

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

THESE

Présentée

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

Pour obtenir le titre de

DOCTEUR D'ETAT EN GENIE MECANIQUE

Option : Construction Mécanique

Par

Mr BENBOUTA RACHID

*Simulation numérique des champs élastiques anisotropes
de déformations générés par des réseaux unidirectionnels
de dislocations aux interfaces de matériaux multicouches.*

Soutenue publiquement le 23/03/2006, devant le jury composé de :

Dr ABIBSI Abdelhafid	Prof.	Université de Biskra	Président
Dr ADAMI Lahbib	Prof.	Université de Batna	Rapporteur
Dr MIHI Abdelkader	M.C	Université de Batna	Co-rapporteur
Dr OUTTAS Toufik	M.C.	Université de Batna	Examineur
Dr ZEDIRA Hama	M.C.	C.U. Khenchela	Examineur
Dr BRIOUA Mourad	M.C.	Université de Batna	Examineur
Dr BENZAADA Said	M.C.	Université de Biskra	Examineur

REMERCIEMENTS

Durant les années de préparation de ma thèse, j'ai eu le plaisir de rencontrer et de côtoyer de nombreuses personnes que je tiens à remercier ici, car leur aide m'a été précieuse :

Un grand merci :

à Mr L. ADAMI encadreur, et Mr A. MIHI co-encadreur, pour toutes leurs orientations et leurs précieux conseils qui m'ont permis de concrétiser ce travail, à qui j'exprime ma profonde gratitude et reconnaissance.

à Mr A. ABIBSI, Professeur à l'Université de Biskra, d'avoir accepté la présidence de ce jury.

également à Mr T. OUTTAS et Mr BRIOUA, Maîtres de Conférences à l'Université de Batna, Mr H. ZEDIRA, Maître de Conférences au Centre Universitaire de Khenchela, et Mr S. BENZAADA, Maître de Conférences à l'Université de Biskra, d'avoir accepté d'être membres du jury et d'évaluer mon travail..

à Mr S. MADANI, Mr T. OUTTAS, Mr M. BRIOUA et Mme A. DERARDJA, pour leur contribution préalable à ce travail et l'aide qu'ils m'ont apportée.

à tous les collègues enseignants du Département de Mécanique, à qui j'exprime ma reconnaissance pour leur amitié et leur disponibilité permanente.

Résumé

L'étude des déformations élastiques associées aux réseaux interfaciaux de dislocations représente un domaine qui n'a été exploité que partiellement malgré son importance dans l'explication des propriétés physiques des matériaux. Ceci est souvent dû à la complexité d'analyser le modèle caractérisé par la microscopie électronique à transmission (MET) ou la microscopie électronique à transmission, haut résolution (METHR) dans les conditions réelles, entre autres l'anisotropie de deux matériaux. Dans ce travail, les champs élastiques d'un réseau unidirectionnel de dislocations de misfit placé à l'interface d'un matériau multicouche sont déterminés en utilisant une analyse par série de Fourier et en considérant l'élasticité anisotrope particulière à chaque cristal. Les coefficients de cette série et les termes définissant la géométrie du réseau interfacial sont déterminés numériquement. Les termes comportant les coefficients de Fourier constituent les éléments second membre d'une matrice 24x24 pour le système bicristal mince, 18x18 pour le système couche sur substrat et 12x12 pour le système infini. Différentes applications sont présentées pour les bicristaux Al/Al, Cu/Cu et Al/Cu.

Mots clés : Dislocations Bilame mince, Misfit, Elasticité, surfaces libres

Abstract

The study of the elastic deformations associated with interfacial dislocation networks represent a domain which is partly treated, although its importance explain physical properties of materials. It is often due to complexity of the analysis of the pattern featured by the transmission electron microscopy (TEM) or high resolution transmission electron microscopy (HRTEM) in real conditions, such as anisotropic material characteristics. In this work,. The elastic fields of an unidirectionnel of misfit dislocations placed at the interface of an multi-layer material are obtained using a double Fourier series analysis and by considering the anisotropic elasticity own to each cristal. The coefficients of this series which defined the interfacial network geometries are determined numirecally. The terms which involve the Fourier coefficients constitutes the second elements of the 24x24 matrix for the thin bifoil, 18x18 matrix for the epilayer/ substrate and 12x12 matrix for infinite bicristal. Various applications are presented for the bicrystals Al/Al , Cu/Cu and Al/Cu.

Keywords: Dislocations, Thin bicristal, Misfit, Elasticity, Free surfaces

Liste des Symboles

C_{ijkl}^+, C_{ijkl}^-	Constantes élastiques relatives au cristal (+) et au cristal (-)
ε	Tenseur de déformation
ε_{kl}	Tenseur de déformation relatif au champ de déplacement u_k^0
u_k	Champ de déplacement généralisé exprimé en série de Fourier.
n	Nombre d'harmonique utilisés pour la sommation dans la série de Fourier.
$1/g = \Lambda$	Période
b_1, b_2	Composantes du vecteur de Burgers
σ_{ij}	Champ de contrainte
σ_{1k}	Contrainte normale suivant l'axe Ox_1 perpendiculaire à l'interface
$\lambda_{\alpha k}^{\epsilon}, L_{\alpha ij}$	Constantes complexes obtenus par la résolution du système d'équations homogène
$X_{\alpha}^{(n)}, Y_{\alpha}^{(n)}$	Inconnues complexes du système globale à résoudre pour ($\alpha = 1,2,3$)
h_1	Epaisseur de la couche
a_{Al}, a_{Cu}	Paramètres de maille des cristaux Al et Cu
Δu	Déplacement relatif à l'interface
u^+, u^-	Déplacement dans le cristal (+) et (-)
K_j	Coefficient du polynôme du $6^{\text{ème}}$ degré p_{α}
r_{α}, s_{α}	Partie réelle et partie imaginaire de p_{α}

Liste des Acronymes

M.E.T.	Microscopie Electronique à Transmission.
M.E.T.H.R.	Microscopie Electronique à Transmission Haute Résolution.
S.T.M.	(Scanning Tunneling Microscopy) Microscopie à Effet Tunnel.
DMs	Dislocation de Misfit.

Table Des Matières

Introduction générale.....	1
Chapitre 1 : Rappels Bibliographiques	
1.1.Introduction	4
1.2. Travaux expérimentaux	4
1.3. Travaux théoriques :.....	10
1.3.1 En isotropie.....	10
1.3.2 En anisotropie.....	16
Chapitre 2 : Formulation mathématique des champs élastiques pour le cas du réseau unidirectionnel de DMs	
2.1 Introduction	14
2.2 Rappel sur les dislocations intrinsèques et extrinsèques.....	22
2.3 Géométrie du problème.....	24
2.4 Détermination du champ déplacement.....	24
2.4.1 Expression finale du champ des déplacements.....	29
2.5 Champ des contraintes.....	30
Chapitre 3 : Solution explicite en élasticité anisotrope	
3.1 Introduction.....	33
3.2 Première configuration: cas du bicristal mince	33
3.2.1 Conductions aux limites.....	34
3.2.1.1 Conditions en déplacement.....	34
3.2.1.2 Conditions en contraintes..	35
3.2.1.3 Système d'équation réel 24 x 24 et matrice globale associée.....	35
3.3 Deuxième configuration: cas du milieu semi infini.....	41
3.3.1 Conditions en déplacement.....	41
3.3.2 Conditions en contraintes..	41
3.3.3. Système d'équation réel 18 x 18 et matrice globale associée.....	42
3.4 Troisième configuration: cas du milieu infini.....	45
3.4.1 Conditions en déplacement.....	45
3.4.2 Conditions en contraintes..	45

3.4.3. Système d'équation réel 12 x 12 et matrice globale associée.....	46
---	----

Chapitre 4: Applications Numériques

4.1 Introduction.....	48
4.2 Etapes de calcul du programme.....	48
4.3 Organigramme globale du programme.....	50
4.4 Première configuration: cas du bicristal mince	51
4.4.1 Matériaux utilisés	51
4.4.2 Calcul d'erreur à l'interface	51
4.4.3 Champ des déplacements	53
4.4.4 Champ des contraintes.....	55
4.4.4.1 Bicristal homogène (anisotrope).....	55
4.4.4.2 Bicristal hétérogène (anisotrope).....	58
4.5 Deuxième configuration: couche sur substrat.....	61
4.6 Troisième configuration milieu infini	62
4.6.1 Bicristal homogène.....	62
4.6.2 Bicristal hétérogène.....	66
4.7 Comparaison avec les résultats obtenus en élasticité isotrope.....	68
4.7.1 Première configuration bilame mince.....	68
4.7.1.1 Champs des déplacements.....	69
4.7.1.2 Champs des contraintes.....	70
4.7.1.2.1 Bicristal homogène.....	70
4.7.1.2.2 Bicristal hétérogène.....	74
4.7.2 Deuxième configuration couche sur substrat.....	75
4.7.3 Troisième configuration milieu infini	76
4.7.1.2.1 Bicristal homogène.....	76
4.7.1.2.2 Bicristal hétérogène.....	80
Conclusion générale	83

Références bibliographiques.

Annexe.

Liste des figures

- Figure 1.1** - Analyse numérique du champ de déplacement autour d'une double singularité à une épaisseur de $10d$, (a) simulation de l'état déformé, le cœur d'une dislocation à 90° est indiqué par la flèche. (b) Image M.E.H.R. à contraste inversé montrant les positions atomiques en blanc et les défauts, les croix sont les positions théoriques. 6
- Figure I.2** - Topographies des images S.T.M. observées à l'interface de Au/ (111) Ni. 7
- Figure 1.3** - Calcul de l'énergie par atome Au pour deux structures d'interface différentes en fonction de la périodicité de la superstructure. 7
- Figure 1.4** - Image M.E.T.H.R. de l'hétéro-interface μ/γ sur laquelle est superposé le champ des déplacements théoriques des colonnes atomiques (points noirs). Les positions expérimentales des colonnes correspondent aux taches blanches. Les facettes théoriques sont indiquées par les traits blancs. 8
- Figure 1.5** - (a) Image S.T.M d'une couche de 5-ML d'InAs croissante sur GaAs(110) à la température 420°C . Les dislocations coins sont représentées par les lignes noires le long de $[001]$. (b) Vue en perspective de l'image S.T.M. de InAs/ GaAs (110), la surface indique les principales quantités mesurée à partir des données S.T.M. pour le réseau de Dislocations coins. A=déplacement vertical, B=largeur max à la mi-hauteur, C=espacement entre dislocations. 8
- Figure 1.6.** (c) Déplacement vertical négatif mesuré expérimentalement à partir d'images S.T.M. de InAs/GaAs(110) en fonction de l'épaisseur de la couche InAs. 9
(d) FWHM mesuré expérimentalement à partir d'images S.T.M de InAs/GaAs(110) en fonction de l'épaisseur de la couche InAs.
- Figure 1.7** - Image Cl des dislocations de misfit dans GaAs/In_{0.15}Ga_{0.85}As(25nm)/GaAs, (a) configuration originale, (b) après 30 s à 1040 K. 10
- Figure 1.8** - Dislocations de misfit dans GaAs/In_{0.2}Ga_{0.8}As(20 nm)/GaAs, (c) configuration originale, (d) après 30 s à 1040 K. 11
- Figure 1.9** - Courbe d'équi-contraintes $\sigma_{11}=\pm 300\text{MPa}$ tracée pour une distribution coin, $b=a/2[011]\text{Al}$ placée sur l'une des deux hétéro-interfaces d'un milieu tricouches Al/Al₂Cu/Al 13
- Figure I.10** - Champs de déplacement des bilames minces Al / Al₂Cu sous l'effet de dislocations coins interfaciales, le champ u est multiplié par un facteur 3 pour plus de clarté. Les droites horizontales représentent les surfaces libres et l'interface non déformée. où $b // O_x$ 14
- Figure 1.11** - Courbes d'équi-contraintes σ_{11} (en GPa) pour le composite SiO₂/Si/(001)GaAs. 14
- Figure 1.12** - Courbes d'équi-contraintes σ_{22} (en GPa) pour le composite SiO₂/Si/ (001) GaAs. 15
- Figure 1.13** - Lame mince de silicium courbée par une dislocation coin avec $\mathbf{b} = \frac{1}{2} 110 // O_x$. Un motif carré de points (période \mathbf{b} le long de O_x) est déformé élastiquement. 15

- Figure 1.14** - Courbes iso-contraintes 0 and ± 40 MPa dans une lame ultramince ($h = 16$ nm) de silicium déformée par une dislocation coin de vecteur de Burgers $\mathbf{b} = \frac{1}{2} 110//Ox$. Les signes + et - indiquent les régions à contraintes positives et négatives. 16
- Figure 1.15** - représentation de l'hétérojonction (001) CdTe / (001) GaAs, (a) position des colonnes atomiques prédites par le calcul de Bonnet, les atomes sont différenciés par 4 symboles différents, C est le milieu entre deux cœurs de dislocations, (b) Image M.E.T.H.R. montrant le bon accord entre les positions théoriques (les croix noires) et les position expérimentales (zones grises sombres), sauf bien sur au voisinage des cœurs. 18
- Figure 1.16** - Courbes d'équi-contraintes $\sigma_{11} = \pm 150$ MPa pour une dislocation placée à l'interface d'un bilame mince Al / Al₂Cu (a) $b // Ox_1$, (b) $b // Ox_2$ 19
- Figure 1.17** - Champ de déplacement des surfaces libres pour différents bicristaux InAs/(111)GaAs, C_{ij} sont anisotropes, d 'épaisseurs ($\pm 2.aInAs$), ($\pm 4.aInAs$), ($\pm 6.aInAs$), ($\pm 8.aInAs$), ($\pm 10.aInAs$). 19
- Figure 1.18** - Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 400$ MPa pour une dislocation placée à l'interface d'un matériau tricouches NiSi₂/ NiSi₂/GaAs; C_{ij} Anisotropes, $b // Ox$, 20
- Figure 2.1** - Représentation de dislocations extrinsèques réparties périodiquement le long de l'interface 22
- Figure 2.2** - Représentation de dislocations intrinsèques réparties périodiquement le long de l'interface 23
- Figure 2.3** - Déplacement relatif de deux cristaux Courbes sawtooth et stair-case relatives aux dislocations intrinsèques et extrinsèques respectivement. 23
- Figure 2.4** - Deux milieux +/-, avec un réseau unidirectionnel de dislocations à l'interface, l/g est la période. C^+_{ijkl} et C^-_{ijkl} sont les constantes élastiques des deux milieux, h^+ et h^- sont les épaisseurs des deux milieux. 24
- Figure 3.1** - bicristal mince +/-, avec une dislocation à l'interface, C^+_{ijkl} et C^-_{ijkl} sont les constantes élastiques des deux milieux. 34
- Figure 3.2**- Couche/Substrat +/-, avec un réseau unidirectionnel de dislocations à l'interface, C^+_{ijkl} et C^-_{ijkl} sont les constantes élastiques des deux milieux, h_1 est l'épaisseur de la couche. 41
- Figure 3.3**- milieu infini +/-, avec un réseau unidirectionnel de dislocations à l'interface, C^+_{ijkl} et C^-_{ijkl} sont les constantes élastiques des deux milieu. 45
- Figure 4.1** - Représentation du déplacement relatif interfacial. 52
- Figure 4.2** - Etat initial des unités structurales (sans défauts) représenté dans un plan (x_1, x_2) 53
- Figure 4.3** - Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Cu sous l'effet de dislocation coin interfaciale, C_{ij} anisotropes, $b // Ox_2$ 54

Figure 4.4 - Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Cu sous l'effet de dislocation coin interfaciale, Cij anisotropes, $b // Ox_1$	54
Figure 4.5 - Courbes d'equi-contrainte σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un bilame mince Al/Al, Cij anisotropes, (a,b et c) $b // Ox_1$, (d, e et f) $b // Ox_2$	56
Figure 4.6 - Courbes d'equi-contrainte σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un bilame mince Cu/Cu, Cij anisotropes, (a,b et c) $b // Ox_1$, (d, e et f) $b // Ox_2$	58
Figure 4.7 - Courbes d'equi-contrainte σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un bilame mince Al/Cu, Cij anisotropes, (a,b et c) $b // Ox_1$, (d, e et f) $b // Ox_2$	60
Figure 4.8 - Courbes d'equi-contrainte σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un milieu semi infini Al/Cu, Cij anisotropes, (a,b et c) $b // Ox_1$, (d, e et f) $b // Ox_2$	62
Figure 4.9 - Courbes d'equi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un milieu infini Al/Al, Cij anisotropes, (a,b et c) $b // Ox_1$, (d, e et f) $b // Ox_2$	64
Figure 4.10 - Courbes d'equi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un milieu infini Cu/Cu, Cij anisotropes, (a,b et c) $b // Ox_1$, (d, e et f) $b // Ox_2$	65
Figure 4.11 - Courbes d'equi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un milieu infini Al/Cu, Cij anisotropes, (a, b et c) $b // Ox_1$, (d, e et f) $b // Ox_2$	67
Figure 4.12 - Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Cu sous l'effet d'une dislocation coin interfaciale, (○) Cij quasi-isotropes et (+) Cij anisotropes, $b // Ox_2$	69
Figure 4.13 - Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Cu sous l'effet d'une dislocation coin interfaciale, (○) Cij quasi-isotropes et (+) Cij anisotropes, $b // Ox_1$	70
Figure 4.14 - Courbes d'equi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un bilame mince Al/Al, Cij quasi-isotropes, (a,b et c) $b // Ox_1$, (d, e et f) $b // Ox_2$	72
Figure 4.15 - Courbes d'equi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un bilame mince Cu/Cu, Cij quasi-isotropes, (a,b et c) $b // Ox_1$, (d, e et f) $b // Ox_2$	73
Figure 4.16 - Courbes d'equi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un bilame mince Al/Cu, Cij quasi-isotropes, (a,b et c) $b // Ox_1$, (d, e et f) $b // Ox_2$	75
Figure 4.17 - Courbes d'equi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un milieu semi infini Al/Cu, Cij quasi-isotropes, (a,b et c) $b // Ox_1$, (d, e et f) $b // Ox_2$	76

Figure 4.18 - Courbes d'equi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un milieu infini Al/Al, Cij quasi-isotropes, (a,b et c) b//Ox ₁ , (d, e et f) b//Ox ₂	78
Figure 4.19 - Courbes d'equi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un milieu infini Cu/Cu, Cij quasi-isotropes, (a,b et c) b//Ox ₁ , (d, e et f) b//Ox ₂	79
Figure 4.20 - Courbes d'equi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un milieu infini Al/Cu, Cij quasi-isotropes, (a,b et c) b//Ox ₁ , (d, e et f) b//Ox ₂	81
Figure 4.21 - Courbes d'equi-contraintes $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 Gpa obtenus à partir d'expression analytique pour les bicristaux infini (a) Al/Al et (b) Cu/Cu, Cij isotropes, b//Ox ₁ .	82

Liste des Tables

Tableau 4.1 - Constantes d'élasticité anisotropes pour Al et Cu. [79,82]	51
Tableau 4.2 - Paramètres cristallins, modules d'élasticité et constantes élastiques isotropes pour Al et Cu [71-79-80]	68

Introduction générale

Depuis les deux dernières décennies, l'industrie microtechnique a connu un essor très important. Les techniques de fabrication ont évolué et ont ainsi permis une réduction du coût de production. Aujourd'hui, de nombreuses applications intègrent des dispositifs de taille réduite. En effet, les industries automobile, aéronautique, biomédicale cherchent à miniaturiser et alléger leurs produits tout en demandant une fiabilité accrue. La demande est également très forte dans le domaine des télécommunications ou de l'électronique grand public (par exemple : les capteurs de pression, de température, les accéléromètres, les transducteurs ou les micro-actionneurs qui convertissent une grandeur électrique en énergie).

D'autre part, les matériaux hétéroépitaxiaux sont des composés particulièrement intéressants pour ce type d'application. Les recherches s'orientent de plus en plus vers l'élaboration de couches minces déposées sur des substrats qui s'intégreront plus facilement dans le dispositif final. L'emploi de couches minces présente donc un avantage non négligeable : il permet la diminution de la taille des micro-systèmes tout en offrant la possibilité de les réaliser rapidement par des techniques de fabrication collective.

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

Dans la littérature spécialisée, il s'est avéré que nombre important de ces défauts interfaciaux se résumait essentiellement en des dislocations disposées plus ou moins régulièrement suivant l'orientation cristallographique de la face du substrat et des traitements de recuit subis par l'échantillon, la densité et le caractère de ces dislocations dépendent des écarts paramétriques et angulaires entre les cristaux le long de l'interface, mais aussi de la rapidité avec laquelle a été refroidi l'échantillon.

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

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

R.Bonnet et col [4] en 1994 reprennent le problème de Chou [1], mais pour une dislocation coin. En 2000, R.Bonnet [5] a proposé une solution analytique pour la détermination du champ élastique isotrope (déplacement, contrainte et énergie) d'un composite A/B/C déformé par un réseau rectiligne de dislocations de misfit, localisé à l'hétérointerface B/C.

Dans le cas de réseaux plus ou moins complexes de dislocations, les champs élastiques ont été déterminés par Bonnet [6], Chou et col [1] et Willis et col [7].

En ce basant sur la méthode de Bonnet [8], permettant l'obtention de solutions analytiques explicites, nous proposons dans ce travail, pour la première fois, la détermination des champs élastiques générés à l'interface d'un matériau multicouches par des réseaux unidirectionnels de dislocations intrinsèques, dans le cas d'une élasticité anisotrope des cristaux.

Nous verrons que dans ce cas une équation polynomiale du sixième degré est établie et résolue numériquement, le champ élastique de déformation (déplacements et contraintes) est déterminé avec une double précision.

Ce travail est divisé en 4 chapitres. Une synthèse des résultats bibliographiques relatifs au sujet est présentée dans le premier chapitre. Le deuxième chapitre est consacré au développement du calcul analytique des champs de déplacements et de

contraintes en élasticité anisotrope. Dans le troisième chapitre nous présentons la géométrie du problème et la méthode utilisée. Le Quatrième chapitre est réservé aux applications numériques pour les cas suivants: Al/Al, Cu/Cu et Al/Cu,

Enfin, une conclusion générale parachève le travail réalisé.

Chapitre 1

Rappels bibliographiques

1.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à une synthèse des résultats les plus significatifs concernant les défauts interfaciaux et particulièrement les réseaux de dislocation de misfit (MDs) tapissant les interfaces cristallines.

Un rappel des travaux expérimentaux est présenté en premier notamment en microscopie électronique en transmission (M.E.T), à haute résolution (M.E.T.H.R) ou encore en microscopie à effet tunnel (STM), et sera suivi d'un autre sur les principaux modèles théorique établis et appliqués dans la littérature.

1.2 Travaux expérimentaux.

L'étude structurale des hétéro-interfaces a beaucoup bénéficié ces dernières années des progrès réalisés en M.E.T et M.E.T.H.R. Ainsi en 1953, Hedges et Mitchel [9] révèlent l'existence de lignes de dislocations à l'intérieur de cristaux de bromure de cuivre, ces lignes se joignent les unes les autres, en nœuds triples, formant de larges cellules. Ces différents arrangements observés sont de deux types: en lignes parallèles précédemment étudiés par différents auteurs (Burgers [10], Bragg [11], Van der Merwe [12], Read et Shockly [13], [14]) ou bien en arrangements hexagonaux périodiques.

En M.E.T. et dans le cadre de l'élasticité isotrope, plusieurs travaux ont été effectués pour examiner la nature des contrastes liés aux dislocations situées près des surfaces libres. Ainsi Howie et Whelan [15] ont calculé des profils d'intensité pour des dislocations vis parallèles à une surface libre voisine; Tunstall et al. [16] observent le contraste d'une dislocation vis

émergeant normalement à une surface libre; enfin Humble [17] présente des images simulées de dislocations inclinées par rapport à la surface libre.

Le contraste d'une dislocation située à proximité d'une surface libre qui lui est parallèle est parfois inattendu, comme cela a déjà été souligné par Clarebrough [18]. Cet auteur note que, dans un alliage Cu-8at.%Si, un segment de dislocations $1/2[011]$ a des contrastes qui n'obéissent pas au critère d'invisibilité $g \cdot b = 0$ de Hirsch et al. [19]. Ce vecteur de burgers fut identifié à l'aide d'un programme de simulation construit par Head et al. [20], programme qui n'est pas construit pour prendre en compte l'effet de la relaxation de surface et qui ne fonctionne pas pour une dislocation strictement parallèle à la surface.

En 1987, R. Bonnet et Morton [21] sont arrivés à calculer le contraste en M.E.T. à deux ondes d'une dislocation rectiligne placée dans un cristal élastiquement anisotrope, à des distances variables des surfaces libres. Ce calcul a permis de vérifier que dans certains cas, les effets de surface sont loin d'être négligeable:

(i) ils peuvent affecter de grandes épaisseurs. Ainsi, une dislocation coin dans Ni_3Al , de vecteur de burgers $[001]$ parallèle à la normale de la lame mince, placée près du plan moyen d'une lame mince d'épaisseur voisine de 180 nm, a un contraste qui diffère sensiblement de celui calculé avec un champ élastique correspondant à un milieu infiniment étendu. Ce contraste évolue rapidement plus près des surfaces libres.

(ii) de faibles variations de la distance à la surface peuvent modifier considérablement le contraste de la dislocation. Ceci indique que le critère d'invisibilité de Hirsch et al [19] n'est pas significatif pour une dislocation parallèle et proche d'une surface libre, aussi bien en élasticité isotrope qu'anisotrope.

Notons que plusieurs investigations expérimentales et théoriques ont été présentées pour déterminer les contraintes internes à l'intérieur des phases γ et γ' du superalliage CMSX-2. Les observations en Microscopie électronique montrent la présence d'hétéro-interfaces γ / γ' parallèles au plan $\{740\}$ contenant des familles uniques de dislocations coin intrinsèques orientées suivant $\langle 001 \rangle$ (Ati [22]).

Dans un travail récent, J. M. Kang [23] étudia la relaxation par les dislocations d'interface des hétérostructures à fort désaccord paramétrique prenant GaAs/Si (001) et GaSb/GaAs (001) comme modèle. Il conclut que les dislocations d'interface de type 90° sont

les plus convenables pour la relaxation du désaccord paramétrique à cause de la supériorité d'efficacité et de stabilité aux autres dislocations comme celles de 60° . Dans GaSb/GaAs, la croissance en îlots est étudiée en changeant les conditions de croissance telles que l'épaisseur de la couche, la température de dépôtetc.

En 1994, M.Loubradou et al. [24] Ont mis l'accent sur l'aspect microstructurale de la croissance épitaxiale d'une couche InP sur un substrat préparé InP(001), dans les figures 1.1 on peut voir l'effet du champ de déplacement élastique produit par des dislocations de translations dont les cœurs sont localisés en différents points de l'interface.

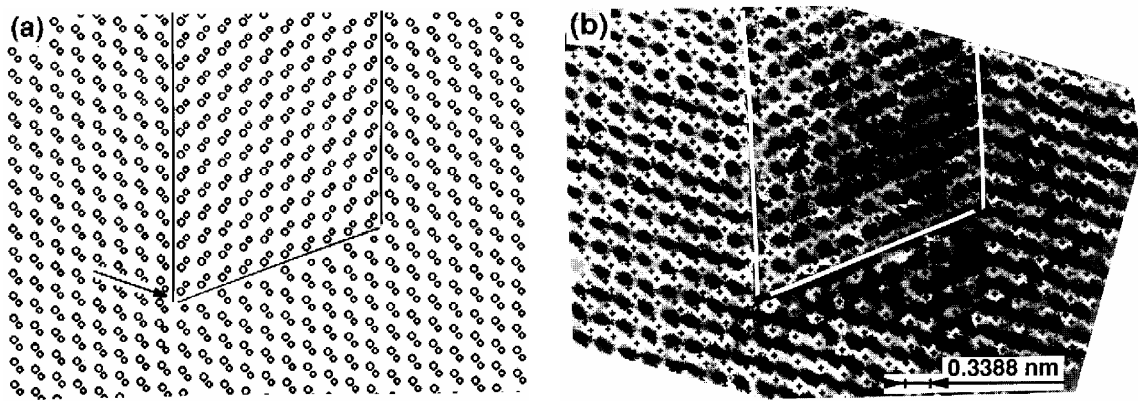


Figure 1.1 - Analyse numérique du champ de déplacement autour d'une double singularité à une épaisseur de $10d$, (a) simulation de l'état déformé, le cœur d'une dislocation à 90° est indiqué par la flèche. (b) Image M.E.H.R. à contraste inversé montrant les positions atomiques en blanc et les défauts, les croix sont les positions théoriques[24].

En 1995, J.Jacobsen et al.[25], en étudiant la croissance d'une monocouche de Au croissante sur Ni(111), ont montré que cette croissance conduit à la formation d'un réseau ordonné de boucles de dislocations de misfit en dessous du substrat Ni(111). Ces auteurs ont remarqué que la nouvelle structure de l'interface présente trois aspects différents par rapport à une structure normale de DMs, le premier aspect, c'est qu'elle se forme déjà pendant la croissance d'une seule monocouche de Au figure 1.2.a, en second, elle se forme dans le substrat et non pas dans la couche figure 1.2.b, et le troisième aspect, c'est qu'elle est contrôlée par l'énergie de l'interface plutôt que par le champ de déformation des deux phases figure 1.3.

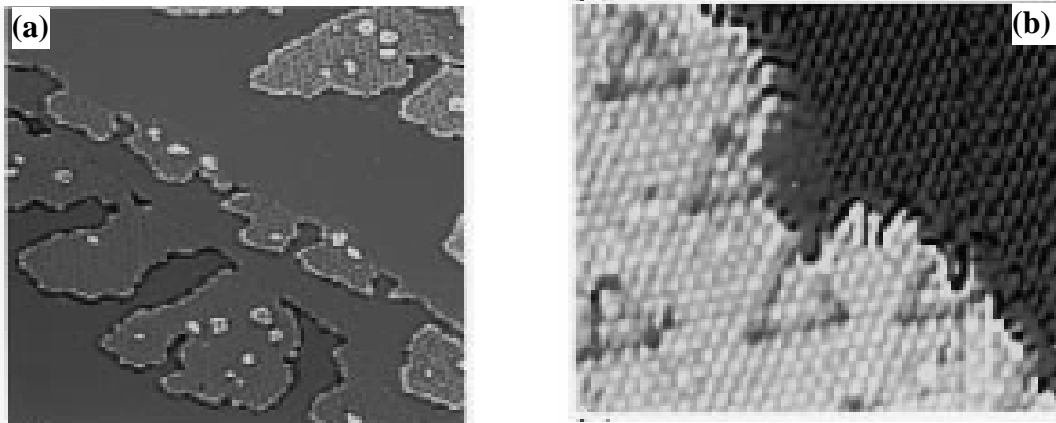


Figure 1.2 - Topographies des images S.T.M. observées à l'interface de Au/ (111) Ni.
 (a) naissance d'îlots Au aux premières étapes de la croissance dans le substrat Ni.
 (b) apparition de la structure triangulaire dans le substrat [25].

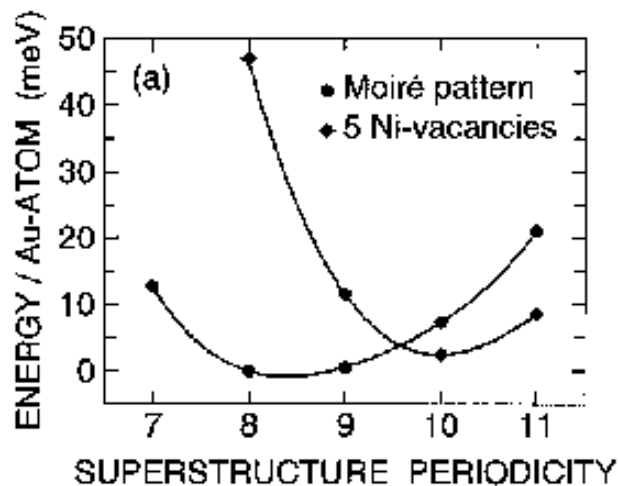


Figure 1.3 - Calcul de l'énergie par atome Au pour deux structures d'interface différentes en fonction de la périodicité de la superstructure [25].

En 1996, R. Bonnet et col. [26] ont utilisé la M.E.T.H.R. pour faire une comparaison visuelle entre les champs des déplacements expérimentaux (taches blanches) et théoriques (points noirs) des colonnes atomiques figure 1.4. Cette comparaison est tout à fait satisfaisante puisque les points noirs demeurent tous à l'intérieur des contrastes blancs, sauf au cœur de la DM bien entendu.

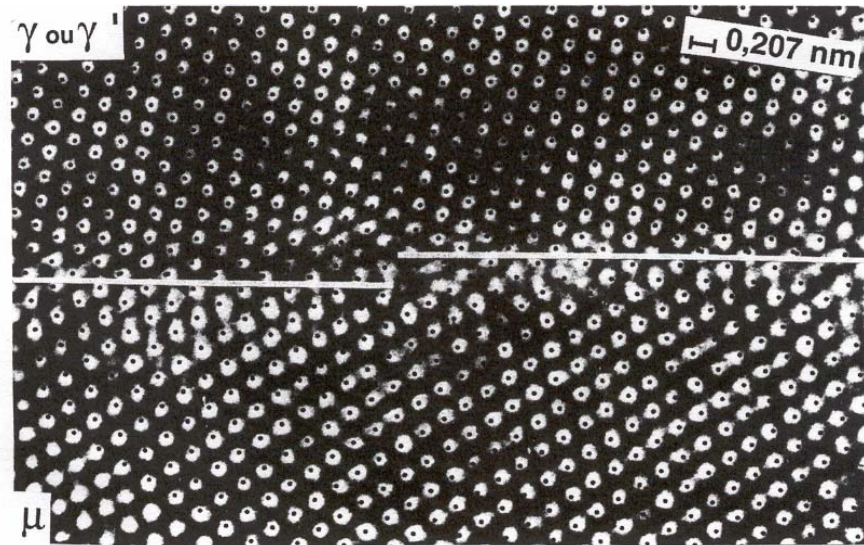


Figure 1.4 - Image M.E.T.H.R. de l'hétéro-interface μ/γ sur laquelle est superposé le champ des déplacements théoriques des colonnes atomiques (points noirs). Les positions expérimentales des colonnes correspondent aux taches blanches. Les facettes théoriques sont indiquées par les traits blancs [26].

En 1998, J.G.Belk et al. [27], ont utilisé des images S.T.M pour obtenir les dimensions du champ de déplacement à la surface d'InAs croissante sur du GaAs (110). Le déplacement des atomes dans le film, du au champ de déformation des dislocations coins, a été obtenu en mesurant la profondeur et la largeur de la surface obtenue en fonction de l'épaisseur de la couche d'InAs (<30ML) figures 1.5 et 1.6.

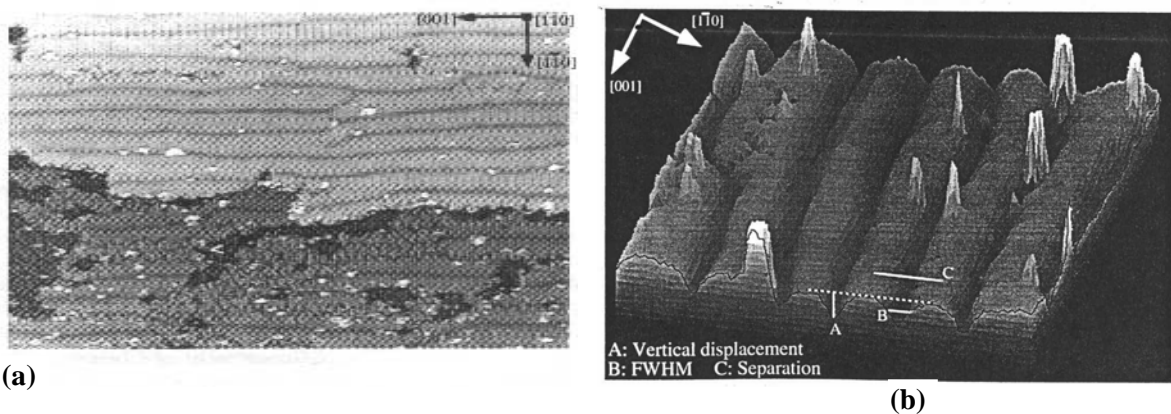


Figure 1.5 - (a) Image S.T.M d'une couche de 5-ML d'InAs croissante sur GaAs(110) à la température 420 °C. Les dislocations coins sont représentées par les lignes noires le long de [001]. (b) Vue en perspective de l'image S.T.M. de InAs/ GaAs (110), la surface indique les principales quantités mesurée à partir des données S.T.M. pour le réseau de Dislocations coins. A=déplacement vertical, B=largeur max à la mi-hauteur, C=espacement entre dislocations [27].

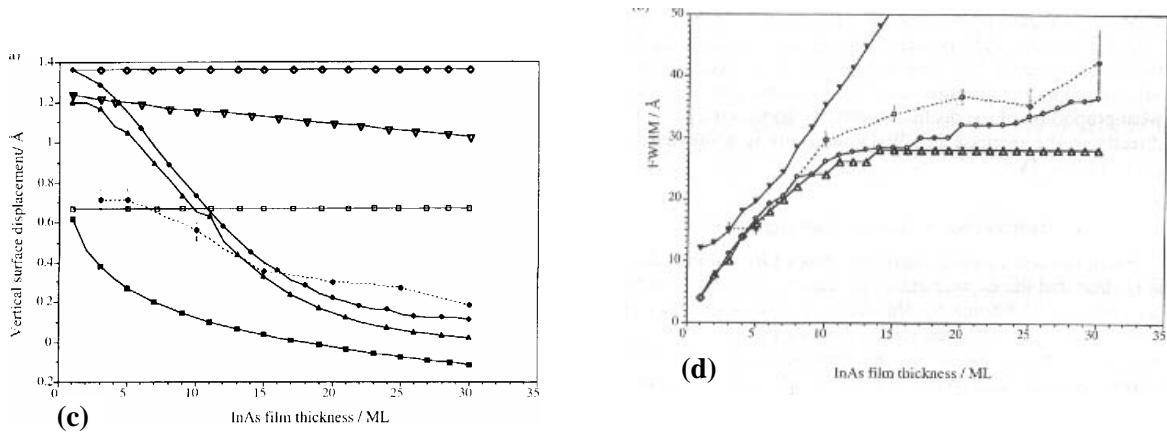
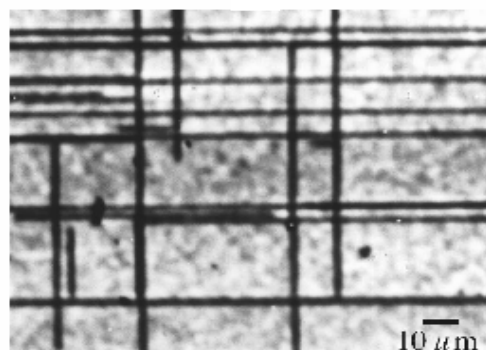


Figure 1.6. (c) Déplacement vertical négatif mesuré expérimentalement à partir d'images S.T.M. de InAs/GaAs(110) en fonction de l'épaisseur de la couche InAs. (d) FWHM mesuré expérimentalement à partir d'images S.T.M de InAs/GaAs(110) en fonction de l'épaisseur de la couche InAs [27].

X.W.Liu et al. [28] ont présenté les structures de dislocations pour les hétérostructures GaAs/ $\text{In}_x\text{GaAs}_{1-x}$ /GaAs en fonction de la température. Dans chaque cas l'épaisseur de la couche est supérieure à sa valeur critique. Ces auteurs ont montré la formation de nouvelles dislocations coins 90° aux interfaces des hétérostructures GaAs/ $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ /GaAs et GaAs/ $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ /GaAs durant leur maintien pendant une durée de 30s à la température 1040 K. Ces dislocations forment de nouveaux arrangements orthogonaux en addition aux réseaux de dislocations coins 60° figure 1.7 et figure 1.8.

(a)



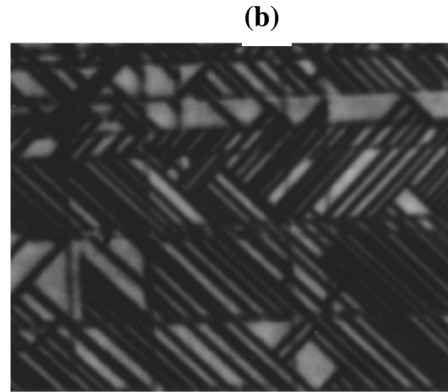


Figure 1.7 - Image CI des dislocations de misfit dans GaAs/In_{0.15}Ga_{0.85}As(25nm/GaAs) (a) configuration originale, (b) après 30 s à 1040 K [28].

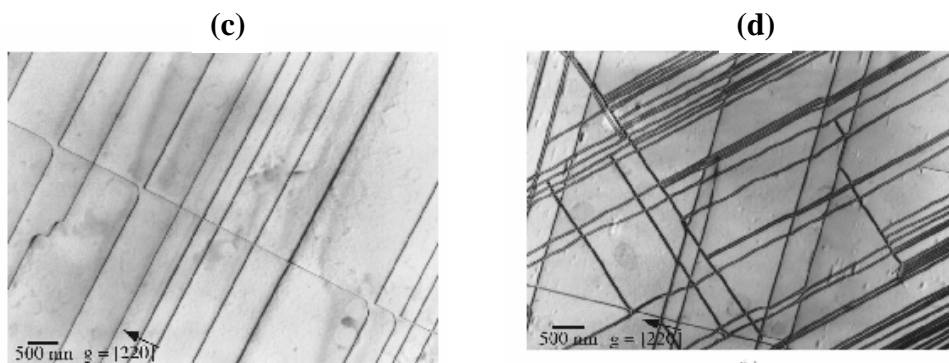


Figure 1.8 - Dislocations de misfit dans GaAs/In_{0.2}Ga_{0.8}As(20 nm)/GaAs (c) configuration originale, (d) après 30 s à 1040 K [28].

1.3 Travaux théoriques

1.3.1 En isotropie

Au début, les expressions analytiques des déplacements et des contraintes autour d'une dislocation rectiligne dans un milieu isotrope homogène ont été déterminées pour une dislocation vis par Volterra [29] et pour une dislocation coin par Burgers [10].

Tout d'abord nous tenons à signaler que les résultats des travaux donnés en bibliographie ont porté sur deux types de réseaux de dislocations:

- les dislocations de translation de Volterra [29] appelées communément "dislocations extrinsèques"
- les dislocations de Frank et Vander [30] appelées en anglais "misfit dislocation" qu'on appelle dislocations intrinsèques par opposition aux dislocations extrinsèques.

Utilisant la théorie classique de l'élasticité isotrope, Read et Shockley [14] d'une part et Vander Merwe [30] d'autre part déterminent le champ de contraintes et l'énergie d'un réseau de dislocations à l'interface séparant deux milieux différents. Plus récemment, Hokanson et Winchell [31] calculèrent l'énergie des sous-joints de torsion de plan (0001) dans les monocristaux de zinc pour différentes configurations.

Le cas d'une dislocation qui se trouve le long de l'arête d'une interface dièdre séparant deux milieux isotropes soudés a été résolu par R. Bonnet [32] en 1981. Les expressions analytiques des contraintes, des déplacements et de l'énergie de ligne autour de la dislocation sont déterminées à partir de la résolution d'un système 12 équations à 12 inconnues. Lorsque l'angle dièdre tend vers π , Ces expressions s'identifient à celles obtenues par Nakahara et al. [33] dans le cas d'une interface plane. Des exemples particuliers sont traités pour le champ des contraintes lorsque le rapport des modules de cisaillement μ^+/μ^- est égal 2 et 1/2 et l'angle dièdre égale à 60° .

Concernant l'effet de surface sur le champ des déplacements et de contraintes, les seules solutions explicites disponibles dans l'approximation de l'élasticité isotrope pour un milieu homogène enveloppent le cas d'une dislocation vis parallèle ou perpendiculaire aux surfaces libres (Leibfried et Dietze [34], Eshelby et Stroh [35]) et celle d'une dislocation coin parallèle aux deux surfaces libres et située à mi-hauteur de la lame (Moss et Hoover [36], Nabarro et Kostian [37]).

En 1981, R. Bonnet [8] en appliquant une nouvelle méthode basée sur une analyse en séries de Fourier, a déterminé les champs de déplacement et de contrainte proche d'un joint plan séparant deux phases ayant une ou deux périodicité de défauts. Une application numérique a été alors proposée pour un réseau plan de dislocations intrinsèques ou extrinsèques afin d'examiner l'influence de la période et du module de Young sur l'énergie élastique stockée à l'interface, il est arrivé aux résultats suivants:

1/ L'énergie élastique emmagasiné dans le cas des dislocations vis est inférieure à celle emmagasiné par les dislocations coin.

2/ Une grande partie de l'énergie est emmagasinée dans la phase molle.

3/ L'énergie élastique des dislocations coin (b1,0,0) est toujours supérieure à celle des dislocations coin (0,b2,0) dès que les gr_0 dépassent légèrement 0.009 (1/g: période, r_0 : rayon de coupure)

4/ Pour $\mu^+ = \mu^-$, l'énergie est légèrement inférieure à celle donnée par Read et Shockley [14].

Pour le cas d'une dislocation placée dans un bilame mince, Chu [38]; Gultin et Romanov [39] parviennent à calculer le champ des contraintes dans le bilame, au moyen de formules semi-analytiques. Par contre, le champ des déplacements n'est pas déterminé alors qu'il est utile à connaître en M.E.T.

Pour les multicouches, plusieurs tentatives ont été proposées pour résoudre les problèmes difficiles posés pour les milieux à n couches élastiquement hétérogènes. Ainsi le cas d'une dislocation vis a surtout retenu l'attention lorsque $n > 2$: Chou [40] considère une plaquette prise en sandwich entre deux milieux semi-infinis ($n = 3$); Oveçoglu et col [41] parviennent à tenir compte de trois couches minces déposées sur un substrat semi-infini ($n = 4$); Koehler [3] propose une solution pour un composite formé de couches alternatives de deux phases (n est infini).

Concernant le cas des couches épitaxiées sur substrat, où l'épaisseur de la couche à déposer joue un rôle important dans l'optimisation des caractéristiques du matériau, c'est Frank et Vander [30] en 1949, qui se sont attaqués les premiers ce problème en utilisant les propriétés élastiques des cristaux et les désaccords paramétriques des réseaux cristallins. Plus récemment, dans trois articles successifs, Vander Merwe [42] a amélioré son modèle en tenant en compte l'effet de l'épaisseur sur l'énergie élastique stockée dans le matériau, et présenta des applications aux accolements de faces (111) de cristaux cfc sur des faces (110) de cristaux cc cependant un double inconvénient apparaît dans ce travail:

- la considération d'un module de cisaillement propre à l'interface.
- la considération que les cristaux conservent leurs structures atomiques jusqu'à l'interface.

En admettant que les dislocations interfaciales sont extrinsèques, le champ élastique de telles dislocations à l'interface couche / substrat a été étudié en 1990 par Willis et col [43]. Ces auteurs parviennent à donner une solution explicite lorsque les deux milieux ont les mêmes propriétés élastiques, et que les dislocations sont purement vis. Pour les dislocation coin, ils donnent une solution en séries de Fourier qui nécessite néanmoins l'inversion numérique d'une matrice complexe 4×4 , pour chaque harmonique de la série.

En 1992, R. Bonnet et J. L. Verger-Gaugry [44] sont arrivés à donner la solution explicite complète du champ élastique (déplacements, contraintes, dilatations volumiques, énergie) d'une famille de dislocations réparties périodiquement le long d'une interface plane,

celle-ci séparant un cristal (d'épaisseur finie h) en épitaxie sur un substrat monocristallin semi-infini. Certains résultats obtenus récemment par Willis et col [43] pour des dislocations à caractère extrinsèque sont confirmés, notamment la présence dans la couche de contraintes moyennes dont les valeurs sont inversement proportionnelles à la période. Leur analyse indique que le champ des déplacements des dislocations extrinsèques ne diffère de celui des dislocations intrinsèques que par l'addition de termes linéaires. Les résultats sont étendues à un réseau carré de dislocations intrinsèques, avec des applications numériques au systèmes GaAs/Si et GaSb/GaAs .

Plus récemment en 1994, R.Bonnet et R.Zenati [4] ont estimé le champ élastique des déplacements d'une dislocation interfaciale rectiligne, placée sur l'une des deux interfaces d'un sandwich formé d'une plaquette mince séparant deux milieux semi-infinis, en adoptant une méthode par séries de Fourier dans le cas d'un précipité Al_2Cu très mince (2 nm) dans une matrice d'Aluminium. L'effet perturbateur de modules d'élasticité différents est représenté pour l'une des contraintes normale figure 1.9.

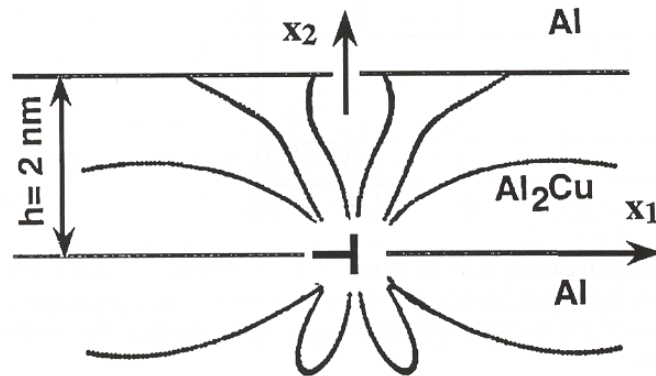


Figure 1.9 - Courbe d'équi-contraintes $\sigma_{11} = \pm 300 \text{ MPa}$ tracée pour une distribution coin $b = a/2[011]$ Al placée sur l'une des deux hétéro-interfaces d'un milieu tricouches Al/Al₂Cu/Al [4]

La même année aussi, R.Bonnet [45] a proposé une solution analytique, pour le calcul du champ des déplacements d'une dislocation inter faciale rectiligne placée à l'interface d'une lame mince biphasée, la lame étant formée de deux plaquettes soudées élastiquement isotropes, des applications sur le bicristal Al/Al₂Cu ont conduit à la représentation du champ de déplacement suivant deux directions du vecteur de Burgers figure 1.10.

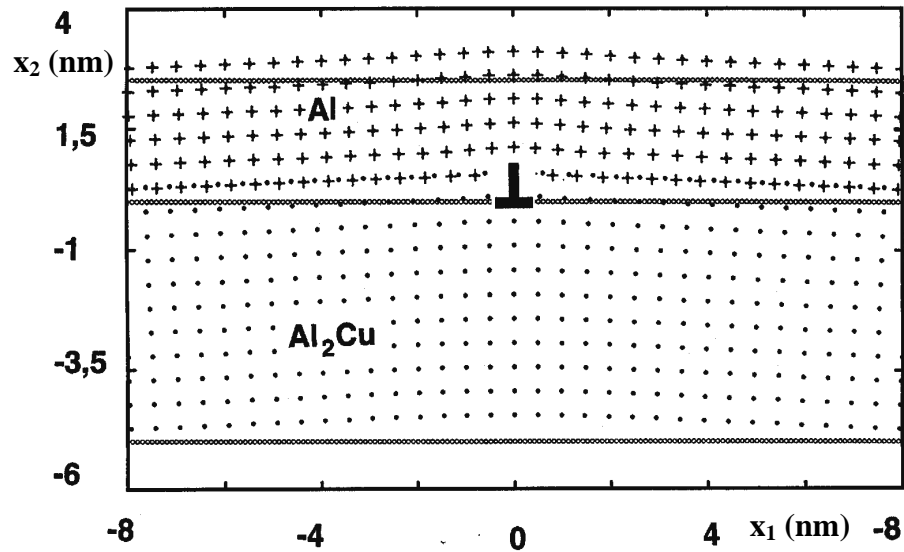


Figure I.10 - Champs de déplacement des bilames minces Al / Al₂Cu sous l'effet de dislocations coins interfaciales, le champ u est multiplié par un facteur 3 pour plus de clarté. Les droites horizontales représentent les surfaces libres et l'interface non déformée. où $b \parallel Ox_1$ [45].

En 2000, R.Bonnet [46] a proposé une solution analytique pour la détermination du champ élastique (déplacement, contrainte et énergie) d'un composite A/B/C déformé par un réseau rectiligne de dislocations de misfit, localisé à l'hétéro interface B/C.

Des applications sur le composite SiO₂/Si/(001) GaAs ont permis de présenter le champ des contraintes figures 1.11 et 1.12.

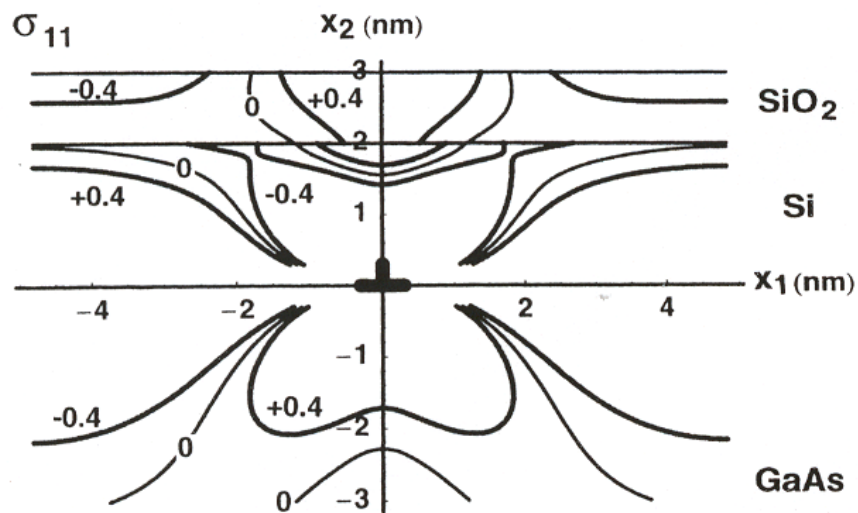


Figure 1.11 - Courbes d'équi-contraintes σ_{11} (en GPa) pour le composite SiO₂/Si/(001)GaAs [46].

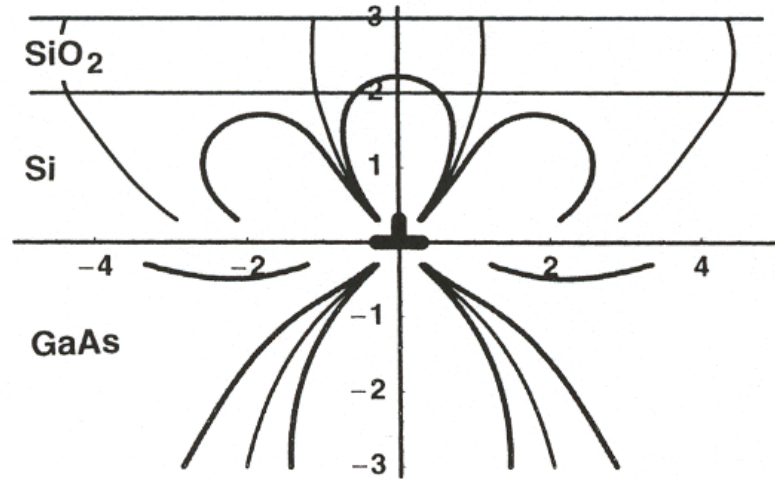


Figure 1.12 - Courbes d'équi-contraintes σ_{22} (en GPa) pour le composite $\text{SiO}_2/\text{Si}/(001) \text{GaAs}$ [46].

Très récemment encore, Le champ élastique d'un défaut cristallin parallèle aux deux surfaces libres d'une lame mince isotrope est étudié en 2003 par Bonnet [47], par l'exploitation des formules proposées par Kroupa 1959 [48], le présent auteur a préféré une nouvelle approche, plus globale puisqu'elle peut inclure n'importe quel vecteur \mathbf{b} . Cette approche est élémentaire puisqu'elle est basée sur l'application répétée de la solution d'un vieux problème résolu d'abord par Flamant en 1892 [49] à partir des formules de Boussinesq cité par Mandel 1966 [50].

Les figures 1.13 et 1.14 représentent le champ des déplacements et les répartitions des contraintes pour une lame ultramince de silicium et une dislocation avec $\mathbf{b} = \frac{1}{2} 110//Ox$.

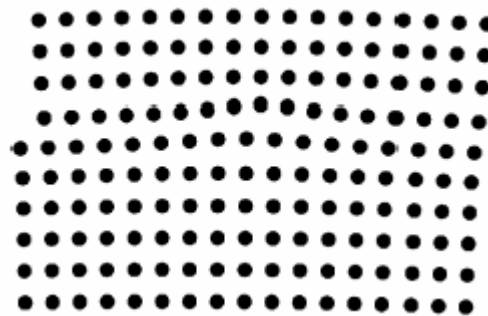


Figure 1.13 - Lame mince de silicium courbée par une dislocation coin avec $\mathbf{b} = \frac{1}{2} 110//Ox$. Un motif carré de points (période \mathbf{b} le long de Ox) est déformé élastiquement [47].

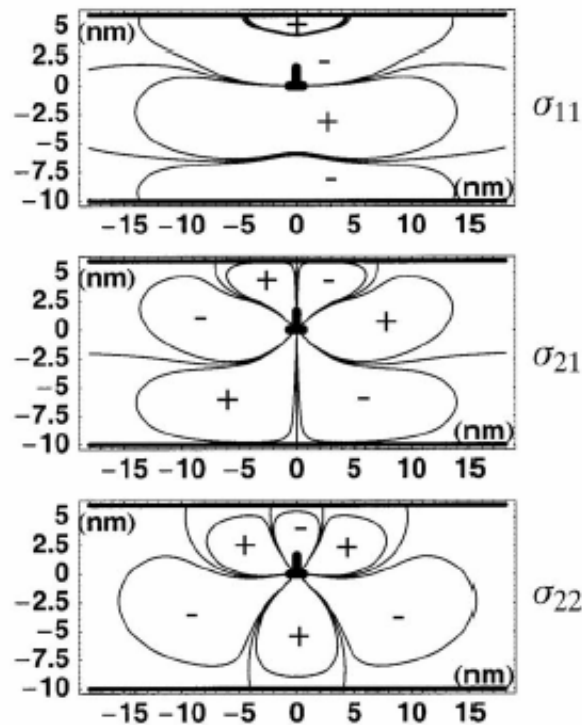


Figure 1.14 - Courbes iso-contraintes 0 and ± 40 MPa dans une lame ultramince ($h = 16$ nm) de silicium déformée par une dislocation coin de vecteur de Burgers $\mathbf{b} = \frac{1}{2} 110//Ox$. Les signes + et - indiquent les régions à contraintes positives et négatives [47].

1.3.2 En anisotropie

L'élasticité anisotrope a été introduite dans la théorie des dislocations par Eshelby, Read et Shockley [51] en 1953 pour calculer les champs des déplacements et des contraintes au voisinage d'une dislocation rectiligne dans un milieu homogène.

Le problème d'une dislocation rectiligne située à l'interface entre deux milieux élastiques anisotropes a reçu une attention particulière dans la littérature (Gemperlova et Saxl [52]; Tucker [53]; Clements [54]; Willis [55]; Braekhus et Lothe [56]); mais comme souligné par Pande et Chou [57], toutes les tentatives aboutissent à des formules compliquées et encombrées ce qui traduit le manque d'applications numériques à ce sujet. Ainsi Nakahara et Willis [58] montrent que les calculs effectués par Braekhus et Lothe [56] en 1971 sont basés sur des conditions aux limites inappropriées et posent des questions sur la validité des résultats obtenus.

En 1973, Barnett et Lothe [59] corrigent l'erreur de Braekhus et Lothe [56] et montrent que, lorsqu'on utilise un facteur correct de l'énergie de la dislocation, le théorème de l'image-force est vraiment valable.

Plus tard, Dupeux et Bonnet [60] reconsidèrent le problème et le résolvent numériquement, les auteurs calculent les champs des contraintes et des déplacements autour d'une dislocation placée à l'interface de deux milieux différents. Deux exemples concernant des dislocations aux interfaces Al/Al₂Cu et laiton α /laiton β sont traités numériquement à l'aide d'un programme FORTRAN. Ils font apparaître des effets notables, à la fois de l'hétérogénéité et de l'anisotropie, sur les valeurs des déplacements, des contraintes et des énergies de ligne.

Pour le cas d'une dislocation coin située sur l'arête commune à N (>2) joints plans semi-infinis séparant différents milieux anisotropes, les champs de déformation élastique sont déterminés par R. Bonnet [61], en étendant l'analyse formulée par le même auteur et Dupeux. Le problème est ainsi ramené pour le champ des contraintes à la résolution d'un système de 6N équations linéaires à 6N inconnues. Un exemple illustrant le champ des cisssions d'une dislocation coin dièdre à l'angle formé par deux facettes {112} d'un joint de macles dans l'or est présenté montrant aussi que l'anisotropie n'affecte pas sensiblement l'énergie de ligne de la dislocation ($E=0.127$ J/m en anisotropie et $E=0.131$ J/m en isotropie).

Concernant les réseaux périodiques de dislocations interfaciales et à partir des résultats d'Eshelby et col [51], Stroh [62] obtiendra le champ des contraintes d'un réseau plan de dislocations rectilignes équidistantes situées dans un milieu anisotrope homogène. Plus tard et en 1962, Chou [63] propose des expressions plus détaillées du champ des contraintes pour un réseau de dislocation où la structure du cristal est hexagonale tenant en compte l'avantage de la symétrie du cristal.

Depuis ces travaux plusieurs auteurs ont abordé ce sujet dans le but d'obtenir le champ des contraintes et/ou des déplacements au voisinage des réseaux de dislocations interfaciales (Chou et Yang [64], Hirth, Barnett et Lothe [65], Bacon et al. [66], Bonnet [67,8]) mettant en évidence deux types particuliers de dislocations interfaciales: les dislocations intrinsèques et les dislocations extrinsèques. Par développement en séries de Fourier doubles, les champs élastiques du joint interphase à structure périodique (simple ou double), sont établis formellement par Bonnet [68]. Dans le cas d'un réseau de dislocations

intrinsèques identiques et parallèle (cas unidimensionnel), l'auteur détermine analytiquement les champs élastiques (déplacements et contraintes) et l'énergie élastique stockée. Une application est déduite pour le système laiton α / laiton β avec l'observation d'un effet considérable de l'orientation du joint sur les valeurs des énergies élastiques.

En 1985, R. Bonnet [69] a résolu théoriquement le problème lié à un réseau périodique de dislocations intrinsèques ou extrinsèques situé à l'interface d'un bilame mince introduisant l'effet des surfaces libres sur la dispersion des contraintes et de l'énergie stockée à l'interface

En 1994, R. Bonnet et M. Loubradou [70] ont proposé une approche dite « continue », dans le but de décrire les positions atomiques autour de dislocations de misfit présentes le long d'une interface plane entre deux milieux hétérogènes anisotropes, l'étude sur l'hétérojonction (001) CdTe/ (001) GaAs s'est accompli par des résultats très comparables aux images M.E.T.H.R. loin des cœurs de dislocations, figure 1.15.

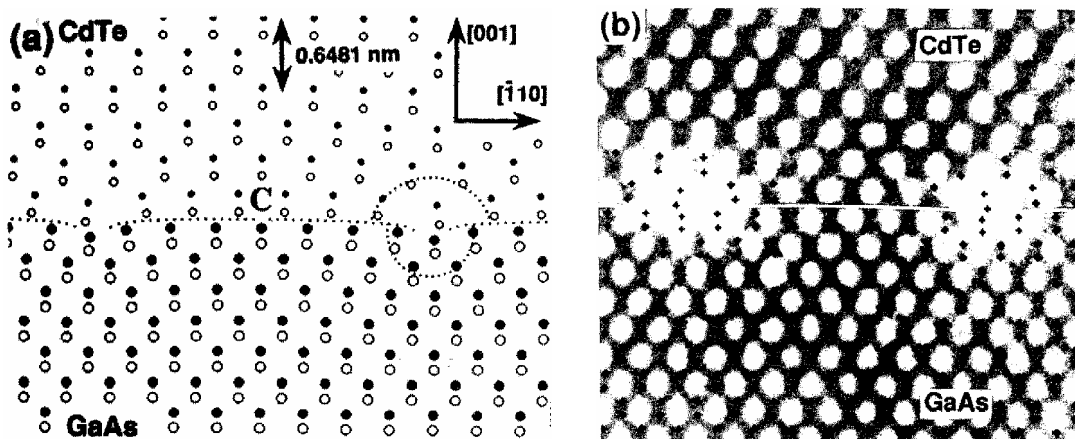


Figure 1.15 - représentation de l'hétérojonction (001) CdTe / (001) GaAs, (a) position des colonnes atomiques prédites par le calcul de Bonnet, les atomes sont différenciés par 4 symboles différents, C est le milieu entre deux cœurs de dislocations, (b) Image M.E.T.H.R. montrant le bon accord entre les positions théoriques (les croix noires) et les positions expérimentales (zones grises sombres), sauf bien sûr au voisinage des cœurs [70].

En 1997, S. Madani [71], considère que l'interface plane du bilame mince est tapissée d'un réseau périodique, parallèle, de dislocations de misfit (intrinsèques). Il a pu représenter le champ de contrainte σ_{11} , du matériau Al/Al₂Cu, pour des C_{ij} anisotropes, et suivant deux directions du vecteur de Burgers figure I.16. Conclu que la présence d'un second cristal modifie considérablement la distribution d'équi- contrainte au voisinage de la dislocation. De

même ces iso-contraintes révèlent un effet de surface non rencontré dans le cas de l'élasticité isotrope.

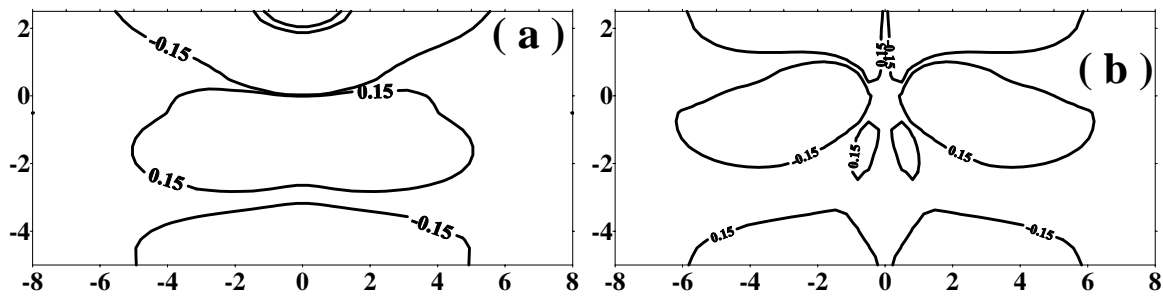


Figure 1.16 - Courbes d'équi-contraintes $\sigma_{11} = \pm 150$ MPa pour une dislocation placée à l'interface d'un bilame mince Al/Al₂Cu (a) $b // Ox_1$, (b) $b // Ox_2$ [71].

En 2002, T.Outtas [72] considère que l'interface plane du bilame mince est tapissée d'un réseau bi-périodique, plus exactement hexagonal régulier de dislocations de misfit (intrinsèques). Il présente le champ de déplacement, figure 1.17.

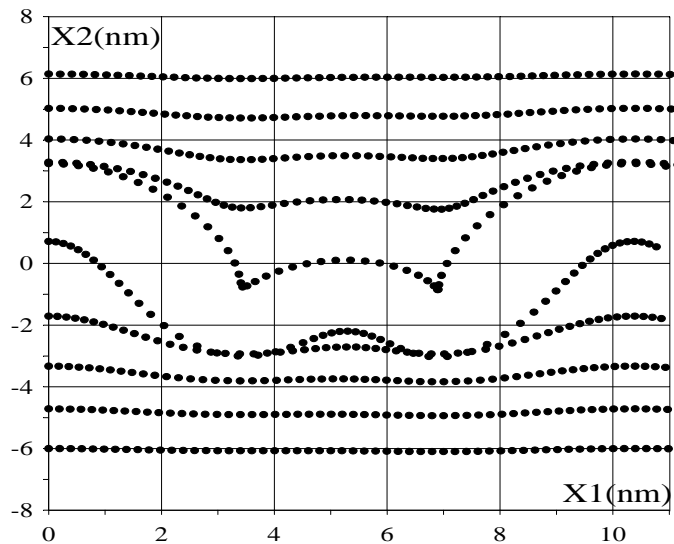


Figure 1.17 - Champ de déplacement des surfaces libres pour différents bicristaux InAs/(111)GaAs, C_{ij} sont anisotropes, d d'épaisseurs $(\pm 2.a_{InAs})$, $(\pm 4.a_{InAs})$, $(\pm 6.a_{InAs})$, $(\pm 8.a_{InAs})$, $(\pm 10.a_{InAs})$ [72].

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

Plus récemment en 2005, M. Brioua et col.[73] ont présenté la distribution des iso-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 400$ MPa, autour d'un réseau de dislocations coin, pour une orientation du vecteur de Burgers $b // Ox_1$, pour un matériau tricouche NiSi₂/Si/GaAs. Les résultats obtenus montrent bien la dispersion, sur une plus ou moins grande surface du couple

tension-compression dans la couche et autour des deux dislocations qui la délimitent ; ce qui permet, entre autres, de voir quelle est la zone en tension et celle en compression, la vérification des conditions aux limites ainsi que la quantification de la discontinuité le long d'interfaces hétérogènes.

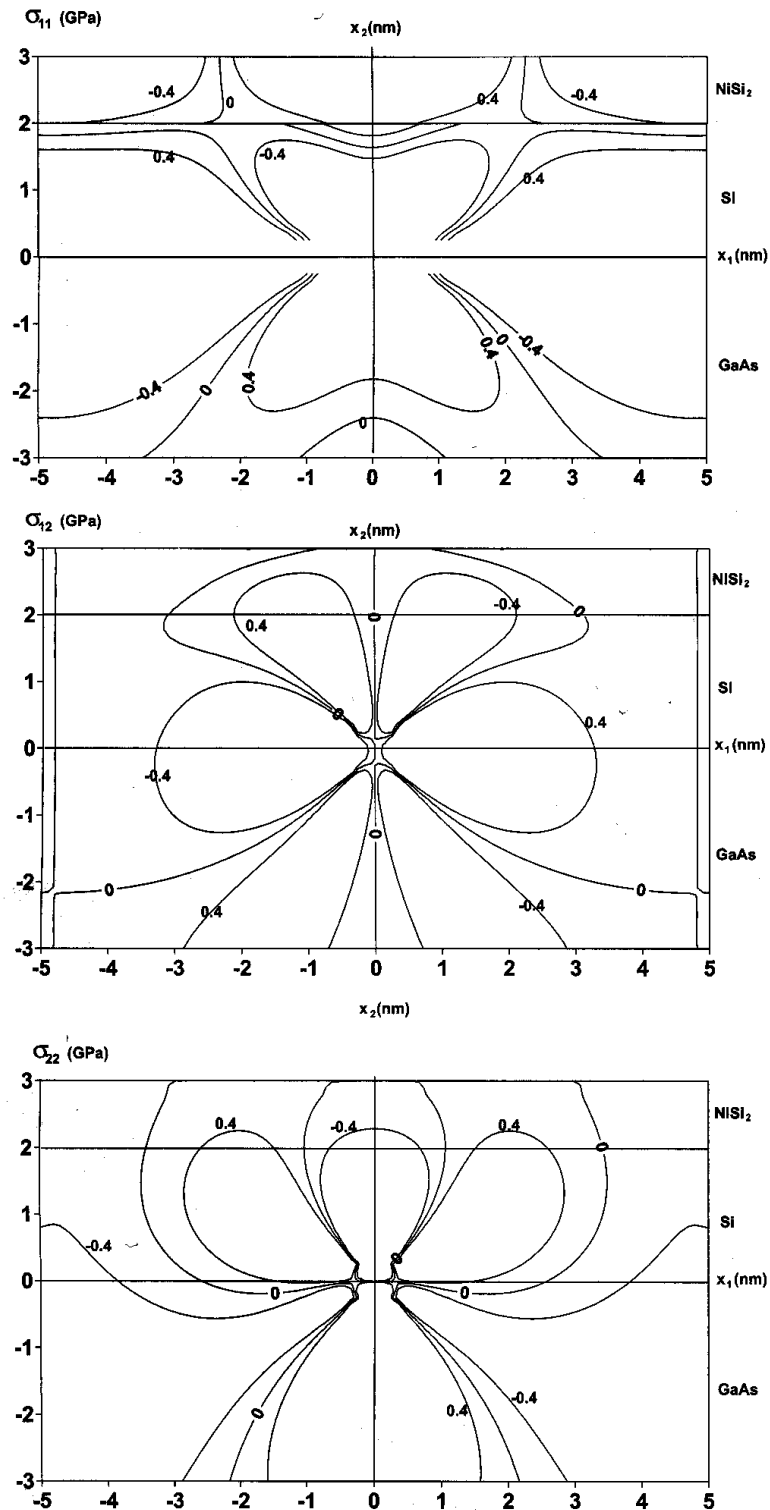


Figure 1.18 - Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 400$ MPa pour une dislocation placée à l'interface d'un matériau tricouche NiSi₂/ NiSi₂/GaAs; C_{ij} Anisotropes, $b // Ox$ [73].

Chapitre 2

Formulation mathématique des champs élastiques pour le cas du réseau unidirectionnel de DMs

2.1 Introduction

Le problème fondamental d'une dislocation rectiligne, dans un milieu anisotrope a été résolu par Eshelby et col [51] et formulé différemment par d'autres auteurs tels Stroh [56,74], Spence [75], Chou [63,64], Seeger et Schoecler [77]. Tucker [53] est parvenu le premier à exprimer, dans le cadre de l'élasticité anisotrope, le champ des déplacements d'une dislocation rectiligne sur un joint plan. Par la suite, Humble et Forwood [78] corrigent certaines erreurs typographiques de la formule (27) de Tucker [53] et vérifieront la validité de leurs expressions en simulant le contraste de telle dislocation.

Pour résoudre le problème d'une dislocation rectiligne à l'interface de deux milieux anisotropes de nature différente, Bonnet et Dupeux [60], et partant d'une analyse différente de celle de Tucker [53], arrivent à obtenir une expression analytique équivalente à celle de Humble et Forwood [78].

Une application numérique est alors proposée pour le système Al/Al₂Cu dont le but d'examiner la contribution élastique de l'énergie de ligne et le champ de dilatation. Un fort effet d'hétérogénéité élastique sur les champs élastiques est mis en évidence.

L'analyse du problème devient plus difficile lorsque les deux surfaces libres de la lame mince sont prises en considération comme le prouve le nombre d'article à ce sujet : en isotropie 11 références ont été recensées par Gultin et Romanov [39]. Citons que Chou [40] a donné le champ des contraintes pour une dislocation vis dans un matériau à trois couches, et

que Nabarro et Kostlan [37] et Moss et Hoover [36] ont considéré le cas d'une dislocation coin placée sur le plan moyen d'une lame mince élastiquement homogène.

Dans ce chapitre, et en se basant sur un article de R. Bonnet [69] paru en 1985, nous allons présenter en utilisant la théorie élastique anisotropique, le développement mathématique de base du champ élastique (déplacement et contrainte) pour un réseau unidirectionnel de dislocations DMs.

2.2 Rappel sur les dislocations intrinsèques et extrinsèques.

Dans la littérature, on distingue deux types de dislocations interfaciales:

2.2.1 Dislocation de translation (extrinsèque)

C'est un défaut linéaire introduit par une coupure de Volterra et qui subit un mouvement de translation. Ce mouvement produit à travers le cristal une déformation macroscopique dans laquelle le cristal cède aux contraintes appliquées.

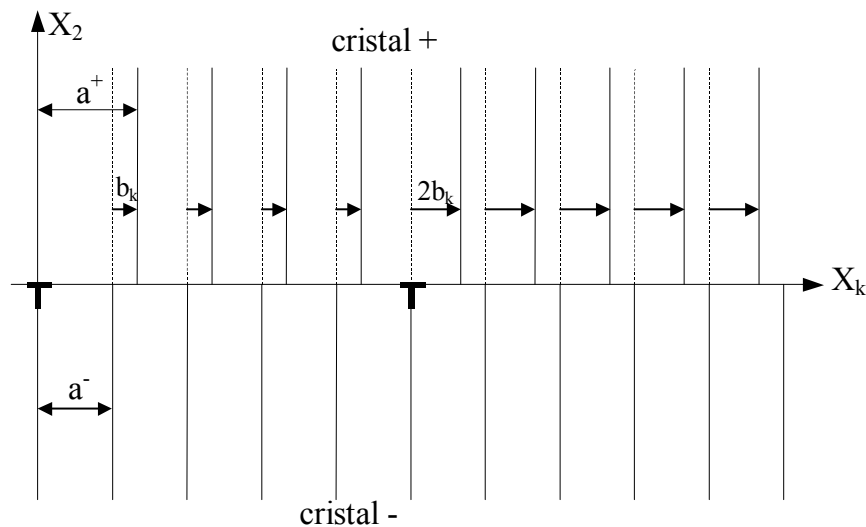


Figure 2.1 - Représentation de dislocations extrinsèques réparties périodiquement le long de l'interface

2.2.2 Dislocation intrinsèque (de misfit)

Ce type de dislocation résulte d'une relaxation due au désaccord paramétrique entre certaines matrices planes des deux cristaux.

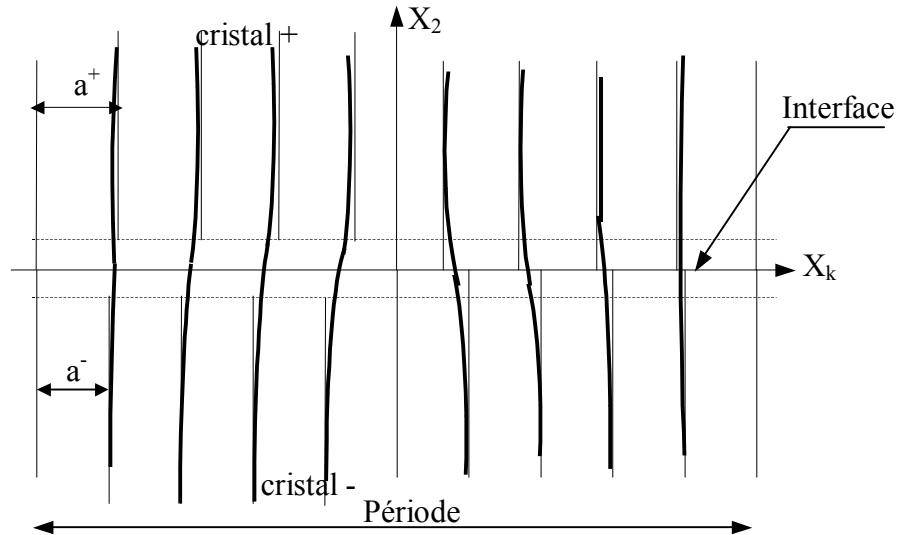


Figure 2.2 - Représentation de dislocations intrinsèques réparties périodiquement le long de l'interface

2.2.3 Etude comparative

Les dislocations intrinsèques possèdent une géométrie nécessaire à la formation de ce qu'on appelle contrainte interface libre soudée. Citons par exemple la structure de la dislocation d'un joint de grain à bas angle, les structures interfaciales des films épitaxiaux et des précipités semi-cohérents.

Ces dislocations, contrairement aux dislocations extrinsèques, ne présentent pas de contraintes à longue distance à cause de la périodicité du déplacement relatif; donc elles n'interagissent ni avec un défaut ponctuel, ni avec un défaut linéaire à grande distance.

Pour les déplacements relatifs, le premier type présente un déplacement en marches d'escaliers "stair-case" par contre le deuxième type présente un déplacement en dents de scie "sawtooth" (figure 2.3)

$$|u_k^+ - u_k^-|_{x_2=0}$$

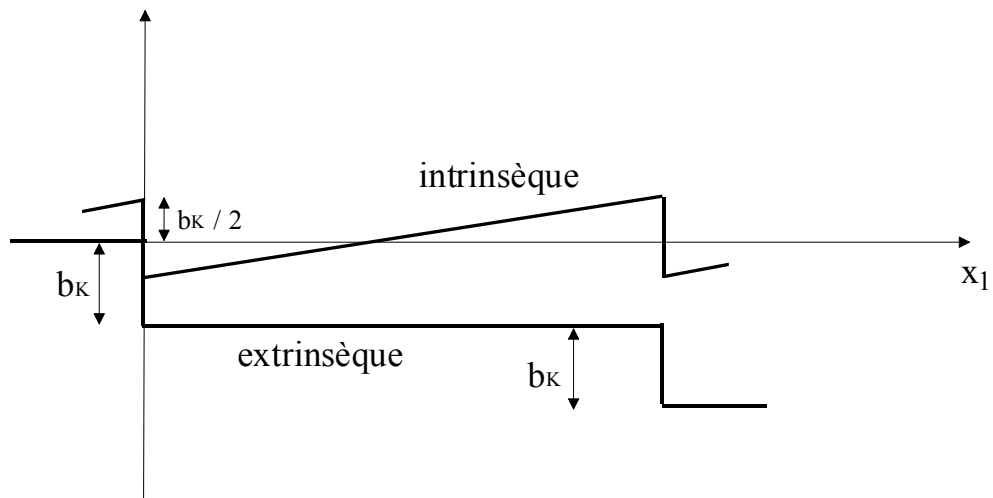


Figure 2.3 - Déplacement relatif de deux cristaux Courbes sawtooth et stair-case relatives aux dislocations intrinsèques et extrinsèques respectivement.

2.3 Géométrie du problème

La figure 2.4, montre en détail, la géométrie du problème pour un réseau unidirectionnel de dislocations qui se développent dans le plan d'une interface séparant deux milieux notes (+) et (-) de natures différentes élastiquement anisotropes et caractérisés respectivement par les constantes C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- et par leurs épaisseurs respectives h_1 et $h-h_1$, la période $\Lambda=1/g$. Cet arrangement périodique de défaut linéaires est parallèle à l'axe Ox_3 d'un repère cartésien $Ox_1x_2x_3$ convenablement choisi.

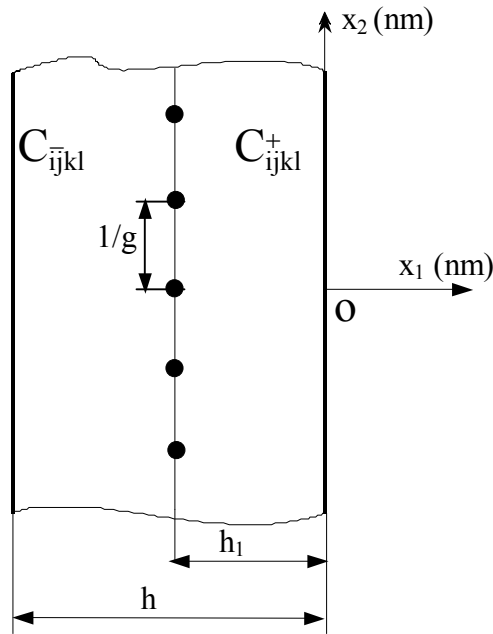


Figure 2.4 - Deux milieux +/-, avec un réseau unidirectionnel de dislocations à l'interface, $1/g$ est la période. C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- sont les constantes élastiques des deux milieux, h_1 et $h-h_1$ sont les épaisseurs des deux milieux.

2.4 Détermination du champ déplacement

Comme la déformation est supposée périodique le long de l'axe Ox_2 , elle peut être développée en série de Fourier en tout point des deux milieux hors des régions de discontinuité [69] :

$$\varepsilon_{ij}(x_1, x_2) = \sum_G \varepsilon_{ij}^{(G)}(x_1) \cdot \exp\left(\frac{2 \cdot i \cdot \pi \cdot n}{\Lambda} \cdot x_2\right) \quad (2.1)$$

pour $|x_1|$ tendant vers l'infini tous les coefficients tendent vers zéro (préservation des unités structurales), sauf $\varepsilon_{ij}^{(G=0)}(x_1)$ qui est supposé constant.

L'intégration de (2.1) donne le champ de déplacement:

$$u_k = u_k^0 + v_{k1}^0 \cdot x_1 + v_{k2}^0 \cdot x_2 + \sum_{n \neq 0} u_k^{(n)}(x_1) \cdot \exp(2i\pi \cdot g \cdot n \cdot x_2) \quad k=1,2,3 \quad (2.2)$$

Avec $1/g = \Lambda$

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

Donc l'expression du champ de déplacement s'écrit aussi (Bonnet et Verger-Gaurgry, 1992)[44]:

$$u_k = \sum_{n \neq 0} u_k^{(n)}(x_1) \cdot \exp(2i\pi \cdot g \cdot n \cdot x_2) \quad k=1,2,3 \quad (2.3)$$

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

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl} \quad (2.4)$$

$$\text{Où } \varepsilon_{kl} = 1/2(u_{k,l} + u_{l,k}) \quad (i, j, k, l = 1, 2, 3) \quad (2.5)$$

En substituant (2.5) dans (2.4), nous obtenons :

$$\sigma_{ij} = 1/2 (C_{ijkl} \cdot u_{k,l}) + 1/2 (C_{ijlk} \cdot u_{l,k}) \quad (2.6)$$

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

$$\sigma_{ij} = 1/2 (C_{ijkl} \cdot u_{k,l}) + 1/2 (C_{ijlk} \cdot u_{l,k}) \quad (2.7)$$

Etant donné que les indices muets k et l prendront les mêmes valeurs, donc les deux termes à droites sont égaux [51].

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \cdot u_{k,l} \quad (2.8)$$

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

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

$$\Rightarrow C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} = 0 \quad (2.10)$$

En remplaçant par (2.3) dans (2.10), on obtient trois équations différentielles qui peuvent s'écrire de la façon suivante:

$$C_{j1k1}(-4\pi^2 g^2 n^2) u_k^{(n)} + (C_{j1k2} + C_{j2k1})(2i\pi n g) u_{k,2}^{(n)} + C_{j2k2} u_{k,22}^{(n)} = 0 \quad (2.11)$$

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

$$u_k^{(n)}(x_1) = \lambda'_{\alpha k} \cdot \exp(-2.i. \pi.g.n.p_{\alpha}.x_1) \quad (2.12)$$

Où les $\lambda'_{\alpha k}$ et p_{α} sont des constantes complexes à déterminer à l'aide du système à 3 équations linéaires suivant obtenu en remplaçant par (2.12) dans (2.11):

$$[C_{j1k1} + (C_{j1k2} + C_{j2k1})p_{\alpha} + C_{j2k2}.p_{\alpha}^2] \cdot \lambda'_{\alpha k} = 0 \quad (2.13)$$

$$\text{qui s'écrit: } A_{jk} \lambda'_{\alpha k} = 0 \quad (2.14)$$

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

En adoptant pour les constantes élastiques la convention à deux indices

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

L'équation (2.13) s'écrit sous forme explicite de la manière suivante :

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

Ce système est similaire à celui obtenu par Eshelby et col [51] dans le cas d'une dislocation rectiligne placée dans un milieu homogène en élasticité anisotrope. Il admet pour chaque p_{α} des solutions $\lambda'_{\alpha k}$ non triviales si le déterminant de A_{jk} est égal à zéro :

$$\det(A_{jk}) = |C_{j1k1} + (C_{j1k2} + C_{j2k1}) \cdot p_{\alpha} + C_{j2k2} \cdot p_{\alpha}^2| = 0 \quad (2.15)$$

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

$$K_0 + K_1.p + K_2.p^2 + K_3.p^3 + K_4.p^4 + K_5.p^5 + K_6.p^6 = 0 \quad (2.16)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

Donc pour résoudre le problème il faut calculer les six racines du polynôme (2.16). Ces racines sont d'après Eshelby [51] complexes puisque la densité d'énergie doit être toujours positive. Ainsi comme les coefficients du polynôme sont réels les racines complexes considérées ici sont :

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

Dans la suite du problème, seules les racines à partie imaginaire positive sont choisies. Ces racines s'écrivent : $p_\alpha^{(n)} = p_\alpha^r(n) \pm ip_\alpha^i(n)$ (2.17) avec $\alpha = 1, 2, 3$ et $p_\alpha^i(n) > 0$

Pour chacune des six racines p_α données en (2.17) on résout le système en $\lambda'_{\alpha k}$ suivant :

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} \\ F_{21} & F_{22} & F_{23} \\ F_{31} & F_{32} & F_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda'_{\alpha 1} \\ \lambda'_{\alpha 2} \\ \lambda'_{\alpha 3} \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (2.18)$$

Avec :

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

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

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

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

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

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

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

$$\lambda'_{\alpha k}{}^{(n)} = \lambda'_{\alpha k}{}^r{}^{(n)} \pm i \lambda'_{\alpha k}{}^i{}^{(n)} \quad (2.19)$$

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

En posant arbitrairement $\lambda'_{\alpha 3}=1$ on peut à partir de (2.18) calculer :

$$\lambda'_{\alpha 1} = \frac{F_{12}F_{23} - F_{13}F_{22}}{F_{11}F_{22} - F_{12}F_{21}} \quad (2.20)$$

$$\lambda'_{\alpha 2} = \frac{-(F_{11}F_{23} - F_{13}F_{21})}{F_{11}F_{22} - F_{12}F_{21}} \quad (2.21)$$

$$\lambda'_{\alpha 3} = 1 \quad (2.22)$$

La troisième équation du système (2.18) est toujours vérifiée car en remplaçant $\lambda'_{\alpha 1}$ et $\lambda'_{\alpha 2}$ par leurs valeurs obtenus en (2.21) et (2.22), on retrouve l'expression du déterminant de la matrice F_{jk} qui est égal à zéro.

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

$$\lambda_{\alpha 1} = \frac{\lambda'_{\alpha 1}}{(\lambda_{\alpha 1}'^2 + \lambda_{\alpha 2}'^2 + \lambda_{\alpha 3}'^2)^{1/2}} \quad (2.23)$$

$$\lambda_{\alpha 2} = \frac{\lambda'_{\alpha 2}}{(\lambda_{\alpha 1}'^2 + \lambda_{\alpha 2}'^2 + \lambda_{\alpha 3}'^2)^{1/2}} \quad (2.24)$$

$$\lambda_{\alpha 3} = \frac{\lambda'_{\alpha 3}}{(\lambda_{\alpha 1}'^2 + \lambda_{\alpha 2}'^2 + \lambda_{\alpha 3}'^2)^{1/2}} \quad (2.25)$$

$$\text{tel que : } \lambda_{\alpha 1}^2 + \lambda_{\alpha 2}^2 + \lambda_{\alpha 3}^2 = 1 \quad (2.26)$$

Les équations (2.11) ont ainsi comme solution générale des combinaisons linéaires des solutions trouvées pour chaque α , autrement dit:

$$u_k^{(n)}(x_1) = \sum_{\alpha=1}^6 C_\alpha^{(n)} \lambda_{\alpha k} \exp(-2i\pi g n p_\alpha x_1) \quad (2.27)$$

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

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

$$\begin{cases} X_\alpha^{(n)} / 2.i.\pi.n \\ Y_\alpha^{(n)} / 2.i.\pi.n \end{cases} \quad (\alpha = 1,2,3) \quad (2.28)$$

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

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

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

$$u_k^{(n)}(x_1) = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{X_\alpha^{(n)} \lambda_{\alpha k}}{2i\pi n} \exp(-2i\pi g n p_\alpha x_1) + \frac{Y_\alpha^{(n)} \bar{\lambda}_{\alpha k}}{2i\pi n} \exp(-2i\pi g n \bar{p}_\alpha x_1) \quad (2.29)$$

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

La combinaison de (2.1) avec (2.29) permet d'écrire le champ des déplacements sous la forme suivante :

$$u_k = \sum_{n \neq 0} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{X_\alpha^{(n)} \lambda_{\alpha k}}{2i\pi n} \exp[(2i\pi g n (x_2 - p_\alpha .x_1))] + \frac{Y_\alpha^{(n)} \bar{\lambda}_{\alpha k}}{2i\pi n} \exp[(2i\pi g n (x_2 - \bar{p}_\alpha .x_1))] \quad (2.30)$$

2.4.1 Expression finale du champ des déplacements

Pour plus de performance sur le plan numérique, il est convenable d'écrire l'équation (2.30) sous une forme où la sommation ne tient compte que des valeurs positives de l'entier n.

On peut l'écrire sous la forme :

$$u_k = \sum_{n \neq 0} \sum_{\alpha=1}^3 C_{\alpha k}^{(n)} \cdot \exp\left[2i\pi g n(x_2 - r_\alpha x_1)\right] \quad (2.31)$$

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

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

Donc la double somme (2.31) devient:

$$2 \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re}\left(C_{\alpha k}^{(n)}\right) \cdot \cos\left[2\pi g n\left(x_2 - r_\alpha x_1\right)\right] + \operatorname{Re}\left(i C_{\alpha k}^{(n)}\right) \sin\left[2\pi g n\left(x_2 - r_\alpha x_1\right)\right] \quad (2.32)$$

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

$$\begin{aligned} u_k = & \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi n}\right) \sum_{\alpha=1}^3 \left[\{\cos[n\omega(x_2 - r_\alpha x_1)] \right. \\ & \times \operatorname{Re}[(iX_\alpha^{(n)}\lambda_{\alpha k})\exp(n\omega s_\alpha x_1) + (-iY_\alpha^{(n)}\overline{\lambda_{\alpha k}})\exp(-n\omega s_\alpha x_1)]\} \\ & + \{\sin[n\omega(x_2 - r_\alpha x_1)] \times \operatorname{Re}[(X_\alpha^{(n)}\lambda_{\alpha k})\exp(n\omega s_\alpha x_1) + (Y_\alpha^{(n)}\overline{\lambda_{\alpha k}})\exp(-n\omega s_\alpha x_1)]\} \\ & \left. (k=1,2,3) \right] \end{aligned} \quad (2.33)$$

2.5 Champ des contraintes

Le champ des contraintes est obtenu à partir de l'équation (2.33) en utilisant la loi de

Hooke qui s'écrit : $\sigma_{kl} = C_{kl ij} \varepsilon_{ij}$

$$\sigma_{kl} = C_{kl ij} \cdot u_{i,j} = C_{kl i1} \cdot u_{i,1} + C_{kl i2} \cdot u_{i,2} + C_{kl i3} \cdot u_{i,3} \quad (2.34)$$

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

$$\sigma_{kl} = C_{kl i1} \cdot u_{i,1} + C_{kl i2} \cdot u_{i,2} \quad (2.35)$$

d'où enfin

$$\sigma_{kl} = C_{kl11} \cdot u_{1,1} + C_{kl21} \cdot u_{2,1} + C_{kl12} \cdot u_{1,2} + C_{kl22} \cdot u_{2,2} \quad (2.36)$$

Avec

$$\begin{aligned} u_1 = & \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi n}\right) \sum_{\alpha=1}^3 \left[\{\cos[n\omega(x_2 - r_\alpha x_1)] \right. \\ & \times \operatorname{Re}[(iX_\alpha^{(n)}\lambda_{\alpha 1})\exp(n\omega s_\alpha x_1) + (-iY_\alpha^{(n)}\overline{\lambda_{\alpha 1}})\exp(-n\omega s_\alpha x_1)]\} \\ & + \{\sin[n\omega(x_2 - r_\alpha x_1)] \times \operatorname{Re}[(X_\alpha^{(n)}\lambda_{\alpha 1})\exp(n\omega s_\alpha x_1) + (Y_\alpha^{(n)}\overline{\lambda_{\alpha 1}})\exp(-n\omega s_\alpha x_1)]\} \end{aligned} \quad (2.37)$$

Et

$$\begin{aligned}
 u_2 = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 & \left[\{ \cos[n\omega(x_2 - r_\alpha x_1)] \right. \\
 & \times \operatorname{Re} [(-iX_\alpha^{(n)} \lambda_{\alpha 2}) \exp(n\omega s_\alpha x_1) + (-iY_\alpha^{(n)} \bar{\lambda}_{\alpha 2}) \exp(-n\omega s_\alpha x_1)] \} \\
 & \left. + \{ \sin[n\omega(x_2 - r_\alpha x_1)] \times \operatorname{Re} [(X_\alpha^{(n)} \lambda_{\alpha 2}) \exp(n\omega s_\alpha x_1) + (Y_\alpha^{(n)} \bar{\lambda}_{\alpha 2}) \exp(-n\omega s_\alpha x_1)] \} \right] \quad (2.38)
 \end{aligned}$$

En posant

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

$$C = X_\alpha \cdot \exp(n \omega \cdot s_\alpha \cdot x_1)$$

$$D = Y_\alpha \cdot \exp(-n \omega \cdot s_\alpha \cdot x_1)$$

On aura:

$$u_1 = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \cos(A) \operatorname{Re} [(-i\lambda_{\alpha 1} C) + (-i\bar{\lambda}_{\alpha 1} D)] + \sin(A) \operatorname{Re} [(\lambda_{\alpha 1} C) + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} D)] \right\} \quad (2.39)$$

Et

$$u_2 = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \cos(A) \operatorname{Re} [(-i\lambda_{\alpha 2} C) + (-i\bar{\lambda}_{\alpha 2} D)] + \sin(A) \operatorname{Re} [(\lambda_{\alpha 2} C) + (\bar{\lambda}_{\alpha 2} D)] \right\} \quad (2.40)$$

D'ou

$$\begin{aligned}
 C_{kl11} U_{1,1} = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 & \left\{ \sin(A) \operatorname{Re} [(i\lambda_{\alpha 1} C) C_{kl11} + (i\bar{\lambda}_{\alpha 1} D) C_{kl11}] \right. \\
 & \left. + \cos(A) \operatorname{Re} [(\lambda_{\alpha 1} C) C_{kl11} + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} D) C_{kl11}] \right\} \quad (2.41)
 \end{aligned}$$

Et

$$\begin{aligned}
 C_{kl21} U_{2,1} = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 & \left\{ \sin(A) \operatorname{Re} [(i\lambda_{\alpha 2} C) C_{kl21} + (i\bar{\lambda}_{\alpha 2} D) C_{kl21}] \right. \\
 & \left. + \cos(A) \operatorname{Re} [(\lambda_{\alpha 2} C) C_{kl21} + (\bar{\lambda}_{\alpha 2} D) C_{kl21}] \right\} \quad (2.42)
 \end{aligned}$$

$$(37)+(38) = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} [(\lambda_{\alpha 1} C + \bar{\lambda}_{\alpha 1} D) C_{kl11} + (\lambda_{\alpha 2} C + \bar{\lambda}_{\alpha 2} D) C_{kl21}] (\cos(A) + i \sin(A)) \quad (2.43)$$

De même

$$\begin{aligned}
 C_{kl12} U_{1,2} = \frac{\omega}{\pi} \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} & \left\{ (\lambda_{\alpha 1} C + \bar{\lambda}_{\alpha 1} D) (\cos(A) + i \sin(A)) r_\alpha C_{kl12} \right. \\
 & \left. + (\lambda_{\alpha 1} C - \bar{\lambda}_{\alpha 1} D) (\cos(A) + i \sin(A)) s_\alpha C_{kl12} \right\} \quad (2.44)
 \end{aligned}$$

Et

$$C_{kl22}U_{2,2} = \frac{\omega}{\pi} \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left\{ (\lambda_{\alpha 2} C + \bar{\lambda}_{\alpha 2} D) (\cos(A) + i \sin(A)) r_{\alpha} C_{kl22} \right. \\ \left. + (\lambda_{\alpha 2} C - \bar{\lambda}_{\alpha 2} D) (\cos(A) + i \sin(A)) s_{\alpha} C_{kl22} \right\} \quad (2.45)$$

$$\Rightarrow C_{kl12}U_{1,2} + C_{kl22}U_{2,2} = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left\{ (\lambda_{\alpha 1} C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) C r_{\alpha} + \right. \\ \left. (\bar{\lambda}_{\alpha 1} C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) D r_{\alpha} + (\lambda_{\alpha 1} C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) C s_{\alpha} \right. \\ \left. - (\bar{\lambda}_{\alpha 1} C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) D s_{\alpha} \right\} \quad (2.46)$$

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

On aura:

$$C_{kl12}U_{1,2} + C_{kl22}U_{2,2} = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left\{ (\lambda_{\alpha 1} C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) C p_{\alpha} \right. \\ \left. + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) D p_{\alpha} \right\} \quad (2.47)$$

Donc

$$\sigma_{kl} = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left\{ (\lambda_{\alpha 1} C_{kl11} + \lambda_{\alpha 2} C_{kl21}) (\cos(A) + i \sin(A)) C + \right. \\ \left. + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} C_{kl11} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} C_{kl21}) (\cos(A) + i \sin(A)) D + (\lambda_{\alpha 1} C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) C p_{\alpha} \right. \\ \left. + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) C \bar{p}_{\alpha} \right\} \quad (2.48)$$

$$\sigma_{kl} = \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \cos(A) \operatorname{Re} \left\{ \left[\lambda_{\alpha 1} (C_{kl11} + p_{\alpha} C_{kl12}) + \lambda_{\alpha 2} (C_{kl21} + p_{\alpha} C_{kl22}) \right] C + \right. \\ \left. \left[\bar{\lambda}_{\alpha 1} (C_{kl11} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl12}) + \bar{\lambda}_{\alpha 2} (C_{kl21} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl22}) \right] D \right\} + \\ \sin(A) \operatorname{Re} \left\{ \left[\lambda_{\alpha 1} (C_{kl11} + p_{\alpha} C_{kl12}) + \lambda_{\alpha 2} (C_{kl21} + p_{\alpha} C_{kl22}) \right] C + \right. \\ \left. \left[\bar{\lambda}_{\alpha 1} (C_{kl11} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl12}) + \bar{\lambda}_{\alpha 2} (C_{kl21} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl22}) \right] D \right\} \quad (2.49)$$

On obtient finalement l'expression suivante:

$$\sigma_{ij} = 2g \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \left[\{ \cos[n\omega (x_2 - r_{\alpha} x_1)] + \right. \\ \times \operatorname{Re} [X_{\alpha}^{(n)} L_{\alpha ij} \exp(n\omega s_{\alpha} x_1) + Y_{\alpha}^{(n)} \bar{L}_{\alpha ij} \exp(-n\omega s_{\alpha} x_1)] + \{ \sin[n\omega (x_2 - r_{\alpha} x_1)] + \\ \times \operatorname{Re} [i X_{\alpha}^{(n)} L_{\alpha ij} \exp(n\omega s_{\alpha} x_1) + i Y_{\alpha}^{(n)} \bar{L}_{\alpha ij} \exp(-n\omega s_{\alpha} x_1)] \} \\ \text{avec } L_{\alpha kl} = \lambda_{\alpha j} [C_{klj1} + p_{\alpha} C_{klj2}] \quad \text{et } i, j = 1, 2, 3, \quad l = 1, 2 \quad (2.50)$$

Chapitre 3

Solution explicite en élasticité anisotrope

3.1 Introduction

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

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

Pour déterminer la valeur des constantes complexes X_α^+ , Y_α^+ , X_α^- et Y_α^- ($\alpha=1,2,3$), on applique les conditions aux limites suivantes pour les trois types de bicristaux étudiés.

3.2 Première configuration: cas du bicristal mince

Pour faciliter la comparaison entre les résultats obtenus en admettant l'hypothèse de lames minces homogènes, nos résultats sont présentés avec un système cartésien $Ox_1x_2x_3$ bien défini.

La figure 3.1, présente la géométrie du problème pour un réseau unidirectionnel de dislocations intrinsèques placé dans le plan d'une interface séparant deux milieux notés (+) et (-). Dans leur repère les deux surfaces libres sont placées à $x_1=0$ et $x_1=h$, ($h<0$). Dans chaque lame, le cœur de la dislocation est placée à $x_1=h_1$, ($h_1<0$).

Ces deux milieux sont élastiquement anisotropes et de natures différentes. Ils sont caractérisés respectivement par les constantes C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- et la période $\Lambda=1/g$.

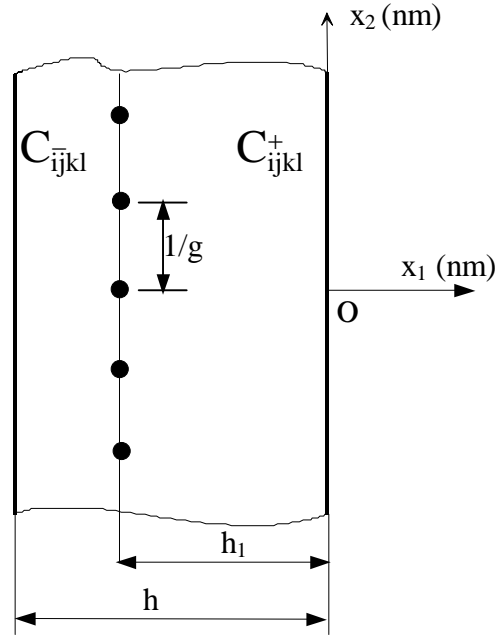


Figure 3.1 - bicristal mince +/-, avec une dislocation à l'interface, C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- sont les constantes élastiques des deux milieux.

3.2.1 Conditions aux limites

3.2.1.1 Conditions en déplacement

La linéarité du déplacement relatif interfacial peut être décrite par l'expression suivante :

$$u_k^+ - u_k^- = \frac{b_k}{\Lambda} x_2 - \frac{b_k}{2} \quad (3.1)$$

tel que u_k^+ et u_k^- correspondent respectivement aux champs de déplacements du cristal droite ($x_1 > h_1$) et gauche ($x_1 < h_1$) à l'interface.

Comme le déplacement relatif $\Delta U_k(x_2)$ est périodique le long de Ox_2 , il peut être développé en séries de Fourier :

$$\Delta U_k(x_2) = \sum_{-\infty}^{+\infty} C_k^{(n)} \exp(2i\pi gn x_2) dx_2 \quad (3.2)$$

$$\text{avec } C_k^{(n)} = \frac{1}{\Lambda} \int_{x_0}^{x_0+\Lambda} \Delta U_k(x_2) \exp\left(\frac{-2i\pi n}{\Lambda} x_2\right) dx_2 \quad (3.3)$$

après calcul de $C_k^{(n)}$, ΔU_k s'écrit :

$$\Delta U_k(x_2) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \frac{i b_k}{2\pi n} \exp(2i\pi gn x_2) \quad (3.4)$$

et comme $\Delta U_k(x_2)$ est réel, il s'écrit :

$$\Delta U_k(x_2) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{-b_k}{\pi n} \sin\left(\frac{2\pi n}{\Lambda} x_2\right) \quad (3.5)$$

Donc la linéarité du déplacement relatif à l'interface est exprimé par:

$$\left[u_k^+ - u_k^- \right]_{x_1=h_1} = -\frac{b_k}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} (1/n) \sin(n\omega x_2) \quad (3.6)$$

3.2.1.2 Conditions en contraintes

a- La continuité des contraintes normales à l'interface.

L'interface étant en équilibre, pour $x_1 = h_1$, les contraintes normales doivent être continues de part et d'autre de l'interface, donc pour les cristaux (+) et (-) on peut écrire :

$$\left[\sigma_{1k}^+ \right]_{x_1=h_1} = \left[\sigma_{1k}^- \right]_{x_1=h_1} \quad (3.7)$$

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

b- Nullité des contraintes normales aux surfaces libres.

L'équilibre des surfaces libres impose que les contraintes normales soient nulles respectivement pour $x_1 = 0$ et $x_1 = h$, ce qui donne:

$$\left[\sigma_{1k}^+ \right]_{x_1=0} = 0 \quad \text{pour le cristal (+)} \quad (3.8)$$

$$\left[\sigma_{1k}^- \right]_{x_1=h} = 0 \quad \text{pour le cristal (-)} \quad (3.9)$$

3.2.1.3 Système d'équation réel 24 x 24 et matrice globale associée

En omettant l'exposant n , les 12 inconnues complexes X_α^+ , Y_α^+ , X_α^- et Y_α^- sont donc les solutions du système linéaire à 24 équations réelles obtenues par combinaison des expressions des déplacements (2.33) et des contraintes (2.50) avec les conditions aux limites (3.1) à (3.9), on obtient, ainsi, les équations suivantes :

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[A \operatorname{inter}(AC(\alpha) - i.AS(\alpha) - B \operatorname{inter}(BC(\alpha) - i.BS(\alpha))) \right] = -b_k \quad (3.10)$$

$$\operatorname{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 \left[A \operatorname{inter}(AC(\alpha) - i.AS(\alpha) - B \operatorname{inter}(BC(\alpha) - i.BS(\alpha))) \right] = 0 \quad (3.11)$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 [\operatorname{Cinter}(AC(\alpha) - i.AS(\alpha) - \operatorname{Dinter}(BC(\alpha) - i.BS(\alpha))] = 0 \quad (3.12)$$

$$\operatorname{Re} i \sum_{\alpha=1}^3 [\operatorname{Cinter}(AC(\alpha) - i.AS(\alpha) - \operatorname{Dinter}(BC(\alpha) - i.BS(\alpha))] = 0 \quad (3.13)$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 (X_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{+} + Y_{\alpha}^{+} \bar{L}_{\alpha 1k}^{+}) = 0 \quad (3.14)$$

$$\operatorname{Re} i \sum_{\alpha=1}^3 (X_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{+} + Y_{\alpha}^{+} \bar{L}_{\alpha 1k}^{+}) = 0 \quad (3.15)$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 (\operatorname{Einter}(DC(\alpha) - i.DS(\alpha)) = 0 \quad (3.16)$$

$$\operatorname{Re} i \sum_{\alpha=1}^3 (\operatorname{Einter}(DC(\alpha) - i.DS(\alpha)) = 0 \quad (3.17)$$

Avec $Ainter = X_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{+} \operatorname{EXP1}(\alpha) + Y_{\alpha}^{+} \bar{\lambda}_{\alpha k}^{+} \operatorname{EXP2}(\alpha)$

$$Binter = X_{\alpha}^{-} \lambda_{\alpha k}^{-} \operatorname{EXP3}(\alpha) + Y_{\alpha}^{-} \bar{\lambda}_{\alpha k}^{-} \operatorname{EXP4}(\alpha)$$

$$Cinter = X_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{+} \operatorname{EXP1}(\alpha) + Y_{\alpha}^{+} \bar{L}_{\alpha 1k}^{+} \operatorname{EXP2}(\alpha)$$

$$Dinter = X_{\alpha}^{-} L_{\alpha 1k}^{-} \operatorname{EXP3}(\alpha) + Y_{\alpha}^{-} \bar{L}_{\alpha 1k}^{-} \operatorname{EXP4}(\alpha)$$

$$Einter = X_{\alpha}^{-} L_{\alpha 1k}^{-} \operatorname{EXP5}(\alpha) + Y_{\alpha}^{-} \bar{L}_{\alpha 1k}^{-} \operatorname{EXP6}(\alpha)$$

Et $AC(\alpha) = \cos(n\omega r_{\alpha}^{+} h_1)$

$$AS(\alpha) = \sin(n\omega r_{\alpha}^{+} h_1)$$

$$BC(\alpha) = \cos(n\omega r_{\alpha}^{-} h_1)$$

$$BS(\alpha) = \sin(n\omega r_{\alpha}^{-} h_1)$$

$$DC(\alpha) = \cos(n\omega r_{\alpha}^{-} h)$$

$$DS(\alpha) = \sin(n\omega r_{\alpha}^{-} h)$$

$$\operatorname{EXP1}(\alpha) = \exp(n\omega s_{\alpha}^{+} h_1)$$

$$\operatorname{EXP2}(\alpha) = \exp(-n\omega s_{\alpha}^{+} h_1)$$

$$\text{EXP3}(\alpha) = \exp(n\omega s_{\alpha}^{-} h_1)$$

$$\text{EXP4}(\alpha) = \exp(-n\omega s_{\alpha}^{-} h_1)$$

$$\text{EXP5}(\alpha) = \exp(n\omega s_{\alpha}^{-} h)$$

$$\text{EXP6}(\alpha) = \exp(-n\omega s_{\alpha}^{-} h)$$

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

$$X_{\alpha}^{+} = A_{\alpha}^{+} + iB_{\alpha}^{+}$$

$$X_{\alpha}^{-} = A_{\alpha}^{-} + iB_{\alpha}^{-}$$

$$Y_{\alpha}^{+} = C_{\alpha}^{+} + iD_{\alpha}^{+}$$

$$Y_{\alpha}^{-} = C_{\alpha}^{-} + iD_{\alpha}^{-}$$

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

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

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

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

$$L_{\alpha kl}^{+} = L_{\alpha kl}^{r+} + iL_{\alpha kl}^{i+}$$

$$L_{\alpha kl}^{-} = L_{\alpha kl}^{r-} + iL_{\alpha kl}^{i-}$$

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

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

On obtient ainsi le système suivant:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{+} (\lambda_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{i+} AS(\alpha)) + B_{\alpha}^{+} (-\lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha)) \right] \text{EXP1}(\alpha) \right. \\ & + \left[C_{\alpha}^{+} (\lambda_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i+} AS(\alpha)) + D_{\alpha}^{+} (\lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) + D_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha)) \right] \text{EXP2}(\alpha) \\ & + \left[A_{\alpha}^{-} (-\lambda_{\alpha k}^{r-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i-} BS(\alpha)) + B_{\alpha}^{-} (\lambda_{\alpha k}^{i-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{r-} BS(\alpha)) \right] \text{EXP3}(\alpha) \\ & \left. + \left[C_{\alpha}^{-} (-\lambda_{\alpha k}^{r-} BC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{i-} BS(\alpha)) + D_{\alpha}^{-} (-\lambda_{\alpha k}^{i-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{r-} BS(\alpha)) \right] \text{EXP4}(\alpha) \right\} = -b_k \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{+} (-\lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha)) + B_{\alpha}^{+} (-\lambda_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i+} AS(\alpha)) \right] \text{EXP1}(\alpha) \right. \\ & + \left[C_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha) + D_{\alpha}^{+} (-\lambda_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{i+} AS(\alpha)) \right] \text{EXP2}(\alpha) \\ & + \left[A_{\alpha}^{-} (\lambda_{\alpha k}^{i-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{r-} BS(\alpha)) + B_{\alpha}^{-} (\lambda_{\alpha k}^{r-} BC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{i-} BS(\alpha)) \right] \text{EXP3}(\alpha) \\ & \left. + \left[C_{\alpha}^{-} (-\lambda_{\alpha k}^{i-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{r-} BS(\alpha)) + D_{\alpha}^{-} (\lambda_{\alpha k}^{r-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i-} BS(\alpha)) \right] \text{EXP4}(\alpha) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{+} (L_{\alpha 1k}^{r+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{i+} AS(\alpha)) + B_{\alpha}^{+} (-L_{\alpha 1k}^{i+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r+} AS(\alpha)) \right] \text{EXP1}(\alpha) \right. \\
& + \left[C_{\alpha}^{+} (L_{\alpha 1k}^{r+} AC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i+} AS(\alpha)) + D_{\alpha}^{+} (L_{\alpha 1k}^{i+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r+} AS(\alpha)) \right] \text{EXP2}(\alpha) \\
& + \left[A_{\alpha}^{-} (-L_{\alpha 1k}^{r-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i-} BS(\alpha)) + B_{\alpha}^{-} (L_{\alpha 1k}^{i-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{r-} BS(\alpha)) \right] \text{EXP3}(\alpha) \\
& \left. + \left[C_{\alpha}^{-} (-L_{\alpha 1k}^{r-} BC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{i-} BS(\alpha)) + D_{\alpha}^{-} (-L_{\alpha 1k}^{i-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{r-} BS(\alpha)) \right] \text{EXP4}(\alpha) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{3.20}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{+} (-L_{\alpha 1k}^{i+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r+} AS(\alpha)) + B_{\alpha}^{+} (-L_{\alpha 1k}^{r+} AC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i+} AS(\alpha)) \right] \text{EXP1}(\alpha) \right. \\
& + \left[C_{\alpha}^{+} (L_{\alpha 1k}^{i+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r+} AS(\alpha)) + D_{\alpha}^{+} (-L_{\alpha 1k}^{r+} AC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i+} AS(\alpha)) \right] \text{EXP2}(\alpha) \\
& + \left[A_{\alpha}^{-} (L_{\alpha 1k}^{i-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{r-} BS(\alpha)) + B_{\alpha}^{-} (L_{\alpha 1k}^{r-} BC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{i-} BS(\alpha)) \right] \text{EXP3}(\alpha) \\
& \left. + \left[C_{\alpha}^{-} (L_{\alpha 1k}^{i-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{r-} BS(\alpha)) + D_{\alpha}^{-} (L_{\alpha 1k}^{r-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i-} BS(\alpha)) \right] \text{EXP4}(\alpha) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{3.21}$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 (A_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{r+} - B_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{i+} + C_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{r+} + D_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{i+}) = 0 \tag{3.22}$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 (A_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{i+} - B_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{r+} + C_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{i+} + D_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{r+}) = 0 \tag{3.23}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{-} (L_{\alpha 1k}^{r-} DC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{i-} DS(\alpha)) + B_{\alpha}^{-} (-L_{\alpha 1k}^{i-} DC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r-} DS(\alpha)) \right] \text{EXP5}(\alpha) \right. \\
& \left. + \left[C_{\alpha}^{-} (L_{\alpha 1k}^{r-} DC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i-} DS(\alpha)) + D_{\alpha}^{-} (L_{\alpha 1k}^{i-} DC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r-} DS(\alpha)) \right] \text{EXP6}(\alpha) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{3.24}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{-} (-L_{\alpha 1k}^{i-} DC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r-} DS(\alpha)) + B_{\alpha}^{-} (-L_{\alpha 1k}^{r-} DC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i-} DS(\alpha)) \right] \text{EXP5}(\alpha) \right. \\
& \left. + \left[C_{\alpha}^{-} (L_{\alpha 1k}^{i-} DC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r-} DS(\alpha)) + D_{\alpha}^{-} (-L_{\alpha 1k}^{r-} DC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{i-} DS(\alpha)) \right] \text{EXP6}(\alpha) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{3.25}$$

En posant

$$P_{\alpha k} = \left[\lambda_{\alpha k}^{r+} \cdot AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{i+} \cdot AS(\alpha) \right] \text{EXP1}(\alpha)$$

$$Q_{\alpha k} = \left[-\lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha) \right] \text{EXP1}(\alpha)$$

$$R_{\alpha k} = \left[\lambda_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i+} AS(\alpha) \right] \text{EXP2}(\alpha)$$

$$S_{\alpha k} = \left[\lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha) \right] \text{EXP2}(\alpha)$$

$$\begin{aligned}
E_{\alpha k} &= \left[-\lambda_{\alpha k}^{r-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i-} BS(\alpha) \right] EXP3(\alpha) \\
F_{\alpha k} &= \left[\lambda_{\alpha k}^{i-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{r-} BS(\alpha) \right] EXP3(\alpha) \\
G_{\alpha k} &= \left[-\lambda_{\alpha k}^{r-} BC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{i-} BS(\alpha) \right] EXP4(\alpha) \\
H_{\alpha k} &= \left[-\lambda_{\alpha k}^{i-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{r-} BS(\alpha) \right] EXP4(\alpha) \\
I_{\alpha k} &= \left[L_{\alpha 1k}^{r+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{i+} AS(\alpha) \right] EXP1(\alpha) \\
K_{\alpha k} &= \left[-L_{\alpha 1k}^{i+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r+} AS(\alpha) \right] EXP1(\alpha) \\
M_{\alpha k} &= \left[L_{\alpha 1k}^{r+} AC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i+} AS(\alpha) \right] EXP2(\alpha) \\
N_{\alpha k} &= \left[L_{\alpha 1k}^{i+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r+} AS(\alpha) \right] EXP2(\alpha) \\
T_{\alpha k} &= \left[-L_{\alpha 1k}^{r-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i-} BS(\alpha) \right] EXP3(\alpha) \\
V_{\alpha k} &= \left[L_{\alpha 1k}^{i-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{r-} BS(\alpha) \right] EXP3(\alpha) \\
W_{\alpha k} &= \left[-L_{\alpha 1k}^{r-} BC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{i-} BS(\alpha) \right] EXP4(\alpha) \\
Z_{\alpha k} &= \left[-L_{\alpha 1k}^{i-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{r-} BS(\alpha) \right] EXP2(\alpha) \\
J_{\alpha k} &= \left[L_{\alpha 1k}^{r-} DC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{i-} DS(\alpha) \right] EXP5(\alpha) \\
U_{\alpha k} &= \left[-L_{\alpha 1k}^{i-} DC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r-} DS(\alpha) \right] EXP5(\alpha) \\
O_{\alpha k} &= \left[L_{\alpha 1k}^{r-} DC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i-} DS(\alpha) \right] EXP6(\alpha) \\
D_{\alpha k} &= \left[L_{\alpha 1k}^{i-} DC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r-} DS(\alpha) \right] EXP6(\alpha)
\end{aligned}$$

Le système d'équations (3.18)-(3.25) s'écrit d'une manière explicite comme suit:

P_{11}	Q_{11}	R_{11}	S_{11}	E_{11}	F_{11}	G_{11}	H_{11}	P_{21}	Q_{21}	R_{21}	S_{21}	E_{21}	F_{21}	G_{21}	H_{21}	P_{31}	Q_{31}	R_{31}	S_{31}	E_{31}	F_{31}	G_{31}	H_{31}	A_1^+	$-b_1$
P_{12}	Q_{12}	R_{12}	S_{12}	E_{12}	F_{12}	G_{12}	H_{12}	P_{22}	Q_{22}	R_{22}	S_{22}	E_{22}	F_{22}	G_{22}	H_{22}	P_{32}	Q_{32}	R_{32}	S_{32}	E_{32}	F_{32}	G_{32}	H_{32}	B_1^+	$-b_2$
P_{13}	Q_{13}	R_{13}	S_{13}	E_{13}	F_{13}	G_{13}	H_{13}	P_{23}	Q_{23}	R_{23}	S_{23}	E_{23}	F_{23}	G_{23}	H_{23}	P_{33}	Q_{33}	R_{33}	S_{33}	E_{33}	F_{33}	G_{33}	H_{33}	C_1^+	$-b_3$
Q_{11}	$-P_{11}$	S_{11}	$-R_{11}$	F_{11}	$-E_{11}$	H_{11}	$-G_{11}$	Q_{21}	$-P_{21}$	S_{21}	$-R_{21}$	F_{21}	$-E_{21}$	H_{21}	$-G_{21}$	Q_{31}	$-P_{31}$	S_{31}	$-R_{31}$	F_{31}	$-E_{31}$	H_{31}	$-G_{31}$	D_1^+	0
Q_{12}	$-P_{12}$	S_{12}	$-R_{12}$	F_{12}	$-E_{12}$	H_{12}	$-G_{12}$	Q_{22}	$-P_{22}$	S_{22}	$-R_{22}$	F_{22}	$-E_{22}$	H_{22}	$-G_{22}$	Q_{32}	$-P_{32}$	S_{32}	$-R_{32}$	F_{32}	$-E_{32}$	H_{32}	$-G_{32}$	A_1^-	0
Q_{13}	$-P_{13}$	S_{13}	$-R_{13}$	F_{13}	$-E_{13}$	H_{13}	$-G_{13}$	Q_{23}	$-P_{23}$	S_{23}	$-R_{23}$	F_{23}	$-E_{23}$	H_{23}	$-G_{23}$	Q_{33}	$-P_{33}$	S_{33}	$-R_{33}$	F_{33}	$-E_{33}$	H_{33}	$-G_{33}$	B_1^-	0
I_{11}	K_{11}	M_{11}	N_{11}	T_{11}	V_{11}	W_{11}	Z_{11}	I_{21}	K_{21}	M_{21}	N_{21}	T_{21}	V_{21}	W_{21}	Z_{21}	I_{31}	K_{31}	M_{31}	N_{31}	T_{31}	V_{31}	W_{31}	Z_{31}	C_1^-	0
I_{12}	K_{12}	M_{12}	N_{12}	T_{12}	V_{12}	W_{12}	Z_{12}	I_{22}	K_{22}	M_{22}	N_{22}	T_{22}	V_{22}	W_{22}	Z_{22}	I_{32}	K_{32}	M_{32}	N_{32}	T_{32}	V_{32}	W_{32}	Z_{32}	D_1^-	0
I_{13}	K_{13}	M_{13}	N_{13}	T_{13}	V_{13}	W_{13}	Z_{13}	I_{23}	K_{23}	M_{23}	N_{23}	T_{23}	V_{23}	W_{23}	Z_{23}	I_{33}	K_{33}	M_{33}	N_{33}	T_{33}	V_{33}	W_{33}	Z_{33}	A_2^+	0
K_{11}	$-I_{11}$	N_{11}	$-M_{11}$	V_{11}	$-T_{11}$	Z_{11}	$-W_{11}$	K_{21}	$-I_{21}$	N_{21}	$-M_{21}$	V_{21}	$-T_{21}$	Z_{21}	$-W_{21}$	K_{31}	$-I_{31}$	N_{31}	$-M_{31}$	V_{31}	$-T_{31}$	Z_{31}	$-W_{31}$	B_2^+	0
K_{12}	$-I_{12}$	N_{12}	$-M_{12}$	V_{12}	$-T_{12}$	Z_{12}	$-W_{12}$	K_{22}	$-I_{22}$	N_{22}	$-M_{22}$	V_{22}	$-T_{22}$	Z_{22}	$-W_{22}$	K_{32}	$-I_{32}$	N_{32}	$-M_{32}$	V_{32}	$-T_{32}$	Z_{32}	$-W_{32}$	C_2^+	0
K_{13}	$-I_{13}$	N_{13}	$-M_{13}$	V_{13}	$-T_{13}$	Z_{13}	$-W_{13}$	K_{23}	$-I_{23}$	N_{23}	$-M_{23}$	V_{23}	$-T_{23}$	Z_{23}	$-W_{23}$	K_{33}	$-I_{33}$	N_{33}	$-M_{33}$	V_{33}	$-T_{33}$	Z_{33}	$-W_{33}$	D_2^+	0
L_{11}^+	$-L_{11}^+$	L_{11}^+	L_{11}^+	0	0	0	0	L_{21}^+	$-L_{21}^+$	L_{21}^+	L_{21}^+	0	0	0	0	L_{31}^+	$-L_{31}^+$	L_{31}^+	L_{31}^+	0	0	0	0	A_2^-	0
L_{12}^+	$-L_{12}^+$	L_{12}^+	L_{12}^+	0	0	0	0	L_{22}^+	$-L_{22}^+$	L_{22}^+	L_{22}^+	0	0	0	0	L_{32}^+	$-L_{32}^+$	L_{32}^+	L_{32}^+	0	0	0	0	B_2^-	0
L_{13}^+	$-L_{13}^+$	L_{13}^+	L_{13}^+	0	0	0	0	L_{23}^+	$-L_{23}^+$	L_{23}^+	L_{23}^+	0	0	0	0	L_{33}^+	$-L_{33}^+$	L_{33}^+	L_{33}^+	0	0	0	0	C_2^-	0
L_{11}^-	L_{11}^-	$-L_{11}^-$	L_{11}^-	0	0	0	0	L_{21}^-	L_{21}^-	$-L_{21}^-$	L_{21}^-	0	0	0	0	L_{31}^-	L_{31}^-	$-L_{31}^-$	L_{31}^-	0	0	0	0	D_2^-	0
L_{12}^-	L_{12}^-	$-L_{12}^-$	L_{12}^-	0	0	0	0	L_{22}^-	L_{22}^-	$-L_{22}^-$	L_{22}^-	0	0	0	0	L_{32}^-	L_{32}^-	$-L_{32}^-$	L_{32}^-	0	0	0	0	A_3^+	0
L_{13}^-	L_{13}^-	$-L_{13}^-$	L_{13}^-	0	0	0	0	L_{23}^-	L_{23}^-	$-L_{23}^-$	L_{23}^-	0	0	0	0	L_{33}^-	L_{33}^-	$-L_{33}^-$	L_{33}^-	0	0	0	0	B_3^+	0
0	0	0	0	J_{11}	U_{11}	Q_{11}	D_{11}	0	0	0	0	J_{21}	U_{21}	Q_{21}	D_{21}	0	0	0	0	J_{31}	U_{31}	Q_{31}	D_{31}	C_3^+	0
0	0	0	0	J_{12}	U_{12}	Q_{12}	D_{12}	0	0	0	0	J_{22}	U_{22}	Q_{22}	D_{22}	0	0	0	0	J_{32}	U_{32}	Q_{32}	D_{32}	D_3^+	0
0	0	0	0	J_{13}	U_{13}	Q_{13}	D_{13}	0	0	0	0	J_{23}	U_{23}	Q_{23}	D_{23}	0	0	0	0	J_{33}	U_{33}	Q_{33}	D_{33}	A_3^-	0
0	0	0	0	U_{11}	$-J_{11}$	D_{11}	$-O_{11}$	0	0	0	0	U_{21}	$-J_{21}$	D_{21}	$-O_{21}$	0	0	0	0	U_{31}	$-J_{31}$	D_{31}	$-O_{31}$	B_3^-	0
0	0	0	0	U_{12}	$-J_{12}$	D_{12}	$-O_{12}$	0	0	0	0	U_{22}	$-J_{22}$	D_{22}	$-O_{22}$	0	0	0	0	U_{32}	$-J_{32}$	D_{32}	$-O_{32}$	C_3^-	0
0	0	0	0	U_{13}	$-J_{13}$	D_{13}	$-O_{13}$	0	0	0	0	U_{23}	$-J_{23}$	D_{23}	$-O_{23}$	0	0	0	0	U_{33}	$-J_{33}$	D_{33}	$-O_{33}$	D_3^-	0

3.3 Deuxième configuration: cas du milieu semi infini (couche/substrat)

Dans ce qui suit nous allons considérer une couche mince d'épaisseur h_1 déposée sur un substrat, tel que l'interface est tapissée d'un réseau unidirectionnel de dislocation coin de type $(1/2)\langle 110 \rangle$ la surface libre est placée à $x_1 = 0$ et le cœur de la dislocation est placé à $x_1 = h_1$, ($h_1 < 0$) (figure 3.2).

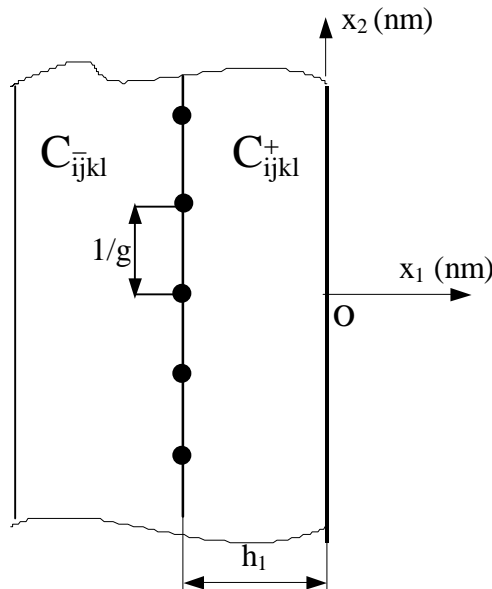


Figure 3.2- Couche/Substrat +/-, avec un réseau unidirectionnel de dislocations à l'interface, C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- sont les constantes élastiques des deux milieux, h_1 est l'épaisseur de la couche.

3.3.1 Conditions en déplacement

La linéarité du déplacement relatif à l'interface est exprimé par:

$$\left[u_k^+ - u_k^- \right]_{x_1=h_1} = -\frac{b_k}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} (1/n) \sin(n\alpha x_2) \quad (3.26)$$

3.3.2 Conditions en contraintes

a- à travers l'interface $x_1 = h_1$ les forces sont continues ce qui se traduit par l'équilibre des contraintes normales σ_{1k} :

$$\left[\sigma_{1k}^+ \right]_{x_1=h_1} = \left[\sigma_{1k}^- \right]_{x_1=h_1} \quad (3.27)$$

b- la surface libre de la couche étant en équilibre, ce qui nous permet de considérer que la contrainte normale est nulle pour $x_1 = 0$.

$$\left[\sigma_{1k}^+ \right]_{x_1=0} = 0 \quad (3.28)$$

3.3.3 Système d'équation réel 18 x 18 et matrice globale associée

En omettant l'exposant n , les 09 inconnues complexes X_α^+ , Y_α^+ et Y_α^- sont donc les solutions du système linéaire à 18 équations réelles obtenues par combinaison des expressions des déplacements (2.33) et des contraintes (2.50) avec les conditions aux limites (3.26) à (3.28), on obtient, ainsi, les équations suivantes :

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[A \operatorname{inter}(AC(\alpha) - i.AS(\alpha) - B \operatorname{interl}(BC(\alpha) - i.BS(\alpha))) \right] = -b_k \quad (3.29)$$

$$\operatorname{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 \left[A \operatorname{inter}(AC(\alpha) - i.AS(\alpha) - B \operatorname{interl}(BC(\alpha) - i.BS(\alpha))) \right] = 0 \quad (3.30)$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[C \operatorname{inter}(AC(\alpha) - i.AS(\alpha) - D \operatorname{interl}(BC(\alpha) - i.BS(\alpha))) \right] = 0 \quad (3.31)$$

$$\operatorname{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 \left[C \operatorname{inter}(AC(\alpha) - i.AS(\alpha) - D \operatorname{interl}(BC(\alpha) - i.BS(\alpha))) \right] = 0 \quad (3.32)$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 (X_\alpha^+ L_{\alpha 1k}^+ + Y_\alpha^+ \bar{L}_{\alpha 1k}^+) = 0 \quad (3.33)$$

$$\operatorname{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 (X_\alpha^+ L_{\alpha 1k}^+ + Y_\alpha^+ \bar{L}_{\alpha 1k}^+) = 0 \quad (3.34)$$

Avec

$$B \operatorname{interl} = Y_\alpha^- \bar{\lambda}_{\alpha k}^- \operatorname{EXP4}(\alpha)$$

$$D \operatorname{interl} = Y_\alpha^- \bar{L}_{\alpha 1k}^- \operatorname{EXP4}(\alpha)$$

Pour mieux exprimer les conditions aux limites, il est commode d'utiliser des grandeurs réelles comme dans le cas du bicristal mince.

On obtient ainsi le système suivant:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_\alpha^+ (\lambda_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{i+} AS(\alpha)) + B_\alpha^+ (-\lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha)) \right] \operatorname{EXP1}(\alpha) \right. \\ & + \left[C_\alpha^+ (\lambda_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i+} AS(\alpha)) + D_\alpha^+ (\lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) + D_\alpha^+ \lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha)) \right] \operatorname{EXP2}(\alpha) \\ & \left. + \left[C_\alpha^- (-\lambda_{\alpha k}^{r-} BC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{i-} BS(\alpha)) + D_\alpha^- (-\lambda_{\alpha k}^{i-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{r-} BS(\alpha)) \right] \operatorname{EXP4}(\alpha) \right\} = -b_k \end{aligned} \quad (3.35)$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{+} (-\lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha)) + B_{\alpha}^{+} (-\lambda_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i+} AS(\alpha)) \right] \text{EXP1}(\alpha) \right. \\
& + \left[C_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha) + D_{\alpha}^{+} (-\lambda_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{i+} AS(\alpha)) \right] \text{EXP2}(\alpha) \\
& \left. + \left[C_{\alpha}^{-} (-\lambda_{\alpha k}^{i-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{r-} BS(\alpha)) + D_{\alpha}^{-} (\lambda_{\alpha k}^{r-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i-} BS(\alpha)) \right] \text{EXP4}(\alpha) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{3.36}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{+} (L_{\alpha 1k}^{r+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{i+} AS(\alpha)) + B_{\alpha}^{+} (-L_{\alpha 1k}^{i+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r+} AS(\alpha)) \right] \text{EXP1}(\alpha) \right. \\
& + \left[C_{\alpha}^{+} (L_{\alpha 1k}^{r+} AC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i+} AS(\alpha)) + D_{\alpha}^{+} (L_{\alpha 1k}^{i+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r+} AS(\alpha)) \right] \text{EXP2}(\alpha) \\
& \left. + \left[C_{\alpha}^{-} (-L_{\alpha 1k}^{r-} BC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{i-} BS(\alpha)) + D_{\alpha}^{-} (-L_{\alpha 1k}^{i-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{r-} BS(\alpha)) \right] \text{EXP4}(\alpha) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{3.37}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{+} (-L_{\alpha 1k}^{i+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r+} AS(\alpha)) + B_{\alpha}^{+} (-L_{\alpha 1k}^{r+} AC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i+} AS(\alpha)) \right] \text{EXP1}(\alpha) \right. \\
& + \left[C_{\alpha}^{+} (L_{\alpha 1k}^{i+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r+} AS(\alpha)) + D_{\alpha}^{+} (-L_{\alpha 1k}^{r+} AC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i+} AS(\alpha)) \right] \text{EXP2}(\alpha) \\
& \left. + \left[C_{\alpha}^{-} (L_{\alpha 1k}^{i-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{r-} BS(\alpha)) + D_{\alpha}^{-} (L_{\alpha 1k}^{r-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i-} BS(\alpha)) \right] \text{EXP4}(\alpha) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{3.38}$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 (A_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{r+} - B_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{i+} + C_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{r+} + D_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{i+}) = 0 \tag{3.39}$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 (A_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{i+} - B_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{r+} + C_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{i+} + D_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{r+}) = 0 \tag{3.40}$$

En reprenant les mêmes notations que pour la matrice 24x24, les termes de la matrice 18x18 sont définis comme suit :

3.4 Troisième configuration: cas du milieu infini

Dans ce qui suit nous allons considérer le problème d'une dislocation située à l'interface de deux milieux infinis notés (+) et (-), tel que l'interface est tapissée d'un réseau unidirectionnel de dislocation coin de type $(1/2)\langle 110 \rangle$. Pour la représentation, le tracé a été limité à une épaisseur égale à h . Le cœur de la dislocation est placée à $x_1 = h_1$, ($h_1 < 0$) (figure 3.3).

Ces deux milieux sont élastiquement anisotropes et de natures différentes. Ils sont caractérisés respectivement par les constantes C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- et la période $\Lambda = 1/g$.

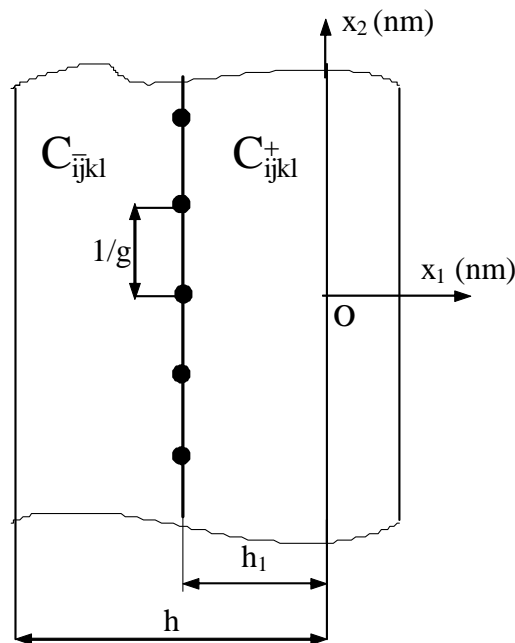


Figure 3.3- Milieu infini +/-, avec un réseau unidirectionnel de dislocations à l'interface, C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- sont les constantes élastiques des deux milieux.

3.4.1 Conditions en déplacement

La linéarité du déplacement relatif à l'interface est exprimé par:

$$\left[u_k^+ - u_k^- \right]_{x_1=h_1} = -\frac{b_k}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} (1/n) \sin(n\omega x_2) \quad (3.41)$$

3.4.2 Conditions en contraintes

A travers l'interface $x_1 = h_1$ les forces sont continues ce qui se traduit par l'équilibre des contraintes normales σ_{1k} :

$$\left[\sigma_{1k}^+ \right]_{x_1=h_1} = \left[\sigma_{1k}^- \right]_{x_1=h_1} \quad (3.42)$$

Dans le cas limite de deux milieux infinis, les constantes complexes $X_{\alpha}^{-}, Y_{\alpha}^{+}$ ($\alpha = 1, 3$) sont choisies nulles pour assurer la convergence du champ des déformations loin de l'interface.

L'inversion numérique du système de 12 équations à 12 inconnues réelles, obtenu à partir des conditions aux limites; permet le calcul du champ u_k des déplacements dans les deux cristaux ainsi que le champ de contraintes.

3.4.3 Système d'équation réel 12 x 12 et matrice globale associée

En omettant l'exposant n , les 06 inconnues complexes X_{α}^{+} et Y_{α}^{-} sont donc les solutions du système linéaire à 12 équations réelles obtenues par combinaison des expressions des déplacements (2.33) et des contraintes (2.50) avec les conditions aux limites (3.41) et (3.42), on obtient, ainsi, les équations suivantes :

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 [A \operatorname{interl}(AC(\alpha) - i.AS(\alpha)) - B \operatorname{interl}(BC(\alpha) - i.BS(\alpha))] = -b_k \quad (3.43)$$

$$\operatorname{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 [A \operatorname{interl}(AC(\alpha) - i.AS(\alpha)) - B \operatorname{interl}(BC(\alpha) - i.BS(\alpha))] = 0 \quad (3.44)$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 [C \operatorname{interl}(AC(\alpha) - i.AS(\alpha)) - D \operatorname{interl}(BC(\alpha) - i.BS(\alpha))] = 0 \quad (3.45)$$

$$\operatorname{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 [C \operatorname{interl}(AC(\alpha) - i.AS(\alpha)) - D \operatorname{interl}(BC(\alpha) - i.BS(\alpha))] = 0 \quad (3.46)$$

avec

$$A \operatorname{interl} = X_{\alpha}^{+} \lambda_{\alpha k}^{+} \operatorname{EXPI}(\alpha)$$

$$B \operatorname{interl} = Y_{\alpha}^{-} \bar{\lambda}_{\alpha k}^{-} \operatorname{EXP4}(\alpha)$$

$$C \operatorname{interl} = X_{\alpha}^{+} L_{\alpha 1k}^{+} \operatorname{EXPI}(\alpha)$$

$$D \operatorname{interl} = Y_{\alpha}^{-} \bar{L}_{\alpha 1k}^{-} \operatorname{EXP4}(\alpha)$$

Pour mieux exprimer les conditions aux limites, il est commode d'utiliser des grandeurs réelles comme dans le cas du bicristal mince.

On obtient ainsi le système suivant:

$$\sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{+} (\lambda_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{i+} AS(\alpha)) + B_{\alpha}^{+} (-\lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha)) \right] \operatorname{EXPI}(\alpha) \right. \\ \left. + \left[C_{\alpha}^{-} (-\lambda_{\alpha k}^{r-} BC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{i-} BS(\alpha)) + D_{\alpha}^{-} (-\lambda_{\alpha k}^{i-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{r-} BS(\alpha)) \right] \operatorname{EXP4}(\alpha) \right\} = -b_k \quad (3.47)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{+} (-\lambda_{\alpha k}^{i+} AC(\alpha) + \lambda_{\alpha k}^{r+} AS(\alpha)) + B_{\alpha}^{+} (-\lambda_{\alpha k}^{r+} AC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i+} AS(\alpha)) \right] EXP1(\alpha) \right. \\ \left. + \left[C_{\alpha}^{-} (-\lambda_{\alpha k}^{i-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{r-} BS(\alpha)) + D_{\alpha}^{-} (\lambda_{\alpha k}^{r-} BC(\alpha) - \lambda_{\alpha k}^{i-} BS(\alpha)) \right] EXP4(\alpha) \right\} = 0 \quad (3.48)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{+} (L_{\alpha 1k}^{r+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{i+} AS(\alpha)) + B_{\alpha}^{+} (-L_{\alpha 1k}^{i+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r+} AS(\alpha)) \right] EXP1(\alpha) \right. \\ \left. + \left[C_{\alpha}^{-} (-L_{\alpha 1k}^{r-} BC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{i-} BS(\alpha)) + D_{\alpha}^{-} (-L_{\alpha 1k}^{i-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{r-} BS(\alpha)) \right] EXP4(\alpha) \right\} = 0 \quad (3.49)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \left[A_{\alpha}^{+} (-L_{\alpha 1k}^{i+} AC(\alpha) + L_{\alpha 1k}^{r+} AS(\alpha)) + B_{\alpha}^{+} (-L_{\alpha 1k}^{r+} AC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i+} AS(\alpha)) \right] EXP1(\alpha) \right. \\ \left. + \left[C_{\alpha}^{-} (L_{\alpha 1k}^{i-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{r-} BS(\alpha)) + D_{\alpha}^{-} (L_{\alpha 1k}^{r-} BC(\alpha) - L_{\alpha 1k}^{i-} BS(\alpha)) \right] EXP4(\alpha) \right\} = 0 \quad (3.50)$$

En reprenant les mêmes notations que pour la matrice 24x24, les termes de la matrice 12x12 sont définis comme suit :

$$\begin{bmatrix} P_{11} & Q_{11} & G_{11} & H_{11} & P_{21} & Q_{21} & G_{21} & H_{21} & P_{31} & Q_{31} & G_{31} & H_{31} \\ P_{12} & Q_{12} & G_{12} & H_{12} & P_{22} & Q_{22} & G_{22} & H_{22} & P_{32} & Q_{32} & G_{32} & H_{32} \\ P_{13} & Q_{13} & G_{13} & H_{13} & P_{23} & Q_{23} & G_{23} & H_{23} & P_{33} & Q_{33} & G_{33} & H_{33} \\ Q_{11} & -P_{11} & H_{11} & -G_{11} & Q_{21} & -P_{21} & H_{21} & -G_{21} & Q_{31} & -P_{31} & H_{31} & -G_{31} \\ Q_{12} & -P_{12} & H_{12} & -G_{12} & Q_{22} & -P_{22} & H_{22} & -G_{22} & Q_{32} & -P_{32} & H_{32} & -G_{32} \\ Q_{13} & -P_{13} & H_{13} & -G_{13} & Q_{23} & -P_{23} & H_{23} & -G_{23} & Q_{33} & -P_{33} & H_{33} & -G_{33} \\ I_{11} & K_{11} & W_{11} & Z_{11} & I_{21} & K_{21} & W_{21} & Z_{21} & I_{31} & K_{31} & W_{31} & Z_{31} \\ I_{12} & K_{12} & W_{12} & Z_{12} & I_{22} & K_{22} & W_{22} & Z_{22} & I_{32} & K_{32} & W_{32} & Z_{32} \\ I_{13} & K_{13} & W_{13} & Z_{13} & I_{23} & K_{23} & W_{23} & Z_{23} & I_{33} & K_{33} & W_{33} & Z_{33} \\ K_{11} & -I_{11} & Z_{11} & -W_{11} & K_{21} & -I_{21} & Z_{21} & -W_{21} & K_{31} & -I_{31} & Z_{31} & -W_{31} \\ K_{12} & -I_{12} & Z_{12} & -W_{12} & K_{22} & -I_{22} & Z_{22} & -W_{22} & K_{32} & -I_{32} & Z_{32} & -W_{32} \\ K_{13} & -I_{13} & Z_{13} & -W_{13} & K_{23} & -I_{23} & Z_{23} & -W_{23} & K_{33} & -I_{33} & Z_{33} & -W_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1^+ \\ B_1^+ \\ C_1^- \\ D_1^- \\ A_2^+ \\ B_2^+ \\ C_2^- \\ D_2^- \\ A_3^+ \\ B_3^+ \\ C_3^- \\ D_3^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -b_1 \\ -b_2 \\ -b_3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Chapitre 4

Applications Numériques

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous rassemblons les applications numériques des calculs développés dans cette thèse. Les systèmes d'équations (24x24), (18x18) et (12x12) à inconnues réelles, obtenu au chapitre précédent par l'approche analytique développée, ne peut être résolu que numériquement vu sa complexité. Un programme Fortran, présentées en annexe 1, a été élaboré à cet effet pour déterminer les inconnues X_{α}^{+} , Y_{α}^{+} , X_{α}^{-} et Y_{α}^{-} ($\alpha=1,2, 3$), pour chaque cristal, et ainsi en déduire les champs des déplacements et de contraintes dans le bicristal mince, le milieu semi infini (couche/substrat) et milieu infini.

Nous commençons par la présentation de l'essentiel des étapes de calcul effectuées par le programme que nous avons élaboré, suivi d'un calcul d'erreur à l'interface, ensuite nous exposons les résultats en déplacements et en contraintes obtenus pour les cas suivants :

- Bicristal mince : les bicristaux choisis sont : Al/Al, Cu/Cu et Al/Cu
- Couche/substrat : les bicristaux choisis sont : Al/Cu
- Milieu infini : les bicristaux choisis sont : Al/Al, Cu/Cu, Al/Cu

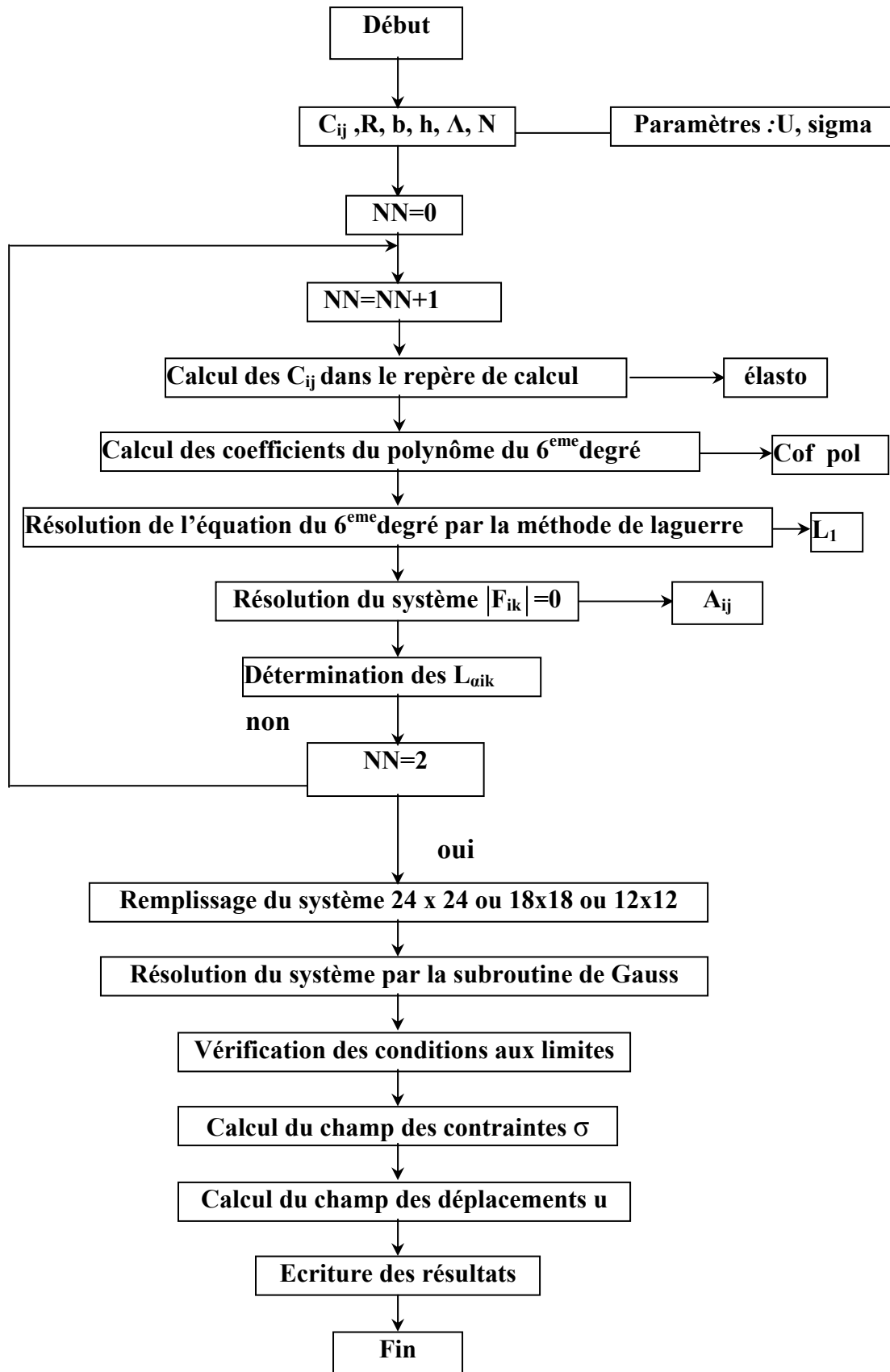
4.2 Etapes de calcul du programme

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

1- détermination de la matrice de passage du système du cristal au système de travail présenté dans le chapitre 3 pour que Ox_1 soit perpendiculaire aux plans réticulaires qui constituent l'interface des deux cristaux.

- 2- exprimer les constants élastiques C_{ij} de chaque cristal dans le repère de travail.
- 3- calculer les parties réelles et les parties imaginaires des six racines complexes p_α du polynôme du sixième degré obtenu en combinant la loi de Hooke et la condition d'équilibre que doit vérifier le système étudié. Pour chaque p_α , le programme calcule aussi les constantes complexes " $\lambda_{\alpha k}$ " ($k = 1, 3$) et en déduit les " $L_{\alpha j l}$ " qui sont des constantes complexes. Ce calcul se fait pour chaque cristal.
- 4- l'inversion numérique d'un système de 24 équations à 24 inconnues réelles, (18 équations à 18 inconnues réelles ou 12 équations à 12 inconnues réelles) obtenu à partir des conditions aux limites, permet le calcul des constantes inconnues.
- 5- la réinjection de ces constantes dans les équations des conditions aux limites permet de s'assurer de la validité des calculs.
- 6- les constantes ainsi calculées sont injectées dans l'expression des déplacements pour calculer:
 - a- l'erreur relative à l'interface ($x_1 = h_1$).
 - b- l'évolution du déplacement relatif Δu à l'interface en fonction de x_2 ($x_1 = h_1$).
 - c- le déplacement des unités structurales autour de la dislocation dans un plan (x_1, x_2) pour différentes orientations du défaut.
- 7- à partir de la loi de Hooke et en connaissant le champ des déplacements, le programme permet aussi de calculer:
 - a- l'évolution des contraintes en fonction de x_1
 - b- la dispersion des iso-contraintes dans le plan (x_1, x_2)

4.3 Organigramme global du programme



4.4 Première configuration bilame mince

4.4.1 Matériaux utilisés

Nous nous sommes basé sur le matériau à deux couches Al/Cu qui a fait de plusieurs études dans l'approximation d'une élasticité isotrope notamment celle de Bouzaher [79], Bouzaher et Bonnet [80] et de Fong [81].

Le cristal positif est choisi du côté de Al avec une épaisseur de $h_1 = 2/3h$ avec $h=7.5$ nm. Cette épaisseur est couramment rencontrée en M.E.T.H.R.[45]. De même le cristal négatif est choisi du côté de Cu dont l'épaisseur est $h-h_1$. En pratique, pour avoir une bonne représentation des champs élastiques (u_k, σ_{jk}) au voisinage d'une dislocation de translation, il suffira de choisir pour les calculs une période très grande devant h , soit $10xh = 75$ nm

Les constantes d'élasticité anisotropes sont données par le tableau 4.1

Cristal	C₁₁	C₁₂	C₄₄
Al (GPa)	108.2	61.3	28.5
Cu (GPa)	168.4	121.4	75.4

Tableau 4.1 - Constantes d'élasticité anisotropes pour Al et Cu. [79,82]

4.4.2 Calcul d'erreur à l'interface

Pour examiner la précision des calculs effectués par le programme, nous avons tracé les courbes des déplacements relatifs en fonction de x_2 ($\Delta u = f(x_2)$) qui correspondent d'une part à l'expression analytique (3.1) établie au chapitre III et d'autre part au résultat donné par le programme dans le cas d'un bicristal mince Al/Cu.

La figure 4.1 obtenue bien que les courbes sont parfaitement superposables dans le domaine de validité de l'expression analytique qui se situe entre la première dislocation placée à $x_2 = 0$ et la deuxième dislocation placée à $x_2 = 75$ nm correspondant à une période. Il est à noter que la comparaison entre les deux courbes doit se faire loin des cœurs des dislocations pour lesquels les valeurs de Δu obtenus à partir du programme divergent. En réalité les calculs effectués près de la dislocation, tout en évitant le cœur ($r_0 = |b| = 0.2864$

nm), ne permettent pas de donner de bons résultats par suite de la convergence très lente des séries.

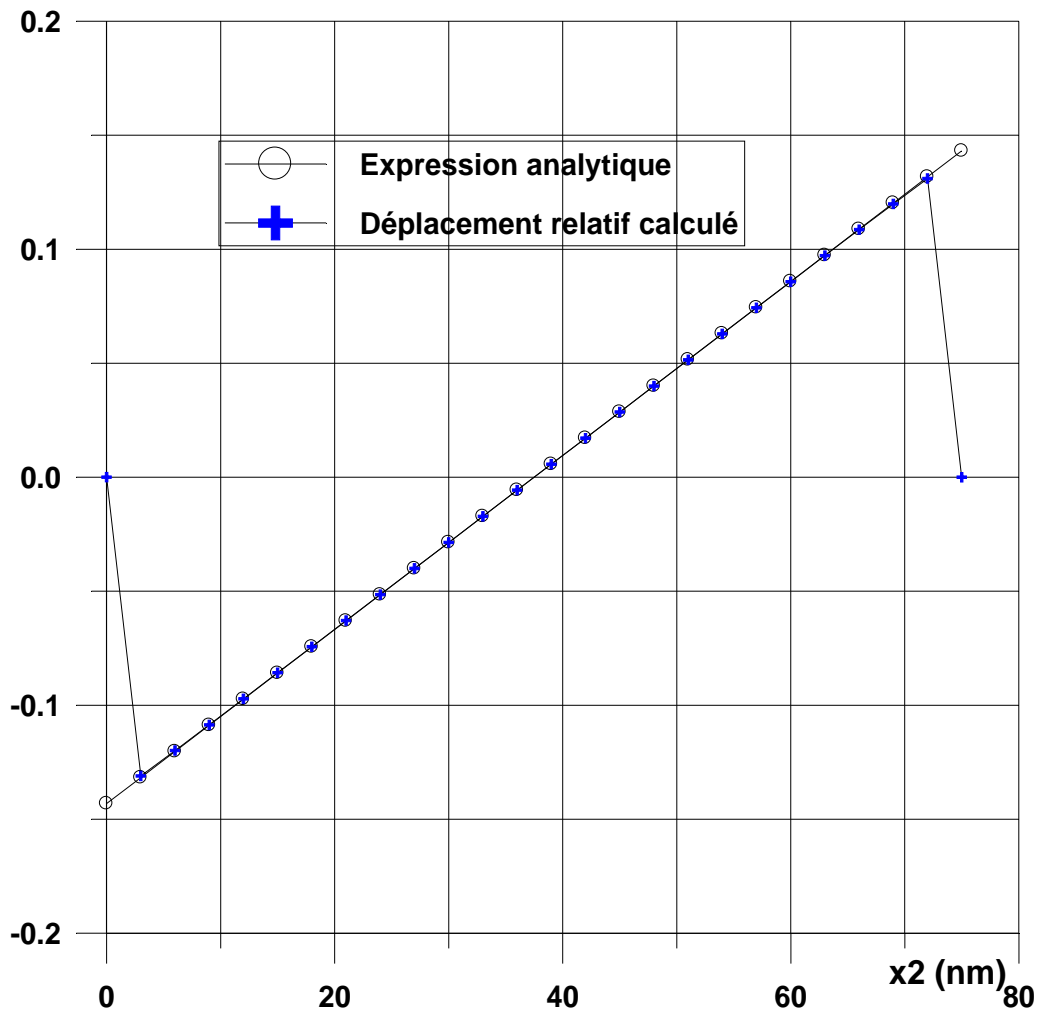


Figure 4.1 - Représentation du déplacement relatif interfacial.

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

Aussi pour $x_2 = 5b$, l'erreur relative définie par :

$$\Delta R = \left| \frac{(\Delta u_{\text{programme}} - \Delta u_{\text{exp.analytique}}) / \Delta u_{\text{exp.analytique}}}{\Delta u_{\text{exp.analytique}}} \right|$$

est estimé à 3.3 %. Cette parfaite superposition des courbes le long d'une période est due à la méthode théorique utilisée, au nombre d'harmoniques choisi et à la double précision des calculs.

4.4.3 Champs des déplacements

Nous commençons par présenter en figure 4.2 l'état initial (sans défaut) des unités structurales d'un bicristal mince dans le plan (x_1, x_2) . Les points sont tous équidistants et séparés par une distance de 0.5 nm. Les surfaces libres et l'hétéro-interface non déformées sont représentées par les lignes verticales situées respectivement à -7.5 nm, -5 nm et 0 nm.

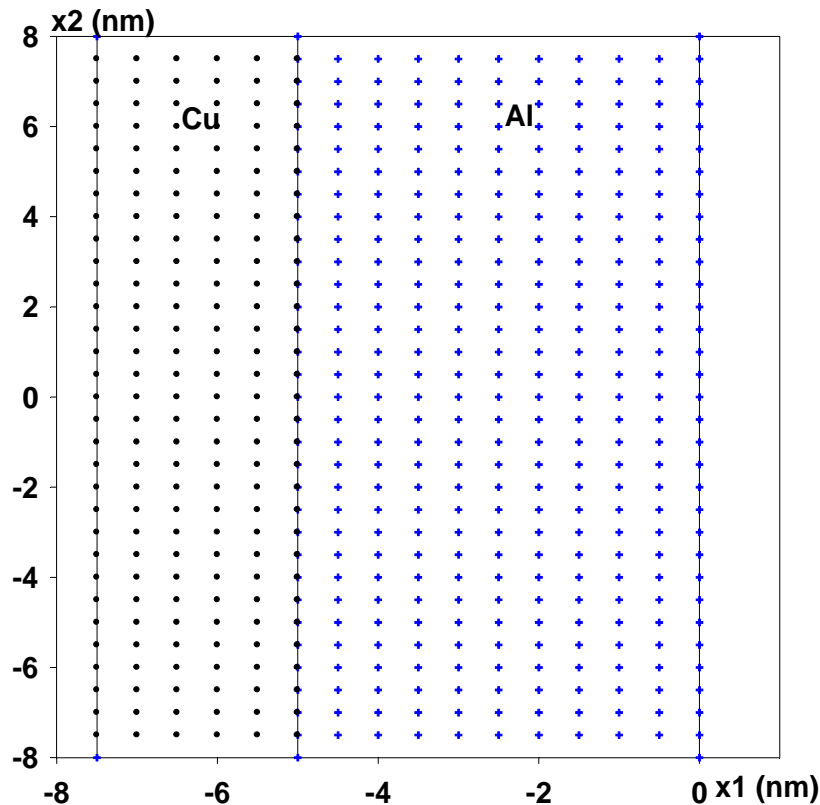


Figure 4.2 - Etat initial des unités structurales (sans défauts) représenté dans un plan (x_1, x_2)

Après introduction à l'origine du système Ox_1x_2 d'une dislocation coin, les résultats, présentés ci-dessous figures 4.3 et 4.4 correspondent au cas d'un bicristal mince Al/Cu(001).

Les déformations des cristaux sont visualisées par des réseaux pseudo-carrés de points noirs (Cu) et de croix (Al). La figure 4.3 correspond à $b = a_{Al}/2$ [110] soit dans le repère de travail $b_1=0$, $b_2= a_{Al}/\sqrt{2} = 0.2864$ nm, tandis que la figure 4.4 correspond à $b = a_{Al}/2$ [101] soit $b_1= a_{Al}/\sqrt{2} = 0.2864$ nm, $b_2= 0$ avec $a_{Al} = 0.405$ nm.

Sur les figures 4.3 et 4.4 le long de chaque hétéro-interface, les réseaux déformés de croix et de points sont discontinus. En effet, les discontinuités interfaciales de u , de module

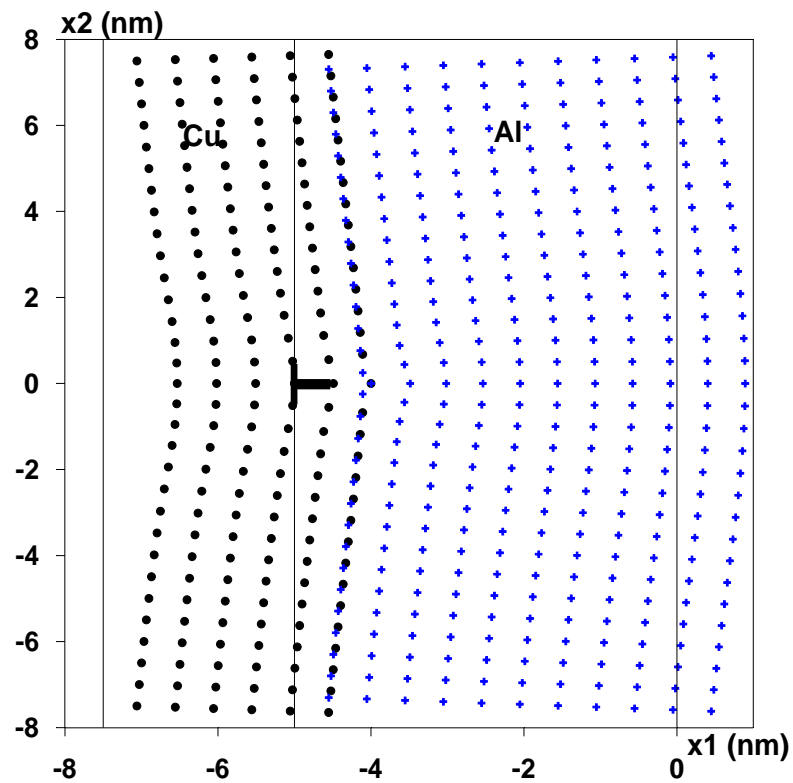


Figure 4.3 - Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Cu sous l'effet de dislocation coin interfaciale, C_{ij} anisotropes, $b // Ox_2$

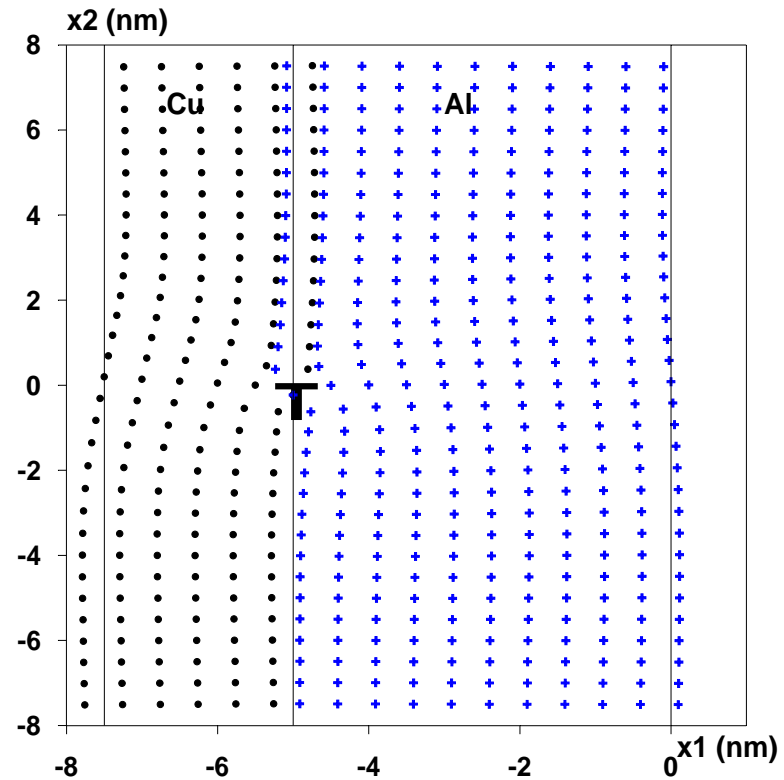


Figure 4.4 - Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Cu sous l'effet d'une dislocation coin interfaciale, C_{ij} anisotropes, $b // Ox_1$

$a_{Al}/\sqrt{2}$ sont bien visibles en dessous et en dessus du cœur des dislocations. Ces figures illustrent bien la déformabilité du cristal Al par rapport à Cu, plus rigide en particulier pour la figure 4.3.

Notons que pour mieux suggérer les déformations du bilame, les déplacements u_k ont été multipliés en chaque point par 3.

4.4.4 Champs des contraintes

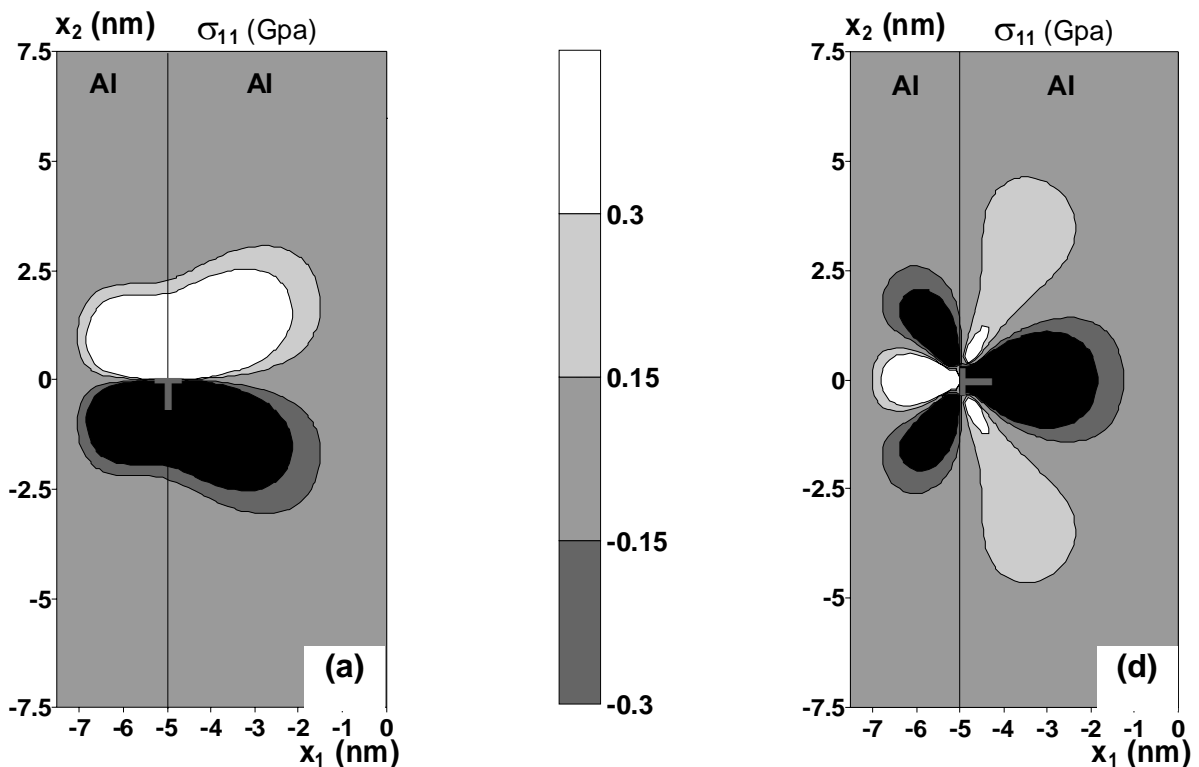
4.4.4.1 Bicristal homogène

Nous présentons dans cette partie la distribution des iso-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ et ± 0.3 GPa autour d'une dislocation coin, pour deux orientations du vecteur de burgers b , dans le cas de cristaux homogènes Al/Al et Cu/Cu.

Les figures (4.5-a, b, c, d, e et f) correspondent au cas du bicristal mince Al/Al pour les deux orientations de b suivantes:

$b // Ox_1$ figures (4.5-a, b, c) et $b // Ox_2$ figures (4.5-d, e, f).

Les figures (4.6-a, b, c, d, e et f) correspondent au cas du bicristal mince Cu/Cu pour les mêmes orientations de b que précédemment.



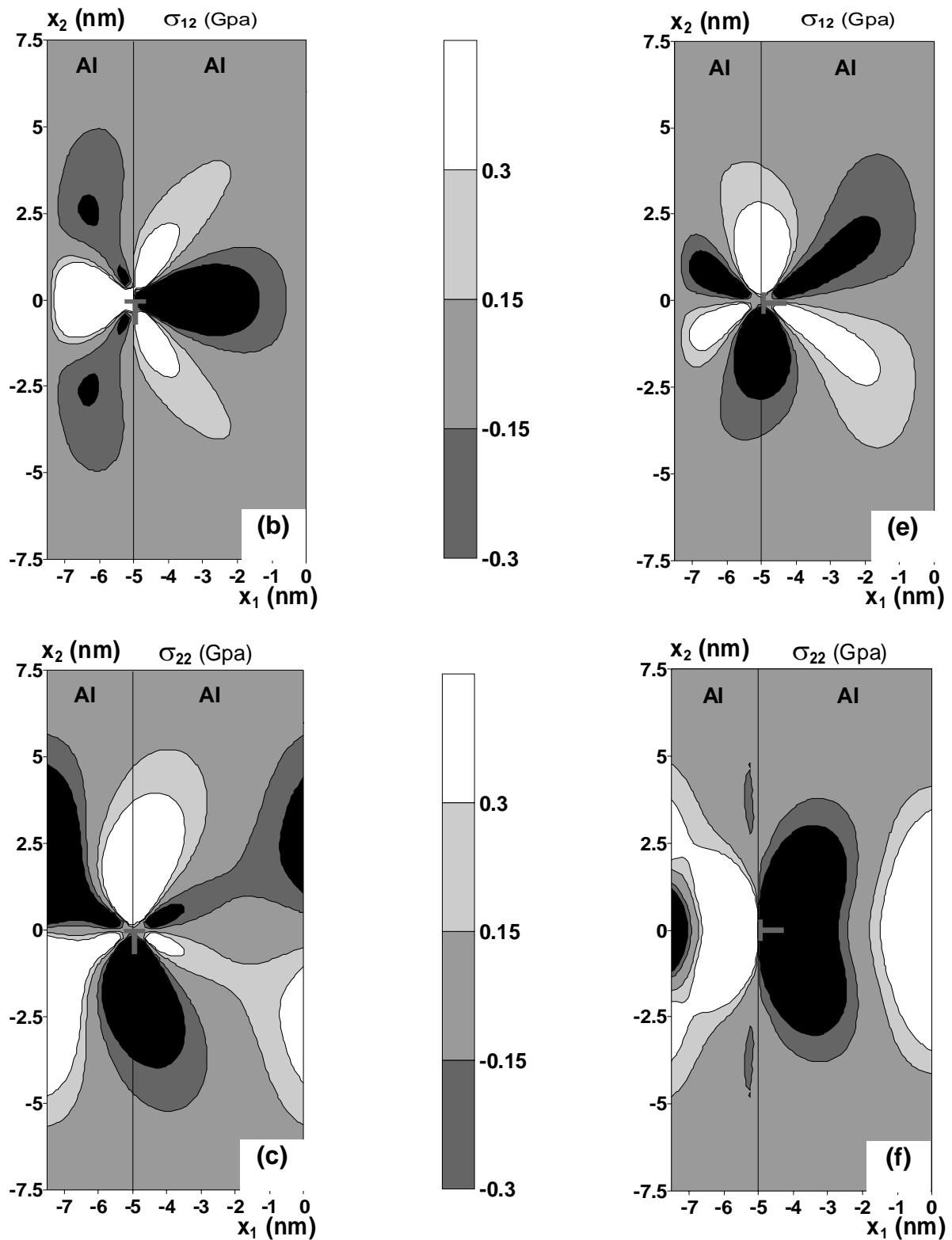
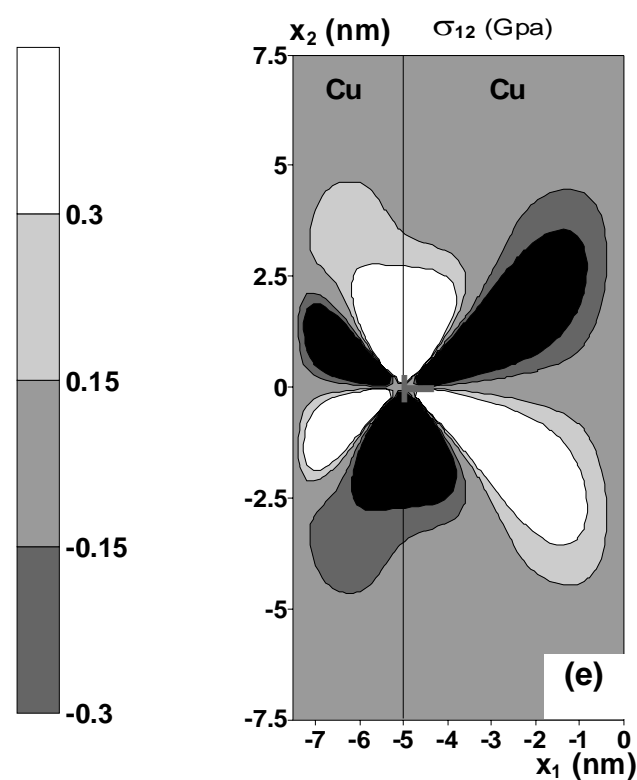
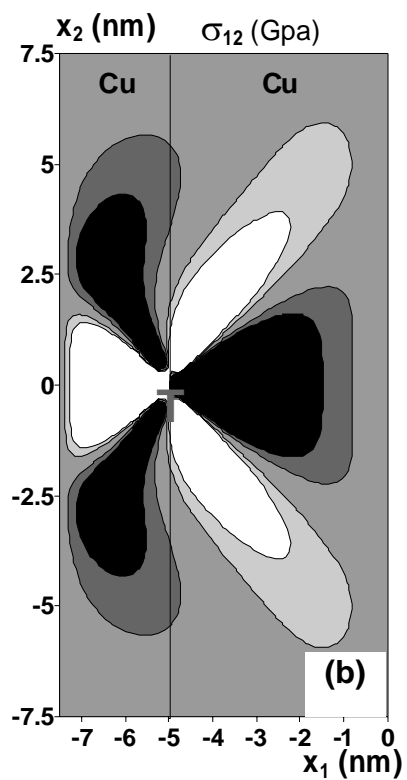
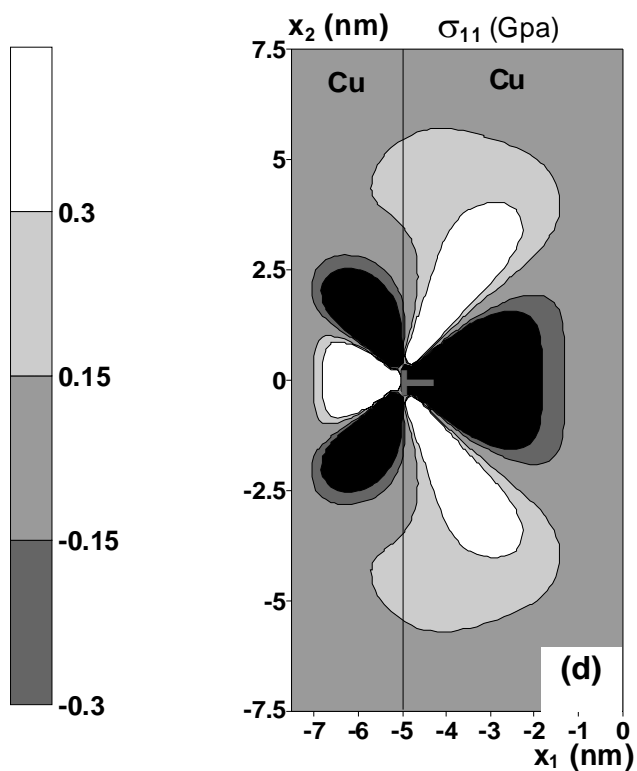
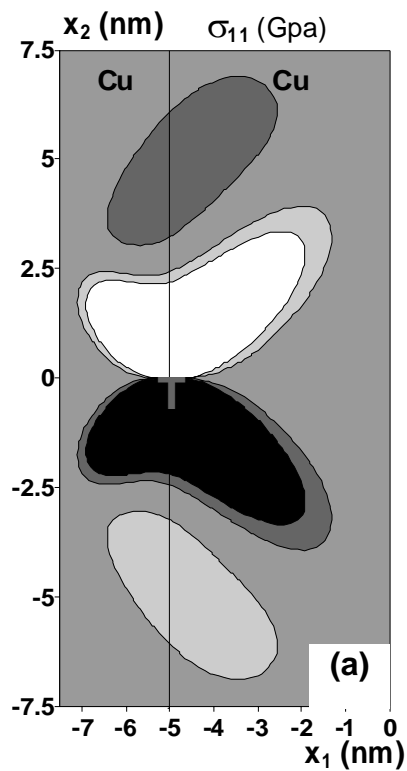


Figure 4.5 - Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un bilame mince Al/Al, C_{ij} anisotropes, (a,b et c) $b//Ox_1$, (d, e et f) $b//Ox_2$



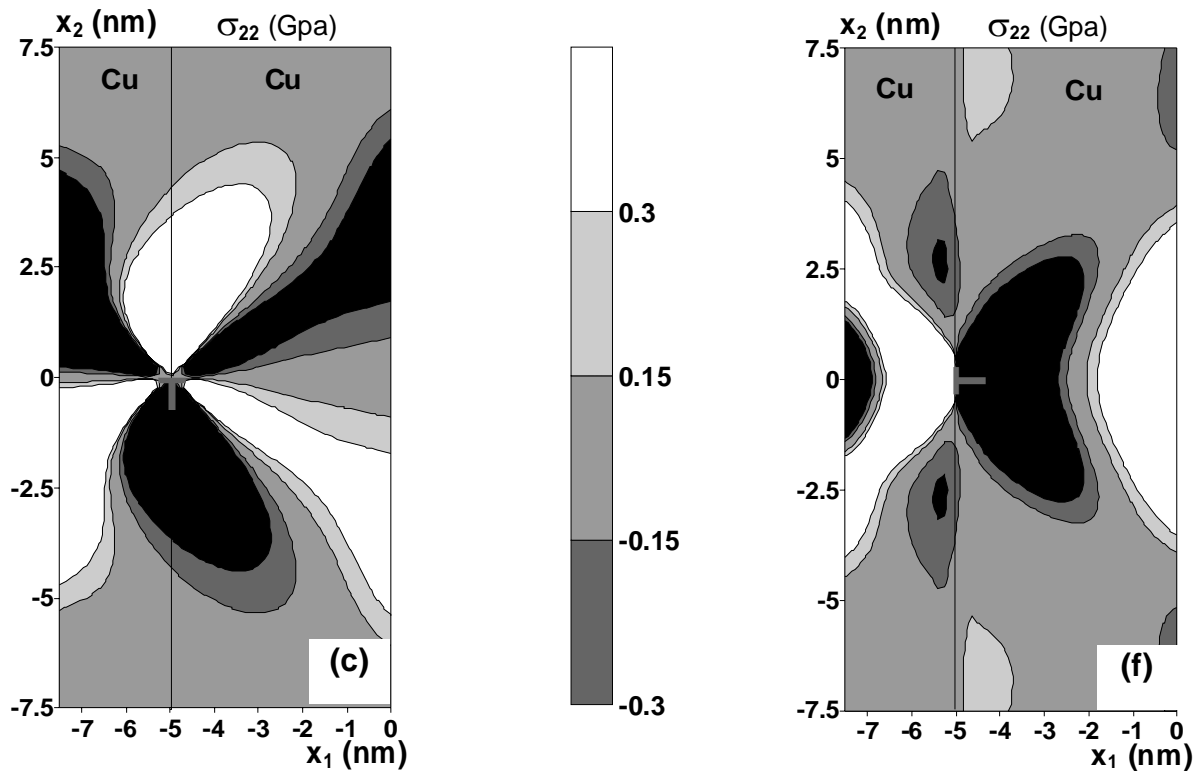
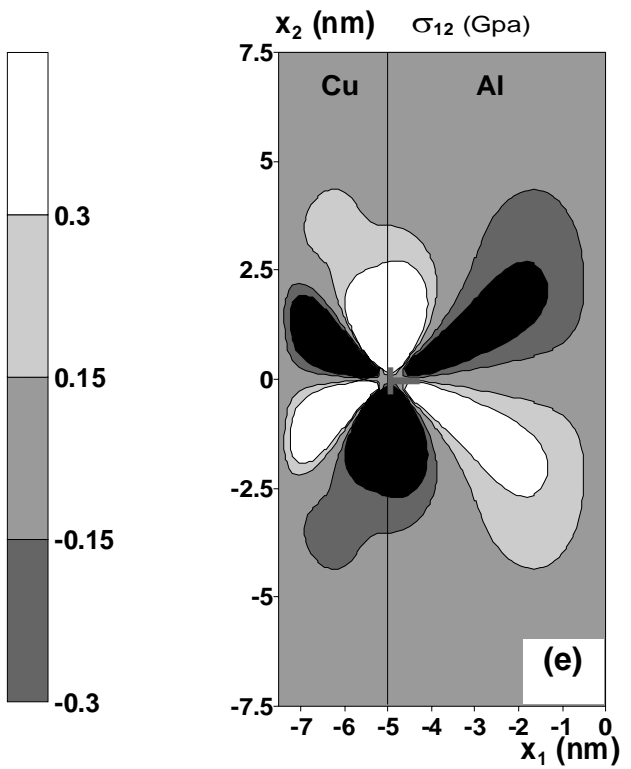
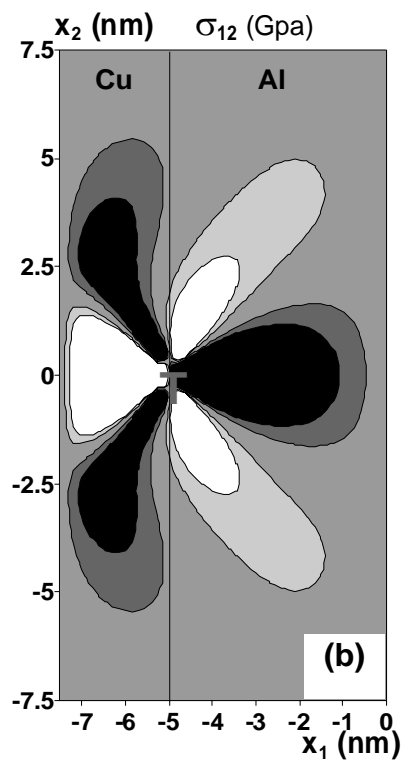
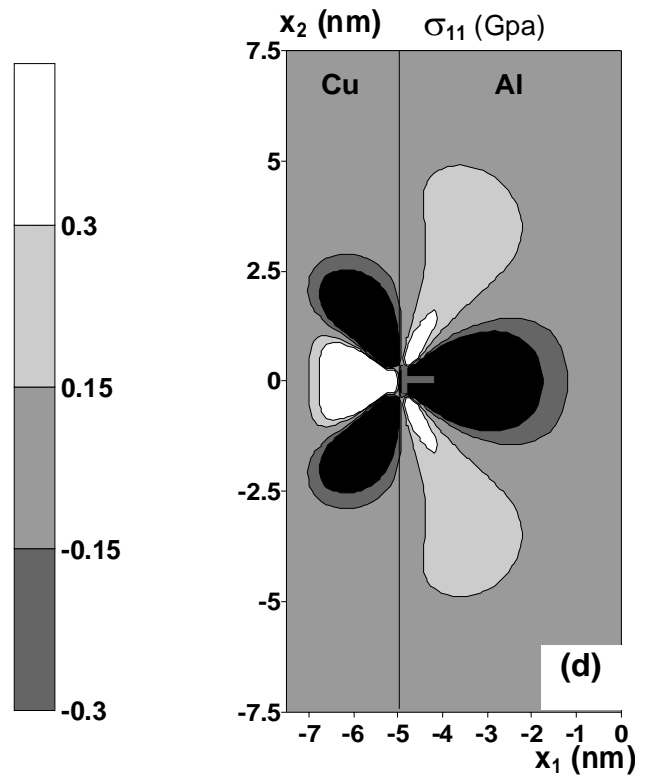
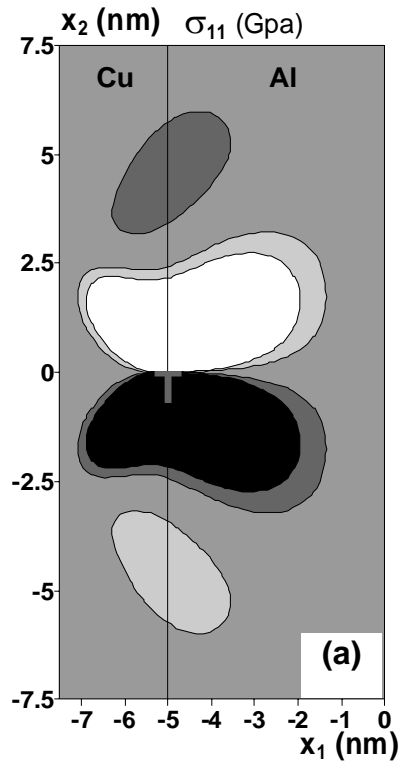


Figure 4.6 - Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un bilame mince Cu/Cu, C_{ij} anisotropes, (a,b et c) $b//Ox_1$, (d, e et f) $b//Ox_2$

4.4.4.2 Bicristal hétérogène

Nous présentons dans cette partie la distribution des iso-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ et ± 0.3 GPa autour d'une dislocation coin, pour deux orientations du vecteur de burgers b , dans le cas de cristal hétérogène Al/Cu.

Les figures (4.7-a, b, c, d, e et f) correspondent au cas du bicristal mince Al/Cu pour les mêmes orientations de b que précédemment.



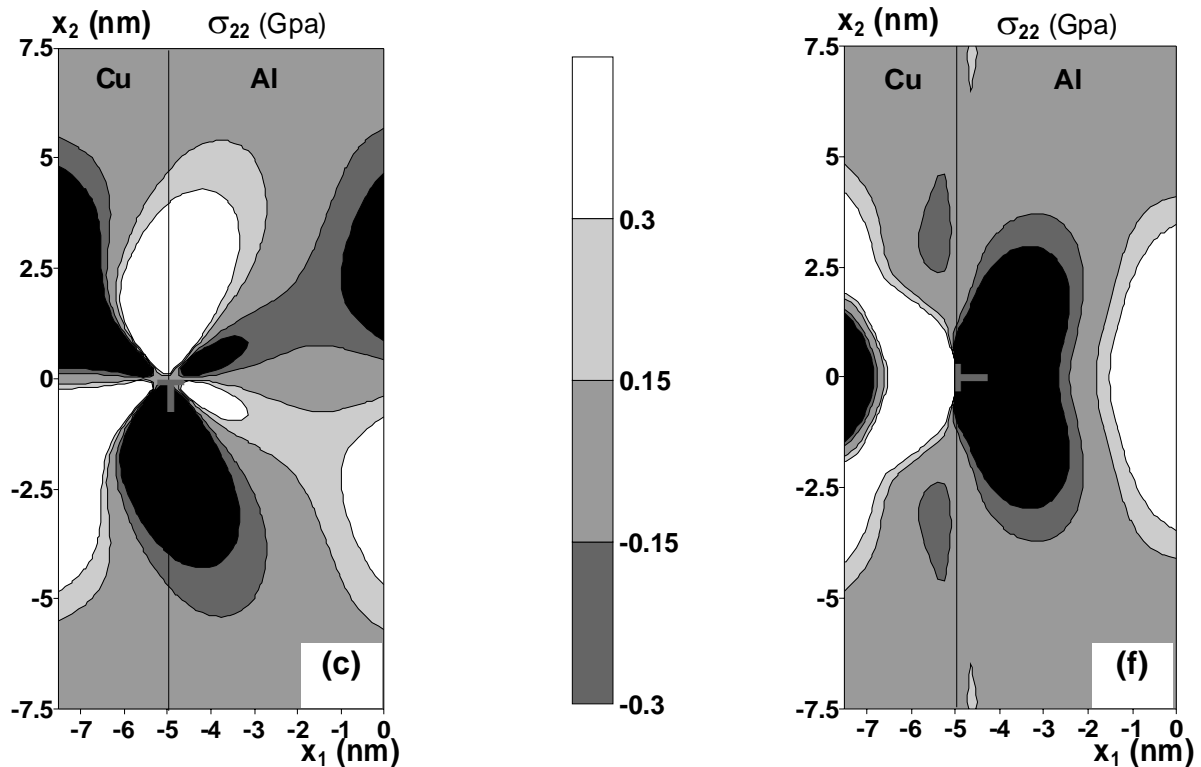


Figure 4.7 - Courbes d'equi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un bilame mince Al/Cu, C_{ij} anisotropes, (a,b et c) $b//Ox_1$, (d, e et f) $b//Ox_2$

Ces figures montrent :

- Il y a une grande dispersion des contraintes dans le précipité Cu que dans Al a cause de la dureté du premier.
 - Que toutes les courbes sont symétrique par rapport à l'axe Ox_1 et semblent suivre la même allure pour chaque type de contrainte.
 - La continuité des contraintes σ_{11} et σ_{12} le long de l'interface et leurs nullités à la surface libre conformément aux conditions aux limites.
 - Il est remarquable de constater que les valeurs de σ_{22} pour $x_2 = 0$ figures 4.5(c,f), 4.6(c,f) et 4.7(c,f), près des surfaces libres de droite et de gauche, sont respectivement négatives (compression) du coté du plan supplémentaire et positives (traction) de l'autre. Elles atteignent des pic très élevés dans ces régions : les maximums sont sur l'axe Ox_1 aux points d'ordonnées (0,0) et (0,h), ces effets de surfaces sont donc très importants sur les échantillons observés en MET à haute résolution [21,47]. Les figures 4.5(a,b,d,e), 4.6(a,b,d,e) et 4.7(a,b,d,e) montrent bien l'écrantage des iso-contraintes σ_{11} et σ_{12} par les surfaces libres.
- Les iso-contraintes $\sigma_{11} = \sigma_{12} = 0$ rencontre bien sur les deux surfaces libres.

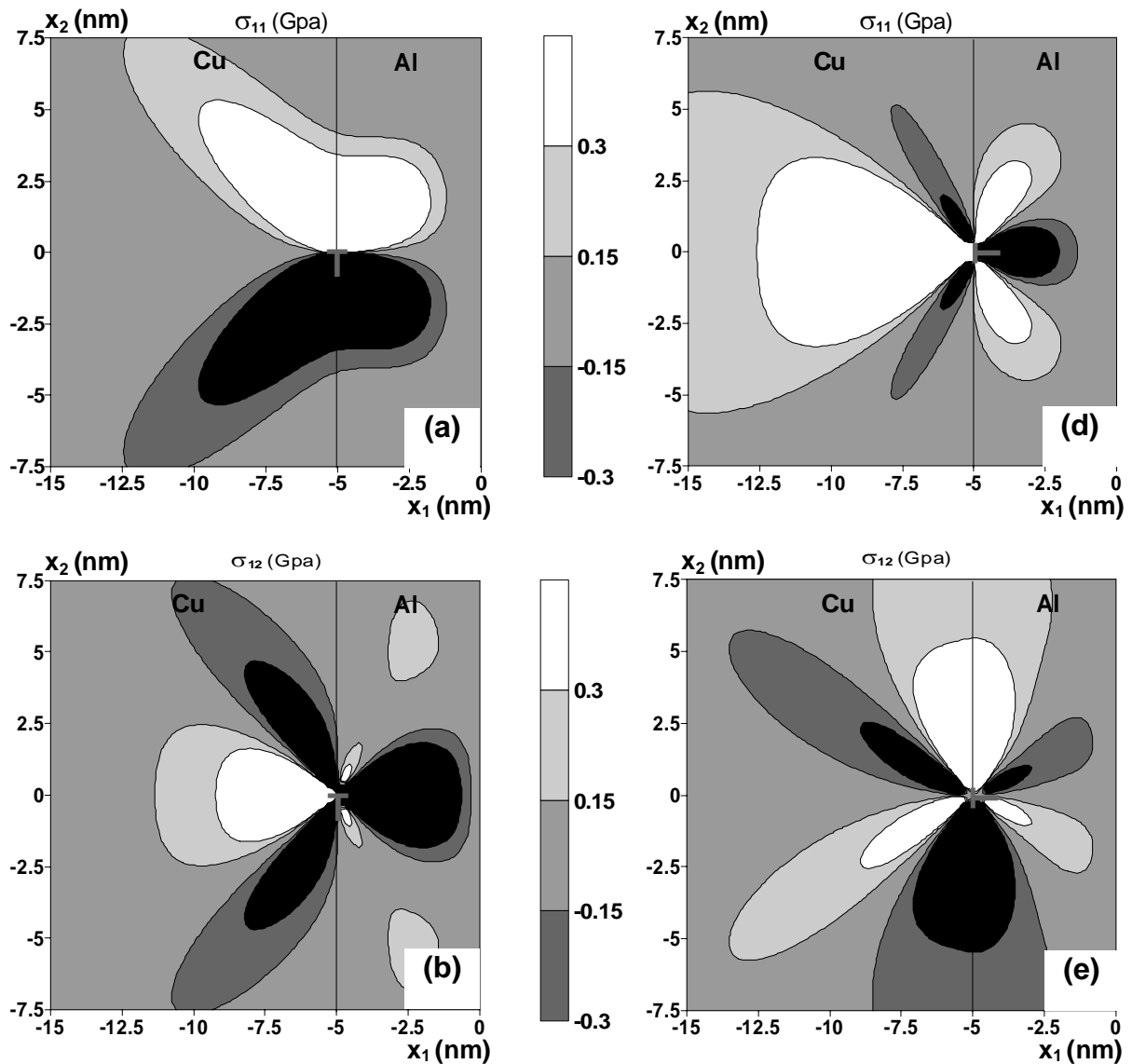
4.5 Deuxième configuration couche/ substrat

Pour mieux montrer l'effet des surfaces libres sur la dispersion des contraintes, nous avons établi un programme basé sur la même méthode que précédemment (bilame mince) mais cette fois-ci pour le cas de bicristaux semi-infinis.

Nous présentons dans cette partie la distribution des iso-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ et ± 0.3 GPa autour d'une dislocation coin, pour deux orientations du vecteur de burgers b , dans le cas de cristal hétérogène Al/Cu.

Les figures (4.8-a, b, c, d, e et f) correspondent au cas d'une couche Al sur un substrat Cu pour deux orientations de b suivantes:

$b // Ox_1$ figures (4.8-a, b, c) et $b // Ox_2$ figures (4.8-d, e, f)



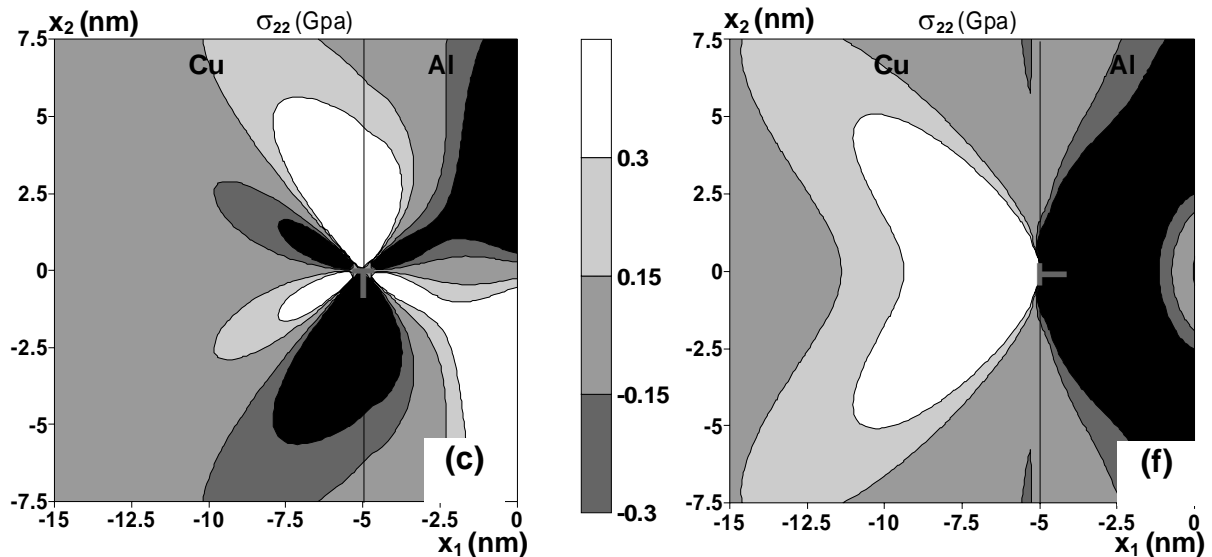


Figure 4.8 - Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un milieu semi infini Al/Cu, C_{ij} anisotropes, (a,b et c) $b//Ox_1$, (d, e et f) $b//Ox_2$

Ces figures montrent bien l'effet de la surface libres de la couche pour σ_{22} , et on remarque que les valeurs de σ_{22} pour $x_2 = 0$, près de la surface libre sont négatives (compression).

4.6 Troisième configuration milieu infini

pour enrichir nos constatations quant à l'effet des surfaces libres sur la dispersion des contraintes, nous avons établi un programme basé sur la même méthode que précédemment (bilame mince) mais cette fois-ci pour le cas de bicristaux infinis.

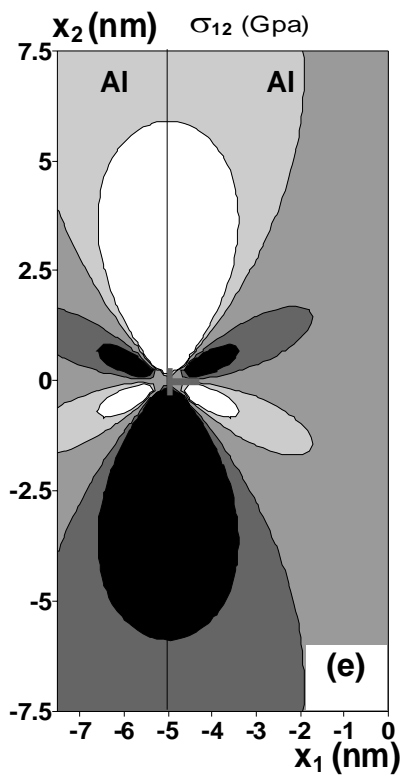
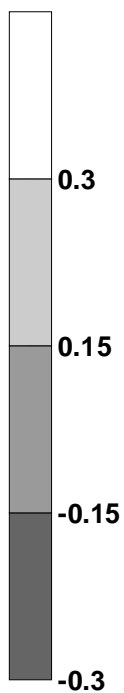
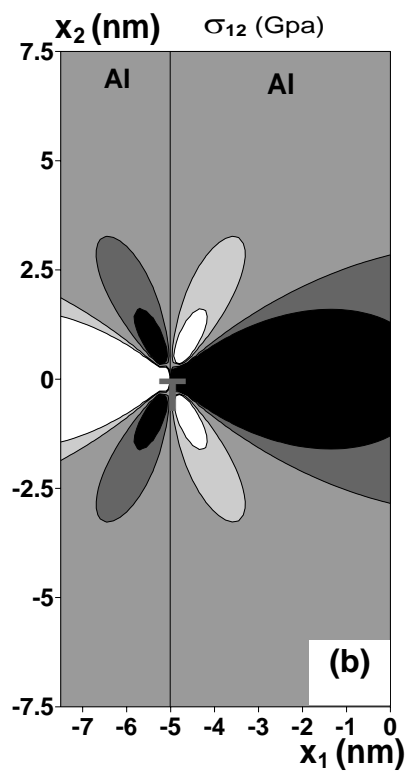
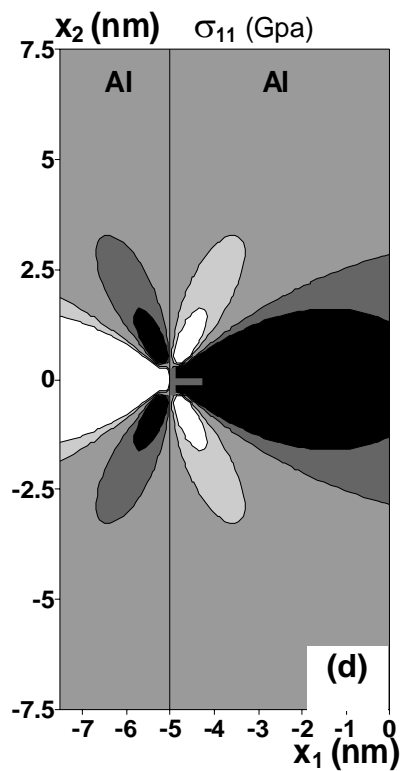
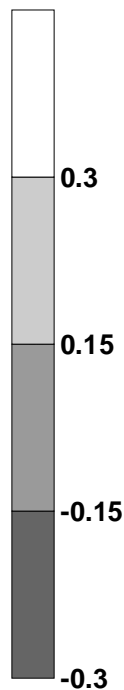
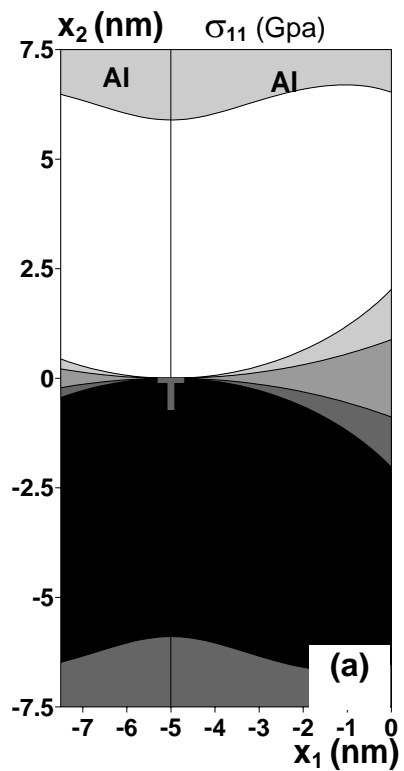
Pour la représentation, le tracé a été limité à une épaisseur égale à $h = 7.5$ nm .

4.6.1 Bicristal homogène

Dans les figures ci-dessous sont représentées, les courbes des iso-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ et ± 0.3 GPa autour d'une dislocation coin, pour deux orientations du vecteur de burgers b , dans le cas des cristaux homogènes Al/Al et Cu/Cu.

- $b//Ox_1$ figures (4.9-a, b, c et 4.10-a, b, c).

- $b//Ox_2$ figures (4.9 -d, e, f et 4.10-d, e, f)



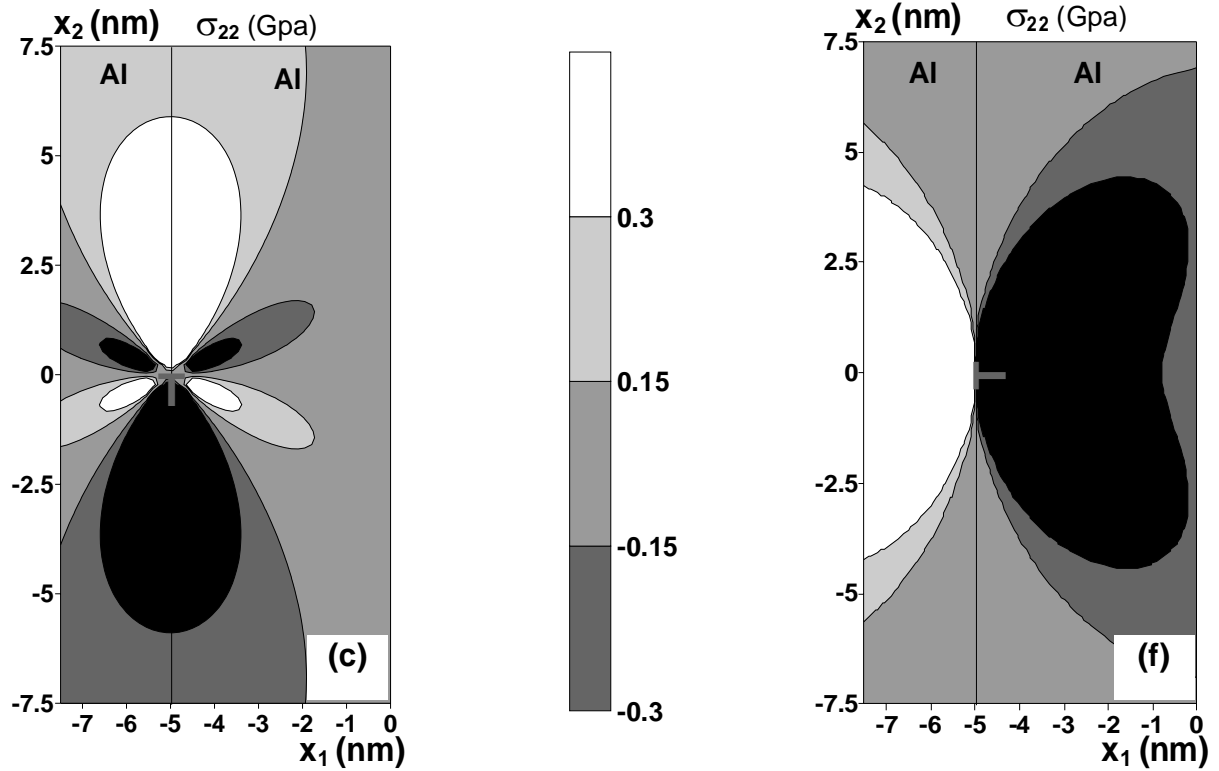
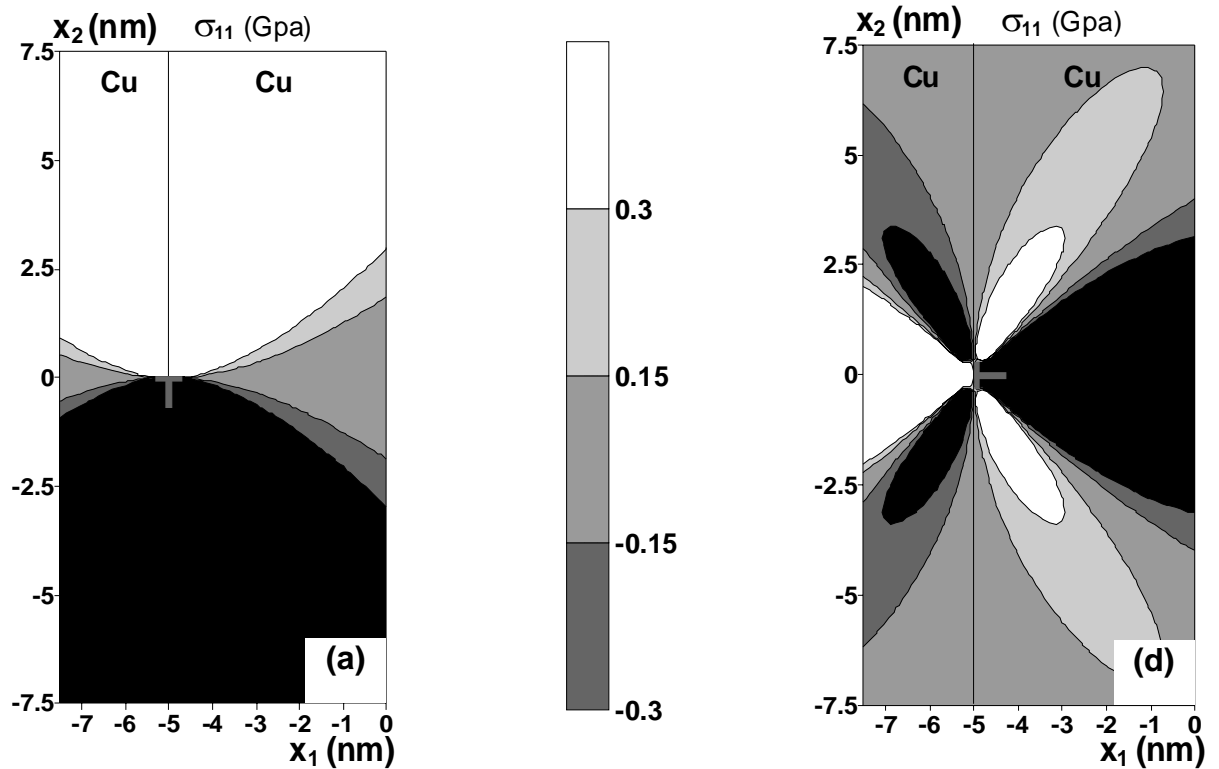


Figure 4.9 - Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un milieu infini Al/Al, C_{ij} anisotropes, (a,b et c) b// Ox_1 , (d, e et f) b// Ox_2



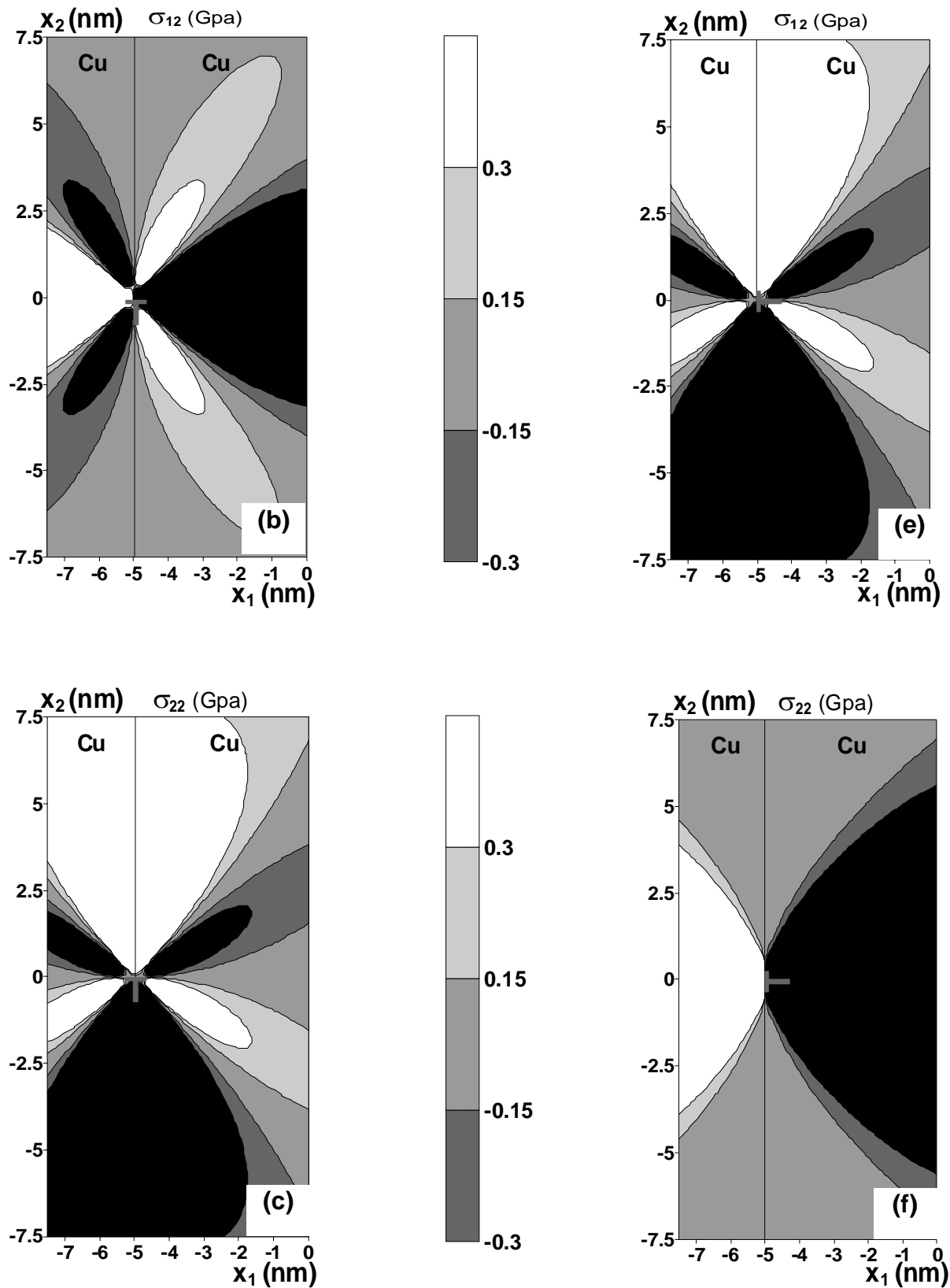
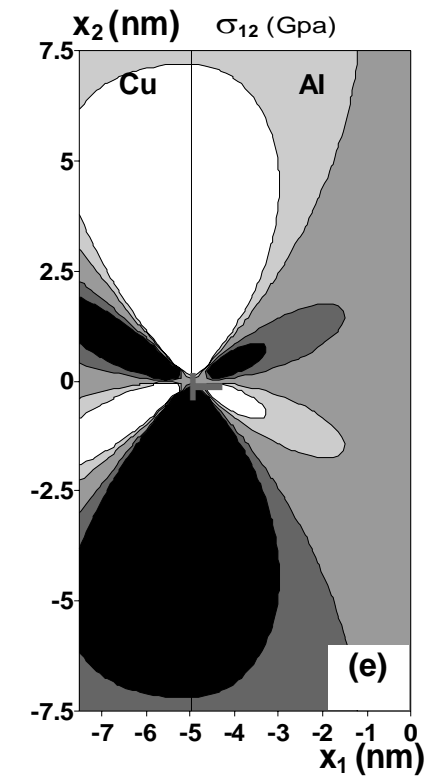
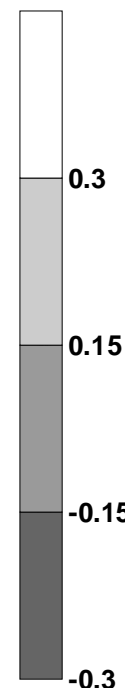
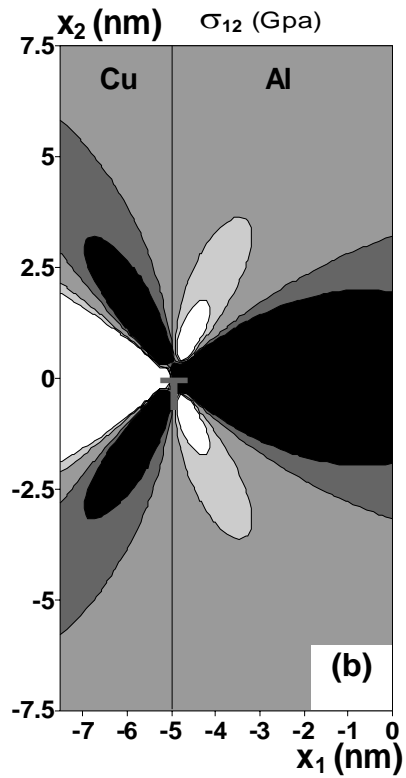
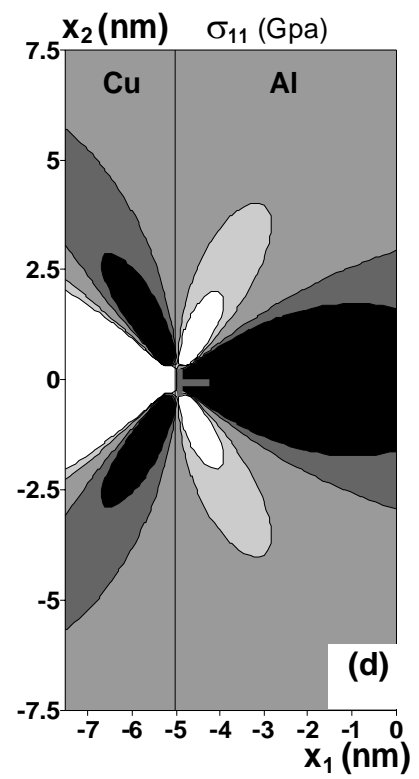
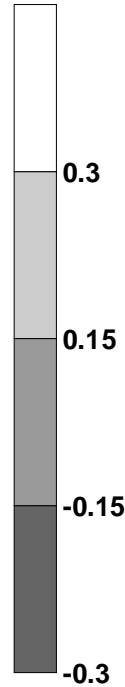
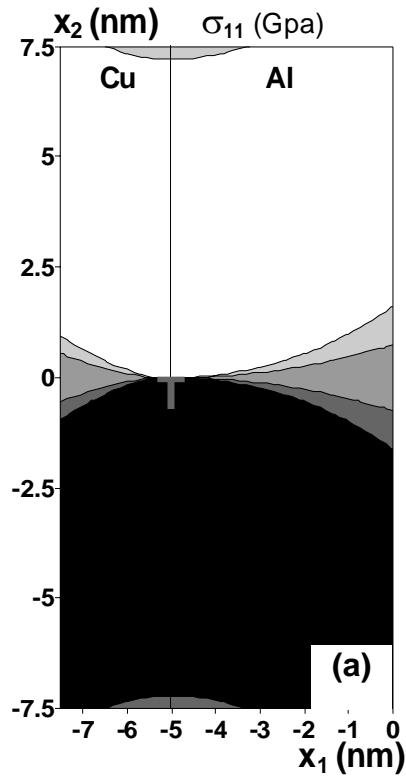


Figure 4.10 - Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placée à l'interface d'un milieu infini Cu/Cu, C_{ij} anisotropes, (a, b et c) $b // O x_1$, (d, e et f) $b // O x_2$

4.6.2 Bicristal hétérogène

Les figures (4.11-a, b, c, d, e et f) correspondent au cas du bicristal infini hétérogène Al/Cu pour les mêmes orientations de b que précédemment.



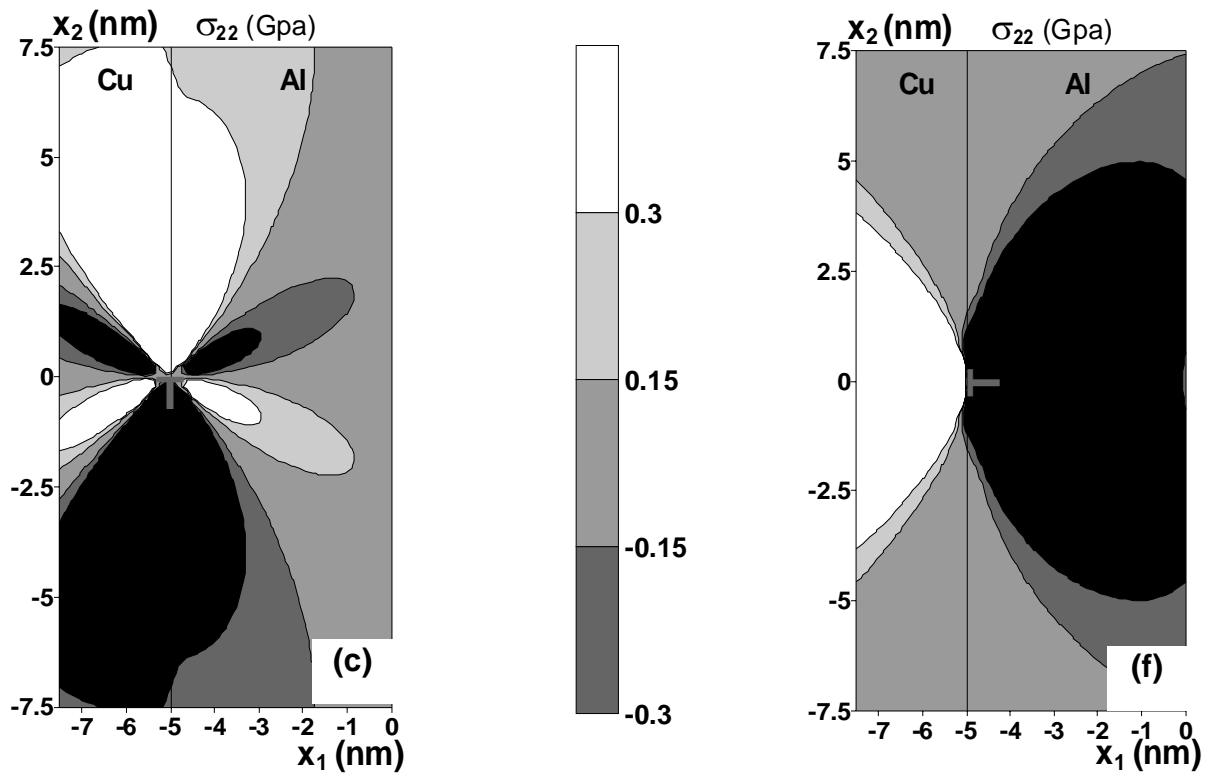


Figure 4.11 - Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un milieu infini Al/Cu, C_{ij} anisotropes, (a , b et c) $b//Ox_1$, (d , e et f) $b//Ox_2$

Ces figures montrent que :

- la continuité des contraintes σ_{11} et σ_{12} le long de l'interface et leurs nullités à la surface libre conformément aux conditions aux limites.
- La discontinuité des contraintes σ_{22} est beaucoup plus visible dans le cas du matériau hétérogène Al/Cu (figure 4.11-c).
- Les courbe des contraintes σ_{11} , σ_{12} et σ_{22} dans le cas du matériau hétérogène Al/Cu se situe entre ceux des deux matériaux homogènes Al/Al et Cu/Cu.

4.7 Comparaison avec les résultats obtenus en élasticité isotrope

Le programme élaboré, étant basé sur une analyse par séries de Fourier en élasticité anisotrope, doit pouvoir donner satisfaction, s'il est exécuté avec des données quasi-isotropes c'est à dire très proche de l'isotropie. En effet en remplaçant dans notre programme les constantes élastiques C_{ij} anisotropes par ceux isotropes et en faisant quelques manipulations numériques basées sur une précédente expérimentation numérique d'un cas semblable [72,79], le programme permet de retrouver les résultats en déplacement et en contraintes obtenus dans le cas isotrope.

Les C_{ij} isotropes sont calculées par les formules classique d'élasticité (Hirth et col., 1982 [84])

$$C_{11} = \lambda + 2\mu \quad ; \quad C_{12} = \lambda \quad ; \quad C_{44} = \mu \quad \text{et} \quad \lambda = \frac{2 \nu \mu}{1 - 2 \nu} \quad (4.2)$$

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

Pour les applications numériques les valeurs des constantes C_{11} et C_{12} utilisées sont égales aux valeurs isotropes calculées à partir de (4.1), cependant C_{44} est choisie égale à $(\mu - \mu / 1000)$.

Les racines du polynôme choisies sont $p_{\alpha} = 10^{-14} \pm iG$ [79].

Le tableau 4.2 montre les paramètres cristallins, les modules d'élasticité et les constantes élastiques isotropes de Al et Cu utilisés dans nos calculs.

Cristal	a (nm)	μ (GPa)	ν	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
Al	0.405	26.50	0.347	113.1	60.10	26.50
Cu	0.405	46.32	0.36	211.748	119.1	46.32

Tableau 4.2 - Paramètres cristallins, modules d'élasticité et constantes élastiques isotropes pour Al et Cu [71-79-80]

Facteur d'anisotropie de Zener

$$A = \frac{2 \cdot C_{44}}{C_{11} - C_{12}} = \mathbf{1.21} \text{ pour Al et } \mathbf{3.20} \text{ pour Cu .}$$

4.7.1 Première configuration bilame mince

4.7.1.1 Champs des déplacements

En se limitant au matériau hétérogène Al/Cu pour les deux directions du vecteur de Burgers ($b // O x_1$ et $b // O x_2$) et en superposant les courbes du cas anisotrope avec ceux du cas quasi-isotrope (figures 4.12 et 4.13)

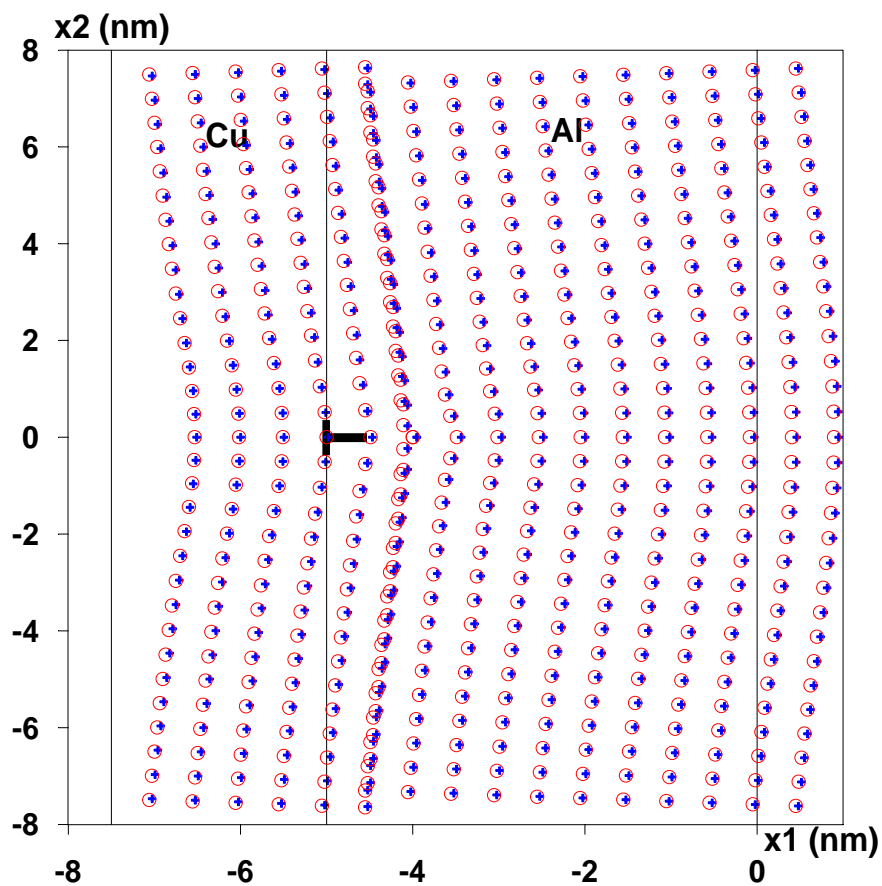


Figure 4. 12 - Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Cu sous l'effet d'une dislocation coin interfaciale, (○) C_{ij} quasi-isotropes et (+) C_{ij} anisotropes , $b // O x_2$

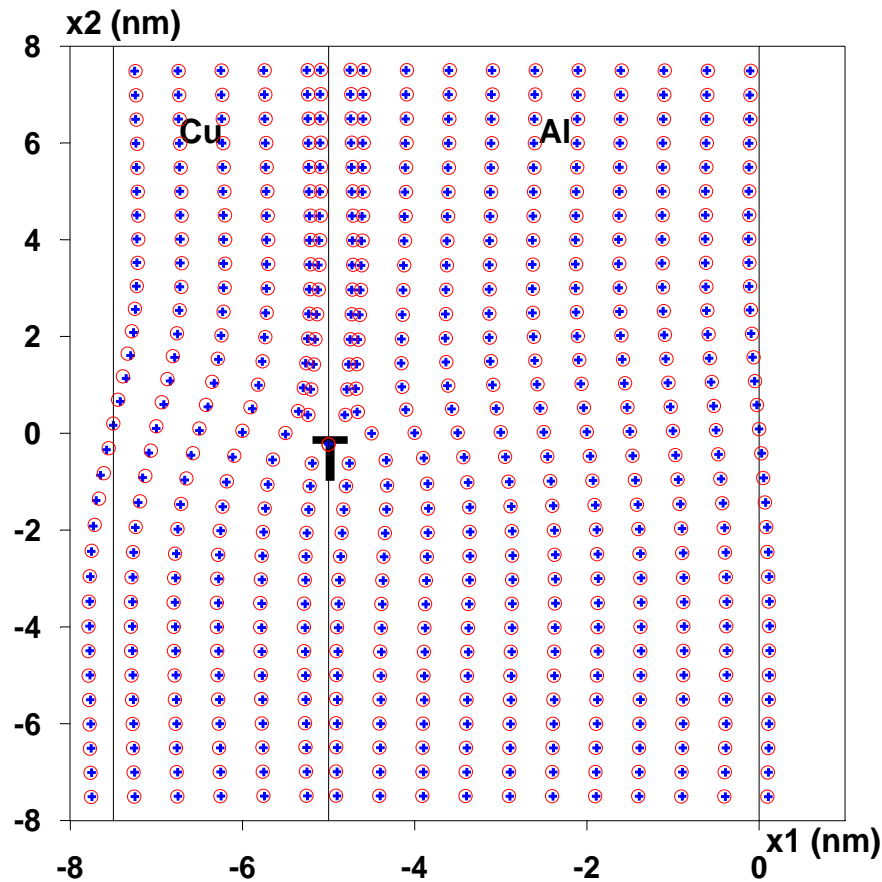


Figure 4. 13 - Schéma illustrant les champs des déplacements du bilame Al/Cu sous l'effet d'une dislocation coin interfaciale, (○) C_{ij} quasi-isotropes et (+) C_{ij} anisotropes, $b // Ox_1$

Nous constatons évidemment que les résultats obtenus sont très comparables aux résultats de Bonnet [45] obtenus en élasticité isotrope, et surtout relativement proches de ceux anisotropes des figures 4.3 et 4.4 .

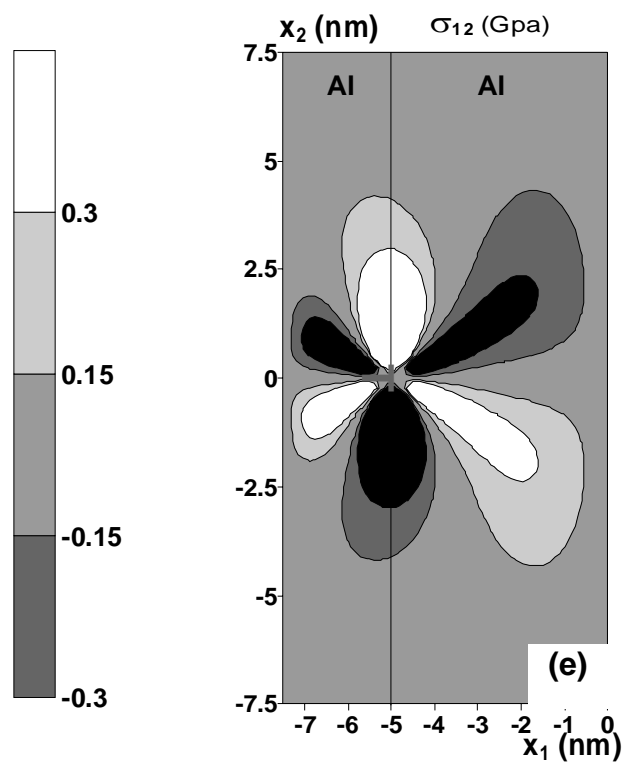
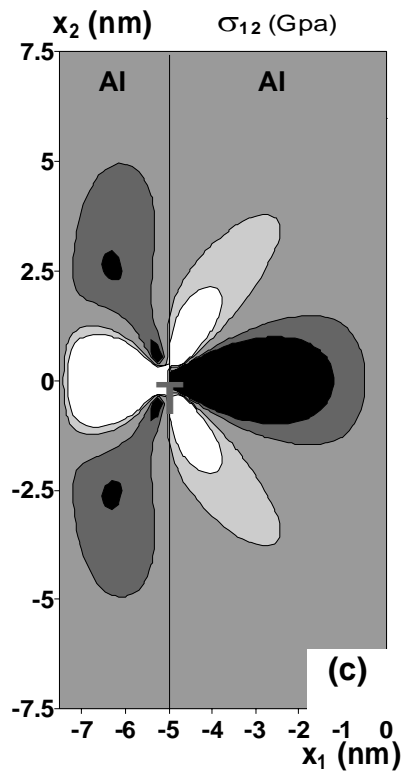
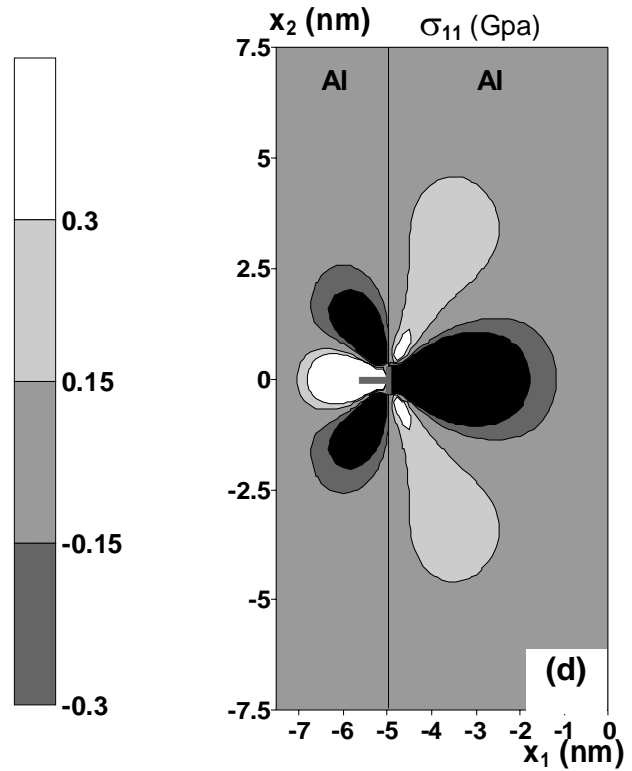
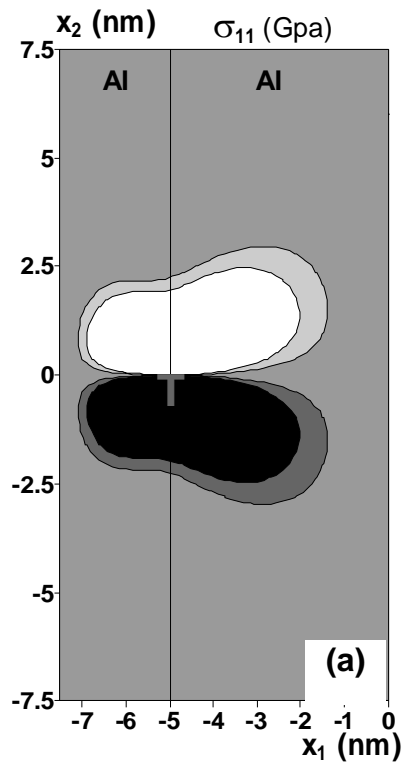
4.7.1.2 Champs des contraintes

4.7.1.2.1 Bicristal homogène

Nous présentons maintenant la distribution des iso-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ et ± 0.3 GPa autour d'une dislocation coin, pour deux orientations du vecteur de burgers b , dans le cas des cristaux homogène Al/Al, Cu/Cu.

Les figures (4.14 -a, b, c, d, e et f) correspondent au cas du bicristal mince Al/Al pour les mêmes orientations de b que précédemment.

Les figures (4.15 -a, b, c, d, e et f) correspondent au cas du bicristal mince Cu/Cu pour les mêmes orientations de b que précédemment.



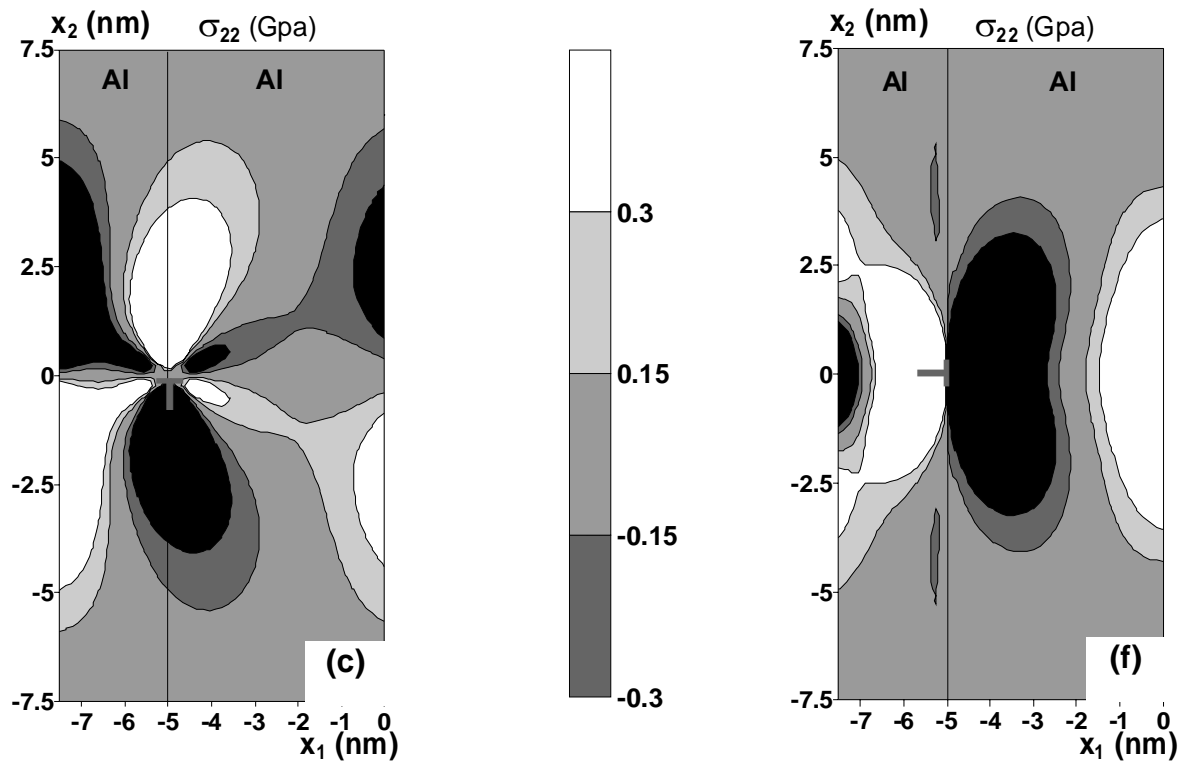
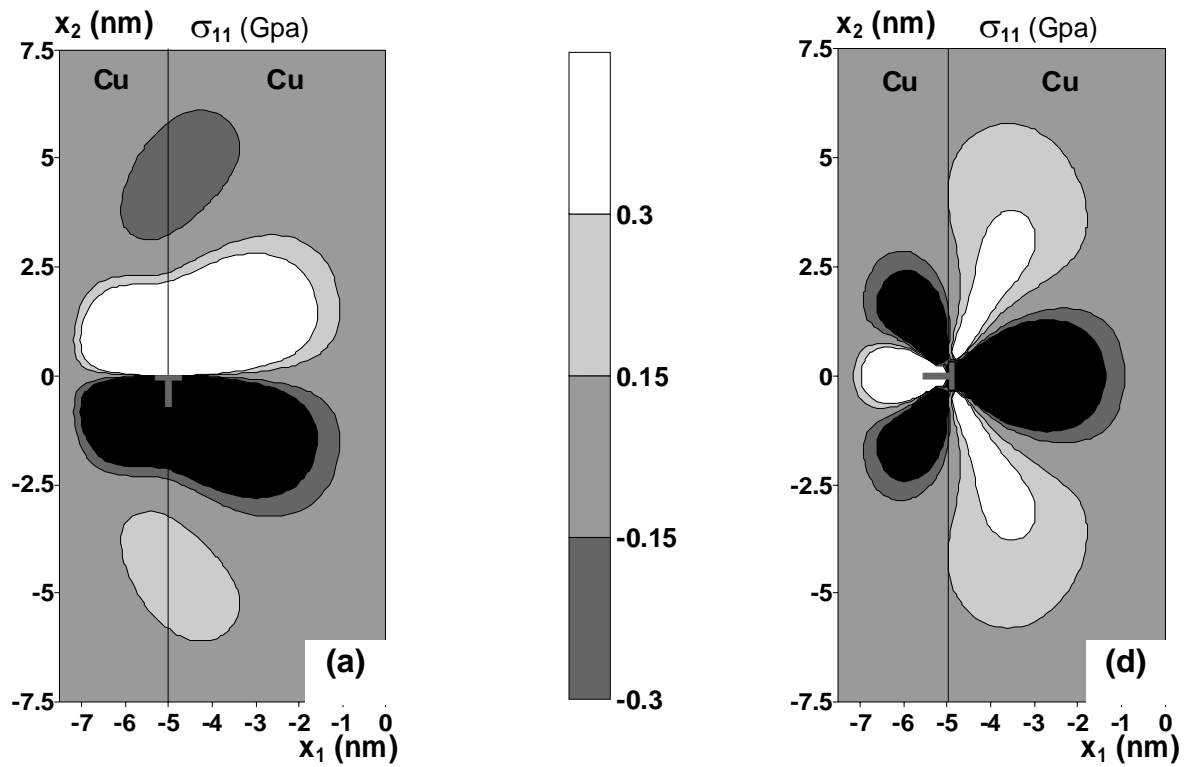


Figure 4.14 - Courbes d'equi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placée à l'interface d'un bilame mince Al/Al, C_{ij} quasi-isotropes, (a,b et c) $b//Ox_1$, (d, e et f) $b//Ox_2$



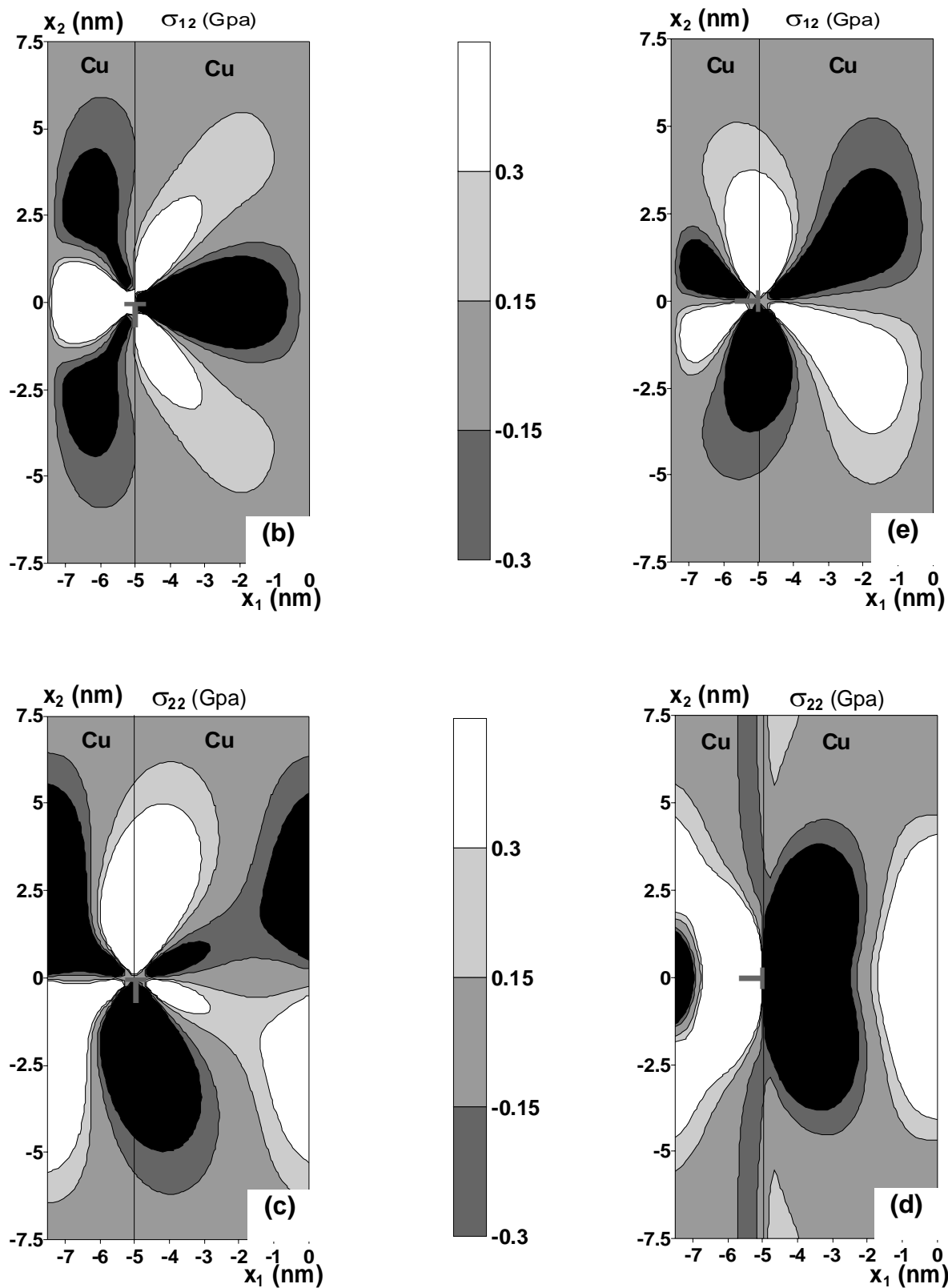
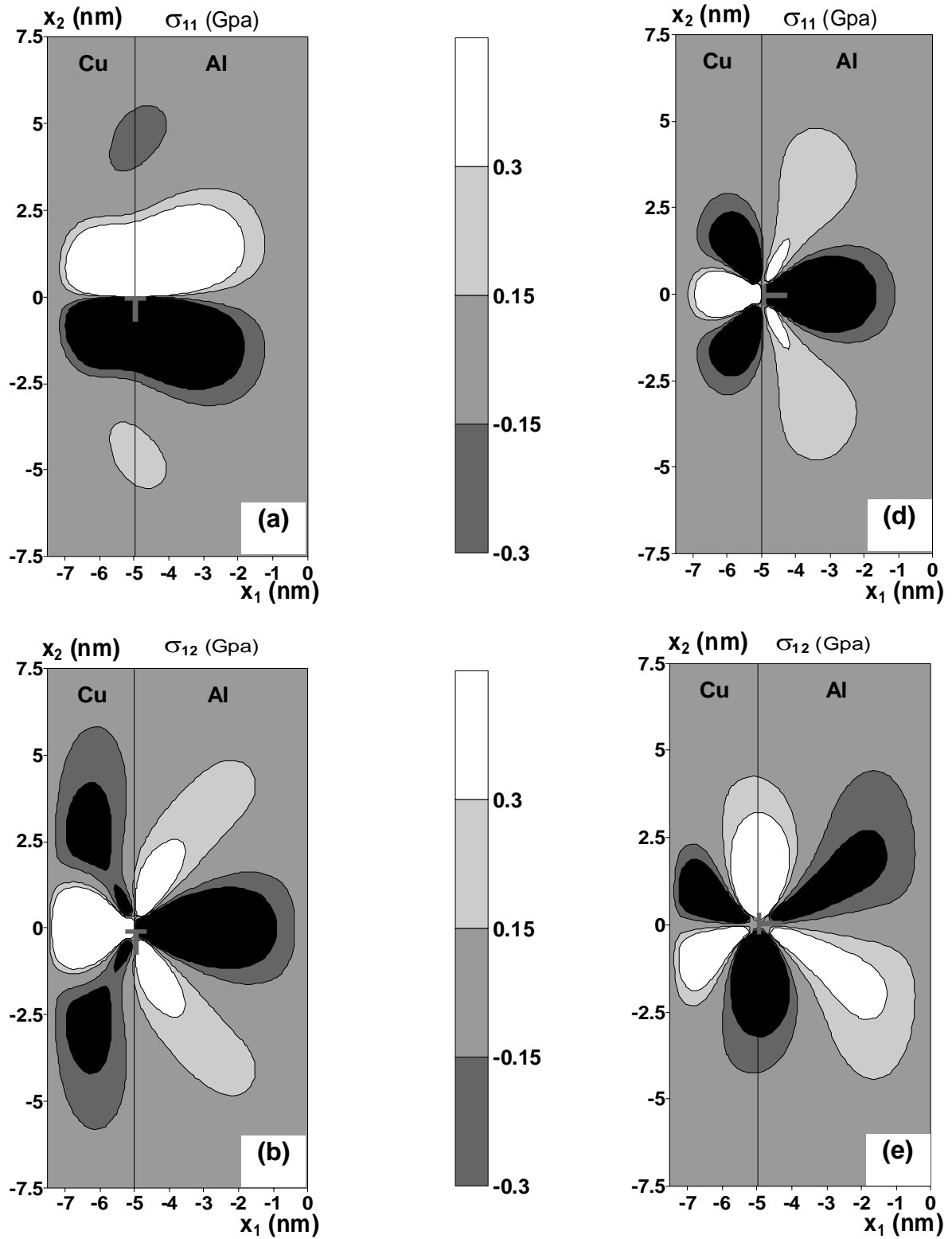


Figure 4.15 - Courbes d'equi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un bilame mince Cu/Cu, C_{ij} quasi-isotropes, (a,b et c) b// Ox_1 , (d, e et f) b// Ox_2

4.7.1.2 Bicristal hétérogène

Nous présentons maintenant la distribution des iso-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ et ± 0.3 GPa autour d'une dislocation coin, pour deux orientations du vecteur de burgers b , dans le cas des cristal hétérogène Al/Cu.

Les figures (4.16 -a, b, c, d, e et f) correspondent au cas du bicristal mince Al/Cu.



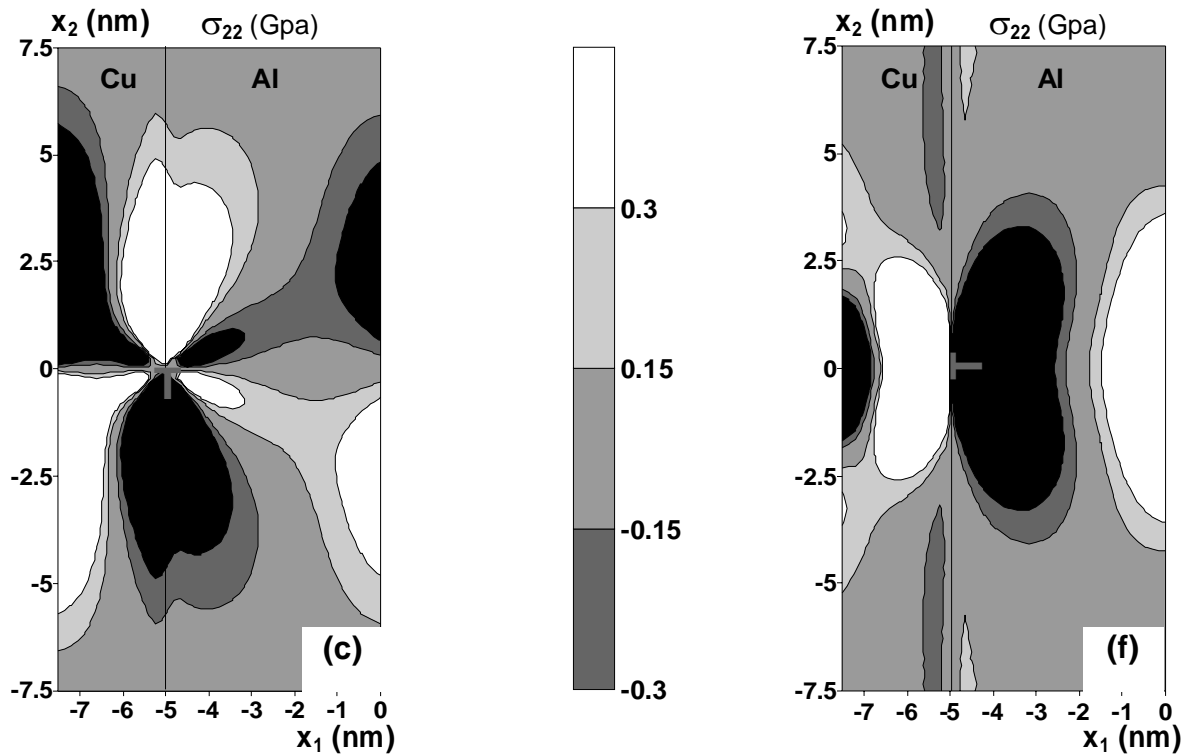
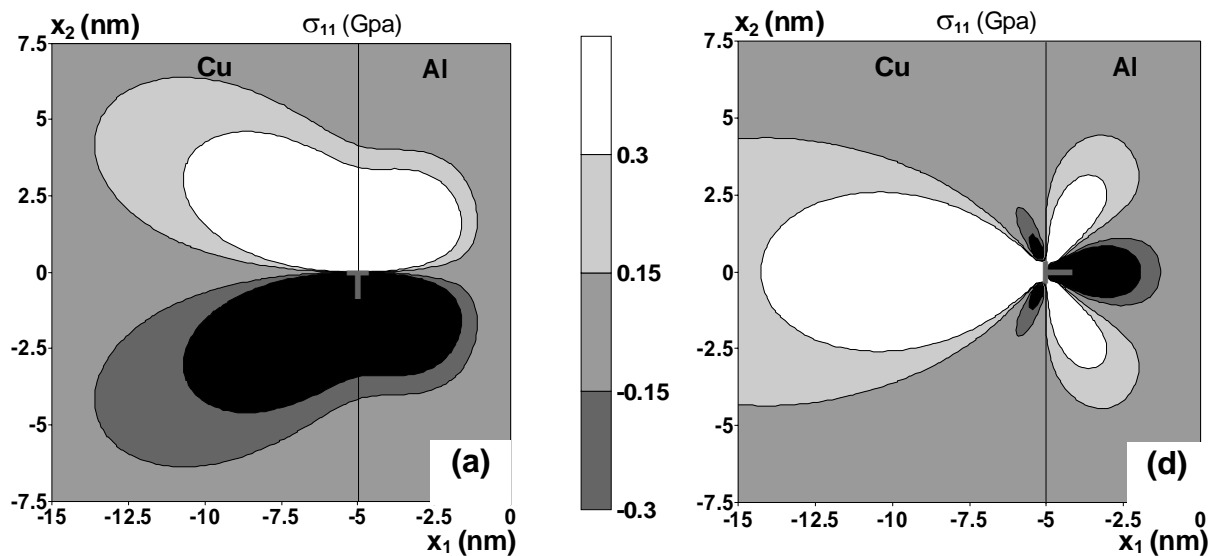


Figure 4.16 - Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un bilame mince Al/Cu, C_{ij} quasi-isotropes, (a,b et c) $b//Ox_1$, (d, e et f) $b//Ox_2$

4.7.2 Deuxième configuration couche/ substrat

Dans les figures 4. 17, on représente la distribution des iso-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ et ± 0.3 GPa, dans le cas d'un système couche/substrat et en se limitant au matériau hétérogène Al/Cu pour les deux directions du vecteur de Burgers ($b//Ox_1$ et $b//Ox_2$)



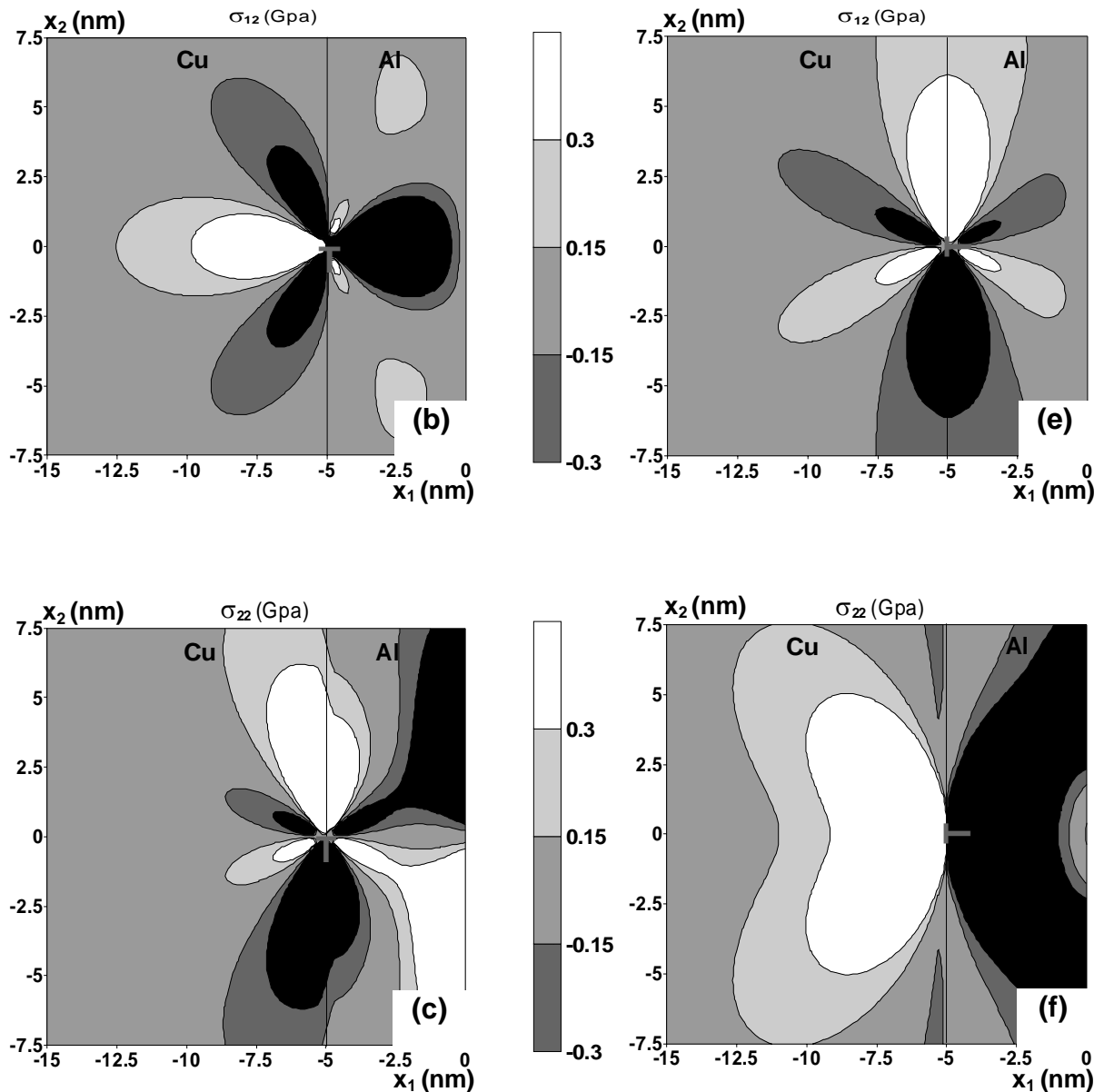


Figure 4.17 - Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placée à l'interface d'un milieu semi infini Al/Cu, C_{ij} quasi-isotropes, (a,b et c) $b//Ox_1$, (d, e et f) $b//Ox_2$

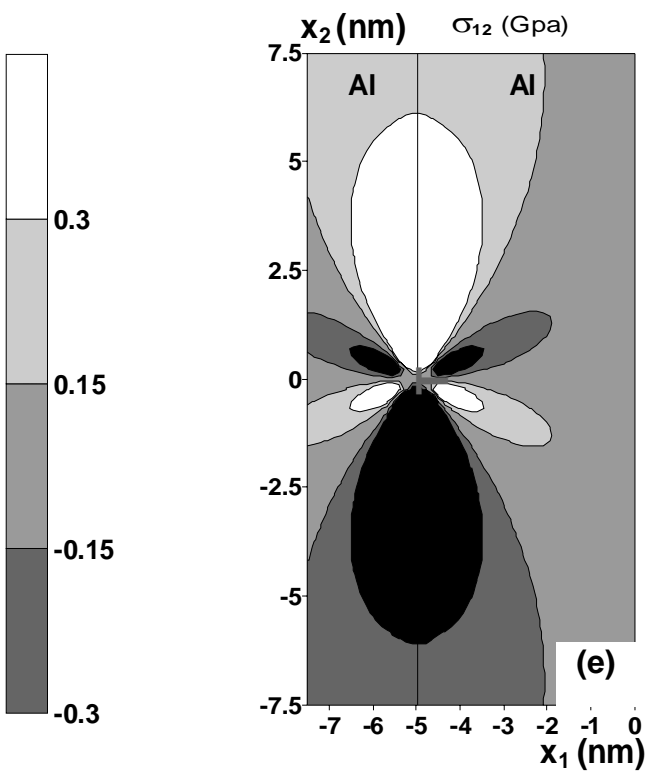
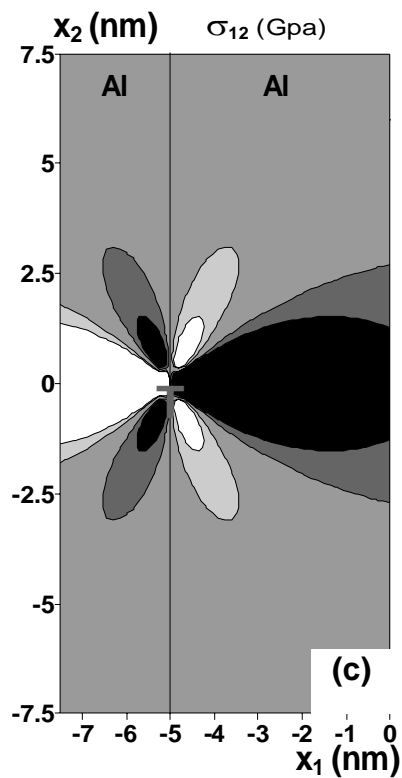
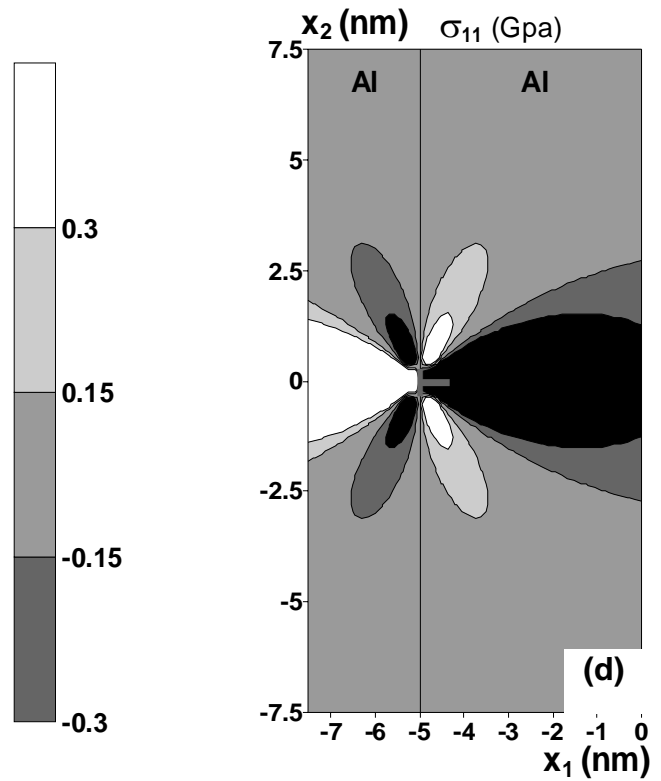
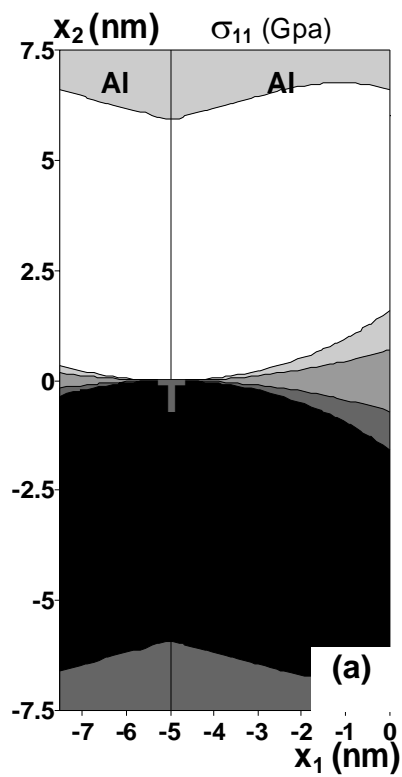
4.7.3 Troisième configuration milieu infini

4.7.3.1 Bicristal homogène

Nous présentons dans cette partie la distribution des iso-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ et ± 0.3 GPa autour d'une dislocation coin, pour deux orientations du vecteur de Burgers b , dans le cas des cristaux homogène Al/Al, Cu/Cu.

Les figures (4.18 -a, b, c, d, e et f) correspondent au cas du bicristal infini Al/Al pour les mêmes orientations de b que précédemment.

Les figures (4.19 -a, b, c, d, e et f) correspondent au cas du bicristal infini Cu/Cu pour les mêmes orientations de b que précédemment.



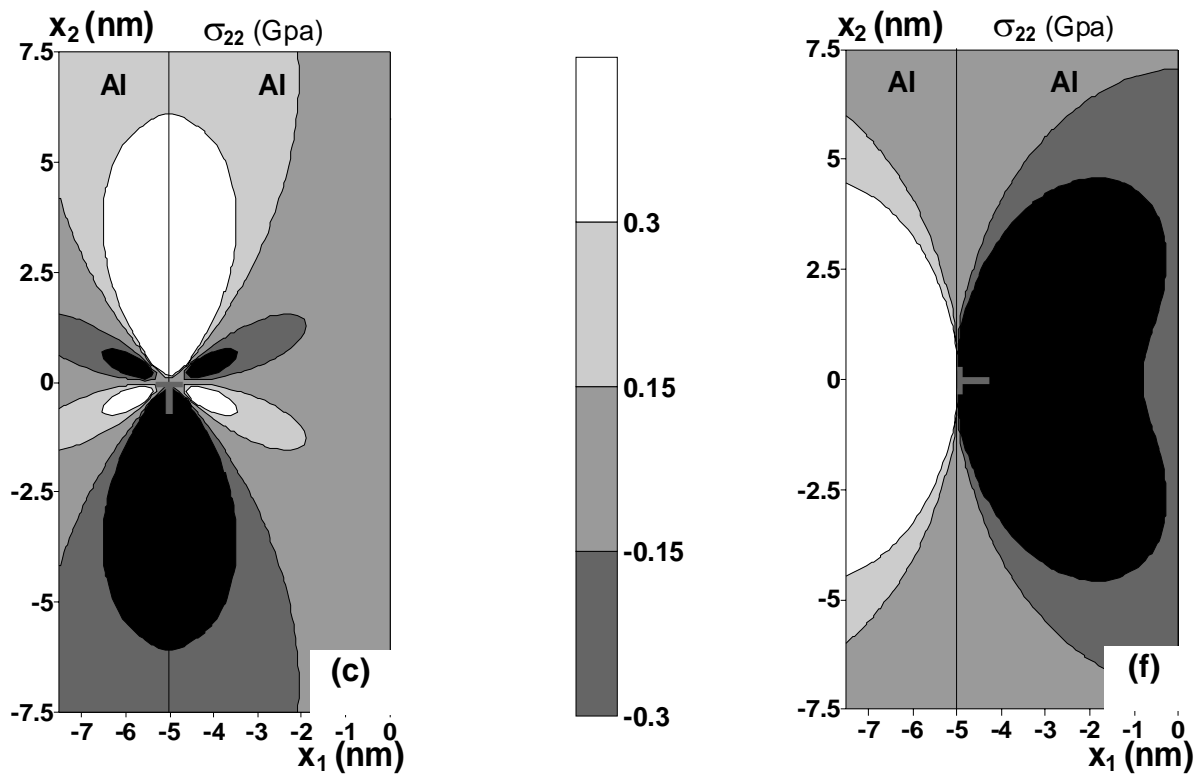
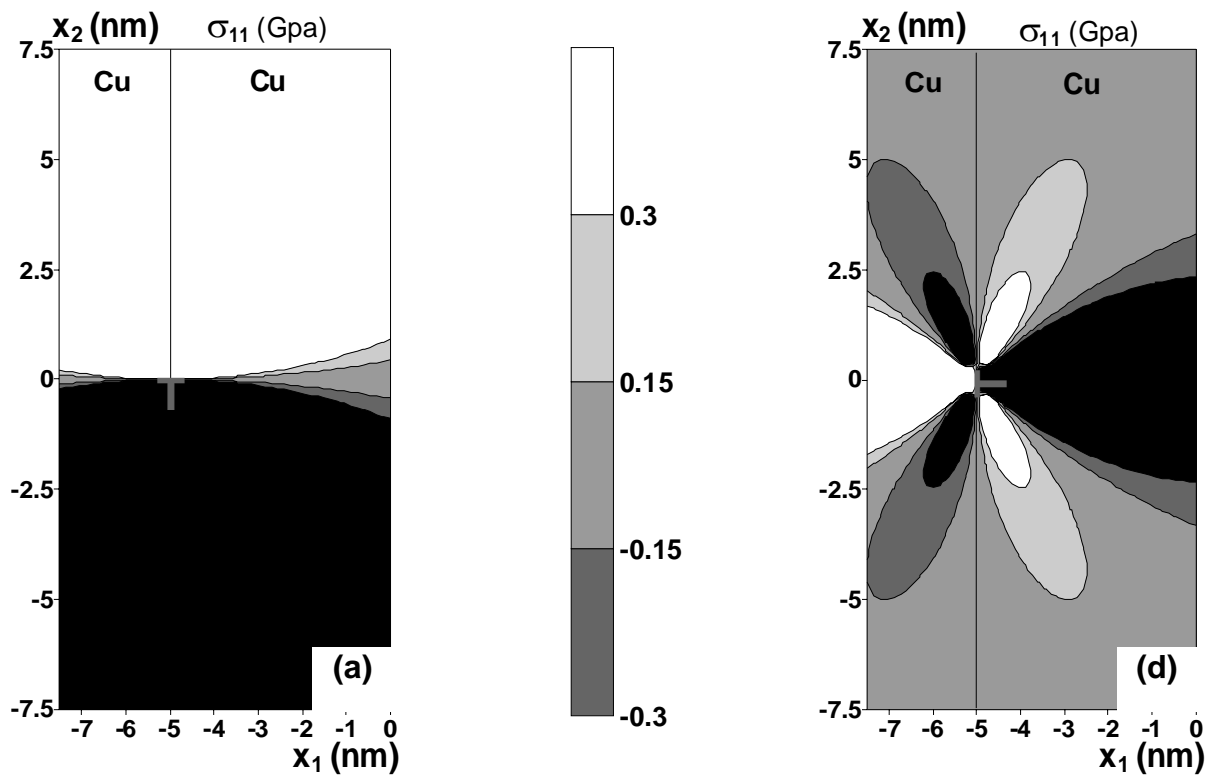


Figure 4.18 - Courbes d'equi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un milieu infini Al/Al, C_{ij} quasi-isotropes, (a,b et c) b// Ox_1 , (d, e et f) b// Ox_2



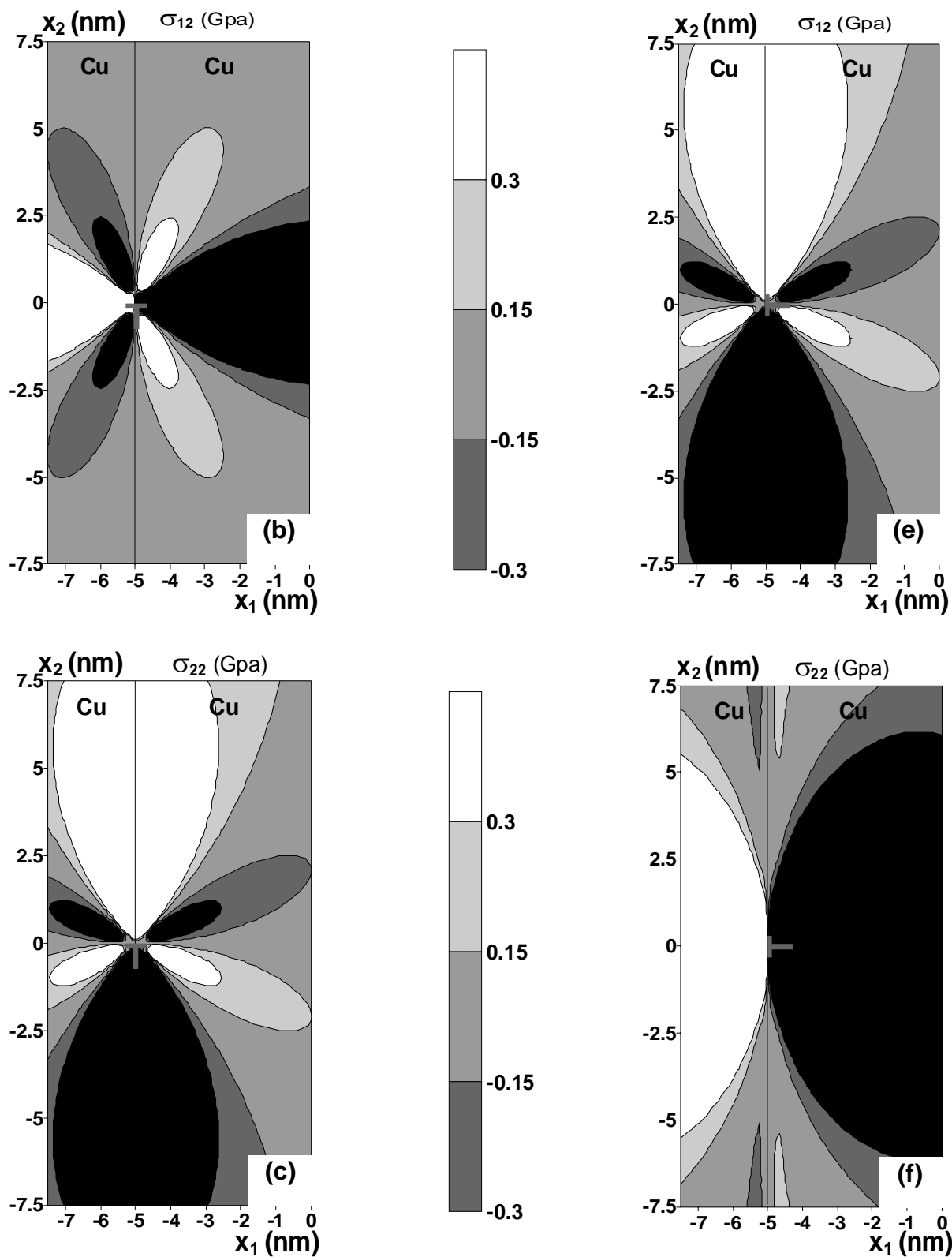
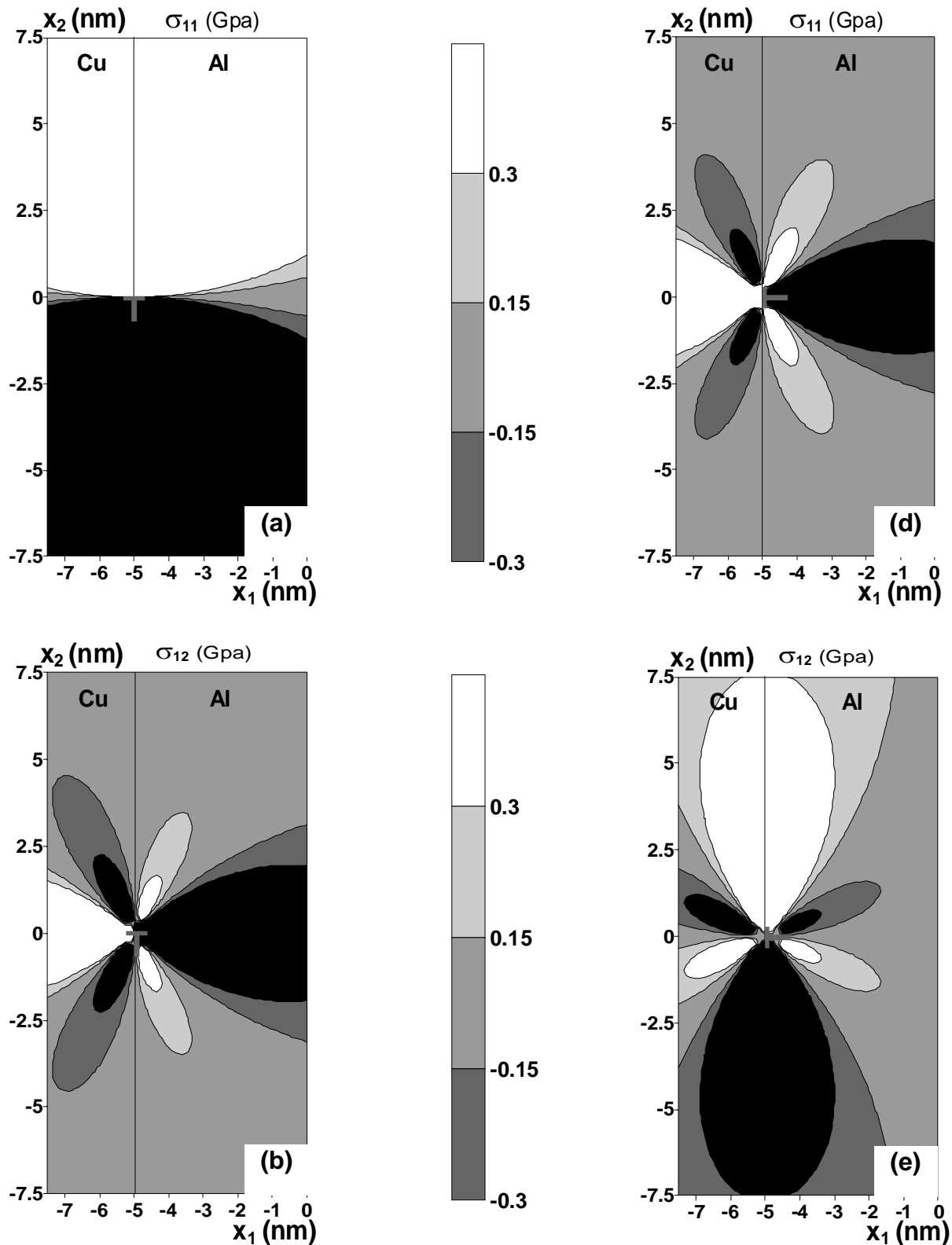


Figure 4.19 - Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un milieu infini Cu/Cu, C_{ij} quasi-isotropes, (a,b et c) b// Ox_1 , (d, e et f) b// Ox_2

4.7.3.2 Bicristal hétérogène

De même, nous présentons sur les figures (4.20 -a, b, c, d, e et f) la distribution des iso-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ et ± 0.3 GPa, dans le cas d'un milieu infini hétérogène Al/Cu.



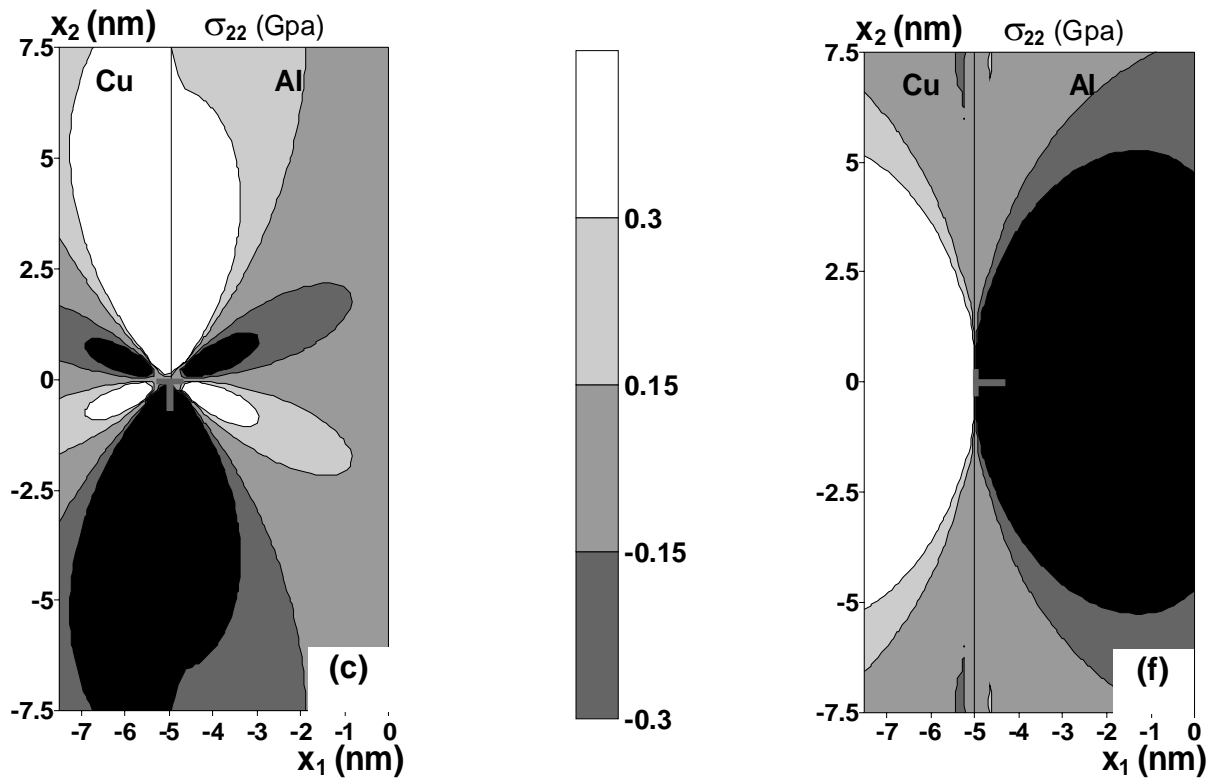


Figure 4.20 - Courbes d'équi-contraintes σ_{11} , σ_{12} et $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa pour une dislocation placé à l'interface d'un milieu infini Al/Cu, C_{ij} quasi-isotropes, (a,b et c) $b//Ox_1$, (d, e et f) $b//Ox_2$

Ces courbes montrent clairement que les lobes de la figure 4.20 se situent entre les lobes des figures 4.18 et 4.19 pour le même vecteur de Burgers b .

Les résultats obtenus dans le cas du milieu infini pour les bicristaux homogènes Al/Al et Cu/Cu sont comparés aux courbes données en figures 4.21-a et 4.20-b, obtenues en élasticité isotropie, à partir de l'expression analytique suivante (Hirth et col.[84]):

$$\sigma_{22} = \left[\frac{\mu \cdot b_2}{2\pi(1-\nu)} \right] \frac{-x_1(x_2^2 - x_1^2)}{(x_2^2 + x_1^2)^2} \quad (4.1)$$

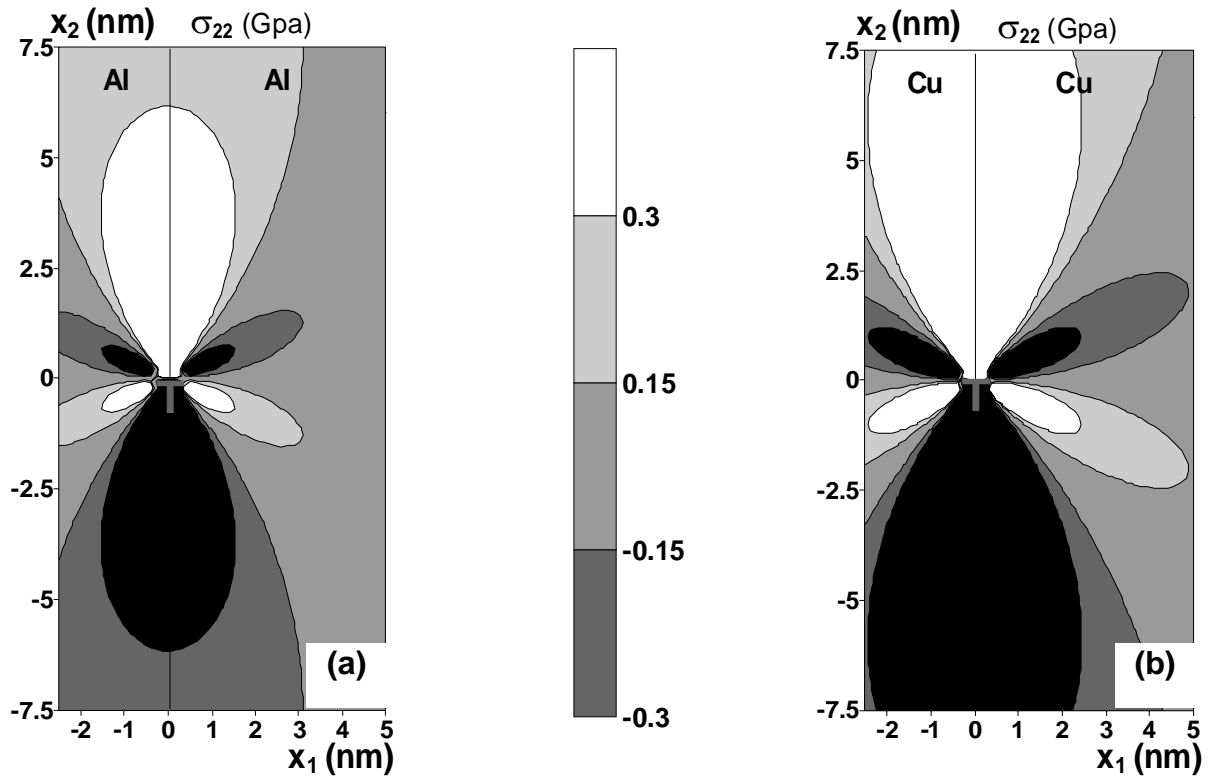


Figure 4.21 - Courbes d'equi-contraintes $\sigma_{22} = \pm 0.15$ GPa et ± 0.3 GPa obtenus à partir d'expression analytique pour les bicristaux infini (a) Al/Al et (b) Cu/Cu, C_{ij} isotropes, $b//Ox_1$.

4.8 Interprétation des résultats

Ces figures montrent :

- Une grande dispersion des contraintes σ_{22} dans le cas quasi-isotrope que dans le cas anisotrope pour Cu alors que pour Al/Al et Al/Cu, nous observons le contraire.
- Les résultats correspondant au cas quasi-isotrope sont semblables presque d'une manière parfaite à ceux des cas isotropes obtenus par R. Bonnet [88] employant des formules analytiques de Lee et Dundurs [89], surtout pour le cristal le moins anisotrope qu'est l'aluminium, ce qui confirme la validité de notre programme construit en élasticité anisotrope.
- Les courbes d'equi-contraintes σ_{22} obtenues dans le cas quasi- isotropes sont sensiblement superposables aux courbes obtenues par l'expression analytique 4.1.
- Ces iso-contraintes révèlent un effet de surface qui n'a pas été mentionné dans le cas de l'élasticité isotrope.
- Les contraintes σ_{11} sont continues à travers toute l'interface et nulles à la limite de la couche conformément aux conditions aux limites.

- Pour les mêmes cristaux, les différences entre le cas anisotrope et quasi-isotrope ne sont pas significatives.
- La discontinuité des contraintes σ_{22} à travers l'interface, cette discontinuité est due essentiellement à l'hétérogénéité du matériau.

Conclusion Générale

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

L'application de la théorie d'élasticité combinée à une analyse par séries de Fourier proposée dans [6] et la considération de l'élasticité anisotrope conduit à l'établissement d'un polynôme du sixième ordre dont l'exactitude des coefficients est vérifiée numériquement. Les racines de ce polynôme sont complexes et conjuguées deux à deux. L'établissement des conditions aux limites propres à un réseau parallèle de dislocations de misfit, placé à l'interface d'un matériau de deux couches (+)/(-), abouti soit à un système de 12 équations linéaires à 12 inconnues complexes pour le cas de bilame mince, ou à un système de 09 équations linéaires à 09 inconnues complexes pour le cas couche/ substrat et enfin à un système de 06 équations linéaires à 06 inconnues complexes pour le cas de milieu infini. Ces systèmes ne peuvent être inversés que numériquement et ses solutions sont les coefficients de la série de Fourier recherchée. Les déplacements et les contraintes sont calculés en fonction de ces coefficients.

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

Concernant le champ de déplacements nous avons montré que les résultats obtenus en élasticité anisotrope, sont très comparables aux résultats de Bonnet [45] obtenus en élasticité isotrope. Ceci est dû au fait que la valeur du facteur d'anisotropie est proche de l'unité, surtout pour l'aluminium.

Les déplacements des unités structurales autour de la dislocation dépendent du module et de l'orientation du vecteur de Burgers.

Les discontinuités interfaciales de u , de module $a_{Al}/\sqrt{2}$ sont bien visibles en dessous et en dessus du cœur des dislocations.

Concernant le champ des contraintes, on a mis en évidence les points suivants :

- les iso-contraintes révèlent un effet de surface qui n'a pas été mentionné dans le cas de l'élasticité isotrope ;
- la continuité des contraintes σ_{11} et σ_{12} le long de l'interface et leur nullité à la surface libre conformément aux conditions aux limites ;
- les contraintes σ_{22} reflètent bien la nature du désaccord paramétrique dans le bicristal, du fait que les deux cotés de l'interface sont en état de contraintes opposées, cristal (+) et cristal (-) sont respectivement en état de tension et de compression près de l'interface. Toutefois, au voisinage du cœur de la dislocation, l'état de contraintes est inversé à cause du demi-plan supplémentaire associé à la dislocation ;
- il y a une grande dispersion des contraintes dans le matériau Cu que dans Al à cause de la dureté du premier ;
- il y a une dispersion de contraintes dans le cas quasi-isotrope comparativement au cas anisotrope pour Cu, alors que pour Al/Al et Al/Cu nous observons le contraire.

Pour s'assurer de la validité de notre programme original on a effectué des tests de convergence c'est à dire que notre programme doit pouvoir fonctionner près de l'isotrope, lorsque on remplace les constantes C_{ij} anisotropes par les C_{ij} quasi-isotropes. Les résultats correspondant au cas quasi-isotrope sont concordent avec ceux des cas isotropes obtenus par R. Bonnet [45,88] employant des formules analytiques de Lee et Dundurs [89], surtout pour le cristal le moins anisotrope qu'est l'aluminium, ce qui confirme la validité de notre programme construit en élasticité anisotrope.

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

Finalement, nous avons l'occasion de signaler que : l'étude a permis d'atteindre les objectifs visés. 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.

Perspectives

Cette étude ouvre la voie à beaucoup de questions :

La solution en série de Fourier converge lentement près du cœur de la dislocation à cause du phénomène de Gibbs, en effet lorsque le nombre d'harmoniques est faible, l'inversion du système 12x12 fait défaut à cause des termes exponentiels dépendant directement de Λ et de h , d'où le recours à des valeurs plus grandes de n , et donc un temps de calcul plus long. En perspective future, un autre moyen de détermination des champs élastiques offrant une meilleure rapidité de convergence peut être en modélisant le problème par éléments finis.

L'effet de la température sur le champ élastique de matériaux multicouches qui n'a pas été traité. Evidemment, s'il y'a une variation de température, Les contraintes internes augmenteront à ce moment là et provoqueront une flexion du matériau. Ce dernier thème représente, donc, une perspective pour le présent travail, pour lequel on considère un bicristal parfaitement relaxé.

Références bibliographiques

- [1] Y. T. Chou, C.S. Pande, et H.C. Yang, J. Appl. Phys. 46, 5, (1975).
- [2] M.L. Oveçoglu, M.F. Doerner, et W.D. Nix, Acta Met., 35, p: 2947-2957, (1987).
- [3] J.S. Koehler, Phys. Rev.B, 2, p:547-551, (1970).
- [4] R. Zenati, R. Bonnet, C. R. Acad. Sci. Paris, t.318, serie II, p: 31-36, (1994).
- [5] R. Bonnet, Phy. Stat. Sol.(a) 177,219 (2000).
- [6] R. Bonnet, Phil. Mag. A, vol 44, p: 625-642, (1981c)
- [7] J.R. Willis, S.C. Jain, et R. Bullough, Phil. Mag., A, 62, 115, (1990)
- [8] R. Bonnet, Phil. Mag. A, vol 43, N°5, p: 1165 -1187, (1981a)
- [9] J. Hedges, et J.W. Michell, Phil. Mag., 44, 223, (1953)
- [10] J.M. Burgers, Proc. K. Ned. AKad. Wet. Amst., 42, 278 et 293, (1939)
- [11] W.L. Bragg, Proc. Phys. Soc (Londres), 52, 54 - 55, (1940)
- [12] J.H. Vander Merwe, Proc. Phys. Soc (Londres), A63, 616, (1950)
- [13] W.T. Read, et W. Shockley, Phys. Rev., 75, 692, (1949)
- [14] W.T. Read, et W. Shockley, Phys. Rev., 78, 275 ,(1950)
- [15] A. Howie, et M.J. Whelan, Proc. R. Soc (Londres), A, 267, 206, (1962)
- [16] W.J. Tunstall, P.B. Hirsch, et J. Steeds, Phil. Mag, 9, 99, (1964)
- [17] P. Humble, Phil. Mag., A, 51, 469, (1985)
- [18] L.M. Clarebrough, Phil. Mag., 30, 1295, (1974)
- [19] P.B. Hirsch, A. Howie, R.B. Nicholson, Pashley, D. W., et M.J. Whelan, Electron Microscopy of thin crystals, (London: Batterworth), p.162 ,(1965)
- [20] 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)
- [21] R. Bonnet, A.J. Morton, Phil. Mag. A, vol 56, N°6, p: 815 -830, (1987)
- [22] A. Ati, Thèse De Doctorat D'état, Université Houari Boumédiene - Alger, (1993)

- [23] J.M. Kang, Thèse De Doctorat D'état, Université Paul Sabatier - Toulouse, (1993)
- [24] M.Loubradou, R. Bonnet and AC atana , Phil. Mag. A70, 1045 (1994).
- [25] J. Jacobsen, L. Pleth Nielson, F. Besenbacher, I. Stensgaard, E. Laegsgaard, T. Rasmussen, K.W. Jacobsen and J.K.Norskov, Phy. Rev. Lett.75,489 (1995).
- [26] R. Bonnet, M. Loubrandou et J.M. Pénisson, journal de physique III, volume 6, (1996)
- [27] J.G. Belk, D.W. Pashley, B.A. Joyc and T.S. Jones, , Phy. Rev.B58, 16194 (1998).
- [28] X.W.Liu, A.A.Hopgood, B.F. Usher, H.Wang and N.S.Braithwaite, j.Appl.Phys.88, 10 (2000).
- [29] V. Volterra, Annales Ecoles Normales supérieures, Paris (3), 24,400, (1907)
- [30] F.C. Frank, et J.H. Vander Merwe, Proc. Roy. Soc. A,108, 205 et 200, 125, (1949)
- [31] J.L. Hokanson, et P.G. Winchell, J. Appl. Phys., 39, 3311, (1968)
- [32] R. Bonnet, Phys. Stat. Sol. (b), 108, 435, (1981)
- [33] S. Nakahara, Wu, J. B. C., et Li, J. C. M., Mater. Sci. Engng, 10, 291, (1972)
- [34] G. Leibfried, et Dietze, H.D., Z. Phys, 126, 790, (1949)
- [35] J.D. Eshelby et Stroh, A. N, Phil. Mag., 42, 1401, (1951)
- [36] W.C. Moss et Hoover, W. G., J. Appl. Phys. 49, 5449, (1978)
- [37] F.R.N. Nabarro et Kostlan, E. J, J. Appl. Phys. 49, 5445, (1978)
- [38] S.N.G. Chu, J. Appl. Phys., 53 (4), p: 3019-3023, (1982)
- [39] M.Y. Gultin, A.E. Romanov, Phys. Stat. Sol. (a), 125, p: 107-125, (1991)
- [40] Y.T. Chou, Phys. Stat. Sol, 17, p: 509-516 , (1966)
- [41] M.L. Oveçoglu, Doerner, M. F., et Nix, W. D., Acta Met., 35, p: 2947-2957, (1987)
- [3] J.S. Koehler, Phys. Rev.B, 2, p:547-551, (1970)
- [42] J.H. Vander Merwe, Phil. Mag., A, 45, 127, (1982a); Ibid, 45, 145, (1982b); Ibid,45, 159, (1982c)
- [43] J.R. Willis, Jain, S. C., et Bullough, R., Phil. Mag., A, 62, 115, (1990)
- [44] R. Bonnet, et J.L. Verger-Gaugry, Phil. Mag. A, vol 66, N° 5, 849 -871, (1992)
- [4] R. Bonnet, R. Zenati, C. R. Acad. Sci. Paris, t.318, serie II, p: 31-36, (1994).
- [45] R.Bonnet, C.R.Acad. Sci.Paris, t.318, serie II, p :289-295, (1994).
- [46] R. Bonnet, Phy. Stat. Sol.(a) 177,219 (2000).
- [47] R. Bonnet, C.R. Physique 4, 961-966, (2003).
- [48] F. Kroupa, J. Phys. 9 488-494, (1959)

- [49] M Flamant, C. R. Paris, Gauthier-Villars 114 1465-1468, (1892).
- [50] J. Mandel, cours de Mécanique des milieux continus, t. II, Gauthier-villars, 1966, p.627.
- [51] J.D. Eshelby, Read, W. T., et Shockley, W., Acta. Met., 1, 251, (1953)
- [52] J. Gemperlova, et Saxl, I., C Zech, J. Phys., B18, 1085 -93, (1968)
- [53] M.O. Tucker, Phil. Mag., 19, 1141, (1969)
- [54] Clements, D. L. , Int. J. Eng. Science , 9, 256 - 65, (1971)
- [55] J.R. Willis, J. Mech. Phys. Solids, 19, 353 - 68, (1971)
- [56] J. Braekhus et Lothe, J., Phys. Stat. Sol. (b), 43, 651-7, (1971)
- [57] C.S. Pande et Chou, Y., T., J. Appl. Phys., 43, 840, (1972)
- [58] S. Nakahara, et J.R. Willis, J. Phys. F: Metal phys. 3 L, 299 -54, (1973)
- [59] D.M. Barnett, Lothe, J., J. Phys. F: Metal phys. vol 4, 299 -54, (1973)
- [60] M. Dupeux et R. Bonnet, Acta. Met., 28, 721, (1980)
- [61] R. Bonnet, Acta. Met., Vol 30, p: 311-315, (1982)
- [62] A.N. Stroh, Phil. Mag., 3, 625, (1958); J.Math.Phys., 41, 77, (1962)
- [63] Y.T. Chou, J. Appl. Phys., 33, 2747, (1962)
- [64] Y.T. Chou, Scripta. Metall., 10, 331, (1976)
- [65] J.P. Hirth, D.M. Barnett, et J. Lothe, Phil. Mag., A, 40, 39, (1979)
- [66] D.J. Bacon, D.M. Barnett, et R.O. Scattergood, Prog. Mater. Sci, 23, 51, (1978)
- [67] R. Bonnet, Ecole d'Eté, Matériaux composites à hautes performances CNRS, (1979)
- [68] R. Bonnet, Acta. Met., Vol 29, p: 437-445, (1981b)
- [69] R. Bonnet, Phil. Mag. A, vol 51, N°1, p: 51-58, (1985)
- [70] R. Bonnet, M. Loubradou , Phy. Rev. B, Vol.49, Num 20, (1994).
- [71] S. Madani, Thèse de Magistère de l'université de Batna, (1997).
- [72] T. Outtas , Thèse de Doctorat de l'université de Batna, (2002).
- [73] M. Brioua, R. Benbouta, S. Madani and L. Adami J.ournal of Colloid and Interface Science 282 (2005) 120-123
- [74] A.N. Stroh, J.Lmath.Phys., 41, 77, (1962).
- [75] G.B. Spence, J. Appl. Phys., 33, 729, (1962)
- [77] A. Seeger et G. Schoecl, Acta. Met., 1, 519 (1953)
- [78] P. Humble et C.T. Forwood, Phil. Mag., 31, 1011, (1975).
- [79] A. Bouzaher, Doctorat thesis, Constantine, Algeria, (1992).
- [80] A. Bouzaher, and R. Bonnet, Phys. Stat. Sol. (b) 181,117-126, (1994).

- [81] D. D. Fong, Doctorat thesis, Harvard University Cambridge, Massachusetts September (2001)
- [82] N. Fribourg-Blanc, M. Dupeux, G. Guenin, et R. Bonnet, *J. Appl. Cryst.* 12. p.151-155, 1979.
- [83] A. F. Schwartzman and R. Sinclair, *J. electron Mater.*, 20, 805, (1991).
- [84] J. P. Hirsh and J. Lothe, *Theory of dislocations*, 2nd. Ed., Wiley. New York p.837 (1982)
- [85] G. Feillet, *Evaluation of Advanced Semiconductor Materials by Electron Microscopy*, édité par D. Cherns (New York : Plenum), p.33., (1990).
- [86] A. Bourret, P. H. Fuoss, A. Rocher et C. Raisin, *advances in surface and thin film diffraction*, Vol. 208 (Pittsburg, Pennsylvania: Materials Research Society), p.303, (1991)
- [87] C. Zener, *Elasticity and Anelasticity of Metals*, Chicago Univ., Press, 16, (1948)
- [88] R. Bonnet, *Interface Science*, vol. 4, 169-179, 1997.
- [89] M.S. Lee, and J. Dunders, *Intern. J. Engng. Sci.* 11, 87 (1973).

Annexe

*****PROGRAMME PRINCIPALE*****

```
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
logical polish
COMPLEX*16 cofc(7),rac(6),AINTER2,BINTER2
dimension C(6,6),CC(6,6),XCOF(7),COF(7),PR(6),PI(6)
dimension R(3,3),S1(6,6),S2(2,2),SL1(81),AINTER1(3),BINTER1(3)
dimension PR1(6), PR2(6),PI1(6), PI2(6), QR(6), QI(6)
dimension ar1(3,3),ai1(3,3),ar2(3,3),ai2(3,3),p(6),p1(3),p2(3)
dimension a1(3,3),a2(3,3),uu1(1),uu2(1),AINTER2(3),BINTER2(3)
dimension A13(3),A14(3),A15(3),A16(3),A17(3),A18(3),A19(3),A20(3)
complex*16 A13,a14,a15,a16,a17,a18,a19,a20,ainter1,binter1
dimension E2(3,3,3),ES(3,6),ER1(3,3,3),b(24),coef2(3),
$ EI1(3,3,3),ER2(3,3,3),EI2(3,3,3),e(3,3,3),e1(3,3,3)
dimension er(3,3,3),ei(3,3,3),bv2(3),doef1(3),coef1(3)
dimension sigma2(3,3),tigma(3,3),sigma1(3,3),u1(3),u2(3),ud1(3)
real er,er1,er2,coef4,coef2,coef1
real ar1,ar2,uu1,uu2
zi=dcmplx(0.d0,1.d0)
xpi=3.14159265
open(10,file='isocu.dat')
open(8,file='anis')
open(11,file='deplc2.dat')
open(111,file='deplc1.dat')
open(14,file='cont11.dat')
open(13,file='cont12.dat')
open(12,file='cont22.dat')
open(17,file='cont111.dat')
open(16,file='cont112.dat')
open(15,file='cont122.dat')
open(353,file='delta.dat')
open(2501,file='som1.dat')
nn=0
5   nn=nn+1
c   lecture des cij dans le repere initial
    READ(10,*) (CC(1,J),J=1,6)
    IF((DABS(CC(1,1)-999.)).LT.1.d-6)STOP
    READ(10,*) (CC(3,J),J=3,6)
    READ(10,*) (CC(4,J),J=4,6)
    DO 15 I=1,6
    DO 15 J=I,6
15  CC(J,I)=CC(I,J)
    read(10,*) ((r(i,j),j=1,3),i=1,3)
    WRITE(8,40) NN
40  FORMAT(57X,'CRISTAL',I2,/)
    WRITE(8,41) NN, NN, ((CC(I,J),J=1,6), (R(I,J),J=1,3),I=1,3),
    $ ((CC(I,J),J=1,6),I=4,6)
41  FORMAT(9X,'CONSTANTES ELASTIQUES C',I1,37X,'MATRICE DE TRANSF. R'
    $ ,I1,/,3(6F10.5,6X,3F10.7/),3(6F10.5/)/)
    CALL ELASTO (CC,R,C,S1,S2,SL1,0)
c   ecriture des resultats d'elasto
    write(8,45)NN,((c(i,j),j=1,6),i=1,6)
45  format(9x,'constantes elastiques c',i1,' dans le repere de calcul'
    1,/,6(6f10.5,/),/)
    CALL COFPOL(S2,XCOF)
    do 501 i=1,7
    cof(i)=xcof(i)
501  cofc(i)=dcmplx(xcof(i),0.D0)
```

```

polish=.true.
CALL L1(COFC,6,RAC,POLISH)
do 777 i=1,6
777 continue

```

c ecriture des six racines resultat de polrt**

```

write(8,55)nn,(xcof(i),i=1,7),(nn,i,pr(i),nn,i,pi(i),i=1,6)
55 format('polynome(milieu',i2,')='7d25.18,/, 'racines',/,
16(5x,'pr',i1,'(',i1,')='d25.18,3x,'pi',i1,'(',i1,')='
2 d25.18,/,/))

```

c tri des trois racines a partie imaginaire positive

```

K=0
DO 60 I=1,6
IF(PI(I).GT.(0.)) GO TO 65
GO TO 60
65 K=K+1
QR(K)=PR(I)
QI(K)=PI(I)
60 CONTINUE
DO 71 I=1,3
71 P(I)=dcmplx(QR(I),QI(I))
write(8,'(116(1H*))')
do 681 I=1,3
write(8,(' N=",I2," P",I2,"=",2d25.18'))NN,I,P(I)

```

681 continue

```

DO 70 I=1,3
IF(NN.EQ.1) PR1(I)=QR(I)
IF(NN.EQ.1) PI1(I)=QI(I)
IF(NN.EQ.1) P1(I)=P(I)
IF(NN.EQ.2) P2(I)=P(I)
70 CONTINUE
do 6811 I=1,3
write(8,(' N=",I2," P",I2,"=",2d25.18'))NN,I,P(I)

```

6811 continue

```

do 80 i=1,3
F11=C(1,1)+2.*C(1,6)*P(i)+C(6,6)*P(i)*P(i)
F22=C(6,6)+2.*C(2,6)*P(i)+C(2,2)*P(i)*P(i)
F3=C(5,5)+2.*C(5,4)*P(i)+C(4,4)*P(i)*P(i)
F4=C(6,5)+(C(6,4)+C(2,5))*P(i)+C(2,4)*P(i)*P(i)
F5=C(5,1)+(C(5,6)+C(4,1))*P(i)+C(4,6)*P(i)*P(i)
F6=C(1,6)+(C(1,2)+C(6,6))*P(i)+C(6,2)*P(i)*P(i)
if((cdabs(f5).gt.1.d-8).or.(cdabs(f4).gt.1.d-8))go to 73
if(cdabs(f3).lt.1.d-4)go to 74
A(I,3)=0.d0
go to 79

```

74 continue

```

A(I,3)=1.d0
A(I,2)=0.d0
A(I,1)=0.d0
go to 79
73 call Aij(I,F11,F6,F22,-F5,-F4,DE, AP(I,1),AP(I,2))
AP(I,3)=dcmplx(1.d0,0.d0)

```

c***NORMALISATION DES LAMBDA*******

```

A(i,1)= AP(i,1)/(cdsqrt(ap(i,1)*ap(i,1)+ap(i,2)*ap(i,2)+ap(i,3)*
1ap(i,3)))
A(i,2)= AP(i,2)/(cdsqrt(ap(i,1)*ap(i,1)+ap(i,2)*ap(i,2)+ap(i,3)*
1ap(i,3)))
A(i,3)= AP(i,3)/(cdsqrt(ap(i,1)*ap(i,1)+ap(i,2)*ap(i,2)+ap(i,3)*
1ap(i,3)))

```

```

79  write(8,'(116(1H*))')
    do 682 j=1,3
      write(8,1111)I,J,A(I,J)
1111 format('A',I1,',',I1,'=',2F12.7)
682  continue
80  continue

```

c Affectation et sauvgarde des 9 A1(I,J) et des 9 A(I,J)**

```

do 88 I=1,3
  if(NN.eq.1) go to 86
  A2(I,1)=A(I,1)
  do 87 J=1,3
    ar2(i,j)=dreal(a2(i,j))
87  AI2(I,J)=dimag(A2(I,J))
    go to 88
86  A1(I,1)=A(I,1)
    A1(I,2)=A(I,2)
    A1(I,3)=A(I,3)
    do 89 j=1,3
      AR1(I,J)=dreal(A1(I,J))
89  AI1(I,J)=dimag(A(I,J))
88  continue

```

c***calcul des coefficients E(I,J,K) du developement des contraintes****

c*** (I=numero de la racine P,(J,K)=indice de la contrainte corespondante:**

c*** sigma(J,K)=RE(sum(I=1,3)(E(I,J,K)*D(I)/2.*PI*I*Z(I)))**

```

do 95 I=1,3
  do 95 L=1,6
95  ES(I,L)=((C(L,1)+P(I)*C(L,6))*A(I,1))+((C(L,6)+P(I)*C(L,2))
    1*A(I,2))+((C(L,5)+P(I)*C(L,4))*A(I,3))
    do 100 I=1,3
      E(I,1,1)=ES(I,1)
      E(I,2,2)=ES(I,2)
      E(I,3,3)=ES(I,3)
      E(I,1,3)=ES(I,5)
100  E(I,1,2)=ES(I,6)

```

C***Ecriture des E(i,j,k)**

```

do 105 i=1,3
  DO 105 j=1,3
  DO 105 m=1,3
    E(i,m,j)=E(i,j,m)
    ER(i,j,m)=dreal(e(i,j,m))
105 EI(i,j,m)=DIMAG(E(i,j,m))
    do 686 ial=1,3
      write(8,'(75(1H*))')
    do 686 m=1,3
      do 686 j=1,3
        write( 8,(' L",I1,I1,I1,"=",2F15.7')ial,m,j,E(ial,m,j)
686  continue

```

c*** Affectation et sauvgarde des E(i,j,k)**

```

DO 115 i=1,3
DO 115 j=1,3
DO 115 m=1,3
  if(NN.eq.1) go to 111
  go to 115
115 continue
  if(NN.eq.1) go to 5
  read(10,*) BU1,BU2,BU3,H,PERIOD,nmax
  H1=2*H/3
  write(8,207)BU1,BU2,BU3,H1,H,period,nmax

```



```

207 format(1x,'vecteur de burgers de la dislocation numero 1(ANG)
1=',/3f10.5//,'H1=',f10.5,5x,'H=',f10.5,9x,'periode=',f10.5,
2 //,'nmax=',I5,/)
write(8,725) (BV2(I),I=1,3),theta
725 format(1x,'vecteur de burgers de la dislocation numero 2(ANG) =',
1/,3f10.5/,1x,'angle polaire theta(radian)=' ,
2f10.5,/)
do 1000 ij=1,24
do 1000 il=1,24
1000 Q(ij,il)=0.d0
Omega=2.*xpi/(period)
c** choix de X2
c calcul pour un reseau de dislocations intrinseques
c*****POUR LES ISO-CONTRAINTES*****
DO 9999 I2=1,61
xx2=(I2-31)*0.25
do 1300 I=1,31
xx1=(I-31)*0.25
do 1400 j=1,3
do 1400 k=1,3
sigma1(k,j)=0.d0
1400 sigma2(k,j)=0.d0
do kd=1,3
u1(kd)=0.d0
end do
do ke=1,3
u2(ke)=0.d0
end do
do 1299 N=1,nmax
c GG=n/period
c pr1(1)=1.d-14
c pr1(2)=1.d-14
c pr1(3)=1.d-14
c IF(NN.EQ.1) P(3)=CMPLX(PR1(3),gg)
c IF(NN.EQ.2) P(1)=CMPLX(PR2(1),gg)
c IF(NN.EQ.2) P(2)=CMPLX(PR2(2),gg)
c IF(NN.EQ.2) P(3)=CMPLX(PR2(3),gg)
B(1)=-BU1
B(2)=-BU2
B(3)=-BU3
do 1409 in=4,24
1409 B(in)=0.d0
ZO=float(N)*OMEGA
do 1100 ia=1,3
EXPON1=dexp(-ZO*PI1(IA)*H1)
EXPON2=dexp(+ZO*PI1(IA)*H1)
EXPON3=dexp(-ZO*PI2(IA)*H1)
EXPON4=dexp(+ZO*PI2(IA)*H1)
AC=dcos(ZO*(PR1(IA)*H1))
BS=dsin(ZO*(PR2(IA)*H1))
DC=dcos(ZO*(PR2(IA)*H))
DS=dsin(ZO*(PR2(IA)*H))
do 1099 k=1,3
L=8*IA-7
c-----
Q(k,L+1)=(-AI1(IA,k)*AC-AR1(IA,k)*AS)*EXPON1
Q(k,L+2)=(AR1(IA,k)*AC+AI1(IA,k)*AS)*EXPON2
Q(k,L+3)=(AI1(IA,k)*AC-AR1(IA,k)*AS)*EXPON2
Q(k,L+4)=(-AR2(IA,k)*BC+AI2(IA,k)*BS)*EXPON3
Q(k,L+5)=(AI2(IA,k)*BC+AR2(IA,k)*BS)*EXPON3

```

$$Q(k,L+6)=(-AR2(IA,k)*BC-AI2(IA,k)*BS)*EXPON4$$

$$Q(k,L+7)=(-AI2(IA,k)*BC+AR2(IA,k)*BS)*EXPON4$$

c-----

$$Q(k+3,L)=(-AI1(IA,k)*AC-AR1(IA,k)*AS)*EXPON1$$

$$Q(k+3,L+1)=(-AR1(IA,k)*AC+AI1(IA,k)*AS)*EXPON1$$

$$Q(k+3,L+2)=(AI1(IA,k)*AC-AR1(IA,k)*AS)*EXPON2$$

$$Q(k+3,L+3)=(-AR1(IA,k)*AC-AI1(IA,k)*AS)*EXPON2$$

$$Q(k+3,L+4)=(AI2(IA,k)*BC+AR2(IA,k)*BS)*EXPON3$$

$$Q(k+3,L+5)=(AR2(IA,k)*BC-AI2(IA,k)*BS)*EXPON3$$

$$Q(k+3,L+6)=(-AI2(IA,k)*BC+AR2(IA,k)*BS)*EXPON4$$

$$Q(k+3,L+7)=(AR2(IA,k)*BC+AI2(IA,k)*BS)*EXPON4$$

c-----

$$Q(k+6,L+2)=(ER1(IA,1,k)*AC+EI1(IA,1,k)*AS)*EXPON2$$

$$Q(k+6,L+3)=(EI1(IA,1,k)*AC-ER1(IA,1,k)*AS)*EXPON2$$

$$Q(k+6,L+4)=(-ER2(IA,1,k)*BC+EI2(IA,1,k)*BS)*EXPON3$$

$$Q(k+6,L+5)=(EI2(IA,1,k)*BC+ER2(IA,1,k)*BS)*EXPON3$$

$$Q(k+6,L+6)=(-ER2(IA,1,k)*BC-EI2(IA,1,k)*BS)*EXPON4$$

$$Q(k+6,L+7)=(-EI2(IA,1,k)*BC+ER2(IA,1,k)*BS)*EXPON4$$

c-----

$$Q(k+9,L)=(-EI1(IA,1,k)*AC-ER1(IA,1,k)*AS)*EXPON1$$

$$Q(k+9,L+1)=(-ER1(IA,1,k)*AC+EI1(IA,1,k)*AS)*EXPON1$$

$$Q(k+9,L+2)=(EI1(IA,1,k)*AC-ER1(IA,1,k)*AS)*EXPON2$$

$$Q(k+9,L+3)=(-ER1(IA,1,k)*AC-EI1(IA,1,k)*AS)*EXPON2$$

$$Q(k+9,L+4)=(EI2(IA,1,k)*BC+ER2(IA,1,k)*BS)*EXPON3$$

$$Q(k+9,L+5)=(ER2(IA,1,k)*BC-EI2(IA,1,k)*BS)*EXPON3$$

$$Q(k+9,L+6)=(-EI2(IA,1,k)*BC+ER2(IA,1,k)*BS)*EXPON4$$

$$Q(k+9,L+7)=(ER2(IA,1,k)*BC+EI2(IA,1,k)*BS)*EXPON4$$

c-----

$$Q(k+12,L)=ER1(IA,1,k)$$

$$Q(k+12,L+1)=-EI1(IA,1,k)$$

$$Q(k+12,L+2)=ER1(IA,1,k)$$

$$Q(k+12,L+3)=EI1(IA,1,k)$$

c-----

$$Q(k+15,L)=EI1(IA,1,k)$$

$$Q(k+15,L+1)=ER1(IA,1,k)$$

$$Q(k+15,L+2)=-EI1(IA,1,k)$$

$$Q(k+15,L+3)=ER1(IA,1,k)$$

c-----

$$Q(k+18,L+4)=(ER2(IA,1,k)*DC-EI2(IA,1,k)*DS)*EXPON5$$

$$Q(k+18,L+5)=(-EI2(IA,1,k)*DC-ER2(IA,1,k)*DS)*EXPON5$$

$$Q(k+18,L+6)=(ER2(IA,1,k)*DC+EI2(IA,1,k)*DS)*EXPON6$$

$$Q(k+18,L+7)=(EI2(IA,1,k)*DC-ER2(IA,1,k)*DS)*EXPON6$$

c-----

$$Q(k+21,L+5)=(-ER2(IA,1,k)*DC+EI2(IA,1,k)*DS)*EXPON5$$

$$Q(k+21,L+6)=(+EI2(IA,1,k)*DC-ER2(IA,1,k)*DS)*EXPON6$$

$$Q(k+21,L+7)=(-ER2(IA,1,k)*DC-EI2(IA,1,k)*DS)*EXPON6$$

1099 continue

1100 continue

c*****

```
call array(2,24,24,24,24,XA,Q)
call simQ(XA,B,24,KS)
do 1102 IA=1,3
  L=8*IA-7
  X1(IA)=B(L)+ZI*B(L+1)
  Y1(IA)=B(L+2)+ZI*B(L+3)
  X2(IA)=B(L+4)+ZI*B(L+5)
  Y2(IA)=B(L+6)+ZI*B(L+7)
```

1102 CONTINUE

C*****

C**VERIFICATION DES EQUATION 13 A 20 DE PHIL.MAG**

```
do 1461 kx=1,3
  A13(kx)=(0.d0,0.d0)
  A15(kx)=(0.d0,0.d0)
  A19(kx)=(0.d0,0.d0)
  A20(kx)=(0.d0,0.d0)
do 1471 IX=1,3
  EXPON1=dexp(-ZO*PI1(IX)*H1)
  EXPON2=dexp(+ZO*PI1(IX)*H1)
  EXPON3=dexp(-ZO*PI2(IX)*H1)
  EXPON4=dexp(+ZO*PI2(IX)*H1)
  EXPON5=dexp(-ZO*PI2(IX)*H)
  EXPON6=dexp(+ZO*PI2(IX)*H)
  AINTER1(kx)=X1(IX)*A1(IX,kx)*EXPON1+
1      Y1(IX)*DCONJG(A1(IX,kx))*EXPON2
  AINTER2(kx)=X2(IX)*A2(IX,kx)*EXPON3+
1      Y2(IX)*DCONJG(A2(IX,kx))*EXPON4
  BINTER1(kx)=X1(IX)*E1(IX,1,kx)*EXPON1
1      +Y1(IX)*DCONJG(E1(IX,1,kx))*EXPON2
  BINTER2(kx)=X2(IX)*E2(IX,1,kx)*EXPON3
1      +Y2(IX)*DCONJG(E2(IX,1,kx))*EXPON4
  A13(kx)=A13(kx)+AINTER1(kx)*(dcos(zo*pr1(iX)*h1)+
1      zi*dsin(zo*pr1(iX)*h1))
1      -AINTER2(kx)*(dcos(zo*pr2(iX)*h1)+
1      zi*dsin(zo*pr2(iX)*h1))
  A15(kx)=A15(kx)+BINTER1(kx)*(dcos(zo*pr1(iX)*h1)+
1      zi*dsin(zo*pr1(iX)*h1))
1      -BINTER2(kx)*(dcos(zo*pr2(iX)*h1)+
1      zi*dsin(zo*pr2(iX)*h1))
  A17(kx)=A17(kx)+X1(IX)*E1(IX,1,kx)+Y1(IX)*DCONJG(E1(IX,1,kx))
  A19(kx)=A19(kx)+(X2(IX)*E2(IX,1,kx)*EXPON5
1      +Y2(IX)*DCONJG(E2(IX,1,kx))*EXPON6)*(dcos(zo*pr2(ix)*h)
1      +zi*dsin(zo*pr2(ix)*h))
1471 continue
  A14(kx)=ZI*A13(kx)
  A16(kx)=ZI*A15(kx)
  A18(kx)=ZI*A17(kx)
  A20(kx)=ZI*A19(kx)
1461 continue
  if(n.eq.2) write(8,*) (A13(Kx),A14(Kx),A15(Kx),A16(Kx),A17(Kx),
1      A18(kx),A19(Kx),A20(kx), Kx=1,3)
```

c** CHAMP DES CONTRAINTES SIGMA2 DANS LE CRISTAL 1 ******

```
do 1451 k=1,3
  if(xx1.lt.h1)go to 1448
1  tigma(j,k)=0.d0
do 1452 IA=1,3
  ARG1 =ZO*(XX2-PR1(IA)*XX1)
  ARG2 = Zo*PI1(IA)*XX1
  FCOS = DCOS(ARG1)
  FSIN = DSIN(ARG1)
  FEXP1 = DEXP(-ARG2)
  FEXP2 = DEXP(+ARG2)
DO 2 J = 1,3
  IF (J.GT.K) go to 2
  DOEF1(J) = X1(IA)*E1(IA,J,k)*FEXP1+Y1(IA)*DCONJG(E1(IA,J,K))*FEXP2
  COEF2(J) = ZI*DOEF1(J)
  TIGMA(J,K) = TIGMA(J,K)+FCOS*COEF1(J)+FSIN*COEF2(J)
2  CONTINUE
1452 CONTINUE
```

```

DO 3 J = 1,3
IF(J.GT.K) GO TO 3
SIGMA1(J,K) = SIGMA1(J,K) +(2./PERIOD)*TIGMA(J,K)
SIGMA1(K,J) = SIGMA1(J,K)
3 CONTINUE
IF (XX1.gt.h1) GO TO 1449
c*** CHAMP DES CONTRAINTES SIGMA2 DANS LE CRISTAL 2 ***
7 TIGMA(J,K) = 0.D0
DO 1453 IA = 1,3
ARG1 = ZO*(XX2-PR2(IA)*XX1)
ARG2 =ZO*PI2(IA)*XX1
FCOS = DCOS(ARG1)
FSIN = DSIN(ARG1)
FEXP1 = DEXP(-ARG2)
FEXP2 = DEXP(+ARG2)
DO 4 J = 1,3
IF(J.GT.K) GO TO 4
DOEF1(J) = X2(IA)*E2(IA,J,K)*FEXP1
1 +Y2(IA)*DCONJG(E2(IA,J,K))*FEXP2
TIGMA(J,k) = TIGMA(J,K)+FCOS*COEF1(J)+FSIN*COEF2(J)
4 CONTINUE
1453 CONTINUE
DO 6 J = 1,3
IF(J.GT.K) GO TO 6
SIGMA2(J,K) = SIGMA2(J,K) +(2./PERIOD)*TIGMA(J,K)
SIGMA2(K,J) = SIGMA2(J,K)
1451 CONTINUE
c*****CALCUL DES DEPLACEMENTS POUR LE CRISTAL 1 *****
do 1541 kk=1,3
if(xx1.lt.h1)go to 8441
do kf=1,3
ud1(kf)=0.D0
end do
do 2541 ia=1,3
ARG1 =ZO*(XX2-PR1(IA)*XX1)
ARG2 =Zo*PI1(IA)*XX1
FCOS = DCOS(ARG1)
FSIN = DSIN(ARG1)
FEXP1 =DEXP(-ARG2)
FEXP2 = DEXP(+ARG2)
DCOEF4 = X1(IA)*A1(IA,kk)*FEXP1+Y1(IA)*DCONJG(A1(IA,kk))*FEXP2
COEF4=DCOEF4
2541 CONTINUE
U1(kk)=U1(kk)+(1./(xpi*n))*Ud1(kk)
IF (XX1.gt.h1) GO TO 4449
c*****CALCUL DES DEPLACEMENTS POUR LE CRISTAL 2 *****
8441 do kf=1,3
ud2(kf)=0.D0
end do
do 3541 IA=1,3
ARG1 =ZO*(XX2-PR2(IA)*XX1)
ARG2 =Zo*PI2(IA)*XX1
FCOS = DCOS(ARG1)
FSIN = DSIN(ARG1)
FEXP1 = DEXP(-ARG2)
FEXP2 = DEXP(+ARG2)
DCOEF4 = X2(IA)*A2(IA,kk)*FEXP1+Y2(IA)*DCONJG(A2(IA,kk))*FEXP2
COEF4=DCOEF4
COEF3 = -ZI*DCOEF4
Ud2(kk) = Ud2(kk)+FCOS*COEF3+FSIN*COEF4

```

```

3541 CONTINUE
      U2(kk)=U2(kk)+1./(xpi*n)*Ud2(kk)
4449 continue
1541 continue
1299 continue
      DO 1699 J = 1,3
        IF(IT.GT.J) GO TO 1697
1697 CONTINUE
c*****IMPRESSION DES CONTRAINTES*****
      IF(XX1.GT.h1) WRITE(13,694) XX1,XX2,SIGMA1(2,1)
      IF(XX1.GT.h1) WRITE(14,694) XX1,XX2,SIGMA1(2,2)
694 FORMAT(1X,2F6.2,10X,d25.18)

      IF(XX1.LT.h1) WRITE(12,695) XX1,XX2,SIGMA2(1,1)
      IF(XX1.LT.h1) WRITE(13,695) XX1,XX2,SIGMA2(2,1)
      IF(XX1.LT.h1) WRITE(14,695) XX1,XX2,SIGMA2(2,2)
695 FORMAT(1X,2F6.2,10X,d25.18)
555 do 9961 ib=1,3
9961 continue
1311 uu1(1)=xx2+3*u1(1)
      uu2(2)=xx1+3*u2(2)
      delta1= u1(2)-u2(2)
      if(xx1.lt.h1)write(11,305)uu2(1),uu2(2)
305 FORMAT(1X,d25.18,2x,d25.18)
      if(xx1.gt.h1)write(111,306)uu1(1),uu1(2)
306 FORMAT(1X,d25.18,2x,d25.18)
      if(xx1.eq.h1)write(111,307)uu1(1),uu1(2)
307 FORMAT(1X,d25.18,1x,d25.18)
      if(xx1.eq.h1)write(11,308)uu2(1),uu2(2)
308 FORMAT(1X,d25.18,1x,d25.18)
1300 CONTINUE
9999 CONTINUE
202 STOP
      END

```