

*REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE*

*MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE*

## **THESE**

**Présentée**

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

**Par :**  
**DERARDJA AKILA**

Pour obtenir le titre de

**DOCTEUR D'ETAT EN GENIE MECANIQUE**

**Option : Construction Mécanique**

**ETUDE DE LA DISSOCIATION D'UN RESEAU DE MISFIT  
HEXAGONAL PLACE A L'INTERFACE DE COUCHES MINCES**

**Soutenue Publiquement le 09/11/2005 devant le Jury composé de :**

|                       |                   |  |                   |
|-----------------------|-------------------|--|-------------------|
| <b>K. GUERGUOURI,</b> | <b>Professeur</b> | <b>Université de Constantine</b>       | <b>Président</b>  |
| <b>L. ADAMI,</b>      | <b>Professeur</b> | <b>Université de Batna</b>             | <b>Rapporteur</b> |
| <b>A. ATI,</b>        | <b>Professeur</b> | <b>Université de Bejaia</b>            | <b>Examineur</b>  |
| <b>G. DIRRAS,</b>     | <b>M C. (HDR)</b> | <b>LPMTM, Université de Paris XIII</b> | <b>Examineur</b>  |
| <b>K. TAIBI,</b>      | <b>M C.</b>       | <b>USTHB, Alger</b>                    | <b>Examineur</b>  |

**Publications et Communications internationales réalisées au cours de cette thèse**

- 1- L. ADAMI, A. DERARDJA and R. BONNET, *A thin foil deformed by hexagonal network of misfit dislocations: Application to (111) CoSi<sub>2</sub>/(111)Si* Congrès Euroméditerranéen de la matière condensée, publié dans **Algerian Journal of Advanced Materials N°3,69-73 (1999).****
- 2- A. DERARDJA, R. BONNET and L. ADAMI, *Elastic interactions in the heterointerface- interphase  $\gamma$ /(111) $\gamma'$  After nucleation and growth in a nickel based superalloys*, **The 4th international mechanical engineering Conference JIMEC Amman (2001)****
- 3- T. OUTTAS, L. ADAMI, A. DERARDJA, S. MADANI and R. BONNET, *Anisotropic elastic field of a thin bicrystal deformed by a biperiodic network of Misfit dislocations*, **Phys. Stat. Sol.(a), 188, N°3, 1041-1045 (2001).****
- 4- A. DERARDJA, L. ADAMI, S. BENYOUSSEF et R. BONNET, *Anisotropie de la relaxation élastique d'un réseau bipériodique de dislocations enterrées : Théorie et application aux bicristaux de semi conducteurs*, **Ann. Chim. Sci. Mat., 29(4), 123-132 (2004)****

*A mes parents*

*A toute personne qui, en connaissant la valeur de la science, a connu  
la puissance et la grandeur de celui qui nous l'a apprise.*

*et*

*A toute personne qui utilise la science pour le bien de toutes les créatures.*

## ***REMERCIEMENTS***

Ce travail a vu le jour grâce à la contribution de :

- Mon Directeur de Thèse, Monsieur Lahbib ADAMI, qui m'a montré la bonne direction pour faire de la recherche. Il m'a appris, également, la liberté d'initiative et m'a témoigné, incessamment, ses encouragements et sa confiance. Qu'il trouve ici l'expression de ma gratitude.
- Monsieur Roland BONNET, Directeur de recherches au C.N.R.S de Grenoble pour son aide et ses conseils assidus, lesquels étaient essentiels dans l'accomplissement de ce travail. Qu'il trouve ici l'expression de toute ma considération et mon profond respect pour son esprit scientifique, son amabilité et ses encouragements permanents.

Je remercie vivement :

- Monsieur Kamel GUERGUOURI, Professeur à l'université de Constantine d'avoir bien voulu accepté de présider ce jury.
- Monsieur Abdelaziz ATI, Professeur à l'université de Bejaia.
- Monsieur Guy DIRRAS, Maître de Conférences au LPMTM, C.N.R.S à l'université de Paris 13.
- Monsieur Kamel TAIBI, Maître de Conférences à l'USTHB, Alger

Pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail et pour le grand honneur qu'ils me font en acceptant de le juger. Il est certain que leurs commentaires vont aider à perfectionner la qualité de ma thèse.

Je remercie les membres de ma famille de recherche :

M<sup>r</sup> T. OUTTAS, M<sup>r</sup> S. MADANI , M<sup>r</sup> M. BRIOUA et M<sup>r</sup> R. BENBOUTA, pour leurs conseils, leurs sympathies, leurs encouragements. Depuis que je les connais, je les ai trouvé toujours prêts à m'écouter et à m'aider.

Je remercie également toutes mes amies, particulièrement :

S. AOUBID, W.BENABBAS et L. BOUTERAA, leur sincère amitié a, indirectement, favorisé la réalisation de ce travail.

## RESUME

Les interfaces hétérogènes ne sont relativement pas bien connues, hormis pour quelques couples métal-oxyde que la cohérence cristalline permet de décrire simplement. En général, la structure de l'interface ne résulte pas du raccordement exact de deux réseaux et il est nécessaire d'introduire les dislocations interfaciales pour décrire cette interface dont de nombreuses propriétés sont tributaires. Notre travail est voué à l'étude des systèmes épitaxiaux à interfaces semi cohérentes qui contiennent parfois des réseaux bipériodiques complexes de dislocations de misfit (MDs). Les champs élastiques causés par de tels arrangements observés le long d'interfaces cristallines jouent un rôle crucial dans l'amélioration des propriétés physiques des systèmes épitaxiaux. Dans cette thèse, des résultats nouveaux et exacts en élasticité anisotrope sont proposés pour des réseaux hexagonaux de dislocations de misfit incluant des fautes d'empilement intrinsèques et/ou extrinsèques. En généralisant une approche antérieure basée sur la périodicité du déplacement relatif interfacial et une formulation en séries de Fourier double des champs de déplacements, nous développons les expressions des champs élastiques en considérant une dissociation possible des MDs. Les coefficients de Fourier et les termes définissant la géométrie du réseau interfacial sont déterminés analytiquement. Les termes comportant les coefficients de Fourier constituent les éléments second membre d'une matrice  $18 \times 18$  pour le système couche sur substrat et  $24 \times 24$  pour le bicristal mince. En occurrence, des applications numériques sont présentées pour le bilame mince InAs/(111) GaAs analysé par microscopie à effet tunnel par J. G. Belk et col et pour une couche de silicium déposée en désorientation d'un angle de  $5^\circ$  sur un substrat de silicium observé par H. Föll et col. Les effets d'anisotropie, d'épaisseur et de dissociation sont discutés à partir de graphes typiques.

## ABSTRACT

The heterogeneous interfaces are relatively little known, aside from some metal-oxide pair which crystalline coherences may be described simply. Generally, the interface structures do not result from the exact joining of two lattices and it is necessary to insert interfacial dislocations to describe this interface which many properties are reliant. Our work is devoted to the study of epitaxial systems with semicoherent interfaces which contain sometimes complex periodic networks of misfit dislocations (MDs). The elastic fields of such arrangements observed along interfaces play a crucial part in the improvement of the physical properties of epitaxial systems. In this thesis, new and exact results are proposed in anisotropic elasticity for hexagonal networks of MDs which contain intrinsic and/or extrinsic stacking faults. We developed, using a previous approach based on the relative interfacial displacement and a Fourier series formulation of the displacement fields, the expressions of elastic fields when there is a possible dissociation of MDs. The Fourier coefficients which define the interfacial network geometries are determined analytically. The terms which involve the Fourier coefficients constitute the second elements of the  $18 \times 18$  matrix for the epilayer/substrate systems and  $24 \times 24$  matrix for the thin bilayer. In this case, numerical applications are presented for the thin bilayer InAs/(111)GaAs which was analysed by Scanning Tunneling Microscopy (STM) by J. G. Belk and al, and for an epilayer of silicon deposited on a silicon substrate with a misorientation angle of  $5^\circ$  observed by H. Föll and al. Anisotropy, thickness and dissociation effects are discussed from typical graphs.





# SOMMAIRE

|   |    |
|---|----|
| INTRODUCTION GENERALE.....  | 1  |
| <i>CHAPITRE I : LES RESEAUX DE DISLOCATIONS<br/>INTERFACIALES</i>                         |    |
| I. 1 Introduction.....  | 5  |
| I. 2 Réseaux non dissociés.....   | 6  |
| I. 2. 1 Travaux théoriques.....   | 6  |
| I. 2. 2 Investigations expérimentales.....  | 7  |
| I. 3 Réseaux dissociés.....   | 8  |
| I. 3. 1 Travaux théoriques.....   | 8  |
| I. 3. 2 Investigations expérimentales.....  | 9  |
| <i>CHAPITRE II : DISSOCIATION A SYMETRIE TRI- AXIALE<br/>DU RESEAU DE MISFIT</i>          |    |
| II. 1 Introduction.....   | 13 |
| II. 2 Conventions et symboles attachés à un défaut d'empilement.....                      | 13 |
| II. 3 Réseau hexagonal comportant des fautes d'empilement intrinsèques.....               | 17 |
| II. 4 Réseau hexagonal dissocié en fautes d'empilement intrinsèques et extrinsèques.....  | 22 |
| II. 5 Conclusion.....   | 25 |
| <i>CHAPITRE III : CALCUL DES CHAMPS DE DEPLACEMENTS<br/>ET DE CONTRAINTES ANISOTROPES</i> |    |
| III.1 Introduction.....   | 26 |
| III. 2 Solution en élasticité anisotrope.....   | 26 |
| III. 2. 1 Expression du déplacement $U_k$ .....   | 29 |
| III. 2. 2 Expression des contraintes.....   | 29 |
| III. 3 Solution pour un bicristal mince.....  | 31 |
| III. 3. 1 Conditions aux limites .....  | 31 |
| III. 4 Solution pour un milieu semi infini .....  | 38 |
| III. 4. 1 Conditions aux limites du modèle géométrique.....                               | 38 |
| III. 5 Conclusion.....  | 44 |

**CHAPITRE IV : APPLICATIONS AUX INTERFACES COMPACTES**

|   |               |
|---|---------------|
| <b>IV. 1 Introduction.....</b>  | <b>45</b>     |
| <b>IV. 2 Bicristal ultramince.....</b>  | <b>48</b>     |
| <b>IV. 2. 1 Courbe d'élévation .....</b>  | <b>48</b>     |
| <b>IV. 2. 2 Topologie des surfaces libres.....</b>                                | <b>50</b>     |
| <b>IV. 2. 3 Images STM numériques.....</b>  | <b>53</b>     |
| <b>IV. 2. 4 Distribution des contraintes.....</b>                                 | <b>55</b>     |
| <b>IV. 2. 5 Effet de la dissociation sur la distribution des contraintes.....</b> | <b>55</b>     |
| <b>IV. 3 Conclusion.....</b>  | <b>60</b>     |
| <b>IV. 4 Milieu semi infini.....</b>  | <b>61</b>     |
| <b>IV. 4. 1 Courbe d'élévation.....</b>   | <b>62</b>     |
| <b>IV. 4. 2 Effet de la dissociation sur la surface libre.....</b>                | <b>64</b>     |
| <b>IV. 4. 3 Effet de l'épaisseur sur la déformation de la surface libre.....</b>  | <b>67</b>     |
| <b>IV. 4. 4 Représentation schématique des équi-contraintes.....</b>              | <b>70</b>     |
| <b>IV. 5 Conclusion.....</b>  | <b>72</b>     |
| <br><b>CONCLUSION GENERALE.....</b>   | <br><b>73</b> |
| <b>Références Bibliographiques</b>  |               |
| <b>Annexes</b>  |               |

---

## INTRODUCTION GENERALE

Le développement des hétéro-structures est directement lié au progrès des techniques d'élaboration et d'optimisation de nouveaux matériaux destinés à des applications où une grande précision est requise. La croissance homo ou hétéro-épitaxiale de matériaux et les nouvelles techniques d'obtention de ces hétéro-interfaces sont, en conséquence, des thèmes très attractifs pour bien des laboratoires, avec des applications pratiques très prometteuses, voir par exemple [1,6]. Ces techniques impliquent le raccordement de deux cristaux de natures identiques (joints de grains) ou différentes (joints interphases), très minces (quelques dizaines de nanomètres), leurs réseaux cristallins étant éventuellement tournés l'un par rapport à l'autre [7,9]. Les désaccords de longueurs et/ou d'angles le long de l'interface génèrent inévitablement des champs élastiques associés au raccordement des deux réseaux cristallins, champs élastiques qui peuvent influencer beaucoup sur les propriétés physiques recherchées, voir par exemple [10,11].

Notre travail s'insère parmi les efforts actuels qui sont déployés dans le but d'élargir la théorie des dislocations aux défauts interfaciaux et faciliter l'identification de ceux-ci par les méthodes de caractérisation. L'intérêt du sujet s'est focalisé sur le fait que l'interface tapissée d'un réseau hexagonal de dislocations de désaccord (Misfit Dislocations : MDs) ne demeure pas stable en température ambiante pour une longue durée ou encore lors des techniques de dépôt, et en conséquence pour certaines applications, il est plus avantageux de connaître l'évolution de ce réseau de MDs et d'instaurer la solution adéquate quand la géométrie du réseau n'est plus bidimensionnelle mais plutôt tridimensionnelle. Dans ce sens, la solution théorique et numérique est établie dans le cadre d'une élasticité anisotrope pour un réseau de dislocations de misfit pures coins quand la dissociation des nœuds triples du réseau donne naissance à des imparfaites de Shockley.

Une synthèse bibliographique sur les travaux les plus significatifs portant sur la dissociation d'une dislocation en faute d'empilement intrinsèque (FEI) et / ou en faute d'empilement extrinsèque (FEE) ainsi que la dissociation de réseaux bipériodiques de MDs nous a mené à fonder les hypothèses des modèles suivants :

- a) Un bicristal ultra mince dont l'interface est recouverte d'un réseau hexagonal régulier et bipériodique de MDs. Un nœud sur deux de la cellule de base formant le réseau est dissocié en donnant une FEI. L'extension de la dissociation est caractérisée par un facteur  $q$  défini par le rapport de la surface de faute sur la surface non fautée.

- b) Un modèle géométrique définit par une couche mince déposée sur un substrat monocristallin tel que l'interface est constituée d'un réseau régulier en nid d'abeilles dont tous les sommets sont dissociés, alternativement, en FEI et FEE. L'étendue de la dissociation de la FEI est caractérisée par un facteur  $q$  et celle de la FEE par  $p$  tel que :  $p = 1 - q$ .

Après une brève présentation des hypothèses de calcul adoptées et des conventions et symboles utilisés, nous déterminons analytiquement les coefficients des séries de Fourier qui tiennent compte de la géométrie des réseaux dans le cas (a) et dans le cas (b). Par la suite, nous montrons comment obtenir la solution générale des équations dans le cas d'une double périodicité en utilisant les séries de Fourier doubles.

La solution bute sur un système de neuf équations linéaires à neuf inconnues complexes dans le cas d'un milieu semi infini et sur un système de douze équations à douze inconnues complexes dans le cas d'un bilame mince. Le second membre des deux systèmes d'équations est composé de la somme de deux termes ; un terme  $T_k$  qui dépend à son tour d'un autre terme calculé auparavant pour un réseau de MDs non dissocié noté  $T_k^{\text{ind}}$  et un terme supplémentaire noté  $H_k$  relatifs aux nouvelles conditions liées à la géométrie du réseau de MDs considéré.

Les systèmes d'équations obtenus ne peuvent être inversés que numériquement. En conséquence, nous avons construits des programmes en langage Fortran qui ont permis d'obtenir des résultats analogues à ceux peu nombreux disponibles dans la littérature.

Le choix de ces deux modèles géométriques impose la division du travail en deux parties principales :

#### Première partie :

Nous nous sommes fixés pour objectif, dans un premier temps, de déterminer en anisotropie les champs élastiques relatifs à un bicristal mince déformée par une hétéro-interface cohérente ou semi-cohérente parallèle aux surfaces libres du bilame. Après obtention des équations définitives donnant les champs de déplacements et de contraintes, nous avons construit un programme en langage fortran en double précision qui permet d'effectuer tous les calculs recherchés dans le problème étudié.

Une application au système InAs/(111) GaAs a permis une validation de notre programme de calcul en vérifiant que près de l'isotropie, c'est à dire pour des constantes élastiques quasi isotropes, les résultats convergent vers ceux disponibles dans [12]. En effet, la courbe d'élévation tracée au dessus des points O, U et V en quasi isotropie est similaire à celle tracée en isotropie. La même courbe tracée en anisotropie souligne un effet d'anisotropie important qui n'a pas été relevé auparavant.

Une fois le programme vérifié, nous avons calculé les champs de déplacements et de contraintes ainsi que des images numériques identiques aux images STM fournies par J. G. Belk et col [13].

L'importance de l'effet d'anisotropie relevé nous a mené à juger qu'une comparaison avec l'étude réalisée en anisotropie pour un réseau hexagonal régulier de dislocations de misfit par T. Outtas et col [14] serait plus raisonnable. Afin de retrouver des résultats comparables à ceux obtenus par les auteurs, nous avons considéré le cas où le coefficient de dissociation prend la valeur de  $2/3$  ce qui correspond, dans le modèle abordé, à une absence de la dissociation. Nous avons constaté, alors, que les courbes décrivant la topologie des surfaces libres et celles qui illustrent la distribution des contraintes sont en parfait accord avec les résultats auxquels sont parvenus T. Outtas et col. Par la suite, les effets d'épaisseurs des surfaces libres du bilame mince et de dissociation du réseau de MDs sont discutés à partir de graphes typiques.

#### Deuxième partie :

En référence aux travaux réalisés sur l'or par Wöll et col [15], par Barth et col [16] et sur du platine par Sandy et col [17] ainsi que Bott et col [18] et en se basant sur la méthode présentée par Bonnet [19], nous établissons en élasticité anisotrope, pour un système couche sur substrat, une solution détaillée lorsque tous les sommets du réseau hexagonal de dislocations coins dont les vecteurs de Burgers sont du type  $1/2 \langle 110 \rangle$  sont dissociés en partielles de Shockley dont les vecteurs de burgers sont du type  $1/6 \langle 112 \rangle$  ; ce qui nécessite l'introduction de conditions aux limites appropriées. Nous retrouvons, à travers une application aux cristaux anisotropes de silicium désorientés d'un angle de  $5^\circ$ , des images tout à fait cohérentes avec celles observés par H. Föll et col [21] pour un sous joint de torsion observé dans la lame mince (111) Si/(111) Si.

Nous avons, également, testé notre programme près de l'isotropie en traçant la courbe d'élévation par inclusion des constantes élastiques quasi-isotropes. Nous avons enregistré, une fois de plus, un effet d'anisotropie important. Nous avons quantifié la perturbation de la surface libre distante de l'interface plane par un nombre  $N$  de mono-couches  $Mc_s$ . Il apparaît sur les topologies des surfaces libres une influence de l'épaisseur qui est loin d'être négligeable. Aussi, l'extension de la dissociation change complètement la morphologie de ces dernières. Finalement, nous traçons les courbes d'équi-contraintes, dont les contours doivent permettre de donner des explications plus détaillées sur les contraintes localisées au niveau de la FEI et de la FEE. L'idée directrice de cette dernière application est de voir l'évolution de la dissociation dans une symétrie tri-axiale.

En conclusion, nous tenons à signaler, qu'à notre connaissance et jusqu'à ce jour, il n'existe aucun résultat publié en anisotropie pour cette partie étudiée.

La comparaison des résultats a été, de ce fait, effectuée par rapport aux quelques images numériques calculées dans le cadre d'une élasticité isotrope pour le cristal  $\text{Ni}_{75}\text{Pt}_{25}$  recuit [19].

Aussi, l'absence de résultats semblables en isotropie pour l'application  $\text{Si}/(111)\text{Si}$  a rendu l'interprétation plus délicate. De nombreuses idées peuvent, en conséquence, être développés pour la même application, ou encore, pour d'autres applications similaires afin de donner plus d'explication au phénomène physique observé.

# LES RESEAUX DE DISLOCATIONS INTERFACIALES

## I. 1 Introduction

La technologie moderne utilise, souvent, des matériaux différents qui doivent être assemblés en une seule unité. Ce qui conduit, inévitablement, à l'existence d'interfaces entre les phases constituant l'unité. L'interface devient, alors, un élément important qui peut influencer considérablement les propriétés du matériau. Ces interfaces, ou encore, hétéro interfaces sont élaborées de façons différentes suivant le domaine d'application pour lequel elles sont destinées. Elles sont, fréquemment, ornées de dislocations qui provoquent des champs élastiques inaccessibles à la mesure expérimentale. La mise au point d'un matériau exige, en conséquence, la connaissance de ces champs élastiques régnants au niveau de l'interface. Ce qui apporterait des propriétés spécifiques aux futures applications dans certains domaines, telles que la microélectronique et l'optoélectronique. Parmi ces applications particulièrement attrayantes, citons l'exemple de la fabrication de substrats auto-organisant. Ces nano-structures ouvrent, en effet, la voie à la réalisation de composants électroniques originaux offrant des possibilités d'intégration très importantes ; on peut, par exemple, élever la densité des boîtes quantiques si l'on connaît le champ de contraintes dans les couches déposées. Le processus expliquant ce phénomène d'auto organisation est basé sur l'effet de diffusion anisotropique des atomes déposés en surface et qui subissent l'influence du champ de contraintes des couches enterrées. Ce chapitre, préambule à notre travail, a un double objectif. Il donne, d'une part, un tour d'horizon succinct des connaissances expérimentales et théoriques sur les principaux travaux reliés directement aux systèmes épitaxiaux dont la surface est déformée par des dislocations de misfit partielles de type Shockley et fautes d'empilement. Il permet, d'autre part, d'établir l'état de l'art sur certaines propriétés que nous rediscutons plus loin sous l'éclairage des résultats de notre travail. Nous commençons par des rappels généraux sur les travaux réalisés théoriquement et expérimentalement en isotropie et en anisotropie sur les réseaux hexagonaux non dissociés. Ensuite nous exposons les travaux disponibles qui traitent le cas de la dissociation d'une dislocation de misfit (MDs) et d'un réseau de MDs.

## I. 2 Réseaux non dissociés

### I. 2. 1 Travaux théoriques

Pour le cas le plus simple d'une dislocation de misfit coin avec une ligne et un vecteur de Burgers parallèle à l'hétéro-interface enterrée, le glissement à caractère linéaire de la dislocation sur le plan de l'interface est associé à un champ de déplacements élastique relatif interfacial. Quand plusieurs MDs interagissent élastiquement, la perturbation géométrique de la surface induite par le champ de déformation devient beaucoup plus compliquée. A ce moment là, il devient indispensable d'évaluer correctement ces champs tri-dimensionnels afin d'apprécier leur contribution à l'explication d'images observées.

Pour une MDs rectiligne parallèle à la surface libre, la théorie de l'élasticité linéaire classique a été appliquée par plusieurs chercheurs pour des conditions aux limites plus ou moins compliquées dans l'hypothèse d'un milieu soit homogène, soit hétérogène [22, 29].

Cependant, pour des MDs non rectilignes relativement voisines les unes des autres, il est souhaitable de prendre en compte leur distribution géométrique le long d'hétérointerfaces, le désaccord paramétrique entre les deux cristaux et les constantes élastiques relatives. Dans ce contexte, Saada étudie le cas d'un réseau hexagonal formé par des dislocations de translation parallèles à la surface libre dans milieu homogène [30]. L'auteur montre, en utilisant l'expression du tenseur des déformations donnée par Mura (1971), que les propriétés essentielles des réseaux plans, périodiques de dislocations, trouvées dans l'approximation d'une élasticité isotrope peuvent être étendues pour les joints de grains à bas angle dans un milieu anisotrope. De leur côté, Willis et col [31] ont traité la relaxation à la surface libre d'une famille de dislocations parallèles. Les champs élastiques du joint interphase à structure périodique (simple ou double) ont été établis, par la suite et formellement, par Bonnet [32]. Dans le cas d'un réseau de MDs identiques et parallèles, l'auteur détermine analytiquement les champs élastiques et l'énergie élastique stockée. Une application est déduite pour le système laiton $\alpha$ /laiton $\beta$ . Le problème des réseaux hexagonaux périodiques a été résolu partiellement par Rey et col [33] en faisant appel à une méthode qui semble être délicate à manœuvrer. Les auteurs déterminent les champs de contraintes, en élasticité isotrope, en appliquant la théorie continue des dislocations développée antérieurement [34,36]. Ils utilisent la fonction de distribution de Dirac pour le traitement des réseaux discrets de dislocations de translation et ils parviennent à obtenir le tenseur des contraintes dans l'hypothèse de faibles déformations et petites désorientations. Chaque élément de ce tenseur se compose de deux termes :

- Un terme périodique décroissant exponentiellement avec la distance au plan d'interface et nul en moyenne.
- Un terme constant dans chacune des moitiés d'espace présentant une discontinuité à la traversée de l'interface.



Parmi les méthodes disponibles dans la littérature, celle qui a retenue notre attention est une contribution basée sur une formulation en séries de Fourier, définie en isotropie, pour un réseau bipériodique par Bouzaher et col [37] car elle présente des formules explicites qui peuvent être vérifiées numériquement. En effet, des applications numériques donnant des courbes qui illustrent l'effet de surface sont présentées pour trois hétérosystèmes différents CoSi<sub>2</sub>/Si, les résultats ont été comparés au cas du système Si/Si, dont les propriétés élastiques sont identiques pour la couche et pour le substrat. Dans le cadre d'une élasticité anisotrope, Bonnet a établi les expressions relatives aux champs de déplacements et de contraintes pour un réseau hexagonal de dislocations de misfit situé sur une interface plane [38]. En référence à son travail, j'ai traité le modèle couche sur substrat par introduction de conditions aux limites appropriés et les champs précis de déplacements et de contraintes sont alors déterminés [39]. Par la suite, Bonnet propose une solution en isotropie pour le cas du bilame mince [40]. La même approche a été reprise, dans le cadre d'une élasticité anisotrope, par T. Outtas [41].

### I. 2. 2 Investigations expérimentales

Les observations des réseaux de dislocations sont couramment effectuées par microscopie électronique à transmission (MET) sur des systèmes épitaxiaux, dans des zones d'épaisseur comprise entre 0,1 et 1  $\mu\text{m}$  [41,42]. Lorsque le motif bipériodique d'un réseau a des périodes de l'ordre de cette épaisseur, les interactions élastiques deviennent très difficiles à décrire. Néanmoins, dans le cas particulier où le réseau est strictement parallèle à ces interfaces, le problème peut être résolu dans l'hypothèse de dislocations de misfit [43,44]. Des réseaux hexagonaux complexes de dislocations linéaires ont été observés le long de joints de grains par microscopie électronique à transmission et expérimentation à rayons X [45,47], attribuant aux segments de singularités la propriété de dislocations de translation ; ce qui a conduit plusieurs auteurs à chercher la relation principale entre les vecteurs de Burgers et la géométrie des réseaux [48,50]. Particulièrement, une étude très convaincante par MET donnant précisément les vecteurs de Burgers de réseaux hexagonaux de dislocations a été publiée par l'équipe australienne [52,57]. Aussi, les contrastes de singularités interfaciales ont été analysés, en se basant sur le critère d'approximation  $\mathbf{g}\cdot\mathbf{b}$ , par Hirsch et col [46].

Des réseaux hexagonaux de singularités linéaires le long d'hétérointerfaces de métaux, de semi conducteurs et de systèmes épitaxiaux ont été, également, observés [58,63]. Avec les développements récents des techniques d'expérimentation, ces singularités deviennent de plus en plus difficiles à étudier à cause des effets de surfaces libres sur leurs champs de déplacement élastique. En effet, pour une couche très mince déposée sur un substrat monocristallin observé par diffraction à rayons X [64,65], une analyse est faite dans le but d'interpréter le champ de déplacement d'un réseau carré de singularités linéaires, mais sans tenir compte de sa dépendance de l'épaisseur  $h$  [66].

A partir d'observations en microscopie à haute résolution METHR, des études à l'échelle atomique sont présentées pour une variété d'hétérointerfaces facettées [67,69]. Les images montrent clairement que l'utilisation, uniquement, de dislocations à translation finie est inappropriée pour le calcul du champ de déplacement. Par contre, l'hypothèse de préservation de l'unité atomique structural interfacial, légèrement déformée, pour estimer le misfit est en bon accord avec les observations. Des images montrant la présence de réseaux réguliers de dislocations de misfit, pour des échantillons recuits à haute température, ont été fournies [70]. Par soucis de compréhension des phénomènes d'interfaces, et de contrôle des défauts interfaciaux à l'échelle atomique, d'autres observations sont réalisées en METHR [71,77]. La structure et la déformation de la surface libre sont, également, étudiées à l'échelle micrométrique par Cullis et col [78,79]. Par ailleurs, la description à l'échelle atomique d'interfaces comportant des dislocations commence à être abordée par des méthodes de calcul numériques.

Parmi les premiers essais, des interfaces de Si/(001)Ge et de NiSi<sub>2</sub>/(111)Si ont été simulées par Matthai et Ashu [80]. Leurs calculs sont basés sur la relaxation d'un ensemble d'atomes contenus dans un volume incluant une période interfaciale. Les conditions aux limites à la périphérie de ce volume sont fixées par les propriétés élastiques des dislocations de translation.

## **1. 3 Réseaux dissociés**

### **I. 3. 1 Travaux théoriques**

La génération et l'évolution des différentes structures de défauts au cours de la croissance de films minces dans les systèmes épitaxiaux est, ces dernières années, le sujet de nombreuses études expérimentales et théoriques. En particulier, citons celles qui témoignent de l'intense développement du concept de dislocations de misfit, leur formation aux joints d'interphases, entre substrat et film épitaxial, et qui servent de canaux efficaces pour la suppression de contraintes causées par le désaccord paramétrique ainsi que les propriétés différentes des deux milieux [81,85]. Le rôle des MDs peut, actuellement, être joué à la fois par des dislocations parfaites et des dislocations partielles qui sont associées à des fautes d'empilement. Une mono couche métallique déposée sur une surface dense d'un métal CFC ou HC peut se mettre en fautes d'empilement. L'énergie de ces fautes d'empilement sur des surfaces CFC (111) ou HC (0001) de métaux de transition, par exemple, est évaluée à 0° K par une méthode de liaisons fortes et en utilisant une technique de fraction continue [86]. Dans ce travail, les cas de l'homo et de l'hétéro-épitaxie sont envisagés. Pour l'homoépitaxie, il a été trouvé que les énergies de ces fautes d'empilement sont du même ordre de grandeur en surface et dans le volume.

Il est discuté dans le cas de l'hétéroépitaxie et pour un substrat donné, la possibilité d'apparition de fautes d'empilement en surface.

Cependant, la majorité des modèles théoriques proposés sont relatifs à la formation de dislocations parfaites, bien qu'une comparaison entre MD parfaites et partielles suggère l'existence de paramètres dans les hétéro-systèmes pour lesquels la formation de MDs partielles est préférable du point de vue énergétique [87]. L'analyse théorique de Gutkin [88] qui tient compte de la largeur du misfit entre film et substrat ( $>1\%$ ) montre que les dislocations partielles se forment dans les hétérostructures avant les dislocations parfaites. Cette conclusion est d'un intérêt considérable en vue de l'exigence de la technologie moderne utilisant des hétérostructures à large misfit. Mais, parfois, la complexité du réseau de dislocations de misfit observé implique une difficulté liée à l'établissement de solutions convenables.

En effet, très peu de travaux concernant la dissociation des réseaux périodiques sont disponibles malgré les travaux expérimentaux qui confirment la présence de ce type de réseaux, citons par exemple les références [89,90]. Dans ce contexte, Bonnet parvient à des expressions analytiques du champ de déplacements et de contraintes, en élasticité isotrope, pour un réseau hexagonal de misfit qui se dissocie en FEI, en se basant sur une approche antérieure présentée par le même auteur. Sa méthode s'avère rigoureuse, il en fait preuve à travers une application à l'hétérostructure semi conductrice InAs/(111)GaAs. Ensuite, il traite le cas où tous les nœud du réseau hexagonal de DMs sont, successivement, dissociés en FEI et FEE [12,19]. Pour le monocristal (111) Ni<sub>75</sub>Pt<sub>25</sub> qui expose un réseau trigonal formé par des FEI alternées à des FEE, il montre que les images produites par calcul numérique du relief de la surface libre de surfaces sous jacentes reconstruites peuvent être évaluées à partir des propriétés élastiques du matériau quand l'entière géométrie de la dissociation est prise en compte. Le principe des calculs est similaire à celui proposé originellement pour un modèle unidimensionnel par Frank et Van der Merwe, à l'exception de la complexité des conditions aux limites. Un travail récent concernant la dissociation d'une dislocation vis sur des plans (111) de matériaux à structure CFC est proposé par Günther [91]. Les deux partielles de Shockley sont représentées par des dislocations de Peierls séparées par une distance  $d$ . L'énergie de misfit dans le plan de glissement est obtenue pour  $N$  surfaces.

### I. 3. 2 Investigations expérimentales

L'absence de solutions fondamentales pour ce type de problèmes a une conséquence négative sur la fabrication et l'optimisation des hétérostructures affectées à des applications pratiques. Par exemple, pour l'élaboration des faces (111) du silicium, les dislocations vis du sous joint (001) se dissocient, généralement, sur des plans (111)Si et non dans le plan du sous joint ; ce qui complique le problème théorique sérieusement. Durant la dernière décennie, beaucoup de chercheurs se sont intéressés à la caractérisation d'interfaces par microscopie à effet tunnel STM (Scanning Tunneling Microscopy) car cette dernière s'avère être une technique très encourageante [92,96].

Le progrès de la STM offre une meilleure précision, à l'échelle atomique de surfaces sous jacente avec des défauts cristallins complexes et /ou des réseaux de MDs interagissant fortement avec les surfaces libres [97,98]. Les travaux expérimentaux mettant en évidence la présence de défauts d'empilement intrinsèques et / ou extrinsèques sont résumés ci après.

La première évidence expérimentale pour la dissociation d'une dislocation vis dans un joint de grain à bas angle (001) de silicium a été présentée par Belov et col [99]. Les auteurs trouvent qu'une dislocation vis de vecteur  $b = 1/2\langle 110 \rangle$  peut se dissocier sur un plan (111) en deux partielles de  $30^\circ$  formant une FEI. On déduit que la dislocation de joints de grain possède le même comportement mécanique que la dislocation parfaite de type vis d'un plan de glissement. Par imagerie STM, une dislocation coin dissocié en deux partielles de Shockley limitant une faute d'empilement dans l'hétérostructure Cu/(0001) Ru est, également, visualisée. On trouve que la relaxation du champ élastique dépend de l'épaisseur de la couche. On note une relaxation pseudomorphique pour une épaisseur de l'ordre d'une monocouche. Pour une épaisseur égale à 4 monocouches, la structure du réseau est quasi hexagonal [100].

La même interface est examinée par J. de La Figuera et col, qui ont constaté, après dépôt de monocouches de cuivre en tension sur un substrat de Ru, par une réaction de sulfuration que le sulfure réagit avec des dislocations triaxiales en les dissociant. L'augmentation de la densité de ces dislocations est accommodée par la modification du réseau de dislocations de misfit [101].

Par ailleurs, Joël Eymery et col ont élaboré par collage moléculaire de films ultra minces de silicium sur des substrats de silicium, de nouveaux substrats pour l'épitaxie présentant une nano structuration de la surface. Grâce à la désorientation des deux cristaux, le collage moléculaire produit des réseaux nanométriques de dislocations localisés à l'interface de collage. On montrera que la modulation périodique du potentiel de surface résultant du champ de contraintes des dislocations permet de réaliser une croissance auto organisée à la surface des films ultra minces de nanocristaux de Si et de Ge. Des calculs d'élasticité isotrope destinés à optimiser l'élaboration des échantillons, ainsi que les techniques de rayons X permettant l'étude de ces dislocations et nanostructures sont présentées [102].

En 2001, A. Janzen et col étudient le processus de formation de réseaux ordonnés de dislocations activés thermiquement dans l'hétérostructure Ge/(111)Si et ils parviennent à trouver des dislocations désordonnées avec un très grand nombre de partielles tri axiales dans la couche de Ge pour une température inférieure à  $550^\circ\text{C}$ . De même, Ils ont relevé pour le même système, qu'aux premières étapes de croissance, la couche de Ge forme des nanopyramides déformées conduisant à la nucléation de dislocations à la base des pyramides [103].

Une analyse quantitative de la déformation est présentée pour le système hétéro épitaxique cohérent InAs/(111)AGaAs. L'analyse combine la théorie de l'élasticité linéaire isotrope aux mesures expérimentales.

L'état de déformation de ces exemples est caractérisé par diffraction aux RX. Les distances interplanaires le long des directions cristallographiques [111] et [220] obtenues à partir des spectres de rayons X indiquent, clairement, que les couches minces se déforment parallèlement au plan interfacial InAs/(111)A GaAs, ainsi l'accommodation de la déformation est induite par le désaccord paramétrique [104].

Une analyse analogue des images obtenues par microscopie électronique à transmission MET, pour l'hétérostructure GaAs/ In<sub>x</sub>Ga obtenue par adhésion moléculaire montre que des dislocations partielles tri-axiales peuvent glisser pour donner des segments de dislocations qui accommodent le misfit interfacial avant que l'épaisseur critique ne soit atteinte. Dans l'hétéro structure InAs/(111)GaAs, des images mettant en évidence des réseaux de dislocations qui se forment quand la couche atteint l'épaisseur critique ont été obtenues par STM. Les colonnes atomiques autour des segments de dislocations et le champ de déformation induit par les dislocations de misfit sont tous deux déterminés par une mesure de la densité des dislocations [105].

De leur côté, C. T. Forwood et col (1986) ont travaillé sur des micrographies électroniques à deux ondes. Des réseaux hexagonaux de dislocations secondaires dans des joints de macle cohérents  $\Sigma 3$  dans des échantillons de bicristaux de Cu + 6% Si ont été mis en évidence. Ils ont calculé le module et le signe des vecteurs de Burgers des dislocations formant le réseau.

Le mode de croissance couche par couche des composés GaSe et InSe sur du silicium a permis de constater que ZnSe est épitaxié sur la surface InSe de la même manière que directement sur Si(111). Par contre, des fautes d'empilement sont générés dans les plans (111) avec une plus forte densité en présence de InSe [106].

Une étude sur l'alliage Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> qui suscite beaucoup d'intérêt depuis quelques années à cause de ses applications potentielles en optoélectronique a été abordée. On note que la relaxation des contraintes se fait par nucléation de dislocations de misfit. A forte teneur en Ge, la relaxation se fait d'abord par la formation d'îlots cohérents avant l'épaisseur critique et par nucléation de dislocations ensuite. Toute fois, ils ont conclu que les techniques habituelles ne permettent pas d'étudier en début de croissance (quelques monocouches) la relaxation des contraintes et le déplacement atomique [107].

En utilisant le MET, Marshall et col ont observé la dissociation d'une dislocation de misfit 60° à l'interface de multicouches SiGe/Si, étendue à l'intérieur d'un substrat de 5 à 7.5 nm d'épaisseur. L'analyse en théorie d'élasticité a montré que la dissociation est une configuration d'équilibre pour une dislocation de misfit de 60° et que la déformation par compression de multicouches sert, principalement, à la position de dislocations partielles et de fautes d'empilement suivant la surface libre [108].

Récemment, Le phénomène de reconstruction de surfaces dans les métaux C.F.C à partir de la déformation de surfaces sous jacentes de MDs avec un modèle incluant des fautes d'empilement a fasciné la communauté de la science des surfaces.

Les expériences réalisées par diffraction de rayons X et par STM montrent que les contraintes de surface dans de tels systèmes relèvent de la formation de réseaux de MDs partielles [109,110].

Le premier système métallique dans lequel des FEI et des FEE ont été observées est l'or . On voit sur une surface (111) Au un modèle de chevrons constitué d'une double bande dont l'orientation change périodiquement [111,112]. Par la suite, quelques modèles de dislocations de misfit similaires ont été observé par STM sur la surface Pt (111).

A la différence de l'or, le platine ne se reconstruit pas sous des conditions normales de température et de pression. Les expériences ont montré qu'il peut être induit à la reconstruction, soit par élévation de température autour de 1330° K, ou par ajout d'une surface dans la vapeur de Pt sursaturée. Sur certaines surfaces denses du Pt (111), la reconstruction hexagonale se modifie pour donner un modèle de triangles ondulées [113]. Aussi, la structure de la surface de platine a été investiguée par STM [114]. Les auteurs montrent que la structure de la surface peut être décrite par une création périodique de régions avec des fautes d'empilement et des dislocations partielles.

# DISSOCIATION A SYMETRIE TRI-AXIALE DU RESEAU DE DISLOCATIONS

## II. 1 Introduction

Les structures cristallines sont actuellement élaborées et observées à l'échelle nanométrique, ce qui constitue une source de nouveaux problèmes théoriques à résoudre dans le but de comprendre leurs nombreuses propriétés [113,114].

De multiples arrangements de dislocations interfaciales sont observés le long d'hétéro structures cristallines et de sous-joint de torsion. Par exemple, les bilames constitués de deux phases matérielles sont observés en microscopie électronique à haute résolution (HREM) ou en expérimentation *in situ* afin d'extraire des informations d'aspect chimique, structural ou encore mécanique. L'interface, dans ce cas, est tapissée d'un réseau bipériodique de dislocations [115].

Par ailleurs, le sous joint de torsion Si/(111) Si présente un réseau hexagonal de dislocations dissocié en deux types de fautes d'empilements ( FEI et FEE) à la fois [21].

Cependant, il y a un manque dans la théorie des dislocations tenant compte des propriétés élastiques de tels arrangements dans de tels matériaux qu'ils soient homogènes ou hétérogènes.

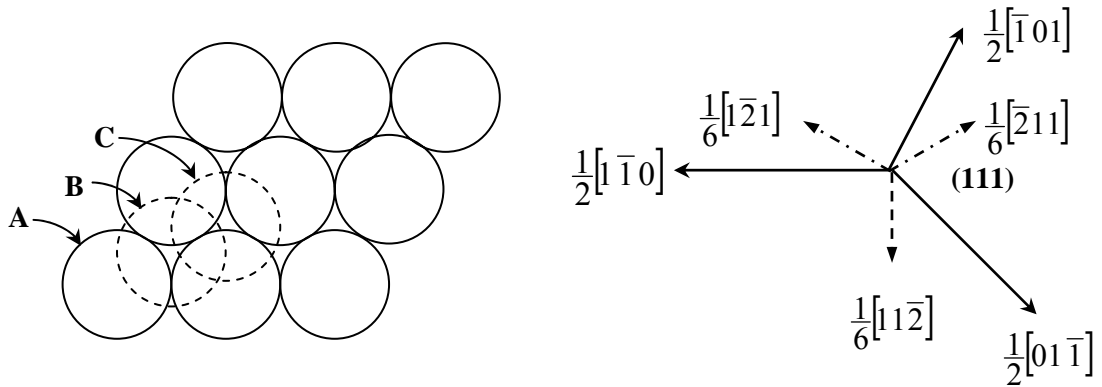
Dans notre travail, on suppose dans un premier temps qu'un nœud sur les six nœuds appartenant à la cellule de base du réseau hexagonal de MDs se dissocie en un triangle limité par des dislocations Shockley de type coin. Les trois triangles constituent trois fautes d'empilement intrinsèques (FEI).

Par la suite, les six nœuds se dissocient en donnant trois autres triangles alternés avec les premiers et qui représentent des fautes d'empilement extrinsèques (FEE).

## II. 2 Conventions et symboles attachés à un défaut d'empilement

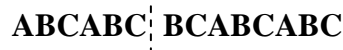
Afin de réduire son énergie élastique, la dislocation  $\frac{a}{2}[110]$  dans une structure CFC se dissocie en deux partielles de type  $\frac{a}{6}[112]$ .

Cette dissociation conduit à un défaut d'empilement atomique qui est soit intrinsèque soit extrinsèque suivant la séquence d'empilement conventionnelle. En vue d'élucider le phénomène de dissociation d'une dislocation parfaite pour former une faute d'empilement, considérons en détail l'empilement atomique de la figure (2.2.1).



**Figure 2. 2. 1** : Projection normale au plan (111) montrant les trois types des positions d'empilement A, B et C. Notations vectorielles correspondantes à un cristal CFC.

Dans le type intrinsèque, la séquence d'empilement est maintenue dans le cristal sur chaque côté à droite de la faute jusqu'au plan de faute. Le défaut d'empilement intrinsèque (FEI) se forme quand une couche atomique est supprimée de la séquence normale, après un déplacement parallèlement au plan (111) de la moitié supérieure du cristal soit :



Le défaut d'empilement extrinsèque (FEE) se forme par l'addition d'une couche atomique à la séquence normale et il suit la formation d'une FEI, soit :



Une représentation convenable, qui simplifie l'ordre séquentiel et qui est utilisée dans le traitement de différents types de partielles est établie par N. Thompson.

En joignant les atomes dans un cube de maille primitive cubique de volume  $(a/2)^3$  par des lignes droites, on forme le tétraèdre de Thompson présenté sur la figure (2.2.2) et reproduit de l'ouvrage de Hirth et Lothe [20]. Les faces internes et externes du tétraèdre représentent les quatre plans de glissement  $\{111\}$  possibles (huit plans si le signe est pris en considération, par exemple (111) et  $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ ) et ses arêtes correspondent aux six directions de glissement ( douze en tenant compte du signe) d'une structure CFC. L'atome à l'origine est noté D et les autres sont notés A, B et C dans le sens des aiguilles d'une montre tels que : D(0,0,0), A(1/2,0,1/2), B(0,1/2,1/2) et C(1/2,1/2,0).

Les projections orthogonales du sommet du tétraèdre (A, B, C, D) vers les faces opposées sont désignées respectivement par  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  et  $\delta$  sur la vue éclatée de ce tétraèdre déplié à partir du sommet D, figure (2.1(b)) et les plans opposés sont notés respectivement a, b, c et d sur la surface externe et  $\bar{a}$ ,  $\bar{b}$ ,  $\bar{c}$  et  $\bar{d}$  sur la surface interne. Les plans  $\{111\}$  sont représentés tels que, par exemple (111) devient (d). Sur la base de cette représentation, et à titre d'exemple, le vecteur de Burgers  $\frac{a}{2}[1\bar{1}0]$  sera désigné par BA tandis que le vecteur de Burgers opposé  $\frac{a}{2}[\bar{1}10]$  sera désigné par AB .



La notation  $[\bar{1}\bar{1}0]$  est utilisée à la place de la notation classique  $[\bar{1}\bar{1}0]$  pour indiquer le sens de la direction.

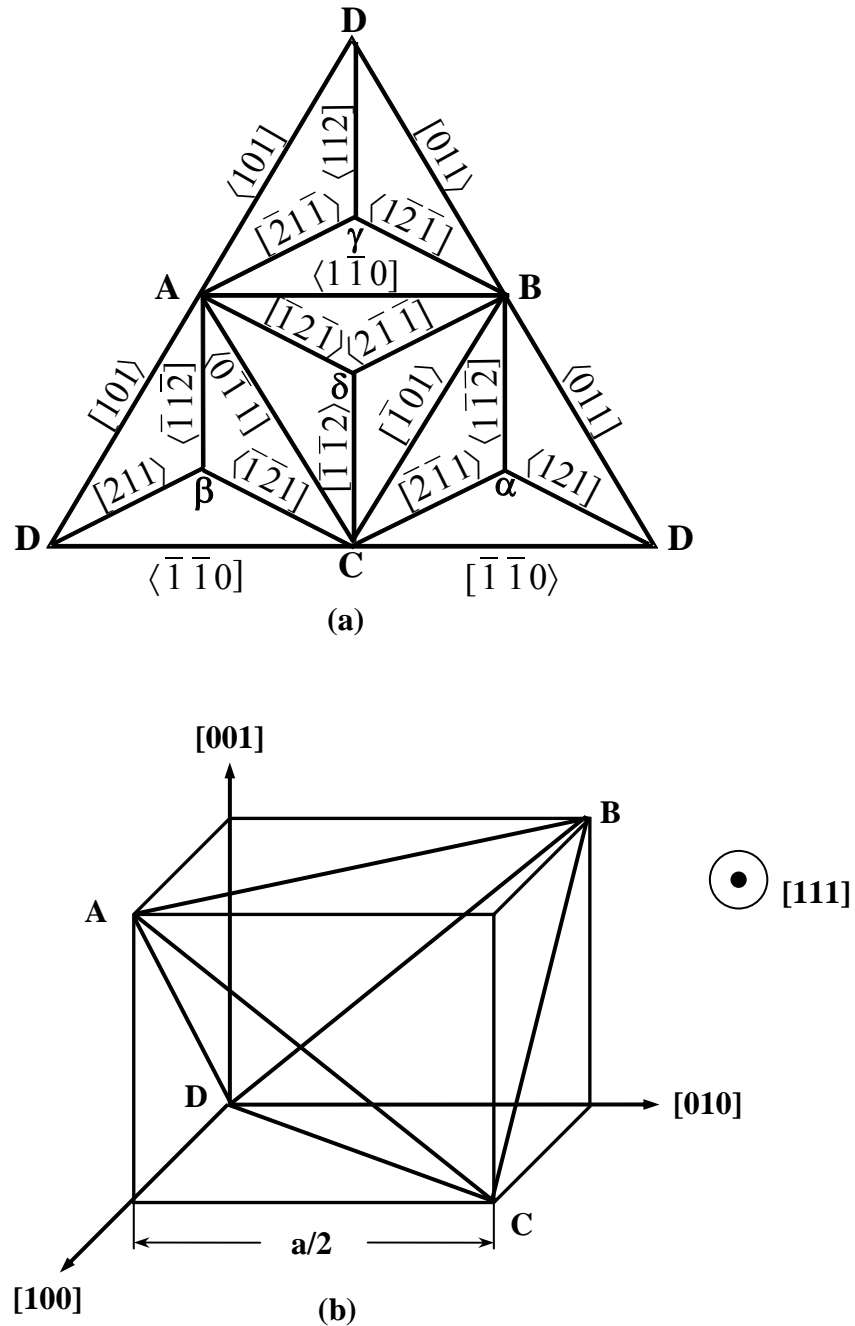


Figure 2.2.2 : (a) Le tétraèdre de Thompson ouvert sur le nœud D.  
 (b) Plan de glissement,  $\mathbf{AB}$  Vecteur de Burgers de la dislocation parfaite et  $\mathbf{A}\delta$  vecteur de Burgers de la dislocation partielle.

Pour une FEI située sur le plan (111), les dislocations partielles  $\delta\mathbf{B}$  et  $\mathbf{A}\delta$  sont dans l'ordre indiqué sur la figure (2.2.3), où le plan (111) est indiqué par sa normale sortante.

L'ordre des vecteurs de Burgers, et donc l'orientation du plan, sont importants : sur un plan cristallin, il serait erroné de mettre la partielle  $\delta\mathbf{B}$  à droite, car le résultat serait un empilement AA.

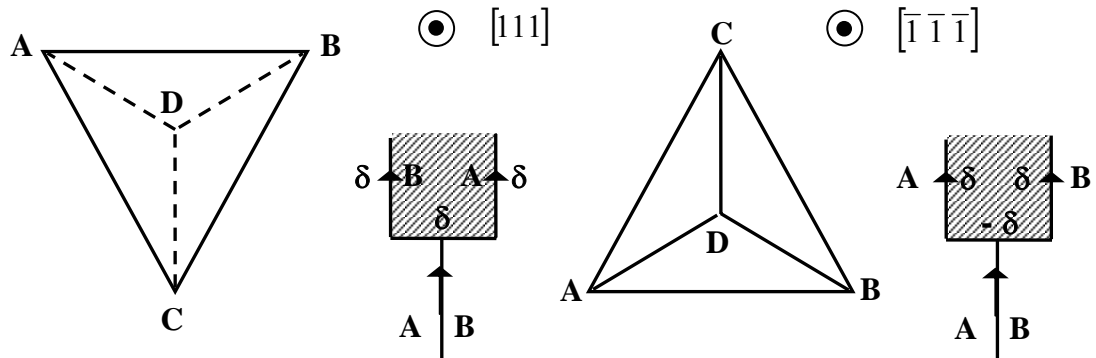


Figure 2. 2. 3 : Dissociation intrinsèque de la dislocation AB dans le plan orienté (111) pour une structure CFC.

Voyons la dislocation parfaite  $\mathbf{AB}$  sur le plan (d) à partir de l'extérieur du tétraèdre et le long du sens positif de la ligne, la FEI se termine par la partielle  $\delta\mathbf{B}$  sur la gauche et par  $\mathbf{A}\delta$  sur la droite. Si on regarde dans le sens positif de la ligne et de l'intérieur du tétraèdre, la FEI se termine par  $\mathbf{A}\delta$  sur la gauche et  $\delta\mathbf{B}$  sur la droite.

Par conséquent, pour une dislocation partielle de Shockley ( $\mathbf{b} = \mathbf{A}\delta = \frac{1}{6}[\bar{1}2\bar{1}]$ ), vu sur (d), c'est à dire de l'extérieur du tétraèdre, le défaut intrinsèque est à gauche de la ligne et le défaut extrinsèque est à droite de la ligne de la dislocation, figure (2.2.4).

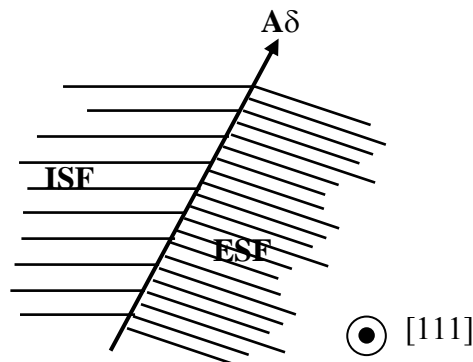


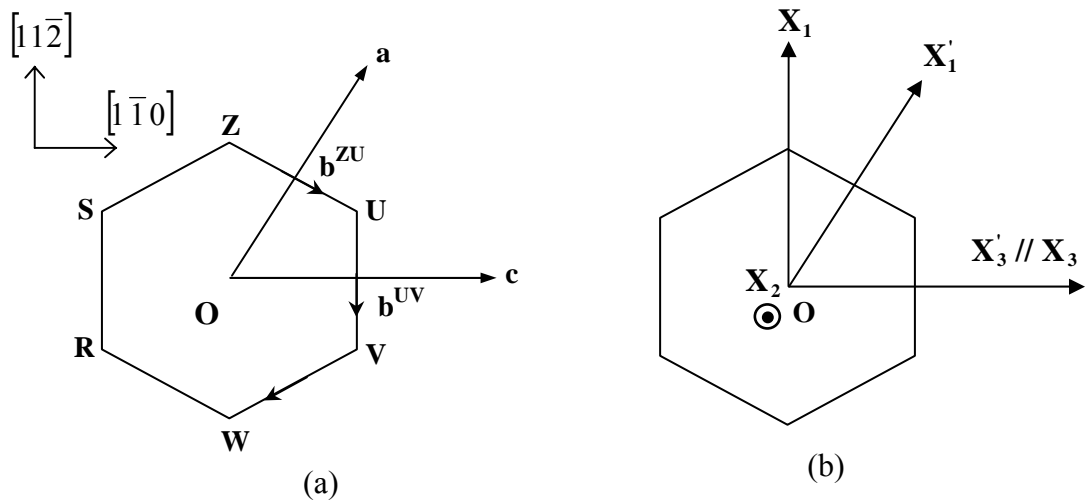
Figure 2. 2. 4 : Relation entre vecteur de Burgers d'une dislocation partielle et caractère d'un défaut d'empilement.

Cette règle (intrinsèque à gauche, extrinsèque à droite) s'inverse pour chacun des cas suivants :

- Si le signe de la partielle est changé, on a alors  $\delta\mathbf{A}$ .
- Si l'on considère une double Shockley ( par exemple  $2\delta\mathbf{A} = \frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}]$ ).
- Si l'on observe le plan du défaut depuis l'intérieur du tétraèdre (la direction (111) pointerait vers la feuille).

### II. 3 Réseau hexagonal comportant des fautes d'empilement intrinsèques

Comme il a été spécifié dans un travail précédent [5,6] sur un réseau régulier en nid d'abeille dont le modèle est représenté par la figure (3.1 (a)), le déplacement relatif interfacial entre deux milieux notés respectivement (+) et (-)  $\Delta\mathbf{u} = \mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- \Big|_{x_2=0}$  change linéairement à l'intérieur de la cellule UVWRSZ.



**Figure 2. 3. 1** : Géométrie du réseau de MDs à motif hexagonal, de vecteurs périodes  $\mathbf{a}$  et  $\mathbf{c}$ .  
 (a) Les nœuds ne sont pas dissociés.  
 (b) Repère cartésien  $Ox_1x_2x_3$  de calcul et repère  $Ox'_1x'_2x'_3$  lié au cristal.

En utilisant le repère cartésien  $Ox_1x_2x_3$  du modèle hexagonal avec des vecteurs unitaires  $\mathbf{a}$  et  $\mathbf{c}$ , ce déplacement s'exprime par la fonction :

$$\Delta\mathbf{u} = \mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- \Big|_{x_2=0} = X_1 \mathbf{b}^{ZU} + X_3 \mathbf{b}^{UV} \tag{2.1}$$

où  $\mathbf{b}^{ZU}$  et  $\mathbf{b}^{UV}$  sont les vecteurs de Burgers des segments ZU et UV respectivement. Au milieu de ZU par exemple la fonction est égale à  $\mathbf{b}^{ZU}/2$  et au milieu de RW elle est égale à  $-\mathbf{b}^{ZU}/2$ . Le déplacement relatif bipériodique  $\Delta\mathbf{u} = \mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- \Big|_{x_2=0}$  est développé en série de Fourier double sur l'ensemble des vecteurs  $\mathbf{G}(m,n)$  du réseau réciproque associé.

La sommation sur  $G$  est équivalente à la sommation sur le domaine  $D$  du plan  $(m, n)$  qui s'exerce sur tous les entiers algébriques  $m$  et  $n$  telles que :  $(n = 0, m > 0$  et  $n > 0, \forall m)$  et dans ce cas,  $\Delta\mathbf{u}$  s'écrit dans le repère  $Ox'_1x'_2x'_3$  :

$$\Delta \mathbf{u} = \sum_{\mathbf{D}} \mathbf{T}^{(\mathbf{G})} \sin \left[ 2\pi \left( n \frac{x_1}{a} + m \frac{x_3}{c} \right) \right] = \sum_{\mathbf{D}} \mathbf{T}^{(\mathbf{G})} \sin (2\pi \mathbf{G} \times \mathbf{R}) \quad (2.2)$$

où  $\mathbf{R}$  est vecteur du réseau direct issu du centre et dont les coordonnées sont  $(x_1, x_2, x_3)$ . Les composantes  $\mathbf{T}^{(\mathbf{G})}$  des séries de Fourier associées à l'équation (2.1) sont calculés pour un simple réseau hexagonal de dislocations de misfit. Nous rappelons ci après l'expression du vecteur  $\mathbf{T}^{(\mathbf{G})}$  noté par la suite  $\mathbf{T}^{\text{ind}}$  ( vecteur du réseau indissocié).

Pour un réseau hexagonal régulier,  $\mathbf{T}^{(\mathbf{G})}$  est tel que :

Pour  $m + n \neq 0, n - 2m \neq 0$  et  $m - 2n \neq 0$  :

$$\mathbf{T}^{(\mathbf{G})} = \frac{3 \sin [2\pi (m + n)/3]}{\pi^2 (m + n)} \left[ \frac{\mathbf{b}^{\text{ZU}}}{n - 2m} + \frac{\mathbf{b}^{\text{UV}}}{m - 2n} \right]$$

Pour  $m + n \neq 0$  et  $n - 2m \neq 0$  :

$$\mathbf{T}^{(\mathbf{G})} = \frac{(-1)^{(n+1)}}{\pi (m + n)} \mathbf{b}^{\text{ZU}}$$

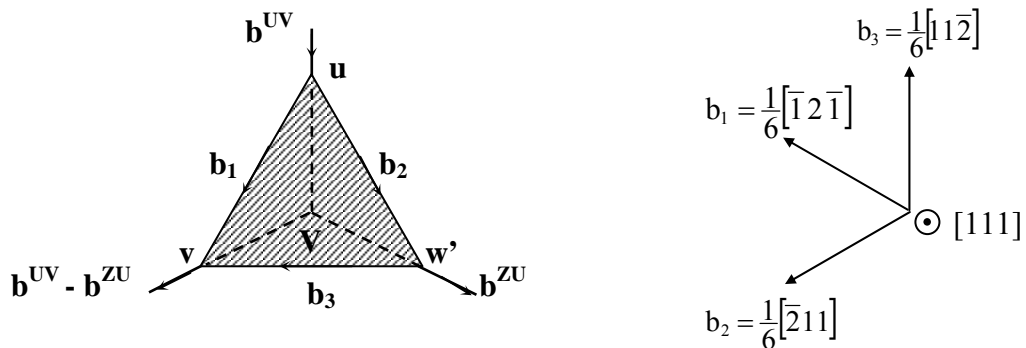
Pour  $m + n \neq 0$  et  $m - 2n \neq 0$

$$\mathbf{T}^{(\mathbf{G})} = \frac{(-1)^{(m+1)}}{\pi (m + n)} \mathbf{b}^{\text{UV}}$$

pour  $m + n = 0, m \neq 0$  et  $n \neq 0$

$$\mathbf{T}^{(\mathbf{G})} = \frac{1}{3\pi m} [\mathbf{b}^{\text{ZU}} - \mathbf{b}^{\text{UV}}]$$

Considérons le même modèle géométrique représenté sur la figure (2.3.1) et supposons, à présent, qu'un nœud sur deux de la cellule UVWRSZ se dissocie en donnant une FEI, tel que la dissociation du nœud V par exemple est définie par la figure (2.3.2).

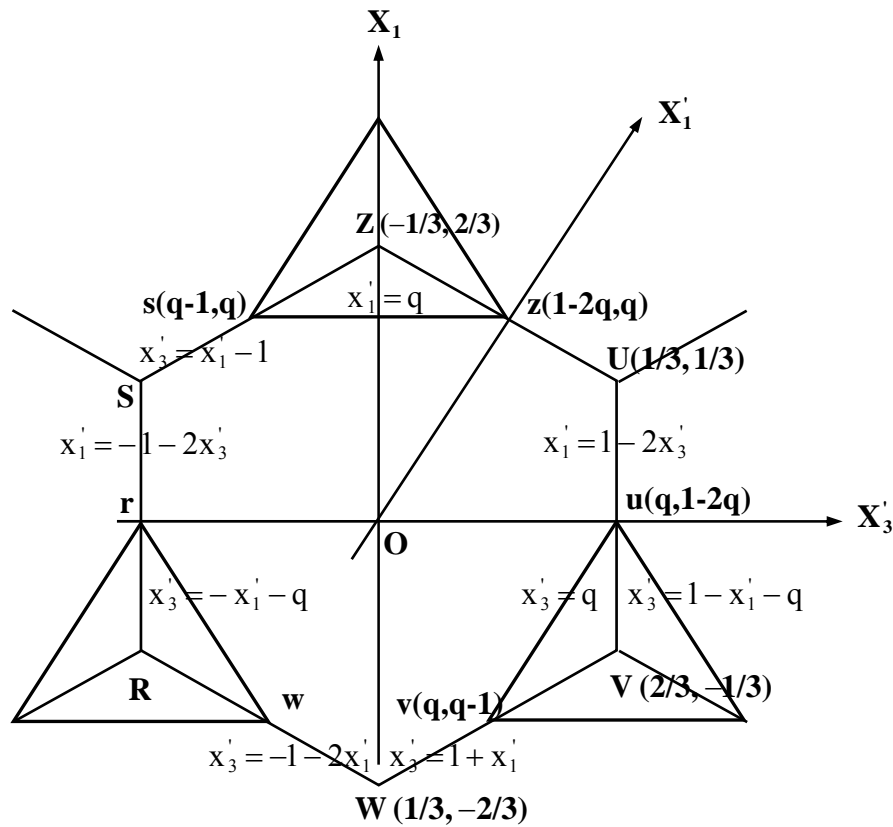


**Figure 2. 3. 2** : Géométrie de la dissociation triangulaire. Nœud ouvert V.  
 Dislocations partielles ayant pour vecteurs de Burgers  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$  et  $\mathbf{b}_3$ .  
 Les flèches le long des lignes de dislocations spécifient leurs orientations.

La position de l'apex u du triangle uvw' le long de UV a été choisi pour spécifier l'étendue de la dissociation tel que :

$$\mathbf{Ou} = q\mathbf{c} + (1 - 2q)\mathbf{a}$$

Un choix quelconque du paramètre q va fixer la géométrie du modèle. Ainsi, pour le nouveau modèle géométrique, il est indispensable de faire un développement en série de Fourier double le long des triangles uVv, rRw et sZz, figure (2.3.3).



**Figure 2. 3. 3 :** Coordonnées des points UVWRSZ dans le repère  $x_3'0x_1'$   
 les nœuds de type V, R et Z sont dissociés pour former une faute  
 d'empilement triangulaire, à caractère intrinsèque.

La nouvelle condition au limite en déplacement le long de l'interface est plus générale.  
 En notation indicielle :

$$\begin{aligned} \Delta u_{\mathbf{k}} &= \mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{(0)} + \sum_{\mathbf{D}} \left[ \mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{(\mathbf{G})} \cos(2\pi \mathbf{G} \times \mathbf{R}) + \mathbf{T}_{\mathbf{k}}^{(\mathbf{G})} \sin(2\pi \mathbf{G} \times \mathbf{R}) \right] \\ &= \mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{(0)} + \sum_{\mathbf{G} \neq 0} \frac{1}{2} (\mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{(\mathbf{G})} - i\mathbf{T}_{\mathbf{k}}^{(\mathbf{G})}) \exp(2\pi i\mathbf{G} \times \mathbf{R}) \end{aligned} \quad (2.3)$$

S'il n'y a pas de dissociation, on retrouve le fait que l'antisymétrie des déplacements relatifs impose une série en sinus. Les coefficients des termes trigonométriques sont déterminés par l'identité de l'expression (2.3) avec l'expression (2.4).

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{u}^{(\text{total})} = \Delta \mathbf{u}^{\text{ind}} - \mathbf{b}_1 \left( a_{0,0}^{(1)} + \sum_{\mathbf{D}} 2 \left[ a_{m,n}^{(1)} \cos(2\pi \mathbf{GR}) - b_{m,n}^{(1)} \sin(2\pi \mathbf{GR}) \right] \right) \\ + \mathbf{b}_2 \left( a_{0,0}^{(2)} + \sum_{\mathbf{D}} 2 \left[ a_{m,n}^{(2)} \cos(2\pi \mathbf{GR}) - b_{m,n}^{(2)} \sin(2\pi \mathbf{GR}) \right] \right) \\ + \mathbf{b}_3 \left( a_{0,0}^{(3)} + \sum_{\mathbf{D}} 2 \left[ a_{m,n}^{(3)} \cos(2\pi \mathbf{GR}) - b_{m,n}^{(3)} \sin(2\pi \mathbf{GR}) \right] \right) \end{aligned} \quad (2.4)$$

Dans l'expression (2.4), le terme  $\Delta \mathbf{u}^{\text{ind}}$  est donné par l'équation (2.2). Pour les trois sommations, le terme moyen est égal à  $\frac{(2-3q)^2}{6}$  où  $q$  est un paramètre géométrique lié à l'extension de la dissociation.

En conséquence, l'expression (2.4) devient :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- \Big|_{x_2=0} = \frac{(2-3q)^2}{6} (-\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3) + \sum_{\mathbf{D}} \left\{ 2 (-\mathbf{b}_1 a_{m,n}^{(1)} + \mathbf{b}_2 a_{m,n}^{(2)} + \mathbf{b}_3 a_{m,n}^{(3)}) \cos(2\pi \mathbf{GR}) \right. \\ \left. + \left[ \mathbf{T}^{\text{ind}} + 2 (\mathbf{b}_1 b_{m,n}^{(1)} - \mathbf{b}_2 b_{m,n}^{(2)} - \mathbf{b}_3 b_{m,n}^{(3)}) \right] \sin(2\pi \mathbf{GR}) \right\} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Les indices supérieurs 1, 2 et 3 associés aux coefficients  $a_{m,n}$  et  $b_{m,n}$  correspondent aux développements en série le long des triangles  $uVv$ ,  $rRw$  et  $sZz$  respectivement. Après calcul, il s'avère que :

Pour les indices supérieurs (1) :

Si  $m \neq 0, n \neq 0, m+n \neq 0$  et  $2n-m \neq 0$  :

$$a_{m,n}^{(1)} = \frac{-3n \cos[(4m-2n)\pi/3] + (m+n) \cos[2q(m-2n)\pi] - (m-2n) \cos[2q(m+n)\pi]}{4\pi^2 n(m-2n)(m+n)}$$

$$b_{m,n}^{(1)} = \frac{3n \sin[(4m-2n)\pi/3] - (m+n) \sin[2q(m-2n)\pi] + (m-2n) \sin[2q(m+n)\pi]}{4\pi^2 n(m-2n)(m+n)}$$

Si  $n = 0$  :

$$a_{m,0}^{(1)} = \frac{-3 \cos[4m\pi/3] + 3 \cos[2m\pi q] + 2m\pi(3q-2) \sin[2m\pi q]}{4m^2 \pi^2} = F_1(m)$$

$$b_{m,0}^{(1)} = \frac{3 \sin[4m\pi/3] - 3 \sin[2m\pi q] + 2m\pi(3q-2) \cos[2m\pi q]}{4m^2 \pi^2} = F_2(m)$$

Si  $m+n=0$  :

$$a_{m,n}^{(1)} = \frac{1 - \cos(6n\pi q)}{12n^2 \pi^2} = F_3(n)$$

$$b_{m,n}^{(1)} = \frac{2n\pi(3q-2) - \sin(6n\pi q)}{12n^2 \pi^2} = F_4(n)$$

Si  $2n-m=0$  :

$$a_{m,n}^{(1)} = F_3(n) \quad \text{et} \quad b_{m,n}^{(1)} = -F_4(n)$$

Pour les indices supérieurs (2) :

Si  $m \neq 0, n \neq 0, m + n \neq 0, 2m - n \neq 0$  et  $2n - m \neq 0$  :

$$a_{m,n}^{(2)} = \frac{3(m-n) \cos [2\pi(m+n)/3] - (2m-n) \cos [2\pi q(m-2n)] - (m-2n) \cos [2\pi q(n-2m)]}{4 \pi^2 (m-2n)(m-n)(2m-n)}$$

$$b_{m,n}^{(2)} = \frac{3(m-n) \sin [2\pi(m+n)/3] + (2m-n) \sin [2\pi q(m-2n)] + (m-2n) \sin [2\pi q(n-2m)]}{4 \pi^2 (m-2n)(m-n)(2m-n)}$$

Si  $m - n = 0$  :

$$a_{m,n}^{(2)} = F_1(n)$$

$$b_{m,n}^{(2)} = -F_2(n)$$

Si  $2m - n = 0$  :

$$a_{m,n}^{(2)} = F_3(m)$$

$$b_{m,n}^{(2)} = F_4(m)$$

Si  $2n - m = 0$  :

$$a_{m,n}^{(2)} = F_3(n)$$

$$b_{m,n}^{(2)} = F_4(n)$$

Pour les indices supérieurs (3) :

Si  $m \neq 0, n \neq 0, m + n \neq 0$  et  $2m - n \neq 0$  :

$$a_{m,n}^{(3)} = \frac{-3m \cos [4\pi(2m-n)/3] + (m+n) \cos [2\pi q(2m-n)] + (2m-n) \cos [2\pi q(m+n)]}{4 \pi^2 m(2m-n)(m+n)}$$

$$b_{m,n}^{(3)} = \frac{3m \sin [4\pi(2m-n)/3] - (m+n) \sin [2\pi q(2m-n)] + (2m-n) \sin [2\pi q(m+n)]}{4 \pi^2 m(2m-n)(m+n)}$$

Si  $m = 0$  :

$$a_{0,n}^{(3)} = F_1(n)$$

$$b_{0,n}^{(3)} = F_4(n)$$

Si  $m + n = 0$  :

$$a_{m,n}^{(3)} = F_3(n)$$

$$b_{m,n}^{(3)} = -F_4(n)$$

Si  $2m - n = 0$  :

$$a_{m,n}^{(3)} = F_3(m)$$

$$b_{m,n}^{(3)} = -F_4(m)$$

Les coefficients géométriques sont donnés, suivant les conditions de nullité du dénominateur par :

$$\mathbf{H}_K = -2\mathbf{b}_1 \times \mathbf{a}_{m,n}^{(1)} + 2\mathbf{b}_2 \times \mathbf{a}_{m,n}^{(2)} + 2\mathbf{b}_3 \times \mathbf{a}_{m,n}^{(3)}$$

$$\mathbf{T}_K = \mathbf{T}^{ind} + 2 \times \mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_{m,n}^{(1)} - 2 \times \mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_{m,n}^{(2)} - 2 \times \mathbf{b}_3 \times \mathbf{b}_{m,n}^{(3)}$$

### II. 4 Réseau hexagonal dissocié en fautes d'empilement intrinsèques et extrinsèques

Le problème de la détermination des champs élastiques résultant de la présence de dislocations interfaciales ne peut être traité théoriquement que si l'on connaît exactement les vecteurs de Burgers mis en jeu. En général, la comparaison d'images calculées et observées en microscopie électronique en transmission permet de les déterminer.

Sur la figure (2.4.1), les dislocations dissociées ont des vecteurs de Burgers notés  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3, \mathbf{b}_4, \mathbf{b}_5$  et  $\mathbf{b}_6$ , tandis que pour un réseau non dissocié les vecteurs de Burgers sont notés  $\mathbf{b}^{UV}$  et  $\mathbf{b}^{ZU}$ .

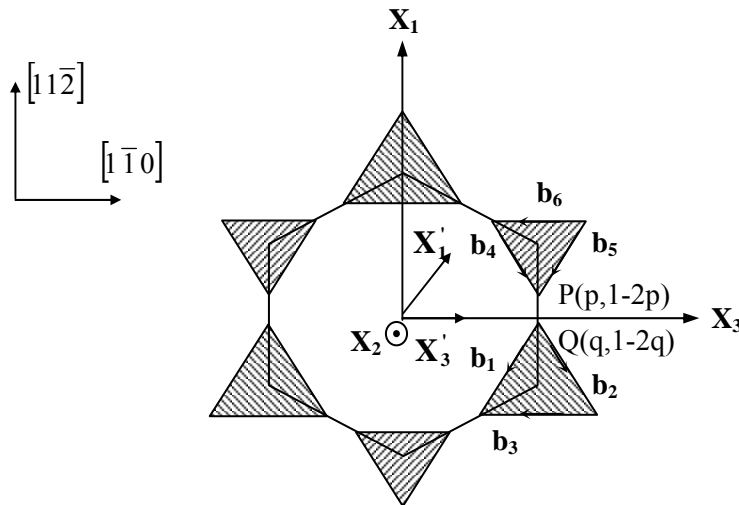
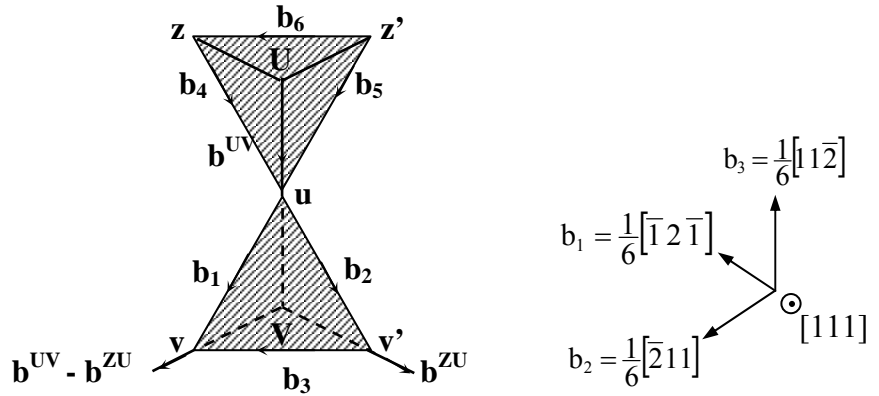


Figure 2. 4. 1 : Représentation de la cellule hexagonale dissociée en FEI et FEE alternées

Considérons une dissociation provenant du nœud V, débutant à partir de l'état où les dislocations de misfit ne sont pas dissociées. L'extension de la dissociation produit un extra déplacement le long de chaque triangle interfacial  $uVv, rRw$  et  $sZz$ . De façon équivalente, l'extension de la dissociation provenant du nœud U et définie par  $p$ , tel que :  $p=1-q$ , produit un extra déplacement le long des triangles à partir de la convention d'orientation indiquée sur la figure (2.4.2), ces extra déplacements sont décrits respectivement par :  $-\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3, \mathbf{b}_4, \mathbf{b}_5$  et  $-\mathbf{b}_6$ .





**Figure 2. 4. 2** : Géométrie de la dissociation triangulaire. Nœud ouvert V. Dislocations partielles ayant pour vecteurs de Burgers  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  et  $\mathbf{b}_3$ . Nœud ouvert U. Dislocations partielles ayant pour vecteurs de Burgers  $\mathbf{b}_4$ ,  $\mathbf{b}_5$  et  $\mathbf{b}_6$ . Les flèches le long des lignes de dislocations spécifient leurs orientations.

Pour représenter le déplacement relatif total, ces extra déplacements doivent être ajoutés à ceux décrit par l'équation (2.1) pour tous les points à l'intérieur de l'hexagone UVWRSZ. Les séries de Fourier exprimant la fonction interfaciale finale  $\Delta \mathbf{u}$  peuvent être obtenues, après de fastidieux calculs, sous la forme suivante :

$$\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- \Big|_{x_2=0} = \sum_{\mathbf{D}} \left[ 2(-\mathbf{b}_1 a_{m,n}^{(1)} + \mathbf{b}_2 a_{m,n}^{(2)} + \mathbf{b}_3 a_{m,n}^{(3)} - \mathbf{b}_4 a_{m,n}^{(4)} + \mathbf{b}_5 a_{m,n}^{(5)} - \mathbf{b}_6 a_{m,n}^{(6)}) \cos(2\pi \mathbf{G} \times \mathbf{R}) \right] + \left[ \mathbf{T}^{\text{ind}} + 2(\mathbf{b}_1 b_{m,n}^{(1)} - \mathbf{b}_2 b_{m,n}^{(2)} - \mathbf{b}_3 b_{m,n}^{(3)} + \mathbf{b}_4 b_{m,n}^{(4)} - \mathbf{b}_5 b_{m,n}^{(5)} + \mathbf{b}_6 b_{m,n}^{(6)}) \sin(2\pi \mathbf{G} \times \mathbf{R}) \right] \quad (2.6)$$

Dans l'équation (2.6), les coefficients  $a_{m,n}^{(j)}$  et  $b_{m,n}^{(j)}$  ( $j = 1,6$ ) sont des expressions analytiques définies ci-dessous.

Terme général pour  $n \neq 0$ ,  $m+n \neq 0$  and  $2n-m \neq 0$  :

$$a_{m,n}^{(1)} = \frac{-3\cos[2\pi(2m-n)/3] + (m+n)\cos[2q(m-2n)\pi] - (m-2n)\cos[2q(m+n)\pi]}{4\pi^2 n(m-2n)(m+n)}$$

$$a_{m,n}^{(2)} = \frac{3(m-n)\cos[2\pi(m+n)/3] - (2m-n)\cos[2\pi q(m-2n)] - (m-2n)\cos[2\pi q(-2m+n)]}{4\pi^2 (m-2n)(m-n)(2m-n)}$$

$$a_{m,n}^{(3)} = \frac{3m\cos[2\pi(m-2n)/3] + (n-2m)\cos[2\pi q(m+n)] - (m+n)\cos[2\pi q(n-2m)]}{4\pi^2 m(2m-n)(m+n)}$$

$a_{m,n}^{(4)}$  est égal à la même expression que  $a_{m,n}^{(2)}$  mais  $q$  est remplacé par  $p$ .

$a_{m,n}^{(5)}$  est égal à la même expression que  $-a_{m,n}^{(1)}$  mais  $q$  est remplacé par  $p$ .

$a_{m,n}^{(6)}$  est égal à la même expression que  $a_{m,n}^{(3)}$  mais  $q$  est remplacé par  $p$ .

$$b_{m,n}^{(1)} = \frac{3n \sin[2\pi(2m-n)/3] - (m+n) \sin[2q(m-2n)\pi] + (m-2n) \sin[2q(m+n)\pi]}{4\pi^2 n(m-2n)(m+n)}$$

$$b_{m,n}^{(2)} = \frac{3(m-n) \sin[2\pi(m+n)/3] + (2m-n) \sin[2\pi q(m-2n)] + (m-2n) \sin[2\pi q(n-2m)]}{4\pi^2 (m-2n)(m-n)(2m-n)}$$

$$b_{m,n}^{(3)} = \frac{3m \sin[2\pi(m-2n)/3] + (2m-n) \sin[2\pi q(m+n)] + (m+n) \sin[2\pi q(n-2m)]}{4\pi^2 (2m-n)(m+n)}$$

$$b_{m,n}^{(4)} = \frac{-3(m-n) \sin[2\pi(m+n)/3] + (2m-n) \sin[2\pi p(m-2n)] + (m-2n) \sin[2\pi p(n-2m)]}{4\pi^2 (m-2n)(m-n)(2m-n)}$$

$$b_{m,n}^{(5)} = \frac{3n \sin[2(n-2m)\pi/3] - (m+n) \sin[2p\pi(m-2n)] + (m-2n) \sin[2p\pi(m+n)]}{4\pi^2 n(m-2n)(m+n)}$$

$$b_{m,n}^{(6)} = \frac{-3m \sin[2\pi(m-2n)/3] + (2m-n) \sin[2\pi p(m+n)] - (m+n) \sin[2\pi p(2m-n)]}{4\pi^2 m(2m-n)(m+n)}$$

- Si  $n = 0$  :

$$a_{m,0}^{(1)} = \frac{-3 \cos[4m\pi/3] + 3 \cos[2m\pi q] + 2m\pi(3q-2) \sin[2m\pi q]}{4m^2 \pi^2} = F_1(m)$$

$$a_{m,0}^{(5)} = \frac{-3 \cos[4m\pi/3] + 3 \cos[2m\pi p] + 2m\pi(3p-1) \sin[2m\pi p]}{4m^2 \pi^2} = G_1(m)$$

$$b_{m,0}^{(1)} = \frac{3 \sin[4m\pi/3] - 3 \sin[2m\pi q] + 2m\pi(3q-2) \cos[2m\pi q]}{4m^2 \pi^2} = F_2(m)$$

$$b_{m,0}^{(5)} = \frac{2m\pi(3p-1) \cos[2m\pi p] - 3 \sin[4m\pi/3] - 3 \sin[2m\pi p]}{4m^2 \pi^2} = G_2(m)$$

Si  $m = 0$  :

$$a_{0,n}^{(3)} = F_1(n) \quad a_{0,n}^{(6)} = G_1(n)$$

$$b_{0,n}^{(3)} = F_2(n) \quad b_{0,n}^{(6)} = G_2(n)$$

Si  $m - n = 0$  :

$$a_{m,n}^{(2)} = F_1(n) \quad b_{m,n}^{(2)} = -F_2(n)$$

$$a_{m,n}^{(4)} = G_1(n) \quad b_{m,n}^{(4)} = -G_2(n)$$

Si  $m + n = 0$  :

$$a_{m,n}^{(1)} = a_{m,n}^{(3)} = \frac{1 - \cos[6n\pi q]}{12n^2 \pi^2} = F_3(n)$$

$$a_{m,n}^{(5)} = a_{m,n}^{(6)} = \frac{1 - \cos[6n\pi p]}{12n^2 \pi^2} = G_3(n)$$

$$b_{m,n}^{(1)} = \frac{2n\pi(3q-2) - \sin[6n\pi q]}{12n^2 \pi^2} = F_4(n)$$

$$b_{m,n}^{(3)} = -F_4(n)$$

$$b_{m,n}^{(5)} = \frac{2n\pi(3p-1) - \sin[6n\pi p]}{12n^2 \pi^2} = G_4(n)$$

$$b_{m,n}^{(6)} = -G_4(n)$$

Si  $m - 2n = 0$  :

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{m,n}^{(1)} = \mathbf{a}_{m,n}^{(2)} = F_3(\mathbf{n}) & & \mathbf{a}_{m,n}^{(4)} = \mathbf{a}_{m,n}^{(5)} = G_3(\mathbf{n}) \\ \mathbf{b}_{m,n}^{(1)} = -F_4(\mathbf{n}) & & \mathbf{b}_{m,n}^{(2)} = F_4(\mathbf{n}) \\ \mathbf{b}_{m,n}^{(4)} = G_4(\mathbf{n}) & & \mathbf{b}_{m,n}^{(5)} = -G_4(\mathbf{n}) \end{aligned}$$

Si  $2m - n = 0$  :

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{m,n}^{(2)} = \mathbf{a}_{m,n}^{(3)} = F_3(\mathbf{m}) & & \mathbf{a}_{m,n}^{(4)} = \mathbf{a}_{m,n}^{(6)} = G_3(\mathbf{m}) \\ \mathbf{b}_{m,n}^{(2)} = F_4(\mathbf{m}) & & \mathbf{b}_{m,n}^{(3)} = -F_4(\mathbf{m}) \\ \mathbf{b}_{m,n}^{(4)} = -G_4(\mathbf{m}) & & \mathbf{b}_{m,n}^{(6)} = G_4(\mathbf{m}) \end{aligned}$$

De la même façon que précédemment, Les coefficients géométriques sont donnés par :

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_K &= 2(-\mathbf{b}_1 \times \mathbf{a}_{m,n}^{(1)} + \mathbf{b}_2 \times \mathbf{a}_{m,n}^{(2)} + \mathbf{b}_3 \times \mathbf{a}_{m,n}^{(3)} - \mathbf{b}_4 \times \mathbf{a}_{m,n}^{(4)} + \mathbf{b}_5 \times \mathbf{a}_{m,n}^{(5)} - \mathbf{b}_6 \times \mathbf{a}_{m,n}^{(6)}) \\ \mathbf{T}_K &= \mathbf{T}^{ind} + 2(\mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_{m,n}^{(1)} - \mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_{m,n}^{(2)} - \mathbf{b}_3 \times \mathbf{b}_{m,n}^{(3)} + \mathbf{b}_4 \times \mathbf{b}_{m,n}^{(4)} - \mathbf{b}_5 \times \mathbf{b}_{m,n}^{(5)} + \mathbf{b}_6 \times \mathbf{b}_{m,n}^{(6)}) \end{aligned}$$

## II. 5 Conclusion

Dans ce chapitre, des conventions, des notations ainsi que des expressions analytiques sont détaillées pour deux réseaux différents de dislocations partielles de Schockley, délimitant des fautes d'empilement, situés sur une interface plane. Le premier réseau est constitué de défauts d'empilement intrinsèques situés au niveau des nœuds alternés de la cellule hexagonale de MDs coins qui est à la base de formation du réseau. L'extension de la dissociation de ces nœuds est définie par un paramètre noté q correspondant au rapport de la surface de faute sur la surface non fautée.

Le second réseau est formé d'une succession régulière de fautes d'empilement extrinsèques et intrinsèques à partir du nœud U de la cellule notée UVWRSZ. La propagation de la dissociation est indiquée par un paramètre p égal à  $1 - q$ , tel que q est le coefficient de dissociation défini dans le premier modèle.

Dans les deux cas, les vecteurs de Burgers ainsi que toutes les composantes de ces vecteurs sont déterminés. Aussi, des expressions analytiques relatives aux coefficients des séries de Fourier sont calculées.

# CALCUL DES CHAMPS DE DEPLACEMENTS ET DE CONTRAINTES ANISOTROPES

## III. 1 Introduction

Le présent travail considère une déformation élastique tri-dimensionnelle d'un système épitaxial comportant un réseau hexagonal de dislocations de misfit. A partir de l'extension d'une analyse précédente, une solution est proposée pour résoudre tout problème concernant une hétéro interface plane avec une structure périodique, en tenant compte de la géométrie du modèle de réseau de dislocations formé. Comme conséquence, il est à présent possible, en principe, de prendre en compte la variété des défauts rencontrés tels que les segments de MDs courbés ou les MDs dissociés (Schmid et col 1992, Brune et col 1994 et Günther et col 1995). La clé de la solution est de noter que pour toute géométrie plane, la détermination du champ  $\mathbf{u}$  peut souvent être réduite à la détermination des coefficients de Fourier  $H_k$  et  $T_k$  des équations (2.3). Pour une géométrie quelconque, ces coefficients peuvent être calculés analytiquement dans le cas de l'élasticité isotrope et anisotrope.

Les champs élastiques dus à une interface incohérente tapissée d'un réseau hexagonal de dislocations sont déterminés pour trois cas différents. Dans un travail précédent, nous avons déterminé les champs élastiques causés par la présence d'un réseau hexagonal régulier de misfit. Dans le présent travail, nous généralisons la solution précédente au cas de la dissociation du réseau de MDs en partielles de Shockley qui délimitent des FEI et /ou des FEE. Nous étudions le cas du bilame mince ainsi que le cas d'un milieu semi infini en élasticité anisotrope.

## III. 2 Solution en élasticité anisotrope

Les champs de déplacements étant nécessairement bipériodiques pour chaque cristal, compte tenu de la périodicité des déformations des unités structurales de part et d'autre de l'interface, la solution générale peut s'écrire avec la convention de sommation définie dans le chapitre 2 comme suit :

$$U_k = \sum_{G \neq 0} \mathbf{u}_k^{(G)}(x_2) \exp(2\pi i \mathbf{G} \mathbf{R}) \quad (3.1)$$

Les déplacements (3.1) doivent satisfaire l'équation différentielle de la théorie classique de l'élasticité.

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad \text{avec :} \quad \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (U_{k,l} + U_{l,k}) \quad (3.2)$$

Comme la sommation sur les indices muets k et l se fait de la même façon, la condition d'équilibre statique des contraintes dans la région de déformation sera donnée par :

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad \Rightarrow \quad C_{ijkl} U_{k,jl} = 0 \quad (3.3)$$

C'est à dire que :

$$C_{ijkl} \frac{\partial^2 U_k}{\partial x_j \partial x_l} = 0 \quad (3.4)$$

La combinaison des équations (3.1) et (3.4) conduit à une infinité de systèmes de trois équations différentielles linéaires du second ordre, dans lesquelles les inconnues sont les fonctions  $\mathbf{u}_k^{(G)}(x_2)$ .

Un système quelconque sera défini par :

$$-4\pi^2 \psi_{jk}^{(G)} + 2\pi \varphi_{jk}^{(G)} \mathbf{u}_{k,2}^{(G)} + C_{j2k2} \mathbf{u}_{k,22}^{(G)} = 0 \quad (3.5)$$

Avec :

$$\psi_{jk}^{(G)} = C_{j1k1} \times \mathbf{G}_1^2 + C_{j3k3} \times \mathbf{G}_3^2 + (C_{j1k3} + C_{j3k1}) \times \mathbf{G}_1 \mathbf{G}_3 \quad (3.6)$$

Et :  $\varphi_{jk}^{(G)} = (C_{j1k2} + C_{j2k1}) \times \mathbf{G}_1 + (C_{j2k3} + C_{j3k2}) \times \mathbf{G}_3$   
(3.7)

Les solutions du système d'équations (3.5) sont de la forme :

$$\mathbf{u}_k^{(G)} = \lambda_{\alpha k}^{(G)} \exp(2\pi i p_{\alpha}^{(G)} x_2) \quad (3.8)$$

Dans l'expression (3.8), le terme  $p_{\alpha}^{(G)}$  représente les racines complexes d'un polynôme du sixième degré ( $\alpha = 1, 6$ ) et le terme  $\lambda_{\alpha k}^{(G)}$  représente des quantités complexes en fonction de  $\varphi_{ij}$  et  $\psi_{ij}$ . L'introduction de la relation (3.8) dans le système (3.5) conduit à un nouveau système défini par :

$$F_{ij}^{(G)} \lambda_{\alpha k}^{(G)} = 0 \quad (3.9)$$

Où :  $F_{jk}^{(G)} = \left| \psi_{jk}^{(G)} + \varphi_{jk}^{(G)} p^{(G)} + C_{j2k2} \times p^{(G)^2} \right| = 0$

(3.10)

Afin de simplifier les notations, on adoptera la convention à deux indices de Hirth pour les constantes élastiques et on notera les éléments du système (3.10) par  $F_{jk}$ , en omettant leurs la dépendance avec les vecteurs  $\mathbf{G}$  tels que :

$$\begin{aligned} F_{11} &= \psi_{11} + \varphi_{11} p_{\alpha} + C_{66} p_{\alpha}^2 & F_{21} &= F_{12} = \psi_{12} + \varphi_{12} p_{\alpha} + C_{62} p_{\alpha}^2 \\ F_{22} &= \psi_{22} + \varphi_{22} p_{\alpha} + C_{22} p_{\alpha}^2 & F_{23} &= F_{32} = \psi_{23} + \varphi_{23} p_{\alpha} + C_{24} p_{\alpha}^2 \end{aligned}$$

$$F_{33} = \Psi_{33} + \Phi_{33} p_\alpha + C_{44} p_\alpha^2$$

$$F_{31} = F_{13} = \Psi_{31} + \Phi_{31} p_\alpha + C_{46} p_\alpha^2$$

On obtient alors un système dont le déterminant est donné par :

$$|F_{jk}| = F_{11} \times F_{22} \times F_{33} + 2 \times F_{12} \times F_{23} \times F_{31} - F_{31}^2 \times F_{22} - F_{21}^2 \times F_{33} - F_{23}^2 \times F_{11} = 0 \quad (3.11)$$

Le développement du déterminant donne une équation du sixième degré en  $p_\alpha$  ( $\alpha = 1, 6$ ) qui s'écrit :

$$K_6 p^6 + K_5 p^5 + K_4 p^4 + K_3 p^3 + K_2 p^2 + K_1 p + K_0 \quad (3.12)$$

dont les coefficients sont définis par :

$$K_0 = \Psi_{11} \Psi_{22} \Psi_{33} + 2 \Psi_{12} \Psi_{23} \Psi_{31} - \Psi_{11} \Psi_{23}^2 - \Psi_{22} \Psi_{31}^2 - \Psi_{33} \Psi_{21}^2$$

$$K_1 = \Psi_{11} (\Psi_{22} \Phi_{33} + \Psi_{33} \Phi_{22}) + \Psi_{22} \Psi_{33} \Phi_{11} + 2 [\Psi_{12} (\Psi_{23} \Phi_{31} + \Psi_{31} \Phi_{23} + \Psi_{23} \Psi_{31} \Phi_{12}) - \Psi_{31} (\Psi_{31} \Phi_{22} + 2 \Psi_{22} \Phi_{31}) - \Psi_{21} (\Psi_{21} \Phi_{33} + 2 \Psi_{33} \Phi_{21}) - \Psi_{23} (\Psi_{23} \Phi_{11} + 2 \Psi_{11} \Phi_{23})]$$

$$K_2 = \Psi_{11} (\Phi_{22} \Phi_{33} + C_{22} \Psi_{33}) + \Psi_{22} (\Psi_{11} C_{44} + \Phi_{11} \Phi_{33}) + \Psi_{33} (\Phi_{11} \Phi_{22} + C_{66} \Psi_{22}) + 2 [\Psi_{12} (\Phi_{23} \Phi_{31} + C_{24} \Psi_{31}) + \Psi_{23} (\Phi_{12} \Phi_{31} + C_{46} \Psi_{12}) + \Psi_{31} (\Phi_{12} \Phi_{23} + C_{62} \Psi_{23})] - 2 \Psi_{31} (\Phi_{31} \Phi_{22} + C_{46} \Psi_{22}) - \Psi_{31}^2 C_{22} - \Phi_{31}^2 \Psi_{22} - 2 \Psi_{21} (\Phi_{21} \Phi_{33} + C_{26} \Psi_{33}) - \Psi_{21}^2 C_{44} - \Phi_{21}^2 \Psi_{33} - 2 \Psi_{23} (\Phi_{23} \Phi_{11} + C_{24} \Psi_{11}) - \Psi_{23}^2 C_{66} - \Phi_{23}^2 \Psi_{11}$$

$$K_3 = C_{44} (\Psi_{11} \Phi_{22} + \Psi_{22} \Phi_{11}) + C_{22} (\Psi_{11} \Phi_{33} + \Psi_{33} \Phi_{11}) + C_{66} (\Psi_{22} \Phi_{33} + \Psi_{33} \Phi_{22}) + \Phi_{11} \Phi_{22} \Phi_{33} + 2 [C_{46} (\Psi_{12} \Phi_{23} + \Psi_{23} \Phi_{12}) + C_{24} (\Psi_{12} \Phi_{31} + \Psi_{31} \Phi_{12}) + C_{62} (\Psi_{23} \Phi_{31} + \Psi_{31} \Phi_{23}) + \Phi_{12} \Phi_{23} \Phi_{31}] - 2 C_{46} (\Psi_{31} \Phi_{22} + \Psi_{22} \Phi_{31}) - \Phi_{31} (2 C_{22} \Psi_{31} + \Phi_{31} \Phi_{22}) - 2 C_{26} (\Phi_{33} \Psi_{21} + \Phi_{21} \Psi_{33}) - \Phi_{21} (2 C_{44} \Psi_{21} + \Phi_{21} \Phi_{33}) - 2 C_{24} (\Psi_{23} \Phi_{11} + \Psi_{11} \Phi_{23}) - \Phi_{23} (2 C_{66} \Psi_{23} + \Phi_{23} \Phi_{11})$$

$$K_4 = C_{44} (\Psi_{11} C_{22} + \Psi_{22} C_{66} + \Phi_{22} \Phi_{11}) + C_{22} (\Psi_{33} C_{66} + \Phi_{33} \Phi_{11}) + C_{66} \Phi_{22} \Phi_{33} + 2 [C_{46} (\Psi_{12} C_{24} + \Psi_{23} C_{62} + \Phi_{12} \Phi_{23}) + C_{24} (\Psi_{31} C_{62} + \Phi_{12} \Phi_{31}) + C_{62} \Phi_{23} \Phi_{31}] - 2 C_{46} (\Psi_{31} C_{22} + \Phi_{31} \Phi_{22}) - C_{22} \Phi_{31}^2 - C_{46}^2 \Psi_{22} - 2 C_{26} (\Psi_{21} C_{44} + \Phi_{21} \Phi_{33}) - C_{44} \Phi_{21}^2 - C_{26}^2 \Psi_{33} - 2 C_{46} (\Psi_{31} C_{22} + \Phi_{31} \Phi_{22}) - 2 C_{24} (\Psi_{23} C_{66} + \Phi_{23} \Phi_{11}) - C_{66} \Phi_{23}^2 - C_{24}^2 \Psi_{11}$$

$$K_5 = \Phi_{11} C_{22} C_{44} + C_{66} (\Phi_{22} C_{44} + C_{22} \Phi_{33}) + 2 [C_{46} (\Phi_{12} C_{24} + \Phi_{23} C_{62}) + C_{62} C_{24} \Phi_{31}] - C_{46} - (2 \Phi_{31} C_{22} + \Phi_{22} C_{46}) - C_{26} (2 \Phi_{21} C_{44} + \Phi_{33} C_{26}) - C_{24} (2 \Phi_{23} C_{66} + \Phi_{11} C_{24})$$

$$K_6 = C_{66} C_{22} C_{44} + 2 C_{62} C_{24} C_{46} - C_{22} C_{46}^2 - C_{44} C_{26}^2 - C_{66} C_{24}^2$$

Les coefficients du polynôme sont réels mais les solutions de l'équation (3.12) sont complexes et conjuguées deux à deux tels que :

$$p_\alpha = p_\alpha^r \pm i p_\alpha^i \quad \text{avec} \quad \alpha = 1, 2, 3 \quad \text{et} \quad p_\alpha^i > 0$$

Les termes  $\lambda_{\alpha k}$  sont également complexes, ils sont obtenus par résolution du système (3.9) et ils s'écrivent :

$$\lambda_{\alpha k} = \lambda_{\alpha k}^r + i\lambda_{\alpha k}^i \quad k = 1, 2 \text{ et } 3$$

Les  $\lambda_{\alpha k}$  utilisés pour le calcul des déplacements et des contraintes sont normalisés de façon à obéir à la relation suivante :

$$\lambda_{\alpha 1}^2 + \lambda_{\alpha 2}^2 + \lambda_{\alpha 3}^2 = 1$$

Les équations (3.5) ont pour solutions générales des combinaisons linéaires des solutions trouvées pour chaque  $\alpha$ .

$$u_k^{(G)} = \sum_{G \neq 0} P_{\alpha}^{(G)} \lambda_k^{(G)} \exp(2\pi i p_{\alpha}^{(G)} x_2) \quad (3.13)$$

Les constantes complexes  $P_{\alpha}^{(G)}$  seront déterminées par les conditions aux limites en déplacement à l'interface.

### III. 2. 1 Expression du déplacement $U_k$

En tenant compte du fait que la sommation sur l'ensemble des vecteurs  $G$  est équivalente à la sommation sur le domaine  $D$  défini dans le chapitre 2 et en remplaçant l'expression de  $u_k^{(G)}$  donnée dans (3.13) dans l'équation (3.1), on obtient :

$$U_k = 2 \operatorname{Re} \left\{ \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 \left[ P_{\alpha}^{(G)} \lambda_{\alpha k}^{(G)} \exp \left[ 2\pi i (p_{\alpha}^{(G)} x_2 + \mathbf{GR}) \right] + Q_{\alpha}^{(G)} \bar{\lambda}_{\alpha k}^{(G)} \exp \left[ 2\pi i (\bar{p}_{\alpha}^{(G)} x_2 + \mathbf{GR}) \right] \right] \right\} \quad (3.14)$$

### III. 2. 2 Expression des contraintes

Par dérivation de l'équation (3.14) et en appliquant les relations (3.2), on obtient :

$$\sigma_{kl} = C_{k1l1} \frac{\partial U_i}{\partial x_1} + C_{k1l2} \frac{\partial U_i}{\partial x_2} + C_{k1l3} \frac{\partial U_i}{\partial x_3} \quad (3.15)$$

Posons :  $\theta = 2\pi i (\mathbf{GR} + p_{\alpha}^{(G)} x_2)$  et  $\bar{\theta} = 2\pi i (\mathbf{GR} + \bar{p}_{\alpha}^{(G)} x_2)$

Chaque terme de l'équation (3.15) est développé, en variant l'indice  $i$ , sous la forme suivante :

$$C_{k1i1} \frac{\partial U_i}{\partial x_1} \quad i = 1, 2, 3$$

$$\frac{\partial U_1}{\partial x_1} = 2\operatorname{Re} \left\{ \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 P_{\alpha} \lambda_{\alpha 1} \exp(2\pi \mathbf{G}_1) \theta + Q_{\alpha} \bar{\lambda}_{\alpha 1} \exp(2\pi \mathbf{G}_1) \bar{\theta} \right\}$$

$$\frac{\partial U_2}{\partial x_1} = 2\operatorname{Re} \left\{ \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 P_{\alpha} \lambda_{\alpha 2} \exp(2\pi \mathbf{G}_1) \theta + Q_{\alpha} \bar{\lambda}_{\alpha 2} \exp(2\pi \mathbf{G}_1) \bar{\theta} \right\}$$

$$\frac{\partial U_3}{\partial x_1} = 2\operatorname{Re} \left\{ \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 P_{\alpha} \lambda_{\alpha 3} \exp(2\pi \mathbf{G}_1) \theta + Q_{\alpha} \bar{\lambda}_{\alpha 3} \exp(2\pi \mathbf{G}_1) \bar{\theta} \right\}$$

$$C_{khl} \frac{\partial U_i}{\partial x_1} = 4\pi \operatorname{Re} \left\{ \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 i C_{khl1} \mathbf{G}_1 \times P_\alpha \lambda_{\alpha 1} \exp \theta + i C_{khl1} \mathbf{G}_1 \times Q_\alpha \bar{\lambda}_{\alpha 1} \exp \bar{\theta} \right\}$$

En introduisant les trois termes développés dans l'expression (3.15) et en posant :

$$\begin{aligned} L_{\alpha kl}^{(G)} &= [C_{klj1} \mathbf{G}_1 + C_{klj3} \mathbf{G}_3 + p_\alpha^{(G)} C_{klj2}] \lambda_{\alpha j}^{(G)} \\ \bar{L}_{\alpha kl}^{(G)} &= [C_{klj1} \mathbf{G}_1 + C_{klj3} \mathbf{G}_3 + \bar{p}_\alpha^{(G)} C_{klj2}] \bar{\lambda}_{\alpha j}^{(G)} \end{aligned}$$

L'expression (3.15) s'écrira finalement :

$$\sigma_{kl} = 4\pi \operatorname{Re} \left\{ \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 i L_{\alpha kl}^{(G)} P_\alpha^{(G)} \exp \theta + i L_{\alpha kl}^{(G)} Q_\alpha^{(G)} \exp \bar{\theta} \right\} \quad (3.16)$$

L'exigence numérique impose une expression explicite de la contrainte en quantité réelle.

Posons :

$$\begin{aligned} L_{\alpha kl} &= L_{\alpha kl}^r + i L_{\alpha kl}^i \\ \bar{L}_{\alpha kl} &= L_{\alpha kl}^r - i L_{\alpha kl}^i \\ L_{\alpha kl} P_\alpha &= (L_{\alpha kl}^r P_\alpha^r - L_{\alpha kl}^i P_\alpha^i) + i (L_{\alpha kl}^r P_\alpha^i + L_{\alpha kl}^i P_\alpha^r) \\ \bar{L}_{\alpha kl} Q_\alpha &= (L_{\alpha kl}^r Q_\alpha^r + L_{\alpha kl}^i Q_\alpha^i) + i (L_{\alpha kl}^r Q_\alpha^i - L_{\alpha kl}^i Q_\alpha^r) \\ \theta &= 2\pi i [\mathbf{GR} + (p_\alpha^r + i p_\alpha^i) x_2] = 2\pi i (\mathbf{GR} + p_\alpha^r x_2) - 2\pi p_\alpha^i x_2 = \theta' - 2\pi p_\alpha^i x_2 \\ \bar{\theta} &= 2\pi i [\mathbf{GR} + (p_\alpha^r - i p_\alpha^i) x_2] = 2\pi i (\mathbf{GR} + p_\alpha^r x_2) - 2\pi p_\alpha^i x_2 = \theta' + 2\pi p_\alpha^i x_2 \\ i L_{\alpha kl} P_\alpha &= -B + iA \\ i \bar{L}_{\alpha kl} Q_\alpha &= -D + iC \end{aligned}$$

L'équation (3.16) devient alors :

$$\sigma_{kl} = -4\pi \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 [B \cos \theta' + A \sin \theta'] \exp(-2\pi p_\alpha^i x_2) - [D \cos \theta' + C \sin \theta'] \exp(-2\pi p_\alpha^i x_2) \quad (3.17)$$

Cette expression est de nouveau développée afin d'avoir des termes plus explicites pour que la matrice à inverser soit plus simple.



### III. 3 Solution pour un bicristal mince

Pour un bicristal mince d'épaisseurs respectives  $h^+$  et  $h^-$  comportant une interface tapissée d'un réseau hexagonal dissocié en FEI alternées, la solution du problème passe par une formulation en séries de Fourier double avec la considération des conditions aux limites liées au modèle géométrique décrit par la figure 3.3.1.

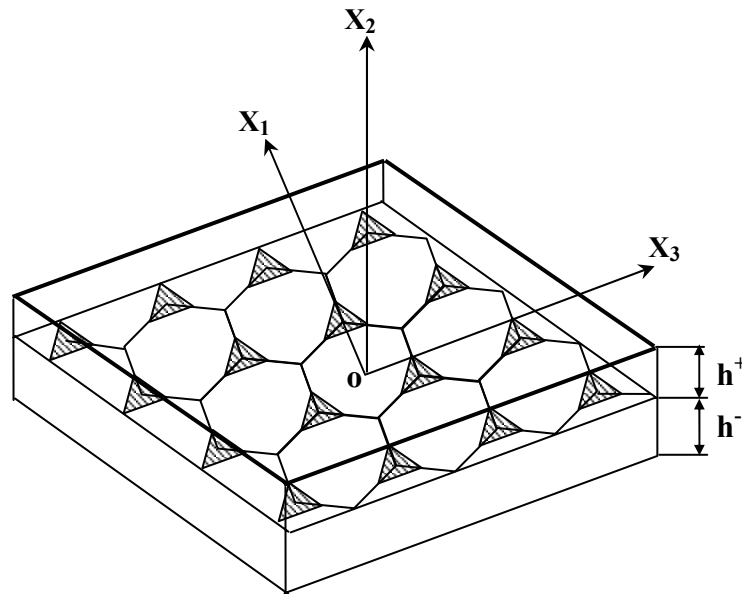


Figure 3. 3. 1 : Géométrie du réseau de dislocations situé à l'interface d'un bilame mince

#### III. 3. 1 Conditions aux limites

##### a- Conditions en déplacement :

1- Le champ des déplacements  $\mathbf{u}$  est bipériodique parallèlement à l'hétérointerface. Il est discontinu au travers de l'hétéro-interface, excepté au centre des hexagones formant le réseau MDs. La discontinuité de  $\mathbf{u}$  le long de l'interface notée  $\Delta\mathbf{u}$  est relativement complexe à formuler analytiquement dans le cas de la dissociation mais on peut l'écrire sous sa forme complexe compacte comme suit :

$$\Delta\mathbf{u} \Big|_{x_2=0} = \sum_{\mathbf{G} \neq 0} \frac{1}{2} [(\mathbf{H}_k - i\mathbf{T}_k) \exp(2\pi i \mathbf{G}\mathbf{R})] \quad (3.18)$$

Dans l'expression (3.18), les vecteurs  $\mathbf{T}$  et  $\mathbf{H}$  ne dépendent que de la géométrie des lignes de MDs et de leurs vecteurs de Burgers.

Reprenons l'équation (3.14) à laquelle nous allons appliquer cette première condition en déplacement, nous aurons respectivement les équations (3.19) pour la couche notée (+) et (3.20) pour la couche notée (-).

- Pour  $x_2 > 0$  :

$$U_k^+ = 2\text{Re} \left[ \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 (P_\alpha^{r+} + iP_\alpha^{i+}) \times (\lambda_{\alpha k}^{r+} + i\lambda_{\alpha k}^{i+}) \exp 2\pi i(\mathbf{GR} + p_\alpha^{(G)} x_2) + (Q_\alpha^{r+} + iQ_\alpha^{i+}) \times (\lambda_{\alpha k}^{r+} - i\lambda_{\alpha k}^{i+}) \exp 2\pi i(\mathbf{GR} + p_\alpha^{(G)} x_2) \right] \quad (3.19)$$

- Pour  $x_2 < 0$  :

$$U_k^- = 2\text{Re} \left[ \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 (P_\alpha^{r-} + iP_\alpha^{i-}) \times (\lambda_{\alpha k}^{r-} + i\lambda_{\alpha k}^{i-}) \exp 2\pi i(\mathbf{GR} + p_\alpha^{(G)} x_2) + (Q_\alpha^{r-} + iQ_\alpha^{i-}) \times (\lambda_{\alpha k}^{r-} - i\lambda_{\alpha k}^{i-}) \exp 2\pi i(\mathbf{GR} + p_\alpha^{(G)} x_2) \right] \quad (3.20)$$

Au niveau de l'interface, c'est à dire pour  $x_2 = 0$ , le déplacement relatif interfacial s'écrira, après développement des équations (3.19) et (3.20) comme suit :

$$\Delta U_k \Big|_{x_2=0} = U_k^+ - U_k^- \Big|_{x_2=0} \quad (3.21)$$

Explicitement (3.21) aura pour expression :

$$\begin{aligned} \Delta U_k \Big|_{x_2=0} = \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 \{ & (P_\alpha^{r+} \lambda_{\alpha k}^{r+} - P_\alpha^{i+} \lambda_{\alpha k}^{i+} + Q_\alpha^{r+} \lambda_{\alpha k}^{r+} + Q_\alpha^{i+} \lambda_{\alpha k}^{i+} \\ & - P_\alpha^{r-} \lambda_{\alpha k}^{r-} - P_\alpha^{i-} \lambda_{\alpha k}^{i-} - Q_\alpha^{r-} \lambda_{\alpha k}^{r-} - Q_\alpha^{i-} \lambda_{\alpha k}^{i-}) \cos 2\pi \mathbf{GR} \\ & + (P_\alpha^{r+} \lambda_{\alpha k}^{i+} - P_\alpha^{i+} \lambda_{\alpha k}^{r+} + Q_\alpha^{r+} \lambda_{\alpha k}^{i+} - Q_\alpha^{i+} \lambda_{\alpha k}^{r+} \\ & - P_\alpha^{r-} \lambda_{\alpha k}^{i-} - P_\alpha^{i-} \lambda_{\alpha k}^{r-} - Q_\alpha^{r-} \lambda_{\alpha k}^{i-} - Q_\alpha^{i-} \lambda_{\alpha k}^{r-}) \sin 2\pi \mathbf{GR} \} \end{aligned} \quad (3.22)$$

### b- Conditions en contraintes :

#### 1- Continuité des contraintes $\sigma_{2k}$ à l'interface

L'interface séparant les deux milieux est en équilibre si les composantes normales des contraintes qui leur correspondent satisfont les conditions suivantes :

#### 1- Continuité des contraintes $\sigma_{2k}$ à l'interface

L'application de la condition (3.23) à l'équation (3.17) conduit à l'expression suivante :

$$\sigma_{2k}^+ \Big|_{x_2=0} = \sigma_{2k}^- \Big|_{x_2=0} \quad (3.23)$$

- Pour la couche (+):

$$\sigma_{2k}^+ = 4\pi \text{Re} \left\{ \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 i(P_\alpha^{r+} + P_\alpha^{i+})(L_{\alpha 2k}^{r+} + iL_{\alpha 2k}^{i+}) \exp 2\pi i \mathbf{GR} + i(Q_\alpha^{r+} + iQ_\alpha^{i+})(L_{\alpha 2k}^{r+} - iL_{\alpha 2k}^{i+}) \exp 2\pi i \mathbf{GR} \right\} \quad (3.24)$$

- Pour la couche (-) :

$$\sigma_{2k}^- = 4\pi \text{Re} \left\{ \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 i(P_{\alpha}^{r-} + P_{\alpha}^{i-})(L_{\alpha 2k}^{r-} + iL_{\alpha 2k}^{i-}) \exp 2\pi i \mathbf{GR} + i(Q_{\alpha}^{r-} + iQ_{\alpha}^{i-})(L_{\alpha 2k}^{r-} - iL_{\alpha 2k}^{i-}) \exp 2\pi i \mathbf{GR} \right\} \quad (3.25)$$

2- Equilibre des contraintes  $\sigma_{2k}$  aux surfaces libres :

Pour  $x_2 = h^+$ , la contrainte normale  $\sigma_{2k}^+$  est nulle et elle l'est également pour  $x_2 = h^-$ .

$$\sigma_{2k}^+ \Big|_{x_2=h^+} = \sigma_{2k}^- \Big|_{x_2=h^-} = 0 \quad (3.26)$$

En tenant compte de la condition (3.26), on aboutit aux expressions suivantes :

$$\begin{aligned} & \text{Re} \left\{ \sum_{\alpha=1}^3 - \left[ (L_{\alpha 2k}^{r+} + iL_{\alpha 2k}^{i+})(P_{\alpha}^{r+} + iP_{\alpha}^{i+}) \exp \bar{\theta} + (L_{\alpha 2k}^{r+} - iL_{\alpha 2k}^{i+})(Q_{\alpha}^{r+} + iQ_{\alpha}^{i+}) \exp \theta \right] \sin 2\pi \mathbf{GR} \right. \\ & \left. + i \sum_{\alpha=1}^3 \left[ (L_{\alpha 2k}^{r-} + iL_{\alpha 2k}^{i-})(P_{\alpha}^{r-} + iP_{\alpha}^{i-}) \exp \bar{\theta} + (L_{\alpha 2k}^{r-} - iL_{\alpha 2k}^{i-})(Q_{\alpha}^{r-} + iQ_{\alpha}^{i-}) \exp \theta \right] \right\} \cos 2\pi \mathbf{GR} = 0 \quad (3.27) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \text{Re} \left\{ \sum_{\alpha=1}^3 - \left[ (L_{\alpha 2k}^{r-} + iL_{\alpha 2k}^{i-})(P_{\alpha}^{r-} + iP_{\alpha}^{i-}) \exp \bar{\theta} + (L_{\alpha 2k}^{r-} - iL_{\alpha 2k}^{i-})(Q_{\alpha}^{r-} + iQ_{\alpha}^{i-}) \exp \theta \right] \sin 2\pi \mathbf{GR} \right. \\ & \left. + i \sum_{\alpha=1}^3 \left[ (L_{\alpha 2k}^{r+} + iL_{\alpha 2k}^{i+})(P_{\alpha}^{r+} + iP_{\alpha}^{i+}) \exp \bar{\theta} + (L_{\alpha 2k}^{r+} - iL_{\alpha 2k}^{i+})(Q_{\alpha}^{r+} + iQ_{\alpha}^{i+}) \exp \theta \right] \right\} \cos 2\pi \mathbf{GR} = 0 \quad (3.28) \end{aligned}$$

L'application des conditions aux limites du problème aux expressions générales du champ de déplacement et de contraintes mène au système d'équations suivant :

$$\sum_{\alpha=1}^3 P_{\alpha}^+ \lambda_{\alpha k}^+ + Q_{\alpha}^+ \lambda_{\alpha k}^+ - P_{\alpha}^- \bar{\lambda}_{\alpha k}^- - Q_{\alpha}^- \bar{\lambda}_{\alpha k}^- = \frac{H_k - iT_k}{2} \quad (3.29)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 P_{\alpha}^+ L_{\alpha 2k}^+ + Q_{\alpha}^+ \bar{L}_{\alpha 2k}^+ - P_{\alpha}^- L_{\alpha 2k}^- - Q_{\alpha}^- \bar{L}_{\alpha 2k}^- = 0 \quad (3.30)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 P_{\alpha}^+ L_{\alpha 2k}^+ \exp(2\pi i p_{\alpha}^+ \times h^+) + Q_{\alpha}^+ \bar{L}_{\alpha 2k}^+ \exp(2\pi i \bar{p}_{\alpha}^+ \times h^+) = 0 \quad (3.31)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 P_{\alpha}^- L_{\alpha 2k}^- \exp(2\pi i p_{\alpha}^- \times h^-) + Q_{\alpha}^- \bar{L}_{\alpha 2k}^- \exp(2\pi i \bar{p}_{\alpha}^- \times h^-) = 0 \quad (3.32)$$

L'inversion du système (3.29 à 3.32) nous paraît impossible analytiquement vu la complexité du système 24x24 à inverser. Cette inversion requiert des évaluations sur machine avec le mode double précision avec un grand nombre d'harmoniques à inclure.

La matrice contenant 576 termes est défini ci après.

$$Ac_1^+ = \cos(2\pi p_1^{r+} \times h^+) \text{ et } As_1^+ = \sin(2\pi p_1^{r+} \times h^+)$$

$$Ac_2^+ = \cos(2\pi p_2^{r+} \times h^+) \text{ et } As_2^+ = \sin(2\pi p_2^{r+} \times h^+)$$

$$Ac_3^+ = \cos(2\pi p_3^{r+} \times h^+) \text{ et } As_3^+ = \sin(2\pi p_3^{r+} \times h^+)$$

$$\text{expl1} = \exp(-2\pi p_1^{i+} \times h^+) \text{ et } \text{exp21} = \exp(2\pi p_1^{i+} \times h^+)$$

$$\text{expl2} = \exp(-2\pi p_2^{i+} \times h^+) \text{ et } \text{exp22} = \exp(2\pi p_2^{i+} \times h^+)$$

$$\text{exp13} = \exp(-2\pi p_3^{i+} \times h^+) \text{ et } \text{exp23} = \exp(2\pi p_3^{i+} \times h^+)$$

$$A_{11c}^{p+} = (L_{121}^{r+} \times Ac_1^+ - L_{121}^{i+} \times As_1^+) \times \text{exp11}$$

$$A_{11c}^{m+} = (-L_{121}^{i+} \times Ac_1^+ - L_{121}^{r+} \times As_1^+) \times \text{exp11}$$

$$A_{12c}^{m+} = (L_{121}^{r+} \times Ac_1^+ + L_{121}^{i+} \times As_1^+) \times \text{exp21}$$

$$A_{12c}^{p+} = (L_{121}^{i+} \times Ac_1^+ - L_{121}^{r-} \times As_1^+) \times \text{exp21}$$

$$B_{11c}^{p+} = (L_{221}^{r+} \times Ac_2^+ - L_{221}^{i+} \times As_2^+) \times \text{exp12}$$

$$B_{11c}^{m+} = (L_{221}^{r+} \times Ac_2^+ - L_{221}^{i+} \times As_2^+) \times \text{exp12}$$

$$B_{12c}^{m+} = (L_{221}^{r+} \times Ac_2^+ + L_{221}^{i+} \times As_2^+) \times \text{exp22}$$

$$B_{12c}^{p+} = (L_{221}^{i+} \times Ac_2^+ - L_{221}^{r-} \times As_2^+) \times \text{exp22}$$

$$C_{11c}^{p+} = (L_{321}^{r+} \times Ac_3^+ - L_{321}^{i+} \times As_3^+) \times \text{exp13}$$

$$C_{11c}^{m+} = (-L_{321}^{i+} \times Ac_3^+ - L_{321}^{r+} \times As_3^+) \times \text{exp13}$$

$$C_{12c}^{m+} = (L_{321}^{r+} \times Ac_3^+ + L_{321}^{i+} \times As_3^+) \times \text{exp23}$$

$$C_{12c}^{p+} = (L_{321}^{i+} \times Ac_3^+ - L_{321}^{r-} \times As_3^+) \times \text{exp23}$$

$$A_{11s}^{p+} = (-L_{121}^{i+} \times Ac_1^+ - L_{121}^{r+} \times As_1^+) \times \text{exp11}$$

$$A_{11s}^{m+} = (-L_{121}^{r+} \times Ac_1^+ + L_{121}^{i+} \times As_1^+) \times \text{exp11}$$

$$A_{12s}^{m+} = (L_{121}^{i+} \times Ac_1^+ - L_{121}^{r+} \times As_1^+) \times \text{exp12}$$

$$A_{12s}^{p+} = (-L_{121}^{r+} \times Ac_1^+ - L_{121}^{i+} \times As_1^+) \times \text{exp12}$$

$$B_{11s}^{p+} = (-L_{221}^{i+} \times Ac_2^+ - L_{221}^{r+} \times As_2^+) \times \text{exp12}$$

$$B_{11s}^{m+} = (-L_{221}^{r+} \times Ac_2^+ + L_{221}^{i+} \times As_2^+) \times \text{exp12}$$

$$B_{12s}^{m+} = (L_{221}^{i+} \times Ac_2^+ - L_{221}^{r+} \times As_2^+) \times \text{exp22}$$

$$B_{12s}^{p+} = (-L_{221}^{r+} \times Ac_2^+ - L_{221}^{i+} \times As_2^+) \times \text{exp22}$$

$$C_{11s}^{p+} = (-L_{321}^{i+} \times Ac_3^+ - L_{321}^{r+} \times As_3^+) \times \text{exp13}$$

$$C_{11s}^{m+} = (-L_{321}^{r+} \times Ac_3^+ + L_{321}^{i+} \times As_3^+) \times \text{exp13}$$

$$C_{12s}^{m+} = (L_{321}^{i+} \times Ac_3^+ - L_{321}^{r+} \times As_3^+) \times \text{exp23}$$

$$C_{12s}^{p+} = (-L_{321}^{r+} \times Ac_3^+ - L_{321}^{i+} \times As_3^+) \times \text{exp23}$$

$$Ac_1^- = \cos(2\pi p_1^{r-} \times h^-) \text{ et } As_1^- = \sin(2\pi p_1^{r-} \times h^-),$$

$$Ac_2^- = \cos(2\pi p_2^{r-} \times h^-) \text{ et } As_2^- = \sin(2\pi p_2^{r-} \times h^-),$$

$$Ac_3^- = \cos(2\pi p_3^{r-} \times h^-) \text{ et } As_3^- = \sin(2\pi p_3^{r-} \times h^-)$$

$$\text{exp31} = \exp(-2\pi p_1^{i-} \times h^-) \text{ et } \text{exp41} = \exp(2\pi p_1^{i-} \times h^-)$$

$$\text{exp32} = \exp(-2\pi p_2^{i-} \times h^-) \text{ et } \text{exp42} = \exp(2\pi p_2^{i-} \times h^-)$$

$$\text{exp33} = \exp(-2\pi p_3^{i-} \times h^-) \text{ et } \text{exp43} = \exp(2\pi p_3^{i-} \times h^-)$$

$$A_{11c}^{p-} = (L_{121}^{r-} \times Ac_1^- - L_{121}^{i-} \times As_1^-) \times \text{exp31}$$

$$A_{11c}^{m-} = (-L_{121}^{i-} \times Ac_1^- - L_{121}^{r-} \times As_1^-) \times \text{exp31}$$

$$A_{12c}^{m-} = (L_{121}^{r-} \times Ac_1^- + L_{121}^{i-} \times As_1^-) \times \text{exp41}$$

$$A_{12c}^{p-} = (L_{121}^{i-} \times Ac_1^- - L_{121}^{r-} \times As_1^-) \times \text{exp41}$$

$$B_{11c}^{p-} = (L_{221}^{r-} \times Ac_2^- - L_{221}^{i-} \times As_2^-) \times \text{exp32}$$

$$B_{11c}^{m-} = (L_{221}^{r-} \times Ac_2^- - L_{221}^{i-} \times As_2^-) \times \text{exp32}$$

$$B_{12c}^{m-} = (L_{221}^{r-} \times Ac_2^- + L_{221}^{i-} \times As_2^-) \times \text{exp32}$$

$$B_{12c}^{p-} = (L_{221}^{i-} \times Ac_2^- - L_{221}^{r-} \times As_2^-) \times \text{exp32}$$

$$C_{11c}^{p-} = (L_{321}^{r-} \times Ac_3^- - L_{321}^{i-} \times As_3^-) \times \text{exp33}$$

$$C_{11c}^{m-} = (-L_{321}^{i-} \times Ac_3^- - L_{321}^{r-} \times As_3^-) \times \text{exp33}$$

$$C_{12c}^{m-} = (L_{321}^{r-} \times Ac_3^- + L_{321}^{i-} \times As_3^-) \times \text{exp33}$$

$$C_{12c}^{p-} = (L_{321}^{i-} \times Ac_3^- - L_{321}^{r-} \times As_3^-) \times \text{exp33}$$

$$A_{11s}^{p-} = (-L_{121}^{i-} \times Ac_1^- - L_{121}^{r-} \times As_1^-) \times \text{exp31}$$

$$A_{11s}^{m-} = (-L_{121}^{r-} \times Ac_1^- + L_{121}^{i-} \times As_1^-) \times \text{exp31}$$

$$A_{12s}^{m-} = (L_{121}^{i-} \times Ac_1^- - L_{121}^{r-} \times As_1^-) \times \text{exp41}$$

$$A_{12s}^{p-} = (-L_{121}^{r-} \times Ac_1^- - L_{121}^{i-} \times As_1^-) \times \text{exp41}$$

$$B_{11s}^{p-} = (-L_{221}^{i-} \times Ac_2^- - L_{221}^{r-} \times As_2^-) \times \text{exp32}$$

$$B_{11s}^{m-} = (-L_{221}^{r-} \times Ac_2^- + L_{221}^{i-} \times As_2^-) \times \text{exp32}$$

$$B_{12s}^{m-} = (L_{221}^{i-} \times Ac_2^- - L_{221}^{r-} \times As_2^-) \times \text{exp42}$$

$$B_{12s}^{p-} = (-L_{221}^{r-} \times Ac_2^- - L_{221}^{i-} \times As_2^-) \times \text{exp42}$$

$$C_{11s}^{p-} = (-L_{321}^{i-} \times Ac_3^- - L_{321}^{r-} \times As_3^-) \times \text{exp33}$$

$$C_{11s}^{m-} = (-L_{321}^{r-} \times Ac_3^- + L_{321}^{i-} \times As_3^-) \times \text{exp33}$$

$$C_{12s}^{m-} = (L_{321}^{i-} \times Ac_3^- - L_{321}^{r-} \times As_3^-) \times \text{exp43}$$

$$C_{12s}^{p-} = (-L_{321}^{r-} \times Ac_3^- - L_{321}^{i-} \times As_3^-) \times \text{exp43}$$

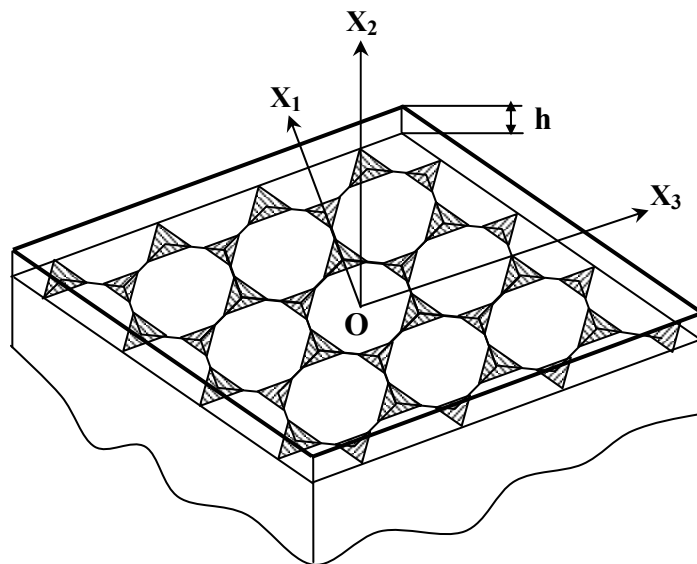
|                     |                      |                      |                     |                      |                      |                      |                      |                     |                      |                      |                     |                      |
|---------------------|----------------------|----------------------|---------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|---------------------|----------------------|----------------------|---------------------|----------------------|
| $\lambda_{11}^{r+}$ | $-\lambda_{11}^{i+}$ | $\lambda_{11}^{r+}$  | $\lambda_{11}^{i+}$ | $-\lambda_{11}^{r-}$ | $\lambda_{11}^{i-}$  | $-\lambda_{11}^{r-}$ | $-\lambda_{11}^{i-}$ | $\lambda_{21}^{r+}$ | $-\lambda_{21}^{i+}$ | $\lambda_{21}^{r+}$  | $\lambda_{21}^{i+}$ | $-\lambda_{21}^{r-}$ |
| $\lambda_{12}^{r+}$ | $-\lambda_{12}^{i+}$ | $\lambda_{12}^{r+}$  | $\lambda_{12}^{i+}$ | $-\lambda_{12}^{r-}$ | $\lambda_{12}^{i-}$  | $-\lambda_{12}^{r-}$ | $-\lambda_{12}^{i-}$ | $\lambda_{22}^{r+}$ | $-\lambda_{22}^{i+}$ | $\lambda_{22}^{r+}$  | $\lambda_{22}^{i+}$ | $-\lambda_{22}^{r-}$ |
| $\lambda_{13}^{r+}$ | $-\lambda_{13}^{i+}$ | $\lambda_{13}^{r+}$  | $\lambda_{13}^{i+}$ | $-\lambda_{13}^{r-}$ | $\lambda_{13}^{i-}$  | $-\lambda_{13}^{r-}$ | $-\lambda_{13}^{i-}$ | $\lambda_{23}^{r+}$ | $-\lambda_{23}^{i+}$ | $\lambda_{23}^{r+}$  | $\lambda_{23}^{i+}$ | $-\lambda_{23}^{r-}$ |
| $\lambda_{11}^{i+}$ | $\lambda_{11}^{r+}$  | $-\lambda_{11}^{i+}$ | $\lambda_{11}^{r+}$ | $-\lambda_{11}^{i-}$ | $-\lambda_{11}^{r-}$ | $\lambda_{11}^{i-}$  | $-\lambda_{11}^{r-}$ | $\lambda_{21}^{i+}$ | $\lambda_{21}^{r+}$  | $-\lambda_{21}^{i+}$ | $\lambda_{21}^{r+}$ | $-\lambda_{21}^{i-}$ |
| $\lambda_{12}^{i+}$ | $\lambda_{12}^{r+}$  | $-\lambda_{12}^{i+}$ | $\lambda_{12}^{r+}$ | $-\lambda_{12}^{i-}$ | $-\lambda_{12}^{r-}$ | $\lambda_{12}^{i-}$  | $-\lambda_{12}^{r-}$ | $\lambda_{22}^{i+}$ | $\lambda_{22}^{r+}$  | $-\lambda_{22}^{i+}$ | $\lambda_{22}^{r+}$ | $-\lambda_{22}^{i-}$ |
| $\lambda_{13}^{i+}$ | $\lambda_{13}^{r+}$  | $-\lambda_{13}^{i+}$ | $\lambda_{13}^{r+}$ | $-\lambda_{13}^{i-}$ | $-\lambda_{13}^{r-}$ | $\lambda_{13}^{i-}$  | $-\lambda_{13}^{r-}$ | $\lambda_{23}^{i+}$ | $\lambda_{23}^{r+}$  | $-\lambda_{23}^{i+}$ | $\lambda_{23}^{r+}$ | $-\lambda_{23}^{i-}$ |
| $L_{121}^{r+}$      | $-L_{121}^{i+}$      | $L_{121}^{r+}$       | $L_{121}^{i+}$      | $-L_{121}^{r-}$      | $L_{121}^{i-}$       | $-L_{121}^{r-}$      | $-L_{121}^{i-}$      | $L_{221}^{r+}$      | $-L_{221}^{i+}$      | $L_{221}^{r+}$       | $L_{221}^{i+}$      | $-L_{221}^{r-}$      |
| $L_{122}^{r+}$      | $-L_{122}^{i+}$      | $L_{122}^{r+}$       | $L_{122}^{i+}$      | $-L_{122}^{r-}$      | $L_{122}^{i-}$       | $-L_{122}^{r-}$      | $-L_{122}^{i-}$      | $L_{222}^{r+}$      | $-L_{222}^{i+}$      | $L_{222}^{r+}$       | $L_{222}^{i+}$      | $-L_{222}^{r-}$      |
| $L_{123}^{r+}$      | $-L_{123}^{i+}$      | $L_{123}^{r+}$       | $L_{123}^{i+}$      | $-L_{123}^{r-}$      | $L_{123}^{i-}$       | $-L_{123}^{r-}$      | $-L_{123}^{i-}$      | $L_{223}^{r+}$      | $-L_{223}^{i+}$      | $L_{223}^{r+}$       | $L_{223}^{i+}$      | $-L_{223}^{r-}$      |
| $L_{121}^{i+}$      | $L_{121}^{r+}$       | $-L_{121}^{i+}$      | $L_{121}^{r+}$      | $-L_{121}^{i-}$      | $-L_{121}^{r-}$      | $L_{121}^{i-}$       | $-L_{121}^{r-}$      | $L_{221}^{i+}$      | $L_{221}^{r+}$       | $-L_{221}^{i+}$      | $L_{221}^{r+}$      | $-L_{221}^{i-}$      |
| $L_{122}^{i+}$      | $L_{122}^{r+}$       | $-L_{122}^{i+}$      | $L_{122}^{r+}$      | $-L_{122}^{i-}$      | $-L_{122}^{r-}$      | $L_{122}^{i-}$       | $-L_{122}^{r-}$      | $L_{222}^{i+}$      | $L_{222}^{r+}$       | $-L_{222}^{i+}$      | $L_{222}^{r+}$      | $-L_{222}^{i-}$      |
| $L_{123}^{i+}$      | $L_{123}^{r+}$       | $-L_{123}^{i+}$      | $L_{123}^{r+}$      | $-L_{123}^{i-}$      | $-L_{123}^{r-}$      | $L_{123}^{i-}$       | $-L_{123}^{r-}$      | $L_{223}^{i+}$      | $L_{223}^{r+}$       | $-L_{223}^{i+}$      | $L_{223}^{r+}$      | $-L_{223}^{i-}$      |
| $A_{11c}^{p+}$      | $A_{11c}^{m+}$       | $A_{12c}^{m+}$       | $A_{12c}^{p+}$      | 0                    | 0                    | 0                    | 0                    | $B_{11c}^{p+}$      | $B_{11c}^{m+}$       | $B_{12c}^{m+}$       | $B_{12c}^{p+}$      | 0                    |
| $A_{21c}^{p+}$      | $A_{21c}^{m+}$       | $A_{22c}^{m+}$       | $A_{22c}^{p+}$      | 0                    | 0                    | 0                    | 0                    | $B_{21c}^{p+}$      | $B_{21c}^{m+}$       | $B_{22c}^{m+}$       | $B_{22c}^{p+}$      | 0                    |
| $A_{31c}^{p+}$      | $A_{31c}^{m+}$       | $A_{32c}^{m+}$       | $A_{32c}^{p+}$      | 0                    | 0                    | 0                    | 0                    | $B_{31c}^{p+}$      | $B_{31c}^{m+}$       | $B_{32c}^{m+}$       | $B_{32c}^{p+}$      | 0                    |
| $A_{11s}^{p+}$      | $A_{11s}^{m+}$       | $A_{12s}^{m+}$       | $A_{12s}^{p+}$      | 0                    | 0                    | 0                    | 0                    | $B_{11s}^{p+}$      | $B_{11s}^{m+}$       | $B_{12s}^{m+}$       | $B_{12s}^{p+}$      | 0                    |
| $A_{21s}^{p+}$      | $A_{21s}^{m+}$       | $A_{22s}^{m+}$       | $A_{22s}^{p+}$      | 0                    | 0                    | 0                    | 0                    | $B_{21s}^{p+}$      | $B_{21s}^{m+}$       | $B_{22s}^{m+}$       | $B_{22s}^{p+}$      | 0                    |
| $A_{31s}^{p+}$      | $A_{31s}^{m+}$       | $A_{32s}^{m+}$       | $A_{32s}^{p+}$      | 0                    | 0                    | 0                    | 0                    | $B_{31s}^{p+}$      | $B_{31s}^{m+}$       | $B_{32s}^{m+}$       | $B_{32s}^{p+}$      | 0                    |
| 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $A_{11c}^{p-}$       | $A_{11c}^{m-}$       | $A_{12c}^{m-}$       | $A_{12c}^{p-}$       | 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $B_{11c}^{p-}$       |
| 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $A_{21c}^{p-}$       | $A_{21c}^{m-}$       | $A_{22c}^{m-}$       | $A_{22c}^{p-}$       | 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $B_{21c}^{p-}$       |
| 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $A_{31c}^{p-}$       | $A_{31c}^{m-}$       | $A_{32c}^{m-}$       | $A_{32c}^{p-}$       | 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $B_{31c}^{p-}$       |
| 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $A_{11s}^{p-}$       | $A_{11s}^{m-}$       | $A_{12s}^{m-}$       | $A_{12s}^{p-}$       | 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $B_{11s}^{p-}$       |
| 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $A_{21s}^{p-}$       | $A_{21s}^{m-}$       | $A_{22s}^{m-}$       | $A_{22s}^{p-}$       | 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $B_{21s}^{p-}$       |

|                      |                      |                      |                     |                      |                      |                     |                      |                      |                      |                      |            |                  |
|----------------------|----------------------|----------------------|---------------------|----------------------|----------------------|---------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|------------|------------------|
| $\lambda_{21}^{i-}$  | $-\lambda_{21}^{r-}$ | $-\lambda_{21}^{i-}$ | $\lambda_{31}^{r+}$ | $-\lambda_{31}^{i+}$ | $\lambda_{31}^{r+}$  | $\lambda_{31}^{i+}$ | $-\lambda_{31}^{r-}$ | $\lambda_{31}^{i-}$  | $-\lambda_{31}^{r-}$ | $-\lambda_{31}^{i-}$ | $P_1^{r+}$ | $\frac{H_1}{2}$  |
| $\lambda_{22}^{i-}$  | $-\lambda_{22}^{r-}$ | $-\lambda_{22}^{i-}$ | $\lambda_{32}^{r+}$ | $-\lambda_{32}^{i+}$ | $\lambda_{32}^{r+}$  | $\lambda_{32}^{i+}$ | $-\lambda_{32}^{r-}$ | $\lambda_{32}^{i-}$  | $-\lambda_{32}^{r-}$ | $-\lambda_{32}^{i-}$ | $P_1^{i+}$ | $\frac{H_2}{2}$  |
| $\lambda_{23}^{i-}$  | $-\lambda_{23}^{r-}$ | $-\lambda_{23}^{i-}$ | $\lambda_{33}^{r+}$ | $-\lambda_{33}^{i+}$ | $\lambda_{33}^{r+}$  | $\lambda_{33}^{i+}$ | $-\lambda_{33}^{r-}$ | $\lambda_{33}^{i-}$  | $-\lambda_{33}^{r-}$ | $-\lambda_{33}^{i-}$ | $P_1^{r-}$ | $\frac{H_3}{2}$  |
| $-\lambda_{21}^{r-}$ | $\lambda_{21}^{i-}$  | $-\lambda_{21}^{r-}$ | $\lambda_{31}^{i+}$ | $\lambda_{31}^{r+}$  | $-\lambda_{31}^{i+}$ | $\lambda_{31}^{r+}$ | $-\lambda_{31}^{i-}$ | $-\lambda_{31}^{r-}$ | $\lambda_{31}^{i-}$  | $-\lambda_{31}^{r-}$ | $P_1^{i-}$ | $\frac{-T_1}{2}$ |
| $-\lambda_{22}^{r-}$ | $\lambda_{22}^{i-}$  | $-\lambda_{22}^{r-}$ | $\lambda_{32}^{i+}$ | $\lambda_{32}^{r+}$  | $-\lambda_{32}^{i+}$ | $\lambda_{32}^{r+}$ | $-\lambda_{32}^{i-}$ | $-\lambda_{32}^{r-}$ | $\lambda_{32}^{i-}$  | $-\lambda_{32}^{r-}$ | $Q_1^{r+}$ | $\frac{-T_2}{2}$ |
| $-\lambda_{23}^{r-}$ | $\lambda_{23}^{i-}$  | $-\lambda_{23}^{r-}$ | $\lambda_{33}^{i+}$ | $\lambda_{33}^{r+}$  | $-\lambda_{33}^{i+}$ | $\lambda_{33}^{r+}$ | $-\lambda_{33}^{i-}$ | $-\lambda_{33}^{r-}$ | $\lambda_{33}^{i-}$  | $-\lambda_{33}^{r-}$ | $Q_1^{i+}$ | $\frac{-T_3}{2}$ |
| $L_{221}^{i-}$       | $-L_{221}^{r-}$      | $-L_{221}^{i-}$      | $L_{321}^{r+}$      | $-L_{321}^{i+}$      | $L_{321}^{r+}$       | $L_{321}^{i+}$      | $-L_{321}^{r-}$      | $L_{321}^{i-}$       | $-L_{321}^{r-}$      | $-L_{321}^{i-}$      | $Q_1^{r-}$ | 0                |
| $L_{222}^{i-}$       | $-L_{222}^{r-}$      | $-L_{222}^{i-}$      | $L_{322}^{r+}$      | $-L_{322}^{i+}$      | $L_{322}^{r+}$       | $L_{322}^{i+}$      | $-L_{322}^{r-}$      | $L_{322}^{i-}$       | $-L_{322}^{r-}$      | $-L_{322}^{i-}$      | $Q_1^{i-}$ | 0                |
| $L_{223}^{i-}$       | $-L_{223}^{r-}$      | $-L_{223}^{i-}$      | $L_{323}^{r+}$      | $-L_{323}^{i+}$      | $L_{323}^{r+}$       | $L_{323}^{i+}$      | $-L_{323}^{r-}$      | $L_{323}^{i-}$       | $-L_{323}^{r-}$      | $-L_{323}^{i-}$      | $P_2^{r+}$ | 0                |
| $-L_{221}^{r-}$      | $L_{221}^{i-}$       | $-L_{221}^{r-}$      | $L_{321}^{i+}$      | $L_{321}^{r+}$       | $-L_{321}^{i+}$      | $L_{321}^{r+}$      | $-L_{321}^{i-}$      | $-L_{321}^{r-}$      | $L_{321}^{i-}$       | $-L_{321}^{r-}$      | $P_2^{i+}$ | 0                |
| $-L_{222}^{r-}$      | $L_{222}^{i-}$       | $-L_{222}^{r-}$      | $L_{322}^{i+}$      | $L_{322}^{r+}$       | $-L_{322}^{i+}$      | $L_{322}^{r+}$      | $-L_{322}^{i-}$      | $-L_{322}^{r-}$      | $L_{322}^{i-}$       | $-L_{322}^{r-}$      | $P_2^{r-}$ | 0                |
| $-L_{223}^{r-}$      | $L_{223}^{i-}$       | $-L_{223}^{r-}$      | $L_{323}^{i+}$      | $L_{323}^{r+}$       | $-L_{323}^{i+}$      | $L_{323}^{r+}$      | $-L_{323}^{i-}$      | $-L_{323}^{r-}$      | $L_{323}^{i-}$       | $-L_{323}^{r-}$      | $P_2^{i-}$ | 0                |
| 0                    | 0                    | 0                    | $C_{11c}^{p+}$      | $C_{11c}^{m+}$       | $C_{12c}^{m+}$       | $C_{12c}^{p+}$      | 0                    | 0                    | 0                    | 0                    | $Q_2^{r+}$ | 0                |
| 0                    | 0                    | 0                    | $C_{21c}^{p+}$      | $C_{21c}^{m+}$       | $C_{22c}^{m+}$       | $C_{22c}^{p+}$      | 0                    | 0                    | 0                    | 0                    | $Q_2^{i+}$ | 0                |
| 0                    | 0                    | 0                    | $C_{31c}^{p+}$      | $C_{31c}^{m+}$       | $C_{32c}^{m+}$       | $C_{32c}^{p+}$      | 0                    | 0                    | 0                    | 0                    | $Q_2^{r-}$ | 0                |
| 0                    | 0                    | 0                    | $C_{11s}^{p+}$      | $C_{11s}^{m+}$       | $C_{12s}^{m+}$       | $C_{12s}^{p+}$      | 0                    | 0                    | 0                    | 0                    | $Q_2^{i-}$ | 0                |
| 0                    | 0                    | 0                    | $C_{21s}^{p+}$      | $C_{21s}^{m+}$       | $C_{22s}^{m+}$       | $C_{22s}^{p+}$      | 0                    | 0                    | 0                    | 0                    | $P_3^{r+}$ | 0                |
| 0                    | 0                    | 0                    | $C_{31s}^{p+}$      | $C_{31s}^{m+}$       | $C_{32s}^{m+}$       | $C_{32s}^{p+}$      | 0                    | 0                    | 0                    | 0                    | $P_3^{i+}$ | 0                |
| $B_{11c}^{m-}$       | $B_{12c}^{m-}$       | $B_{12c}^{p-}$       | 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $C_{11c}^{p-}$       | $C_{11c}^{m-}$       | $C_{12c}^{m-}$       | $C_{12c}^{p-}$       | $P_3^{r-}$ | 0                |
| $B_{21c}^{m-}$       | $B_{22c}^{m-}$       | $B_{22c}^{p-}$       | 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $C_{21c}^{p-}$       | $C_{21c}^{m-}$       | $C_{22c}^{m-}$       | $C_{22c}^{p-}$       | $P_3^{i-}$ | 0                |
| $B_{31c}^{m-}$       | $B_{32c}^{m-}$       | $B_{32c}^{p-}$       | 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $C_{31c}^{p-}$       | $C_{31c}^{m-}$       | $C_{32c}^{m-}$       | $C_{32c}^{p-}$       | $Q_3^{r+}$ | 0                |
| $B_{11s}^{m-}$       | $B_{12s}^{m-}$       | $B_{12s}^{p-}$       | 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $C_{11s}^{p-}$       | $C_{11s}^{m-}$       | $C_{12s}^{m-}$       | $C_{12s}^{p-}$       | $Q_3^{i+}$ | 0                |
| $B_{21s}^{m-}$       | $B_{22s}^{m-}$       | $B_{22s}^{p-}$       | 0                   | 0                    | 0                    | 0                   | $C_{21s}^{p-}$       | $C_{21s}^{m-}$       | $C_{22s}^{m-}$       | $C_{22s}^{p-}$       | $Q_3^{r-}$ | 0                |

### III. 4 Solution pour un milieu semi infini

Lorsqu'une couche est déposée sur un substrat monocristallin, différents modes de croissance prennent place [116]. Après une hauteur suffisante de matière déposée, une grande variété de défauts interfaciaux peuvent être observés. La densité de défauts dépend, en particulier, du misfit interfacial entre les deux cristaux, lequel, peut être soit de nature longitudinale soit de nature angulaire.

Dans ce qui suit nous allons considérer une couche mince d'épaisseur  $h$  déposée sur un substrat placé vers  $x_2 < 0$ , tel que l'interface est tapissée d'un réseau hexagonal de dislocations coins de type  $1/2 \langle 110 \rangle$  qui accommodent, initialement, un misfit bidimensionnel ou un angle de torsion le long du plan (111). Par la suite, au prix d'un accroissement raisonnable de complexité, les nœuds se dissocient par glissement, ce qui peut conduire à deux types de triangles fautés. En accord avec l'orientation cristallographique des segments de dislocations et la convention utilisée pour les vecteurs de Burgers dans Hirth et Lothe [20], le nœud V est remplacé par une FEI, tandis que le nœud U est substitué par une FEE, figure (3.4.1).



**Figure 3. 4. 1 :** Hétéro-interface tapissée d'un réseau hexagonal de dislocations dissocié en fautes d'empilement intrinsèques et extrinsèques.

#### III. 4. 1 Conditions aux limites du modèle géométrique

La supposition de la répétition de l'unité atomique structurale à l'intérieur de l'hexagone UVWRSZ au niveau de l'interface a été confirmée par la microscopie



électronique à transmission haute résolution (METHR) [5,7]. De là, des conditions sur les déplacements et sur les contraintes s'imposent sur le milieu semi infini.

**a- Conditions en déplacement :**

La même condition en déplacement interfacial est reprise dans le cas du milieu semi infini, en conséquence l'équation (3.18) est appliquée et on obtient alors respectivement les équations (3.33) pour la couche et (3.34) pour le substrat.

- Pour la couche :

$$U_k^+ = 2\text{Re} \left[ \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 (P_{\alpha}^{r+} + iP_{\alpha}^{i+}) \times (\lambda_{\alpha k}^{r+} + i\lambda_{\alpha k}^{i+}) \exp 2\pi i(\mathbf{GR} + p_{\alpha}^{(G)} x_2) + (Q_{\alpha}^{r+} + iQ_{\alpha}^{i+}) \times (\lambda_{\alpha k}^{r+} - i\lambda_{\alpha k}^{i+}) \exp 2\pi i(\mathbf{GR} + p_{\alpha}^{(G)} x_2) \right] \quad (3.33)$$

- Pour le substrat :

$$U_k^- = 2\text{Re} \left[ \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 (P_{\alpha}^{r-} + iP_{\alpha}^{i-}) \times (\lambda_{\alpha k}^{r-} + i\lambda_{\alpha k}^{i-}) \exp 2\pi i(\mathbf{GR} + p_{\alpha}^{(G)} x_2) + (Q_{\alpha}^{r-} + iQ_{\alpha}^{i-}) \times (\lambda_{\alpha k}^{r-} - i\lambda_{\alpha k}^{i-}) \exp 2\pi i(\mathbf{GR} + p_{\alpha}^{(G)} x_2) \right] \quad (3.34)$$

2- Pour  $x_2 < 0$ , le champ  $\mathbf{u}$  doit converger vers zéro. Cela n'est possible que si  $P_{\alpha}^- = 0$ .

En conséquence l'équation (3.34) se réduit à :

$$U_k^- = 2 \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 (Q_{\alpha}^{r-} \lambda_{\alpha k}^{r-} + Q_{\alpha}^{i-} \lambda_{\alpha k}^{i-}) \exp 2\pi i(\mathbf{GR} + \bar{p}_{\alpha}^{(G)}) \quad (3.35)$$

et donc le déplacement relatif interfacial aura pour expression :

$$\Delta U_k \Big|_{x_2=0} = \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ (P_{\alpha}^{r+} \lambda_{\alpha k}^{r+} - P_{\alpha}^{i+} \lambda_{\alpha k}^{i+} + Q_{\alpha}^{r+} \lambda_{\alpha k}^{r+} + Q_{\alpha}^{i+} \lambda_{\alpha k}^{i+} - Q_{\alpha}^{r-} \lambda_{\alpha k}^{r-} + Q_{\alpha}^{i-} \lambda_{\alpha k}^{i-}) \cos 2\pi \mathbf{GR} - (P_{\alpha}^{r+} \lambda_{\alpha k}^{i+} + P_{\alpha}^{i+} \lambda_{\alpha k}^{r+} - Q_{\alpha}^{r+} \lambda_{\alpha k}^{i+} + Q_{\alpha}^{i+} \lambda_{\alpha k}^{r+} + Q_{\alpha}^{r-} \lambda_{\alpha k}^{i-} - Q_{\alpha}^{i-} \lambda_{\alpha k}^{r-}) \sin 2\pi \mathbf{GR} \right\} \quad (3.36)$$

ou encore :

$$\Delta U_k \Big|_{x_2=0} = \sum_D \mathbf{H}_k^{(G)} \cos 2\pi \mathbf{GR} + \mathbf{T}_k^{(G)} \sin 2\pi \mathbf{GR} \quad (3.37)$$

**b- Condition en contraintes :**

1- Continuité des contraintes  $\sigma_{2k}$  à l'interface

$$\sigma_{2k}^+ \Big|_{x_2=0} = \sigma_{2k}^- \Big|_{x_2=0} \quad (3.38)$$

L'application de la condition (3.38) à l'équation (3.17) conduit à l'expression suivante :

- Pour la couche :

$$\sigma_{2k}^+ = 4\pi \text{Re} \left\{ \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 i(P_{\alpha}^{r+} + P_{\alpha}^{i+})(L_{\alpha 2k}^{r+} + iL_{\alpha 2k}^{i+}) \exp 2\pi i \mathbf{GR} + i(Q_{\alpha}^{r+} + iQ_{\alpha}^{i+})(L_{\alpha 2k}^{r+} - iL_{\alpha 2k}^{i+}) \exp 2\pi i \mathbf{GR} \right\} \quad (3.39)$$

- Pour le substrat :

$$\sigma_{2k}^- = 4\pi \text{Re} \left\{ \sum_D \sum_{\alpha=1}^3 i(Q_{\alpha}^{r-} + iQ_{\alpha}^{i-})(L_{\alpha 2k}^{r-} - iL_{\alpha 2k}^{i-}) \exp 2\pi i \mathbf{GR} \right\} \quad (3.40)$$

2- Nullité des contraintes  $\sigma_{2k}$  à la limite de la couche

Pour :  $x_2 = h \Rightarrow \sigma_{2k} = 0$  et alors chaque terme de la série doit être nul ce qui donne après développement :

$$\begin{aligned} & \text{Re} \left\{ \sum_{\alpha=1}^3 - \left[ (L_{\alpha 2k}^r + iL_{\alpha 2k}^i)(P_{\alpha}^r + iP_{\alpha}^i) \exp \bar{\theta} + (L_{\alpha 2k}^r - iL_{\alpha 2k}^i)(Q_{\alpha}^r + iQ_{\alpha}^i) \exp \theta \right] \sin 2\pi \mathbf{GR} \right. \\ & \left. + i \sum_{\alpha=1}^3 \left[ (L_{\alpha 2k}^r + iL_{\alpha 2k}^i)(P_{\alpha}^r + iP_{\alpha}^i) \exp \bar{\theta} + (L_{\alpha 2k}^r - iL_{\alpha 2k}^i)(Q_{\alpha}^r + iQ_{\alpha}^i) \exp \theta \right] \right\} \cos 2\pi \mathbf{GR} = 0 \quad (3.41) \end{aligned}$$

Les conditions aux limites du modèle géométrique étudié sont définies par le système d'équations à neuf inconnues complexes suivant :

$$\sum_{\alpha=1}^3 P_{\alpha}^+ \lambda_{\alpha k}^+ + Q_{\alpha}^+ \lambda_{\alpha k}^+ - Q_{\alpha}^- \bar{\lambda}_{\alpha k}^- = \frac{H_k - iT_k}{2} \quad (3.42)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 P_{\alpha}^+ L_{\alpha 2k}^+ + Q_{\alpha}^+ \bar{L}_{\alpha 2k}^+ - Q_{\alpha}^- \bar{L}_{\alpha 2k}^- = 0 \quad (3.43)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 P_{\alpha}^+ L_{\alpha 2k}^+ \exp(2\pi i p_{\alpha}^+ \times h) + Q_{\alpha}^+ \bar{L}_{\alpha 2k}^+ \exp(2\pi i \bar{p}_{\alpha}^+ \times h) = 0 \quad (3.44)$$

Le système (3.42) à (3.44), comme dans le cas précédent, ne peut être inversé que numériquement et pour cela nous allons le développer afin d'obtenir une matrice réelle de 18x18 qui sera inversée par la méthode classique de Gauss. En reprenant les mêmes notations que pour la matrice 24x24, les termes de la matrice sont définis comme suit :

$$A_{c_1} = \cos(2\pi p_1^{r+} \times h) \text{ et } A_{s_1} = \sin(2\pi p_1^{r+} \times h)$$

$$A_{c_2} = \cos(2\pi p_2^{r+} \times h) \text{ et } A_{s_2} = \sin(2\pi p_2^{r+} \times h)$$

$$A_{c_3} = \cos(2\pi p_3^{r+} \times h) \text{ et } A_{s_3} = \sin(2\pi p_3^{r+} \times h)$$

$$\text{expl1} = \exp(-2\pi p_1^{i+} \times h) \text{ et } \text{exp21} = \exp(2\pi p_1^{i+} \times h)$$

$$\text{expl2} = \exp(-2\pi p_2^{i+} \times h) \text{ et } \text{exp22} = \exp(2\pi p_2^{i+} \times h)$$

$$\text{expl3} = \exp(-2\pi p_3^{i+} \times h) \text{ et } \text{exp23} = \exp(2\pi p_3^{i+} \times h)$$

$$A_{11c}^p = (L_{121}^{r+} \times A_{c_1} - L_{121}^{i+} \times A_{s_1}) \times \text{expl1}$$

$$A_{11c}^m = (-L_{121}^{i+} \times A_{c_1} - L_{121}^{r+} \times A_{s_1}) \times \text{expl1}$$

$$A_{12c}^m = (L_{121}^{r+} \times A_{c_1} + L_{121}^{i+} \times A_{s_1}) \times \text{exp21}$$

$$A_{12c}^p = (L_{121}^{i+} \times A_{c_1} - L_{121}^{r+} \times A_{s_1}) \times \text{exp21}$$

$$B_{11c}^p = (L_{221}^{r+} \times A_{c_2} - L_{221}^{i+} \times A_{s_2}) \times \text{expl2}$$

$$B_{11c}^m = (L_{221}^{i+} \times A_{c_2} - L_{221}^{r+} \times A_{s_2}) \times \text{expl2}$$

$$B_{12c}^m = (L_{221}^{r+} \times A_{c_2} + L_{221}^{i+} \times A_{s_2}) \times \text{exp22}$$

$$B_{12c}^p = (L_{221}^{i+} \times A_{c_2} - L_{221}^{r+} \times A_{s_2}) \times \text{exp22}$$

$$\begin{aligned}
C_{11c}^p &= (L_{321}^{r+} \times Ac_3 - L_{321}^{i+} \times As_3) \times \text{exp13} \\
C_{11c}^m &= (-L_{321}^{i+} \times Ac_3 - L_{321}^{r+} \times As_3) \times \text{exp13} \\
C_{12c}^m &= (L_{321}^{r+} \times Ac_3 + L_{321}^{i+} \times As_3) \times \text{exp23} \\
C_{12c}^p &= (L_{321}^{i+} \times Ac_3 - L_{321}^{r-} \times As_3) \times \text{exp23} \\
A_{11s}^p &= (-L_{121}^{i+} \times Ac_1 - L_{121}^{r+} \times As_1) \times \text{exp11} \\
A_{11s}^m &= (-L_{121}^{r+} \times Ac_1 + L_{121}^{i+} \times As_1) \times \text{exp11} \\
A_{12s}^m &= (L_{121}^{i+} \times Ac_1 - L_{121}^{r+} \times As_1) \times \text{exp12} \\
A_{12s}^p &= (-L_{121}^{r+} \times Ac_1 - L_{121}^{i+} \times As_1) \times \text{exp12} \\
B_{11s}^p &= (-L_{221}^{i+} \times Ac_2 - L_{221}^{r+} \times As_2) \times \text{exp12} \\
B_{11s}^m &= (-L_{221}^{r+} \times Ac_2 + L_{221}^{i+} \times As_2) \times \text{exp12} \\
B_{12s}^m &= (L_{221}^{i+} \times Ac_2 - L_{221}^{r+} \times As_2) \times \text{exp22} \\
B_{12s}^p &= (-L_{221}^{r+} \times Ac_2 - L_{221}^{i+} \times As_2) \times \text{exp22} \\
C_{11s}^p &= (-L_{321}^{i+} \times Ac_3 - L_{321}^{r+} \times As_3) \times \text{exp13} \\
C_{11s}^m &= (-L_{321}^{r+} \times Ac_3 + L_{321}^{i+} \times As_3) \times \text{exp13} \\
C_{12s}^m &= (L_{321}^{i+} \times Ac_3 - L_{321}^{r+} \times As_3) \times \text{exp23} \\
C_{12s}^p &= (-L_{321}^{r+} \times Ac_3 - L_{321}^{i+} \times As_3) \times \text{exp23}
\end{aligned}$$

|                     |                      |                      |                     |                      |                      |                     |                      |                      |                     |
|---------------------|----------------------|----------------------|---------------------|----------------------|----------------------|---------------------|----------------------|----------------------|---------------------|
| $\lambda_{11}^{r+}$ | $-\lambda_{11}^{i+}$ | $\lambda_{11}^{r+}$  | $\lambda_{11}^{i+}$ | $-\lambda_{11}^{r-}$ | $-\lambda_{11}^{i-}$ | $\lambda_{21}^{r+}$ | $-\lambda_{21}^{i+}$ | $\lambda_{21}^{r+}$  | $\lambda_{21}^{i+}$ |
| $\lambda_{12}^{r+}$ | $-\lambda_{12}^{i+}$ | $\lambda_{12}^{r+}$  | $\lambda_{12}^{i+}$ | $-\lambda_{12}^{r-}$ | $-\lambda_{12}^{i-}$ | $\lambda_{22}^{r+}$ | $-\lambda_{22}^{i+}$ | $\lambda_{22}^{r+}$  | $\lambda_{22}^{i+}$ |
| $\lambda_{13}^{r+}$ | $-\lambda_{13}^{i+}$ | $\lambda_{13}^{r+}$  | $\lambda_{13}^{i+}$ | $-\lambda_{13}^{r-}$ | $-\lambda_{13}^{i-}$ | $\lambda_{23}^{r+}$ | $-\lambda_{23}^{i+}$ | $\lambda_{23}^{r+}$  | $\lambda_{23}^{i+}$ |
| $\lambda_{11}^{i+}$ | $\lambda_{11}^{r+}$  | $-\lambda_{11}^{i+}$ | $\lambda_{11}^{r+}$ | $\lambda_{11}^{i-}$  | $-\lambda_{11}^{r-}$ | $\lambda_{21}^{i+}$ | $\lambda_{21}^{r+}$  | $-\lambda_{21}^{i+}$ | $\lambda_{21}^{r+}$ |
| $\lambda_{12}^{i+}$ | $\lambda_{12}^{r+}$  | $-\lambda_{12}^{i+}$ | $\lambda_{12}^{r+}$ | $\lambda_{12}^{i-}$  | $-\lambda_{12}^{r-}$ | $\lambda_{22}^{i+}$ | $\lambda_{22}^{r+}$  | $-\lambda_{22}^{i+}$ | $\lambda_{22}^{r+}$ |
| $\lambda_{13}^{i+}$ | $\lambda_{13}^{r+}$  | $-\lambda_{13}^{i+}$ | $\lambda_{13}^{r+}$ | $\lambda_{13}^{i-}$  | $-\lambda_{13}^{r-}$ | $\lambda_{23}^{i+}$ | $\lambda_{23}^{r+}$  | $-\lambda_{23}^{i+}$ | $\lambda_{23}^{r+}$ |
| $L_{121}^{r+}$      | $-L_{121}^{i+}$      | $L_{121}^{r+}$       | $L_{121}^{i+}$      | $-L_{121}^{r-}$      | $-L_{121}^{i-}$      | $L_{221}^{r+}$      | $-L_{221}^{i+}$      | $L_{221}^{r+}$       | $L_{221}^{i+}$      |
| $L_{122}^{r+}$      | $-L_{122}^{i+}$      | $L_{122}^{r+}$       | $L_{122}^{i+}$      | $-L_{122}^{r-}$      | $-L_{122}^{i-}$      | $L_{222}^{r+}$      | $-L_{222}^{i+}$      | $L_{222}^{r+}$       | $L_{222}^{i+}$      |
| $L_{123}^{r+}$      | $-L_{123}^{i+}$      | $L_{123}^{r+}$       | $L_{123}^{i+}$      | $-L_{123}^{r-}$      | $-L_{123}^{i-}$      | $L_{223}^{r+}$      | $-L_{223}^{i+}$      | $L_{223}^{r+}$       | $L_{223}^{i+}$      |
| $L_{121}^{i+}$      | $L_{121}^{r+}$       | $-L_{121}^{i+}$      | $L_{121}^{r+}$      | $-L_{123}^{i+}$      | $-L_{121}^{r-}$      | $L_{221}^{i+}$      | $L_{221}^{r+}$       | $-L_{221}^{i+}$      | $L_{221}^{r+}$      |
| $L_{122}^{i+}$      | $L_{122}^{r+}$       | $-L_{122}^{i+}$      | $L_{122}^{r+}$      | $L_{122}^{i-}$       | $-L_{122}^{r-}$      | $L_{222}^{i+}$      | $L_{222}^{r+}$       | $-L_{222}^{i+}$      | $L_{222}^{r+}$      |
| $L_{123}^{i+}$      | $L_{123}^{r+}$       | $-L_{123}^{i+}$      | $L_{123}^{r+}$      | $L_{123}^{i-}$       | $-L_{123}^{r-}$      | $L_{223}^{i+}$      | $L_{223}^{r+}$       | $-L_{223}^{i+}$      | $L_{223}^{r+}$      |
| $A_{11c}^p$         | $A_{11c}^m$          | $A_{12c}^m$          | $A_{12c}^p$         | 0                    | 0                    | $B_{11c}^p$         | $B_{11c}^m$          | $B_{12c}^m$          | $B_{12c}^p$         |
| $A_{21c}^p$         | $A_{21c}^m$          | $A_{22c}^m$          | $A_{22c}^p$         | 0                    | 0                    | $B_{21c}^p$         | $B_{21c}^m$          | $B_{22c}^m$          | $B_{22c}^p$         |
| $A_{31c}^p$         | $A_{31c}^m$          | $A_{32c}^m$          | $A_{32c}^p$         | 0                    | 0                    | $B_{31c}^p$         | $B_{31c}^m$          | $B_{32c}^m$          | $B_{32c}^p$         |
| $A_{11s}^p$         | $A_{11s}^m$          | $A_{12s}^m$          | $A_{12s}^p$         | 0                    | 0                    | $B_{11s}^p$         | $B_{11s}^m$          | $B_{12s}^m$          | $B_{12s}^p$         |
| $A_{21s}^p$         | $A_{21s}^m$          | $A_{22s}^m$          | $A_{22s}^p$         | 0                    | 0                    | $B_{21s}^p$         | $B_{21s}^m$          | $B_{22s}^m$          | $B_{22s}^p$         |
| $A_{31s}^p$         | $A_{31s}^m$          | $A_{32s}^m$          | $A_{32s}^p$         | 0                    | 0                    | $B_{31s}^p$         | $B_{31s}^m$          | $B_{32s}^m$          | $B_{32s}^p$         |

$$\begin{array}{cccccccc|c|c}
 -\lambda_{21}^{r-} & -\lambda_{21}^{i-} & \lambda_{31}^{r+} & -\lambda_{31}^{i+} & \lambda_{31}^{r+} & \lambda_{31}^{i+} & -\lambda_{31}^{r-} & -\lambda_{31}^{i-} & P_1^{r+} & \frac{H_1}{2} \\
 -\lambda_{22}^{r-} & -\lambda_{22}^{i-} & \lambda_{32}^{r+} & -\lambda_{32}^{i+} & \lambda_{32}^{r+} & \lambda_{32}^{i+} & -\lambda_{32}^{r-} & -\lambda_{32}^{i-} & P_1^{i+} & \frac{H_2}{2} \\
 -\lambda_{23}^{r-} & -\lambda_{23}^{i-} & \lambda_{33}^{r+} & -\lambda_{33}^{i+} & \lambda_{33}^{r+} & \lambda_{33}^{i+} & -\lambda_{33}^{r-} & -\lambda_{33}^{i-} & Q_1^{r+} & \frac{H_3}{2} \\
 \lambda_{21}^{i-} & -\lambda_{21}^{r-} & \lambda_{31}^{i+} & \lambda_{31}^{r+} & -\lambda_{31}^{i+} & \lambda_{31}^{r+} & \lambda_{31}^{i-} & -\lambda_{31}^{r-} & Q_1^{i+} & \frac{T_1}{2} \\
 \lambda_{22}^{i-} & -\lambda_{22}^{r-} & \lambda_{32}^{i+} & \lambda_{32}^{r+} & -\lambda_{32}^{i+} & \lambda_{32}^{r+} & \lambda_{32}^{i-} & -\lambda_{32}^{r-} & Q_1^{r-} & \frac{T_2}{2} \\
 \lambda_{23}^{i-} & -\lambda_{23}^{r-} & \lambda_{33}^{i+} & \lambda_{33}^{r+} & -\lambda_{33}^{i+} & \lambda_{33}^{r+} & \lambda_{33}^{i-} & -\lambda_{33}^{r-} & Q_1^{i-} & \frac{T_3}{2} \\
 -L_{221}^{r-} & -L_{221}^{i-} & L_{321}^{r+} & -L_{321}^{i+} & L_{321}^{r+} & L_{321}^{i+} & -L_{321}^{r-} & -L_{321}^{i-} & P_2^{r+} & 0 \\
 -L_{222}^{r-} & -L_{222}^{i-} & L_{322}^{r+} & -L_{322}^{i+} & L_{322}^{r+} & L_{322}^{i+} & -L_{322}^{r-} & -L_{322}^{i-} & P_2^{i+} & 0 \\
 -L_{223}^{r-} & -L_{223}^{i-} & L_{323}^{r+} & -L_{323}^{i+} & L_{323}^{r+} & L_{323}^{i+} & -L_{323}^{r-} & -L_{323}^{i-} & Q_2^{r+} & = 0 \\
 L_{221}^{i-} & -L_{221}^{r-} & L_{321}^{i+} & L_{321}^{r+} & -L_{321}^{i+} & L_{321}^{r+} & L_{321}^{i-} & -L_{321}^{r-} & Q_2^{i+} & 0 \\
 L_{222}^{i-} & -L_{222}^{r-} & L_{322}^{i+} & L_{322}^{r+} & -L_{322}^{i+} & L_{322}^{r+} & L_{322}^{i-} & -L_{322}^{r-} & Q_2^{r-} & 0 \\
 L_{223}^{i-} & -L_{223}^{r-} & L_{323}^{i+} & L_{323}^{r+} & -L_{323}^{i+} & L_{323}^{r+} & L_{323}^{i-} & -L_{323}^{r-} & Q_2^{i-} & 0 \\
 0 & 0 & C_{11c}^p & C_{11c}^m & C_{12c}^m & C_{12c}^p & 0 & 0 & P_3^{r+} & 0 \\
 0 & 0 & C_{21c}^p & C_{21c}^m & C_{22c}^m & C_{22c}^p & 0 & 0 & P_3^{i+} & 0 \\
 0 & 0 & C_{31c}^p & C_{31c}^m & C_{32c}^m & C_{32c}^p & 0 & 0 & Q_3^{r+} & 0 \\
 0 & 0 & C_{11s}^p & C_{11s}^m & C_{12s}^m & C_{12s}^p & 0 & 0 & Q_3^{i+} & 0 \\
 0 & 0 & C_{21s}^p & C_{21s}^m & C_{22s}^m & C_{22s}^p & 0 & 0 & Q_3^{r-} & 0 \\
 0 & 0 & C_{31s}^p & C_{31s}^m & C_{32s}^m & C_{32s}^p & 0 & 0 & Q_3^{i-} & 0
 \end{array}$$

### III. 5 Conclusion

Dans ce chapitre et après détermination de toutes les expressions analytiques des coefficients de Fourier, nous appliquons la théorie de l'élasticité anisotrope avec une formulation en séries de Fourier double. La mise en équation du problème conduit à une équation polynomiale d'ordre six. Les conditions aux limites de raccordement des deux milieux à l'interface génèrent, respectivement, 12 équations linéaires à 12 inconnues complexes pour le bilame mince et un système de 9 équations linéaires à 9 inconnues complexes pour le système couche sur substrat. La résolution de ces systèmes d'équations ne peut se faire que numériquement. Nous avons, alors, développé ces derniers en systèmes d'équations à inconnues réelles afin de faciliter leur inversion. Les coefficients géométriques intervenant dans ces systèmes sont explicités, en chapitre 2, en fonction de la géométrie du réseau et des vecteurs de Burgers. Ainsi sur le plan théorique, le problème est réduit à l'inversion numérique des systèmes d'équations établis. Les solutions permettent de calculer les champs de déplacement et le tenseur des contraintes qui est déduit ensuite par dérivation et application de la loi de Hooke.

# APPLICATIONS AUX INTERFACES COMPACTES

## IV. 1 Introduction

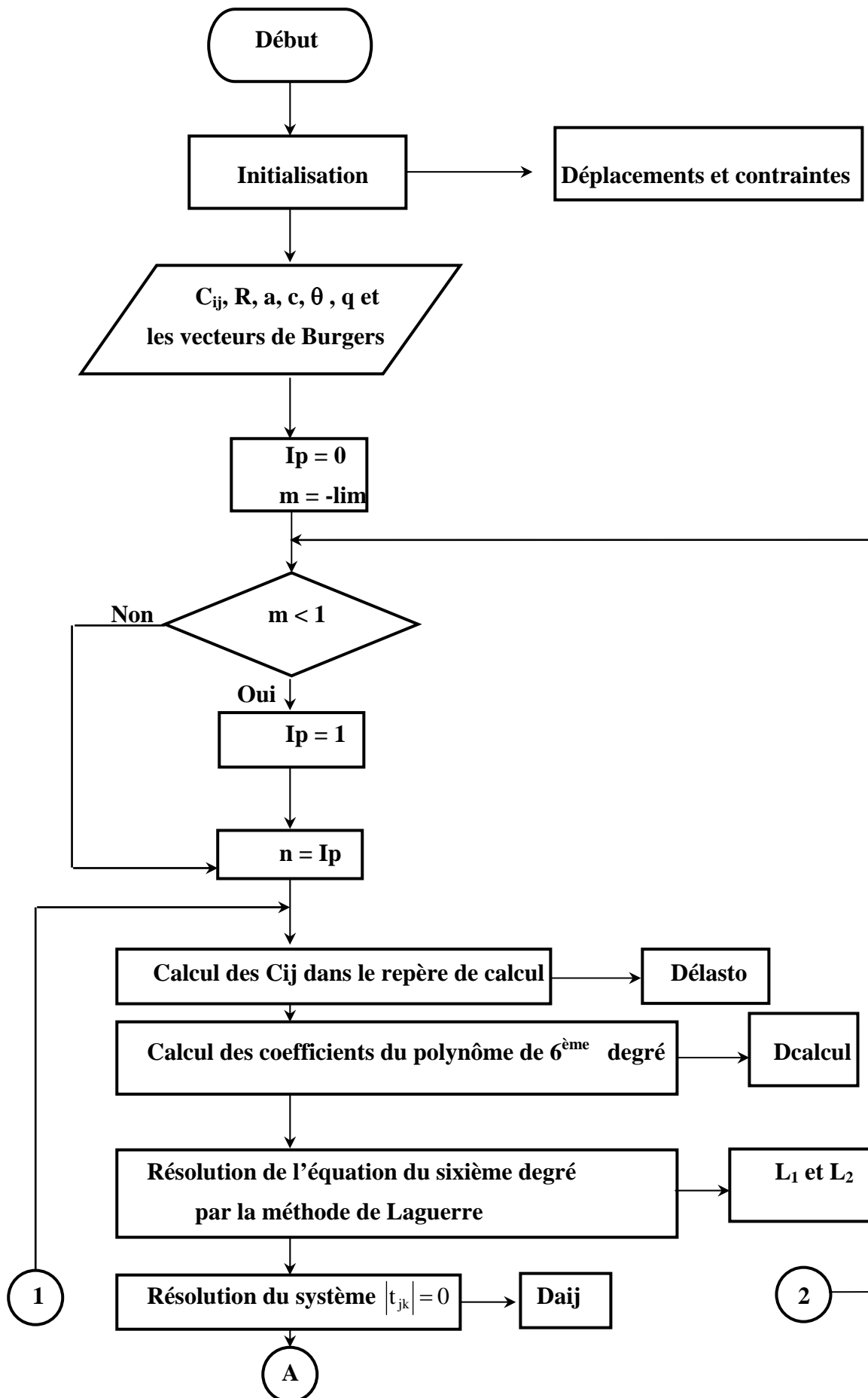
Le système hétéro-épitaxial InAs/(111)GaAs permet d'obtenir des couches ultra-minces régulières de InAs de quelques nanomètres sur le substrat GaAs(111), en épitaxie cube/cube. On suppose que la couche d'InAs débute sa relaxation par formation de dislocations de misfit à une épaisseur comprise entre 1 et 2  $M_c$ . A une épaisseur plus élevée, de petits triangles bordés par trois lignes de dislocations apparaissent [107]. La même observation est reportée pour le système CoSi<sub>2</sub>/Si [93] et le système Si/Ge [118]. En outre, la reconstruction de surfaces cristallines peut correspondre à une structure complexe avec différents types d'empilements atomiques. La déformation de la surface est supposée provenir d'un réseau bipériodique d'une surface sous-jacente de dislocations de misfit partiellement dissociées en dislocations de Shockley limitant alternativement des fautes d'empilement intrinsèques et extrinsèques. Prenons l'exemple du mono cristal Ni<sub>75</sub>Pt<sub>25</sub> recuit observé par STM par Schmid et col [119] et le sous joint Si/Si observé par Föll et col [21]. Les constantes élastiques anisotropes des deux milieux considérés sont prises dans le référentiel classique de Nye. Près de l'isotropie ou en quasi isotropie, nous tenons compte évidemment du fait que le milieu est défini comme élastiquement isotrope si les propriétés élastiques sont complètement indépendantes de la direction.

Dans le cas de la symétrie cristalline cubique ceci se réalise quand :  $C_{44} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) = \mu$

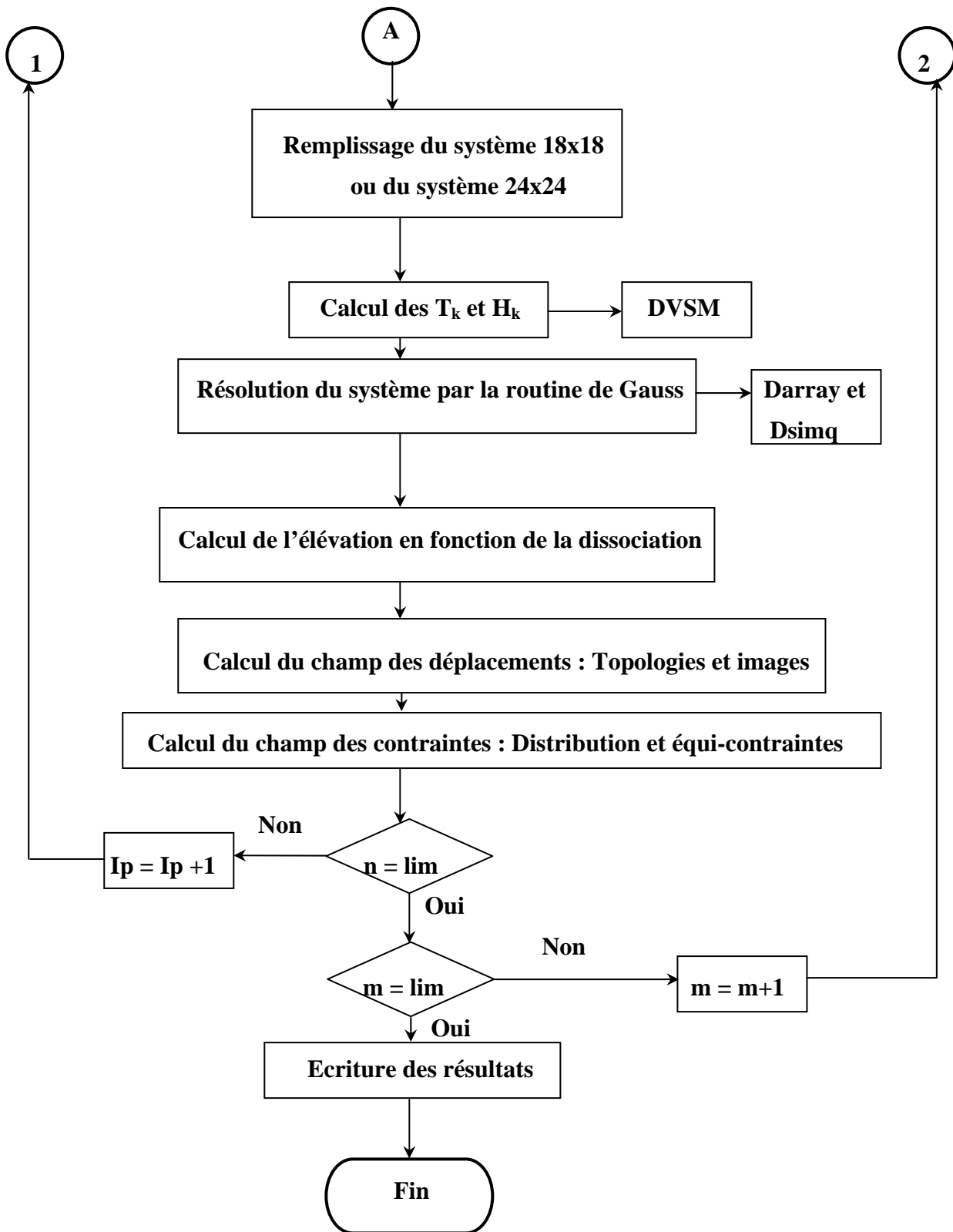
La déviation de la limite d'isotropie peut être quantifiée, dans les réseaux cubiques par le

facteur d'anisotropie de Zener : 
$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}$$

Avant de passer à l'application aux cas concrets cités ci-dessus, nous présentons l'organigramme des programmes en Fortran que nous avons construit.







## IV. 2 Bicristal ultramine

L'objet de cette application est de représenter exactement les champs élastiques pour un bilame mince hétérogène d'épaisseur totale choisie en se basant sur les études expérimentales réalisées en METHR ou en STM. L'hétéro-structure semi-conductrice InAs/(111) GaAs observée est prise comme exemple.

Le cristal situé du côté  $x_2 > 0$  a un paramètre de maille  $a_{\text{InAs}} = 0,6058$  nm et celui situé du côté  $x_2 < 0$  a un paramètre  $a_{\text{GaAs}} = 0,5653$  nm.

Le désaccord paramétrique est bidimensionnel, il est défini par :  $\varepsilon = \frac{2(a^+ - a^-)}{(a^+ + a^-)} = 6,9\%$ .

La période du réseau est calculée par la relation suivante :  $a = \frac{a_{\text{InAs}} a_{\text{GaAs}}}{\sqrt{2(a_{\text{InAs}} - a_{\text{GaAs}})}} = 5,98$  nm.

Les constantes élastiques anisotropes relatives à chaque cristal sont prises dans le référentiel classique de Nye. Dans ce référentiel, les données, en Gpa, sont :

Pour l'arséniure d'indium :  $C_{11} = 86,5$      $C_{12} = 48,5$     et     $C_{44} = 39,6$ .

Pour l'arséniure de gallium :  $C_{11} = 119$      $C_{12} = 53,8$     et     $C_{44} = 59,5$ .

l'épaisseur totale du bilame est prise égale à  $n$  mono couches ( $M_{cs}$ ), telle que :

$h_t = h^+ + h^- = n \times M_{cs} = n \frac{a_{\text{InAs}}}{\sqrt{3}}$ . Le module du vecteur de Burgers d'un réseau de

dislocations non dissocié est égale à la longueur moyenne de deux vecteurs  $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$  des

deux réseaux, soit  $b = \frac{(a_{\text{InAs}} + a_{\text{GaAs}})}{2^{3/2}} = 0,414$  nm

Similairement, pour les partielles de Shockley, le module est  $b_p = \frac{b}{\sqrt{3}} = 0,239$  nm.

Les composantes du vecteur de Burgers sont alors :

$b^{UV} (0,0,-b)$ ,  $b^{ZU} (-b\frac{\sqrt{3}}{2}, 0, -\frac{b}{2})$ ,  $b_1 (\frac{b_p}{2}, 0, -\frac{b_p\sqrt{3}}{2})$ ,  $b_2 (-\frac{b_p}{2}, 0, -\frac{b_p\sqrt{3}}{2})$  et  $b_3 (b_p, 0, 0)$ .

Le nombre d'harmonique donnant une bonne convergence des séries de Fourier est égal à 30.

### IV. 2. 1 Courbe d'élévation

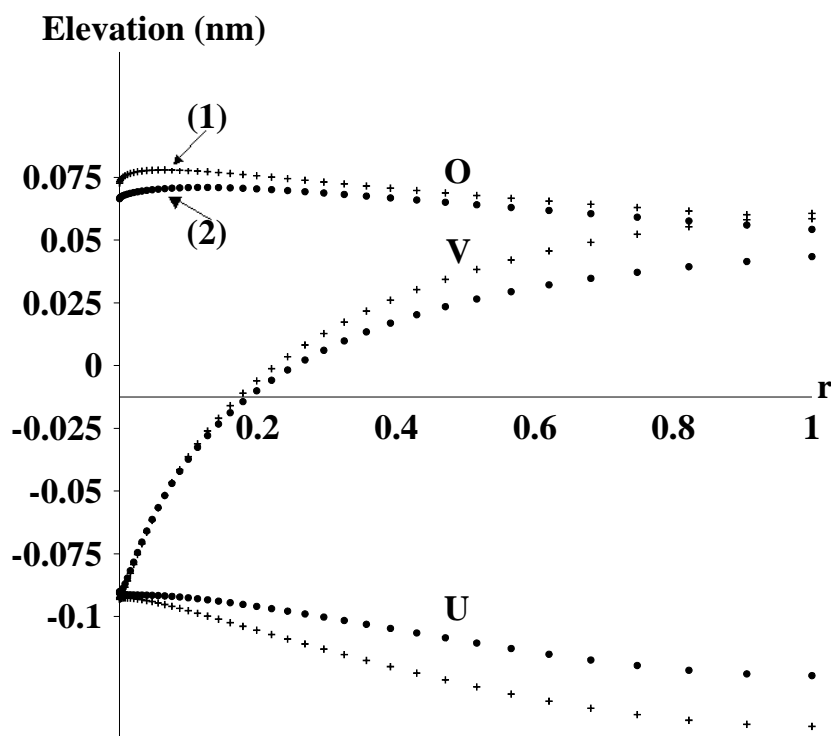
La courbe d'élévation en fonction de  $r$  est tracée en anisotropie et en quasi-isotropie en considérant un bilame d'épaisseur totale égale à  $h_t = 9 M_{cs}$ , tels que  $h^+ = 3 M_{cs}$  et  $h^- = 6 M_{cs}$ . Le coefficient  $r$  caractérise l'étendue de la dissociation, c'est le rapport (surface de faute/surface non fautée) et il varie avec le coefficient de dissociation  $q$  suivant la relation :

$$r = \frac{(2-3q)^2}{(2-(2-3q)^2)}.$$

Lorsque  $r$  varie de 0 à 1, le changement d'altitude des points de surface situés à l'aplomb du centre O de la cellule hexagonale, varie, en anisotropie, de 0,0665 nm jusqu'à 0,0542 nm en passant par un maximum de 0,071 nm pour  $r = 0,12$ . En quasi isotropie, les valeurs respectives de l'élévation varient entre 0,073 nm et 0,058 nm.

Au dessus du nœud non dissocié U, la variation est limitée (en nm) entre  $-0,090$  et  $-0,123$  en anisotropie, et entre  $-0,093$  et  $-0,143$ , en quasi-isotropie.

Pour le cas non dissocié, les niveaux d'élévation aux points O d'une part et U et V de l'autre sont nettement décalés, ce qui reflète deux états de surface bien différents : juste autour des nœuds triples U et V et même le long des segments de la cellule UVWRSZ. La couche est latéralement en traction bidimensionnelle du fait de l'écart paramétrique positif, ce qui se traduit par une compression de la couche comprise à l'intérieur de cette cellule d'où son élévation comme à l'aplomb du demi plan supplémentaire d'une dislocation. La dissociation du nœud V donne naissance à une zone fautée limitée par un triangle de dislocations MDs Shockley orientées selon  $\langle 110 \rangle$ .



**Figure 4. 2. 1** : Variation de l'élévation dans la surface libre à l'aplomb des points O, U et V de la cellule hexagonale : (1) en quasi-isotropie  
(2) en anisotropie

La différence la plus remarquable concerne le nœud V dissocié en donnant une FEI, lorsque le coefficient  $r$  tend vers 1, la superposition pour un maximum de dissociation soit  $q = 1/3$  obtenue en isotropie ainsi qu'en quasi-isotropie n'a pas été relevée en anisotropie. Le programme en quasi isotropie donne des résultats très comparables à ceux obtenus par Bonnet en isotropie [12] ce qui est satisfaisant pour valider le programme. Les calculs effectués en anisotropie montrent clairement une différence notable entre l'isotropie et l'anisotropie qui n'a pas été relevée auparavant.

#### IV. 2. 2 Topologie des surfaces libres

Dans le but de voir l'effet de la dissociation en anisotropie sur les déplacements, nous avons tracé la topologie des surfaces libres pour des bilames d'épaisseurs respectives égales à :  $-2 M_{cs} /+ 2M_{cs}$ ,  $- 4 M_{cs} /+ 4 M_{cs}$ ,  $- 6 M_{cs} /+ 6 M_{cs}$ ,  $- 8 M_{cs} /+8 M_{cs}$  et  $- 10 M_{cs} /+ 10 M_{cs}$ . Les résultats montrent des différences remarquables pour les déplacements. De ce fait, nous avons jugé plus intéressant de comparer les résultats obtenus en anisotropie avec ceux obtenus également en anisotropie par Outtas et Col [14] dans le cas du réseau en nid d'abeilles de dislocations de misfit.

La figure (4.2.2(a)) montre les déformations des surfaces libres pour un réseau non encore dissocié c'est à dire pour  $q = 2/3$  et les résultats sont en parfait accords avec ceux obtenus par Outtas et col, quoique l'épaisseur du bilame n'est pas la même. En effet, dans le soucis d'une représentation plus réaliste, les épaisseurs choisies pour représenter la figure (4.2.2) sont en fonction du nombre de  $M_{cs}$ . Dans les plans  $(x_2, x_1)$  et  $(x_2, x_3)$  parallèles à l'interface, les déformations sont importantes même pour une épaisseur totale du bilame égale à  $20 M_{cs}$ . Lorsque le réseau de dislocations est dissocié c'est à dire pour un coefficient  $q = 1/3$ , Figures (4.2.3 (a) et (b)), l'effet de la dissociation sur les surfaces libres est distingué et la périodicité de la déformation relative à la symétrie tri-dimensionnelle est claire. Nous recherchions également l'épaisseur totale du bilame pour laquelle l'équilibre atomique est atteint. Les calculs montrent que les surfaces libres du bilame se stabilisent à une épaisseur totale de  $34 M_{cs}$ , épaisseur très voisine de celle choisie par T.Outtas [41] dans le cas du réseau hexagonal régulier de misfit. Notons que les zones situées à l'aplomb du centre O de la cellule sont d'autant plus déformées qu'au dessus des segments de la cellule UVWRSZ. Les tensions autour de ces zones provoquent des compressions proportionnelles des zones intermédiaires qui s'estompent avec l'épaisseur.

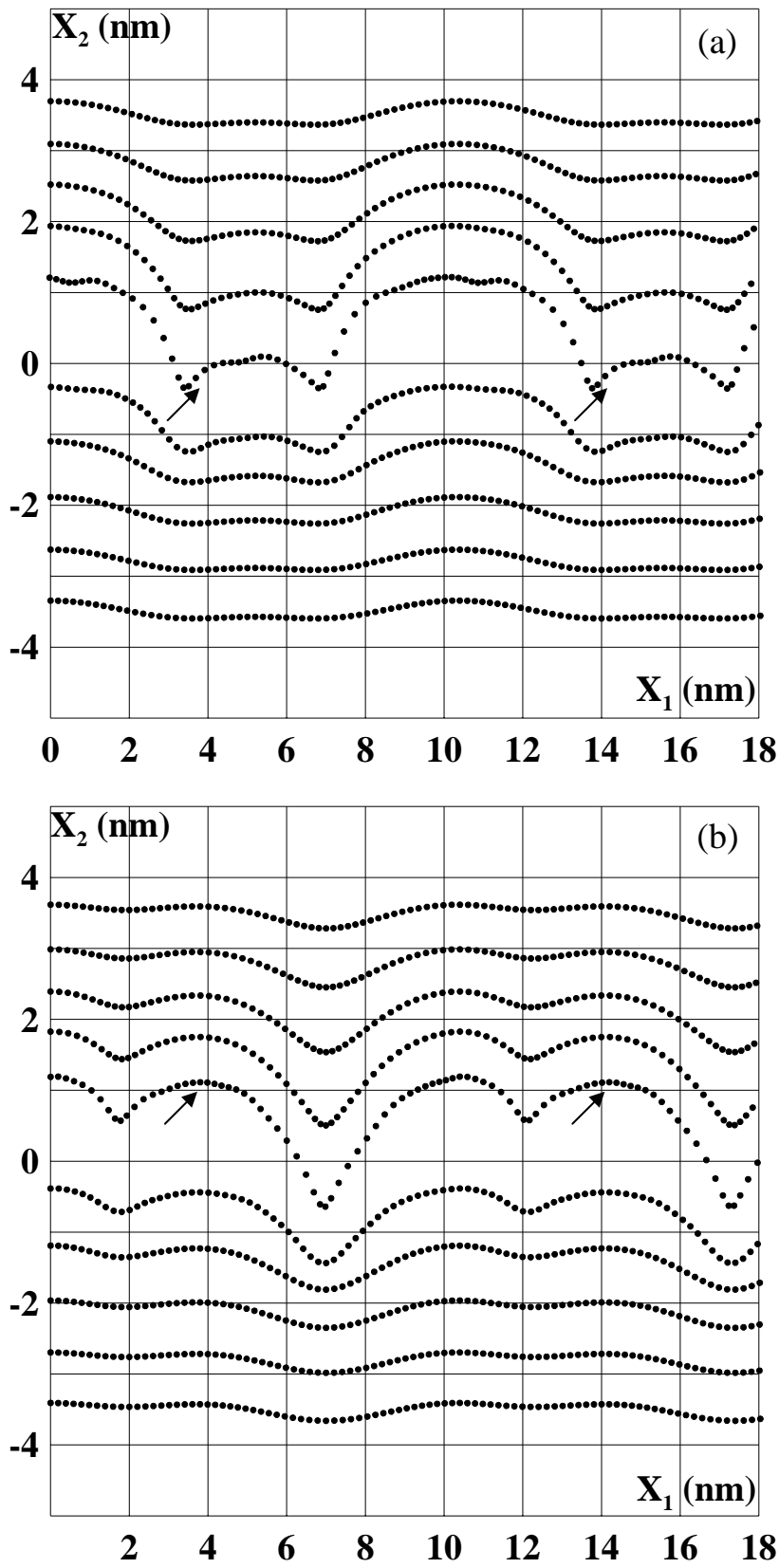


Figure 4. 2. 2 : Topologies des surfaces libres dans le plan  $(x_2, x_1)$   
 (a) Le réseau hexagonal non dissocié  
 (b) Le réseau hexagonal dissocié

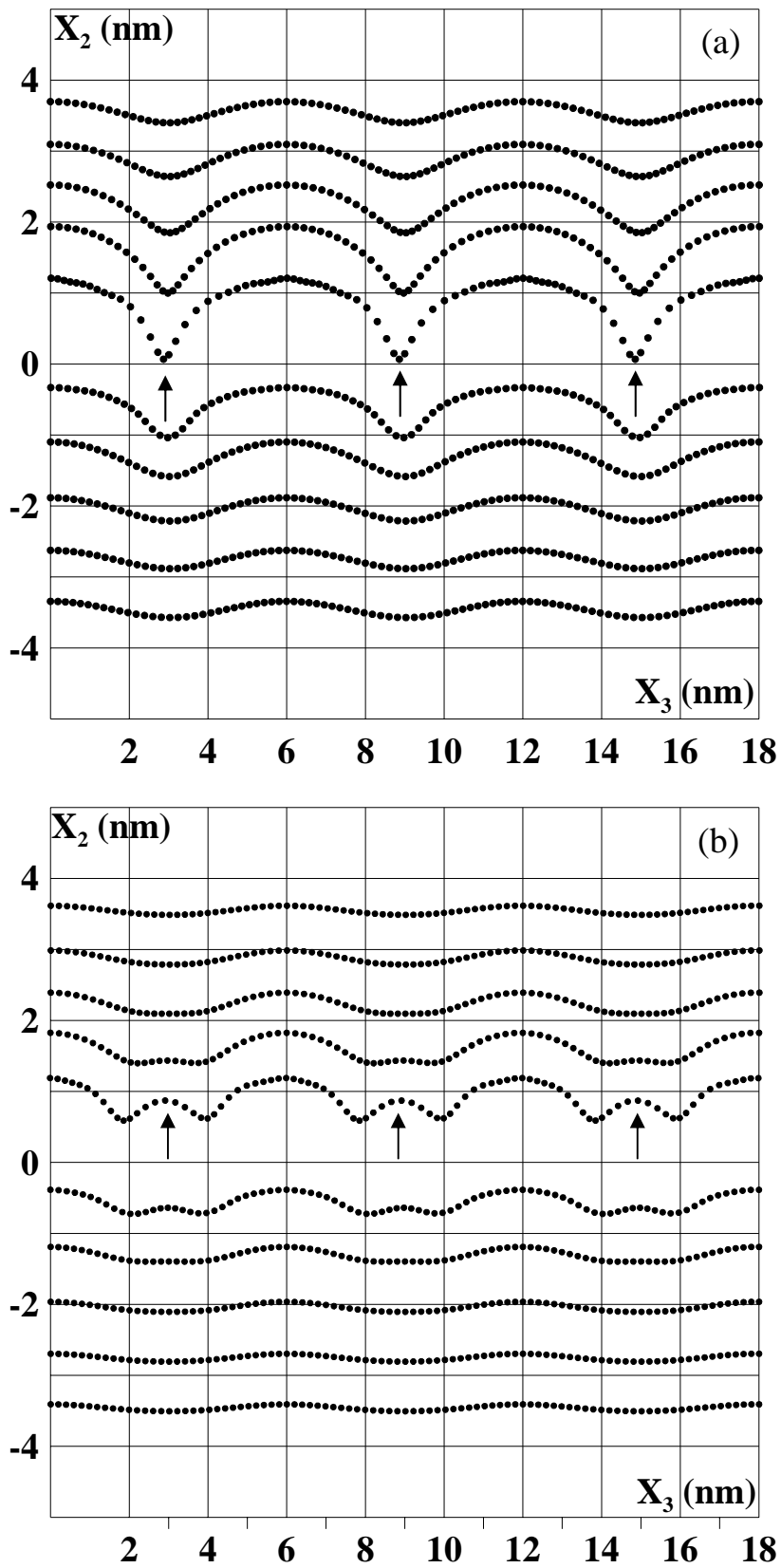


Figure 4. 2. 3 : Topologies des surfaces libres dans le plan  $(x_2, x_3)$

(a) Le réseau hexagonal non dissocié

(b) Le réseau hexagonal dissocié

Dans le plan  $(x_2, x_3)$ , la déformation élastique est représentée pour trois périodes en partant du centre O de la cellule hexagonale, le cœur de la dislocation noté UV est retrouvé trois fois pour  $x_3 = 2,99$  nm,  $x_3 = 8,99$  nm et  $x_3 = 14,99$  nm.

Dans le plan  $(x_2, x_1)$  la déformation est périodique et elle s'étale sur deux nœuds triples notés Z à partir du centre O et dont la position est indiquée sur les courbes par des flèches. Il est évident que la couche ne se déforme pas de façon équivalente de part et d'autre du nœud Z, vu les coordonnées de ce point.

Nous remarquons, dans le plan  $(x_2, x_1)$  et pour une épaisseur  $h^+ = 2 Mc_s$ , une perturbation qui est due essentiellement au nombre d'harmonique M utilisé. Pour une plus haute précision M peut être pris supérieur à 30 ; la limite utilisée dans la représentation des figures (4.2.2) et (4.2.3). Il faut noter, cependant, que le temps de calcul est prohibitif et que cette épaisseur n'est pas très significative dans les applications pratiques.

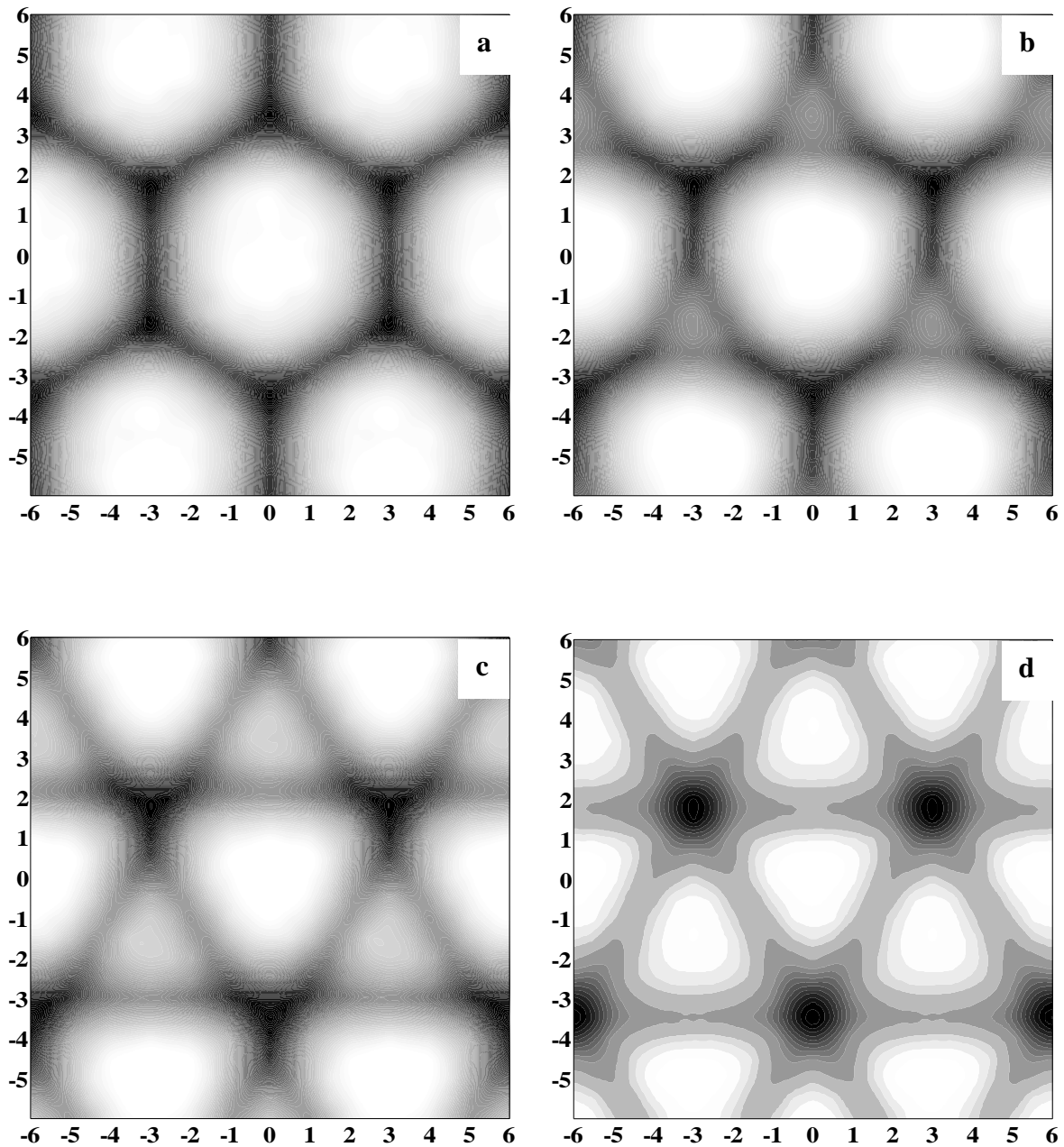
### IV. 2. 3 Images STM numériques

Afin de bien illustrer le changement du relief de la surface libre quand le paramètre de dissociation q prend les valeurs successives  $q = 2/3$  (pas de dissociation),  $q = 1/2$ ,  $q = 5/12$  (dissociation limitée) et  $q = 1/3$  (maximum de dissociation), nous avons tracé les images numériques d'une cellule centrée en O similaires à celles observées par microscopie à effet tunnel (STM). Une grille rectangulaire de 60 x 60 points est considérée pour une évaluation de  $\mathbf{u}_2(x_1, h^+, x_3)$  avec  $h^+ = 4 Mc_s$ . Pour le contraste, nous avons choisi la couleur noire pour un minimum égal à 0 et la couleur blanche pour un maximum égal à 1.

La grille rectangulaire est limitée par 4 plans de symétrie du champ  $\mathbf{u}$ , tous parallèles à l'axe  $Ox_2$ . Deux de ces plans sont également parallèles à  $Ox_1$  et passent par les extrémités des vecteurs  $-\mathbf{c}$  et  $\mathbf{c}$ , tandis que les deux autres plans sont parallèles à  $Ox_3$  et passent par les extrémités des vecteurs  $-\mathbf{a}$  et  $\mathbf{a}$ .

La figure (4.2.4) montre en détails la transformation du réseau initialement hexagonal en un réseau triangulaire quand la dissociation augmente de (a) à (d). La couche d'InAs est en compression bidimensionnelle et ceci s'explique par le fait qu'au dessus du centre O, l'élévation est maximale et elle diminue progressivement autour de O en formant une bosse. Théoriquement, le misfit est positif car le paramètre de maille de l'InAs est supérieur à celui du GaAs ce qui nécessite une compression de la couche d'InAs sur du GaAs. L'hétéro interface expose de petits triangles de fautes d'empilement aux nœuds alternés du réseau hexagonal de base. Au dessus des triangles de fautes, la surface libre est soumise à un changement d'élévation important. La topographie des images obtenues est comparable à celle disponible dans la littérature en isotropie [12] et à celle fournie par les observations expérimentales par (STM) [13]. Sur les images observées par J. G. Belk et col et après dépôt d'une couche d'InAs d'épaisseur égale à  $5 Mc_s$  on voit clairement la position des MDs avec apparition de petits triangles formés par trois lignes de dislocations.

Ceci suggère que la relaxation de la couche commence par formations de MDs à une épaisseur comprise entre 1 et 2 Mcs.



**Figure 4. 2. 4 :** topographies numériques calculées pour des valeurs du coefficient de dissociation  $q$  égales respectivement à  $2/3$ ,  $1/2$ ,  $5/12$  et  $1/3$ .



#### IV. 2. 4 Distribution des contraintes

La différence mettant en évidence un effet d'anisotropie important sur les contraintes  $\sigma_{11}$  le long de  $Ox_2$  en absence de dissociation est prouvée [120]. Les calculs montrent que, pour chaque abscisse  $x_2$ , les contraintes calculées en isotropie sont au moins deux fois plus importantes qu'en anisotropie.

En outre, nous voulions suivre exactement le comportement des contraintes  $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{22}$  en fonction de l'épaisseur du bicristal. En effet, les figures (4.2.5), (4.2.6) a et b illustrent l'effet de l'épaisseur sur les variations des contraintes  $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{22}$  le long de l'axe  $Ox_2$ , pour quatre bicristaux et un système couche sur substrat. Les bicristaux minces ont des épaisseurs respectives :  $h = 8$  Mcs, 12 Mcs, 16 Mcs et 20 Mcs; le système couche sur substrat est constitué d'une couche d'InAs d'épaisseur égale à 10 Mcs sur un substrat semi-infini de GaAs (courbe fléchée). Nous remarquons que la compression des couches est d'autant plus forte que les épaisseurs sont faibles et ceci est valable pour les deux types de réseaux ( $r = 0$  et  $r = 1$ ). La contrainte  $\sigma_{11}$  change de signe à l'intérieur de chaque cristal ce qui correspond à un équilibre tension-compression. Par contre la valeur de  $\sigma_{22}$  atteint son maximum pour une épaisseur de la couche d'InAs égale à 10 Mcs. Cette dernière est parfaitement superposable à une couche de la même épaisseur déposée sur un substrat de GaAs. Le signe de la contrainte  $\sigma_{22}$  dans la couche correspond à une compression de l'InAs sur du GaAs. Enfin, nous constatons la cohérence de nos résultats avec ceux obtenus en anisotropie dans [14].

#### IV. 2. 5 Effet de la dissociation sur la distribution des contraintes

Les figure (4.2.7) et (4.2.8) permettent d'avoir une idée sur la dissociation des nœuds de type V sur la distribution des contraintes. Nous avons sélectionné quelques bicristaux d'épaisseurs totales respectives 16 Mcs et 20 Mcs, telle que  $h^+ = h^-$ . Nous observons que la contrainte  $\sigma_{11}$ , au niveau des surfaces libres, est plus grande quand le réseau n'est pas dissocié par rapport au réseau dissocié. La valeur absolue de cette contrainte peut diminuer jusqu'à 50% si on considère des bicristaux plus minces. La dissociation permet plutôt de réduire la tension des zones avoisinant les surfaces libres que la compression des zones situées juste en dessous. Par ailleurs, nous remarquons que la contrainte  $\sigma_{22}$  est caractérisée par un léger déplacement des pics vers l'interface lorsque le réseau est dissocié. L'intersection des deux courbes, pour  $r = 0$  et  $r = 1$ , se fait en se rapprochant des deux surfaces libres et elles finissent par s'annuler conformément à la condition aux limites imposée. Notons dans ce cas que pour une épaisseur de 8 Mcs, la valeur de  $\sigma_{22}$  passe de  $-0.20$ , pour le réseau non dissocié, à  $-0.50$  GPa, pour le réseau dissocié (figure 4.2.7), sachant que les valeurs de  $\sigma_{11}$ , pour les deux cas sont voisines (figure 4.2.8).

Ce comportement doit traduire une légère baisse du niveau d'élévation de la couche à

l'aplomb du point O; or l'examen de la courbe d'élévation de la figure (4.2.1) confirme bien cela.

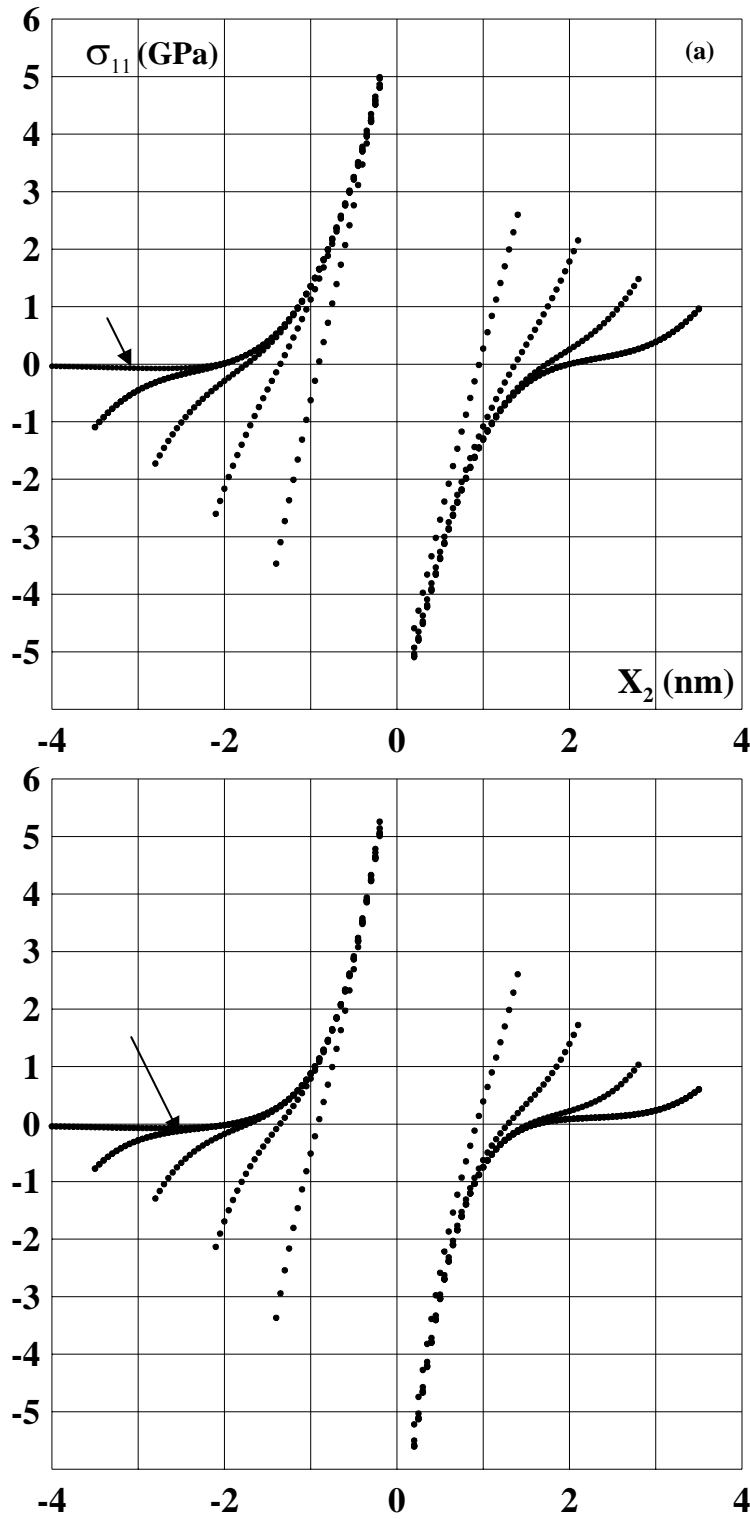


Figure 4. 2. 5 : Effet de l'épaisseur sur la distribution de la contrainte  $\sigma_{11}$

(a) Réseau non dissocié ( $r = 0$ )

(b) Réseau dissocié ( $r = 1$ )

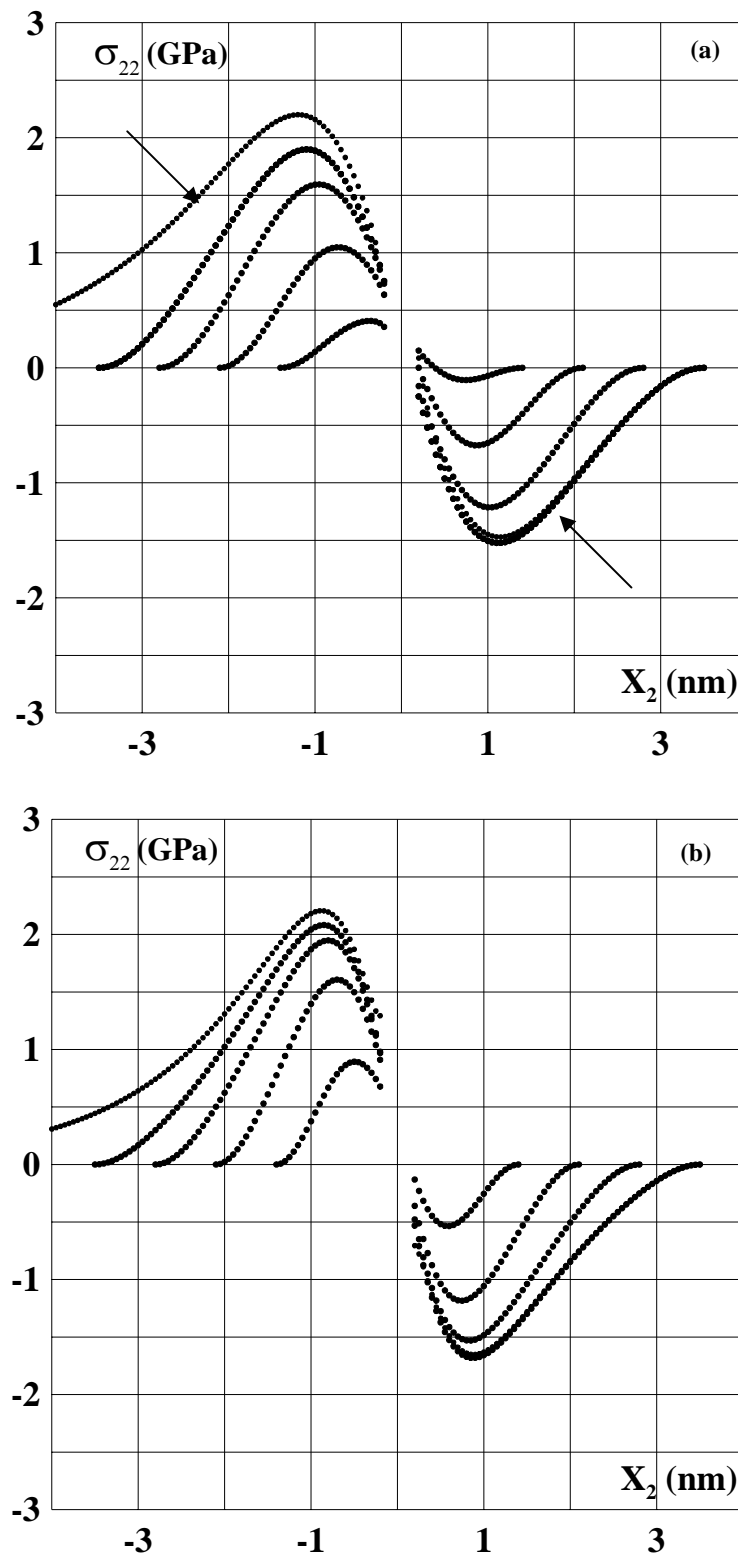


Figure 4. 2. 6 : Effet de l'épaisseur sur la distribution de la contrainte  $\sigma_{22}$

(a) Réseau non dissocié ( $r = 0$ )

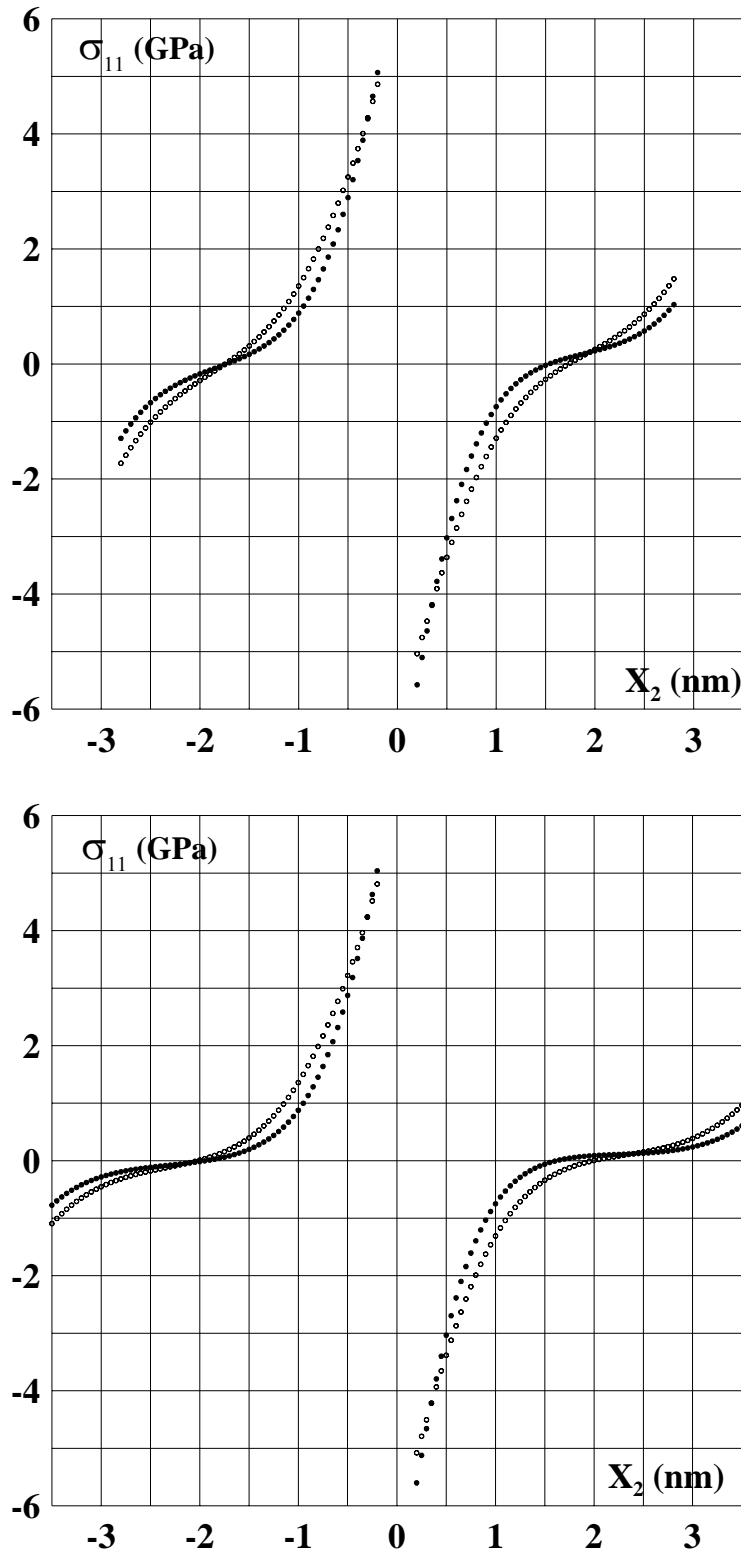


Figure 4. 2. 7 : Effet de la dissociation sur la distribution de la contrainte  $\sigma_{11}$

- Réseau dissocié ( $r = 1$ )
- Réseau non dissocié ( $r = 0$ )

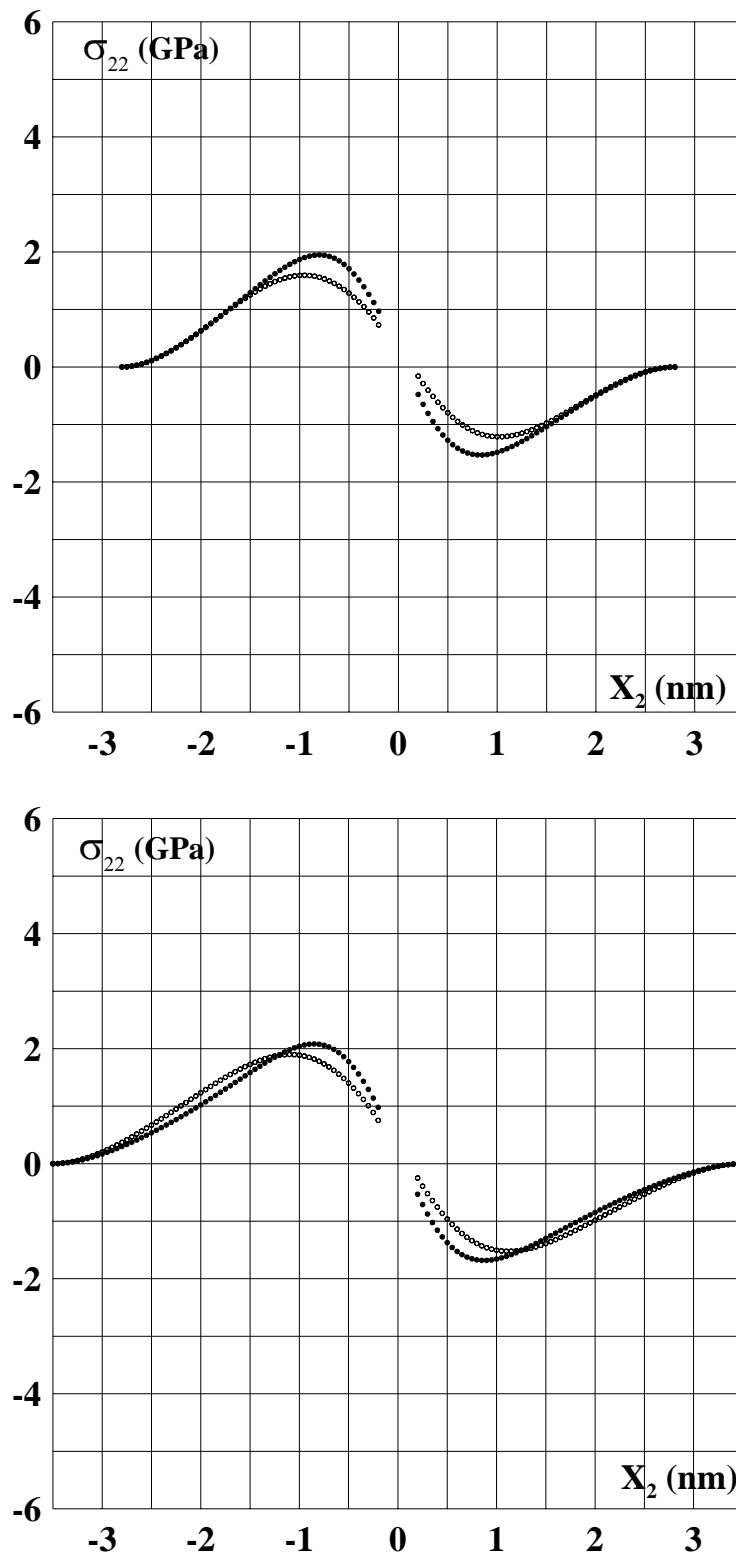


Figure 4. 2. 8 : Effet de la dissociation sur la distribution de la contrainte  $\sigma_{22}$

- Réseau dissocié ( $r = 1$ )
- Réseau non dissocié ( $r = 0$ )

### IV. 3 Conclusion

Nos investigations numériques indiquent que, pour le système InAs/GaAs(111)A observé par Yamaguchi et col (1997), et dont l'hétérointerface illustre de petits triangles de fautes d'empilement aux nœuds ouverts alternés d'un réseau hexagonal, les images numériques calculées décrivent la perturbation de la surface libre en fonction de l'étendue de la dissociation. L'élévation à l'aplomb de points typiques du réseau est calculée. Directement au dessus des triangles de fautes, la surface libre est soumise à un grand changement d'élévation. D'autre part, la distribution des contraintes pour lesquelles il n'existe pas d'expressions analytiques sont représentées avec précision.

#### IV. 4 Milieu semi infini

En général, la qualité cristalline d'une couche déposée sur un substrat monocristallin est fortement dépendante des premiers stades de germination, et en particulier de l'orientation des cristaux les uns par rapport aux autres. Ces orientations mutuelles conditionnent la densité des défauts structuraux créés aux joints de grains lors de l'étape de coalescence. Dans les conditions standards de dépôt où le substrat choisi est le silicium monocristallin, il n'existe aucune orientation préférentielle des cristaux et l'on aboutit à la formation de films intensément fautés. On se donne pour cette application un joint interphase plan séparant une couche d'épaisseur  $h$  et un substrat semi infini. Le réseau de dislocations initialement hexagonal est dissocié en tous ses nœuds triples en partielles de Shockley délimitant alternativement des fautes d'empilement intrinsèques et extrinsèques.

Nous nous sommes proposé de déterminer les champs élastiques relatifs à au système Si/(111)Si observé par H. Föll et col. La couche est légèrement désorientée en torsion par rapport au substrat d'un angle  $\beta = 5^\circ$  autour de l'axe  $Ox_2$  à l'interface.

Commençons par déterminer les vecteurs de Burgers le long des segments UV et ZU de la cellule hexagonale et qui sont relatifs à la désorientation de  $5^\circ$ .

Le déplacement relatif au point  $(x_1,0,x_3)$  est autour de O :

$$\Delta \mathbf{u}^{(O)} = \begin{bmatrix} \beta x_3 \\ 0 \\ -\beta x_1 \end{bmatrix}$$

Le déplacement relatif au point  $(x_1,0,x_3)$  est le même autour de C, tel que :

$$\Delta \mathbf{u}^{(C)} = \begin{bmatrix} \beta(x_3 - x_3^{(C)}) \\ 0 \\ -\beta(x_1 - x_1^{(C)}) \end{bmatrix}$$

Le long du segment UV des deux hexagones juxtaposés, la discontinuité du déplacement relatif définit le vecteur de Burgers du segment de dislocation.

$$\mathbf{b}^{(UV)} = \Delta \mathbf{u}^{(O)} - \Delta \mathbf{u}^{(C)} = \begin{bmatrix} \beta \times a \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.05 \times 10 = 0.5 \text{ nm} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

En répétant la même analyse du déplacement autour de A, on trouve que :

$$\mathbf{b}^{(ZU)} = \Delta \mathbf{u}^{(O)} - \Delta \mathbf{u}^{(A)} = \begin{bmatrix} \beta \times \frac{a}{2} \\ 0 \\ -\beta \times \frac{a\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.05 \times 5 = 0.25 \text{ nm} \\ 0 \\ -0.05 \times 8.660 = -0.433 \text{ nm} \end{bmatrix}$$

Le module du vecteur de Burgers d'une dislocation de misfit non dissocié est égal à la moyenne de deux vecteurs  $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$  du cristal. La partielle de Schockley correspondante, est calculée par la relation :  $b_p = \frac{a_p + a_m}{2\sqrt{6}}$ . En conséquence, les composantes de tous les vecteurs de Burgers sont données par ce qui suit :

$$\mathbf{b}_1 \left( \frac{b_p}{2}, 0, \frac{-b_p\sqrt{3}}{2} \right), \mathbf{b}_2 \left( \frac{-b_p}{2}, 0, \frac{-b_p\sqrt{3}}{2} \right), \mathbf{b}_3 (b_p, 0, 0), \mathbf{b}_5 = \mathbf{b}_1, \mathbf{b}_4 = \mathbf{b}_2 \text{ et } \mathbf{b}_6 = \mathbf{b}_3.$$

Le matériau est homogène, il est caractérisé par les constantes élastiques anisotropes suivantes :  $C_{11} = 165.7 \text{ GPa}$ ,  $C_{12} = 63.9 \text{ GPa}$  et  $C_{44} = 79.6 \text{ GPa}$ .

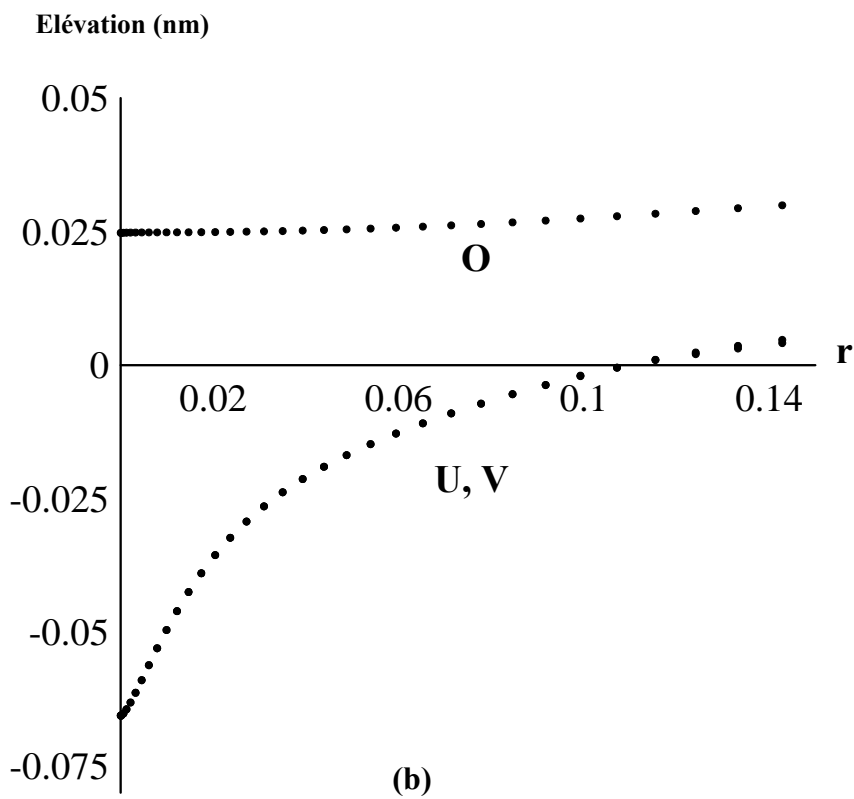
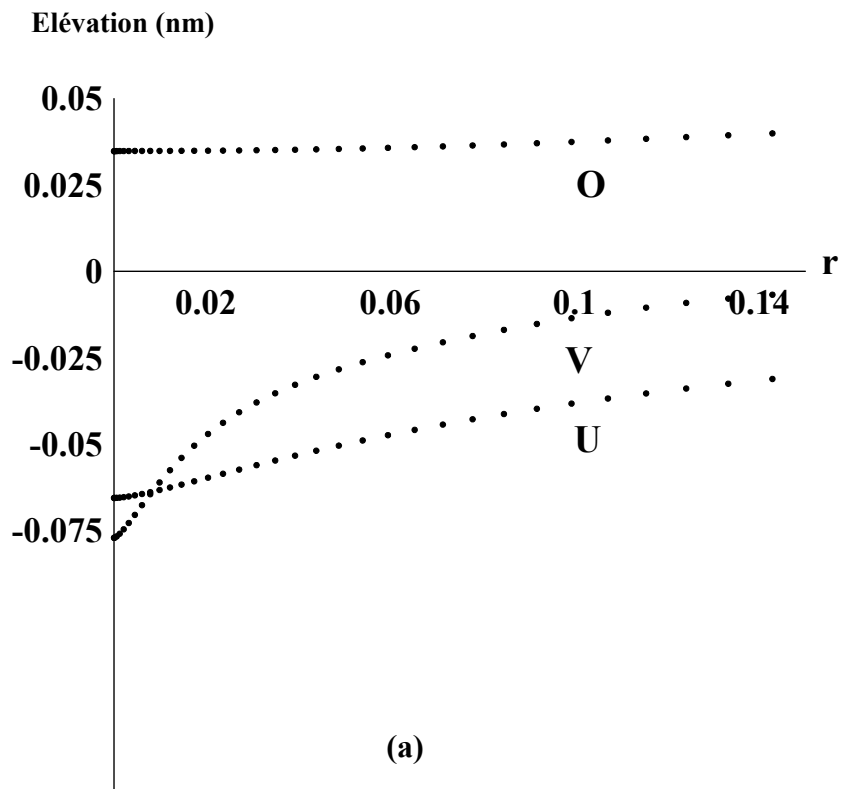
L'épaisseur de la couche  $h$  varie en fonction du nombre de mono-couches inclus dans les calculs. Par soucis de précision, nous avons pris un nombre d'harmoniques égal à 30. Une précision plus grande est possible mais le temps de calcul est important. En conséquence, nous avons jugé que le nombre d'harmoniques utilisé est satisfaisant.

#### IV. 4. 1 Courbe d'élévation

En référence au travail réalisé par Bonnet [12] qui traite le même modèle en isotropie, nous avons tracé, en quasi isotropie, la courbe d'élévation. Les courbes des figures 4.4.1 (a) et (b) sont, alors, représentées pour une épaisseur de la couche égale à  $4 \text{ Mc}_s$ . Les résultats sont similaires à ceux obtenus en isotropie. En effet, lorsque nous analysons la courbe de la figure 4.4.1 (b) et la courbe obtenue par Bonnet, dans le cas isotrope, pour le monocristal  $(111)\text{Ni}_{75}\text{Pt}_{25}$  recuit, nous constatons que l'allure de la courbe que nous traçons en quasi-isotropie est très conforme, ce qui permet de conclure une validation du programme de calcul.

Comparée à l'élévation tracée dans le cas étudié en première partie du présent travail, la variation de l'élévation au dessus du point O, pour minime qu'elle soit, est plutôt croissante contrairement à celle présentée en figure 4.2.1. En réalité, cela est directement lié à l'orientation du réseau de dislocations MDs considéré dans chaque cas. La dissociation s'accompagne d'un relâchement de contraintes qui correspond dans ce cas à une tension (compression dans le cas précédent), ce qui se traduit par une légère hausse du niveau d'élévation (baisse dans le cas précédent).





**Figure 4. 4. 1** : Variation de l'élévation de la surface libre directement au dessus des points O, U et V lorsque l'extension des FEI et des FEE augmente simultanément.  
 (a) en anisotropie, (b) en quasi-isotropie

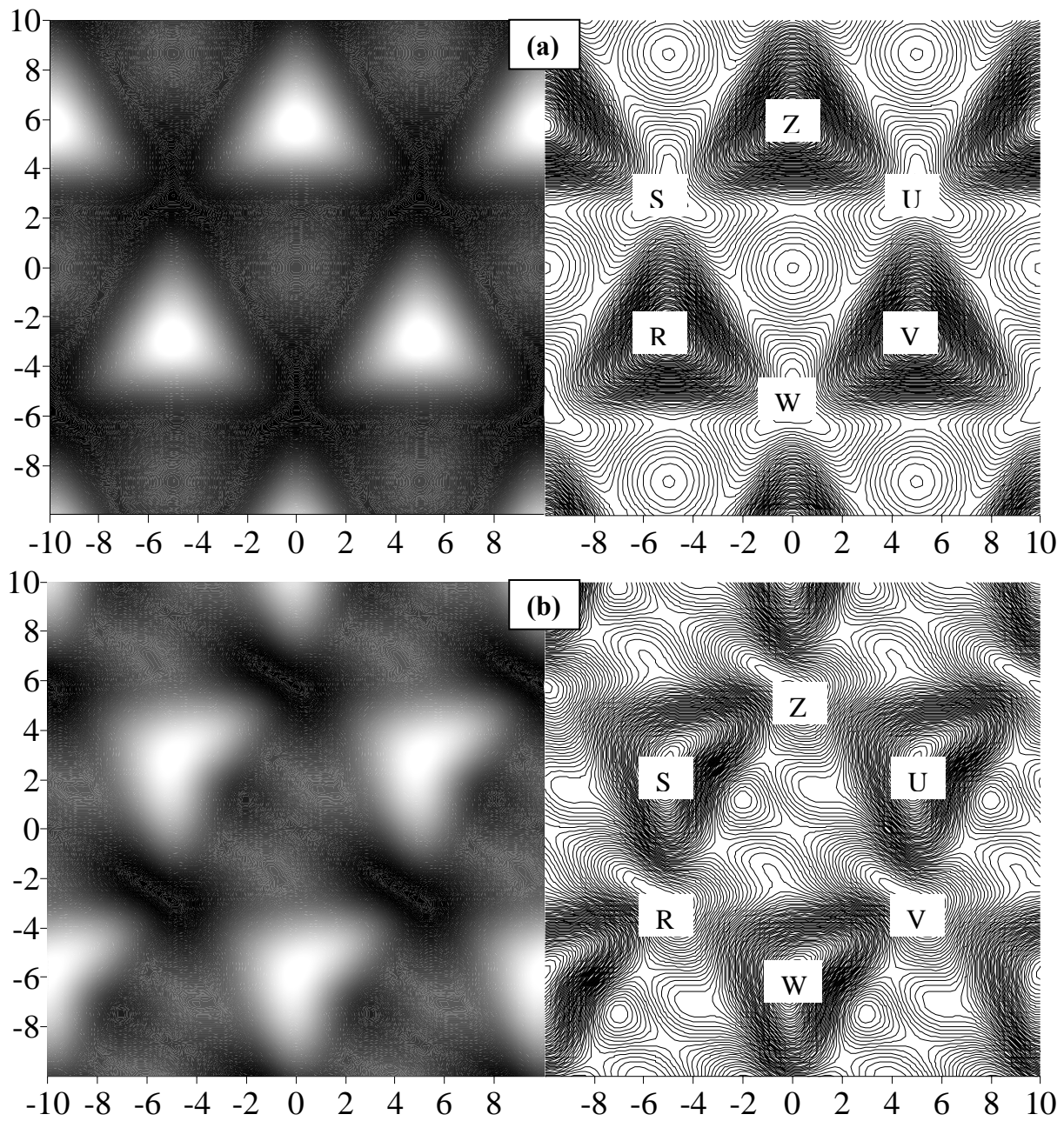
Notons, aussi, que l'élévation est moins importante en quasi-isotropie qu'en anisotropie. Ce qui est vraiment impressionnant, c'est la différence qui existe en terme d'élévation au dessus de la FEI (point V) et de la FEE (point U) et qui est de l'ordre de 0.02 nm lorsque le réseau est complètement dissocié. L'évolution de cette élévation en fonction de la dissociation des nœuds U et V rend bien compte de deux états différents de surfaces sous jacentes générés par la dissociation des MDs en partielles de Schockley limitant alternativement des fautes d'empilement intrinsèques et extrinsèques décrites par l'orientation des vecteurs  $b_1, b_2, b_3$  et  $b_4, b_5, b_6$  respectivement.

#### IV. 4. 2 Effet de la dissociation sur la surface libre

Les images représentées sur les figures 4.4.2 et 4.4.3 sont des images numériques équivalentes aux images STM. Elles décrivent l'effet de l'étendue de la dissociation sur la déformation de la surface libre. Nous relevons que quand le nœud U n'est pas dissocié ( $q=1/3$  et  $p=2/3$ ), la FEI située au niveau du point V est complètement dissocié en un triangle bien déterminé par contre quand le nœud U est dissocié, la FEE apparaît un peu vague en contraste (fig. 4.4.2 (b)) mais elle est bien définie lorsque le contour est tracé en se servant de lignes.

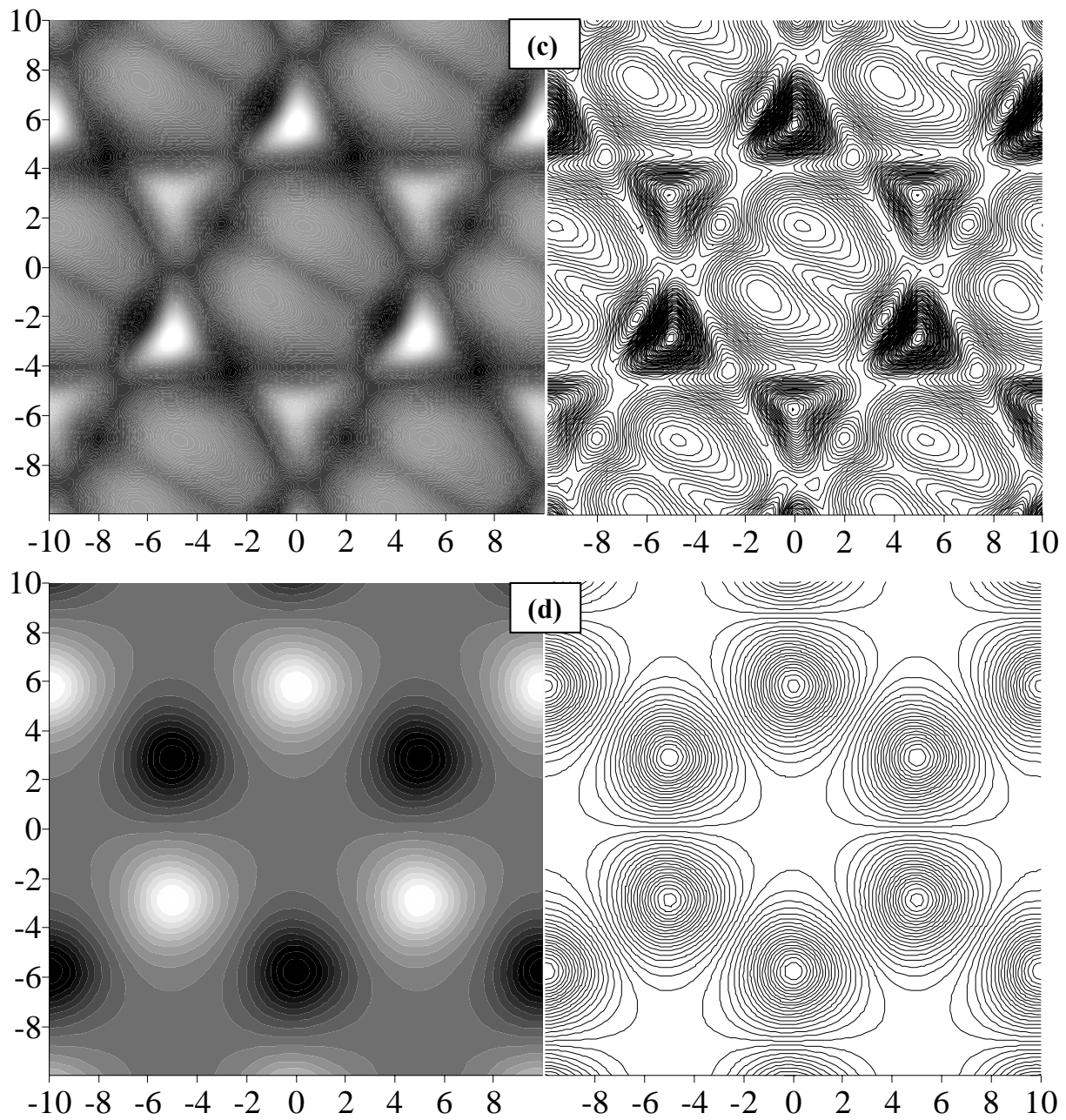
L'étoile de David obtenu par Bonnet en isotropie [19] pour  $p=q=1/2$  est retrouvée et les triangles fautés situés aux sommets de la cellule hexagonale ont presque la même dimension. Il est important de noter que les points P et Q ne se superposent pas parfaitement comme prévu (fig. 4.4.3). Ceci s'explique discrètement par le fait que l'arrangement est déterminé par une balance énergétique entre fautes d'empilement. L'expérience indique que, réellement, l'énergie d'une FEE excède celle d'une FEI [20]. Ce qui confirme que l'effet d'anisotropie est loin d'être négligeable et que l'isotropie dans ce cas ne fournit pas la précision requise pour certaines applications.

Pour la figure 4.4.3 (d), nous avons essayé d'ignorer la relation  $p=1-q$  et nous nous sommes proposé de voir quelle serait la topologie de la surface libre pour  $p=q=1/3$ . Nous relevons que la dissociation est presque totale pour tous les sommets de la cellule et que la dimension des triangles fautés peut être comparée aux cas (a) et (b) qui représentent respectivement un maximum de dissociation pour V et pour U.



**Figure 4.4.2 :** Images simulées correspondant à une évolution de la dissociation de (a) à (d), tel que le réseau hexagonal initial se transforme en réseau triangulaire.

- (a) Le nœud U n'est pas dissocié ( $q = 1/3$  et  $p=2/3$ ).
- (b) Le nœud U est dissocié ( $q = 2/3$  et  $p = 1/3$ )



**Figure 4. 4. 3 :** Images simulées correspondant à une évolution de la dissociation de (a) à (d), tel que le réseau hexagonal initial se transforme en réseau triangulaire.

- (a) Dissociation partielle ( $q = p = 1/2$ ).
- (b) Dissociation maximum ( $q = p = 1/3$ ).

#### IV. 4. 3 Effet de l'épaisseur sur la déformation de la surface libre

Il est connu que lors de l'épitaxie, les contraintes d'épitaxie relaxent généralement par l'introduction de dislocations et/ou la propagation de dislocations préexistantes.

La relaxation se fait progressivement avec l'épaisseur de la couche déposée car les dislocations interagissent de façon répulsive et il faut augmenter l'épaisseur de la couche pour alimenter la force motrice qui les fait avancer.

En ce sens, nous présentons les topologies de la surface libre dans les plans  $(x_2, x_3)$  et  $(x_2, x_1)$  pour une épaisseur de la couche allant de 4 à 20  $M_c_s$  à raison d'un pas égal à deux et pour un coefficient de dissociation  $p = q = 1/2$  figure (4.4.4). Il apparaît au dessus du point  $x_1 = x_3 = 0$  dans le plan  $(x_2, x_3)$  et pour  $h = 4 M_c_s$  une légère tension liée à la valeur du vecteur  $b_1$ . Cette tension disparaît totalement à partir de  $h = 6 M_c_s$ .

Notre objectif, à travers cette application, est d'avoir une idée sur l'épaisseur pour laquelle la couche ne présente plus de déformation. En effet, pour  $h = 20 M_c_s$ , l'ondulation existe mais elle est moins prononcée. La différence en grandeur entre le point le plus haut de la surface et le point le plus bas est de l'ordre du millième de nanomètres.

En analysant les topologies de la surface libre, nous nous sommes rendus compte que pour une épaisseur de la couche  $h = 20 M_c_s$ , la couche est encore déformée; ce qui a suscité notre curiosité pour observer de près cette déformation à partir de cette hauteur.

Les courbes de la figure (4.4.5), représentées à trois dimensions, montrent le relief de la surface libre et son changement lorsque l'épaisseur  $h$  augmente. Les couches sont prises distantes de l'interface de 20, 30 et 40  $M_c_s$ , Le calcul montre que la couche reste sous l'influence, quoique très faible, du réseau de DMs, situé à l'interface même pour une épaisseur de la couche de l'ordre de 40  $M_c_s$ .

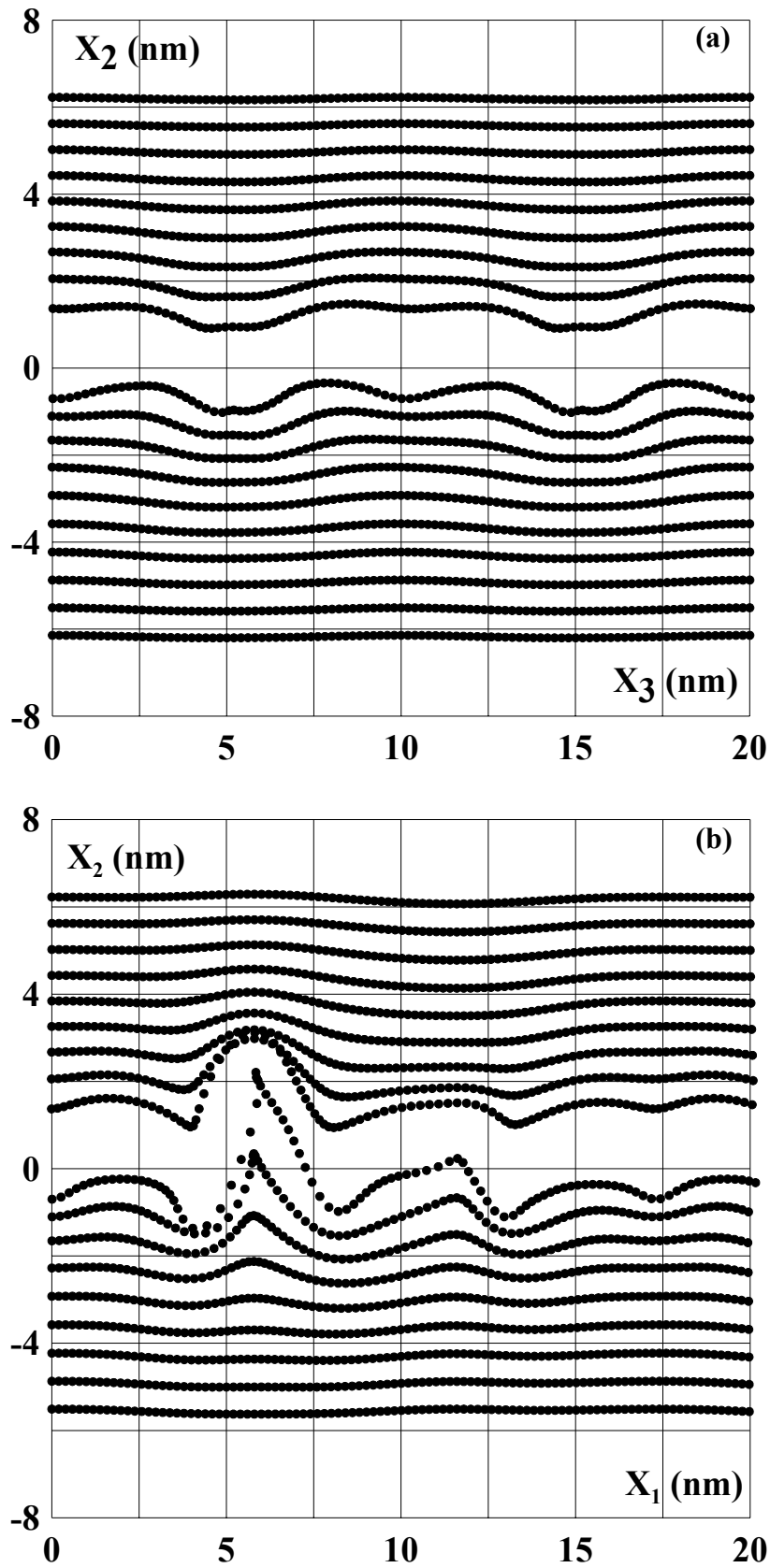
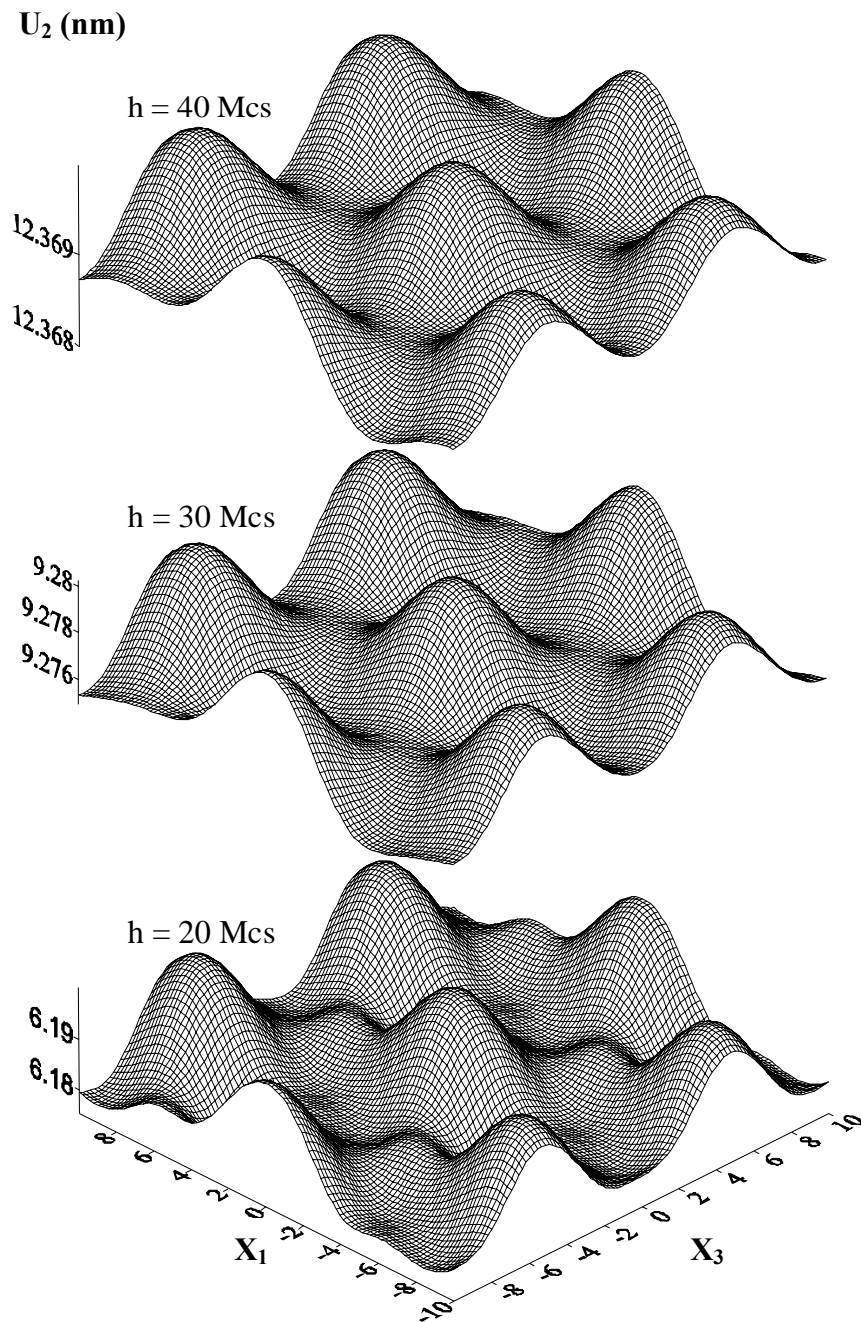


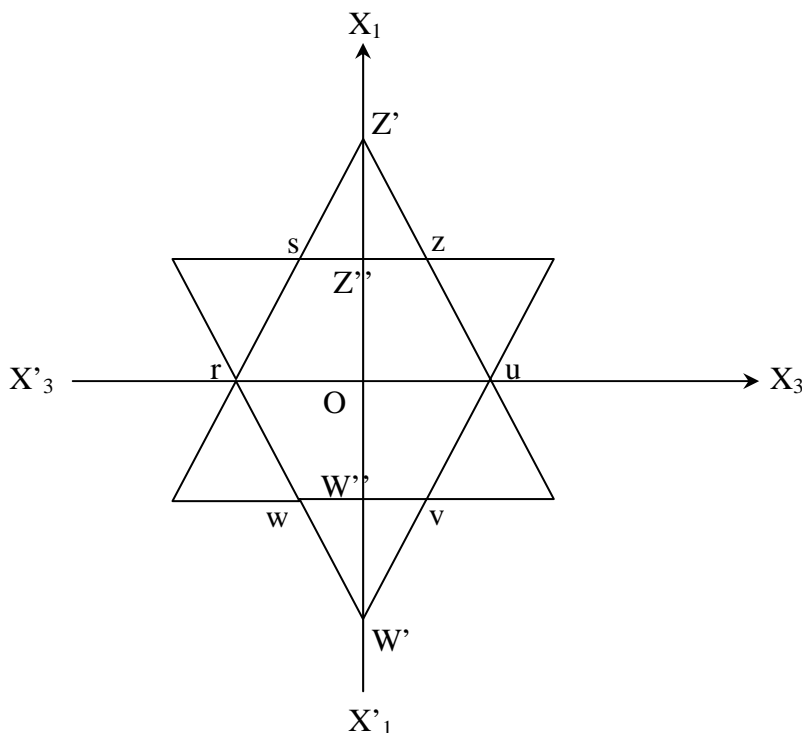
Figure 4.4.4 : Topologies des surfaces libres pour une épaisseur de la couche allant de 4 à 20  $Mc_s$  et pour  $p = q = 1/2$ .



**Figure 4. 4. 5 :** Relief de la surface libre pour une épaisseur de la couche égale successivement à 20, 30 et 40 Mcs et pour  $q = p = 1/2$ .

#### IV. 4. 4 Représentation schématique des équi-contraintes

On veut illustrer les équi-contraintes pour une épaisseur égale à  $6 Mc_s$ , afin de vérifier l'évolution de celles-ci dans une symétrie tri-axiale. En effet, nous avons choisi pour cette application des points typiques de la cellule hexagonale et qui sont d'une part, l'apex u correspondant à un nœud quadruple après dissociation et d'autre part, le centre du repère O correspondant à la zone saine. Les iso-contraintes sont tracées dans le plan  $(x_2, x_1)$  autour de u et autour de O en englobant les dislocations partielles notées respectivement  $Z''$  et  $W''$  ( figure 4.4.6). Il s'agit suivant la même représentation, de décortiquer en détails un phénomène précis relevé sur les courbes de topologie des surfaces libres pour une dissociation, prévue de même taille, lorsque le coefficient  $p = q = 1/2$ .



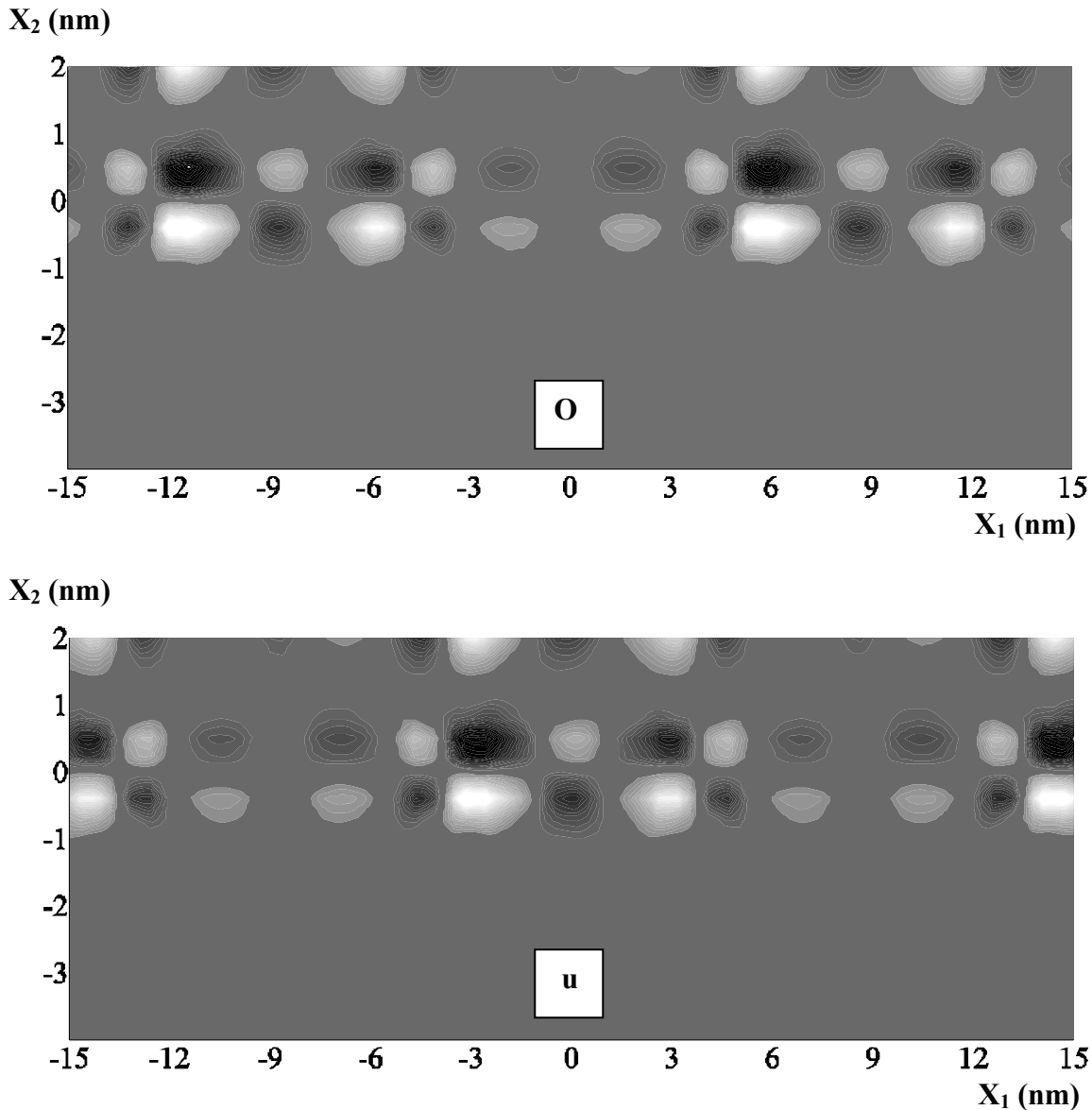
**Figure 4. 4. 6 :** cellule de MDs dissociée ( $p = q = 1/2$ )

Le contraste a été choisi tel que le maximum de la contrainte correspond à une couleur noire et le minimum à une couleur blanche. Celui-ci renseigne sur un phénomène de tension- compression entre la couche et le substrat comme le montrent les courbes des figures 4.4.8, 4.4.9 et 4.4.10.

Nous avons suivi le comportement de  $\sigma_{11}$  le long de l'axe  $x_2$  (figure 4.4.7) ; les courbes déploient clairement l'effet de la contrainte de surface ou réciproquement l'influence de la surface libre sur la contrainte  $\sigma_{11}$ .

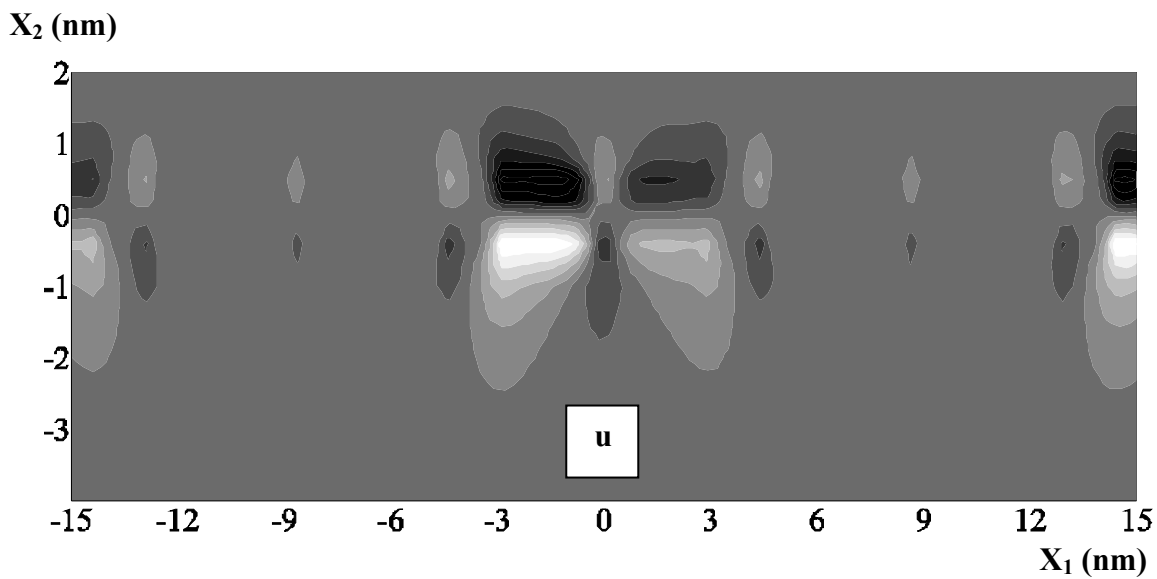
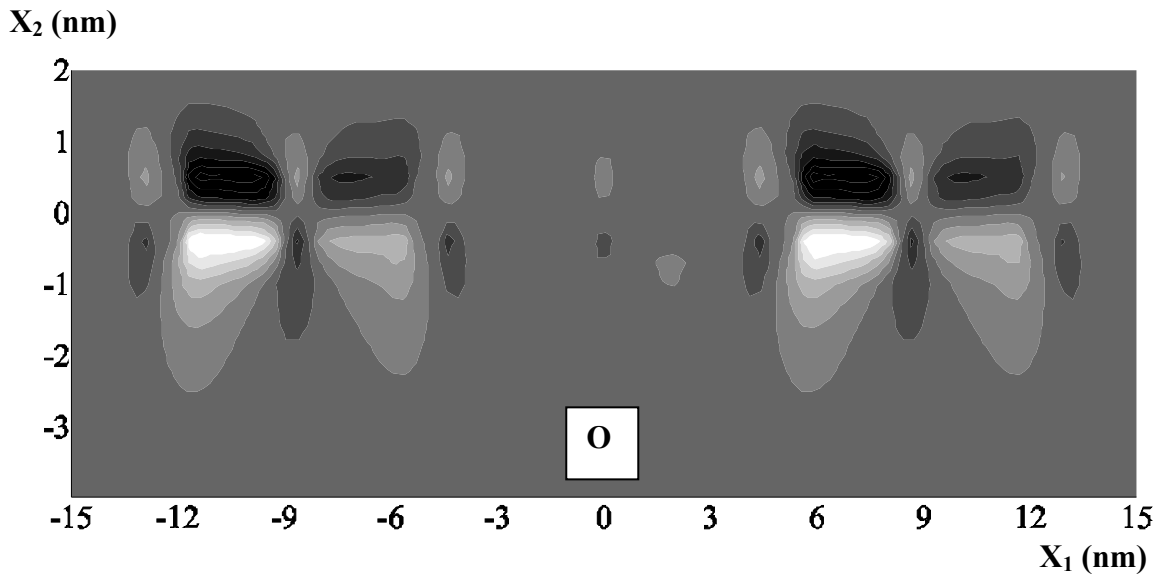


Il est notable que l'étendue de la contrainte  $\sigma_{11}$  se fait symétriquement, autour de  $u$ ; nœud quadruple situé à  $x_3 = 5$  nm et  $x_1 = 0$  nm et, également, autour du centre O en englobant les parties de Shockley situées de part et d'autre de ce point.



**Figure 4. 4. 7 :** Equi-contraintes  $\sigma_{11}$  dans le plan  $(x_2, x_1)$  représentées respectivement autour des points O et u.

La contrainte  $\sigma_{22}$ , quant à elle, vérifie bien la condition de nullité à la surface libre (figure 4.4.8). Les contours de la contrainte autour de O ainsi qu' autour de u indiquent une symétrie satisfaisante après dissociation du réseau. Aussi, le contraste définit bien la compression de la couche de silicium.



**Figure 4. 4. 8** : Equi-contraintes  $\sigma_{22}$  dans le plan  $(x_2, x_1)$  représentées respectivement autour des points O et u.

En outre, nous avons choisi de représenter en plus des contraintes  $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{22}$ , la contrainte  $\sigma_{12}$  pour bien décrire l'effet des partielles. Une influence de ces dernières sur la surface libre surgit. Un phénomène uniforme de tension-compression localisé à l'interface autour des partielles notées Z'' et W'' est relevé. Nous remarquons un contraste inversé des courbes de la contrainte tangentielle  $\sigma_{12}$ , s'étalant de part et d'autre du centre O. La même forme des courbures représentées au niveau des zones comportant les partielles est retrouvée au niveau de u.

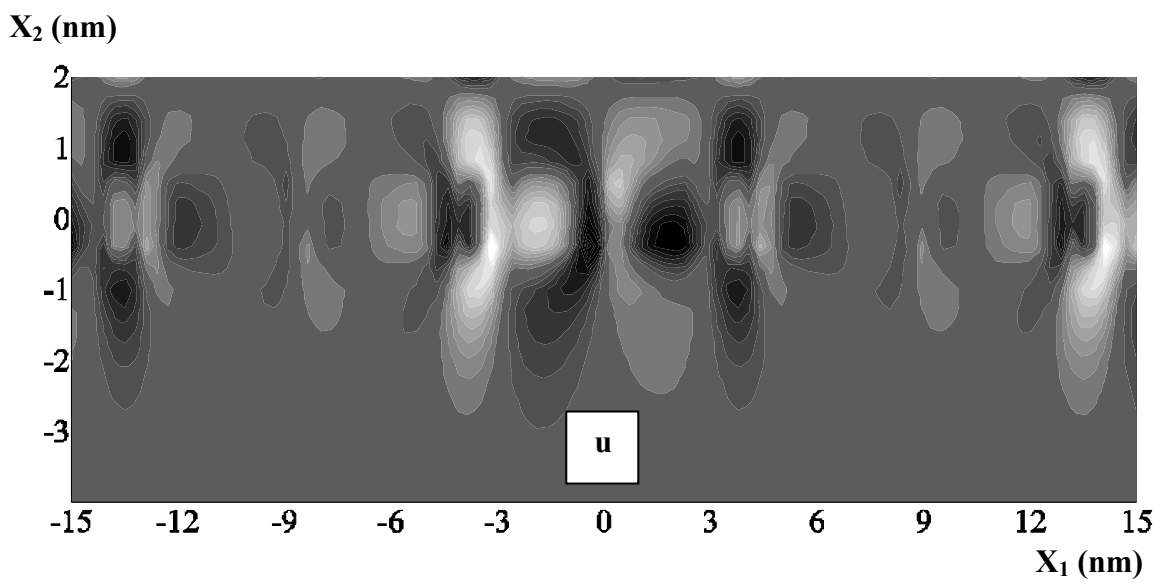
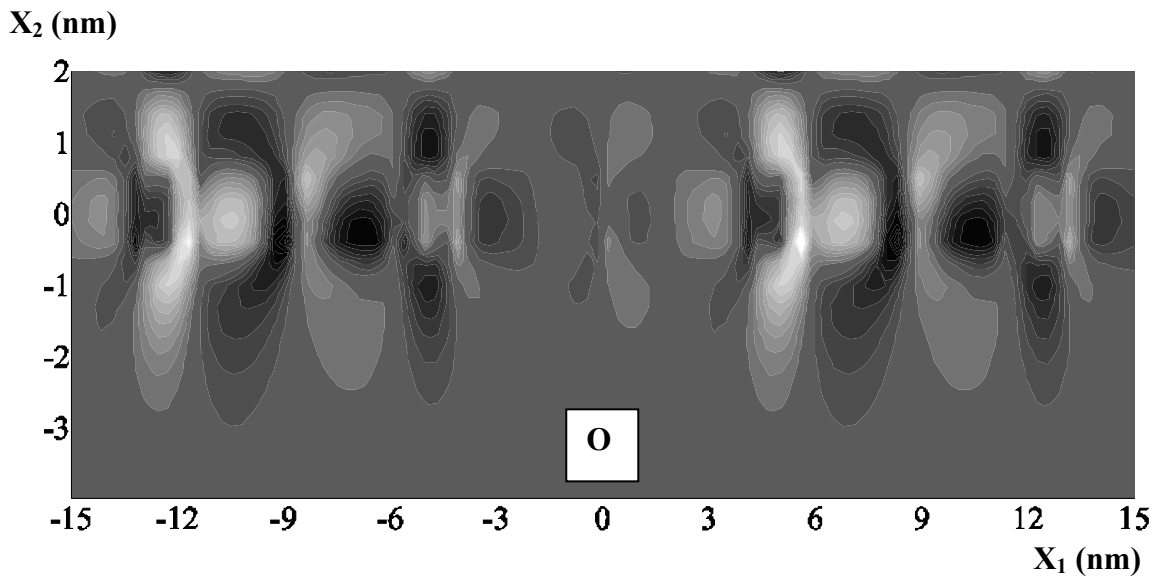


Figure 4. 4. 9 : Equi-contraintes  $\sigma_{12}$  dans le plan  $(x_2, x_1)$  représentées respectivement autour des points O et u.

## IV. 5 Conclusion

Nous avons restreint cette application à l'étude d'un système homogène constitué d'une couche de silicium désorientée d'un angle de  $5^\circ$  par rapport à un substrat possédant les mêmes propriétés, en nous inspirons des travaux de Föll et col sur le sous joint de silicium et ceux de Bonnet et col sur le mono cristal  $\text{Ni}_{75}\text{Pt}_{25}(111)$  recuit. Après nous être attachés à calculer les champs de déplacement et de contraintes générés par les fautes d'empilements interfaciaux, nous nous sommes rendu compte d'un effet d'anisotropie important, d'une influence de l'épaisseur de la couche en compression et d'un changement de morphologie de la surface libre qui est du essentiellement à la dissociation.

## CONCLUSION GENERALE

Les méthodes théoriques et expérimentales constituent deux approches indispensables pour concevoir des matériaux; seulement dans l'élaboration de certains systèmes épitaxiaux celles-ci s'avèrent insuffisantes pour répondre aux défis actuels de la technologie moderne, particulièrement en microélectronique et en optoélectronique. D'une part, les approches théoriques font souvent appel à des approximations importantes, parfois difficiles à justifier. D'autre part, les interprétations expérimentales sont fréquemment délicates à cause de la complexité des phénomènes observés au niveau des interfaces cristallines. La réalisation d'expériences de laboratoire sur des modèles idéaux employés par le théoricien peut, dans certains cas, être totalement impossible. En conséquence, les chercheurs ont eu recours à une frontière entre ces deux approches : les méthodes numériques.

En effet, celles-ci sont en voie d'acquérir une place aussi importante que les deux approches classiques. Elles permettent de réaliser des calculs exacts et de mieux comprendre les phénomènes observés. Il est possible en modélisation numérique de contrôler les paramètres de la structure épitaxiée et de vérifier les hypothèses simplificatrices. Cependant les techniques numériques ne se limitent pas à un seul rôle, elles peuvent être, également, un outil de prédiction quantitatif des propriétés physiques. De plus elles se substituent en partie à l'expérience réelle, lorsque le coût de celle-ci est grand ou lorsqu'on a besoin de mesurer des grandeurs physiques dans des conditions expérimentales extrêmes. En ce qui nous concerne, nous avons étudié théoriquement et numériquement un modèle géométrique d'interface plane lorsque celle-ci :

- 1) appartient à un bilame mince.
- 2) est comprise entre un substrat monocristallin et une couche mince.

Nous avons supposé, dans le premier modèle que l'interface est tapissée d'un réseau hexagonal de dislocations de misfit (MDs) dont les nœuds alternés sont dissociés en partielles de Shockley délimitant des fautes d'empilement intrinsèques. Nous avons établi, dans le cadre d'une élasticité anisotrope, les champs élastiques relatifs au modèle étudié en se basant sur une formulation en séries de Fourier doubles. La formulation théorique mise au point intègre de façon explicite l'arrangement des dislocations. Les termes qui tiennent compte du réseau de dislocations considéré sont définis à partir des coefficients de Fourier, déterminés analytiquement, et sont, par la suite, introduits dans les expressions des champs de déplacements. Le tenseur des contraintes est obtenu par dérivation et application de la loi de Hooke. L'étendue de la dissociation est définie par un facteur  $q$  qui représente le rapport de la surface de faute sur la surface non fautive.

L'analyse débouche sur un système de 12 équations à 12 inconnues complexes dont la résolution ne peut être que numérique. Afin de simplifier les calculs sur machine, nous avons développé ce système d'équations en un système de 24 équations réelles à 24 inconnues réelles. Nous avons, alors mis en place un programme en langage fortran, en double précision, qui permet de résoudre le problème et de donner les champs de déplacements et de contraintes. A travers une application au bilame d'InAs/ (111)GaAs observé par J. G. Belk et col, nous avons validé notre programme, comparativement aux résultats disponibles en isotropie. En effet, la courbe d'élévation que nous avons tracé en anisotropie et en quasi isotropie souligne un effet d'anisotropie important. Suite à cela, nous trouvons plus objectif de comparer nos résultats avec ceux obtenus par T. Outtas pour le cas d'un réseau hexagonal régulier de dislocations de misfit . Comme l'étendue de la dissociation est contrôlée par le facteur  $q$ , nous supposons que le réseau de MDs analysé n'est pas encore dissocié. Les champs de déplacements et de contraintes calculés sont en parfait accord avec les résultats cités ci dessus. Nous déterminons, après, l'effet de la dissociation sur les surfaces libres du bilame et l'effet de l'épaisseur sur la topologie de celles-ci. La distribution des contraintes, pour laquelle, il n'existe pas d'expressions analytiques est également illustrée.

Dans une deuxième partie du travail, nous étudions le cas d'un réseau hexagonal de MDs qui donne un réseau trigonal composé de fautes d'empilement intrinsèques alternés à des fautes d'empilement extrinsèques. Les interactions élastiques entre MDs sont déterminés théoriquement en utilisant la même analyse définie dans la première partie. La mise en équation du problème aboutit à un système de 9 équations linéaires à 9 inconnues complexes que nous avons développé en un système de 18 équations linéaires à 18 inconnues réelles. La géométrie du réseau de MDs est définie par un facteur noté  $p$  et égal à  $1 - q$ , tel que  $q$  est le paramètre qui représente le rapport de la surface de faute sur la surface non fautée. La résolution du problème et l'application au système Si/(111)Si observé par H. Föll ont permis de remarquer ce qui suit :

- La courbe d'élévation tracée en anisotropie montre qu'au dessus des nœuds U et V de la cellule hexagonale UVWRSZ qui est à la base du réseau ne présente pas d'intersection en en début de la dissociation et lorsque cette dernière est à son maximum. Contrairement à cette allure, une courbe identique tracée en quasi isotropie, c'est à dire près de l'isotropie, montre que l'élévation à l'aplomb des mêmes points est pratiquement la même. En conséquence, un effet des surfaces sous jacentes est relevée.
- Les topologies de la surface libre calculées en fonction de l'épaisseur de la couche  $h$  déposée, au dessus des points U et V indiquent pour que  $p = q = 1/2$ , la morphologie de la couche est pareille mais l'ordre de grandeur de la déformation est un peu plus élevé au dessus de la FEE.

## CONCLUSION GENERALE

---

Dans le soucis de trouver une explication à cela, nous avons représenté dans le plan  $(x_2, x_1)$  et suivant l'axe  $x_2$  les courbes d'équi-contraintes autour du nœud quadruple  $u$ , médiateur de la ligne UV, et autour du centre du repère O définissant la zone saine de la cellule mais en incluant les deux partielles de Shockley formées de part et d'autre de ce centre après dissociation. Nous constatons que l'étendue de la symétrie de la dissociation, prévue parfaite, se fait désormais uniformément. Par ailleurs, et quoi que la convergence des séries de Fourier est vérifiée, le nombre d'harmonique utilisé ne semble pas être très suffisant particulièrement, pour certaines représentations exigeant une très grande précision. L'augmentation de ce nombre est possible pour d'autres applications mais le temps de calcul est important.

Finalement, nous avons l'occasion de signaler que, l'étude a permis d'atteindre les objectifs visé. Le problème théorique est complètement résolu et les programmes construits sont vérifiés et validés rigoureusement. Il s'en est dégagé des résultats nouveaux et précis de modèles théoriques assez complexes. Néanmoins, cette étude ouvre la voie à beaucoup de questions, notamment pour la deuxième partie traitée, qui trouveront leurs réponses dans une continuité et un éventuel développement du présent travail.

## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] MRS Symposium Proceedings series, Nanostructured Interfaces, 2002 MRS Spring Meeting, San Francisco, éditeur: 506 Keystone Drive, Warrendale, PA 15086- 7573 USA, vol. 727.
- [2] Proceedings of 8<sup>th</sup> Conf. On Intergranular and Interphase Boundaries in Materials Toyama, Japan, 1-4 juillet 1996, JIMIS-8iib96, The Japan Institute of Metals, éditeur Y. Ishida et col.
- [3] J. G. Belk, , Ph. D. thesis, Imperial College, University of London, 1997.
- [4] A. Bourret et P. H. Fuoss, Appl. Phys. Lett. 61, 1992, 1034-1036.
- [5] A. Bourret, Surf. Sc. 432, 1999, 35-53
- [6] A. E. Romanov, P. M. Petroff et J. S. Speck, Appl. Phys. Lett. 74, 1999, 2280-2282.
- [7] F. Fournel, H. Moriceau, N. Magnea, J. Eymery, J. L. Rouvière, K. Rousseau et B. Aspar, Mat. Sc.Eng. B73, 2000, 42- 46.
- [8] K. Rousseau, J.L. Rouvière, F. Fournel, H. Moriceau, Mater. Sci. In Semiconductor Proc. 4, 2001, 101-104.
- [9] F. Fournel, H. Moriceau, B. Aspar, K. Rousseau, J. Eymery, J. L. Rouvière et N. Magnea, Appl. Phys. Lett. 80, 2002, 793-795
- [10] K. Nakajima, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 338, 1994, 149-160.
- [11] T.Zheleva, M. Ichimura, S. Oktyabrsky et J. Narayan, Atomic scale characterization of InGaAs/GaAsSi heterostructure by HREM, atomistic modeling and multislice image simulation, Semicond. Charac.(Int. Workshop), 1996, Conférence en 1995, éditeurs: Bullis et col., Imprimeur : AIP Press, Woodbury, N. Y., USA, 688-692.
- [12] R. Bonnet, Phil. Mag. A, 1999, vol 79, N° 8,1909-1922.
- [13] J. G.Belk, J. L.,Sudijono, X. M. Zhang, J. H. Neave, T. S. Jones. And B. A. Joyce, 1997, Phys. Rev. Lett., 78, 475.
- [14] T. Outtas, L. Adami, A. Derardja, S. Madani and R. Bonnet, Phys. Stat. Sol.(a), 188, N°3, 2001, 1041-1045.
- [15] Ch. Wöll, S. Chiang, R. J. Wilson et P. H. Lippel, Phys. Rev. B, 39,1989, 7988.
- [16] J. V. Barth, H. Brune, G. Ertl et R. J. Behm, Phys. Rev. B 42, 1990, 9307.
- [17] A. R. Sandy, S. G. J. Mochrie, D. M. Zehner, G. Grübel, K. G. Huang et D. Gibbs, Phys. Rev. Lett., 68, 1992, 2192.
- [18] M. Bott, M.Hohage, T. Michely et G. Comsa, Phys. Rev. Lett., 70,1993, 1489.
- [19] R. Bonnet, Phys. Rev. B, 61, N°20, 2000, 14059-14065.
- [20] J. P. Hirth et J. Lothe, Theory of dislocations, seconde édition, Wiley, New York,1982



## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

---

- [21] H. Föll et D. Ast , Phil. Mag.A, Vol 40, N° 5, 1979, 598-610.
- [22] A. K. Head, Proc. Phys. Soc., B66, 1953,793.
- [23] M. S. Lee et J. Dundurs, J. Engng. Sci., 11, 1973, 87.
- [24] J. Lothe, Institute of Physics, University of Oslo, Report 83, 1983, 21.
- [25] M. L. Ovecoglu, M. F. Doerner et W. D. Nix, Acta. Metall., 35, 1987, 2947.
- [26] J. R. Willis, S. C. Jain et R. Bullough, Phil. Mag. A, 62, 1990,115.
- [27] M. Y. Gutkin et A. E. Romanov, Phys. Stat. Sol. (a), 125, 1991, 107.
- [28] R. Bonnet et J. L. Verger-Gaugry, Phil. Mag. A, 66, 1992, 849.
- [29] R. Bonnet, Phys. Rev. B, 53, 1996, 10978.
- [30] G. Saada. Dislocation Modelling of Physical Systems, Proc. of Conf., Gainesville 1980. Eds. M. F. Ashby, R. Bullough, C. S. Hartle and P. Hirth, Pergamon Press : Oxford,1980, 311.
- [31] J. R. Willis, S. C. Jain et R. Bullough, Phil. Mag. A, 62, 1990.
- [32] R. Bonnet, Acta. Met., 29, 1981, 437.
- [33] C. Rey et G. Saada, Phil. Mag., 33, 1976, 825.
- [34] J. F. Nye, Physical Properties of Crystals, Oxford University Press, Ely House, London, 276, 1969.
- [35] E. Kröner, Kontinuumstheorie der Verstzungen und Eigenspannungen, Berlin : Springer-Verlag, 1968.
- [36] B. Bilby, R. Bullough et E. Smith, Proc. R. Soc. A, 31, 1955, 263.
- [37] A. Bouzaher et R. Bonnet , Phil. Mag.A, 66, , 1992, 823.
- [38] R. Bonnet et A. Bouzaher, Trans. Tech. Pub, 1995,
- [39] A.Derardja, Thèse de Magistère de l'université de Batna, 1997.
- [40] R. Bonnet , Phys. Stat. Sol. (a) 177, 2000, 219.
- [41] T. Outtas, Thèse de Doctorat d'état de l'Université de Batna, 2002.
- [42] P. B. Hirsch, A. Howie, R. B. Nicholson, D. W. Pashley et M. J. Whelan, Electron Microscopy of Thin Crystals, Robert E. Krieger Pub. Cy, Malabar, Florida, 2<sup>nd</sup> edition, 1977.
- [43] A. K. Head, P. Humble, L. M. Clarebrough, A. J. Morton et C. T. Forwood, Computed Electron Micrographs and Defect Identification, Amsterdam, north Holland, 1973.
- [44] A. F. Schwartzman et R. Sinclair, J. of Elec. Mat., 20, 1991, 805.
- [45] R. Bonnet et M. Loubradou, Ultramicroscopy 69, 1997, 241
- [46] P. B. Hirsch, R.W. Horne et M. J. Whelan, Phil. Mag.,1, 1956, 677.
- [47] S. Amelinckx, Dislocations and mechanical properties of crystals, Int. Conf. Held at Lake placid Sept. 6-8, 1956, Eds. J. C. Fisher, W. G. Johnston, R. Thompson et T. Vreland, New york, John Wiley and Sons, Inc., p. 3.
- [48] S. Amelinckx, Acta. metall., 6, 1958, 34.
- [49] F. C. Frank et J. H. Van Der Merwe, Proc. Roy. Soc. A, 198, 1949, 205.
- [50] S. Amelinckx et W. Dekeyser, Solid. State. Phys., 8, 1959, 325.

## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

---

- [51] R. Bonnet et F. Durand, *Phil. Mag.*, 32, 1975, 997.
- [52] L. M. Clarebrough et C. T. Forwood, *Phys. Stat. Sol. (a)*, 58, 1980, 597.
- [53] C. T. Forwood et L. M. Clarebrough, *Aust. J. Phys.*, 38, 1985, 449.
- [54] C. T. Forwood et L. M. Clarebrough, *Phil. Mag. A.*, 53, 1986, L31.
- [55] C. T. Forwood et L. M. Clarebrough, *Phil. Mag. B.*, 59, 1989, 637.
- [56] C. T. Forwood et L. M. Clarebrough, *Electron Microscopy of Interfaces in Metals and Alloys*, Ed. Adam Hilger, IOP Publ. Ltd. Bristol., Eds. J. M. Gibson, R. T. Tung, J. M. Philips et R. Hull, sup. to *J. de Phys.*, vol 46, 1991, 369.
- [57] P. Humble et C. T. Forwood, *Phil. Mag.*, 31, 1975, 1011.
- [58] A. Lasalmonie et J. L. Strudel., *Phil. Mag.*, 32, 1975, 937.
- [59] P. J. Goodhew et P. Maheswaran, *Proc. of Micro 78*, Roy. Microsc. Soc. 13, 1978, 54
- [60] J. G. Erlings et F. W. Schapink, *Thin Solid films (a)* 61, 1979, 33 ; (b) *J. of Mat. Sc.* 15, 381.
- [61] G. Honjo et K. Yagi., *Current Topics in materials sciences*, 1980, Ed. E. Kaldis (North holland, Amsterdam), Vol. 6, 195.
- [62] J. J. C. Hamelink et F. W. Schapink, *Phil. Mag. A*, 44, 1981, 1219.
- [63] L. A. Tietz, S. R. Summerfelt et C. B. Carter, *MRS symposium on atomic Scale Structure of interfaces*. Eds. R. D. Bringans, J. M. Gibson , Pittsburgh, Pennsylvania , 1990, 209.
- [64] K. K. Sagoe. Crenstil et L. C. Brown, *Phil. Mag. A.*, 61, 1990, 4.
- [65] K. K. Sagoe. Crenstil et L. C. Brown, *Phil. Mag. A.*, 63, 1991, 4.
- [66] I. K. Tung et L. R. Feidenhans, *Phys. Rev. A*, 1988, 3652.
- [67] C. A. Lucas et D. Loretto, *Appl. Phys. Lett.*, 60, 1992, 2071.
- [68] A. Bourret, P. H. Fuoss, P. H. Rocher et C. Raisin, *Advances in Surface and Thin Film Diffraction*, Eds. T. C. Huang, P. I. Cohen et D. J. Eaglesham, Pittsburg, PA : Material Research Society, vol 208, 1991, 303.
- [69] R. Bonnet, M. Loubradou, A. Catana et P. Stadelmann, *Met. Trans. A.*, 22, 1991, 1145.
- [70] R. Bonnet et M. Loubradou, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, Eds. W. A. T. Clarck, U. Dahmen and C. Briant, Material. Research Society, Pittsburg, Penn., 238, 1992, 29.
- [71] R. Bonnet, M. Loubradou et J. M. Penisson, *Phys. Rev. Lett.*, 69, 1992, 104.
- [72] R. Bonnet et M. Loubradou, *Phys. Rev. B*, 49, 1994, 14397.
- [73] A. Vila, A. Cornet, J. R. Morante, P. Ruterana, M. Loubradou et R. Bonnet, *Phil. Mag. A*, 71, 1995, 85.
- [74] G. Feuillet, L. di Ciocco, A. Million, J. Cibert et S. Tararenko, *Ins. Phys. Conf. Ser.* 87, 135, 1987
- [75] A. F. Schwartzman et R. Sinclair, *J. Elec. Mat.*, 22, 1981, 805.
- [76] A. Olsen et J. C. H. Spence, *Phil. Mag. A*, 43, 1981, 945.
- [77] D. Gerthsen, *Phil. Mag. A*, 43, 1993, 1365.
- [78] A. G. Cullis, A. J. Pidduck et M. T. Emeny, *Phys. Rev. Lett.*, 75, 1995, 2368.

## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

---

- [79] A. G. Cullis et J. L. Hutchinson, *Microscopy of Semiconducting Materials*, Institute of Physics Conference Series, N° 157, 1997, Bristol.
- [80] C. C. Mathai et D. Ashu, *Colloque de Physique*, Colloque C1, sup. au n°1, 51, 1990, 873.
- [81] Yu. A. Tkhorik et L. S. Khazan, *Plastic deformation and misfit dislocations in heteroepitaxial systems*, Naukova Dumka, Kiev, 1983.
- [82] E. A. Fitzgerald, *Mater. Sci. Rep.* 7, 1991, 87.
- [83] L. B. Freund, *MRS Bull.*, 17, 1992, 52.
- [84] R. Beanland, D. I. Dunstan et P. I. Goodhew, *Adv. Phys.* 45, 1996, 1461.
- [85] S. C. Jain, A. H. Harker et R. A. Cowley, *Phil. Mag. A*, 75, 1997, 1461.
- [86] B. Piveteau, M. C. Desjonquères et D. Spanjaard, *J. Phys. I France*, 2, 1992, 1677-1690.
- [87] A. K. Gutakovskii et V. B. Osvenskii, *Structural Defect in Epitaxial Layers of Semiconductors*, Metallurgiya, Moscow, 1985.
- [88] M. Yu. Gutkin, K. N. Mikaelyan et I. A. Ovid'ko, *Phys. Solid State* 40, 1998, 2059
- [89] J. Zou et D. J. H. Cockayne, *Appl. Phys. Lett.*, 69, 1996, 1083.
- [90] I. A. Ovid'ko, *J. Phys. Condens. Matter*, 11 (34), 1999, 6521.
- [91] S. Gunther, *Phil. Mag. A*, vol 82, N°5, 2002, 1033-1048.
- [92] I. A. Ovid'ko, *Proceeding of the NATO advanced Research Workshop*, Ed. By G.-M. Chow, 2000, p 231.
- [93] R. Stadler, H. Siringhaus, N. Onda et H. Vän Kandel, *Appl. Phys. Lett.*, 59, 1960, 1992, *Ultramicroscopy*, 42-44, 1991, 781.
- [94] B. Voigtländer et A. Zinner, *J. Vac. Sci. Tech. A*, 12, 1994, 1932.
- [95] H. Berthge, D. Heuer, Ch. Jensen, K. Reshöft et U. Köhler, *Surf. Sci.*, 331-333, 1995, 878.
- [96] G. Springholz, *Appl. Surf. Sci.*, 112, 1997, 12.
- [97] J. Jacobsen, L. P. Nielsen, F. Besenbacher, I. Stensgaard, E. Laesgaard, T. Rasmussen, K. W. Jacobsen et J. K. Norskov, *Phys. Rev. Lett.*, 75, 1995, 489.
- [98] A. Luis Zepeda, I. R. Pelzel, Z. Brett Z. W. Nosh, H. Weinberg and D. Maroudas, *Journal of Applied Physics* Vol 90, 2001, 6, 2689-2698.
- [99] A. Y. Belov, R. Scholz et K. Scheerschmidt, *Phil. Mag. Lett.*, 79, 1999, 531-538.
- [100] C. Günther, J. Vrijmoeth, R. Q. Hwang et R. J. Behm, *Phys. Rev. Lett.*, 74, 1995, 754.
- [101] J. de La Figuera, A. K. Schmid, K. Pohl, N. C. Bartlet, C. B. Carter et R. Q. Hwang, *Phys. Rev. B*, 63, 2001, 165431.
- [102] J. Eymery, F. Fournel, H. Moriceau, F. Rieutord, D. Buttard, B. Aspar, *Appl. Phys. Lett.*, 75, 1999, 22.
- [103] A. Janzen, I. Dumkow et M. Horn-von-Hoegen, *Appl. Phys. Lett.*, 79, 2001, 2387.
- [104] X. W. Liu, A. A. Hopgood, B. F. Usher, H. Wang et N. St. J. Braithwaite, *Semicond. Sci. Technol.*, 14, 1999, 1145.

## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

---

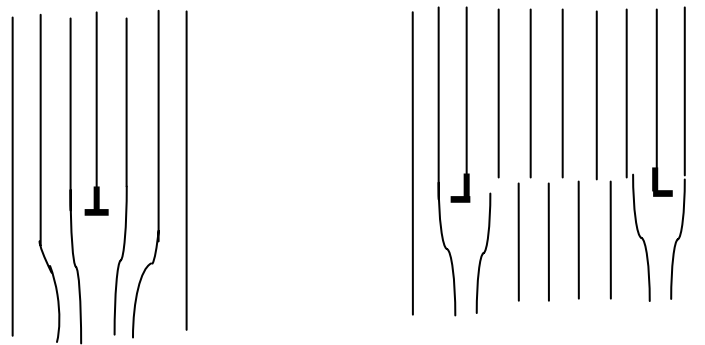
- [105] H. Yamaguchi, J. G. Belk, X. M. Zhang, J. H. Neave, T. S. Jones et B. A. Joyce, Phys. Rev. Lett., 78, 1997, 475.
- [106] H. Brune, Surf. Sci. Rep., 31, 1998, 121.
- [107] F. Besenbacher, Rep. Prog. Phys., 59, 1996, 1737.
- [108] A. F. Marshall, D. B. Aubertine, W. D. Nix et P. C. McIntyre, J. of Mater. Res., 20, N°2, 2005, 447-445.
- [109] J. V. Barth, H. Brune, G. Ertl et R. J. Behm, Phys.Rev. B, 42, 1990, 9307.
- [110] S. Narasimhan et D. Vanderbilt, Phys. Rev. Lett., 69, 1992, 1564.
- [111] M. Bott, M. Hohage, T. Michely, G. Comsa, Phys. Rev. Lett., 70, 1993, 1489.
- [112] A. R. Sandy, S. G. J. Mochrie, D. M. Zehner, G. Grübel, K. G. Huang et D. Gibbs, Phys. Rev. Lett., 68, 1992, 2192.
- [113] P. Anderson, Scripta Metall. Mater., 27, 1992, 687.
- [114] D. S. Lashmore and R. Thompson, J of Mater. Res. 7,1992, 2379.
- [115] X. G. Ning, D. S. Wilkinson, J. F. Mao, J. H. Li, H. Q. Ye, Z. J. Pu et D. X. Zou, Intergranular and interphase boundaries in materials, Part 1, edited by A. C. Ferro, J. P. Conde et M. A. Fortes (Transtec Publications Ltd Switzerland), Mater. Sci. Forum, Part 1 207-209,1996, 113.
- [116] P. Pirouz, Polycrystalline semiconductors, edité par J. H. Werner, H. J. Möller, and H. P. Strunk (Springer- Verlag, Berlin), 1989, Springer Proceedings in Physics, Vol. 35, p. 200.
- [117] M. Schmid, A. Biedermann, H. Stadler et P. Varga, Phys. Rev. Lett., 69,1992, 925.
- [118] G. Meyer, B. Voigtländer et N. M. Amer, Surf. Sci. Lett., 274, 1992, L541.
- [119] A. Derardja, L. Adami, S. Benyoussef et R. Bonnet, Ann. Chim. Sci. Mat, 29(4), 2004, 123-132.
- [120] N. Clément, A. Coujou, M. Benyoucef, M. Jouiad, D. Caillard, A. Couret, G. Molénat and M. Legros, Colloque National Superalliages Monocristallins, edited par SNEMCA (Direction Technique, 77550 Moissy Cramayel, France (1995), p. 146.
- [121] H. Brune, H. Röder, C. Boragno et K. Kern, Phys. Rev. B 49, 1994, 2997.
- [122] R. Bonnet et M. Loubradou, Phys. Rev. B 49, 14 397, 1994.
- [123] M. Loubradou, R. Bonnet et J. M. Penisson, Phil. Mag.A, 72,1995,1381
- [126] H. Yamaguchi, J. G. Belk, X. M. Zhang, J.L. Sudjino, M. R. Fahy, T. S. Jones, D. W. Pashley et B. A. Joyce, Phys. Rev.B, 55,1997, 1337.
- [127] S. Groh, B. Devincre, L. P. Kubin, A. Ross, F. Feyel et J.-L. Chaboche, Phil. Mag. Lett., 83, N°5, 2003, 303-313.

## ANNEXE I : LES DISLOCATIONS PARTIELLES

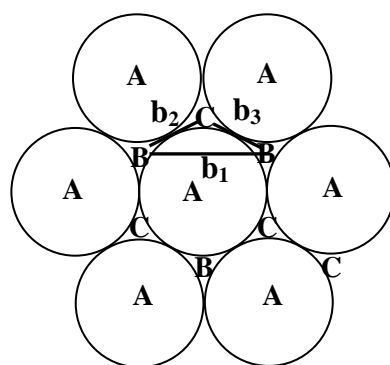
La dissociation d'une dislocation parfaite en deux dislocations partielles est possible si :

$$b_2^2 + b_3^2 < b_1^2$$

Les partielles de Schockley créent une faute d'empilement dans la séquence d'empilement ABCABC...de la structure CFC. Sur la figure A1. 1, on voit la déformation élastique autour des partielles, lesquelles se déplacent de façon répulsive (a). Comme l'énergie est proportionnelle au vecteur de Burgers, elle peut renseigner sur la distance entre partielles.



(a)



(b)

**Figure A1. 1 :** (a) Distorsion élastiques autour de dislocations partielles.  
(b) Faute d'empilement entre les partielles.

## ANNEXE II : CALCUL DES COMPOSANTES DU VECTEUR G DU RESEAU RECIPROQUE

Le système  $Ox_1x_2x_3$  est un trièdre orthonormé. Le système  $Ox'_1x'_2x'_3$  est le système oblique lié au réseau de dislocations ; figure A2. 1, tel que :

$$x_1 = x'_1 \cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) = x'_1 \sin\theta \Rightarrow x'_1 = \frac{x_1}{\sin\theta} \quad (\text{A2. 1})$$

Afin d'exprimer  $x'_3$  en fonction de  $x_1$  et  $x_3$ , on fait une rotation de  $\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right)$  du système d'axes lié au réseau de dislocations dans le sens des aiguilles d'une montre. On obtient :

$$x_3'' = x_3 \cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) - x_1 \sin\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) \Rightarrow x_3'' = x_3 \sin\theta - x_1 \cos\theta \quad (\text{A2. 2})$$

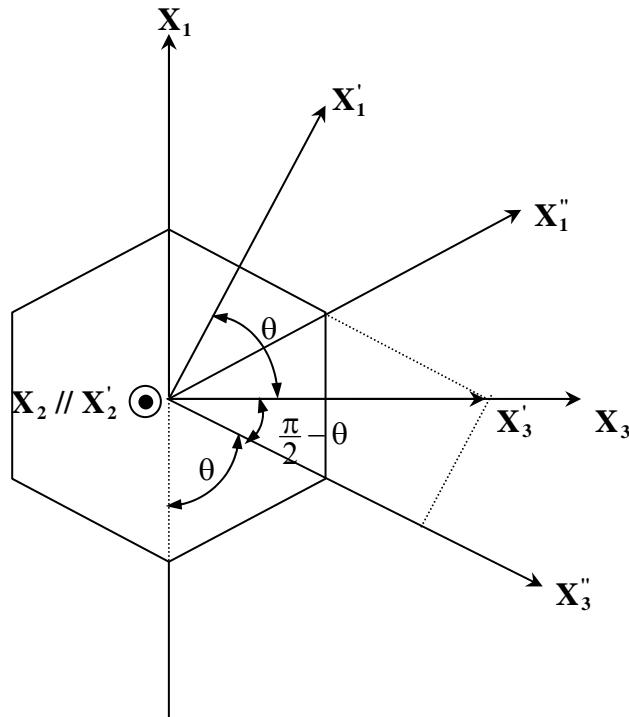
Exprimez  $x_3''$  en fonction de  $x'_3$  dans le système  $Ox''_1x''_3$  :

$$x_3'' = x'_3 \cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) = x'_3 \sin\theta \quad (\text{A2. 3})$$

La substitution de  $x_3''$  dans (A2. 2) donne :

$$x'_3 \sin\theta = x_3 \sin\theta - x_1 \cos\theta \Rightarrow x'_3 = x_3 - \frac{x_1}{\text{tg}\theta}$$

$$x_3 \text{ aura finalement l'expression suivante : } \quad x_3 = x'_3 + x'_3 \cos\theta \quad (\text{A2. 4})$$



**Figure A2. 1 :** Transformation des systèmes d'axes du réseau direct au réseau réciproque.

Considérons les composantes du vecteur  $\mathbf{G}$  du réseau réciproque tel que :

$$\mathbf{G} = n\mathbf{a}^* + m\mathbf{c}^*$$

Comme le réseau est plan, on prend  $|\mathbf{b}| = |\mathbf{j}| = 1$  ; figure (A2. 2)

$$\mathbf{a} = a[\mathbf{i} \sin\theta + \mathbf{k} \cos\theta] \text{ et } \mathbf{c} = c\mathbf{k}$$

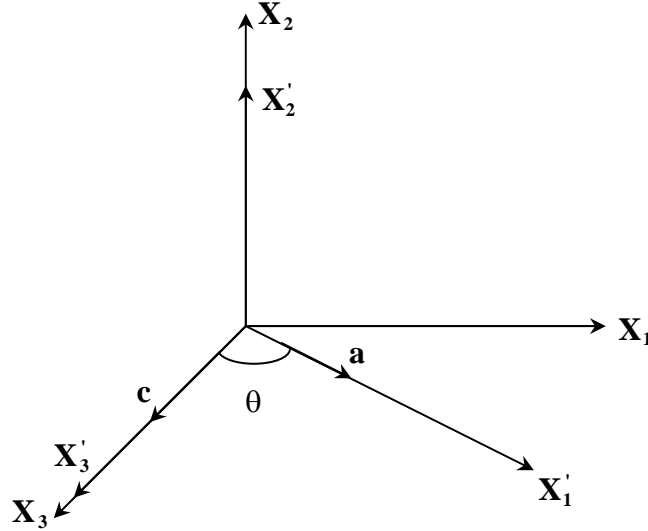


Figure A2. 2 : Définition du système de calcul de  $\mathbf{a}^*$  et  $\mathbf{c}^*$

soit :  $V = a c \sin\theta$

$$\mathbf{a}^* = \frac{1}{V} [\mathbf{b} \wedge \mathbf{c}] = \frac{c}{V} [\mathbf{j} \wedge \mathbf{k}] = \frac{c}{V} \mathbf{i} = \frac{c}{a c \sin\theta} \mathbf{i}$$

$$\mathbf{a}^* = \frac{1}{a \sin\theta} \mathbf{i} \quad (\text{A2. 5})$$

$$\mathbf{c}^* = \frac{1}{V} [\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}] = \frac{a}{a c \sin\theta} [(\sin\theta \mathbf{i} + \cos\theta \mathbf{k}) \wedge \mathbf{j}]$$

$$\mathbf{c}^* = \frac{1}{a c \sin\theta} [(\sin\theta \mathbf{k} - \cos\theta \mathbf{i})] \quad (\text{A2. 6})$$

Donc :

$$\mathbf{G} = \frac{n c - m a \cos\theta}{a c \sin\theta} \mathbf{i} + \frac{m}{c} \mathbf{k} \quad (\text{A2. 7})$$

$$\mathbf{G}\mathbf{R} = \frac{n}{a} x'_1 + \frac{m}{c} x'_3$$

$$\mathbf{G}\mathbf{R} = \frac{n x_1}{a \sin\theta} + \frac{m}{c} (x_3 - \frac{x_1}{\tan\theta}) = (\frac{n}{a \sin\theta} - \frac{m \cos\theta}{c \sin\theta}) x_1 + \frac{m}{c} x_3$$

$$\mathbf{G}\mathbf{R} = (\frac{n c - m a \cos\theta}{a c \sin\theta}) x_1 + \frac{m}{c} x_3$$

## ANNEXE III

Montrons que :  $p_{\alpha}^{(-G)} = -p_{\alpha}^{(G)}$

$$\text{Rappelons l'équation : } \psi_{jk}^{(G)} + \varphi_{jk}^{(G)} p^{(G)} + C_{j2k2} p^{(G)^2} = 0 \quad (\text{A3. 1})$$

Calculons cette expression pour  $-G$  :

$$\psi_{jk}^{(-G)} + \varphi_{jk}^{(-G)} p^{(-G)} + C_{j2k2} p^{(-G)^2} = 0 \quad (\text{A3. 2})$$

Comme les composantes du vecteur  $\mathbf{G}$  sont  $\mathbf{G}_1$  et  $\mathbf{G}_3$ , on obtient :

$$\psi_{jk}^{(-G)} = C_{j1k1} \mathbf{G}_1^2 + C_{j3k3} \mathbf{G}_3^2 + (C_{j1k3} + C_{j3k1}) (-\mathbf{G}_1) (-\mathbf{G}_3) \quad (\text{A3. 3})$$

$$\text{et } \varphi_{jk}^{(-G)} = (C_{j1k2} + C_{j2k1}) (\mathbf{G}_1) + (C_{j2k3} + C_{j3k2}) (-\mathbf{G}_3) \quad (\text{A3. 4})$$

$$\text{donc : } \psi_{jk}^{(-G)} - \varphi_{jk}^{(-G)} + C_{j2k2} p^{(-G)^2} = 0 \quad (\text{A3. 5})$$

Effectuons le changement de variable suivant :  $p_{\alpha}^{(-G)} = -q_{\alpha}^{(G)}$

On aura alors :

$$\psi_{jk}^{(G)} - \varphi_{jk}^{(G)} + C_{j2k2} q^{(G)^2} = 0$$

Cette équation a les mêmes racines que ( A3. 1) et par conséquent :  $q_{\alpha}^{(G)} = p_{\alpha}^{(G)}$

Il s'ensuit que :  $p_{\alpha}^{(-G)} = -p_{\alpha}^{(G)}$