



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DE BATNA 2
FACULTE DE TECHNOLOGIE
DEPARTEMENT DE GENIE MECANIQUE

THÈSE

Présentée pour l'obtention du diplôme de Docteur en sciences
Spécialité : MECANIQUE
Option : SCIENCES DES MATERIAUX

Par

Ahmed BOUSSAHA

THEME

Etude de l'influence des dépôts de nanostructures lors de
l'hétéroépitaxie sur la morphologie des joints de grains obtenus
par collage moléculaire.

Soutenue publiquement le //, devant le jury composé de :

BENBOUTA Rachid	Professeur	Université Batna 2	Président
MADANI Salah	Professeur	Université Batna 2	Rapporteur
KANIT Toufik	Professeur	Université de Lille France	Co- Rapporteur
DJEBAILI Hamid	Professeur	Université de Khenchela	Examineur
DERFOUF Semcheddine	Professeur	Université Biskra	Examineur
KADDOURI Wahid	M.C.A	Université Batna2	Examineur

Dédicaces

A ma femme

A mes enfants

A la mémoire de nos chers enseignants qui nous ont quittés en silence

ZAOUCH BOUBAKEUR

BENYAHIA MOUSSA

MENNINA RACHID

ABDELHAMID CHAWKI

DJEFFEL SALAH

Remerciements

Ce travail a été fait au laboratoire de mécanique des structures et matériaux : **LAMSM** ; et c'est mon ami le Professeur **Salah MADANI** qui a proposé et assuré son encadrement et je lui suis extrêmement reconnaissant. Je le remercie vivement pour sa patience et sa compréhension;

Une grande reconnaissance et remerciements pour le professeur **Rachid BENBOUTA** pour toute l'aide qu'il m'a apporté, pour ses encouragements durant la thèse et pour sa présidence du jury durant la soutenance ;

Je remercie également mon ami le professeur **Semcheddine DERFOUF** de l'université de Biskra qui m'a fait l'honneur d'être examinateur et membre du jury ;

Je tiens également à présenter mes remerciements au professeur **Hamid DJEBAILI** de l'université de Khenchela d'avoir étudié avec attention mon travail et d'être un membre du jury ;

Je remercie également mon ami le Professeur **Mourad BRIOUA** qui m'a honoré par son assistance et sa participation à ma soutenance ;

La personne qui m'a fait le grand honneur d'être membre du jury est la plus exceptionnelle: Mon très cher ami le Docteur **WAHID KADDOURI ...**

Je suis très reconnaissant envers mes très chers amis **RAFIK MAKHLOUFI, WAHID KADDOURI, MOHAMED MASMOUDI** et **LARBI BOURIH**

C'est un grand honneur d'avoir des amis pareils

Merci pour tout

Mes remerciements vont également à mes amis Dr **Ghazali MEBARKI**, Dr **Yassine DEMAGH**,

Je remercie vivement notre cher enseignant Dr **Mehieddine NAOUN** pour toute l'aide qu'il m'a apporté et pour ses encouragements ;

J'adresse des remerciements non moins chaleureux au Dr **Hamza BENNACEUR**, Dr **Nabil BESSANANE**,

Mes remerciements s'adressent également à mon ami **Mourad MENASRIA**, et à l'ensemble des enseignants et du personnel du département de génie mécanique.

AHMED

Table des matières

Résumé	
Nomenclature	
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Introduction générale.....	2
Chapitre I : Synthèse bibliographique	
I.1 Introduction.....	6
I.2 Principaux travaux théoriques et expérimentaux en Isotropie.....	6
I.2.1 Travaux de Frank Fournel 2001.....	7
I.2.2 Travaux de Fabien Leroy 2003.....	8
I.2.3 Travaux de José Coelho 2004.....	11
I.3 Principaux travaux théoriques en Anisotropie.....	12
I.4 Champs et énergie élastiques produits en surface par un réseau de dislocations faiblement enterré accommodant une torsion.....	12
I.4.1 Travaux de S.Madani et al.....	12
I.4.2 Joint de torsion Si/Si(001).....	12
I.4.3 Champs des déplacements.....	13
I.4.4 Champs de déformations et de contraintes.....	13
I.4.5 Énergie.....	17
I.5 Joint de torsion GaAs/GaAs (001).....	18
I.5.1 Champs de déformation et de contrainte.....	18
I.6 Travaux de S.Fentous et al.....	23
I.7 Travaux de M.Brioua et al.....	25
I.8 Travaux de Makhloufi et al.....	27
I.9 Conclusion.....	28
Chapitre II : Notions de nanostructures, réseaux de dislocations et élasticité linéaire	
II.1 Introduction	30
II.2 Notions de nanostructures	30
II.2.1 Nanosciences et nanotechnologies.....	30
II.2.2 Nano objets et nanomatériaux.....	30
II.2.3 Classification des nanomatériaux.....	32

II.2.3.1	Classification de Siegel.....	32
II.2.3.2	Classification de Niihara.....	33
II.2.3.3	Classification de Gleiter.....	33
II.2.4	Composition des nanomatériaux.....	34
II.2.4.1	Cœur de grain.....	35
II.2.4.2	Joints de grains.....	35
II.2.5	Croissance de nanostructures par épitaxie.....	36
II.2.5.1	L'épitaxie.....	36
II.2.5.2	Les différents modes de croissance.....	37
II.2.6	Les techniques de fabrication de films minces.....	38
II.2.6.1	La pulvérisation cathodique.....	38
II.2.6.2	L'Épitaxie par Jets Moléculaires.....	38
II.2.6.3	Principe de L'Épitaxie par Jets Moléculaires.....	39
II.2.6.4	L'ablation laser.....	40
II.2.6.5	Le collage moléculaire.....	40
II.3	Réseaux de dislocations	42
II.3.1	Les différents types de réseaux de dislocations.....	42
II.3.2	Un joint de désaccord de paramétrique.....	44
II.3.3	Un joint de flexion.....	44
II.3.4	Un joint de torsion.....	45
II.4	Rappels de la théorie de l'élasticité	48
II.4.1	Le champ de déplacements.....	48
II.4.2	Le champ de déformations.....	49
II.4.3	Le champ de contraintes.....	50
II.4.4	Énergie de déformation élastique.....	51
II.5	Conclusion	53
Chapitre III : Présentation du problème, conditions aux limites et solution en élasticité anisotrope		
III.1	Introduction.....	55
III.2	Géométrie du problème.....	55
III.3	Formulation mathématique.....	56
III.4	Mise en équations du problème.....	57
III.4.1	Champ de déplacements.....	57
III.4.1	Expression finale du champ des déplacements.....	63

III.4.2	Champ de contraintes.....	64
III.4.2.1	Expression finale du champ des contraintes.....	68
III.5	Premier cas : tricouches avec un seul réseau de dislocations unidirectionnel au niveau de l'interface CdTe/GaAs.....	69
III.5.1	Conditions aux limites.....	69
III.5.1.1	Conditions aux limites en déplacement.....	69
III.5.1.2	Conditions aux limites en contrainte.....	70
III.6	Deuxième cas : tricouches avec un réseau de dislocations carré au niveau de l'interface GaAs / GaAs.....	71
III.6.1	Conditions aux limites.....	71
III.6.1.1	Conditions aux limites en déplacement.....	71
III.6.1.2	Conditions aux limites en contrainte.....	73
III. 6.2	Champ élastique d'un réseau carré de dislocation par le principe de superposition...	74
III.6.2.1	Champ des déplacements.....	75
III.6.2.2	Champ des contraintes.....	77
III.7	Système d'équations et matrice associée.....	77
III.7.1	Première interface CdTe / GaAs.....	77
III.7.2	Deuxième interface GaAs/GaAs.....	80
III.8	Expressions des déplacements et contraintes avec les conditions aux limites.....	81
III.9	Conclusion.....	82
Chapitre IV : Applications numériques		
IV.1	Introduction.....	84
IV.2	Expérimentation numérique.....	84
IV.2.1	Organigramme global du programme.....	85
IV.3	Géométrie du problème.....	85
IV.4	Conventions et symboles liés à la géométrie des deux réseaux	87
IV.5	Présentation du système CdTe/GaAs.....	87
IV.5.1	Le tellure de cadmium CdTe.....	87
IV.5.2	L'Arséniure de Gallium GaAs.....	88
IV.6	Déplacement interfacial relatif pour l'interface CdTe/GaAs	89
IV.7	Influence du réseau parallèle sur les champs des déplacements.....	91
IV.8	Iso valeurs du réseau carré placé à l'interface GaAs/GaAs.....	92

IV.9	Champs de déplacements, pour un réseau carré de dislocations cas du collage moléculaire GaAs(001)/GaAs(001).....	96
IV.10	Densité d'énergie élastique.....	97
IV.11	Conclusion.....	98
	Conclusion générale	100
	Références bibliographiques	103
	Annexes	
	Annexe I	108
	Annexe II	112
	Annexe III-1	116
	Annexe III-2	117

Résumé

Ce travail consiste à évaluer numériquement la répartition des champs élastiques, causés par des réseaux de dislocations intrinsèques placés au niveaux d'interfaces dans un tricouche nanométrique pour pouvoir estimer leur influence sur la topologie des surfaces lors de l'opération de l'hétérostructure.

L'organisation des nanostructures est assurée par la connaissance des différents champs élastiques causés par les réseaux de dislocations enterrées et calculés dans le cas d'élasticité anisotrope. Dans le présent travail, nous avons étudié l'influence des champs élastiques générés par des réseaux de dislocations carrées et parallèles induits aux niveaux des interfaces d'un tricouche CdTe/GaAs/GaAs(001). Le but est de contrôler l'organisation et le dépôt de nanostructures vis à vis de la topologie.

Mots-clés : Interface, réseau nanométrique, dislocation, champ élastique, élasticité anisotrope.

Notations et acronymes

$C_{ijkl}^+, C_{ijkl}^*, C_{ijkl}^-$	Constantes élastiques relatives aux cristaux (+), (*) et (-)
$\frac{1}{g} = \Lambda$	Période
a_{Cu}	Paramètre de maille du Cuivre
a_{Fe}	Paramètre de maille du Fer
h	Epaisseur de la couche
Δu	Déplacement relatif
\mathbf{b}	Vecteur de Burgers
$Ox_1x_2x_3$	Repère cartésien lié au réseau unidirectionnel de dislocations.
σ_{ij}	Champ de contrainte
ε_{ij}	Champ de déformation
$\lambda'_{\alpha k}$	Constantes complexes
p_α	Racines complexes du polynôme du 6 ^{ème} degré.
$\overline{p_\alpha}$	Paire conjuguée des racines complexes.
N	Nombre d'harmoniques
p_α^r	Racines à partie imaginaire positive
p_α^i	Racines à partie imaginaire négative
$C_\alpha^{(n)}$	Constantes complexes déterminées par les conditions aux limites
$X_\alpha^{(n)}, Y_\alpha^{(n)}$	Inconnues complexes du système final
u_k	Champ de déplacement
λ	Coefficient de Lamé
μ	Coefficient de Lamé
ν	Coefficient de Poisson
r_0	Rayon du coeur
R	Dimension du grain cristallin
τ	Contrainte de cisaillement
ϵ	Allongement relatif
E	Module d'élasticité
$M.E.T$	Microscope Electronique à Transmission
$M.E.T.H.R$	Microscope Electronique à Transmission Haute Résolution
$S.T.M$	Microscope à Effet Tunnel (Scanning Tunneling Microscopy)
DMs	Dislocation de Misfit

Liste des figures

Chapitre I

- Figure I.1:** Variation, en fonction du pas des dislocations, de la valeur maximale de la déformation ε_{13} à la surface du film de 10 nm..... 7
- Figure I.2:** Variation, en fonction de l'épaisseur du film, de la valeur de la déformation maximale à la surface du film ε_{13} en se plaçant avec une distance entre dislocations vis constante, égale à 50nm..... 7
- Figure I.3:** Vues MET en coupe de deux substrats auto-organisant montrant la très bonne cristallinité des films ultra-minces et la reconstruction parfaite des interfaces de collage 8
- Figure I.4:** Collage et interface d'un joint de grains. Vue plane de MET, le pas des dislocations vis est de $50,6 \pm 0,6 \text{ nm}$ ($0,435 \pm 0,005^\circ$) pour 50nm visés..... 8
- Figure I.5:** Champ de déplacement à la surface de l'échantillon ($\varphi = 0.44^\circ$, $h = 100 \text{ \AA}$). La longueur des vecteurs est proportionnelle au module des déplacements. Le déplacement maximum, au quart de la diagonale, vaut 0.487 \AA ($\approx b/7.88$)..... 9
- Figure I.6:** Iso valeurs de la densité d'énergie élastique dans le volume de l'échantillon ($\varphi = 0.44^\circ$, $h = 100 \text{ \AA}$)..... 9
- Figure I.7:** Champ de déplacement u_1 . L'échelle est prise entre le minimum en surface ($x_1 = 100 \text{ nm}$) et le maximum entre les dislocations, à l'interface..... 10
- Figure I.8 :** Croissance du Ge/Si. Etude STM de l'échantillon B5 ($\varphi = 1.0^\circ$, $h = 10 \text{ nm}$) : surfaces à différentes échelles. Position nominale de la surface : 25 \AA sous l'interface de collage. Les directions $\langle 110 \rangle$ sont données par les directions des tranchées..... 11
- Figure I.9 :** (a) Composante non nulle du champ de contraintes σ_{31} ; en Pa ; et (b) densité volumique d'énergie élastique respectivement stockée et induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda = 25 \text{ nm}$, $h = 20 \text{ nm}$)..... 11
- Figure I.10 :** Schéma illustrant les champs des déplacements des unités structurales déformés par un réseau carré de dislocations vis à la surface de l'échantillon Si/Si..... 13
- Figure I.11 :** Composante non nulle du champ de déformation ε_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda = 50 \text{ nm}$, $h_1 = 10 \text{ nm}$). Représentation

sur une surface de 2×2 périodes.....	14
Figure I.12 : Composante non nulle du champ de contraintes σ_{13} [en GPa] induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50$ nm, $h_1=10$ nm). Représentation sur une surface de 2×2 périodes.....	14
Figure I.13 : Iso-valeurs des déformations ε_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50$ nm, $h_1=10$ nm).Les flèches indiquent les lignes de dislocations vis	14
Figure I.14 : Iso-valeurs des contraintes σ_{13} [en GPa] induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50$ nm, $h_1=10$ nm). Représentation sur une surface de 2×2 périodes	15
Figure I.15 : Variation, en fonction de la période du réseau de dislocations, de la valeur maximale de la déformation ε_{13} à la surface du film de 10 nm	15
Figure I.16 : Variation, en fonction de la période du réseau de dislocations, de la valeur maximale de la contrainte σ_{13} à la surface du film de 10 nm.....	15
Figure I.17 : Variation, en fonction de l'épaisseur de la couche, de la valeur maximale de la déformation ε_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis de période 50 nm	16
Figure I.18 : Variation, en fonction de l'épaisseur de la couche, de la valeur maximale de la contrainte σ_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis de période 50 nm.....	16
Figure I.19 : Évolution de la déformation maximale en surface en fonction de la périodicité du réseau de dislocations vis, pour différentes épaisseurs.....	16
Figure I.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	18
Figure I.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 carré de dislocations vis de période 50 nm.....	18
Figure I.22 : Iso-valeurs des déformations ε_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=25$ nm, $h_1=20$ nm).Les flèches indiquent les lignes de dislocations vis.....	19
Figure I.23: Evolution de la contrainte maximale en surface en fonction de la périodicité du réseau de dislocations vis, pour différentes épaisseurs.....	19

Figure I.24 : Iso valeurs de la densité volumique stockée en surface due à réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=25$ nm, $h_1=20$ nm). (a) 2D, (b) 3D.....	20
Figure I.25 : Evolution de la densité volumique stockée en surface en fonction de la périodicité du réseau de dislocations vis, pour différentes épaisseurs.....	21
Figure I.26 : Bilame mince +/- avec un réseau unidirectionnel de dislocations à l'interface.....	21
Figure I.27 : Schéma illustrant les champs de déplacements du bilame Al/Al ₂ Cu sous l'effet de dislocation coin interfaciale avec $b_1//Ox_1$	21
Figure I.28: Couche sur substrat avec un réseau carré de dislocations à l'interface.....	22
Figure I.29: Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Al ₂ Cu sous l'effet de dislocation coin interfaciale, C_{ij} anisotropes, $b // Ox_1$	22
Figure I.30: Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Al ₂ Cu sous l'effet de dislocation coin interfaciale, C_{ij} anisotropes, $b // Ox_2$	22
Figure I.31: Courbes d'équi-contraintes $\sigma_{11} = \pm 150$ MPa pour une dislocation placée à l'interface d'un bilame mince Al /Al ₂ Cu, $b //Ox_1$	23
Figure I.32: Courbes d'équi-contraintes $\sigma_{11} = \pm 150$ MPa pour une dislocation placée à l'interface d'un bilame mince Al /Al ₂ Cu, $b //Ox_2$	23
Figure I.33: Matériau tricouche (*)/(+)/(−), avec un réseau hexagonal de dislocations intrinsèques à l'interface $x_2=0$. C_{ijkl}^* , C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- sont les constantes élastiques des trois cristaux et h l'épaisseur de la plaquette mince (+).....	23
Figure I.34: Déplacement relatif suivant x_1 , pour un nombre d'harmonique $M=50$	24
Figure I.35: Déplacement relatif suivant x_3 , pour un nombre d'harmonique $M=50$	24
Figure I.36: Champ de déformation dans le plan (Ox_1x_2).....	24
Figure I.37: Champ de déformation dans le plan (Ox_3x_2).....	24
Figure I.38: Contrainte σ_{11} en fonction de l'épaisseur de la couche.....	24
Figure I.39: Contrainte σ_{22} en fonction de l'épaisseur de la couche.....	24
Figure I.40: Champ de déformation dans le plan (Ox_3x_2).....	25
Figure I.41: Champ de déformation dans le plan (Ox_1x_2).....	25
Figure I.42: Contrainte σ_{11} en fonction de l'épaisseur de la couche.....	25
Figure I.43: Contrainte σ_{22} en fonction de l'épaisseur de la couche.....	25
Figure I.44: Matériau tricouche NiSi ₂ /Si/GaAs avec un réseau de dislocations Intrinsèques.....	26

Figure I.45:	Superposition des différentes courbes obtenues pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche intermédiaire $h^+=2$; 4 et 6nm, matériau tricouches NiSi ₂ /si/GaAs , C _{ij} anisotropes, $b//Ox_1$	26
Figure I.46:	Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le matériau tricouches NiSi ₂ /NiSi ₂ /GaAs, Si/Si/GaAs et NiSi ₂ /Si/GaAs, $x_1 = \Lambda/2$, C _{ij} anisotropes, $b//Ox_1$	26
Figure I.47:	Géométrie du matériau tricouche Cu/Cu/(001) Fe sous l'influence de deux réseaux de dislocations unidirectionnels.....	27
Figure I.48:	Schéma illustrant les champs de déplacements du matériau Cu/Cu/(001)Fe sous l'effet de deux réseaux de dislocations interfaciales où $b // Ox_1$ et pour $h^*=4nm$, $h^+=4nm$ et $h^-=4nm$	27
Figure I.49:	Schéma illustrant les champs de déplacements du matériau Cu/Cu/(001)Fe sous l'effet de deux réseaux de dislocations interfaciales où $b // Ox_2$ et pour $h^*=4nm$, $h^+=4nm$ et $h^-=4nm$	27
Figure I.50:	Présentation de U_1 pour $b//ox_1$ pour l'interface entre le cristal (*) et le cristal (+).....	28
Figure I.51:	- Présentation de U_1 pour $b//ox_2$ pour l'interface entre le cristal(+) et le cristal (-).....	28

Chapitre II

Figure II.1:	Micrographies montrant un matériau conventionnel(a) et un matériau nanocristallin(b).....	27
Figure II.2:	Classification des nanostructures selon leur dimensionnalité selon Siegel...	29
Figure II.3:	Classification des nanomatériaux selon Niihara.....	29
Figure II.4:	Les différentes familles des nanomatériaux selon Gleiter.....	30
Figure II.5:	Composition des nanomatériaux.....	31
Figure II.6:	Image haute résolution du cœur de grain du nickel nanocristallin.....	31
Figure II.7:	Structure d'hétéroépitaxie accordée en paramètre de maille, contrainte, et relaxé plastiquement. L'hétéroépitaxie accordée est similaire à l'homoépitaxie.....	33
Figure II.8 :	Classification des différents modes de croissance : (a) croissance 3D par la formation d'îlots (Volmer–Weber) (b) croissance 2D couche par couche (Frank-van der Merwe), et (c) croissance 2D puis 3D (Stranski–Krastanov)	34

Figure II.9 :	Technique de la pulvérisation cathodique.....	35
Figure II.10 :	Schéma d'un bâti d'épitaxie par jets moléculaires.....	36
Figure II.11 :	Schéma de principe de l'auto-organisation par des réseaux de dislocation enterrés.....	37
Figure II.12 :	Principe du collage moléculaire.....	38
Figure II.13 :	Les différentes désorientations cristallines possibles lors du collage et les réseaux dislocations qu'engendre le raccordement cristallin. (a) le désaccord paramétrique : les paramètres de maille a et b des deux cristaux sont différents.Le raccordement engendre la formation d'un réseau uni ou bidimensionnel de dislocations coin. (b) la flexion : les deux surfaces collées font un angle $\theta/2$. Lors du raccordement, ces deux désorientations produisent un réseau unidimensionnel de dislocations coin. (c) la torsion : un des deux cristaux est tourné d'un angle ϕ autour d'un axe perpendiculaire au futur joint de grains. Après le raccordement cristallin, ce dernier type de désorientation engendre un réseau bidimensionnel de dislocations vis.....	39
Figure II.14 :	a) Définition de l'angle de vicinalité de deux surfaces avant leur mise en contact. Cet angle correspond à l'angle entre le vecteur normal à la surface et le vecteur normal aux plans cristallins. b) Formation du réseau de dislocations coin pour relaxer les contraintes dues à la désorientation de flexion entre les deux cristaux. La désorientation de flexion correspond cette fois à l'angle entre les vecteurs normaux aux plans cristallins à l'interface de collage.....	41
Figure II.15 :	a) Image de Moiré obtenue en superposant deux réseaux carré identiques tournés l'un par rapport à l'autre d'un angle $\phi/2$. b) Appariation du le réseau carré de dislocations vis.....	42
Figure II.16 :	Périodicité des réseaux de dislocations en fonction de l'angle de désorientation.....	43
Figure II.17 :	Microscopie électronique en transmission en vue plane des réseaux de dislocations.....	44
Figure II.18 :	Microscopie électronique en transmission en vue en coupe de l'interface de collage, d'un échantillon dont la rotation vaut environ 5°	44
Figure II.19 :	Transformation d'un point et d'un vecteur.....	45

Figure II.20 :	Un petit élément de volume d'un solide.....	45
Figure II.21 :	Les composantes d'un champ de contraintes agissant sur un élément de volume.....	46
 Chapitre III		
Figure III.1:	Géométrie du matériau tricouche CdTe/GaAs/GaAs.....	55
Figure III.2:	Tricouche avec deux réseaux de dislocations unidirectionnel et carré aux interfaces A/B et B/C; h^*, h^+ et h^- sont les épaisseurs des trois milieux.....	56
Figure III.3:	Configuration du tricouche A/B/C	57
Figure III.4:	Réseau de dislocations unidirectionnel à l'interface CdTe/GaAs.....	69
Figure III.5:	Représentation des dislocations intrinsèques réparties périodiquement le long de l'interface CdTe / GaAs	69
Figure III.6:	Courbe en dents de scie relative aux dislocations intrinsèques placées à la première interface CdTe / GaAs	70
Figure III.7:	Conditions aux limites en contraintes.....	70
Figure III.8 :	Réseau de dislocations carré à l'interface GaAs/GaAs.....	71
Figure III.9 :	Représentation des dislocations intrinsèques réparties périodiquement le long de l'interface GaAs / GaAs.....	72
Figure III.10 :	Courbe en dents de scie relative aux dislocations intrinsèques placées à la deuxième interface GaAs / GaAs	72
Figure III.11 :	Conditions aux limites en contraintes.....	73
Figure III.12 :	Configuration de la première famille de dislocations unidirectionnelles.....	74
Figure III.13 :	Configuration de la deuxième famille de dislocations unidirectionnelles...	74
Figure III.14 :	Représentation du réseau carré de dislocations par le principe de superposition.....	75
Figure III.15 :	Configuration de la première interface entre (*) et (+).....	77
Figure III.16 :	Configuration de la deuxième interface entre (+) et (-).....	80
 Chapitre VI		
Figure IV.1:	Organigramme général du programme.....	85

Figure IV.2:	Matériau tricouches CdTe/GaAs/GaAs sous l'effet de deux réseaux de dislocations unidirectionnel et carré.....	86
Figure IV.3:	Réseau de dislocations unidirectionnel.....	86
Figure IV.4:	Réseau de dislocations carré.....	86
Figure IV.5:	(a) Modèle de la maille cristalline du CdTe, type cubique face centrée. (b) Modèle de la face {111} de la structure Zinc Blende du CdTe.....	87
Figure IV.6:	La structure Zinc-blende du GaAs.....	88
Figure IV.7:	Déplacement relatif à l'interface du système CdTe/ GaAs.....	90
Figure IV.8 a :	Topologie de l'hétérostructure CdTe/GaAs en 3D sous l'effet d'un réseau de dislocations parallèle interfaciale pour $b // O_{x_1}(\Lambda=25 \text{ nm}, h_1=2 \text{ nm})$	91
Figure IV.8 b :	Topologie de l'hétérostructure CdTe/GaAs en 2D sous l'effet d'un réseau de dislocations parallèle interfaciale pour $b // O_{x_1}(\Lambda=25 \text{ nm}, h_1=2 \text{ nm})$	92
Figure IV.9 :	Topologie de l'hétérostructure CdTe/GaAs.....	92
Figure IV.10 :	Iso valeurs des champs de déplacement u_1 de la couche GaAs en fonction de l'épaisseur des couches pour $h^+=4\text{nm}$ sous l'effet de dislocations interfaciales.....	93
Figure IV.11 :	Iso valeurs des champs de déplacement u_1 de la couche inférieure GaAs, en fonction de l'épaisseur des couches pour $h^-=4\text{nm}$ sous l'effet de dislocations interfaciales pour b_1	93
Figure IV.12 :	Iso valeurs des champs de déplacement u_1 de l'hétérostructure GaAs/GaAs.....	94
Figure IV.13 :	Représentation en 3D des iso valeurs des champs de déplacement u_1 de l'hétérostructure GaAs/GaAs, cas d'un réseau de dislocations en fonction de l'épaisseur des couches pour $h^-=8\text{nm}$ et $h^+=8\text{nm}$ sous l'effet de dislocations interfaciales et pour $b_1//x_1$	95
Figure IV.14 :	Champs de déplacement u_1 entre deux dislocations séparées de 10nm, représentation en 2D et 3D.....	96
Figure IV.15 :	Champs de déplacement u_2 entre deux dislocations séparées de 10nm, représentation en 2D et 3D.....	97
Figure IV.16 :	Densité d'énergie élastique pour un réseau de dislocations coins, séparés de 10 nm, pour une épaisseur de 10 nm pour le cas GaAs(001)/GaAs(001), présentation en 2D et 3D.....	98

Liste des tableaux

Tableau IV.1:	Constantes d'élasticité anisotrope pour CdTe et GaAs.....	88
Tableau IV.2:	Calcul d'erreur ΔR pour le système CdTe/GaAs/ GaAs.....	91

Introduction générale

Introduction générale

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

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

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

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

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

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

3. Quels sont les mécanismes qui pilotent la forme, la taille et la densité de ces nanostructures ?

Et principalement voir l'influence des dépôts de nanostructures (troisième couche) lors de l'hétéroépitaxie sur la morphologie des joints de grains obtenus par collage moléculaire (spécifiquement sur la périodicité des réseaux de dislocations).

Pour pouvoir utiliser ces structures dans des dispositifs, il faut être en mesure d'obtenir des densités suffisantes d'objets. Par opposition à la très grande majorité des techniques consistant à maîtriser très finement l'organisation ou l'auto-organisation du dépôt des nanostructures sur des substrats standard, le sujet de notre thèse a été de développer celle que nous estimons être la plus prometteuse, à savoir : l'organisation à longue distance de nanostructures sur des substrats fonctionnels, grâce aux champs de contraintes et de déformations induits en surface par un réseau carré de dislocations (RDs) périodique faiblement enterré. Ces champs périodiques, sont précisément créés par collage moléculaire avec notamment une désorientation en rotation dite de torsion et également appelée "twist" en terminologie anglo-saxonne, entre les deux cristaux mis en contact.

Pour cela nous envisageons d'étudier un matériau tricouches représentant une couche mince sur un substrat avec un réseau carré de dislocation vis, avec la géométrie du bilame mince dont le réseau de dislocations est unidirectionnel et accommodant un désaccord paramétrique.

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

Pour mener à terme cette étude, nous avons élaboré un programme de simulation numérique en code **MATHEMATICA** capable de déterminer les champs élastiques en se basant sur une formulation mathématique des séries de Fourier.

Le premier chapitre est dédié à une synthèse bibliographique regroupant l'essentiel des travaux théoriques et expérimentaux destinés à la détermination du comportement mécanique des couches minces épitaxiées en présence de réseaux de dislocations au niveau des interfaces cristallines.

Dans les travaux théoriques, il s'agit d'évaluer les champs élastiques en se basant sur le modèle de la théorie classique de l'élasticité ou bien sur le modèle de Bonnet (1981) dans le cas isotrope et puis dans le cas anisotrope, avec quelques représentations graphiques en déplacement, déformation et contraintes ;

Le deuxième chapitre présente quelques notions de nanostructures de base, de réseaux de dislocations ainsi que la théorie des dislocations dans le domaine de l'élasticité linéaire.

Le troisième chapitre décrit la géométrie et les conditions aux limites du problème qui est un matériau tricouche de type A/B/C muni de deux réseaux unidirectionnel et carré de dislocations placés au niveau des deux interfaces. La formulation mathématique utilisée du champ des déplacements et des contraintes en élasticité anisotrope, se base sur un modèle de Bonnet (1981), et qui utilise des séries de Fourier double à coefficients complexes pour décrire la périodicité du réseau de dislocations. Les développements mathématiques ont conduit, après linéarisation, à un système d'équations globale sous forme $AX=B$ gouvernant l'évolution du champ des déplacements ;

Le quatrième chapitre est consacré à la résolution numérique du problème en présentant les champs de déplacement générés par les réseaux de dislocations en élasticité anisotrope ainsi que leurs effets.

Le problème résolu a permis de représenter aussi l'énergie emmagasinée. Le matériau CdTe/GaAs/GaAs est choisi comme exemple d'application, le travail numérique a été effectué sous le code **MATHEMATICA**.

Enfin, le travail est achevé par une conclusion générale résumant les résultats de l'étude avec quelques perspectives pour l'amélioration et la validation des modèles traités.

Chapitre I

Synthèse bibliographique

I.1 Introduction

La théorie élastique anisotrope trouve son utilisation dans plusieurs travaux qui s'intéressent aux couches minces, obtenues par épitaxie ou collage moléculaire, afin d'évaluer numériquement les champs élastiques dans les milieux à N couches qui sont élastiquement hétérogènes, au contraire des travaux antérieurs qui supposent que ses milieux sont élastiquement isotropes [3].

Durant la croissance épitaxiale, l'obtention d'un ordre à longue distance d'îlots s'obtient en ajoutant une modulation périodique au potentiel chimique de surface. Pour cela, on peut soit utiliser les propriétés intrinsèques des surfaces telles qu'une vicinalité ou bien tirer parti des défauts extrinsèques aux surfaces, tels que des dislocations pour localiser les îlots. Dans ce cas, il faut trouver un moyen pour imposer l'ordre latéral des défauts qui induira à son tour l'ordre des îlots [2].

La présence des réseaux de dislocations aux interfaces rend l'étude de ces dernières un peu compliquée ce qui fait appel à l'utilisation de modèles mathématiques permettant de décrire les différents champs élastiques (déplacement, déformation, contrainte et énergie) difficilement accessibles expérimentalement [3].

Le but de ce chapitre est de présenter brièvement, sous forme d'une synthèse bibliographique, quelques travaux théoriques et expérimentaux ayant une relation directe avec les défauts interfaciaux dans les multicouches à l'échelle nanométrique et plus particulièrement en présence des réseaux de dislocations au niveau des interfaces cristallines.

I.2 Principaux travaux théoriques et expérimentaux en Isotropie

En 1997, un groupe de chercheurs de l'université de Santa Barbara (UCSB) sont arrivés à coller « par fusion » deux plaquettes de GaAs (Eymery, [4]) réalisant ainsi des joints de grains de torsion, avec un angle de désorientation faible et contrôlé au dixième de degré entre les deux cristaux. Les collages GaAs/GaAs se sont avérés plus difficiles à réaliser relativement aux collages Si/Si, essentiellement du fait du caractère binaire du composé.

Depuis, plusieurs travaux théoriques et expérimentaux sont succédés pour apporter des solutions plus ou moins convaincantes quant à l'obtention d'un ordre à longue distance des boîtes quantiques. Citons ici les travaux pilotes de Frank Fournel [5] et Fabien Leroy [6] pour le collage moléculaire du Si/Si et récemment celles de José Coelho [7] pour le collage moléculaire du GaAs/GaAs.

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

I.2.1 Travaux de Frank Fournel 2001

Dans son travail, Frank Fournel [5] commença à tracer, à partir toujours des formules de Bonnet [8], la variation du déplacement maximal à la surface du film en faisant varier le pas de dislocations vis (Figure I.1), et l'épaisseur du film à déposer (Figure I.2).

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

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

Expérimentalement, il réussit à contrôler au nanomètre près l'épaisseur finale d'un film ultra-mince de silicium comme nous pouvons le voir sur la figure I.3. Sur cette figure, nous pouvons aussi constater que ce film a conservé les très bonnes qualités cristallines du film superficiel du SOI de départ et que l'interface de collage est très bien reconstruite.

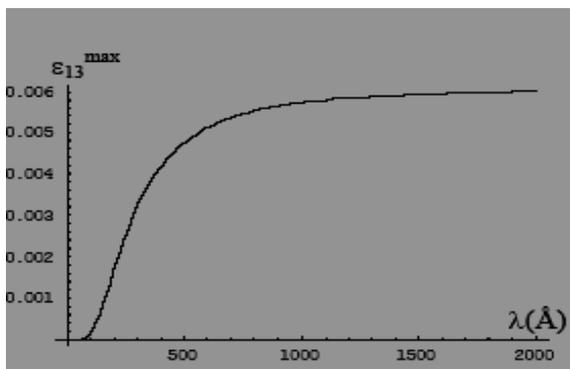


Figure I.1 - Variation, en fonction du pas des dislocations, de la valeur maximale de la déformation ε_{13} à la surface du film de 10nm.

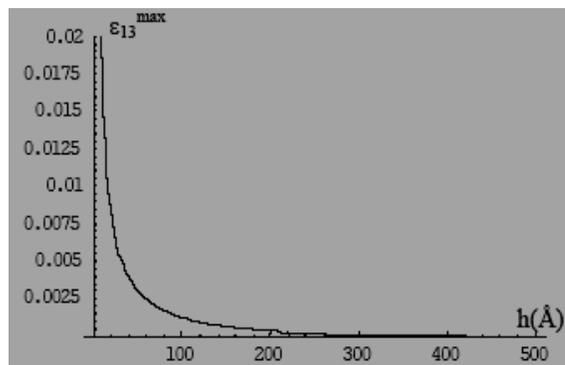


Figure I.2 - Variation, en fonction de l'épaisseur du film, de la valeur de la déformation maximale à la surface du film ε_{13} en se plaçant avec une distance entre dislocations vis constante, égale à 50nm.

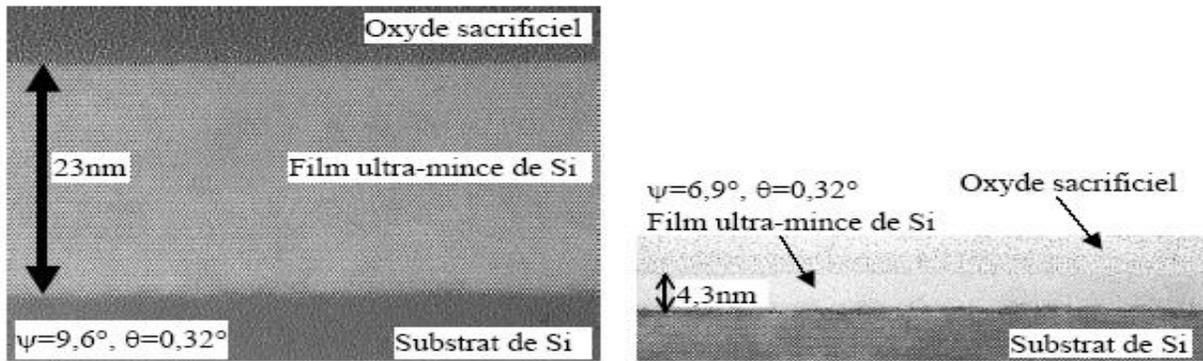


Figure. I.3 - Vues MET en coupe de deux substrats auto-organisant montrant la très bonne cristallinité des films ultra-minces et la reconstruction parfaite des interfaces de collage. [5]

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

Il arriva en fin, avec un contrôle bien précis des angles et après stabilisation, à obtenir uniquement des dislocations vis avec un pas de $50,6 \pm 0,6 \text{ nm}$, comme le montre l'image MET (Figure. I.4), ce qui donne, d'après la formule de Frank une désorientation de torsion de $0,435 \pm 0,005^\circ$.

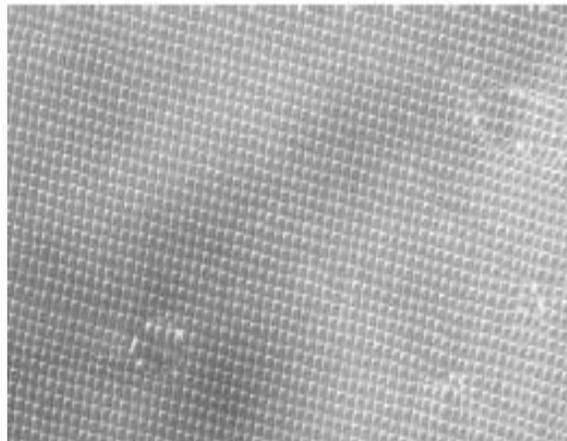


Figure I.4 - Collage et interface d'un joint de grains. Vue plane de MET, le pas des dislocations vis est de $50,6 \pm 0,6 \text{ nm}$ ($0,435 \pm 0,005^\circ$) pour 50 nm visés [5].

I.2.2 Travaux de Fabien Leroy 2003

En 2003, Fabien Leroy [6], en partant de la formulation de Bonnet et Verger-Gaugry [8] en élasticité continue isotrope, a pu déterminer les valeurs des champs élastiques en tout point de

l'échantillon du Si/Si et ceci dans le cas d'un réseau de dislocations vis (Figures I.5 et I.6), associés à la torsion dans le plan de la couche collée par rapport au substrat, et pour les réseaux de dislocations coins, associés à la flexion (Figure I.7).

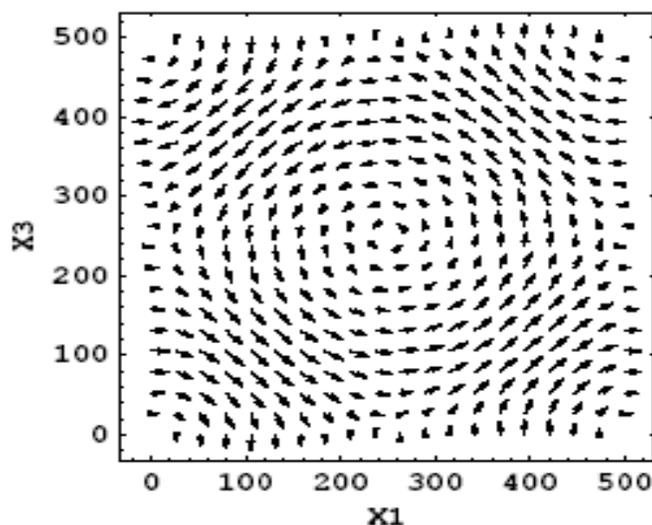


Figure I.5 - Champ de déplacement à la surface de l'échantillon ($\varphi = 0.44^\circ$, $h = 100\text{\AA}$). La longueur des vecteurs est proportionnelle au module des déplacements. Le déplacement maximum, au quart de la diagonale, vaut 0.487\AA ($\approx b/7.88$). [6]

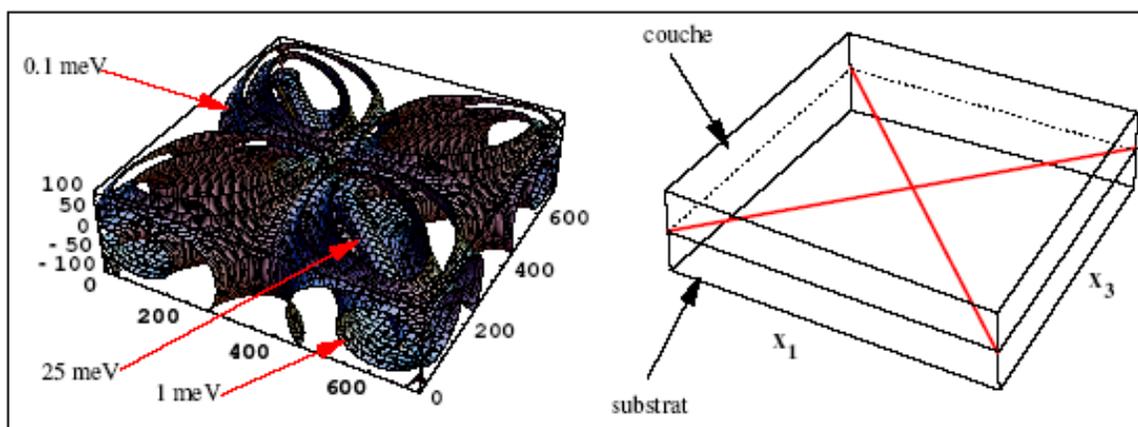


Figure I.6 - Iso valeurs de la densité d'énergie élastique dans le volume de l'échantillon ($\varphi = 0.44^\circ$, $h = 100\text{\AA}$). [6]

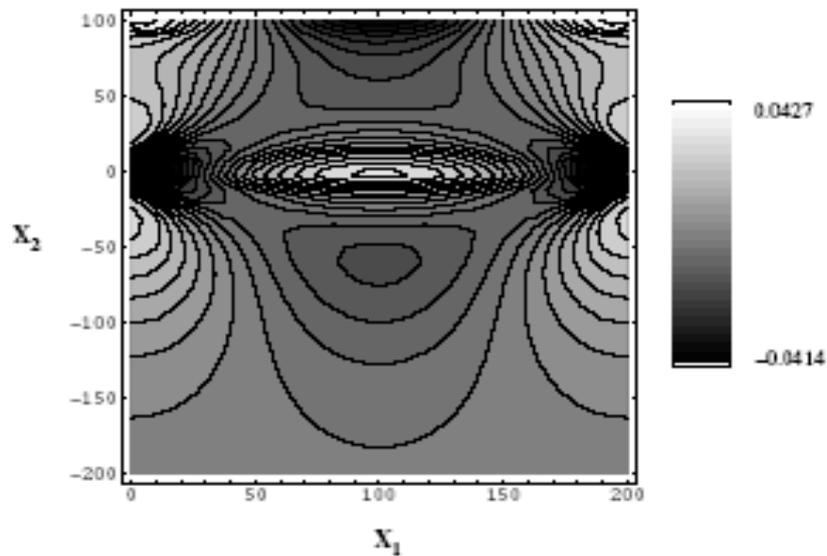


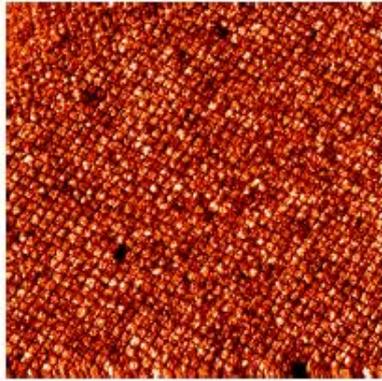
Figure I.7 - Champ de déplacement u_1 . L'échelle est prise entre le minimum en surface ($x_1 = 100$ nm) et le maximum entre les dislocations, à l'interface [6].

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

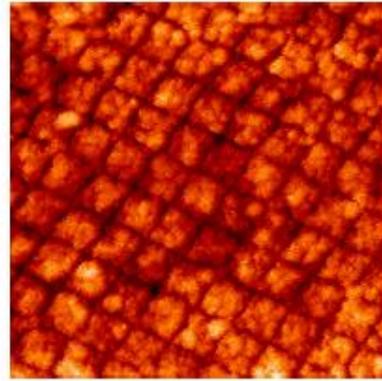
Dans la partie expérimentale, et après avoir réalisé des substrats auto organisés de Si/Si par collage moléculaire, il a exposé une méthode pour contrôler précisément la localisation de la nucléation d'îlots en surface. Ce contrôle de la localisation sur un réseau carré permet de contrôler la densité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

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

Pour surmonter ce problème, il a utilisé des préparations chimiques spécifiques pour réaliser des gravures préférentielles des surfaces et il a réussi à obtenir des morphologies périodiques contrôlées, avec des distances de corrélation importantes. Ces morphologies se sont révélées efficaces pour organiser un dépôt d'îlots de Ge comme le montre la figure I.8.



(a) Echelle : 800×800 nm.
Echelle verticale min/max : 9 nm.



(b) Echelle : 200×200 nm.
Echelle verticale min/max : 6 nm.

Figure I.8 - Croissance du Ge/Si. Etude STM de l'échantillon B5 ($\varphi = 1.0^\circ$, $h = 10$ nm) : surfaces à différentes échelles. Position nominale de la surface : 25 Å sous l'interface de collage. Les directions $\langle 110 \rangle$ sont données par les directions des tranchées [6].

I.2.3 Travaux de José Coelho 2004

José Coelho en 2004 [7], en utilisant la théorie élastique isotrope, a déterminé les champs élastiques et l'énergie en surface qui reproduisent l'organisation des dislocations faiblement enterrées (figure I.9) et ce pour un joint de torsion et un joint de flexion de GaAs/GaAs.

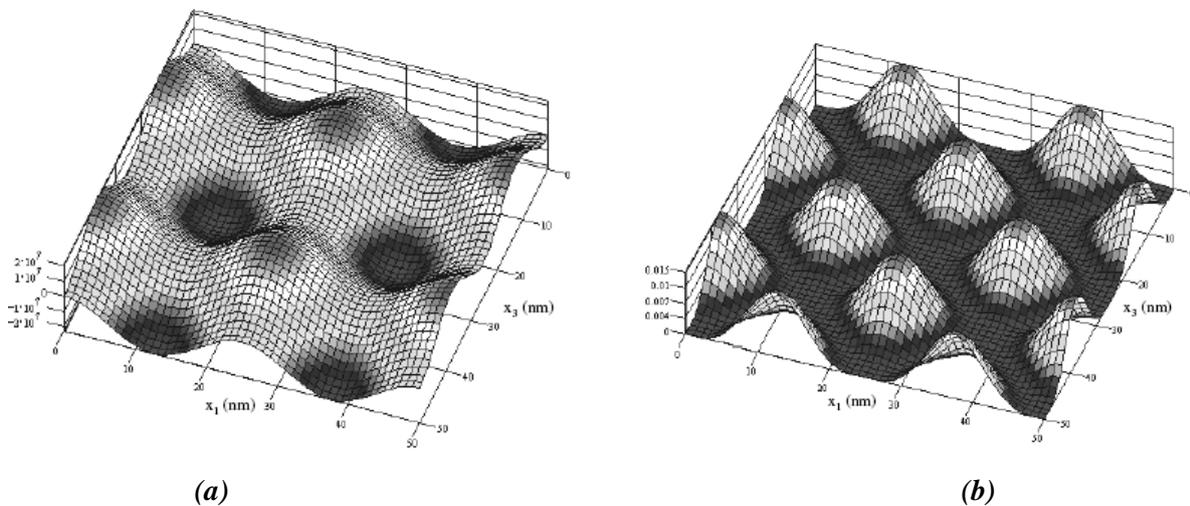


Figure I.9 - (a) Composante non nulle du champ de contraintes σ_{31} (en Pa) ; (b) densité volumique d'énergie élastique respectivement stockée et induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda = 25$ nm, $h = 20$ nm). [7]

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

D'autre part, pour une épaisseur donnée, en fonction de la périodicité des dislocations et des conditions de croissance, ce sera soit un joint de flexion, soit un joint de torsion qui sera plus favorable à l'organisation de nanostructures auto-assemblées.

I.3 Principaux travaux théoriques en Anisotropie

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

Dans ce qui suit, nous allons présenter les principaux résultats en anisotropie obtenus lors des travaux de S.Madani, S.Fentous, M.Brioua et R.Makhloufi pour voir l'influence des réseaux de dislocations faiblement enterrés et parallèles à la surface sur les propriétés élastiques de celles-ci. Ces résultats sont nécessaires pour voir l'influence des dépôts de nanostructures (troisième couche) lors de l'hétéroépitaxie sur la morphologie des joints de grains obtenus par collage moléculaire, objet de notre travail de thèse.

I.4 Champs et énergie élastiques produits en surface par un réseau de dislocations faiblement enterré accommodant une torsion

I.4.1 Travaux de S.Madani et al.

I.4.2 Joint de torsion Si/Si(001)

Depuis quelques années, les bicristaux obtenus par collage moléculaire de faces (001) de silicium sont de plus en plus étudiés car ils permettent de réaliser des motifs très réguliers à l'échelle nanométrique [8, 9, 10,11].

Des simulations des échantillons de silicium obtenus déjà par collage moléculaire [5,6] dont les différents paramètres sont technologiquement accessibles sont présentées ci-dessous. L'angle de torsion nominal est de 0.4407° , et l'épaisseur de la couche collée est $h = 10$ nm. L'angle de rotation correspond à une période de 50 nm.

I.4.3 Champs des déplacements

La figure I.10 est une représentation du champ de déplacement, tracé à l'altitude $x_2 = 10$ nm, c'est-à-dire à la surface de l'échantillon. Les lignes de dislocations vis sont dans le plan $x_2 = 0$, et sont confondues avec les droites $x_1 = 0$, $x_1 = \Lambda$, $x_3 = 0$ et $x_3 = \Lambda$.

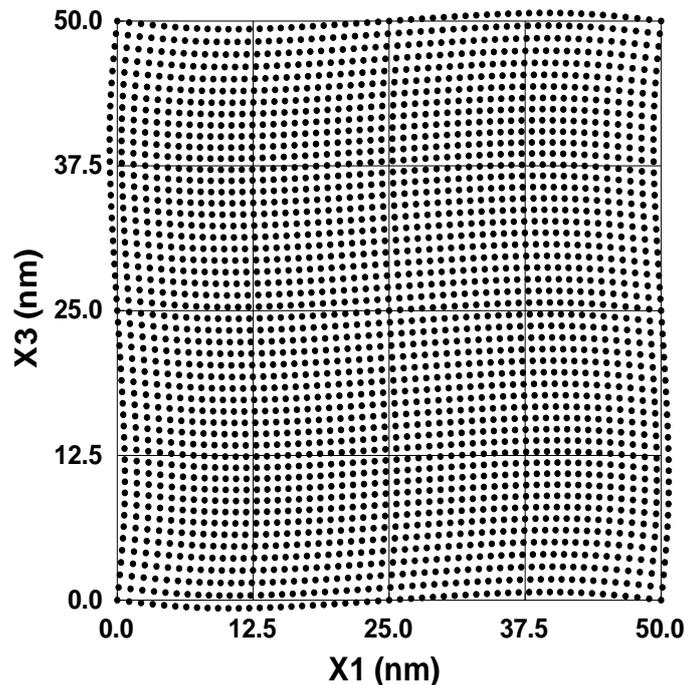


Figure I.10 - Schéma illustrant les champs des déplacements des unités structurales déformées par un réseau carré de dislocations vis à la surface de l'échantillon Si/Si. [2]

I.4.4 Champs de déformations et de contraintes

Les variations en surface des déformations ε_{13} et des contraintes σ_{13} sont représentées respectivement (figure I.11 et I.12) pour un réseau carré de dislocation vis de 50 nm de période, enterré à 10 nm de profondeur. Les extrema de ces champs sont logiquement situés à l'aplomb du milieu des segments de dislocations. Au centre des cellules définies par ces dernières et sur les diagonales du réseau carré, les contraintes et déformations sont nulles (voir, par exemple, la figure I.13 pour la déformation et la figure I.14 pour la contrainte).

La déformation maximale calculée à la surface est 1,5% (en isotropie 0.48%) alors que la contrainte maximale calculée en surface est de l'ordre de 0.75 GPa (en isotropie 5 GPa) [2].

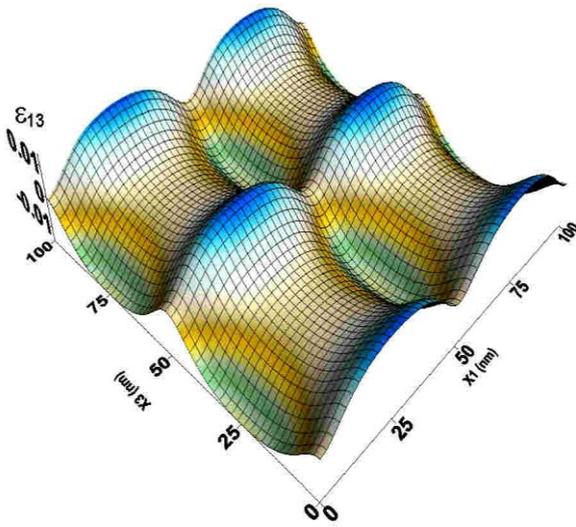


Figure I.11 - Composante non nulle du champ de déformations ε_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50\text{nm}$, $h_1=10\text{nm}$). Représentation sur une surface de 2×2 périodes [2].

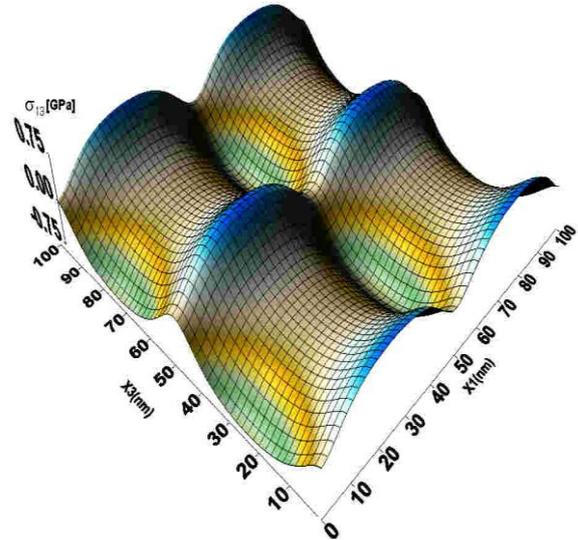


Figure I.12 - Composante non nulle du champ de contraintes σ_{13} [en GPa] induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50\text{ nm}$, $h_1=10\text{nm}$). Représentation sur une surface de 2×2 périodes [2].

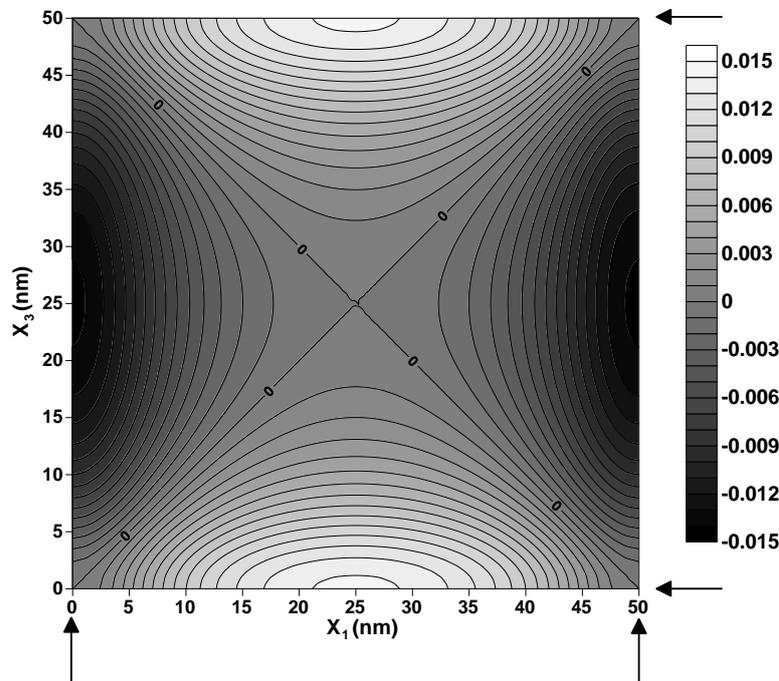


Figure I.13 - Iso-valeurs des déformations ε_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50\text{ nm}$, $h_1=10\text{nm}$). Les flèches indiquent les lignes de dislocations vis. [2]

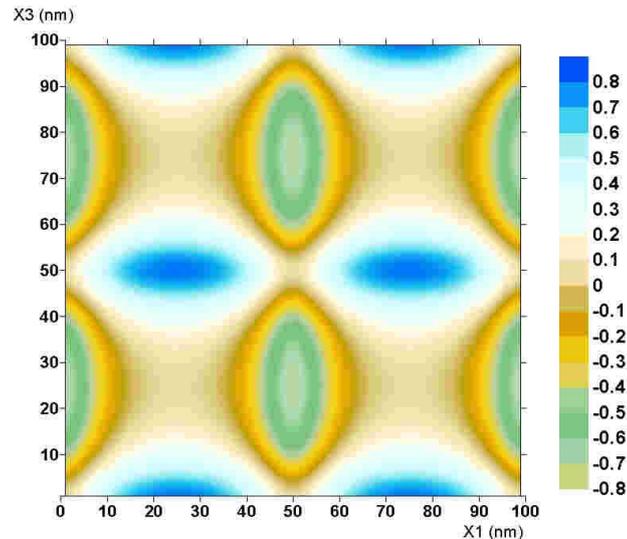


Figure I.14 - Iso-valeurs des contraintes σ_{13} [en GPa] induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=50$ nm, $h_1=10$ nm). Représentation sur une surface de 2×2 périodes. [2]

La variation de la déformation maximale et de la contrainte maximale à la surface du film est présentée en faisant varier la période du réseau de dislocations vis (figures I.15 et I.16).

Nous pouvons apercevoir d'après l'analyse des résultats que les courbes obtenues tendent de manière monotone vers un palier et que quantitativement, nous sommes à environ 80% de la valeur asymptotique de ε_{13} pour une distance entre dislocations égale à 50nm soit 5 fois plus grande que l'épaisseur du film que nous avons fixé ici à 10nm. Le rapport entre l'épaisseur du film et le pas des dislocations doit donc être suffisamment faible pour que les champs élastiques (déformations et contraintes) induits par les dislocations soit les plus importants possibles [2].

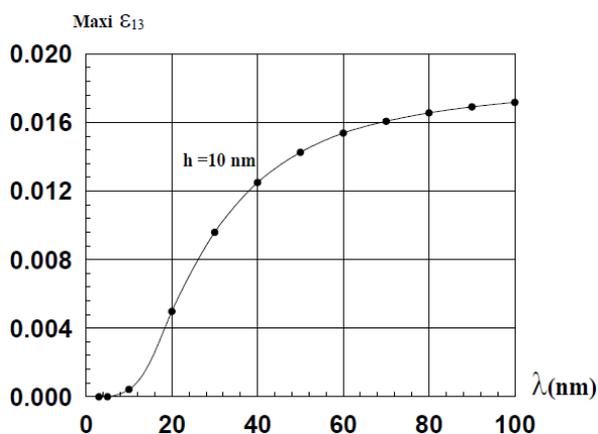


Figure I.15 - Variation, en fonction de la période du réseau de dislocations, de la valeur maximale de la déformation ε_{13} à la surface du film de 10 nm. [2]

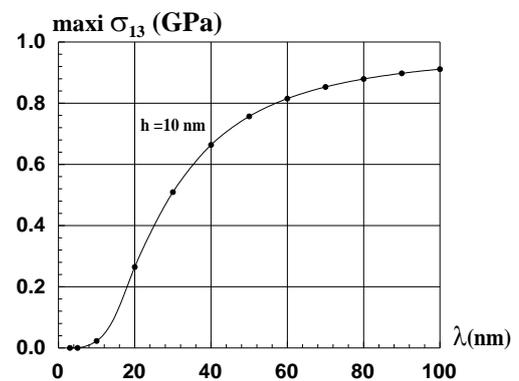


Figure I.16 - Variation, en fonction de la période du réseau de dislocations, de la valeur maximale de la contrainte σ_{13} à la surface du film de 10 nm. [2]

Les figures I.17 et I.18 présentent la variation, en fonction de l'épaisseur de la couche, de la valeur maximale de la déformation ε_{13} et de la contrainte σ_{13} induits en surface par un réseau carré de dislocations vis de période 50 nm. Nous pouvons voir que ces champs sont d'autant plus importants que l'épaisseur de la couche est faible. Ce qui justifie la tentative des chercheurs à fabriquer des films ultra-minces [2].

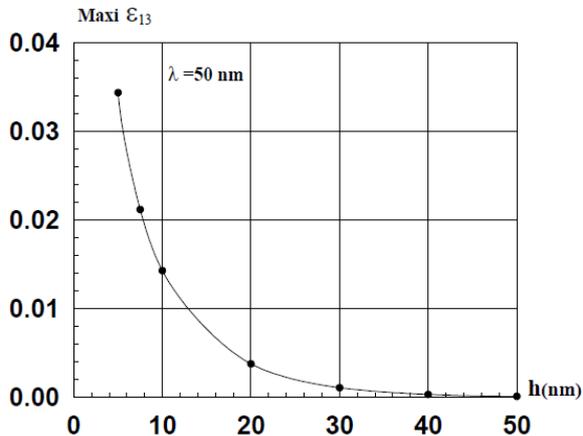


Figure I.17 - Variation, en fonction de l'épaisseur de la couche, de la valeur maximale de la déformation ε_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis de période 50 nm. [2]

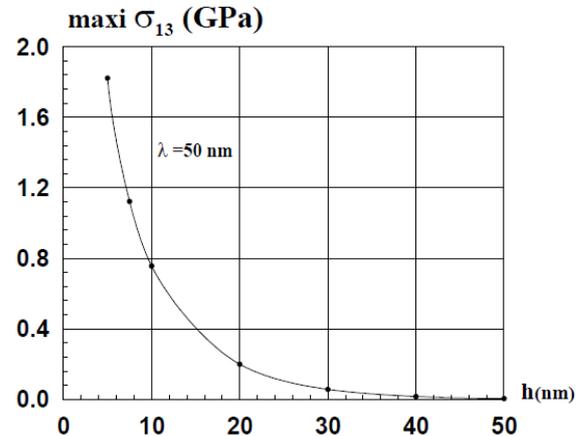


Figure I.18 - Variation, en fonction de l'épaisseur de la couche, de la valeur maximale de la contrainte σ_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis de période 50 nm. [2]

Dans ce qui suit, S.Madani a défini une plage d'épaisseur, en fonction de la période, qui serait intéressante pour contrôler la disposition des nanostructures. Il faut que la déformation maximale soit importante.

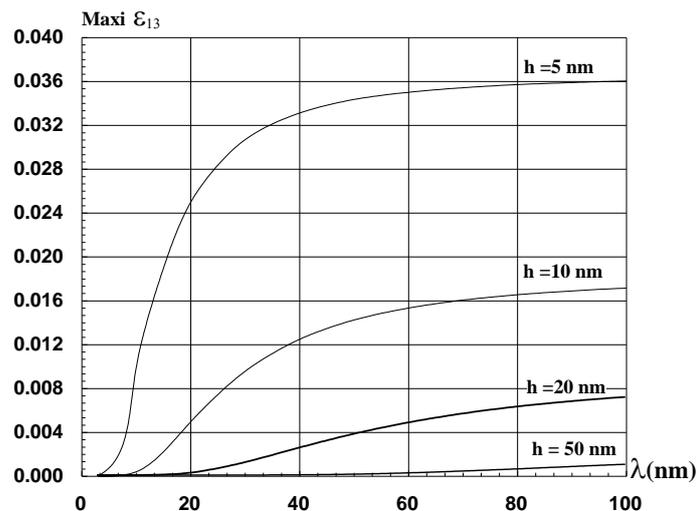


Figure I.19 - Évolution de la déformation maximale en surface en fonction de la périodicité du réseau de dislocations vis, pour différentes épaisseurs. [2]

Pour cela il a tracé à la figure I.19 représentant l'évolution de la déformation maximale en surface en fonction de la périodicité des réseaux de dislocations, pour différentes épaisseurs de couche collée.

1- A période fixe, la déformation maximale augmente quand l'épaisseur diminue. Cette évolution est exponentielle. Il semble donc naturel d'amincir au maximum la couche collée pour bénéficier au maximum en surface des effets des champs élastiques.

2- Pour une épaisseur fixée, la déformation maximale augmente avec la périodicité du réseau de dislocations, jusqu'à atteindre une valeur limite. D'après la figure I.19, pour $h = 10$ nm, le domaine de périodicité compris approximativement entre 15 et 25 nm est intéressant. Au delà de 25 nm, la pente de la courbe est faible, et il faut une augmentation importante de la périodicité pour gagner en champs élastiques. De plus, des problèmes de stabilité de la couche peuvent se poser [5]. La même analyse peut être faite pour les autres épaisseurs ainsi, et à titre d'exemple, pour $h = 5$ nm, le domaine de périodicité compris entre 10 et 20 nm paraît le plus intéressant.

Pour obtenir des champs élastiques suffisamment importants en surface, un critère approximatif est de considérer que l'épaisseur doit être comprise entre le quart et la moitié de la périodicité. Ceci est en accord avec le critère d'efficacité avancé par Bourret [12] : l'épaisseur de la couche collée doit être inférieure à la période des dislocations.

I.4.5 Énergie

L'amplitude maximale de la densité volumique d'énergie élastique stockée en surface due à un réseau carré de dislocations vis est représentée en figures I.20 et I.21. On constate que son amplitude maximale à épaisseur h constante tend elle aussi vers un palier de manière monotone. Sur la figure I.21, on constate que son amplitude maximale à période Λ constante décroît exponentiellement quand l'épaisseur h augmente. Donc pour que l'effet en surface de ces champs soit notable, il ne faut donc pas que le rapport h/Λ soit trop grand.

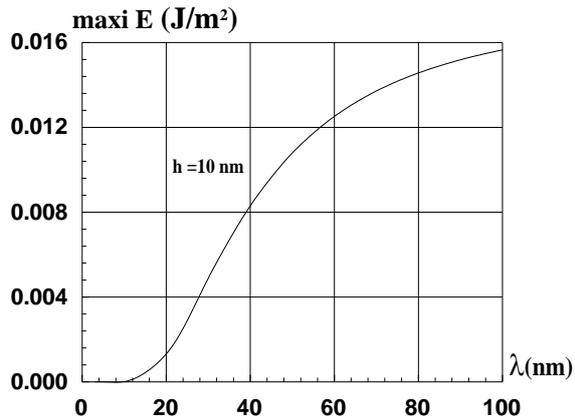


Figure I.20 - Variation, en fonction de la période du réseau de dislocations, de la valeur maximale de la densité volumique d'énergie élastique stockée à la surface du film de 10 nm. [2]

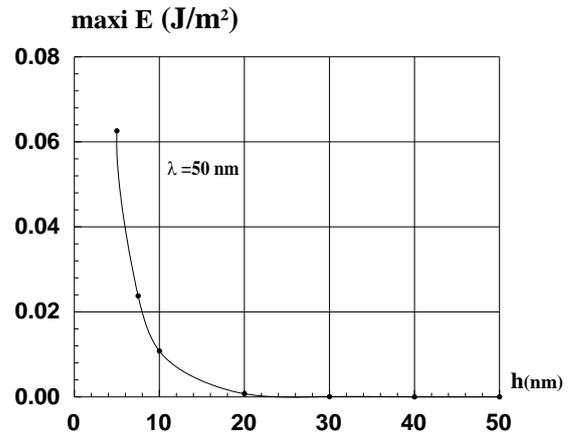


Figure I.21 - Variation, en fonction de l'épaisseur de la couche, de la valeur maximale de la densité volumique d'énergie élastique induit en surface par un réseau carré de dislocations vis de période 50 nm. [2]

I.5 Joint de torsion GaAs/GaAs (001)

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

G. Patriarche [13], a supposé que les dislocations sont orientées selon des directions $\langle 011 \rangle$ et que leurs vecteurs de Burgers sont donc de type $a/2 \langle 011 \rangle$. Il s'agit d'une orientation naturelle pour les lignes de dislocations vis dans les matériaux III-V.[2]

I.5.1 Champs de déformation et de contrainte

Nous représentons en premier, la variation en surface de ε_{13} (figure I.22) induit par un réseau carré de dislocation vis de 25 nm de période enterré à 20 nm de profondeur. Les résultats obtenus montrent que la déformation est nulle sur les diagonales du réseau carré, et que les extrema se trouvent à l'aplomb du milieu des segments de dislocations. Cette fois-ci, la déformation maximale calculée à la surface est estimée à environ 0.065 %.

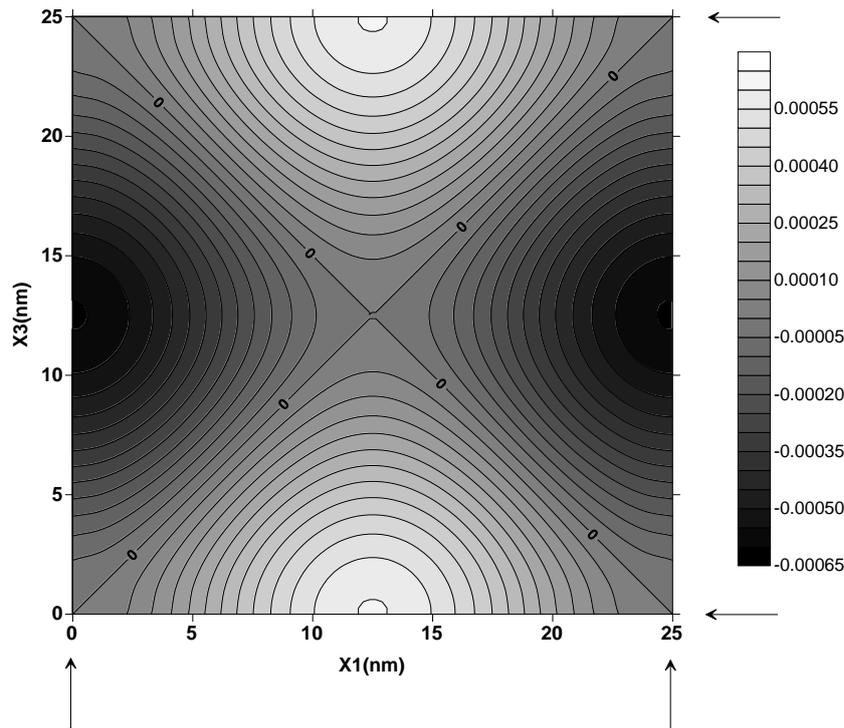


Figure I.22 - Iso-valeurs des déformations ϵ_{13} induit en surface par un réseau carré de dislocations vis ($A=25\text{ nm}$, $h_1=20\text{ nm}$). Les flèches indiquent les lignes de dislocations vis.

L'évolution de la contrainte maximale en surface en fonction de la périodicité des réseaux de dislocations, pour différentes épaisseurs de la couche collée est présentée ci-dessous (figure I.23).

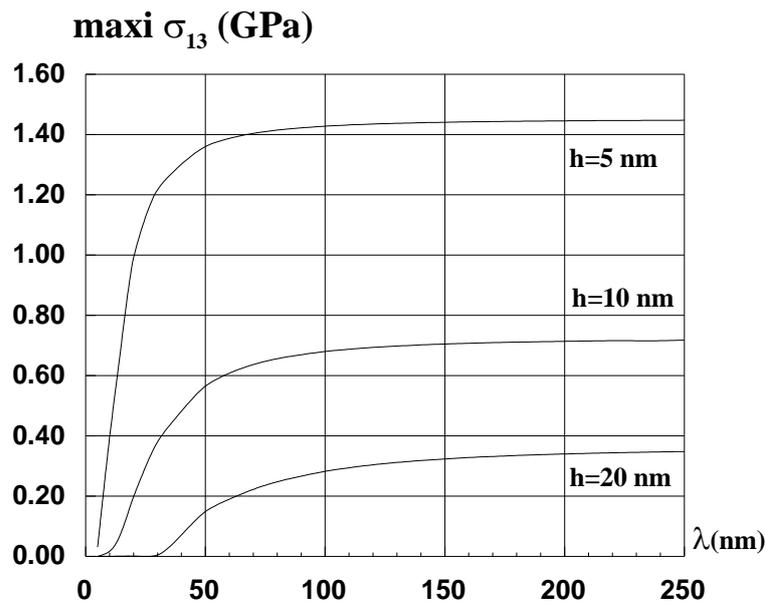


Figure I.23 - Evolution de la contrainte maximale en surface en fonction de la périodicité du réseau de dislocations vis, pour différentes épaisseurs.

Les remarques suivantes peuvent être faites :

1- A période fixe, la contrainte maximale augmente quand l'épaisseur diminue. Cette évolution est exponentielle ;

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

Les valeurs des contraintes maximales obtenues cette fois-ci sont approximativement la moitié des valeurs obtenues par J.Coehlo [7] en élasticité isotrope.

L'amplitude maximale de la densité volumique d'énergie élastique stockée pour une période de 25nm et $h_1 = 20$ nm, est représentée en 2D et 3D le long d'une distance de deux fois une période (figure I.24). On remarque que les modulations (tout comme celles des champs de contraintes et de déformations) reproduisent la périodicité du réseau de dislocations.

Nous avons constaté aussi que les amplitudes maximales de la densité volumique d'énergie élastique stockée en surface, à période Λ constante, décroissent elles aussi exponentiellement quand l'épaisseur h_1 augmente (figure I.25). De même, elles tendent vers un palier de manière monotone dont le niveau est plus inférieur que celui atteint pour un joint de torsion du silicium.

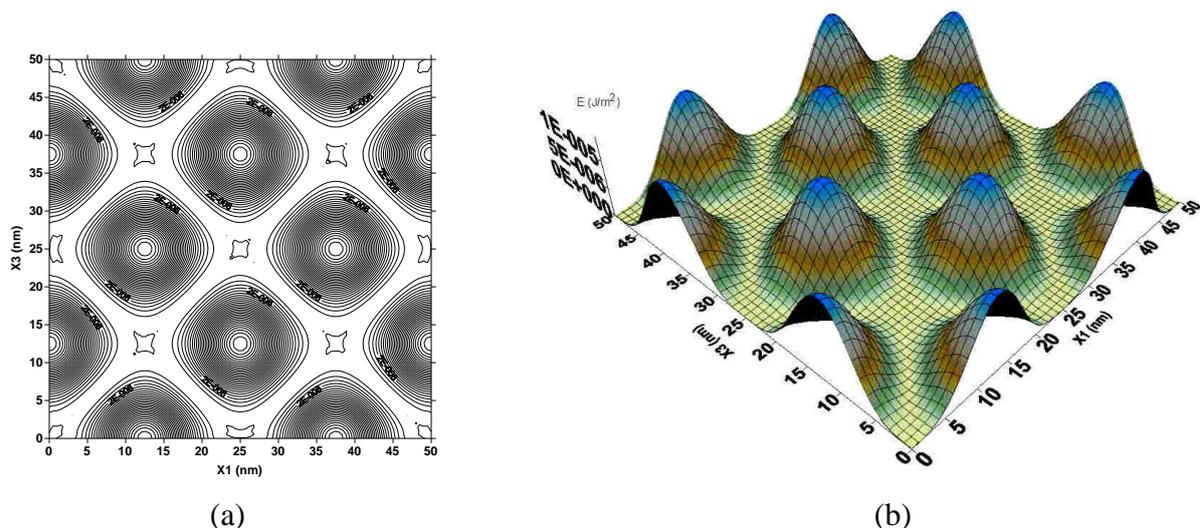


Figure I.24 - Iso valeurs de la densité volumique stockée en surface due à réseau carré de dislocations vis ($\Lambda=25$ nm, $h_1=20$ nm).(a) 2D, (b) 3D.

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

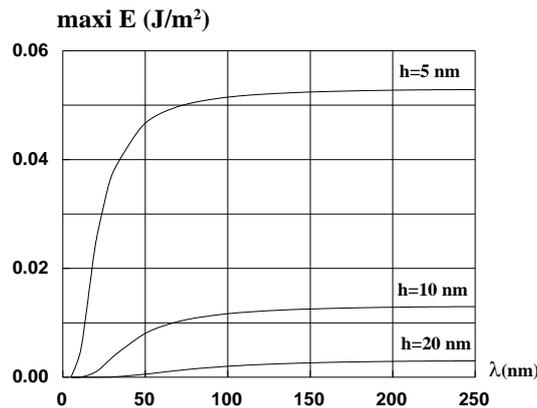


FIG. I.25 - Evolution de la densité volumique stockée en surface en fonction de la périodicité du réseau de dislocations vis, pour différentes épaisseurs.

En 1997, S. Madani [14] considère que l'interface plane du bilame mince est tapissée d'un réseau de dislocations de misfit intrinsèques périodique parallèle. Parmi ses résultats, le calcul des champs de déplacements et de contraintes, d'un matériau Al/Al₂Cu, pour des C_{ij} anisotropes et un vecteur de Burgers parallèle à l'axe Ox_1 .

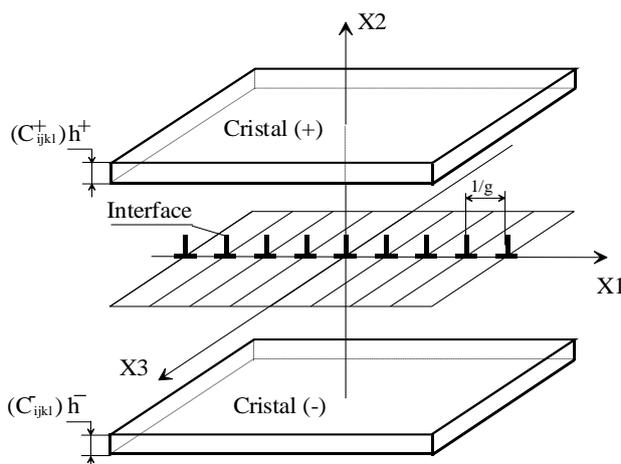


Figure I.26 - Bilame mince +/- avec un réseau unidirectionnel de dislocations à l'interface. [15]

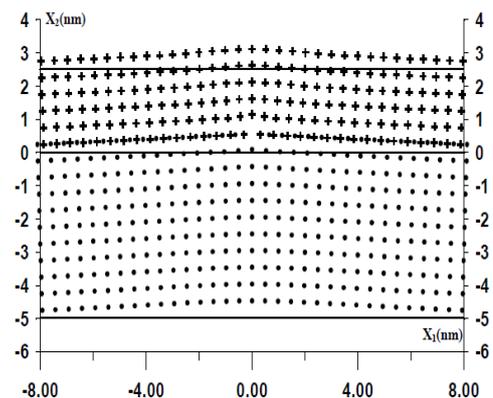


Figure I.27 - Schéma illustrant les champs de déplacements du bilame Al/Al₂Cu sous l'effet de dislocation coin interfaciale avec $b_1//Ox_1$. [15]

En 2006, S. Madani [2] considère que l'interface plane du bilame mince est tapissée d'un réseau de dislocations de misfit intrinsèques carré. Parmi ses résultats le calcul du champ des déplacements et contraintes, d'un matériau Al / Al₂Cu, pour des C_{ij} anisotropes.

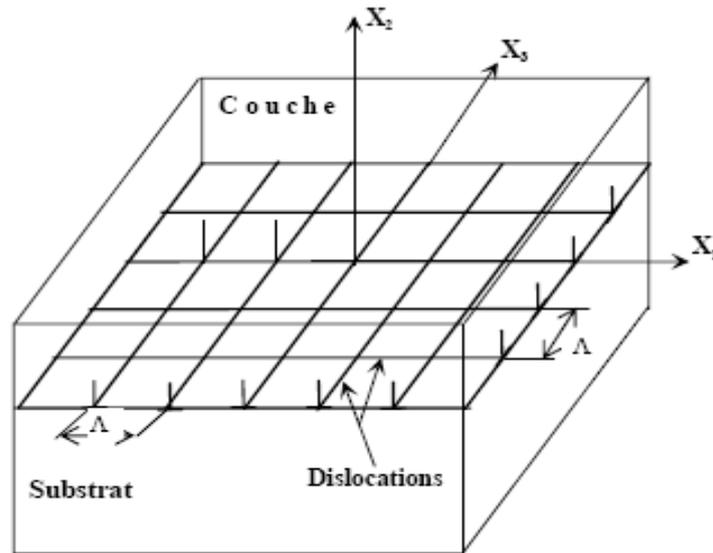


Figure I.28 - Couche sur substrat avec un réseau carré de dislocations à l'interface. [16]

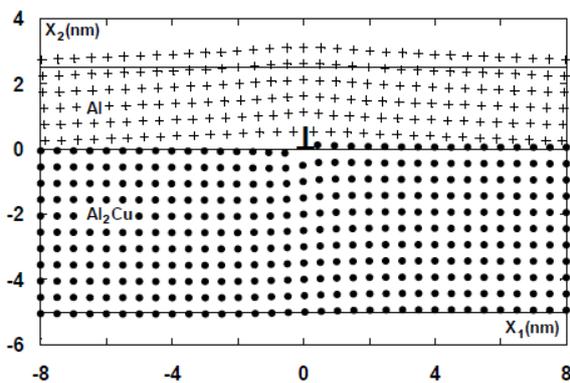


Figure I.29 - Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Al₂Cu sous l'effet de dislocation coin interfaciale, C_{ij} anisotropes, b // Ox₁

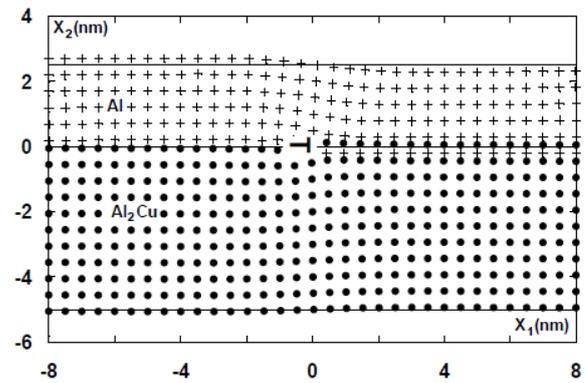


Figure I.30 - Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Al₂Cu sous l'effet de dislocation coin interfaciale, C_{ij} anisotropes, b // Ox₂

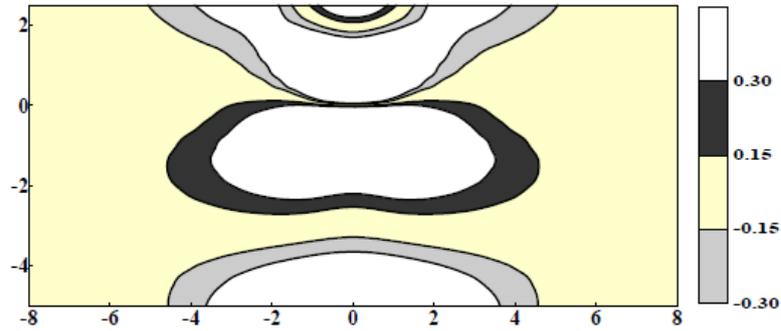


Figure I.31- Courbes d'équi-contraintes $\sigma_{11} = \pm 150$ MPa pour une dislocation placée à l'interface d'un bilame mince Al /Al₂Cu, $b // O x_1$

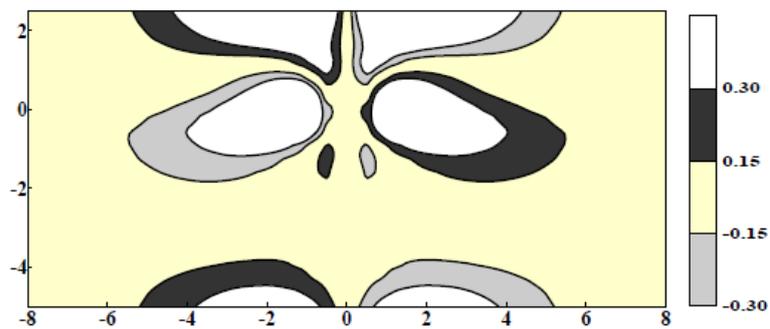


Figure I.32 - Courbes d'équi-contraintes $\sigma_{11} = \pm 150$ MPa pour une dislocation placée à l'interface d'un bilame mince Al /Al₂Cu, $b // O x_2$

I.6 Travaux de S.Fentous et al.

En 2002, S.Fantous [15] a traité le cas d'un matériau tricouche sous l'effet d'un seul réseau de dislocations hexagonal placé à l'interface des deux cristaux (+) et (-). Dans son travail, il a considéré les deux systèmes épitaxiaux, Si/CoSi₂/(111)Si et GaAs/InAs/(111)GaAs.

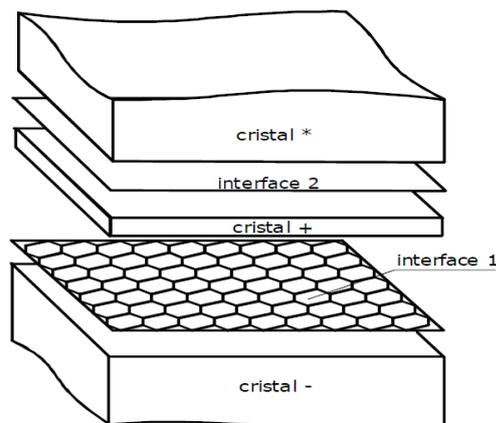


Figure I.33 - Matériau tricouche $(*)/(+)/(-)$, avec un réseau hexagonal de dislocations intrinsèques à l'interface $x_2=0$. C_{ijkl}^* , C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- sont les constantes élastiques des trois cristaux et h l'épaisseur de la plaquette mince (+). [15]

Pour le système $\text{CoSi}_2/(111)\text{Si}$:

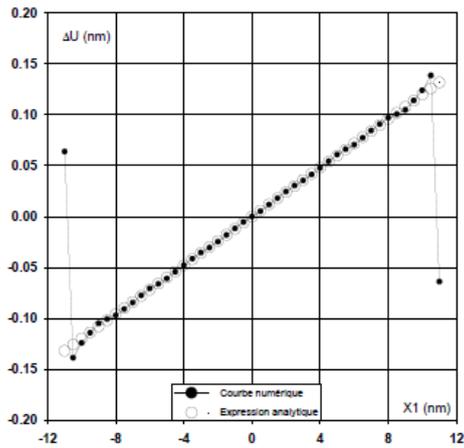


Figure I.34 - Déplacement relatif suivant x_1 , pour un nombre d'harmonique $M=50$

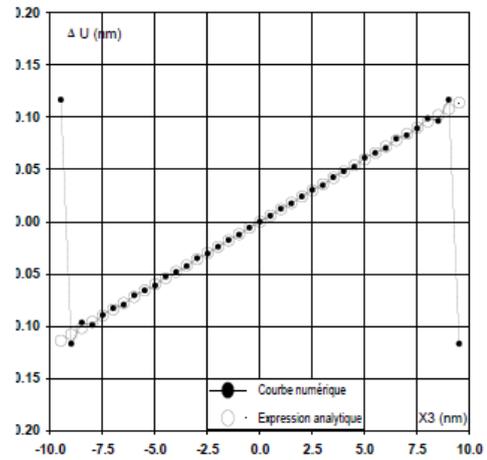


Figure I.35 - Déplacement relatif suivant x_3 , pour un nombre d'harmonique $M=50$

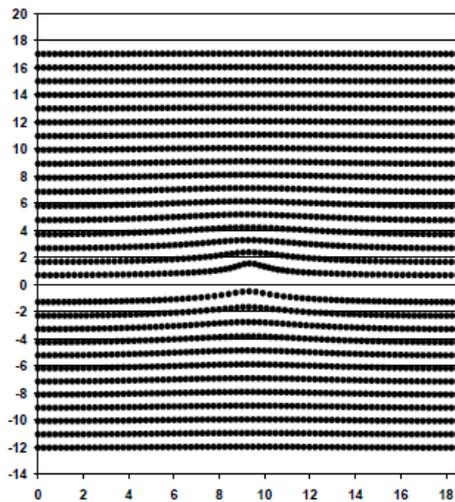


Figure I.36 - Champ de déformation dans le plan (Ox_1x_2)

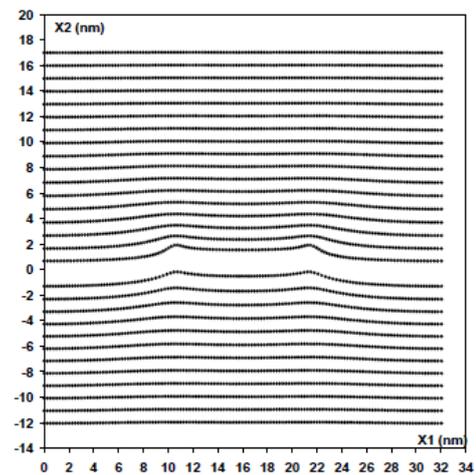


Figure I.37 - Champ de déformation dans le plan (Ox_3x_2)

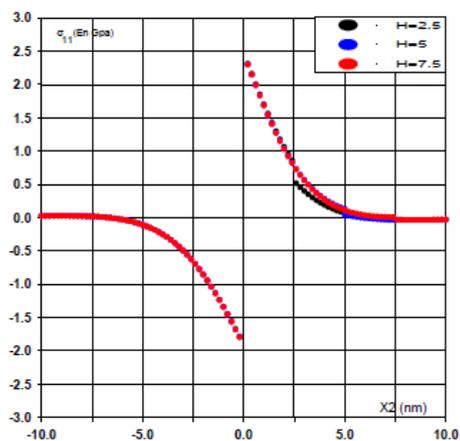


Figure I.38 - Contrainte σ_{11} en fonction de l'épaisseur de la couche

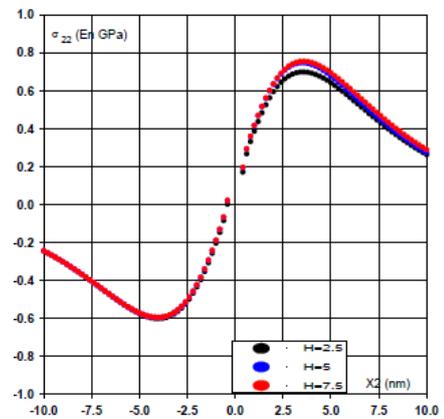


Figure I.39 - Contrainte σ_{22} en fonction de l'épaisseur de la couche

Pour le Système GaAs/InAs/(110)GaAs :

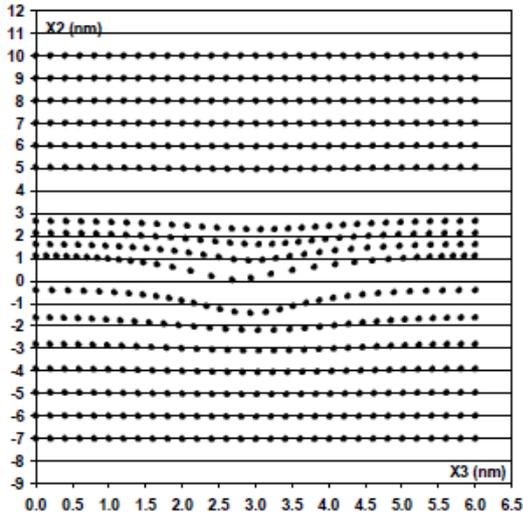


Figure I.40 - Champ de déformation dans le plan (Ox_3x_2)

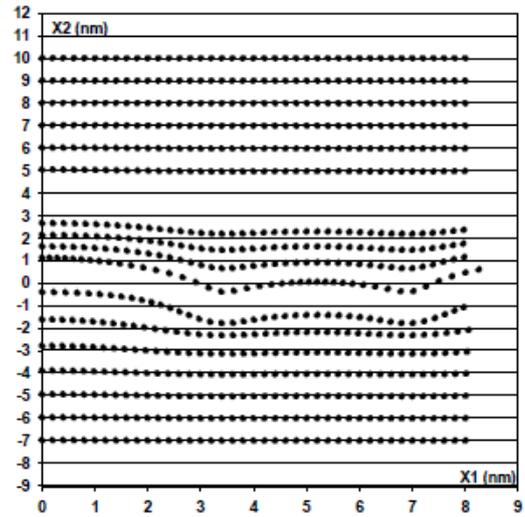


Figure I.41 - Champ de déformation dans le plan (Ox_1x_2)

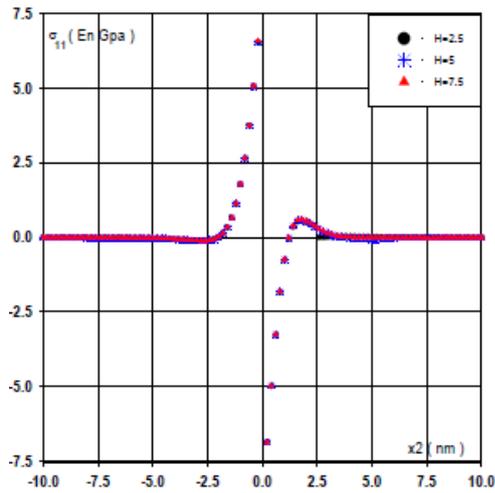


Figure I.42 - Contrainte σ_{11} en fonction de l'épaisseur de la couche.

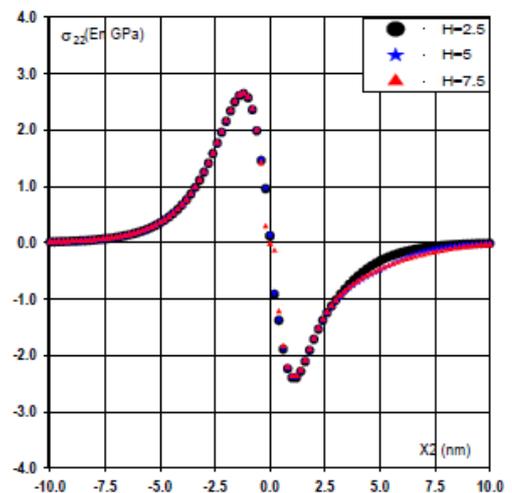


Figure I.43 - Contrainte σ_{22} en fonction de l'épaisseur de la couche.

I.7 Travaux de M.Brioua.

En 2005, M.Brioua [16] a traité le composé tricouche NiSi₂ / Si / GaAs sous l'effet d'un réseau de dislocations intrinsèques interfaciales de type coin pour un vecteur de Burgers $b // Ox_1$ (Figure I.44).

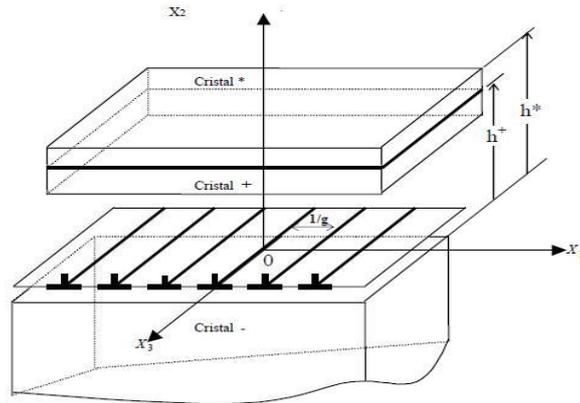


Figure I.44 - Matériau tricouche $NiSi_2/Si/GaAs$ avec un réseau de dislocations intrinsèques [16].

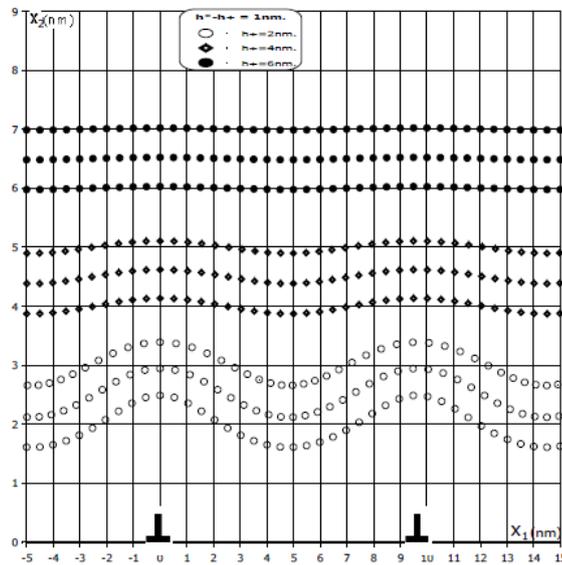


Figure I.45 - Superposition des différentes courbes obtenues pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche intermédiaire $h^+ = 2, 4$ et 6nm , matériau tricouches $NiSi_2/Si/GaAs$, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

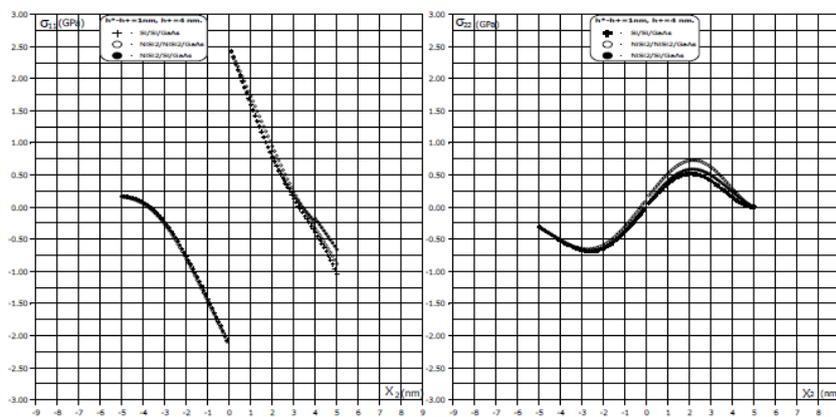


Figure I.46 - Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le matériau tricouches $NiSi_2/NiSi_2/GaAs$, $Si/Si/GaAs$ et $NiSi_2/Si/GaAs$, $x_1 = \Lambda/2$, C_{ij} anisotropes, $b//Ox_1$

I.8 Travaux de Makhloufi et al.

Makhloufi et al. [3] ont étudié le problème d'un matériau tricouche Cu/Cu/(001) Fe sous l'effet de deux réseaux de dislocations unidirectionnels placés à l'hétéro interface Cu /Cu et l'hétéro interface Cu/(001) Fe.

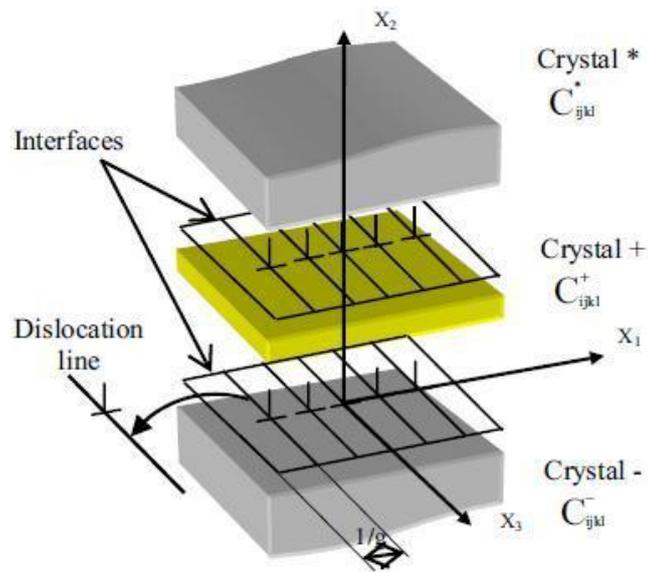


Figure I.47 - Géométrie du matériau tricouche Cu/Cu/(001) Fe sous l'influence de deux réseaux de dislocations unidirectionnels [3].

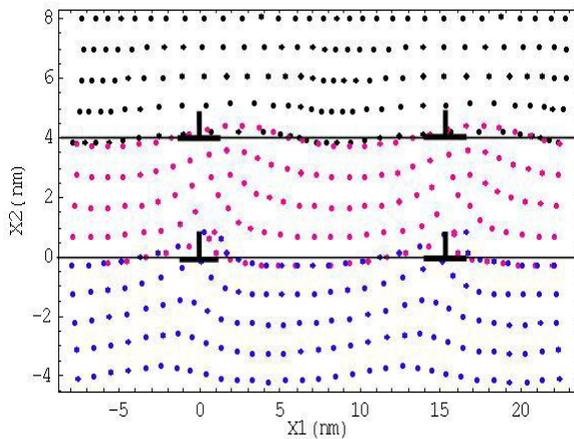


Figure I.48 - Schéma illustrant les champs de déplacements du matériau Cu/Cu/(001)Fe sous l'effet de deux réseaux de dislocations interfaciales où $b \parallel Ox_1$ et pour $h^* = 4nm$, $h^+ = 4nm$ et $h^- = 4nm$.

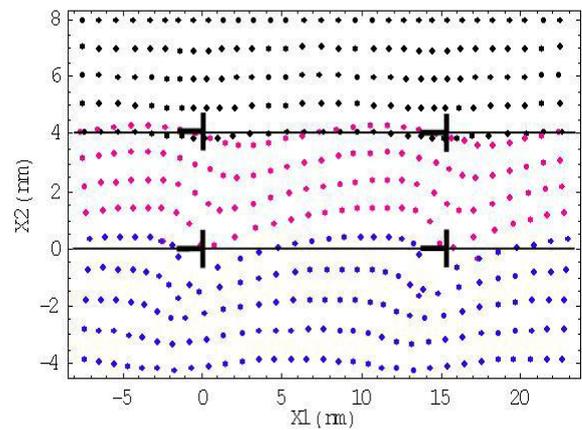


Figure I.49 - Schéma illustrant les champs de déplacements du matériau Cu/Cu/(001)Fe sous l'effet de deux réseaux de dislocations interfaciales où $b \parallel Ox_2$ et pour $h^* = 4nm$, $h^+ = 4nm$ et $h^- = 4nm$.

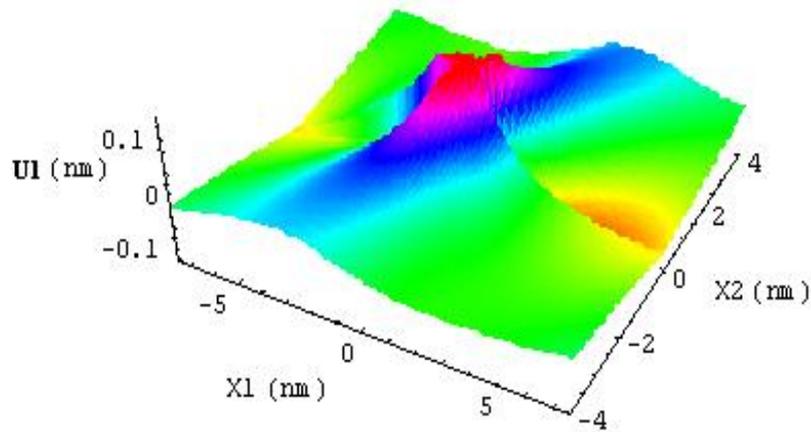


Figure I.50 - Présentation de U_1 pour $b//ox_1$ pour l'interface entre le cristal(*) et le cristal (+)

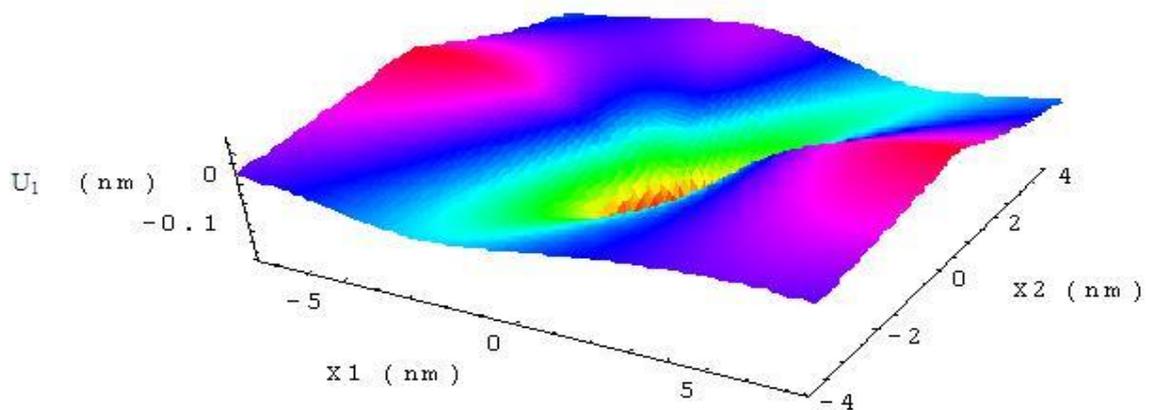


Figure I.51 - Présentation de U_1 pour $b//ox_2$ pour l'interface entre le cristal(+) et le cristal (-)

I.9 Conclusion

Le premier chapitre de ce travail a été consacré à la présentation de quelques travaux qui traitent la détermination des champs élastiques des matériaux nanométriques dans le cas isotrope et anisotrope particulièrement avec la présence des réseaux de dislocations au niveau des interfaces cristallines. L'étude bibliographique a montré que la prise en compte des effets des champs élastiques est d'une grande aide pour améliorer la qualité des hétérostructures ainsi que leurs propriétés.

Chapitre II

*Notions de nanostructures, réseaux de dislocations et
élasticité linéaire*

II.1 Introduction

Depuis plus d'une vingtaine d'années, le terme "**nano**" est sans doute le préfixe le plus en vogue dans le domaine de la science. La thématique "nanomatériaux, nanostructures, nanosystèmes" foisonne et elle est en pleine émergence en ce 21^{ème} siècle.

Dès 1872, Lord Kelvin s'interrogea déjà sur les possibles caractéristiques physiques, chimiques et thermiques des matériaux très finement divisés.

Dès le début des années 60, des études et des recherches dans le domaine nanométrique mobilisent toute la communauté scientifique qui ne cesse de confirmer cette formidable intuition qu'a eue Richard Feynman par des découvertes voire par la production de nanomatériaux présentant des propriétés mécaniques et physiques qui étaient impensables il y a quelques années. [17]

II.2 Notions de nanostructures

II.2.1 Nanosciences et nanotechnologies

Les nanosciences et nanotechnologies constituent-elles un domaine nouveau ? Alors que l'on utilise depuis des siècles des nanomatériaux tels que les verres et les céramiques, et que la chimie fait appel à des molécules de tailles diverses, ce qui a surtout changé c'est la possibilité de synthétiser de manière de mieux en mieux contrôlée, d'observer, de manipuler et de comprendre les nano-objets et leur assemblage. Les nanosciences s'intéressent d'une part, aux nouveaux phénomènes au niveau des nano-objets, et d'autre part, aux interactions entre objets nanométriques.

Les nanotechnologies, formalisation des concepts et procédés des nanosciences en vue d'applications, ont d'ores et déjà de larges domaines d'application en microélectronique et dans le domaine des matériaux, et un ensemble de champs prospectifs auront sans aucun doute dans les décennies à venir des retombées sociétales et économiques majeures [18].

II.2.2 Nano objets et nanomatériaux

Les nano-objets sont des matériaux produits intentionnellement dont une, deux ou trois dimensions externes se situent à l'échelle nanométrique. Il en existe trois catégories : les nanofeuillets (nanoplats, nanoplaquettes...), les nanofibres (nanotubes, nanobatônnets...) et les nanoparticules. Ils se présentent sous forme individuelle ou agglomérée et peuvent être utilisés soit en tant que tels soit pour élaborer de nouveaux matériaux auxquels ils confèrent des propriétés

spécifiques liées à la dimension nanométrique : les nanomatériaux. Un nanomatériau se rapporte à un matériau ayant des tailles de grains inférieures à au moins 100 nm [Siegel 1993]. C'est seulement par l'utilisation du microscope à force atomique ou de la microscopie à transmission électronique ou encore par la diffraction de rayon X que la taille des grains dans la gamme du nanomètre peut être visualisée [19].

Suivant la dimensionnalité du caractère nanostructuré, les nanomatériaux peuvent se présenter sous plusieurs formes différentes : nanoparticules, films minces, poudres nanostructurées, alliages nanocristallins...etc. Ils peuvent être des métaux, des céramiques ou des composites constitués de phases cristallines, quasicristallines ou amorphes.

Afin de se rendre compte de l'extrême petitesse du nanomètre, il faut savoir que pour l'atteindre il a fallu diviser le mètre trois fois de suite par 1000, soit au total par un milliard : autant dire que nous rentrons dans le monde des atomes. Plus encore, les producteurs de composants électroniques fabriquent des circuits de 90 nm, soit des gravures 1000 fois plus fines que l'épaisseur d'un cheveu [17]. On comprend mieux qu'à cette taille, il est tout à fait possible de manipuler la matière, atome par atome, de la fabriquer, d'améliorer ses propriétés chimiques, physiques ou électroniques. Associant les compétences des chercheurs en chimie, physique et biologie, plusieurs voies prometteuses s'ouvrent à la science dans l'univers des matériaux, de l'électronique ou de la médecine. Les micrographies suivantes montrent ce qu'on peut voir et à la même échelle dans un matériau conventionnel et dans un nanomatériau nanocristallin.



Figure II.1 - Micrographies montrant un matériau conventionnel(a) et un matériau nanocristallin(b) [17].

D'un point de vue pratique, l'unique objectif de la diminution des dimensions est d'augmenter la densité de dispositifs sur une même surface. D'un point de vue fondamental, la taille nanométrique de certains matériaux leur confère des nouvelles propriétés (électroniques, magnétiques, optiques,) susceptibles d'être exploitées pour de nouvelles applications. Seulement, pour ce faire, la forme, la taille, la position et la densité de ces nanostructures doivent être précisément contrôlées [20].

II.2.3 Classification des nanomatériaux

II.2.3.1 Classification de Siegel

Selon Siegel, les nanomatériaux peuvent être classés en quatre familles selon qu'il s'agit respectivement de particules dispersées, de baguettes, de couches planes ou de nanograins assemblés en volumes; ou selon qu'il s'agit de systèmes monophasés ou multiphasés composites. [17]

- **Nanomatériaux de dimension 0** : Ils sont constitués de grains nanométriques dispersés de façon aléatoire ou organisée dans une matrice. On les retrouve par exemple dans les cristaux colloïdaux utilisés en optique et dans les fluides magnétiques.

- **Nanomatériaux de dimension 1** : Ils sont constitués d'un empilement de couches nanocristallines ou d'alliages homogènes d'épaisseur nanométrique. Dans ce domaine, il convient de considérer les nanotubes et les nanofils.

- **Nanomatériaux de dimension 2** : Ces matériaux sont sous forme de couches minces, comme dans les dépôts d'agrégats ou de revêtements épais obtenus par projection plasma ou par voie électrochimique.

- **Nanomatériaux de dimension 3** : Ces matériaux sont sous forme compacte comme dans les céramiques, caractérisés par l'existence d'une zone interfaciale (joints de grains) qui sépare les grains nanométriques. [21]

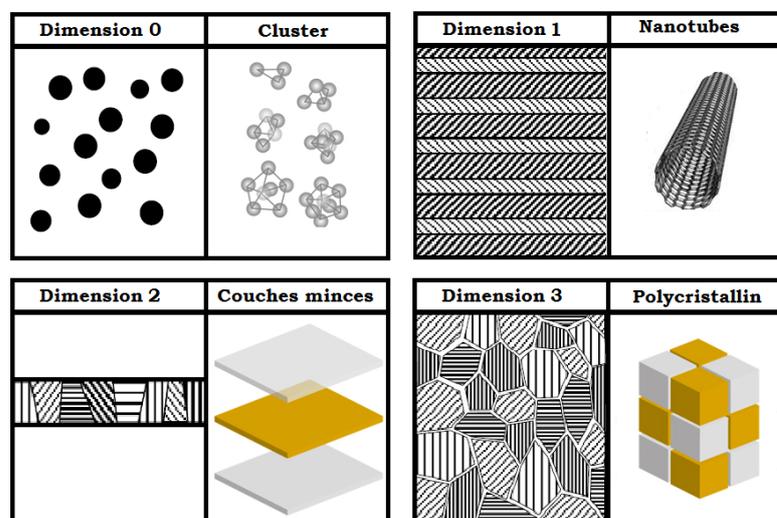


Figure II.2 - Classification des nanostructures selon leur dimensionnalité selon Siegel [Siegel, 1993].

II.2.3.2 Classification de Niihara

La classification de Niihara est basée sur la structure des nanocomposites [Niihara 1991] et il suggère qu'ils se répartissent en quatre sous-classes (Figure II.3). La matrice n'est pas généralement à l'échelle nanométrique, mais elle contient des particules nanométriques à l'intérieur des grains, le composite est dit alors de type intragranulaire. Si au contraire ces particules nanométriques se situent dans la zone des joints de grains, les composites sont de type intergranulaire. Il y a aussi les composites mixtes qui contiennent à la fois des particules intra et intergranulaires. Dans ces trois cas on se réfère à la distribution d'une phase nanométrique minoritaire vis-à-vis d'une phase majoritaire micrométrique.

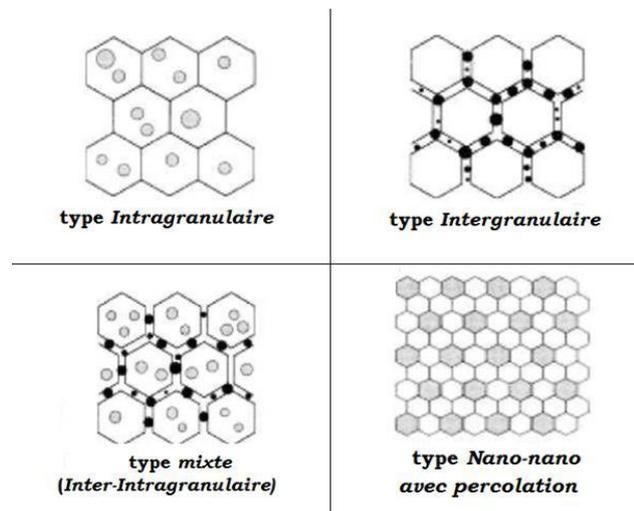


Figure II.3 - Classification des nanomatériaux selon Niihara [Niihara 1991].

II.2.3.3 Classification de Gleiter

D'après Gleiter (2000) [22], il existe au moins une des dimensions des constituants dont la taille est inférieure à 50 nm et environ 50% des atomes sont dans les joints de grains. La figure II-4 donne la classification des nanomatériaux selon leur composition chimique et la dimension des cristallites. Les régions des joints de grains de la première et de la deuxième famille sont indiquées en noir afin d'accentuer les différents arrangements atomiques dans les grains (cristallites) et dans les joints de grains. La composition chimique des grains et des joints de grains est identique dans la première famille. Dans la deuxième famille, les joints de grains sont les régions où deux cristaux de composition chimique différente se joignent ensemble et causent une augmentation de la concentration, ainsi :

- Les plaquettes (ou lamelles) ont une dimension (1D),
- Les aiguilles ont deux dimensions (2D),
- Les grains équiaxes ont trois dimensions (3D).

Morphologie de matériaux nanoarchitecturés	Types d'architectures			
	Identiques	Différente pour chaque cristal	Différence entre joint de grain et grains	Inclusions dans une matrice de composition différente
Lamelles				
Aiguilles				
Grains équiaxes				

Figure II.4 - Les différentes familles des nanomatériaux selon Gleiter (Gleiter 2000).

II.2.4 Composition des nanomatériaux

La microstructure des matériaux à petits grains influe directement sur le mécanisme dominant la transformation. On peut considérer en effet, que la composition cristalline d'un nanomatériau est constituée de trois phases : le cœur de grain (grain core), le joint de grain (grain boundary) et les lignes triples (triple junctions).

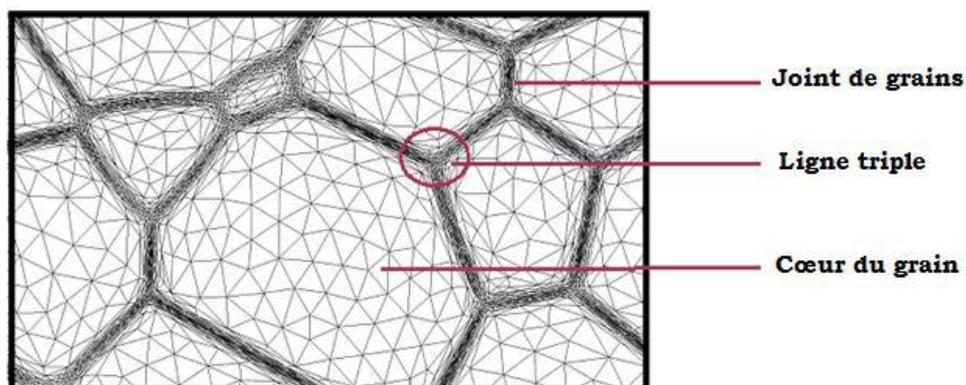


Figure II.5 - Composition des nanomatériaux. [21]

II.2.4.1 Cœur de grain

Le cœur de grain est composé d'un cristal dont la configuration géométrique dépend des atomes qui composent le matériau (CC, CFC, HC). Ces cristaux ou grains sont orientés au hasard les uns par rapport aux autres. Kumar et al. (2003) [23] ont révélé selon une étude récente et après un examen microscopique de l'intérieur du grain, que sa structure cristalline s'étale jusqu'à la limite du joint de grains. Les images hautes résolutions de la figure II-6 obtenues par un microscope à transmission d'électrons montrent le cœur de grain du nickel nanocristallin.

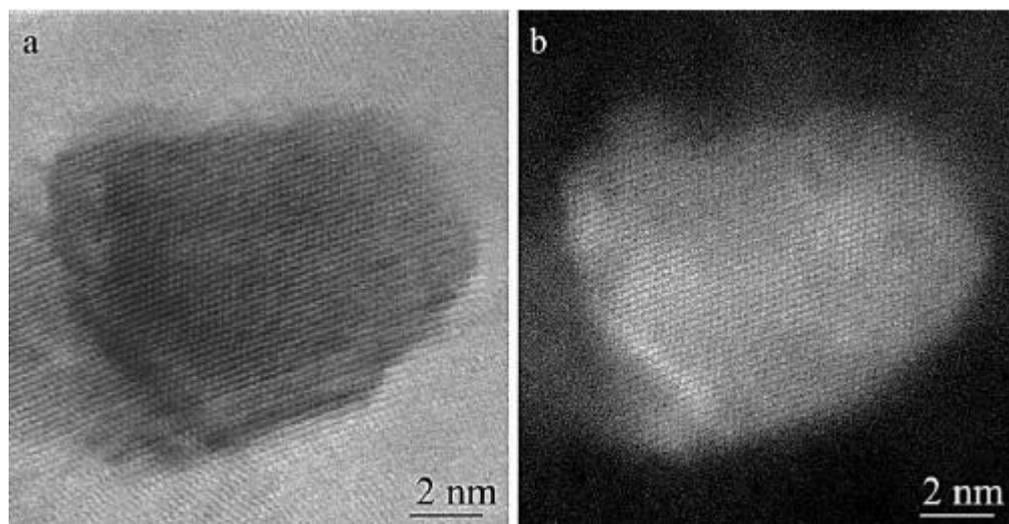


Figure II.6 - Image haute résolution du cœur de grain du nickel nanocristallin (Kumar et al. 2003). [23]

Les travaux et les observations de Kumar et al. (2003) [23] confortent une autre étude expérimentale réalisée par Ranganathan et al. (2001) [24] sur le titane nanocristallin.

II.2.4.2 Joints de grains

Le joint de grain est la région qui sépare deux grains. L'une des caractéristiques essentielles des nanomatériaux est liée au nombre important d'atomes qui se trouvent dans les joints de grains.

Dans le présent travail, la définition du joint de grains est attribuée à l'interface entre deux grains cristallins ayant des orientations ou des paramètres de maille différents. Donc, les grains en question sont le substrat et la couche cristalline mis en contact lors du collage moléculaire. En général, un joint de grains peut être une interface quelconque, mais à l'équilibre thermique il est

plan afin de minimiser sa surface et donc de minimiser l'énergie d'interface. Il est constitué d'un réseau de dislocations qui permet d'accommoder la discontinuité cristalline entre les deux grains.

II.2.5 Croissance de nanostructures par épitaxie

II.2.5.1 L'épitaxie

Le mot "épitaxie" tire son origine étymologique du grec : "taxis" (arrangement) et "epi" (par-dessus). Dans le contexte de la physique des matériaux, l'épitaxie désigne le dépôt ordonné d'un matériau sur un autre matériau qui constitue le substrat, élaborer un matériau à partir d'une surface cristalline, en respectant l'ordre cristallin imposé par le substrat. Si le matériau déposé est le même que le substrat, on parle alors d'homo-épitaxie, dans le cas contraire, on parle d'hétéro-épitaxie [25].

Pour que la structure du substrat soit conservée, les deux matériaux doivent avoir un paramètre de maille proche l'un de l'autre. De plus, les propriétés physico-chimiques (coefficient de dilatation thermique, composition chimique, ...) des matériaux peuvent être différentes et influencer les propriétés structurales.

Quand le film et le substrat présentent un désaccord de maille non nul, les deux mailles peuvent s'adapter pour accorder leurs paramètres cristallographiques dans le plan de croissance : c'est une croissance pseudomorphique [26].

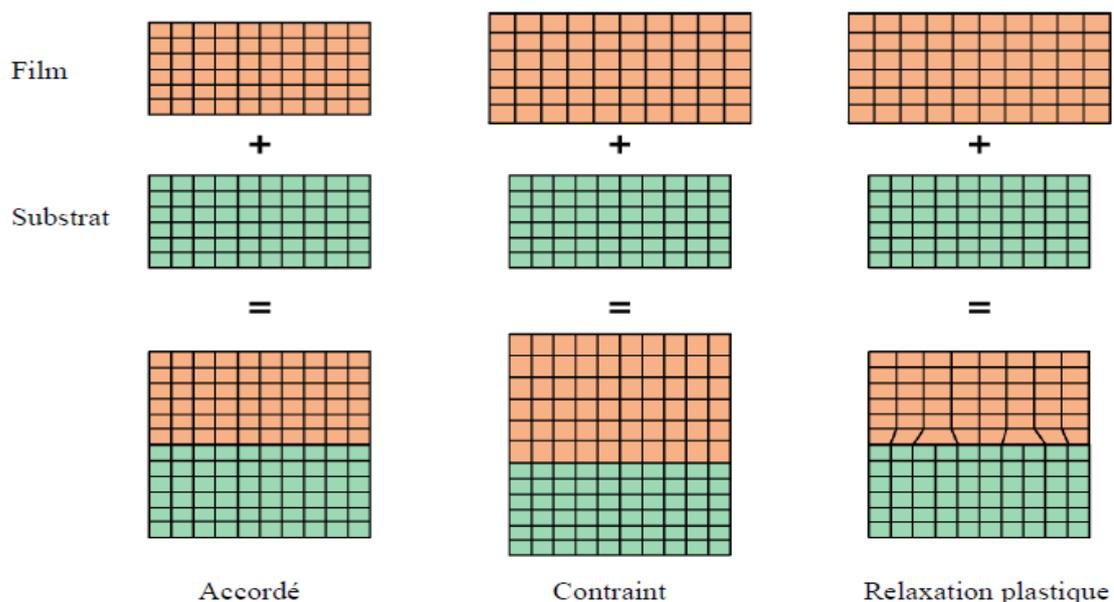


Figure II.7 - Structure d'hétéroépitaxie accordée en paramètre de maille, contrainte, et relaxé plastiquement. L'hétéroépitaxie accordée est similaire à l'homoépitaxie [26].

La croissance pseudomorphique est en général le mécanisme qui prévaut au début de la croissance d'une couche contrainte. Ce phénomène a lieu entre des matériaux différents mais cristallisant dans la même structure cristallographique. Près de l'interface, les premières couches du film s'adaptent à la maille du substrat.

Lorsque l'épaisseur de la couche contrainte augmente, l'énergie élastique accumulée dans le système augmente. La relaxation de cette énergie conduit à différents modes de croissance. [26]

II.2.5.2 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 (Figure II.8). Dans le premier mode de croissance, appelé mode Volmer-Weber[27], les atomes qui arrivent sur la surface se regroupent et forment des îlots. C'est une croissance tridimensionnelle. Dans le deuxième cas, le matériau déposé croît couche par couche (mode de croissance Frank-Van der Merwe) [28]. La surface de croissance reste globalement conforme à la surface du substrat, on parle de croissance bidimensionnelle.

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. [6]

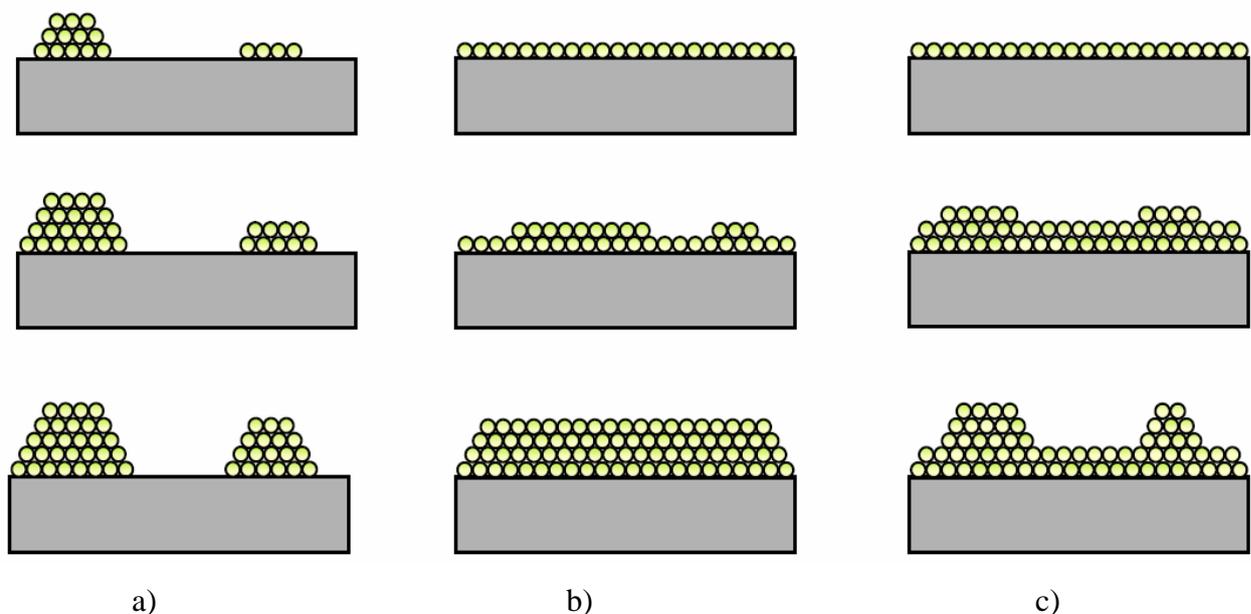


Figure II.8 - Classification des différents modes de croissance : (a) croissance 3D par la formation d'îlots (Volmer-Weber) (b) croissance 2D couche par couche (Frank-van der Merwe), et (c) croissance 2D puis 3D (Stranski-Krastanov). [6]

II.2.6 Les techniques de fabrication de films minces

Plusieurs méthodes d'élaboration de couches minces existent actuellement : 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 utilisées industriellement, à cause de leur meilleur rendement (vitesse de dépôt plus grande). Parmi les méthodes chimiques, les méthodes d'électrolyse donnent également de très beaux résultats. Nous donnons le principe quelques techniques utilisées actuellement dans le domaine. [29]

II.2.6.1 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. Ces atomes pulvérisés vont alors se déposer sur le substrat qui joue le rôle d'anode. Le grand intérêt de la pulvérisation cathodique est sa capacité à synthétiser rapidement un grand nombre d'échantillons de caractéristiques variables. La pulvérisation cathodique a été la technique la plus souvent utilisée et 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. [29]

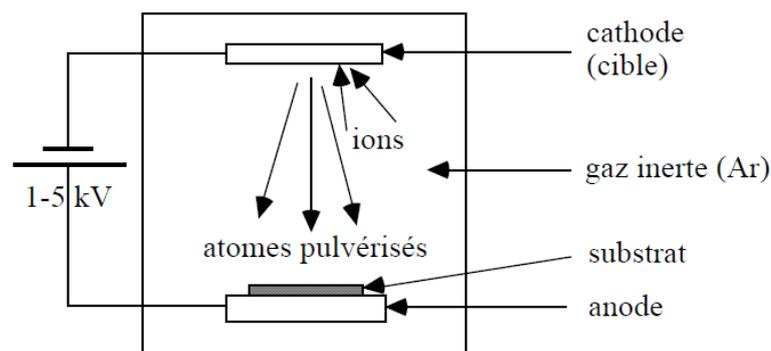


Figure II.9 - Technique de la pulvérisation cathodique.

II.2.6.2 L'Épitaxie par Jets Moléculaires

Les premières croissances par épitaxie par jet moléculaire (EJM) de couches fines furent réalisées sur le système III-V à la fin des années 50 par Günther [30]. Celui-ci réussit la croissance de films minces stœchiométriques d'InAs et d'InSb qui, déposés sur un substrat en verre étaient polycristallins.

Au début des années 70, les mécanismes de croissance des matériaux III-V par EJM furent principalement étudiés au sein des laboratoires Mullard en Angleterre et des laboratoires Bell aux États Unis [31,32]. En utilisant des sources solides pures de gallium et d'arsenic, ces derniers ont montré la bonne qualité de la croissance sur GaAs dans une enceinte où régnait un vide poussé (10^{-10} à 10^{-11} Torr). En 1983, Neave et al. [33] et van Hove et al. [34] montrent l'intérêt d'utiliser les oscillations RHEED (Reflection High Electron Energy Diffraction) durant la croissance cristalline pour contrôler précisément l'épaisseur des films minces et des super-réseaux de semi-conducteurs.

II.2.6.3 Principe de L'Épitaxie par Jets Moléculaires

L'Épitaxie par Jets Moléculaires (EJM) est une technique de croissance de couches minces qui permet de réaliser des dépôts monocristallins. La figure II-10 présente une vue schématique d'un bâti d'épitaxie par jets moléculaires. [35]

Le principe des dépôts consiste à évaporer le matériau que l'on veut déposer en le chauffant par effet joule (fil résistif), par rayonnement (cellule de Knudsen) ou par bombardement électronique (canon à électrons). Le flux des atomes vers la surface est moléculaire, c'est-à-dire que les atomes n'interagissent pas entre eux lors de leur parcours de la source vers le substrat. [36]

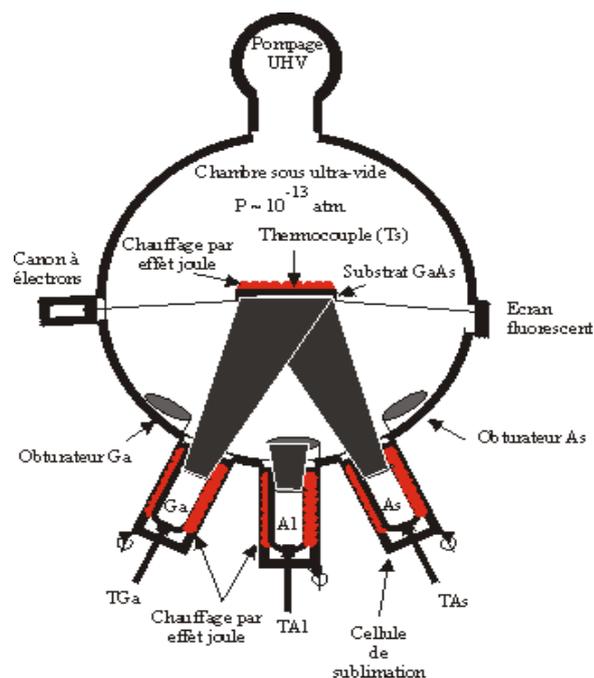


Figure II.10 - Schéma d'un bâti d'épitaxie par jets moléculaires. [35]

II.2.6.4 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. Le grand avantage de cette technique réside a priori dans sa capacité à conserver la stœchiométrie d'un alliage constituant la cible [29]. L'une des caractéristiques des hétérostructures à base de semi-conducteurs III-V est qu'elles mettent en jeu des couches de faible épaisseur, typiquement quelques dizaines de nanomètres ou moins. La fabrication de telles structures impose un contrôle précis des vitesses de croissance mais requiert également la maîtrise de la réalisation des interfaces.

II.2.6.5 Le collage moléculaire

Le collage moléculaire consiste à établir une liaison entre deux matériaux sans l'apport de matière extérieure (comme de la colle ou une matière adhésive). Il en existe différents types, applicable à différents matériaux et classés, en général, en fonction des forces utilisées pour rapprocher les plaques ou pour effectuer le scellement [RAY 1999, LAG 2000].

Il s'agit donc de mettre en contact les plaquettes à coller à température ambiante et ensuite à provoquer la soudure directe des deux cristaux par un recuit de stabilisation. Le collage moléculaire nécessite cependant que les surfaces soient très proches l'une de l'autre. Avant de mettre en contact les deux cristaux, il est donc nécessaire de les préparer "physiquement" et "chimiquement" pour que leur surface soit suffisamment plane, propre et adaptée "chimiquement" au collage. [20]

Pour qu'une méthode d'organisation soit efficace et intéressante, par rapport aux autres méthodes existantes, elle doit assurer :

- une organisation spontanée, c'est-à-dire une action collective sur l'assemblée d'îlots à l'échelle du substrat, pour éviter la lenteur d'un placement îlot par îlot ;
- un contrôle précis de la périodicité, avec une plage de variation assez grande (de l'ordre de quelques nanomètres à quelques centaines de nanomètres). [6]

Une solution pour répondre aux besoins exprimés auparavant est la création de réseaux de dislocations enterrées par l'utilisation du collage moléculaire. L'avantage de ce processus de création des réseaux de dislocations est le contrôle précis de la périodicité, et la cohérence à très longue distance des réseaux. Les réseaux de dislocations créés par collage moléculaire induisent des champs élastiques périodiques. Ces champs élastiques périodiques en surface modulent le potentiel

chimique, ce qui devrait permettre d'induire l'auto-organisation avec un pas contrôlé des îlots en surface. Un schéma de principe est donné à la Figure II.11.

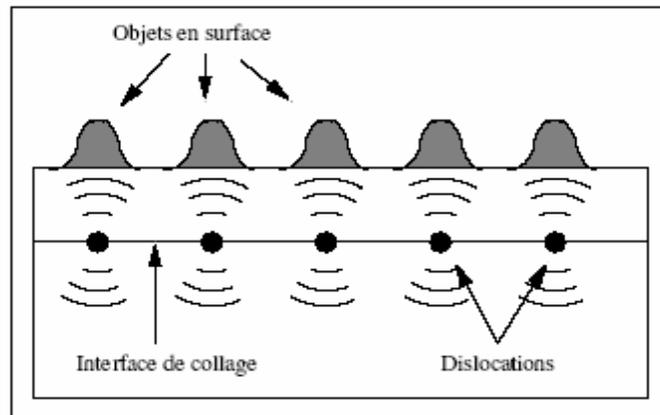


Figure II.11 - Schéma de principe de l'auto-organisation par des réseaux de dislocation enterrés. [6]

Le collage moléculaire de deux cristaux peut produire trois types de réseaux de dislocation :

- Un réseau de dislocations coins, lié à la différence de paramètre de maille entre les deux cristaux collés ;
- Un réseau de dislocations vis, dont la périodicité est liée à l'angle de rotation dans le plan de collage entre les deux cristaux ;
- Un réseau de dislocations mixtes, associé à la flexion entre les deux cristaux. [6]

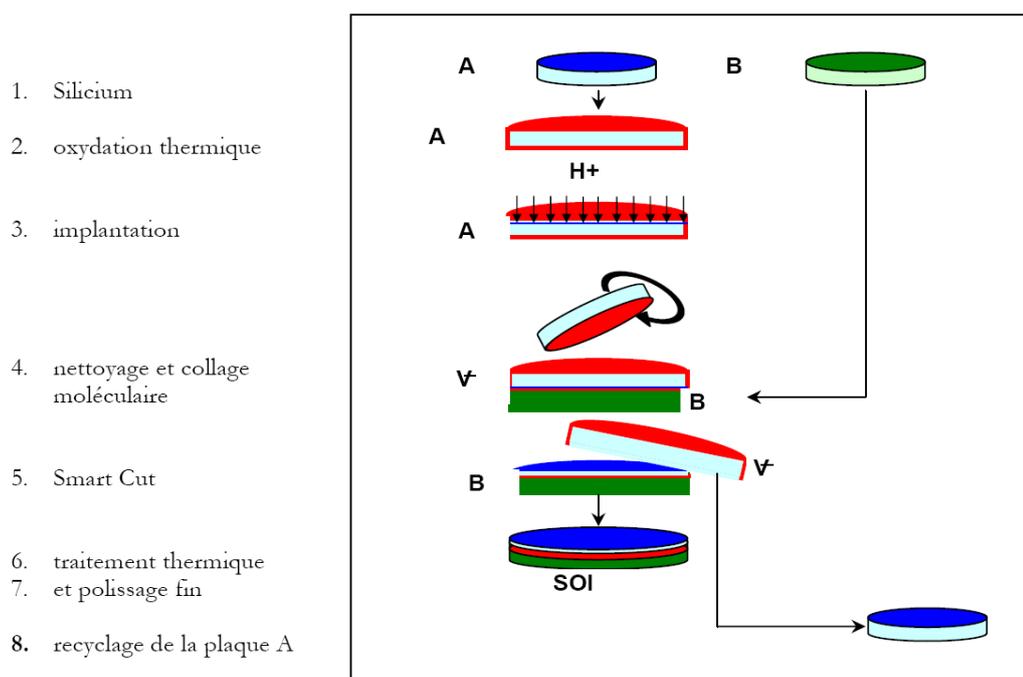


Figure II.12 - Principe du collage moléculaire [2].

II.3 Réseaux de dislocations

II.3.1 Les différents types de réseaux de dislocations

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

Les réseaux de dislocations, se formant au niveau de ces joints de grains, peuvent être dus à une flexion entre les deux grains, une torsion ou un désaccord de maille (Figure. II.13). On parle alors de joints de désaccord paramétrique, de flexion ou de torsion. [2]

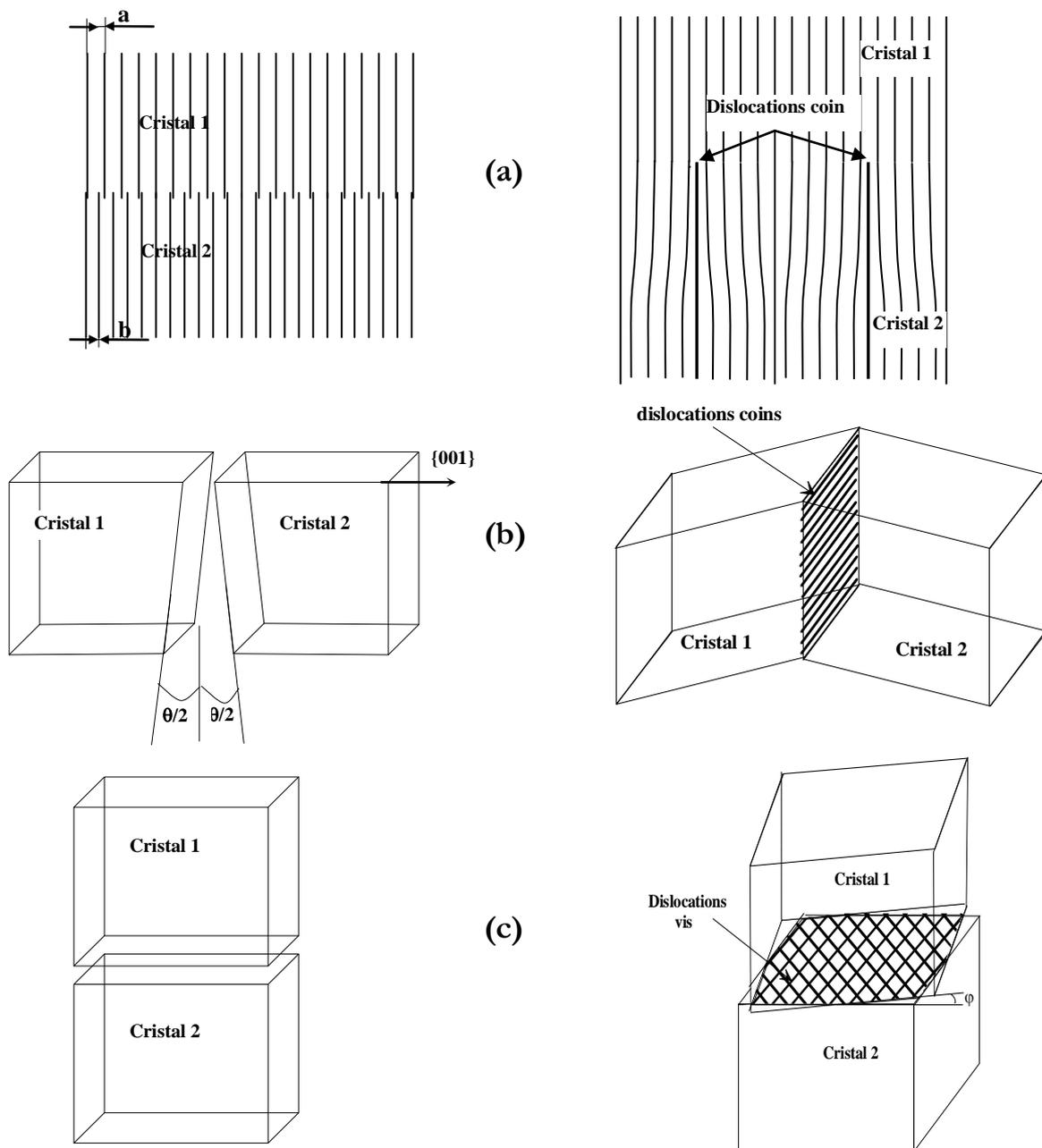


Figure II.13 - Les différentes désorientations cristallines possibles lors du collage et les réseaux de dislocations qu'engendre le raccordement cristallin.

(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. [2]

II.3.2 Un joint de désaccord paramétrique

Si les deux paramètres de maille sont différents, un joint de grains composé d'un réseau uni ou bidimensionnel de dislocations coin va apparaître pour relaxer les contraintes de désaccord paramétrique dites, en terminologie anglaise, de « *misfit* ».

Le « *misfit* » est bien connu dans le domaine de l'épitaxie, cependant, contrairement à ce qui se passe lors d'un dépôt au dessus de l'épaisseur critique d'un matériau, les dislocations formées ici, sont confinées et très périodiques dans le plan de l'interface de collage. Elles forment un véritable joint de grains entre les deux cristaux, considérés alors comme infiniment épais (c'est la raison pour laquelle les dislocations ne sont pas traversantes et restent confinées à l'interface de collage).

Notons que les premières observations de réseaux de dislocations de désaccord aux interfaces furent faites en microscopie électronique en transmission (TEM) par Matthews [39] sur le système Au sur Ag orienté (001) : $\Delta a/a = -0,2\%$ puis Jesser et Matthews [39] sur les systèmes γ -Fe sur Cu-(001) : $\Delta a/a = +1,6\%$, Co/Cu-(001) : $\Delta a/a = +2,4\%$ et Cr/Ni-(001) : $\Delta a/a = -3,1\%$. Pour tous ces métaux cubiques faces centrées (c.f.c.) orientés (001), les dislocations de désaccord formaient, à l'interface, un réseau carré suivant les directions $\langle 110 \rangle$.

II.3.3 Un 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 ou, en terminologie anglaise, un "*miscut*", par rapport au plan cristallin idéal qui devrait terminer une surface {001}. Alors le raccordement de ces deux cristaux doit prendre en compte ce désalignement caractérisé par un certain angle θ_s , défini entre le vecteur normal à la surface et le vecteur normal aux plans cristallins. Cet angle est appelé angle de vicinalité ou angle d'erreur de coupe.

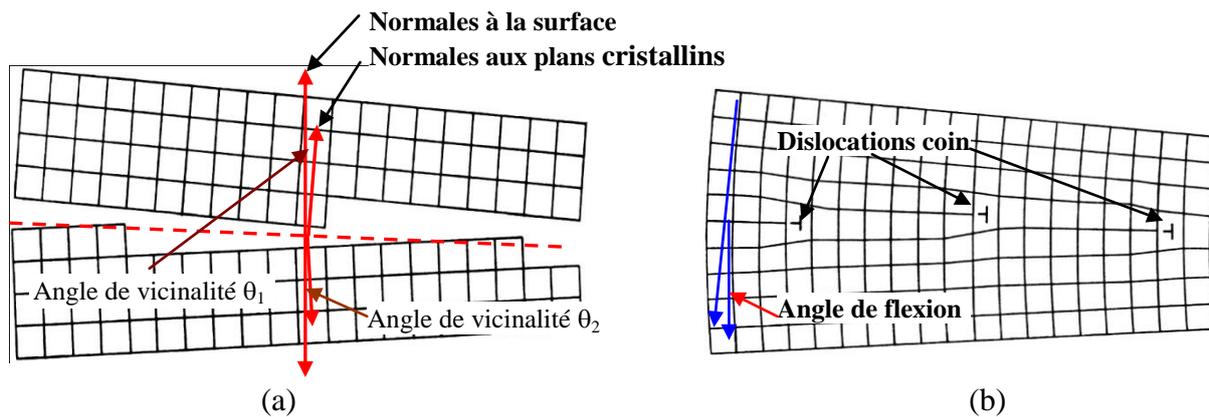


Figure II.14 - a) Définition de l'angle de vicinalité de deux surfaces avant leur mise en contact. Cet angle correspond à l'angle entre le vecteur normal à la surface et le vecteur normal aux plans cristallins. b) Formation du réseau de dislocations coin pour relaxer les contraintes dues à la désorientation de flexion entre les deux cristaux. La désorientation de flexion correspond cette fois à l'angle entre les vecteurs normaux aux plans cristallins à l'interface de collage.

Cette désorientation de flexion va provoquer l'apparition d'un réseau unidimensionnel de dislocations coin dont le pas est, d'après la formule de Frank [36] :

$$A_{\text{Coin}} = \frac{b}{2 \cdot \sin(\theta/2)} \quad (\text{II.1})$$

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

II.3.4 Un 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, 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 (figure II.15a). 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 (figure II.15b). C'est ce décalage qui provoque l'apparition des dislocations vis.

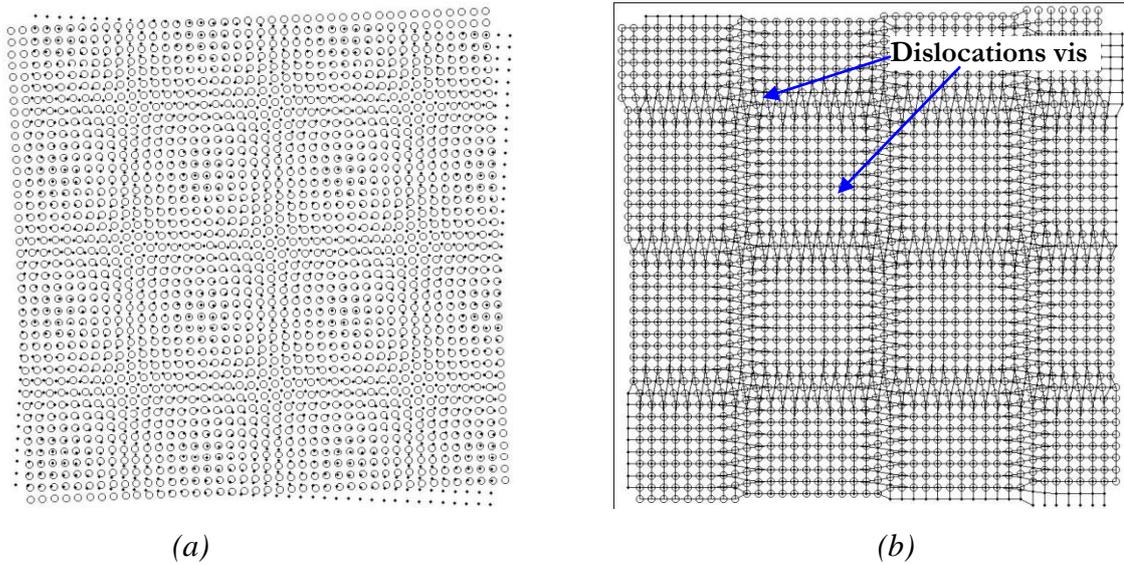


Figure II.15 - a) Image de Moiré obtenue en superposant deux réseaux carrés identiques tournés l'un par rapport à l'autre d'un angle $\varphi/2$. b) Apparition du réseau carré de dislocations vis.

De même, la périodicité Λ d'un réseau de dislocations induit par une désorientation d'angle φ est donnée par la formule de Frank [37] :

$$\Lambda_{\text{vis}} = \frac{b}{2 \cdot \sin(\varphi/2)} \quad (\text{II.2})$$

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

$$\Lambda = \frac{a_0}{2\sqrt{2} \cdot \sin(\varphi/2)} \quad (\text{II.3})$$

L'équation (II.3) relie l'angle de rotation φ dans le plan entre les deux cristaux à la périodicité du réseau de dislocations, le long de la direction $\langle 110 \rangle$. Le contrôle de cet angle de rotation détermine donc la précision de la périodicité du réseau.

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

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

$$\Lambda_{\text{mixte}} = \frac{a_0}{2 \cdot \tan \theta} \quad (\text{II.4})$$

En considérant que seule la composante normale à l'interface du vecteur de burgers des dislocations mixtes contribue à la flexion (vecteur effectif $b = a_0/2$). La figure II.16 donne pour les cas de la rotation et le cas de la flexion, les valeurs de périodicité en fonction de l'angle de désorientation, calculée d'après la formule de Frank.

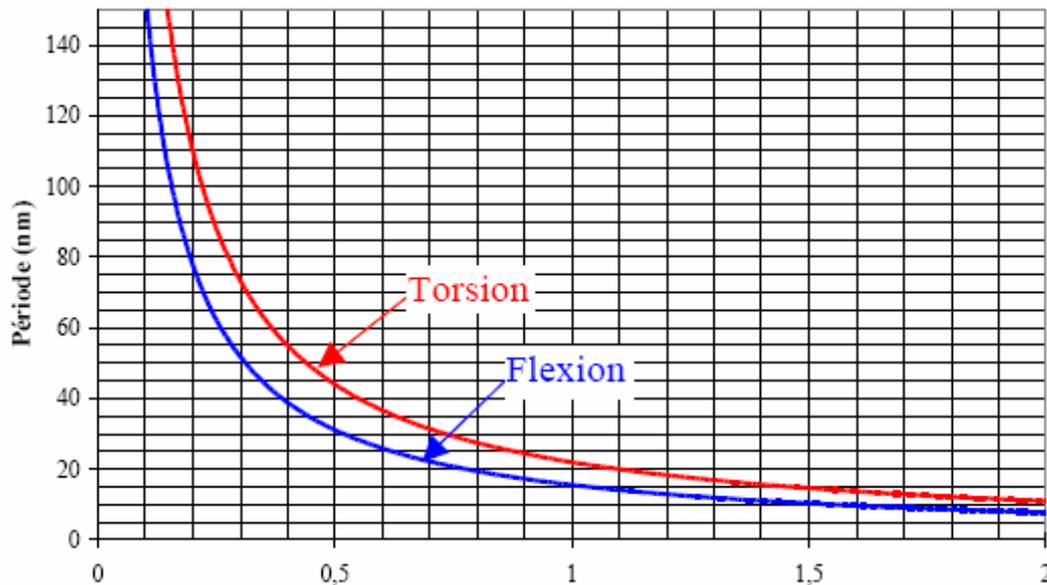
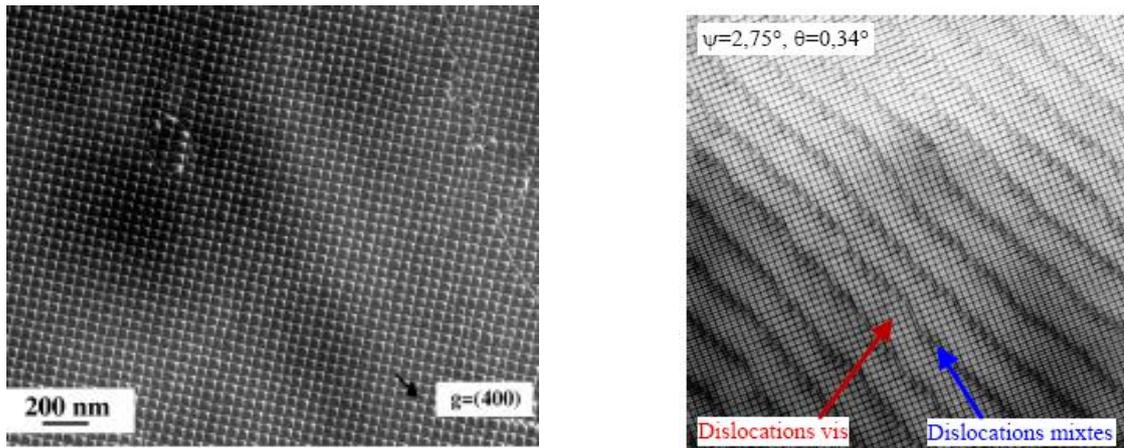


Figure II.16 - Périodicité des réseaux de dislocations en fonction de l'angle de désorientation.

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

La figure II.17 montre deux images en TEM [38] de deux types de réseaux de dislocations : un réseau de rotation pure (Figure II.17a), et un réseau de flexion et rotation (Figure II.17b).

On peut noter sur ces images la grande régularité du réseau de dislocation vis. Les lignes de dislocations vis sont très droites, et orthogonales entre elles. On observe aussi sur la figure II.17b que les lignes de dislocations mixtes sont légèrement sinueuses autour d'une direction moyenne. Ces directions moyennes sont parallèles entre elles. De même, la figure II.18 montre une image TEM de l'interface de collage. On peut observer que l'interface de collage est plane. Les dislocations sont confinées dans le plan d'interface.



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

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

Figure 2.17 - Microscopie électronique en transmission en vue plane des réseaux de dislocations. [38]



Figure II.18 - Microscopie électronique en transmission en vue en coupe de l'interface de collage, d'un échantillon dont la rotation vaut environ 5° . [38]

II.4 Rappels de la théorie de l'élasticité

II.4.1 Le champ de déplacements

Considérons un solide initialement non contraint. Soient (i, j, k) 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 : $(i+u, j+v, k+w)$. Les quantités u, v et w sont donc les déplacements de l'atome en question selon les axes $(O_i), (O_j)$ et (O_k) du repère initial et le champ de déplacements est le vecteur de coordonnées (u, v, w) . [3]

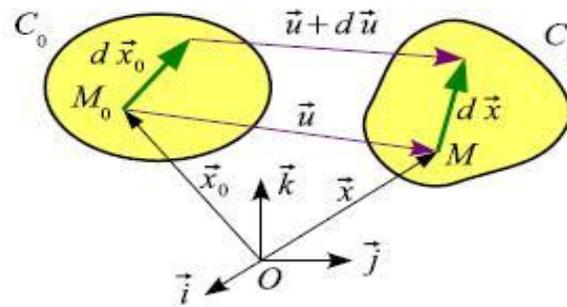


Figure II.19 - Transformation d'un point et d'un vecteur [3].

II.4.2 Le champ de déformations

Le champ de déformations d'un élément de volume (Figure II.19) 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 $i \neq j$). Ces déformations sont liées aux déplacements que subissent les atomes. [3]

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{xx} &= \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) & \varepsilon_{xy} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\
 \varepsilon_{yy} &= \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right) & \varepsilon_{xz} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\
 \varepsilon_{zz} &= \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right) & \varepsilon_{yz} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)
 \end{aligned}
 \tag{II.5}$$

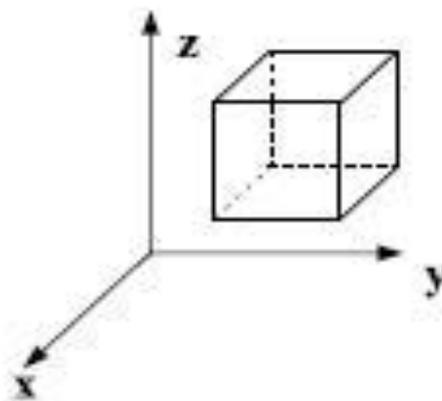


Figure II.20 - Un petit élément de volume d'un solide [7].

II.4.3 Le champ de contraintes

Le champ de contraintes 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 $i \neq j$) (Figure II.21). 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 :

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx}, \sigma_{xz} = \sigma_{zx} \text{ et } \sigma_{yz} = \sigma_{zy} \quad (\text{II. 6})$$

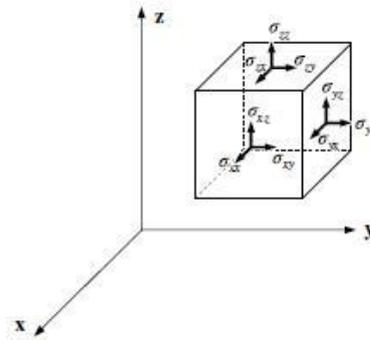


Figure II.21 - Les composantes d'un champ de contraintes agissant sur un élément de volume. [7]

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 :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad (\text{II. 7})$$

Où les C_{ij} sont les constantes dites élastiques. Ces constantes ne sont pas indépendantes. Cependant, 21 ou plus 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 :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\lambda + 2\mu) & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & (\lambda + 2\mu) & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & (\lambda + 2\mu) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad (\text{II. 8})$$

Où μ est le module de cisaillement du matériau et λ est défini par :

$$\lambda = \frac{2\nu\mu}{1 - 2\nu} \quad (\text{II. 9})$$

Tel que ν est le coefficient de Poisson du matériau.

En résumé, les dislocations sont à l'origine des champs élastiques de déplacements, de déformations, de contraintes et de l'énergie de déformation élastique. Par conséquent, la présence de dislocations à proximité de la surface d'un cristal influence la croissance d'îlots : si les dislocations sont organisées en réseaux, les îlots reproduisent la même organisation.

II.4.4 Énergie de déformation élastique

La création d'une dislocation dans un cristal requiert une certaine énergie, qui est la somme de l'énergie élastique due aux champs de contraintes et de déformations mentionnés précédemment et de l'énergie de cœur au centre de la dislocation où il existe une région dont l'arrangement atomique est très fortement perturbé : cette région s'appelle le cœur de la dislocation, elle a un rayon r_0 de l'ordre de $3b$ à $5b$. Dans cette partie du cristal, la théorie élastique ne s'applique pas car les déformations sont trop importantes. Par contre, à une distance r , supérieure à r_0 , le cristal est déformé élastiquement où on peut évaluer les contraintes en utilisant la loi de Hooke.

$$E_{\text{dislocation}} = E_{\text{élastique}} + E_{\text{cœur}} \approx E_{\text{élastique}} \quad (\text{II. 10})$$

Les seules contraintes à considérer sont des contraintes de cisaillement.

Dans le cas d'une dislocation vis :

$$\frac{dE_{\text{élastique}}}{dV} = \frac{\tau^2}{2\mu} \quad (\text{II.11})$$

$$\frac{dE_{\text{élastique}}}{l \cdot 2\pi dr} = \frac{\tau^2}{2\mu} \quad (\text{II.12})$$

$$E_{\text{élastique}} = \frac{l}{2\mu} \left(\frac{\mu b}{2\pi}\right)^2 \int_{r_0}^R \frac{2\pi l}{r} dr = \frac{\mu b^2}{4\pi} \log\left(\frac{R}{r_0}\right) \quad (\text{II.13})$$

Dans le cas d'une dislocation coin :

$$\frac{dE_{\text{élastique}}}{dV} = \frac{E \epsilon^2}{2} \quad (\text{II.14})$$

$$\frac{dE_{\text{élastique}}}{l \cdot 2\pi dr} = \frac{E b^2}{8\pi^2} \quad (\text{II.15})$$

$$E_{\text{élastique}} = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \log\left(\frac{R}{r_0}\right) \quad (\text{II.16})$$

Dans le cas général, on peut écrire :

$$E_{\text{élastique}} = \frac{\mu b^2}{4\pi\chi} \log\left(\frac{R}{r_0}\right) \quad (\text{II.17})$$

Avec $\chi = 1$ pour les dislocations vis, et $\chi = 1 - \nu$ pour les dislocations coins.

Un milieu élastique contraint emmagasine une énergie élastique de déformation exprimée par unité de volume. De façon générale, la densité d'énergie élastique autour d'un point dont l'état de contraintes est donné par σ_{ij} et l'état des déformations par ϵ_{ij} s'exprime par :

$$E_{\text{élastique}} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \sigma_{ij} \epsilon_{ij} \quad (\text{II.18})$$

En développant, on aura l'expression suivante :

$$E_{\text{élastique}} = \frac{1}{2} [\sigma_{11} \cdot \epsilon_{11} + \sigma_{21} \cdot \epsilon_{21} + \sigma_{31} \cdot \epsilon_{31} + \sigma_{12} \cdot \epsilon_{12} + \sigma_{22} \cdot \epsilon_{22} + \sigma_{32} \cdot \epsilon_{32} + \sigma_{13} \cdot \epsilon_{13} + \sigma_{23} \cdot \epsilon_{23} + \sigma_{33} \cdot \epsilon_{33}] \quad (\text{II.19})$$

Sachant que la déformation est :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{II.20})$$

Avec : $\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21}$, $\varepsilon_{31} = \varepsilon_{13}$, $\varepsilon_{23} = \varepsilon_{32}$ et que la déformation est plane, donc :

$$\varepsilon_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x} + \frac{\partial u_1}{\partial y} \right) & 0 \\ \left(\frac{\partial u_1}{\partial y} + \frac{\partial u_2}{\partial x} \right) & \frac{\partial u_2}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{II.21})$$

$$E_{\text{élastique}} = \frac{1}{2} [\sigma_{11} \cdot \varepsilon_{11} + \sigma_{21} \cdot \varepsilon_{21} + \sigma_{12} \cdot \varepsilon_{12} + \sigma_{22} \cdot \varepsilon_{22}] \quad (\text{II.22})$$

On considère un réseau de dislocations coin, périodique selon Ox, dont le vecteur de Burgers est orienté selon Ox. Alors les composantes σ_{12} , σ_{21} et σ_{22} du champ de contraintes ne sont pas nulles, ainsi que u_1 et u_2 . Le déplacement selon u_3 est nul puisque l'on est dans une géométrie de cisaillement pur.

Alors cette énergie peut s'écrire comme suit :

$$E_{\text{élastique}} = \frac{1}{2} [\sigma_{11} \cdot \varepsilon_{11} + \sigma_{21} \cdot \varepsilon_{21} + \sigma_{12} \cdot \varepsilon_{12} + \sigma_{22} \cdot \varepsilon_{22}] \quad (\text{II.23})$$

II.5 Conclusion

Dans ce chapitre, sont présentées quelques notions de nanostructures qui ont une relation avec le thème ainsi que quelques notions de base essentielles sur la théorie des dislocations qui étudie le cristal imparfait (cristal réel) pour montrer le rôle déterminant des dislocations et leur influence sur la croissance des nanomatériaux, ensuite quelques rappels essentiels de la théorie de l'élasticité qui montrent les différentes expressions du champ de déplacements, de déformations et de l'énergie de déformation élastique.

Chapitre III

*Présentation du problème, conditions aux limites et solution
en élasticité anisotrope*

III.1 Introduction

La croissance par épitaxie des matériaux ayant des paramètres de maille différents, crée au niveau des interfaces de ces derniers des réseaux de dislocations coin périodiques (dislocations de misfit) pour relaxer les contraintes de désaccord paramétrique.

Dans ce contexte, nous décrivons les champs élastiques pour le cas d'un matériau tricouche A / B / C (Figure III.1) composé d'une couche mince B d'épaisseur h prise en sandwich entre un milieu A ($x_2 > 0$) et un milieu C ($x_2 < 0$), en présence de deux réseaux de dislocations de misfit qui se développent périodiquement, le premier, unidirectionnel au niveau de l'interface (A / B) et le second carré au niveau de l'interface (B / C).

III.2 Géométrie du problème

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

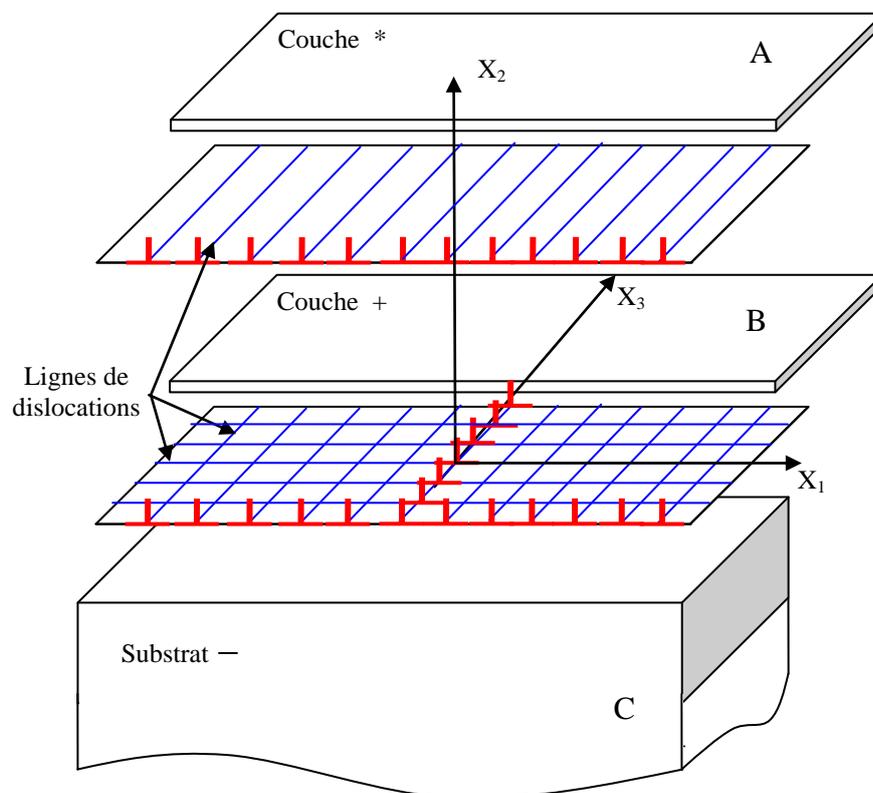


Figure III.1 - Géométrie du matériau tricouche CdTe/GaAs/GaAs

Dans tout ce qui suit, nous adoptons les conventions suivantes : la couche mince B est affectée d'un symbole (+) et les deux milieux A et C au dessus et au dessous de la couche B respectivement des symboles (*) et (-). L'arrangement périodique de défauts linéaires est parallèle à l'axe Ox_3 d'un repère cartésien orthonormé $Ox_1x_2x_3$ orienté de façon à avoir Ox_2 perpendiculaire aux deux surfaces ainsi qu'aux interfaces. La période des dislocations interfaciales (notée Λ) est égale à $1/g$ selon Ox_1 , dont le vecteur de Burgers \mathbf{b} est orienté selon Ox_1 .

III.3 Formulation mathématique

L'évaluation des champs élastiques des multicouches minces épitaxiées sur des substrats monocristallins, dues aux réseaux de dislocations présents aux interfaces, sont difficiles à estimer.

Les différents cas des réseaux de dislocations placés le long des hétéro-interfaces séparant les milieux composant les systèmes ont été résolus antérieurement par plusieurs auteurs cités dans le chapitre I.

Les champs de déformations élastiques (déplacements et contraintes) pour deux réseaux de dislocations unidirectionnel et carré placés au niveau des deux interfaces formant un matériau tricouche A/B/C vont être développés en utilisant la théorie élastique anisotrope basée sur une analyse en séries de Fourier.

La Figure III.2 représente la géométrie du problème pour trois milieux (*), (+) et (-) supposés obéir à la loi de Hooke. Ces trois milieux sont séparés par deux interfaces planes comportant deux réseaux de dislocations intrinsèques.

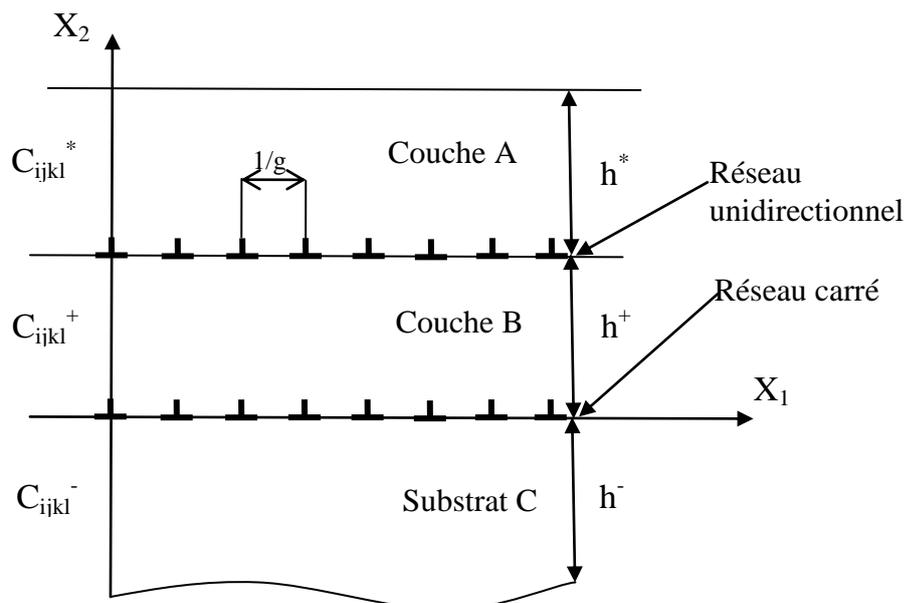


Figure III.2 - Tricouche avec deux réseaux de dislocations unidirectionnel et carré aux interfaces A/B et B/C; h^* , h^+ et h^- sont les épaisseurs des trois milieux.

III.4. Mise en équations du problème

III.4.1. Champ de déplacements

La figure III.3 représente la configuration à étudier :

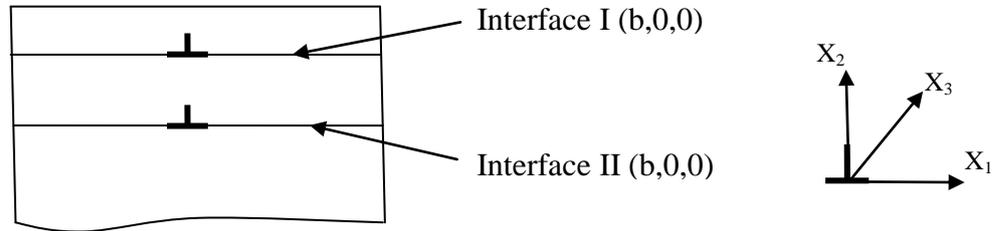


Figure III.3 - Configuration du tricouche A/B/C

Le champ de déplacements est supposé périodique pour chaque cristal le long de l'axe Ox_1 et la solution générale peut être écrite avec la convention d'Einstein après développement en série de Fourier comme suit :

$$\varepsilon_{ij}(X_1, X_2) = \sum_G \varepsilon_{ij}^{(G)}(X_2) \exp\left(\frac{2i\pi n}{\Lambda} X_1\right) \quad (\text{III. 1})$$

L'intégration de (III.1) donne le champ de déplacements :

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

Les dislocations intrinsèques de misfit sont caractérisées par des champs de contraintes nulles à longue distance, donc v_{k1}^0 et v_{k2}^0 doivent prendre des valeurs nulles et par commodité, u_k^0 est une constante choisie égale à zéro, donc l'expression du champ de déplacements s'écrit :

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

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

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\text{III. 4})$$

Où :

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

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

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(C_{ijkl} u_{k,l}) + \frac{1}{2}(C_{ijlk} u_{l,k}) \quad (\text{III. 6})$$

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

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(C_{ijkl} u_{k,l}) + \frac{1}{2}(C_{ijlk} u_{l,k}) \quad (\text{III. 7})$$

Étant donné que les indices muets k et l prennent les mêmes valeurs, donc les deux termes de l'équation (III. 7) sont égaux, ce qui donne :

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

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

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

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

En introduisant (III.3) dans (III.10), on obtient trois équations différentielles qui peuvent s'écrire de la manière suivante :

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

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

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

En remplaçant (III.12) par sa valeur dans (III.11), on obtient un système à 3 équations linéaires (III. 13) où les $\lambda'_{\alpha k}$ et p_α sont des constantes complexes à déterminer.

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

Le système à 3 équations linéaires peut s'écrire de la manière suivante :

$$A_{jk} \lambda'_{\alpha k} = 0 \quad (\text{III. 14})$$

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

En adoptant pour les constantes élastiques la convention à deux indices, ce qui fait :

11 devient 1,	22 devient 2,
33 devient 3,	23 devient 4,
13 devient 5,	12 devient 6

L'équation (III.14) s'écrit sous la forme explicite de la manière suivante :

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

Ce système est similaire à celui obtenu par Eshelby et al. [38] dans le cas d'une dislocation rectiligne placée dans un milieu homogène en élasticité anisotrope, il admet pour chaque P_α des solutions $\lambda'_{\alpha k}$ non triviales si le déterminant de A_{jk} est égal à zéro :

$$|A_{jk}| = |C_{j1k1} + (C_{j1k2} + C_{j2k1})p_\alpha + C_{j2k2}p_\alpha^2| = 0 \quad (\text{III. 15})$$

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

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

Où K_i ($i = 0, \dots, 6$) sont fonctions des constantes élastiques C_{ij} , et leurs expressions sont :

$$\begin{aligned}
K_0 &= C_{11}C_{66}C_{55} - C_{11}C_{56}^2 - C_{55}C_{16}^2 + 2C_{16}C_{15}C_{56} - C_{66}C_{15}^2 \\
K_1 &= C_{15}C_{16}(C_{56} + 2C_{25} + C_{46}) + 2C_{55}(C_{11}C_{26} - C_{16}C_{12}) \\
&\quad + C_{11}(C_{66}(C_{45} + C_{35}) - 2C_{56}(C_{46} + C_{25})) + 2C_{56}(C_{15}C_{12} + C_{16}C_{14}) \\
&\quad - C_{45}C_{16}^2 - 2C_{26}C_{15}^2 \\
K_2 &= C_{11}C_{22}C_{55} + 2C_{16}C_{26}C_{55} + 2C_{11}C_{26}(C_{45} + C_{35}) - 2C_{11}C_{66}(C_{45} - C_{35}) \\
&\quad + C_{44}C_{11}C_{66} - 2C_{11}C_{24}C_{56} - C_{16}C_{56}(2C_{46} + 3C_{25} + C_{15}) \\
&\quad - C_{25}C_{11}(2C_{46} - C_{25}) - 4C_{45}C_{16}C_{12} - C_{55}C_{12}(2C_{66} + C_{12}) - C_{11}C_{46}^2 \\
&\quad - C_{44}C_{16}^2 + 2C_{15}C_{16}C_{24} + C_{15}C_{66}(C_{56} + 2C_{25}) + C_{15}C_{12}(2C_{25} + C_{46}) \\
&\quad - 2C_{15}C_{26}(C_{25} + 2C_{14}) + C_{12}C_{14}(C_{25} + C_{56}) + C_{12}C_{25}C_{56} - C_{46}C_{15}C_{66} \\
&\quad + C_{46}C_{12}(C_{14} + C_{56}) - C_{66}(C_{14}^2 + C_{56}^2) \\
K_3 &= 2C_{55}C_{22}C_{16} + (C_{45} + C_{33})(C_{11}C_{22} + C_{66}^2) - 2C_{45}C_{66}^2 + 4C_{33}C_{16}C_{26} + 2C_{44}C_{11}C_{26} \\
&\quad + 4C_{24}C_{16}C_{14} + 2(C_{56} + C_{14})(C_{12}C_{25} - C_{24}C_{16}) - C_{46}C_{56}(C_{66} - 3C_{12} - C_{16}) \\
&\quad - 2(C_{46} + C_{25})(C_{11}C_{24} + C_{16}C_{25}) - 2C_{16}C_{46}^2 - 2C_{44}C_{16}C_{12} \\
&\quad + (C_{12} + 2C_{66})(C_{15}C_{24} + C_{56}^2 + C_{56}C_{14} - 2C_{45}C_{12}) + C_{15}C_{12}C_{24} - 2C_{26}C_{14}^2 \\
&\quad + C_{15}C_{26}(2C_{25} - 3C_{46}) - C_{66}C_{56}^2 - 2C_{56}C_{14}C_{26} + 2C_{66}C_{56}^2 \\
&\quad + C_{14}C_{66}(2C_{25} - C_{46}) + C_{14}C_{12}C_{46} - (C_{14} + C_{56})(C_{66}C_{56} + 2C_{22}C_{15}) \\
K_4 &= C_{22}C_{55}C_{66} + 2C_{45}C_{16}C_{22} + 2C_{35}C_{22}C_{16} + 2C_{35}C_{26}C_{66} + C_{44}C_{11}C_{22} + 2C_{44}C_{16}C_{26} \\
&\quad - 4C_{16}C_{25}C_{24} - 2C_{16}C_{24}C_{46} - C_{11}C_{24}^2 - C_{55}C_{26}^2 - 4C_{12}C_{26}C_{45} \\
&\quad - 2C_{45}C_{26}C_{66} - 2C_{44}C_{12}C_{66} - C_{44}C_{12}^2 + 2C_{15}C_{26}C_{24} + 2C_{12}C_{24}C_{56} \\
&\quad + 2C_{12}C_{14}C_{24} + 2C_{14}C_{24}C_{66} + C_{26}C_{56}^2 + 2C_{56}C_{25}C_{26} + C_{14}C_{26}C_{56} \\
&\quad + 2C_{14}C_{24}C_{25} + C_{12}C_{46}C_{56} + C_{46}C_{56}C_{66} + C_{12}C_{46}C_{25} - C_{26}C_{46}C_{56} \\
&\quad - 3C_{14}C_{46}C_{26} + C_{12}C_{46}^2 - 2C_{22}C_{15}C_{46} - C_{22}C_{14}^2 + 2C_{22}C_{14}C_{56} - C_{22}C_{56}^2 \\
K_5 &= C_{66}C_{22}(C_{45} + C_{35}) + 2C_{44}C_{22}C_{16} + 2C_{44}C_{66}(C_{22} - C_{26}) - 2C_{66}C_{24}C_{25} - 2C_{16}C_{24}^2 \\
&\quad - 2C_{45}C_{26}^2 - 2C_{44}C_{26}C_{12} + 2C_{12}C_{24}C_{46} + C_{46}C_{26}(C_{56} + 2C_{25} - C_{46}) \\
&\quad - 2C_{22}C_{45}(C_{56} + C_{14}) + 2(C_{56} + C_{14})(C_{24}C_{26} - C_{22}C_{45}) \\
K_6 &= -C_{22}C_{46}^2 - C_{66}C_{24}^2 - C_{44}C_{26}^2 + C_{66}C_{22}C_{44} + 2C_{46}C_{26}C_{24}
\end{aligned}$$

Donc, pour résoudre le problème, il faut calculer les six racines du polynôme (III.16). Ces racines sont complexes d'après J.D. Eshelby et al. [38] puisque la densité d'énergie doit être toujours positive.

Et comme les coefficients du polynôme sont réels, les racines complexes considérées ici sont :

$P_\alpha (\alpha = 1,3)$ et leurs paires conjuguées : $\overline{p_\alpha} (\alpha = 1,3)$

Dans la suite du problème, seules les racines à partie imaginaire positive sont choisies. Ces racines s'écrivent :

$$P_\alpha^{(n)} = P_\alpha^{r(n)} \pm iP_\alpha^{i(n)} \quad (\text{III. 17})$$

Avec : $\alpha = 1, 2, 3$ et $P_\alpha^{i(n)} > 0$. Pour chacune des racines p_α données en (III. 17), on résout le système en $\lambda'_{\alpha k}$ suivant :

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

Avec :

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

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

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

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

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

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

Les $\lambda'_{\alpha k}$ obtenus sont exprimés donc en fonction des C_{ij} et sont complexes, ils s'écrivent :

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

La théorie rapporte que les déplacements et les contraintes ne dépendent que des valeurs relatives de $\lambda'_{\alpha k}$ ($k = 1,3$). En posant arbitrairement $\lambda'_{\alpha 3} = 1$ on peut à partir de (III. 18) calculer :

$$\lambda'_{\alpha 1} = \frac{F_{12}F_{23} - F_{13}F_{22}}{F_{11}F_{22} - F_{12}F_{21}} \quad (\text{III. 19.1})$$

$$\lambda'_{\alpha 2} = \frac{-(F_{11}F_{23} - F_{13}F_{21})}{F_{11}F_{22} - F_{12}F_{21}} \quad (\text{III. 19.2})$$

$$\lambda'_{\alpha 2} = 1 \quad (\text{III. 19.3})$$

La troisième équation du système (III.18) est toujours vérifiée car en remplaçant $\lambda'_{\alpha 1}$ et $\lambda'_{\alpha 2}$ par leurs valeurs obtenues en (III.19.1) et (III.19.2), on obtient l'expression du déterminant de la matrice F_{jk} qui est égal à zéro. Les $\lambda_{\alpha k}$ choisis pour le calcul des déplacements et des contraintes s'expriment en fonction des $\lambda'_{\alpha k}$ par :

$$\lambda_{\alpha 1} = \frac{\lambda'_{\alpha 1}}{(\lambda_{\alpha 1}^2 + \lambda_{\alpha 2}^2 + \lambda_{\alpha 3}^2)^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{III. 20.1})$$

$$\lambda_{\alpha 2} = \frac{\lambda'_{\alpha 2}}{(\lambda_{\alpha 1}^2 + \lambda_{\alpha 2}^2 + \lambda_{\alpha 3}^2)^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{III. 20.2})$$

$$\lambda_{\alpha 3} = \frac{\lambda'_{\alpha 3}}{(\lambda_{\alpha 1}^2 + \lambda_{\alpha 2}^2 + \lambda_{\alpha 3}^2)^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{III. 20.3})$$

tel que :

$$(\lambda_{\alpha 1}^2 + \lambda_{\alpha 2}^2 + \lambda_{\alpha 3}^2) = 1 \quad (\text{III. 21})$$

Les équations (III.11) ont ainsi comme solution générale des combinaisons linéaires des solutions trouvées pour chaque α , autrement dit :

$$U_k^{(n)}(x_2) = \sum_{\alpha=1}^6 C_{\alpha}^{(n)} \lambda_{\alpha k} \exp(2i\pi g n p_{\alpha} x_2) \quad (\text{III. 22})$$

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

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

$$\begin{cases} X_{\alpha}^{(n)} / 2i\pi n \\ Y_{\alpha}^{(n)} / 2i\pi n \end{cases} \quad (\alpha = 1, 2, 3) \quad (\text{III. 23})$$

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

$$p_{\alpha k} = \overline{p_{(\alpha-3)k}} \quad \text{et} \quad \lambda_{\alpha k} = \overline{\lambda_{(\alpha-3)k}}$$

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

$$U_k^{(n)}(x_2) = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{X_{\alpha}^{(n)} \lambda_{\alpha k}}{2i\pi n} \exp(2i\pi g n p_{\alpha} x_2) + \frac{Y_{\alpha}^{(n)} \overline{\lambda_{\alpha k}}}{2i\pi n} \exp(2i\pi g n \overline{p_{\alpha}} x_2) \quad (\text{III. 24})$$

Où les constantes complexes $X_{\alpha}^{(n)}$ et $Y_{\alpha}^{(n)}$ seront déterminées à l'aide des conditions aux limites relatives au problème. La combinaison de (III.23) avec (III.24) permet d'écrire le champ de déplacements sous la forme suivante :

$$u_k = \sum_{n \neq 0} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{X_{\alpha}^{(n)} \lambda_{\alpha k}}{2i\pi n} \exp[(2i\pi g n (x_1 + p_{\alpha} x_2)] \\ + \frac{Y_{\alpha}^{(n)} \overline{\lambda_{\alpha k}}}{2i\pi n} [\exp(2i\pi g n (x_1 + \overline{p_{\alpha}} x_2))] \quad (\text{III. 25})$$

III.4.1.1 Expression finale du champ des déplacements

Pour plus de performances sur le plan numérique, il est convenable d'écrire l'équation (III.25) sous une forme où la sommation ne tient compte que des valeurs positives de l'entier n . On peut l'écrire sous la forme :

$$u_k = \sum_{n \neq 0} \sum_{\alpha=1}^3 C_{\alpha k}^{(n)} \exp[(2i\pi g n (x_1 + r_{\alpha} x_2)] \quad (\text{III. 26})$$

Comme u_k est une fonction réelle, et après détermination des $C_{\alpha k}^{(n)}$:

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

Donc, la double somme (III.26) devient :

$$u_k = 2 \sum_{n \neq 0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re}(C_{\alpha k}^n) \cos[(2\pi g n(x_1 + r_\alpha x_2))] \\ + \operatorname{Re}(iC_{\alpha k}^n) \sin[(2\pi g n(x_1 + r_\alpha x_2))] \quad (\text{III. 27})$$

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

$$u_k = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 \{ [\cos [n\omega(x_1 + r_\alpha x_2)] \times \operatorname{Re}[(-iX_\alpha^{(n)} \lambda_{\alpha k}) \exp(-n\omega s_\alpha x_2)] \\ + (-iY_\alpha^{(n)} \overline{\lambda_{\alpha k}}) \exp(n\omega s_\alpha x_2)] \} \\ + \{ \sin[n\omega(x_1 + r_\alpha x_2)] \times \operatorname{Re}[(X_\alpha^{(n)} \lambda_{\alpha k}) \exp(-n\omega s_\alpha x_2)] \\ + (Y_\alpha^{(n)} \overline{\lambda_{\alpha k}}) \exp(n\omega s_\alpha x_2) \}, \quad k = 1, 2, 3 \quad (\text{III. 28})$$

III.4.2 Champ de contraintes

Le champ de contraintes est obtenu à partir de l'équation (III .28) en utilisant la loi de Hooke qui s'écrit :

$$\sigma_{kl} = C_{klij} \varepsilon_{ij} \quad (\text{III. 29})$$

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

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

$$\sigma_{kl} = C_{kli1} u_{i,1} + C_{kli2} u_{i,2} \quad (\text{III. 30})$$

D'où en fin:

$$\sigma_{kl} = C_{kl11} u_{1,1} + C_{kl21} u_{2,1} + C_{kl12} u_{1,2} + C_{kl22} u_{2,2} \quad (\text{III. 31})$$

Avec :

$$\begin{aligned}
u_1 = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 & \{ \cos [n\omega(x_1+r_\alpha x_2)] \times \text{Re} [(-iX_\alpha^{(n)} \lambda_{\alpha 1}) \exp(-n\omega s_\alpha x_2) \\
& + (-iY_\alpha^{(n)} \overline{\lambda_{\alpha 1}}) \exp(n\omega s_\alpha x_2)] \} \\
& + \{ \sin [n\omega(x_1+r_\alpha x_2)] \times \text{Re} [(X_\alpha^{(n)} \lambda_{\alpha 1}) \exp(-n\omega s_\alpha x_2) \\
& + (Y_\alpha^{(n)} \overline{\lambda_{\alpha 1}}) \exp(n\omega s_\alpha x_2)] \} \quad \text{(III. 32)}
\end{aligned}$$

Et :

$$\begin{aligned}
u_2 = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 & \{ \cos [n\omega(x_1+r_\alpha x_2)] \times \text{Re} [(-iX_\alpha^{(n)} \lambda_{\alpha 2}) \exp(-n\omega s_\alpha x_2) \\
& + (-iY_\alpha^{(n)} \overline{\lambda_{\alpha 2}}) \exp(n\omega s_\alpha x_2)] \} \\
& + \{ \sin [n\omega(x_1+r_\alpha x_2)] \times \text{Re} [(X_\alpha^{(n)} \lambda_{\alpha 2}) \exp(-n\omega s_\alpha x_2) \\
& + (Y_\alpha^{(n)} \overline{\lambda_{\alpha 2}}) \exp(n\omega s_\alpha x_2)] \} \quad k = 1,2,3 \quad \text{(III. 33)}
\end{aligned}$$

En posant :

$$A = n\omega(x_1+r_\alpha x_2) \quad ; \quad C = X_\alpha \exp(-n\omega s_\alpha x_2) \quad \text{et} \quad D = Y_\alpha \exp(n\omega s_\alpha x_2)$$

On aura :

$$\begin{aligned}
u_1 = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 & \{ \cos (A) \text{Re} [(-i\lambda_{\alpha 1} C) + (-i\overline{\lambda_{\alpha 1}} D)] \\
& + \sin(A) \text{Re} [(\lambda_{\alpha 1} C) + (\overline{\lambda_{\alpha 1}} D)] \} \quad \text{(III. 34)}
\end{aligned}$$

Et :

$$\begin{aligned}
u_2 = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 & \{ \cos (A) \text{Re} [(-i\lambda_{\alpha 2} C) + (-i\overline{\lambda_{\alpha 2}} D)] \\
& + \sin(A) \text{Re} [(\lambda_{\alpha 2} C) + (\overline{\lambda_{\alpha 2}} D)] \} \quad \text{(III. 35)}
\end{aligned}$$

D'où :

$$C_{k111} U_{1,1} = \left(\frac{\omega}{\pi}\right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \{ \sin(A) \operatorname{Re}[(i\lambda_{\alpha 1} C)C_{k111} + (i\overline{\lambda_{\alpha 1}}D)C_{k111}] \\ + \cos(A) \operatorname{Re}[(\lambda_{\alpha 1} C)C_{k111} + (\overline{\lambda_{\alpha 1}}D)C_{k111}] \} \quad (\text{III. 36})$$

Et :

$$C_{k121} U_{2,1} = \left(\frac{\omega}{\pi}\right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \{ \sin(A) \operatorname{Re}[(i\lambda_{\alpha 2} C)C_{k121} + (i\overline{\lambda_{\alpha 2}}D)C_{k121}] \\ + \cos(A) \operatorname{Re}[(\lambda_{\alpha 2} C)C_{k121} + (\overline{\lambda_{\alpha 2}}D)C_{k121}] \} \quad (\text{III. 37})$$

La somme des expressions (III.36) et (III.37) donne :

$$C_{k111} U_{1,1} + C_{k121} U_{2,1} \\ = \left(\frac{\omega}{\pi}\right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re}[(\lambda_{\alpha 1} C + \overline{\lambda_{\alpha 1}}D)C_{k111} + (\lambda_{\alpha 2} C + \overline{\lambda_{\alpha 2}}D)C_{k121}] (\cos(A) \\ + i\sin(A)) \quad (\text{III. 38})$$

De même :

$$C_{k112} u_{1,2} = \left(\frac{\omega}{\pi}\right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re}[(\lambda_{\alpha 1} C + \overline{\lambda_{\alpha 1}}D)(\cos(A) + i\sin(A))r_{\alpha} C_{k112}] \\ + (\lambda_{\alpha 1} C - \overline{\lambda_{\alpha 1}}D)(\cos(A) + i\sin(A)) s_{\alpha} C_{k112} \} \quad (\text{III. 39})$$

Et

$$C_{k122} u_{2,2} = \left(\frac{\omega}{\pi}\right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re}[(\lambda_{\alpha 2} C + \overline{\lambda_{\alpha 2}}D)(\cos(A) + i\sin(A))r_{\alpha} C_{k122}] \\ + (\lambda_{\alpha 2} C - \overline{\lambda_{\alpha 2}}D)(\cos(A) + i\sin(A)) s_{\alpha} C_{k122} \} \quad (\text{III. 40})$$

La somme des expressions (III.39) et (III.40) donne :

$$\begin{aligned}
& C_{k112}u_{1,2} + C_{k122}u_{2,2} \\
&= \left(\frac{\omega}{\pi}\right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} [(\lambda_{\alpha 1} C_{k112} + \lambda_{\alpha 2} C_{k122})(\cos(A) + i\sin(A))Cr_{\alpha}] \\
&+ (\overline{\lambda_{\alpha 1}} C_{k122} + \overline{\lambda_{\alpha 2}} C_{k122})(\cos(A) + i\sin(A)) Dr_{\alpha} \\
&+ (\lambda_{\alpha 1} C_{k112} + \lambda_{\alpha 2} C_{k122})(\cos(A) + i\sin(A))Cs_{\alpha} \\
&- (\overline{\lambda_{\alpha 1}} C_{k122} + \overline{\lambda_{\alpha 2}} C_{k122})(\cos(A) \\
&+ i\sin(A))Ds_{\alpha} \} \tag{III. 41}
\end{aligned}$$

Sachant que :

$$p_{\alpha} = r_{\alpha} + is_{\alpha} \quad \text{et} \quad \overline{p_{\alpha}} = r_{\alpha} - is_{\alpha}$$

L'expression (III.41) devient :

$$\begin{aligned}
& C_{k112}u_{1,2} + C_{k122}u_{2,2} \\
&= \left(\frac{\omega}{\pi}\right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} [(\lambda_{\alpha 1} C_{k112} + \lambda_{\alpha 2} C_{k122})(\cos(A) + i\sin(A))Cp_{\alpha}] \\
&+ (\overline{\lambda_{\alpha 1}} C_{k122} + \overline{\lambda_{\alpha 2}} C_{k122})(\cos(A) + i\sin(A)) Dp_{\alpha} \\
&+ (\lambda_{\alpha 1} C_{k112} + \lambda_{\alpha 2} C_{k122})(\cos(A) + i\sin(A))Cs_{\alpha} \\
&- (\overline{\lambda_{\alpha 1}} C_{k122} + \overline{\lambda_{\alpha 2}} C_{k122})(\cos(A) \\
&+ i\sin(A))Ds_{\alpha} \} \tag{III. 42}
\end{aligned}$$

Donc :

$$\begin{aligned}
\sigma_{kl} &= \left(\frac{\omega}{\pi}\right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} [(\lambda_{\alpha 1} C_{k112} + \lambda_{\alpha 2} C_{k121})(\cos(A) \\
&+ i\sin(A))C + (\overline{\lambda_{\alpha 1}} C_{k111} + \overline{\lambda_{\alpha 2}} C_{k121})(\cos(A) + i\sin(A)) D \\
&+ (\lambda_{\alpha 1} C_{k112} + \lambda_{\alpha 2} C_{k122})(\cos(A) + i\sin(A))Cp_{\alpha} \\
&+ (\overline{\lambda_{\alpha 1}} C_{k112} + \overline{\lambda_{\alpha 2}} C_{k122})(\cos(A) \\
&+ i\sin(A))C\overline{p_{\alpha}} \} \tag{III. 43}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{kl} = & \left(\frac{\omega}{\pi}\right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \cos(A) \operatorname{Re} \left\{ \left[\lambda_{\alpha 1} (C_{k111} + p_{\alpha} C_{k112}) \right. \right. \\
& + \lambda_{\alpha 2} (C_{k121} + p_{\alpha} C_{k122}) \left. \right] C + \left[\overline{\lambda_{\alpha 1}} (C_{k111} + \overline{p_{\alpha}} C_{k112}) \right. \\
& + \left. \left. \overline{\lambda_{\alpha 2}} (C_{k121} + \overline{p_{\alpha}} C_{k122}) \right] D \right\} \\
& + \sin(A) \operatorname{Re} i \left\{ \left[\lambda_{\alpha 1} (C_{k111} + p_{\alpha} C_{k112}) \right. \right. \\
& + \lambda_{\alpha 2} (C_{k121} + p_{\alpha} C_{k122}) \left. \right] C + \left[\overline{\lambda_{\alpha 1}} (C_{k111} + \overline{p_{\alpha}} C_{k112}) \right. \\
& + \left. \left. \overline{\lambda_{\alpha 2}} (C_{k121} + \overline{p_{\alpha}} C_{k122}) \right] D \right\}
\end{aligned} \tag{III. 44}$$

III.4.2.1 Expression finale du champ des contraintes

On obtient finalement l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij} = & 2g \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \cos[n\omega(x_1 + r_{\alpha} x_2)] \right. \\
& + \operatorname{Re} \left[X_{\alpha}^{(n)} L_{\alpha ij} \exp(-n\omega s_{\alpha} x_2) + Y_{\alpha}^{(n)} \overline{L_{\alpha ij}} \exp(n\omega s_{\alpha} x_2) \right] \left. \right\} \\
& + \left\{ \sin[n\omega(x_1 + r_{\alpha} x_2)] \right. \\
& + \operatorname{Re} \left[i X_{\alpha}^{(n)} L_{\alpha ij} \exp(-n\omega s_{\alpha} x_2) \right. \\
& + \left. \left. i Y_{\alpha}^{(n)} \overline{L_{\alpha ij}} \exp(n\omega s_{\alpha} x_2) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{III. 45}$$

$$\text{Avec :} \quad L_{\alpha ij} = \lambda_{ij} [C_{klj1} + p_{\alpha} C_{klj2}] \quad i, j = 1, 2, 3 \text{ et } l = 1, 2$$

Pour déterminer les valeurs des constantes complexes $X_{\alpha}^*, Y_{\alpha}^*, X_{\alpha}^+, Y_{\alpha}^+$ et Y_{α}^- , ($\alpha = 1, 2, 3$), on applique les conditions aux limites en déplacement et en contrainte pour les deux cas séparément : premier cas d'un tricouches avec un seul réseau de dislocations au niveau de l'interface CdTe / GaAs et le deuxième cas d'un tricouches avec un réseau de dislocations au niveau de l'interface GaAs / GaAs.

III.5 Premier cas : tricouches avec un seul réseau de dislocations unidirectionnel au niveau de l'interface CdTe/GaAs

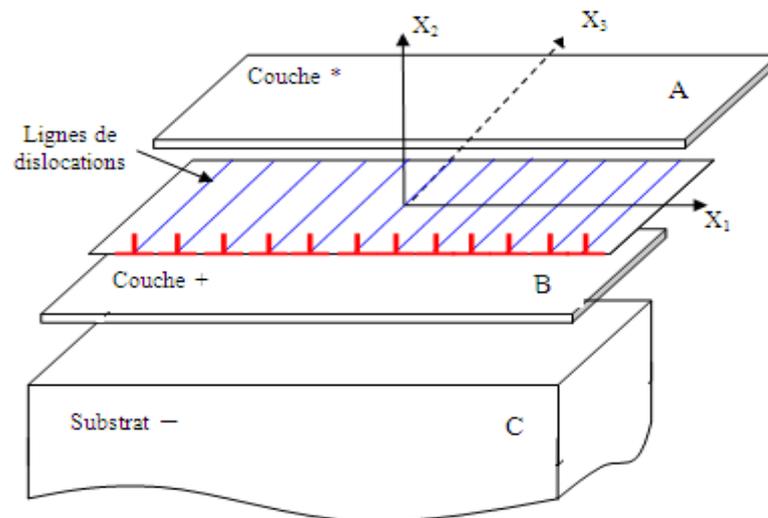


Figure III.4 - Réseau de dislocations unidirectionnel à l'interface CdTe/GaAs.

III.5.1 Conditions aux limites

III.5.1.1 Conditions aux limites en déplacement

Nous admettons ici que les interfaces sont planes, et sont siège de deux familles de dislocations intrinsèques réparties périodiquement et que le champ des déplacements est périodique, de période Λ .

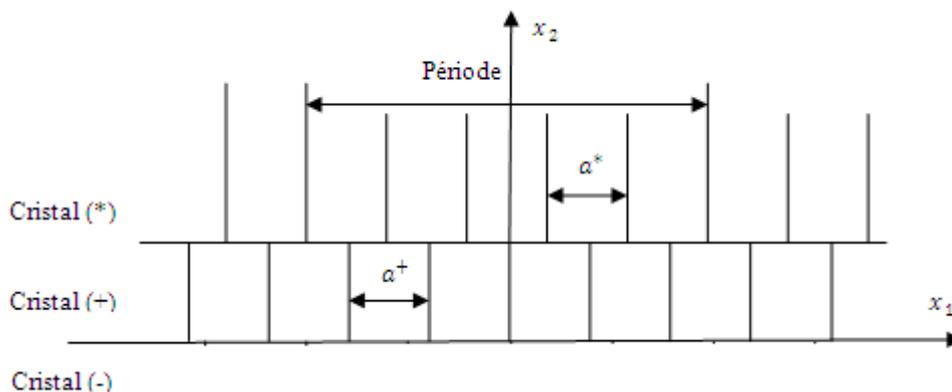


Figure III.5 - Représentation des dislocations intrinsèques réparties périodiquement le long de l'interface CdTe / GaAs.

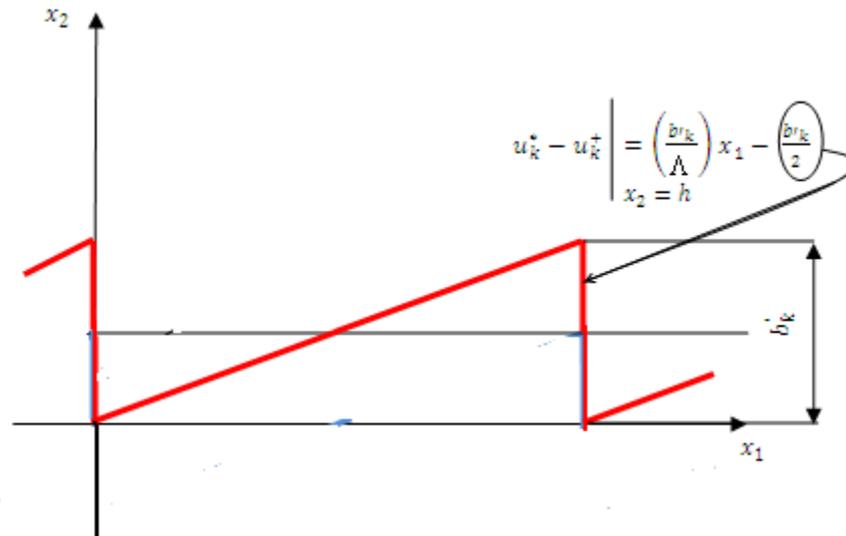


Figure III.6 - Courbe en dents de scie relative aux dislocations intrinsèques placées à la première interface CdTe / GaAs

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

$$u_k^* - u_k^+ = \left(\frac{b'_k}{\Lambda} \right) x_1 - \frac{b'_k}{2} \tag{III. 46}$$

III.5.1.2 Conditions aux limites en contrainte

Les conditions en contraintes considérées sont :

a/ La continuité des contraintes normales à l'interface impose la relation suivante:

$$[\sigma_{2k}^*]_{x_2=h} = [\sigma_{2k}^+]_{x_2=h} \tag{III. 47}$$

Cette condition traduit l'équilibre des deux cristaux à l'interface.

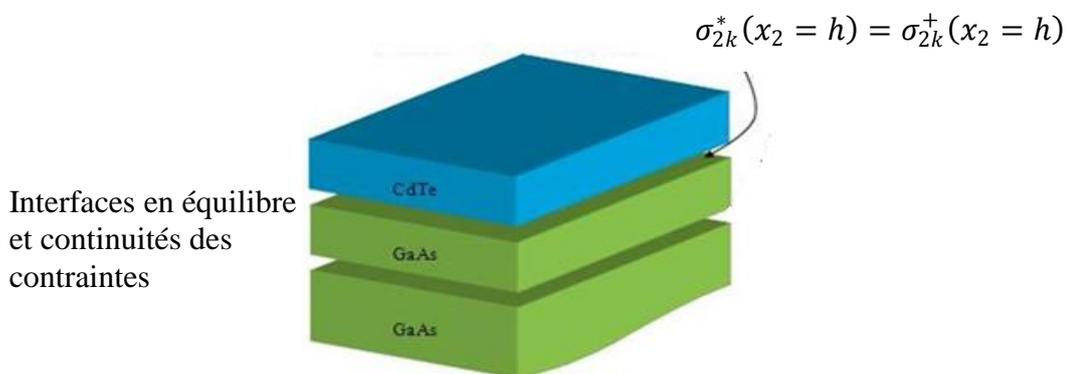


Figure III.7 - Conditions aux limites en contraintes.

b/ Les surfaces du tricouche étant en équilibre, on peut affirmer que les composantes normales du tenseur de contraintes sont nulles pour $x_2 = h^*$, ce qui donne :

$$[\sigma_{2k}^*]_{x_2=h^*} = 0 \quad (\text{III. 48})$$

c/ Condition d'équilibre à la surface libre $x_2 = h^*$

$$\left[\frac{\partial \sigma_{2k}^*}{\partial x_1} \right]_{x_2=h^*} = 0 \quad (\text{III. 49})$$

III.6 Deuxième cas : tricouches avec un réseau de dislocations carré au niveau de l'interface GaAs / GaAs

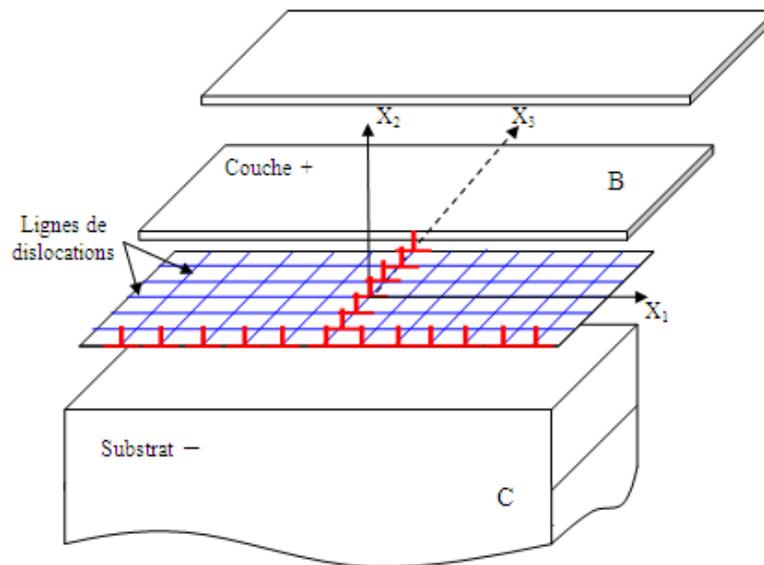


Figure III.8 - Réseau de dislocations carré à l'interface GaAs/GaAs

III.6.1 Conditions aux limites

III.6.1.1 Conditions aux limites en déplacement

Même supposition déjà considéré dans le premier cas concernant la planéité d'interface.

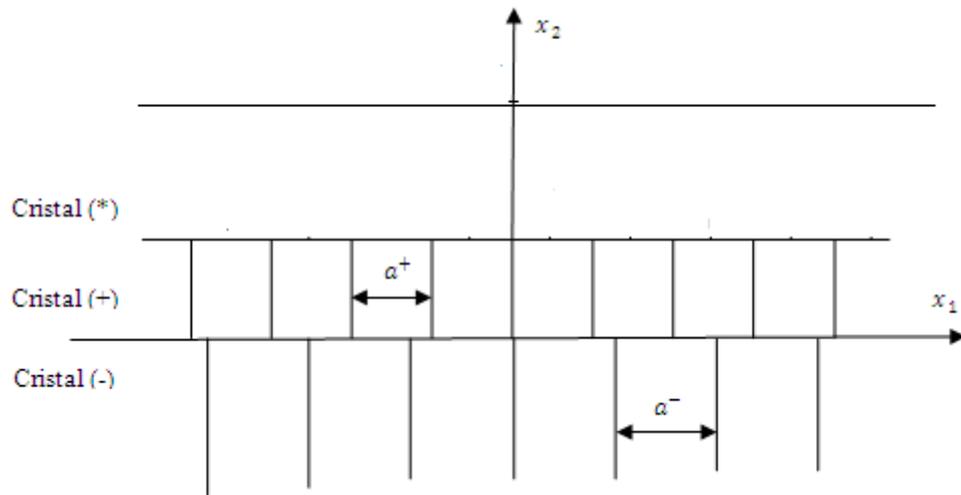


Figure III.9 - Représentation des dislocations intrinsèques réparties périodiquement le long de l'interface GaAs / GaAs.

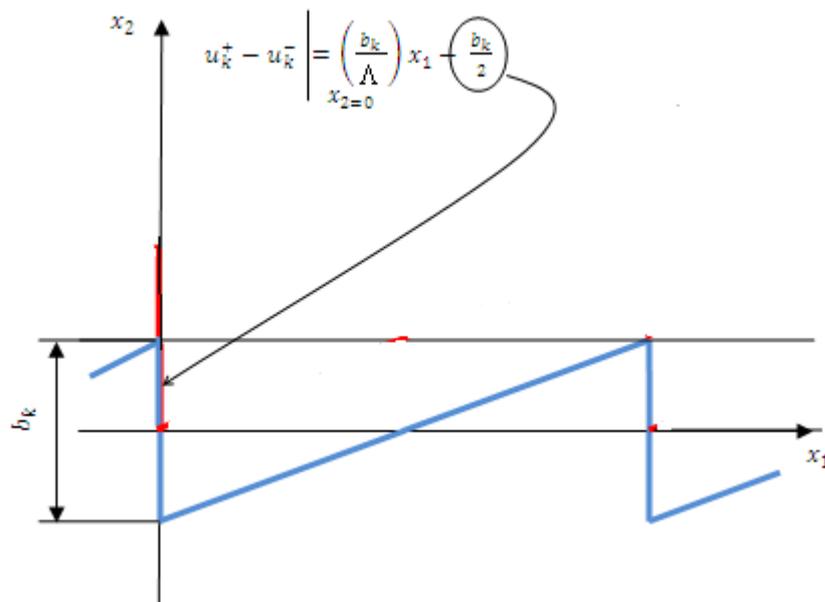


Figure III.10 - Courbe en dents de scie relative aux dislocations intrinsèques placées à la deuxième interface GaAs / GaAs

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

$$u_k^* - u_k^+ = \left(\frac{b'_k}{\Lambda}\right) x_1 - \frac{b'_k}{2} \tag{ III. 50}$$

Tels que u_k^* et u_k^+ représentent respectivement les champs de déplacements du cristal supérieur ($x_2 > 0$) et cristal intermédiaire ($x_2 > 0$). Comme le déplacement relatif $\Delta u_k(x_1)$ est périodique le long de l'axe Ox_1 , il peut être développé en séries de Fourier :

$$\Delta u_k(x_1) = \sum_{-\infty}^{+\infty} C_k^{(n)} \exp\left(\frac{2i\pi n}{\Lambda} x_1\right) dx_1 \quad (\text{III. 50. a})$$

Avec :

$$C_k^{(n)} = \frac{1}{\Lambda} \int_{x_0}^{x_0+\Lambda} \Delta u_k(x_1) \exp\left(\frac{2i\pi n}{\Lambda} x_1\right) dx_1 \quad (\text{III. 50. b})$$

Après calcul de $C_k^{(n)}$, Δu_k s'écrit :

$$\Delta u_k(x_1) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{ib_k}{2\pi n}\right) \exp\left(\frac{2i\pi n}{\Lambda} x_1\right) \quad (\text{III. 50. c})$$

Et comme $\Delta u_k(x_1)$ est réel, il s'écrit :

$$\Delta u_k(x_1) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{-b_k}{\pi n}\right) \sin\left(\frac{2\pi n}{\Lambda} x_1\right) \quad (\text{III. 50. d})$$

III.6.1.2 Conditions aux limites en contrainte

Les conditions en contraintes considérées sont :

a/ La continuité des contraintes normales à l'interface impose la relation suivante:

$$[\sigma_{2k}^+]_{x_2=0} = [\sigma_{2k}^-]_{x_2=0} \quad (\text{III. 51})$$

Cette condition traduit l'équilibre des deux cristaux à l'interface.

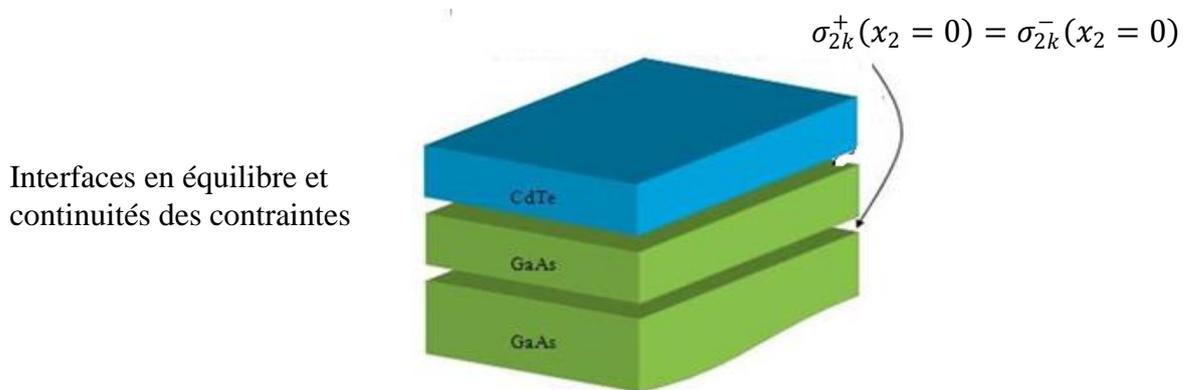


Figure III.11 - Conditions aux limites en contraintes.

b/ Les surfaces du tricouche étant en équilibre, on peut affirmer que les composantes normales du tenseur de contraintes sont nulles pour $x_2 = -h^-$, ce qui donne :

$$[\sigma_{2k}^-]_{x_2=-h^-} = 0 \quad (\text{III.52})$$

c/ Condition d'équilibre à la surface libre $x_2 = -h^-$

$$\left[\frac{\partial \sigma_{2k}^-}{\partial x_1} \right]_{x_2=-h^-} = 0 \quad (\text{III.53})$$

III. 6.2 Champ élastique d'un réseau carré de dislocation par le principe de superposition

En se basant sur le principe de superposition, le champ élastique de deux réseaux parallèles de dislocations sur la même interface peut être résolu simplement en considérant que la deuxième famille II peut être déduite de la première famille I par rotation de $+\pi/2$, (Figure. III.12).

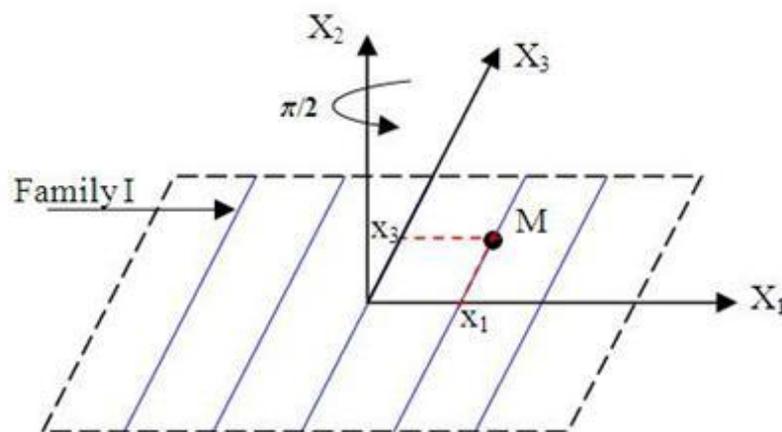


Figure III.12 - Configuration de la première famille de dislocations unidirectionnelles

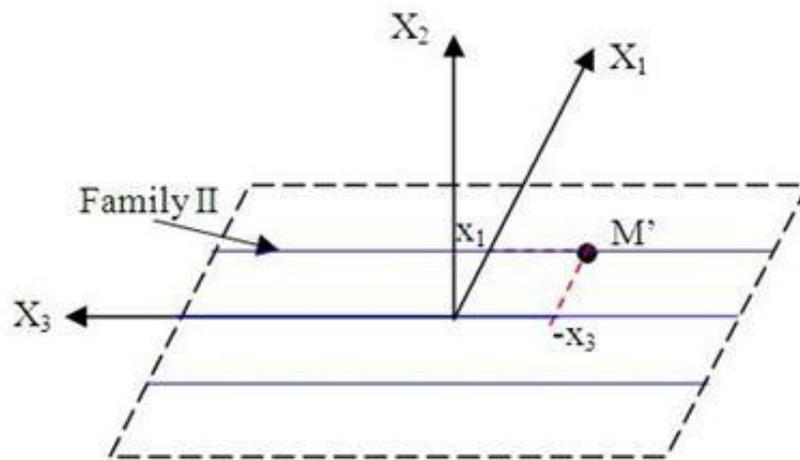


Figure III.13 - Configuration de la deuxième famille de dislocations unidirectionnelles

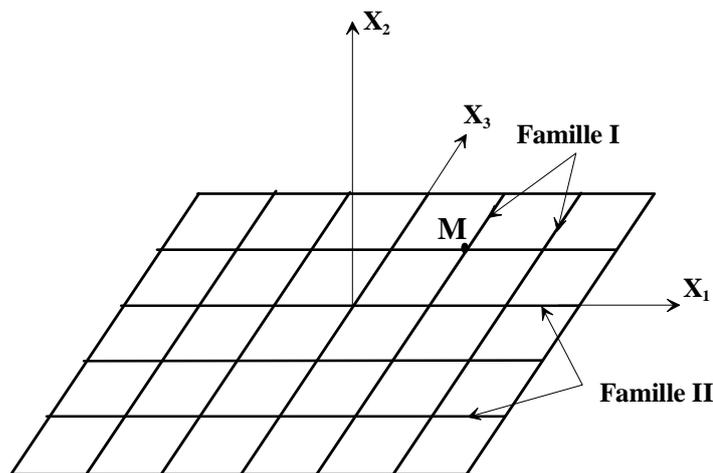


Figure III.14 - Représentation du réseau carré de dislocations par le principe de superposition

III.6.2.1 Champ des déplacements

En notant $u_k(x_1, x_2, x_3)$ le champ des déplacements lié au réseau de dislocations de la famille **I** (Figure III.12) pour laquelle les dislocations ont un vecteur de burgers b_k .

Construisons une autre famille **II** de dislocations (Figure III.13), déduite de la précédente par rotation de $+\pi/2$ autour de Ox_2 . Au point $M'(-x_3, x_2, x_1)$ correspond donc le point $M(x_1, x_2, x_3)$. Le champ des déplacements total u_k^T se déduit de l'addition des champs des familles I et II. La contribution de la famille II est donnée par l'équation matricielle suivante :

$$\left[u_k^{\text{II}}(M) \right] = [R] \left[u_k^{\text{II}}(M') \right] \quad (\text{III. 54})$$

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

$$[R] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{III. 55})$$

Et comme $\left[u_k^{\text{II}}(M') \right]$ n'est rien d'autre que u_k défini au point M' $(-x_3, x_2, x_1)$.

Alors on écrit : $\left[u_k^{\text{II}}(M') \right] = \left[u_k^{\text{I}}(M') \right]$

Ainsi on aura $\left[u_k^{\text{II}}(M) \right] = [R] \left[u_k^{\text{I}}(M') \right]$

$$\text{D'où } \left[u_k^{\text{II}}(M) \right] = \begin{bmatrix} u_3^{\text{I}}(M') \\ u_2^{\text{I}}(M') \\ -u_1^{\text{I}}(M') \end{bmatrix} \quad \text{Avec : } \begin{cases} u_1^{\text{II}}(x_1, x_2, x_3) = u_3^{\text{I}}(-x_3, x_2, x_1) \\ u_2^{\text{II}}(x_1, x_2, x_3) = u_2^{\text{I}}(-x_3, x_2, x_1) \\ u_3^{\text{II}}(x_1, x_2, x_3) = -u_1^{\text{I}}(-x_3, x_2, x_1) \end{cases} \quad (\text{III. 56})$$

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

$$\begin{bmatrix} u_1^{\text{T}} \\ u_2^{\text{T}} \\ u_3^{\text{T}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1(M) + u_3(M') \\ u_2(M) + u_2(M') \\ u_3(M) - u_1(M') \end{bmatrix} \quad (\text{III. 57})$$

Avec :

$u_k(M)$ donné par (III.28) et calculé pour la 1^{ère} famille de dislocations.

$u_k(M')$ donné par la même expression (III.28) mais calculé pour la 2^{ème} famille de dislocations.

III.6.2.2 Champ des contraintes

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

$$[\sigma_{ij}^{II}(M)] = [R] [\sigma_{ij}^I(M')] [R]^{-1} = \begin{bmatrix} \sigma_{33}^I(M') & \sigma_{23}^I(M') & -\sigma_{13}^I(M') \\ \sigma_{23}^I(M') & \sigma_{22}^I(M') & -\sigma_{12}^I(M') \\ -\sigma_{13}^I(M') & -\sigma_{12}^I(M') & \sigma_{11}^I(M') \end{bmatrix} \quad (III. 58)$$

Enfin nous obtenons le champ des contraintes total.

$$[\sigma_{ij}^T(M)] = \begin{bmatrix} \sigma_{11}^I(M) + \sigma_{33}^I(M') & \sigma_{12}^I(M) + \sigma_{23}^I(M') & \sigma_{13}^I(M) - \sigma_{13}^I(M') \\ \sigma_{12}^I(M) + \sigma_{23}^I(M') & \sigma_{22}^I(M) + \sigma_{22}^I(M') & \sigma_{23}^I(M) - \sigma_{12}^I(M') \\ \sigma_{13}^I(M) - \sigma_{13}^I(M') & \sigma_{23}^I(M) - \sigma_{12}^I(M') & \sigma_{33}^I(M) + \sigma_{11}^I(M') \end{bmatrix} \quad (III. 59)$$

III.7 Système d'équations et matrice associée

En affectant l'exposant n, les inconnues complexes $X_\alpha^*, Y_\alpha^*, X_\alpha^+, Y_\alpha^+$ et Y_α^- sont donc les solutions du système linéaire à équations réelles obtenues par combinaison des expressions des déplacements (III.28) et des contraintes (III.45) avec les conditions aux limites (III.46) à (III.53).

III.7.1 Première interface CdTe / GaAs

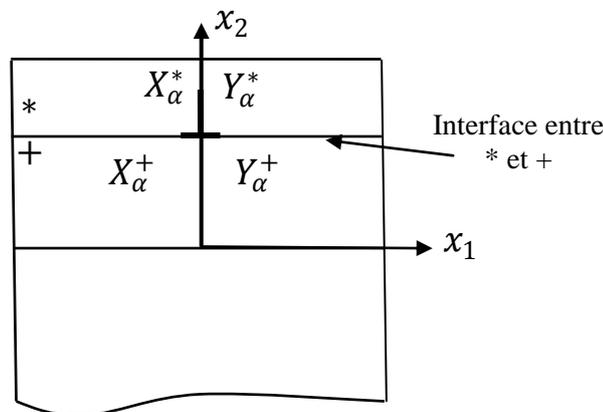


Figure III.15 - Configuration de la première interface entre (*) et (+)

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[- \left(X_{\alpha}^* \lambda_{\alpha k}^* - X_{\alpha}^+ \lambda_{\alpha k}^+ - Y_{\alpha}^+ \overline{\lambda_{\alpha k}^+} \right) \right] = b'_k$$

$$\operatorname{Re} i \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_{\alpha}^* \lambda_{\alpha k}^* - X_{\alpha}^+ \lambda_{\alpha k}^+ - Y_{\alpha}^+ \overline{\lambda_{\alpha k}^+} \right) \right] = 0$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_{\alpha}^* \lambda_{\alpha k}^* E_1 \right) (C_1 + iS_1) - \left(X_{\alpha}^+ \lambda_{\alpha k}^+ E_3 \right) (C_2 + iS_2) - \left(Y_{\alpha}^+ \overline{\lambda_{\alpha k}^+} E_4 \right) (C_2 + iS_2) \right] = 0$$

$$\operatorname{Re} i \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_{\alpha}^* L_{\alpha 2k}^* E_1 \right) (S_1 - iC_1) - \left(X_{\alpha}^+ L_{\alpha 2k}^+ E_3 \right) (S_2 - iC_2) - \left(Y_{\alpha}^+ \overline{L_{\alpha 2k}^+} E_4 \right) (S_2 - iC_2) \right] = 0$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_{\alpha}^* L_{\alpha 2k}^* E_1 \right) (C_1 + iS_1) - \left(X_{\alpha}^+ L_{\alpha 2k}^+ E_3 \right) (C_2 + iS_2) - \left(Y_{\alpha}^+ \overline{L_{\alpha 2k}^+} E_4 \right) (C_2 + iS_2) \right] = 0$$

$$\operatorname{Re} i \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_{\alpha}^* L_{\alpha 2k}^* E_1 \right) (S_1 - iC_1) - \left(X_{\alpha}^+ L_{\alpha 2k}^+ E_3 \right) (S_2 - iC_2) - \left(Y_{\alpha}^+ \overline{L_{\alpha 2k}^+} E_4 \right) (S_2 - iC_2) \right] = 0$$

Posons :

$$X_{\alpha}^+ = A_{\alpha}^+ + iB_{\alpha}^+ \quad ; \quad X_{\alpha}^* = A_{\alpha}^* + iB_{\alpha}^* \quad ; \quad Y_{\alpha}^+ = C_{\alpha}^+ + iD_{\alpha}^+ \quad \text{et} \quad Y_{\alpha}^- = C_{\alpha}^- + iD_{\alpha}^-$$

Avec :

$$C_1 = \cos(n\omega r_{\alpha}^* h)$$

$$\lambda_{\alpha k}^* = \lambda_{\alpha k}^{r*} + i\lambda_{\alpha k}^{i*}$$

$$C_2 = \cos(n\omega r_{\alpha}^+ h)$$

$$\lambda_{\alpha k}^+ = \lambda_{\alpha k}^{r+} + i\lambda_{\alpha k}^{i+}$$

$$S_1 = \sin(n\omega r_{\alpha}^* h)$$

$$\lambda_{\alpha k}^- = \lambda_{\alpha k}^{r-} + i\lambda_{\alpha k}^{i-}$$

$$S_2 = \sin(n\omega r_{\alpha}^+ h)$$

$$\overline{\lambda_{\alpha k}^*} = \lambda_{\alpha k}^{r*} - i\lambda_{\alpha k}^{i*}$$

$$E_1 = \exp(-n\omega s_{\alpha}^* h)$$

$$\overline{\lambda_{\alpha k}^+} = \lambda_{\alpha k}^{r+} - i\lambda_{\alpha k}^{i+}$$

$$E_3 = \exp(-n\omega s_{\alpha}^+ h)$$

$$\overline{\lambda_{\alpha k}^-} = \lambda_{\alpha k}^{r-} - i\lambda_{\alpha k}^{i-}$$

$$E_4 = \exp(n\omega s_{\alpha}^+ h)$$

$$G_{\alpha k} = E_1 (L_{\alpha 2k}^{r*} C_1 - L_{\alpha 2k}^{i*} S_1)$$

$$H_{\alpha k} = -E_1 (L_{\alpha 2k}^{i*} C_1 + L_{\alpha 2k}^{r*} S_1)$$

$$I_{\alpha k} = -E_3 (L_{\alpha 2k}^{r+} C_2 - L_{\alpha 2k}^{i+} S_2)$$

$$M_{\alpha k} = E_3 (L_{\alpha 2k}^{i+} C_2 + L_{\alpha 2k}^{r+} S_2)$$

$$N_{\alpha k} = -E_4 (L_{\alpha 2k}^{r+} C_2 + L_{\alpha 2k}^{i+} S_2)$$

$$T_{\alpha k} = -E_4 (L_{\alpha 2k}^{i+} C_2 - L_{\alpha 2k}^{r+} S_2)$$

On obtient ainsi le système suivant :

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^3 - A_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{r+} + B_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{i+} - C_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{r+} - D_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{i+} + C_{\alpha}^{-} \lambda_{\alpha k}^{r-} + D_{\alpha}^{-} \lambda_{\alpha k}^{i-} = 0 \\
& \sum_{\alpha=1}^3 - A_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{i+} - B_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{r+} + C_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{i+} - D_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{r+} - C_{\alpha}^{-} \lambda_{\alpha k}^{i-} + D_{\alpha}^{-} \lambda_{\alpha k}^{r-} = 0 \\
& \sum_{\alpha=1}^3 - A_{\alpha}^{*} \lambda_{\alpha k}^{*} - i B_{\alpha}^{*} \lambda_{\alpha k}^{*} + A_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{+} + i B_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{+} + C_{\alpha}^{+} \overline{\lambda_{\alpha k}^{+}} + i D_{\alpha}^{+} \overline{\lambda_{\alpha k}^{+}} = b'_k \\
& \sum_{\alpha=1}^3 A_{\alpha}^{*} \lambda_{\alpha k}^{*} + i B_{\alpha}^{*} \lambda_{\alpha k}^{*} - A_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{+} - i B_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{+} - C_{\alpha}^{+} \overline{\lambda_{\alpha k}^{+}} - i D_{\alpha}^{+} \overline{\lambda_{\alpha k}^{+}} = 0 \tag{III. 60} \\
& \sum_{\alpha=1}^3 A_{\alpha}^{*} G_{\alpha k} + B_{\alpha}^{*} H_{\alpha k} + A_{\alpha}^{+} I_{\alpha k} + B_{\alpha}^{+} M_{\alpha k} + C_{\alpha}^{+} N_{\alpha k} + D_{\alpha}^{+} T_{\alpha k} = 0 \\
& \sum_{\alpha=1}^3 - A_{\alpha}^{*} H_{\alpha k} + B_{\alpha}^{*} G_{\alpha k} - A_{\alpha}^{+} M_{\alpha k} + B_{\alpha}^{+} I_{\alpha k} - C_{\alpha}^{+} T_{\alpha k} + D_{\alpha}^{+} N_{\alpha k} = 0 \\
& \sum_{\alpha=1}^3 A_{\alpha}^{+} L_{\alpha 2k}^{r+} + B_{\alpha}^{+} L_{\alpha 2k}^{i+} + C_{\alpha}^{+} L_{\alpha 2k}^{r+} + D_{\alpha}^{+} L_{\alpha 2k}^{i-} - C_{\alpha}^{-} L_{\alpha 2k}^{r-} - D_{\alpha}^{-} L_{\alpha 2k}^{i-} = 0 \\
& \sum_{\alpha=1}^3 - A_{\alpha}^{+} L_{\alpha 2k}^{i+} - B_{\alpha}^{+} L_{\alpha 2k}^{r+} + C_{\alpha}^{+} L_{\alpha 2k}^{i+} - D_{\alpha}^{+} L_{\alpha 2k}^{r+} - C_{\alpha}^{-} L_{\alpha 2k}^{i-} + D_{\alpha}^{-} L_{\alpha 2k}^{r-} = 0
\end{aligned}$$

En posant :

$$P_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{r+} AC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i+} AS(\alpha)] \text{Expon1}(\alpha)$$

$$Q_{\alpha k} = -[L_{\alpha 2k}^{i+} AC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{r+} AS(\alpha)] \text{Expon1}(\alpha)$$

$$R_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{r+} AC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i+} AS(\alpha)] \text{Expon2}(\alpha)$$

$$S_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{i+} AC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r+} AS(\alpha)] \text{Expon2}(\alpha)$$

$$E_{\alpha k} = -[L_{\alpha 2k}^{r+} AS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i+} AC(\alpha)] \text{Expon1}(\alpha)$$

$$F_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{i+} AS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r+} AC(\alpha)] \text{Expon1}(\alpha)$$

$$G_{\alpha k} = [-L_{\alpha 2k}^{r+} AS(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i+} AC(\alpha)] \text{Expon2}(\alpha)$$

$$H_{\alpha k} = -[L_{\alpha 2k}^{i+} AS(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{r+} AC(\alpha)] \text{Expon2}(\alpha)$$

$$I_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{r-} BC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i-} BS(\alpha)] \text{Expon3}(\alpha)$$

$$K_{\alpha k} = [-L_{\alpha 2k}^{i-} BC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r-} BS(\alpha)] Expon3(\alpha)$$

$$M_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{r-} BC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i-} BS(\alpha)] Expon4(\alpha)$$

$$N_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{i-} BC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r-} BS(\alpha)] Expon4(\alpha)$$

$$T_{\alpha k} = [-L_{\alpha 2k}^{r-} BS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i-} BC(\alpha)] Expon3(\alpha)$$

$$V_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{i-} BS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r-} BC(\alpha)] Expon3(\alpha)$$

$$W_{\alpha k} = [-L_{\alpha 2k}^{r-} BS(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i-} BC(\alpha)] Expon4(\alpha)$$

$$Z_{\alpha k} = [-L_{\alpha 2k}^{i-} BS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r-} BC(\alpha)] Expon4(\alpha)$$

III.7.2 Deuxième interface GaAs/GaAs

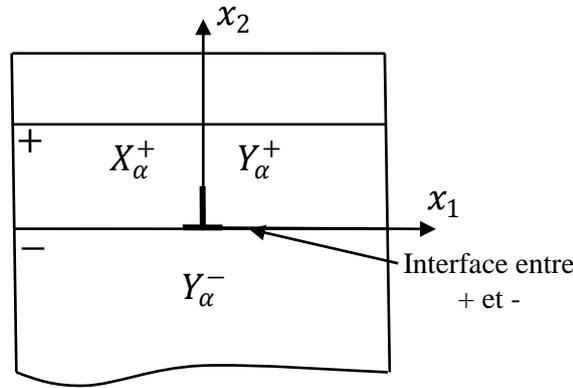


Figure III.16 - Configuration de la deuxième interface entre (+) et (-)

$$Re \sum_{\alpha=1}^3 \left[- \left(X_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{+} + Y_{\alpha}^{+} \overline{\lambda_{\alpha k}^{+}} \right) + \left(Y_{\alpha}^{-} \overline{\lambda_{\alpha k}^{-}} \right) \right] = b_k$$

$$Re i \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{+} + Y_{\alpha}^{+} \overline{\lambda_{\alpha k}^{+}} \right) - \left(Y_{\alpha}^{-} \overline{\lambda_{\alpha k}^{-}} \right) \right] = 0$$

$$Re \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_{\alpha}^{+} L_{\alpha 2k}^{+} + Y_{\alpha}^{+} \overline{L_{\alpha 2k}^{+}} \right) + \left(Y_{\alpha}^{-} \overline{\lambda_{\alpha 2k}^{-}} \right) \right] = 0$$

$$Re i \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_{\alpha}^{+} L_{\alpha 2k}^{+} + Y_{\alpha}^{+} \overline{L_{\alpha 2k}^{+}} \right) + \left(Y_{\alpha}^{-} \overline{\lambda_{\alpha 2k}^{-}} \right) \right] = 0$$

III.8 Expressions des déplacements et contraintes avec les conditions aux limites

Les constantes complexes (X_α^* , Y_α^* , X_α^+ , Y_α^+ et Y_α^-) sont les solutions du système linéaire à 30 équations réelles obtenues par combinaison des expressions des déplacements et des contraintes avec les conditions aux limites :

a) La première condition de discontinuité à $x_2 = 0$ en déplacement (III.50) au niveau de la deuxième interface GaAs /GaAs se traduit par l'expression suivante :

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 -(X_\alpha^+ \lambda_{\alpha k}^+ + Y_\alpha^+ \bar{\lambda}_{\alpha k}^+) + Y_\alpha^- \bar{\lambda}_{\alpha k}^- = \mathbf{b}_k$$

$$\operatorname{Re} i \sum_{\alpha=1}^3 -(X_\alpha^+ \lambda_{\alpha k}^+ + Y_\alpha^+ \bar{\lambda}_{\alpha k}^+) - Y_\alpha^- \bar{\lambda}_{\alpha k}^- = 0$$

b) La deuxième condition représente la discontinuité à $x_2 = h$ en déplacement (III.46) au niveau de la première interface entre CdTe/GaAs :

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 -(X_\alpha^* \lambda_{\alpha k}^* + Y_\alpha^* \bar{\lambda}_{\alpha k}^*) + (X_\alpha^+ \lambda_{\alpha k}^+ + Y_\alpha^+ \bar{\lambda}_{\alpha k}^+) = \mathbf{b}'_k$$

$$\operatorname{Re} i \sum_{\alpha=1}^3 (X_\alpha^* \lambda_{\alpha k}^* + Y_\alpha^* \bar{\lambda}_{\alpha k}^*) - (X_\alpha^+ \lambda_{\alpha k}^+ + Y_\alpha^+ \bar{\lambda}_{\alpha k}^+) = 0$$

c) La troisième condition est celle de la continuité à $x_2 = h^+$ au niveau de l'interface CdTe /GaAs :

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 X_\alpha^* L_{\alpha 2k}^* E_1 (C_1 + iS_1) + (Y_\alpha^* \bar{L}_{\alpha 2k}^* E_2) (C_1 + iS_1) -$$

$$(X_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^+ E_3) (C_2 + iS_2) - (Y_\alpha^+ \bar{L}_{\alpha 2k}^+ E_4) (C_2 + iS_2) = 0$$

$$\operatorname{Re} i \sum_{\alpha=1}^3 X_\alpha^* L_{\alpha 2k}^* E_1 (S_1 - iC_1) + (Y_\alpha^* \bar{L}_{\alpha 2k}^* E_2) (S_1 - iC_1)$$

$$- (X_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^+ E_3) (S_2 - iC_2) - (Y_\alpha^+ \bar{L}_{\alpha 2k}^+ E_4) (S_2 - iC_2) = 0$$

d) La quatrième condition est une condition de continuité des contraintes pour $x_2 = 0$ au niveau de l'interface GaAs /GaAs :

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 (X_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^+ + Y_\alpha^+ \bar{L}_{\alpha 2k}^+) - Y_\alpha^- \bar{L}_{\alpha 2k}^- = 0$$

$$\operatorname{Re} i \sum_{\alpha=1}^3 -(X_\alpha^+ L_{\alpha 2k}^+ + Y_\alpha^+ \bar{L}_{\alpha 2k}^+) - Y_\alpha^- \bar{L}_{\alpha 2k}^- = 0$$

e) De même, la cinquième condition concerne la contrainte normale nulle à la surface libre pour $x_2 = h^*$:

$$\operatorname{Re} i \sum_{\alpha=1}^3 (X_{\alpha}^* L_{\alpha 2k}^* E_5 + Y_{\alpha}^* \bar{L}_{\alpha 2k}^* E_6) EC$$

$$- (X_{\alpha}^* L_{\alpha 2k}^* E_5 + Y_{\alpha}^* \bar{L}_{\alpha 2k}^* E_6) ES = 0$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 (X_{\alpha}^* L_{\alpha 2k}^* E_5 + Y_{\alpha}^* \bar{L}_{\alpha 2k}^* E_6) EC$$

$$+ (X_{\alpha}^* L_{\alpha 2k}^* E_5 + Y_{\alpha}^* \bar{L}_{\alpha 2k}^* E_6) ES = 0$$

Après développement de ces différentes conditions, on obtiendra un système d'équations qui s'écrit sous la forme d'un produit matriciel :

$$AX = B \tag{III. 61}$$

Où la matrice colonne X (A^+ , A^- , B^+ , B^- , C^+ , C^- , D^+ et D^-) renferme ces inconnues complexes. Ce système sera résolu numériquement en utilisant une approche analytique basée sur les séries de Fourier double. [6]

III.9 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté la géométrie du problème qui est un tricouche A/B/C sous l'effet de deux réseaux de dislocations intrinsèques unidirectionnel et carré ainsi que toutes les conditions aux limites quelles soient de déplacements ou de contraintes, ensuite le développement de la formulation mathématique qui se base sur les séries de Fourier dans le cas de l'élasticité anisotrope. Cette formulation conduit à un système d'équations linéaires et une fois ce système est résolu, on obtient toutes les expressions finales des déplacements et des contraintes.

Chapitre IV

Applications numériques

IV.1 Introduction

Dans ce travail, nous allons réaliser des calculs par simulation numérique pour déterminer les champs des déplacements ainsi que les iso valeurs pour un matériau tricouches anisotrope sous l'effet de deux réseaux de dislocations placés aux interfaces : le premier, parallèle au niveau de l'hétérostructure CdTe/GaAs ; le deuxième, carré entre le GaAs/GaAs. Ensuite nous allons tracer les différents graphes afin de voir le comportement du matériau tricouches.

IV.2 Expérimentation numérique

Pour la résolution du problème, nous avons élaboré un programme **MATHEMATICA** permettant :

1- la détermination de la matrice de passage du système cristallin au système de travail et par conséquent la détermination des valeurs des constantes élastiques C_{ij} de chaque cristal dans le nouveau repère ;

2- le calcul des parties réelles et imaginaires des six racines complexes p_α du polynôme du sixième degré obtenu en combinant la loi de Hooke et la condition d'équilibre.

3- le calcul des constantes complexes $\lambda_{\alpha k}$ ($k = 1,3$) ainsi que les $L_{\alpha 2k}$, pour chaque p_α ;

4- l'inversion numérique du système global (III.60) obtenu à partir des conditions aux limites ;

5- le calcul des constantes inconnues $X_\alpha^*, Y_\alpha^*, X_\alpha^+, Y_\alpha^+$ et Y_α^- ;

6- la réinjection de ces constantes dans les expressions des déplacements, des déformations, des contraintes et de l'énergie pour les calculer numériquement.

La concrétisation de ce travail ne pourra se faire qu'à la lumière d'applications numériques adéquates permettant d'un côté, la validation de notre approche analytique, et d'un autre côté, rendre crédible le modèle mathématique.

Avant d'entamer cela, il est nécessaire de procéder tout d'abord à la validation de notre programme numérique.

IV.2.1 Organigramme global du programme

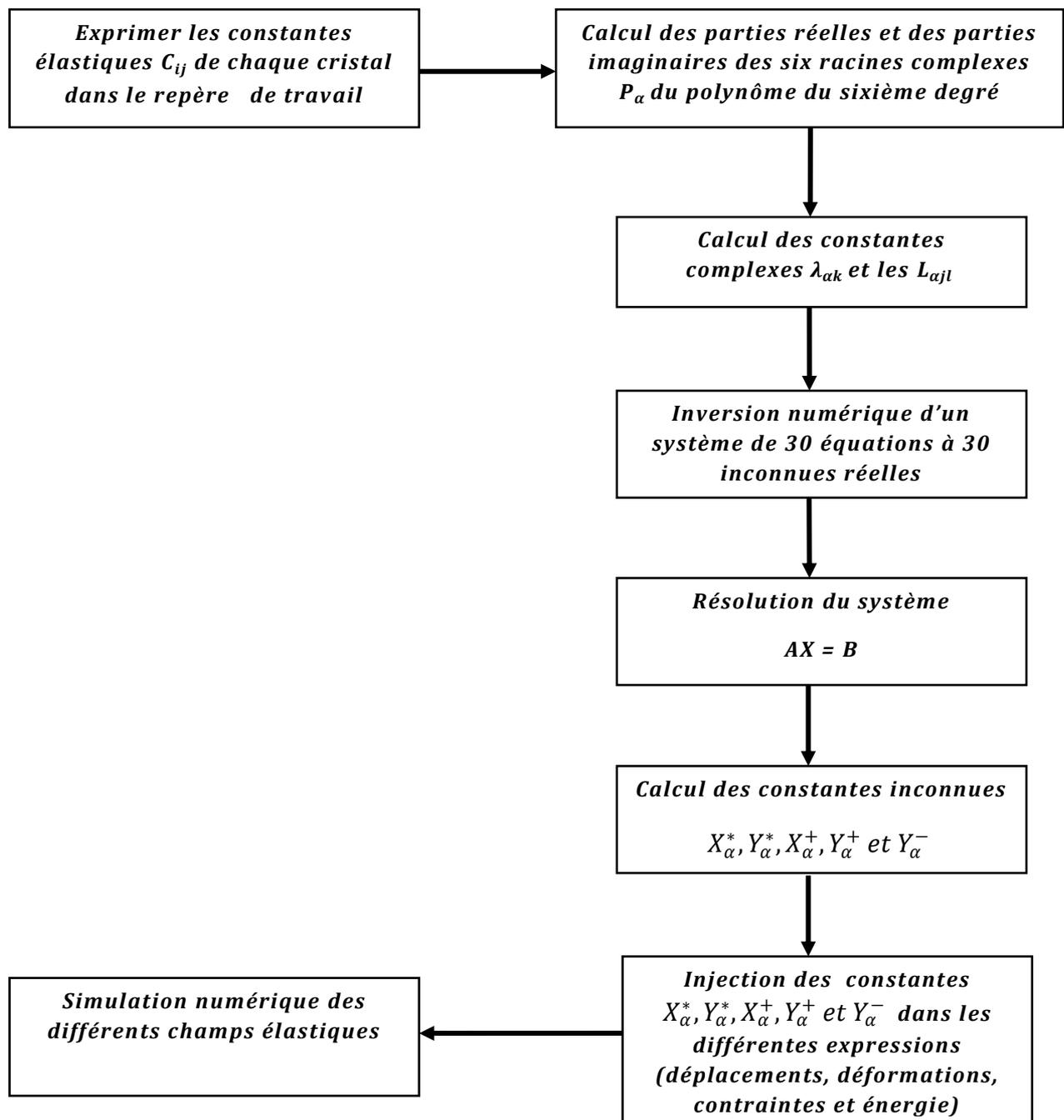


Figure IV.1 - Organigramme général du programme.

IV.3 Géométrie du problème

Le problème illustré par la figure IV.2 correspond à la mise en contact de deux couches d'épaisseurs limitées A et B représentant un bilame mince sur un milieu C semi infini qui est le substrat. Les trois milieux élastiquement anisotropes caractérisés par leurs constantes élastiques et

leurs épaisseurs h^+ , h^- et h^* , sont séparés par deux interfaces planes comprenant deux réseaux de dislocations au niveau de CdTe/GaAs et GaAs/GaAs avec une période de réseau $1/g$.

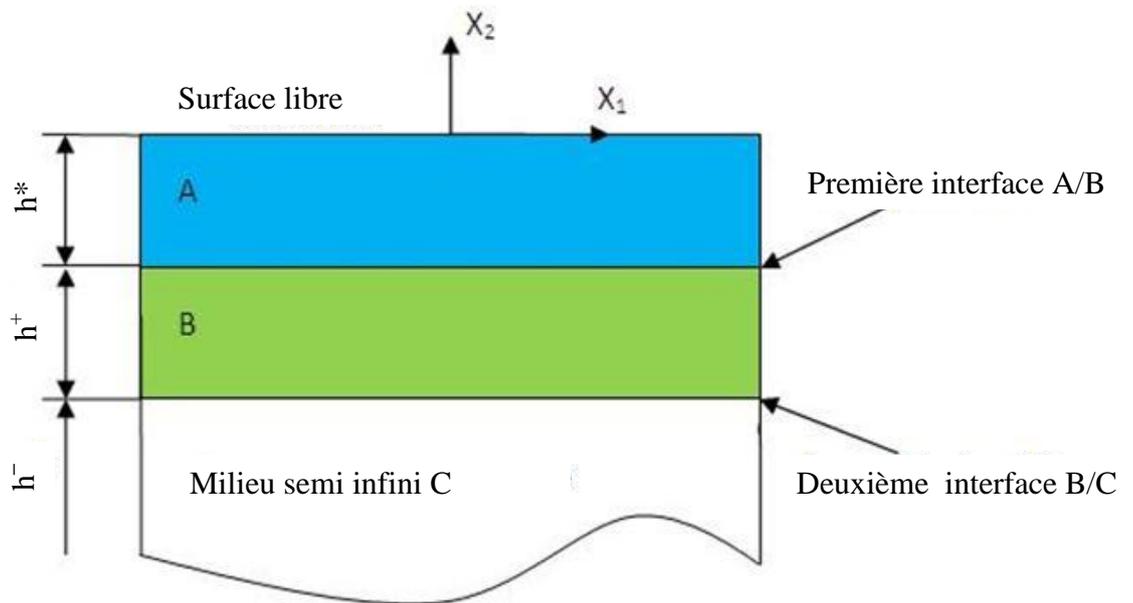


Figure IV.2- Matériau tricouche CdTe/GaAs/GaAs sous l'effet de deux réseaux de dislocations unidirectionnel et carré.

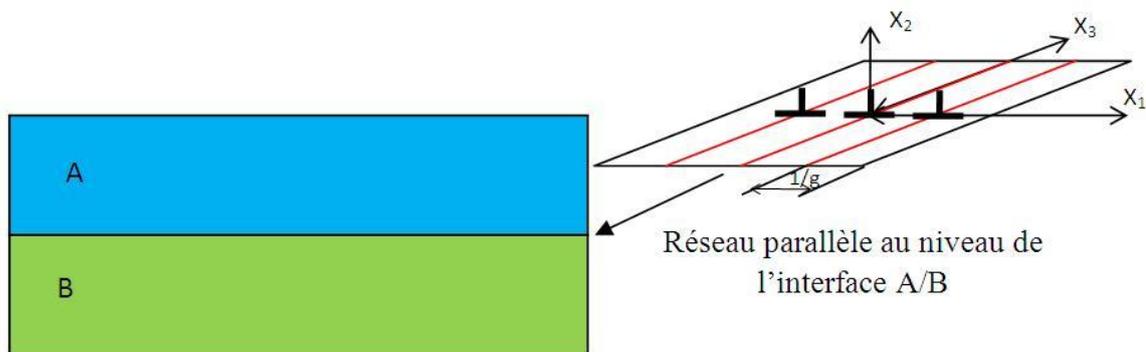


Figure IV.3- Réseau de dislocations unidirectionnel.

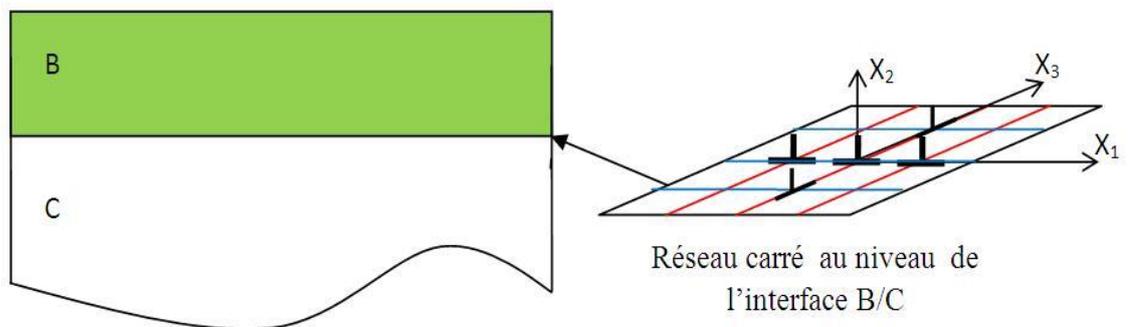


Figure IV.4 - Réseau de dislocations carré.

IV.4 Conventions et symboles liés à la géométrie des deux réseaux

Les trois milieux caractérisés par les constantes élastiques C_{ijkl}^* , C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- sont notés respectivement, A : * ($x_2 > 0$), B : + ($x_2 > 0$) et C : - ($x_2 < 0$).

IV.5 Présentation du système CdTe/GaAs

IV.5.1 Le tellurure de cadmium CdTe

Le CdTe est un composé défini binaire de masse molaire 240 g.mole^{-1} appartenant à la famille II-VI de la classification périodique des éléments chimiques formé à partir d'atomes d'un élément métallique du groupe II, le cadmium ($Z = 48$) et d'un élément semi-métallique du groupe VI, le tellure ($Z = 52$). Les atomes de cet élément s'agencent usuellement sous la structure dite zinc-blende (aussi appelée sphalérite) comme présenté sur la figure IV.5 (a). Ce type de maille cristalline est formé de deux réseaux cubiques faces centrées, l'un aux nœuds duquel ne se trouvent que des atomes de cadmium, l'autre que des atomes de tellure, décalés l'un de l'autre d'un quart de diagonale du cube.

Parmi les semi conducteurs II-VI, ce composé possède un numéro atomique élevé qui lui confère un coefficient d'absorption important pour les photons, et une bande interdite de 1,5 eV bien adaptée au spectre solaire. Ces propriétés font de ce matériau un bon candidat non seulement dans le domaine du photovoltaïque, mais aussi pour l'absorption de rayonnements plus énergétiques tels que les rayons X permettant notamment son application en imagerie médicale. [42]

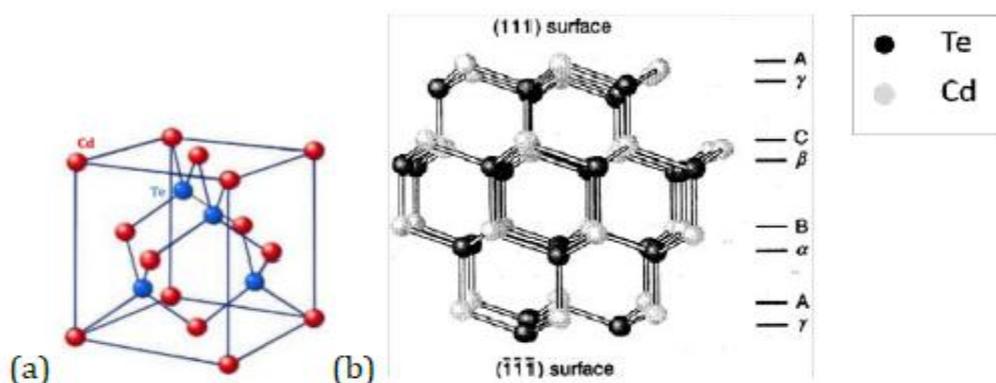


Figure IV.5- (a) Modèle de la maille cristalline du CdTe, type cubique face centrée. (b) Modèle de la face {111} de la structure Zinc Blende du CdTe [Durose, 2010]. [42]

IV.5.2 L'Arséniure de Gallium GaAs

Le GaAs est un matériau de la famille des semi-conducteurs dit «III-V» composé des éléments chimiques Arséniure As ($Z=33$) et Gallium Ga ($Z=31$). Employé dans la fabrication des cellules solaires, l'arséniure de gallium GaAs, du fait du numéro atomique relativement bas est capable d'absorber efficacement les rayons X de faibles énergies (< 100 KeV). Le GaAs cristallise dans la structure cristalline Zinc-blende (Figure IV.6) : il s'agit de deux réseaux cubiques à faces centrées, décalés de $(1/4, 1/4, 1/4)$ l'un par rapport à l'autre. [42]

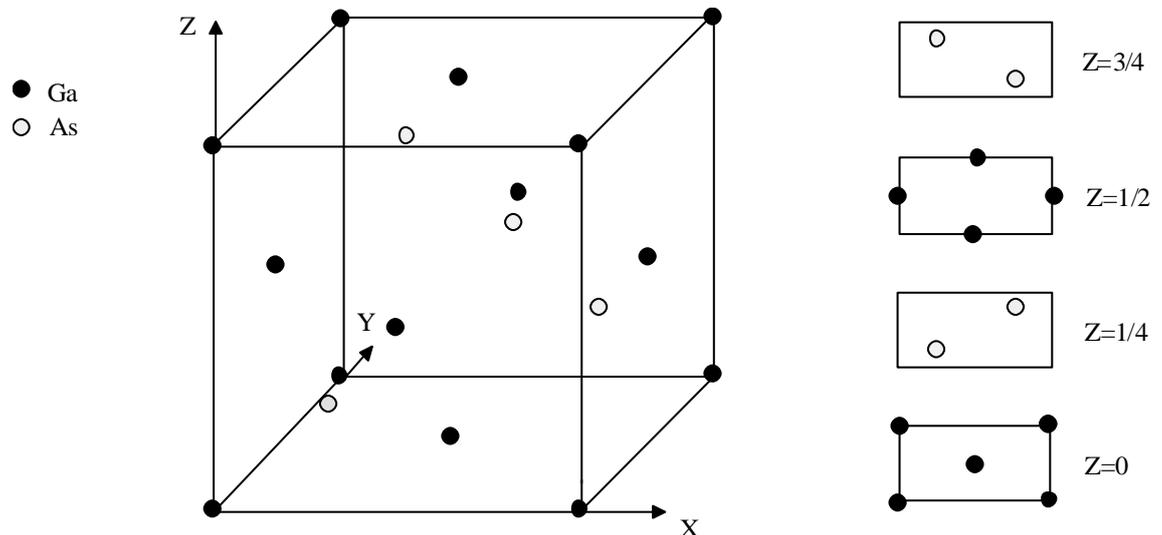


Figure IV.6- La structure Zinc-blende du GaAs. [2]

Les constantes d'élasticité du système CdTe/GaAs sont données par le tableau IV.1. [6, 8, 43]

Tableau IV.1 Constantes d'élasticité anisotrope des éléments CdTe et GaAs

Désignation	CdTe	GaAs
Paramètre de maille a (nm)	0.4681	0.56533
Constantes élastiques anisotropes C_{ij} (Gpa)	$C_{11} = 53.5$	$C_{11} = 118$
	$C_{12} = 36.9$	$C_{12} = 53.5$
	$C_{44} = 20.2$	$C_{44} = 59.4$
Vecteur de Burgers b (nm)	0.3997	

Période Λ (nm)	25
------------------------	----

Le vecteur de Burgers et la période du réseau sont calculés par les expressions suivantes :

$$b = \frac{(a_{CdTe} + a_{GaAs})}{2,2^{1/2}} \quad (IV .1)$$

$$\Lambda = \frac{(a_{CdTe} \cdot a_{GaAs})}{(a_{CdTe} - a_{GaAs}) \cdot 2^{1/2}} \quad (IV .2)$$

Le désaccord paramétrique est donné par :

$$\varepsilon = 2 \frac{|a_{CdTe} - a_{GaAs}|}{a_{CdTe} + a_{GaAs}} = 18.81\% \quad (IV .3)$$

Le facteur d'anisotropie est calculé par l'expression suivante :

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (IV .4)$$

$A= 2,43$ pour le CdTe et $A= 1,84$ pour le GaAs

Les études expérimentales, notamment en M.E.T.H.R des hétérojonctions de CdTe/GaAs (Feuillet [44]) ont montré que les facettes interfaciales des deux cristaux sont de type (001).

Nous présentons dans ce qui suit les résultats, en déplacement, obtenus pour trois types de matériaux correspondant à des densités de dislocations différentes. Ces matériaux sont CdTe/GaAs, GaAs/GaAs et CdTe/GaAs/GaAs, ils correspondent respectivement à une période 25 nm.

IV.6 Déplacement interfacial relatif pour l'interface CdTe/GaAs

En 1994, R.Bonnet et M.Loubradou [41] ont proposé une approche dite "continue", pour décrire les positions atomiques autour des dislocations de misfit présentes le long d'une interface

plane entre deux milieux hétérogènes anisotropes. L'application de cette approche pour le cas de l'hétérojonction (001) CdTe/(001) GaAs montre que les résultats trouvés sont très proches des images de M.E.T.H.R.

La Figure IV.7 montre que le déplacement interfacial relatif linéaire décrit pour chaque composante u_k d'un matériau bicouches CdTe/GaAs sous l'effet de dislocations intrinsèques est une courbe « en dent de scie ». La courbe obtenue par calcul numérique est superposable avec la courbe analytique sur plusieurs périodes en raison de la convergence des séries de Fourier précisément loin des cœurs de dislocation intrinsèques.

Ladite courbe représente la condition de raccordement des deux milieux à l'interface. Le déplacement relatif du cristal (+) par rapport au cristal (-) est donné par l'expression:

$$u_k^+ - u_k^- = \left(\frac{b_k}{\Lambda} \right) - \frac{b_k}{2} \quad (\text{IV.5})$$

De même pour le déplacement relatif (*) par rapport au cristal (+) qui est donné par l'expression :

$$u_k^* - u_k^+ = \left(\frac{b'_k}{\Lambda} \right) x_1 - \frac{b'_k}{2} \quad (\text{IV.6})$$

Le développement en séries de Fourier nous permet d'écrire le déplacement relatif $\Delta u_k(x_1)$:

$$\Delta u_k(x_1) = \sum_{-\infty}^{+\infty} C_k^{(n)} \exp \frac{2i\pi n}{\Lambda} x_1 \, dx_1 \quad (\text{IV.7})$$

A partir des expressions IV.5 et IV.6, on représente le déplacement relatif aux interfaces suivant l'axe Ox_1 (Figure IV.7) pour $N=500$.

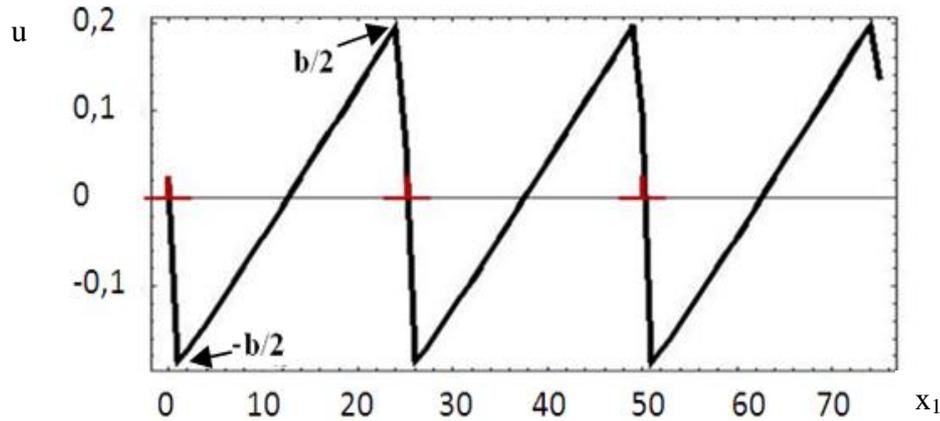


Figure IV.7 - Déplacement relatif à l'interface du système CdTe/ GaAs.

Pour valider le programme numérique élaboré sous le code **MATHEMATICA**, on doit comparer les résultats obtenus à partir du programme pour différentes valeurs du nombre d'harmoniques N (N=40, 50, 100 et 500), avec les résultats donnés par l'expression analytique du déplacement relatif interfacial en fonction de x_1 ($\Delta u = f(x_1)$).

Les calculs effectués près du cœur ne permettent pas de donner de bons résultats par suite de convergence très lente des séries de Fourier parce que l'application des lois de la théorie d'élasticité n'est plus valable au niveau du cœur de la dislocation. L'erreur relative est définie par :

$$\Delta R = \left| (\Delta R_{programme} - \Delta U_{exp\ analytique}) / \Delta U_{exp\ analytique} \right| \tag{IV.8}$$

Tableau IV.2 : Calcul d'erreur ΔR pour le système CdTe/GaAs/ GaAs

N	$x_1=5b$	$X_1=b$	$x_1=b/2$	$X_1=b/4$
40	$\Delta R= 2.64\%$	$\Delta R= 8.92\%$	$\Delta R= 5.80\%$	$\Delta R= 36.66\%$
50	$\Delta R= 0.56\%$	$\Delta R= 4.9\%$	$\Delta R= 15.53 \%$	$\Delta R= 23.54\%$
100	$\Delta R= 1.20\%$	$\Delta R= 3.06\%$	$\Delta R= 4.58 \%$	$\Delta R= 15.24\%$
500	$\Delta R= 0.21\%$	$\Delta R= 0.86\%$	$\Delta R= 1.02 \%$	$\Delta R= 4.21\%$

IV.7 Influence du réseau parallèle sur les champs des déplacements

Les Figures IV.8 (a et b) décrivent la forme topologique de la surface supérieure simulée, sous l'effet d'un réseau de dislocations parallèle, pour une orientation du vecteur de burgers $b // Ox_1$ et une épaisseur de couche $h = 2nm$.

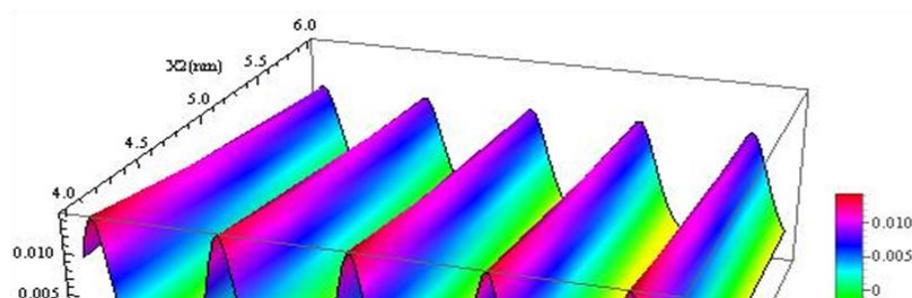


Figure IV.8. a- Topologie de l'hétérostructure CdTe/GaAs en 3D sous l'effet d'un réseau de dislocations parallèle interfacial pour $b // Ox_1$: ($\Lambda=25$ nm, $h_1=2$ nm).

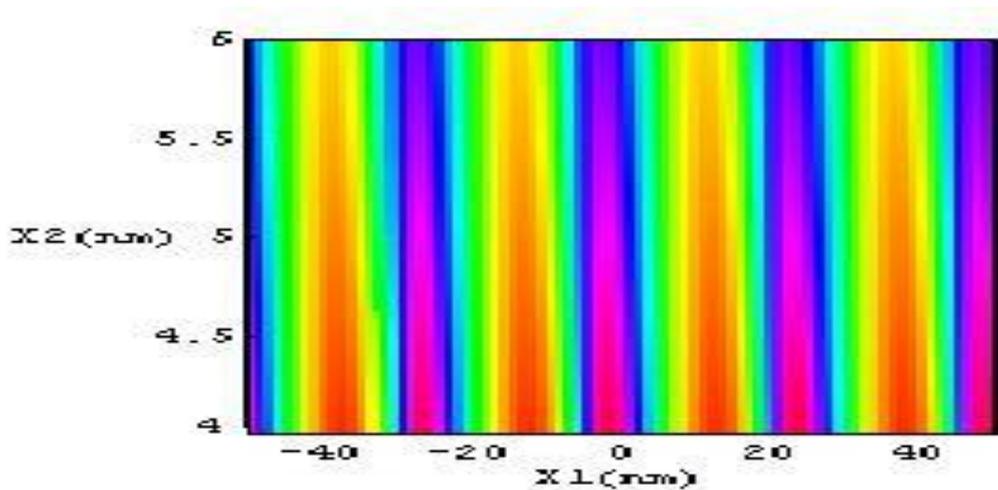


Figure IV.8. b- Topologie de l'hétérostructure CdTe/GaAs en 2D sous l'effet d'un réseau de dislocations parallèle interfacial pour $b // Ox_1$: ($\Lambda=25$ nm, $h_1=2$ nm).

La topologie apparaît comme une ondulation ascendante le long de x_1 , ce qui reflète le comportement de la série de Fourier. La morphologie périodique est répétée tous les 25 nm.

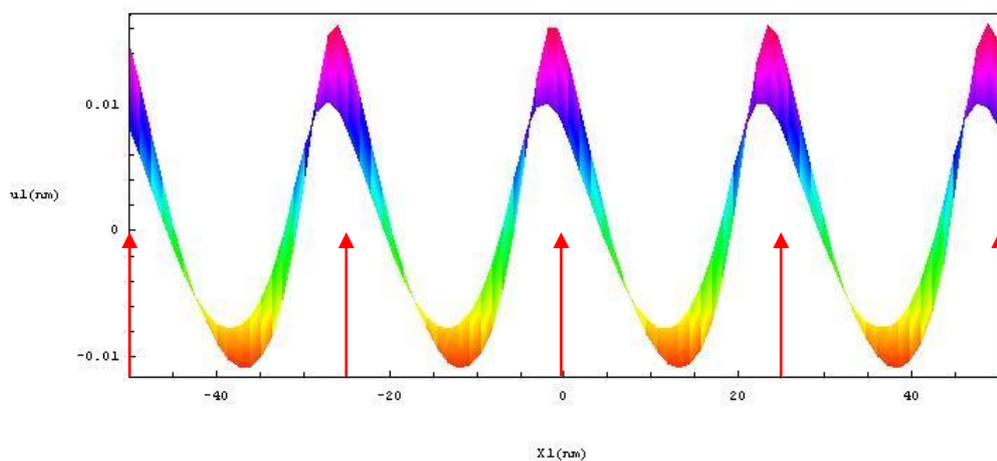


Figure IV.9 Topologie de l'hétérostructure CdTe/GaAs

Les iso valeurs des champs de déplacement autour des dislocations appartenant au réseau parallèle de la première interface varient de -0.011 à $+0.016$ nm pour l'hétérostructure CdTe/GaAs pour une épaisseur de la couche supérieure du CdTe égale à 2 nm.

La surface présente des ondulations 1D que les auteurs qualifient de RD 1D malgré la valeur faible de l'amplitude, la présence en surface de nanostructures ordonnées est visible résultant de la superposition des nanostructures du CdTe et GaAs.

IV.8 Iso valeurs du réseau carré placé à l'interface GaAs/GaAs

Les iso valeurs des champs de déplacement u_1 autour d'une dislocation et plusieurs dislocations ensuite appartenant au réseau carré, sont présentées sur les figures IV.10 à IV.12 pour

l'hétérostructure GaAs/GaAs(001) accommodant un désaccord paramétrique et sous l'effet d'un réseau carré pour une orientation du vecteur de burgers \mathbf{b} .

Les champs de déplacement (positifs et négatifs) sont situés entre les lignes de dislocation. Les valeurs de l'amplitude de u_1 varient de $-0,1$ nm à $0,3$ nm pour GaAs / GaAs.

La symétrie des champs de déplacement respecte bien la symétrie linéaire du réseau carré de dislocations.

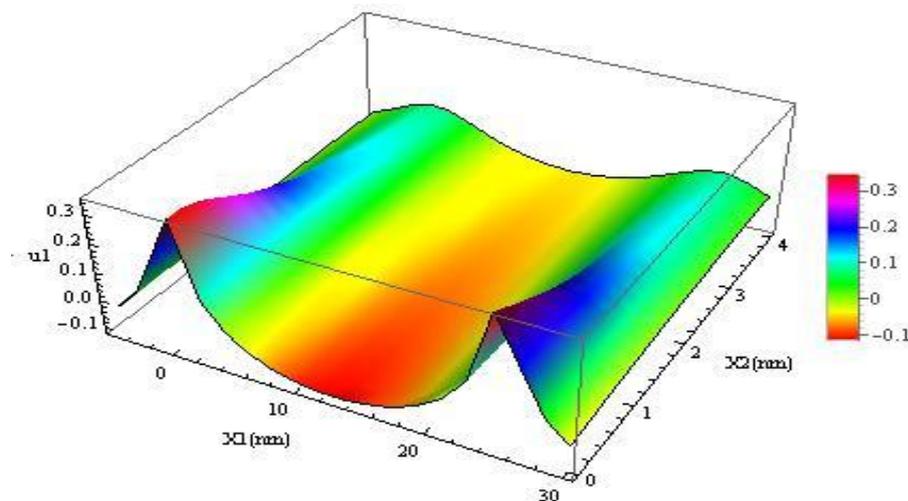


Figure IV.10 - Iso valeurs des champs de déplacement u_1 de la couche GaAs en fonction de l'épaisseur des couches pour $h^+ = 4$ nm sous l'effet de dislocations interfaciales.

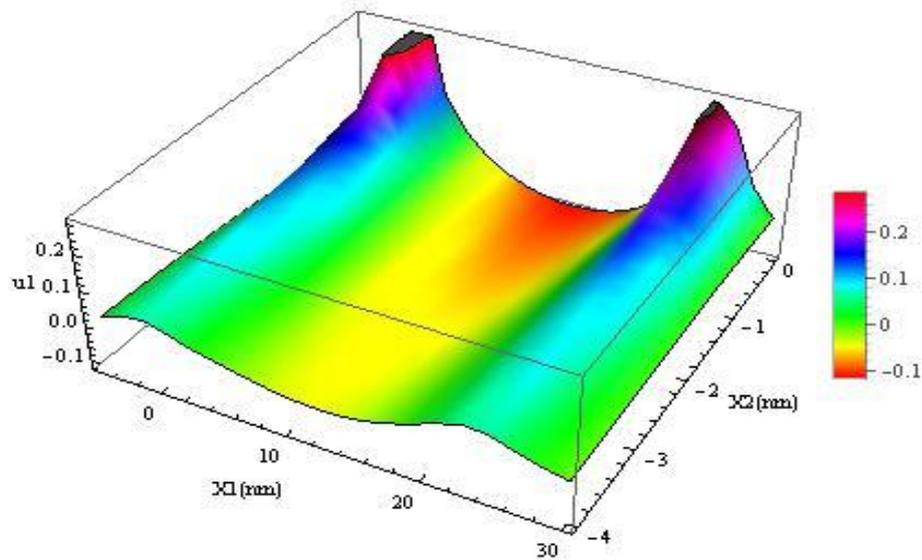


Figure IV.11- Iso valeurs des champs de déplacement u_1 de la couche inférieure GaAs, en fonction de l'épaisseur des couches pour $h^- = 4\text{nm}$ sous l'effet de dislocations interfaciales pour b_1 .

La première dislocation placée à $x_1 = 0$ et la deuxième à $x_1 = 25$ nm correspondant à une période, nous permet de constater une nette déformation à l'aplomb des cœurs des dislocations avec une amplitude qui varie entre -0.1 nm et $+0.3$ nm.

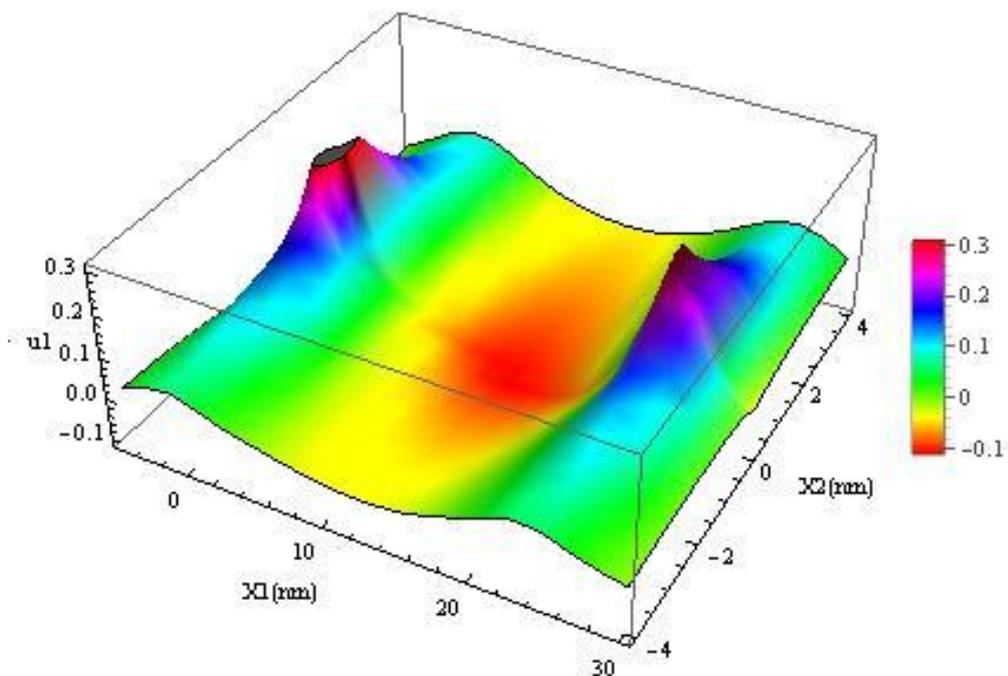


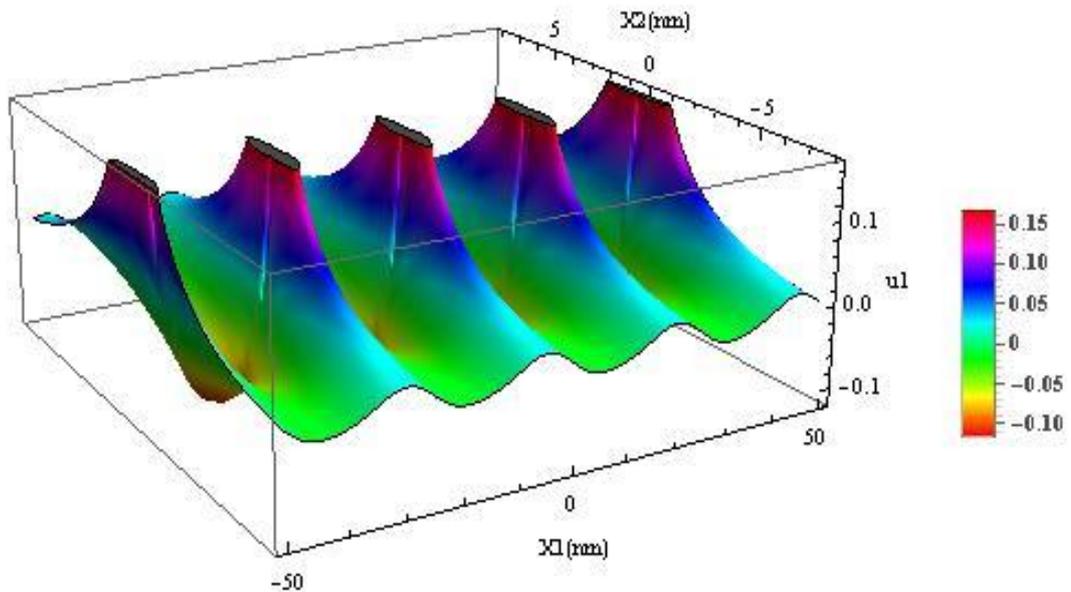
Figure IV.12 - Iso valeurs des champs de déplacement u_1 de l'hétérostructure GaAs/GaAs.

On remarque aussi sur la figure IV.12 en trois dimensions que dans le plan $x_2 > 0$, u_1 a tendance à croître de manière de moins en moins rapide lorsque l'on s'éloigne du plan $x_1 = 0$. Au niveau de la première interface entre (CdTe)/(GaAs) un pic de déplacements positifs est visible pour $x_2 = 0$ à proximité de la dislocation et qui se répète au niveau de $x_2 = 25$ nm distance de la période.

Les phénomènes de compression et tension observés sur la figure IV.12 à proximité de la première dislocation pour $x_1 = 0$ et entre deux dislocations vont provoquer des ondulations qui se propagent tout au long de l'axe x_1 .

La nette déformation apparaît pour des couches minces par rapport aux couches relativement épaisses surtout à l'aplomb des cœurs des dislocations.

Pour vérifier la périodicité du réseau sur plusieurs périodes, nous avons simulé les iso valeurs sur une distance de 100 nm sur l'axe x_1 où la périodicité est respectée.



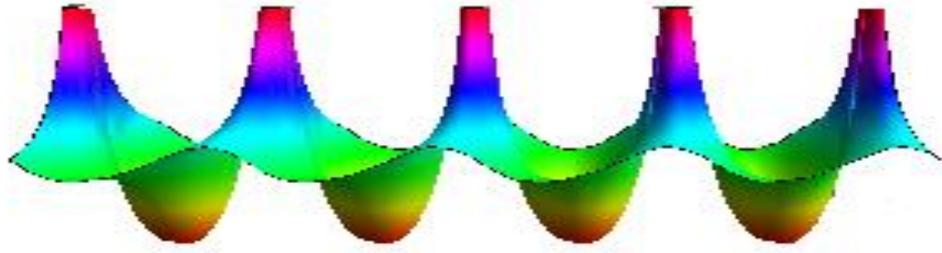


Figure IV.13 - Représentation en 3D des iso valeurs des champs de déplacement u_1 de l'hétérostructure GaAs/GaAs, cas d'un réseau de dislocations en fonction de l'épaisseur des couches pour $h^- = 8\text{nm}$ et $h^+ = 8\text{nm}$ sous l'effet de dislocations interfaciales et pour b_1/x_1 .

Les déformations élastiques des couches minces épitaxiées sur des substrats monocristallins, dues aux réseaux de dislocations présents aux interfaces, sont difficiles à estimer.

L'épaisseur de la couche prise en sandwich pour laquelle l'influence sur la déformation ne peut être produite en cas d'augmentation de l'épaisseur de la couche capot du cristal CdTe est de 8 nm, donc pratiquement pas de déplacements.

On remarque aussi qu'au dessus des cœurs des dislocations, les deux couches présentent une élévation de zone ce qui implique une compression et de l'autre côté une tension dans la zone médiane comprise entre les deux dislocations au niveau de chaque interface pour $x_2 = 0$, $x_2 = 4\text{nm}$ et $x_2 = 8\text{nm}$.

IV.9 champs de déplacements, pour un réseau carré de dislocations cas du collage moléculaire GaAs(001)/GaAs(001)

En calculant les champs de déplacements, pour un réseau carré de dislocations cas du collage moléculaire GaAs(001)/GaAs(001), où la période est de 10 nm, et l'épaisseur de 7 nm pour la couche collée, les valeurs montrent que les extrema des champs de déplacement en surface ne sont pas situés à l'aplomb des lignes de dislocations.

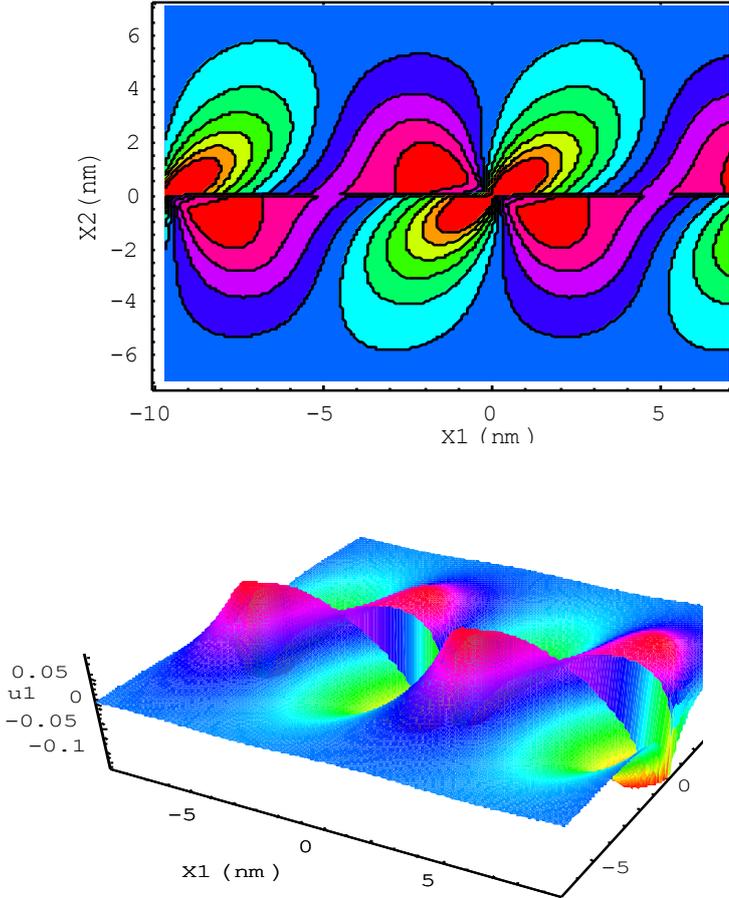
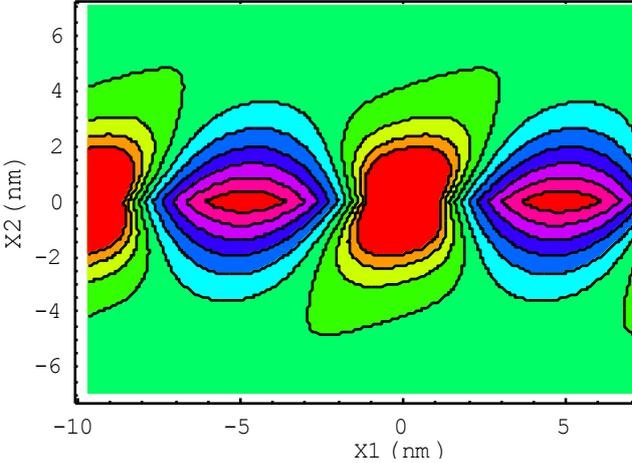


Figure IV.14 - Champs de déplacement u_1 entre deux dislocations séparées de 10nm, représentation en 2D et 3D.



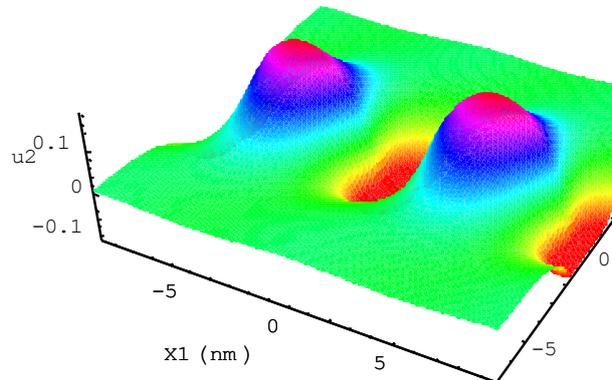


Figure IV.15 - Champs de déplacement u_2 entre deux dislocations séparées de 10nm, représentation en 2D et 3D.

IV.10 Densité d'énergie élastique

Lors de l'épitaxie d'un matériau sur un substrat de paramètre de maille différent, il apparaît une contrainte de compression ou de dilatation biaxiale dans la couche épitaxiée, qui s'accompagne d'une accumulation d'énergie élastique. Au-delà d'une épaisseur critique, l'énergie élastique emmagasinée devient suffisante pour générer des défauts structuraux sous forme de réseaux de dislocations qui relaxent partiellement les contraintes dans le cristal. L'épaisseur critique dépend directement de la différence de paramètre de maille entre le substrat et la couche.

Le comportement des champs de déplacements explique le positionnement des extrema d'énergie élastique (positif et négatif) en surface sont situés entre les lignes de dislocations, à environ 25% et 75% de la période. Les flèches (Figure IV.16) indiquent le positionnement en x_1 des dislocations coins. La courbe est tracée sur deux périodes.

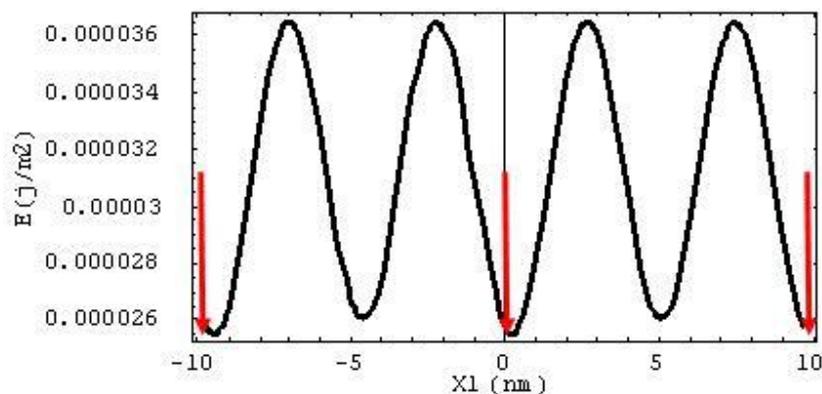


Figure IV.16 - Densité d'énergie élastique pour un réseau de dislocations coins, séparés de 10 nm, pour une épaisseur de 10 nm pour le cas GaAs(001)/GaAs(001), présentation en 2D.

On remarque que cette association du collage moléculaire GaAs(001)/GaAs(001), présente l'avantage d'avoir une distribution homogène de l'énergie (même valeur des pics énergétiques) et par conséquent une déposition future homogène d'autres types de matériaux.

IV.11 Conclusion

Les dislocations organisées en réseaux sont à l'origine de champs élastiques. La compréhension de la forme topologique des surfaces se fait par l'étude de ces derniers.

L'insertion de deux réseaux de dislocations dans un tricouche nanométrique CdTe/GaAs/GaAs influe sur la topologie des différentes surfaces.

Les résultats confirment que les champs élastiques sont suffisamment importants en surface à chaque fois que la couche déposée est de faible épaisseur.

La méthode utilisée permet de visualiser clairement les zones en état de tension et de compression des surfaces.

Conclusion générale

Conclusion générale

Le concept de dislocation a été introduit pour résoudre en premier le paradoxe de la limite élastique théorique sachant qu'il y a une grande différence entre les propriétés plastiques du cristal parfait et celles des cristaux réels.

La découverte des RX et de la nature cristalline des métaux combinées à l'étude du comportement élastique de milieu homogène amène les chercheurs, à considérer la discontinuité des propriétés élastiques dans un cylindre homogène et à introduire le défaut de fermeture qui porte le nom de Burgers. Depuis plusieurs travaux expérimentaux se sont fixés pour objectifs de caractériser ces défauts surtout avec le développement des moyens d'investigation.

Parallèlement à ces travaux expérimentaux de mise en évidence de l'existence de ces défauts interfaciaux dans les matériaux cristallins, plusieurs chercheurs ont focalisé leurs efforts pour modéliser ces défauts en déterminant les champs élastiques inaccessibles à la mesure expérimentale.

A l'utilisation de défauts enterrés pour contrôler la densité, on peut donc ajouter comme condition que ces défauts doivent s'organiser spontanément en réseaux. Par conséquent, la croissance ultérieure de nanostructures de petite taille tend à s'organiser d'une façon ordonnée par rapport aux réseaux de dislocations, car les atomes voient, lors de leur déplacement atomique, une modulation du potentiel de surface.

Donc, dans notre travail, pour contrôler la densité et la distribution et piloter la localisation des nanostructures, on a choisi d'utiliser les dislocations enterrées sous la surface.

L'influence quantitative de défauts enterrés a été calculée dans le cadre de l'élasticité continue isotrope : pour une dislocation et pour le cas de réseaux de dislocations vis, coin, ou mixtes. [11]

Dans le présent travail, nous avons étudié l'influence des champs élastiques générés par des réseaux de dislocations unidirectionnels et carrés induits aux niveaux des interfaces d'un matériau tricouche CdTe/GaAs/GaAs(001) en utilisant l'élasticité anisotrope. Le but principal est de contrôler l'organisation et le dépôt de nanostructures vis à vis de la topologie.

Les champs élastiques sont créés en considérant un collage moléculaire d'une couche mince sur un substrat avec l'ajout d'une troisième couche par épitaxie. L'étude de ces champs est nécessaire à la prédiction de la morphologie des surfaces. Elle est nécessaire aussi à la définition d'un critère pour prédire soit la localisation d'ilots sur ces surfaces, soit les lieux d'érosion préférentielle ainsi que les zones en compression et les zones en tension.

La détermination des effets des champs élastiques sur les matériaux nanométriques déposés est importante, tant du point de vue applications expérimentales que de la modélisation théorique, et c'est dans ce contexte que nous avons pu résoudre le problème pour ce type de matériau (tricouche) avec la présence de deux réseaux de dislocations intrinsèques différents placés au niveau des deux interfaces dans le cas d'une élasticité anisotrope en élaborant un programme sous le code **MATHEMATICA** pour étudier pour la première fois les problèmes des multicouches en présence de N réseaux de dislocations interfaciales.

Dans un premier temps, nous avons établi les hypothèses et la géométrie du modèle choisi ainsi que les conditions aux limites appropriées qui se résument en :

- Le type de réseau de dislocations pour chaque interface ;
- La périodicité du déplacement relatif le long de l'axe Ox_1 pour le réseau unidirectionnel;
- La périodicité du déplacement relatif le long de l'axe Ox_1 et Ox_2 pour le réseau carré.
- La continuité des contraintes σ_{2k} aux interfaces ;
- Nullité des contraintes σ_{2k} au niveau des surfaces libres ;
- Discontinuité des déplacements relatifs interfaciaux $(u_k^+ - u_k^-)$ et $(u_k^* - u_k^+)$.

Le développement des calculs nous a conduits à un système d'équations dont la résolution numérique donne les différents champs élastiques (déplacements, déformations et contraintes).

A travers des applications sur le matériau CdTe/GaAs/GaAs(001), la procédure numérique a été validée en comparant les résultats obtenus pour différentes valeurs du nombre d'harmoniques N avec les résultats donnés par l'expression analytique.

Nous avons remarqué que l'insertion d'un deuxième réseau de dislocations au niveau de l'interface cristal (*)/cristal (+) modifie considérablement la distribution des champs élastiques, et révèle aussi un nouveau effet d'ondulation qui se propage tout au long de l'axe de périodicité dans le cas de l'élasticité anisotrope. Les champs élastiques sont importants à chaque fois que la couche déposée est de faible épaisseur.

En conclusion, les dislocations organisées en réseaux sont à l'origine de champs élastiques et la compréhension de la forme topologique des surfaces se fait par la détermination et l'étude de ces champs.

Références Bibliographiques

- [1]: Richard Feynman, "There's Plenty of Room at the Bottom": An Invitation to Enter a New Field of Physics, (1960) : Allocution prononcée lors de la reunion annuelle de l'American Physical Society, 29 Decembre 1959. In Engineering and Science, Fevrier, 22.
- [2]: Madani.S. (2006). Organisation des nanostructures par des réseaux carrés de dislocations enterrés sur des substrats de silicium Si et d'alliage de gallium arséniure GaAs, Thèse de doctorat, Université de Batna, Algérie
- [3]: Makhloufi, R., Brioua, M., & Benbouta, R. (2016). The Effect of the Elastic Fields Caused by a Networks of Dislocations Placed at Interfaces of a Three-Layer Material Cu/Cu/(001) Fe in the Case of Anisotropic Elasticity. Arabian Journal for Science and Engineering, 41(5), 1955-1960.
- [4]: J. Eymery, Réalisation d'un détecteur infrarouge à base de boîtes quantiques auto organisées InAs dans GaAs, Rapport DGA. ERE/SC N°97-1048/A000/DSP/SREA/SC/PROSP, 1998.
- [5]: Fournel. F. (2001). Réalisation par adhésion moléculaire d'un substrat induisant l'auto organisation latérale et contrôlée du dépôt de nanostructures, Doctoral dissertation, Université Joseph-Fourier-Grenoble I.
- [6]: Leroy .F. (2003).Auto-organisation de nanostructures par des réseaux de dislocations enterrées. Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier – Grenoble 1, France.
- [7]: José.C. (2004). Organisation à longue distance par un réseau de dislocations faiblement enterré de nanostructures de semi-conducteurs III-V auto-assemblées sur substrat d'arséniure de gallium, Thèse de doctorat, Université Paris XI, France.
- [8]: R.Bonnet, J.L. Verger-Gaugry, Phil.Mag. A66, 849, 1992
- [9]: R. Bonnet, K. Rousseau et F. Fournel, C.R.Phys.3,657-663, 2002.
- [10]: F. Leroy, J. Eymery, P. Gentile, et F. Fournel, Appl. Phys. Lett. 80 (17), 3078, 2002.
- [11]: F. Fournel, H. Moriceau, N. Magnéa, J. Eymery, J. L. Rouviere, et K. Rousseau, Appl. Phys. Lett. 80(5), 793, 2002.
- [12]: A. Bourret. How to control the self-organization of nanoparticles by bonded thin layers. Surf. Sci., 432(1-2) :37, 1999.
- [13]: G. Patriarche, C. Mériadec, G. Le Roux, C. Deparis, I. Sagnes, J.-C. Harmand and F.

- Glas, GaAs/GaAs twist-bonding for compliant substrates : interface structure and epitaxial growth, *Appl. Surf. Sci.* 164, 15, 2000.
- [14]: Madani, S. (1997), Etude d'un réseau unidirectionnel de dislocation de Misfit placé a l'interface d'un bicristal mince (déplacements-contraintes), Thèse de magistère, Université de Batna, Algérie.
- [15]: Fantous, S. (2002), Effets élastiques des dislocations de misfit dans un matériau sandwich, Thèse de magistère, Université de Batna, Algérie.
- [16]: Brioua, M. (2005). Etude du champ élastique d'un réseau unidirectionnel de dislocations interfaciales dans un matériau tricouches en élasticité anisotrope (couches/substrat), Thèse de doctorat, Université de Batna, Algérie
- [17]: Benkassem. S. (2007). Propriétés mécaniques et modélisation multiéchelle de l'effet de taille dans les polycristaux nanométriques, Thèse de doctorat, Université Paul Verlaine de Metz, France.
- [18]: P. Laonnois. (2004). Rapport « Nanosciences et nanotechnologies » Laboratoire de Physique des solides (UMR CNRS 8502), Université Paris Sud 91405.
- [19]: Ricaud, M., & Witschger, O. (2009). Nanomaterials– Definitions, toxicological risk, characterisation of occupational exposure and prevention measures. INRS, ED, 6050.
- [20]: Alexis.B. (2007). Nanostructuration de surface de plaques de silicium (001) par révélation d'un réseau de dislocations enterrées pour l'auto-organisation à longue distance nanostructures.
- [21]: F.Z.Bouzit. (2018). Synthèse par voie électrolytique et caractérisation des couches minces CO-NI nanostructurées. Thèse de doctorat, Université 8 Mai 1945 Guelma, Algérie.
- [22]: Gleiter, H., Nanostructured materials: Basic concepts and microstructure. *Acta mater*, 48 pp: 1-29, (2000).
- [23]: Kumar, K. S., Suresh, S., Chisholm, M. F., Horton, J. A., & Wang, P. (2003). Deformation of electrodeposited nanocrystalline nickel. *Acta Materialia*, 51(2), 387-405
- [24]: Ranganathan, S., Divakar, R., & Raghunathan, V. S. (2001). Interface structures in nanocrystalline materials. *Scripta Materialia*, 44(8-9), 1169-1174.
- [25]: Pascale. A. (2003). Évolution morphologique des nanostructures $Si_{1-x}Ge_x$ pendant la croissance par EJM. Thèse de doctorat, Université de la Méditerranée, France

- [26] : Poydenot. V. (2005). Boîtes et fils de Ge sur Si(001) ordonnés à longue distance par des réseaux de dislocations de flexion. Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier – Grenoble 1, France.
- [27]: M. Volmer, Z. Phys. Chim. Vol 119, 277, 1926
- [28]: F. Van Der Merwe, Physical Review B, 39, 3632 , 1989
- [29]: S.Andrieu.(2003). Introduction aux couches minces et aux réseaux. Laboratoire de Physique des Matériaux – UMR7556.CNRS / Université H. Poincaré, France.
- [30] : Günther, K. G. (1958). Aufdampfschichten aus halbleitenden III-V-Verbindungen. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 13(12), 1081-1089.
- [31] : J. R. Arthur, Interaction of Ga and As₂ molecular beams with GaAs surfaces, J. Appl. Phys., 39 (1968), p 4032.
- [32] : A.Y. Cho, GaAs epitaxy by a molecular beam method: Observations of surface structure on the (001) face, J. Appl. Phys., 42 (1971), p 2074.
- [33] : Neave, J. H., Joyce, B. A., Dobson, P. J., & Norton, N. (1983). Dynamics of film growth of GaAs by MBE from RHEED observations. *Applied Physics A*, 31(1), 1-8.
- [34] : J.V. Hove, C. S. Lent, R. P. Pukite et P. I. Cohen, Damped oscillations in reflection high energy electron diffraction during GaAs MBE, J. Vac. Sci. Technol.B, 1 (1983), p 741.
- [35] : S.Dhellemmes. (2006).Contribution à l'étude de l'épitaxie par jets moléculaires à grande échelle de semi-conducteurs phosphorés. Thèse de doctorat, Université des Sciences et Technologies de Lille, France.
- [36] : Y.Bogumilowicz. (2005).Épitaxie et gravure d'hétérostructures Si / Si_{1-x}Ge_x pour applications dans les technologies MOS. Thèse de doctorat, École Centrale de Lyon, France.
- [37] : F. C. Frank. Defects in crystalline solids, page 159. London : Physical Society, 1954.
- [38]: Karine Rousseau. Etude géométrique, structurale et chimique par microscopie électronique en transmission de joints de grains de surface de Si. Thèse, Université Paris VI, 2002.
- [39]: Matthews, J. W. (1966). Accommodation of misfit across the interface between single -crystal films of various face-centred cubic metals. *Philosophical Magazine*, 13(126), 1207-1221.
- [40]: Eshelby, J. D., Read, W. T., & Shockley, W. (1953). Anisotropic elasticity with applications to dislocation theory. *Acta metallurgica*, 1(3), 251-259.

- [41]: Bonnet, R., & Loubradou, M. (1994). Atomic positions around misfit dislocations on a planar heterointerface. *Physical Review B*, 49(20), 14397.
- [42]: C.Buis. (2013). Étude des corrélations entre les défauts structuraux et les inhomogénéités spatiales des détecteurs de rayons X à base de CdTe pour l'imagerie médicale. Thèse de doctorat, Université Jean Monnet – Saint-Etienne, France.
- [43]: J.Rousset . (2007).Étude du dépôt électrochimique de couches épaisses de tellure de cadmium, Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie (Paris VI).
- [44]: G.Feuillet. Evaluation of advanced semiconductor materials by electron microscopy, édité par D. Cherns (New York : Plenum), P.33., 1990

Annexes

Annexe 1

Le collage moléculaire

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

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

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

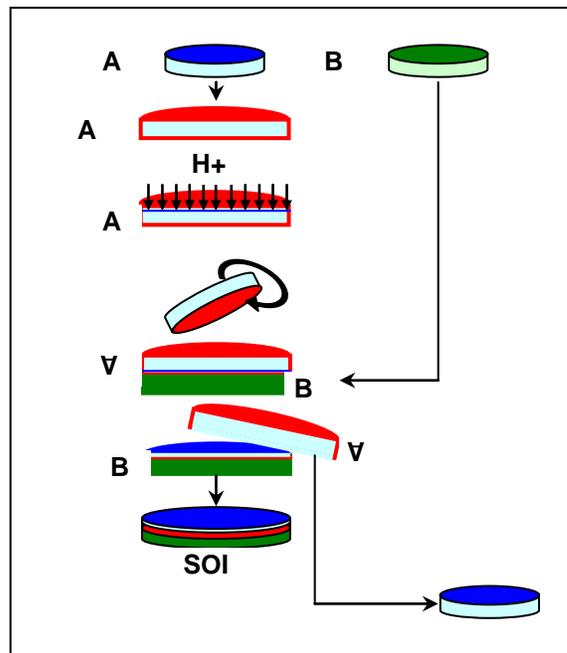


Fig.A1.1: Technologie Smart Cut appliquée à la réalisation de structures SOI.

A.1. Principe

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

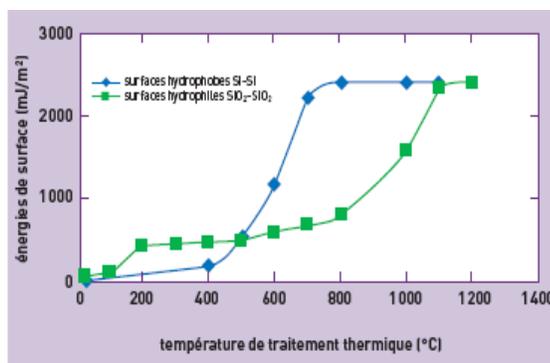


Fig.A1.2: Énergies de surface typiques pour des collages "hydrophobes" (cas du collage de deux plaques de silicium Si-Si) et des collages "hydrophiles" (cas du collage de deux plaques de silicium oxydées SiO₂-SiO₂).

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

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

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

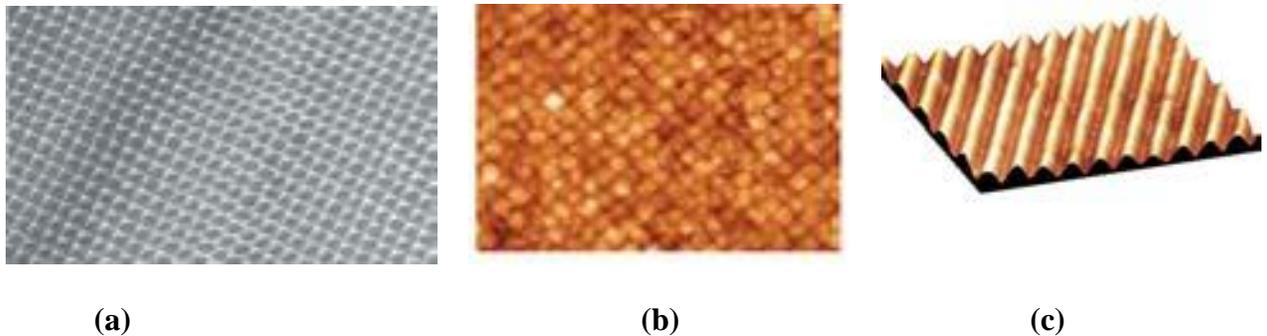


Fig.A1.3: Observations (a) en microscopie électronique à transmission (MET) d’un réseau unique de dislocations vis, enterrées quelques nanomètres sous la surface de la structure, de période 49,4 nm, (b) par microscopie à effet tunnel (STM) d’une surface de Si, structurée par gravure et présentant une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

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

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

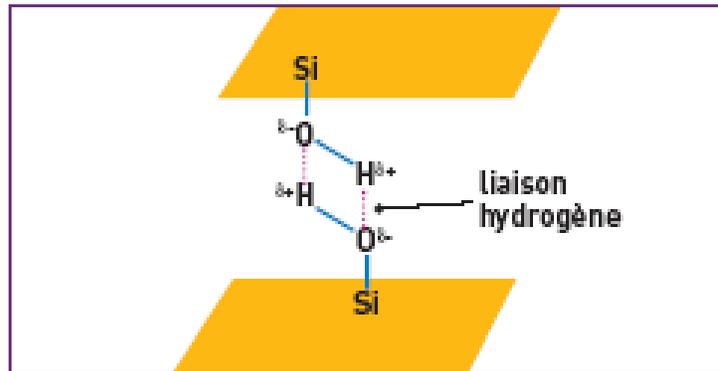


Fig. A1.4 : Principe de collage moléculaire de deux surfaces d’oxyde par liaisons hydrogène entre les liaisons silanols (SiOH–SiOH) de surface.

Annexe II

Programme élaboré sous le code MATHEMATICA

Le code utilisé pour simuler les champs de contraintes et de déformations, est le code **MATHEMATICA** de l'éditeur Wolfram. Un logiciel très puissant avec une importante capacité à manipuler formellement les équations. Pour calculer les grandeurs élastiques du matériau tricouche, nous avons utilisé quelques conventions. Le vecteur de Burgers est défini par $b = (b_1, b_2, b_3)$. Le calcul des champs élastiques pour un réseau unidirectionnel de dislocations coin se fait en choisissant le vecteur de Burgers. Les coefficients élastiques des couches sont différents. Toute variable finissant par p ou $+$ (respectivement n ou $-$ et $*$) et associée à la couche sandwich (respectivement inférieure ou supérieure). L'épaisseur est notée par h^* (respectivement h^+ et h^-). Ω remplace N le nombre d'harmoniques. Re et Im signifiant respectivement partie réelle et partie imaginaire.

On commence par calculer la matrice de passage $[c_{ij}]$ du système de départ au système de travail, ensuite on transforme la matrice de passage en une matrice $[T]_{6 \times 6}$ dans le but de définir les constantes élastiques du cristal dans le repère de travail :

Transformation de la matrice de passage en une matrice $[T]_{6 \times 6}$:

$$[c'_{ij}] = [T]^T [c_{ij}] [T]$$

$$c'_{ij} = \text{Transpose}[T] . c_{ij} . T; \text{MatrixForm}[c'_{ij}]$$

Résolution du polynôme du sixième degré, ce qui donne six racines complexes :

$$\text{Expand}[K_0 + K_1 (p_\gamma) + K_2 (p_\gamma)^2 + K_3 (p_\gamma)^3 + K_4 (p_\gamma)^4 + K_5 (p_\gamma)^5 + K_6 (p_\gamma)^6 = 0]$$

$$\text{NSolve}[K_0 + K_1 (p_\gamma) + K_2 (p_\gamma)^2 + K_3 (p_\gamma)^3 + K_4 (p_\gamma)^4 + K_5 (p_\gamma)^5 + K_6 (p_\gamma)^6 = 0, p_\gamma]$$

Résolution du système d'équations numériquement:

$$A . X = B$$

Où la matrice colonne X comporte les inconnues a^* , b^* , a^+ , b^+ , c^+ , d^+ , c^- et d^- . Les matrices A et B sont respectivement une matrice carré complexe 24×24 et une matrice colonne.

Après calcul des constantes complexes, on les réinjectent dans les équations des conditions aux limites pour s'assurer de la validité des calculs:

```
Table[(X*)_α=(a*)_α+TM(b*)_α,{α,3}];Print["(X*)_1=", (X*)_1];Print
["(X*)_2=", (X*)_2];Print["(X*)_3=", (X*)_3];
```

```
Table[(Y*)_α=0,{α,3}];Print["(Y*)_1=", (Y*)_1];Print
["(Y*)_2=", (Y*)_2];Print["(Y*)_3=", (Y*)_3];
```

```
Table[(X+)_α=(a+)_α+TM(b+)_α,{α,3}];Print["(X+)_1=", (X+)_1];Print
["(X+)_2=", (X+)_2];Print["(X+)_3=", (X+)_3];
```

```
Table[(Y+)_α=(c+)_α+TM(d+)_α,{α,3}];Print["(Y+)_1=", (Y+)_1];Print
["(Y+)_2=", (Y+)_2];Print["(Y+)_3=", (Y+)_3];
```

```
Table[(Y-)_α=(c-)_α+TM(d-)_α,{α,3}];Print["(Y-)_1=", (Y-)_1];Print
["(Y-)_2=", (Y-)_2];Print["(Y-)_3=", (Y-)_3];
```

Champs des déplacement u_{1p} et u_{2p} pour la couche « + » :

```
U1p[ω_, h_, X1_, X2_, b1_, b2_, b3_] :=
Simplify[Sum[1/(πΩ) Sum[Cos[Ωω (X1+rP_αX2)] Re[(-TM(X+)_αλ+α,1)Exp[-
ΩωS^P_αX2]+(-TM(Y+)_αConjugate[λ+α,1]Exp[ΩωS^P_αX2]]]+
Sin[Ωω (X1+rP_αX2)] Re[(X+)_αλ+α,1)Exp[-ΩωS^P_αX2]+(Y+)_αConjugate[λ+α,1]
Exp[ΩωS^P_αX2]]], {Ω, 1, 500}, {α, 1, 3}], TimeConstraint<300]
```

```
U1p=[0.41555, 4, 15.12, 0, 0.253, 0, 0]
```

```
U2p[ω_, h_, X1_, X2_, b1_, b2_, b3_] :=
Simplify[Sum[1/(πΩ) Sum[Cos[Ωω (X1+rP_αX2)] Re[(-TM(X+)_αλ+α,2)Exp[-
ΩωS^P_αX2]+(-TM(Y+)_αConjugate[λ+α,2]Exp[ΩωS^P_αX2]]]+
```

```
Sin[Ωω(X1+rpαX2)]Re[(X+)αλ+α,2)Exp[-ΩωSpαX2]+((Y+)αConjugate[λ+α,2]  
Exp[ΩωSpαX2]]],{Ω,1,500},{α,1,3}],TimeConstraint□300]
```

```
U2p= [0.41555, 4,15.12, 0,0.253, 0,0]
```

Variation numérique de $\Delta u_k = u_k^+ - u_k^-$:

```
Δu=[ω_,h_,X1_,X2_,b1_,b2_,b3_]:= U1p[ω,h,X1,X2,b1,b2,b3]-  
U1n[ω,h,X1,X2,b1,b2,b3]
```

```
Timing[Plot1=FullSimplify[Table[{X1,Δu[0.41555,4,X1,0,  
0.253,0,0]}],{X1,0,15.12,0.42}],TimeConstraint□∞]]
```

```
nn=ListPlot[Plot1,Frame□True,GridLines□None,PlotStyle□PointSize  
e[.02],AxesOrigin□None]
```

```
Show[nn,analy,FrameLabel□{"X1 (nm)", " Δu (nm)"},AxesOrigin □  
None]
```

```
Δu=[ X1_, b1_]:= [b1/15.12].X1- b1/2  
Plot2= Table[{X1, Δu[X1, 0.253]},{ X1, 0,15.12}];
```

Iso déplacements « + » et « - »:

```
U1[ω_,h_,X1_,X2_,b1_,b2_,b3_]:=If[X2>0,U1p[ω,h,X1,X2,b1,b2,b3],U1n[  
ω,h,X1,X2,b1,b2,b3]];
```

```
ContourPlot[U1[0.41555,4,X1,X2,0.253,0,0],{ X1,-7.56,7.56},{ X2,-  
4,4},AspectRatio□1/GoldenRatio,Frame□True, FrameLabel□  
{"X1 (nm)", "X2 (nm)"},PlotPoints□10]
```

```
Plot3D[U1[0.41555, 4, X1, X2, 0.253, 0, 0], { X1, -7.56, 7.56}, { X2, -
4, 4}, Mesh->False, Boxed->False, AxesLabel->{ "X1 (nm)", "X2 (nm)",
"X3 (nm)"}, PlotPoints->10, Background->GrayLevel[0.8]]
```

Champs des contraintes dans la couche « + » et $x_2 > 0$:

```
 $\sigma_{11p}[\omega_, h_, X1_, X2_, b1_, b2_, b3_] :=$ 
Simplify[Sum[\omega/(\pi) Sum[Cos[\Omega\omega (X1+r^p_\alpha X2)] Re[(X^+)_{\alpha} L^{+}_{\alpha,1,1}) Exp[-
\Omega\omega s^p_{\alpha} X2] + (Y^+)_{\alpha} Conjugate[L^{+}_{\alpha,1,1}) Exp[\Omega\omega s^p_{\alpha} X2]] +
Sin[\Omega\omega (X1+r^p_{\alpha} X2)] Re[(TM(X^+)_{\alpha} L^{+}_{\alpha,1,1})
Exp[-\Omega\omega s^p_{\alpha} X2] + (TM(Y^+)_{\alpha} Conjugate[L^{+}_{\alpha,1,1})
Exp[\Omega\omega s^p_{\alpha} X2]]], {\Omega, 1, 500}, {\alpha, 1, 3}], TimeConstraint->300]
```

```
 $\sigma_{11p}[0.41555, 4_, 15.12, 0, 0.253, 0, 0]$ 
```

```
 $\sigma_{12p}[\omega_, h_, X1_, X2_, b1_, b2_, b3_] :=$ 
Simplify[Sum[\omega/(\pi) Sum[Cos[\Omega\omega (X1+r^p_\alpha X2)] Re[(X^+)_{\alpha} L^{+}_{\alpha,1,2}) Exp[-
\Omega\omega s^p_{\alpha} X2] + (Y^+)_{\alpha} Conjugate[L^{+}_{\alpha,1,2}) Exp[\Omega\omega s^p_{\alpha} X2]] +
Sin[\Omega\omega (X1+r^p_{\alpha} X2)] Re[(TM(X^+)_{\alpha} L^{+}_{\alpha,1,2})
Exp[-\Omega\omega s^p_{\alpha} X2] + (TM(Y^+)_{\alpha} Conjugate[L^{+}_{\alpha,1,2})
Exp[\Omega\omega s^p_{\alpha} X2]]], {\Omega, 1, 500}, {\alpha, 1, 3}], TimeConstraint->300]
```

```
 $\sigma_{12p}[0.41555, 4_, 15.12, 0, 0.253, 0, 0]$ 
```

Matrice Globale

	19	20	21	22	23	24				
1	0	0	0	0	0	0	6.1.1	A_1^+	1	b_1
2	0	0	0	0	0	0		A_2^+	9	b_2
3	0	0	0	0	0	0		A_3^+	17	b_3
4	0	0	0	0	0	0	7.1.1	B_1^+	2	0
5	0	0	0	0	0	0		B_2^+	10	0
6	0	0	0	0	0	0		B_3^+	18	0
7	$-\lambda_{11}^{r*}$	$-\lambda_{21}^{r*}$	$-\lambda_{31}^{r*}$	λ_{11}^{i*}	λ_{21}^{i*}	λ_{31}^{i*}	8.1.1	C_1^+	3	b_1'
8	$-\lambda_{12}^{r*}$	$-\lambda_{22}^{r*}$	$-\lambda_{32}^{r*}$	λ_{12}^{i*}	λ_{22}^{i*}	λ_{32}^{i*}		C_2^+	11	b_2'
9	$-\lambda_{13}^{r*}$	$-\lambda_{23}^{r*}$	$-\lambda_{33}^{r*}$	λ_{13}^{i*}	λ_{23}^{i*}	λ_{33}^{i*}		C_3^+	19	b_3'
10	λ_{11}^{r*}	λ_{21}^{r*}	λ_{31}^{r*}	$-\lambda_{11}^{i*}$	$-\lambda_{21}^{i*}$	$-\lambda_{31}^{i*}$	9.1.1	D_1^+	4	0
11	λ_{12}^{r*}	λ_{22}^{r*}	λ_{32}^{r*}	$-\lambda_{12}^{i*}$	$-\lambda_{22}^{i*}$	$-\lambda_{32}^{i*}$		D_2^+	12	0
12	λ_{13}^{r*}	λ_{23}^{r*}	λ_{33}^{r*}	$-\lambda_{13}^{i*}$	$-\lambda_{23}^{i*}$	$-\lambda_{33}^{i*}$		D_3^+	20	0
13	G_{11}	G_{21}	G_{31}	H_{11}	H_{21}	H_{31}	12.1.1	C_1^-	5	0
14	G_{12}	G_{22}	G_{32}	H_{12}	H_{22}	H_{32}		C_2^-	13	0
15	G_{13}	G_{23}	G_{33}	H_{13}	H_{23}	H_{33}		C_3^-	21	0
16	$-H_{11}$	$-H_{21}$	$-H_{31}$	G_{11}	G_{21}	G_{31}	13.2.1	D_1^-	6	0
17	$-H_{12}$	$-H_{22}$	$-H_{32}$	G_{12}	G_{22}	G_{32}		D_2^-	14	0
18	$-H_{13}$	$-H_{23}$	$-H_{33}$	G_{13}	G_{23}	G_{33}		D_3^-	22	0
19	0	0	0	0	0	0	14.2.1	A_1^*	7	0
20	0	0	0	0	0	0		A_2^*	15	0
21	0	0	0	0	0	0		A_3^*	23	0
22	0	0	0	0	0	0	15.2.1	B_1^*	8	0
23	0	0	0	0	0	0		B_2^*	16	0
24	0	0	0	0	0	0		B_3^*	24	0

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	$-\lambda_{11}^{r+}$	$-\lambda_{21}^{r+}$	$-\lambda_{31}^{r+}$	λ_{11}^{i+}	λ_{21}^{i+}	λ_{31}^{i+}	$-\lambda_{11}^{r+}$	$-\lambda_{21}^{r+}$	$-\lambda_{31}^{r+}$	$-\lambda_{11}^{i+}$	$-\lambda_{21}^{i+}$	$-\lambda_{31}^{i+}$	λ_{11}^{r-}	λ_{21}^{r-}	λ_{31}^{r-}	λ_{11}^{i-}	λ_{21}^{i-}	λ_{31}^{i-}
2	$-\lambda_{12}^{r+}$	$-\lambda_{22}^{r+}$	$-\lambda_{32}^{r+}$	λ_{12}^{i+}	λ_{22}^{i+}	λ_{32}^{i+}	$-\lambda_{12}^{r+}$	$-\lambda_{22}^{r+}$	$-\lambda_{32}^{r+}$	$-\lambda_{12}^{i+}$	$-\lambda_{22}^{i+}$	$-\lambda_{32}^{i+}$	λ_{12}^{r-}	λ_{22}^{r-}	λ_{32}^{r-}	λ_{12}^{i-}	λ_{22}^{i-}	λ_{32}^{i-}
3	$-\lambda_{13}^{r+}$	$-\lambda_{23}^{r+}$	$-\lambda_{33}^{r+}$	λ_{13}^{i+}	λ_{23}^{i+}	λ_{33}^{i+}	$-\lambda_{13}^{r+}$	$-\lambda_{23}^{r+}$	$-\lambda_{33}^{r+}$	$-\lambda_{13}^{i+}$	$-\lambda_{23}^{i+}$	$-\lambda_{33}^{i+}$	λ_{13}^{r-}	λ_{23}^{r-}	λ_{33}^{r-}	λ_{13}^{i-}	λ_{23}^{i-}	λ_{33}^{i-}
4	$-\lambda_{11}^{i+}$	$-\lambda_{21}^{i+}$	$-\lambda_{31}^{i+}$	$-\lambda_{11}^{r+}$	$-\lambda_{21}^{r+}$	$-\lambda_{31}^{r+}$	λ_{11}^{i+}	λ_{21}^{i+}	λ_{31}^{i+}	$-\lambda_{11}^{r+}$	$-\lambda_{21}^{r+}$	$-\lambda_{31}^{r+}$	$-\lambda_{11}^{i-}$	$-\lambda_{21}^{i-}$	$-\lambda_{31}^{i-}$	λ_{11}^{r-}	λ_{21}^{r-}	λ_{31}^{r-}
5	$-\lambda_{12}^{i+}$	$-\lambda_{22}^{i+}$	$-\lambda_{32}^{i+}$	$-\lambda_{12}^{r+}$	$-\lambda_{22}^{r+}$	$-\lambda_{32}^{r+}$	λ_{12}^{i+}	λ_{22}^{i+}	λ_{32}^{i+}	$-\lambda_{12}^{r+}$	$-\lambda_{22}^{r+}$	$-\lambda_{32}^{r+}$	$-\lambda_{12}^{i-}$	$-\lambda_{22}^{i-}$	$-\lambda_{32}^{i-}$	λ_{12}^{r-}	λ_{22}^{r-}	λ_{32}^{r-}
6	$-\lambda_{13}^{i+}$	$-\lambda_{23}^{i+}$	$-\lambda_{33}^{i+}$	$-\lambda_{13}^{r+}$	$-\lambda_{23}^{r+}$	$-\lambda_{33}^{r+}$	λ_{13}^{i+}	λ_{23}^{i+}	λ_{33}^{i+}	$-\lambda_{13}^{r+}$	$-\lambda_{23}^{r+}$	$-\lambda_{33}^{r+}$	$-\lambda_{13}^{i-}$	$-\lambda_{23}^{i-}$	$-\lambda_{33}^{i-}$	λ_{13}^{r-}	λ_{23}^{r-}	λ_{33}^{r-}
7	λ_{11}^{r+}	λ_{21}^{r+}	λ_{31}^{r+}	$-\lambda_{11}^{i+}$	$-\lambda_{21}^{i+}$	$-\lambda_{31}^{i+}$	λ_{11}^{r+}	λ_{21}^{r+}	λ_{31}^{r+}	λ_{11}^{i+}	λ_{21}^{i+}	λ_{31}^{i+}	0	0	0	0	0	0
8	λ_{12}^{r+}	λ_{22}^{r+}	λ_{32}^{r+}	$-\lambda_{12}^{i+}$	$-\lambda_{22}^{i+}$	$-\lambda_{32}^{i+}$	λ_{12}^{r+}	λ_{22}^{r+}	λ_{32}^{r+}	λ_{12}^{i+}	λ_{22}^{i+}	λ_{32}^{i+}	0	0	0	0	0	0
9	λ_{13}^{r+}	λ_{23}^{r+}	λ_{33}^{r+}	$-\lambda_{13}^{i+}$	$-\lambda_{23}^{i+}$	$-\lambda_{33}^{i+}$	λ_{13}^{r+}	λ_{23}^{r+}	λ_{33}^{r+}	λ_{13}^{i+}	λ_{23}^{i+}	λ_{33}^{i+}	0	0	0	0	0	0
10	$-\lambda_{11}^{r+}$	$-\lambda_{21}^{r+}$	$-\lambda_{31}^{r+}$	λ_{11}^{i+}	λ_{21}^{i+}	λ_{31}^{i+}	$-\lambda_{11}^{r+}$	$-\lambda_{21}^{r+}$	$-\lambda_{31}^{r+}$	$-\lambda_{11}^{i+}$	$-\lambda_{21}^{i+}$	$-\lambda_{31}^{i+}$	0	0	0	0	0	0
11	$-\lambda_{12}^{r+}$	$-\lambda_{22}^{r+}$	$-\lambda_{32}^{r+}$	λ_{12}^{i+}	λ_{22}^{i+}	λ_{32}^{i+}	$-\lambda_{12}^{r+}$	$-\lambda_{22}^{r+}$	$-\lambda_{32}^{r+}$	$-\lambda_{12}^{i+}$	$-\lambda_{22}^{i+}$	$-\lambda_{32}^{i+}$	0	0	0	0	0	0
12	$-\lambda_{13}^{r+}$	$-\lambda_{23}^{r+}$	$-\lambda_{33}^{r+}$	λ_{13}^{i+}	λ_{23}^{i+}	λ_{33}^{i+}	$-\lambda_{13}^{r+}$	$-\lambda_{23}^{r+}$	$-\lambda_{33}^{r+}$	$-\lambda_{13}^{i+}$	$-\lambda_{23}^{i+}$	$-\lambda_{33}^{i+}$	0	0	0	0	0	0
13	I_{11}	I_{21}	I_{31}	M_{11}	M_{21}	M_{31}	N_{11}	N_{21}	N_{31}	T_{11}	T_{21}	T_{31}	0	0	0	0	0	0
14	I_{12}	I_{22}	I_{32}	M_{12}	M_{22}	M_{32}	N_{12}	N_{22}	N_{32}	T_{12}	T_{22}	T_{32}	0	0	0	0	0	0
15	I_{13}	I_{23}	I_{33}	M_{13}	M_{23}	M_{33}	N_{13}	N_{23}	N_{33}	T_{13}	T_{23}	T_{33}	0	0	0	0	0	0
16	$-M_{11}$	$-M_{21}$	$-M_{31}$	I_{11}	I_{21}	I_{31}	$-T_{11}$	$-T_{21}$	$-T_{31}$	N_{11}	N_{21}	N_{31}	0	0	0	0	0	0
17	$-M_{12}$	$-M_{22}$	$-M_{32}$	I_{12}	I_{22}	I_{32}	$-T_{12}$	$-T_{22}$	$-T_{32}$	N_{12}	N_{22}	N_{32}	0	0	0	0	0	0
18	$-M_{13}$	$-M_{23}$	$-M_{33}$	I_{13}	I_{23}	I_{33}	$-T_{13}$	$-T_{23}$	$-T_{33}$	N_{13}	N_{23}	N_{33}	0	0	0	0	0	0
19	L_{121}^{r+}	L_{221}^{r+}	L_{321}^{r+}	L_{121}^{i+}	L_{221}^{i+}	L_{321}^{i+}	L_{121}^{r+}	L_{221}^{r+}	L_{321}^{r+}	L_{121}^{i-}	L_{221}^{i-}	L_{321}^{i-}	$-L_{121}^{r-}$	$-L_{221}^{r-}$	$-L_{321}^{r-}$	$-L_{121}^{i-}$	$-L_{221}^{i-}$	$-L_{321}^{i-}$
20	L_{122}^{r+}	L_{222}^{r+}	L_{322}^{r+}	L_{122}^{i+}	L_{222}^{i+}	L_{322}^{i+}	L_{122}^{r+}	L_{222}^{r+}	L_{322}^{r+}	L_{122}^{i-}	L_{222}^{i-}	L_{322}^{i-}	$-L_{122}^{r-}$	$-L_{222}^{r-}$	$-L_{322}^{r-}$	$-L_{122}^{i-}$	$-L_{222}^{i-}$	$-L_{322}^{i-}$

21	L_{123}^{r+}	L_{223}^{r+}	L_{323}^{r+}	L_{123}^{i+}	L_{223}^{i+}	L_{323}^{i+}	L_{123}^{r+}	L_{223}^{r+}	L_{323}^{r+}	L_{123}^{i-}	L_{223}^{i-}	L_{323}^{i-}	$-L_{123}^{r-}$	$-L_{223}^{r-}$	$-L_{323}^{r-}$	$-L_{123}^{i-}$	$-L_{223}^{i-}$	$-L_{323}^{i-}$
22	$-L_{121}^{i+}$	$-L_{221}^{i+}$	$-L_{321}^{i+}$	$-L_{121}^{r+}$	$-L_{221}^{r+}$	$-L_{321}^{r+}$	L_{121}^{i+}	L_{221}^{i+}	L_{321}^{i+}	$-L_{121}^{r+}$	$-L_{221}^{r+}$	$-L_{321}^{r+}$	$-L_{121}^{i-}$	$-L_{221}^{i-}$	$-L_{321}^{i-}$	L_{121}^{r-}	L_{221}^{r-}	L_{321}^{r-}
23	$-L_{122}^{i+}$	$-L_{222}^{i+}$	$-L_{322}^{i+}$	$-L_{122}^{r+}$	$-L_{222}^{r+}$	$-L_{322}^{r+}$	L_{122}^{i+}	L_{222}^{i+}	L_{322}^{i+}	$-L_{122}^{r+}$	$-L_{222}^{r+}$	$-L_{322}^{r+}$	$-L_{122}^{i-}$	$-L_{222}^{i-}$	$-L_{322}^{i-}$	L_{122}^{r-}	L_{222}^{r-}	L_{322}^{r-}
24	$-L_{123}^{i+}$	$-L_{223}^{i+}$	$-L_{323}^{i+}$	$-L_{123}^{r+}$	$-L_{223}^{r+}$	$-L_{323}^{r+}$	L_{123}^{i+}	L_{223}^{i+}	L_{323}^{i+}	$-L_{123}^{r+}$	$-L_{223}^{r+}$	$-L_{323}^{r+}$	$-L_{123}^{i-}$	$-L_{223}^{i-}$	$-L_{323}^{i-}$	L_{123}^{r-}	L_{223}^{r-}	L_{323}^{r-}