

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE



MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

MEMOIRE

Présentée

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

Pour obtenir le titre de

MAGISTER EN GENIE MECANIQUE
Option : Science des matériaux

Par
Mr DJARALLAH SEBTI

*Détermination analytique des grandeurs élastiques générées
par des réseaux unidirectionnels de dislocations dans un
échantillon collé en utilisant le code MATHEMATICA*

Soutenu publiquement le 07/02/2008, devant le jury composé de :

Dr Toufik OUTTAS	M.Conférences, Université de Batna	Président
Dr Salah MADANI	M.Conférences, Université de Batna	Encadreur
Dr Saïd BENZAADA	M.Conférences, Université de Biskra	Examineur
Dr Rachid BENBOUTA	M.Conférences, Université de Batna	Examineur
Dr Mourad Brioua	M.Conférences, Université de Batna	Examineur

Remerciements

Je tiens à remercier mon encadreur le Docteur Salah MADANI pour ses conseils et son constant soutien, je lui exprime ici mon attachement et ma profonde reconnaissance pour la confiance qu'il m'a témoignée

Je remercie aussi tout le groupe des enseignants de l'année théorique, je cite en particulier le Dr.B.Benmohamed, Dr.R.Manaa et Dr.R.Smail.

Je tiens à remercier vivement mes chers élèves des classes 3^{ème}TM et 3^{ème}GM du Lycée Ali Nameur-Batna pour leur support et encouragement, je leur souhaite une bonne réussite au Baccalauréat (2008).

Je remercie aussi tous les gents qui m'ont aidés à réaliser ce travail, en particulier Mr Djamel Batache.

J'adresse mes sincères remerciements au :

Docteur Toufik Outtas de l'Université de Batna;

Docteur Rachid Benbouda de l'Université de Batna;

Docteur Mourad Brioua de l'Université de Batna;

Docteur Said Bensaada de l'Université de Biskera;

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

Table des matières

Introduction générale	1
Chapitre 1 Introduction à la théorie des dislocations	3
1.1 Introduction.....	3
1.2 Généralités.....	3
1.2.1 Les différents types de dislocations.....	3
1.2.2 Le vecteur de Burgers d'une dislocation.....	4
1.2.3 Mouvements des dislocations.....	5
1.2.4 Caractéristiques des dislocations.....	6
1.3 Réseaux de dislocations interfaciales.....	7
1.3.1 Les différents types de réseaux de dislocations.....	7
1.3.1.1 Joint de désaccord paramétrique.....	9
1.3.1.2 Joint de flexion.....	9
1.3.1.3 Joint de torsion.....	10
Chapitre 2 Rappels de la théorie de l'élasticité	12
2.1 Définitions.....	12
2.1.1 Le champ de déplacements.....	12
2.1.2 Le champ de déformations.....	12
2.1.3 Le champ de contraintes.....	13
2.1.4 L'énergie de déformation élastique.....	13
2.2 Théorie de l'élasticité linéaire.....	14
2.3 Application de la théorie de l'élasticité linéaire aux dislocations.....	15
2.3.1 Cas des dislocations vis.....	15
2.3.2 Cas des dislocations coin.....	16
2.3.3 Cas des dislocations mixtes.....	18
Chapitre 3 Technologie des couches minces	19
Introduction.....	19
3.1 Notion de couche mince.....	19
3.2 Les techniques de fabrication de couches minces.....	20
3.2.1 La pulvérisation cathodique.....	20
3.2.2 L'Épitaxie par Jets Moléculaires.....	22
3.2.2.1 Généralités sur l'épitaxie.....	24
3.2.2.2 Les différents modes de croissance.....	25
3.2.2.3 Considérations thermodynamiques.....	26
3.2.3 L'ablation laser.....	29
3.3 Applications des couches minces.....	30
3.3.1 Couches minces dans les composants et dispositifs électroniques: L'interconnexion....	30
3.3.2 Les couches techniques pour des dispositifs électroniques.....	31
Chapitre 4 Solution en élasticité isotrope	32
4.1 Introduction.....	32
4.2 Géométrie du problème.....	33
4.3 Conditions aux limites.....	35
4.3.1 Condition de convergence.....	35

4.3.2	Conditions en déplacement.....	35
4.3.3	Conditions en contraintes.....	37
4.4	Détermination explicite du champ des déplacements et des contraintes.....	39
4.4.1	Détermination des constantes complexes.....	39
4.4.2	Expressions analytiques du champ des déplacements pour les deux milieux.....	40
4.4.3	Expressions analytiques du champ des contraintes.....	42
4.5	Calcul de l'énergie élastique stockée pour un réseau unidirectionnel de dislocations en fonction de l'épaisseur h de la couche.....	44
Chapitre 5 Applications numériques		46
5.1	Validation du programme de calcul élaboré.....	46
5.2	Application numérique.....	48
5.2.1	Matériaux utilisés.....	48
5.2.1.1	le silicium (Si).....	48
5.2.1.2	L'arsenic de gallium (GaAs).....	49
5.2.1.3	L'hétérostructure GaAs/Si.....	50
5.2.2	Présentation des résultats et interprétations.....	51
5.2.2.1	Champs des déplacements.....	51
5.2.2.2	Champ élastique des contraintes.....	54
	A. Evolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 loin du cœur de la dislocation.....	54
	B. Evolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 près du cœur de la dislocation.....	58
	C. Cas des iso-contraintes.....	59
5.2.2.3	Energie.....	61
Conclusion générale.....		66
	Annexe 1.....	68
	Annexe 2.....	70
	Annexe 3.....	75
	Bibliographie	

Introduction générale

L'histoire de la théorie des dislocations se divise en trois étapes qui se chevauchent. Dans la première, quelques idées simples et ingénieuses sont apparues et ont donné des explications qualitatives à de nombreuses propriétés mécaniques des cristaux, par exemples de leur faible résistance mécanique. Dans la seconde étape, les explications sont devenues plus détaillées et plus spéculatives; elles se sont étendues à un plus large domaine d'observation : la mode était alors d'élaborer une théorie des dislocations au sujet d'un résultat quelconque sur la déformation plastique.

Finalement on se rendit compte que les dislocations pouvaient expliquer non seulement les résultats observés, mais presque n'importe quel résultat, et en général de plusieurs façons. Cette remarque conduisit à la troisième étape qui est l'établissement progressif et critique de la théorie fondamentale à partir des premiers principes et la recherche de vérifications expérimentales décisives de la théorie.

La théorie des dislocations prend d'autant plus d'intérêt que les interfaces cristallines sont elles mêmes constituées de défauts linéaires. En effet depuis environ trois décennies, les études expérimentales des couches épitaxiales sur substrat monocristallin se sont développées considérablement, depuis les premiers instants de la nucléation jusqu'à l'obtention de l'épaisseur désirée, celle-ci dépassant en général 10nm dans les applications sur substrat de silicium [1-3]. Lorsque ces couches ont des épaisseurs suffisantes, les interfaces sont souvent tapissées de 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. Les champs élastiques de

déformation régnant au voisinage de ces interfaces sont étudiés en microscopie électronique à transmission (par exemple [4-5]) et par diffraction de rayons X [6]. Il est donc nécessaire de disposer de modèles mathématiques aussi réalistes que possible qui puissent décrire ces champs de déformation.

Dans ce cadre, et en utilisant la théorie élastique anisotrope, une équipe* de recherche de l'université de Batna a pu déterminer les différents champs élastiques générés par différentes configurations de réseaux de dislocations interfaciales à savoir : réseau unidirectionnel, carré et hexagonal et ceci en élaborant des programmes en langage Fortran.

Et afin de comparer les résultats obtenus par cette équipe de recherche en anisotropie avec ceux de l'isotropie, nous avons fixé pour objectif dans ce travail d'utiliser le code de calcul formel MATHEMATICA pour calculer et représenter l'ensemble des champs élastiques isotropiques (déplacements, contraintes et énergie) générés par un réseau unidirectionnel de dislocations coins et ceci dans le cas d'une couche mince déposée sur un substrat cristallin.

Ce travail est présenté en 5 chapitres. Le premier chapitre est une introduction au concept de dislocation. Le deuxième chapitre passe en revue la théorie d'élasticité linéaire utilisée pour le calcul des différents champs élastiques autour des dislocations dans un milieu homogène infini. Dans le troisième chapitre, la technologie des couches minces est présentée.

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

Dans le cinquième chapitre, des applications numériques pour le calcul des déplacements, des contraintes et des énergies sont présentés pour les joints de flexion suivants : Si/Si et GaAs/GaAs et pour l'hétérostructure GaAs/Si accommodant un désaccord paramétrique.

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

* Equipe dirigée par le professeur Lahbib ADAMI

Chapitre 1

Introduction à la théorie des dislocations

1.1 Introduction.

Les premières études sur les matériaux ont amené les chercheurs à calculer la valeur de la résistance théorique de cristaux parfaits, valeurs très supérieures à celles effectivement mesurées. Durant les années 1930, on a formulé la théorie selon laquelle la différence entre les valeurs calculées et mesurées de la résistance mécanique s'expliquait par la présence d'un défaut cristallin linéaire, nommé « Dislocation » par la suite. Mais il a fallu attendre les années 1950 pour que soit confirmée, par observation directe au microscope électronique, l'existence des dislocations. Depuis lors, la théorie des dislocations s'est enrichie d'une explication précise des nombreux phénomènes physiques et mécaniques qui se produisent au sein des matériaux cristallins, notamment les métaux et les céramiques.

1.2 Généralités.

Une dislocation est un défaut à une dimension, ou défaut linéaire du réseau cristallin, au voisinage duquel certains atomes sont mal alignés [7]. La dislocation permet une déformation plastique du matériau lorsqu'elle se déplace.

1.2.1 Les différents types de dislocations.

Pour un réseau cubique, il existe deux types de dislocations : les dislocations coins et les dislocations vis (voir *Fig.1.1*). La dislocation coin est formée par l'insertion d'un demi plan atomique, elle est matérialisée par la ligne de dislocation AB (*Fig.1.1-a*). La dislocation vis est formée par le décalage d'une maille d'une partie du cristal (voir *Fig.1.1-b*). C'est un mouvement de cisaillement. Il existe aussi un autre

type de dislocation, qui n'a pas de représentation simple : il s'agit des dislocations mixtes qui possèdent à la fois un caractère coin et un caractère vis (Fig.1.1-c): son vecteur de Burgers a une composante parallèle et une autre perpendiculaire à la ligne de dislocation. Ainsi, sur la figure 1.1-c, la dislocation est de type vis à l'extrémité gauche, coin à l'extrémité droite et mixte entre les deux.

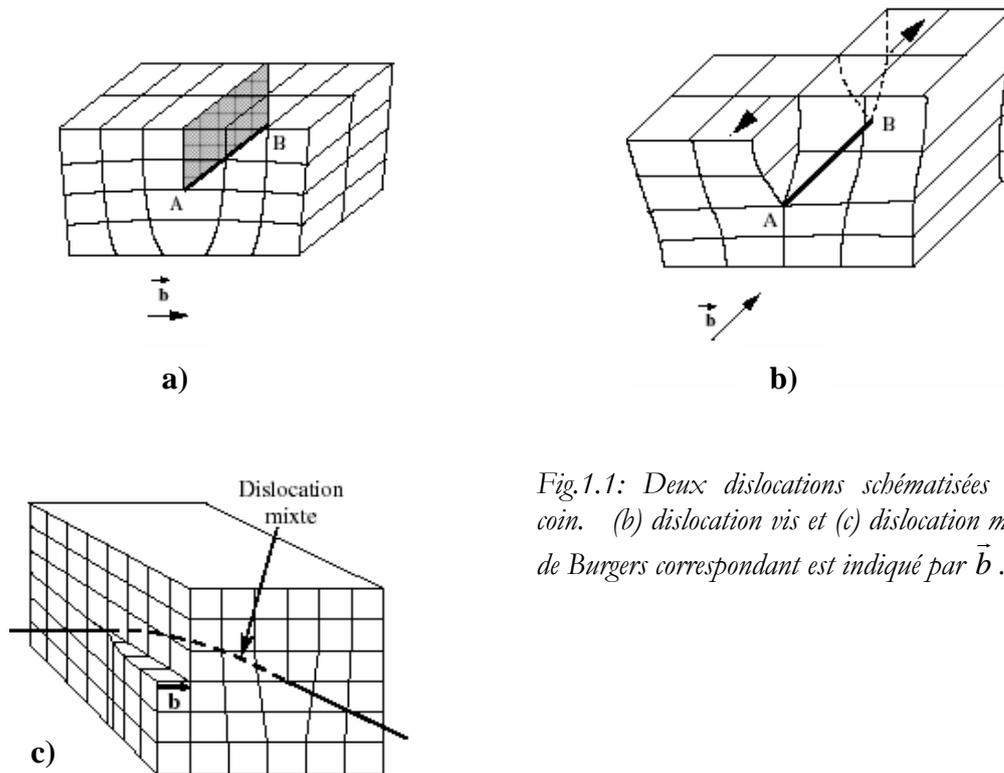


Fig.1.1: Deux dislocations schématisées :(a) dislocation coin. (b) dislocation vis et (c) dislocation mixte. Le vecteur de Burgers correspondant est indiqué par \vec{b} .

1.2.2 Le vecteur de Burgers d'une dislocation.

Une dislocation est caractérisée par son vecteur de Burgers \vec{b} , qui est un vecteur du réseau cristallin. Le type de dislocation (coin, vis ou mixte) est déterminé par l'orientation de ce vecteur par rapport à la ligne de dislocation: perpendiculaire pour une dislocation-coin, parallèle pour une dislocation-vis. Pour une dislocation mixte, le vecteur de Burgers et la ligne de dislocation ne sont ni perpendiculaires ni parallèles.

On détermine le vecteur de Burgers en dessinant, autour de la dislocation et suffisamment loin du coeur, un circuit fermé passant par les noeuds du réseau cristallin. Lorsqu'on enlève le défaut constitué par la dislocation du réseau cristallin, le vecteur de Burgers est la différence de chemin définie en parcourant le même circuit que précédemment (voir Fig.1.2).

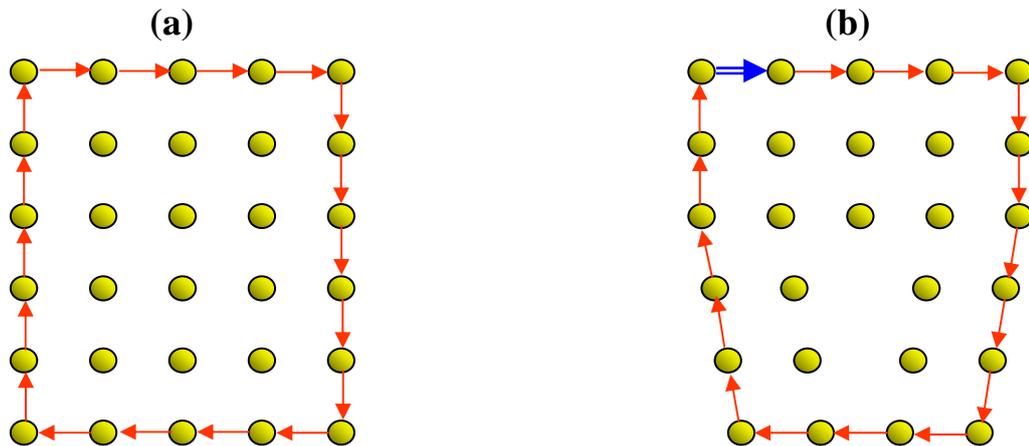


Fig.1.2: Construction du vecteur de Burgers d'une dislocation coin. (a) cristal parfait, (b) dislocation coin

1.2.3 Mouvements des dislocations.

Les dislocations peuvent se déplacer soit par glissement, soit par montée. Dans un plan atomique dense, le déplacement minimal des atomes redonnant une configuration conforme au réseau est plus petit que dans un plan peu dense (Fig.1.3). Il en va de même pour un déplacement selon une direction dense par rapport à une direction peu dense. Intuitivement, on peut supposer que les plans et directions denses sont respectivement les plans et directions privilégiés de glissement des atomes et donc des dislocations. Par exemple, pour les cristaux à structure cubique à face centrée (cfc), les plans denses sont du type $\{111\}$ et les directions denses du type $\langle 110 \rangle$. Des considérations plus rigoureuses ainsi que l'expérience confirment qu'ils constituent le système de glissement de ces cristaux.

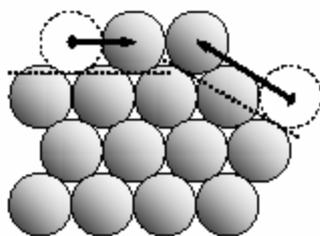


Fig.1.3 : Déplacements d'atomes selon un plan atomique dense (flèche de gauche) et selon un plan peu dense (flèche de droite). Les plans sont matérialisés par les lignes pointillées

Pour qu'une dislocation puisse glisser, il faut à la fois que sa ligne et son vecteur de Burgers appartiennent à un plan de glissement. Le mécanisme de montée est activé par le mouvement de lacunes situées au voisinage de la ligne de dislocation, il est donc d'autant plus probable que la température est élevée. Si des lacunes sont créées sous la dislocation, c'est le mécanisme inverse qui a lieu (on pourrait parler de «descente»).

1.2.4 Caractéristiques des dislocations

Plusieurs caractéristiques des dislocations ont une incidence marquée sur les propriétés mécaniques des métaux.

Lorsqu'un métal subit une déformation, une partie de l'énergie de déformation (environ 5%) y est conservée [7], tandis que le reste se dissipe sous forme de chaleur. La plus grande partie de l'énergie conservée y demeure en tant qu'énergie de déformation associée aux dislocations. Dans le cas de la dislocation coin représentée à la figure 1.4, la présence d'un demi-plan d'atomes supplémentaire engendre une certaine distorsion réticulaire atomique autour de la ligne de dislocation. Il s'ensuit que des régions deviennent le lieu de déformations réticulaires en compression, en traction et en cisssion s'imposant aux atomes voisins. Les atomes situés immédiatement au-dessus de la ligne de dislocation et ceux qui lui sont adjacents sont comprimés les uns contre les autres, ce qui revient à dire qu'ils font l'objet d'une déformation en compression par rapport aux atomes d'un cristal parfait qui sont très loin de la dislocation. L'effet est contraire immédiatement au-dessous du demi-plan: les atomes réticulaires y subissent une déformation en tension. Des contraintes de cisssion sont également présentes autour d'une dislocation coin. Dans le cas d'une dislocation vis, les déformations réticulaires relèvent exclusivement d'un cisaillement et peuvent être assimilées à des champs de déformation qui rayonnent à partir de la ligne de dislocation. Les déformations atteignent les atomes environnantes et leur ampleur diminue avec l'augmentation de la distance par rapport à la dislocation.

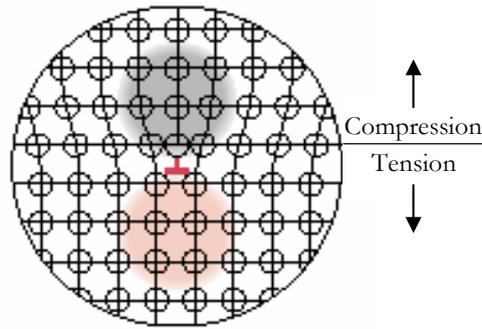


Fig.1.4 : Région en compression et en tension situées à proximité d'une dislocation.

1.3 Réseaux de dislocations interfaciales

L'interface entre deux grains cristallins ayant des orientations ou des paramètres de maille différents est appelée joint de grains. En général, un joint de grains est considéré comme une interface quelconque, mais à l'équilibre thermique il est plan afin de minimiser sa surface et donc de minimiser l'énergie d'interface. Il est constitué d'un réseau de dislocations qui permet d'accommoder la discontinuité cristalline entre les deux grains.

1.3.1 Les différents types de réseaux de dislocations

Les réseaux de dislocations se formant au niveau d'un joint de grains peuvent être dus à une flexion entre les deux grains, une torsion ou un désaccord de maille (*Fig.1.5*). On parle alors de joints de flexion, de torsion ou de désaccord de maille.

Une flexion est une rotation entre les plans cristallins des deux cristaux liés dont l'axe est contenu dans le plan de la jonction.

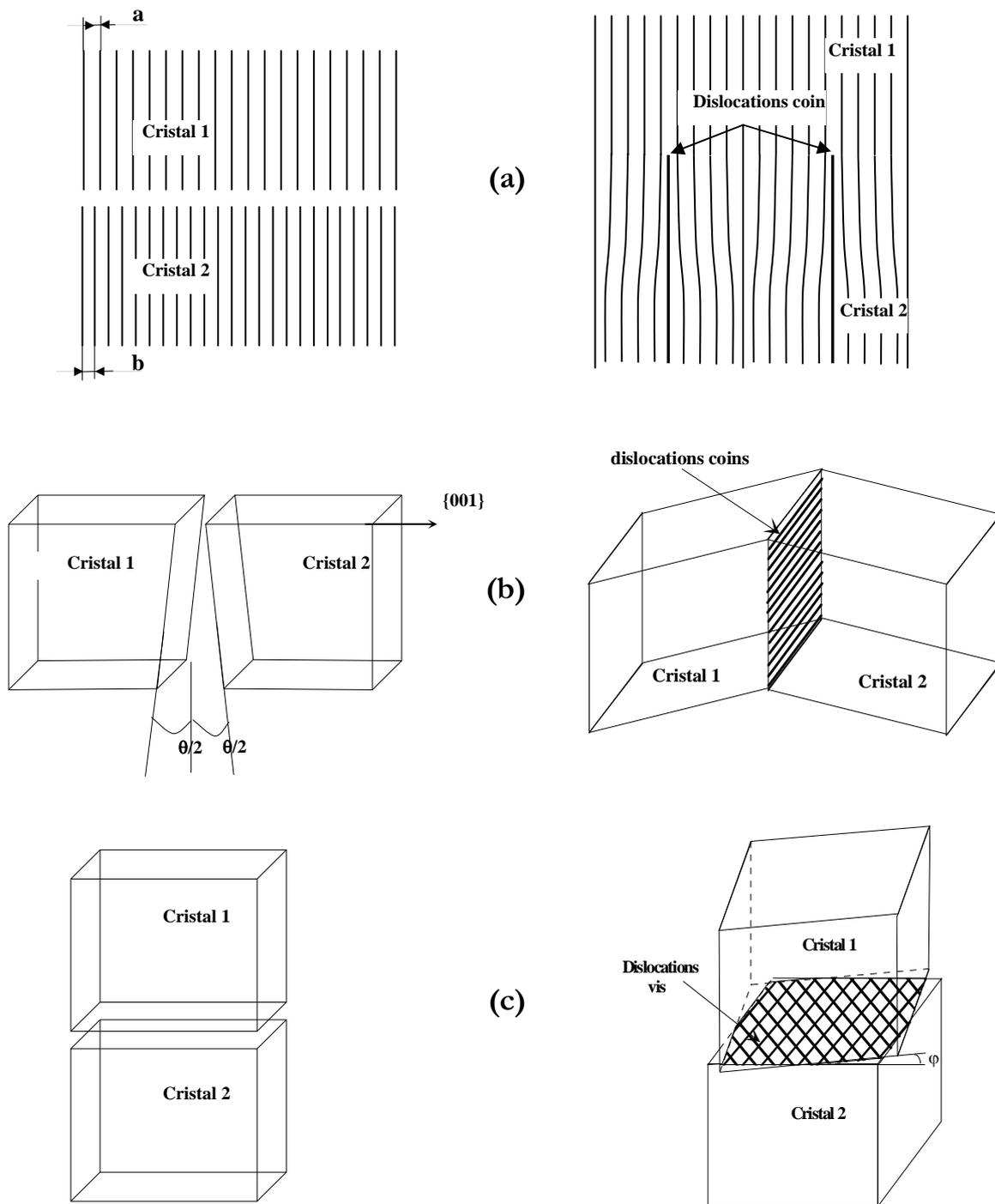


FIG. 1.5 : Les différentes désorientations cristallines possibles lors du collage et les réseaux de dislocations qu'engendre le raccordement cristallin.

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

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

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

1.3.1.1 Joint de désaccord paramétrique.

Si les deux paramètres de maille sont différents, un joint de grains composé d'un réseau 1D ou 2D de dislocations coin va apparaître pour relaxer les contraintes de désaccord paramétrique « *misfit dislocations* ». Le « misfit » est bien connu dans le domaine de l'épitaxie.

Les dislocations formées, sont confinées et périodiques dans le plan de l'interface de collage. Elles forment un véritable joint de grains entre les deux cristaux.

Les premières observations de réseaux de dislocations de désaccord aux interfaces ont été faites en microscopie électronique en transmission (MET) par Matthews [8]

sur le système Au sur Ag orienté (001) : $\frac{\Delta a}{a} = -0.2\%$ puis Jesser et Matthews [9] sur

les systèmes γ -Fe sur Cu -(001) : $\frac{\Delta a}{a} = +1.6\%$, Co/Cu-(001) : $\frac{\Delta a}{a} = +2.4\%$ et Cr/Ni-

(001) : $\frac{\Delta a}{a} = -3.1\%$ [10-a,b,c].

Pour tous ces métaux cubiques à faces centrées (c.f.c.) orientés (001), les dislocations de désaccord formaient, à l'interface, un réseau carré suivant les directions $\langle 110 \rangle$.

1.3.1.2 Joint de flexion.

Une flexion est une rotation entre les plans cristallins des deux cristaux liés dont l'axe est contenu dans le plan de la jonction. Sachant que les deux surfaces que nous mettons en contact ne sont jamais parfaites et qu'elles présentent notamment un certain désalignement, une erreur de coupe par rapport au plan cristallin idéal qui devrait terminer une surface {001}. Cette désorientation de flexion va provoquer l'apparition d'un réseau 1D de dislocations coin dont la période est donnée par la formule de Frank :

$$p_{coin} = \frac{b}{2 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (1.1)$$

1.3.1.3 Joint de torsion.

Une torsion est une rotation entre les plans cristallins des deux cristaux liés, mais dont l'axe est perpendiculaire au plan de la jonction. Lors du raccordement, si les deux cristaux présentent une désorientation en rotation, des contraintes périodiques vont apparaître avec la formation des liaisons covalentes. En effet, il est très facile de se rendre compte, avec une simple figure de Moiré, figure 1.6, qu'il existe des zones de coïncidence et des zones où les colonnes atomiques ne sont pas les unes en face des autres lors de la superposition des deux cristaux. Dans ces zones de bonne coïncidence, les colonnes atomiques de chaque cristal vont se décaler élastiquement pour accommoder le décalage cristallin. Cependant, plus on s'éloigne du centre de ces zones, plus l'énergie nécessaire à la déformation des colonnes est importante. A une certaine distance, il est même énergétiquement plus favorable de changer de colonnes atomiques pour continuer le raccordement d'un cristal avec l'autre. C'est ce décalage qui provoque l'apparition des dislocations vis.

De même, la périodicité d'un réseau de dislocations induit par une désorientation d'angle φ est donnée par la formule de Frank [11] :

$$P_{vis} = \frac{b}{2 \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)} \quad (1.2)$$

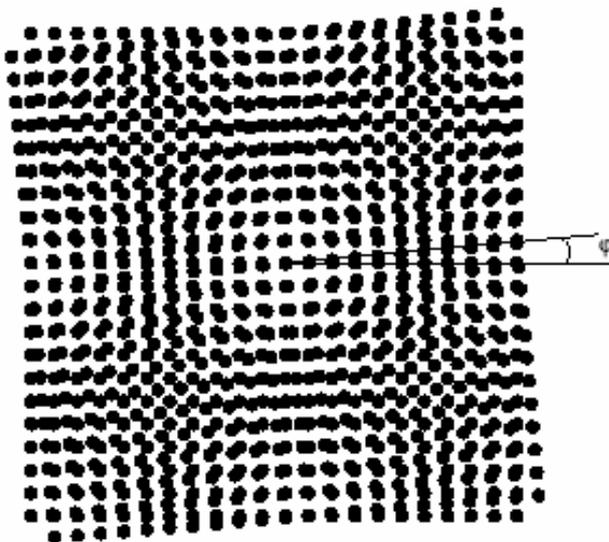


Fig.1.6: Figure de Moiré obtenue en superposant deux réseaux carrés identiques tournés l'un par rapport à l'autre d'un angle φ .

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

$$p_{vis} = \frac{a_0}{2\sqrt{2} \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)} \quad (1.3)$$

L'équation (1.3) relie l'angle de rotation φ dans le plan entre les deux cristaux à la période du réseau de dislocations, le long de la direction $\langle 110 \rangle$. Le contrôle de cet angle de rotation détermine donc la précision de la périodicité du réseau.

Dans le cas d'un réseau de lignes de dislocations mixtes, pour un angle de flexion θ , la formule de Frank s'écrit :

$$p_{mixte} = \frac{a_0}{2 \tan \theta} \quad (1.4)$$

Chapitre 2

Rappels de la théorie de l'élasticité

2.1 Définitions

2.1.1 Le champ de déplacements

Considérons un solide initialement non contraint (*Fig 2.1*). Soient $(x ; y ; z)$ les coordonnées cartésiennes d'un atome quelconque du solide. Lorsque l'on applique des contraintes, la position de l'atome considéré change et les nouvelles coordonnées sont : $(x+u ; y+v ; z+w)$. Les quantités \mathbf{u} , \mathbf{v} et \mathbf{w} sont donc les déplacements de l'atome en question selon les axes (Ox) , (Oy) et (Oz) du repère respectivement (où O est l'origine du repère) et le champ de déplacements est le vecteur de coordonnées $(\mathbf{u} ; \mathbf{v} ; \mathbf{w})$.

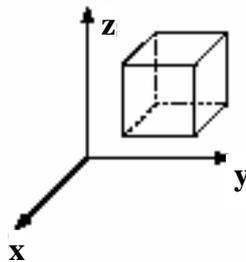


Fig.2.1 : Un petit élément de volume d'un solide.

2.1.2 Le champ de déformations

Le champ de déformations d'un élément de volume peut être exprimé au moyen de six termes. Il s'agit de trois termes de dilatation ou de compression (suivant qu'ils sont positifs ou négatifs) ϵ_{ij} selon l'axe (O_i) (avec $i = x, y$ ou z) et de six termes de cisaillement ϵ_{ji} (où $i \neq j$) dans un plan parallèle à l'axe (O_k) (où $k \neq i$ et j).

Ces déformations sont liées aux déplacements que subissent les atomes :

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{xx} &= \frac{\partial u}{\partial x} & \varepsilon_{xy} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\
 \varepsilon_{yy} &= \frac{\partial v}{\partial y} & \varepsilon_{xz} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\
 \varepsilon_{zz} &= \frac{\partial w}{\partial z} & \varepsilon_{yz} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

2.1.3 Le champ de contraintes

De même, le champ de contraintes (qui n'est autre qu'une force par unité de surface) d'un élément de volume peut être exprimé au moyen de neuf termes: trois termes de dilatation compression σ_{ii} et six termes de cisaillement σ_{ij} (où $i \neq j$) (Fig.2.2). Les six termes de cisaillement ne sont pas indépendants : ils doivent s'ajouter de sorte qu'aucun couple n'agisse sur l'élément de volume. S'il existait un tel couple, l'élément de volume tournerait de plus en plus vite. Cela impose $\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$, $\sigma_{xz} = \sigma_{zx}$ et $\sigma_{yz} = \sigma_{zy}$.

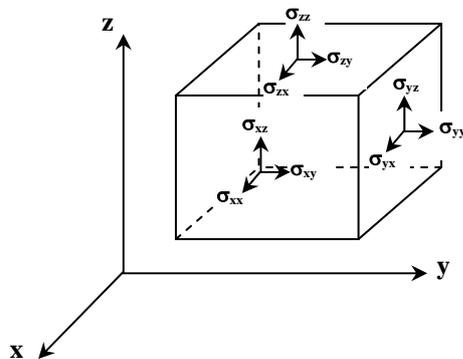


Fig.2.2 : Les composantes d'un champ de contraintes agissant sur un élément de volume.

2.1.4 L'énergie de déformation élastique

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

$$w = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}
 \tag{2.2}$$

2.2 Théorie de l'élasticité linéaire

Si le champ de contraintes appliqué au solide considéré est faible et si la température est assez basse pour que les effets de fluage soient négligeables, il est relié aux déformations par la loi linéaire de Hooke qui s'écrit (en notation matricielle) comme suit :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

où les C_{ij} sont les constantes dites élastiques.

Ces constantes ne sont pas indépendantes. Cependant, pas moins de 21 d'entre elles sont nécessaires pour un matériau anisotrope. Si l'on se limite aux corps isotropes, le nombre de constantes indépendantes est considérablement réduit. Dans ce cas, la loi de Hooke peut s'exprimer à l'aide des seuls coefficients de Lamé μ et λ :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\lambda + 2\mu) & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & (\lambda + 2\mu) & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & (\lambda + 2\mu) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

λ est défini par: $\lambda = \frac{2\nu\mu}{1-2\nu}$

ν est le coefficient de Poisson du matériau.

2.3 Application de la théorie de l'élasticité linéaire aux dislocations.

Les dislocations imposent des déformations et des contraintes au cristal. Le cristal sera considéré être un milieu infini, continu, élastique et isotrope dans lequel la théorie de l'élasticité linéaire s'applique Hirth et Lothe [12]. Les résultats exposés dans la suite seront donc seulement valable suffisamment loin du cœur de la dislocation considérée car ce dernier est loin d'être une zone continue et exempte de déformations plastiques.

2.3.1 Cas des dislocations vis

Considérons une dislocation vis, figure 2.3, dont la ligne est orientée positivement comme l'axe (Oz) et dont le vecteur de Burgers est défini par : $\vec{b} = -b \vec{z}$, où \vec{z} est le vecteur unitaire de l'axe (Oz).

Son champ de déplacements est défini par :

$$w = \frac{b}{2\pi} \arctan \frac{y}{x} \quad (2.5)$$

les déplacements selon les axes (Ox) et (Oy) étant nuls. Les déformations élastiques autour de cette dislocation sont :

$$\varepsilon_{xz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) = -\frac{b}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2},$$

$$\varepsilon_{yz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) = \frac{b}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}, \quad (2.6)$$

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{xy} = 0,$$

et donc les contraintes sont :

$$\sigma_{xz} = -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2},$$

$$\sigma_{yz} = \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}, \quad (2.7)$$

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \sigma_{xy} = 0,$$

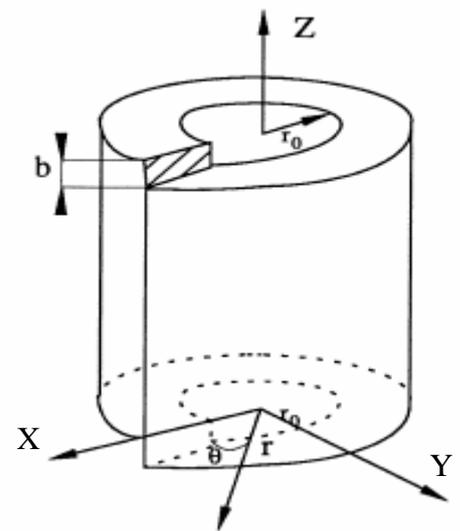


Fig. 2.3 : Schéma d'une dislocation vis

Dans les équations (2.6) et (2.7), on peut voir que les déformations et les contraintes deviennent infinies quand la distance ($r = x^2 + y^2$) par rapport à la ligne de dislocation tend vers zéro. Puisque la théorie linéaire de l'élasticité est fondée sur l'hypothèse que les contraintes et les déformations sont petites, il apparaît à nouveau que cette analyse n'est pas valable dans les régions proches de la ligne de dislocation. On limite souvent l'utilisation de ces expressions à des distances r supérieures au rayon du cœur r_0 . Ce dernier est parfois choisi égal à cinq fois le module du vecteur de Burgers.

L'énergie de déformation élastique par unité de longueur de la ligne de dislocation (énergie interne pour une dislocation) s'exprime en:

$$\xi = \int_{r_0}^R \frac{\mu b^2}{\pi} \left(\frac{1}{2r} - \frac{r}{R^2} \right)^2 r dr = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}, \quad (2.8)$$

où r_0 est le rayon du cœur et R la dimension du cristal ou du grain cristallin pour les polycristaux. L'énergie interne totale de la dislocation inclut également l'énergie emmagasinée à l'intérieur du rayon r_0 où la théorie linéaire des milieux continus n'est plus applicable. Cependant la plus grande partie de l'énergie de déformation due à la dislocation est emmagasinée dans les régions éloignées du cœur. Par conséquent, l'équation (2.8) donne une bonne approximation de l'énergie interne totale.

2.3.2 Cas des dislocations coin

Considérons une dislocation coin dont la ligne est orientée positivement comme l'axe (Oz) et dont le vecteur de Burgers est : $\vec{b} = b \vec{x}$, où \vec{x} est le vecteur unitaire de l'axe (Ox).

Son champ de déplacements est défini par :

$$u = \frac{b}{2\pi} \left[\arctan \frac{y}{x} + \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{xy}{r^2} \right],$$

$$v = -\frac{b}{2\pi} \left[\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \ln r + \frac{x^2}{2r^2(1-\nu)} \right], \quad (2.9)$$

$$w = 0,$$

Son champ de déformations est défini par :

$$\varepsilon_{xx} = -\frac{by}{4\pi} \frac{3x^2 + y^2 - 2\nu r}{r^2(\nu-1)},$$

$$\varepsilon_{yy} = -\frac{by}{4\pi} \frac{[y^2(2\nu-1) + x^2(2\nu+1)]}{r^2(\nu-1)}, \quad (2.10)$$

$$\varepsilon_{xy} = \frac{bx}{4\pi} \frac{x^2 - y^2}{r^2(1-\nu)},$$

$$\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0,$$

Son champ de contraintes est défini par :

$$\sigma_{xx} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{r^2},$$

$$\sigma_{yy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{r^2}, \quad (2.11)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(3x^2 + y^2)}{r^2},$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0,$$

Enfin, son énergie de déformation s'écrit :

$$\xi = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0}, \quad (2.12)$$

2.3.3 Cas des dislocations mixtes

Le vecteur de Burgers d'une dislocation mixte rectiligne fait un angle arbitraire avec la ligne de dislocation. Si nous faisons coïncider l'axe (Oz) avec la ligne de dislocation et plaçons l'axe (Ox) dans le plan de glissement de la dislocation, on peut écrire le vecteur de Burgers :

$\vec{b} = b_x \vec{x} + b_z \vec{z}$, où b_x et b_z désignent les composantes du vecteur de Burgers selon les axes (Ox) et (Oz). Ces composantes ne sont autre que les composantes coin et vis (respectivement) du vecteur de Burgers.

Le champ de déplacements d'une ligne de dislocation est alors la somme du champ de déplacement d'une dislocation coin pure de vecteur de Burgers $b_x \vec{x}$ et d'une dislocation vis pure de vecteur de Burgers $b_y \vec{y}$. Les champs de déformations et de contraintes ainsi que l'énergie de déformation élastique s'obtiennent par des sommes analogues.

Chapitre 3

Technologie des couches minces

Introduction

Les études effectuées sur les couches minces déposées sur des substrats monocristallins révèlent l'existence de réseaux de dislocations interfaciales bien organisés, et dont la densité et le caractère dépendent des écarts paramétriques et angulaires entre les cristaux le long de l'interface.

Dans ce chapitre, nous passerons en revue la technologie des couches minces et les méthodes de leurs élaborations.

3.1 Notion de couche mince [13].

Par principe une couche mince d'un matériau donné est un élément de ce matériau dont l'une des dimensions, qu'on appelle l'épaisseur, a été fortement réduite de telle sorte qu'elle s'exprime en nanomètres et que cette faible distance entre les deux surfaces limites (cette quasi bidimensionnalité) entraîne une perturbation de la majorité des propriétés physiques. La différence essentielle entre le matériau à l'état massif et à l'état de couches minces est en effet liée au fait que dans l'état massif on néglige généralement avec raison le rôle des limites dans les propriétés, tandis que dans une couche mince ce sont au contraire les effets liés aux surfaces limites qui sont prépondérants. Il est assez évident que plus l'épaisseur sera faible et plus cet effet de bidimensionnalité sera exacerbé, et qu'inversement lorsque l'épaisseur d'une couche mince dépassera un certain seuil l'effet d'épaisseur deviendra minime et le matériau retrouvera les propriétés bien connues du matériau massif.

La seconde caractéristique essentielle d'une couche mince est que, quelle que soit la procédure employée pour sa fabrication, une couche mince est toujours solidaire d'un support sur lequel elle est construite (même si, après coup, il arrive parfois que l'on sépare le film mince du support). En conséquence il sera impératif de tenir compte de ce fait majeur dans la conception, à savoir que le support influence très fortement les propriétés structurales de la couche qui y est déposée. Ainsi une couche mince d'un même matériau, de même épaisseur pourra avoir des propriétés physiques sensiblement différentes selon qu'elle sera déposée sur un substrat isolant amorphe tel le verre, ou un substrat monocristallin de silicium par exemple.

Il résulte de ces deux caractéristiques essentielles d'une couche mince la conséquence suivante: une couche mince est anisotrope par construction.

3.2 Les techniques de fabrication de couches minces

On distingue deux grandes catégories de méthodes d'élaboration de couches minces : les méthodes physiques, telles que la pulvérisation ou l'évaporation, et les méthodes chimiques, comme la CVD (*chemical vapor deposition*). Les méthodes physiques sont en général utilisées en recherche, alors que les méthodes chimiques sont également utilisées industriellement, à cause de leur meilleur rendement (vitesse de dépôt plus grande). Nous citons ici le principe des trois techniques utilisées actuellement dans le domaine des films minces magnétiques ou les dépôts ayant des épaisseurs de quelques angströms, à savoir, la pulvérisation cathodique, l'épitaxie par jets moléculaires, et l'ablation laser.

3.2.1 La pulvérisation cathodique

Le principe de base de la pulvérisation cathodique est de bombarder une cible (cathode) à l'aide d'un gaz neutre (en général l'argon) afin de pulvériser les atomes constituant la cible, figure 3.1. Ces atomes pulvérisés vont alors se

déposer sur le substrat qui joue le rôle d'anode. Une tension de quelques kV appliquée entre l'anode et la cathode entraîne une décharge auto-entretenu si la pression de gaz est suffisante (10 à 500 mTorr). Autour de ce dispositif de base peuvent se greffer d'autres fonctions qui permettent d'augmenter l'efficacité de la méthode de dépôt. On distingue en particulier le procédé triode, qui inclue une source auxiliaire d'électrons et permet de travailler avec des pressions de gaz plus faibles (0,1 mTorr), le procédé magnétron, pour lequel des aimants permanents distribués autour de la chambre permettent de créer un confinement magnétique du plasma et par là même d'augmenter le rendement d'ionisation des électrons qui effectuent alors des trajectoires hélicoïdales, et le procédé radiofréquence, pour lequel on applique une tension radiofréquence, qui permet de pulvériser des isolants contrairement aux procédés précédents.

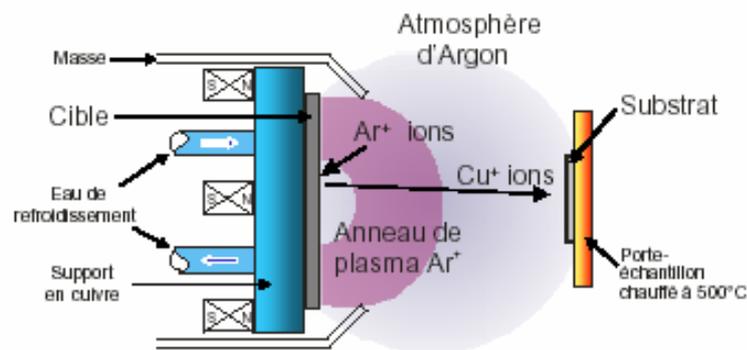


Fig.3.1 : Schéma de principe de la pulvérisation cathodique

Le grand intérêt de la pulvérisation cathodique est sa capacité à synthétiser rapidement un grand nombre d'échantillons de caractéristiques variables. Notons qu'il est maintenant possible, en diminuant la pression dans les enceintes, et en diminuant la vitesse de croissance, d'obtenir dans certains cas des dépôts épitaxiés.

Cette technique permet un contrôle excellent de la formation du matériau sous forme de couche mince, et donc de garantir une qualité et une reproductibilité nécessaire non seulement à de nombreuses applications

technologiques, mais également à l'étude purement fondamentale des propriétés de ces nouveaux matériaux. Ce contrôle de la qualité est illustré par les deux images (Fig.3.2), qui représentent respectivement la surface d'un substrat avant le dépôt, et la surface d'une couche mince après le dépôt.

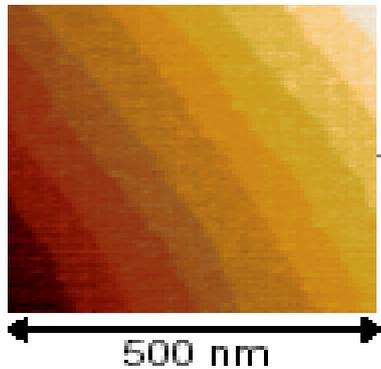


Fig.3.2 a) Substrat avant dépôt, avec présence de marches atomiques à la surface.

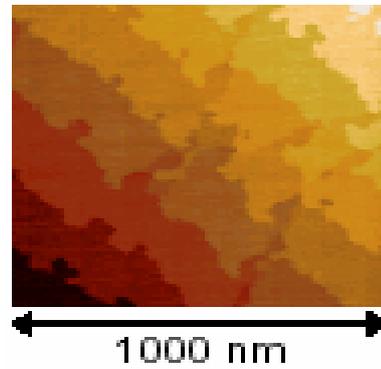


Fig.3.2 b) Couche mince après dépôt, ayant conservé la structure de base du substrat.

3.2.2 L'Épitaxie par Jets moléculaires.

L'EJM est une technique qui permet de réaliser des dépôts monocristallins, figure 3.3. Cette technique a été développée pour la croissance des semi-conducteurs (Si, GaAs, CdTe, ZnSe,...) car elle permet de réaliser des homoépitaxies à basse température (400-600°C pour Si) contrairement à la CVD (1000°C). En outre, les basses températures d'épitaxie impliquent de travailler avec des vitesses lentes (qq. Å/s) afin de laisser le temps aux atomes arrivant à la surface de migrer par diffusion de surface vers des sites cristallographiques. Pour obtenir des films purs, compte tenu de ces vitesses lentes, il est donc nécessaire de travailler avec des vides très poussés, appelé UHV pour (*Ultra-High-Vacuum*), à savoir 10^{-10} torr classiquement. Le principe des dépôts est très simple : il suffit d'évaporer le matériau que l'on veut déposer en le chauffant par effet joule (fil résistif), par rayonnement ou par bombardement électronique (canon à électrons). En outre, sous UHV, le libre parcours moyen parcouru par un atome est très grand (de l'ordre de 10^6 m à

10^{-10} torr !), ce qui implique que les flux d'atomes évaporés sont directionnels, les atomes se déplaçant en ligne droite sans aucun choc avant de se déposer sur le substrat. C'est pour cette raison qu'on parle de jets moléculaires ou atomiques. On ne peut donc pas parler de pression d'un gaz dans une chambre sous UHV.

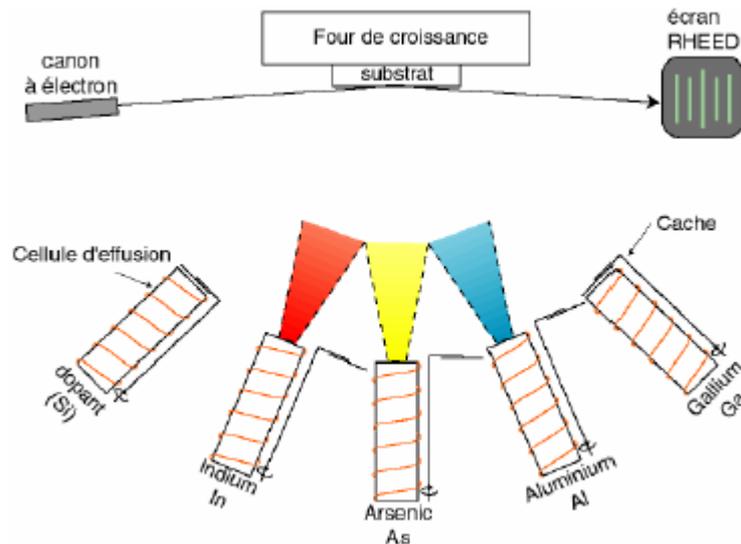


Fig. 3.3: Schéma de principe d'une croissance par épitaxie par jets moléculaires

En outre, étant donné les faibles pressions (on devrait alors plutôt dire flux converti en pression), la théorie cinétique des gaz est tout à fait appropriée pour calculer les flux. Un tel vide impose de grosses contraintes (problème des frottements mécaniques sous UHV, dégazage, transfert des échantillons) qui rend cette technique lourde et demandant un savoir-faire important. Néanmoins, cette technique permet de réaliser couramment des hétéroépitaxies compte tenu des faibles températures d'épitaxie qui éliminent le mécanisme d'interdiffusion des deux matériaux. Cette technique, comme la pulvérisation cathodique, est couramment utilisée pour la synthèse de couches minces magnétiques.

3.2.2.1 Généralités sur l'épitaxie

Lorsqu'un matériau est épitaxié, [du grec *taxi* (ordre) et *epti* (dessus)] il reproduit la structure cristalline du substrat sans discontinuité au niveau de leur interface (on parle d'*homoépitaxie* si le matériau épitaxié et le matériau support sont identiques et d'*hétéroépitaxie* dans le cas contraire). Pour que cela soit possible, deux conditions doivent être vérifiées. Il faut que le matériau déposé et le substrat cristallisent dans la même structure ou dans des structures voisines. De plus, ils doivent posséder des paramètres de maille proches.

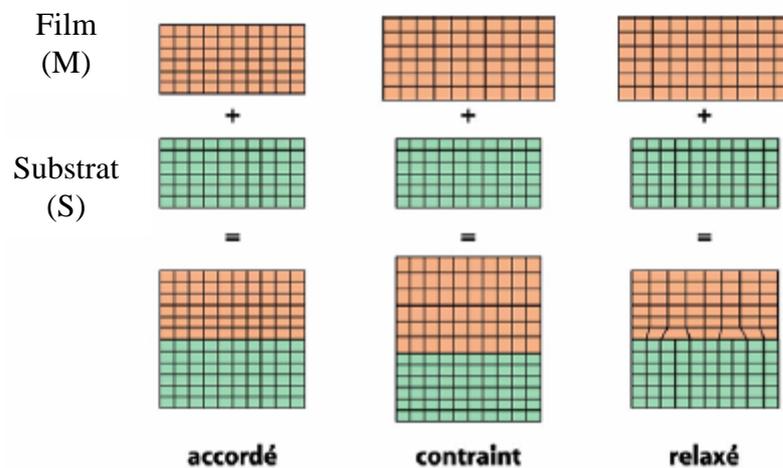


Fig.3.4 : Structures d'hétéroépitaxies accordée en maille, contrainte et relaxée (l'hétéroépitaxie accordée en maille est similaire à l'homoépitaxie).

Dans le cas où le désaccord de paramètre de maille est strictement nul, il est théoriquement possible d'épitaxier une épaisseur infinie de matériau sans que des dislocations n'apparaissent (la croissance est alors cohérente). Par contre s'il est non nul, le matériau déposé est contraint et subit une déformation élastique lors de la croissance, de sorte que son paramètre de maille dans le plan de l'interface soit identique à celui du substrat ; on parle alors de croissance pseudomorphique cohérente. Cette déformation est quadratique (Fig.3.4). Cependant, l'énergie élastique accumulée dans le système constitué du substrat et du matériau épitaxié croît linéairement avec la quantité de

matière déposée et doit être relaxée. Ce sont les différents modes de croissance permettant cette relaxation.

3.2.2.2 Les différents modes de croissance

Lorsque l'on considère la croissance d'une couche mince cristalline sur un substrat cristallin, on peut distinguer schématiquement trois modes de croissance (voir Fig.3.5). Dans le premier cas, le matériau déposé croît couche par couche (mode de croissance Franck-Van der Merwe). La surface de croissance reste globalement conforme à la surface du substrat, on parle de croissance bidimensionnelle. Dans le deuxième mode de croissance, appelé mode Volmer-Weber, les atomes qui arrivent sur la surface se regroupent et forment des îlots. C'est une croissance tridimensionnelle. Le troisième type de croissance, le mode Stranski-Krastanov est intermédiaire. Les premières couches croissent de manière bidimensionnelle, puis, au delà d'une certaine épaisseur appelée épaisseur critique, la croissance subit une transition et devient tridimensionnelle. La couche mince est donc constituée d'une couche de mouillage surmontée d'îlots. C'est le cas de la croissance du germanium sur silicium.

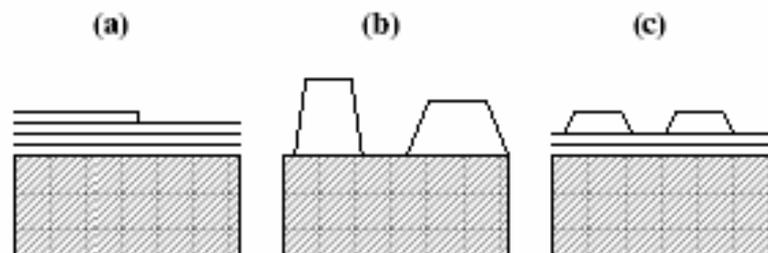


Fig.3.5 : Schéma des différents modes de croissance : (a) Franck-Van der Merwe, (b) Volmer-Weber et (c) Stranski-Krastanov.

3.2.2.3 Considérations thermodynamiques.

a) Considérations d'énergie de surface:

Aux tous premiers instants de la croissance épitaxiale, le rapport entre la surface du matériau épitaxié et son volume est très grand. Des considérations relatives aux énergies de surface prévalent donc sur celles relatives à l'énergie élastique emmagasinée en volume. Soient γ_s l'énergie de surface du substrat S , γ_m l'énergie de surface du matériau épitaxié M et γ_i leur énergie d'interface. Les énergies de surface dépendent de l'orientation cristalline, de l'état de contrainte et des reconstructions de surface. L'énergie d'interface est liée au recouvrement du substrat par le matériau épitaxié. Les matériaux appariés sont souvent voisins chimiquement. Si $\gamma_s > \gamma_m + \gamma_i$, l'augmentation de la surface libre du matériau épitaxié constitue une diminution de l'énergie du système. C'est pourquoi le matériau M va «mouiller» la surface et croître de manière 2D: une nouvelle couche atomique ne se forme que lorsque la précédente est complète. C'est le *mode de croissance Frank-van der Merwe*. A ce stade de la croissance, l'énergie élastique emmagasinée n'est pas suffisante pour former des dislocations (assez coûteuses en énergie) ; la croissance est donc cohérente. Si en revanche $\gamma_s < \gamma_m + \gamma_i$, l'augmentation de la surface libre du matériau épitaxié constitue une augmentation de l'énergie du système et ce dernier va donc tenter de maintenir la surface libre du substrat aussi grande que possible : il se formera des îlots 3D cohérents (ils peuvent ne pas demeurer cohérents si la croissance se poursuit). C'est le *mode de croissance Volmer-Weber*.

En l'absence de désaccord de paramètre de maille entre M et S (c'est à dire dans le cas d'une homoépitaxie), les modes de croissance 2D et 3D cohérents sont les seules morphologies que peut adopter le matériau M .

Pour décrire les modes de croissance qui opèrent quand la quantité de matériau déposé augmente, de simples considérations de surfaces ne suffisent plus : il faut également prendre en compte l'énergie emmagasinée en volume.

b) Considérations d'énergie emmagasinée en volume:

✓ Une énergie d'origine élastique.

L'énergie emmagasinée dans le volume du matériau déposé est due à la contrainte que subit ce dernier. Cette contrainte a deux origines : thermique et élastique. La contrainte d'origine thermique est due à la différence de coefficient de dilatation thermique entre le substrat S et le matériau épitaxié M . De cette différence de coefficient de dilatation résulte une différence de déformation au cours d'un changement de température ΔT . Entre le GaAs et l'InAs par exemple, cette différence de déformation est de l'ordre de 0,7 pour mille pour un ΔT de 600°C, alors que le désaccord de maille entre le GaAs et InAs est de l'ordre de 7%. C'est pourquoi on négligera la contrainte d'origine thermique par rapport à la contrainte élastique due au désaccord de paramètre de maille.

Selon la théorie de l'élasticité linéaire l'énergie élastique E_{el} accumulée par unité de surface dans une couche épitaxiée 2D cohérente est donnée par :

$$E_{el} = M \left(\frac{\Delta a}{a} \right)^2 h \quad (3.1)$$

où M est le module d'Young du matériau épitaxié quand il est soumis à une contrainte biaxiale (dans un plan parallèle à la surface du substrat, pour que le désaccord de maille soit nul dans ce plan), $\frac{\Delta a}{a}$ est le désaccord de maille du substrat par rapport à la couche et h est l'épaisseur de cette dernière. M dépend du matériau épitaxié et de son orientation cristalline (car il se déforme de manière différente selon le plan dans lequel s'exerce la contrainte biaxiale). Pour une couche 2D cohérente, l'énergie totale accumulée dans la couche par unité de surface est donc :

$$E_{Tot} = M \left(\frac{\Delta a}{a} \right)^2 h + \gamma_m + \gamma_i \quad (3.2)$$

Elle croît avec h et la simple croissance 2D cohérente n'est rapidement plus suffisante pour relaxer la contrainte à l'origine de cette énergie. Le système peut alors évoluer soit vers un mode de croissance par lequel la contrainte est relaxée de manière plastique par formation de dislocations, soit vers un autre mode de croissance par lequel la contrainte est relaxée de manière élastique par formation d'îlots cohérents.

✓ **Relaxation de l'énergie élastique par formation de dislocations.**

Le premier mode de croissance est le plus souvent adopté par des systèmes pour lesquels le désaccord de maille est très faible : de quelques pour mille. La croissance demeure 2D cohérente et pseudomorphique jusqu'à une certaine épaisseur. Au-delà il devient préférable pour le système de former des dislocations (organisées en un réseau 2D carré, dans le cas d'une orientation (100)) à l'interface entre le matériau déposé et le substrat pour relaxer la contrainte élastique accumulée. Le matériau déposé reprend alors son propre paramètre de maille.

✓ **Relaxation de l'énergie élastique par formation d'îlots tridimensionnels croissance Stranski-Krastanov.**

L'autre mode de croissance qui permet la relaxation d'un matériau qui commence par croître de manière 2D est généralement adopté par des systèmes dont le désaccord de maille est de quelques pour cent.

Après formation d'une fine couche 2D pseudomorphique (dite «couche de mouillage»), la contrainte accumulée est relaxée par les faces libres d'îlots cohérents qui se forment en surface : comme on peut le voir sur le schéma de la Fig.3.6, au niveau de ces faces libres, le matériau épitaxié tend à reprendre son propre paramètre de maille et la contrainte élastique est ainsi diminuée.

C'est le *mode de croissance Stranski-Krastanov (SK)*. La relaxation de l'énergie élastique ainsi permise sera d'autant plus efficace que l'îlot sera haut. Mais cela va de pair avec une augmentation de sa surface libre et par conséquent de son énergie de surface. C'est donc cette compétition entre la relaxation de l'énergie élastique et l'augmentation de l'énergie de surface qui conditionne la croissance SK. D'autre part, si la croissance du matériau contraint se poursuit, les îlots atteignent une taille au-delà de laquelle la relaxation élastique ne suffit plus et des dislocations apparaissent en leur sein, tandis qu'ils adoptent le paramètre de maille du matériau libre.

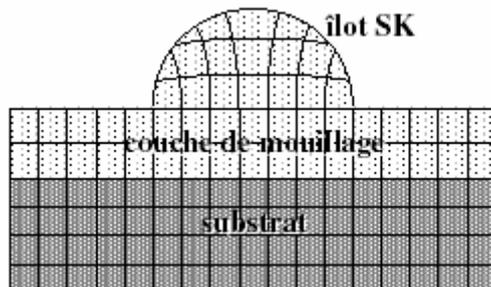


Fig.3.6 : Représentation schématique d'un îlot formé selon le mode de croissance Stranski-Krastanov.

3.2.3 L'ablation laser

Cette technique est proche de l'EJM puisqu'elle ne diffère de cette dernière que par le moyen d'évaporer le matériau à déposer. On utilise en effet un faisceau laser de forte intensité envoyé sur une cible constituée du matériau que l'on veut déposer sur le substrat. La différence avec l'EJM est qu'on évapore alors des amas d'atomes. L'avantage de cette technique réside a priori dans sa capacité à conserver la stœchiométrie d'un alliage constituant la cible. En outre, il existe une autre différence importante avec l'EJM : en EJM l'énergie des atomes se déposant sur le substrat est uniquement thermique et donc très faible (0,17 eV pour 1000°C) alors qu'elle peut être beaucoup plus importante en ablation laser. La thermalisation des atomes arrivant sur le substrat est donc très différente en EJM et en ablation laser, ce qui peut avoir des répercussions importantes sur les mécanismes de croissance.

3.3 Applications des couches minces

La mise en oeuvre de technologies de fabrication de couches minces a conduit à de nombreuses applications dans des domaines très divers. Nous citerons, le domaine des composants électroniques, celui des transducteurs pour capteurs, l'optique, la décoration et la protection des surfaces. Selon le type d'application les procédés de fabrication sont plus ou moins complexes. Nous allons expliciter ci-dessous ces principaux domaines d'application.

3.3.1 Couches minces dans les composants et dispositifs électroniques: L'interconnexion.

Dès le début du développement des composants semiconducteurs intégrés les technologies couches minces se sont révélées d'un intérêt fondamental pour assurer les interconnexions entre éléments distants d'une même puce. Pour cela trois matériaux ont été principalement utilisés. En premier lieu, l'aluminium qui est facile à déposer par évaporation thermique, bon conducteur de l'électricité, facile à interconnecter à un fil de liaison en aluminium par soudure à ultra-sons et d'un coût modique. C'est le matériau type exploité dans des circuits tels les amplificateurs opérationnels, figure 3.7. Typiquement on va l'utiliser sous forme de couches de 2 à 3 μm d'épaisseur.

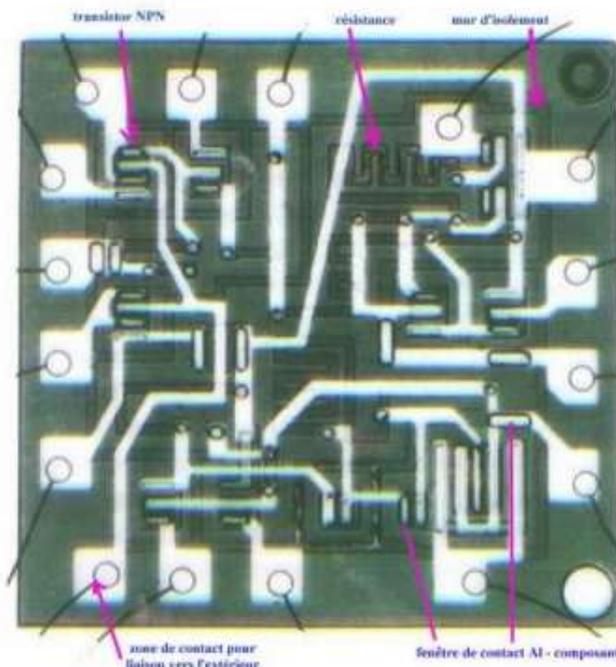


Fig.3.7 : Exemple d'ampli-op : en blanc les couches d'aluminium servant aux interconnexions

L'or qui présente l'avantage d'une meilleure conductibilité et aucun risque d'oxydation va être employé aussi, mais plus fréquemment pour assurer les interconnexions entre éléments discrets en technologie hybride, figure 3.8. Dans ce cas il arrive qu'on interpose entre la céramique support et la couche d'or une sous-couche d'accrochage de chrome de moins 30nm d'épaisseur. Les liaisons vers l'extérieur se font alors par thermo-compression ce qui exige une surépaisseur d'or obtenue par galvanoplastie aux endroits concernés.

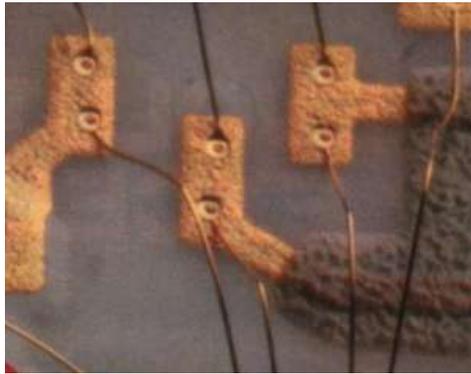


Fig.3.8 : circuits hybride avec liaisons par couches d'or.

Depuis quelque temps on a commencé à exploiter des couches de cuivre comme matériau d'interconnexion car le cuivre présente l'avantage d'avoir la plus faible résistivité ce qui se révèle très important dans les dispositifs ultra miniaturisés fonctionnant à des fréquences très élevées tels les microprocesseurs à 1GHz et au-delà.

3.3.2 Les couches techniques pour des dispositifs électroniques

Les couches minces servent aussi beaucoup à la réalisation de dispositifs techniques, figure 3.9, très employés telles les têtes de lecture des disques durs (couches magnétiques) de nos ordinateurs, mais aussi les têtes d'impression de nos imprimantes à jet d'encre et bien entendu les cellules solaires (constituées de couches de Si amorphe).



Fig.3.9 : Cibles de pulvérisation cathodique pour applications

Chapitre 4

Solution en élasticité isotrope

4.1 Introduction

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

Dans ce cadre et en utilisant la théorie élastique anisotrope, l'équipe de recherche de l'université de Batna en collaboration avec le professeur Roland bonnet de l'INPG Grenoble –France- (Institut national polytechnique de Grenoble) à pu résoudre les problèmes suivants :

- 1- Réseau unidirectionnel de dislocations
 - Bilame mince (voir la thèse de magistère du Dr Madani salah [14] et la thèse de doctorat du Dr Benbouta Rachid [15])
 - Matériau tricouche (voir la thèse de doctorat du Dr Brioua mourad[16])
- 2- Réseau carré de dislocations
 - Bilame mince (voir la thèse de doctorat du Dr Madani salah[17])
- 3- Réseau hexagonal de dislocations
 - Couche mince sur un substrat (voir la thèse de magistère du Dr Derardja Akila [18])
 - Bilame mince (voir la thèse de doctorat du Dr Outtas Toufik [19])

Dans ce chapitre, et en se basant sur l'analyse en série de Fourier des champs de déformations proposée par Roland bonnet en 1992 [20], nous allons présenté en utilisant la théorie élastique isotrope, les résultats d'une investigation des champs

élastiques (déplacement, déformation, contrainte et énergie) générés par un réseau unidirectionnel de dislocations coins situé à l'interface d'une couche mince sur un substrat

Le modèle choisi représente, néanmoins pour les réseaux unidirectionnels, la base de tous les calculs des autres configurations à savoir bilame mince et matériau tricouche.

4.2 Géométrie du problème:

La figure 4.1, montre en détail, la géométrie du problème pour un réseau unidirectionnel de dislocations coins, qui se développent périodiquement dans le plan d'une interface de collage d'une couche mince, d'épaisseur h , sur un substrat. Les deux milieux $+$ ($x_2 > 0$) et $-$ ($x_2 < 0$) sont élastiquement isotropes et caractérisés respectivement par les constantes élastiques μ^+ et μ^- . Cet arrangement périodique de défauts linéaires est parallèle à l'axe Ox_3 d'un repère cartésien $Ox_1x_2x_3$ convenablement choisi, tel que Ox_2 est perpendiculaire à l'interface de collage. La période des dislocations interfaciales est Λ .

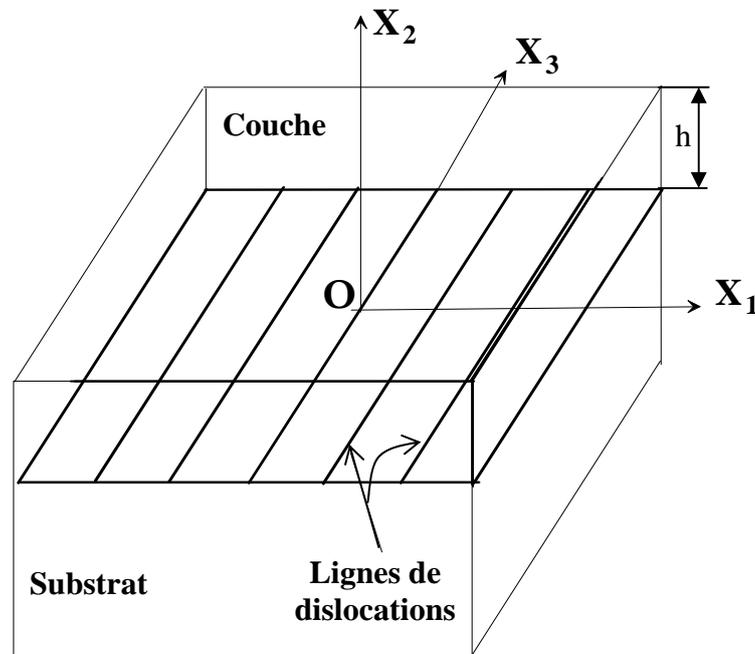


FIG. 4.1: Schéma d'une couche mince cristalline, d'épaisseur h , collée sur un substrat cristallin, avec un réseau unidirectionnel de dislocations coins à l'interface.

Soit un milieu élastiquement isotrope. En combinant les équations d'équilibre d'un élément de volume aux relations linéaires de Hooke, nous obtenons l'équation différentielle classique de l'élasticité, où u_k représente les trois composantes du champ des déplacements ($i, k=1, 2, 3$).

$$(\lambda + \mu)u_{i,ik} + \mu u_{k,ki} = 0 \quad (4.1)$$

Où λ et μ sont les coefficients de Lamé du milieu déformé.

La déformation est plane et supposée strictement périodique le long de l'axe ox_1 (Fig.4.1) avec la période Λ . Le repère cartésien est centré sur le cœur d'une dislocation interfaciale. Posons $\omega = 2\pi/\Lambda$, et adoptons Re et Im comme symboles signifiant respectivement "partie réelle de" et "partie complexe de". En admettant que le champ des déformations est périodique selon ox_1 , les composantes du champ des déplacements u_k peuvent s'écrire sous l'une ou l'autre forme suivante:

$$u_k = \sum_{n=-\infty}^{\infty} U_k^{(n)} \exp(in\omega x_1) \quad (4.2a)$$

$$u_k = u_k^0 + v_{k1}^0 x_1 + v_{k2}^0 x_2 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[2 \operatorname{Re}(U_k^{(n)}) \cos(n\omega x_1) - 2 \operatorname{Im}(U_k^{(n)}) \sin(n\omega x_1) \right] \quad (4.2b)$$

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

En insérant l'équation (4.2a) dans l'équation (4.1), nous obtenons, pour chaque harmonique de rang n non nul,

$$(\lambda + 2\mu)(-n^2\omega^2)U_1 + (\lambda + \mu)(in\omega)U_{2,2} + \mu U_{1,22} = 0 \quad (4.3)$$

$$\mu(-n^2\omega^2)U_2 + (\lambda + \mu)(in\omega)U_{1,2} + (\lambda + 2\mu)U_{2,22} = 0 \quad (4.4)$$

$$(-n^2\omega^2)U_3 + U_{3,22} = 0 \quad (4.5)$$

La solution générale du système (4.3), (4.4) et (4.5) est donnée par :

$$U_1 = (P + Qn\omega x_2) \exp(-n\omega x_2) + (R + Sn\omega x_2) \exp(n\omega x_2), \quad (4.6)$$

$$U_2 = i \left[P + Q(3 - 4\nu) + Qn\omega x_2 \right] \exp(-n\omega x_2) - i \left[R - S(3 - 4\nu) + Sn\omega x_2 \right] \exp(n\omega x_2), \quad (4.7)$$

$$U_3 = T \exp(-n\omega x_2) + U \exp(n\omega x_2), \quad (4.8)$$

Les constantes complexes P , Q , R , S , T et U dépendent des conditions aux limites.

4.3 Conditions aux limites:

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

Pour déterminer la valeur des constantes complexes P , Q , R , S , T et U on applique les conditions aux limites suivantes :

4.3.1 Condition de convergence

Nous admettons que dans le substrat ($x_2 < 0$), l'énergie élastique stockée par unité de surface demeure finie. Nous imposons alors une condition aux limites sur la convergence des déplacements u_k , dans le substrat, qui doivent rester finis quand x_2 tend $-\infty$.

Comme toutes les contraintes tendent vers zéro dans le milieu $x_2 < 0$ loin du joint ($|x_2| \rightarrow \infty$), les constantes v_{k1}^0 et v_{k2}^0 sont nulles.

Pour la même raison, avec l'équation (4.2b) substituée dans les équations (4.6)-(4.8), on a:

$$P^- = Q^- = T^- = 0 \quad (4.9)$$

4.3.2 Conditions en déplacement:

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

périodiques le long de Ox_1 (Fig. 4.2) et nuls à mi-chemin entre deux coeurs de dislocations.

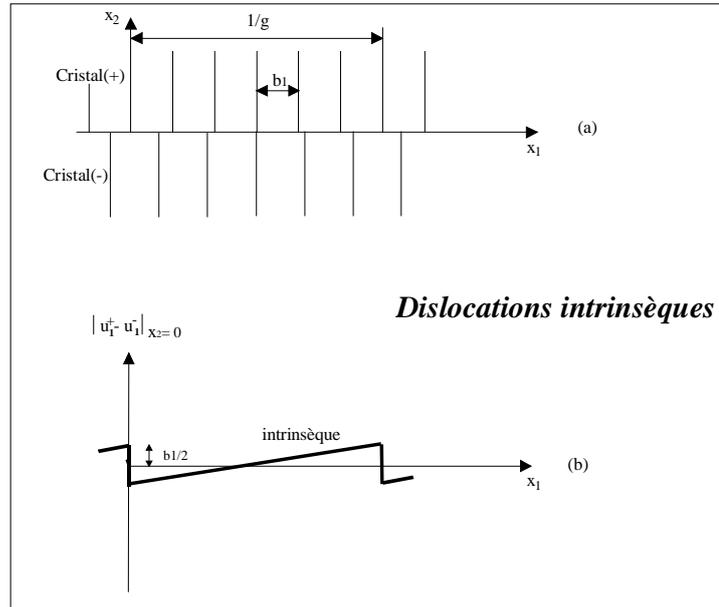


FIG. 4.2: (a) Représentation schématisée du déplacement associé à un réseau de dislocation
(b) Courbe en dent de scie et en escalier relatives respectivement aux dislocations intrinsèques.

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

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

La linéarité du déplacement relatif à l'interface peut être exprimée par [21] :

$$u_k^+ - u_k^- = \left(\frac{b_k}{\Lambda} \right) x_1 - \frac{b_k}{2}, \quad (4.10 \text{ a})$$

$$u_k^+ - u_k^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{ib_k}{2\pi n} \exp(in\omega x_1), \quad n \neq 0, \quad (4.10 \text{ b})$$

$$u_k^+ - u_k^- = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{-b_k}{\pi n} \sin(n\omega x_1), \quad (4.10 \text{ c})$$

Où n décrit l'ensemble des entiers relatifs non nuls.

La série (4.2a) appliquée aux deux milieux + et -, et l'équation (4.10b) imposent donc que :

$$U_k^+ - U_k^- = \frac{ib_k}{2n\pi}, \quad (4.11a)$$

$$u_k^{0+} = u_k^{0-}, \quad (4.11b)$$

Le champ des déplacements est donc défini à un vecteur translation près, identique pour les milieux + et -. Ce vecteur, qui peut être choisi de façon arbitraire, a des composantes que nous choisissons nulles pour simplifier $u_k^{0+} = u_k^{0-} = 0$.

Le champ des déplacement (4.2b) s'écrit donc finalement:

$$u_k = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left[\operatorname{Re}(U_k^{(n)}) \cos(n\omega x_1) - \operatorname{Im}(U_k^{(n)}) \sin(n\omega x_1) \right], \quad (4.12)$$

4.3.3 Conditions en contraintes:

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

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

$$\sigma_{2k}^+(x_2 = 0) = \sigma_{2k}^-(x_2 = 0) \quad (4.13)$$

Explicitons maintenant cette condition en déterminant tout d'abord les expressions des déformations (i, j=1, 2, 3).

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}), \quad (4.14)$$

A partir des relations de Hooke appliquées à la déformation plane;

$$\sigma_{11} = (\lambda + 2\mu)\varepsilon_{11} + \lambda\varepsilon_{22}, \dots etc, \quad (4.15)$$

et de l'expression du champ des déplacements, série (4.12), nous obtenons les déformations (non nulles) ;

$$\varepsilon_{11} = \sum_1^{\infty} \left[-2n\omega \operatorname{Im}(U_1) \cos(n\omega x_1) - 2n\omega \operatorname{Re}(U_1) \sin(n\omega x_1) \right], \quad (4.16)$$

$$\varepsilon_{22} = \sum_1^{\infty} \left[2 \operatorname{Re}(U_{2,2}) \cos(n\omega x_1) - 2 \operatorname{Im}(U_{2,2}) \sin(n\omega x_1) \right], \quad (4.17)$$

$$\varepsilon_{12} = \sum_1^{\infty} \left\{ \left[\operatorname{Re}(U_{1,2}) - n\omega \operatorname{Im}(U_2) \right] \cos(n\omega x_1) + \left[-\operatorname{Im}(U_{1,2}) - n\omega \operatorname{Re}(U_2) \right] \sin(n\omega x_1) \right\}, \quad (4.18)$$

$$\varepsilon_{13} = \sum_1^{\infty} \left[-n\omega \operatorname{Im}(U_3) \cos(n\omega x_1) - n\omega \operatorname{Re}(U_3) \sin(n\omega x_1) \right], \quad (4.19)$$

$$\varepsilon_{23} = \sum_1^{\infty} \left[\operatorname{Re}(U_{3,2}) \cos(n\omega x_1) - \operatorname{Im}(U_{3,2}) \sin(n\omega x_1) \right], \quad (4.20)$$

Les contraintes σ_{2k} (réelles) ont donc les expressions (complexes) suivantes:

$$\sigma_{22} = \sum_{-\infty}^{+\infty} \left[i\lambda n\omega U_1 + (\lambda + 2\mu) U_{2,2} \right] \exp(in\omega x_1), \quad (4.21a)$$

$$\sigma_{21} = \sum_{-\infty}^{+\infty} \mu (U_{1,2} + in\omega U_2) \exp(in\omega x_1), \quad (4.21b)$$

$$\sigma_{23} = \sum_{-\infty}^{+\infty} \mu U_{3,2} \exp(in\omega x_1), \quad (4.21c)$$

Ce qui donne, en termes réels

$$\begin{aligned} \sigma_{22} = \sum_1^{\infty} \left\{ \left[\lambda(-2n\omega) \operatorname{Im}(U_1) + 2(\lambda + 2\mu) \operatorname{Re}(U_{2,2}) \right] \cos(n\omega x_1) \right. \\ \left. + \left[\lambda(-2n\omega) \operatorname{Re}(U_1) - 2(\lambda + 2\mu) \operatorname{Im}(U_{2,2}) \right] \sin(n\omega x_1) \right\}, \end{aligned} \quad (4.22a)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{21} = \sum_1^{\infty} \left\{ 2\mu \left[\operatorname{Re}(U_{1,2}) - n\omega \operatorname{Im}(U_2) \right] \cos(n\omega x_1) \right. \\ \left. + 2\mu \left[-\operatorname{Im}(U_{1,2}) - n\omega \operatorname{Re}(U_2) \right] \sin(n\omega x_1) \right\}, \end{aligned} \quad (4.22b)$$

$$\sigma_{23} = \sum_1^{\infty} \left[2\mu \operatorname{Re}(U_{3,2}) \cos(n\omega x_1) - 2\mu \operatorname{Im}(U_{3,2}) \sin(n\omega x_1) \right], \quad (4.22c)$$

Dans ces expressions, les dérivées $U_{1,2}$ et $U_{2,2}$ et $U_{3,2}$, facilement calculable, sont les suivantes:

$$U_{1,2} = \left[Qn\omega - n\omega(P + Qn\omega x_2) \right] \exp(-n\omega x_2) + \left[Sn\omega + n\omega(R + Sn\omega x_2) \right] \exp(n\omega x_2), \quad (4.23a)$$

$$\begin{aligned} U_{2,2} = -in\omega \left[P + Q(2 - 4\nu) + Qn\omega x_2 \right] \exp(-n\omega x_2) \\ - in\omega \left[R - S(2 - 4\nu) + Sn\omega x_2 \right] \exp(n\omega x_2), \end{aligned} \quad (4.23b)$$

$$U_{2,3} = -n\omega T \exp(-n\omega x_2) - n\omega U \exp(n\omega x_2), \quad (4.23c)$$

La condition (4.13), combinée avec les équations (4.21a), (4.21b) et (4.21c) implique donc les trois relations suivantes, dans lesquelles il faut faire $x_2 = 0$:

$$\left[i\lambda^+ n\omega U_1^+ + (\lambda^+ + 2\mu^+) U_{2,2}^+ \right] - \left[i\lambda^- n\omega U_1^- + (\lambda^- + 2\mu^-) U_{2,2}^- \right] = 0, \quad (4.24a)$$

$$\mu^+ (U_{1,2}^+ + in\omega U_2^+) - \mu^- (U_{1,2}^- + in\omega U_2^-) = 0, \quad (4.24b)$$

$$\mu^+ U_{3,2}^+ - \mu^- U_{3,2}^- = 0, \quad (4.24c)$$

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

$$i\lambda^+ n\omega U_1^+ + (\lambda^+ + 2\mu^+) U_{2,2}^+ = 0, \quad (4.25a)$$

$$U_{1,2}^+ + in\omega U_2^+ = 0, \quad (4.25b)$$

$$U_{3,2}^+ = 0, \quad (4.25c)$$

4.4. Détermination explicite du champ des déplacements et des contraintes

4.4.1 Détermination des constantes complexes.

Pour trouver explicitement chacun des coefficients de Fourier $U_k^{(n)}$ du champ des déplacements (4.12), il faut résoudre analytiquement les équations (4.11), (4.24) et (4.25).

Pour le milieu $x_2 < 0$, les conditions (4.9) s'appliquent. Il demeure donc à résoudre un système linéaire de neuf équations à neuf inconnues P^+ , Q^+ , R^+ , S^+ , T^+ , U^+ , R^- , S^- , et U^- .

Ce système se découple en fait en deux sous-systèmes indépendants. Le premier comporte seulement les inconnues T^+ , U^+ , et U^- . Il s'écrit:

$$T^+ + U^+ - U^- = \frac{ib_3}{2n\pi}, \quad (4.26a)$$

$$\mu^+ (-T^+ + U^+) - \mu^- U^- = 0, \quad (4.26b)$$

$$-T^+ + U^+ \exp(2n\omega h) = 0, \quad (4.26c)$$

Les solutions sont purement complexes. En notant $k = \mu^+ / \mu^-$, elles s'écrivent;

$$U^+ = \frac{ib_3}{2n\pi} \frac{1}{1-k+(1+k)\exp(2n\omega h)}, \quad (4.27)$$

$$T^+ = U^+ \exp(2n\omega h) = \frac{ib_3}{2n\pi} \frac{\exp(2n\omega h)}{1-k+(1+k)\exp(2n\omega h)}, \quad (4.28)$$

$$U^- = k(-T^+ + U^+) = \frac{ib_3}{2n\pi} \frac{k(1-\exp(2n\omega h))}{1-k+(1+k)\exp(2n\omega h)}, \quad (4.29)$$

La composante du champ des déplacements parallèlement aux dislocations ne dépend donc que de la composante vis du vecteur de Burgers \mathbf{b} et du rapport \mathbf{k} des modules de cisaillement.

L'autre système d'équations comporte les six inconnues P^+ , Q^+ , R^+ , S^+ , R^- , et S^- . Il s'écrit sous la forme d'un produit matriciel, ou la matrice colonne X_j ($j=1,\dots,6$) renferme ces six inconnues complexes écrites dans le même ordre de haut en bas;

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{B}, \quad (4.30)$$

Dans cette équation, les matrices \mathbf{A} et \mathbf{B} sont respectivement une matrice carrée réelle 6×6 et une matrice colonne.

Ainsi, la seule quantité complexe intervenant dans cette équation est le premier élément de la matrice \mathbf{B} . Cette équation a été résolue analytiquement en utilisant le logiciel de calcul formel *MATHEMATICA*.

Le résultat peut se mettre sous la forme suivante:

$$X_j = \frac{[t_{j1} + t_{j2} \exp(2n\omega h) + t_{j3} \exp(4n\omega h)]b_2 + [t_{j4} + t_{j5} \exp(2n\omega h) + t_{j6} \exp(4n\omega h)]ib_1}{2n\pi\Delta}, \quad (4.31a)$$

$$\Delta = \alpha + \beta \exp(2n\omega h) + \gamma \exp(4n\omega h), \quad (4.31b)$$

Les termes t_{jm} ($j, m = 1, 2, \dots, 6$) et α , β et γ sont explicités dans l'Annexe 1 en fonction de k , du produit $n\omega h$ et des coefficients de Poisson ν^+ et ν^- .

4.4.2 Expressions analytiques du champ des déplacements pour les deux milieux.

En insérant dans les équations (4.6-8) et (4.12) les expressions des solutions trouvées ci-dessus nous obtenons les expressions explicites du champ des déplacements pour les deux milieux.

Pour la couche ($x_2 > 0$) ;

$$\begin{aligned}
u_1^+ = & \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ b_2 \{ (t_{12} + n\omega t_{22} x_2) \exp[n\omega(2h - x_2)] + (t_{13} + n\omega t_{23} x_2) \exp[n\omega(4h - x_2)] \right. \\
& + (t_{31} + n\omega t_{41} x_2) \exp(n\omega x_2) + (t_{32} + n\omega t_{42} x_2) \exp[n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\text{Cos}(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \\
& + b_1 \{ (-t_{15} - n\omega t_{25} x_2) \exp[n\omega(2h - x_2)] + (-t_{16} - n\omega t_{26} x_2) \exp[n\omega(4h - x_2)] \\
& + (-t_{34} - n\omega t_{44} x_2) \exp(n\omega x_2) + (-t_{35} - n\omega t_{45} x_2) \exp[n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\text{Sin}(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \left. \right\}, \quad (4.32)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_2^+ = & \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ b_1 \{ [-t_{15} + t_{25} (-3 + 4\nu^+ - n\omega x_2)] \exp n\omega(2h - x_2) \right. \\
& + [-t_{16} + t_{26} (-3 + 4\nu^+ - n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h - x_2)] + [t_{34} + t_{44} (-3 + 4\nu^+ + n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \\
& + [t_{35} + t_{45} (-3 + 4\nu^+ + n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\text{Cos}(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \\
& + b_2 \{ [-t_{12} + t_{22} (-3 + 4\nu^+ - n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h - x_2)] \\
& + [-t_{13} + t_{23} (-3 + 4\nu^+ - n\omega x_2)] \exp n\omega(4h - x_2) \\
& + [t_{31} + t_{41} (-3 + 4\nu^+ + n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \\
& + [t_{32} + t_{42} (-3 + 4\nu^+ + n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\text{Sin}(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \left. \right\}, \quad (4.33)
\end{aligned}$$

$$u_3^+ = \frac{-b_3}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp[n\omega(x_2 - 2h)] + \exp(-n\omega x_2)}{n\{1 + k + (1 - k) \exp[-2n\omega h]\}} \text{Sin}(n\omega x_1), \quad (4.34)$$

Pour le substrat ($x_2 < 0$) ;

$$\begin{aligned}
u_1^- = & \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ b_2 \{ (t_{51} + n\omega t_{61} x_2) \exp(n\omega x_2) + (t_{52} + n\omega t_{62} x_2) \exp[n\omega(2h + x_2)] \right. \\
& + (t_{53} + n\omega t_{63} x_2) \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\text{Cos}(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \\
& + b_1 \{ (-t_{54} - n\omega t_{64} x_2) \exp(n\omega x_2) + (-t_{55} - n\omega t_{65} x_2) \exp[n\omega(2h + x_2)] \\
& + (-t_{56} - n\omega t_{66} x_2) \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\text{Sin}(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \left. \right\}, \quad (4.35)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_2^- = & \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ b_1 \{ [t_{54} + t_{64}(-3 + 4\nu^- + n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \right. \\
& + [t_{55} + t_{65}(-3 + 4\nu^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \\
& + [t_{56} + t_{66}(-3 + 4\nu^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\text{Cos}(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \\
& + b_2 \{ [t_{51} + t_{61}(-3 + 4\nu^- + n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \\
& + [t_{52} + t_{62}(-3 + 4\nu^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \\
& + [t_{53} + t_{63}(-3 + 4\nu^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\text{Sin}(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \left. \right\}, \quad (4.36)
\end{aligned}$$

$$u_3^- = \frac{-b_3}{\pi} k \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp[n\omega(x_2 - 2h)] - \exp(n\omega x_2)}{n[1 + k + (1 - k)\exp(-2n\omega h)]} \text{Sin}(n\omega x_1), \quad (4.37)$$

4.4.3 Expressions analytiques du champ des contraintes

Les expressions analytiques des contraintes sont obtenues en appliquant les équations (4.16),(4.20) puis (4.15).

Les contraintes σ_{33} sont calculées par la relation classique $\sigma_{33} = \nu(\sigma_{11} + \sigma_{22})$.

- **Milieu** ($x_2 > 0$);

$$\begin{aligned}
\sigma_{11}^+ = & 2\omega\mu^+ \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ b_1 \{ [-t_{15} + t_{25}(2\nu^+ - n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h - x_2)] \right. \\
& + [-t_{16} + t_{26}(2\nu^+ - n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h - x_2)] \\
& + [-t_{34} + t_{44}(-2\nu^+ - n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) + [-t_{35} + t_{45}(-2\nu^+ - n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\text{Cos}(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \\
& + b_2 \{ [-t_{12} + t_{22}(2\nu^+ - n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h - x_2)] + [-t_{13} + t_{23}(2\nu^+ - n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h - x_2)] \\
& + [-t_{31} + t_{41}(-2\nu^+ - n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) + [-t_{32} + t_{42}(-2\nu^+ - n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\text{Sin}(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \left. \right\} \quad (4.38)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{22}^+ = & 2\omega\mu^+ \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ b_1 \{ [t_{15} + t_{25}(2 - 2\nu^+ + n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h - x_2)] \right. \\
& + [t_{16} + t_{26}(2 - 2\nu^+ + n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h - x_2)] \\
& + [t_{34} + t_{44}(-2 + 2\nu^+ + n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \\
& \left. \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +[t_{35} + t_{45}(-2 + 2\nu^+ + n\omega x_2)]\exp(n\omega(2h + x_2)]\left\} \frac{\text{Cos}(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \right. \\
& + b_2 \{ [t_{12} + t_{22}(2 - 2\nu^+ + n\omega x_2)]\exp[n\omega(2h - x_2)] \\
& + [t_{13} + t_{23}(2 - 2\nu^+ + n\omega x_2)]\exp[n\omega(4h - x_2)] + [t_{31} + t_{41}(-2 + 2\nu^+ + n\omega x_2)]\exp(n\omega x_2) \\
& \left. + [t_{32} + t_{42}(-2 + 2\nu^+ + n\omega x_2)]\exp[n\omega(2h + x_2)]\right\} \frac{\text{Sin}(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \left. \right\}, \quad (4.39)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{21}^+ &= 2\omega\mu^+ \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ b_2 \{ [-t_{12} + t_{22}(-1 + 2\nu^+ - n\omega x_2)]\exp[n\omega(2h - x_2)] \right. \\
& + [-t_{13} + t_{23}(-1 + 2\nu^+ - n\omega x_2)]\exp n\omega(4h - x_2)] + [t_{31} + t_{41}(-1 + 2\nu^+ + n\omega x_2)]\exp(n\omega x_2) \\
& + [t_{32} + t_{42}(-1 + 2\nu^+ + n\omega x_2)]\exp[n\omega(2h + x_2)]\left\} \frac{\text{Cos}(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \right. \\
& + b_1 \{ [t_{15} + t_{25}(1 - 2\nu^+ + n\omega x_2)]\exp[n\omega(2h - x_2)] + [t_{16} + t_{26}(1 - 2\nu^+ + n\omega x_2)]\exp[n\omega(4h - x_2)] \\
& + [-t_{34} + t_{44}(1 - 2\nu^+ - n\omega x_2)]\exp(n\omega x_2) \\
& \left. + [-t_{35} + t_{45}(1 - 2\nu^+ - n\omega x_2)]\exp[n\omega(2h + x_2)]\right\} \frac{\text{Sin}(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \left. \right\}, \quad (4.40)
\end{aligned}$$

$$\sigma_{23}^+ = \frac{\omega\mu^+}{\pi} b_3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp(-n\omega x_2) - \exp[n\omega(x_2 - 2h)]}{1 + k + (1 - k)\exp(-2n\omega h)} \text{Sin}(n\omega x_1), \quad (4.41)$$

$$\sigma_{13}^+ = \frac{-n\omega}{\pi} b_3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp(-n\omega x_2) + \exp[n\omega(x_2 - 2h)]}{1 + k + (1 - k)\exp(-2n\omega h)} \text{Cos}(n\omega x_1), \quad (4.42)$$

- **Milieu** ($x_2 < 0$);

$$\begin{aligned}
\sigma_{11}^- &= 2\omega\mu^- \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ b_1 \{ [-t_{54} + t_{64}(-2\nu^- - n\omega x_2)]\exp(n\omega x_2) \right. \\
& + [-t_{55} + t_{65}(-2\nu^- - n\omega x_2)]\exp[n\omega(2h + x_2)] \\
& + [-t_{56} + t_{66}(-2\nu^- - n\omega x_2)]\exp[n\omega(4h + x_2)]\left\} \frac{\text{Cos}(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \right. \\
& + b_2 \{ [-t_{51} + t_{61}(-2\nu^- - n\omega x_2)]\exp(n\omega x_2) \\
& + [-t_{52} + t_{62}(-2\nu^- - n\omega x_2)]\exp[n\omega(2h + x_2)] \\
& \left. + [-t_{53} + t_{63}(-2\nu^- - n\omega x_2)]\exp[n\omega(4h + x_2)]\right\} \frac{\text{Sin}(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \left. \right\}, \quad (4.43)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{22}^- = & 2\omega\mu^- \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ b_1 \{ [t_{54} + t_{64}(-2 + 2\nu^- + n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \right. \\
& + [t_{55} + t_{65}(-2 + 2\nu^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \\
& + [t_{56} + t_{66}(-2 + 2\nu^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\text{Cos}(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \\
& + b_2 \{ [t_{51} + t_{61}(-2 + 2\nu^- + n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \\
& + [t_{52} + t_{62}(-2 + 2\nu^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \\
& + [t_{53} + t_{63}(-2 + 2\nu^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\text{Sin}(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \left. \right\}, \tag{4.44}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{21}^- = & 2\omega\mu^- \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ b_2 \{ [t_{51} + t_{61}(-1 + 2\nu^- + n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \right. \\
& + [t_{52} + t_{62}(-1 + 2\nu^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \\
& + [t_{53} + t_{63}(-1 + 2\nu^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\text{Cos}(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \\
& + b_1 \{ [-t_{54} + t_{64}(1 - 2\nu^- - n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \\
& + [-t_{55} + t_{65}(1 - 2\nu^- - n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \\
& + [-t_{56} + t_{66}(1 - 2\nu^- - n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\text{Sin}(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \left. \right\}, \tag{4.45}
\end{aligned}$$

$$\sigma_{23}^- = \frac{k\omega\mu^-}{\pi} b_3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 - \exp(-2n\omega h)) \exp(n\omega x_2)}{1 + k + (1 - k) \exp(-2n\omega h)} \text{Sin}(n\omega x_1), \tag{4.46}$$

$$\sigma_{13}^- = \frac{-\omega\mu^-}{\pi} b_3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{-\exp(n\omega x_2) + \exp[n\omega(x_2 - 2h)]}{1 + k + (1 - k) \exp(-2n\omega h)} \text{Cos}(n\omega x_1), \tag{4.47}$$

4.5 Calcul de l'énergie élastique stockée pour un réseau unidirectionnel de dislocations en fonction de l'épaisseur h de la couche.

Une coupure est tout d'abord effectuée le long de l'interface $x_2 = 0$. Pour rétablir les liaisons atomiques, il faut exercer des contraintes de surface. Le travail de forces de surface correspondantes est calculé pour le déplacement relatif indiqué par l'équation (4.10a). Dans cette intégrale, les contraintes σ_{2k} sont exprimées par les équations

(4.44),(4.45) et (4.46) relatives au milieu, calculées pour $x_2 = 0$. Formellement, elles sont plus simples à écrire pour le milieu ($x_2 < 0$) à cause des équations (4.9).

La surface d'intégration s'étend sur une longueur unité le long de Ox_3 et Ox_1 sur l'intervalle $(r_0, \Lambda - r_0)$, r_0 étant le rayon de coupure.

L'énergie élastique stockée par unité de surface, notée E_s , est donc ;

$$E_s = \frac{1}{2\Delta} \int_{r_0}^{\Lambda - r_0} b_k \left(-\sigma_{2k}^- \right)_{x_2=0} \left(\frac{x_1}{\Delta} - \frac{1}{2} \right) dx_1, \quad (4.48)$$

L'intégration donne le résultat suivant ;

$$E_s = \frac{\mu^- \omega k}{\pi} \sum_1^{\infty} \left(\frac{4N_1}{\Delta} + \frac{(1 - \exp(-2hn\omega)) b_3^2}{1 + k + (1 - k) \exp(-2hn\omega)} \right) \left[\left(1 - \frac{r_0}{\Delta} \right) \frac{\cos(n\omega r_0)}{4n\pi} + \frac{\sin(n\omega r_0)}{4n^2 \pi^2} \right], \quad (4.49)$$

Avec Δ donnée par l'équation (4.31b) et

$$N_1 = (b_1^2 + b_2^2) \left[1 - \nu^+ - k + k\nu^- + (-1 + \nu^+ - k + k\nu^-) \exp(4hn\omega) \right] \\ + \left[(b_1^2 + b_2^2) 2k(1 - \nu^-) (1 + 2h^2 n^2 \omega^2) + (b_2^2 - b_1^2) 4hn\omega (1 - \nu^+) \right] \exp(2hn\omega), \quad (4.50)$$

Chapitre 5

Applications numériques

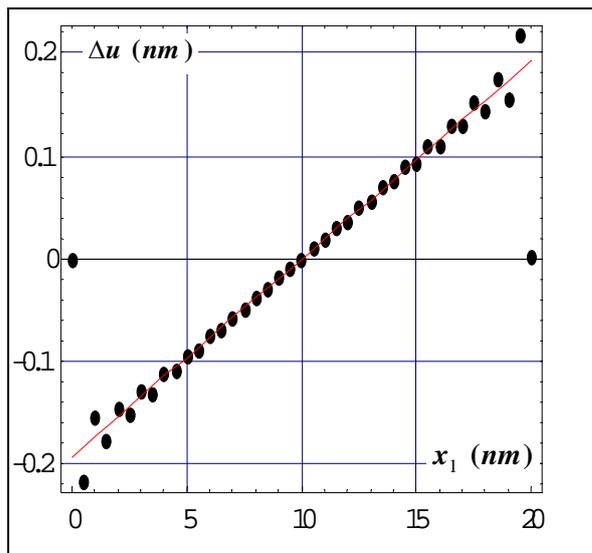
Pour la résolution du problème, nous avons élaboré un programme en langage Mathematica qui nous permet :

1. l'inversion numérique du système (4.30), obtenue à partir des conditions aux limites.
2. le calcul des constantes inconnues P^+ , Q^+ , R^+ , S^+ , T^+ , U^+ , R^- , S^- , et U^- .
3. la réinjection de ces constantes dans les expressions des déplacements, des déformations, des contraintes et de l'énergie pour les calculer numériquement.

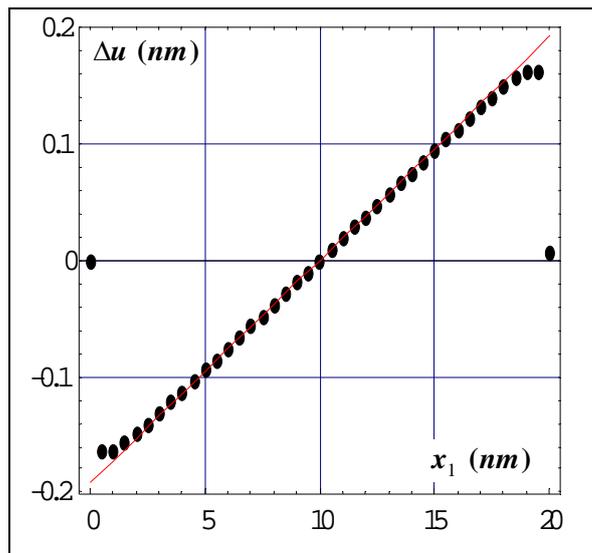
5.1 Validation du programme de calcul élaboré

La concrétisation de notre travail ne pourra se faire qu'à la lumière d'applications numériques adéquates, qui nous permettront d'un côté de valider notre approche analytique et d'un autre côté de rendre crédible notre modèle mathématique en vue des perspectives recommandées. Avant d'entamer cela, il est nécessaire de procéder tout d'abord à la validation de notre programme numérique, en comparant les résultats obtenus par le programme avec l'expression analytique du déplacement relatif $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_1)$ donnée par (Equ.4.10a). Pour cela nous avons représenté en figure 5.1 le déplacement relatif $\Delta \mathbf{u}$ à travers l'interface en faisant varier le nombre d'harmoniques n ($n=20,40,60,100,500,1000$).

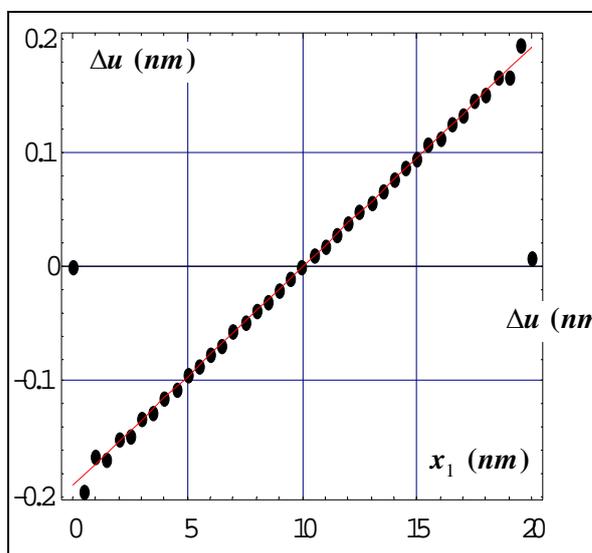
Notons qu'avec ce langage Mathematica, on peut atteindre pour la première fois un nombre d'harmoniques n égale à 1000 ou plus, valeur qui influe positivement sur la convergence des séries de fourriers et qui ne peut pas être obtenue par la programmation en langage Fortran.



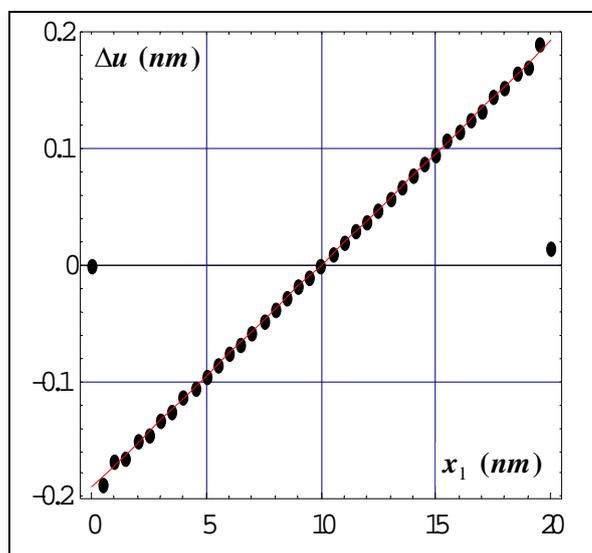
(a) Nombre d'harmoniques $n=20$



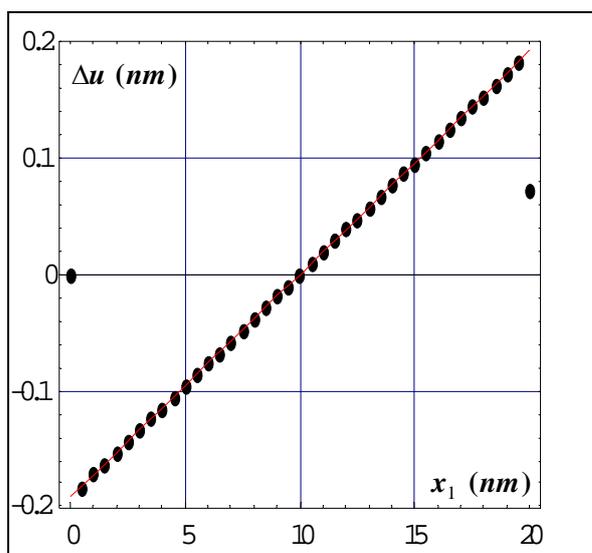
(b) Nombre d'harmoniques $n=40$



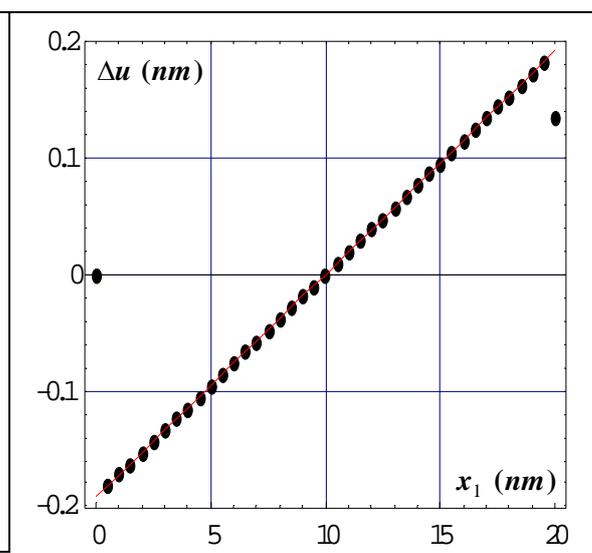
(c) Nombre d'harmoniques $n=60$



(d) Nombre d'harmoniques $n=100$



(e) Nombre d'harmoniques $n=500$



(f) Nombre d'harmoniques $n=1000$

FIG. 5.1: Représentation du déplacement relatif interfacial

Dans ces figures, les points représentent les résultats de notre programme, et les lignes continues les courbes analytiques (obtenues à partir de l'expression analytique).

On constate qu'en augmentant le nombre d'harmoniques n , les courbes obtenues numériquement deviennent plus rectilignes en se superposant de plus en plus à celles obtenues analytiquement et ceci dans le domaine de validité de l'expression analytique qui se situe entre la première dislocation placée à $x_1 = 0$ et la deuxième dislocation placée à $x_1 = 20$ nm correspondant à une période. Il est à noter que la comparaison entre les deux courbes doit se faire loin des coeurs des dislocations pour lesquels les valeurs de Δu obtenues à partir du programme divergent. En réalité les calculs effectués près de la dislocation, tout en évitant le cœur, ne permettent pas de donner de bons résultats par suite de la convergence très lente des séries.

Cette parfaite superposition des courbes le long d'une période est due à la méthode théorique utilisée, au nombre d'harmoniques choisis.

5.2 Application numérique

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

5.2.1 Matériaux utilisés : nous commençons par présenter les matériaux sur lesquels notre travail s'est essentiellement basé, à savoir le silicium (Si) et l'alliage de gallium arséniure (GaAs).

5.2.1.1 le silicium (Si)

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

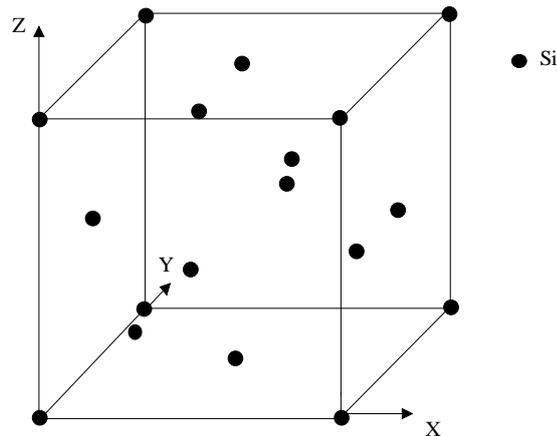


FIG. 5.2: La structure diamant du silicium

Les données expérimentales relatives au Si d'après [20,22], utilisées dans les différents calculs, sont présentées au tableau 5.1.

Désignation	Paramètres	valeurs
Paramètre de maille	a (nm)	0.5428
Vecteur de burgers	b (nm)	0.3838
Epaisseur de la couche déposée	h (nm)	10
Période du réseau de dislocations	p (nm)	20
Constantes élastiques	μ (GPa)	66.10
	ν	0.23

Tableau 5.1: Paramètre cristallin, vecteur de burgers et constantes élastiques isotropes du Silicium d'après [20,22].

5.2.1.2 L'arsenic de gallium (GaAs)

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

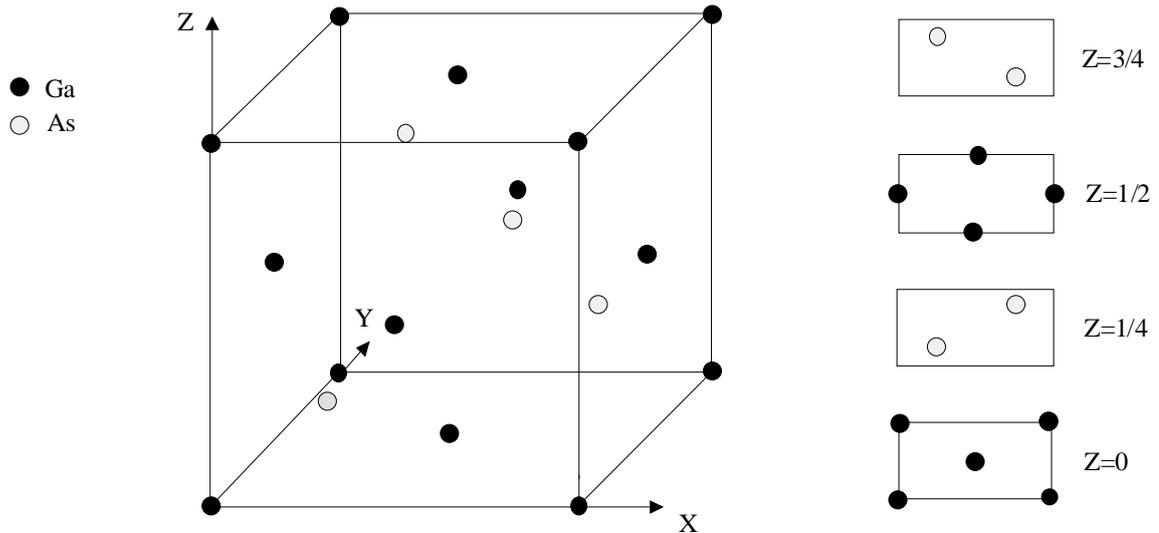


FIG. 5.3: La structure Zinc-blende du GaAs

Les données expérimentales relatives au GaAs d'après [20,23], utilisées dans les différents calculs, sont présentées au tableau 5.2.

Désignation	Paramètres	valeurs
Paramètre de maille	a (nm)	0.56533
Vecteur de burgers	b (nm)	0.3997
Epaisseur de la couche déposée	h (nm)	20
Période du réseau de dislocations	p (nm)	25
Constantes élastiques	μ (GPa)	46.00
	ν	0.25

Tableau 5.2: Paramètre cristallin, vecteur de burgers et constantes élastiques isotropes pour le GaAs d'après [20,23].

5.2.1.3 L'hétérostructure GaAs/Si

Cette hétérostructure a fait l'objet de plusieurs études lorsque le silicium est substrat orienté suivant (001). Cette hétérojonction est particulièrement intéressante pour diverses applications électroniques et électro-optiques. Toute fois, la forte

densité de défauts de volume créés en cours de croissance limite encore ces applications.

Pour les calculs, nous avons choisi les données suivantes, tableau 5.3 :

Désignation	Paramètres	valeurs
Vecteur de burgers	b (nm)	0.3838
Épaisseur de la couche déposée	h (nm)	10
Période du réseau de dislocations	p (nm)	9.7

Tableau 5.3: Vecteur de burgers, épaisseur de la couche et période du réseau de dislocations pour l'hétérostructure GaAs/Si d'après [20,23].

5.2.2 Présentation des résultats et interprétations:

Considérons une interface composée d'un réseau de dislocations de période Λ et qui sont parallèles à l'axe (Ox_3) d'un repère orthonormé direct ($Ox_1x_2x_3$); cet axe est confondu avec l'une des dislocations (voir figure 4.1).

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

5.2.2.1 Champs des déplacements :

Les résultats du champ de déplacement u_1 et u_2 sont présentés sur les figures 5.4 et 5.5 pour les joints de flexion Si/Si(001), GaAs/GaAs(001) et l'hétérostructure GaAs/Si(001) accommodant un désaccord paramétrique et ceci pour deux orientations du vecteur de burgers. Notons que le problème est invariant selon Ox_3 .

Ces calculs montrent en particulier que les extrema des champs de déplacement (positif et négatif) sont situés entre les lignes de dislocations, à environ 25% et 75% de la période.

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

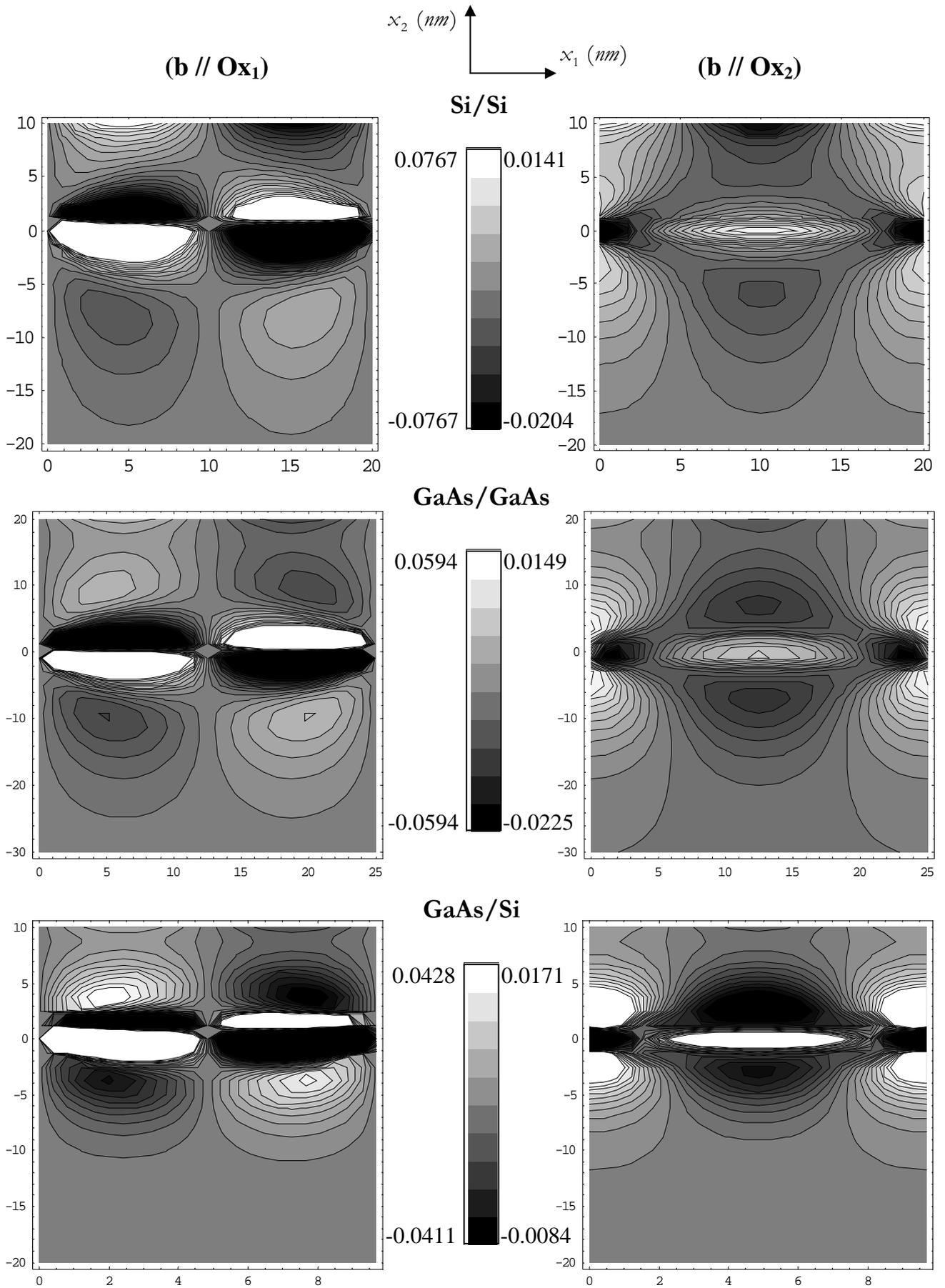


FIG.5.4: Iso valeurs des champs de déplacement \mathbf{u}_1 induit par un réseau unidimensionnel de dislocations coins pour les joints de flexion Si et GaAs et l'hétérostructure GaAs/Si, $b=10\text{nm}$.

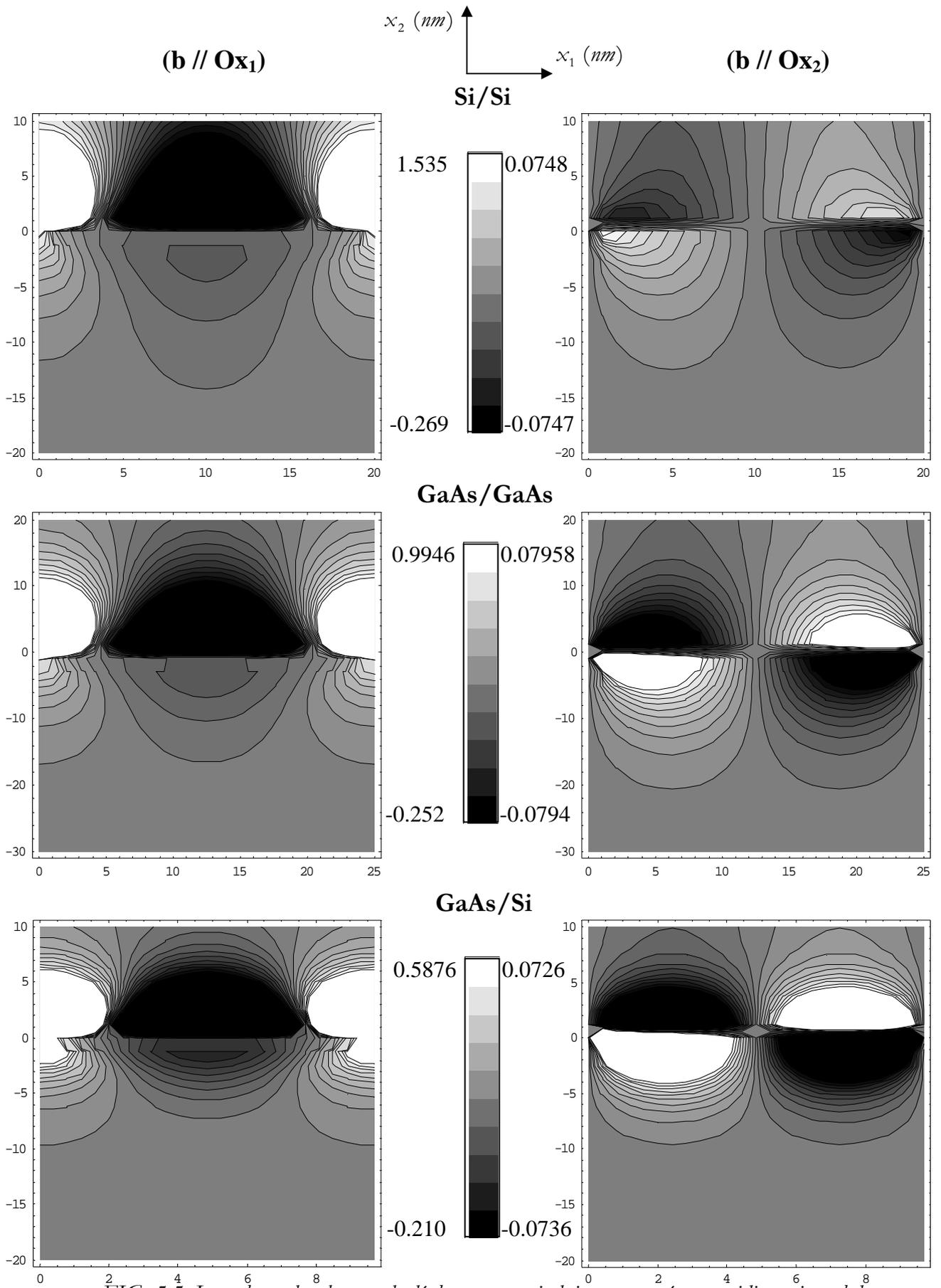


FIG. 5.5: Iso valeurs des champs de déplacement \mathbf{u}_2 induit par un réseau unidimensionnel de dislocations coins pour les joints de flexion Si et GaAs et l'hétérostructure GaAs/Si, $h=10\text{nm}$.

5.2.2.2 Champ élastique des contraintes:

A. Evolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 loin du cœur de la dislocation

Nous présentons ci-dessous l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 (épaisseur du cristal) pour deux positions relativement loin du cœur de la dislocation à savoir :

- $x_1 = \Lambda/4 = 6.25$ nm: près de la dislocation mais loin du coeur
- $x_1 = \Lambda/2 = 12.5$ nm : à mi-période très loin de la dislocation

A.1 : $x_1 = \Lambda/4 = 6.25$ nm

(b // Ox_1)

(b // Ox_2)

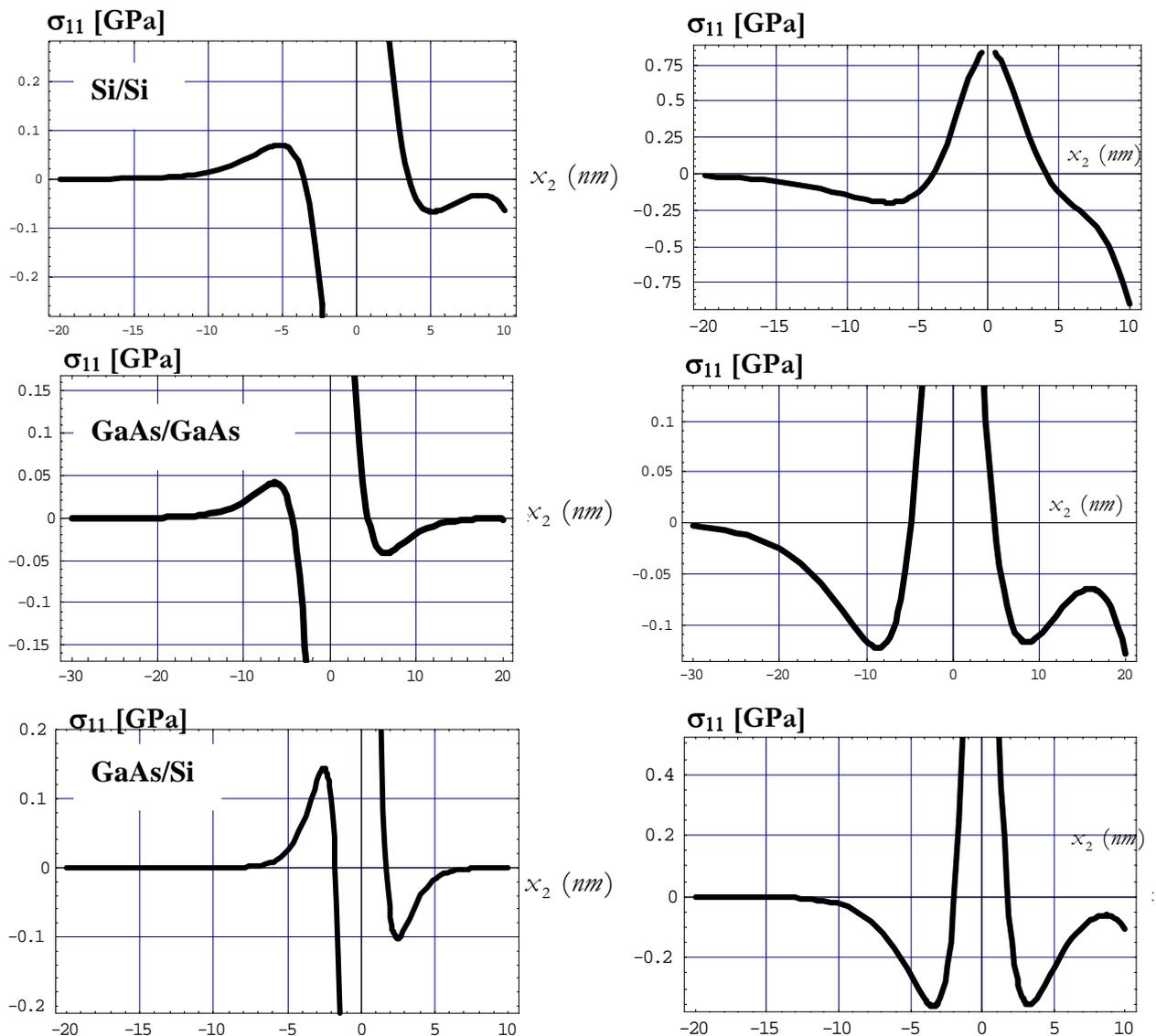


FIG. 5.6 : Evolution des contraintes σ_{11} en fonction de x_2 pour les joints de flexion Si/Si, GaAs/GaAs et l'hétérostructure GaAs/Si, $x_1 = \Lambda/4 = 6.25$ nm

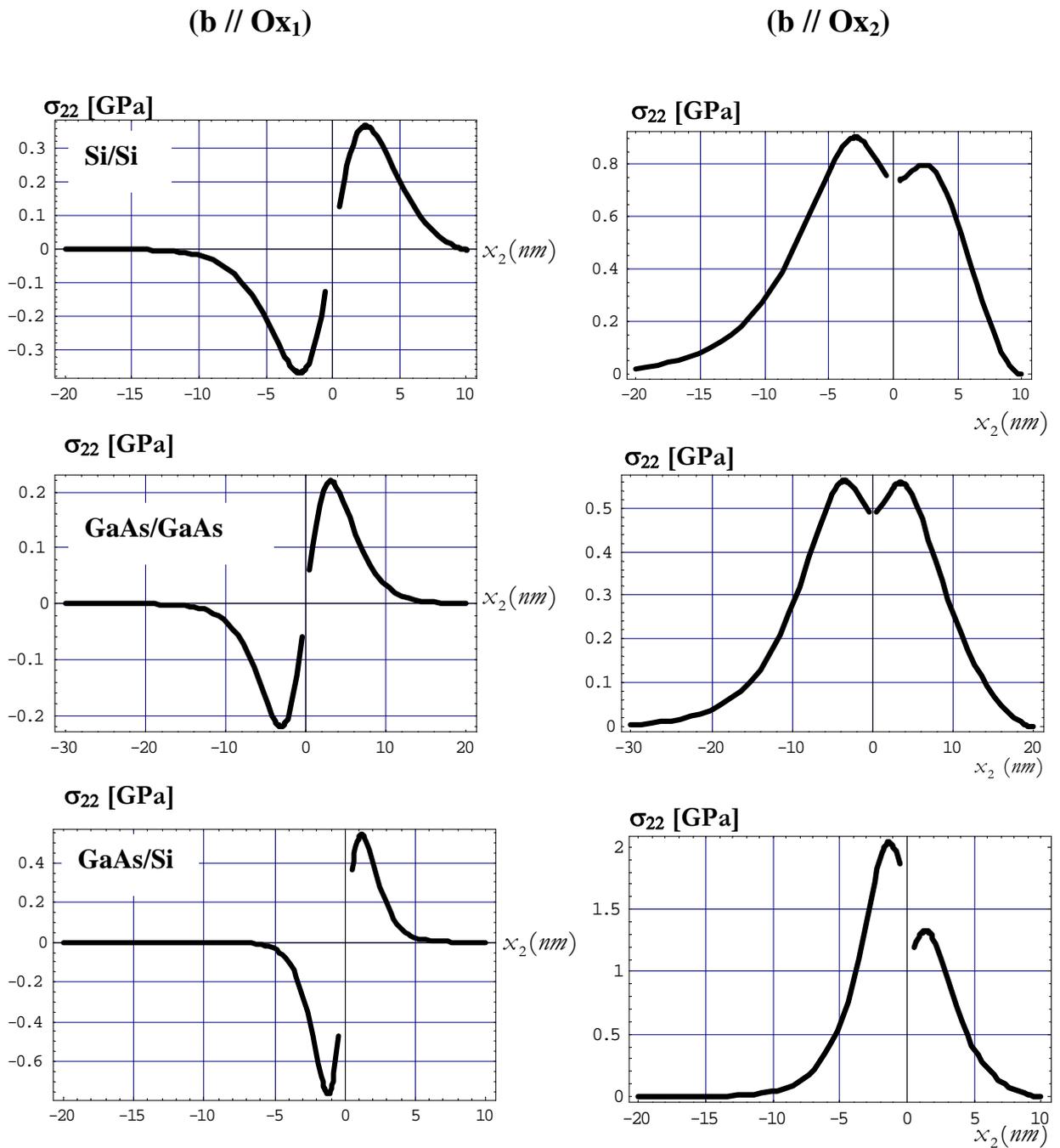


FIG. 5.7 : Evolution des contraintes σ_{22} en fonction de x_2 pour les joints de flexion Si/Si, GaAs/GaAs et l'hétérostructure GaAs/Si, $x_1 = \Lambda/4 = 6.25$ nm

A.2 : $x_1 = \Lambda/2 = 12.5 \text{ nm}$

(b // Ox_1)

(b // Ox_2)

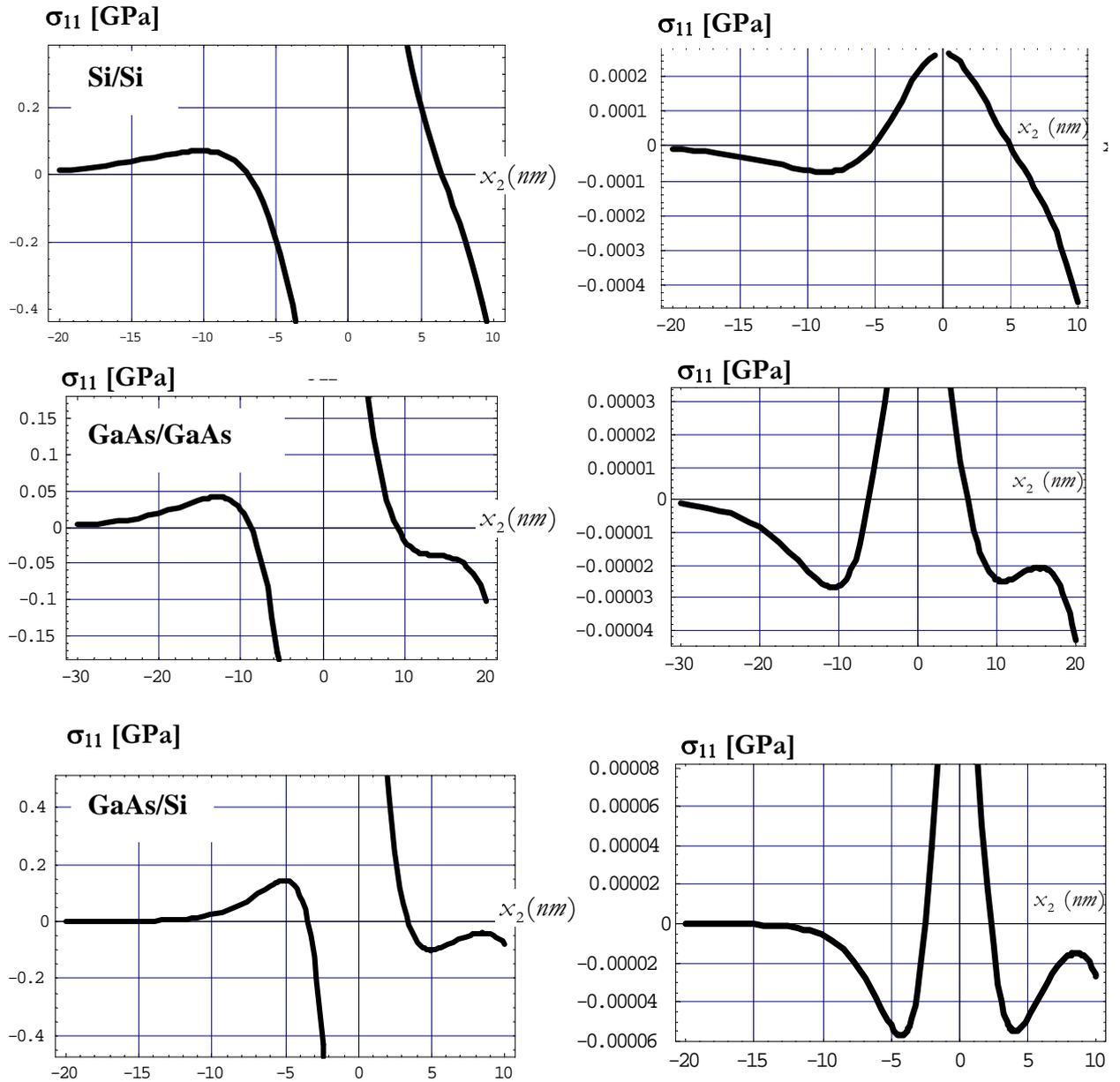


FIG. 5.8 : Evolution des contraintes σ_{11} en fonction de x_2 pour les joints de flexion Si/Si, GaAs/GaAs et l'hétérostructure GaAs/Si, $x_1 = \Lambda/2 = 12,5 \text{ nm}$

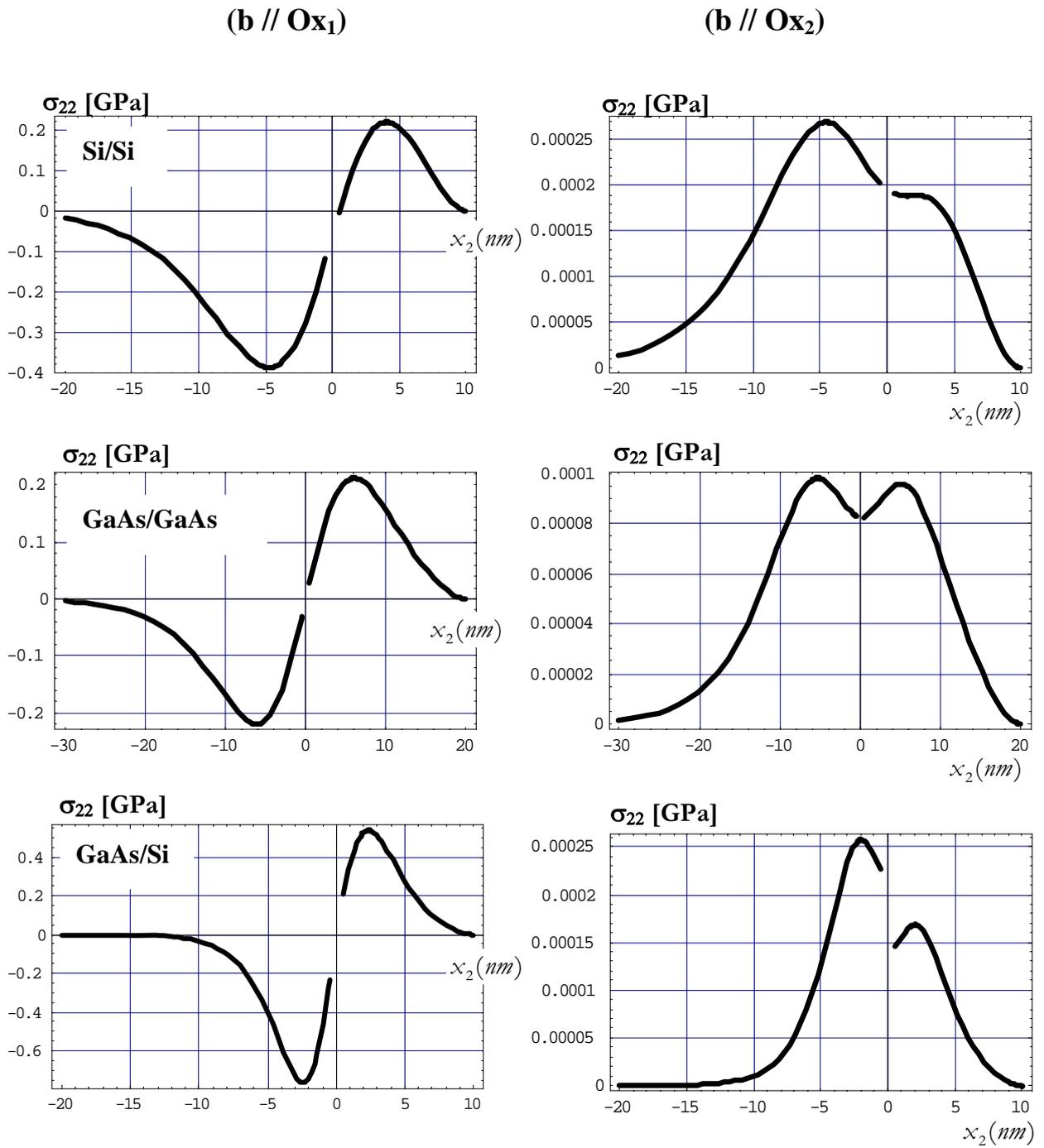


FIG. 5.9 : Evolution des contraintes σ_{22} en fonction de x_2 pour les joints de flexion Si/Si, GaAs/GaAs et l'hétérostructure GaAs/Si, $x_1 = \Lambda/2 = 12.5 \text{ nm}$

B. Evolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 près du cœur de la dislocation

Voyons maintenant comment varie ces mêmes contraintes σ_{11} et σ_{22} si on se rapproche du cœur de la dislocation c'est-à-dire à une distance $x_1 = \Lambda/25$ ($\approx 3b$) pour le Si et le GaAs, et à une distance de $x_1 = \Lambda/10$ ($\approx 3b$) pour l'hétérostructure GaAs/Si.

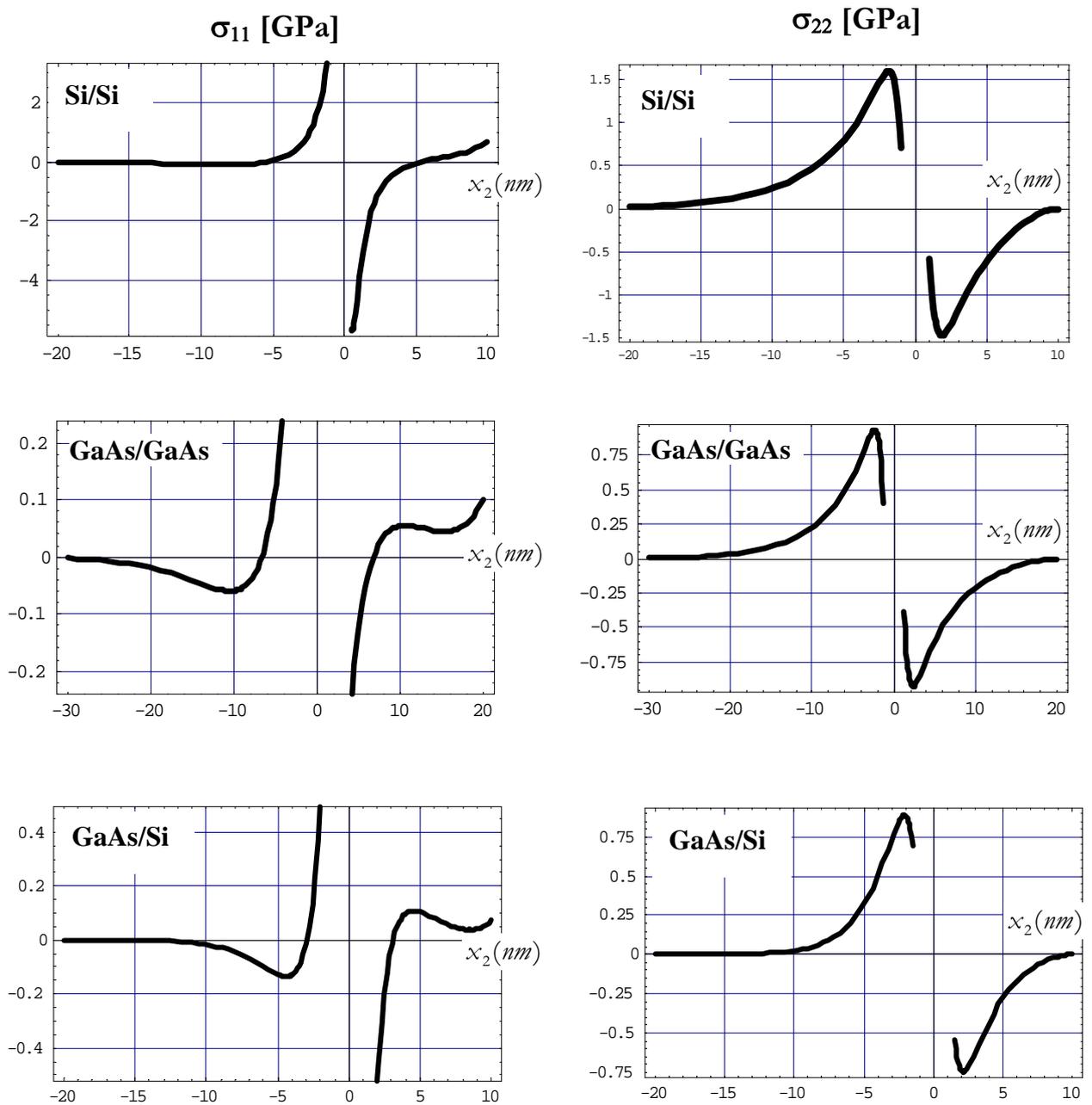


FIG. 5.10 : Evolution des contraintes σ_{11} , σ_{22} en fonction de x_2 pour les joints de flexion Si/Si, GaAs/GaAs et l'hétérostructure GaAs/Si

Les figures (5.6-10) montrent bien que pour toutes les valeurs de x_1 choisies on obtient une discontinuité des contraintes σ_{11} à travers l'interface. Ces contraintes σ_{11} évoluent au sein du même cristal depuis les valeurs positives jusqu'au valeurs négatives et vis versa suivant qu'il s'agit d'une tension ou d'une compression du cristal.

Les différences observées sur les courbes (figure :5.6-9) obtenues pour $x_1 = 1/4$ ou $x_1=1/2$ période et celles obtenues (figure :5.10) pour $x_1=1/25$ période (pour le Si ou le GaAs) ou $x_1=1/10$ période (pour le GaAs/Si) sont dues au fait que loin du coeur de la dislocation (figure :5.6-9) l'état des contraintes des deux côtés de l'interface est inversé par rapport à l'état de celles-ci tout au voisinage du coeur de la dislocation (figure :5.10) à cause du demi-plan supplémentaire.

Les contraintes σ_{22} sont cependant continues à travers toute l'interface et nulles à la limite de la couche conformément aux conditions aux limites.

La valeurs des contraintes σ_{11} et σ_{22} très loin de la dislocation ($x_1 = \Lambda/2$), figure (5.8-9), traduit la limitation du champ de déformation crée par une dislocation isolée.

C. Cas des iso-contraintes

Nous présentons dans cette partie la distribution des iso-contraintes σ_{22} autour d'une dislocation coin, pour une seule orientation du vecteur de burgers à savoir $b//Ox_1$, et ceci dans le cas des joints de flexion Si et GaAs et l'hétérostructure GaAs/Si, figure (5.11).

Ces figures montrent une grande dispersion des contraintes dans la couche surtout pour le GaAs ou elles arrivent jusqu'à la surface libre. De point de vue valeurs, on remarque que les extremas des contraintes du GaAs/Si se situent entre ceux du Si et du GaAs

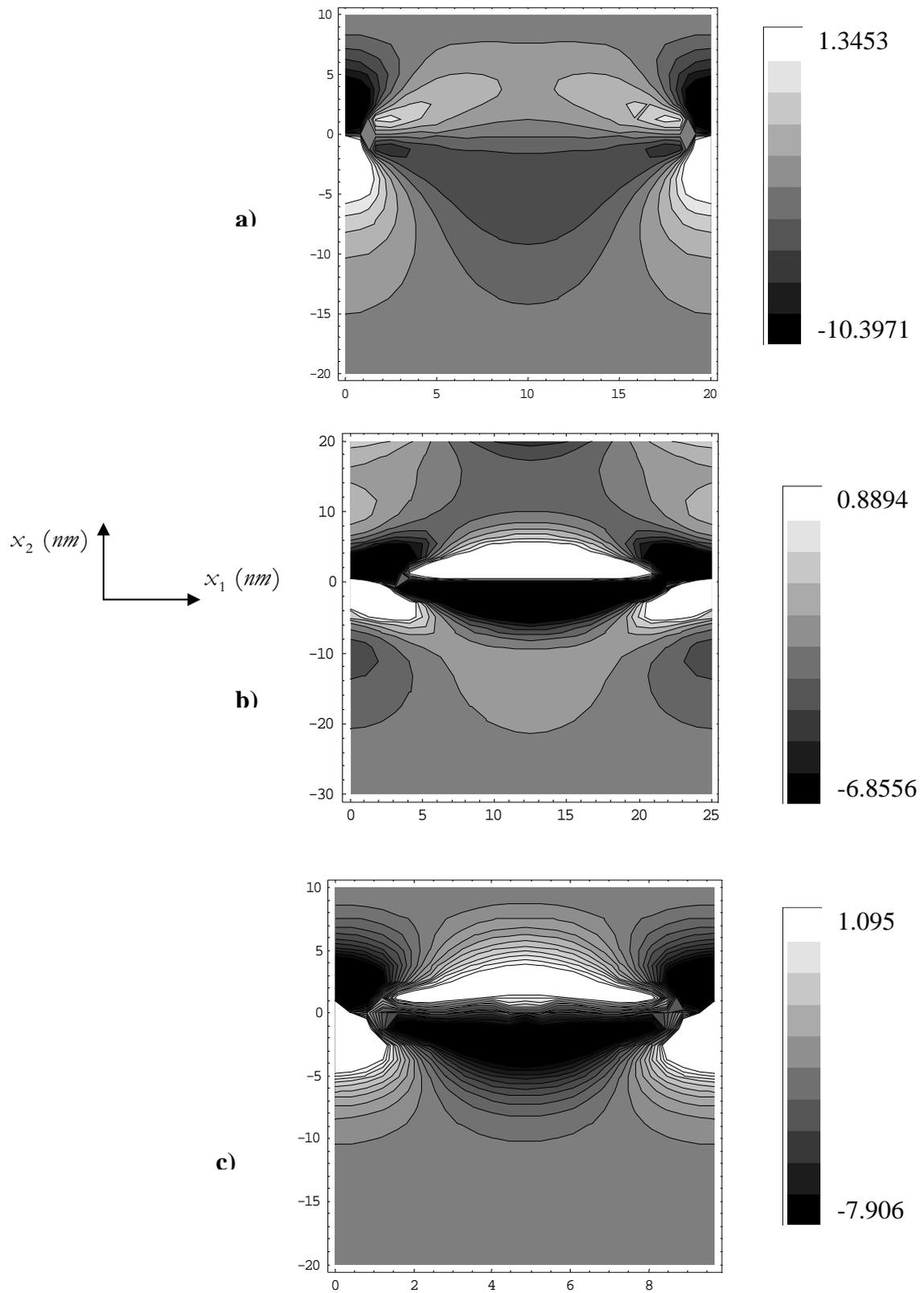


FIG. 5.11: Iso valeurs des champs de contraintes σ_{22} [GPa] induit par un réseau unidimensionnel de dislocations coins pour les joints de flexion (a) Si ($h=10\text{nm}$) et (b) GaAs ($h=20\text{nm}$) et (c) l'hétérostructure GaAs/Si ($h=10\text{nm}$).

5.2.2.3 Energie

Dans ce paragraphe, nous commençons par présenter la variation de l'énergie au sein de la couche supérieure pour les joints de flexion Si/Si, GaAs/GaAs et l'hétérostructure GaAs/Si, figure (5.12-13).

Nous pouvons remarqué que cette énergie est de plus en plus grande lorsqu'on se rapproche de l'interface et qu'elle présente des maximums et des minimums approximativement à $1/4$, $1/2$ et $3/4$ de la période.

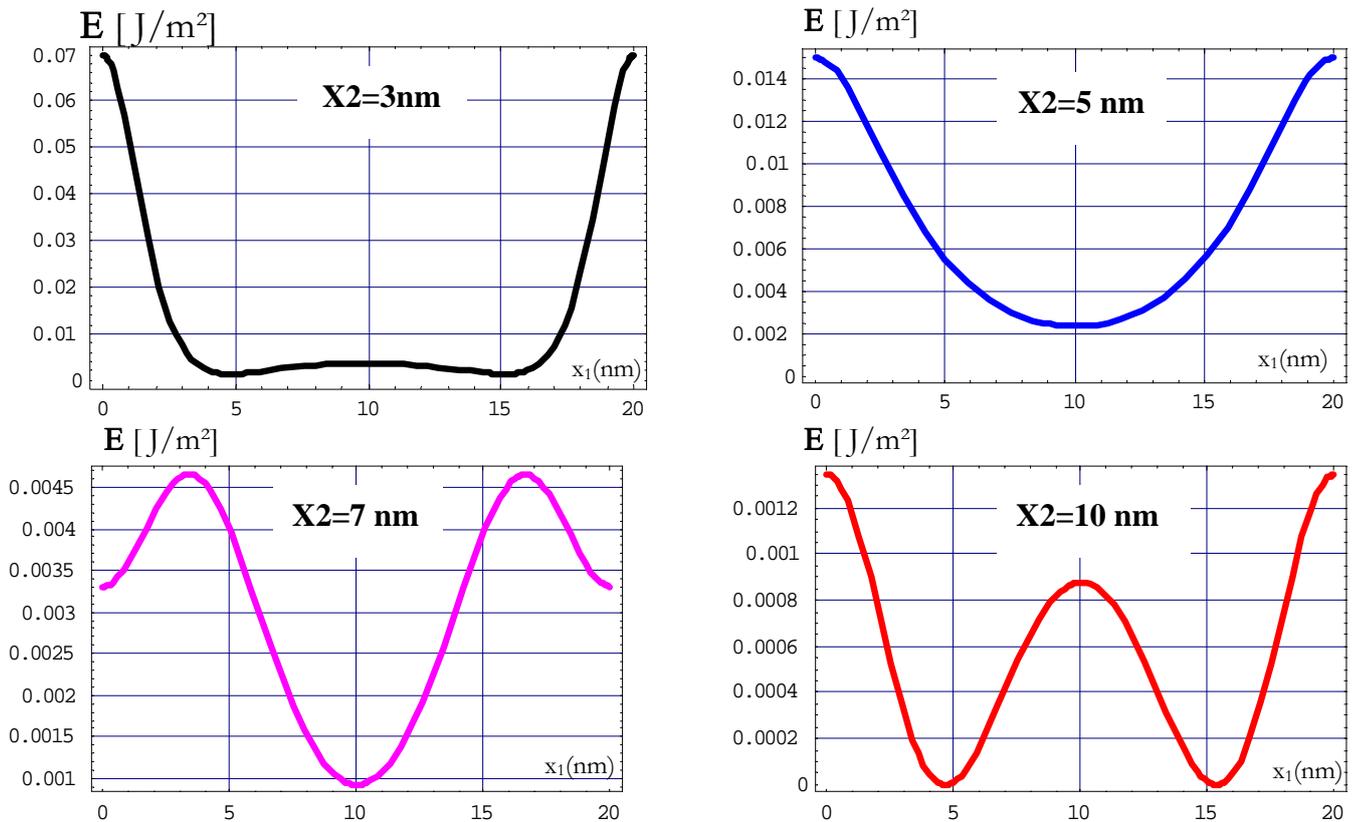


FIG. 5.12 : Variation de l'énergie au sein de la couche supérieure pour le joint de flexion Si/Si

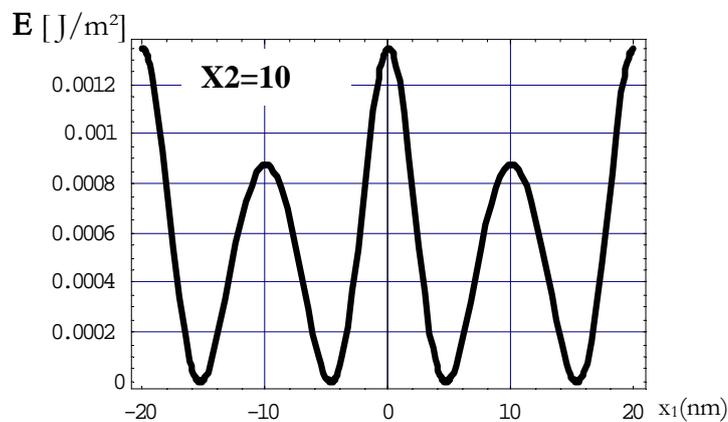


FIG. 5.13 : Variation de l'énergie à la surface libre de la couche supérieure pour le joint de flexion Si/Si sur deux périodes

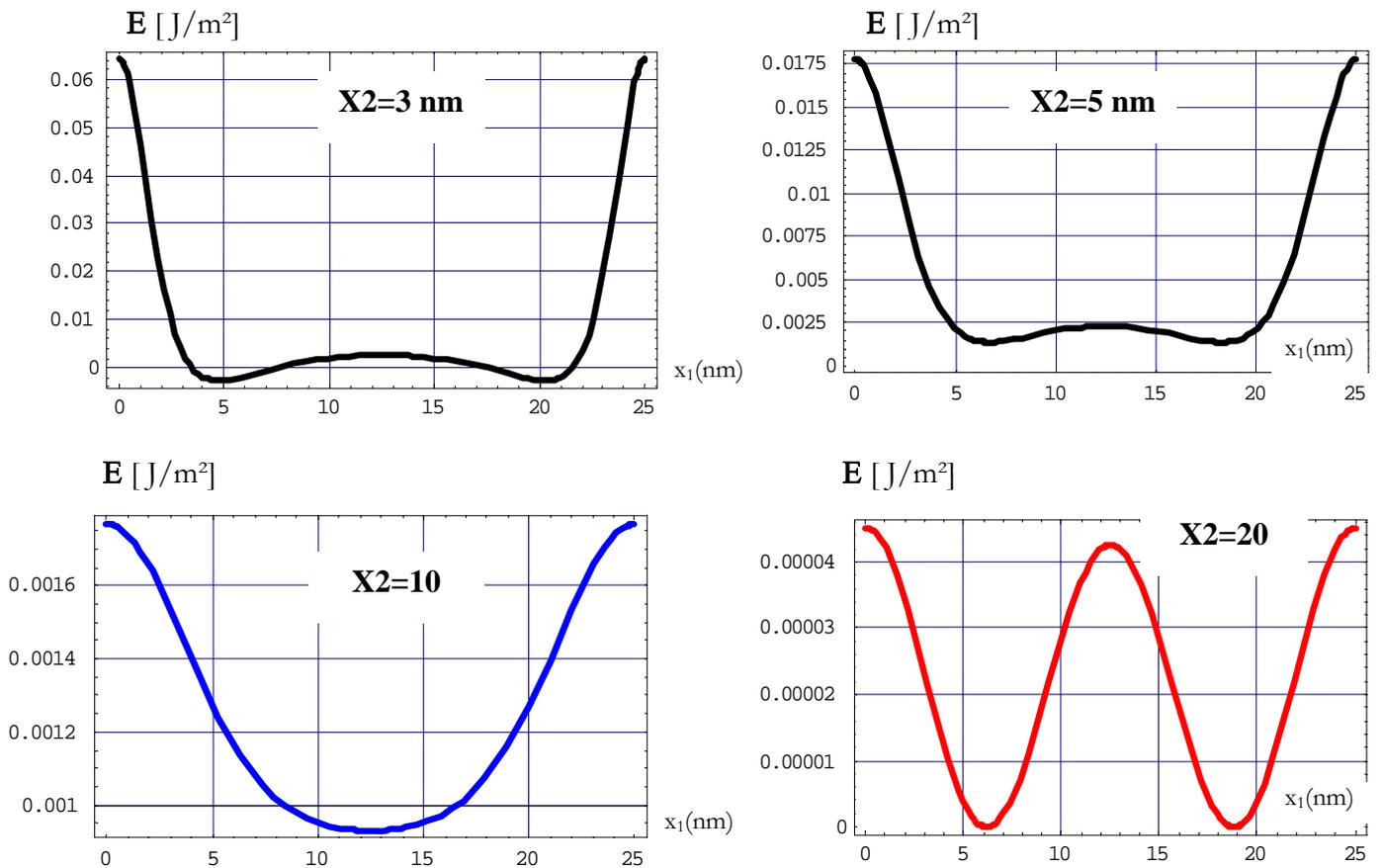


FIG. 5.14 : Variation de l'énergie au sein de la couche supérieure pour le joint de flexion GaAs/GaAs

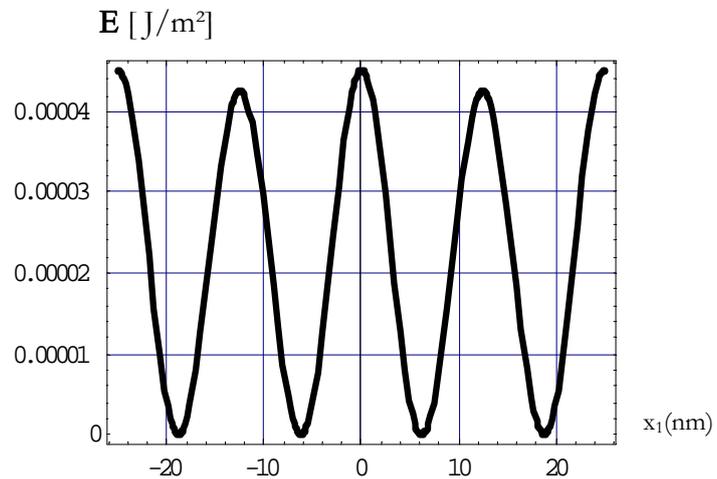


FIG. 5.15 : Variation de l'énergie à la surface libre de la couche supérieure pour le joint de flexion GaAs/GaAs sur deux périodes

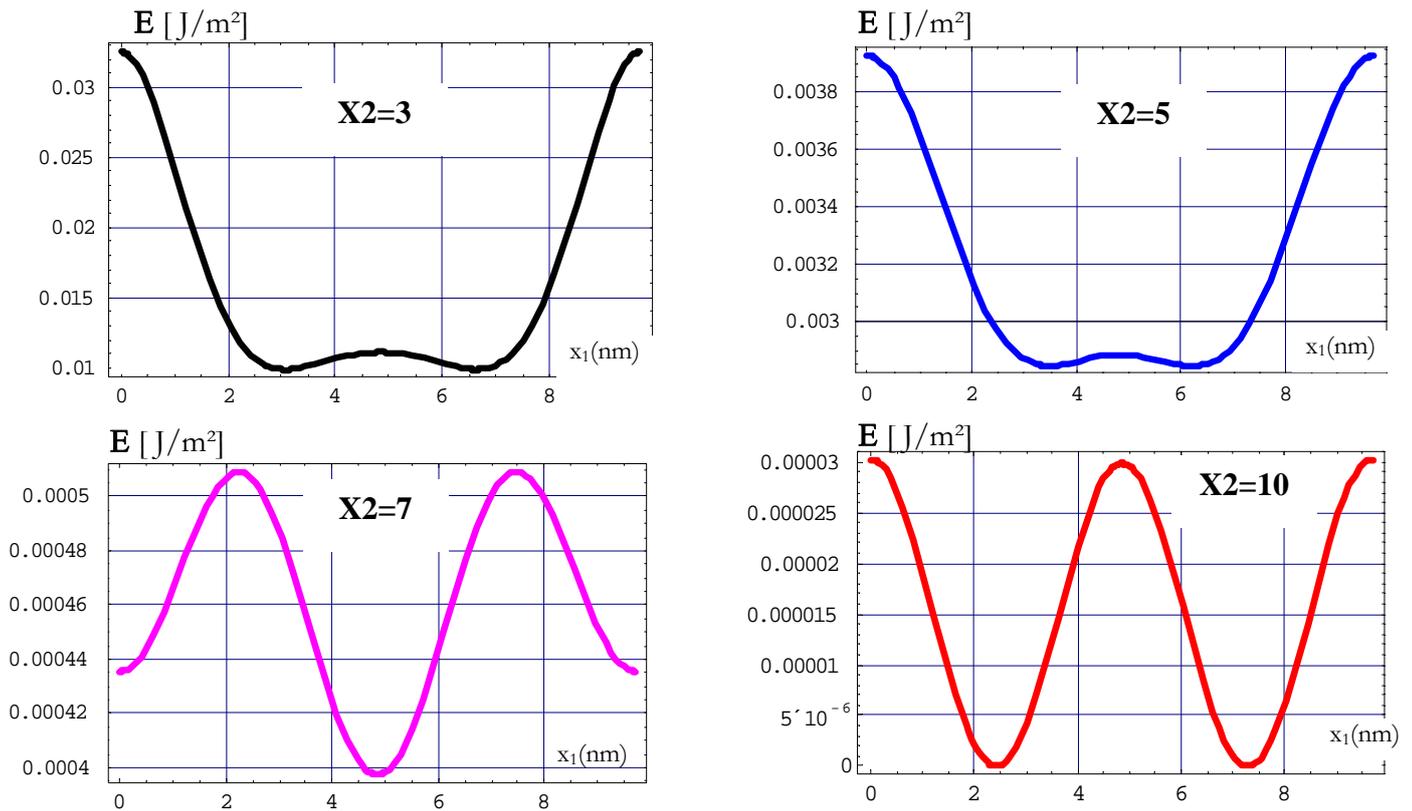


FIG. 5.16 : Variation de l'énergie au sein de la couche supérieure pour le joint de flexion GaAs/Si

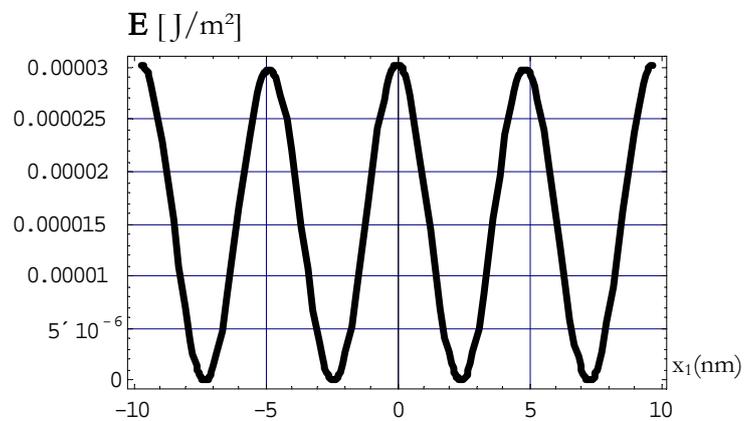


FIG. 5.17 : Variation de l'énergie à la surface libre de la couche supérieure pour le joint de flexion GaAs/Si sur deux périodes

Nous pouvons remarquer sur les courbes des figures (5.13, 15 et 17), qui présentent l'évolution de l'énergie à la surface libre, que l'association de deux matériaux différents (fig.5.17) présente l'avantage d'avoir une distribution homogène de l'énergie sur cette surface (même valeur des pics énergétiques) et par conséquent une déposition future homogène de d'autres types de matériaux.

Nous allons maintenant examiner l'influence de l'épaisseur h et de la période p sur la valeur de l'énergie stockée par unité de surface de la couche de GaAs déposée sur le substrat Si.

Les figures (5.18,19) indiquent respectivement les variations avec l'épaisseur de la couche h et la période p des énergies stockées. Sur la figure 5.18 on voit bien que cette énergie atteint une valeur asymptotique approximativement égale à 0.1255 j/m^2 , dès que l'épaisseur atteint 6 nm .

Quant à la courbe de la figure 5.19, nous remarquons qu'elle présente un maximum d'énergie stockée de l'ordre de 0.15 j/m^2 pour une période qui avoisine les 6 nm .

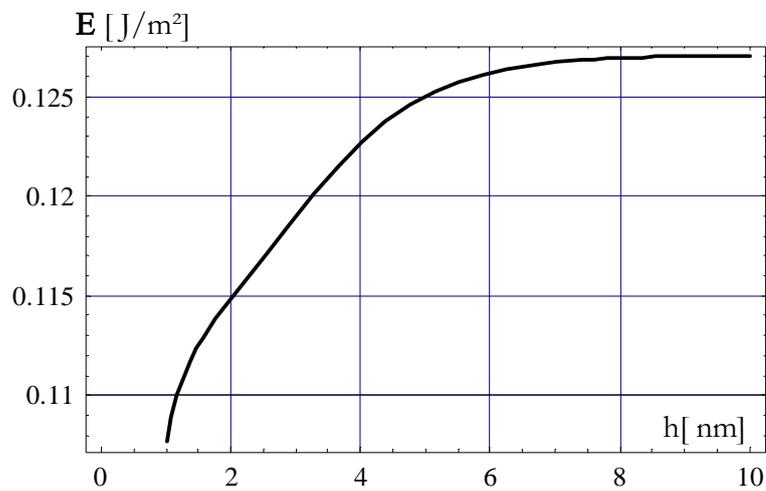


FIG. 5.18 : Variation des énergies élastiques emmagasinées, par unité de surface, en fonction de l'épaisseur h ($p=9.7 \text{ nm}$)

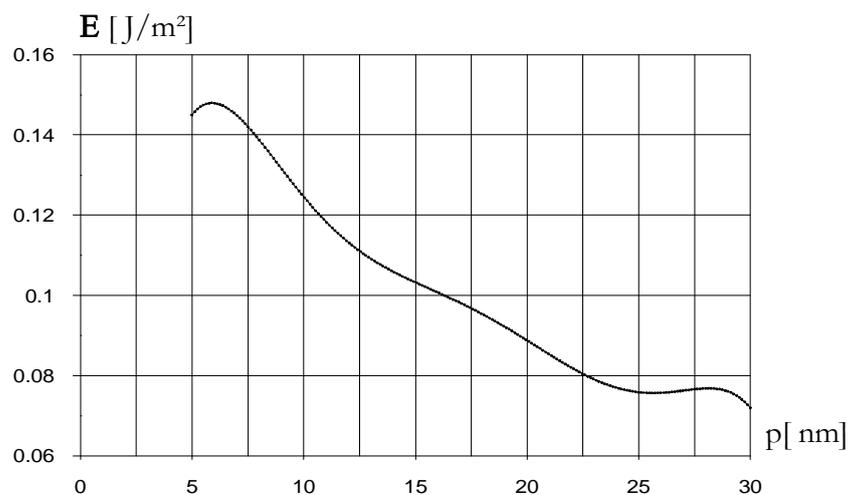


FIG. 5.19 : Variation des énergies élastiques emmagasinées, par unité de surface, en fonction de la période p ($h=10 \text{ nm}$)

L'amplitude maximale de la densité volumique d'énergie élastique stockée en surface due au réseau de dislocations coins est représentée en figures 5.20 et 5.21. On constate que son amplitude maximale à épaisseur h constante tend vers un palier de manière monotone. Sur la figure 5.21, on constate que son amplitude maximale à période p constante décroît exponentiellement quand l'épaisseur h augmente.

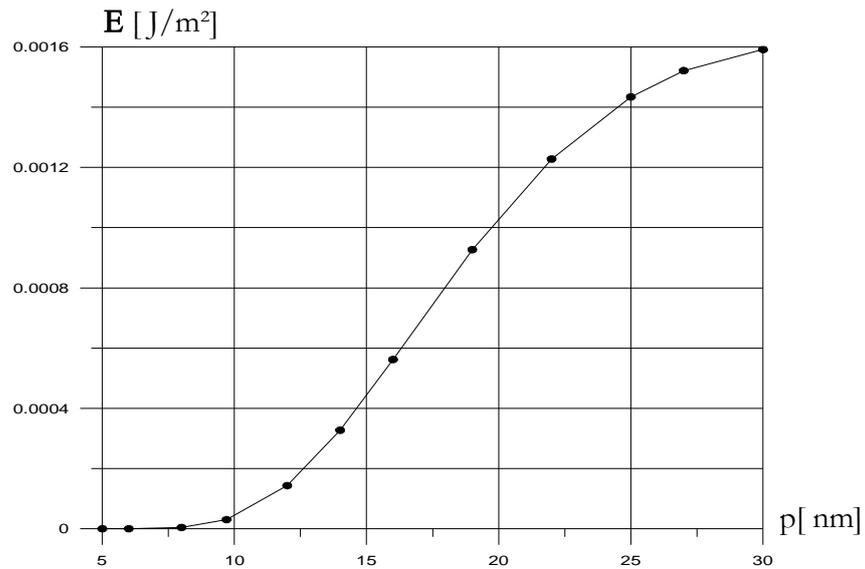


FIG. 5.20: Variation, en fonction de la période du réseau de dislocations, de la valeur maximale de la densité volumique d'énergie élastique stockée à la surface du film de 10 nm.

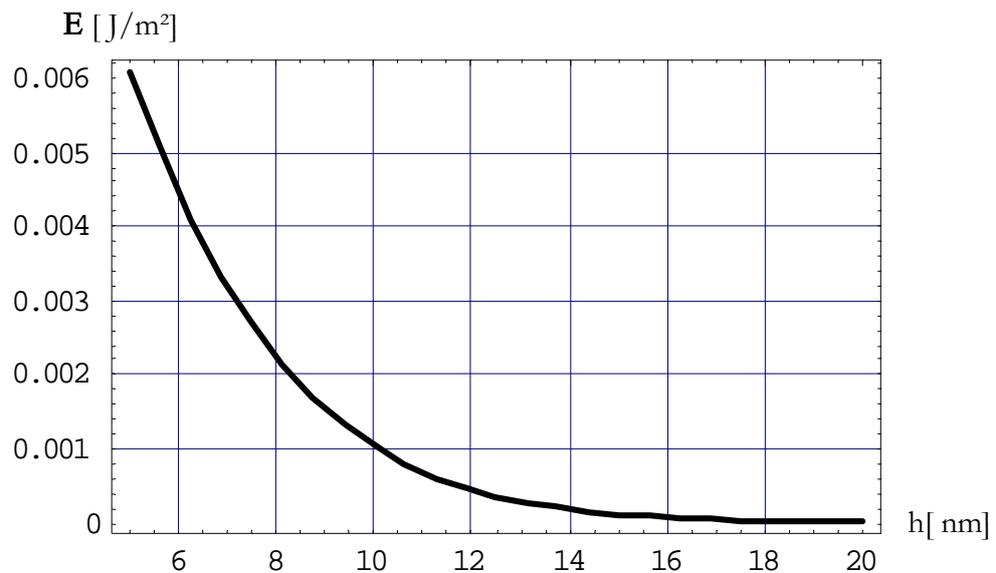


FIG. 5.21: Variation, en fonction de l'épaisseur de la couche, de la valeur maximale de la densité volumique d'énergie élastique induit en surface par un réseau unidirectionnel de dislocations coins de période 9.7 nm.

Conclusion Générale

Les hétérostructures ou les hétérojonctions semi-conductrices sont aujourd'hui, au premier plan de la technologie moderne; chaque jour des composants à semi-conducteurs de plus en plus performants, tels que les diodes, les thyristors, les transistors; sont mis au point contribuant aux résultats spectaculaires dans divers domaines d'application tels que l'informatique, l'espace, la médecine, les télécommunications, l'audiovisuel, etc...

Obtenue généralement par la croissance épitaxiale d'un semi-conducteur sur un autre, une hétérojonction peut être définie comme étant le contact ou la jonction entre ces deux semi-conducteurs de nature et de largeur de bande interdite différentes dans le but d'associer leurs propriétés spécifiques (propriétés électriques et optoélectroniques). Par exemple, 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 ultra-rapides et sa bande interdite 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 électrolumineuses, lasers, photodétecteurs,...) avec une excellente mobilité des électrons. Cependant les propriétés physiques sont médiocres et son élaboration est coûteuse.

Donc, l'association des deux semi-conducteurs c'est à dire l'hétérostructure GaAs/Si, permet de surmonter les problèmes difficiles à résoudre avec un seul matériau.

Dans ce cadre, et en utilisant la théorie élastique isotrope, nous avons utilisé le code formel MATHEMATICA pour simuler l'ensemble des champs élastiques (déplacements, contraintes et énergie) générés par un réseau unidirectionnel de dislocations coins, localisé à l'interface d'un matériau composé d'une couche mince déposée sur un substrat cristallin.

En se basant sur un article de Roland bonnet [14], paru en 1992, des calculs en élasticité isotrope ont été présentés. Ces calculs ont permis de quantifier les différents champs élastiques (en particulier en surface), et d'étudier l'influence des paramètres tels que : la nature du matériau, la période du réseau et l'épaisseur de la couche déposée sur ces champs.

Des applications numériques ont été présentées pour trois types de matériaux à savoir les joints de flexion Si/Si et GaAs/GaAs et l'hétérostructure GaAs/Si accommodant un désaccord paramétrique.

Les résultats montrent que les champs élastiques obtenus, soit pour le joint de flexion ou l'hétérostructure, reproduisent l'organisation des dislocations et que leurs amplitudes sont d'autant plus fortes que l'épaisseur de la couche déposée est faible.

ANNEXE 1

$$\Delta = \alpha + \beta \exp(2hn\omega) + \gamma \exp(4hn\omega)$$

En posant $k = \frac{\mu^+}{\mu^-}$, $\omega = \frac{2\pi}{\Delta}$, et h , l'épaisseur de la couche épitaxiée, les coefficients t_{ji} et α, β, γ qui dépendent de manière naturelle de $n \geq 1$, sont donnés par :

$$\alpha = (-1+k)(3-3k+4kv^- - 4v^-)$$

$$\beta = -2[5 + 2(hn\omega)^2 - 2k + 4k(hn\omega)^2 - 3k^2 - 6k^2(hn\omega)^2 + 4kv^- - 8kv^-(hn\omega)^2 + 4k^2v^- + 8k^2v^-(hn\omega)^2 - 12v^+ + 4kv^+ - 8kv^+v^- + 8(v^+)^2]$$

$$\gamma = (-1-3k+4kv^-)(3+k-4v^+)$$

$$t_{11} = 0$$

$$t_{12} = 2[2 - (hn\omega)^2 - 2k + k(hn\omega)^2 + 3kv^- + 2kv^-(hn\omega) - 6v^+ + 3kv^+ - 2kv^+(hn\omega) - 4kv^+v^- + 4(v^+)^2]$$

$$t_{13} = 2k(2 - 3v^- - 3v^+ + 4v^+v^-)$$

$$t_{14} = 0$$

$$t_{15} = -5 - 6(hn\omega) - 2(hn\omega)^2 + 5k + 6k(hn\omega) + 2k(hn\omega)^2 - 6kv^- - 4kv^-(hn\omega) + 12v^+ + 8v^+(hn\omega) - 6kv^+ - 4kv^+(hn\omega) + 8kv^+v^- - 8(v^+)^2$$

$$t_{16} = -3 - 5k + 6kv^- + 4v^+ + 6kv^+ - 8kv^+v^-$$

$$t_{21} = 0$$

$$t_{22} = -3 + 2(hn\omega) + 3k - 2k(hn\omega) - 4kv^- + 4v^+$$

$$t_{23} = -1 - 3k - 4kv^-$$

$$t_{24} = 0$$

$$t_{25} = 3 + 2(hn\omega) - 3k - 2k(hn\omega) + 4kv^- - 4v^+$$

$$t_{26} = 1 + 3k - 4kv^-$$

$$t_{31} = 2k(v^- - v^+)$$

$$t_{32} = -2[2 - (hn\omega)^2 + 4k(hn\omega) - 3k(hn\omega)^2 + kv^- - 6kv^-(hn\omega) + 4kv^-(hn\omega)^2 - 6v^+ - kv^+ - 6kv^+(hn\omega) + 8kv^+v^-(hn\omega) + 4(v^+)^2]$$

$$t_{33} = 0$$

$$t_{34} = -3 + 3k - 2kv^- + 4v^+ - 2kv^+$$

$$t_{35} = -5 + 6(hn\omega) - 2(hn\omega)^2 - 3k + 10k(hn\omega) - 6k(hn\omega)^2 + 2kv^- - 12kv^-(hn\omega) + 8kv^+(hn\omega)^2 + 12v^+ - 8v^+(hn\omega) + 2kv^+ - 12kv^+(hn\omega) + 16kv^+v^-(hn\omega) - 8(v^+)^2$$

$$t_{36} = 0$$

$$t_{41} = -1 + k$$

$$t_{42} = -3 - 2(hn\omega) - k - 6k(hn\omega) + 8kv^-(hn\omega) + 4v^+$$

$$t_{43} = 0$$

$$t_{44} = -1 + k$$

$$t_{45} = -3 + 2(hn\omega) - k + 6k(hn\omega) - 8kv^-(hn\omega) + 4v^+$$

$$t_{46} = 0$$

$$t_{51} = 2k(v^- - v^+)$$

$$t_{52} = -4k[1 + 2(hn\omega) - 2(hn\omega)^2 - v^- - 4v^-(hn\omega) + 2v^-(hn\omega)^2 - 2v^+ - 2v^+(hn\omega) + 2v^+v^- + 4v^+v^-(hn\omega)]$$

$$t_{53} = 2k(2 - 3v^- + 4v^+v^-)$$

$$t_{54} = -k(3 - 3k - 2v^- + 4kv^- - 2v^+)$$

$$t_{55} = 2k[-1 + 8(hn\omega) + 2(hn\omega)^2 - 3k - 6k(hn\omega)^2 + 2v^- - 8v^-(hn\omega) - 4v^-(hn\omega)^2 + kv^- + 8kv^-(hn\omega)^2 + 2v^+ - 8v^+(hn\omega) - 4v^+v^- + 8v^+v^-(hn\omega)]$$

$$t_{56} = -k(-5 - 3k + 6v^- + 4kv^- + 6v^+ - 8v^+v^-)$$

$$t_{61} = k(-1 + k)$$

$$t_{62} = -2k[1 + 4(hn\omega) - 2(hn\omega)^2 + k + 2k(hn\omega)^2 - 2v^+ - 4v^+(hn\omega)]$$

$$t_{63} = k(3 + k - 4v^+)$$

$$t_{64} = k(-1 + k)$$

$$t_{65} = -2k[1 - 4(hn\omega) - 2(hn\omega)^2 + k + 2k(hn\omega)^2 - 2v^+ + 4v^+(hn\omega)]$$

$$t_{66} = k(3 + k - 4v^+)$$

ANNEXE 2

Généralités sur le Code Mathematica

- **Introduction**

Divers codes ont été écrit pour simuler les champs de contraintes et de déformation. L'outil principal a été Mathematica, de l'éditeur Wolfram. L'avantage prédominant de ce logiciel est sa capacité à manipuler formellement les équations.

- **Qu'est-ce que Mathematica?**

Mathematica est un environnement de calcul formel et numérique permettant de répondre à une très grande variété de besoins tant en enseignement et en recherche. C'est aussi un environnement de programmation multiforme avec lequel on peut développer des applications scientifiques complètes et ouvertes. De plus, Mathematica est pourvu d'un "Notebook", c'est à dire une interface qui permet de bien présenter son travail.

- **Composantes du "Notebook"**

Le notebook permet de faire de la mise en page. Il s'agit d'une mise en page un peu sommaire (qui n'égale pas les capacités d'un traitement de texte complet, tel Word), mais qui sont en général suffisante pour un document de travail. On peut diviser l'interface en quatre éléments.

- 1- L'élément de base: La cellule**

Au lieu d'être divisé en paragraphe (comme dans Word), le texte dans Mathematica est divisé en cellule. Dès que vous tapez du texte, une nouvelle cellule se crée. Les cellules sont indiquées par des crochets bleus sur le côté.

- 2- Les curseurs**

Mathematica possède deux curseurs. Le premier est horizontal et indique que vous êtes entre deux cellules. Si vous cliquez à un endroit où le curseur est horizontal et tapez du texte, vous créez une nouvelle cellule.

Le second curseur est vertical, et indique que vous êtes dans une cellule.

- 3- La hiérarchie des cellules**

Pour constituer l'équivalent d'une table des matières, il est possible d'assigner à une cellule un niveau hiérarchique (par ex. Titre, section, sous-section, etc.). On appelle cette opération donner un style à une section.

Pour changer le style d'une section:

- a) cliquez sur le crocher bleu à droite de la cellule
- b) Allez dans le menu Format: Style et choisissez le style voulu.

4- Ouvrir ou fermer une section

Dès que les cellules forment des sections hiérarchisées (grâce aux styles), les sous-sections deviennent imbriquées dans les sections, elles-mêmes imbriquées dans les titres.

Pour ne plus voir une sous-section, localiser le crocher bleu qui l'englobe et faite un double-clic dessus. Tous ce qui est contenu dans la section est "fermée". Une petite flèche indique qu'il y a des éléments dans la section. Faite un double clic à nouveau pour "ouvrir" une section. En fermant toutes les sous-sections, ça permet d'avoir une "table des matières" de votre document, et donc de mieux saisir la structure du texte.

5- Choisir une feuille de style

Par défaut, vous utiliserez des styles peu flamboyants et sans couleurs. Il est possible de changer les caractéristiques des styles en changeant de feuille de style. Pour changer de feuille de style, allez dans Format: Style Sheet.

- **Les caractères spéciaux dans Mathematica**

Il est possible de changer la typographie de certaines sections de textes (souligné, gras, police et taille du caractère, etc.) . (voir toute la moitié inférieure du menu Format).

Il est aussi possible de taper des caractères spéciaux dans Mathématique, tel α , β , γ , etc. Certains caractères spéciaux (tel les lettres grecques) s'obtiennent facilement avec l'utilisation de la touche .

- **Les palettes d'aide à l'entrée**

Mathematica fournit des palettes qui aident à entrer des caractères spéciaux. Pour afficher une palette, allez dans File: Palettes La plus utile est BasicInput et nous l'utiliserons souvent. Elle est peut-être déjà visible sur le côté droit de votre écran? Celle intitulée CompleteCharacters donne la liste de tout les caractères spéciaux accessibles avec Mathematica.

• Aide-mémoire Mathematica

SYMBLES		
+,-,*,/,^	Opérations élémentaires	3+6+7/(2+4)
!	Factorielle	100!
.	Produit matriciel	{{1,2},{3,4}}.{{5,6},{7,8}}
//	Évaluation postfixée	Pi//N
/. ,>	Utilisation de règles	a+b/.{a->3,b->5}
=, :=	Affectations immédiate et différée	x=2
==, !=	Tests d'égalité et de différence	3==7
(...)	Parenthèses	2*(3+8)
{...}	Liste	L={1,2,3,4,5}
[...]	kième élément d'une liste	L[[5]]
[...]	Appel de fonction	Sin[Pi/12]
%	Résultat du dernier calcul	
;	Expression composée	x=3;y=5;x+y
&&,	ET et OU logiques	5==3 (7 >= 4 && 2==3-1)
#,&	Définir une fonction pure	f=#^2-2&
-	Filtrage	f[x_] :=Sin[x]/x
/;	Filtrage sous conditions	f[x_] /; x>0 :=3*x
?	Filtrage sous conditions	f[x?EvenQ] :=x/2;f[x_?OddQ] :=3*x+1

PRÉSENTER UN RÉSULTAT		
FullForm	Forme complète d'une expression	a*x^2+b*x+c//FullForm
TableForm	Afficher sous forme tabulaire	{a,b,c,d}//TableForm
MatrixForm	Afficher sous forme matricielle	{a,b,c,d}//MatrixForm

GRAPHISME		
Plot	Tracer un graphe de fonction	Plot[Sin[x]/x,{x,-Pi,Pi}]
ParametricPlot	Courbe paramétrée	ParametricPlot[{Cos[t],Sin[t]},{t,0,2*Pi}]
Plot3D	Surface	Plot3D[x^2-y^2,{x,-2,2},{y,-2,2}]
ListPlot	Affichage graphique d'une liste	ListPlot[Table[Random[],10],PlotJoined->True]
Show	Combiner plusieurs graphiques	Show[g1,g2,...]

FONCTIONS ÉLÉMENTAIRES		
Abs	Valeur absolue	Abs[-2.7]
Floor	Partie entière	Floor[2.86]
Exp	Exponentielle	Exp[I*Pi]
Log	Logarithme	Log[Exp[x]]
Sqrt	Racine carrée	Sqrt[96]
Sin,Cos,Tan	Sinus, Cosinus, Tangente	Sin[Pi/4]
ArcSin,ArcCos,ArcTan	Arcs Sinus,Cosinus, Tangente	ArcCos[0]
Sinh,Cosh,Tanh	Sinus, Cosinus, Tangente hyperbolique	Cosh[1]
ArcSinh,ArcCosh,ArcTanh	Fonctions hyperboliques réciproques	ArcCosh[1]

NOMBRES COMPLEXES		
Abs	Module	Abs[1+I]
Arg	Argument	Arg[1+I]
Re, Im	Partie réelle et partie imaginaire	Re[4+8*I]
Conjugate	Conjugué	Conjugate[4+8*I]
ComplexExpand	Écrire sous la forme $a + ib$	ComplexExpand[Re[(a+I*b)^2]]

NOMBRES ENTIERS		
Mod	Modulo (Reste de la division)	Mod[18,4]
Quotient	Quotient de la division	Quotient[18,4]
Binomial	Coefficients binomiaux	Binomial[5,2]
FactorInteger	Factoriser	FactorInteger[345678]
GCD,LCM	PGCD, PPCM	GCD(96,20)
PrimeQ	Test de primalité	PrimeQ[47]
EvenQ,OddQ	Tests de parité et d'imparité	EvenQ[732]

TOUCHES SENSIBLES		
Entrée (clavier)	Passer à la ligne dans la cellule courante	
Entrée (pavé numérique)	Évaluer la cellule courante	
Shift-Entrée	Évaluer la cellule courante	
Ctrl-L	Dernière expression entrée	
Ctrl-K	Complétion automatique	

CONSTANTES MATHÉMATIQUES		
I	Le nombre complexe	$I \wedge 2$
E	La base des logarithmes	$E \wedge (I \cdot \text{Pi})$
Pi	Le nombre π	$\text{Cos}[\text{Pi}/3]$
Infinity	L'infini	$1/\text{Infinity}$

APPROXIMATION		
N	Approximation numérique	$\text{N}[\text{Pi}, 20]$
FindRoot	Rechercher une solution numérique	$\text{FindRoot}[\text{Cos}[x] = x, \{x, 0\}]$

TRANSFORMATIONS ALGÈBRIQUES		
Expand	Développer	$\text{Expand}[(1+x) \cdot (1-x)]$
Factor	Factoriser	$\text{Factor}[x^3 - 3 \cdot x^2 + 3 \cdot x - 1]$
Simplify, FullSimplify	Simplifier	$\text{Simplify}[(\text{Sqrt}[2] - \text{Sqrt}[3]) \wedge 2]$
Sum, Product	Somme, produit	$\text{Sum}[k^2, \{k, 1, n\}]$
Apart	Décomposer en éléments simples	$\text{Apart}[1/(x^2 - 1)]$
Together	Mettre au même dénominateur	$\text{Together}[1/(x + 1) + 3/(x - 1)]$

LISTES ET MATRICES		
Length	Longueur d'une liste	$\text{Length}[\{1, 2, 5, 2\}]$
Table	Créer une liste	$\text{Table}[k^2, \{k, 1, 10\}]$
Range	Entiers successifs	$\text{Range}[3, 15]$
Map	Appliquer une fonction à une liste	$\text{Map}[\#^2 - 2\&, \{0, 1, 2, 3, 4\}]$
Det	Déterminant	$\text{Det}[\{\{a, c\}, \{b, d\}\}]$
Tr	Trace d'une matrice	$\text{Tr}[\{\{a, c\}, \{b, d\}\}]$
MatrixRank	Rang d'une matrice	$\text{MatrixRank}[\{\{a, c\}, \{b, d\}\}]$
LinearSolve	Résolution de systèmes	$\text{LinearSolve}[\{\{1, 3\}, \{2, 4\}\}, \{a, b\}]$
NullSpace	Noyau	$\text{NullSpace}[\{\{1, 2, 3\}, \{4, 5, 6\}, \{7, 8, 9\}\}]$
Eigensystem	Vecteurs propres et valeurs propres	$\text{Eigensystem}[\{\{1, 2\}, \{3, 4\}\}]$

ANALYSE		
D, 'D	Dérivation	$\text{D}[\text{Sin}[x], x] \quad \text{Sin}'[x]$
Integrate	Intégration	$\text{Integrate}[\text{Tan}[x], \{x, 0, \text{Pi}/4\}]$
Limit	Limite	$\text{Limit}[\text{Sin}[x]/x, x \rightarrow 0]$
Solve	Résoudre des équations	$\text{Solve}[x^2 - x - 1 = 0, x]$
DSolve	Résoudre des équations différentielles	$\text{DSolve}[y'[x] = y[x] + 1, y, x]$
Series	Formule de Taylor	$\text{Series}[\text{Exp}[x], \{x, 0, 5\}]$

PROGRAMMATION		
If	Test	$\text{If}[2 < 5, 2, 5]$
Do	Boucle non conditionnelle	$x = 1; \text{Do}[x = x + k, \{k, 1, 10\}]; x$
While	Boucle conditionnelle	$x = 1; \text{While}[x < 1000, x = 2 \cdot x]; x$
Module	Utilisation de variables locales	$\text{Module}[\{x = 1, y = 5\}, \dots]$

ANNEXE 3

Programme élaboré

Nous présentons dans cet annexe une partie du programme élaboré pour le calcul et la simulation des différents champs élastiques.

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

Toute variable finissant par p (respectivement m) est associée à la couche (respectivement au substrat). L'épaisseur est notée h .

On commence par coder les éléments t_{ij} et $\alpha, \beta, \gamma, \delta$.

$\{\omega, p, h, x1, x2, x3, b1, b2, b3\} \in \text{Reals};$

$t11[\omega_, h_, n_] = 0;$

$t12[\omega_, h_, n_] =$

****Simplify[****

****$2(4 \text{ nup}^2 + 3 k \text{ nup} - 4 k \text{ num nup} - 2 k (h n \omega) \text{ nup} - 6 \text{ nup} + k (h n \omega)^2 -$****
****$(h n \omega)^2 - 2 k + 3 k \text{ num} + 2 k \text{ num} (h n \omega) + 2)];$****

$t13[\omega_, h_, n_] = \text{Simplify}[2 k (4 \text{ nup num} - 3 \text{ num} - 3 \text{ nup} + 2)];$

$t14[\omega_, h_, n_] = 0;$

$t15[\omega_, h_, n_] =$

****Simplify[-8 \text{ nup}^2 - 6 k \text{ nup} + 8 k \text{ num nup} - (4 k) h n \omega \text{ nup} + 8 h n \omega \text{ nup} +****
****$12 \text{ nup} + 2 k (h n \omega)^2 - 2 (h n \omega)^2 + 5 k - 6 k \text{ num} - 4 k \text{ num} h n \omega -$****
****$6 h n \omega + 6 h k n \omega - 5] ;$****

$t16[\omega_, h_, n_] = \text{Simplify}[6 \text{ num} k - 8 \text{ num nup} k + 6 \text{ nup} k - 5 k + 4 \text{ nup} - 3] ;$

$t21[\omega_, h_, n_] = 0;$

$t22[\omega_, h_, n_] = \text{Simplify}[-4 \text{ num} k - 2 h n \omega k + 3 k + 4 \text{ nup} + 2 h n \omega - 3] ;$

$t23[\omega_, h_, n_] = \text{Simplify}[4 \text{ num} k - 3 k - 1] ;$

$t24[\omega_, h_, n_] = 0;$

$t25[\omega_, h_, n_] = \text{Simplify}[4 \text{ num} k - 2 h n \omega k - 3 k - 4 \text{ nup} + 2 h n \omega + 3] ;$

$t26[\omega_, h_, n_] = \text{Simplify}[-4 \text{ num} k + 3 k + 1] ;$

```

t31[ω_, h_, n_] = Simplify[2 k (num - nup)];
t32[ω_, h_, n_] =
  Simplify[
    -2 (4 nup2 - k nup - 6 k h n ω nup + 8 h k n num ω nup - 6 nup -
      3 k (h n ω)2 + 4 k num (h n ω)2 - (h n ω)2 + k num - 6 k num h n ω +
      4 h k n ω + 2)];
t33[ω_, h_, n_] = 0;
t34[ω_, h_, n_] = Simplify[-2 num k - 2 nup k + 3 k + 4 nup - 3];
t35[ω_, h_, n_] =
  Simplify[-8 nup2 + 2 k nup - 12 k h n ω nup - 8 h n ω nup + 16 h k n num ω nup +
    12 nup - 6 k (h n ω)2 + 8 k num (h n ω)2 - 2 (h n ω)2 - 3 k + 2 k num -
    12 k num h n ω + 6 h n ω + 10 h k n ω - 5];
t36[ω_, h_, n_] = 0;
t41[ω_, h_, n_] = Simplify[k - 1];
t42[ω_, h_, n_] =
  Simplify[-6 h n ω k + 8 h n num ω k - k + 4 nup - 2 h n ω - 3];
t43[ω_, h_, n_] = 0;
t44[ω_, h_, n_] = Simplify[k - 1];
t45[ω_, h_, n_] =
  Simplify[-8 num h n ω k + 6 h n ω k - k + 4 nup + 2 h n ω - 3];
t46[ω_, h_, n_] = 0;
t51[ω_, h_, n_] = Simplify[2 k (num - nup)];
t52[ω_, h_, n_] =
  Simplify[
    -4 k (2 num (h n ω)2 - 2 (h n ω)2 - num + 2 num nup - 2 nup - 4 num h n ω -
      2 nup h n ω + 2 h n ω + 4 h n num nup ω + 1)];
t53[ω_, h_, n_] = Simplify[2 k (4 nup num - 3 num - 3 nup + 2)];
t54[ω_, h_, n_] = Simplify[-k (4 num k - 3 k - 2 num - 2 nup + 3)];
t55[ω_, h_, n_] =
  Simplify[
    2 k (-6 k (h n ω)2 + 8 k num (h n ω)2 - 4 num (h n ω)2 + 2 (h n ω)2 -
      3 k + 4 k num - 4 nup num + 2 num + 2 nup - 8 num h n ω - 8 nup h n ω +
      8 h n ω + 8 h n num nup ω - 1)];
t56[ω_, h_, n_] = Simplify[-k (4 num k - 3 k - 8 nup num + 6 num + 6 nup - 5)];
t61[ω_, h_, n_] = Simplify[k (k - 1)];

```

```

t62[ω_, h_, n_] =
  Simplify[-2 k (2 k (h n ω)2 - 2 (h n ω)2 + k - 2 nup - 4 nup h n ω + 4 h n ω + 1)];
t63[ω_, h_, n_] = Simplify[k (k - 4 nup + 3)];
t64[ω_, h_, n_] = Simplify[k (k - 1)];
t65[ω_, h_, n_] =
  Simplify[-2 k (2 k (h n ω)2 - 2 (h n ω)2 + k - 2 nup - 4 h n ω + 4 h n nup ω + 1)];
t66[ω_, h_, n_] = Simplify[k (k - 4 nup + 3)];
alp = Simplify[(k - 1) (4 num k - 3 k - 4 nup + 3)];
bet[ω_, h_, n_] =
  Simplify[
    -2 (8 num (h n ω)2 k2 - 6 (h n ω)2 k2 + 4 num k2 - 3 k2 - 8 num (h n ω)2 k +
      4 (h n ω)2 k - 8 nup num k + 4 num k + 4 nup k - 2 k + 8 nup2 +
      2 (h n ω)2 - 12 nup + 5)];
gam = Simplify[(4 num k - 3 k - 1) (k - 4 nup + 3)];
del[ω_, h_, n_] = alp + e4hnω gam + e2hnω bet[ω, h, n];

```

Champs des déplacements pour la couche

```

u1p[ω_, h_, x1_, x2_, b1_, b2_, b3_] := Simplify[Sum[b2 ((t12[ω, h, n] + n ω
t22[ω, h, n] x2) Exp[n ω (2 h - x2)] + (t13[ω, h, n] + n ω t23[ω, h, n]
x2) Exp[n ω (4 h - x2)] + (t31[ω, h, n] + n ω t41[ω, h, n] x2) Exp[n
ω x2] + (t32[ω, h, n] + n ω t42[ω, h, n] x2) Exp[n ω (2 h + x2)])
  Cos[n ω x1] / (n Pi del[ω, h, n]) + b1 ((-t15[ω, h, n] - n ω t25[ω, h, n]
x2) Exp[n ω (2 h - x2)] + (-t16[ω, h, n] - n ω t26[ω, h, n] x2) Exp[n ω
(4 h - x2)] + (-t34[ω, h, n] - n ω t44[ω, h, n] x2) Exp[n ω x2] +
(-t35[ω, h, n] - n ω t45[ω, h, n] x2) Exp[n ω (2 h + x2)]) Sin[n ω x1] / (n Pi del[ω, h, n]),
  {n, 1, Infinity}], TimeConstraint -> 300]

```

```

u2p[ω_, h_, x1_, x2_, b1_, b2_, b3_] := Simplify[Sum[b1 ((-t15[ω, h, n]
+ t25[ω, h, n] (-3 + 4 nup - n ω x2)) Exp[n ω (2 h - x2)] + (-t16[ω, h, n]
+ t26[ω, h, n] (-3 + 4 nup - n ω x2)) Exp[n ω (4 h - x2)] + (t34[ω, h, n]
+ t44[ω, h, n] (-3 + 4 nup + n ω x2)) Exp[n ω x2] + (t35[ω, h, n] +
t45[ω, h, n] (-3 + 4 nup + n ω x2)) Exp[n ω (2 h + x2)]) Cos[n ω x1] / (n Pi del[ω, h, n]) +

```

$$b2((-t12[\omega, h, n] + t22[\omega, h, n](-3 + 4 n \nu - n \omega x2)) \text{Exp}[n \omega (2 h - x2)] + (-t13[\omega, h, n] + t23[\omega, h, n](-3 + 4 n \nu - n \omega x2)) \text{Exp}[n \omega (4 h - x2)] + (t31[\omega, h, n] + t41[\omega, h, n](-3 + 4 n \nu + n \omega x2)) \text{Exp}[n \omega x2] + (t32[\omega, h, n] + t42[\omega, h, n](-3 + 4 n \nu + n \omega x2)) \text{Exp}[n \omega (2 h + x2)]) \text{Sin}[n \omega x1] / (n \text{Pi del}[\omega, h, n]), \{n, 1, \text{Infinity}\},$$
TimeConstraint -> 300]

$$u3p[\omega_, h_, x1_, x2_, b1_, b2_, b3_] := \text{Simplify}[-b3 / \text{Pi Sum}[\text{Sin}[n \omega x1] (\text{Exp}[n \omega (x2 - 2 h)] + \text{Exp}[-n \omega x2]) / (n (1 + k + (1 - k) \text{Exp}[-2 n \omega h])), \{n, 1, \text{Infinity}\},$$
TimeConstraint -> 300]

Champs des déplacements pour le substrat

$$u1m[\omega_, h_, x1_, x2_, b1_, b2_, b3_] := \text{Simplify}[\text{Sum}[b2 ((t51[\omega, h, n] + n \omega t61[\omega, h, n] x2) \text{Exp}[n \omega x2] + (t52[\omega, h, n] + n \omega t62[\omega, h, n] x2) \text{Exp}[n \omega (2 h + x2)] + (t53[\omega, h, n] + n \omega t63[\omega, h, n] x2) \text{Exp}[n \omega (4 h + x2)]) \text{Cos}[n \omega x1] / (n \text{Pi del}[\omega, h, n]) + b1 ((-t54[\omega, h, n] - n \omega t64[\omega, h, n] x2) \text{Exp}[n \omega x2] + (-t55[\omega, h, n] - n \omega t65[\omega, h, n] x2) \text{Exp}[n \omega (2 h + x2)] + (-t56[\omega, h, n] - n \omega t66[\omega, h, n] x2) \text{Exp}[n \omega (4 h + x2)]) \text{Sin}[n \omega x1] / (n \text{Pi del}[\omega, h, n]), \{n, 1, \text{Infinity}\},$$
TimeConstraint -> 300]

$$u2m[\omega_, h_, x1_, x2_, b1_, b2_, b3_] := \text{Simplify}[\text{Sum}[b1 ((t54[\omega, h, n] + t64[\omega, h, n](-3 + 4 n \nu + n \omega x2)) \text{Exp}[n \omega x2] + (t55[\omega, h, n] + t65[\omega, h, n](-3 + 4 n \nu + n \omega x2)) \text{Exp}[n \omega (2 h + x2)] + (t56[\omega, h, n] + t66[\omega, h, n](-3 + 4 n \nu + n \omega x2)) \text{Exp}[n \omega (4 h + x2)]) \text{Cos}[n \omega x1] / (n \text{Pi del}[\omega, h, n]) + b2 ((t51[\omega, h, n] + t61[\omega, h, n](-3 + 4 n \nu + n \omega x2)) \text{Exp}[n \omega x2] + (t52[\omega, h, n] + t62[\omega, h, n](-3 + 4 n \nu + n \omega x2)) \text{Exp}[n \omega (2 h + x2)] + (t53[\omega, h, n] + t63[\omega, h, n](-3 + 4 n \nu + n \omega x2)) \text{Exp}[n \omega (4 h + x2)]) \text{Sin}[n \omega x1] / (n \text{Pi del}[\omega, h, n]), \{n, 1, \text{Infinity}\}, \text{TimeConstraint -> 300]$$

$$u3m[\omega_, h_, x1_, x2_, b1_, b2_, b3_] := \text{Simplify}[-b3 / \text{Pi k Sum}[\text{Sin}[n \omega x1] (\text{Exp}[n \omega (x2 - 2 h)] - \text{Exp}[n \omega x2]) / (n (1 + k + (1 - k) \text{Exp}[-2 n \omega h])), \{n, 1, \text{Infinity}\},$$
TimeConstraint -> 300]

Champs des contraintes pour pour la couche

```
 $\sigma_{11p}[\omega, h, x1, x2, b1, b2, b3] :=$   
Simplify [  
  2  $\omega$  nup  
  Sum [  
    b1 ((-t15 [ $\omega, h, n$ ] + t25 [ $\omega, h, n$ ] (2 nup - n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  (2 h - x2)] +  
      (-t16 [ $\omega, h, n$ ] + t26 [ $\omega, h, n$ ] (2 nup - n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  (4 h - x2)] +  
      (-t34 [ $\omega, h, n$ ] + t44 [ $\omega, h, n$ ] (-2 nup - n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  x2] +  
      (-t35 [ $\omega, h, n$ ] + t45 [ $\omega, h, n$ ] (-2 nup - n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  (2 h + x2)])  
    Cos [n  $\omega$  x1] / (Pi del [ $\omega, h, n$ ]) +  
    b2 ((-t12 [ $\omega, h, n$ ] + t22 [ $\omega, h, n$ ] (2 nup - n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  (2 h - x2)] +  
      (-t13 [ $\omega, h, n$ ] + t23 [ $\omega, h, n$ ] (2 nup - n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  (4 h - x2)] +  
      (-t31 [ $\omega, h, n$ ] + t41 [ $\omega, h, n$ ] (-2 nup - n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  x2] +  
      (-t32 [ $\omega, h, n$ ] + t42 [ $\omega, h, n$ ] (-2 nup - n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  (2 h + x2)])  
    Sin [n  $\omega$  x1] / (Pi del [ $\omega, h, n$ ]), {n, 1, Infinity}], TimeConstraint -> 300 ]
```

```
 $\sigma_{22p}[\omega, h, x1, x2, b1, b2, b3] :=$   
Simplify [  
  2  $\omega$  nup  
  Sum [  
    b1 ((t15 [ $\omega, h, n$ ] + t25 [ $\omega, h, n$ ] (2 - 2 nup + n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  (2 h - x2)] +  
      (t16 [ $\omega, h, n$ ] + t26 [ $\omega, h, n$ ] (2 - 2 nup + n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  (4 h - x2)] +  
      (t34 [ $\omega, h, n$ ] + t44 [ $\omega, h, n$ ] (-2 + 2 nup + n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  x2] +  
      (t35 [ $\omega, h, n$ ] + t45 [ $\omega, h, n$ ] (-2 + 2 nup + n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  (2 h + x2)])  
    Cos [n  $\omega$  x1] / (Pi del [ $\omega, h, n$ ]) +  
    b2 ((t12 [ $\omega, h, n$ ] + t22 [ $\omega, h, n$ ] (2 - 2 nup + n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  (2 h - x2)] +  
      (t13 [ $\omega, h, n$ ] + t23 [ $\omega, h, n$ ] (2 - 2 nup + n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  (4 h - x2)] +  
      (t31 [ $\omega, h, n$ ] + t41 [ $\omega, h, n$ ] (-2 + 2 nup + n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  x2] +  
      (t32 [ $\omega, h, n$ ] + t42 [ $\omega, h, n$ ] (-2 + 2 nup + n  $\omega$  x2)) Exp [n  $\omega$  (2 h + x2)])  
    Sin [n  $\omega$  x1] / (Pi del [ $\omega, h, n$ ]), {n, 1, Infinity}], TimeConstraint -> 300 ]
```

Champs des contraintes pour le substrat

$\sigma_{11m} [\omega, h, x1, x2, b1, b2, b3] :=$

Simplify [

2 ω num

Sum [

b1 ((-t54 [ω, h, n] + t64 [ω, h, n] (-2 num - n ω x2)) Exp [n ω x2] +
(-t55 [ω, h, n] + t65 [ω, h, n] (-2 num - n ω x2)) Exp [n ω (2 h + x2)] +
(-t56 [ω, h, n] + t66 [ω, h, n] (-2 num - n ω x2)) Exp [n ω (4 h + x2)])
Cos [n ω x1] / (Pi del [ω, h, n]) +
b2 ((-t51 [ω, h, n] + t61 [ω, h, n] (-2 num - n ω x2)) Exp [n ω x2] +
(-t52 [ω, h, n] + t62 [ω, h, n] (-2 num - n ω x2)) Exp [n ω (2 h + x2)] +
(-t53 [ω, h, n] + t63 [ω, h, n] (-2 num - n ω x2)) Exp [n ω (4 h + x2)])
Sin [n ω x1] / (Pi del [ω, h, n]), {n, 1, Infinity}], TimeConstraint -> 300]

$\sigma_{22m} [\omega, h, x1, x2, b1, b2, b3] :=$

Simplify [

2 ω num

Sum [

b1 ((t54 [ω, h, n] + t64 [ω, h, n] (-2 + 2 num + n ω x2)) Exp [n ω x2] +
(t55 [ω, h, n] + t65 [ω, h, n] (-2 + 2 num + n ω x2)) Exp [n ω (2 h + x2)] +
(t56 [ω, h, n] + t66 [ω, h, n] (-2 + 2 num + n ω x2)) Exp [n ω (4 h + x2)])
Cos [n ω x1] / (Pi del [ω, h, n]) +
b2 ((t51 [ω, h, n] + t61 [ω, h, n] (-2 + 2 num + n ω x2)) Exp [n ω x2] +
(t52 [ω, h, n] + t62 [ω, h, n] (-2 + 2 num + n ω x2)) Exp [n ω (2 h + x2)] +
(t53 [ω, h, n] + t63 [ω, h, n] (-2 + 2 num + n ω x2)) Exp [n ω (4 h + x2)])
Sin [n ω x1] / (Pi del [ω, h, n]), {n, 1, Infinity}], TimeConstraint -> 300]

Bibliographie

- [1] Catana, A., thèse 864, Ecole polytechnique fédérale de Lausanne, (1990).
- [2] Feuillet, G., Evaluation of advanced semiconductor materials by electron microscopy, édition cherns, New York , (1990).
- [3] Rocher, Da Silva et Raisin Rev.Phys.Appl. 25, 957, (1990b).
- [4] Cherns et Al, phil. Mag.A.45 , 107, (1982).
- [5] Bulle-Lieuwma,C.W.T., Van Ommen et Hornstra, J. Materials Research Society Symposium Proceeding, vol 102, p.377, (1988).
- [6] Bourret, A., Fuoss, P., H., Rocher, A., et Raisin, C., Advanced in surface and thin films diffraction, vol 208 , p303 , (1991).
- [7] William D. Callister, Jr « Science et, génie des matériaux», 5^e édition, (2002).
- [8] J.W. Matthews, Accomodation of misfit across the interface between single-crystal films of various face-centred cubic metals, Phil. Mag. 13 1207-1221 , (1966).
- [9] W.A. Jesser, J.W. Matthews, Evidence for Pseudomorphic growth of iron on copper, Phil. Mag. 15 1097-1106, (1967).
- [10a] W.A. Jesser, J.W. Matthews, Pseudomorphic deposits of cobalt on copper, Phil. Mag., 17, 461-473, (1968).
- [10b] W.A. Jesser, J.W. Matthews, Pseudomorphic deposits of chromium on nickel, Phil.Mag, 17, 475-479, (1968).
- [10c] W.A. Jesser, J.W. Matthews, Pseudomorphic growth of iron on hot copper, Phil. Mag., 17, 595-602 , (1968).
- [11] F. C. Frank. Defects in crystalline solids, page 159. London: Physical Society, (1954).
- [12] J.P. Hirth, J. Lothe, Theory of dislocations (2ed, Wiley , (1982).
- [13] Site web http://perso.orange.fr/michel.hubin/physique/couche/chap_cm1.htm#intro
- [14] Madani salah, thèse de magistère, université de Batna, Algérie, (1997).
- [15] Benbouta Rachid, thèse de doctorat, université de Batna, Algérie, (2006).
- [16] Brioua mourad, thèse de doctorat, université de Batna, Algérie, (2005).
- [17] Madani salah, thèse de doctorat, université de Batna, Algérie, (2006).
- [18] Derardja Akila, thèse de magistère, université de Batna, Algérie, (1997).
- [19] Outtas Toufik, thèse de doctorat, université de Batna, Algérie, (2002).
- [20] Bonnet, R., et Verger-Gaugry , J. L, Phil. Mag. A, vol 66, N° 5, 849 -871, (1992).
- [21] Bonnet, Loubradou, Catana et Stadeimann , (1991).
- [22] R. Bonnet, K. Rousseau et F. Fournel, C.R.Phys.3, 657-663, (2002).
- [23] J.Coelho. Thèse de doctorat, Université de Paris XI, UFR Scientifique d'Orsay, (2004).