

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

MEMOIRE

Présenté

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

Pour obtenir le titre de

MAGISTERE EN GENIE MECANIQUE
Option : Construction mécanique

Par
Mr MAKHLOUFI RAFIK

*Etude de la déformation des champs élastiques dans le cas
de l'élasticité anisotrope : Application au bilame mince
Cu/(001)Fe*

Soutenue publiquement le 10 / 01 / 2010 , devant le jury composé de :

Dr Salah MADANI	M.Conférences, Université de Batna	Président
Dr Mourad BRIOUA	M.Conférences, Université de Batna	Rapporteur
Dr Akila DERARDJA	M.Conférences, Université de Batna	Co-Rapporteur
Pr Abdelaziz ATI	Professeur, Université de Béjaia	Examineur
Dr Rachid BENBOUTA	M.Conférences, Université de Batna	Examineur

« La théorie, c'est quand on sait tout et que rien ne fonctionne. La pratique, c'est quand tout fonctionne et que personne ne sait pourquoi. Si la pratique et la théorie sont réunies, rien ne fonctionne et on ne sait pas pourquoi. »

[Albert Einstein]

Remerciements

Je tiens à remercier ici :

- Mon encadreur le Docteur Mourad Brioua ; pour ses conseils et pour la confiance qu'il m'a témoignée. Le remercier pour son dynamisme et les nombreuses impulsions qu'il a donné à ce travail, et sa disponibilité pour l'achèvement de ce modeste travail.

- Docteur A. Derardja, mon co- encadreur de mémoire pour ses conseils.

Je remercie spécialement le Docteur Salah Madani de l'Université de Batna, qui n'a jamais hésité à répondre à toutes mes questions et d'avoir accepté de présider le jury de ce mémoire.

J'adresse aussi mes sincères remerciements au :

- Professeur Abdelaziz Ati de l'Université de Béjaia

- Docteur Rachid Benbouta de l'Université de Batna

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

Mes remerciements vont également à mes chers amis W. Kaddouri, L. Baroura, M. Abdelhamid et S. Djarallah pour leur aide, soutien et encouragement.

SOMMAIRE

Résumé
Introduction Générale.....	1

Chapitre I Etude bibliographique

Introduction.....	3
I.1. Travaux expérimentaux	3
I.2. Travaux théoriques.....	6
I.2.1. Cas de réseaux de dislocations.....	7

Chapitre II Introduction à la théorie des dislocations

Introduction.....	12
II.1. Modèles de dislocations.....	13
II.2. Dislocation coin.....	14
II.3. Dislocation Vis.....	15
II.4. Dislocation réelle.....	15
II.5. Propriétés des dislocations.....	16
II.5.1. Vecteur de Burgers.....	16
II.5.2. Champ de contrainte élastique.....	16
II.5.3. Mouvement des dislocations.....	17

Chapitre III Présentation du problème et conditions aux limites

Introduction.....	19
III.1. Géométrie du problème.....	20
III.2. Conditions en déplacement	20
III.3. Conditions en contrainte.....	22

Chapitre IV Formulation mathématique et solution en élasticité anisotrope

Introduction.....	23
IV.1. Champ des déplacements	23
IV.2. Expression finale du champ des déplacements.....	29
IV.3. Champ des contraintes.....	29
IV.4. Conditions aux limites.....	32
IV.4.1. Conditions en déplacement.....	32
IV.4.2. Conditions en contrainte.....	32
IV.5. Système 24 x 24 et matrice associée.....	33

Chapitre V Applications numériques

V.1. Etapes de calcul du programme.....	37
V.2. Matériaux utilisés.....	38
V.3. Calcul d'erreur à l'interface.....	38
V.4. Champ des déplacements.....	40
V.4.1. Influence de la variation de l'épaisseur des couches sur la déformation	40
V.4.1.1. Premier Cas $b//Ox_1$	41
V.4.1.2. Premier Cas $b//Ox_2$	41
V.4.1.3. Comparaison et interprétations des résultats.....	42
V.5. Iso valeurs des champs de déplacements.....	43
V.5.1. interprétations des courbes.....	46
V.6. Evolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} dans le composite en fonction de x_2	47
V.6.1. interprétations des courbes.....	52
V.7. Effet de l'hétérogénéité du matériau.....	53
V.8. Comparaison avec les résultats obtenus en élasticité isotrope :.....	54

Effet d'anisotropie

Conclusion Générale

Références bibliographiques.....

Programme élaboré.....

Résumé

L'idée de cette étude est simple: par définition, tout défaut informe sur la possibilité de présence de dislocations enterrées. Ces dislocations peuvent être interfaciales, elles se regroupent en différents réseaux dont la déformation associée est mesurable par observations microscopiques, tandis que théoriquement elle est évaluable grâce au calcul des champs élastiques.

Le but du sujet est d'être capable, d'une part, de fournir des modèles de comportement prédictif à des échelles nanométriques et de reproduire, d'autres parts, certaines observations expérimentales à l'aide d'un programme de simulation numérique par l'application de la théorie de l'élasticité anisotrope. Celle-ci nous permet d'exprimer toutes les expressions nécessaires pour décrire le champ de déformation et cela se fait par développement en séries de Fourier, ce qui conduit à un système d'équations linéaires. Ce dernier ne peut être inversé que numériquement et ses solutions sont les coefficients complexes de la série de Fourier recherchés. Les champs élastiques de déplacements et de contraintes sont calculés en fonction de ces coefficients.

Notre travail s'est focalisé sur la détermination de ces constantes et pour cela nous avons élaboré un programme de simulation numérique en code MATHEMATICA qui nous permet de faire ces calculs, ensuite de simuler les champs de déformations élastiques (déplacements, contraintes). Pour l'application nous avons traité le cas d'un bilame mince Cu/(001)Fe.

Le programme élaboré est très général et peut être utilisé pour différents matériaux exigés par l'industrie. Les champs élastiques dans le cas de l'élasticité anisotrope sont déterminés avec grande précision.

Mots-clés : bilame mince, interface, réseaux de dislocations, élasticité anisotrope.

Introduction Générale

Si on commence à mieux connaître le monde à l'échelle du nanomètre, de larges pans restent encore inconnus. D'un point de vue mécanique, un enjeu des plus excitants, à la fois sous ses aspects fondamentaux et appliqués, est la compréhension des mécanismes de déformations de ces nano matériaux. La miniaturisation des produits dans l'industrie du semi-conducteur (taille des interconnexions en cuivre proche de 130 nm) pose en effet des problèmes de contraintes mécaniques qui engendrent des problèmes de défaillance et de fiabilité (Stress Migration, Electro migration). La prise en compte de ces champs de contraintes dès la conception est devenue un des éléments critiques du développement de nouveaux produits.

Les dislocations, défauts existant au sein de la matière cristalline, sont à la base des mécanismes de plasticité et de déformation des matériaux. De nombreuses théories ont été développées afin de décrire les déplacements atomiques qui surviennent autour de ces défauts fondamentaux, notamment la théorie élastique. Cette théorie est basée sur les comportements macroscopiques et ne prend pas en compte explicitement l'existence des atomes.

Les chercheurs ont voulu tester les limites de cette théorie en mesurant le champ de déplacement expérimental autour d'une dislocation. Ils ont pour cela effectué des observations de dislocations dans le silicium pur par microscopie électronique en transmission à haute résolution, technique qui permet de visualiser les réseaux atomiques dans les matériaux cristallins.

Le champ de déplacement expérimental obtenu a été comparé avec les champs de déplacement théoriques de la théorie élastique selon ses deux variantes : isotrope et anisotrope. Pour effectuer ces observations, les chercheurs ont développé une nouvelle technique de traitement d'images, dite « analyse des images de phase ».

Ils ont montré que c'est la théorie de l'élasticité anisotrope qui est vérifiée, avec une précision de 3 pm : à une distance de quelques nanomètres du cœur de la dislocation, le cristal se déforme différemment selon les directions cristallographiques distinctes [1].

ⁱ : Centre d'études de chimie métallurgique (CECM, Vitry-sur-Seine), et du Centre de recherches sur les macromolécules végétales (CERMAV, Grenoble) du CNRS, en collaboration avec le Département de recherche fondamentale sur la matière condensée du CEA (CEA-G Grenoble),

D'un point de vue fondamental, ces résultats permettent de confirmer numériquement la validité de la théorie anisotrope à l'échelle nanométrique. Il sera possible à l'avenir d'étudier les limites de la théorie de l'élasticité qui ne devrait plus être valable au niveau du cœur des dislocations.

En se basant sur une formulation en séries de Fourier double proposé par Bonnet [1], nous présentons dans ce travail des solutions en élasticité anisotrope pour un réseau unidirectionnel de dislocations intrinsèques situé à l'interface d'un bilame mince.

Nous rencontrons dans nos calculs une équation polynomiale du sixième degré qui est résolue numériquement. La détermination des coefficients de Fourier menant au calcul des champs élastiques requis consiste en la résolution numérique d'une matrice de 24 équations linéaires à 24 inconnues complexes.

Ce travail est présenté en 5 chapitres. Dans le premier chapitre une synthèse des résultats bibliographiques relatifs au sujet est réalisée. Dans le deuxième chapitre nous rappelons la théorie des dislocations.

Dans le chapitre III, nous présentons la géométrie du problème pour un réseau de dislocations unidirectionnel ainsi que les conditions aux limites.

Le chapitre IV est consacré au développement analytique des champs de déplacements et de contraintes en élasticité anisotrope.

le chapitre V est réservé aux applications numériques pour l'hétéro structure d'un bilame mince Cu/(001)Fe .

Au terme de ce mémoire une conclusion générale regroupant l'essentiel des résultats obtenus est présentée.

Chapitre I

SYNTHESE BIBLIOGRAPHIQUES.

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 sur les travaux expérimentaux est présenté, dans une première partie 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'une autre partie sur les travaux théoriques .

Les dislocations: aperçu historique.

Contribution	Chercheur	Année
Calcul théorique de résistance au cisaillement	Frenkel (1894-1952)	1926
Postulat des « Verhakungen »	Dehlinger (1901-1983)	1929
Postulat des dislocations coins	Orowan (1901-1989)	1934
	Polanyi (1891-1976)	
	Taylor (1886-1975)	
Postulat des dislocations vis	Burgers (1895-1981)	1939
Mécanismes de multiplication des dislocations	Frank (1911-1998)	1950
	Read	
Observation en MET des dislocations	Hirsch	1956

I. 1. 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 [2] 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 noeuds triples, formant de larges cellules. Ces différents arrangements observés sont de deux types: en lignes parallèles précédemment étudiés par différents auteurs (Burgers [3], Bragg [4], Van der Merwe [5], Read et Shockly [6], [7]) ou bien en arrangements hexagonaux périodiques.

L'une des premières observations des dislocations interfaciales aux interfaces cfc/cc, en utilisant la M.E.T, est celle de Barö et Gleiter [8] pour les interfaces de laiton α - β . Ils ont observé un réseau périodique de dislocations interfaciales espacées de 90-1000 Å, qu'ils associent aux désaccords paramétriques des plans parallèles proches $(111)_{cfc}$ et $(110)_{cc}$ à l'interface; proposant ainsi pour chaque dislocation un vecteur de burgers

de $1/3 [111]_{\text{cfc}}$ et $1/2[110]_{\text{cc}}$. Plus tard, Bollmann [9] interprète ces résultats, pour une orientation NW, en terme de sa théorie du réseau DSC.

Rigsbee et Aaronson [10] étudient, quant à eux l'interface cfc/cc du silicium et observent alors 2 réseaux périodiques, espacés respectivement de $15\text{-}25\text{\AA}$ et $22\text{-}90\text{\AA}$. Ensuite Hall et Aaronson [11], utilisent une autre technique pour examiner l'interface cfc/cc dans un alliage Cu/Cu pour différentes morphologies de précipitation et d'orientation, avec les plans $(111)_{\text{cfc}}$ et $(110)_{\text{cc}}$ toujours parfaitement parallèles. Dépendant de la morphologie de précipitation, un ou deux réseaux de dislocations interfaciales sont observés en microscopie électronique avec un espacement de 25\AA au moins. Utilisant le critère g.b, ils démontrent que les vecteurs de burgers associés à ce type de dislocations sont compatibles avec ceux prédits par le modèle du réseau 0. Enfin, en 1989 Foorwood et Clarebrough [12] montrent que pour deux différentes orientations entre les plans cfc et cc d'un alliage Cu-fe, l'interface est constituée de trois réseaux de dislocations interfaciales dont les vecteurs de burgers ne sont pas des vecteurs des deux réseaux mais des vecteurs du réseau DSC (Le réseau DSC est le plus grand réseau commun à deux autres réseau différents ayant une supermaille commune).

Les avancées en matière d'observation par M.E.T ou M.E.T.H.R effectuées sur des bicristaux minces ont décelés, pour une orientation relative particulière des deux cristaux, la présence de réseaux de dislocations (FIG.1.1 et FIG.1.2).

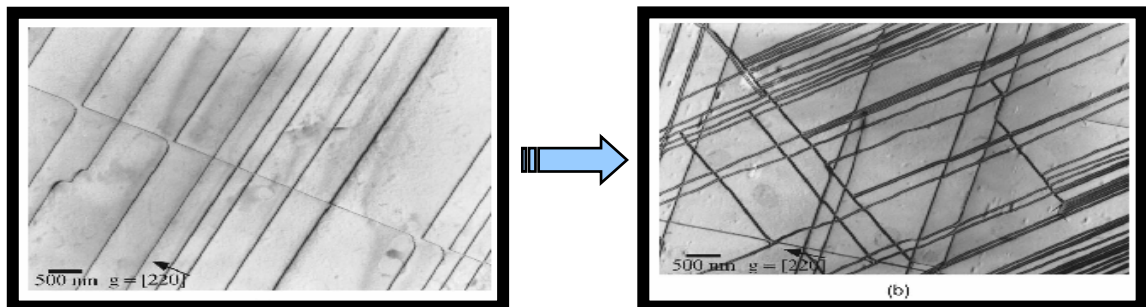


FIG.1.1: Evolution d'un réseau parallèle de DMS dans GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}$ après un processus thermique.

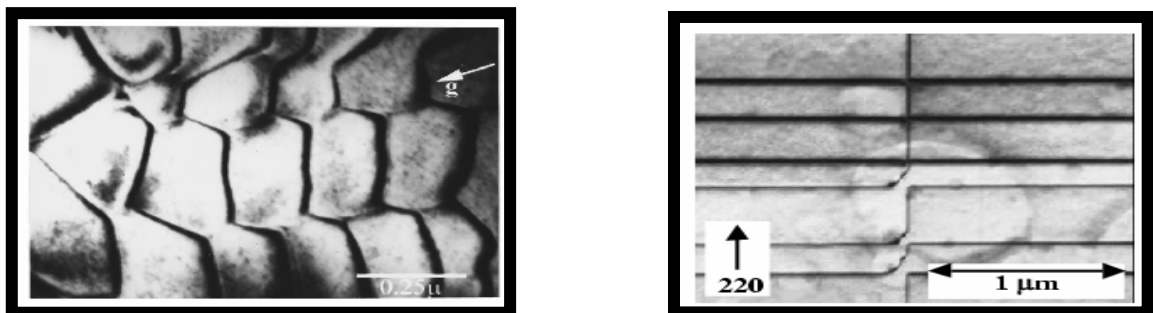


FIG.1.2 : la présence de réseaux périodiques de dislocations pour une orientation relative particulière des deux cristaux effectués sur des bicristaux minces

Les études effectuées sur les couches minces déposées sur des substrats monocristallins révèlent l'existence de réseaux de dislocations interfaciales bien organisés, et dont la densité et le caractère dépendent des écarts paramétriques et angulaires entre les cristaux le long de l'interface (voir Figure 1.3).

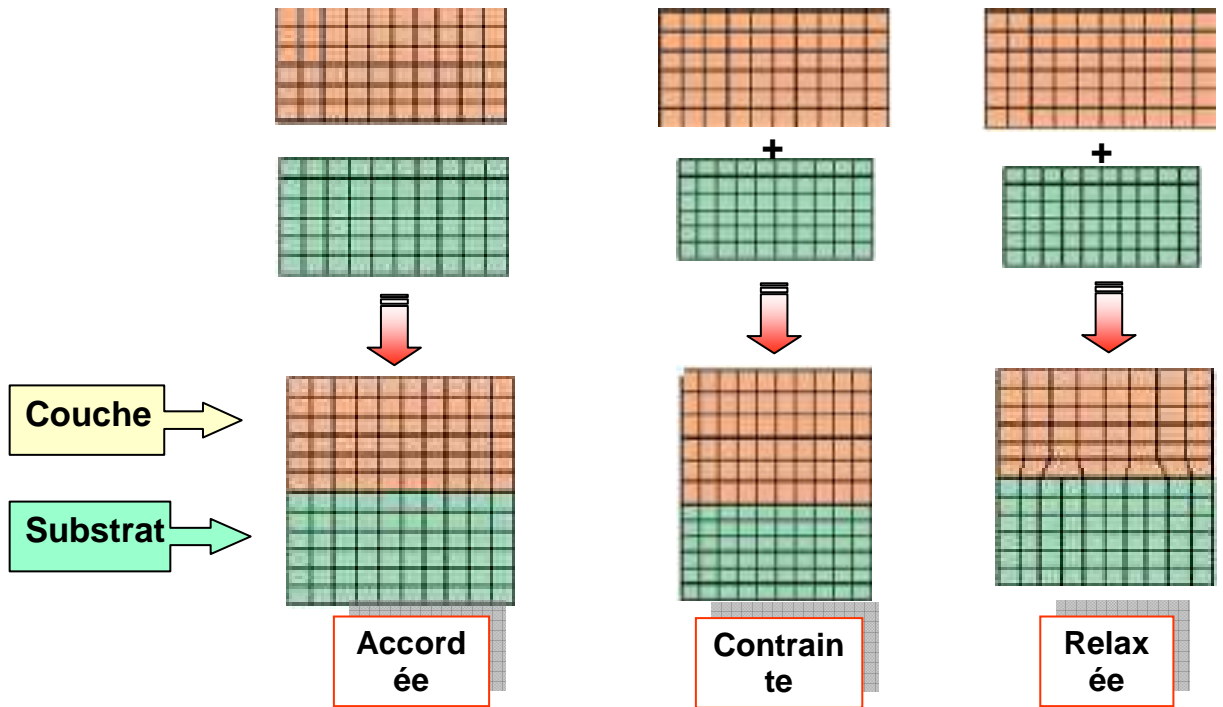


FIG.1.3 : Représentation schématique de l'accommodation du réseau d'un film mince lors de sa fixation sur un substrat de paramètre de maille différent. Les contraintes de cohérence peuvent être relaxées par des dislocations de misfit (Figure de droite).

Les premières observations de réseaux de dislocations de désaccord aux interfaces ont été faites en microscopie électronique à transmission (MET) par Matthews [46] sur le système Au sur Ag orienté (001) : $\frac{\Delta a}{a} = -0.2\%$ puis Jesser et Matthews [47] sur les systèmes γ -Fe sur Cu -(001): $\frac{\Delta a}{a} = +1.6\%$, Co/Cu-(001) : $\frac{\Delta a}{a} = +2.4\%$ et Cr/Ni-(001) : $\frac{\Delta a}{a} = -3.1\%$ [48-a, b, c].

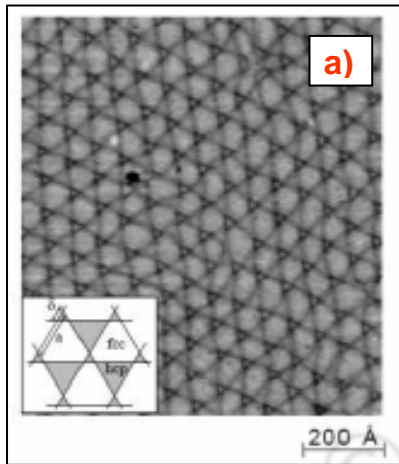


FIG.1.4 (a) Réseau de dislocations de désaccord paramétrique à l'interface Pt (111) – Ag après le dépôt de deux monocouches d'Ag à 400 K suivi d'un recuit à 800 K.

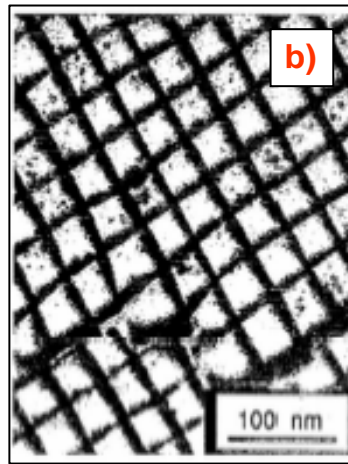


FIG.1.4 (b) Observations MET du réseau carré de dislocations vis de périodicité 38 nm et Fig1.4 (c) du réseau de dislocations mixtes alternées et consécutives.



En Microscopie électronique en transmission et dans le cadre de l'élasticité isotrope, plusieurs travaux sont effectués pour examiner la nature des contrastes liés aux dislocations situées près des surfaces libres. Ainsi Howie et Whelan [13] calculent des profils d'intensité pour des dislocations vis parallèles à une surface libre voisine. Par ailleurs, Tunstall, Hirsch et Steeds [14] observent le contraste d'une dislocation vis émergeant normalement à une surface libre. Enfin Humble [15] 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 [16]. Cet auteur note que, dans un alliage Cu-8at.%Si, un segment de dislocation $1/2[011]$ a des contrastes qui n'obéissent pas au critère d'invisibilité $g \cdot b = 0$ de Hirsch, Howie, Nicholson, Pashley et Whelan [17]. Ce vecteur de burgers fut identifié à l'aide d'un programme de simulation construit par Head, Humble, Clarebrough, Morton et Forwood [18], programme qui ne prend pas 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 [19] 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.

Notons également, que plusieurs investigations expérimentales et théoriques sont 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 dislocation coin intrinsèques orientées suivant $\langle 001 \rangle$ (Ati [20]).

J. M. Kang [21] étudie la relaxation par les dislocations d'interface des hétérostructures à fort désaccord paramétrique prenant GaAs/Si (001) et GaSb/GaAs (001) comme application. Il conclut que les dislocations d'interface de type 90° sont les plus convenables pour la relaxation du désaccord paramétrique à cause de leur efficacité et stabilité par rapport 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.

I. 2. Travaux théoriques .

Nous limitons la synthèse bibliographique aux travaux ayant un lien direct avec le sujet dans le cas de réseaux périodiques de dislocations de désaccord.

I. 2. 1. Cas du réseaux de dislocations

Concernant les réseaux périodiques de dislocations interfaciales et à partir des résultats d'Eshelby et col [23], Stroh [24] obtient le champ des contraintes d'un réseau plan de dislocations rectilignes équidistantes situées dans un milieu anisotrope homogène. Plus tard et en 1962, Chou [25] propose des expressions plus détaillées du champ des contraintes pour un réseau de dislocations où la structure du cristal est hexagonale tenant compte de la propriété de 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, Pande et Yang [26], Hirth, Barnett et Lothe [27], Bacon, Barnett et Scattergood [28], Bonnet [29]). Deux types de dislocations sont, alors traités: les dislocations intrinsèques et les dislocations extrinsèques. Une formulation rigoureuse en série de Fourier double fournit les champs élastiques du joint interphase à structure périodique (simple ou double) [30]. En effet, dans le cas d'un réseau de dislocations intrinsèques identiques et parallèles (cas unidimensionnel), Bonnet détermine analytiquement les champs élastiques (déplacements et contraintes) et l'énergie élastique stockée. L'auteur résout, par la suite [31], théoriquement le problème lié à un réseau périodique de dislocations intrinsèques ou extrinsèques situé à l'interface d'un

bilame mince en introduisant l'effet des surfaces libres sur la dispersion des contraintes et l'énergie stockée à l'interface

En 1994, R. Bonnet et M. Loubradou [32] proposent une approche dite « continue », dans le but de décrire les positions atomiques autour de dislocations de misfit localisées le long d'une interface plane entre deux milieux hétérogènes anisotropes, l'étude de l'hétéro jonction (001) CdTe/(001)GaAs s'est couronnée par des résultats très comparables aux images M.E.T.H.R loin des cœurs de dislocations, (Fig 1.5).

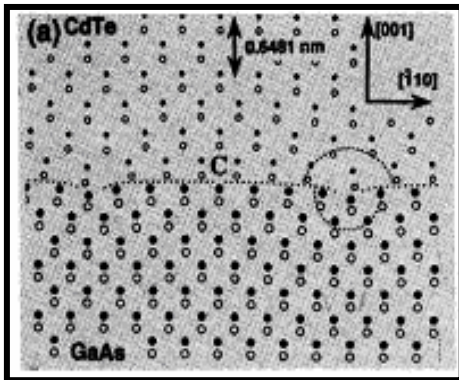


FIG.1.5.a : position des colonnes atomiques prédites par le calcul de Bonnet ,c'est le milieu entre deux cœurs de dislocations

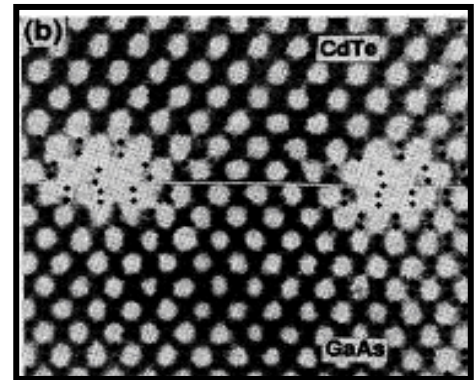


FIG.1.5.b :Image M.E.T.H.R montrant le bon accord entre les positions théoriques et les positions expérimentales

En 1997, S. Madani [33], considère que l'interface plane du bilame mince est tapissée d'un réseau de dislocations de misfit (intrinsèques) périodique parallèle. Parmi ses résultats le calcul du champ des contraintes , d'un matériau Al/Al₂Cu, pour des C_{ij} anisotropes et un vecteur de Burgers parallèle a l'axe Ox₁.

En 1998, J.G.Belk et al [34], traitent plusieurs modèles pour reproduire les mesures expérimentales obtenues lors de l'étude par S.T.M du champ de déplacement dans une couche d'InAs croissante sur du GaAs (110), et dues au champ de déformation des dislocations coins. Le modèle basé sur la théorie classique de l'élasticité a donné satisfaction (Figure1.7.a), mais le modèle basé sur la méthode de R.Bonnet [35] (1981) s'est révélé plus adéquat (Figure1.6.b).

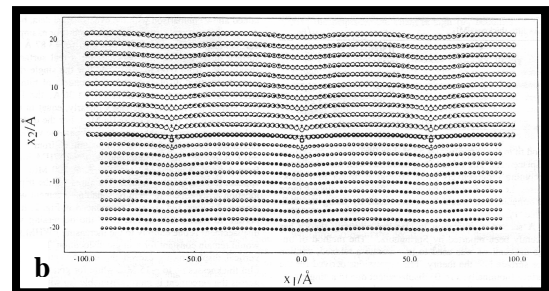
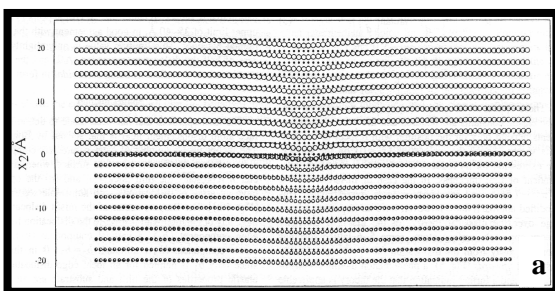


FIG.1.6 :Champ de déplacement atomique à travers la section [001], les deux types d'atomes sont représentés (In et As).(a) Résultat obtenu à partir de la théorie classique de l'élasticité, (b) Résultat obtenu par la méthode de bonnet pour un réseau de dislocations espacées de 60nm.

En 1999, R. Bonnet [36] détermine explicitement en élasticité isotrope le champ élastique d'un réseau plan, bipériodique de dislocations de misfit parallèles aux deux surfaces libres d'un bicristal mince.

Plus récemment en 2005, M. Brioua [37] a traité le composé tricouches NiSi₂/Si/GaAs sous l'effet d'un réseau de dislocations interfaciales de type coin pour un vecteur de Burgers $b//Ox_1$ (FIG.1.7).

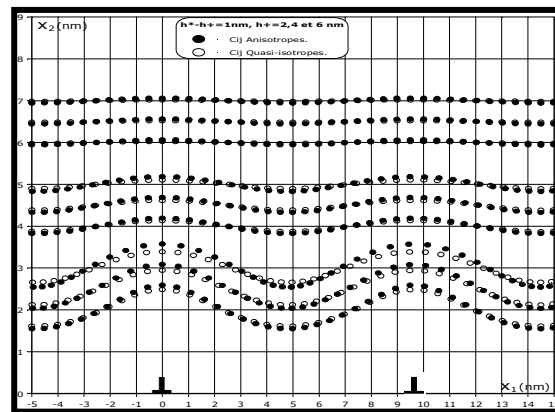


FIG.1.7 : Superposition des champs des déplacements, C_{ij} anisotropes et C_{ij} quasi-isotrope du matériau tricouches NiSi₂/Si/GaAs sous l'effet d'un réseau de dislocations coin interfaciales pour un vecteur de Burgers $b//Ox_1$.

En 2003, R. Bonnet [38] détaille le champ élastique d'un défaut cristallin parallèle aux deux surfaces libres d'une lame mince isotrope, en déformation plane, avec une nouvelle approche utilisant de façon répétée la solution classique du problème de Flamant. Les solutions pour une dislocation coin ayant une position quelconque dans la lame mince et un vecteur de Burgers parallèle aux surfaces est fournie.

En 2003, Fabien Leroy [39] analyse l'interface de collage et les réseaux de dislocations qui la garnissent par des calculs d'élasticité continue isotrope. Les champs élastiques (déformations, contraintes, déplacements et densités d'énergie élastique) sont calculés pour les réseaux carrés de dislocations vis et pour les réseaux de dislocations coins. Ces calculs permettent de quantifier les champs élastiques en surface.

En 2007, X. Wang [40] présente une application de l'élasticité anisotrope a des multicristaux déformés par un réseau de dislocations de misfit.

En 2008, Emmanuel CLOUET [41] calcule le Champ de déplacement créé par une dislocation vis dans le fer (FIG.1.8) en adoptant le formalisme de la théorie élastique anisotrope des défauts linéaires rectilignes qui a été développé à partir des années 1950 suite aux travaux d'Eshelby et al [42] et de Stroh [43, 44].

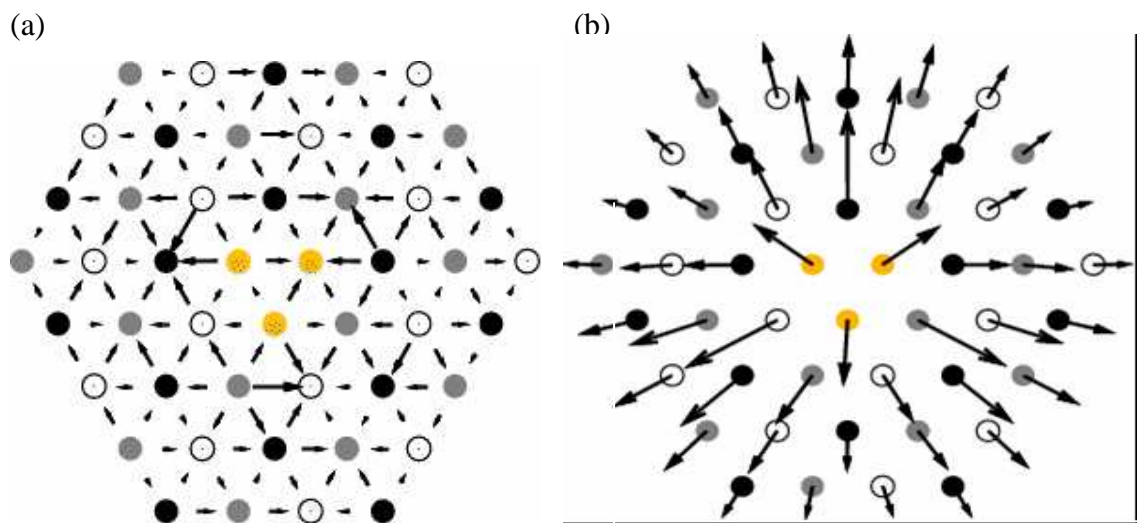


FIG.1.8 : Champ de déplacement créé par une dislocation vis dans le fer. (a) et (b) : champ obtenu par calculs ab-initio [4] après soustraction du champ élastique de Volterra .

En 2009, V. G. Myagkov [45] dans son article intitulé « The γ - Fe formation in epitaxial Cu(001)/Fe(001) thin films by the solid-state synthesis : Structural and magnetic features » utilise l'analyse magnétique et la diffraction par rayons X pour calculer les caractéristiques structurales et chimiques de l'hétérostructure Cu(001)/Fe(001), ainsi que les propriétés électroniques et magnétiques du fer γ lequel fait l'objet actuellement de plusieurs et d'intenses recherches dans le domaine de la physique.

Objectif principal du travail.

Maîtriser le code Mathematica pour être capable, d'une part, de fournir des modèles de comportement à des échelles nanométriques et de reproduire, d'autre part, certaines observations expérimentales à l'aide du code de simulation numérique par l'application de la théorie de l'élasticité anisotrope.

Hypothèses de travail .

Dans notre étude, nous nous sommes basés sur les hypothèses suivantes :

- 1- Le type de réseau de dislocations utilisé est un réseau unidirectionnel de dislocations coins.
- 2- L'interface couche/couche est considérée parfaitement plane.

Objectifs à atteindre.

- 1- Etude des champs de déformation élastique (déformations, contraintes) générés par un réseau de dislocations unidirectionnel en utilisant la théorie d'élasticité anisotrope.
- 2- Maîtriser le code Mathematica afin d'être capable d'élaborer un programme numérique pour simuler les effets élastiques.
- 3- Modélisation, à l'échelle nanométrique du problème posé et résolution.
- 4- Application au bilame mince Cu/(001)Fe .
- 5- Interprétation et comparaison des résultats obtenus dans notre cas à ceux obtenus dans le cas d'une élasticité isotrope.

Chapitre II

INTRODUCTION A LA THEORIE DES DISLOCATIONS.

Introduction à la théorie des dislocations

Introduction.

Une couche mince est une fine pellicule d'un matériau déposée sur un autre matériau, appelé « substrat ». Le but du dépôt est de donner des propriétés particulières à la surface de la pièce, tout en bénéficiant des propriétés massives du substrat (en général : tenue mécanique), par exemple :

- conductivité électrique : métallisation de la surface, par exemple pour observer un échantillon isolant au microscope électronique à balayage
- optique : tain du miroir, traitement anti-reflet des objectifs d'appareil photo, nickelage des casques de pompiers pour réfléchir la chaleur (infra-rouges), dorure de leur visière pour éviter l'éblouissement

En science des matériaux, le dépôt d'une couche mince sur un substrat conduit, généralement à la naissance de dislocations. Une dislocation est un défaut linéaire correspondant à une discontinuité dans l'organisation de la structure cristalline. Une dislocation peut être vue simplement comme un "quantum" de déformation élémentaire au sein d'un cristal possédant un champ de contraintes à longue distance.

Elle est caractérisée par:

- la direction de sa ligne,
- un vecteur appelé « vecteur de Burgers » dont la norme représente l'amplitude de la déformation qu'elle engendre.

Les dislocations ont une importance capitale pour les propriétés physiques des matériaux cristallins :

- ce sont elles qui, en se déplaçant, propagent la déformation plastique. Elles permettent ainsi la mise en forme des pièces métalliques.
- les déformations du réseau cristallin qu'elles induisent facilitent la diffusion des atomes. Elles peuvent ainsi piéger des défauts autour d'elles .
- elles influencent les propriétés électroniques des semi-conducteurs

Description générale d'une dislocation.

Supposons qu'un cisaillement élémentaire d'une distance inter-atomique b se produise uniquement le long d'une partie du plan de cisaillement. La ligne qui sépare la partie qui a été cisailée de celle qui ne l'est pas, est la ligne de dislocation. Elle apparaît ici comme la limite d'un demi plan atomique qui distord fortement les plans voisins (FIG.2.1).

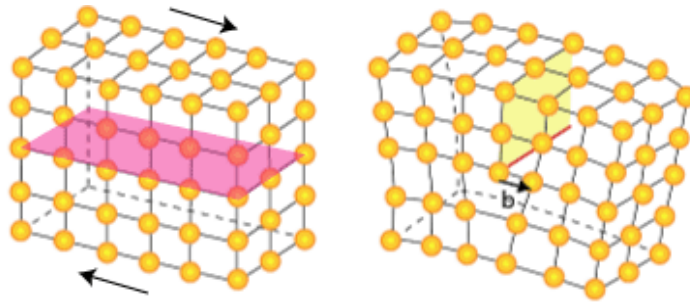


FIG.2.1: Représentation du plan de cisaillement dans un cristal.

Bien qu'observées dans les cristaux liquides au début du siècle par G. Friedel, il aura fallu attendre les années 1950 et l'invention du microscope électronique en transmission pour les observer dans les métaux (FIG.2.2).

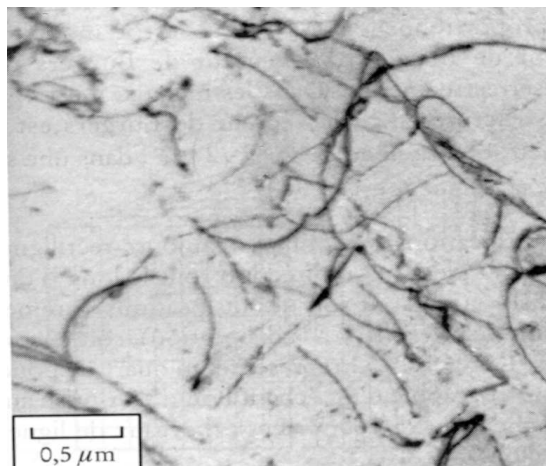


FIG. 2.2 : Dislocations observées au MET dans un échantillon de fer (Dorlot)

II. 1. Modèles de dislocations

Le concept de dislocation dans un milieu « continu » est bien connu depuis les travaux du mathématicien Volterra au début du XX^e siècle. La construction dite « de Volterra » permet de créer formellement une dislocation.

Elle consiste:

- dans un premier temps à couper un volume selon une surface quelconque s'appuyant sur une ligne L ;
- puis à déplacer l'une des lèvres de coupure par rapport à l'autre selon un vecteur \vec{b} (appelé « vecteur de Burgers ») ; dans les solides cristallins (un milieu discontinu), ce vecteur est toujours une translation du réseau ;
- enfin, dans une dernière étape, il s'agit de recoller les deux lèvres de la coupure et de relaxer les contraintes nécessaires au déplacement.

Lorsque ce déplacement est en dehors du plan de coupe, le recollement nécessite l'ajout de matière. Cette construction aboutit à la formation d'une discontinuité linéaire (purement élastique dans un milieu continu) bordant la surface. La dislocation ainsi créée est définie par la position géométrique de la ligne L et de la force nécessaire au déplacement relatif des deux lèvres. Elle ne dépend pas de la position de la surface de coupure. Dans un milieu discontinu, la ligne L marque le « cœur » de la dislocation. Dans cette région, le déplacement des atomes de leur position initiale ne peut pas être défini par une déformation élastique.

La ligne de dislocation ne peut s'arrêter à l'intérieur du cristal mais doit, soit émerger sur une imperfection (surface, joint de grain, autre dislocation), soit se refermer sur elle même. Deux cas particuliers de dislocations rectilignes sont intéressants : la dislocation coin (\vec{b} perpendiculaire à \vec{u} , vecteur unitaire de la ligne L) et la dislocation vis (\vec{b} parallèle à \vec{u}).

II.2. Dislocation coin.

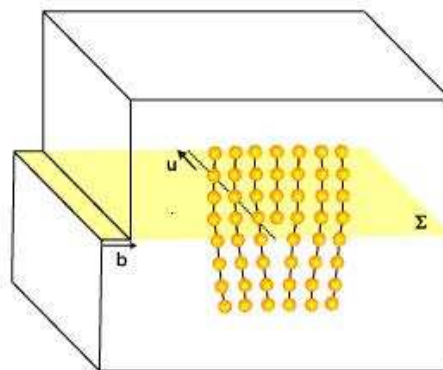


FIG.2.3: Représentation des dislocations coins dans un cristal.

Elle peut être visualisée aisément si on effectue le processus de Volterra en insérant un demi-plan atomique supplémentaire dans la structure parfaite, à la manière dont on enfoncerait un coin dans une pièce de bois (FIG.2.3).

Ce mode d'adaptation est utilisé par certaines plantes lorsque des lignes parallèles suivent une forme de largeur variable, comme par exemple les lignes de grains sur un épis de maïs ou les lignes d'aiguilles sur un cactus.

II. 3. Dislocation vis

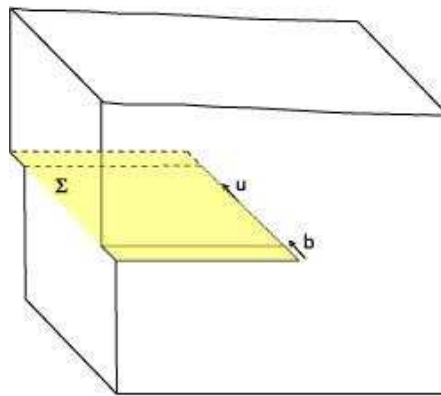


FIG.2.4 : Représentation des dislocations vis dans un cristal.

La dislocation vis tire son nom du fait que chaque point sur le « plan » atomique perpendiculaire à la ligne de dislocation monte d'un pas égal à \vec{b} à chaque tour d'une trajectoire qui enroule la dislocation. La topologie du champ de contrainte autour de la dislocation est donc celle d'une hélice, ou encore, si on fait le tour de la ligne en sautant d'atome en atome, on monte de \vec{b} lorsque l'on fait un tour (FIG.2.4).

II. 4. Dislocation réelle

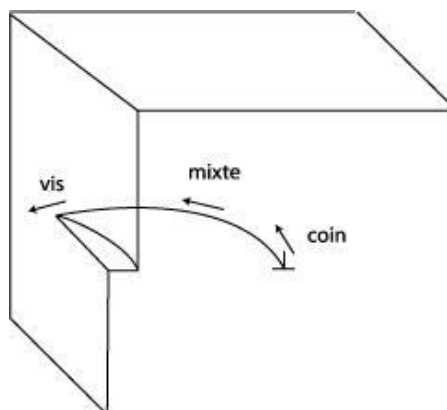


FIG.2.5: Représentation des dislocations réelles dans un cristal.

Dans le cas général, la dislocation a un caractère dit mixte, où le vecteur de Burgers \vec{b} et le vecteur unitaire \vec{u} de la ligne forment un angle quelconque (FIG.2.5).

II. 5. Propriétés des dislocations.

II. 5. 1. Vecteur de Burgers.

Le vecteur de Burgers se définit comme étant le vecteur nécessaire à boucler un circuit initialement fermé dans le cristal parfait et qui se trouve ouvert lorsqu'il enlace la ligne de dislocation. Ce vecteur n'est pas quelconque dans un cristal mais représente une translation du réseau. Par exemple dans l'aluminium qui est cubique à faces centrées, le vecteur de Burgers traditionnellement rencontré est $b = a/2 [110]$, de norme $|b| = 0.29 \text{ nm}$. En termes plus mathématiques, il s'agit de l'intégrale du déplacement sur un circuit fermé enlaçant la ligne de dislocation.

Physiquement, le vecteur de Burgers représente l'amplitude de la déformation transportée par une dislocation. Comme les dislocations sont des objets flexibles, deux dislocations peuvent interagir pour former une troisième dislocation, si et seulement si, la quantité de déformation est conservée : on parle de jonction attractive. Il s'ensuit qu'à un nœud entre plusieurs dislocations, la somme des vecteurs de Burgers est nulle (analogie avec la loi de Kirchhoff).

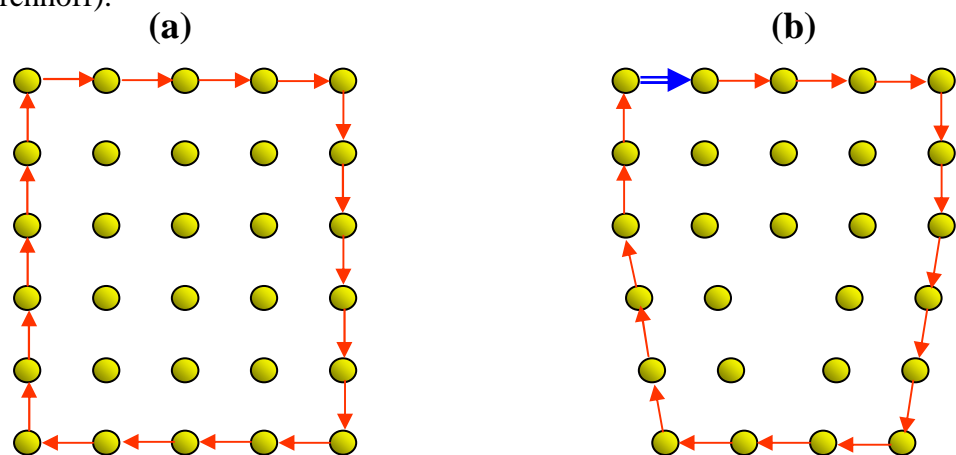


FIG.2.6 : Construction du vecteur de Burgers d'une dislocation coin. (a) cristal parfait, (b) dislocation coin

II. 5. 2. Champ de contrainte élastique.

Comme une dislocation isolée est une singularité élastique, elle développe un champ de contraintes à longue distance. Autour d'une dislocation, les liaisons entre les

atomes sont perturbées. Typiquement pour une dislocation coin, et au dessus de celle-ci, la couche supérieure se trouve en tension tandis qu'en dessous la couche est en compression.

En assimilant le réseau cristallin à un milieu continu élastique, le champ de contraintes autour de la dislocation peut être déterminé.

II. 5. 3. Mouvement des dislocations

Il existe deux types de mouvement :

- le glissement, correspondant au mouvement de la dislocation dans le plan défini par son vecteur de Burgers et la direction de sa ligne
- la montée correspondant au mouvement en dehors du plan de glissement.

a- Le glissement

Ce mouvement est dit « conservatif » car il ne nécessite pas de transport de matière. Il s'effectue de proche en proche par la rupture et le recollement des liaisons atomiques à la manière dont on ferait glisser une double fermeture éclair. Ce type de mouvement est particulièrement efficace pour propager la déformation, et se produit généralement sans autre apport énergétique qu'une faible contrainte extérieure. De façon imagée, on s'imagine très bien qu'il est plus facile de traîner un tapis sur le sol en faisant propager une série de petites bosses plutôt que de tirer l'ensemble du tapis (FIG.2.7).

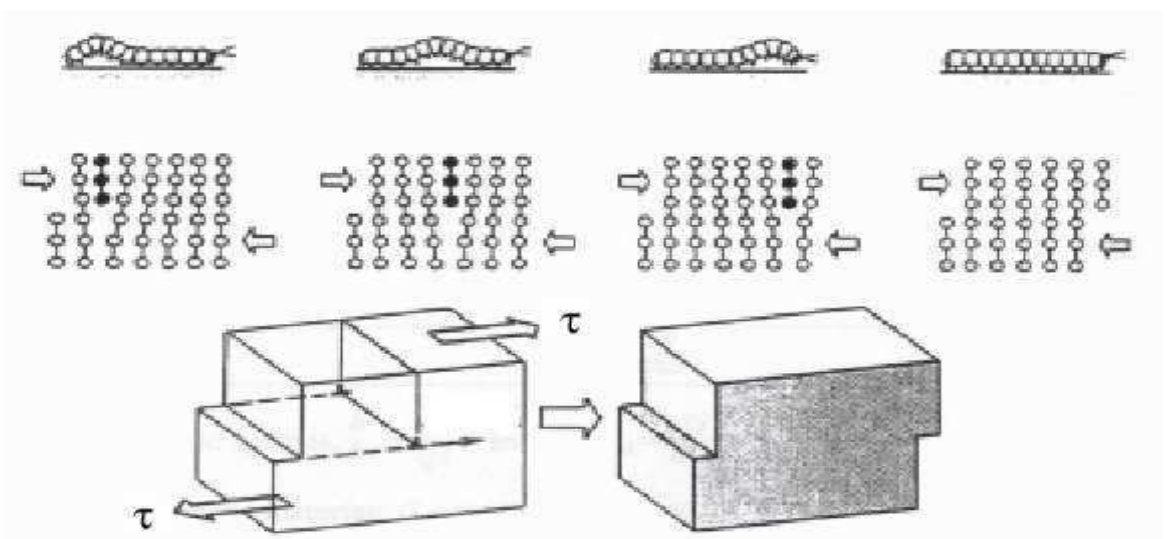


FIG.2.7 : Représentation de l'analogie entre le déplacement d'une chenille et le déplacement d'une dislocation

b- La montée

Pour déplacer une dislocation en dehors de son plan de glissement, il est nécessaire de déplacer des atomes sur de longues distances : le processus est non conservatif et a lieu grâce à la diffusion des lacunes ou d'atomes interstitiels dans le matériau vers le cœur de la dislocation. Comme la quantité des lacunes/interstitiels et leur diffusion est un processus thermiquement actif, la montée apparaît généralement à haute température (FIG.2.8).

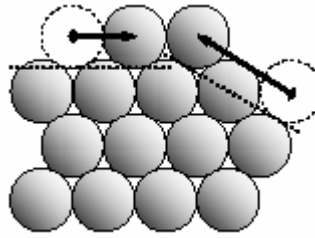


FIG.2.8 : Déplacements d'atomes selon un plan atomique dense (flèche de gauche) et selon un plan peu dense (flèche de droite). Les plans sont matérialisés par les lignes pointillées

Chapitre III

PRESENTATION DU PROBLEME ET CONDITIONS AUX LIMITES.

PRESENTATION DU PROBLEME ET CONDITIONS AUX LIMITES

Introduction.

Au cours de l'épitaxie de deux matériaux, si les deux paramètres de maille sont différents, une interface composée d'un réseau périodique de dislocations coin va apparaître pour relaxer les contraintes de désaccord paramétrique « **misfit dislocations** ». Le « misfit » est bien connu dans le domaine de l'épitaxie.

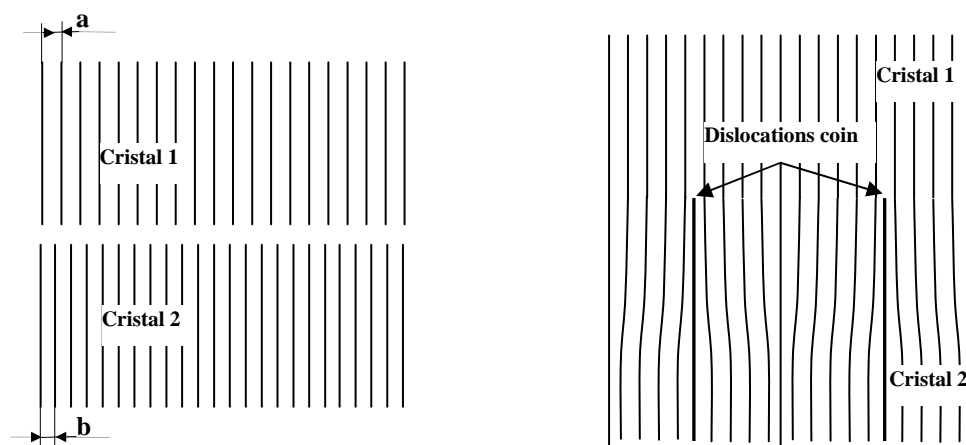


FIG.3.1: Une des désorientations cristallines possibles lors du collage et les réseaux de dislocations qu'engendre le raccordement cristallin.

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

Les dislocations formées, sont confinées et périodiques dans le plan de l'interface de raccordement.

III. 1. Géométrie du problème.

La Figure 3.2, montre en détail, la géométrie du problème pour un réseau unidirectionnel de dislocations coins, qui se développent périodiquement dans le plan d'une interface séparant une couche monocristalline mince, d'épaisseur h^+ , et une couche monocristalline d'épaisseur h^- . Les deux milieux $+$ ($x_2 > 0$) et $-$ ($x_2 < 0$) sont élastiquement anisotropes et caractérisés respectivement par les constantes C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- . Cet arrangement périodique de défauts linéaires est parallèle à l'axe Ox_3 d'un repère cartésien $Ox_1x_2x_3$ convenablement choisi, tel que Ox_2 est la normale commune aux deux surfaces

libres ainsi qu'à l'interface. La période des dislocations interfaciales est Λ et le vecteur de burgers est orienté selon Ox_1 .

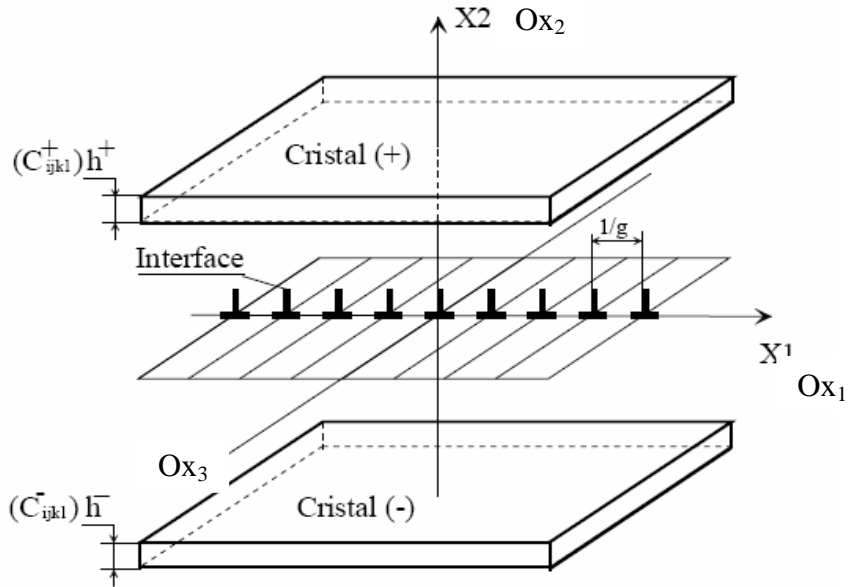


FIG.3.2 : Bilame mince +/- avec un réseau unidirectionnel de dislocations à l'interface, C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- les constantes élastiques des deux milieux, h^+ et h^- sont les épaisseurs des deux milieux.

III. 2. Conditions en déplacements.

Nous admettons ici que l'interface est plane avec une seule famille de dislocations intrinsèques réparties périodiquement et que le champ des déplacements est périodique (période Λ). A partir d'un état non déformé obtenu en coupant les liaisons atomiques le long de l'interface, on peut obtenir l'état final en raccordant les plans réticulaires de façon que U_k^+ (cristal supérieur) et U_k^- (cristal inférieure) soient périodiques le long de Ox_3 et nuls à mi-chemin entre deux coeurs de dislocations. Lorsque la période tend vers l'infini, les conditions aux limites au voisinage d'une dislocation intrinsèque tendent vers celles d'une dislocation de translation placée sur l'hétéro-interface [49].

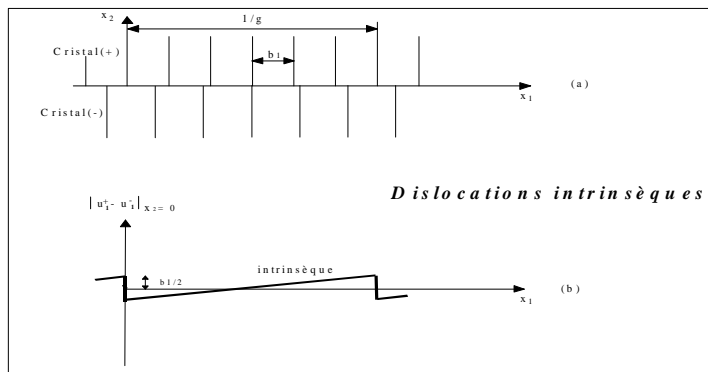


FIG .3.3 : (a) Représentation schématique du déplacement associé à un réseau de dislocation
(b) Courbe en dent scie ou en escalier relative aux dislocations intrinsèques.

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

$$U_k^+ - U_k^- = \left(\frac{b_k}{\Lambda} \right) x_1 - \frac{b_k}{2} \quad (3.1)$$

tel que U_k^+ et U_k^- correspondent respectivement aux champs de déplacements du cristal supérieur ($x_2 > 0$) et inférieur ($x_2 < 0$). Comme le déplacement relatif $\Delta U_k(x_1)$ est périodique le long de Ox_3 , il peut être développé en séries de Fourier:

$$\Delta U_k(x_1) = \sum_{-\infty}^{+\infty} C_k^{(n)} e^{\frac{2in\pi x_1}{\Lambda}} dx_1 \quad (3.2)$$

Avec :

$$C_k^{(n)} = \frac{1}{\Lambda} \int_{x_0}^{x_0+\Delta} \Delta U_k(x_1) e^{\frac{2in\pi x_1}{\Lambda}} dx_1 \quad (3.3)$$

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

$$\Delta U_k(x_1) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{ib_k}{2\pi n} \right) e^{\frac{2in\pi x_1}{\Lambda}} \quad (3.4)$$

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

$$\Delta U_k(x_1) = \sum_{n=1}^{+\infty} \left(\frac{-b_k}{\pi n} \right) \sin\left(\frac{2n\pi x_1}{\Lambda}\right) \quad (3.5)$$

III. 3. Conditions en contraintes.

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

$$\sigma_{2k}^+(x_2 = 0) = \sigma_{2k}^-(x_2 = 0) \quad (3.6)$$

b/ Les surfaces libres du bicristal mince sont en équilibre, ce qui nous permet de considérer que les contraintes normales sont nulles pour les épaisseurs h^+ et h^- .

$$\begin{aligned} \left[\sigma_{2k}^+ \right]_{x_2=h^+} &= 0 \\ \left[\sigma_{2k}^- \right]_{x_2=-h^-} &= 0 \end{aligned} \quad (3.7)$$

Chapitre IV

FORMULATION MATHEMATIQUE ET SOLUTION EN ELASTICITE ANISOTROPE.

SOLUTION EN ELASTICITE ANISOTROPE

Introduction.

En adoptant le formalisme d'Eshelby et col [23] et Stroh [3], Tucker [2] est parvenu 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 [4] corrigent certaines erreurs typographiques de la formule de Tucker [5] et vérifient la validité de leurs expressions en simulant le contraste d'une telle dislocation.

Pour résoudre le problème d'une dislocation rectiligne à l'interface de deux milieux anisotropes de nature différente, Bonnet et Dupeux [6], et partant d'une analyse différente de celle de Tucker [5], arrivent à obtenir une expression analytique équivalente à celle de Humble et Forwood [7].

L'analyse du problème devient plus difficile lorsque les deux surfaces libres de la lame mince sont prises en considération.

Dans ce chapitre, nous allons développer en utilisant la théorie élastique anisotrope tout en se basant sur une analyse en séries de Fourier, les champs de déformations élastiques (déplacements et contraintes) pour un réseau unidirectionnel de dislocations parallèles aux surfaces libres d'un bilame mince.

IV. 1. Champ des déplacements.

Considérons deux milieux (+) et (-) supposés obéir à la loi de Hooke. Ces deux milieux sont séparés par une interface plane comportant un réseau de dislocations intrinsèques

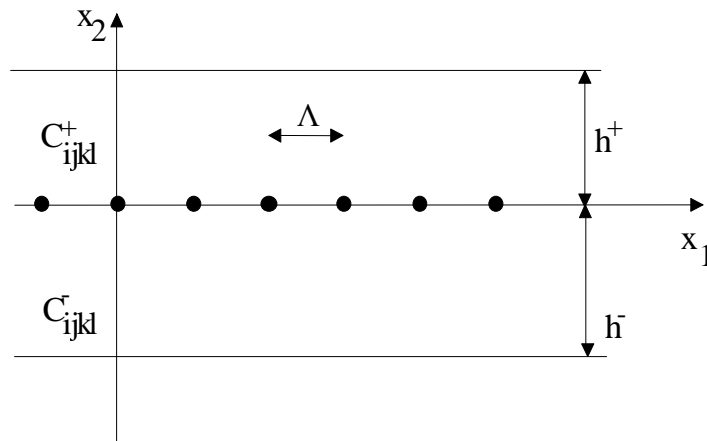


FIG. 4.1 : bilame mince +/-, avec un réseau unidirectionnel de dislocations à l'interface, Λ est la période. C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- sont les constantes élastiques des deux milieux, h^+ et h^- sont les épaisseurs des deux milieux.

La Figure 4.1 montre la géométrie du problème. Le champ de déformation est exprimé sous la forme suivante :

$$\varepsilon_{ij}(x_1, x_2) = \sum_G \varepsilon_{ij}^{(G)}(x_2) \cdot \exp\left(\frac{2 \cdot i \cdot \pi \cdot n}{\Lambda} \cdot x_1\right) \quad (4.1)$$

pour $|x_2|$ tendant vers l'infini, tous les coefficients tendent vers zéro (préservation des unités structurales), sauf $\varepsilon_{ij}^{(G=0)}(x_2)$ qui est supposé constant.

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

$$U_k = U_k^0 + V_{k1}^0 \cdot x_1 + V_{k2}^0 \cdot x_2 + \sum_{n \neq 0} U_k^{(n)}(x_2) \cdot \exp(2 \cdot i \pi \cdot g \cdot n \cdot x_1) \quad k=1,2,3 \quad (4.2)$$

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 y 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:

$$U_k = \sum_{n \neq 0} U_k^{(n)}(x_2) \cdot \exp(2 \cdot i \pi \cdot g \cdot n \cdot x_1) \quad k=1, 2, 3 \quad (4.3)$$

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

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl} \quad (4.4)$$

$$\text{Où} \quad \varepsilon_{kl} = \frac{1}{2} (U_{k,l} + U_{l,k}) \quad (i, j, k, l = 1, 2, 3) \quad (4.5)$$

En substituant (4.5) à (4.4), nous obtenons :

$$\sigma_{ij} = 1/2 (C_{ijkl} \cdot U_{k,l}) + 1/2 (C_{ijkl} \cdot U_{l,k}) \quad (4.6)$$

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

$$\sigma_{ij} = 1/2 (C_{ijkl} \cdot U_{k,l}) + 1/2 (C_{ijlk} \cdot U_{l,k}) \quad (4.7)$$

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

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \cdot U_{k,l} \quad (4.8)$$

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

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (4.9)$$

$$\Rightarrow C_{ijkl} \frac{\partial^2 U_k}{\partial x_j \partial x_l} = 0 \quad (4.10)$$

En remplaçant l'équation (4.3) dans (4.10), on obtient trois équations différentielles qui peuvent s'écrire de la façon suivante:

$$C_{j1k1}(-4\pi^2 g^2 n^2) U_k^{(n)} + (C_{j1k2} + C_{j2k1})(2i\pi n g) U_{k,2}^{(n)} + C_{j2k2} U_{k,22}^{(n)} = 0 \quad (4.11)$$

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

$$U_k^{(n)}(x_2) = \lambda'_{\alpha k} \cdot \exp(2.i. \pi.g.n.p_{\alpha}.x_2) \quad (4.12)$$

Où les $\lambda'_{\alpha k}$ et p_{α} sont des constantes complexes à déterminer à partir du système de 3 équations linéaires suivant obtenu en remplaçant par (4.12) dans (4.11):

$$[C_{j1k1} + (C_{j1k2} + C_{j2k1})p_{\alpha} + C_{j2k2}.p_{\alpha}^2] \cdot \lambda'_{\alpha k} = 0 \quad (4.13)$$

Le système s'écrit sous sa forme compacte :

$$A_{jk} \lambda'_{\alpha k} = 0 \quad (4.14)$$

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 (4.13) 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 [23] dans le cas d'une dislocation rectiligne placée dans un milieu homogène en élasticité anisotrope. Il admet pour chaque p_{α} des solutions $\lambda'_{\alpha k}$ non triviales si le déterminant de A_{jk} est égal à zéro :

$$\det(A_{jk}) = \left| C_{j1k1} + (C_{j1k2} + C_{j2k1}) \cdot p_{\alpha} + C_{j2k2} \cdot p_{\alpha}^2 \right| = 0 \quad (4.15)$$

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

$$K_0 + K_1.p + K_2.p^2 + K_3.p^3 + K_4.p^4 + K_5.p^5 + K_6.p^6 = 0 \quad (4.16)$$

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 :

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

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

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

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

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

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

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

Donc pour résoudre le problème il faut calculer les six racines du polynôme (4.16). Ces racines sont d'après Eshelby [23] complexes puisque la densité d'énergie doit être toujours positive. Ainsi les coefficients du polynôme sont réels et les racines complexes considérées ici sont :

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

Dans la suite du problème seules les racines à partie imaginaire positive sont choisies. Ces racines s'écrivent: $p_\alpha^{(n)} = p_\alpha^r(n) \pm ip_\alpha^i(n)$ (4.17)

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

Pour chacune des racines p_α données en (4.17) on résout le système en $\lambda'_{\alpha k}$ suivant:

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} \\ F_{21} & F_{22} & F_{23} \\ F_{31} & F_{32} & F_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda'_{\alpha 1} \\ \lambda'_{\alpha 2} \\ \lambda'_{\alpha 3} \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (4.18)$$

Avec :

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

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

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

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

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

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

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

$$\lambda'_{\alpha k} = \lambda'_{\alpha k} \pm i\lambda'_{\alpha k} \quad (4.19)$$

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

En posant arbitrairement $\lambda'_{\alpha 3} = 1$ on peut, à partir de (4.18), calculer :

$$\lambda'_{\alpha 1} = \frac{F_{12}F_{23} - F_{13}F_{22}}{F_{11}F_{22} - F_{12}F_{21}} \quad (4.20)$$

$$\lambda'_{\alpha 2} = \frac{-(F_{11}F_{23} - F_{13}F_{21})}{F_{11}F_{22} - F_{12}F_{21}} \quad (4.21)$$

$$\lambda'_{\alpha 3} = 1 \quad (4.22)$$

La troisième équation du système (4.18) est toujours vérifiée car en remplaçant $\lambda'_{\alpha 1}$ et $\lambda'_{\alpha 2}$ par leurs valeurs obtenus en (4.21) et (4.22), 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:

$$\lambda_{\alpha 1} = \frac{\lambda'_{\alpha 1}}{(\lambda'^2_{\alpha 1} + \lambda'^2_{\alpha 2} + \lambda'^2_{\alpha 3})^{1/2}} \quad (4.23)$$

$$\lambda_{\alpha 2} = \frac{\lambda'_{\alpha 2}}{(\lambda'^2_{\alpha 1} + \lambda'^2_{\alpha 2} + \lambda'^2_{\alpha 3})^{1/2}} \quad (4.24)$$

$$\lambda_{\alpha 3} = \frac{\lambda'_{\alpha 3}}{(\lambda'^2_{\alpha 1} + \lambda'^2_{\alpha 2} + \lambda'^2_{\alpha 3})^{1/2}} \quad (4.25)$$

$$\text{tel que : } \lambda_{\alpha_1}^2 + \lambda_{\alpha_2}^2 + \lambda_{\alpha_3}^2 = 1 \quad (4.26)$$

Les équations (4.11) ont ainsi comme solution générale des combinaisons linéaires des solutions trouvées pour chaque α autrement dit:

$$U_k^{(n)}(x_2) = \sum_{\alpha=1}^6 C_{\alpha}^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k} \cdot \exp(2.i.\pi.g.n.p_{\alpha}.x_2) \quad (4.27)$$

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:

$$\begin{cases} X_{\alpha}^{(n)} / 2.i.\pi.n \\ Y_{\alpha}^{(n)} / 2.i.\pi.n \end{cases} \quad (\alpha = 1,2,3) \quad (4.28)$$

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:

$$U_k^{(n)}(x_2) = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{X_{\alpha}^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k}}{2.i.\pi.n} \cdot \exp(2.i.\pi.g.n.p_{\alpha}.x_2) + \frac{Y_{\alpha}^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}}{2.i.\pi.n} \cdot \exp(2.i.\pi.g.n.\bar{p}_{\alpha}.x_2) \quad (4.29)$$

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 (4.1) avec (4.29) permet d'écrire le champ des déplacements sous la forme suivante :

$$U_k = \sum_{n \neq 0} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{X_{\alpha}^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k}}{2.i.\pi.n} \cdot \exp[(2.i.\pi.g.n.(x_1 + p_{\alpha}.x_2))] + \frac{Y_{\alpha}^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}}{2.i.\pi.n} \cdot \exp[(2.i.\pi.g.n.(x_1 + \bar{p}_{\alpha}.x_2)] \quad (4.30)$$

IV. 2 Expression finale du champ des déplacements.

Pour plus de performance sur le plan numérique, il est convenable d'écrire l'équation (4.30) sous une forme où la sommation ne tient compte que des valeurs positives de l'entier n. On peut l'écrire sous la forme :

$$U_k = \sum_{n \neq 0} \sum_{\alpha=1}^3 C_{\alpha k}^{(n)} \cdot \exp[2 \cdot i \cdot \pi \cdot g \cdot n(x_1 + r_{\alpha} \cdot x_2)] \quad (4.31)$$

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

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

Donc la double somme (4.31) devient:

$$2 \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \text{Re}(C_{\alpha k}^n) \cdot \cos[2 \cdot \pi \cdot g \cdot n(x_1 + r_{\alpha} \cdot x_2)] + \text{Re}(i \cdot C_{\alpha k}^n) \cdot \sin[2 \cdot \pi \cdot g \cdot n(x_1 + r_{\alpha} \cdot x_2)] \quad (4.32)$$

En posant $\omega = 2 \cdot \pi \cdot g$, l'expression finale de U_k devient:

$$U_k = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi \cdot n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 [\{ \cos[n \cdot \omega(x_1 + r_{\alpha} \cdot x_2)] \times \text{Re}[(-i \cdot X_{\alpha}^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k}) \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_{\alpha} \cdot x_2) + (-i \cdot Y_{\alpha}^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}) \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_{\alpha} \cdot x_2)] \} + \{ \sin[n \cdot \omega(x_1 + r_{\alpha} \cdot x_2)] \times \text{Re}[X_{\alpha}^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k}) \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_{\alpha} \cdot x_2) + (Y_{\alpha}^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}) \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_{\alpha} \cdot x_2)] \}] \quad (4.33)$$

$k = 1, 2, 3$

IV. 3. Champ des contraintes.

Le champ des contraintes est obtenu à partir de l'équation (4.33) en utilisant la loi de Hooke qui s'écrit :

$$\sigma_{kl} = C_{kl ij} \cdot \epsilon_{ij}$$

$$\sigma_{kl} = C_{kl ij} \cdot U_{i,j} = C_{kli1} \cdot U_{i,1} + C_{kli2} \cdot U_{i,2} + C_{kli3} \cdot U_{i,3} \quad (4.34)$$

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

$$\sigma_{kl} = C_{kli1} \cdot U_{i,1} + C_{kli2} \cdot U_{i,2} \quad (4.34)$$

d'où enfin :

$$\sigma_{kl} = C_{kl11} \cdot U_{1,1} + C_{kl21} \cdot U_{2,1} + C_{kl12} \cdot U_{1,2} + C_{kl22} \cdot U_{2,2} \quad (4.36)$$

Avec

$$\begin{aligned}
U_1 = & \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi \cdot n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 [\{ \cos[n \cdot \omega(x_1 + r_\alpha \cdot x_2)] \\
& \times \text{Re}[-i \cdot X_\alpha^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha 1}] \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) + (-i \cdot Y_\alpha^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha 1}) \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) \}] \\
& + \{ \sin[n \cdot \omega(x_1 + r_\alpha \cdot x_2)] \times \text{Re}[X_\alpha^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha 1}] \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) + (Y_\alpha^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha 1}) \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) \}] \}
\end{aligned} \tag{4.37}$$

$$\begin{aligned}
U_2 = & \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi \cdot n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 [\{ \cos[n \cdot \omega(x_1 + r_\alpha \cdot x_2)] \\
& \times \text{Re}[-i \cdot X_\alpha^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha 2}] \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) + (-i \cdot Y_\alpha^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha 2}) \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) \}] \\
& + \{ \sin[n \cdot \omega(x_1 + r_\alpha \cdot x_2)] \times \text{Re}[X_\alpha^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha 2}] \cdot \exp(-n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) + (Y_\alpha^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha 2}) \cdot \exp(n \cdot \omega \cdot s_\alpha \cdot x_2) \}] \}
\end{aligned} \tag{4.38}$$

En posant

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

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

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

On aura:

$$U_1 = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \cdot \sum_{\alpha=1}^3 \{ \cos(A) \cdot \text{Re}[-i \lambda_{\alpha 1} \cdot C + (-i \bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D)] + \sin(A) \cdot \text{Re}[(\lambda_{\alpha 1} \cdot C) + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D)] \} \tag{4.39}$$

Et

$$U_2 = \sum_{n>0} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \cdot \sum_{\alpha=1}^3 \{ \cos(A) \cdot \text{Re}[-i \lambda_{\alpha 2} \cdot C + (-i \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D)] + \sin(A) \cdot \text{Re}[(\lambda_{\alpha 2} \cdot C) + (\bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D)] \} \tag{4.40}$$

D'ou

$$\begin{aligned}
C_{k111} \cdot U_{1,1} = & \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \{ \sin(A) \cdot \text{Re}[(i \lambda_{\alpha 1} \cdot C) \cdot C_{k111} + (i \bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) C_{k111}] \\
& + \cos(A) \cdot \text{Re}[(\lambda_{\alpha 1} \cdot C) \cdot C_{k111} + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) C_{k111}] \}
\end{aligned} \tag{4.41}$$

Et

$$\begin{aligned}
C_{k121} \cdot U_{2,1} = & \left(\frac{\omega}{\pi} \right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \{ \sin(A) \cdot \text{Re}[(i \lambda_{\alpha 2} \cdot C) \cdot C_{k121} + (i \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) C_{k121}] \\
& + \cos(A) \cdot \text{Re}[(\lambda_{\alpha 2} \cdot C) \cdot C_{k121} + (\bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) C_{k121}] \}
\end{aligned} \tag{4.42}$$

En sommant les équations (4.37) et (4.38), on obtient :

$$\left(\frac{\omega}{\pi}\right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left[(\lambda_{\alpha 1} \cdot C + \bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) \cdot C_{kl11} + (\lambda_{\alpha 2} \cdot C + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) \cdot C_{kl21} \right] \cdot (\cos(A) + i \sin(A)) \quad (4.43)$$

De même

$$C_{kl12} \cdot U_{1,2} = \frac{\omega}{\pi} \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left\{ (\lambda_{\alpha 1} \cdot C + \bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot r_{\alpha} \cdot C_{kl12} \right. \\ \left. + (\lambda_{\alpha 1} \cdot C - \bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot D) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot s_{\alpha} \cdot C_{kl12} \right\} \quad (4.44)$$

Et

$$C_{kl22} \cdot U_{2,2} = \frac{\omega}{\pi} \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left\{ (\lambda_{\alpha 2} \cdot C + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot r_{\alpha} \cdot C_{kl22} \right. \\ \left. + (\lambda_{\alpha 2} \cdot C - \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot D) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot s_{\alpha} \cdot C_{kl22} \right\} \quad (4.45)$$

$$\Rightarrow C_{kl12} \cdot U_{1,2} + C_{kl22} \cdot U_{2,2} = \left(\frac{\omega}{\pi}\right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left\{ (\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C \cdot r_{\alpha} + \right. \\ \left. (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot D \cdot r_{\alpha} + (\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C \cdot s_{\alpha} \right. \\ \left. - (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot D \cdot s_{\alpha} \right\} \quad (4.46)$$

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

On aura:

$$C_{kl12} \cdot U_{1,2} + C_{kl22} \cdot U_{2,2} = \left(\frac{\omega}{\pi}\right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left\{ (\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C \cdot p_{\alpha} \right. \\ \left. + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot D \cdot p_{\alpha} \right\} \quad (4.47)$$

Donc

$$\sigma_{kl} = \left(\frac{\omega}{\pi}\right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \operatorname{Re} \left\{ (\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl11} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl21}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C + \right. \\ \left. (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl11} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl21}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot D + (\lambda_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \lambda_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C \cdot p_{\alpha} \right. \\ \left. + (\bar{\lambda}_{\alpha 1} \cdot C_{kl12} + \bar{\lambda}_{\alpha 2} \cdot C_{kl22}) (\cos(A) + i \sin(A)) \cdot C \cdot \bar{p}_{\alpha} \right\} \quad (4.48)$$

$$\sigma_{kl} = \left(\frac{\omega}{\pi}\right) \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 \cos(A) \cdot \operatorname{Re} \left\{ [\lambda_{\alpha 1} (C_{kl11} + p_{\alpha} C_{kl12}) + \lambda_{\alpha 2} (C_{kl21} + p_{\alpha} C_{kl22})] \cdot C + \right. \\ \left. [\bar{\lambda}_{\alpha 1} (C_{kl11} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl12}) + \bar{\lambda}_{\alpha 2} (C_{kl21} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl22})] \cdot D \right\} + \\ \sin(A) \cdot \operatorname{Re} \left\{ [\lambda_{\alpha 1} (C_{kl11} + p_{\alpha} C_{kl12}) + \lambda_{\alpha 2} (C_{kl21} + p_{\alpha} C_{kl22})] \cdot C + \right. \\ \left. [\bar{\lambda}_{\alpha 1} (C_{kl11} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl12}) + \bar{\lambda}_{\alpha 2} (C_{kl21} + \bar{p}_{\alpha} C_{kl22})] \cdot D \right\} \quad (4.49)$$

On obtient finalement l'expression suivante:

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij} = & 2. g \sum_{n>0} \sum_{\alpha=1}^3 [\{\cos[n. \omega (x_1 + r_\alpha x_2)]\} + \\
& \times \text{Re}[X_\alpha^{(n)}. L_{\alpha ij}. \exp(-n. \omega s_\alpha. x_2) + Y_\alpha^{(n)}. \bar{L}_{\alpha ij}. \exp(n. \omega s_\alpha. x_2)] + \{\sin[n. \omega(x_1 + r_\alpha x_2)]\} + \\
& \times \text{Re}[i. X_\alpha^{(n)}. L_{\alpha ij}. \exp(-n. \omega s_\alpha. x_2) + i. Y_\alpha^{(n)}. \bar{L}_{\alpha ij}. \exp(n. \omega s_\alpha. x_2)] \quad (4.50) \\
\text{avec } & L_{\alpha kl} = \lambda_{\alpha j} [C_{klj1} + p_\alpha C_{klj2}] \\
& i, j = 1, 2, 3 \quad , l = 1, 2
\end{aligned}$$

IV. 4. Conditions aux limites.

Afin de pouvoir résoudre le problème lié au modèle choisi, nous appliquons des conditions aux limites appropriées :

IV. 4. 1. Conditions en déplacement.

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

$$[U_k^+ - U_k^-]_{x_2=0} = -\frac{b_k}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} (1/n). \sin(n. \omega. x_1) \quad (4.51)$$

IV. 4. 2. Conditions en contraintes.

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

$$[\sigma_{2k}^+]_{x_2=0} = [\sigma_{2k}^-]_{x_2=0} \quad (4.52)$$

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

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

$$[\sigma_{2k}^+]_{x_2=h^+} = 0 \quad (4.53)$$

$$[\sigma_{2k}^-]_{x_2=-h^-} = 0 \quad (4.54)$$

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

$$\left[\frac{\partial \sigma_{2k}^+}{\partial x_1} \right]_{x_2=h^+} = 0 \quad (4.55)$$

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

$$\left[\frac{\partial \sigma_{2k}^-}{\partial x_1} \right]_{x_2=-h^-} = 0 \quad (4.56)$$

IV. 5. Système 24 x 24 et matrice 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 (4.33) et des contraintes (4.50) avec les conditions aux limites (4.51) à (4.56).

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[-\left(X_\alpha^+ \cdot \lambda_{\alpha k}^+ + Y_\alpha^+ \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}^+ \right) + \left(X_\alpha^- \cdot \lambda_{\alpha k}^- + Y_\alpha^- \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}^- \right) \right] = b_k \quad (4.57)$$

$$\operatorname{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_\alpha^+ \cdot \lambda_{\alpha k}^+ + Y_\alpha^+ \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}^+ \right) - \left(X_\alpha^- \cdot \lambda_{\alpha k}^- + Y_\alpha^- \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}^- \right) \right] = 0 \quad (4.58)$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_\alpha^+ \cdot L_{\alpha 2k}^+ + Y_\alpha^+ \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^+ \right) - \left(X_\alpha^- \cdot L_{\alpha 2k}^- + Y_\alpha^- \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^- \right) \right] = 0 \quad (4.59)$$

$$\operatorname{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(X_\alpha^+ \cdot L_{\alpha 2k}^+ + Y_\alpha^+ \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^+ \right) - \left(X_\alpha^- \cdot L_{\alpha 2k}^- + Y_\alpha^- \cdot \bar{L}_{\alpha 2k}^- \right) \right] = 0 \quad (4.60)$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 (\text{A inter.AC}) + \operatorname{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 (\text{A inter.AS}) = 0 \quad (4.61)$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 -(\text{A inter.AS}) + \operatorname{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 (\text{A inter.AC}) = 0 \quad (4.62)$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 (\text{B inter.BC}) + \operatorname{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 (\text{B inter.BS}) = 0 \quad (4.63)$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 -(\text{B inter.BS}) + \operatorname{Re} \cdot i \sum_{\alpha=1}^3 (\text{B inter.BC}) = 0 \quad (4.64)$$

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

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

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

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

$\text{BC}(\alpha) = \cos(n \cdot \omega \cdot r_\alpha^- \cdot h^-)$

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

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

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

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

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

Pour faciliter les calculs numériques, il est plus commode d'utiliser des grandeurs réelles.

Pour cela posons:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

On obtient ainsi le système suivant:

$$\sum_{\alpha=1}^3 -A_{\alpha}^{+}\lambda_{\alpha k}^{r+} + B_{\alpha}^{+}\lambda_{\alpha k}^{i+} - C_{\alpha}^{+}\lambda_{\alpha k}^{r+} - D_{\alpha}^{+}\lambda_{\alpha k}^{i+} + A_{\alpha}^{-}\lambda_{\alpha k}^{r-} - B_{\alpha}^{-}\lambda_{\alpha k}^{i-} + C_{\alpha}^{-}\lambda_{\alpha k}^{r-} + D_{\alpha}^{-}\lambda_{\alpha k}^{i-} = b_k \quad (4.65)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 -A_{\alpha}^{+}\lambda_{\alpha k}^{i+} - B_{\alpha}^{+}\lambda_{\alpha k}^{r+} + C_{\alpha}^{+}\lambda_{\alpha k}^{i+} - D_{\alpha}^{+}\lambda_{\alpha k}^{r+} + A_{\alpha}^{-}\lambda_{\alpha k}^{i-} + B_{\alpha}^{-}\lambda_{\alpha k}^{r-} - C_{\alpha}^{-}\lambda_{\alpha k}^{i-} + D_{\alpha}^{-}\lambda_{\alpha k}^{r-} = 0 \quad (4.66)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 A_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{r+} - B_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{i+} + C_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{r+} + D_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{i+} - A_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{r-} + B_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{i-} - C_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{r-} - D_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{i-} = 0 \quad (4.67)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 -A_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{i+} - B_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{r+} + C_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{i+} - D_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{r+} + A_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{i-} + B_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{r-} - C_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{i-} + D_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{r-} = 0 \quad (4.68)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 \left\{ [(A_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{r+} - B_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{i+}).AC(\alpha) - (A_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{i+} + B_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{r+}).AS(\alpha)]EXPON1(\alpha) \right. \\ \left. + [(C_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{r+} + D_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{i+}).AC(\alpha) + (C_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{i+} - D_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{r+}).AS(\alpha)]EXPON2(\alpha) \right\} = 0 \quad (4.69)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 \left\{ [(-A_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{r+} + B_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{i+}).AS(\alpha) - (A_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{i+} + B_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{r+}).AC(\alpha)]EXPON1(\alpha) \right. \\ \left. + [-(C_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{r+} + D_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{i+}).AS(\alpha) + (C_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{i+} - D_{\alpha}^{+}L_{\alpha 2k}^{r+}).AC(\alpha)]EXPON2(\alpha) \right\} = 0 \quad (4.70)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 \left\{ [(A_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{r-} - B_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{i-}).BC(\alpha) - (A_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{i-} + B_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{r-}).BS(\alpha)]EXPON3(\alpha) \right. \\ \left. + [(C_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{r-} + D_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{i-}).BC(\alpha) + (C_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{i-} - D_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{r-}).BS(\alpha)]EXPON4(\alpha) \right\} = 0 \quad (4.71)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 \left\{ [(-A_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{r-} + B_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{i-}).BS(\alpha) - (A_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{i-} + B_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{r-}).BC(\alpha)]EXPON3(\alpha) \right. \\ \left. + [-(C_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{r-} + D_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{i-}).BS(\alpha) + (C_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{i-} - D_{\alpha}^{-}L_{\alpha 2k}^{r-}).BC(\alpha)]EXPON4(\alpha) \right\} = 0 \quad (4.72)$$

En posant

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

$$Q_{\alpha k} = -[L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AS(\alpha)] \cdot EXPON1(\alpha)$$

$$R_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AS(\alpha)] \cdot EXPON2(\alpha)$$

$$S_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AS(\alpha)] \cdot EXPON2(\alpha)$$

$$E_{\alpha k} = -[L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AC(\alpha)] \cdot EXPON1(\alpha)$$

$$F_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AC(\alpha)] \cdot EXPON1(\alpha)$$

$$G_{\alpha k} = [-L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AS(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AC(\alpha)] \cdot EXPON2(\alpha)$$

$$H_{\alpha k} = -[L_{\alpha 2k}^{i+} \cdot AS(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{r+} \cdot AC(\alpha)] \cdot EXPON2(\alpha)$$

$$I_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{r-} \cdot BC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i-} \cdot BS(\alpha)] \cdot EXPON3(\alpha)$$

$$K_{\alpha k} = [-L_{\alpha 2k}^{i-} \cdot BC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r-} \cdot BS(\alpha)] \cdot EXPON3(\alpha)$$

$$M_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{r-} \cdot BC(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i-} \cdot BS(\alpha)] \cdot EXPON4(\alpha)$$

$$N_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{i-} \cdot BC(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r-} \cdot BS(\alpha)] \cdot EXPON4(\alpha)$$

$$T_{\alpha k} = [-L_{\alpha 2k}^{r-} \cdot BS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{i-} \cdot BC(\alpha)] \cdot EXPON3(\alpha)$$

$$V_{\alpha k} = [L_{\alpha 2k}^{i-} \cdot BS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r-} \cdot BC(\alpha)] \cdot EXPON3(\alpha)$$

$$W_{\alpha k} = [-L_{\alpha 2k}^{r-} \cdot BS(\alpha) + L_{\alpha 2k}^{i-} \cdot BC(\alpha)] \cdot EXPON4(\alpha)$$

$$Z_{\alpha k} = [-L_{\alpha 2k}^{i-} \cdot BS(\alpha) - L_{\alpha 2k}^{r-} \cdot BC(\alpha)] \cdot EXPON4(\alpha)$$

Chapitre V

APPLICATIONS NUMERIQUES.

APPLICATIONS NUMERIQUES

Nous regroupons, dans ce chapitre, l'ensemble des applications numériques que nous avons effectué pour le cas du réseau parallèle de dislocations de misfit confiné dans un bilame mince : Cu/(001)Fe

Nous présentons dans ce qui suit l'essentiel des étapes de calcul effectuées par le programme que nous avons élaboré, ainsi que la validation de celui-ci, ensuite nous exposons les résultats en déplacements et en contraintes obtenus pour des orientations différentes des dislocations.

V. 1. Etapes de calcul du programme.

Parmi les calculs que notre programme construit permet de faire:

1°/ détermination de la matrice de passage du repère lié au cristal, au repère cartésien de travail pour que Ox_2 soit perpendiculaire aux plans réticulaires qui constituent l'interface commune aux deux cristaux.

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

3°/ calcul des parties réelles et des 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 à partie imaginaire positive, 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.

4°/ l'inversion numérique d'un système de 24 équations à 24 inconnues réelles, obtenu à partir des conditions aux limites, et calcul des constantes inconnues.

5°/ la reinjection 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 réintroduites dans l'expression des déplacements pour calculer:

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

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

c/ le déplacement des unités structurales autour des dislocations dans le plan (x_1, x_2) pour différentes orientations de celle-ci.

A partir de la loi de Hooke et en connaissant le champ des déplacements, le programme permet aussi de calculer:

a/ la distribution des contraintes en fonction de x_2

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

V. 2. Matériaux utilisés.

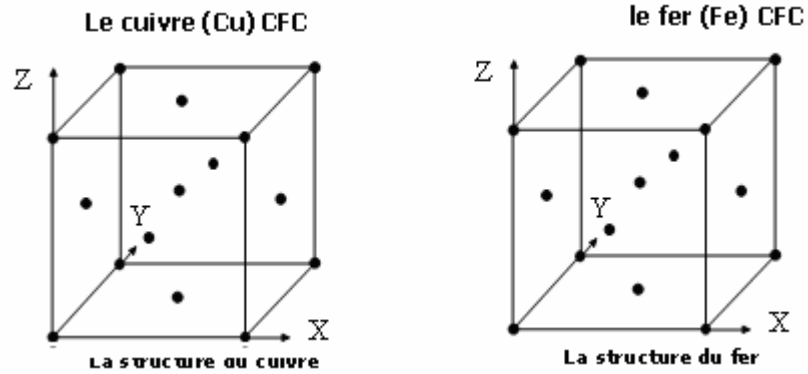


Tableau 5.1 : Données

Désignation	Paramètres Cu	Paramètres Fe
Paramètres de mailles a (nm)	0.361	0.355
Vecteur de Burgers b(nm) du réseau	0.253	
Période du réseau de dislocations Λ (nm)	15.10	
Constantes élastiques anisotropes (Gpa)	$C_{11} = 168.4$	$C_{11} = 232$
	$C_{12} = 121.4$	$C_{12} = 136$
	$C_{44} = 75.4$	$C_{44} = 117$

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

$$b = (a_{Cu} + a_{Fe}) / 2.2^{1/2}$$

$$\Lambda = (a_{Cu} \cdot a_{Fe}) / (a_{Cu} - a_{Fe}) 2^{1/2}$$

V. 3. Calcul d'erreur à l'interface.

Pour examiner la précision des calculs effectués par le programme, nous avons tracé le déplacement relatif interfacial en fonction de x_1 ($\Delta u = f(x_1)$) à partir des résultats donnés par le programme que nous avons superposé à l'expression analytique (3.1) établie au chapitre III, dans le cas d'un bicristal mince Cu/(001)Fe. Pour différentes valeurs du nombre d'harmoniques n ($n=20, 100, 200, 500, 1000$ et 2000), la figure (5.1) présente une linéarité du déplacement relatif interfacial qui devient optimale pour un nombre d'harmoniques élevé. En effet, les courbes deviennent de plus en plus rectilignes et superposables dans le domaine de validité de l'expression analytique qui se situe entre la première dislocation placée à $x_1 = 0$ et la deuxième dislocation placée à $x_1 = 15.10$ nm correspondant à une période. En faisant varier le nombre d'harmoniques n et en s'éloignant de quelques b de chaque dislocation, la convergence des séries de Fourier se fait de façon nettement meilleure.

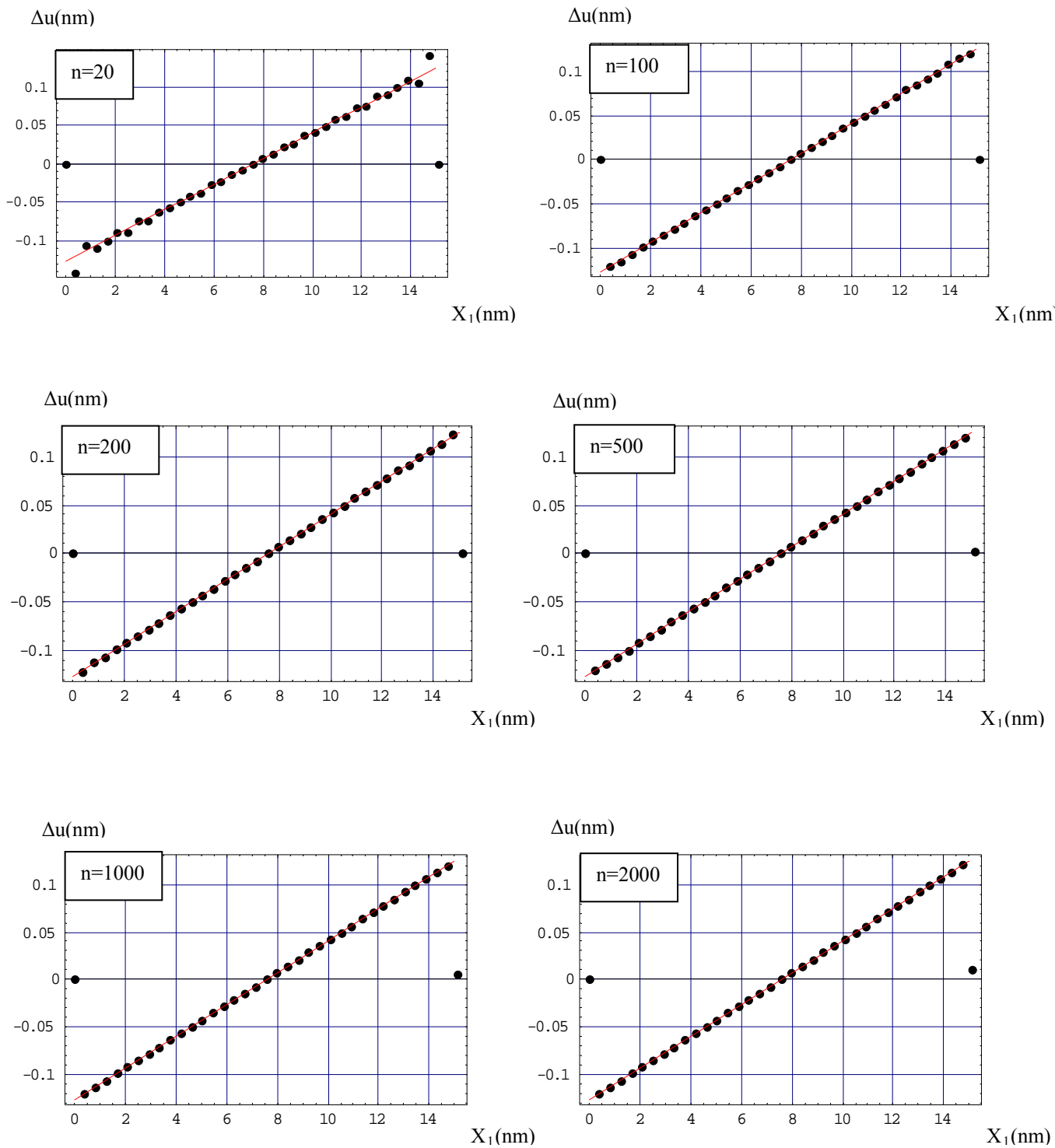


FIG.5.1 : Représentation du déplacement relatif interfacial pour différentes valeurs de n , pour le système Cu / (001) Fe.

Analytique ———
 Evaluée ······

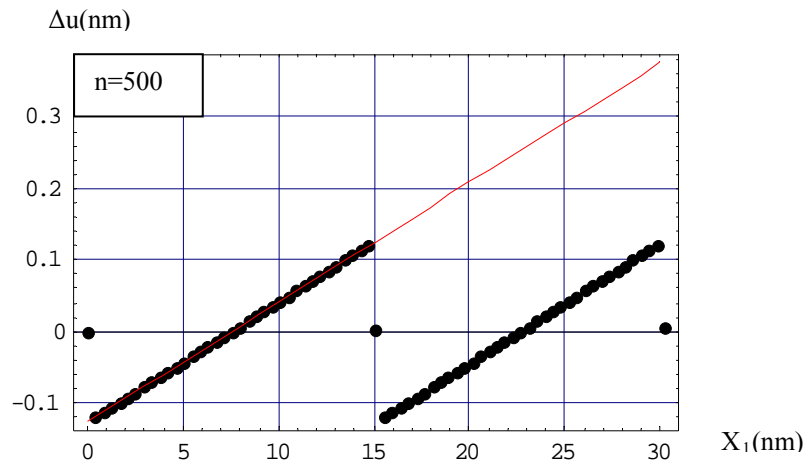


FIG. 5.2: Etendue du déplacement relatif interfacial sur deux périodes.

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

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

n	$X_1=5b$	$X_2=b$
20	$\Delta R=3.31\%$	$\Delta R=7.82\%$
100	$\Delta R=2.37\%$	$\Delta R=4.25\%$
500	$\Delta R=0.94\%$	$\Delta R=2.03\%$

V. 4. Champ des déplacements:

On présente dans ce qui suit les résultats obtenus dans le cas d'un bilame mince Cu/(001)Fe.

V. 4. 1. Influence de la variation de l'épaisseur des couches sur la déformation

Les Figures (5.3) à (5.7) montrent le champ de déplacements dans un plan Ox_1x_2 pour différentes épaisseurs h^+ et h^- des couches sous l'effet d'un réseau de dislocations interfacial en considérant deux orientations respectives du vecteur de burgers.

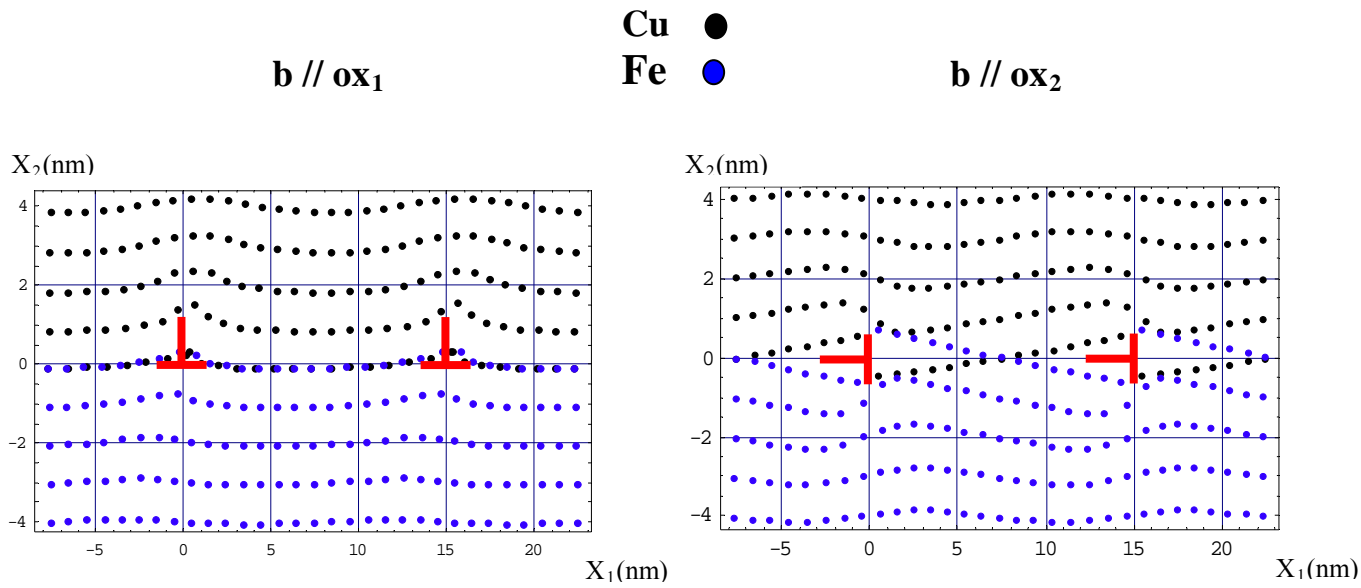


FIG.5.3 : Courbe illustrant les champs des déplacements du bilame mince Cu/(001) Fe sous l'effet d'un réseau de dislocations interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b // Ox_1$ et $b // Ox_2$ pour $h^+=4\text{nm}$ et $h^-=4\text{nm}$ et $n=100$.

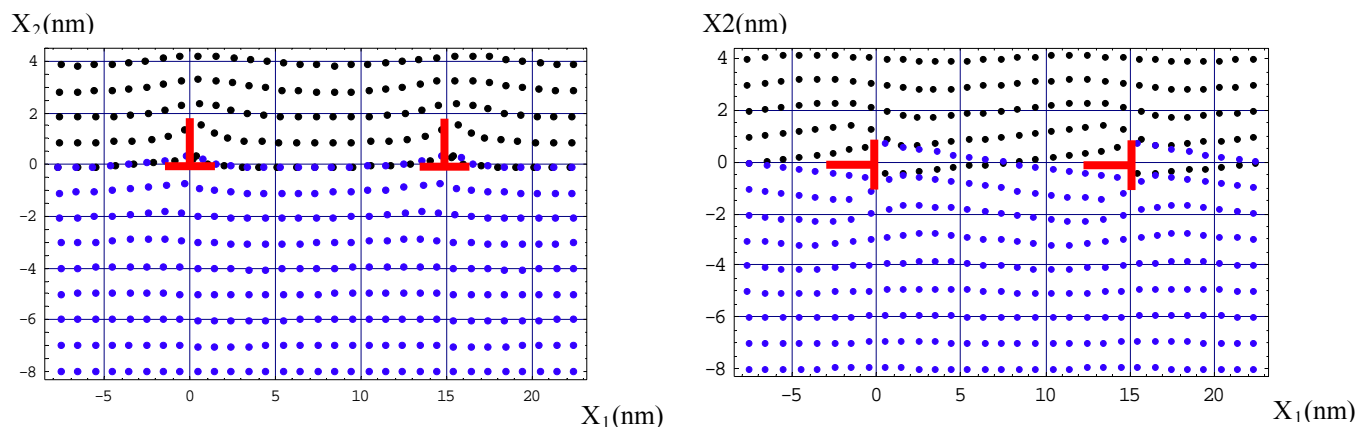


FIG.5.4 : Courbe illustrant les champs des déplacements du bilame mince Cu/(001) Fe sous l'effet d'un réseau de dislocations interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b // Ox_1$ et $b // Ox_2$ pour $h^+=4\text{nm}$ et $h^-=8\text{nm}$ et $n=100$

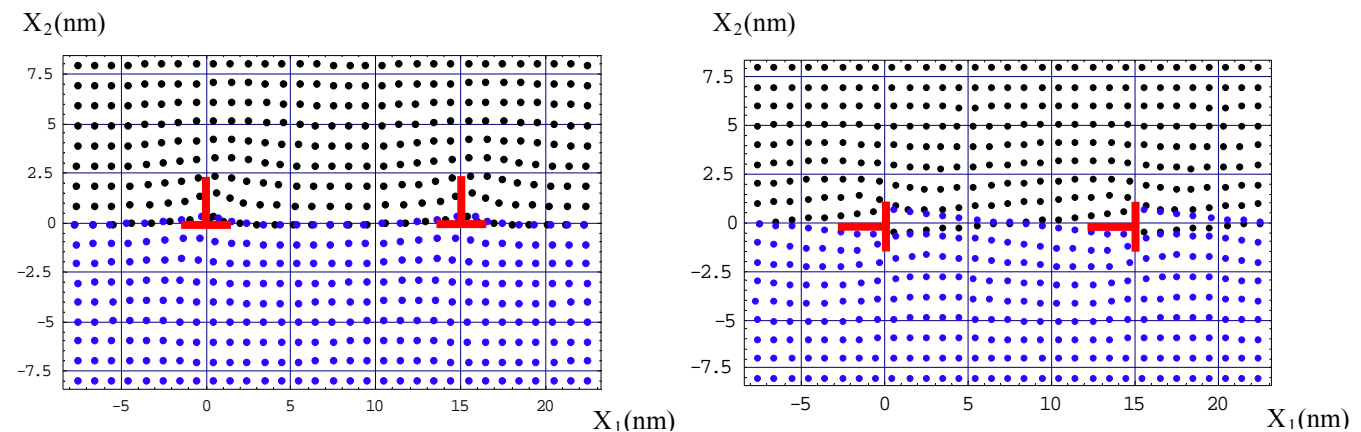


FIG.5.5 : Courbe illustrant les champs des déplacements du bilame mince Cu/(001) Fe sous l'effet d'un réseau de dislocations interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b // Ox_1$ et $b // Ox_2$ pour $h^+=8\text{nm}$ et $h^-=8\text{nm}$ et $n=100$

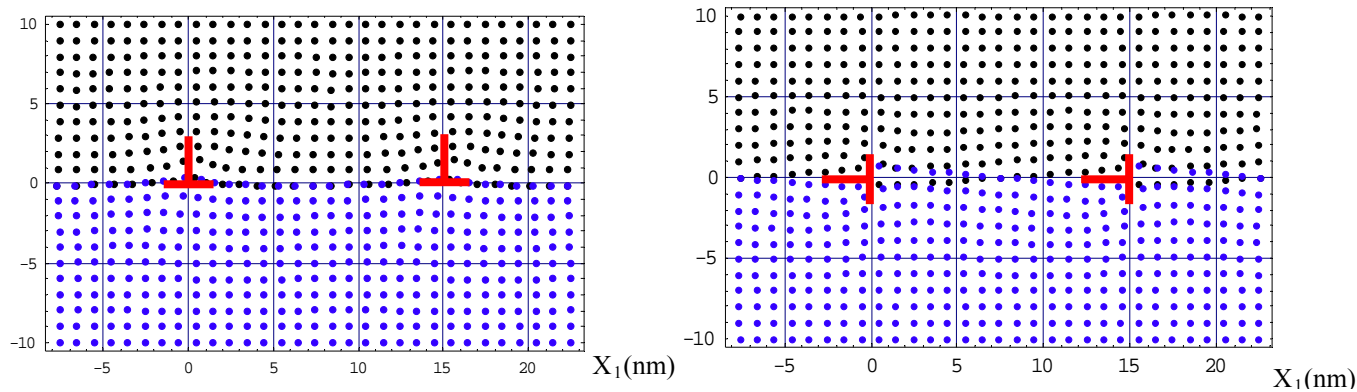


FIG.5.6 : Courbe illustrant les champs des déplacements du bilame mince Cu/(001) Fe sous l'effet d'un réseau de dislocations interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b // Ox_1$ et $b // Ox_2$ pour $h^+=10\text{nm}$ et $h^-=10\text{nm}$

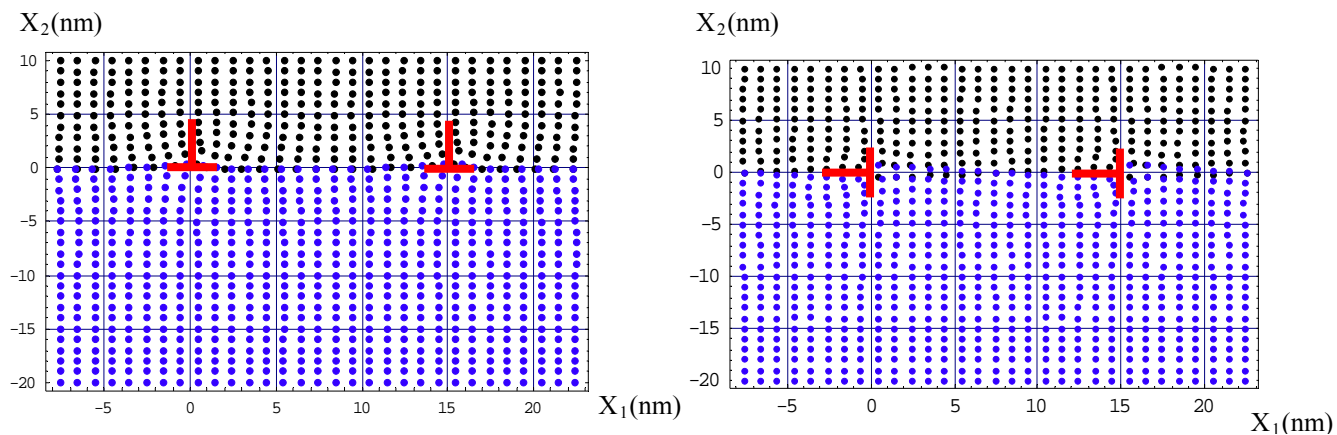


FIG.5.7 : Courbe illustrant les champs des déplacements du bilame mince Cu/(001) Fe sous l'effet d'un réseau de dislocations interfaciales, C_{ij} anisotropes, $b // Ox_1$ et $b // Ox_2$ pour $h^+=10\text{nm}$ et $h^-=20\text{nm}$ et $n=100$.

V. 4. 2. Comparaison et interprétations des résultats.

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

1. Plus l'épaisseur de la couche est petite, plus la déformation est grande à l'aplomb des cœurs des dislocations.
2. L'épaisseur pour laquelle il n'y a pratiquement plus de déplacement est de 9 nm pour $b // Ox_1$ et de 7 nm pour $b // Ox_2$, ce qui traduit une influence de l'orientation de la dislocation sur la déformation.
3. Les facteurs essentiels qui contrôlent le déplacement des unités structurales sont : l'orientation du vecteur de Burgers b et l'épaisseur choisie.
4. Les courbes décrivent bien une tension de la couche de cuivre et une compression de la couche de fer pour une orientation du vecteur de Burgers $b // Ox_1$, ceci est dû au fait que le paramètre de maille du cuivre est supérieur à celui du fer.

V. 4. 1. Iso valeurs des champs de déplacements:

Les résultats du champ de déplacements u_1 et u_2 sont présentés sur les Figures (5.8) à (5.18) pour trois systèmes épitaxiaux homogènes (Cu/Cu et Fe/Fe) et hétérogène Cu/(001)Fe. Notons que le contraste montre clairement une symétrie autour de la dislocation coin.

Cu-Cu pour $b//ox_1$.

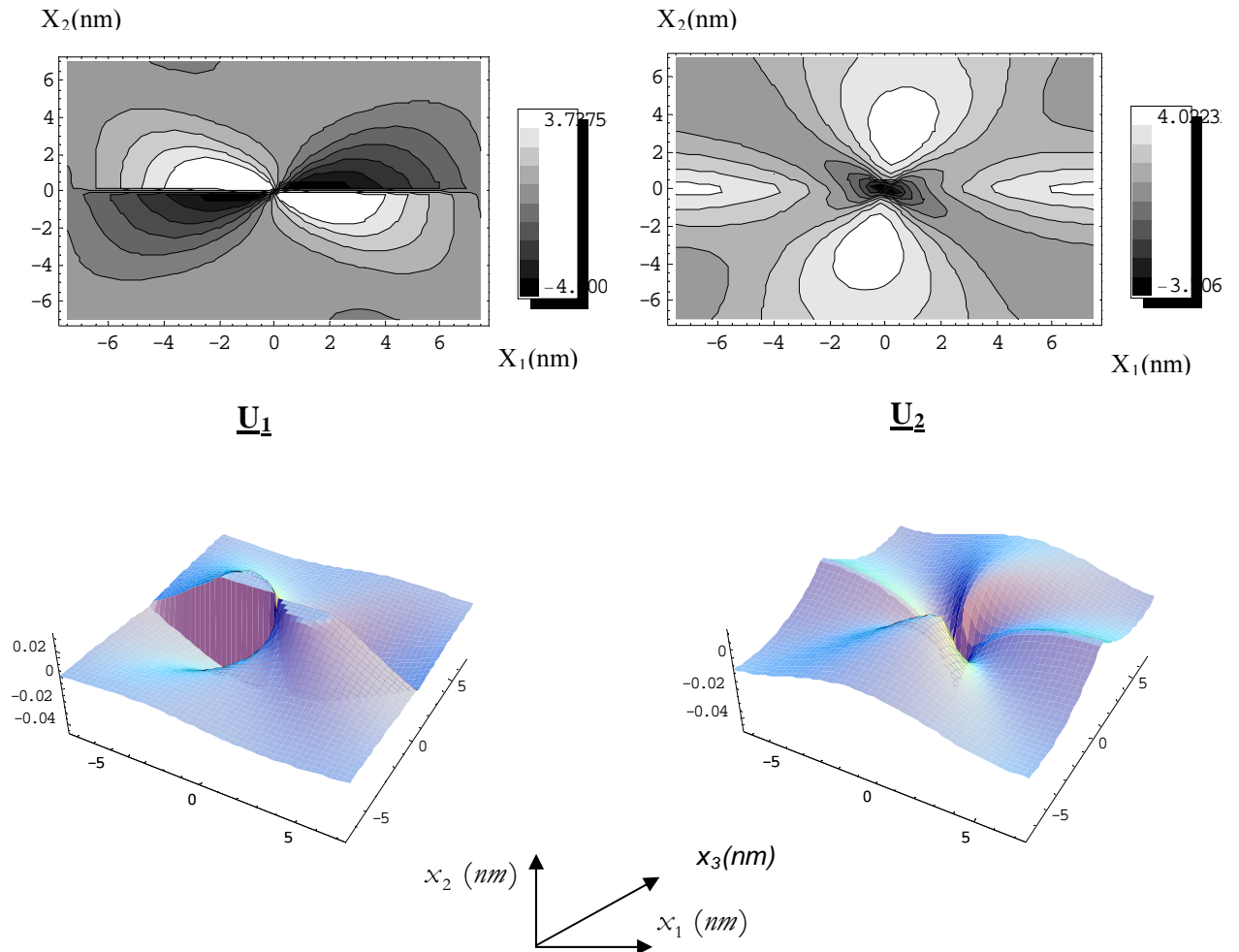


FIG.5.8: Iso valeurs des champs de déplacements u_1 et u_2 induits par un réseau unidimensionnel de dislocations pour le bilame mince Cu/(001)Fe , $b//Ox_1$, $p=15.12$ nm, $b=0.253$ nm et $n=100$

Cu-Cu pour b//ox2.

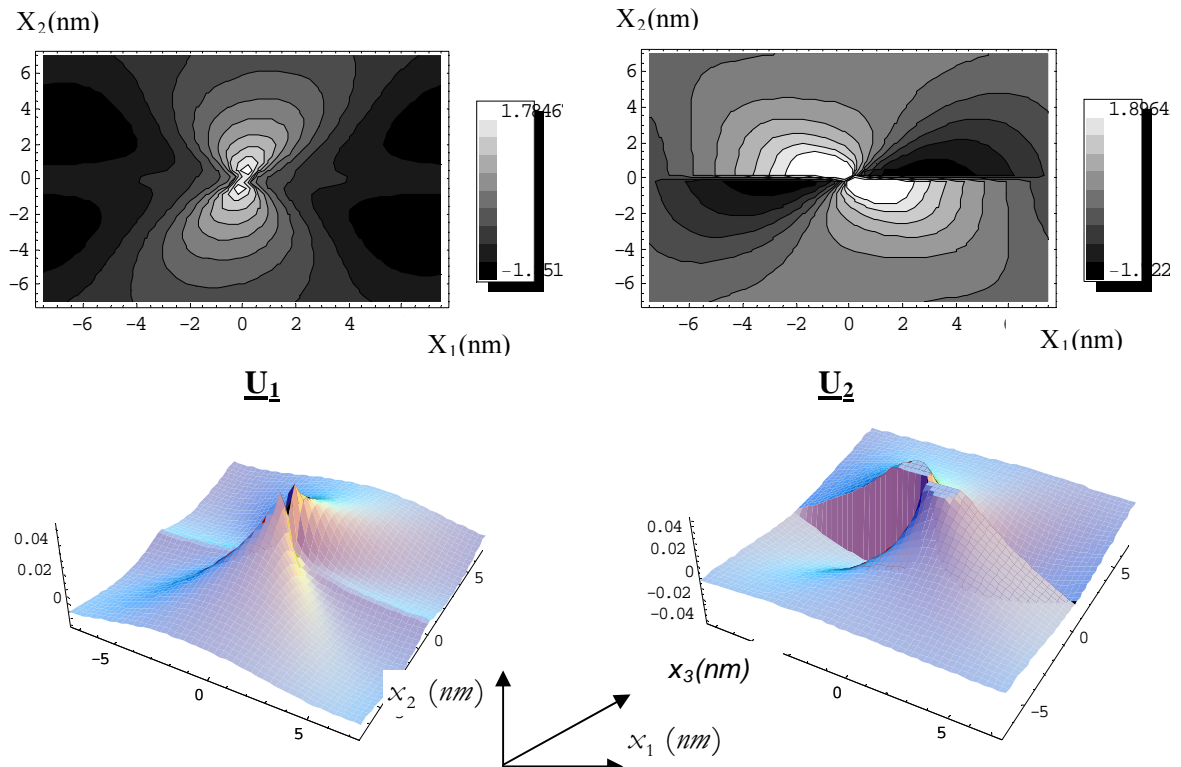


FIG 5.9: Iso valeurs des champs de déplacements u_1 et u_2 induit par un réseau unidimensionnel de dislocations pour le bilame mince Cu/(001)Fe, $b//Ox_2$, $p=15.12$ nm, $b=0.253$ nm

Fe-Fe pour b//ox1.

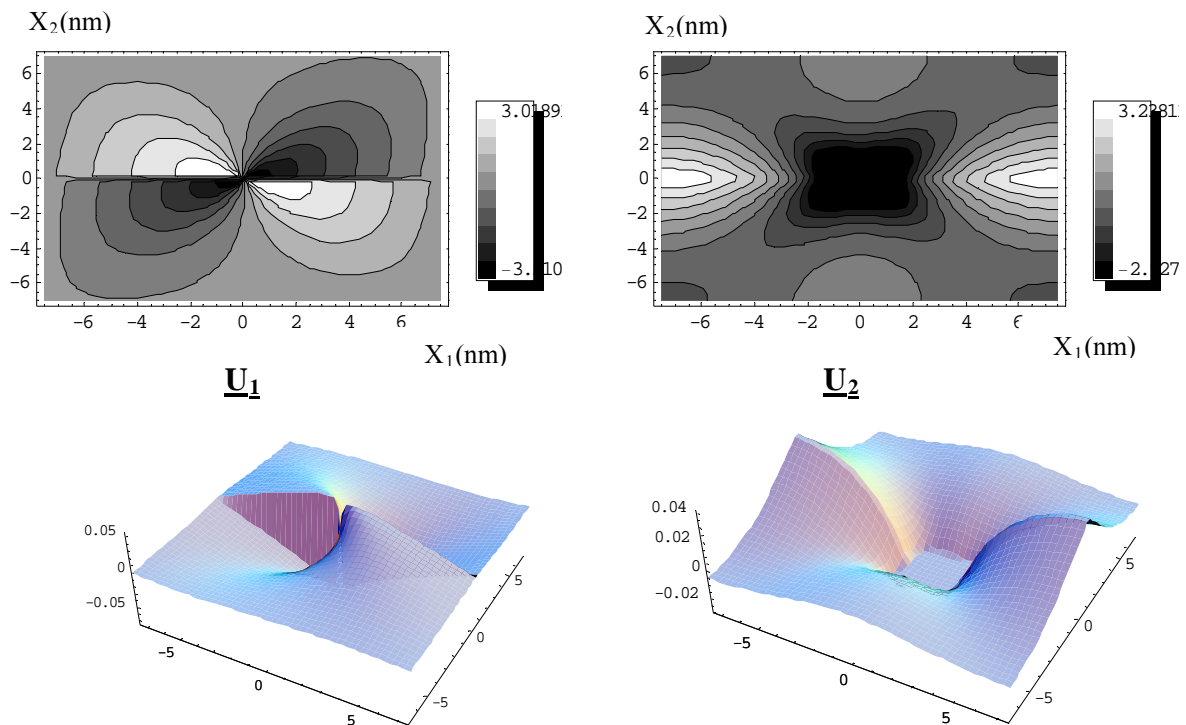


FIG.5.10: Iso valeurs des champs de déplacements u_1 et u_2 induit par un réseau unidimensionnel de dislocations pour le bilame mince Cu/(001)Fe, $b//Ox_1$, $p=15.1$ nm, $b=0.253$ nm et $n=100$

Fe-Fe pour (b//ox2).

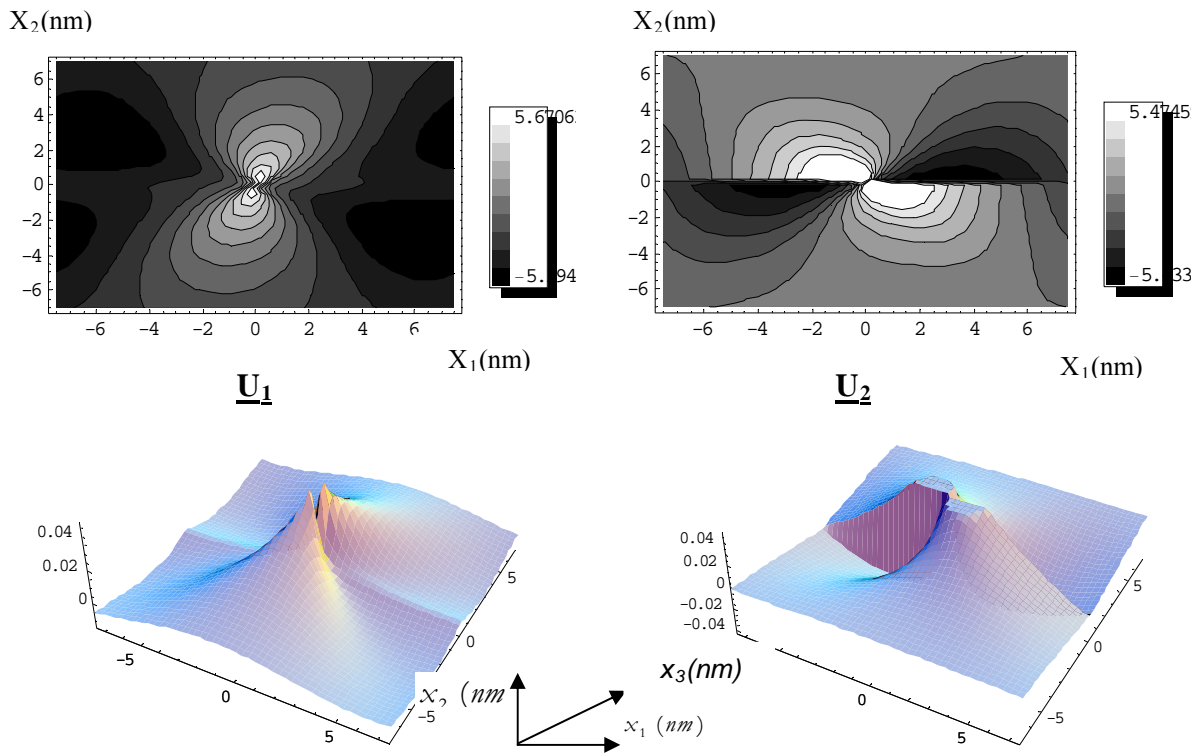


FIG. 5.11: Iso valeurs des champs de déplacements u_1 et u_2 induit par un réseau unidimensionnel de dislocations pour le bilame mince Cu/(001)Fe, $b//Ox_2$, $p=15.1$ nm, $b=0.253$ nm et $n=100$

Cu-Fe pour (b//ox1).

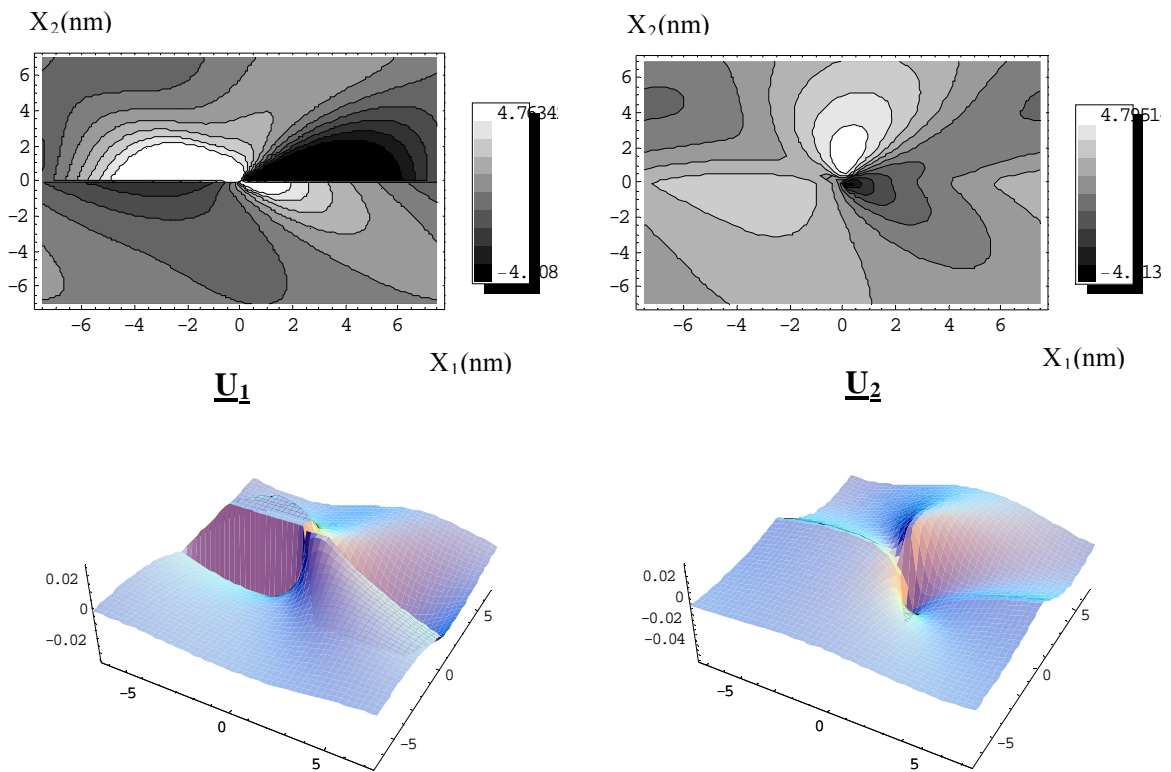


FIG.5.12: Iso valeurs des champs de déplacements u_1 et u_2 induit par un réseau unidimensionnel de dislocations pour le bilame mince Cu/(001)Fe, $b//Ox_2$, $p=15.1$ nm, $b=0.253$ nm et $n=100$.

Cu-Fe pour (b//ox2)

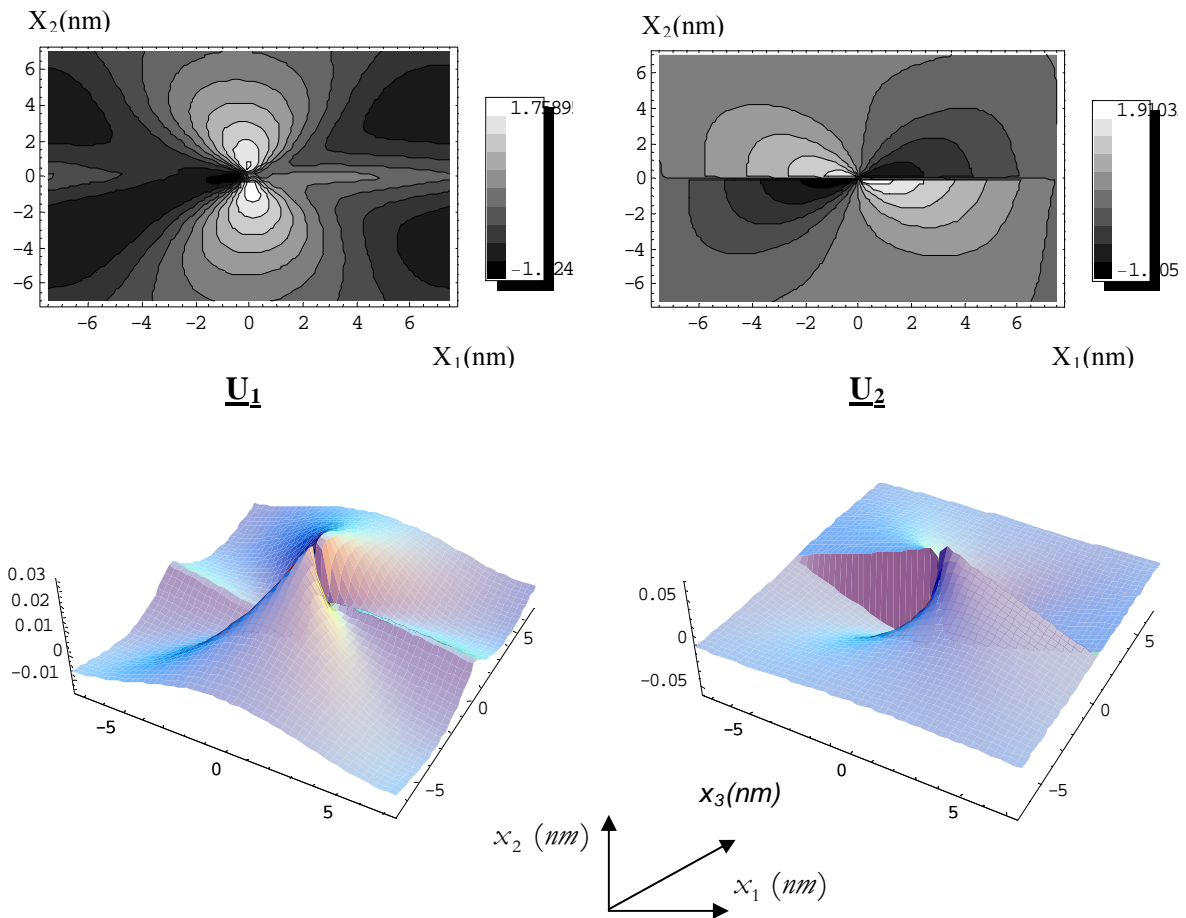


FIG.5.13: Iso valeurs des champs de déplacements u_1 et u_2 induit par un réseau unidimensionnel de dislocations pour le bilame mince Cu/(001)Fe, $b//Ox_2$, $p=15.1$ nm, $b=0.253$ nm et $n=100$.

V. 5. 1. Interprétations des courbes.

Les Figures (5.8 à 5.13) correspondent au trois systèmes homogènes (Cu/Cu et Fe/Fe) et hétérogène Cu/(001)Fe pour deux orientations de b (parallèle à Ox_1 et parallèle à Ox_2). Les épaisseurs des cristaux positifs et négatifs sont choisis égales à 7 nm, pour une période du réseau égale à 15.10 nm. Ces courbes sont obtenues dans le cas de l'élasticité anisotrope. La symétrie des champs de déplacements est bien visible pour la majorité des cas.

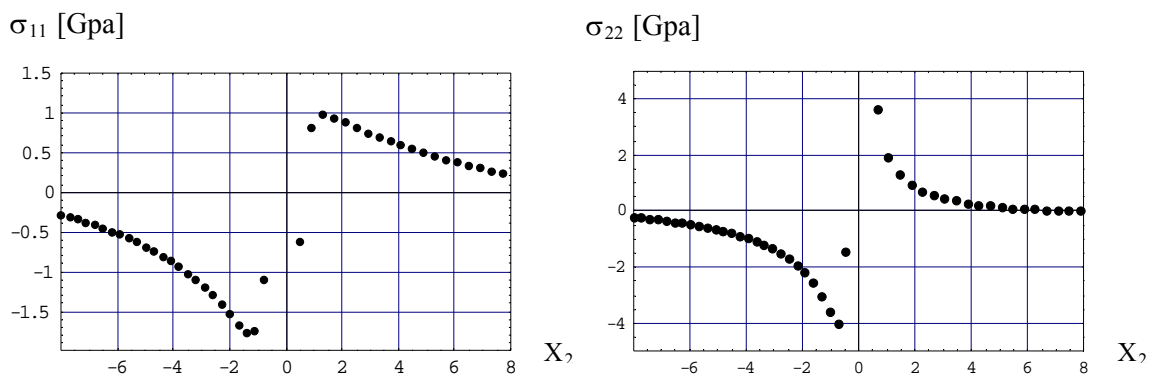
Remarquons que les valeurs des déplacements pour le bilame mince Cu/(001)Fe sont proches des déplacements pour les systèmes homogènes Cu/(001)Cu et Fe/(001)Fe.

V. 6. Evolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} dans le composite.

Nous présentons dans un premier temps, l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 au sein du matériau Cu/(001)Fe sous l'effet d'un réseau de dislocations interfaciales coins dont le vecteur de burgers est parallèle à l'axe Ox_1 . Ensuite, cette distribution des contraintes est représentée également pour les systèmes homogènes Cu/(001)Cu et Fe/(001)Fe.

Cu-Fe pour $b//Ox_1$.

σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = b$, $h^+ = 8nm$ et $h^- = 8nm$.



σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = \Lambda/2$, $h^+ = 8nm$ et $h^- = 8nm$

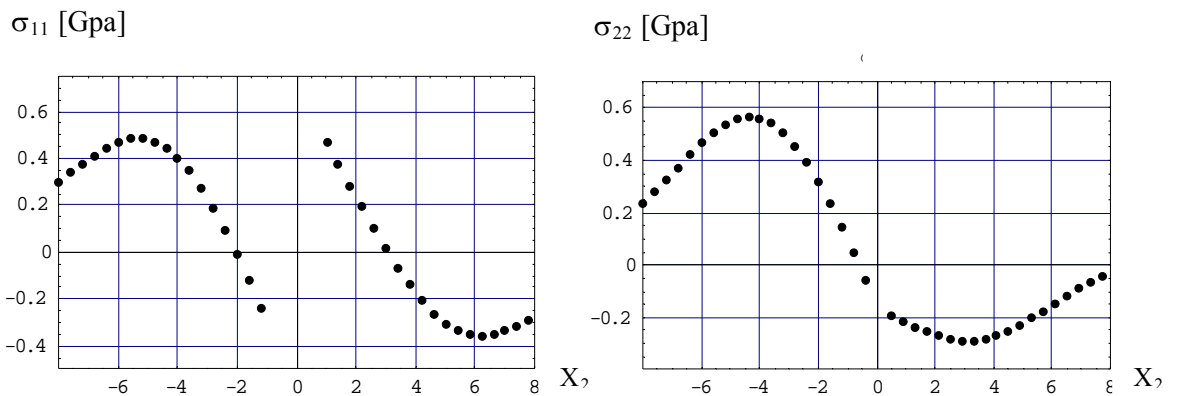
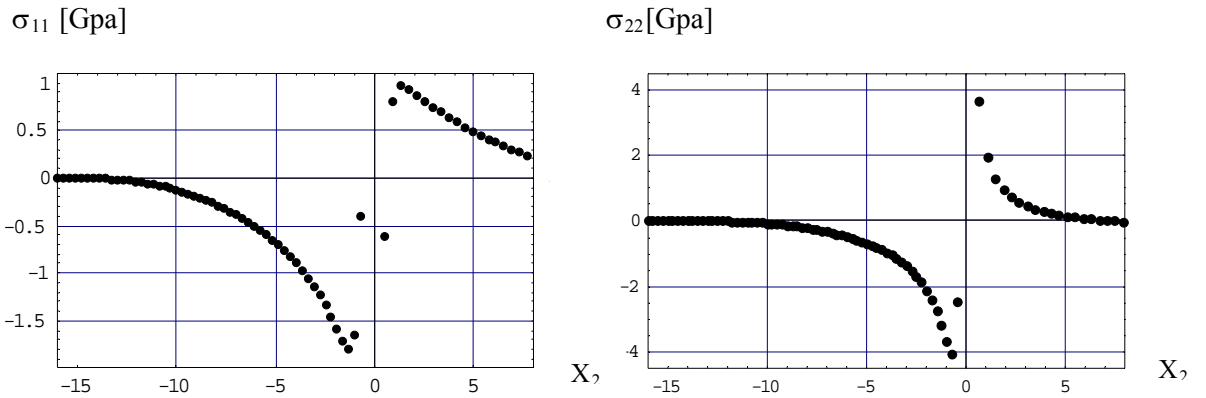
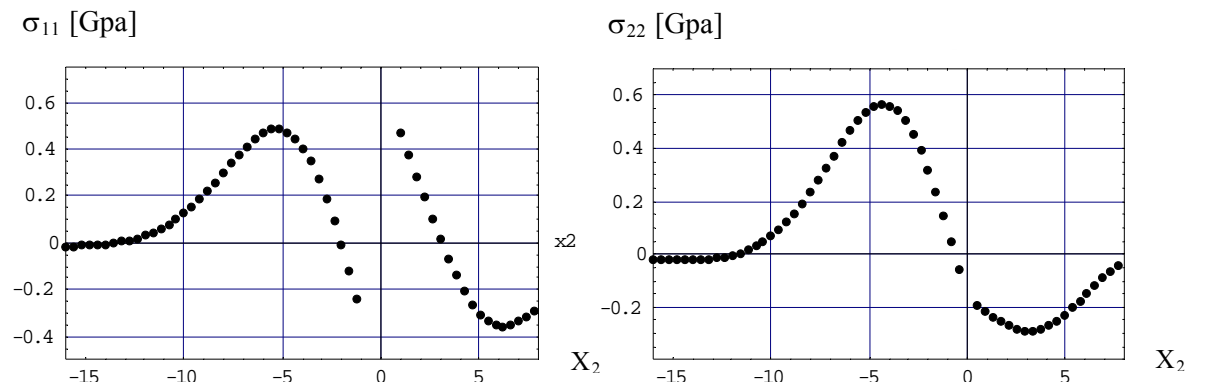


FIG. 5.14: Schéma illustrant l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le bilame mince Cu/(001)Fe, C_{ij} anisotropes, $p = 15.10$ nm pour $n = 100$.

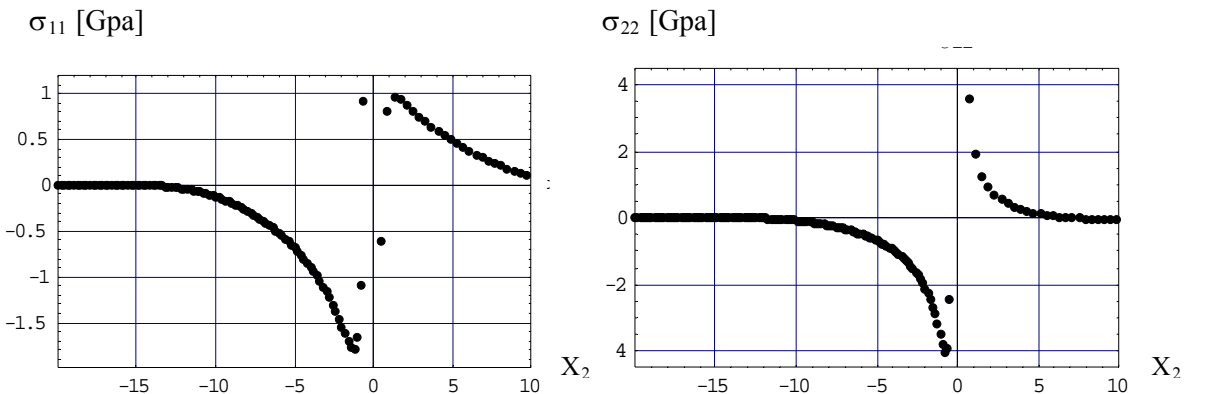
σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = b$, $h^+ = 8nm$ et $h^- = 16nm$.



σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = \Lambda/2$, $h^+ = 8nm$ et $h^- = 16nm$



σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = b$, $h^+ = 10nm$ et $h^- = 20nm$.



σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = \Lambda/2$, $h^+ = 10nm$ et $h^- = 20nm$

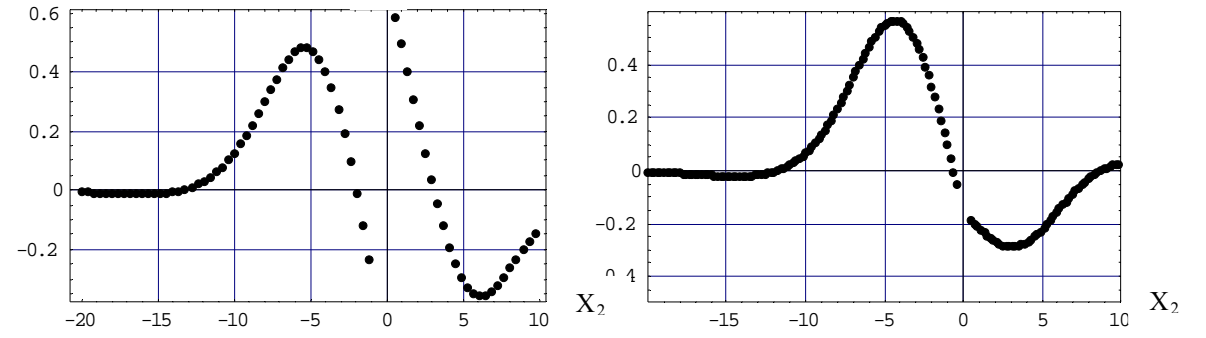
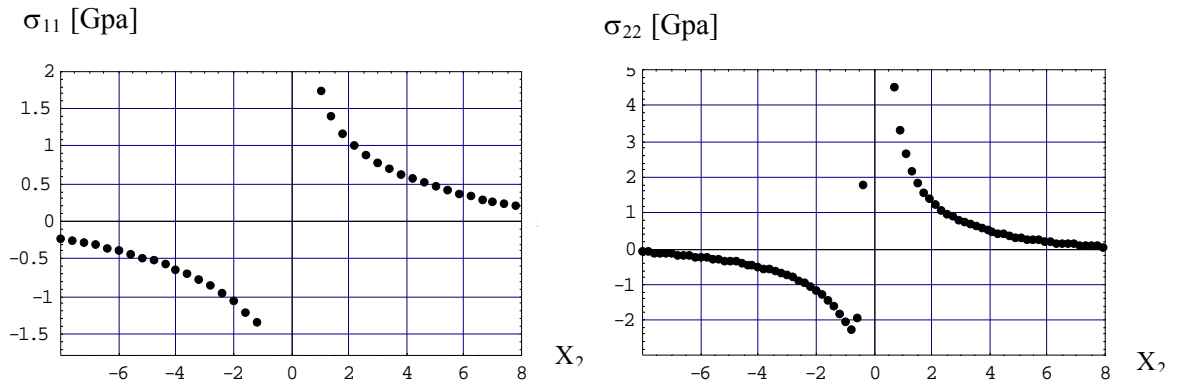


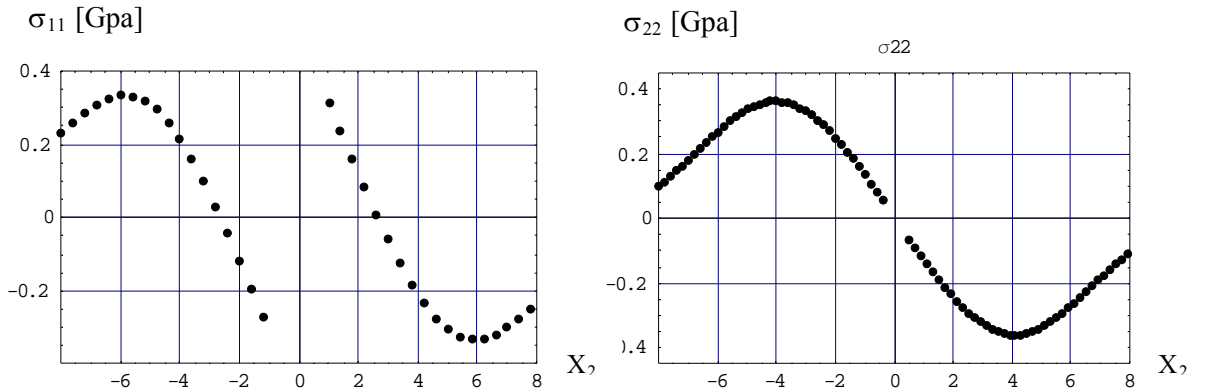
FIG.5.15: Schéma illustrant l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le bilame mince Cu/(001)Fe, C_{ij} anisotropes, $p = 15.10$ nm pour $n = 100$

Cu-Cu pour $b//Ox_1$.

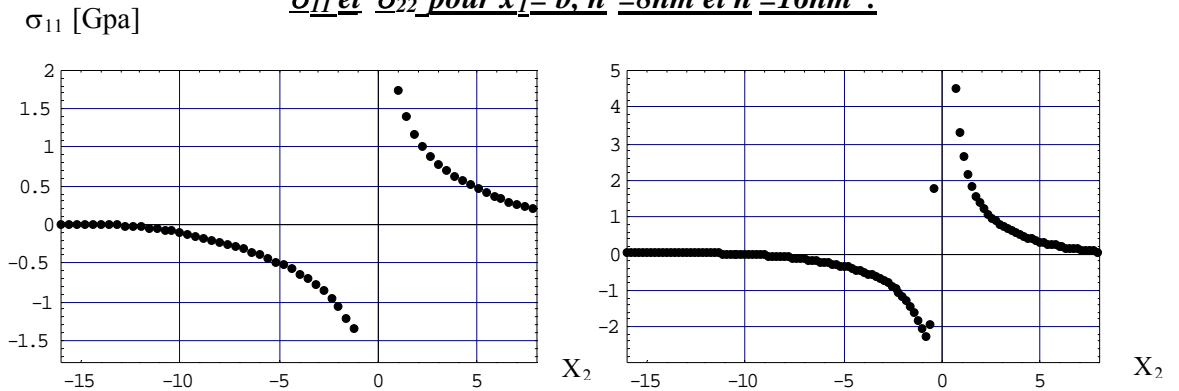
σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = b$, $h^+ = 8nm$ et $h^- = 8nm$.



σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = \Lambda/2$, $h^+ = 8nm$ et $h^- = 8nm$.



σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = b$, $h^+ = 8nm$ et $h^- = 16nm$.



σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = \Lambda/2$, $h^+ = 8nm$ et $h^- = 16nm$.

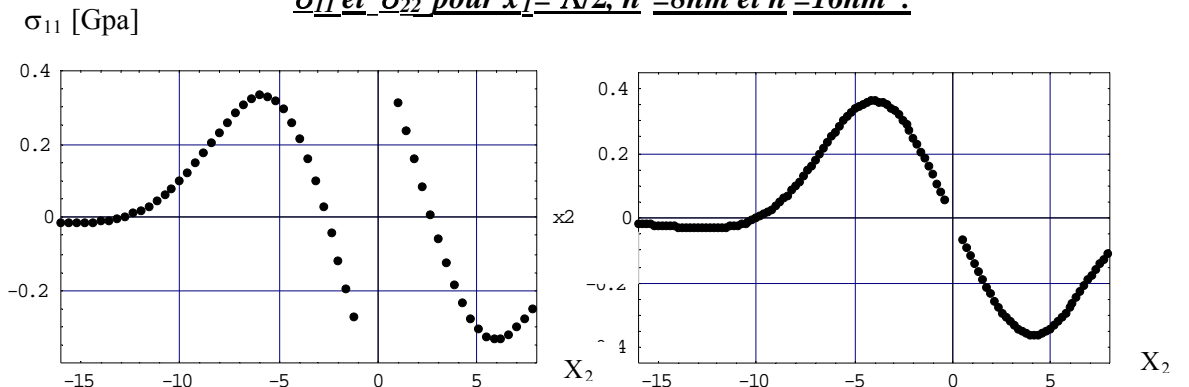
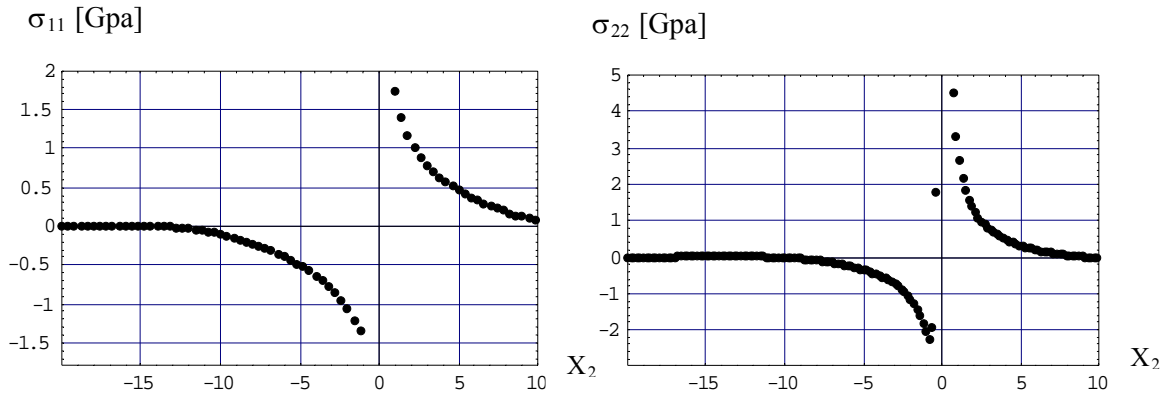


FIG.5.16: Schéma illustrant l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le bilame mince Cu/(001)Cu, C_{ij} anisotropes, $p = 15.10 \text{ nm}$ pour $n = 100$

σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = b$, $h^+ = 10\text{nm}$ et $h^- = 20\text{nm}$.



σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = \Lambda/2$, $h^+ = 10\text{nm}$ et $h^- = 20\text{nm}$.

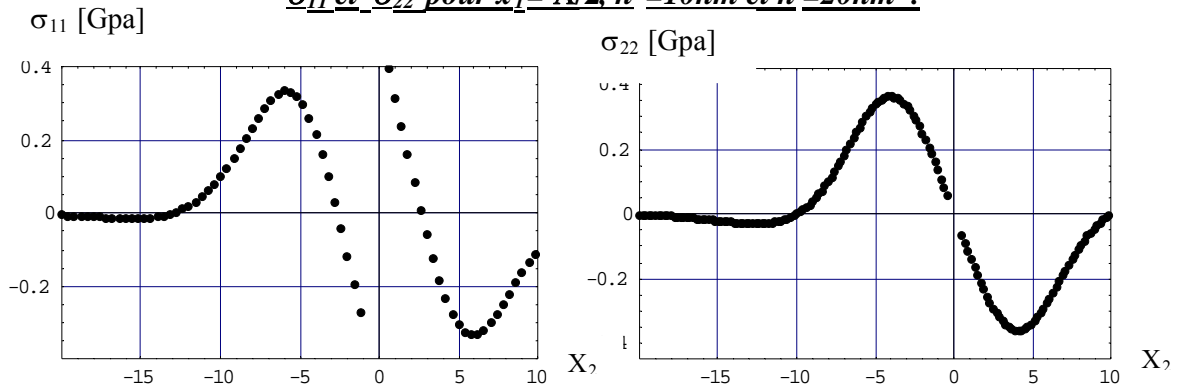
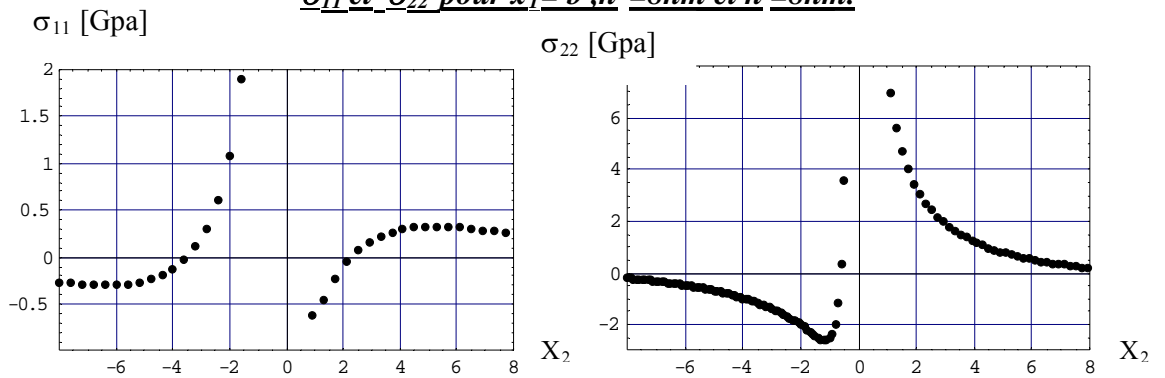


FIG.5.17: Schéma illustrant l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le bilame mince Cu/(001)Cu, C_{ij} anisotropes, $p = 15.10 \text{ nm}$ et $n = 100$

Fe-Fe pour $b // O x_1$

σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = b$, $h^+ = 8\text{nm}$ et $h^- = 8\text{nm}$.



σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = \Lambda/2$, $h^+ = 8\text{nm}$ et $h^- = 8\text{nm}$.

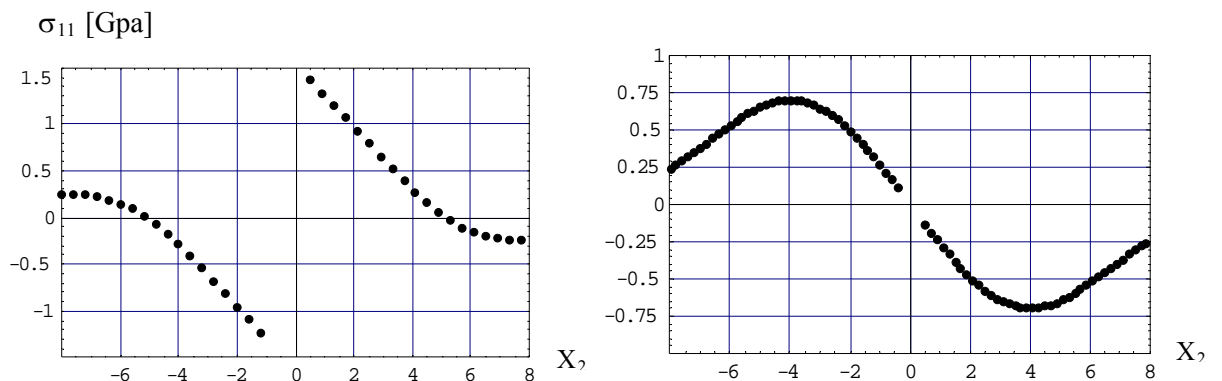
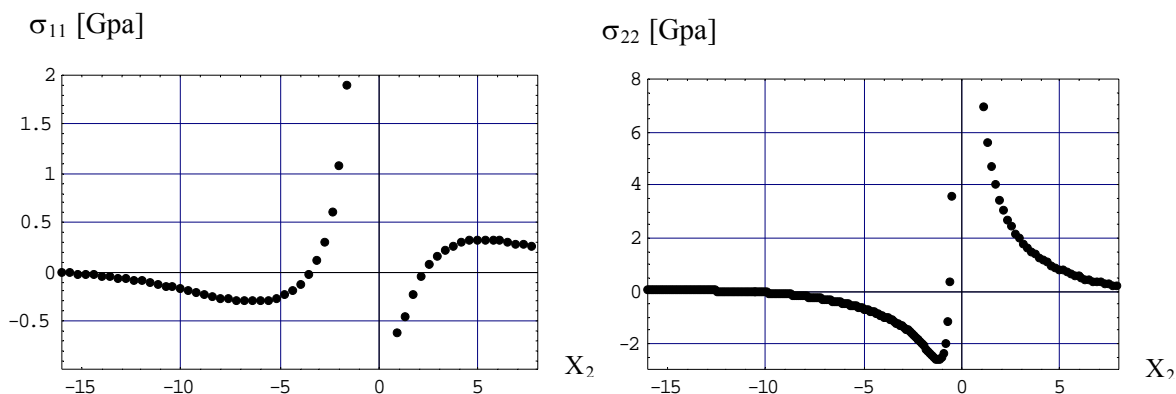
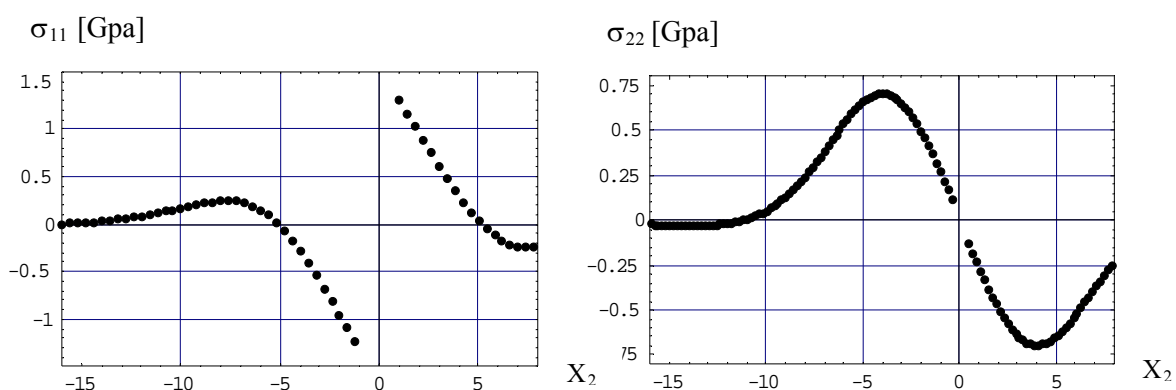


FIG.5.18: Schéma illustrant l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le bilame mince Fe/(001)Fe, C_{ij} anisotropes, $p = 15.10 \text{ nm}$ et $n = 100$

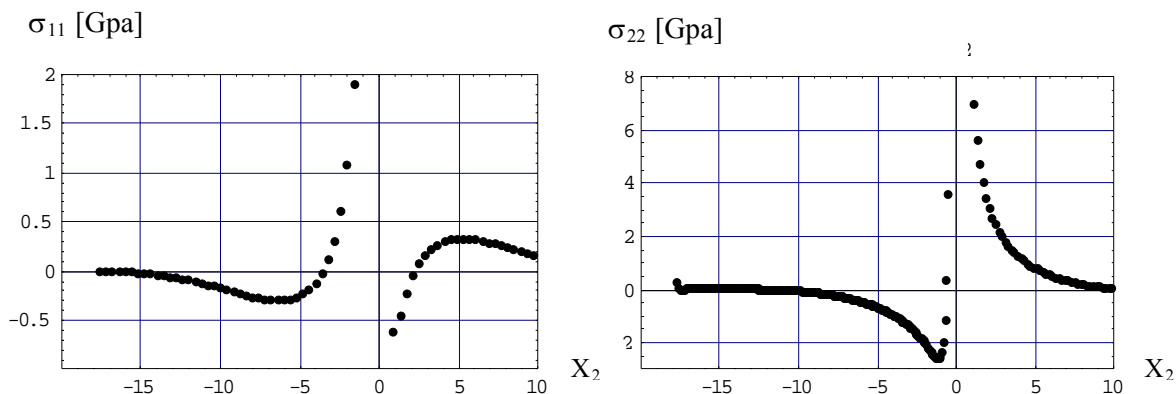
σ_{11} et σ_{22} pour $x_1=b, h^+=8nm$ et $h^-=16nm$.



σ_{11} et σ_{22} pour $x_1=\Lambda/2, h^+=8nm$ et $h^-=16nm$.



σ_{11} et σ_{22} pour $x_1=b, h^+=10nm$ et $h^-=20nm$.



σ_{11} et σ_{22} pour $x_1=\Lambda/2, h^+=10nm$ et $h^-=20nm$.

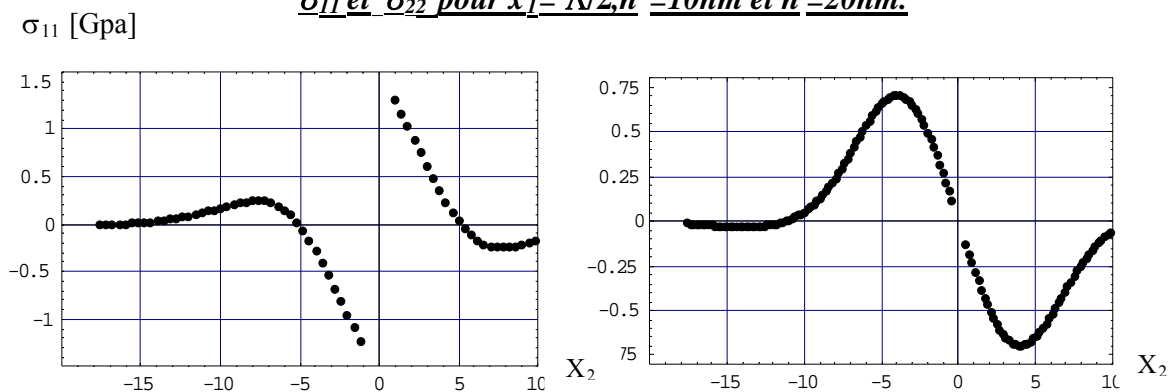
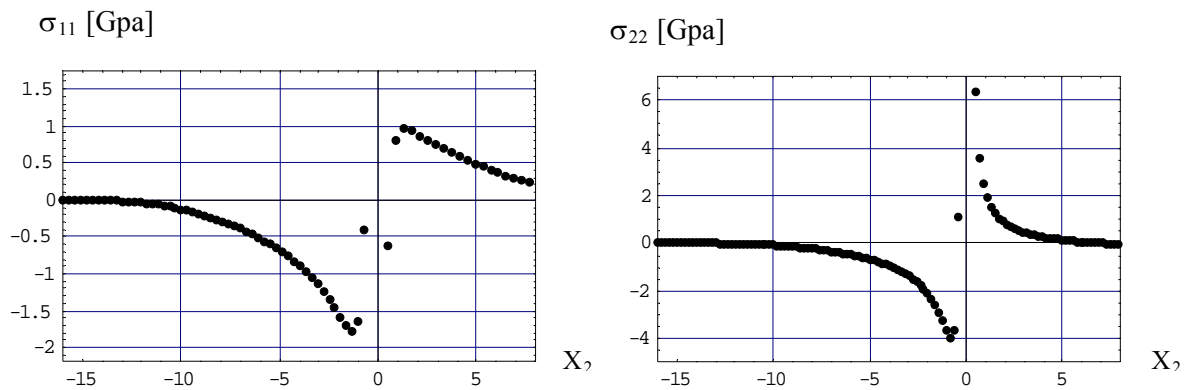


FIG.5.19: Schéma illustrant l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le bilame mince Fe/(001)Fe, C_{ij} anisotropes, $p=15.10$ nm et $n=100$

Cu-Fe pour $b//Ox_1$.

σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = b$, $h^+ = 8nm$ et $h^- = 16nm$.



σ_{11} et σ_{22} pour $x_1 = \Lambda/2$, $h^+ = 8nm$ et $h^- = 16nm$.

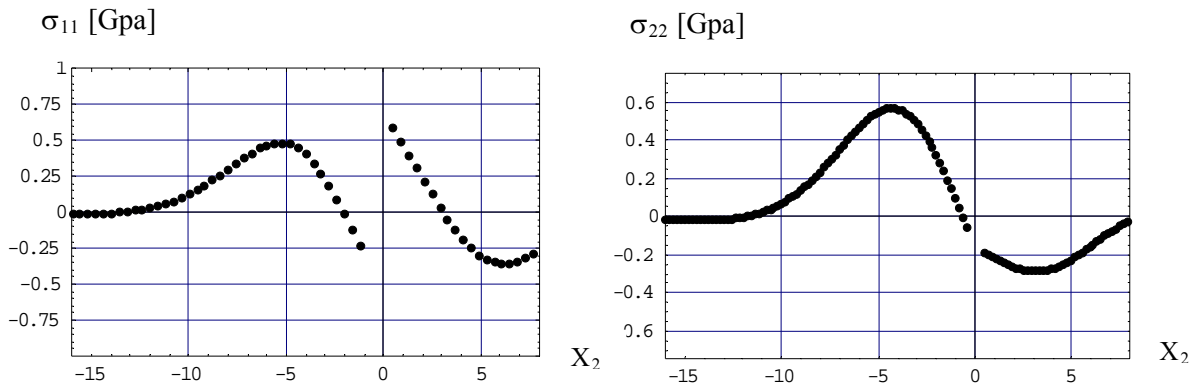


FIG.5.20: Schéma illustrant l'évolution des contraintes σ_{11} et σ_{22} en fonction de x_2 pour le bilame mince Cu/(001)Fe, C_{ij} anisotropes, $p = 15.10$ nm et $n = 1000$

V. 6. 1. Interprétations des courbes.

En ce qui concerne le champ des contraintes, les figures (5.14 à 5.20) montrent bien que :

1. pour toutes les valeurs de x_1 choisies, on obtient une discontinuité des contraintes σ_{11} à travers l'interface.
2. σ_{11} et σ_{22} passent par des maximums dont les valeurs sont entre les valeurs obtenues pour les bilames minces homogènes Cu/(001)Cu et Fe/(001)Fe.
3. Les contraintes σ_{22} sont continues à travers l'interface et nulles au niveau des surfaces libres conformément aux conditions aux limites.
4. La déformation est beaucoup plus grande au voisinage du cœur de la dislocation que loin de celui-ci.

V. 7. Effet de l'hétérogénéité du matériau.

Afin de mieux voir l'effet de l'hétérogénéité du matériau sur l'évolution des contraintes, nous présentons sur la même figure les courbes des contraintes σ_{11} et σ_{22} pour les trois types de bilame mince Cu/(001)Cu, Fe/(001)Fe et Cu/(001)Fe et ceci en gardant une épaisseur totale du bilame constante ($h^+ = 8\text{nm}$ et $h^- = 16\text{nm}$) pour différentes valeurs de x_1 .

Les Figures ci dessous (5.21) à (5.22) montrent que :

1. La discontinuité des contraintes σ_{11} est bien visible pour les trois bilames.
2. La continuité des contraintes σ_{22} à l'interface et leurs nullité a la surface libre conformément aux conditions aux limites est réalisée.
3. Il est notable que les valeurs des contraintes σ_{11} et σ_{22} sont plus importantes pour le bilame Fe/(001)Fe que pour le système hétérogène Cu/(001)Fe.

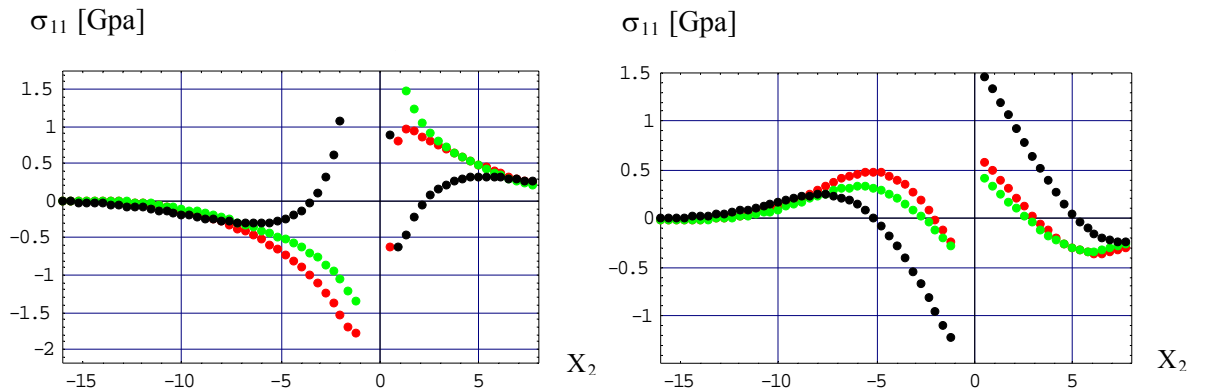


FIG.5.21: Superposition des champs des contraintes σ_{11} en fonction de x_2 pour les bi matériaux Cu/(001)Cu, Fe/(001)Fe et Cu/(001)Fe pour $x_1 = b \text{ nm}$, $x_1 = \Lambda/2 \text{ nm}$ et $b//Ox_1$ et $n=100$.

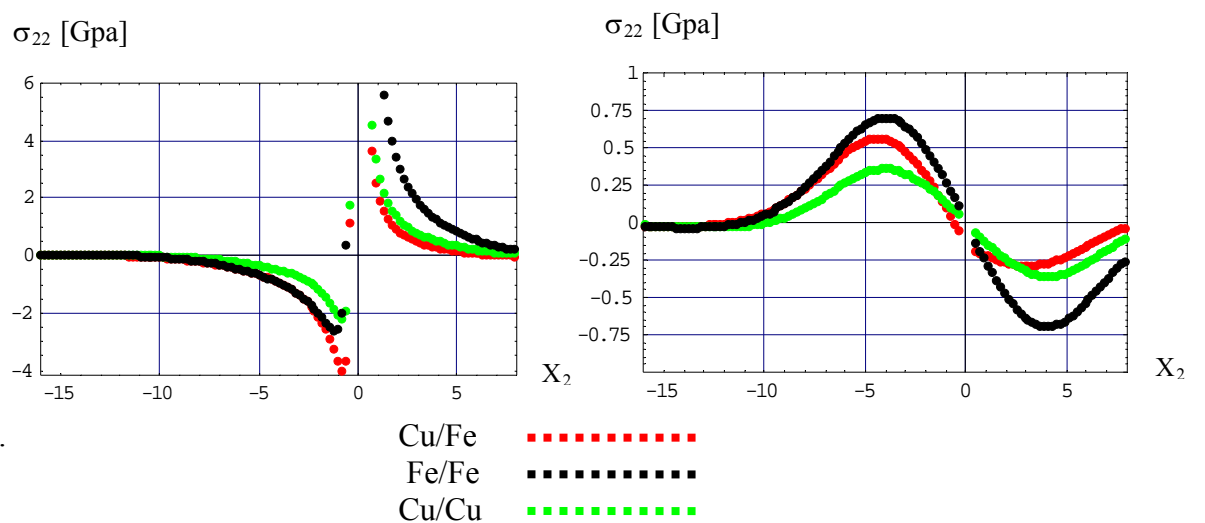


FIG.5.22: Superposition des champs des contraintes σ_{22} en fonction de x_2 pour les bi matériaux Cu/(001)Cu, Fe/(001)Fe et Cu/(001)Fe pour $x_1 = b \text{ nm}$, $x_1 = \Lambda/2 \text{ nm}$ et $b//Ox_1$ et $n=100$

V. 8. Comparaison avec les résultats obtenus en élasticité isotrope : Effet d'anisotropie.

La confirmation de nos résultats obtenus en élasticité anisotrope est synonyme de la validité de notre programme original qui a été testée de manières diverses à chaque étape de calcul après avoir établi les hypothèses du modèle choisi et les conditions aux limites relatives au problème posé. En effet un programme utilisant la même méthode théorique de développement par séries de Fourier double dans le cas de l'élasticité isotrope pour le même bilame mince Cu/(001)Fe construit par l'étudiant Baroura lazhar a donné des résultats très proches (coté allure) des résultats obtenus dans notre cas. La superposition des courbes permet de déceler une nette différence entre l'anisotropie et l'isotropie sachant que les monocristaux de cuivre et de fer sont très anisotropes. Leurs facteurs de Zener respectifs sont $A= 3.20$ pour Cu et $A=2.43$ pour Fe calculés par l'expression suivante : $A = 2C_{44} / (C_{11} - C_{12})$

Cu-Fe pour $b//Ox_1$ et $n=100$.

$$x_1 = b, h^+ = 8nm \text{ et } h^- = 16nm$$

$$x_1 = \Lambda/2, h^+ = 8nm \text{ et } h^- = 16nm .$$

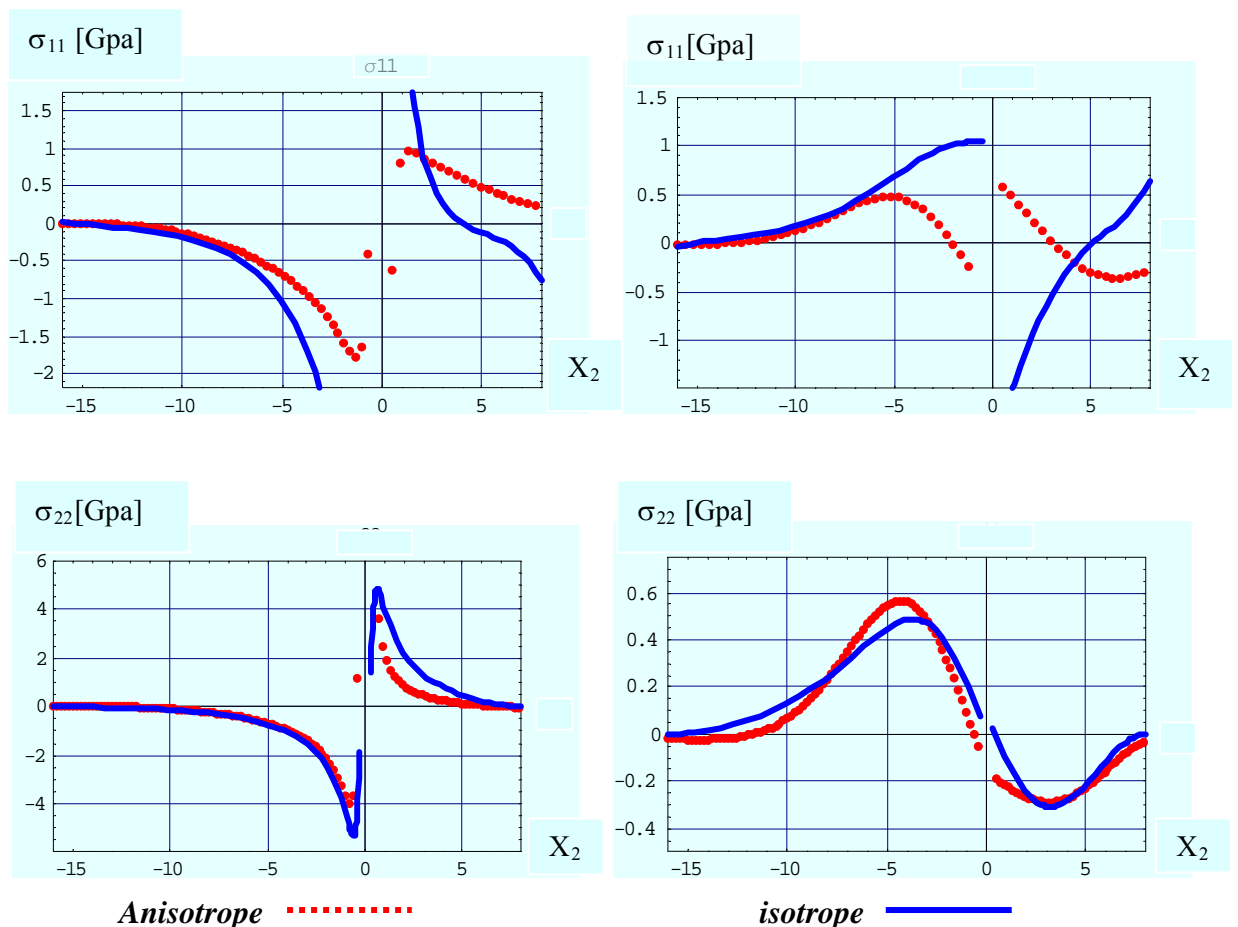


FIG.5.23: Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} anisotrope et isotrope en fonction de x_2 pour le bilame mince Cu/(001)Fe, $x_1 = b$, $x_1 = \Lambda/2$, $n=100$ et $b//Ox_1$.

$x_1 = b, h^{\pm} = 10\text{nm et } h^{-} = 20\text{nm}$

$x_1 = \Lambda/2, h^{\pm} = 10\text{nm et } h^{-} = 20\text{nm}$

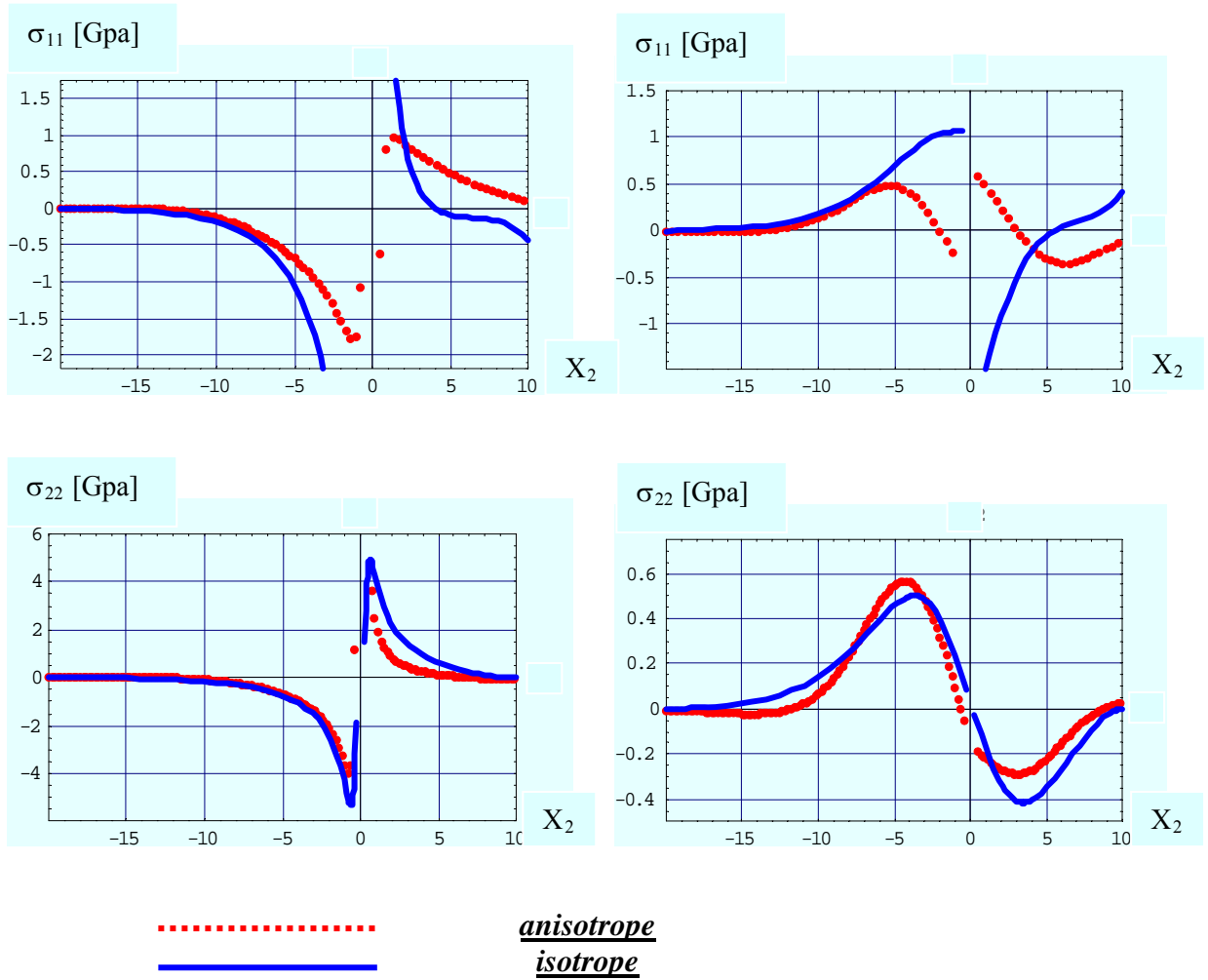


FIG.5.24: Superposition des champs des contraintes σ_{11} et σ_{22} anisotrope et isotrope en fonction de x_2 pour le bilame mince Cu/(001)Fe, $x_1 = 0.253 \text{ nm}$, $x_1 = 7.55\text{nm}$, $n=100$ et $b//Ox_1$

CONCLUSION GENERALE.

L'application de la théorie de l'élasticité anisotrope pour déterminer les effets élastiques (déplacements et contraintes) générés par des dislocations à l'interface d'un bilame mince combinée à une analyse par séries de Fourier double conduit à un système d'équations linéaires qui ne peut être inversé que numériquement. Les solutions de ce système sont les coefficients de la série de Fourier recherchés et ils sont de nature complexe. Les déplacements et les contraintes sont calculés en fonction de ces coefficients.

Ce travail nous a permis d'atteindre l'objectif principal qui est l'élaboration d'un programme numérique en code Mathématica pour simuler les champs élastiques dans le cas de l'élasticité anisotrope. La validité du programme original a été testée de manières diverses à chaque étape de calcul, après avoir établi les hypothèses du modèle choisi et les conditions aux limites relatives au problème posé. Le cas traité dans ce travail est celui du bilame mince. Les conditions aux limites en déplacements et contraintes ont été définies dans un travail préalable par Bonnet. Elles sont résumées dans ce qui suit : continuité des contraintes σ_{2k} à l'interface, nullité de celles-ci au niveau des surfaces libres et discontinuité du déplacement relatif interfacial ($u_k^+ - u_k^-$). L'application de ces conditions aux limites conduit à un système de 24 équations à 24 inconnues réelles qui ne s'inverse que numériquement. L'inversion numérique permet le calcul du champ u_k des déplacements ainsi que le champ de contraintes.

Une fois le programme validé, des applications numériques sont présentées pour trois types de bilame mince à savoir, les bilames homogènes Cu/(001)Cu, Fe/(001)Fe et le bilame mince hétérogène Cu/(001)Fe accommodant un désaccord paramétrique pour le cas anisotrope..

Les résultats obtenus concernant l'évolution des unités structurales des champs des déplacements autour et entre deux dislocations et les champs des déplacements et de contraintes dépendent de plusieurs facteurs essentiels qui sont l'orientation du vecteur de Burgers b , la période p du réseau, les constantes élastiques C_{ij} et l'épaisseur de la couche choisie.

Nous constatons, pour le champ de déplacement, que:

- plus l'épaisseur de la couche est petite, plus la déformation est grande à l'aplomb des cœurs de dislocations.

- La couche supérieure est en tension tandis que la couche inférieure jouant le rôle de substrat dans le bilame est en compression.

De même pour le champ des contraintes nous avons remarqué que:

- La discontinuité des contraintes σ_{11} et la continuité des contraintes σ_{22} à travers l'interface conformément aux conditions aux limites est vérifiée.

Finalement, nous avons l'occasion de signaler qu'une comparaison entre le code Fortran et le code Mathematica montre la très grande souplesse de ce dernier (temps d'exécution plus économique, nombre d'harmonique pouvant dépasser 2000, etc.....) tandis que les programmes en langage Fortran construits pour le même type de calcul présentent l'inconvénient d'un temps d'exécution coûteux et d'une précision qui va à la limite à 14 chiffres significatifs alors que le programme élaboré en langage Mathematica présente l'avantage d'un temps d'exécution court pour un nombre d'harmonique élevé.

Bibliographie

- [1] Bonnet, R., *Phil. Mag. A*, vol 43, N°5, p: 1165 -1187, (1981a)
- [2] Hedges, J. M., et Michell, J. W., *Phil. Mag.*, 44, 223, (1953)
- [3] Burgers, J. M., *Proc. K. Ned. AKad. Wet. Amst.*, 42, 278 et 293, (1939)
- [4] Bragg, W. L. , *Proc. Phys. Soc (Londres)*, 52, 54 - 55, (1940)
- [5] Vander Merwe, J. H., *Proc. Phys. Soc (Londres)*, A63, 616, (1950)
- [6] Read, W. T., et Shockley, W., *Phys. Rev.*, 75, 692, (1949)
- [7] Read, W. T., et Shockley, W., *Phys. Rev.*, 78, 275 ,(1950)
- [8] Barö, G., et Gleiter, H., *Acta Met.*, 21,1405, (1973)
- [9] Bollmann, W. , *Phys. Stat. Sol. (a)*, 21, 543, (1974)
- [10] Risbee, J. M., et Aaronson, H. I., *Acta Met.*, 27, 351, (1979a), *Ibid.*, 365, (1979b)
- [11] Hall, M. G., et Aaronson, H. I., *Acta Met.*, 34,1409, (1986)
- [12] Forwood, C. T, et Clarebrough, L. M., *Phil. Mag.*13, vol 59, N°6, p:637-665, (1981a)
- [13] Howie, A., et Whelan, M.J., *Proc. R. Soc (Londres)*, A, 267, 206, (1962)
- [14] Tunstall, W. J., Hirsch, P.B., et Steeds, J., *Phil. Mag*, 9, 99, (1964)
- [15] Humble, P., *Phil. Mag.*, A, 51, 469, (1985)
- [16] Clarebrough, L. M., *Phil. Mag.*, 30, 1295, (1974)
- [17] Hirsch, P.B., Howie, A., Nicholson, R. B., Pashley, D. W., et Whelan, M.J., *Electron Microscopy of thin crystals*, (London: Batterworth), p.162 , (1965)
- [18] Head, A. K., Humble, P., Clarebrough, L. M., Morton, A. J., et Forwood, C. T.,*computed :Electron Micrographs and Defect Identification (Amsterdam:North-Holland)*, (1973)
- [19] Bonnet, R., Morton, A. J., *Phil. Mag. A*, vol 56, N°6, p: 815 -830, (1987)
- [20] Ati, A., *Thèse De Doctorat D'état*, Université Houari Boumédiene -Alger, (1993)
- [21] Kang, J . M.*Thèse De Doctorat D'état*, Université Paul Sabatier - Toulouse, (1993)
- [22] Eshelby, J. D., Read, W. T., et Shockley, W., *Acta. Met.*, 1, 251, (1953)
- [23] Eshelby, J. D., Read, W. T., et Shockley, W., *Acta. Met.*, 1, 251, (1953)
- [24] Stroh, A. N., *Phil. Mag.*, 3, 625, (1958); *J.Math.Phys.*, 41, 77, (1962)
- [25] Chou, Y. T., *J. Appl. Phys.*, 33, 2747, (1962); *Scripta. Metall.*, 10, 331, (1976)
- [26] Chou, Y. T., Pande, C. S. , et Yang, H. C. *J. Appl. Phys.* 46, 5, (1975)
- [27] Hirth, J. P., Barnett, D. M., et Lothe, J., *Phil. Mag.*, A, 40, 39, (1979)
- [28] Bacon, D. J., Barnett, D., M., et Scattergood, R., O., *Prog. Mater. Sci*, 23, 51, (1978)

- [29] Bonnet, R., Ecole d'Eté, Matériaux composites à hautes performances CNRS, (1979) -
Bonnet, R., Phil. Mag. A, vol 43, N°5, p: 1165 -1187, (1981a)
- [30] Bonnet, R., Acta. Met., Vol 29, p: 437-445, (1981b)
- [31] Bonnet, R., Phil. Mag. A, vol 51, N°1, p: 51-58, (1985)
- [32] Bonnet R., Loubradou M., Phy. Rev. B, Vol. 49, Num 20, (1994)
- [33] Madani, S., Thèse de Magistère de l'université de Batna, (1997).
- [34] J.G. Belk, D.W. Pashley, B.A. Joyce, and T.S. Jones, Phy. Rev Lett. B. Vol .58, 1619-16201 (1998)
- [35] Bonnet, R., Phil. Mag. A, vol 44, p: 625-642, (1981c)
- [36] Bonnet, R., Un bicristal mince déformé sous l'effet d'un réseau bipériodique de dislocations de misfit (1999)
- [37] M. Brioua, R. Benbouda, S. Madani and L. Adami, Journal of Colloid and Interface Science 282 (2005) 120-123
- [38] Bonnet, R., Champ élastique d'une dislocation rectiligne parallèle aux interfaces : une nouvelle approche (2003)
- [39] Fabien Leroy, Thèse de Doctorat de l'université Joseph Fourier - Grenoble 1, (2003).
- [40] X. Wang, E. Pan, and J.D. Albercht, Anisotropic elasticity of multilayered crystals deformed by a biperiodic network of misfit dislocations. (2007)
- [41] E. Clouet, L. Ventelon et F. Willaime, Dislocation et relaxation du Coeur en théorie élastique : l'exemple de la dislocation vis dans le fer. (2008)
- [42] J.D. Eshelby, W.T. Read et W. Shockley, Acta Metall. 1, 251 (1953)
- [43] A.N. Stroh, Philos. Mag. 3, 625 (1958)
- [44] A.N. Stroh, J. Math. Phys. 41, 77 (1962)
- [45] V.G. Myagkov, O.A. Bayukov, L.E. Bykova, G.N. Bondarenko, The γ -Fe formation in epitaxial Cu(001)/Fe(001) thin films by the solid-state synthesis : Structural and magnetic features., Journal of Magnetism and Magnetic Materials 321, 2260-2264, (2009)
- [46] J.W. Matthews, Accommodation of misfit across the interface between single-crystal films of various face-centred cubic metals, Phil. Mag. 13 1207-1221, (1966).
- [47] W.A. Jesser, J.W. Matthews, Evidence for pseudomorphic growth of iron on copper, Phil. Mag. 15 1097-1106, (1967).

[48-a] W.A. Jesser, J.W. Matthews, Pseudomorphic deposits of cobalt on copper, *Phil. Mag.*, 17, 461-473, (1968).

[48-b] W.A. Jesser, J.W. Matthews, Pseudomorphic deposits of chromium on nickel, *Phil.Mag.*, 17, 475-479, (1968).

[48-c] W.A. Jesser, J.W. Matthews, Pseudomorphic growth of iron on hot copper, *Phil. Mag.*, 17 , 595-602, (1968).

[49] Bonnet, R., *Phil. Mag. A*, vol 44, p: 625-642, (1981c).

Annexe

PROGRAMME ELABORE EN CODE MATHEMATICA

Annexe.

Programme élaboré par les codes Mathematica.

Plusieurs codes ont été écrit pour simuler les champs de déplacements et de contraintes tel que le langage FORTRAN. Dans notre travail l'outil principal a été MATHEMATICA, de l'éditeur Wolfram, qui est à la fois une encyclopédie de tous les résultats connus en mathématiques et un analyseur d'équations. La caractéristique la plus pratique de ce logiciel est sa capacité à manipuler formellement les équations.

Pour calculer les grandeurs élastiques du bilame mince, nous avons utilisé quelques conventions. Le vecteur de Burgers est défini par $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)$. Le calcul des champs élastiques pour un réseau unidirectionnel de dislocations coins se fait en choisissant le bon vecteur de Burgers. Les coefficients élastiques de la couche supérieure et de la couche inférieure sont différents.

Toute variable finissant par p ou + (respectivement n ou -) et associée à la couche supérieure (respectivement inférieure). L'épaisseur est notée par h^+ (respectivement h^-), le nombre d'harmonique est noté par Ω .