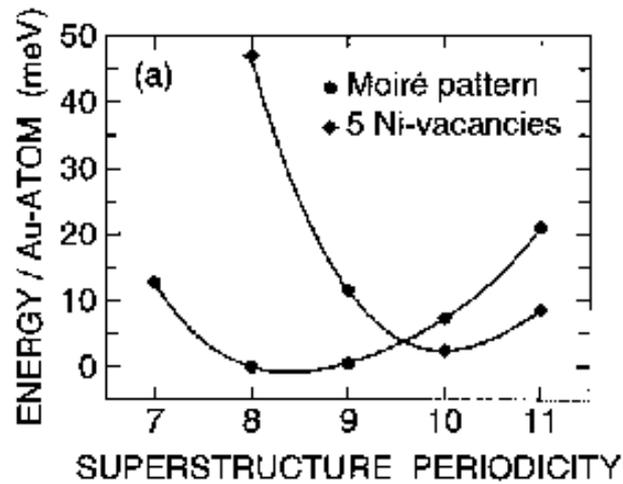


Figure I.2. Calcul de l'énergie par atome Au pour deux structures d'interface différentes en fonction de la périodicité de la superstructure.

En 1996, J.G.Belk et al. [7] ont utilisé la microscopie à effet tunnel (S.T.M) pour l'étude des dislocations de misfit induites lors de la croissance d'InAs sur GaAs (110). Ces auteurs ont observé la formation d'îlots bidimensionnels (2D) avec une taille régulière dans les deux premières monocouches et que des dislocations de misfit, identifiées par arrangement de lignes sombres, apparaissent suivant la coalescence des îlots (2D) figures (I.3 et I.4).

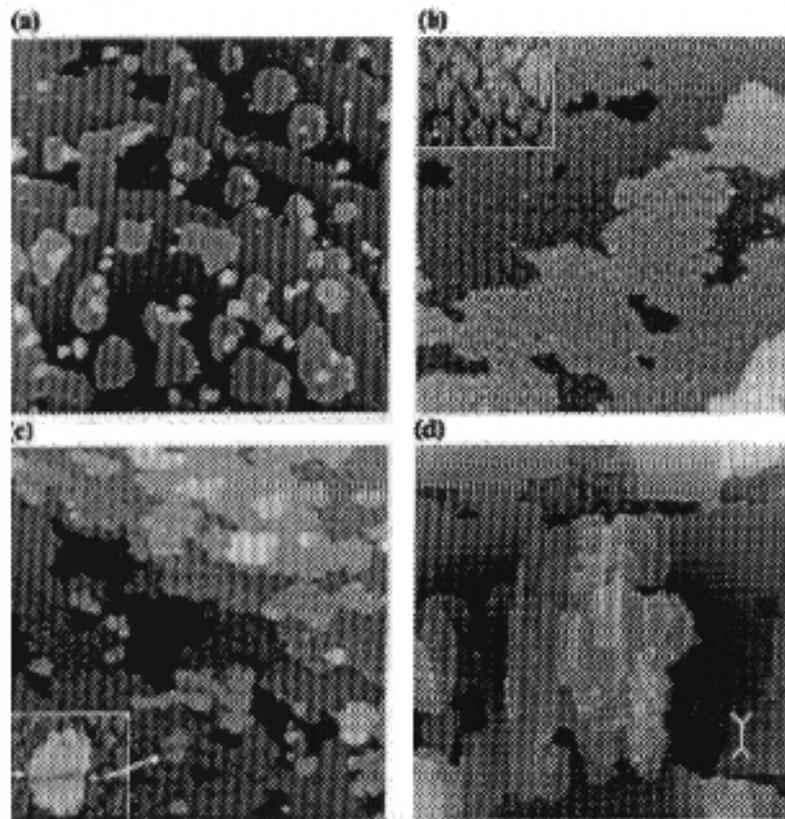


Figure I.3. Image STM d'InAs/GaAs (110) pour les cas suivants : (a) 0.5 ML, (b) 2 ML, (c) 3 ML et (d) 5 ML. L'encart en (b) accentue la morphologie des îlots « rompus », alors que l'encart en (c) montre la taille minimale d'îlots requise pour la nucléation d'une dislocation de misfit au delà de l'épaisseur critique. (d) La

surface à 5 ML est caractérisée par un réseau de dislocations de misfit (bandes sombres).

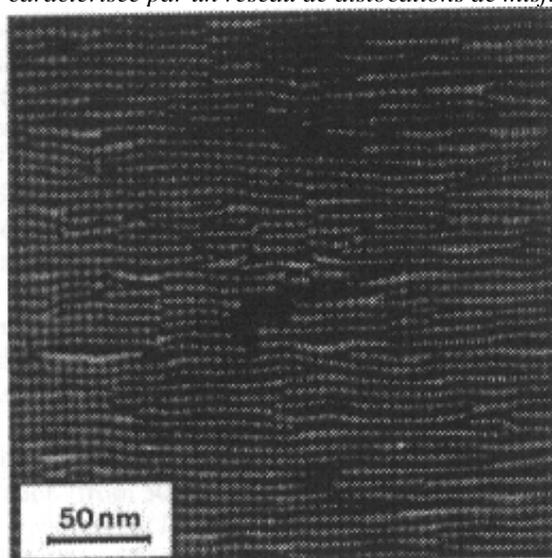


Figure I.4. Image M.E.T de 5 ML d'InAs. Les dislocations de misfit 90° sont représentées en lignes blanches.

En 1997, G. Springholz & col. [8] en étudiant les dislocations de misfit dans une couche épitaxiale de EuTe/PBTe (111) et à partir de mesures sur des images S.T.M, ont présenté les variations du champ de déformations planes ε_{xx} à la surface, due au champ localisé de déformations de dislocations de misfit, en fonction de la direction du vecteur de Burgers pour des épaisseurs de 15, 30 et 60 monocouches de EuTe, figure (I.5.a et b).

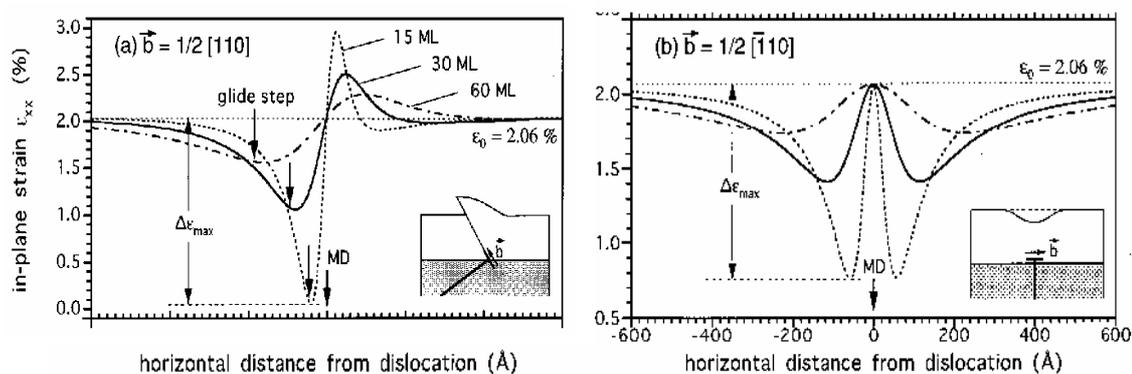
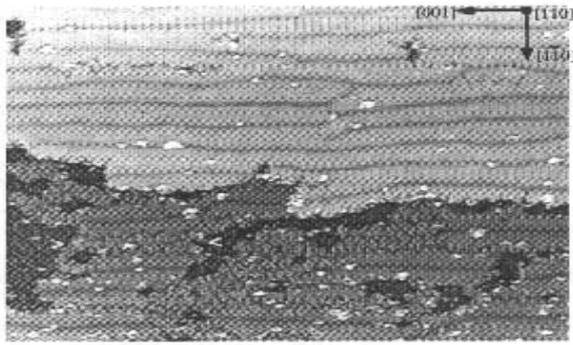


Figure I.5. Variation de la déformation plane ε_{xx} à la surface due au champ de déformation d'une DMs

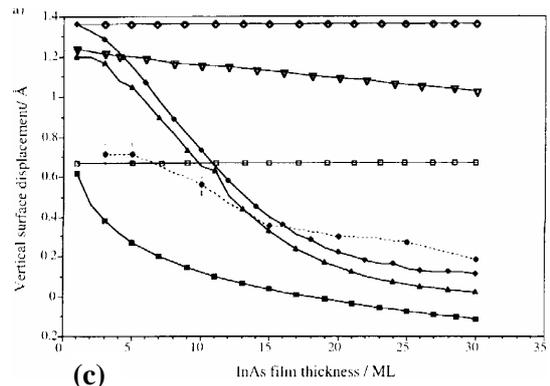
(a) $b = \frac{1}{2} [110]$

(b) $b = \frac{1}{2} [01\bar{1}]$

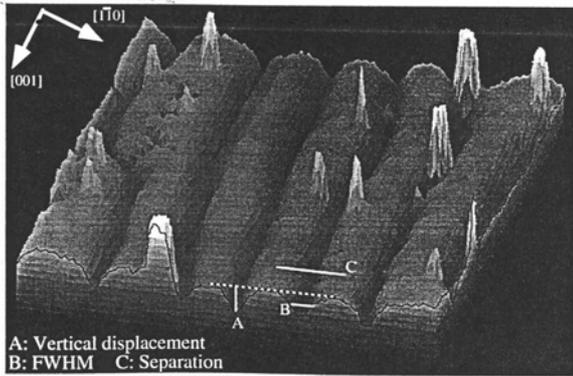
En 1998, J.G.Belk et al. [9], ont utilisé des images S.T.M pour obtenir les dimensions du champ de déplacement à la surface d'InAs croissante sur du GaAs (110). Le déplacement des atomes dans le film, du au champ de déformation des dislocations coins, a été obtenu en mesurant la profondeur et la largeur de la surface obtenue en fonction de l'épaisseur de la couche d'InAs (<30ML) figures (I.6 et I.7).



(a)

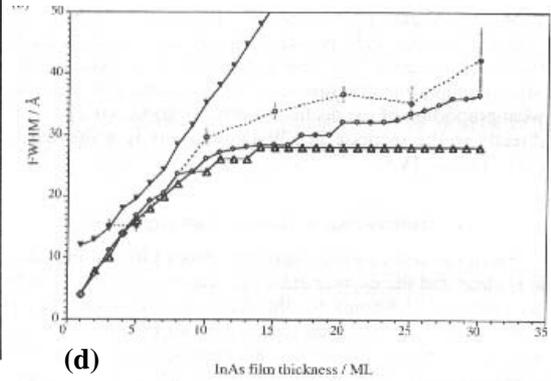


(c)



(b)

Figure I.6. (a) Image S.T.M d'une couche de 5-ML d'InAs croissante sur GaAs(110) à la température 420 °C. Les dislocations coins sont représentées par les lignes noires le long de [001]. (b) Vue en perspective de l'image S.T.M. de InAs/ GaAs (110), la surface indique les principales quantités mesurée à partir des données S.T.M. pour le réseau de Dislocations coins. A=déplacement vertical, B=largeur max à la mi-hauteur, C=espacement entre dislocations.



(d)

Figure I.7. (c) Déplacement vertical négatif mesuré expérimentalement à partir d'images S.T.M. de InAs/GaAs(110) en fonction de l'épaisseur de la couche InAs. (d) FWHM mesuré expérimentalement à partir d'images S.T.M de InAs/GaAs(110) en fonction de l'épaisseur de la couche InAs.

En 1998, J.de la Figuera et al.[10] ont considéré la réaction de sulfuration avec deux monocouches tendues de Cu sur Ru(0001), celles-ci contiennent un réseau parallèle de dislocations partielles, les régions d'empilement de CFC et HC étant séparées par des dislocations coins triaxiales figure (I.8); les auteurs ont constaté que le sulfure réagit avec les dislocations triaxiales en les dissociant et l'augmentation de la densité de ces dislocations est accommodée par la modification du réseau de dislocations de misfit figure(I.9).

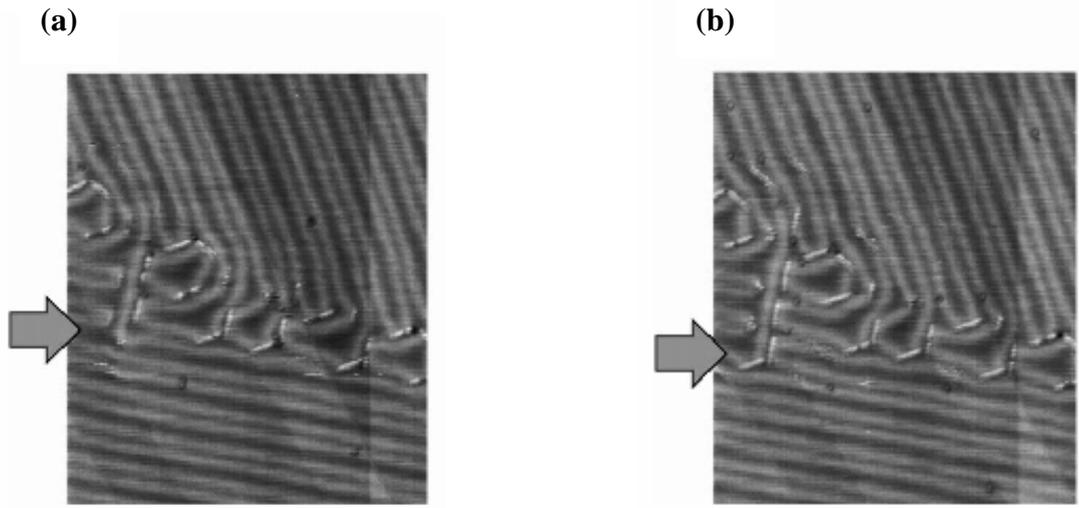


Figure 1.8. Images S.T.M. montrant l'effet d'exposition au sulfure, (a et b) sont les clichés S.T.M. pris quand l'échantillon était dosé avec le sulfure, les flèches sont pointées sur la position avancée des dislocations coins triaxiales.

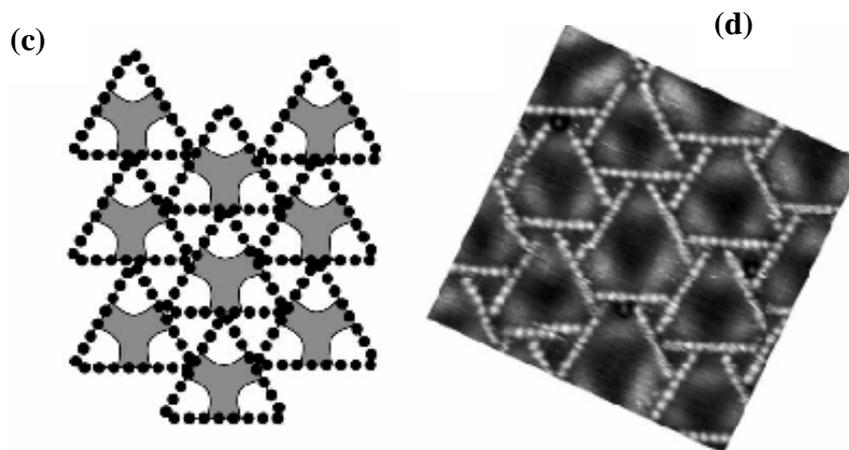


Figure 1.9. Formation d'un réseau de boucles de dislocations pour une plus forte dose de sulfure, (c) diagramme montrant la décoration des dislocations partielles triaxiales par les atomes de sulfures, (d) Image S.T.M. du réseau triangulaire formé.

X.W.Liu et al.[11] ont présenté les structures de dislocations pour les hétérostructures GaAs/In_xGaAs_{1-x}/GaAs en fonction de la température. Dans chaque cas l'épaisseur de la couche est supérieure à sa valeur critique. Ces auteurs ont montré la formation de nouvelles dislocations coins 90° aux interfaces des hétérostructures GaAs/In_{0.15}Ga_{0.85}As/GaAs et GaAs/In_{0.2}Ga_{0.8}As/GaAs durant leur maintien pendant une durée de 30s à la température 1040 K. Ces dislocations forment de nouveaux arrangements

orthogonaux en addition aux réseaux de dislocations coins 60° figure (I.10) et figure (I.11).

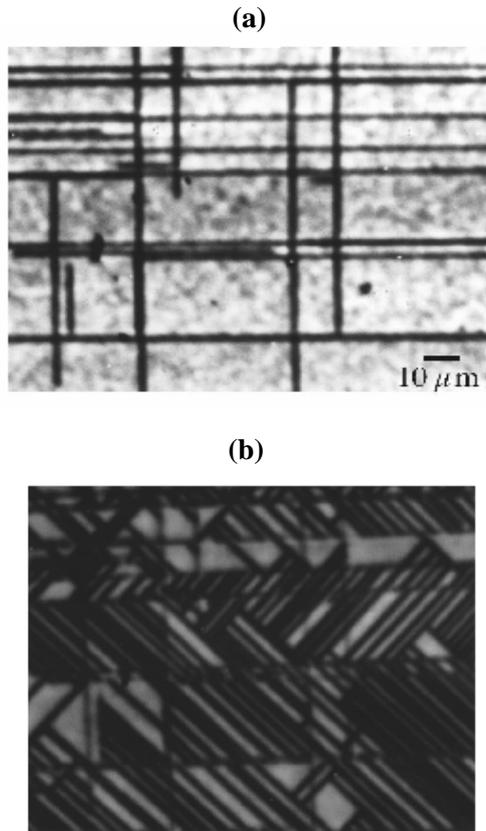


Figure I.10. Image Cl des dislocations de misfit dans GaAs/In_{0.15}Ga_{0.85}As(25nm/GaAs) (a) configuration originale, (b) après 30 s à 1040 K.

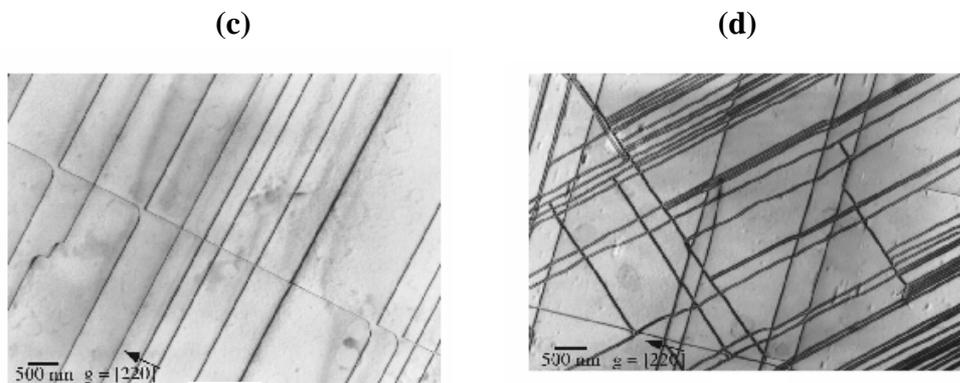


Figure I.11. Dislocations de misfit dans GaAs/In_{0.2}Ga_{0.8}As(20 nm)/GaAs : (c) configuration originale, (d) après 30 s à 1040 K.

I.2.2. Travaux théoriques :

En 1994, R.Bonnet et R.Zenati [4] ont estimé le champ élastique des déplacements d'une dislocation interfaciale rectiligne, placée sur l'une des deux interfaces d'un sandwich formé d'une plaquette mince séparant deux milieux semi-infinis, en adoptant une méthode par séries de Fourier dans le cas d'un précipité Al₂Cu très mince (2 nm) dans une matrice d'Aluminium. L'effet perturbateur de modules d'élasticité différents est représenté pour l'une des contraintes normale figure (I.12).

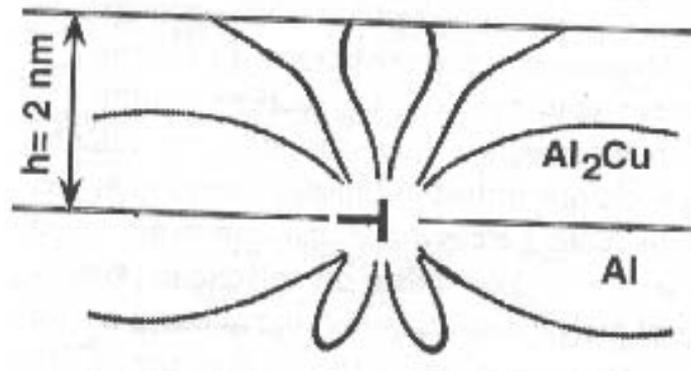


Figure 1.12. Courbe d'équi-contraintes $\sigma_{11} = \pm 300 \text{ MPa}$ tracée pour une distribution coin $b = a/2[011]$ Al placée sur l'une des deux hétéro-interfaces d'un milieu tricouches Al/Al₂Cu/Al

La même année, R. Bonnet et M. Loubradou [12] ont proposé une approche dite « continue », dans le but de décrire les positions atomiques autour de dislocations de misfit présentes le long d'une interface plane entre deux milieux hétérogènes anisotropes, l'étude sur l'hétéro-jonction (001) CdTe / (001) GaAs s'est accompli par des résultats très comparables aux images M.E.T.H.R. loin des cœurs de dislocations, figure (I.13).

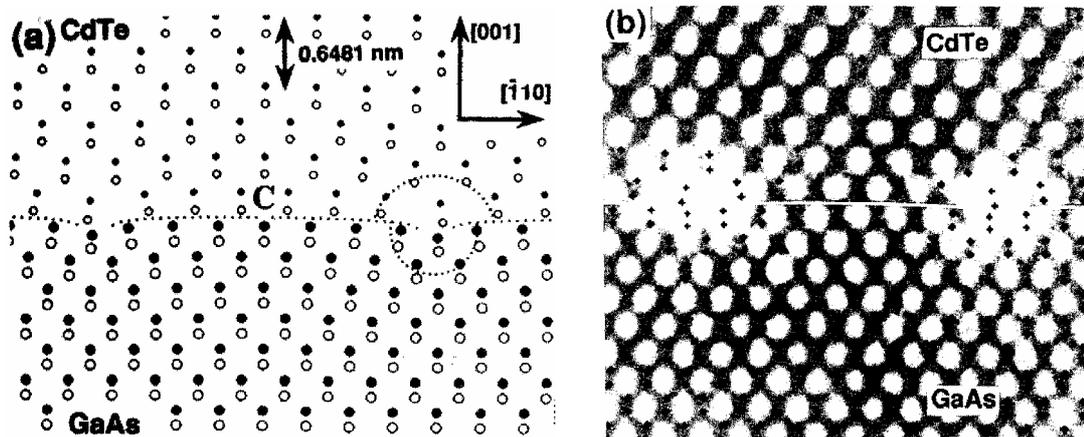


Figure I.13. représentation de l'hétérojonction (001) CdTe / (001) GaAs, (a) position des colonnes atomiques prédites par le calcul de Bonnet, les atomes sont différenciés par 4 symboles différents, C est le milieu entre deux cœurs de dislocations, (b) Image M.E.T.H.R. montrant le bon accord entre les positions théoriques (les croix noires) et les position expérimentales (zones grises sombres), sauf bien sur au voisinage des cœurs.

La même année aussi, R.Bonnet [13] a proposé une solution analytique, pour le calcul du champ des déplacements d'une dislocation inter faciale rectiligne placée à l'interface d'une lame mince biphassée, la lame étant formée de deux plaquettes soudées élastiquement isotropes, des applications sur le bicristal Al/Al₂Cu ont conduit à la représentation du champ de déplacement suivant deux directions du vecteur de Burgers figure (I.14).

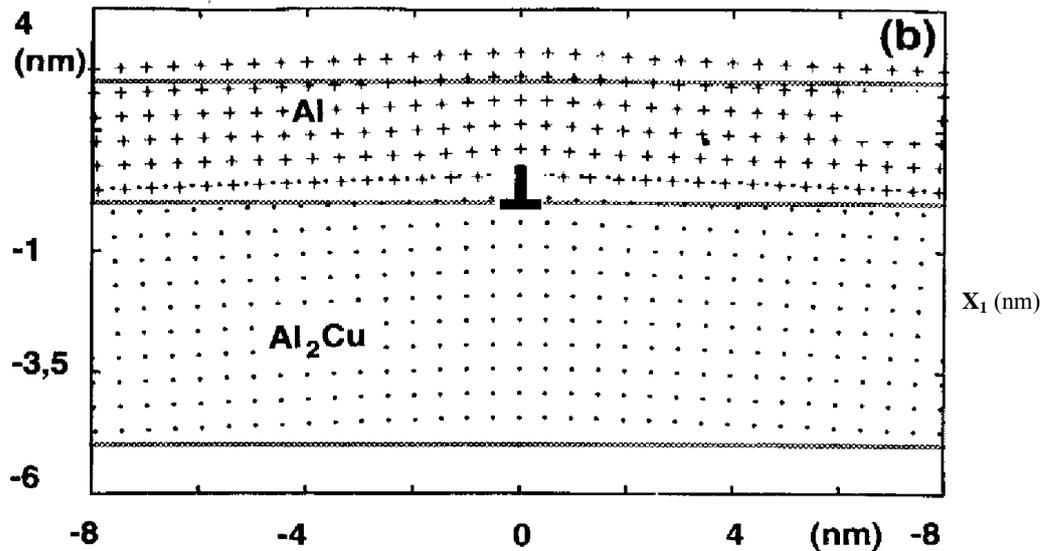


Figure I.14. Champs de déplacement des bilames minces Al / Al₂Cu sous l'effet de dislocations coins interfaciales, le champ u est multiplié par un facteur 3 pour plus de clarté. Les droites horizontales représentent les surfaces libres et l'interface non déformée. où $b // Ox_1$

En 1997, S. Madani [14], considère que l'interface plane du bilame mince est tapissée d'un réseau périodique, parallèle, de dislocations de misfit (intrinsèques). Il a pu représenter le champ de contrainte σ_{11} , du matériau Al/Al₂Cu, pour des C_{ij} anisotropes, et un vecteur de Burger parallèle à l'axe Ox_1 . Conclu que la présence d'un second cristal modifie considérablement la distribution d'équi-contrainte au voisinage de la dislocation. De même ces iso-contraintes révèlent un effet de surface non rencontré dans le cas de l'élasticité isotrope.

En 1998, J.G.Belk [9], ont présenté plusieurs modèles pour reproduire les mesures expérimentales obtenues lors d'étude par S.T.M du champ de déplacement dans une couche d'InAs croissante sur du GaAs (110), du au champ de déformation des dislocations coins. Le modèle basé sur la théorie classique de l'élasticité a donné satisfaction figure. (I.15.a), mais, le modèle basé sur la méthode de R.Bonnet [15] (1981) s'est révélé la plus adéquate, figure (I.15.b).

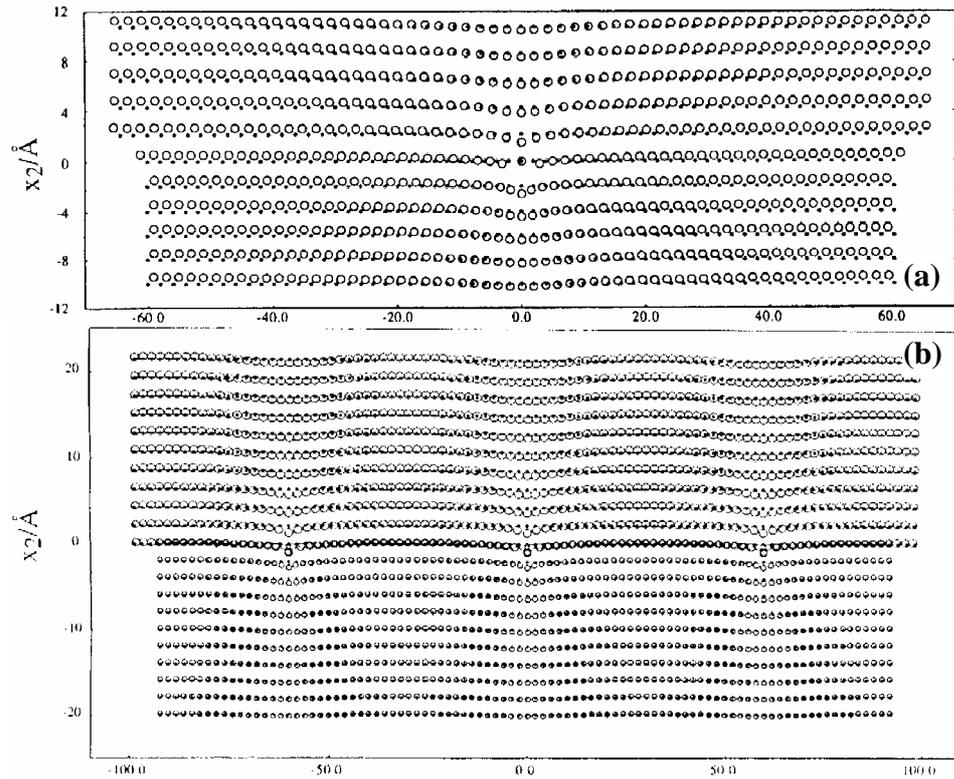


Figure I.15. Champ de déplacement atomique à travers la section [001], les deux types d'atomes sont représentés (In et As), les valeurs sont multipliés par un facteur 2 pour plus de clarté, les cercles noirs et blancs montrant les positions des atomes respectivement avant et après déplacement. (a) Résultat obtenu à partir de la théorie classique de l'élasticité, (b) Résultat obtenu par la méthode de Bonnet pour un réseau de dislocations espacées de 60 nm.

En 1999, Y.Yao et al. [16] ont étendus le modèle Peierls-Nabarro du réseau de dislocations de misfit, à une famille de dislocations de grande largeur. Ainsi, le champ de déplacement, la distribution de la contrainte de cisaillement et la largeur des dislocations de misfit peuvent varier en ajustant un paramètre adimensionnel nommé a et qui est donné dans la fonction de déplacement sur laquelle est basé le modèle modifié de Peierls-Nabarro, cette fonction est donnée par :

$$\text{avec : } f(a) = \frac{(\beta - 2a - \beta a^2)}{2a\beta + 2}$$

$$\beta = \frac{2\pi c\mu}{p\tau_0}, \quad p = \frac{a_1 a_2}{a_1 - a_2}, \quad c = \frac{2a_1 a_2}{a_1 + a_2}$$

τ_0 est le module de cisaillement parallèle à l'interface.

Les résultats de $U(x)$ et de σ sont présentés en figures (I.16) et (I.17).

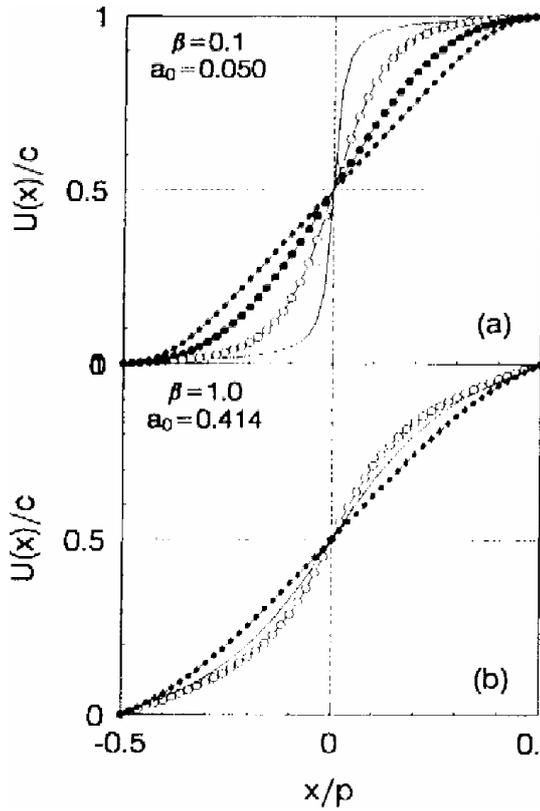


Figure I.16. courbes de variation du déplacement en fonction de β , $U(x)$ étant la fonction déplacement atomique relative entre les atomes à l'interface, x la position atomique.
 (a) pour $a_0 = 0.050$ et $\beta = 0.1$.
 (b) pour $a_0 = 0.414$ et $\beta = 1.0$.

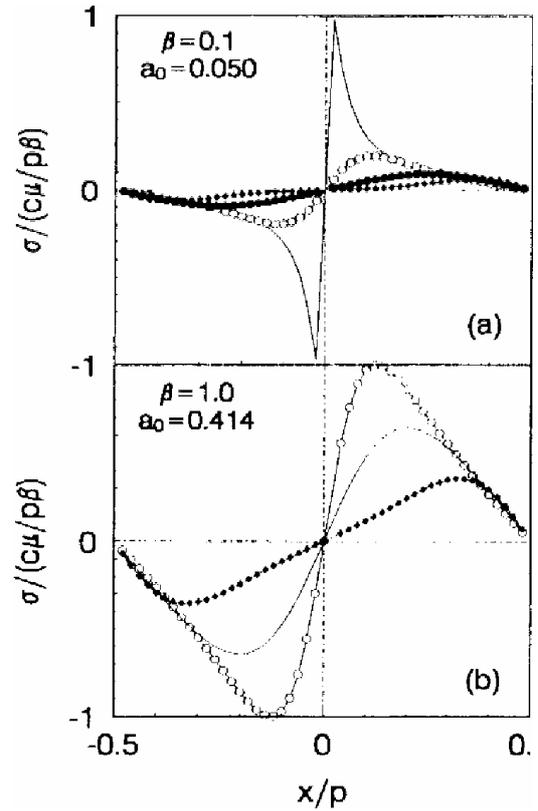


Figure I.17. Distribution de la contrainte de cisaillement, pour différentes valeurs de β et de a_0 .
 (a) pour $a_0 = 0.050$ et $\beta = 0.1$.
 (b) pour $a_0 = 0.414$ et $\beta = 1.0$.

En 2000, R.Bonnet [5] a proposé une solution analytique pour la détermination du champ élastique (déplacement, contrainte et énergie) d'un composite A/B/C déformé par un réseau rectiligne de dislocations de misfit, localisé à l'hétéro interface B/C.

Des applications sur le composite $\text{SiO}_2/\text{Si}/(001)$ GaAs ont permis de présenter le champ des contraintes figures (I.18 et I.19).

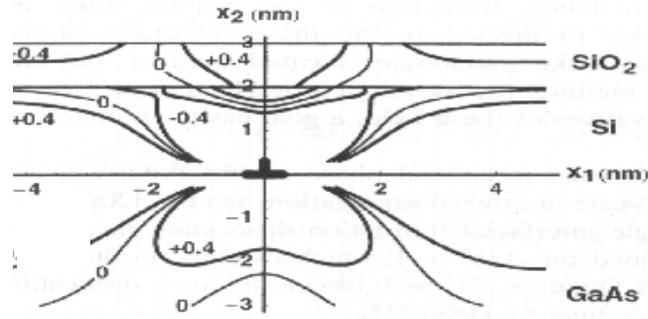


Figure I.18. Courbes d'équi-contraintes σ_{11} (en GPa) pour le composite $\text{SiO}_2/\text{Si}/(001)\text{GaAs}$.

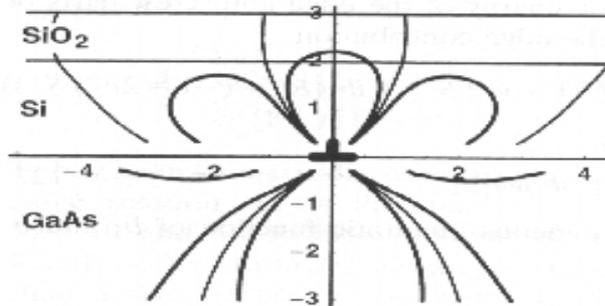


Figure I.19. Courbes d'équi-contraintes σ_{22} (en GPa) pour le composite $\text{SiO}_2/\text{Si}/(001)\text{GaAs}$.

En 2002, T.Outtas [17] considère que l'interface plane du bilame mince est tapissée d'un réseau bi périodique, plus exactement hexagonal régulier de dislocations de misfit (intrinsèques). Il présente le champ de déplacement, figure (I.20).

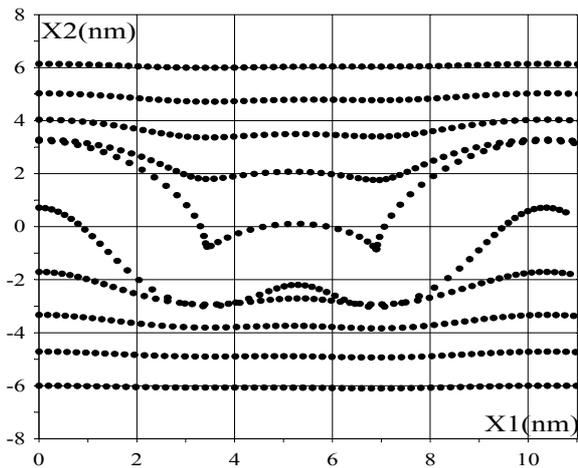


Figure (I.20). Champ de déplacement des surfaces libres pour différents bi cristaux $\text{InAs}/(111)\text{GaAs}$, C_{ij} sont anisotropes, d 'épaisseurs $(\pm 2.a\text{InAs})$, $(\pm 4.a\text{InAs})$, $(\pm 6.a\text{InAs})$, $(\pm 8.a\text{InAs})$, $(\pm 10.a\text{InAs})$.

Il conclu qu'au delà d'une épaisseur de $4.a_{\text{InAs}}$ les couches se déforment de la même façon et dans le même ordre de grandeur .

Chapitre II

Présentation du Problème et Solution en Elasticité Anisotrope

Introduction	14
II.1.Géométrie du problème.....	15
II.1.1. les dislocations intrinsèques ou de misfit.....	15
II.1.2. Les dislocations de translation ou extrinsèques.....	16
II.2.Solution en élasticité anisotrope	18
Introduction.....	18
II.2.1. Champ des déplacements	18
II.2.1.1 Expression finale du champ des déplacements.....	23
II.2.2. Champ des contraintes	24
II.2.3. Conditions aux limites	27
II.2.3.1 Conditions en déplacement.....	27
II.2.3.2 Conditions en contraintes.. ..	27
II.3. Système 30 x 30 et matrice associée	28



Introduction :

Hormis les joints à bas angle, la description des interfaces est complexe et nécessite souvent un vocabulaire approprié pour décrire les défauts inter faciaux. 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.

Lorsqu'une dislocation extrinsèque se déplace le long de l'interface, le déplacement relatif d'un cristal par rapport à l'autre est décrit par une fonction constante, et comme conséquence, les champs de contraintes associés demeurent en général non nuls à l'infini, dans chacun des deux milieux. L'énergie élastique stockée à l'interface du bicristal devient infinie, dans la mesure où elle est intégrée sur l'ensemble du volume et qu'elle croît avec ce dernier. Les réseaux périodiques de dislocations extrinsèques, avec un déplacement relatif constant et des contraintes à longue distance ont été considérés dans la littérature.

Mais physiquement pour des joints proches de l'équilibre thermodynamique, ceci est inacceptable. Par ailleurs, la microscopie à haute résolution ne confirme pas pour les joints d'interphases, la présence de dislocations extrinsèques réparties périodiquement.

Bien au contraire, Bonnet, Loubradou, Catana et Stadelmann [18], par l'observation des interfaces facettées en haute résolution, constatent l'existence de centres de relaxation périodiques le long de l'interface. Les simulations réalisées démontrent que les vecteurs de Burgers mis en jeu sont différents des vecteurs classiques qu'on aurait pu attacher à des dislocations de matrice, et déterminer par un circuit englobant les défauts.

Récemment Willis, Jain et Bullough [19] abordèrent ce problème en admettant que les dislocations inter faciales sont extrinsèques et parviennent à des séries dont les coefficients ne sont pas déterminés analytiquement dans le cas général. Il est donc nécessaire de disposer de modèles, qui puissent décrire sous forme explicite les champs élastiques pour différents cas : milieu élastique isotrope ou anisotrope, homogène ou hétérogène et finis ou infinis.

Comme nous l'avons déjà mentionné dans l'introduction générale la méthode que nous développons ici est inspirée de celle de Bonnet [15] qui consiste à considérer un déplacement relatif périodique et à exprimer le champ de déplacements en séries de Fourier.

II.1 Géométrie du problème:

En 1967, Krausse et Teague ont utilisé les rayons X pour révéler l'existence de réseaux de dislocations à l'interface des hétéro jonctions. Ils attribuent ces défauts interfaciaux à une accommodation partielle de l'écart paramétrique entre les deux matériaux constituant l'hétéro jonction. En effet l'inadaptation mécanique entre deux réseaux cristallins semblables peut être décrit en terme de densité de dislocations coin nécessaire pour accommoder l'écart paramétrique. Donc la densité et le caractère des dislocations dépendent essentiellement des écarts paramétriques et angulaires entre les deux réseaux le long de l'interface ainsi que de la rapidité avec laquelle a été refroidi l'échantillon. Parmi les défauts rencontrés dans les hétéro structures, on cite:

II.1.1. les dislocations intrinsèques ou de misfit: (figure II.1.a.)

Elles sont introduites pour la première fois par Frank et Vander-Merwe [20]. Situées à l'interface des hétéro structures, elles accommodent d'un côté la différence des paramètres cristallins entre la couche et le substrat donc leur présence est inévitable pour la stabilisation structurale des hétéro structures, de l'autre côté elles ne détruisent pas à priori la qualité cristalline et les propriétés électriques de la couche. Ces dislocations ne produisent de contraintes à longue distance donc elles n'interagissent pas avec les défauts ponctuels et linéaires situés à longue distance.

Dans les hétéro structures semi-conductrices élaborées suivant la direction [100], on trouve généralement deux types de dislocations, les dislocations à 60° et les dislocations à 90° . Ces dernières sont appelées "dislocations de Lomer". Dans ce cas, le champ des déplacements est discontinu le long de l'interface, avec une discontinuité variant linéairement à l'intérieur d'une période. Le déplacement inter facial relatif est décrit pour chaque composante u_k par une courbe en dent de scie "Sawtooth curve".

II.1.2. Les dislocations de translation ou extrinsèques: (figure II.1.b)

Elles sont insérées périodiquement par des coupures inter faciales successives de Volterra, en produisant un déplacement relatif $\Delta u_k = u_k^+ - u_k^-$ décrit pour chaque composante par une courbe en escalier "Staircase curve".

Les dislocations de translation sont génératrices des contraintes à longue distance et interagissent donc avec les défauts ponctuels et linéaires situés à longue distance. Elles sont moins stables thermiquement et mécaniquement que les dislocations intrinsèques (S. Nakahara et col [21]).

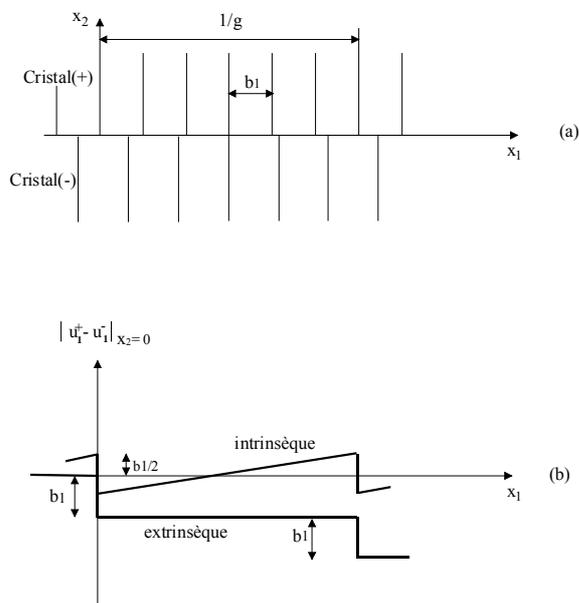


Figure II.1. (a) Représentation schématique du déplacement associé à un réseau de dislocations
(b) Courbe en dent de scie et en escalier relatives respectivement aux dislocations intrinsèques et extrinsèques

Les figures (II.2.a, 2.b), montre en détail, la géométrie du problème pour un réseau unidirectionnel de dislocations qui se développent dans le plan de l'une des deux interfaces d'un matériau tricouche formé de deux couches minces d'épaisseurs (h^+) , $(h^* - h^+)$, de natures différentes et d'un milieu semi-infini.

Cet arrangement périodique de défauts linéaires, ayant un vecteur de Burgers b , est orienté suivant l'axe Ox_3 d'un repère cartésien $Ox_1x_2x_3$ convenablement choisi, Ox_2 est la normale commune à la surface libre ainsi qu'aux deux interfaces.

Les trois milieux sont, élastiquement, anisotropes et caractérisés respectivement par les constantes élastiques C^+_{ijkl} ; C^-_{ijkl} et C^*_{ijkl}

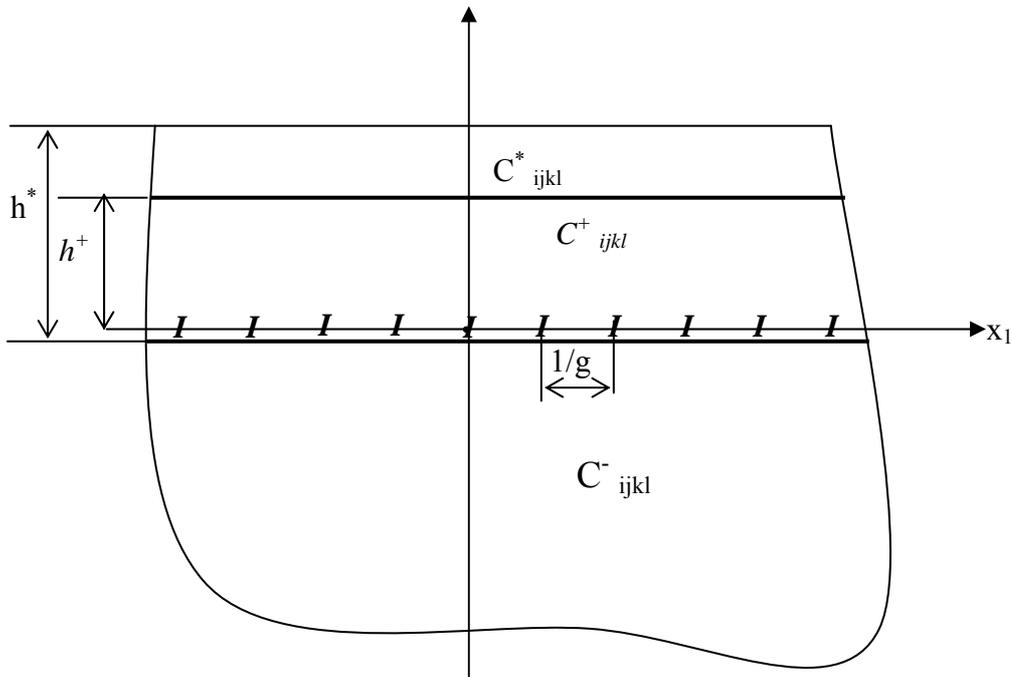


Figure II.2.a Représentation des trois milieux dans un plan

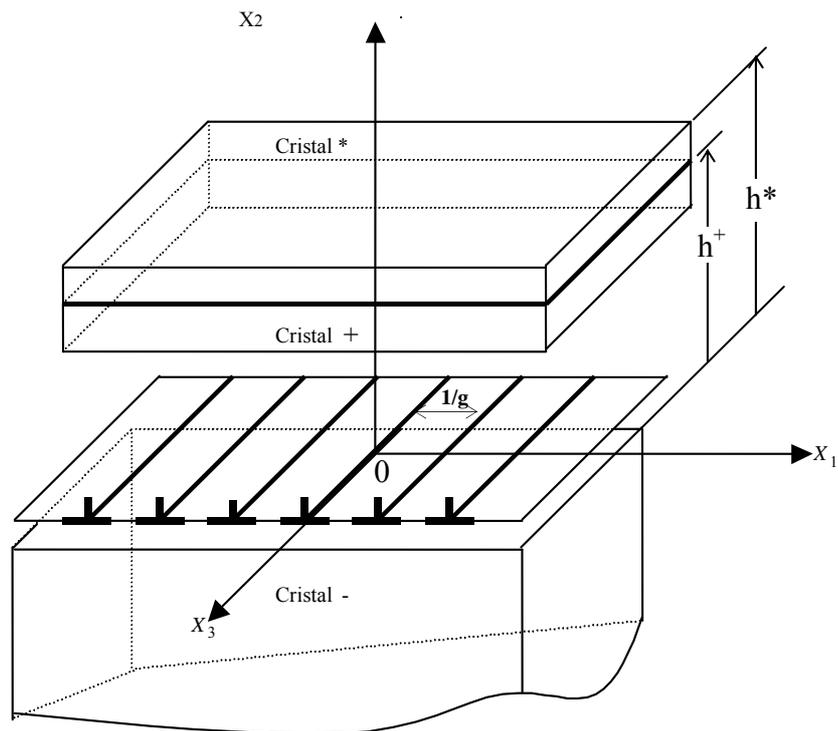


Figure II.2.b Représentation des trois milieux dans l'espace

Figures (II.2.a, 2.b) Matériau tricouches (*) / (+) / (-), avec un réseau unidirectionnel de dislocations intrinsèques à l'interface $x_2=0$; $1/g$ est la période. C^+_{ijkl} , C^-_{ijkl} et C^*_{ijkl} sont les constantes élastiques des trois milieux, h^+ est l'épaisseur du cristal (+) et $(h^* - h^+)$ est l'épaisseur du cristal (*).

II.2.Solution en élasticité anisotrope :

Introduction:

En adoptant le formalisme d'Eshelby [22] et Stroh [23], Tucker[24] est parvenu le premier à exprimé, 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 [25] corrigent certaines erreurs typographiques de Tucker et vérifient la validité de leurs expressions en simulant le contraste de telle dislocation.

Pour résoudre le problème d'une dislocation rectiligne à l'interface de deux milieux anisotropes de nature différente, Bonnet et Dupeux [26], et partant d'une analyse différente de celle de Tucker [24], arrivent à obtenir une expression analytique équivalente à celle de Humble et Forwood [25].

L'analyse du problème devient plus difficile lorsque les deux surfaces libres de la lame mince sont prises en considération comme le prouve le nombre d'article à ce sujet : en isotropie 11 références ont été recensées par Gultin et Romanov [27].

Citons que Chou [28] a donné le champ des contraintes pour une dislocation vis dans un matériau à trois couches et que Nabarro et Kostlan [29] et Moss et Hoover [30] 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 un article de R. Bonnet [31] paru en 1985, nous allons présenter, les résultats d'une investigation du champ élastique (déplacement et contrainte) en utilisant la théorie d'élasticité anisotrope.

II.2.1. Champ des déplacements :

Considérons trois milieux (+), (-) et (*), figure (II.2.b), supposés obéir à la loi de Hooke. Les deux milieux (+) et (-) sont séparés par une interface plane comportant un réseau de dislocations intrinsèques.

La figure (II.2.a) montre la géométrie du problème. 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 :

$$\varepsilon_{ij}(x_1, x_2) = \sum_G \varepsilon_{ij}^{(G)}(x_2) \exp(2.i.\pi.n.x_1/L) \quad (1)$$

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.

En utilisant la convention de sommation d'Einstein sur les indices muets, l'intégration de l'équation (1) donne le champ de déplacement suivant:

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

Avec : $1/g = \Lambda$ (Λ est la période)

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:

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

Ce champ des déplacements u_k doit satisfaire la loi de Hooke généralisée, reliant contraintes et déformations :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl} \quad (4)$$

$$\text{Ou} \quad \sigma_{kl} = \frac{1}{2} (u_{k,l} + u_{l,k}) \quad (i, j, k, l=1, 2, 3) \quad (5)$$

En substituant (5) à (4), nous obtenons :

$$\sigma_{ij} = 1/2 (C_{ijkl} \cdot u_{k,l}) + 1/2 (C_{ijlk} \cdot u_{l,k}) \quad (6)$$

Comme le 3^{ème} et le 4^{ème} indice des constantes élastiques peuvent être interchangés, donc on peut avoir:

$$\sigma_{ij} = 1/2 (C_{ijkl} \cdot u_{k,l}) + 1/2 (C_{ijlk} \cdot u_{l,k}) \quad (7)$$

Etant donné que les indices muets k et l prendront les mêmes valeurs, donc les deux termes à droites sont égaux .

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \cdot u_{k,l} \quad (8)$$

L'état d'équilibre des contraintes dans la région des distorsions s'écrit :

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (9)$$

$$\Rightarrow C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} = 0 \quad (10)$$

En remplaçant par (3) dans (10), on obtient trois équations différentielles qui peuvent s'écrire de la façon suivante:

$$C_{j1k1} (-4\pi^2 g^2 n^2) U_k^{(n)} + (C_{j1k2} + C_{j2k1}) (2i\pi n g) U_{k,2}^{(n)} + C_{j2k2} U_{k,22}^{(n)} = 0 \quad (11)$$

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

$$U_k^{(n)}(x_2) = \lambda'_{\alpha k} \cdot \exp(2.i. \pi.g.n.p_{\alpha}.x_2) \quad (12)$$

Où les $\lambda'_{\alpha k}$ et p_{α} sont des constantes complexes à déterminer à l'aide du système à 3 équations linéaires suivant obtenu en remplaçant par (12) dans (11):

$$[C_{j1k1} + (C_{j1k2} + C_{j2k1})p_{\alpha} + C_{j2k2}.p_{\alpha}^2]. \lambda'_{\alpha k} = 0 \quad (13)$$

$$\text{Qui s'écrit: } A_{jk} \lambda'_{\alpha k} = 0 \quad (14)$$

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

En adoptant pour les constantes élastiques la convention à deux indices

$$11 \rightarrow 1, 22 \rightarrow 2, 33 \rightarrow 3, 23 \rightarrow 4, 13 \rightarrow 5, 12 \rightarrow 6$$

L'équation (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 [22] dans le cas d'une dislocation rectiligne 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 :

$$\det(A_{jk}) = \left| C_{j1k1} + (C_{j1k2} + C_{j2k1}) \cdot p_{\alpha} + C_{j2k2} \cdot p_{\alpha}^2 \right| = 0 \quad (15)$$

On obtient ainsi une équation du sixième degré en p_{α} ($\alpha = 1, \dots, 6$) qui s'écrit :

$$K_0 + K_1.p + K_2.p^2 + K_3.p^3 + K_4.p^4 + K_5.p^5 + K_6.p^6 = 0 \quad (16)$$

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

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

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

$$K_2 = C_{11}C_{22}C_{55} + 2C_{16}C_{26}C_{55} + 2C_{11}C_{26}(C_{45} + C_{35}) - 2C_{16}C_{66}(C_{45} - C_{35}) + C_{44}C_{11}C_{66} - 2C_{11}C_{24}C_{56} - C_{16}C_{56}(2C_{46} + 3C_{25} + C_{15}) - C_{25}C_{11}(2C_{46} - C_{25}) - 4C_{45}C_{16}C_{12} - C_{55}C_{12}(2C_{66} + C_{12}) - C_{11}C_{46}^2 - C_{44}C_{16}^2 + 2C_{15}C_{16}C_{24} + C_{15}C_{66}(C_{56} + 2C_{25}) + C_{15}C_{12}(2C_{25} + C_{46}) - 2C_{15}C_{26}(C_{25} + C_{14}) + C_{12}C_{14}(C_{25} + C_{56}) + C_{12}C_{25}C_{56} - C_{46}C_{15}C_{66} + C_{46}C_{12}(C_{14} + C_{56}) - C_{66}(C_{14}^2 + C_{56}^2)$$

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

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

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

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

Donc pour résoudre le problème il faut calculer les six racines du polynôme (16). Ces racines sont d'après Eshelby [22] 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 seul les racines à partie imaginaire positive sont choisies.

Ces racines s'écrivent: $p_\alpha^{(n)} = p_\alpha^r(n) \pm ip_\alpha^i(n)$ (17)

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

Pour chacune des six racines p_α données en (17) on résout le système (18) afin de déterminer les solutions complexes $\lambda'_{\alpha k}$ exprimées en fonctions des C_{ij} :

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} \\ F_{21} & F_{22} & F_{23} \\ F_{31} & F_{32} & F_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda'_{\alpha 1} \\ \lambda'_{\alpha 2} \\ \lambda'_{\alpha 3} \end{pmatrix} = 0 \quad (18)$$

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 et s'écrivent:

$$\lambda'_{\alpha k}{}^{(n)} = \lambda'_{\alpha k}{}^r{}^{(n)} \pm i\lambda'_{\alpha k}{}^i{}^{(n)} \quad (19)$$

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 (18) calculer :

$$\lambda'_{\alpha 1} = \frac{F_{12}F_{23} - F_{13}F_{22}}{F_{11}F_{22} - F_{12}F_{21}} \quad (20.1)$$

$$\lambda'_{\alpha 2} = \frac{-(F_{11}F_{23} - F_{13}F_{21})}{F_{11}F_{22} - F_{12}F_{21}} \quad (20.2)$$

$$\lambda'_{\alpha 3} = 1 \quad (20.3)$$

La troisième équation du système (18) est toujours vérifiée car en remplaçant $\lambda'_{\alpha 1}$ et $\lambda'_{\alpha 2}$ par leurs valeurs obtenues en (20.1) et (20.2), on retrouve l'expression du déterminant de la matrice F_{jk} qui est égal à zéro.

Les $\lambda_{\alpha k}$ choisis dans le calcul des déplacements et des contraintes s'expriment en fonction des $\lambda'_{\alpha k}$ par:

$$\lambda_{\alpha} = \frac{\lambda'_{\alpha 1}}{(\lambda_{\alpha 1}' + \lambda_{\alpha 2}' + \lambda_{\alpha 3}')^{1/2}} \quad (21.1)$$

$$\lambda_{\alpha 2} = \frac{\lambda'_{\alpha 2}}{(\lambda_{\alpha 1}' + \lambda_{\alpha 2}' + \lambda_{\alpha 3}')^{1/2}} \quad (21.2)$$

$$\lambda_{\alpha 3} = \frac{\lambda'_{\alpha 3}}{(\lambda_{\alpha 1}' + \lambda_{\alpha 2}' + \lambda_{\alpha 3}')^{1/2}} \quad (21.3)$$

Tel que :

$$\lambda_{\alpha_1}^2 + \lambda_{\alpha_2}^2 + \lambda_{\alpha_3}^2 = 1 \quad (22)$$

Les équations (11) ont ainsi comme solution générale des combinaisons linéaires des solutions trouvées :

$$U_k^{(n)}(x_2) = \sum_{\alpha=1}^6 C_{\alpha}^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k} \cdot \exp(2 \cdot i \cdot \pi \cdot g \cdot n \cdot p_{\alpha} \cdot x_2) \quad (23)$$

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

Pour simplifier la résolution du problème, considérons arbitrairement six constantes complexes:

$$\begin{cases} X_{\alpha}^{(n)} / 2 \cdot i \cdot \pi \cdot n \\ Y_{\alpha}^{(n)} / 2 \cdot i \cdot \pi \cdot n \end{cases} \quad (\alpha = 1, 2, 3) \quad (24)$$

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

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

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

$$U_k^{(n)}(x_2) = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{X_{\alpha}^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k}}{2 \cdot i \cdot \pi \cdot n} \cdot \exp(2 \cdot i \cdot \pi \cdot g \cdot n \cdot p_{\alpha} \cdot x_2) + \frac{Y_{\alpha}^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}}{2 \cdot i \cdot \pi \cdot n} \cdot \exp(2 \cdot i \cdot \pi \cdot g \cdot n \cdot \bar{p}_{\alpha} \cdot x_2) \quad (25)$$

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 (1) avec (25) permet d'écrire le champ des déplacements sous la

$$\text{forme suivante : } u_k = \sum_{n \neq 0} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{X_{\alpha}^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k}}{2 \cdot i \cdot \pi \cdot n} \cdot \exp[(2 \cdot i \cdot \pi \cdot g \cdot n \cdot (x_1 + p_{\alpha} \cdot x_2))] + \frac{Y_{\alpha}^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}}{2 \cdot i \cdot \pi \cdot n} \cdot \exp[(2 \cdot i \cdot \pi \cdot g \cdot n \cdot (x_1 + \bar{p}_{\alpha} \cdot x_2))] \quad (26)$$

II.2.1.1 Expression finale du champ des déplacements:

Pour plus de performance sur le plan numérique, il est convenable d'écrire l'équation (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 :

$$u_k = \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 C_{\alpha k}^{(n)} \cdot \exp[2.i.\pi.g.n(x_1 + r_{\alpha}.x_2)] \quad (27)$$

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

$$\Rightarrow C_{\alpha k}^{(-n)} = \overline{C_{\alpha k}^{(n)}}$$

Donc la double somme (27) devient:

$$2 \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re}(C_{\alpha k}^{(n)}) \cdot \cos[2.\pi.g.n(x_1 + r_{\alpha}.x_2)] + \operatorname{Re}(i.C_{\alpha k}^{(n)}) \cdot \sin[2.\pi.g.n(x_1 + r_{\alpha}.x_2)] \quad (28)$$

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

$$\begin{aligned} u_k = & \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi.n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 [\{ \cos[n.\omega(x_1 + r_{\alpha}.x_2)] \\ & \times \operatorname{Re}[(-i.X_{\alpha}^{(n)}. \lambda_{\alpha k}) \cdot \exp(-n.\omega.s_{\alpha}.x_2) + (-i.Y_{\alpha}^{(n)}. \bar{\lambda}_{\alpha k}) \cdot \exp(n.\omega.s_{\alpha}.x_2)] \} \\ & + \{ \sin[n.\omega(x_1 + r_{\alpha}.x_2)] \times \operatorname{Re}[X_{\alpha}^{(n)}. \lambda_{\alpha k}) \cdot \exp(-n.\omega.s_{\alpha}.x_2) + (Y_{\alpha}^{(n)}. \bar{\lambda}_{\alpha k}) \cdot \exp(n.\omega.s_{\alpha}.x_2)] \} \\ & k=1,2,3 \end{aligned} \quad (29)$$

II.2.2. Champ des contraintes :

Le champ des contraintes est obtenu à partir de l'équation (29) en utilisant la loi de Hooke qui s'écrit :

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

$$\sigma_{kl} = C_{klij} \cdot u_{i,j} = C_{kli1} \cdot u_{i,1} + C_{kli2} \cdot u_{i,2} + C_{kli3} \cdot u_{i,3} \quad (30)$$

Sachant que dans notre cas u_i ne dépend pas de x_3 , on aura:

$$\sigma_{kl} = C_{kli1} \cdot u_{i,1} + C_{kli2} \cdot u_{i,2} \quad (31)$$

d'où :

$$\sigma_{kl} = C_{kl11} \cdot u_{1,1} + C_{kl21} \cdot u_{2,1} + C_{kl12} \cdot u_{1,2} + C_{kl22} \cdot u_{2,2} \quad (32)$$

Avec :

$$\begin{aligned} u_1 = & \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi.n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 [\{ \cos[n.\omega(x_1 + r_{\alpha}.x_2)] \\ & \times \operatorname{Re}[(-i.X_{\alpha}^{(n)}. \lambda_{\alpha 1}) \cdot \exp(-n.\omega.s_{\alpha}.x_2) + (-i.Y_{\alpha}^{(n)}. \bar{\lambda}_{\alpha 1}) \cdot \exp(n.\omega.s_{\alpha}.x_2)] \} \\ & + \{ \sin[n.\omega(x_1 + r_{\alpha}.x_2)] \times \operatorname{Re}[X_{\alpha}^{(n)}. \lambda_{\alpha 1}) \cdot \exp(-n.\omega.s_{\alpha}.x_2) + (Y_{\alpha}^{(n)}. \bar{\lambda}_{\alpha 1}) \cdot \exp(n.\omega.s_{\alpha}.x_2)] \} \end{aligned} \quad (33)$$

Et

$$u_2 = \sum_{n \neq 0} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 \left[\{ \cos[n \cdot \omega(x_1 + r_\alpha \cdot x_2)] \right. \\ \left. \times \text{Re} \left[(-i \cdot X_\alpha^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha 2}) \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) + (-i \cdot Y_\alpha^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha 2}) \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) \right] \right\} \\ \left. + \{ \sin[n \cdot \omega(x_1 + r_\alpha \cdot x_2)] \times \text{Re} \left[(X_\alpha^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha 2}) \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) + (Y_\alpha^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha 2}) \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) \right] \right\} \right] \quad (34)$$

En posant :

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

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

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

On aura:

$$u_1 = \sum_{n > 0} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \cdot \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \cos(A) \cdot \text{Re} \left[(-i \lambda_{\alpha 1} \cdot C) + (-i \bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) \right] + \sin(A) \cdot \text{Re} \left[(\lambda_{\alpha 1} \cdot C) + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) \right] \right\} \quad (35)$$

Et

$$u_2 = \sum_{n > 0} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \cdot \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \cos(A) \text{Re} \left[(-i \lambda_{\alpha 2} \cdot C) + (-i \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) \right] + \sin(A) \text{Re} \left[(\lambda_{\alpha 2} \cdot C) + (\bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) \right] \right\} \quad (36)$$

D'où

$$C_{k111} \cdot u_{1,1} = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n > 0} \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \sin(A) \cdot \text{Re} \left[(i \lambda_{\alpha 1} \cdot C) \cdot C_{k111} + (i \bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) C_{k111} \right] \right. \\ \left. + \cos(A) \cdot \text{Re} \left[(\lambda_{\alpha 1} \cdot C) \cdot C_{k111} + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) C_{k111} \right] \right\} \quad (37)$$

Et

$$C_{k121} \cdot u_{2,1} = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n > 0} \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \sin(A) \cdot \text{Re} \left[(i \lambda_{\alpha 2} \cdot C) \cdot C_{k121} + (i \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) C_{k121} \right] \right. \\ \left. + \cos(A) \cdot \text{Re} \left[(\lambda_{\alpha 2} \cdot C) \cdot C_{k121} + (\bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) C_{k121} \right] \right\} \quad (38)$$

$$(37) + (38) = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n > 0} \sum_{\alpha=1}^3 \text{Re} \left[(\lambda_{\alpha 1} \cdot C + \bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) \cdot C_{k111} + (\lambda_{\alpha 2} \cdot C + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) \cdot C_{k121} \right] \cdot (\cos(A) + i \sin(A)) \quad (39)$$

De même

$$C_{kl12} \cdot u_{1,2} = \frac{\omega}{\pi} \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left\{ \left(\lambda_{\alpha 1} \cdot C + \bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D \right) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot r_{\alpha} \cdot C_{kl12} \right. \\ \left. + \left(\lambda_{\alpha 1} \cdot C - \bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D \right) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot s_{\alpha} \cdot C_{kl12} \right\} \quad (40)$$

Et

$$C_{kl22} \cdot u_{2,2} = \frac{\omega}{\pi} \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left\{ \left(\lambda_{\alpha 2} \cdot C + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D \right) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot r_{\alpha} \cdot C_{kl22} \right. \\ \left. + \left(\lambda_{\alpha 2} \cdot C - \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D \right) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot s_{\alpha} \cdot C_{kl22} \right\} \quad (41)$$

$$\Rightarrow C_{kl12} \cdot u_{1,2} + C_{kl22} \cdot u_{2,2} = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left\{ \left(\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl22} \right) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C \cdot r_{\alpha} + \right. \\ \left(\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl22} \right) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot D \cdot r_{\alpha} + \left(\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl22} \right) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C \cdot s_{\alpha} \\ \left. - \left(\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl22} \right) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot D \cdot s_{\alpha} \right\} \quad (42)$$

Sachant que: $p_{\alpha} = r_{\alpha} + i s_{\alpha}$ et $\bar{p}_{\alpha} = r_{\alpha} - i s_{\alpha}$

On aura:

$$C_{kl12} \cdot u_{1,2} + C_{kl22} \cdot u_{2,2} = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left\{ \left(\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl22} \right) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C \cdot p_{\alpha} \right. \\ \left. + \left(\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl22} \right) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot D \cdot \bar{p}_{\alpha} \right\} \quad (43)$$

Donc :

$$\sigma_{kl} = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left\{ \left(\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl11} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl21} \right) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C + \right. \\ \left. + \left(\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl11} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl21} \right) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot D + \left(\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl22} \right) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C \cdot p_{\alpha} \right. \\ \left. + \left(\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl22} \right) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot D \cdot \bar{p}_{\alpha} \right\} \quad (44)$$

$$\sigma_{kl} = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \cos(A) \cdot \operatorname{Re} \left\{ \left[\lambda_{\alpha 1} \left(C_{kl11} + p_{\alpha} C_{kl12} \right) + \lambda_{\alpha 2} \left(C_{kl21} + p_{\alpha} C_{kl22} \right) \right] \cdot C + \right. \\ \left. \left[\bar{\lambda}_{\alpha 1} \left(C_{kl11} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl12} \right) + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \left(C_{kl21} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl22} \right) \right] \cdot D \right\} + \\ \sin(A) \cdot \operatorname{Re} \left\{ \left[\lambda_{\alpha 1} \left(C_{kl11} + p_{\alpha} C_{kl12} \right) + \lambda_{\alpha 2} \left(C_{kl21} + p_{\alpha} C_{kl22} \right) \right] \cdot C + \right. \\ \left. \left[\bar{\lambda}_{\alpha 1} \left(C_{kl11} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl12} \right) + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \left(C_{kl21} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl22} \right) \right] \cdot D \right\} \quad (45)$$

On obtient finalement l'expression suivante:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = & 2. g \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 [\{\cos[n. \omega (x_1 + r_\alpha x_2)]\} + \\ & \times \operatorname{Re}[X_\alpha^{(n)}. L_{\alpha ij}. \exp(-n. \omega. s_\alpha. x_2) + Y_\alpha^{(n)}. \bar{L}_{\alpha ij}. \exp(n. \omega. s_\alpha. x_2)] + \{\sin[n. \omega(x_1 + r_\alpha x_2)]\} + \\ & \times \operatorname{Re}[i. X_\alpha^{(n)}. L_{\alpha ij}. \exp(-n. \omega. s_\alpha. x_2) + i. Y_\alpha^{(n)}. \bar{L}_{\alpha ij}. \exp(n. \omega. s_\alpha. x_2)] \end{aligned} \quad (46)$$

avec $L_{\alpha kl} = \lambda_{\alpha j} [C_{klj1} + p_\alpha C_{klj2}]$
 $i, j = 1, 2, 3$, $l = 1, 2$

II.2.3. Conditions aux limites:

Dans notre travail, on utilise le fait qu'une série périodique de dislocations intrinsèques 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.

Lorsque la période $1/g$ tend vers l'infini, les conditions aux limites au voisinage d'une dislocation intrinsèque tendent vers celle d'une dislocation de translation placée sur l'hétéro interface.

Pour déterminer la valeur des constantes complexes X_α^+ , Y_α^+ , Y_α^- , X_α^* et Y_α^* ($\alpha=1, 2, 3$), on applique les conditions aux limites suivantes :

II.2.3.1 Conditions en déplacement:

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

$$[U_k^+ - U_k^-]_{x_2=0} = -\frac{b_k}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} (1/n) \sin(n. \omega. x_1) \quad (47)$$

$$[U_k^* - U_k^+]_{x_2=h^+} = 0 \quad (48)$$

Où (-), (+) et (*) signifient les cristaux des milieux inférieur (substrat), intermédiaire et supérieur.

II.2.3.2 Conditions en contraintes:

$1/$ à travers l'interface les forces sont continues, ce qui se traduit par l'équilibre des contraintes normales σ_{2k} aux interfaces :

$$\sigma_{2k}^+(x_2=0) = \sigma_{2k}^-(x_2=0) \quad (49)$$

$$\sigma_{2k}^+(x_2=h^+) = \sigma_{2k}^*(x_2=h^+) \quad (50)$$

2/ la surface libre du matériau tricouches est en équilibre, ce qui nous permet de considérer que la contrainte normale est nulle à cette surface ($x_2=h^*$).

$$\sigma_{2k}^*(x_2=h^*)=0 \quad (51)$$

II.3. Système 30 x 30 et matrice associée:

En omettant l'exposant n, les 15 inconnues complexes, sont donc les solutions du système linéaire à 30 équations réelles obtenues par combinaison des expressions des déplacements (29) et des contraintes (46) avec les conditions aux limites (47) à (51) et qui se traduit par les équations (52) à (61).

$$\text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[-\left(X_{\alpha}^+ \cdot \lambda_{\alpha k}^+ + Y_{\alpha}^+ \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}^+ \right) + \left(X_{\alpha}^- \cdot \lambda_{\alpha k}^- + Y_{\alpha}^- \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}^- \right) \right] = b_k \quad (52)$$

$$\text{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_{\alpha}^+ \cdot \lambda_{\alpha k}^+ + Y_{\alpha}^+ \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}^+ \right) - \left(X_{\alpha}^- \cdot \lambda_{\alpha k}^- + Y_{\alpha}^- \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}^- \right) \right] = 0 \quad (53)$$

$$\text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_{\alpha}^+ \cdot L_{\alpha 2k}^+ + Y_{\alpha}^+ \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^+ \right) - \left(X_{\alpha}^- \cdot L_{\alpha 2k}^- + Y_{\alpha}^- \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^- \right) \right] = 0 \quad (54)$$

$$\text{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_{\alpha}^+ \cdot L_{\alpha 2k}^+ + Y_{\alpha}^+ \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^+ \right) - \left(X_{\alpha}^- \cdot L_{\alpha 2k}^- + Y_{\alpha}^- \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^- \right) \right] = 0 \quad (55)$$

$$\text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[\text{Ainter}(\alpha) \cdot (-AS(\alpha) + iAC(\alpha)) \right] + \text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[\text{Binter}(\alpha) \cdot (BCS(\alpha) + iBCC(\alpha)) \right] = 0 \quad (56)$$

$$\text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[-\text{Ainter}(\alpha) \cdot (AC(\alpha) + iAS(\alpha)) \right] + \text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[\text{Binter}(\alpha) \cdot (BCC(\alpha) + iBCS(\alpha)) \right] = 0 \quad (57)$$

$$\text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[-\text{APinter}(\alpha) \cdot (AC(\alpha) + iAS(\alpha)) \right] + \text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[\text{BPinter}(\alpha) \cdot (BCC(\alpha) + iBCS(\alpha)) \right] = 0 \quad (58)$$

$$\text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[\text{APinter}(\alpha) \cdot (AS(\alpha) - iAC(\alpha)) \right] + \text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[\text{BPinter}(\alpha) \cdot (-BCS(\alpha) + iBCC(\alpha)) \right] = 0$$

(59)

$$\text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[(\text{AAinter}(\alpha) \cdot EC(\alpha) - \text{BBinter}(\alpha) \cdot ES(\alpha)) \right] = 0 \quad (60)$$

$$\text{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[(\text{BBinter}(\alpha) \cdot EC(\alpha) + \text{AAinter}(\alpha) \cdot ES(\alpha)) \right] = 0 \quad (61)$$

Avec :

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

$$\text{Binter}(\alpha) = X_{\alpha}^* \cdot L_{\alpha 2k}^* \cdot \text{EXPON3}(\alpha) + Y_{\alpha}^* \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^* \cdot \text{EXPON4}(\alpha)$$

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

$$BPinter(\alpha) = X_{\alpha}^{*} \cdot L_{\alpha 2k}^{*} \cdot EXPON4(\alpha) + Y_{\alpha}^{*} \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^{*} \cdot EXPON3(\alpha)$$

$$AAinter(\alpha) = i(X_{\alpha}^{*} \cdot L_{\alpha 2k}^{*} \cdot EXPON5(\alpha) + Y_{\alpha}^{*} \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^{*} \cdot EXPON6(\alpha))$$

$$BBinter(\alpha) = (X_{\alpha}^{*} \cdot L_{\alpha 2k}^{*} \cdot EXPON5(\alpha) + Y_{\alpha}^{*} \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^{*} \cdot EXPON6(\alpha))$$

Et :

$$AC(\alpha) = \cos(n \cdot \omega \cdot r_{\alpha}^{+} \cdot h)$$

$$AS(\alpha) = \sin(n \cdot \omega \cdot r_{\alpha}^{+} \cdot h)$$

$$BCC(\alpha) = \cos(n \cdot \omega \cdot r_{\alpha}^{*} \cdot h)$$

$$BCS(\alpha) = -\sin(n \cdot \omega \cdot r_{\alpha}^{*} \cdot h)$$

$$EC(\alpha) = \cos(n \cdot \omega \cdot r_{\alpha}^{*} \cdot h^{*})$$

$$ES(\alpha) = \sin(n \cdot \omega \cdot r_{\alpha}^{*} \cdot h^{*})$$

Avec :

$$EXPON1(\alpha) = \exp(-n \cdot \omega \cdot s_{\alpha}^{+} \cdot h^{+})$$

$$EXPON2(\alpha) = \exp(n \cdot \omega \cdot s_{\alpha}^{+} \cdot h^{+})$$

$$EXPON3(\alpha) = \exp(n \cdot \omega \cdot s_{\alpha}^{*} \cdot h^{*})$$

$$EXPON4(\alpha) = \exp(-n \cdot \omega \cdot s_{\alpha}^{*} \cdot h^{*})$$

$$EXPON5(\alpha) = \exp(-n \cdot \omega \cdot r_{\alpha}^{*} \cdot h^{*})$$

$$EXPON6(\alpha) = \exp(n \cdot \omega \cdot r_{\alpha}^{*} \cdot h^{*})$$

Ainsi :

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

$$X_a^+ = A_a^+ + iB_a^+$$

$$X_a^* = A_a^* + iB_a^*$$

$$Y_a^+ = C_a^+ + iD_a^+$$

$$Y_a^- = C_a^- + iD_a^-$$

$$Y_a^* = C_a^* + iD_a^*$$

$$\lambda_{ak}^+ = \lambda_{ak}^{r+} + i\lambda_{ak}^{i+}$$

$$\lambda_{ak}^- = \lambda_{ak}^{r-} + i\lambda_{ak}^{i-}$$

$$\bar{\lambda}_{ak}^+ = \lambda_{ak}^{r+} - i\lambda_{ak}^{i+}$$

$$\bar{\lambda}_{ak}^- = \lambda_{ak}^{r-} - i\lambda_{ak}^{i-}$$

$$\lambda_{ak}^* = \lambda_{ak}^{r*} + i\lambda_{ak}^{i*}$$

$$\bar{\lambda}_{ak}^* = \lambda_{ak}^{r*} - i\lambda_{ak}^{i*}$$

$$L_{a2k}^+ = L_{a2k}^{r+} + iL_{a2k}^{i+}$$

$$L_{a2k}^- = L_{a2k}^{r-} + iL_{a2k}^{i-}$$

$$\bar{L}_{a2k}^+ = L_{a2k}^{r+} - iL_{a2k}^{i+}$$

$$\bar{L}_{a2k}^- = L_{a2k}^{r-} - iL_{a2k}^{i-}$$

$$L_{a2k}^* = L_{a2k}^{r*} + iL_{a2k}^{i*}$$

$$\bar{L}_{a2k}^* = L_{a2k}^{r*} - iL_{a2k}^{i*}$$

On obtient ainsi le système suivant:

$$\sum_{a=1}^3 -A_a^+ \lambda_{ak}^{r+} + B_a^+ \lambda_{ak}^{i+} - C_a^+ \lambda_{ak}^{r+} - D_a^+ \lambda_{ak}^{i+} + A_a^- \lambda_{ak}^{r-} - B_a^- \lambda_{ak}^{i-} + C_a^- \lambda_{ak}^{r-} + D_a^- \lambda_{ak}^{i-} = b_k \quad (62)$$

$$\sum_{a=1}^3 -A_a^+ \lambda_{ak}^{i+} - B_a^+ \lambda_{ak}^{r+} + C_a^+ \lambda_{ak}^{i+} - D_a^+ \lambda_{ak}^{r+} + A_a^- \lambda_{ak}^{i-} + B_a^- \lambda_{ak}^{r-} - C_a^- \lambda_{ak}^{i-} + D_a^- \lambda_{ak}^{r-} = 0 \quad (63)$$

$$\sum_{a=1}^3 A_a^+ L_{a2k}^{r+} - B_a^+ L_{a2k}^{i+} + C_a^+ L_{a2k}^{r+} + D_a^+ L_{a2k}^{i+} - A_a^- L_{a2k}^{r-} + B_a^- L_{a2k}^{i-} - C_a^- L_{a2k}^{r-} - D_a^- L_{a2k}^{i-} = 0 \quad (64)$$

$$\sum_{a=1}^3 -A_a^+ L_{a2k}^{i+} - B_a^+ L_{a2k}^{r+} + C_a^+ L_{a2k}^{i+} - D_a^+ L_{a2k}^{r+} + A_a^- L_{a2k}^{i-} + B_a^- L_{a2k}^{r-} - C_a^- L_{a2k}^{i-} + D_a^- L_{a2k}^{r-} = 0 \quad (65)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{a=1}^3 \{ [-A_a^+ (\lambda_{ak}^{r+} AS(\alpha) + \lambda_{a2k}^{i+} \cdot AC(\alpha)) + B_a^+ (\lambda_{ak}^{r+} AS(\alpha) - \lambda_{a2k}^{i+} \cdot AC(\alpha))] \text{EXPON1}(\alpha) \\ & + [-C_a^+ (\lambda_{ak}^{r+} AS(\alpha) - \lambda_{a2k}^{i+} \cdot AC(\alpha)) - D_a^+ (\lambda_{ak}^{r+} AS(\alpha) + \lambda_{a2k}^{i+} \cdot AC(\alpha))] \text{EXPON2}(\alpha) \} \\ & + \sum_{a=1}^3 \{ [A_a^* (\lambda_{ak}^{r*} BCS(\alpha) + \lambda_{a2k}^{i*} \cdot BCC(\alpha)) - B_a^* (\lambda_{ak}^{r*} BCS(\alpha) - \lambda_{a2k}^{i*} \cdot BCC(\alpha))] \text{EXPON4}(\alpha) \\ & - [C_a^* (\lambda_{ak}^{r*} BCS(\alpha) - \lambda_{a2k}^{i*} \cdot BCC(\alpha)) + D_a^* (\lambda_{ak}^{r*} BCS(\alpha) - \lambda_{a2k}^{i*} \cdot BCC(\alpha))] \text{EXPON3}(\alpha) \} = 0 \end{aligned} \quad (66)$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[-A_{\alpha}^{+}(\lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha) - \lambda_{\alpha 2k}^{i+} AC(\alpha)) + B_{\alpha}^{+}(\lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha 2k}^{r+} AS(\alpha)) \right] EXPON1(\alpha) \right. \\
& \left. + \left[-C_{\alpha}^{+}(\lambda_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha 2k}^{i+} AS(\alpha)) - D_{\alpha}^{+}(\lambda_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) - \lambda_{\alpha 2k}^{r+} AS(\alpha)) \right] EXPON2(\alpha) \right\} \\
& + \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{*}(\lambda_{\alpha k}^{r*} BCC(\alpha) - \lambda_{\alpha 2k}^{i*} BCS(\alpha)) - B_{\alpha}^{*}(\lambda_{\alpha k}^{r*} BCC(\alpha) + \lambda_{\alpha 2k}^{i*} BCS(\alpha)) \right] EXPON4(\alpha) \right. \\
& \left. - \left[C_{\alpha}^{*}(\lambda_{\alpha k}^{r*} BCC(\alpha) + \lambda_{\alpha 2k}^{i*} BCS(\alpha)) + D_{\alpha}^{*}(\lambda_{\alpha k}^{i*} BCC(\alpha) - \lambda_{\alpha 2k}^{r*} BCC(\alpha)) \right] EXPON3(\alpha) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{67}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[-A_{\alpha}^{+}(L_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i+} AS(\alpha)) + B_{\alpha}^{+}(L_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{r+} AS(\alpha)) \right] EXPON1(\alpha) \right. \\
& \left. + \left[-C_{\alpha}^{+}(L_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i+} AS(\alpha)) - D_{\alpha}^{+}(L_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r+} AS(\alpha)) \right] EXPON2(\alpha) \right\} \\
& + \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{r*} BCC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i*} BCS(\alpha)) - B_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{i*} BCC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{r*} BCS(\alpha)) \right] EXPON4(\alpha) \right. \\
& \left. + \left[C_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{r*} BCC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i*} BCS(\alpha)) + D_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{i*} BCC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r*} BCS(\alpha)) \right] EXPON3(\alpha) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{68}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{+}(L_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i+} AC(\alpha)) - B_{\alpha}^{+}(L_{\alpha k}^{i+} AS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r+} AC(\alpha)) \right] EXPON1(\alpha) \right. \\
& \left. + \left[C_{\alpha}^{+}(L_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i+} AC(\alpha)) + D_{\alpha}^{+}(L_{\alpha k}^{i+} AS(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{r+} AC(\alpha)) \right] EXPON2(\alpha) \right\} \\
& + \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[-A_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{r*} BCS(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i*} BCC(\alpha)) + B_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{i*} BCS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r*} BCC(\alpha)) \right] EXPON4(\alpha) \right. \\
& \left. + \left[C_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{i*} BCC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r*} BCS(\alpha)) + D_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{r*} BCS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i*} BCC(\alpha)) \right] EXPON3(\alpha) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{69}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{r*} EC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i*} ES(\alpha)) - B_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{i*} EC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{r*} ES(\alpha)) \right] EXPON5(\alpha) \right. \\
& \left. + \left[C_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{i*} EC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{r*} ES(\alpha)) + D_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{r*} EC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i*} ES(\alpha)) \right] EXPON6(\alpha) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{70}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{r*} ES(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i*} EC(\alpha)) + B_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{i*} ES(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r*} EC(\alpha)) \right] EXPON5(\alpha) \right. \\
& \left. + \left[C_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{r*} EC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i*} ES(\alpha)) + D_{\alpha}^{*}(L_{\alpha k}^{i*} ES(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r*} EC(\alpha)) \right] EXPON6(\alpha) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{71}$$

Afin de traduire les équations (62) à (71) sous forme d'un système matriciel à coefficients réels, on effectue les remplacements suivants :

$$P_{\alpha k} = - \left[\lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha) + \lambda_{\alpha 2k}^{i+} AC(\alpha) \right] \cdot EXPON1(\alpha)$$

$$Q_{\alpha k} = \left[\lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) \right] \cdot EXPON1(\alpha)$$

$$R_{\alpha k} = - \left[\lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) \right] \cdot EXPON2(\alpha)$$

$$\begin{aligned}
S_{\alpha k} &= -\left[\lambda_{\alpha k}^{i+} \cdot AS(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{r+} \cdot AC(\alpha) \right] \cdot EXPON2(\alpha) \\
E_{\alpha k} &= \left[\lambda_{\alpha k}^{r*} \cdot BCS(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i*} \cdot BCC(\alpha) \right] \cdot EXPON4(\alpha) \\
F_{\alpha k} &= -\left[\lambda_{\alpha k}^{i*} \cdot BCS(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{r*} \cdot BCC(\alpha) \right] \cdot EXPON4(\alpha) \\
TT_{\alpha k} &= -\left[\lambda_{\alpha k}^{r*} \cdot BCS(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i*} \cdot BCC(\alpha) \right] \cdot EXPON3(\alpha) \\
\Pi_{\alpha k} &= -\left[\lambda_{\alpha k}^{i*} \cdot BCS(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{r*} \cdot BCC(\alpha) \right] \cdot EXPON3(\alpha) \\
G_{\alpha k} &= -\left[\lambda_{\alpha k}^{r+} \cdot AC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i+} \cdot AS(\alpha) \right] \cdot EXPON1(\alpha) \\
MH_{\alpha k} &= \left[\lambda_{\alpha k}^{i+} \cdot AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{r+} \cdot AS(\alpha) \right] \cdot EXPON1(\alpha) \\
I_{\alpha k} &= -\left[\lambda_{\alpha k}^{r+} \cdot AC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i+} \cdot AS(\alpha) \right] \cdot EXPON2(\alpha) \\
MK_{\alpha k} &= -\left[\lambda_{\alpha k}^{i+} \cdot AC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{r+} \cdot AS(\alpha) \right] \cdot EXPON2(\alpha) \\
LL_{\alpha k} &= \left[\lambda_{\alpha k}^{r*} \cdot BCC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i*} \cdot BCS(\alpha) \right] \cdot EXPON4(\alpha) \\
M_{\alpha k} &= \left[\lambda_{\alpha k}^{i*} \cdot BCC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{r*} \cdot BCS(\alpha) \right] \cdot EXPON4(\alpha) \\
HH_{\alpha k} &= -\left[\lambda_{\alpha k}^{r*} \cdot BCC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{i*} \cdot BCS(\alpha) \right] \cdot EXPON3(\alpha) \\
MM_{\alpha k} &= \left[\lambda_{\alpha k}^{i*} \cdot BCC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{r*} \cdot BCS(\alpha) \right] \cdot EXPON3(\alpha) \\
N_{\alpha k} &= -\left[L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AS(\alpha) \right] \cdot EXPON1(\alpha) \\
CC_{\alpha k} &= \left[L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AS(\alpha) \right] \cdot EXPON1(\alpha) \\
DD_{\alpha k} &= -\left[L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AS(\alpha) \right] \cdot EXPON2(\alpha) \\
BB_{\alpha k} &= -\left[L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AS(\alpha) \right] \cdot EXPON2(\alpha) \\
AA_{\alpha k} &= \left[L_{\alpha 2k}^{r*} \cdot BCC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i*} \cdot BCS(\alpha) \right] \cdot EXPON4(\alpha) \\
\\
T_{\alpha k} &= -\left[L_{\alpha 2k}^{i*} \cdot BCC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{r*} \cdot BCS(\alpha) \right] \cdot EXPON4(\alpha) \\
BM_{\alpha k} &= \left[L_{\alpha 2k}^{r*} \cdot BCC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i*} \cdot BCS(\alpha) \right] \cdot EXPON3(\alpha) \\
XX_{\alpha k} &= \left[L_{\alpha 2k}^{i*} \cdot BCC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r*} \cdot BCS(\alpha) \right] \cdot EXPON3(\alpha) \\
BC_{\alpha k} &= \left[L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AS(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AC(\alpha) \right] \cdot EXPON1(\alpha) \\
V_{\alpha k} &= -\left[L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AC(\alpha) \right] \cdot EXPON1(\alpha) \\
ZX_{\alpha k} &= \left[L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AC(\alpha) \right] \cdot EXPON2(\alpha) \\
W_{\alpha k} &= \left[L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AS(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AC(\alpha) \right] \cdot EXPON2(\alpha)
\end{aligned}$$

$$ZY_{ak} = -\left[L_{a2k}^{r*} \cdot BCS(\alpha) + L_{a2k}^{i*} \cdot BCC(\alpha) \right] \cdot EXPON4(\alpha)$$

$$J_{ak} = -\left[L_{a2k}^{i*} \cdot BCS(\alpha) - L_{a2k}^{r*} \cdot BCC(\alpha) \right] \cdot EXPON4(\alpha)$$

$$MD_{ak} = \left[L_{a2k}^{i*} \cdot BCC(\alpha) - L_{a2k}^{r*} \cdot BCS(\alpha) \right] \cdot EXPON3(\alpha)$$

$$BR_{ak} = \left[L_{a2k}^{i*} \cdot BCS(\alpha) - L_{a2k}^{r*} \cdot BCC(\alpha) \right] \cdot EXPON3(\alpha)$$

$$ZZ_{ak} = \left[L_{a2k}^{r*} \cdot EC(\alpha) - L_{a2k}^{i*} \cdot ES(\alpha) \right] \cdot EXPON5(\alpha)$$

$$WW_{ak} = -\left[L_{a2k}^{i*} \cdot EC(\alpha) + L_{a2k}^{r*} \cdot ES(\alpha) \right] \cdot EXPON5(\alpha)$$

$$RR_{ak} = \left[L_{a2k}^{r*} \cdot EC(\alpha) + L_{a2k}^{i*} \cdot ES(\alpha) \right] \cdot EXPON6(\alpha)$$

$$QQ_{ak} = \left[L_{a2k}^{i*} \cdot EC(\alpha) - L_{a2k}^{r*} \cdot ES(\alpha) \right] \cdot EXPON6(\alpha)$$

$$YY_{ak} = \left[L_{a2k}^{r*} \cdot ES(\alpha) - L_{a2k}^{i*} \cdot EC(\alpha) \right] \cdot EXPON5(\alpha)$$

$$JJ_{ak} = \left[L_{a2k}^{i*} \cdot ES(\alpha) - L_{a2k}^{r*} \cdot EC(\alpha) \right] \cdot EXPON5(\alpha)$$

$$VV_{ak} = -\left[L_{a2k}^{r*} \cdot ES(\alpha) - L_{a2k}^{i*} \cdot EC(\alpha) \right] \cdot EXPON6(\alpha)$$

$$NN_{ak} = \left[L_{a2k}^{i*} \cdot ES(\alpha) - L_{a2k}^{r*} \cdot EC(\alpha) \right] \cdot EXPON6(\alpha)$$

En fin la matrice globale ainsi obtenue aura la taille 30x30 et contiendra 900 termes et s'écrit d'une manière explicite comme suit:

Chapitre III

Applications Numériques

III.1. Organigramme de calcul	34
III.2. Etapes de calcul du programme	34
III.3. Matériaux utilisés	37
III.4. Calcul d'erreur à l'interface	38
III.5. Champ des déplacements	40
III.5.1. Influence de la variation de l'épaisseur de la couche intermédiaire sur la déformation de la couche capot.....	41
III.5.2. Comparaison et interprétation des résultats	47
III.5.3. Influence de la variation de l'épaisseur de la couche capot sur la déformation de la couche intermédiaire	50
III.5.4. Comparaison avec les résultats obtenus en élasticité isotrope	51
III.6. Evolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} dans le composite en fonction de x_2	55
III.6.1. Effet de l'Hétérogénéité du matériau	58
III.6.2. Effet de l'épaisseur de la couche capot	59
III.6.3. Effet de l'anisotropie.....	60
IV.7. Cas des iso-contraintes	66
III.8. Champs de déformation au voisinage d'une seule dislocation du réseau	65



III.1. Organigramme de calcul:

Nous commençons par la présentation en premier lieu d'un organigramme montrant l'essentiel des étapes de calcul effectuées par le programme que nous avons élaboré, suivi d'un calcul d'erreur à l'interface, ensuite nous exposons les résultats en déplacements et en contraintes obtenus pour chaque type de défaut.

III.2. Etapes de calcul du programme:

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

1°/ détermination de la matrice de passage du système du cristal au système de travail présenté dans le chapitre II pour que Ox_2 soit perpendiculaire aux plans réticulaires qui constituent l'interface des deux cristaux.

2°/ exprimer les constantes élastiques C_{ij} de chaque cristal dans le repère de travail.

3°/ calculer les parties réelles et les parties imaginaires des six racines complexes p_α du polynôme du sixième degré obtenu en combinant la loi de Hooke et la condition d'équilibre que doit vérifier le système étudié. Pour chaque p_α , le programme calcule aussi les constantes complexes " $\lambda_{\alpha k}$ " ($k = 1, 3$) et en déduit les " $L_{\alpha j l}$ " qui sont des constantes complexes. Ce calcul se fait pour chaque cristal.

4°/ l'inversion numérique d'un système de 30 équations à 30 inconnues réelles, obtenu à partir des conditions aux limites, permet le calcul des constantes inconnues.

5°/ la re-injection de ces constantes dans les équations des conditions aux limites permet de s'assurer de la validité des calculs.

6°/ les constantes ainsi calculées sont injectées dans l'expression des déplacements pour calculer:

a/ l'erreur relative à l'interface ($x_2 = 0$).

b/ l'évolution du déplacement relatif Δu à l'interface en fonction de x_1 ($x_2 = 0$).

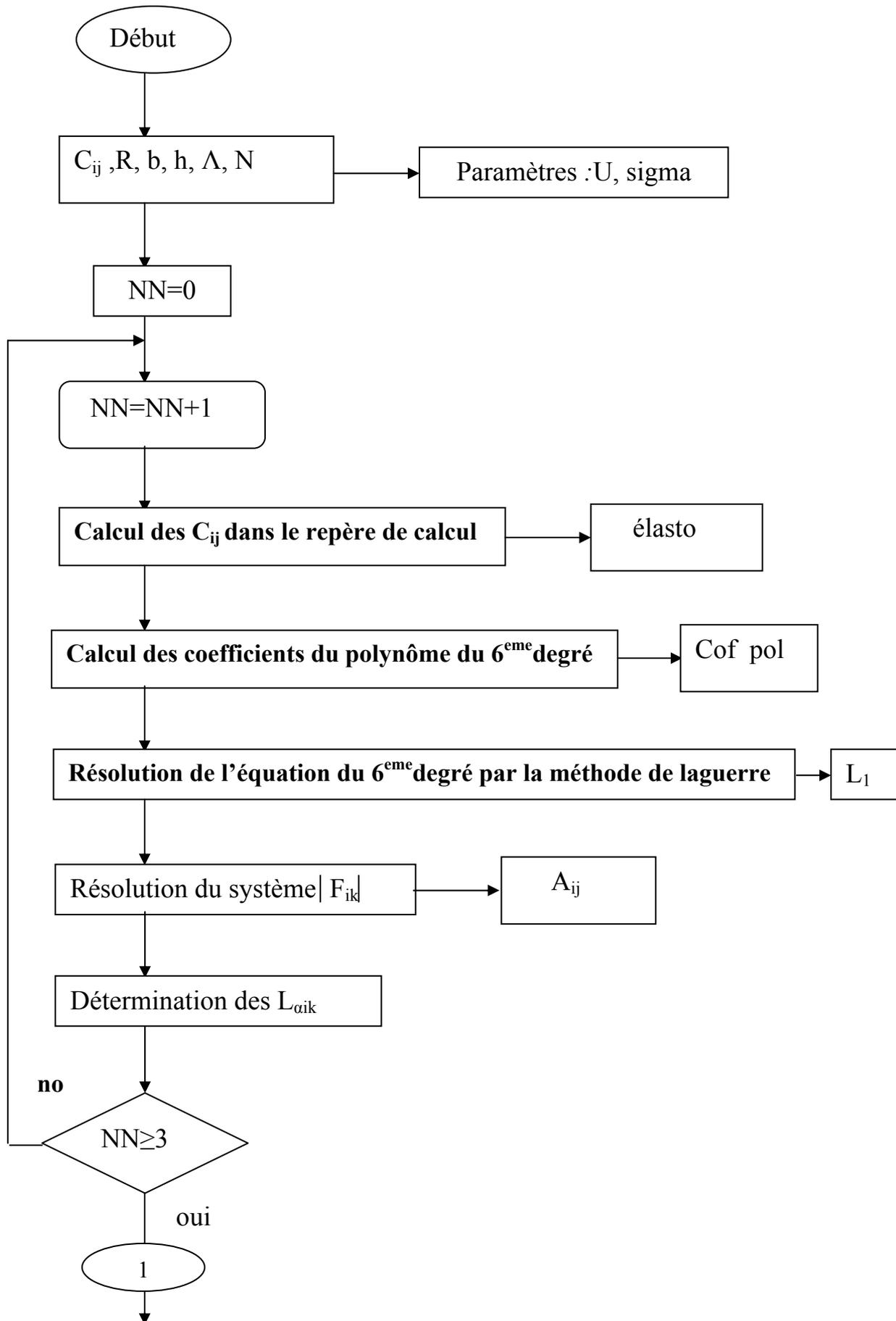
c/ le déplacement des unités structurales autour du réseau de dislocations dans un

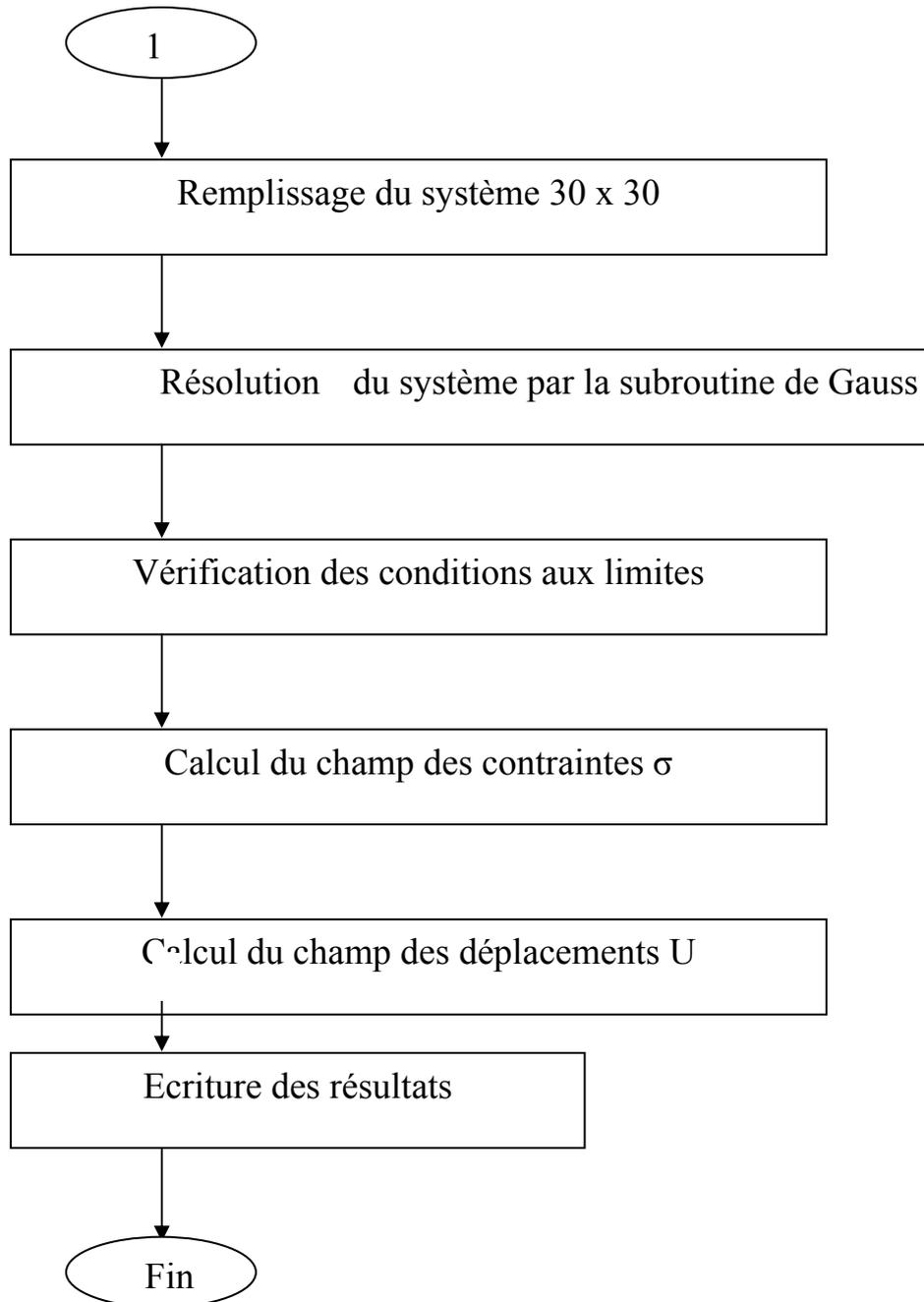
plan (x_1, x_2) pour différentes orientations du défaut.

7°/ à partir de la loi de Hooke et en connaissant le champ des déplacements, le programme permet aussi de calculer:

a/ l'évolution des contraintes en fonction de x_2

b/ la dispersion des iso-contraintes dans le plan (x_1, x_2)





III.3. Matériaux utilisés :

Aujourd'hui, les hétéro jonctions ou les hétéro structures semi-conductrices sont au premier plan de la technologie moderne; chaque jour des composants à semi-conducteurs de plus en plus performants, tels que les diodes, thyristors, transistors; sont mis au point

contribuant aux résultats spectaculaires dans divers domaines d'applications tel que : l'espace, l'informatique, la médecine, les télécommunications, la navigation, l'audiovisuel, ...etc.

Obtenu généralement par la croissance épitaxiale d'un semi-conducteur sur un autre, une hétéro jonction peut être définie comme étant le contact ou la jonction entre ces semi-conducteurs de nature et de largeur de bande interdite différente dans le but d'associer leurs propriétés spécifiques (propriétés électriques et optoélectroniques).

Dans notre travail, nous nous sommes basé sur le matériau à trois couches NiSi₂/Si/GaAs qui a fait l'objet de plusieurs études dans l'approximation d'une élasticité isotrope notamment celles de R. Bonnet [13].

Le silicium (Si) possède d'indéniables qualités liées à certaines de ses propriétés physiques (mécanique, thermique, aptitude à l'oxydation...) et un avantage économique incontestable. Cependant il présente des désavantages en regard de certaines performances désormais requises par les électroniciens et les technologues. Parmi elles, la mobilité médiocre des électrons le pénalise dans la course aux circuits électroniques ultrarapides et sa bande interdite indirecte lui interdit l'accès au domaine des composants optiques. Par contre le GaAs possède une bande interdite directe qui permet la réalisation de composants électro-optiques (diodes électroluminescentes, lasers, photo détecteurs,...) avec une excellente mobilité des électrons. Cependant les propriétés physiques sont médiocres et son élaboration est coûteuse. L'hétéro interface Si/(001)GaAs est souvent observée dans le domaine de la microscopie [32]. De même le NiSi₂ utilisé comme couche épitaxiale dans la technologie électronique offre les caractéristiques électriques requises pour ce type de technologie à savoir surtout sa bonne conductibilité [33].

Donc, l'association des trois semi-conducteurs c'est à dire l'hétéro jonction NiSi₂/Si/GaAs, permet de surmonter les problèmes difficiles à résoudre avec un seul ou deux matériaux.

Les trois axes du repère cartésien sont dans l'ordre parallèles aux vecteurs de bases : [010], [001], [100] des trois cristaux. Les paramètres de mailles du silicium et du GaAs sont respectivement $a_{Si} = 0,5428$ nm et $a_{GaAs} = 0,5653$ nm [34,35], le vecteur de Burgers correspond à $b = (a_{Si} + a_{GaAs}) / 2 \cdot 2^{1/2}$ [001] et la période du réseau étant $\Lambda = a_{Si} \cdot a_{GaAs} / (a_{GaAs} - a_{Si}) \cdot 2^{1/2} = 9.64$ nm [5].

Les constantes d'élasticité anisotropes sont données par [5, 36] et valent (en GPa)

-Pour NiSi ₂	$C_{11} = 228.0,$	$C_{12} = 140.0,$	$C_{44} = 83.0$
- Pour Si	$C_{11} = 165.7,$	$C_{12} = 63.9,$	$C_{44} = 79.6$
- Pour GaAs	$C_{11} = 118.0,$	$C_{12} = 53.5,$	$C_{44} = 59.4$

Les valeurs du facteur d'anisotropie de Zener [37] sont :

$$A = \frac{2 \cdot C_{44}}{C_{11} - C_{12}} = 1.56 \quad \text{pour Si,} \quad 1.84 \quad \text{pour GaAs} \quad \text{et } 1.88 \quad \text{pour NiSi}_2 .$$

III.4. Calcul d'erreur à l'interface:

Pour examiner la précision des calculs effectués par le programme et limité le nombre d'harmoniques utilisé dans les séries de Fourier, nous avons tracé les courbes des déplacements relatifs en fonction de x_1 ($\Delta u = f(x_1)$) qui correspondent d'une part à

l'expression analytique :

$$|u_k^+ - u_k^-|_{x_2=0} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-b_k}{\pi n} \right) \sin\left(\frac{2\pi n x_1}{\Lambda} \right)$$

(1)

Et d'autre part : aux résultats donnés par le programme dans le cas d'un matériau tricouches NiSi₂/Si/GaAs pour différentes valeurs du nombre d'harmoniques n ($n = 20, 40, 60$ et 100).

La figure (III.1) obtenue ci-dessous montre bien qu'en augmentant le nombre d'harmoniques n , les courbes deviennent de plus en plus rectilignes et sont parfaitement superposables 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 $x_1 = 9.64$ nm correspondant à une période.

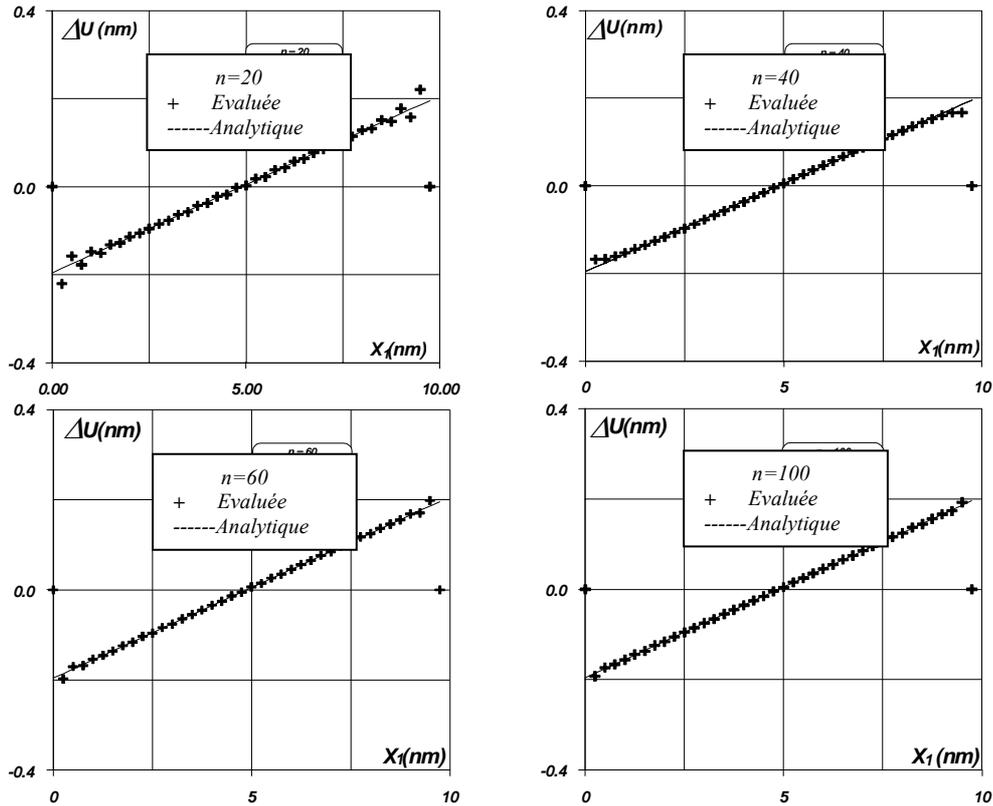


Figure.III.1. Représentation du déplacement relatif interfacial pour différentes valeurs de n .

Il est à noter que la comparaison entre les deux courbes doit se faire loin des cœurs des dislocations pour lesquels les valeurs de Δu obtenus à partir du programme divergent, ceci est en accord avec la théorie puisqu'en se rapprochant du cœur de la dislocation (grande déformation) il y'a discontinuité des propriétés élastiques c'est à dire on ne peut appliquer la théorie d'élasticité. En réalité les calculs effectués près de la dislocation, ne permettent pas de donner de bons résultats par suite de la convergence très lente des séries

Cependant en s'éloignant de quelques b de chaque dislocation, la convergence se fait de façon nettement meilleure.

Aussi pour $x_1 = 5b$, l'erreur relative définie par :

$$\Delta R = \left| (\Delta u_{\text{programme}} - \Delta u_{\text{exp. analytique}}) / \Delta u_{\text{exp. analytique}} \right| \quad \text{est estimée à 3.3 \%}$$

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.

III.5. Champ des déplacements:

On présente dans ce qui suit les résultats obtenus dans le cas d'un matériau tricouches NiSi₂/Si/GaAs tel que le long de l'hétéro interface ($x_2 = 0$) se trouve une série périodique de dislocations intrinsèques espacées d'une distance $\ll \Lambda \gg$ (période) et qui produisent dans chaque milieu des déplacements u_k et des contraintes σ_{ij} . Nous utilisons les conventions et les symboles de R. Bonnet et Col [36].

La figure (III.2) présente l'état initial (sans défaut) des unités structurales dans le plan (x_1, x_2). Les points sont tous équidistants et séparés par une distance de 0.5 nm (pas=0.5), les deux hétéro interfaces ($x_2 = 0$ et $x_2 = h^+$) non déformées, ainsi que la surface libre ($x_2 = h^*$) sont représentées par les lignes horizontales.

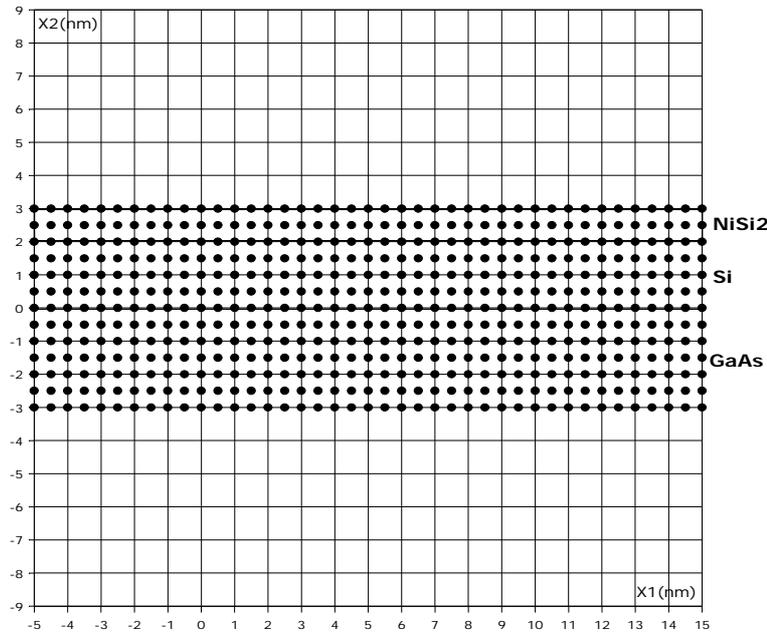


Figure III.2. Etat initial des unités structurales (sans défauts) représenté dans le plan (x_1, x_2)

Après introduction à l'origine du système Ox_1x_2 d'un réseau de dislocations coin, les résultats présentés ci-dessous correspondent au cas d'une couche mince de Si, prise en sandwich entre un substrat de GaAs et une autre couche de NiSi₂.

Notons que pour mieux montrer les déformations du matériau tricouches, les déplacements u_k ont été multipliés en chaque point par 10.

III.5.1. Influence de la variation de l'épaisseur de la couche intermédiaire sur la déformation de la couche capot :

Les figures (III.3) à (III.14) montrent le champ de déplacement dans un plan (x_1 , x_2) pour différentes épaisseurs de la couche intermédiaire h^+ sous l'effet d'un réseau de dislocations coin inter faciales avec un vecteur de burgers b parallèle en premier lieu à Ox_1 et ensuite parallèle à Ox_2 .

En effet, en fixant l'épaisseur de la couche capot (h^*-h^+) et en variant l'épaisseur de la couche intermédiaire du cristal (+), on obtient les résultats suivants :

1^{er} Cas $b//Ox_1$

Pour $h^*-h^+=1$ nm et $h^+=2$ nm

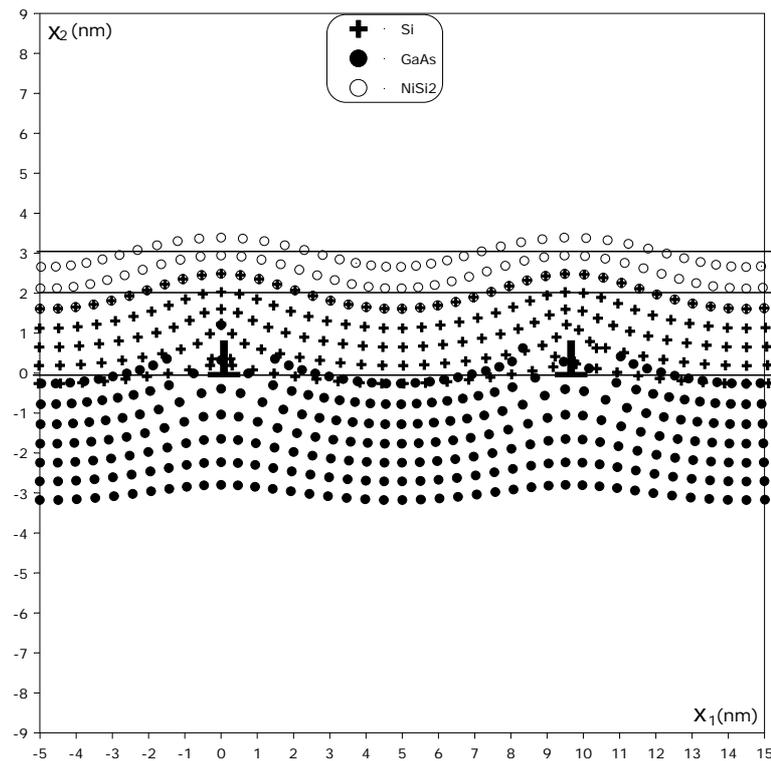


Figure III.3. Schéma illustrant les champs des déplacements du matériau tricouche $NiSi_2/Si/GaAs$ sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

Pour $h^*-h^+=1$ nm et $h^+=4$ nm

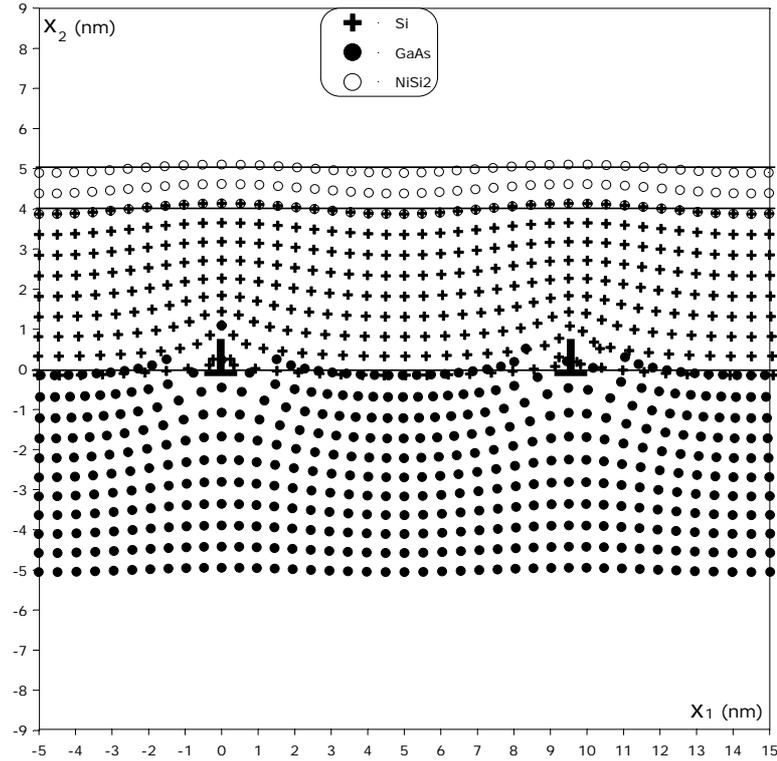


Figure III.4. Schéma illustrant les champs des déplacements du matériau tricouche $NiSi_2/Si/GaAs$ sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

Pour $h^*-h^+=1$ nm et $h^+=6$ nm

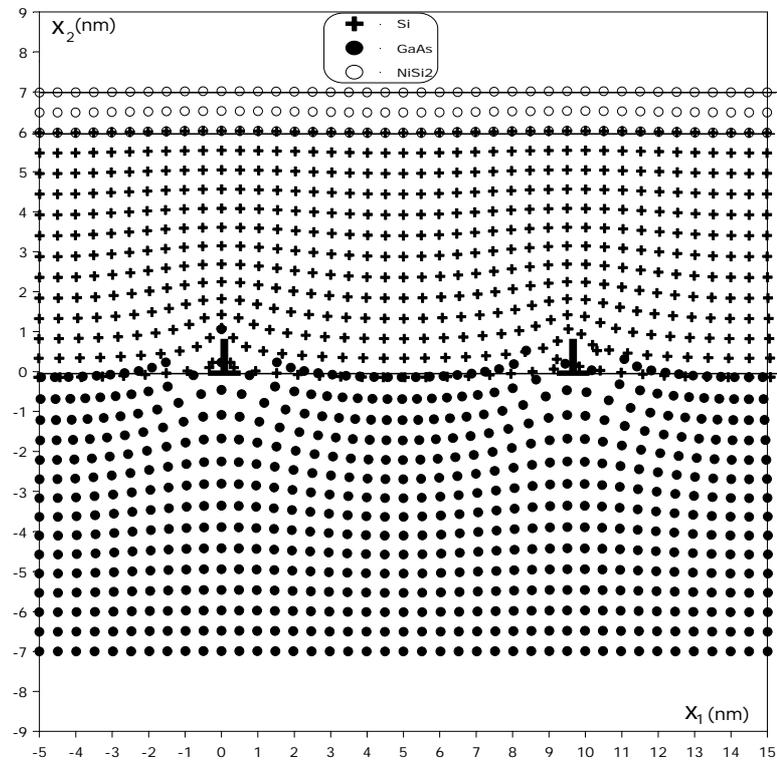


Figure III.5. Schéma illustrant les champs des déplacements du matériau tricouche $NiSi_2/Si/GaAs$ sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

Pour $h^*-h^+=2$ nm et $h^+=2$ nm

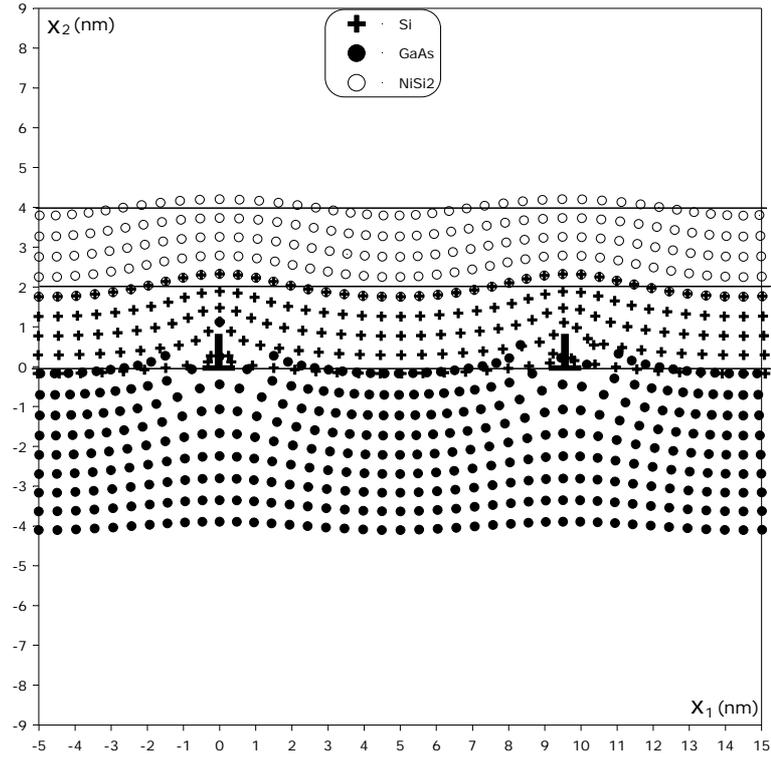


Figure III.6. Schéma illustrant les champs des déplacements du matériau tricouches $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$ sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

Pour $h^*-h^+=2$ nm et $h^+=4$ nm

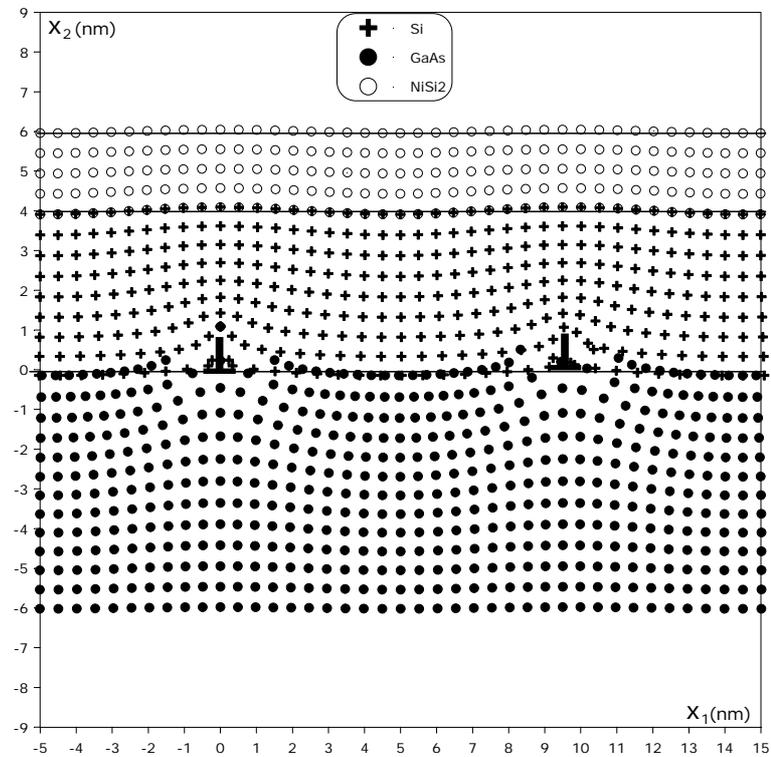


Figure III.7. Schéma illustrant les champs des déplacements du matériau tricouches $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$ sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

Pour $h^*-h^+=2$ nm et $h^+=6$ nm

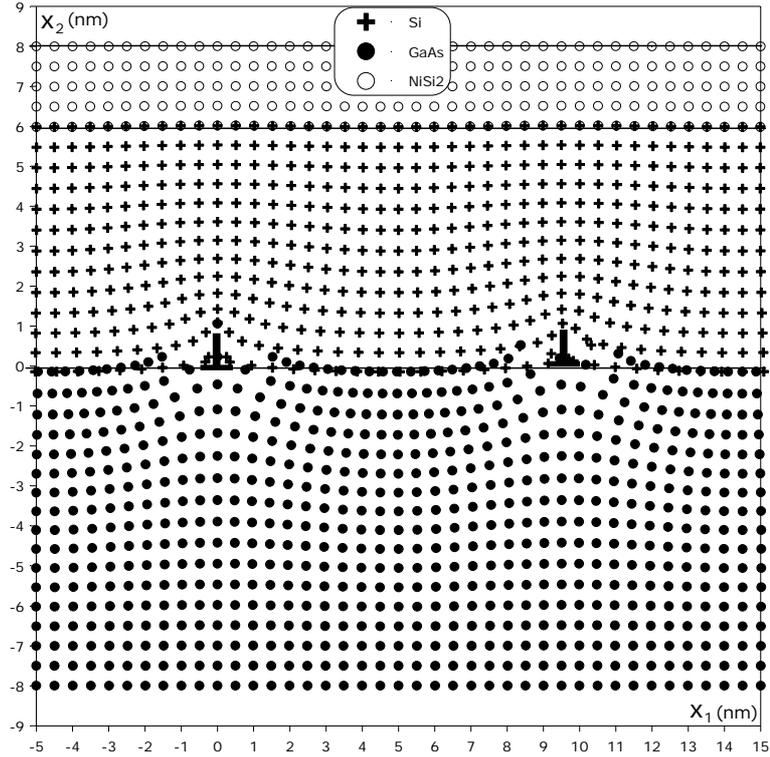


Figure III.8. Schéma illustrant les champs des déplacements du matériau tricouche $NiSi_2/Si/GaAs$ sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

2^{ème} Cas $b//Ox_2$

Pour $h^*-h^+=1$ nm et $h^+=2$ nm

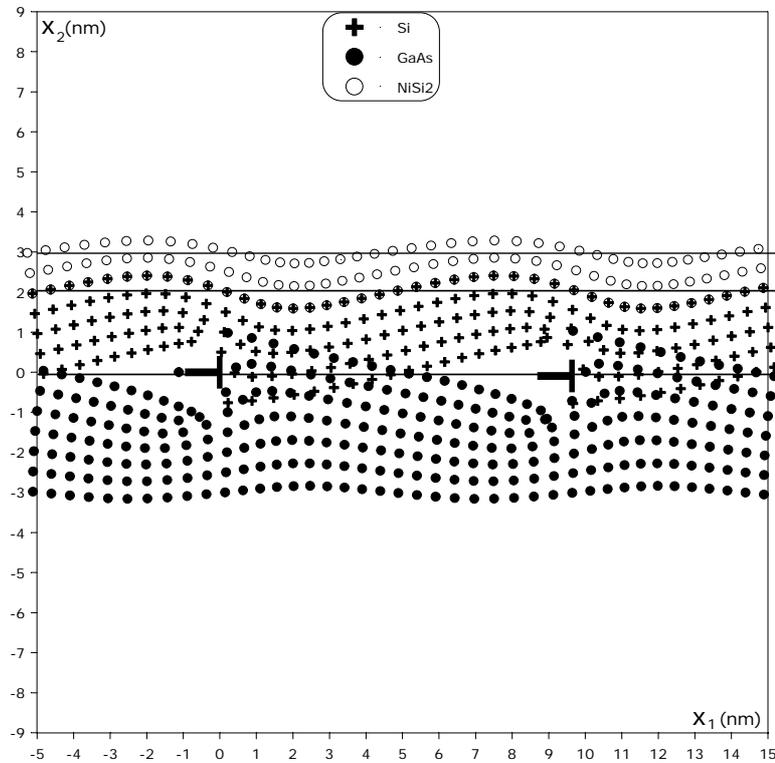


Figure III.9. Schéma illustrant les champs des déplacements du matériau tricouche $NiSi_2/Si/GaAs$ sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_2$

Pour $h^*-h^+=1$ nm et $h^+=4$ nm

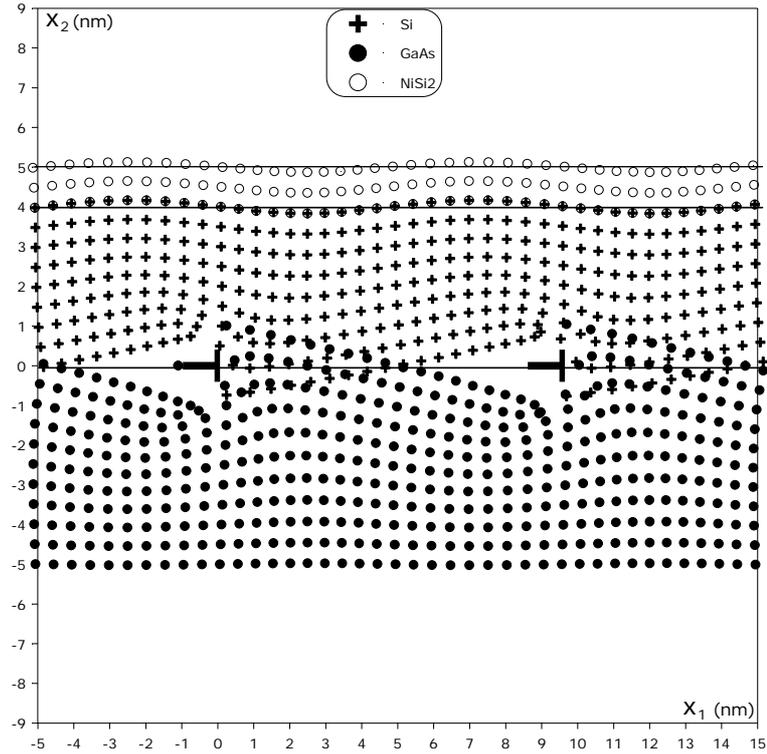


Figure III.10. Schéma illustrant les champs des déplacements du matériau tricouche $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$ sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_2$

Pour $h^*-h^+=1$ nm et $h^+=6$ nm

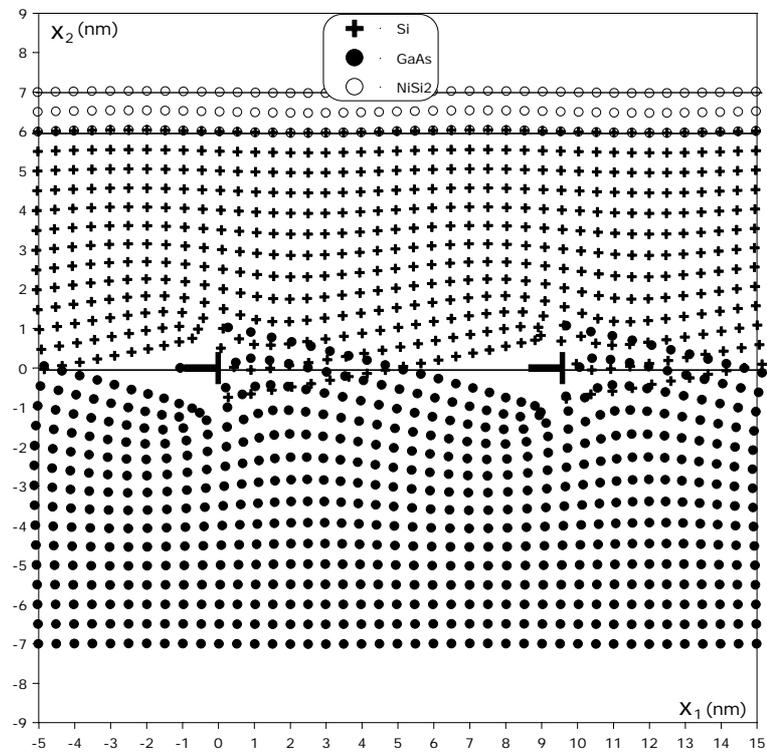


Figure III.11. Schéma illustrant les champs des déplacements du matériau tricouche $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$ sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_2$

Pour $h^* - h^+ = 2$ nm et $h^+ = 2$ nm

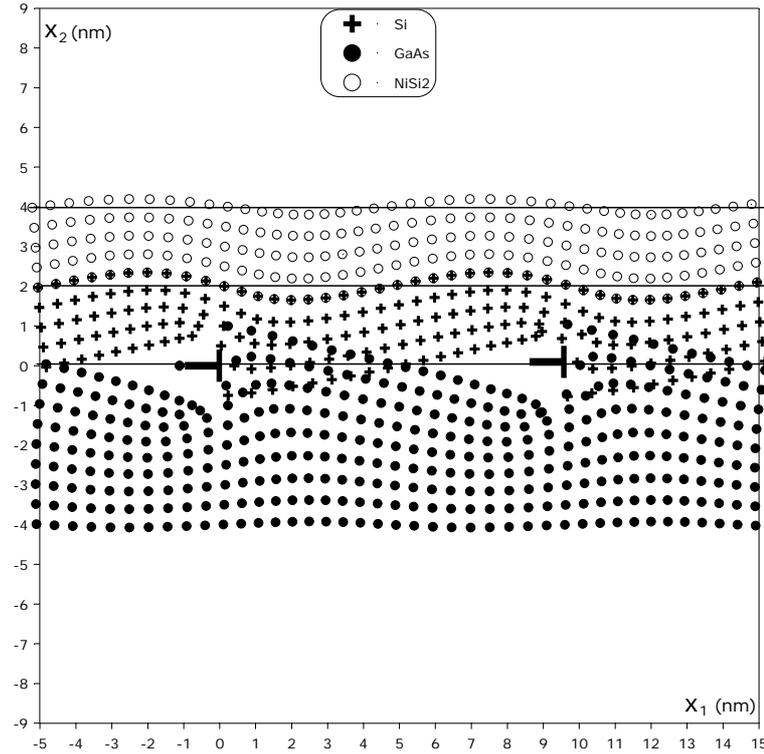


Figure III.12. Schéma illustrant les champs des déplacements du matériau tricouche $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$ sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_2$

Pour $h^* - h^+ = 2$ nm et $h^+ = 4$ nm

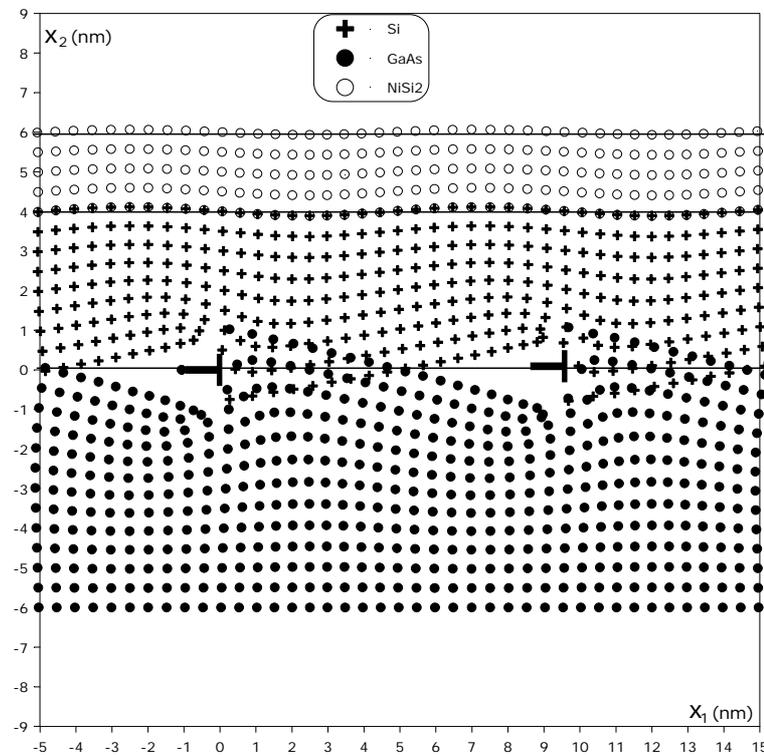


Figure III.13. Schéma illustrant les champs des déplacements du matériau tricouche $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$ sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_2$

Pour $h^* - h^+ = 2 \text{ nm}$ et $h^+ = 6 \text{ nm}$

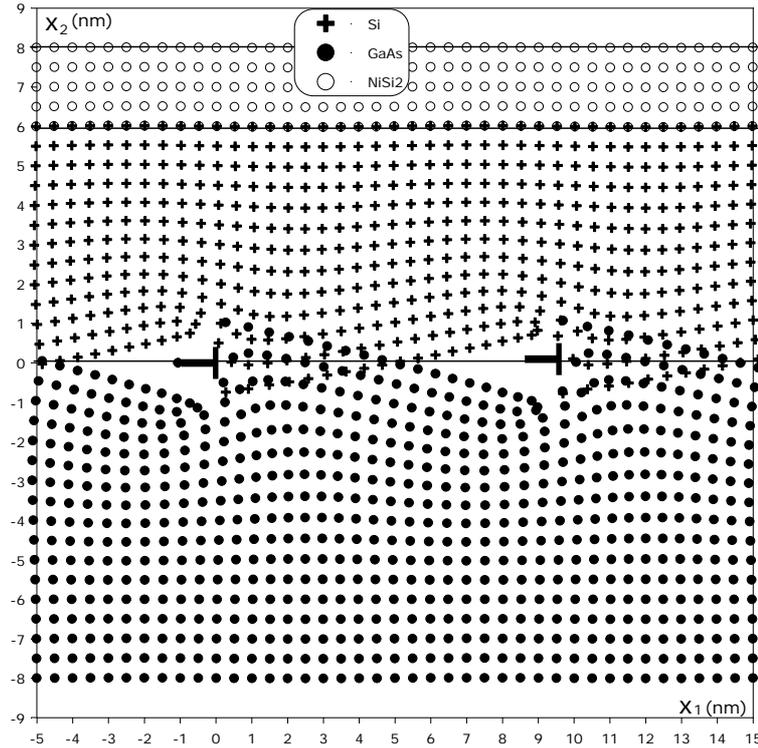


Figure III.14. Schéma illustrant les champs des déplacements du matériau tricouche $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$ sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_2$

III.5.2. Comparaison et interprétation des résultats :

Les figures (III.15) à (III.18) représentent l'état de la couche capot après superposition des courbes obtenues pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche intermédiaire h^+ .

L'évolution des unités structurales des champs des déplacements autour et entre deux dislocations montre que :

1. Plus l'épaisseur de la couche intermédiaire est petite, plus la déformation du composite est grande surtout à l'aplomb des cœurs des dislocations.
2. Pour les couches intermédiaires d'épaisseurs relativement petites, les extremums de déformations élastiques des unités structurales sont nettement visibles.
3. Les quatre facteurs essentiels qui contrôlent le déplacement des unités structurales sont : Le vecteur de burgers b , la période du réseau, les constantes C_{ij} et la hauteur choisie.

Pour $h^*-h^+=1$ nm, $h^+=2,4$ et 6 nm et $b//Ox_1$

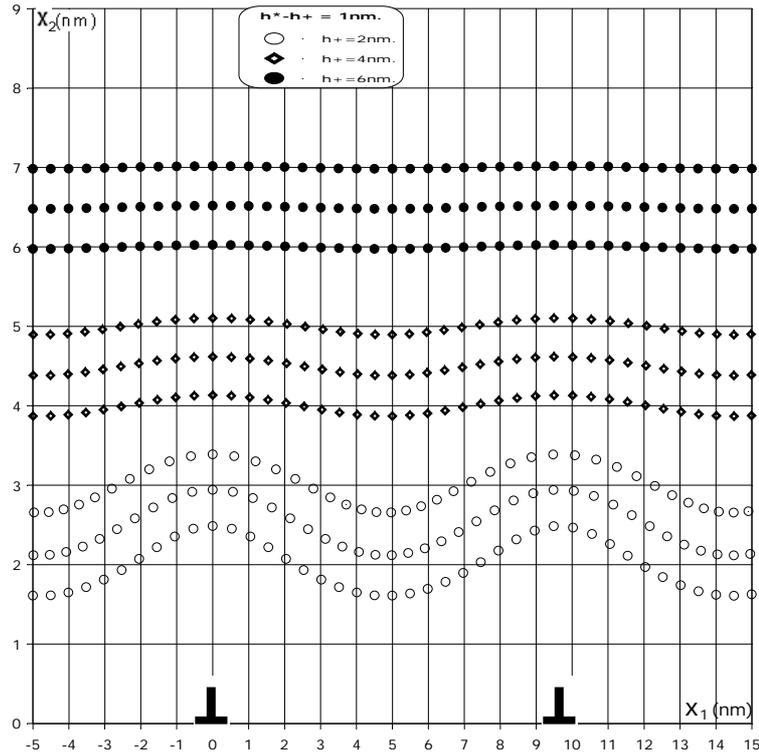


Figure III.15. superposition des différentes courbes obtenues pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche intermédiaire $h^+=2, 4$ et 6 nm, matériau tricouches $NiSi_2/si/GaAs$, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

Pour $h^*-h^+=2$ nm, $h^+=2$ et 6 nm et $b//Ox_1$

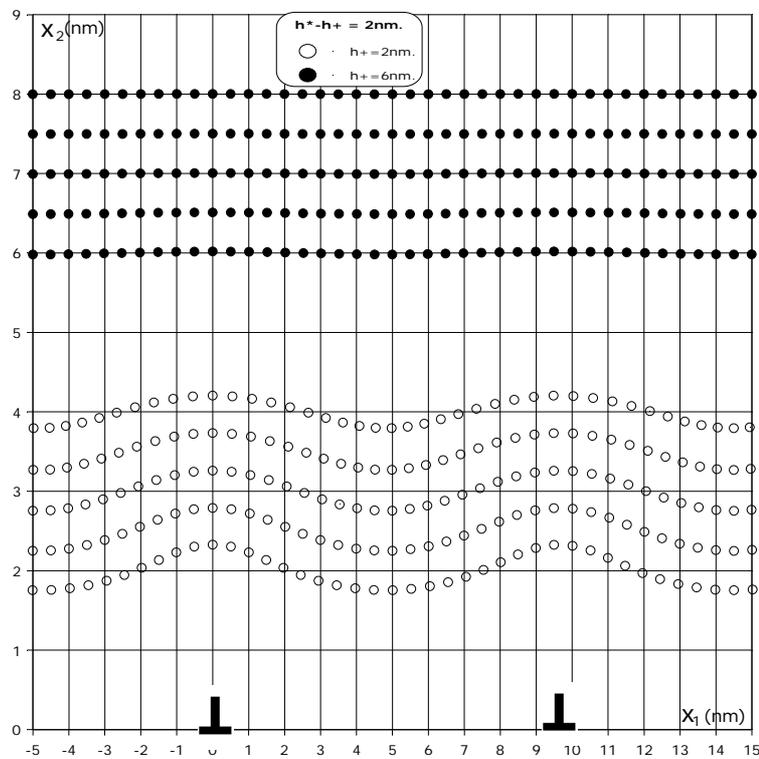


Figure III.16. Aspect des surfaces libres déformées du matériaux tricouches $NiSi_2/Si/GaAs$ pour différentes épaisseurs $h^+=2$ et 6 nm, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

Pour $h^*-h^+=1$ nm, $h^+=2, 4$ et 6 nm et $b//Ox_2$

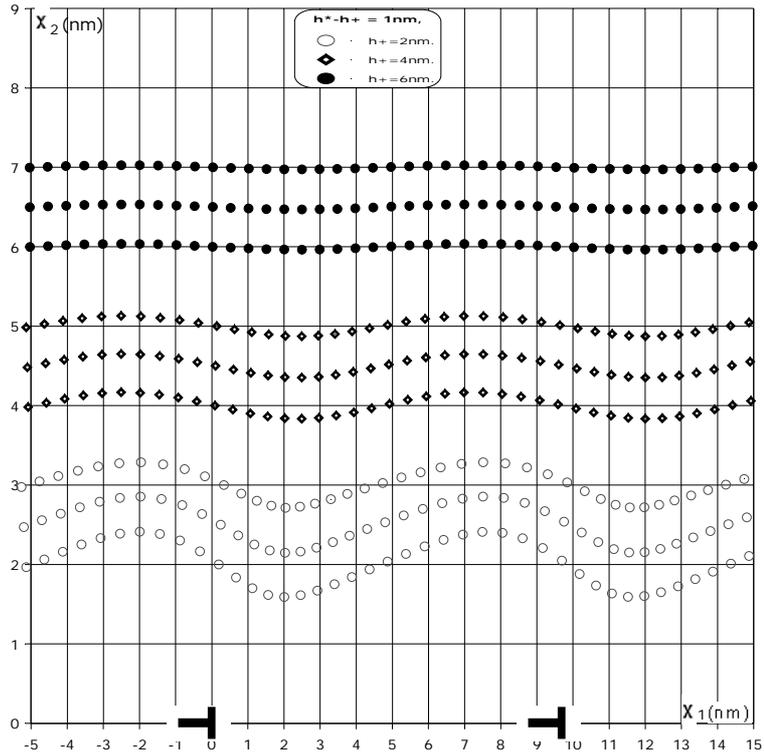


Figure III.17. Aspect des surfaces libres déformées du matériaux tricouches $NiSi_2/Si/GaAs$ pour différentes épaisseurs $h^+=2, 4$ et 6 nm, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_2$

Pour $h^*-h^+=2$ nm, $h^+=2$ et 6 nm et $b//Ox_2$

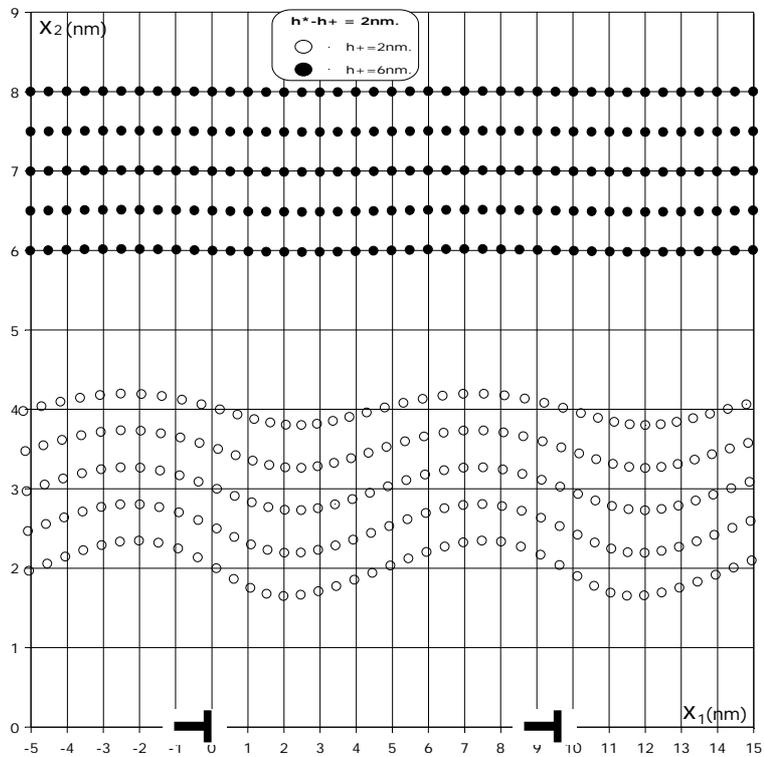


Figure III.18. Aspect des surfaces libres déformées du matériaux tricouches $NiSi_2/Si/GaAs$ pour différentes épaisseurs $h^+=2$ et 6 nm, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_2$

III.5.3. Influence de la variation de l'épaisseur de la couche capot sur la déformation de la couche intermédiaire :

Pour $h^+ = 2$ nm, $h^* - h^+ = 1$ et 2 nm et $b // Ox_1$

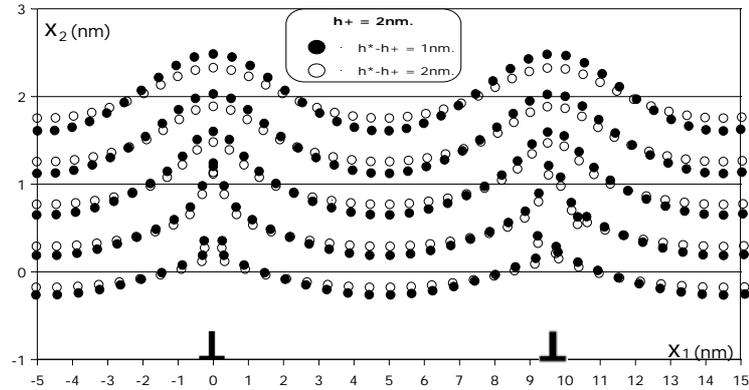


Figure III.19. Superposition de deux courbes de déplacements de la couche intermédiaire, matériau tricouches $NiSi_2/Si/GaAs$, C_{ij} anisotropes, $(h^* - h^+) = 1$ et 2nm, $b // Ox_1$

Pour $h^+ = 4$ nm, $h^* - h^+ = 1$ et 2 nm et $b // Ox_1$

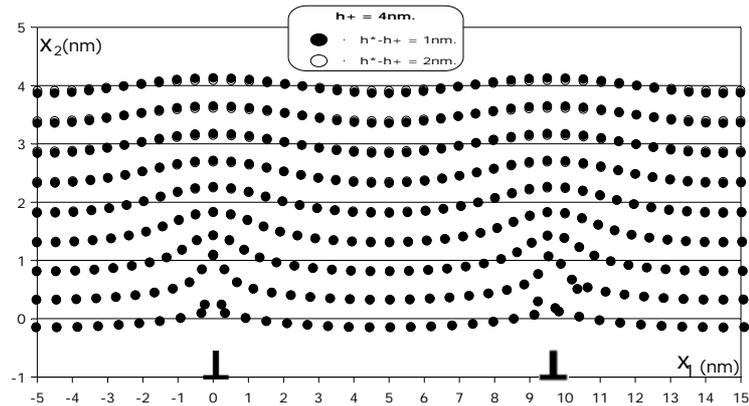


Figure III.20. Superposition de deux courbes de déplacements de la couche intermédiaire, matériau tricouches $NiSi_2/Si/GaAs$, C_{ij} anisotropes, $(h^* - h^+) = 1$ et 2nm, $b // Ox_1$

Pour $h^+ = 6$ nm, $h^* - h^+ = 1$ et 2 nm et $b // Ox_1$

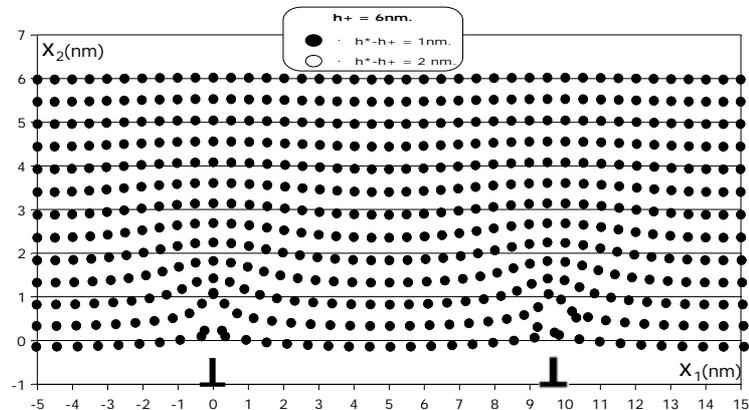


Figure III.21. Superposition de deux courbes de déplacements de la couche intermédiaire, matériau tricouches $NiSi_2/Si/GaAs$, C_{ij} anisotropes, $(h^* - h^+) = 1$ et 2nm, $b // Ox_1$

Sur ces figures (III.19, 20 et 21) les remarques suivantes peuvent être faites :

1. Au dessus des cœurs dislocations, les deux couches, capot et intermédiaire, sont en compression ce qui se traduit par une élévation de cette zone, comme si les demi-plans supplémentaires avaient tendance à être éjecté. Cette élévation est d'autant plus grande que l'épaisseur de la couche capot est faible.
2. La zone située entre deux dislocation est en traction, cela se manifeste par un affaissement de plus en plus grand que l'épaisseur de la couche capot est petite.
3. Si l'épaisseur de la couche intermédiaire dépasse une certaine valeur (dans notre cas $h^+=4\text{nm}$) la variation de l'épaisseur de la couche capot n'influe presque plus sur la déformation.

III.5.4.Comparaison avec les résultats obtenus en élasticité isotrope:

La confirmation de nos résultats obtenus en élasticité anisotrope est tributaire de la validité de notre programme. En effet en remplaçant dans notre programme les C_{ij} par des valeurs quasi-isotropes et les racines p_α du polynôme par des valeurs proches de $\pm iG$ correspondant au cas isotrope (Bonnet et col [12]), le programme permet de retrouver les résultats en déplacement et en contraintes obtenus dans le cas isotrope.

Les C_{ij} isotropes sont calculées par les formules classiques d'élasticité (Hirth et col.,1982 [38])

$$C_{11} = \lambda + 2\mu \quad ; \quad C_{12} = \lambda \quad ; \quad C_{44} = \mu \quad \text{et} \quad \lambda = \frac{2 \nu \mu}{1 - 2 \nu}$$

(1)

Où λ et μ sont les coefficients de lamé et ν le coefficient de poisson.

Pour les applications numériques les valeurs des constantes C_{11} et C_{12} utilisées sont égales aux valeurs isotropes calculées à partir de (1), cependant C_{44} est choisie égale à $(\mu - \mu / 1000)$. Les racines du polynôme choisies sont $p_\alpha = 10^{-14} \pm iG$.

En se limitant au matériau à trois couches NiSi₂/Si/GaAs, pour les deux directions du vecteur de Burgers ($b// O_x1$; $b// O_x2$) et en superposant les courbes du cas anisotrope avec ceux du cas quasi-isotrope, les résultats ci-dessous sont obtenus :

Pour $h^*-h^+=1$ nm, $h^+=2,4$ et 6 nm et $b//Ox_1$

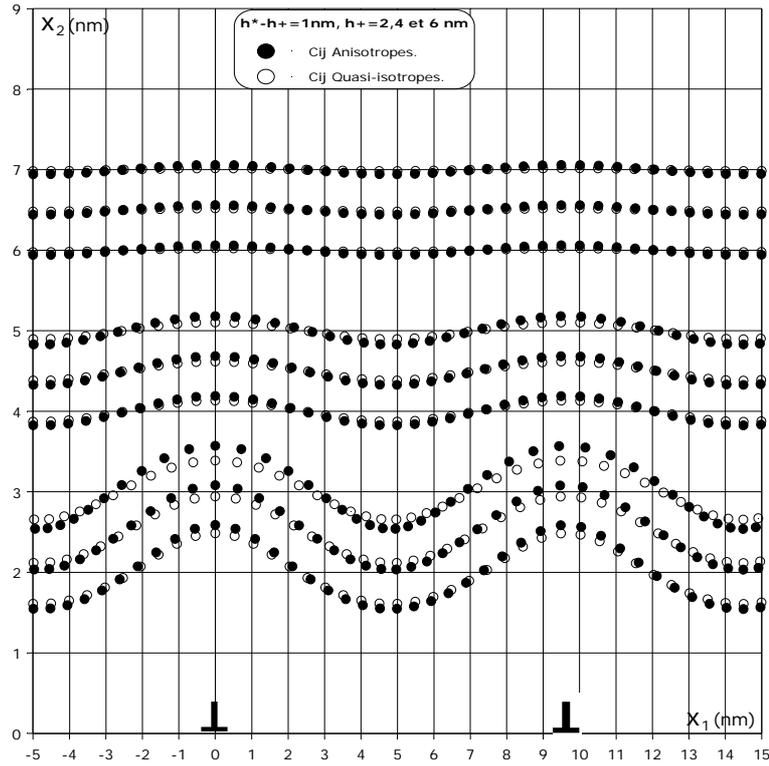


Figure III.22. Superposition des champs des déplacements, C_{ij} anisotropes et C_{ij} quasi-isotropes du matériau tricouches $NiSi_2/Si/GaAs$, sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, $b//Ox_1$

Pour $h^*-h^+=2$ nm, $h^+=2$ et 6 nm et $b//Ox_1$

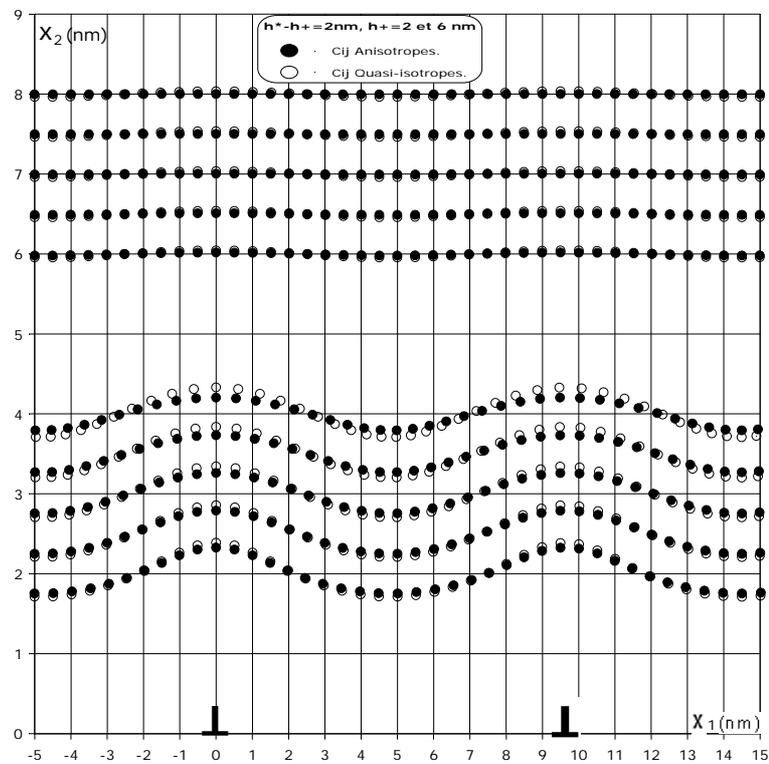


Figure III.23. Superposition des champs des déplacements, C_{ij} anisotropes et C_{ij} quasi-isotropes du matériau tricouches $NiSi_2/Si/GaAs$, sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, $b//Ox_1$

Pour $h^*-h^+=1$ nm, $h^+=2,4$ et 6 nm et $b//Ox_2$

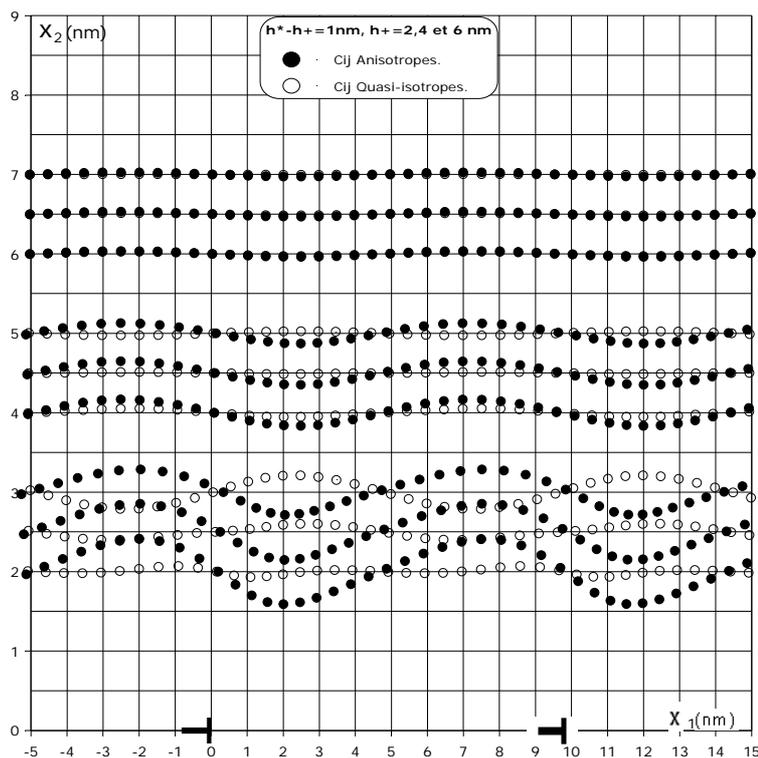


Figure III.24. Superposition des champs des déplacements, Cij anisotropes et Cij quasi-isotropes du matériau tricouches NiSi₂/Si/GaAs, sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, $b//Ox_2$

Pour $h^*-h^+=2$ nm, $h^+=2$ et 6 nm et $b//Ox_2$

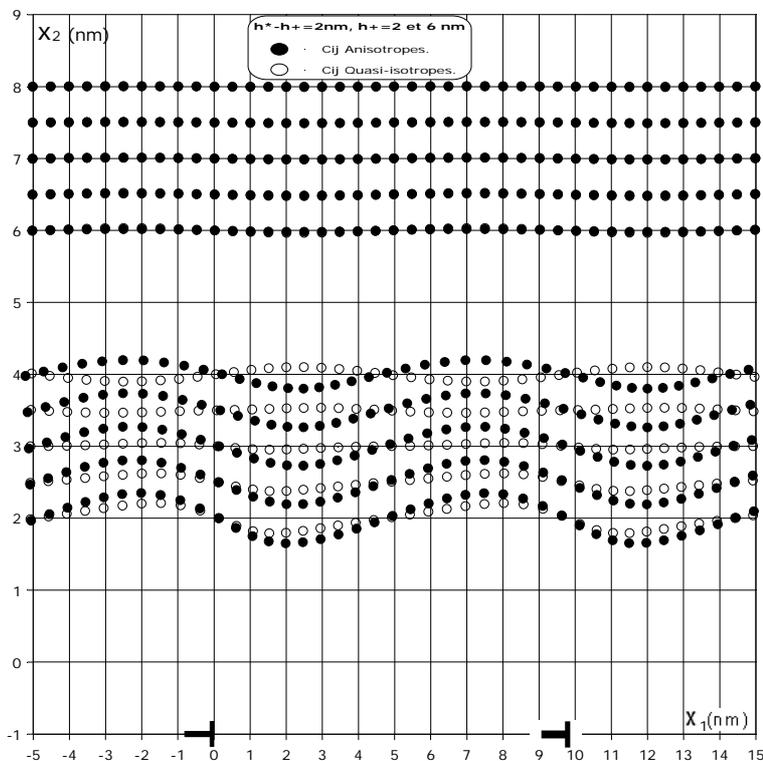


Figure III.25. Superposition des champs des déplacements, Cij anisotropes et Cij quasi-isotropes du matériau tricouches NiSi₂/Si/GaAs, sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales, $b//Ox_2$

En comparant les résultats obtenus pour le cas anisotrope avec le cas quasi-isotrope figures (III.22) à (III.25), on remarque :

1. Pour les couches intermédiaires relativement épaisses ($h^+=4\text{nm}$ et plus), les déplacements dans le cas anisotrope sont sensiblement superposables à ceux obtenus dans le cas quasi-isotrope.
2. La divergence des champs de déplacement est beaucoup plus nette pour les faibles épaisseurs, en effet pour une épaisseur de la couche capot (h^*-h^+) = 1nm et une épaisseur de la couche intermédiaire $h^+=2\text{nm}$, figure (III.22), nous avons une élévation moins grande dans le cas quasi-isotrope à l'aplomb des cœurs des dislocations et un affaissement plus grand dans le cas anisotrope dans la zone médiane entre deux dislocations.
3. Ce dernier phénomène (élévation et affaissement des deux couches) est observé dans le cas où le vecteur de burgers est parallèle à Ox_2 avec cette fois-ci une large amplitude.
4. Le phénomène s'inverse pour le cas où l'épaisseur de la couche capot est de (h^*-h^+) = 2nm avec une épaisseur de la couche intermédiaire égale à $h^+=2\text{nm}$.

III.6. Evolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} dans le composite en fonction de x_2 :

Nous présentons maintenant l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 à mi-distance entre deux dislocations ($x_1 = \text{période}/2$) au sein des matériaux tricouches NiSi₂/NiSi₂/GaAs, Si/Si/GaAs et NiSi₂/Si/GaAs sous l'effet d'un réseau de dislocations coin inter faciales dont le vecteur de burgers est parallèles à l'axe Ox₁.

Pour $h^* - h^\pm = 1 \text{ nm}$ et $h^\pm = 2, 4 \text{ et } 6 \text{ nm}$

NiSi₂/NiSi₂/GaAs

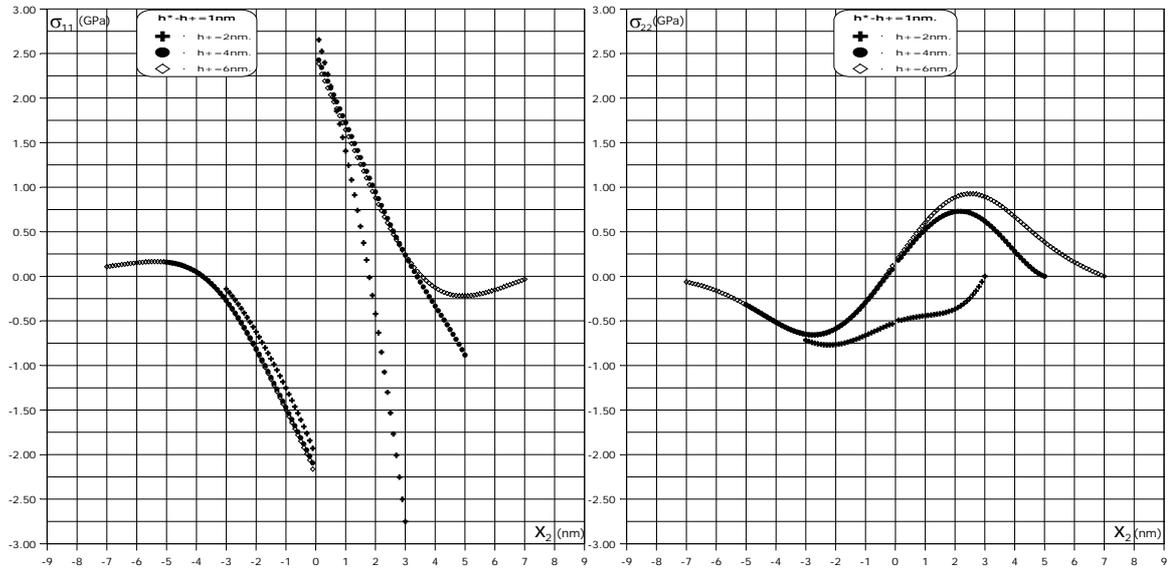


Figure III.26. Schéma illustrant l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le matériau tricouches NiSi₂/NiSi₂/GaAs, $x_1 = \Lambda/2$, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

Si/Si/GaAs

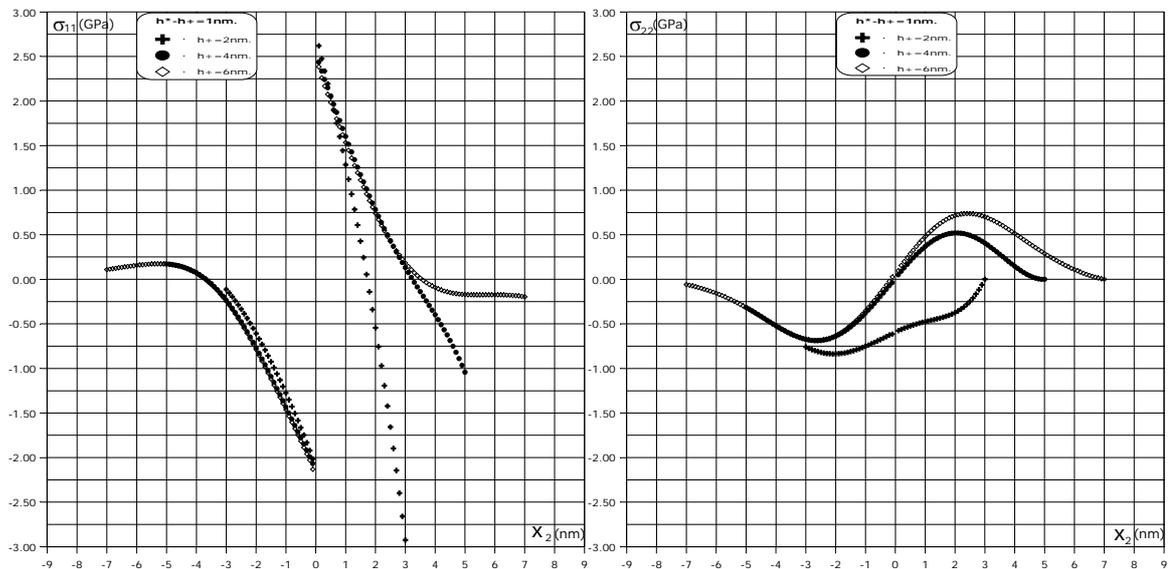


Figure III.27. Schéma illustrant l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le matériau tricouches Si/Si/GaAs, $x_1 = \Lambda/2$, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

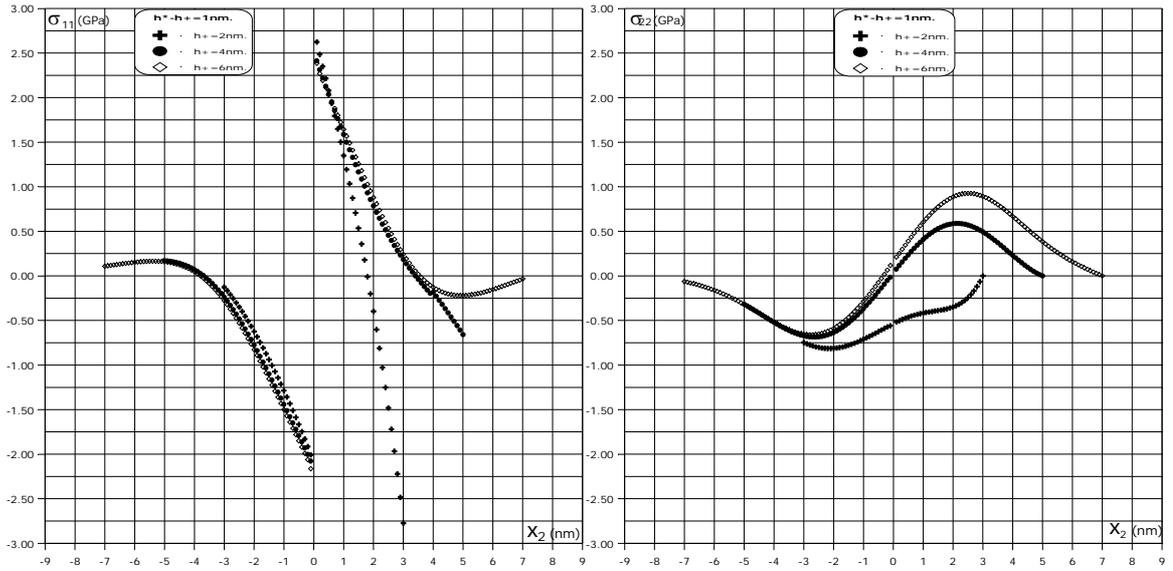
NiSi₂/Si/GaAs

Figure III.28. Schéma illustrant l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le matériau tricouches NiSi₂/Si/GaAs, $x_1 = \Lambda/2$, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

Pour $h^*-h^+=2$ nm et $h^+=2,4$ et 6 nm

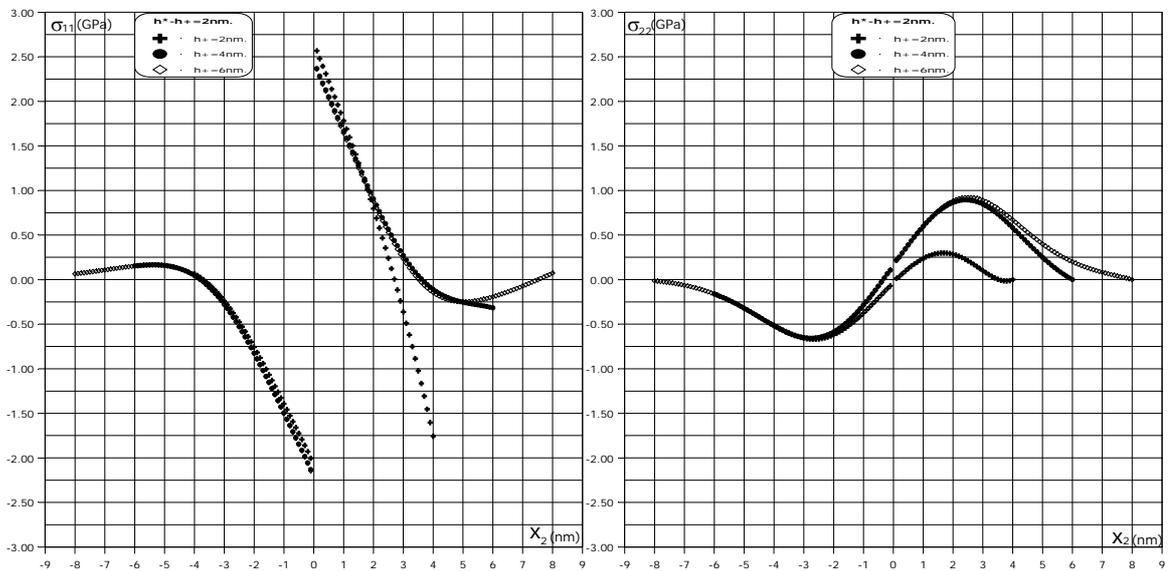
NiSi₂/NiSi₂/GaAs

Figure III.29. Schéma illustrant l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le matériau tricouches NiSi₂/NiSi₂/GaAs, $x_1 = \Lambda/2$, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

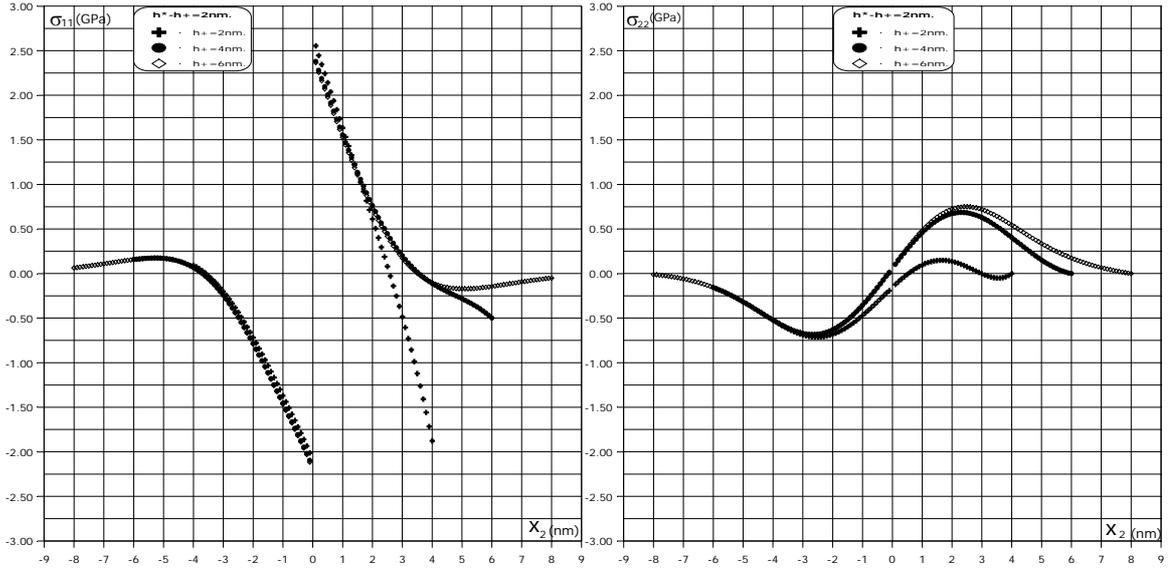
Si/Si/GaAs

Figure III.30. Schéma illustrant l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le matériau tricouches Si/Si/GaAs, $x_1 = A/2$, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

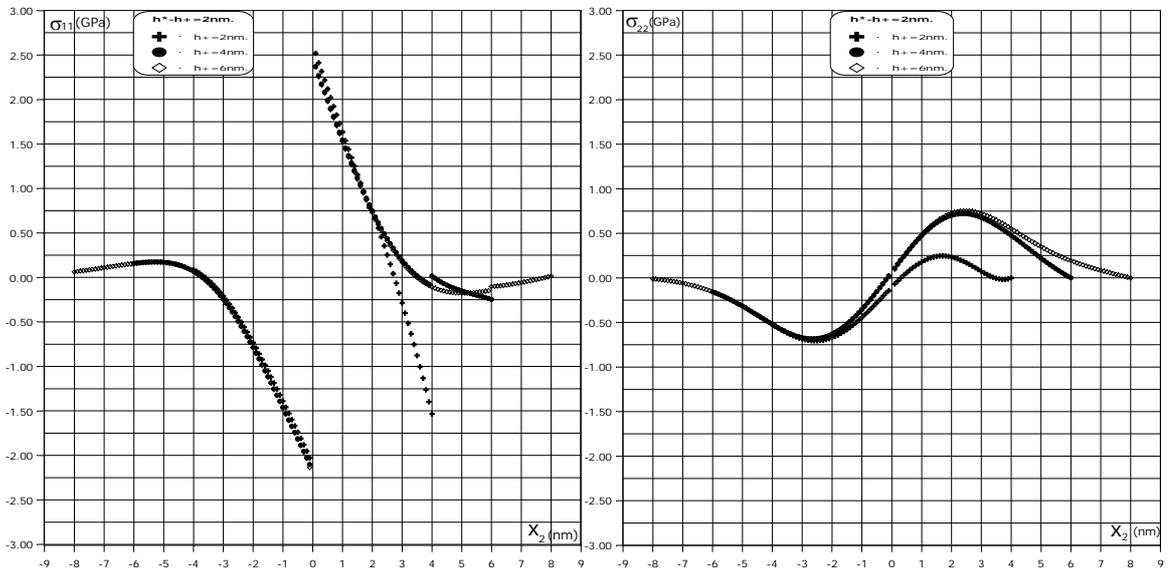
NiSi₂/Si/GaAs

Figure III.31. Schéma illustrant l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le matériau tricouches NiSi₂/Si/GaAs, $x_1 = A/2$, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

III.6.1. Effet de l'Hétérogénéité du matériau :

Afin de mieux voir l'effet de l'hétérogénéité du matériau sur l'évolution des contraintes, nous présentons sur la même figure les courbes des contraintes σ_{11} et σ_{22} pour les trois types de matériaux tricouches et ceci pour le cas: $(h^*-h^+)=1$ nm et $h^+=4$ nm.

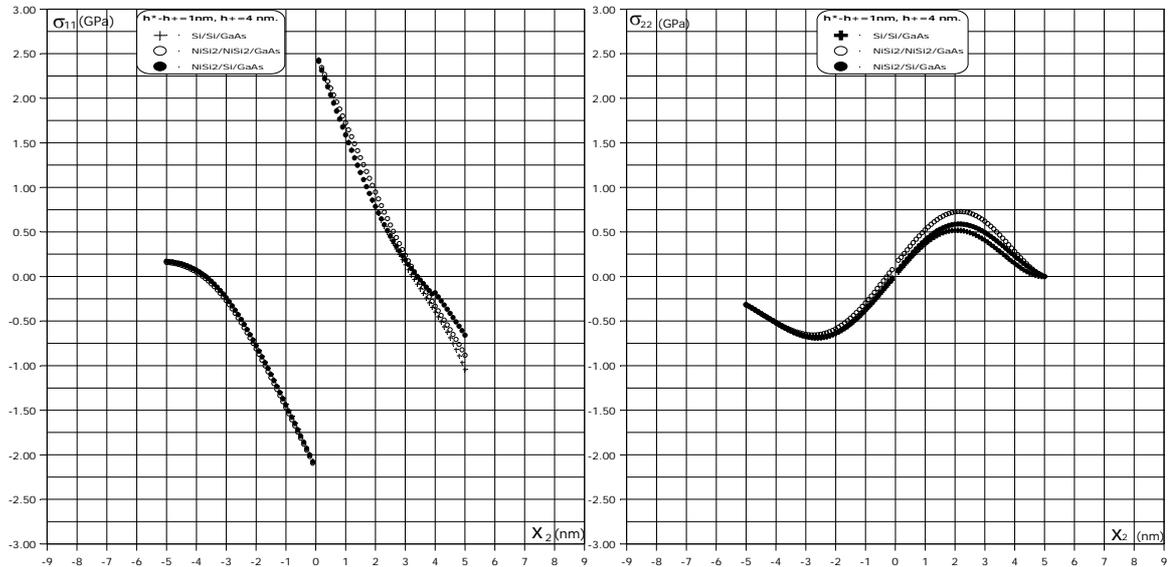


Figure III.32. Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le matériau tricouches $\text{NiSi}_2/\text{NiSi}_2/\text{GaAs}$, $\text{Si}/\text{Si}/\text{GaAs}$ et $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$, $x_1 = A/2$, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

La figure (III.32) montre que :

1. Les substrats sont toujours en état de compression que se soit pour le matériau $\text{NiSi}_2/\text{NiSi}_2/\text{GaAs}$, $\text{Si}/\text{Si}/\text{GaAs}$ ou $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$.
2. La discontinuité des contraintes σ_{11} est beaucoup plus visible dans le cas du matériau hétérogène $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$.
3. Continuité des contraintes σ_{22} aux deux interfaces et leurs nullité à la surface libre conformément aux conditions aux limites.
4. La courbe σ_{22} dans le cas du matériau hétérogène $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$ se situe entre ceux des deux matériaux homogènes $\text{NiSi}_2/\text{NiSi}_2/\text{GaAs}$ et $\text{Si}/\text{Si}/\text{GaAs}$.

III.6.2. Effet de l'épaisseur de la couche capot :

De même, nous présentons sur la même figure l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} pour différentes épaisseurs de la couche capot.

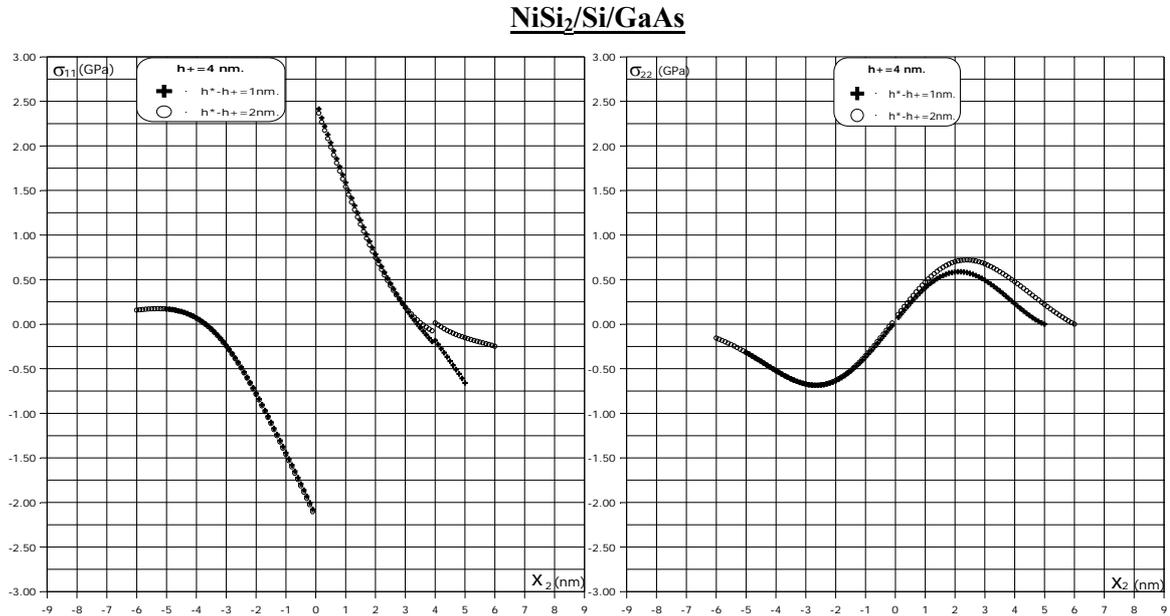


Figure III.32. Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le matériau tricouche NiSi₂/Si/GaAs, $x_1 = A/2$, C_{ij} anisotropes, $h^+ = 4\text{nm}$, $b//Ox_1$

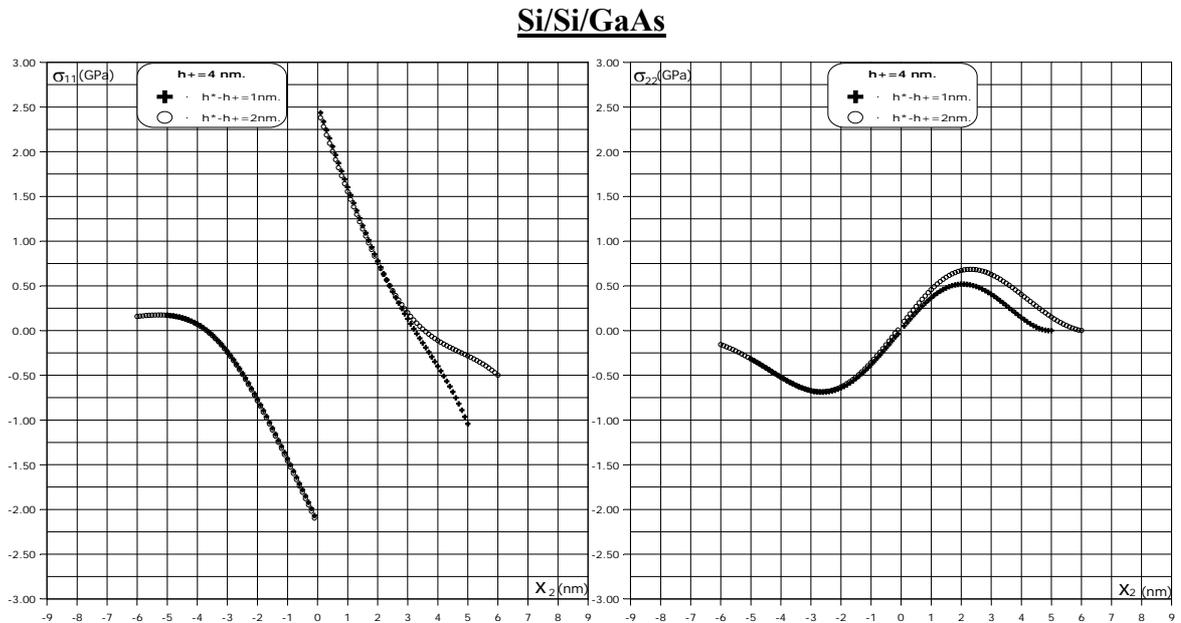


Figure III.33. Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le matériau tricouche Si/Si/GaAs, $x_1 = A/2$, C_{ij} anisotropes, $h^+ = 4\text{nm}$, $b//Ox_1$

Sur ces figures on voit bien que :

1. La variation de l'épaisseur de la couche capot n'a aucune influence sur l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} au sein du substrat.
2. Plus l'épaisseur est petite, plus la tension est grande dans les deux couches.
3. Plus l'épaisseur est grande, plus la discontinuité de la contrainte σ_{11} à travers la deuxième interface (h^+) est grande et ceci dans le cas du matériau tricouche hétérogène NiSi₂/Si/GaAs seulement ce qui prouve que la discontinuité est due à l'hétérogénéité du matériau .
4. L'amplitude des contraintes σ_{22} est d'autant plus grande que l'épaisseur de la couche capot augmente.
5. Les deux couches sont en tension d'autant plus grande que leur épaisseur totale (h^*) est faible.

III.6.3. Effet de l'anisotropie :

Afin de mettre en évidence l'effet de l'anisotropie sur l'évolution des champs de contraintes à l'intérieur du matériau tricouche NiSi₂/Si/GaAs, nous présentons ci-dessous les résultats obtenus pour les mêmes cas que précédemment figure (III.32) superposés avec ceux du cas quasi-isotropie.

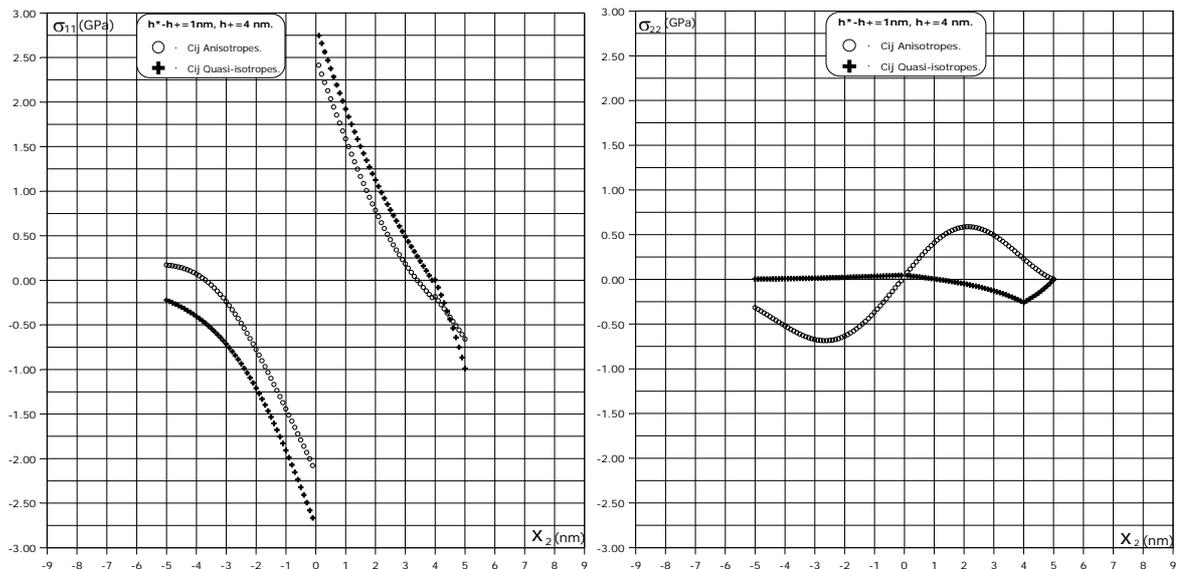


Figure III.34. Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le matériau tricouche NiSi₂/Si/GaAs, $x_1 = \Lambda/2$, Cij anisotropes et Cij quasi-isotropes, $h^+ = 4\text{nm}$, $b // O x_1$

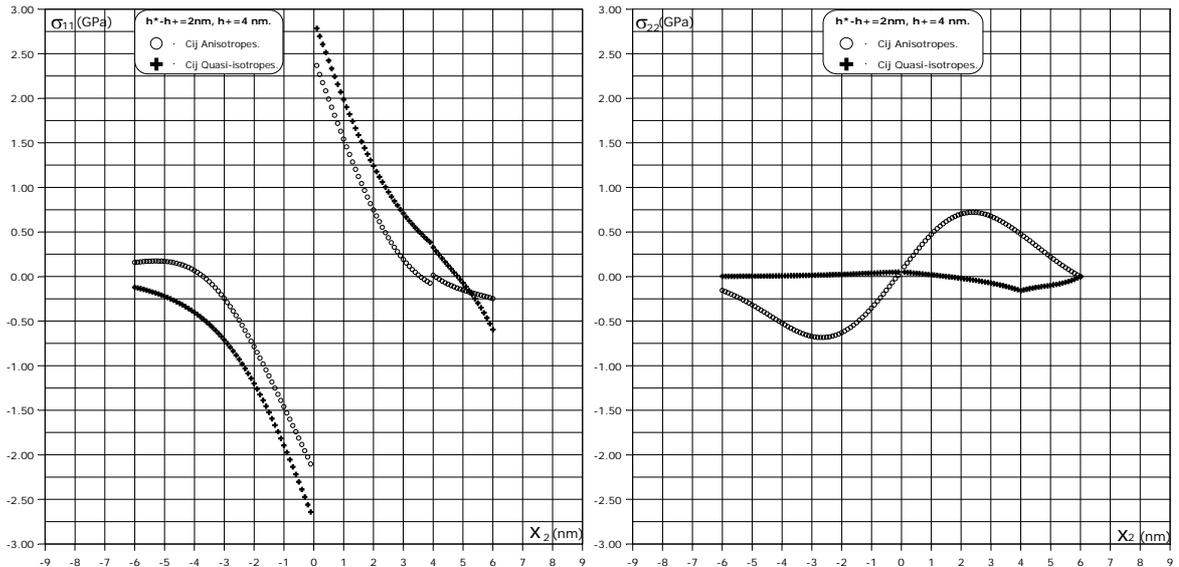


Figure III.35. Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le matériau tricouches $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$, $x_1 = \Lambda/2$, Cij anisotropes et Cij quasi-isotropes, $h^+ = 4\text{nm}$, $b//Ox_1$

En analysant les courbes des contraintes σ_{11} et σ_{22} pour le matériau tricouches $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$ dans le cas anisotrope et quasi-isotrope, les remarques suivantes peuvent être déduites:

1. La compression est beaucoup plus grande dans le cristal (-) substrat dans le cas quasi-isotrope que dans le cas anisotrope.
2. L'amplitude des champs de contraintes σ_{22} est plus grande dans le cas anisotrope que dans le cas quasi-isotrope.
3. A travers les deux interfaces $x_2 = 0$ et $x_2 = 4\text{nm}$, la discontinuité des contraintes σ_{11} est beaucoup plus grande dans le cas anisotrope que dans le cas quasi-isotrope.

III.7. Cas des iso-contraintes :

Nous présentons dans cette partie la distribution des iso-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 400 \text{ MPa}$, pour les matériaux tri couches: $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$; $\text{Si}/\text{Si}/\text{GaAs}$ et $\text{NiSi}_2/\text{NiSi}_2/\text{GaAs}$ dans l'hypothèse suivante :

- Le vecteur de Burgers est parallèle à l'axe Ox_1 .
- L'épaisseur de la couche capot est de 1 nm
- L'épaisseur de la couche intermédiaire est de 2 nm.

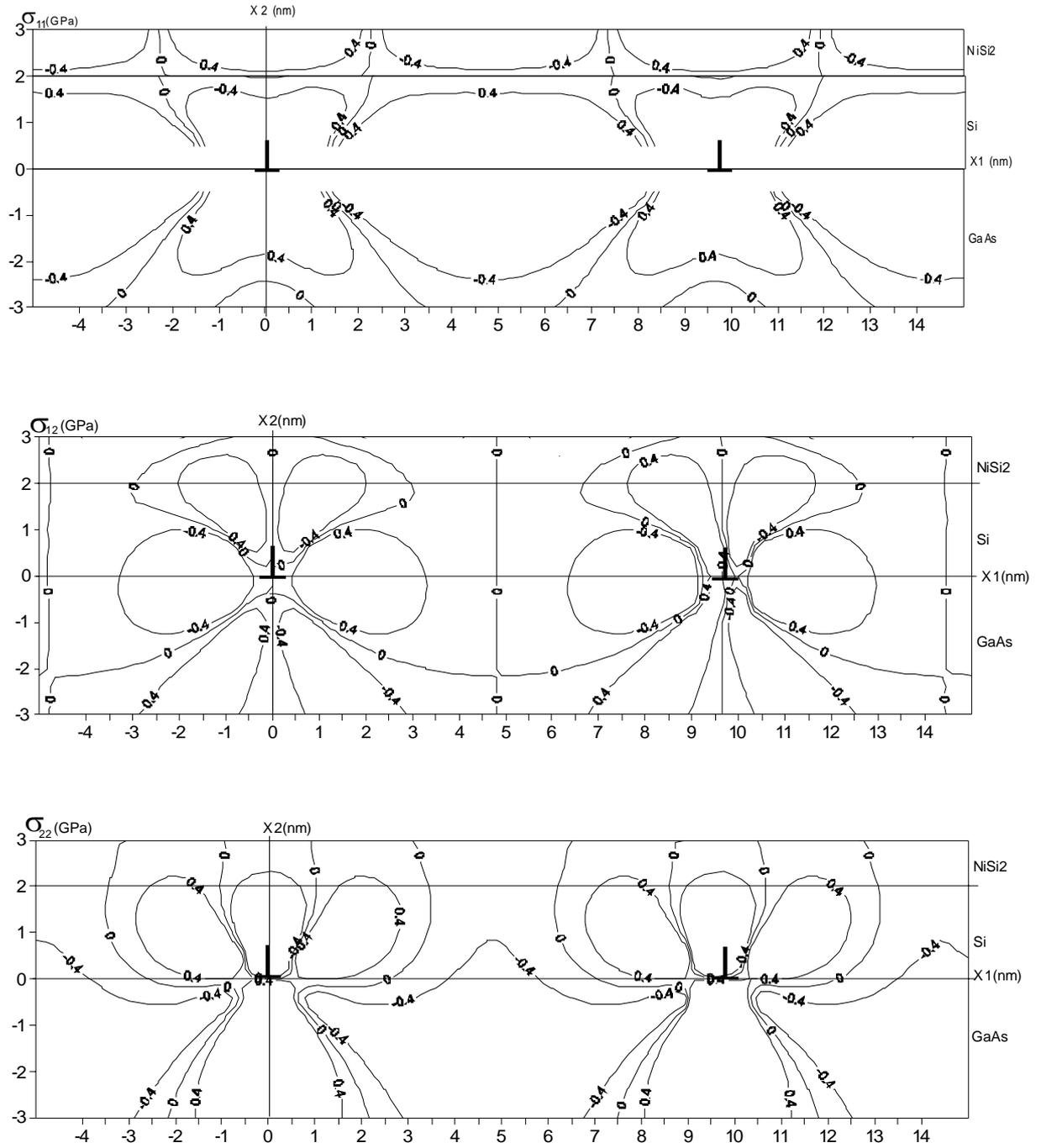


Figure.III.36. Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 400$ MPa pour un réseau de dislocations placées à l'interface d'un matériau tricouches NiSi₂/Si/GaAs; C_{ij} Anisotropes, $b \parallel O x_1$, $h^* = 3$ nm, $h^+ = 2$ nm.

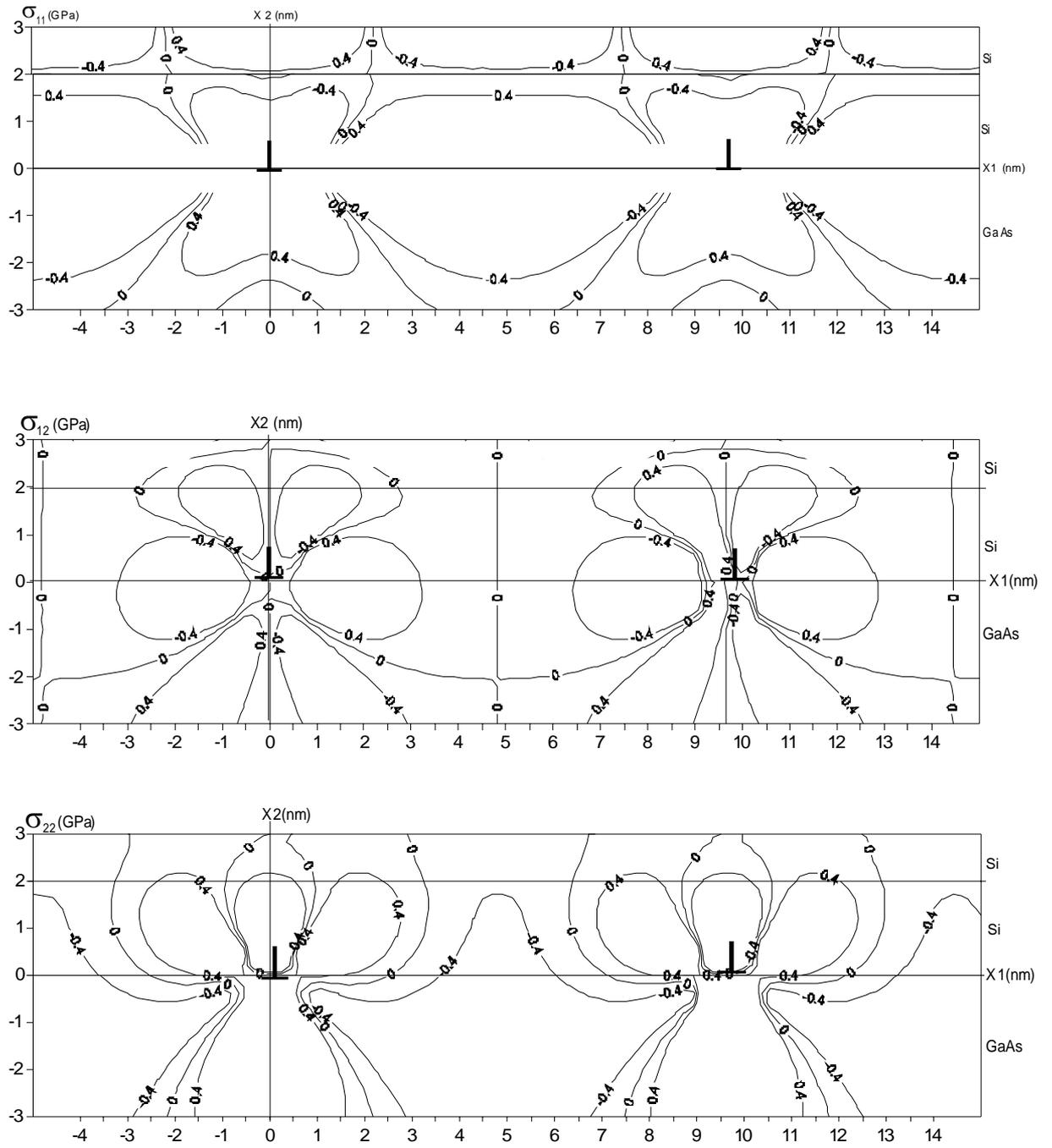


Figure.III.37. Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 400$ MPa pour un réseau de dislocations placées à l'interface d'un matériau tricouches Si/Si/GaAs; C_{ij} Anisotropes, $b // Ox_1$, $h^* = 3$ nm, $h^+ = 2$ nm.

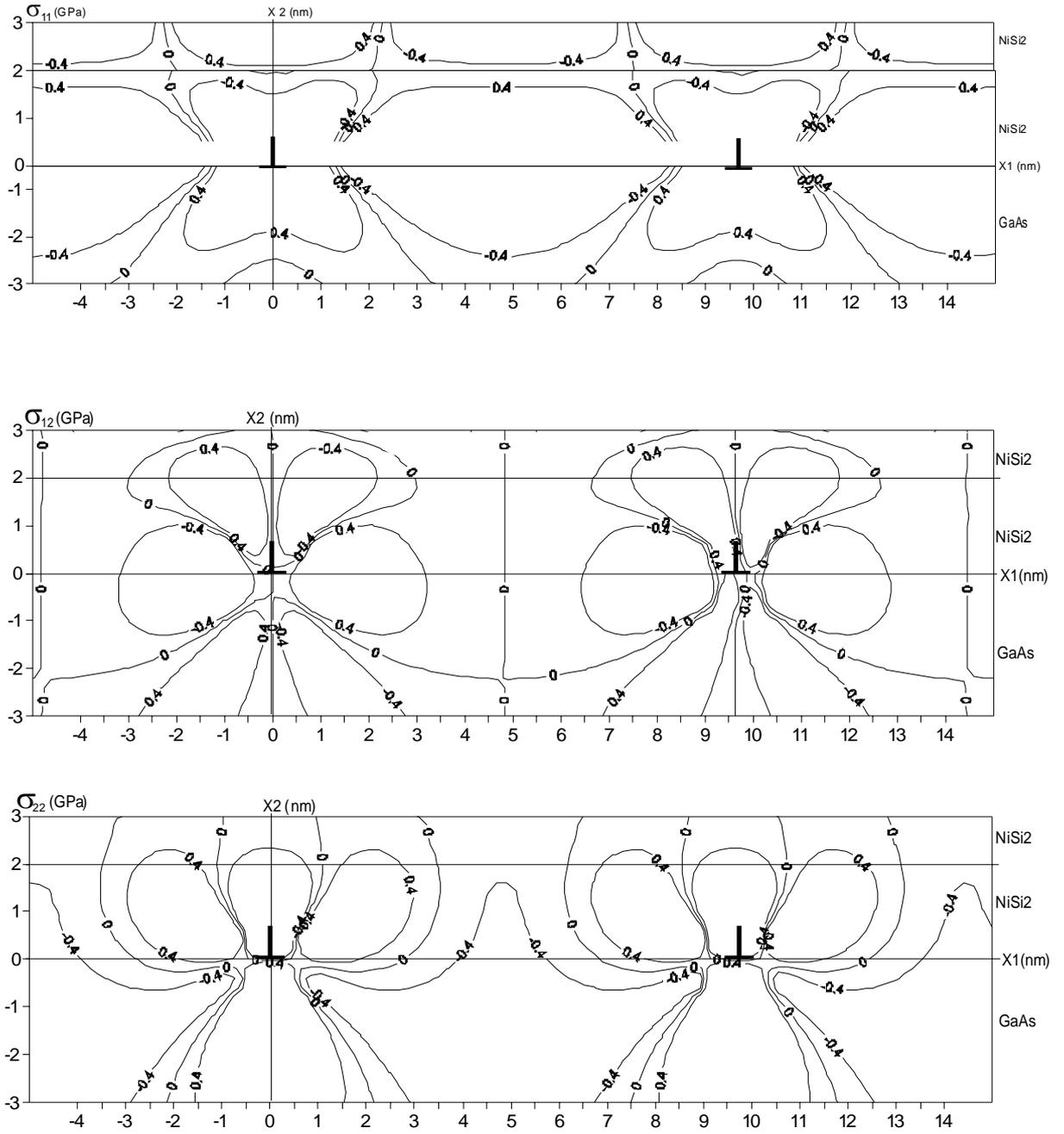


Figure.III.38. Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 400$ MPa pour un réseau de dislocations placées à l'interface d'un matériau tricouches $\text{NiSi}_2/\text{NiSi}_2/\text{GaAs}$; C_{ij} Anisotropes, $b \parallel OX_1$, $h^*=3\text{nm}$, $h^+=2\text{nm}$.

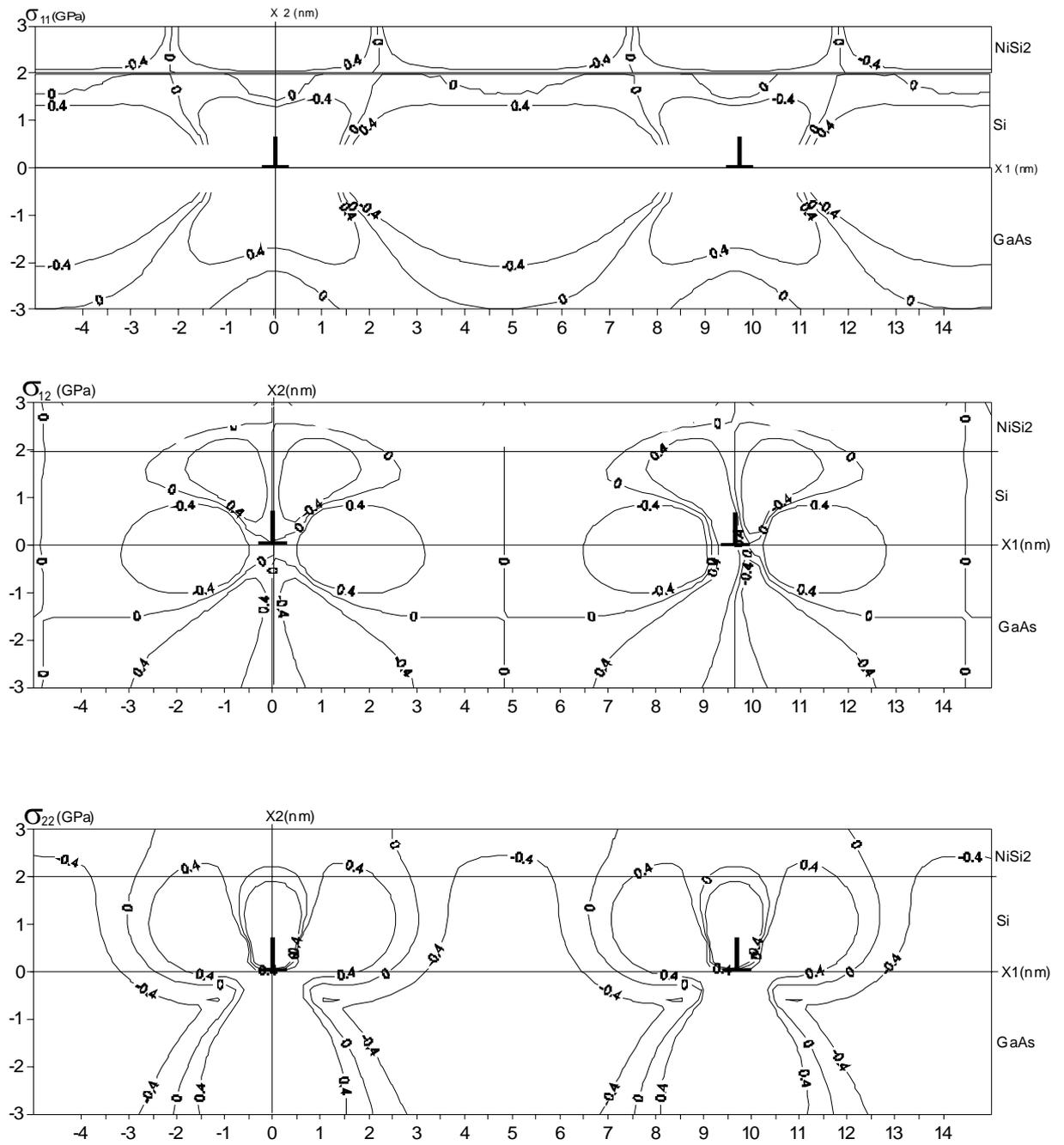


Figure.III.39. Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 400$ MPa pour un réseau de dislocations placées à l'interface d'un matériau tricouches NiSi₂/Si/GaAs; C_{ij} quasi-isotropes, $b \parallel OX_1$, $h^* = 3$ nm, $h^+ = 2$ nm.

Interprétation :

Ces courbes montrent la dispersion, sur une plus ou moins grande surface du couple tension-compression dans la couche et autour des deux dislocations qui la délimitent ; ce qui permet , entre autres, de voir quelle est la zone en tension et celle en compression, la vérification des conditions aux limites ainsi que la quantification de la discontinuité le long d'interfaces hétérogènes.

III.8.Champs de déformation au voisinage d'une seule dislocation du réseau :

Nous présentons maintenant les champs de déformation (déplacements et contraintes) au voisinage d'une seule dislocation du réseau

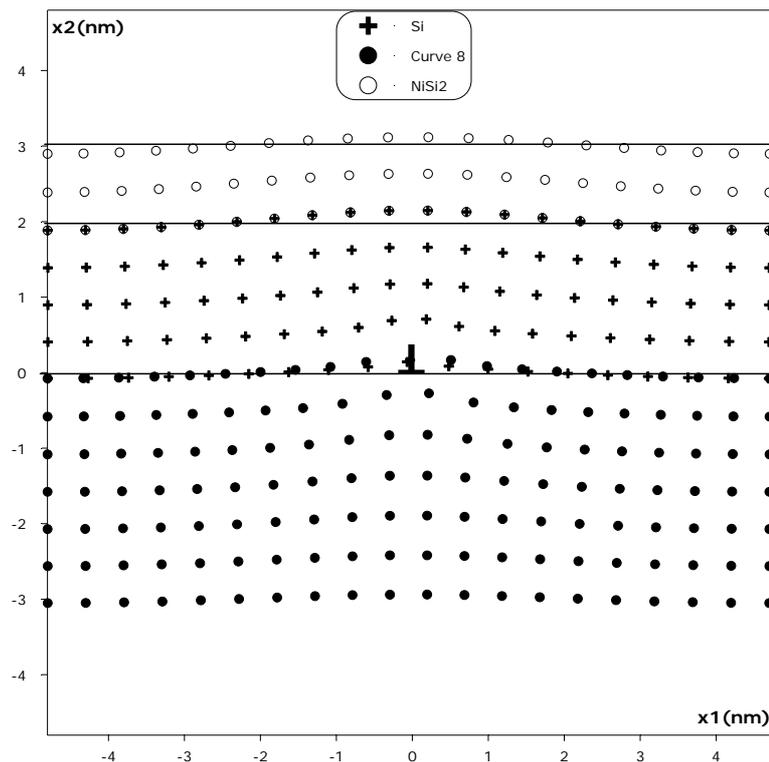


Figure III 40. Schéma illustrant les champs des déplacements du matériau tricouches NiSi₂/Si/GaAs sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciale, C_{ij} anisotropes, b//Ox₁

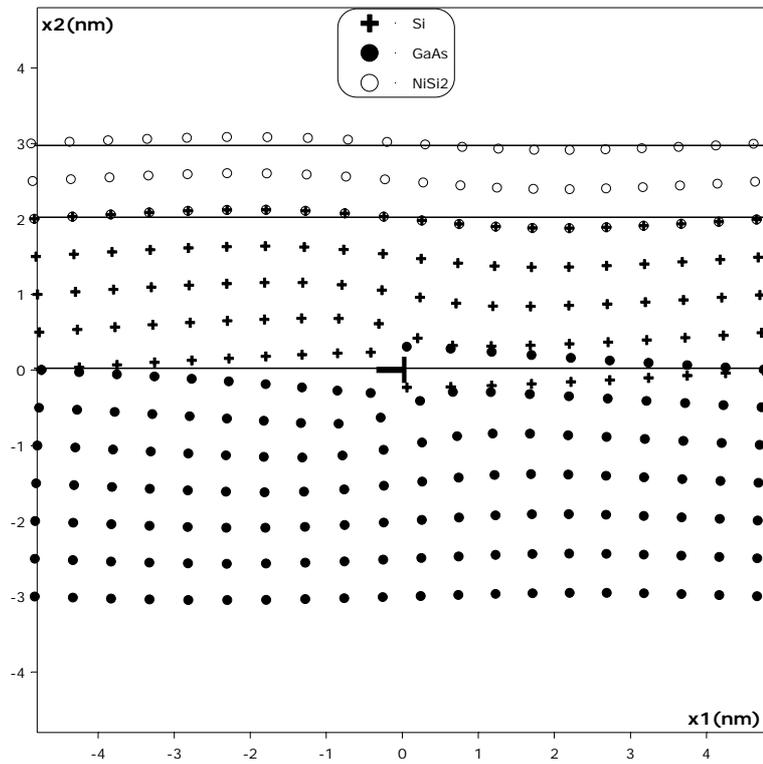


Figure III.41. Schéma illustrant les champs des déplacements du matériau tricouche $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$ sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciale, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_2$

Sur les figures (III.40) et (III.41) le long de chaque hétéro interface on voit bien :

1. La déformabilité de la couche (cristal (+)) par rapport au substrat (cristal (-)) et la couche supérieure (cristal (*)).
2. La discontinuité du déplacement relatif à l'interface ($x_2 = 0$).
3. La continuité du déplacement relatif au niveau de l'interface ($x_2 = h^+$).

Nous présentons maintenant la dispersion des iso-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 400$ MPa autour d'une seule dislocation coin dans les mêmes hypothèses du paragraphe (III..7). Ces courbes sont obtenus dans le cas de l'élasticité anisotrope pour le matériau tricouche: $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$.

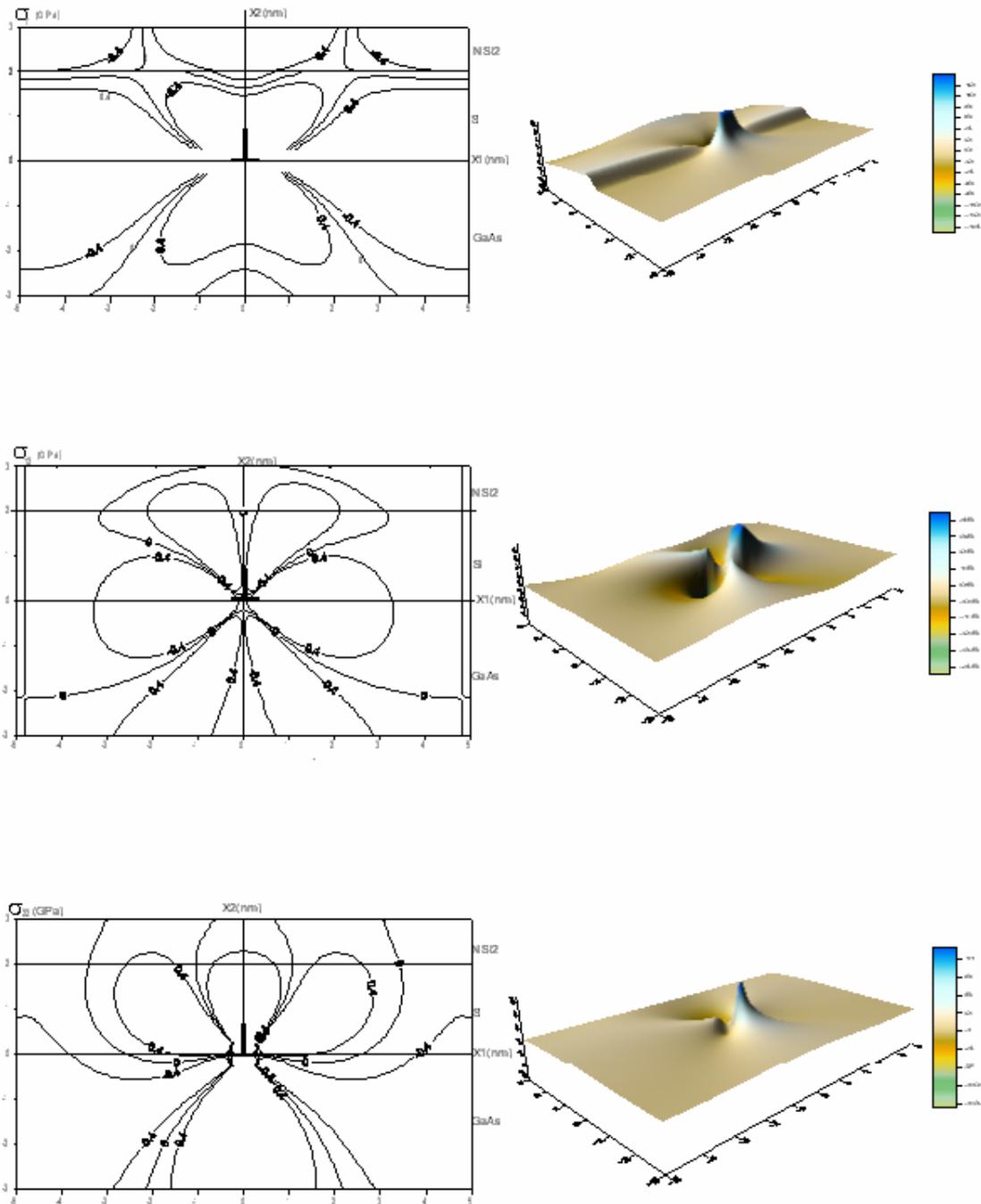


Figure III.42. Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 400$ MPa pour une dislocation placée à l'interface d'un matériau tricouche $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$; C_{ij} anisotropes, $b \parallel \text{Ox}_1$, $h^*=3\text{nm}$, $h^+=2\text{nm}$.

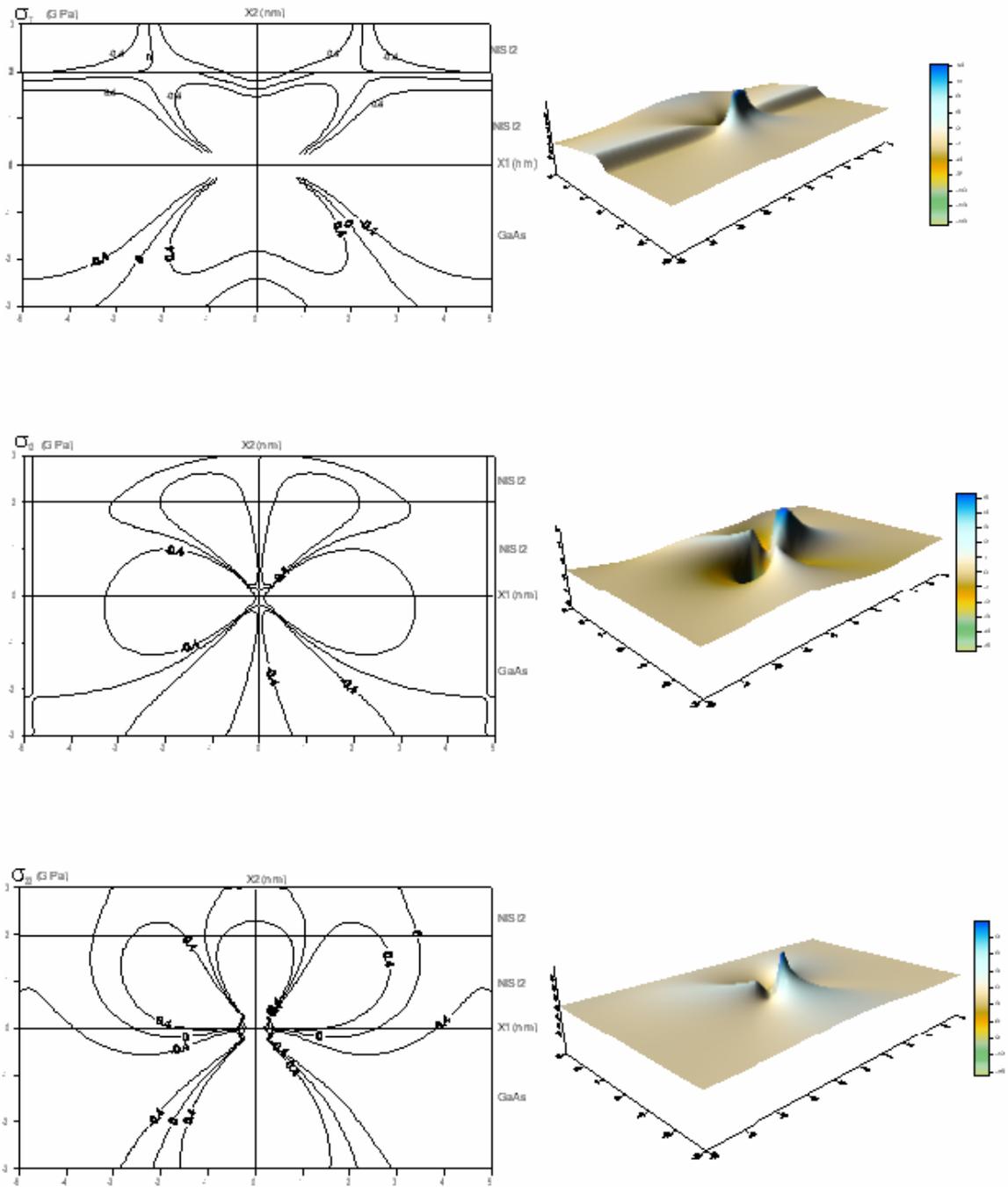


Figure III.43. Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 400$ MPa pour une dislocation placée à l'interface d'un matériau tricouches NiSi₂/ NiSi₂/GaAs; C_{ij} Anisotropes, $b // Ox_1$, $h^*=3$ nm, $h^+=2$ nm.

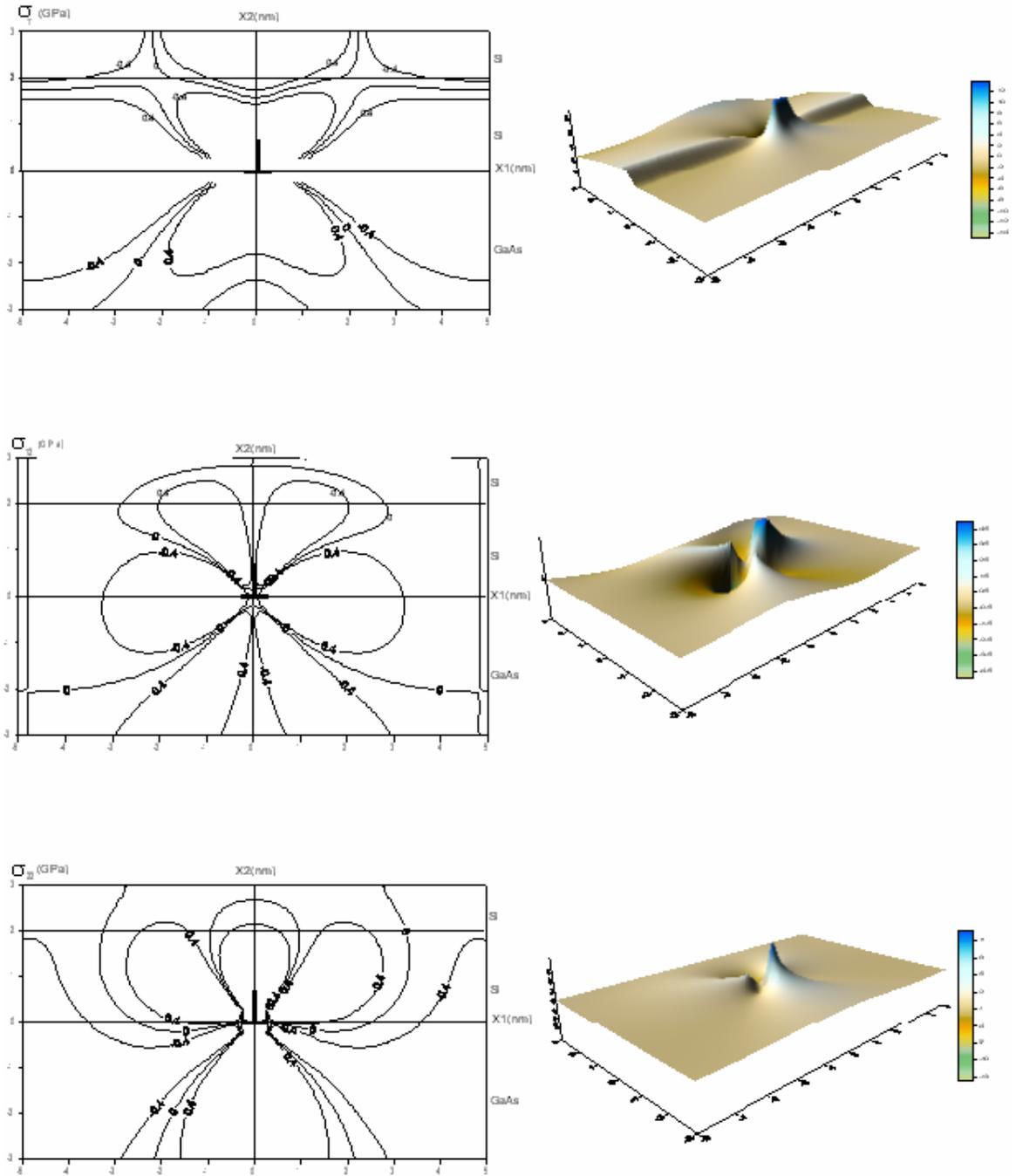


Figure III.44. Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 400$ MPa pour une dislocation placée à l'interface d'un matériau tricouches Si/Si/GaAs; C_{ij} Anisotropes, $b//Ox_1$, $h^*=3\text{nm}$, $h_+=2\text{nm}$.

Sur les figures (III.42, 43 et 44) on voit bien :

1. Que toutes les courbes sont symétrique par rapport à l'axe Ox_2 et semblent suivre la même allure pour chaque type de contrainte.
2. La continuité des contraintes σ_{12} et σ_{22} le long des interfaces et leurs nullités à la surface libre conformément aux conditions aux limites.
3. La discontinuité des contraintes σ_{11} à travers les deux interfaces.
4. Ces iso contraintes révèlent l'effet des surfaces libres pour la contrainte σ_{11} .

Conclusion Générale

Nos travaux se sont focalisés sur les effets élastiques (déplacements et contraintes) générés par des dislocations de misfit à l'interface d'un matériau tricouches. Il s'agissait, en particulier, pour nous de développer une formulation explicite du champ des déplacements en élasticité anisotrope, d'élaborer des programmes de simulation numériques et de les appliquer sur des cas concrets de systèmes épitaxiaux.

L'application de la théorie d'élasticité combinée à une analyse par séries de Fourier double proposée dans [15] et la considération de l'élasticité anisotrope conduit à l'établissement d'un polynôme du sixième ordre dont l'exactitude des coefficients est vérifiée numériquement. Les racines de ce polynôme sont complexes et conjuguées deux à deux. L'établissement des conditions aux limites propres à un réseau parallèle de dislocations de misfit placé à l'interface (+)/(-) d'un matériau tricouches (*)/(+)/(-) abouti à un système de 15 équations linéaires à 15 inconnues complexes. Ce système ne peut être inversé que numériquement et ses solutions sont les coefficients de la série de Fourier recherchée. Les déplacements et les contraintes sont calculés en fonction de ces coefficients.

En effet, après avoir fait valider notre programme Fortran, en faisant des comparaisons entre les expressions analytiques du déplacement relatif à l'interface (+)/(-) et celles utilisant les séries doubles de Fourier, nous avons déterminé les champs pour le matériau NiSi₂/Si/GaAs.

Concernant le champ de déplacement nous avons constaté que plus l'épaisseur de la couche intermédiaire est petite, plus la déformation, du composite, est grande surtout à l'aplomb des cœurs des dislocations et plus les extremums de déformations élastiques des unités structurales sont nettement visibles.

De même pour les couches intermédiaires relativement épaisses ($h^+ = 4\text{nm}$ et plus), les déplacements dans le cas anisotrope sont sensiblement superposables à ceux obtenus dans le cas quasi-isotrope et la divergence des champs de déplacement est beaucoup plus nette pour les faibles épaisseurs, en effet ceci se traduit par une élévation moins grande dans le cas quasi-isotrope à l'aplomb des cœurs des dislocations et un affaissement plus grand dans le cas anisotrope dans la zone médiane entre deux dislocations.

Pour le champ des contraintes nous avons remarqué que, les substrats sont toujours en état de compression que se soit pour le matériau $\text{NiSi}_2/\text{NiSi}_2/\text{GaAs}$, $\text{Si}/\text{Si}/\text{GaAs}$ ou $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$ et ceci quelque soit l'épaisseur de la couche capot.

La discontinuité des contraintes σ_{11} est beaucoup plus visible dans le cas du matériau hétérogène $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$ surtout lorsque l'épaisseur (h^*) est grande ce qui prouve que cette discontinuité est due à l'hétérogénéité du matériau.

Dans le cas du matériau hétérogène $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$ la contrainte σ_{22} se situe entre ceux des deux matériaux homogènes $\text{NiSi}_2/\text{NiSi}_2/\text{GaAs}$ et $\text{Si}/\text{Si}/\text{GaAs}$, cette contrainte est d'autant plus grande que l'épaisseur de la couche capot est grande. La compression est beaucoup plus grande dans le cristal (-) substrat dans le cas quasi-isotrope que dans le cas anisotrope, de même la discontinuité des contraintes σ_{11} est beaucoup plus grande dans le cas anisotrope que dans le cas quasi-isotrope à travers les deux interfaces.

Nous avons présenté aussi, la distribution des iso-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 400$ MPa, autour d'un réseau de dislocations coin, pour une orientation du vecteur de Burgers $b//Ox_1$, pour les matériaux tricouches: $\text{NiSi}_2/\text{Si}/\text{GaAs}$; $\text{Si}/\text{Si}/\text{GaAs}$ et $\text{NiSi}_2/\text{NiSi}_2/\text{GaAs}$. Les résultats obtenus montrent bien la dispersion, sur une plus ou moins grande surface du couple tension-compression dans la couche et autour des deux dislocations qui la délimitent ; ce qui permet, entre autres, de voir quelle est la zone en tension et celle en compression, la vérification des conditions aux limites ainsi que la quantification de la discontinuité le long d'interfaces hétérogènes.

De la même façon que pour l'application précédente, les champs de déformations (déplacements et contraintes) au voisinage d'une seule dislocation du réseau nous ont montré la déformabilité de la couche intermédiaire (cristal (+)) par rapport au substrat (cristal (-)) et la couche supérieure (cristal (*)), la discontinuité du déplacement relatif à l'interface ($x_2 = 0$) et la continuité du déplacement relatif au niveau de l'interface ($x_2 = h^+$).

En fin nous pouvons conclure que les quatre facteurs essentiels qui contrôlent le champ des déformations sont : Le vecteur de Burgers b , la période du réseau, les constantes C_{ij} et la hauteur choisie

Perspectives :

L'effet de la température sur le champ élastique du matériau tricouches n'a pas été discuté. Evidemment s'il y'a une variation de température, une flexion du matériau se produit, si la géométrie du réseau de dislocations de misfit ne peut être modifier pour accommoder exactement la variation du désaccord paramétrique produite, les contraintes internes augmenteront à ce moment là et provoqueront une flexion du matériau. Le cas où un réseau de dislocations est ajouté à l'hétéro interface (+)/(*). Ces thèmes représentent un axe intéressant à développer.

Références Bibliographiques

- [1] **Chou, Y. T., Pande, C. S. , et Yang, H. C. ,** J. Appl. Phys. 46, 5, (1975).
- [2] **Oveçoglu, M. L., Doerner, M. F., et Nix, W. D.,** Elastic interactions of Screw dislocation in thin films on substrates, Acta Met., 35, p: 2947-2957, (1987).
- [3] **Koehler, J. S.,** Attempt to design a strong solid, Phys. Rev.B, 2, p:547-551, (1970).
- [4] **Zenati, R., Bonnet, R.,** C. R. Acad. Sci. Paris, t.318, serie II, p: 31-36, (1994).
- [5] **Bonnet, R. ,** Phy. Stat. Sol.(a) 177,219 (2000).
- [6] **J. Jacobsen, L. Pleth Nielson, F. Besenbacher, I. Stensgaard, E. Laegsgaard, T. Rasmussen, K.W. Jacobsen and J.K.Norskov,** Phy.Rev.Lett.75,489 (1995).
- [7] **J.G.Belk, J. L. Sudijono, X.M.Zhang, J.H.Neave, T.S.Jones and B.A.Joyce,** Phy. Rev Lett. Vol.78, N° 3, 475-478 (1997).
- [8] **G.Springholz, G. Bauer and V.Holy,** Rev Lett. B. 54, 1829 (1996).
- [9] **J.G.Belk, D.W.Pashley, B.A.Joyce, and T.S.Jones,** Phy. Rev Lett. B.Vol.58, 16194-16201 (1998).
- [10] **J. de la Figuera et al, Pohl, A.K. Schmid, N.C. Bartelt, J.Hrbek and R. Q.Hwang,** Surf.Sci. 433-435 (1999).
- [11] **X.W.Liu, A.A.Hopgood, B.F. Usher, H.Wang and N.S.Braithwaite,** j.Appl.Phy.88, 10 (2000).
- [12] **Bonnet R., Loubradou M.,** Phy. Rev. B, Vol.49, Num 20, (1994).
- [13] **Bonnet , R. ,** C.R.Acad. Sci.Paris, t.318, serie II, p :289-295, (1994).
- [14] **Madani, S.,** Thèse de Magistère de l'université de Batna, (1997).
- [15] **Bonnet , R. ,** Phil.Mag.A, Vol. 44, p: 625-642, (1981c).
- [16] **Y.Yao and T.C.Wang,** Acta.Mater. Vol.47, N° 10,3063 (1999).
- [17] **Outtas , T. ,** Thèse de Doctorat de l'université de Batna, (2002).
- [18] **Bonnet,R., Loubradou,M.,Catana, A., et Stadelmann, P.,** Met. Trans.A,(1991).
- [19] **Willis, J.R., Jain, S. C., et Bullough, R.,** Phil. Mag., A, 62, 115, (1990).
- [20] **Frank, F.C., et Vander Merwe, J. H.,** Proc. Roy. Soc. A, 108, 205 et 200, 125, (1949).
- [21] **Nakahara, S., Wu, J. B. C., et Li, J. C. M.,** Mater. Sci. Engng, 10, 291, (1972).
- [22] **Eshelby, J. D., Read, W.T., et Shockley, W.,** Acta. Mrt., 1,251, (1953).
- [23] **Stroh, A.N.,** Phil. Mag., 3, 625, (1958); J.Lmath.Phys., 41, 77, (1962).

- [24] **Tuker, M.O.**, Phil. Mag., 19, 1141, (1969).
- [25] **Humble, P., Forwood, C. T.**, Phil. Mag., 31, 1011, (1975).
- [26] **Dupreux, M., et Bonnet, R.**, Acta. Met., 28, 721, (1982).
- [27] **Gultin, M.Y. et Romanov, A.E.**, Straight edge dislocation in a thin two phase plate, Phys. Stat. Sol. (a), 125, p: 107-125, (1991).
- [28] **Chou, Y., T.**, Screw dislocation in and near lamellar inclusions, Phys. Stat. Sol., 17, p: 509-516 , (1966).
- [29] **Nabarro, F.R. N., et Kostlan, E . J. ,** J. Appl. Phys. 49, 5445, (1978).
- [30] **Moss, W. C., et Hoover, W. G.**, J. Appl. Phys. 49, 5449, (1978).
- [31] **Bonnet, R.**, Phil. Mag. A, vol 51, N°1, p: 51-58, (1985).
- [32] **A.Vila, A.Cornet, J.R Morante, P. Ruterana, M. Loubradou, R. Bonnet, Y. Gonzalez, and L. Gonzalez**, Phil. Mag. A,71, 85 (1995).
- [33] F.M. d'Heurle, J.phys. IV France, colloq. 2, supplement to J.phys.III France, C2-C29 (1996)
- [34] **B.D.Cullity**, in: Elements of X-Ray Diffraction, Addison Wesley. Press, Reading (MA) 1956 (p.484).
- [35] **M. Lazer and G.Wagner**, Cryst. Res. Technol.32, 111 (1997).
- [36] **Bonnet, R.**, et Verger-Gaugry, J.L., Phil. Mag. A, vol 66, N°5, p: 849-871, (1992).
- [37] **Zener, C.**, Elasticity and Anelasticity of Metals, Chicago Univ., Press, 16, (1948)
- [38] **Hirth, J. P. et Lothe, J.**, Theory of dislocations, 2d ed., John Wiley and sons, New-York, 836, (1982)