N° d'ordre 2004-10 *Année 2004*

THESE

présentée devant
l'**ECOLE CENTRALE DE LYON**

pour obtenir le grade de

DOCTEUR

spécialité : **GENIE MECANIQUE**
par

Neïla MOKNI
Ingénieur en Génie des Matériaux

Thèse en cotutelle avec l'Ecole Nationale d'Ingénieurs de Monastir (Tunisie)

RELAXATION DE COUCHES MINCES PRECONTRAINTES : ANALYSE MECANIQUE ET APPLICATIONS AU SUBSTRAT UNIVERSEL POUR L'EPITAXIE

Soutenue le **11 juin 2004** devant le jury d'examen :

MM.	**C. FĂCIU**	**Président**
	R. BILLARDON	**Rapporteur**
	P. DELOBELLE	**Rapporteur**
	F. SIDOROFF	**Directeur de thèse**
	A. DOGUI	**Directeur de thèse**
Mme.	**G. GRENET**	**Examinateur**
	A. DANESCU	**Examinateur**
	B. ELJANI	**Examinateur**

LABORATOIRE DE TRIBOLOGIE ET DYNAMIQUE DES SYSTEMES
ECOLE CENTRALE DE LYON
36, Avenue Guy de Collongue 69131 ECULLY CEDEX

LABORATOIRE DE GENIE MECANIQUE
ECOLE NATIONALE D'INGENIEURS DE MONASTIR
Avenue Ibn El Jazzar 5019 Monastir

Table des matières

Introduction **5**

1 Contraintes internes et relaxation élastique **11**

1.1 Intérêt des semi-conducteurs III-V et limites d'utilisation 11

1.2 Notion de substrat compliant et paramorphique 13

1.3 Réalisation technologique de substrat compliant et paramorphique . . 16

1.4 Conclusion 19

2 Aspects énergétiques de l'épitaxie **21**

2.1 Introduction 21

2.2 Présentation du modèle plaque 21

2.2.1 Hypothèses 21

2.2.2 États des déformations 22

2.2.3 État des contraintes 23

2.2.4 Loi de comportement 24

2.3 Relaxation dans un substrat paramorphique 26

2.3.1 Formulation du problème 26

2.3.2 État des contraintes 27

2.4 Relaxation verticale 30

2.4.1 État des contraintes et courbure 30

2.4.2 Répartition de l'énergie 32

2.5 Relaxation latérale 34

2.5.1 État des contraintes 34

2.5.2 Répartition de l'énergie 34

2.6 Conclusion 36

3 Un Modèle 2D visco-élastique **37**

3.1 Introduction . . . 37

3.2 Distribution des contraintes à l'interface . . . 37

3.3 Modèle viscoélastique de type *shear–lag* . . . 39

3.3.1 Comportement qualitatif des solutions . . . 42

3.3.2 Solution générale . . . 43

3.3.3 Analyse numérique . . . 46

3.4 Cinétique de désolidarisation et croissance du dépôt . . . 47

3.4.1 Solution du problème . . . 50

3.4.2 Analyse numérique . . . 51

3.5 Conclusion . . . 54

4 Instabilité d'une structure film mince précontraint sur une couche visqueuse : cas 2D **55**

4.1 Introduction . . . 55

4.2 Problème non linéaire et solution d'équilibre . . . 56

4.2.1 Écoulement du fluide visqueux : . . . 56

4.2.2 Déformation dans le film élastique . . . 60

4.2.3 Système couplé . . . 62

4.2.4 Analyse de stabilité linéaire . . . 63

4.3 Isotropie avec courbure . . . 65

4.3.1 Formulation . . . 65

4.3.2 Analyse de la stabilité . . . 66

4.4 Etude de la stabilité dans le cas anisotrope . . . 68

4.4.1 État des contraintes dans le film . . . 68

4.4.2 Equations dans le fluide . . . 72

4.4.3 Film mince et fluide couplés . . . 72

4.4.4 Analyse de la stabilité . . . 73

4.4.5 Applications numériques . . . 78

4.5 Conclusion . . . 84

5 Ondulation et anisotropie : cas 3D **87**

5.1 Introduction . . . 87

5.2 Perturbations 3D du film mince - cas isotrope 87
5.2.1 État des contraintes dans le fluide 88
5.2.2 Equations de von-Kàrmàn pour un film élastique isotrope . . . 90
5.2.3 Système couplé et solution d'équilibre 91
5.2.4 Stabilité linéaire - formulation 91
5.2.5 Analyse de la stabilité linéaire 93
5.3 Perturbations 3D du film mince - cas cubique 95
5.3.1 Equation anisotrope de von-Kàrmàn 95
5.3.2 Système couplé 95
5.3.3 Stabilité linéaire - formulation 96
5.3.4 Analyse de la stabilité linéaire 97
5.4 Prise en compte du glissement - aspects qualitatifs 101

Conclusions et perspectives **102**

Références bibliographiques **106**

Introduction

Les structures des semi-conducteurs à couches minces contraintes font l'objet depuis une dizaine d'années de recherches intensives, tant appliquées que fondamentales.

Ces composants sont élaborés à partir des techniques d'épitaxie qui permettent l'obtention de matériaux de très grande pureté présentant des propriétés électroniques et optiques proches de leurs performances idéales. Des applications ont été largement développées, d'une part, dans le domaine des circuits électroniques, et d'autre part, dans celui de l'opto-électronique avec des émetteurs, des modulateurs, des récepteurs de lumière...

Une caractéristique essentielle de ces matériaux est leur structure nonocristalline avec l'inconvénient de pouvoir *a priori* combiner des matériaux présentant des paramètres de maille identiques ou très voisins.

Le développement de tels matériaux se trouve limité par leur procédé de fabrication même. En effet, les technologies d'élaboration de ces matériaux (par exemple les étapes de gravure ou de dépôt de diélectriques) rendent la relaxation élastique des contraintes à leur périphérie inévitable. Celle-ci peut être suffisamment importante pour entraîner la création de défauts structuraux qui sont à l'origine d'une dégradation accélérée des propriétés des matériaux et des hétéro-structures constitutives de ces composants. En effet, lorsqu'on augmente l'épaisseur d'une couche, l'énergie élastique emmagasinée augmente jusqu'à atteindre des niveaux à partir desquels un phénomène de relaxation apparaît. Cette relaxation peut être élastique (pour une différence de maille supérieure à 2%) ou plastique (pour une différence de maille inférieure à 2%). Par conséquent, à partir d'une épaisseur critique du film, on atteint une valeur seuil correspondant à la formation de dislocations qui introduisent alors une densité de défauts d'interface rédhibitoire pour la qualité des structures et son application à l'électronique. La relaxation peut se traduire par l'apparition d'ondulations à la surface du film. La principale caractéristique de ce processus d'évolution peut être décrite suivant une analyse mécanique des phénomènes d'instabilité (Sridhar et al. 2001), (Yin et al. 2002a), (Huang and Suo 2002a) et (Jiang and He 2004).

La bonne qualité des structures hétéroépitaxiales nécessite que la couche épitaxiale soit plus mince qu'une épaisseur critique à partir de laquelle les dislocations

et les irrégularités de surface vont apparaître. Cependant, pour de nombreuses applications comme les détecteurs, les couches désaccordées en maille (totalement relaxées) plus épaisses que la hauteur critique sont désirées. De nombreux travaux sont donc menés pour comprendre les mécanismes de relaxation et d'obtenir des structures d'épaisseurs supérieurs à celles aujourd'hui crées sans voire diminuer leurs propriétés.

Cette thèse s'inscrit dans le cadre d'un projet Rhône-Alpes en collaboration avec le Laboratoire d'Electronique Opto-électronique et Microsystème (LEOM) de l'Ecole Centrale de Lyon et le Commisariat d'Energie Atomique (CEA) dont la thématique est opto-micro et nano-technologie.

L'objectif global du projet consiste au développement de nouveaux substrats permettant l'épitaxie en couches épaisses de matériaux de haute qualité optoélectronique désaccordées en maille sur un substrat hôte. Ces nouveaux substrats permettent ainsi de traiter des applications optoélectroniques et de réaliser des composants à hautes performances. L'idée est alors d'utiliser la **compliance élastique** du substrat en mettant en œuvre des approches théoriques et expérimentales appropriées.

Plus précisément, ce travail s'attache à faire le lien entre les études expérimentales des films minces de type III-V épitaxiés et les résultats issus de la modélisation de ces structures.

Nous nous intéressons à explorer :

1- la modélisation permettant de tenir compte des processus de relaxation élastique des contraintes à la périphérie des composants opto-électroniques,

2- l'aspect énergétique des mécanismes de relaxation élastique des contraintes dans des structures hétérogènes.

Ce mémoire est alors organisé de la façon suivante :

Le premier chapitre est consacré à l'état de l'art du phénomène de compliance et de la physique du problème. Nous abordons brièvement les procédés de fabrication des composants électroniques et les difficultés de croissance observées. Nous montrons particulièrement les spécificités et les limitations du substrat compliant. Enfin, une étude générale concernant la modélisation des phénomènes de compliance est citée.

Le deuxième chapitre, aborde le problème d'épitaxie du point de vue énergétique. Nous nous attachons essentiellement aux calculs des énergies dans des structures précontraintes. Nous distinguons deux types de relaxation, *la relaxation complète par courbure* et *la relaxation latérale par glissement.*

Le troisième chapitre propose un modèle monodimensionnel de type *shear lag* d'un film mince élastique précontraint avec une interface visqueuse. Ceci correspond à un procédé où le substrat est pré-désolidarisé.

Dans le quatrième chapitre, nous nous intéressons à l'étude d'une structure composée par un film élastique précontraint en compression, collé sur un fluide visqueux. Nous décrivons tout d'abord le modèle mécanique bidimensionnel utilisé par l'équipe de Suo (HUANG and SUO 2002b). Nous développons ensuite ce modèle dans le cas d'un matériau isotrope en tenant compte du terme de courbure. L'étude est ensuite étendue au cas des matériaux anisotropes. Nous montrons alors la dépendance de la longueur d'onde relative à l'instabilité du film, en fonction du rapport des épaisseurs des couches contraintes.

Nous démontrons que pour une couche précontrainte de type $In_{0.65}Ga_{0.35}As$ déposée sur un substrat d'InP par l'intermédiaire d'une interface visqueuse ("la cire"), nos résultats sont en accord avec l'expérience.

Enfin, le cinquième chapitre étend notre analyse à une modélisation tri-dimensionnelle. A cet effet, nous utilisons la théorie des plaques non linéaire de "Von-Karman" pour le film et la théorie de lubrification pour le fluide.

Chapitre 1

Contraintes internes et relaxation élastique

1.1 Intérêt des semi-conducteurs III-V et limites d'utilisation

L'hétéroépitaxie des films minces de matériaux semi-conducteurs sur des substrats monocristallins est une des techniques clés de la micro et opto-électronique. La plupart de ces composants sont fabriqués à partir d'hétérostructures d'alliages III-V épitaxiées sur des substrats de GaAs ou InP. L'épitaxie permet, en effet, l'obtention d'interfaces cristallographiques parfaites, chimiquement et électriquement abruptes à l'échelle atomique. Cependant, les technologies de réalisation des composants à semi-conducteurs sont confrontées à des problèmes liés au dépôt diélectrique et à la gravure, entraînant notamment la relaxation des contraintes à leur périphérie. Ceci a incité les chercheurs à étudier la relaxation des contraintes dans les structures épitaxées tant de point de vue fondamental que du point de vue expérimental.

Au cours d'une croissance épitaxiale, les couches parfaitement accordées en maille avec le substrat ont une qualité morphologique acceptable pour les applications en micro ou optoélectronique. Nous définissons par croissance pseudomorphique, la croissance d'une couche de matériau désaccordé en maille sur un matériau épais. En effet, une différence de paramètre de maille même très faible entre la couche et le substrat est suffisante pour provoquer, lors de la croissance cristalline, des contraintes mécaniques importantes. Elles conduisent à l'apparition de défauts diminuant considérablement les performances électroniques du composant. En conséquence, même si les alliages semi-conducteurs III-V peuvent potentiellement couvrir un très large domaine de longueurs d'onde, seuls d'étroits domaines de composition de ces alliages peuvent être exploités. Les autres domaines présentent un désaccord de maille trop fort vis-à-vis des substrats disponibles (Figure 1.1). Cependant, de tels matériaux permettraient de réaliser des composants opto-électroniques pouvant opérer dans la gamme de longueurs d'onde 1,7 - 2,7 μm, gamme qui présente de larges domaines d'applications industrielles. Le diagramme de la Figure 1.1 est très important car

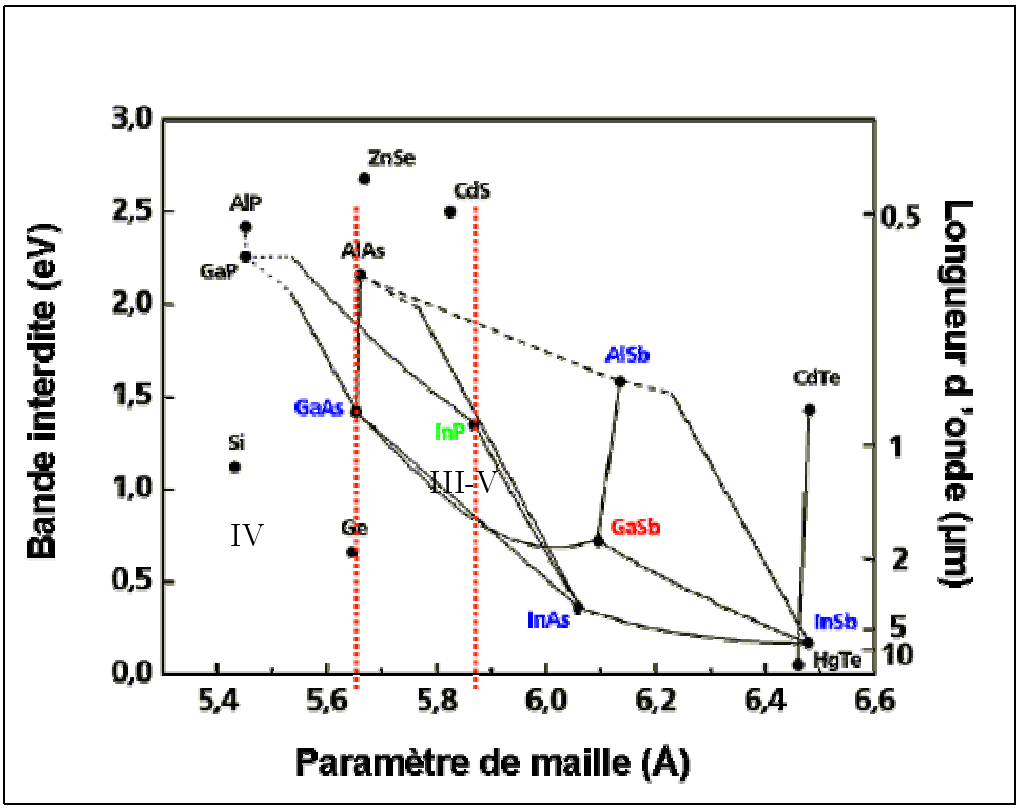

FIG. 1.1 – Charte donnant pour les semi-conducteurs III-V, les largeurs de bandes interdites et les longueurs d'onde associées.

il permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être déposé en couche mince, par épitaxie, sur un substrat binaire, comme GaAs ou InP. Les matériaux III-V offrent donc une grande variété de compositions permettant de modifier leurs propriétés électroniques.

Soit a le paramètre de maille du film à déposer et a_0 le paramètre de maille du substrat ; nous notons la prédéformation du film, (le désaccord de maille) $\varepsilon_0 = 1 - a/a_0$. Pour une couche fortement précontrainte ($\varepsilon_0 > 2\%$), épitaxiée sur un substrat standard, l'énergie élastique emmagasinée augmente avec l'épaisseur de la couche. Le substrat standard étant trop épais pour pouvoir se déformer de façon significative, la maille de la couche en croissance épitaxiale se conforme, dans le plan de surface, à la maille du substrat et se déforme élastiquement en conséquence dans la direction perpendiculaire. Le matériau étant contraint, ce désaccord de maille ne peut être supporté que pour une couche épitaxiée relativement mince (une dizaine de nanomètres pour la plupart des matériaux). Au-delà de l'épaisseur critique du film liée à la formation des dislocations, l'énergie élastique tend à se relaxer et cette relaxation peut s'effectuer élastiquement avec formation d'îlots comme le montre la Figure 1.2.

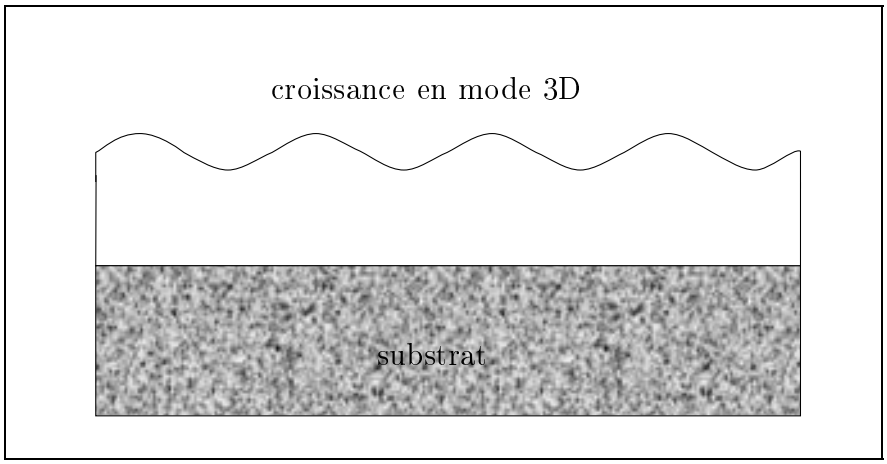

FIG. 1.2 – Relaxation élastique d'un matériau fortement contraint ($\varepsilon > 2\%$) par création d'îlots (mode de croissance 3D).

1.2 Notion de substrat compliant et paramorphique

Le concept de substrat compliant a été introduit ces dernières années par LO (1991) pour permettre de réaliser des couches désaccordées sans les défauts structuraux liés à la relaxation des contraintes créées au cours du processus de croissance. En effet, au cours d'une croissance pseudomorphique sur un substrat standard épais, toute l'énergie élastique sera emmagasinée par la couche épitaxiale. Si nous considérons maintenant un substrat très fin et déformable, l'énergie élastique sera plutôt répartie uniformément entre le substrat et la couche épitaxiale. Si l'épaisseur du substrat libre est inférieure à l'épaisseur critique de formation des dislocations, l'énergie élastique emmagasinée ne sera jamais suffisante pour créer des dislocations quelle que soit l'épaisseur de la couche épitaxiale.

Lors de sa croissance, la couche épitaxiale impose de plus en plus son paramètre de maille et le substrat doit adapter son paramètre de maille à celui de la couche. Pour mieux comprendre ceci, il suffit de considérer la couche épitaxiale comme un substrat et le substrat mince comme une couche épitaxiale. Par conséquent, tant que la couche épitaxiale est plus mince que l'épaisseur critique, il y aura pas de dislocations quelques soit l'épaisseur du substrat. Nous pouvons dire que les rôles du substrat et de la couche épitaxiale sont inversés. La réalisation pratique d'un tel substrat, c'est à dire d'une membrane très fine (épaisseur entre 10 et 50 nm) est difficile surtout pour des dimensions latérales importantes, en particulier, en raison de problèmes de courbure. La solution est donc de reporter le substrat compliant sur un substrat hôte dont la fonction sera de lui donner une tenue mécanique.

L'idée principale du "substrat compliant", est de constituer une fine couche germe monocristalline et de la reporter sur un substrat hôte par un procédé de collage comme présenté sur la Figure 1.3. L'obtention des matériaux épitaxiés relaxés et sans défauts peut se faire par déformation de la couche germe et donc par glissement de celle-ci sur le substrat hôte lorsqu'une couche épaisse désaccordée en

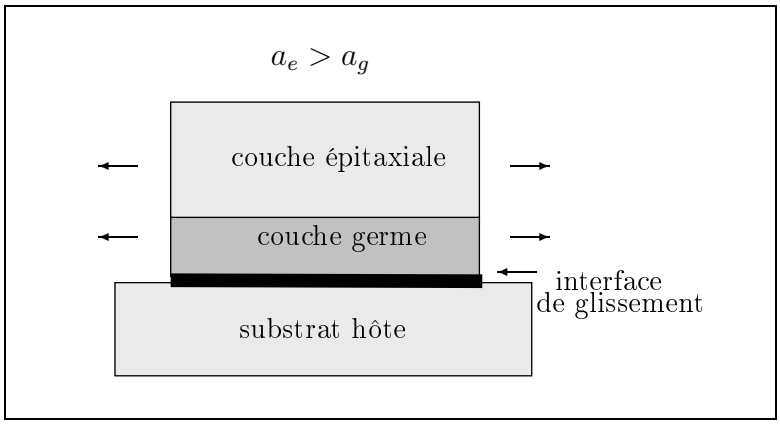

FIG. 1.3 – Principe général du substrat compliant.

maille était épitaxiée sur la couche germe. Pour que l'effet de compliance existe, il faut que les liaisons à l'interface "substrat compliant/substrat hôte" soient les plus faibles possibles pour permettre à la couche germe compliante de se déformer librement parallèlement au plan d'interface tout en interdisant la courbure de l'ensemble "couche/substrat compliant".

Un cas voisin est celui de substrats compliants relaxés ou paramorphiques. Le procédé "paramorphique" (BOUDAA 2003) consiste dans un premier temps à faire croître pseudomorphiquement une couche mince désaccordée sur un substrat standard, puis à la désolidariser de ce substrat de façon à permettre sa relaxation élastique complète avant sa re-déposition sur le substrat initial. L'interface membrane/substrat est alors suffisamment solide (après le recuit d'épitaxie) pour assurer la planeité et la tenue mécanique de l'ensemble. Une telle membrane re-déposée peut servir de germe à une nouvelle croissance épitaxiale de couches épaisses, réalisée en accord de maille.

Nous pouvons ainsi répertorier trois types de relaxation élastique pour une hétérostructure contrainte :

• **Relaxation de type pseudomorphique, glissement :** L'interface de collage entre le substrat hôte et le substrat compliant interdit toute courbure : elle assure une *solidarisation verticale* mais elle permet une *désolidarisation latérale* (Figure 1.4). La compliance élastique "pseudomorphique" se fait par glissement dans le plan d'interface avec le substrat hôte : l'énergie élastique emmagasinée dans la structure se relaxe par un processus de glissement sans courbure à partir des bords. Le rôle de l'interface permettant le glissement est très important. Il est difficile de trouver un collage bien adapté qui assurerait la désolidarisation latérale. Une solution à ce problème est de représenter l'interface par une couche visqueuse infiniment mince. Néanmoins, ce type de collage n'est pas sans inconvénients car il est difficile de trouver un matériau visqueux assurant une désolidarisation latérale idéale, compatible avec les contraintes technologiques imposées.

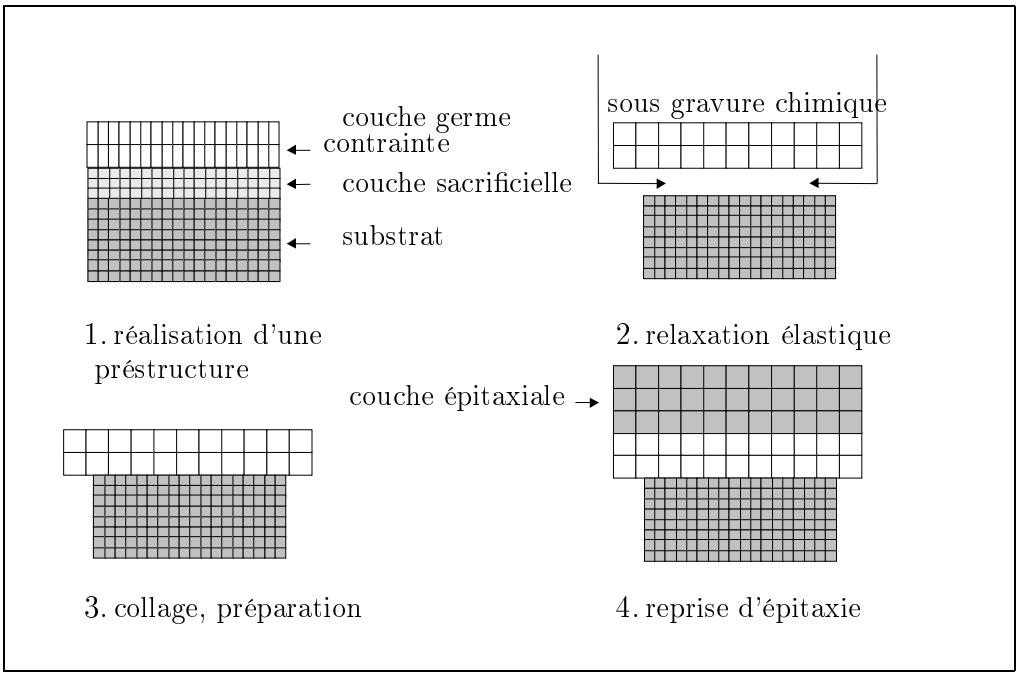

FIG. 1.4 – Principe de l'approche paramorphique pour la réalisation de couches désaccordées en maille sur un substrat d'InP (BOUDAA 2003).

• **Relaxation par ondulations :** Le collage de la couche germe sur un substrat hôte par l'intermédiaire d'une couche visqueuse épaisse peut aussi être envisagé. Cette couche devra être d'une nature compatible avec les techniques de croissance de matériaux cristallins pour l'optoélectronique. L'ensemble formé par la couche germe plus couche contrainte déposée peut alors se relaxer par des ondulations de la surface (Figure 1.5). Cependant, la relaxation par ondulations peut présenter des inconvénients majeurs. En fonction de leur amplitude et de leur longueur d'onde, elle peut conduire à une rugosification de surface de la couche épitaxiale en raison du champ de déformations non homogène qu'elle génère en surface du matériau. On cherchera dans ce cas à obtenir des ondulations de très grandes longueurs d'onde et de faible amplitude. Il convient de noter que dans ce cas le véritable substrat compliant n'est pas le film mince mais la couche épaisse de matériau visqueux (SRIDHAR et al. 2001).

• **Relaxation par courbure :** Une hétérostructure sur un matériau visqueux peut aussi se relaxer élastiquement par courbure (Figure 1.6) et ce type de relaxation élastique entre en compétition avec les phénomènes précédents. Ce phénomène est utilisé pour créer les structures nanométriques (HUANG and SUO 2002b). En pratique, un système contraint combine les modes de relaxation élastique par glissement aux bords de l'échantillon, celui par ondulations en son milieu et celui par courbure de l'échantillon dans son ensemble.

Nous examinons de près ces types de relaxation dans les chapitres suivants.

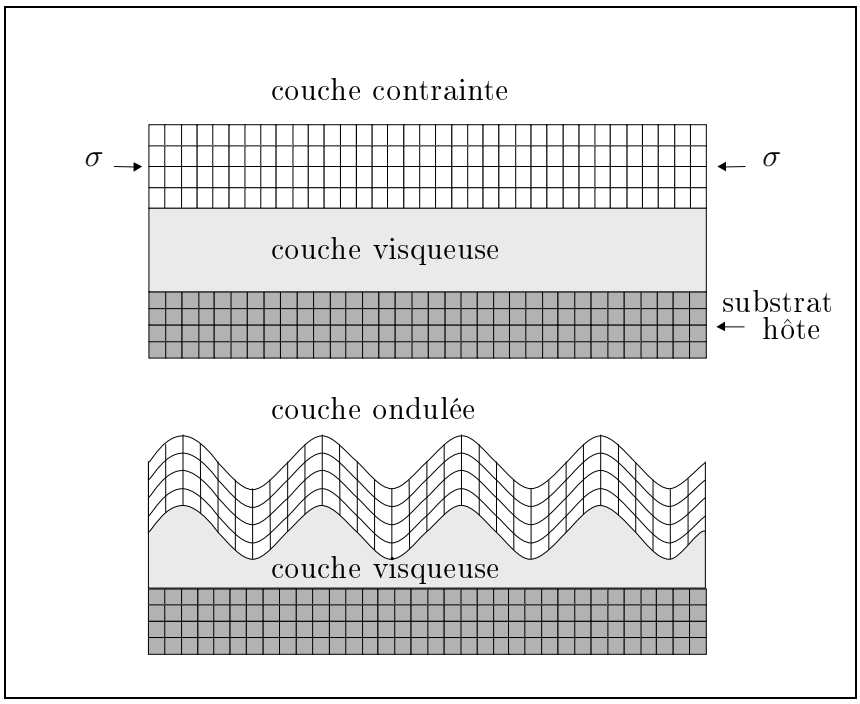

FIG. 1.5 – Principe de la relaxation élastique par ondulation.

1.3 Réalisation technologique de substrat compliant et paramorphique

Nous rappelons que l'idéal serait de fabriquer une membrane de matériau III-V monocristallin :

- sans aucun défaut et fine (à l'échelle nanométrique),
- de grandes dimensions latérales (à l'échelle millimétrique),
- plane à l'échelle macroscopique (pas de courbure ou d'ondulations) et à l'échelle microscopique (non rugueuse),
- libre de toutes contraintes mécaniques sur ses deux faces, chimiquement et morphologiquement compatible avec une reprise d'épitaxie sur une de ses faces,
- mais néanmoins mécaniquement manipulable avec les outils technologiques usuels.

La réalisation d'un substrat avec un tel cahier des charges est utopique. Dès lors, toutes les approches vont viser un compromis entre ce cahier des charges et les réalisations technologiques possibles.

Nous présentons dans cette partie quelques approches technologiques de la littérature reflétant quelques difficultés pratiques rencontrées lors de la réalisation d'un tel substrat compliant.

Dans l'approche proposée par LO (1991), le substrat compliant doit être à la fois mince et libre de toute contrainte mécanique sur ses deux faces pour pouvoir facilement se déformer et adapter son paramètre de maille à celui de la couche en

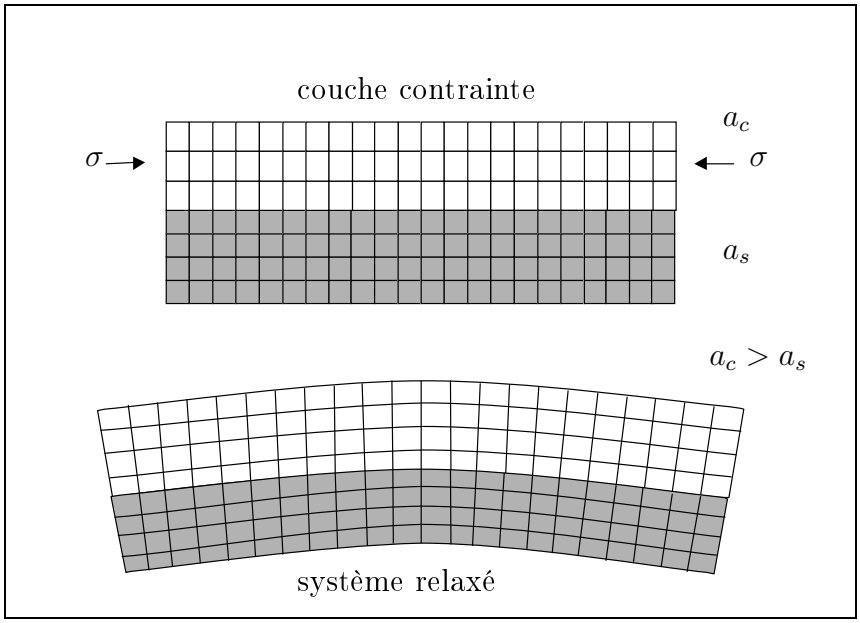

FIG. 1.6 – Principe de la relaxation élastique des contraintes par courbure. Une structure est composée d'un substrat fin et d'un film déposé en compression.

croissance. Cette approche s'est rapidement heurtée à des difficultés d'ordre pratique liées à la manipulation mécanique de ces objets. En effet, il est extrêmement difficile de préparer et surtout de manipuler une telle membrane (grandes dimensions).

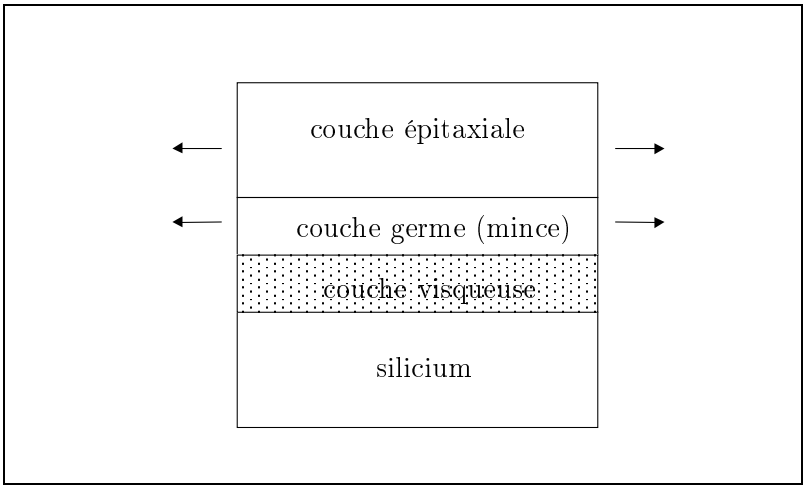

FIG. 1.7 – Substrat compliant sur une couche amorphe visqueuse.

Dans la même approche, ce concept a été développé en introduisant une interface de verre (HOBART 2000). L'idée était de constituer une fine couche germe et la reporter sur un substrat hôte par un procédé de collage comme nous présentons sur la Figure 1.7. La grande difficulté reste de pouvoir préparer des couches qui pourraient fluer à des températures compatibles avec l'épitaxie. En effet, la couche amorphe qui joue le rôle d'une simple interface de collage entre le substrat hôte et la couche

germe, peut jouer un rôle actif dans le processus de relaxation en particulier si elle présente un caractère visqueux aux températures usuelles de reprise de croissance. L'idéal serait que cette interface en matériau visqueux interdise (ou réduise) toute courbure, c'est à dire qu'elle assure une solidarisation verticale tout en permettant une désolidarisation latérale.

Par ailleurs, HANSEN et al. (1998) ont collé une couche de 10 nm de GaAs par l'intermédiaire d'une couche visqueuse de BPSG sur un substrat hôte de GaAs en utilisant les techniques de collage moléculaire. Des reprises de 2 μm d'$In_{0.4}Ga_{0.6}As$ ont été ensuite réalisées. Les auteurs ont observé une rugosité de la surface de la couche épitaxiale et ont attribué ce phénomène à l'état initial de la couche germe (en fait, à l'oxyde très inhomogène sur la surface de GaAs).

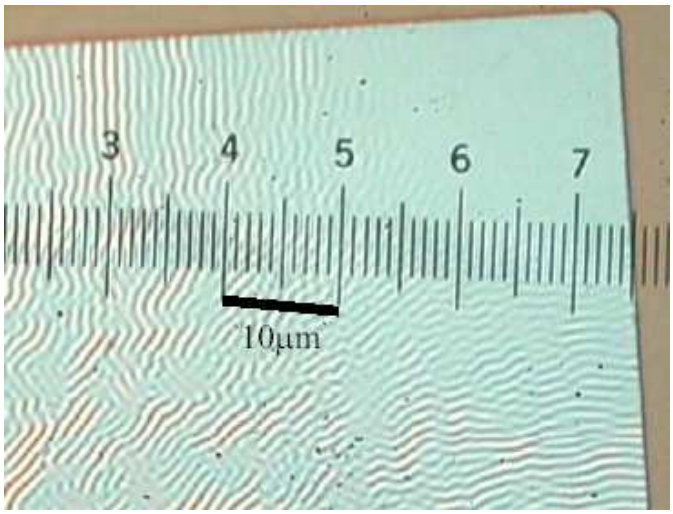

FIG. 1.8 – Image optique d'une couche de $Si_{0.7}Ge_{0.3}$ déposée sur une couche de BPSG de 200 nm (Yin2002).

HOBART (2000), HUANG et al. (2001) ont fait des recuits de bicouches de $Si_{0.7}Ge_{0.3}$ (30 nm)/Si (4 nm), déposés sur la couche visqueuse de BPSG (200 nm). Les structures collées via une couche de SiO_2 de 120 nm ont subi le même traitement thermique afin de comparer le comportement des couches contraintes déposées sur la couche visqueuse et sur une couche amorphe qui ne flue pas. Les analyses AFM ont démontré que la morphologie de la couche contrainte sur la couche de SiO_2 ne change pas après le recuit, par contre, la couche contrainte déposée sur la couche de BPSG ondule. Ces ondulations sont plutôt orientées suivant les directions cristallographiques 100, avec une périodicité et une amplitude respectivement de 1 μm et 70 - 80 nm.

Dans le cas de petits mesas (30 μm x 30 μm), les ondulations sont beaucoup moins hautes, de l'ordre de 0.1 nm. Un mesa contraint peut donc se relaxer (85% de la contrainte initiale après le recuit à 800°C) par déplacement de ses bords libres, si ses dimensions ne sont pas trop importantes et la viscosité de la couche visqueuse n'est pas trop élevée.

Yin et al. (2002a) ont poursuivi ces études. Ils ont démontré que la relaxation par glissement sans ondulations est possible uniquement pour de petites dimensions (40 μm x 40 μm). Dans le cas de plus grandes surfaces, il y a une compétition entre les deux modes de la relaxation (glissement et ondulations) comme nous pouvons le voir sur la Figure 1.8. La viscosité ne joue aucun rôle sur l'amplitude ou la périodicité des ondulations dans le cas de grandes surfaces.

Des procédés technologiques ont été développés sur des matériaux comme la cire Apiezon qui a une faible viscosité dans la gamme de température $20-50$°C (Kostrzewa 2003). L'effort essentiel a consisté à développer des procédés technologiques de préparation de surface pour réussir des collages directs de structure III-V sur du SiO_2 et du BPSG. Il apparaît rapidement que la cire n'est pas forcément le matériau modèle idéal. En effet, elle est assez visqueuse à température ambiante pour que la relaxation puisse se produire au cours de la gravure chimique.

Par ailleurs, pour une reprise d'épitaxie InP/InP, Kostrzewa (2003) a noté que pour des échantillons collés via une fine couche de silice de 30 Å, le phénomène de bullage à haute température persiste. Il est en revanche très atténué pour un collage SiO_2/SiO_2. Ceci montre l'importance de l'épaisseur de la couche de SiO_2 pour un bon collage de la membrane d'InP. Il est cependant possible de jouer sur la viscosité et l'épaisseur de la couche visqueuse pour trouver un compromis favorisant le glissement ou tout au moins des grandes longueurs d'ondes et de faibles amplitudes d'ondulation.

1.4 Conclusion

Les travaux expérimentaux précédemment cités ont soulevé plusieurs problèmes technologiques qui résident dans la réalisation des substrats compliants. Le principal problème est le choix du matériau visqueux approprié compte tenu des conditions liées aux températures d'épitaxie qui soit compatible avec les contraintes technologiques. La maîtrise progressive de structures à base de verre BPSG a ensuite souligné que la relaxation élastique ne procédait pas uniquement par glissement mais aussi par des ondulations avec une longueur d'onde beaucoup plus faible que la taille caractéristique de la structure habituelle.

Au cours de notre étude, nous analyserons les phénomènes génériques qui peuvent apparaître lors de la relaxation latérale d'une couche pré-contrainte sur un substrat visqueux.

Enfin, dans le cadre d'une collaboration avec l'équipe du Laboratoire d'Électronique Optoélectronique et Microsystème de l'École Centrale de Lyon, nous nous sommes intéressés à l'étude des mécanismes de relaxation des couches épitaxiales et du rôle des contraintes liées à l'hétéroépitaxie sur l'évolution structurale des couches. Il s'agit d'associer les phénomènes physiques et les matériaux utilisés à des lois mécaniques capables de les expliquer.

Chapitre 2

Aspects énergétiques de l'épitaxie

2.1 Introduction

L'objectif de cette partie est d'étudier deux processus de relaxation élastique rencontrés au cours de la croissance d'une hétéro-structure contrainte sur un substrat rigide, à savoir la relaxation par courbure et celle par glissement.

Dans un premier temps, nous allons présenter un modèle plaque basé sur la théorie de Love-Kirchhoff. Ensuite, nous allons modéliser la structure dépôt précurseur suivant cette théorie. Dans une deuxième partie, une étude énergétique est effectuée afin d'étudier la faisabilité, les avantages et les inconvénients des deux mécanismes de relaxation lors d'une croissance d'une hétérostructure contrainte sur un substrat rigide.

2.2 Présentation du modèle plaque

Les hypothèses de la théorie générale des plaques sont, dans un schéma de premiers degrés, associées aux noms de Reissner-Mindlin et de Love-Kirchhoff. La théorie de Love-Kirchhoff Timoshenko and Woinowsky-Krieger (1959) est historiquement l'une des premières approches bi-dimensionnelles de la flexion des plaques élastiques. Cette théorie est basée sur l'hypothèse de conservation des normales en négligeant ainsi le cisaillement transverse.

2.2.1 Hypothèses

La théorie générale des plaques utilise les hypothèses suivantes :

1. les contraintes normales σ_{zz} sont négligeables dans le volume de la plaque par rapport aux autres composantes de la contrainte.

2. l'épaisseur h de la plaque est petite relativement aux autres dimensions de la plaque.

3. les points situés sur une normale à la surface moyenne avant déformation restent sur cette normale au cours de la déformation. Ceci revient à négliger l'effet de cisaillement transverse.

4. la déformation transversale est nulle (pas de variation d'épaisseur).

2.2.2 États des déformations

Dans ce cadre, nous avons considéré une plaque rectangulaire mince de longueur l, de largeur b et d'épaisseur h, définie dans son système d'axes (x, y, z).

Le champ de déplacement d'un point $\mathrm{M}(x, y, z)$ s'écrit en fonction des déplacements de la surface moyenne de la plaque, en effet,

$$u_M(x,y,z) = u(x,y) - z\frac{\partial w}{\partial x}, \tag{2.1}$$

$$v_M(x,y,z) = v(x,y) - z\frac{\partial w}{\partial y}, \tag{2.2}$$

$$w_M(x,y,z) = w(x,y). \tag{2.3}$$

La déformée de la normale au plan moyen (oxy) est alors un segment de droite normal à la déformée du plan moyen. Le champ des déformations s'écrit :

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x} - z\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}, \qquad \varepsilon_{xy} = (\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}) - 2z\frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y}, \tag{2.4}$$

$$\varepsilon_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y} - z\frac{\partial^2 w}{\partial y^2}, \qquad \varepsilon_{xz} = 0, \tag{2.5}$$

$$\varepsilon_{zz} = 0, \qquad \varepsilon_{yz} = 0. \tag{2.6}$$

Par ailleurs, nous pouvons écrire le champ des déformations comme étant la superposition :

- <u>des déformations de la membrane</u> :

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \left\{ \begin{array}{c} \hat{\varepsilon}_{xx} \\ \\ \hat{\varepsilon}_{yy} \\ \\ \hat{\varepsilon}_{xy} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \dfrac{\partial u}{\partial x} \\ \\ \dfrac{\partial v}{\partial y} \\ \\ \dfrac{\partial u}{\partial y} + \dfrac{\partial v}{\partial x} \end{array} \right\}, \tag{2.7}$$

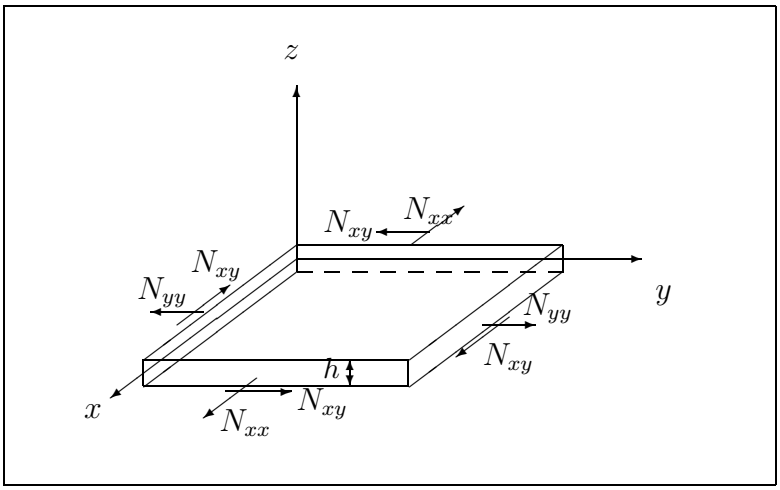

FIG. 2.1 – Schématisation des résultantes en membrane.

qui sont exprimées en fonction des déplacements u et v des points situés dans le plan (oxy).

- <u>des déformations en flexion et en torsion</u> :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_f = z \left\{ \begin{array}{c} \kappa_{xx} \\ \kappa_{yy} \\ \kappa_{xy} \end{array} \right\} = z \left\{ \begin{array}{c} -\dfrac{\partial^2 w}{\partial x^2} \\ -\dfrac{\partial^2 w}{\partial y^2} \\ -2\dfrac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} \end{array} \right\}, \tag{2.8}$$

tel que $\kappa_{xx}, \kappa_{yy}, \kappa_{xy}$ sont les courbures de la plaque. Enfin, nous avons

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}_f = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + z\boldsymbol{\kappa} \tag{2.9}$$

2.2.3 État des contraintes

Les résultantes des forces et des moments par unité de longueur qui agissent sur la plaque peuvent être obtenues en intégrant les contraintes dans la plaque à travers son épaisseur, nous obtenons :

$$\left\{ \begin{array}{c} N_{xx} \\ N_{yy} \\ N_{xy} \end{array} \right\} = \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \left\{ \begin{array}{c} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \tau_{xy} \end{array} \right\} dz; \tag{2.10}$$

tel que N_{xx}, N_{yy}, N_{xy} sont les résultantes par unité de longueur, respectivement des contraintes normales (suivant x et suivant y) et de la contrainte de cisaillement dans le plan (x, y). Elles sont schématisées sur la Figure 2.1.

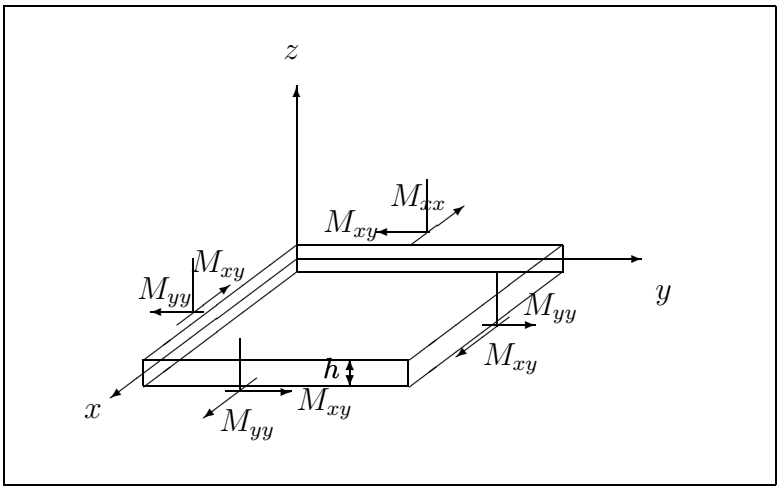

FIG. 2.2 – Schématisation des moments de flexion et de torsion.

Les moments de flexion M_{xx} et M_{yy} et de torsion M_{xy} sont schématisés sur la Figure 2.2 et sont exprimés par,

$$\begin{Bmatrix} M_{xx} \\ M_{yy} \\ M_{xy} \end{Bmatrix} = \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \begin{Bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \tau_{xy} \end{Bmatrix} z \, dz \tag{2.11}$$

2.2.4 Loi de comportement

Nous nous intéressons au cours du développement au cas des matériaux anisotropes. Si nous prenons le cas des matériaux orthotropes, la matrice d'élasticité s'écrit :

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \tau_{xz} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{xy} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xy} \end{Bmatrix} \tag{2.12}$$

Étant en contraintes planes, nous introduisons d'autres coefficients Q_{ij}, appelés constantes de rigidité réduites, et sont exprimés par

$$Q_{ij} = C_{ij} - \frac{C_{i3}C_{3j}}{C_{33}}. \tag{2.13}$$

Par ailleurs, la relation contrainte-déformation peut être réduite dans ce cas en

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \tau_{xy} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & 0 \\ Q_{12} & Q_{22} & 0 \\ 0 & 0 & Q_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \end{Bmatrix}. \tag{2.14}$$

Dans le cas des matériaux à symétrie cubique, la loi de Hooke s'écrit suivant les formes matricielles en réduisant les constantes de rigidité en C_{11}, C_{12} et C_{44} tel que,

$$\left\{\begin{array}{c}\sigma_{xx}\\ \sigma_{yy}\\ \sigma_{zz}\\ \tau_{xz}\\ \tau_{yz}\\ \tau_{xy}\end{array}\right\} = \left[\begin{array}{cccccc} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0\\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0\\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44}\end{array}\right] \left\{\begin{array}{c}\varepsilon_{xx}\\ \varepsilon_{yy}\\ \varepsilon_{zz}\\ \varepsilon_{xz}\\ \varepsilon_{yz}\\ \varepsilon_{xy}\end{array}\right\}. \tag{2.15}$$

Enfin, la relation contrainte-déformation peut être réduite simplement en

$$\left\{\begin{array}{c}\sigma_{xx}\\ \\ \sigma_{yy}\\ \\ \tau_{xy}\end{array}\right\} = \left[\begin{array}{ccc} Q_{11} & Q_{12} & 0\\ \\ Q_{12} & Q_{11} & 0\\ \\ 0 & 0 & Q_{44}\end{array}\right] \left\{\begin{array}{c}\varepsilon_{xx}\\ \\ \varepsilon_{yy}\\ \\ \varepsilon_{xy}\end{array}\right\}. \tag{2.16}$$

Plus précisément, en développant cette relation nous obtenons :

$$\left\{\begin{array}{c}\sigma_{xx}\\ \\ \sigma_{yy}\\ \\ \tau_{xy}\end{array}\right\} = \overbrace{\left[\begin{array}{ccc} C_{11}-\dfrac{C_{12}^2}{C_{11}} & C_{12}-\dfrac{C_{12}^2}{C_{11}} & 0\\ \\ C_{12}-\dfrac{C_{12}^2}{C_{11}} & C_{11}-\dfrac{C_{12}^2}{C_{11}} & 0\\ \\ 0 & 0 & C_{44}\end{array}\right]}^{[Q_{ij}]} \left[\left\{\begin{array}{c}\hat{\varepsilon}_{xx}\\ \\ \hat{\varepsilon}_{yy}\\ \\ \hat{\varepsilon}_{xy}\end{array}\right\} + z\left\{\begin{array}{c}\kappa_{xx}\\ \\ \kappa_{yy}\\ \\ \kappa_{xy}\end{array}\right\}\right]. \tag{2.17}$$

Dans ce cas, les résultantes des forces par unité de longueur s'écrivent :

$$\left\{\begin{array}{c}N_{xx}\\ N_{yy}\\ N_{xy}\end{array}\right\} = \left[\int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \boldsymbol{Q}\, dz\right]\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + \left[\int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} z\,\boldsymbol{Q}\, dz\right]\boldsymbol{\kappa}, \tag{2.18}$$

et les résultantes des moments par unité de longueur :

$$\left\{\begin{array}{c}M_{xx}\\ M_{yy}\\ M_{xy}\end{array}\right\} = \left[\int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \boldsymbol{Q}\, z\, dz\right]\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + \left[\int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \boldsymbol{Q}\, z^2\, dz\right]\boldsymbol{\kappa}. \tag{2.19}$$

Les vecteurs forces et moments résultants peuvent être assemblés sous la forme :

$$\left\{\begin{array}{c}\boldsymbol{N}\\ \boldsymbol{M}\end{array}\right\} = \left[\begin{array}{cc}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{B} & \boldsymbol{D}\end{array}\right]\left\{\begin{array}{c}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\\ \boldsymbol{\kappa}\end{array}\right\} \tag{2.20}$$

en introduisant les matrices :

$$\boldsymbol{A}_{ij} = \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \left[\boldsymbol{Q}_{ij}\right]\, dz, \qquad \boldsymbol{B}_{ij} = \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \left[\boldsymbol{Q}_{ij}\right] z\, dz \tag{2.21}$$

$$\boldsymbol{D}_{ij} = \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \left[\boldsymbol{Q}_{ij}\right] z^2\, dz. \tag{2.22}$$

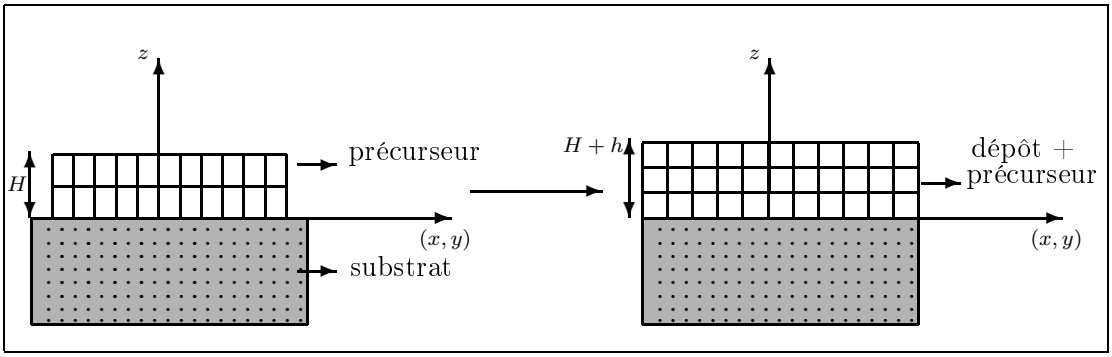

FIG. 2.3 – Illustration de la relaxation durant la croissance du film sur un support compliant ; initialement, sous contrainte, le précurseur est déposé sur un substrat rigide. Ensuite, nous faisons croître un dépôt sur le précurseur de paramètre de maille différent.

2.3 Relaxation dans un substrat paramorphique

Au cours de notre étude, nous nous intéressons aux matériaux monocristallins (silicium, composés III/V etc...). Notre objectif est de réaliser un substrat de maille fixée quelconque sans limitation d'épaisseur afin d'être utilisé dans des dépôts ultérieurs.

Le problème qui se pose est que ces substrats n'existent que pour certains matériaux particuliers de type InP, Silicium, donc avec une maille imposée. La croissance d'une couche avec désaccord de maille par rapport à ce substrat sera limitée par la hauteur critique à partir de laquelle l'énergie élastique induite par ce désaccord de maille se relaxera par :

- instabilité de Grinfeld ;
- dislocation de surface...

Nous nous proposons dans ce qui suit d'évaluer la répartition de l'énergie élastique dans la structure pré-contrainte.

2.3.1 Formulation du problème

A la suite de l'idée de base précédemment développée, nous considérons une plaque rectangulaire, définie dans son système d'axes (x, y, z) comme le montre la Figure 2.3. Les deux couches sont modélisées suivant la théorie des plaques de Love-Kirchhoff en bi-couches.

En effet, le principe de ces substrats consiste à partir d'une couche mince "le précurseur" d'épaisseur H et de maille a_0 en accord ou désaccord de maille avec le substrat. Ensuite, nous faisons croître un dépôt de maille a_1 et d'épaisseur h comme présenté sur la Figure 2.4.

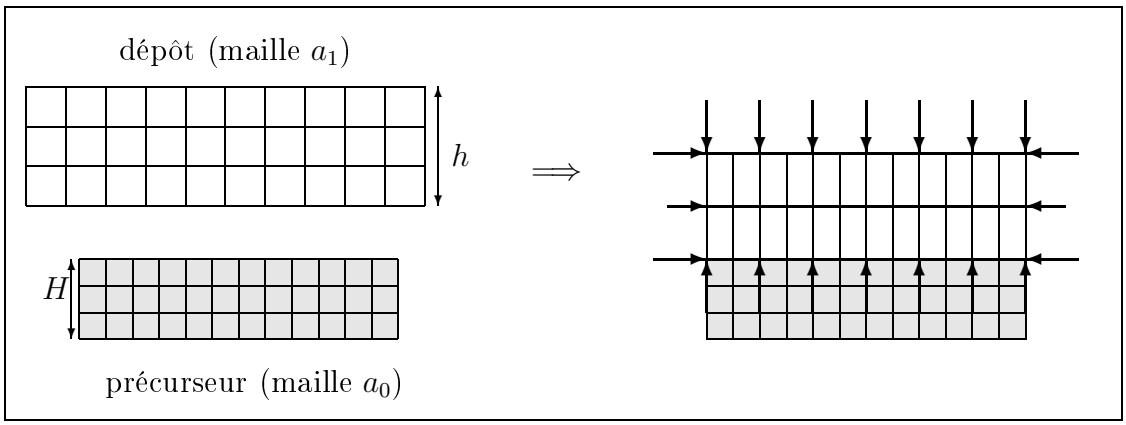

FIG. 2.4 – Configuration de référence : les constituants sont ramenés à la maille du précurseur.

Pour ce faire, nous convenons de prendre comme configuration de référence, la configuration fictive obtenue en supposant tous les constituants ramenés à la maille a_0 du substrat pris comme référence.

Les lois de comportement du précurseur et du dépôt sont respectivement,

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{cases} \mathbf{C}^p\boldsymbol{\varepsilon}, & \text{dans le précurseur,} \quad (0 < z < H); \\ \\ \mathbf{C}^d(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^0) & \text{dans le dépôt} \quad (H < z < H + h), \end{cases} \tag{2.23}$$

avec $\boldsymbol{\varepsilon}^0$ la déformation de la maille naturelle du dépôt par rapport à la maille du précurseur. En général, elle est définie par $\boldsymbol{\varepsilon}^0 = (1 - \dfrac{a_1}{a_0})\mathbf{I}$, où a_1 et a_0 représentent respectivement le paramètre de maille du dépôt et du précurseur et où C_{ij} sont les éléments du tenseur d'élasticité.

2.3.2 État des contraintes

Nous nous plaçons dans le cadre d'une modélisation bi-dimensionnelle, en contraintes planes, dans le plan (xz), défini par la direction de croissance z, et une direction x dans le plan. Cette hypothèse de contraintes planes conduit à des tenseurs de la forme suivante

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & 0 \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.24}$$

Nous nous intéressons au cas cubique. D'après la loi de Hooke, nous avons

$$\sigma_{xx} = C_{11}\varepsilon_{xx} + C_{12}(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}). \tag{2.25}$$

Par ailleurs, la condition de contraintes planes implique, dans le précurseur

$$\sigma_{zz} = C^p_{11}\varepsilon_{zz} + C^p_{12}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) = 0, \tag{2.26}$$

ce qui conduit à

$$\varepsilon_{zz} = -\frac{C_{12}^p}{C_{11}^p}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}), \tag{2.27}$$

et tenant compte des déformations résiduelles, nous aurons dans le dépôt à la suite de cette condition

$$\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{zz}^0 - \frac{C_{12}^d}{C_{11}^d}((\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{xx}^0) + (\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{yy}^0)). \tag{2.28}$$

Si nous prenons un désaccord de maille comme

$$\boldsymbol{\varepsilon}^0 = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & -2\varepsilon\dfrac{C_{12}^d}{C_{11}^d} \end{pmatrix},$$

l'équation (2.28) devient

$$\varepsilon_{zz} = -\frac{C_{12}^d}{C_{11}^d}(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xx}). \tag{2.29}$$

Substituant maintenant les équations (2.27) et (2.29) dans (2.25), les contraintes dans le précurseur seront alors

$$\sigma_{xx} = C_{11}^p\, \varepsilon_{xx} + C_{12}^p \left[\varepsilon_{yy} - \frac{C_{12}^p}{C_{11}^p}(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xx})\right], \tag{2.30}$$

et dans le dépôt

$$\sigma_{xx} = C_{11}^d\, \varepsilon_{xx} + C_{12}^d \left[\varepsilon_{yy} - \frac{C_{12}^d}{C_{11}^d}(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xx})\right]. \tag{2.31}$$

Désormais, nous adoptons la notation σ^p, pour désigner les contraintes dans le précurseur et σ^d pour les contraintes dans le dépôt.

A partir de l'équation précédente, les contraintes dans le précurseur peuvent s'exprimer par :

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{xx}^p \\ \sigma_{yy}^p \\ \tau_{xy}^p \end{Bmatrix} = \overbrace{\begin{bmatrix} C_{11}^p - \dfrac{(C_{12}^p)^2}{C_{11}^p} & C_{12}^p - \dfrac{(C_{12}^p)^2}{C_{11}^p} & 0 \\ C_{12}^p - \dfrac{(C_{12}^p)^2}{C_{11}^p} & C_{11}^p - \dfrac{(C_{12}^p)^2}{C_{11}^p} & 0 \\ 0 & 0 & C_{44}^p \end{bmatrix}}^{[Q_{ij}]_p} \left[\begin{Bmatrix} \hat{\varepsilon}_{xx} \\ \hat{\varepsilon}_{yy} \\ \hat{\varepsilon}_{xy} \end{Bmatrix} + z \begin{Bmatrix} \kappa_{xx} \\ \kappa_{yy} \\ \kappa_{xy} \end{Bmatrix} \right] \tag{2.32}$$

et dans le dépôt

$$\left\{\begin{array}{c}\sigma^d_{xx}\\ \sigma^d_{yy}\\ \tau^d_{xy}\end{array}\right\} = \overbrace{\left[\begin{array}{ccc} C^d_{11}-\frac{(C^d_{12})^2}{C^d_{11}} & C^d_{12}-\frac{(C^d_{12})^2}{C^d_{11}} & 0\\ C^d_{12}-\frac{(C^d_{12})^2}{C^d_{11}} & C^d_{11}-\frac{(C^d_{12})^2}{C^d_{11}} & 0\\ 0 & 0 & C^d_{44}\end{array}\right]}^{[Q_{ij}]_d} \left[\left\{\begin{array}{c}\hat{\varepsilon}_{xx}-\varepsilon^0\\ \hat{\varepsilon}_{yy}-\varepsilon^0\\ \hat{\varepsilon}_{xy}\end{array}\right\} + z\left\{\begin{array}{c}\kappa_{xx}\\ \kappa_{yy}\\ \kappa_{xy}\end{array}\right\}\right] \quad (2.33)$$

Les résultantes des forces et des moments qui agissent sur la plaque peuvent être obtenues en intégrant les contraintes dans la plaque à travers son épaisseur, nous obtenons :

$$\left\{\begin{array}{c}N_{xx}\\ N_{yy}\\ N_{xy}\end{array}\right\} = \int_{-\frac{H+h}{2}}^{\frac{H-h}{2}} \left\{\begin{array}{c}\sigma^p_{xx}\\ \sigma^p_{yy}\\ \tau^p_{xy}\end{array}\right\} dz + \int_{\frac{H-h}{2}}^{\frac{H+h}{2}} \left\{\begin{array}{c}\sigma^d_{xx}\\ \sigma^d_{yy}\\ \tau^d_{xy}\end{array}\right\} dz. \quad (2.34)$$

N_{xx}, N_{yy}, N_{xy} sont les résultantes par unité de longueur, respectivement des contraintes normales et de contrainte de cisaillement (Figure 2.1). De même, M_{xx} et M_{yy} sont les moments de flexion et M_{xy} le moment de torsion par unité de longueur tel que :

$$\left\{\begin{array}{c}M_{xx}\\ M_{yy}\\ M_{xy}\end{array}\right\} = \int_{-\frac{H+h}{2}}^{\frac{H-h}{2}} \left\{\begin{array}{c}\sigma^p_{xx}\\ \sigma^p_{yy}\\ \tau^p_{xy}\end{array}\right\} z dz + \int_{\frac{H-h}{2}}^{\frac{H+h}{2}} \left\{\begin{array}{c}\sigma^d_{xx}\\ \sigma^d_{yy}\\ \tau^d_{xy}\end{array}\right\} z dz \quad (2.35)$$

Sachant que $\hat{\varepsilon}_{xx}, \hat{\varepsilon}_{yy}, \hat{\varepsilon}_{xy}, \kappa_{xx}, \kappa_{yy}$et κ_{xy} sont indépendants de z, les vecteurs forces et moments résultant peuvent être assemblés sous la forme :

$$\left\{\begin{array}{c}\boldsymbol{N}\\ \boldsymbol{M}\end{array}\right\} = \left[\begin{array}{cc}\boldsymbol{A}^d+\boldsymbol{A}^p & \boldsymbol{B}^d+\boldsymbol{B}^p\\ \boldsymbol{B}^d+\boldsymbol{B}^p & \boldsymbol{D}^d+\boldsymbol{D}^p\end{array}\right] \left\{\begin{array}{c}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\\ \boldsymbol{\kappa}\end{array}\right\} - \left\{\begin{array}{c}\boldsymbol{A}^d\\ 0\end{array}\right\}\boldsymbol{\varepsilon}^0, \quad (2.36)$$

en introduisant les matrices :

$$\begin{array}{ll} \boldsymbol{A}^p_{ij} = \left[\boldsymbol{Q}_{ij}\right]_p H, & \boldsymbol{A}^d_{ij} = \left[\boldsymbol{Q}_{ij}\right]_d h,\\ \boldsymbol{B}^p_{ij} = -\frac{1}{2}\left[\boldsymbol{Q}_{ij}\right]_p hH, & \boldsymbol{B}^d_{ij} = \frac{1}{2}\left[\boldsymbol{Q}_{ij}\right]_d hH,\\ \boldsymbol{D}^p_{ij} = \frac{1}{12}\left[\boldsymbol{Q}_{ij}\right]_p (3Hh^2+H^3), & \boldsymbol{D}^d_{ij} = \frac{1}{12}\left[\boldsymbol{Q}_{ij}\right]_d (h^3+3hH^2). \end{array} \quad (2.37)$$

Afin de faire croître des dépôts sans limitation d'épaisseur, le principal problème à résoudre est de désolidariser le précurseur du substrat. Deux approches sont alors envisageables :

- **La désolidarisation complète** (Relaxation verticale). Dans ce cas la solution est déterminée en fixant les résultantes des forces et des moments soient nulles :

$$\boldsymbol{N} = 0, \qquad \boldsymbol{M} = 0; \quad (2.38)$$

- **La désolidarisation latérale**. Dans ce cas les résultantes des forces et la courbure s'annulent en donnant la solution

$$\boldsymbol{N} = 0, \qquad \boldsymbol{\kappa} = 0. \quad (2.39)$$

2.4 Relaxation verticale

2.4.1 État des contraintes et courbure

Dans le cas d'une désolidarisation complète, les bords latéraux de la plaque sont libres de contraintes. Toutefois, les conditions de bords libres $\boldsymbol{\sigma} = 0$ ne peuvent pas être vérifiées localement en tout point et ne le seront que globalement c'est-à-dire nous aurons : $\boldsymbol{N} = 0$ et $\boldsymbol{M} = 0$. Ces deux conditions nous permettent de déterminer $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ et $\boldsymbol{\kappa}$ puis par conséquent la solution complète.

Implicitement, la condition N_{xy} est vérifiée, et par symétrie les conditions $N_{xx} = 0$ et $N_{yy} = 0$ sont identiques. D'après les équations (2.36) et (2.37) nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{N} &= (\boldsymbol{A}^p + \boldsymbol{A}^d)\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + (\boldsymbol{B}^d + \boldsymbol{B}^p)\boldsymbol{\kappa} - \boldsymbol{A}^d\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathbf{0}} \\ \boldsymbol{M} &= (\boldsymbol{B}^d + \boldsymbol{B}^p)\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + (\boldsymbol{D}^d + \boldsymbol{D}^p)\boldsymbol{\kappa} - \boldsymbol{B}^d\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathbf{0}} \end{aligned} \tag{2.40}$$

Si nous adoptons la notation α_p et α_d pour désigner respectivement le précurseur et le dépôt pour l'expression de

$$\alpha = C_{11} + C_{12} - 2\frac{C_{12}^2}{C_{11}}, \tag{2.41}$$

nous déduisons ainsi l'expression de N_{xx} en fonction de α_p et α_d. En effet,

$$N_{xx} = (\alpha_p H + \alpha_d h)\hat{\varepsilon}_{xx} + \frac{1}{2}hH(\alpha_d - \alpha_p)\kappa_{xx} - \alpha_d h\varepsilon. \tag{2.42}$$

D'autre part, l'expression du moment M_{xx} s'écrit,

$$M_{xx} = \frac{hH}{2}\left((\alpha_d - \alpha_p)\hat{\varepsilon}_{xx} - \alpha_d\varepsilon\right) + \left(\frac{H^3 + 3Hh^2}{12}\alpha_p + \frac{3hH^2 + h^3}{12}\alpha_d\right)\kappa. \tag{2.43}$$

La résolution des deux équations $N_{xx} = 0$ et $M_{xx} = 0$ revient à la résolution du système suivant :

$$\begin{cases} N_{xx} = (\alpha_p H + \alpha_d h)\hat{\varepsilon}_{xx} + \frac{1}{2}hH(\alpha_d - \alpha_p)\kappa_{xx} - \alpha_d h\varepsilon = 0. \\ \\ M_{xx} = \frac{hH}{2}\left((\alpha_d - \alpha_p)\hat{\varepsilon}_{xx} - \alpha_d\varepsilon\right) + \left(\frac{H^3+3Hh^2}{12}\alpha_p + \frac{3hH^2+h^3}{12}\alpha_d\right)\kappa = 0 \end{cases} \tag{2.44}$$

Nous obtenons alors $\hat{\varepsilon}_{xx}$ et κ tel que :

$$\kappa = \frac{6\alpha_d\,\alpha_p\;(H+h)\,Hh}{{\alpha_d}^2\,h^4 + (4\,H^3h + 4Hh^3 + 6h^2H^2)\alpha_p\,\alpha_d + {\alpha_p}^2\,H^4}\varepsilon \tag{2.45}$$

$$\hat{\varepsilon}_{xx} = \frac{(\alpha_d\,h^3 + (3\,Hh^2 + 3\,hH^2 + H^3)\,\alpha_p)\,\alpha_d\,h}{4hH\left((h+H)^2 - hH\right)\alpha_p\,\alpha_d + (\alpha_d\,h^2 + \alpha_p\,H^2)^2}\varepsilon. \tag{2.46}$$

Si nous posons $\hat{\alpha} = \dfrac{\alpha_d}{\alpha_p}$ et $x = \dfrac{h}{H}$, nous obtenons alors :

$$\kappa = \frac{6\,\hat{\alpha}\,x\,(1+x)}{H(1+\hat{\alpha}^2\,x^4+2\,\hat{\alpha}\,x\,(2+3\,x+2\,x^2))}\varepsilon; \tag{2.47}$$

Nous nous proposons de tracer le graphe relatif à cette équation. En effet, dans le cas des matériaux isotropes, les coefficients d'élasticité C_{ij} s'écrivent

$$C_{11} = \frac{(1-\nu)E}{(1+\nu)(1-2\nu)}, \quad C_{12} = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}, \quad C_{44} = \frac{E}{(1+\nu)}. \tag{2.48}$$

Supposons dans un premier temps que le dépôt et le précurseur ont les mêmes propriétés élastiques c'est-à-dire, $\alpha_p = \alpha_d$. Ils ne différent ainsi que par leur désaccord de maille : $\varepsilon = 0$ dans le précurseur, et $\varepsilon = \varepsilon^0$ dans le dépôt.

Par conséquent, la courbure κ et la déformation $\hat{\varepsilon}$ se simplifient respectivement en

$$\kappa = 6\,\frac{x\varepsilon}{H(1+x)^3}, \quad \hat{\varepsilon} = \frac{\varepsilon\,x}{1+x}. \tag{2.49}$$

Nous remarquons d'après la Figure 2.5 que la courbure passe par un maximum et décroît vite en fonction du rapport h/H. En effet, nous distinguons trois cas :

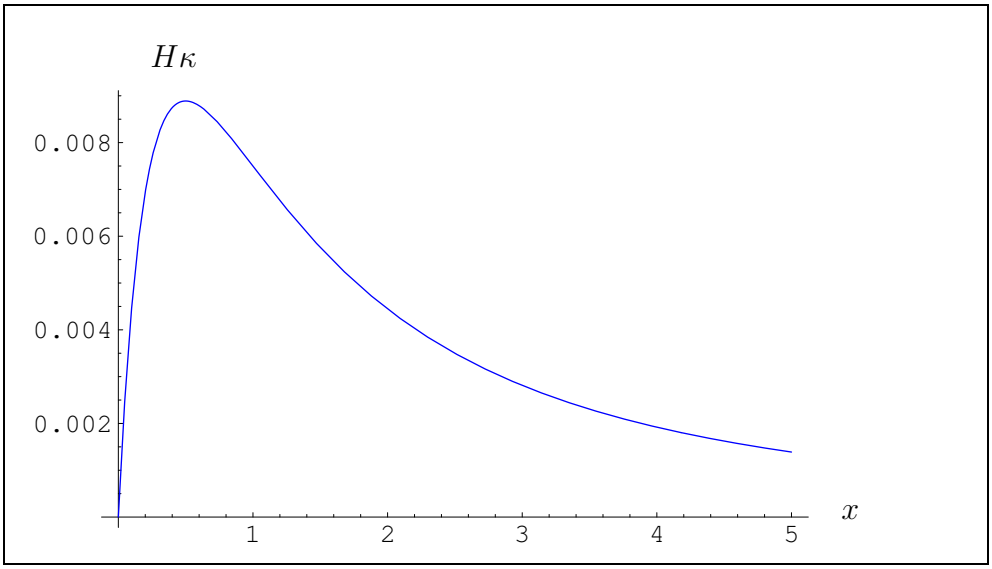

FIG. 2.5 – La courbure κ pour un matériau InGaAS avec une pré-déformation de 1%.

1 si $h \gg H$ technologiquement, cette solution n'est pas acceptable, du fait de la très faible épaisseur du précurseur et de l'impossibilité d'assurer au dépôt une tenue mécanique suffisante.

2 si $h \sim H$, κ est élevée, l'ensemble film/ précurseur se courbe pour permettre la relaxation des contraintes induites lors de la croissance du dépôt.

3 si $h \ll H$, la courbure κ s'annule et dans ce cas le dépôt va se comporter comme le précurseur et le précurseur comme une couche épitaxiale et l'énergie dans l'ensemble est réduite.

La déformation de la membrane est donnée par,

$$\hat{\varepsilon}_{xx} = \frac{\hat{\alpha}\,\varepsilon\,x\,(1+3\,x+3\,x^2+\hat{\alpha}\,x^2)}{1+\hat{\alpha}^2x^4+2\,\hat{\alpha}\,x\,(2+3\,x+2\,x^2)}. \tag{2.50}$$

2.4.2 Répartition de l'énergie

L'énergie élastique totale est donnée par :

$$W = \frac{1}{2}\left[\int \sigma_{ij}\varepsilon_{ij}dv + \int \sigma_{ij}\varepsilon_{ij}dv\right] \tag{2.51}$$

ainsi l'énergie élastique stockée par unité de surface dans le précurseur s'écrit comme :

$$\frac{W_p}{L^2} = \frac{1}{2}\int_0^H \left[\sigma^p_{xx}\varepsilon_{xx} + \sigma^p_{yy}\varepsilon_{yy}\right] dz = \alpha_p \int_0^H (\hat{\varepsilon}+\kappa z)^2 dz. \tag{2.52}$$

L'énergie dans le précurseur donnée en fonction de x et $\hat{\varepsilon}$ par

$$\frac{W_p}{L^2} = \hat{\alpha}\,\varepsilon^2\,H\,\alpha_p\,x\,(\frac{1-2\hat{\alpha}\,x\,(3+6\,x+2\,x^2)}{(1+\hat{\alpha}^2\,x^4+2\,\hat{\alpha}\,x\,(2+3\,x+2\,x^2))^2} \tag{2.53}$$

$$+\frac{\hat{\alpha}^2\,x^2\,(9+36\,x+51\,x^2+30\,x^3+7\,x^4)}{(1+\hat{\alpha}^2\,x^4+2\,\hat{\alpha}\,x\,(2+3\,x+2\,x^2))^2})$$

De même l'énergie dans le dépôt est

$$\frac{W_d}{L^2} = \frac{1}{2}\int_H^{h+H} \left[\sigma^d_x(\varepsilon_{xx}-\varepsilon) + \sigma^d_y(\varepsilon_{yy}-\varepsilon)\right] dz = \alpha_d \int_H^{h+H} (\hat{\varepsilon}-\varepsilon+\kappa z)^2 dz,$$

elle est équivalente à

$$\frac{W_d}{L^2} = \hat{\alpha}^2\,\varepsilon^2 H\alpha_p\,x^2\,(\frac{19+54\,x+63\,x^2+4\,(9+2\,\hat{\alpha})\,x^2}{(1+\hat{\alpha}^2\,x^4+2\,\hat{\alpha}\,x\,(2+3\,x+2\,x^2))^2} \tag{2.54}$$

$$+\frac{3\,(3+4\,\hat{\alpha})\,x^4+6\hat{\alpha}x^5+\hat{\alpha}^3x^6}{(1+\hat{\alpha}^2\,x^4+2\,\hat{\alpha}\,x\,(2+3\,x+2\,x^2))^2})$$

L'énergie totale s'écrit alors

$$\frac{W_T}{L^2} = \frac{W_d}{L^2} + \frac{W_p}{L^2}.$$

Si nous prenons les mêmes constantes élastiques dans le dépôt et dans le précurseur c'est-à-dire $\alpha_p = \alpha_d$, l'énergie élastique répartie respectivement dans le précurseur, le dépôt et l'énergie totale se simplifient en :

$$W_d/(L^2 H \alpha_p \varepsilon^2) = \frac{x(1 - 8x + 12x^2 + 16x^3 + 7x^4)}{(1+x)^6}, \tag{2.55}$$

$$W_p/(L^2 H \alpha_p \varepsilon^2) = \frac{x^2(19 + 16x + 12x^2 + 4x^3 + x^4)}{(1+x)^6} \tag{2.56}$$

$$W_T/(L^2 H \alpha_p \varepsilon^2) = \frac{x(1 + 8x + x^2)}{(1+x)^3}, \tag{2.57}$$

Nous pouvons tracer les courbes qui présentent l'évolution de l'énergie élastique en fonction du rapport x (Figure. 2.6).

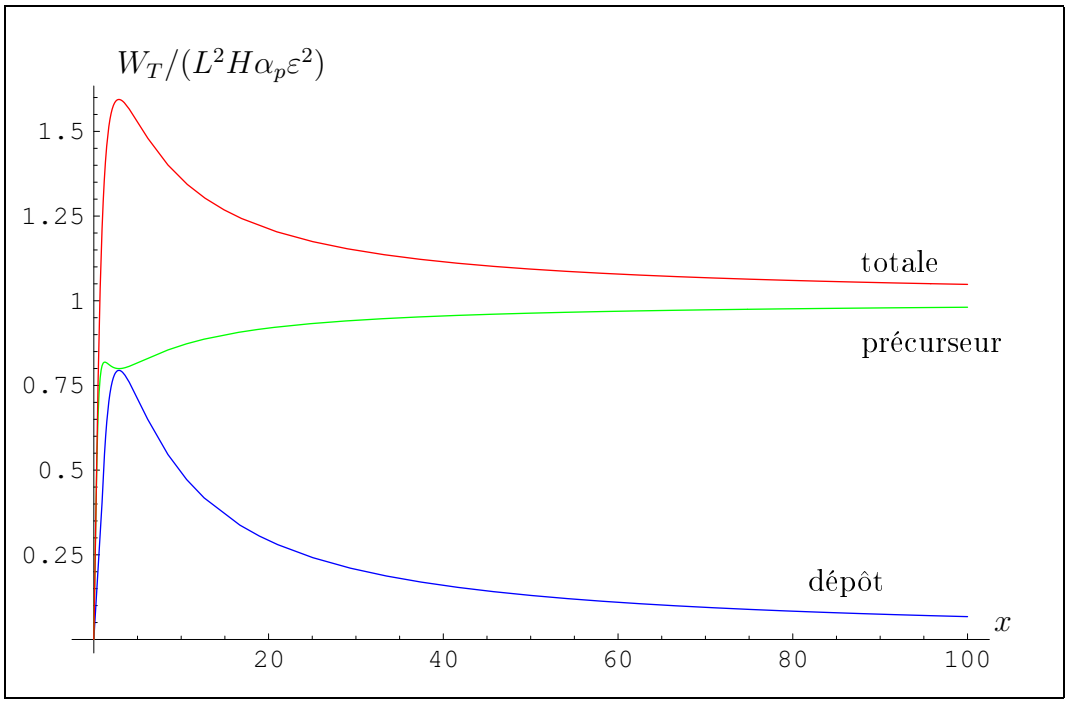

FIG. 2.6 – Evolution de l'énergie (adimensionnelle) en fonction du rapport h/H sous l'hypothèse de la désolidarisation complète.

Cette solution est technologiquement impossible. En effet, pour une épaisseur de dépôt égale à celle du précurseur, la courbure est maximale, ce qui empêche la croissance du dépôt.

2.5 Relaxation latérale

Si une technologie quelconque permet la désolidarisation complète du précurseur, et donc la relaxation complète des contraintes élastiques dans le précurseur lors d'une croissance ultérieure, le désaccord de maille entre le précurseur et le dépôt s'accompagnerait d'une courbure.

Afin d'éviter ce phénomène, un compromis est alors **la relaxation par le bord**, ou **désolidarisation latérale**. Ceci consiste à obtenir une relaxation élastique par une déformation latérale et qui sera implicitement accompagnée d'une déformation verticale du précurseur.

2.5.1 État des contraintes

Supposons maintenant que le film relaxe, non par courbure, mais par glissement à l'interface entre le film mince et le substrat avec un processus de désolidarisation latérale. Ce processus interdit les déplacements verticaux et donc la courbure. Les conditions précédentes exprimées dans le cas de la désolidarisation complète seront remplacées par $N_{xy} = 0$ et $\kappa_{xy} = 0$. L'absence de la courbure conduit à une solution homogène soit : $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \hat{\varepsilon}_{xx}$.

Pour les matériaux cubiques, la loi de comportement élastique est du type :

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = C_{11}\varepsilon_{xx} + C_{12}(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \qquad \sigma_{xy} = C_{44}\varepsilon_{xy},$$

et les relations similaires obtenues par permutation (ou éventuellement avec déformation résiduelle dans le cas du dépôt). Enfin nous aurons

$$\sigma = \alpha_{d,p}\ \varepsilon_{xx} = \alpha_{d,p}\ \hat{\varepsilon}_{xx}. \tag{2.58}$$

La solution des équations $N_{xy} = 0$ et $\kappa_{xy} = 0$ sera alors exprimée comme

$$N_{xx} = N_{yy} = N = \alpha_p \int_{-\frac{h+H}{2}}^{\frac{H-h}{2}} \hat{\varepsilon}_{xx}\, dz + \alpha_d \int_{\frac{H-h}{2}}^{\frac{h+H}{2}} (\hat{\varepsilon}_{xx} - \varepsilon)\, dz = 0.$$

$$\Rightarrow \hat{\varepsilon}_{xx} = \frac{h\varepsilon\alpha_d}{\alpha_p H + \alpha_d h}$$

2.5.2 Répartition de l'énergie

Le calcul analytique de l'énergie élastique par unité de surface nous ramène dans le précurseur à :

$$\frac{W_p}{L^2} = \alpha_p \int_0^H \hat{\varepsilon}_{xx}^2 dz = \alpha_p H(\frac{h\varepsilon\alpha_d}{\alpha_p H + \alpha_d h})^2 = \alpha_p H(\frac{x\varepsilon\alpha_d}{\alpha_p + \alpha_d x})^2 \tag{2.59}$$

alors que celle dans le dépôt, a la forme

$$\frac{W_d}{L^2} = \alpha_d \int_H^{h+H} (\hat{\varepsilon}_{xx} - \varepsilon)^2 dz = \alpha_d h (\frac{h\varepsilon\alpha_d}{\alpha_p H + \alpha_d h} - \varepsilon)^2 = \alpha_d x H (\frac{x\varepsilon\alpha_d}{\alpha_p + \alpha_d x} - \varepsilon)^2. \quad (2.60)$$

L'énergie totale par unité de surface est

$$\frac{W_T}{L^2} = \frac{\alpha_p \alpha_d \varepsilon^2 H h}{\alpha_p H + \alpha_d h} = \frac{\alpha_p \alpha_d \varepsilon^2 H x}{\alpha_p + \alpha_d x} \quad (2.61)$$

Nous présentons le cas des matériaux isotropes en considérant les mêmes coefficients d'élasticité dans les deux couches tel que $\alpha_p = \alpha_d = E/(1-\nu)$.

Les courbes obtenues sur la Figure 2.7 montrent l'évolution de l'énergie par unité de surface pour un alliage de $In_{0.65}Ga_{0.35}As$ (maille 5.95 Å) sur $InAs_{0.35}P_{0.65}$ (maille 5.90 Å) et donc pour une différence de maille de 0.8% en compression, en fonction du rapport h/H. L'épaisseur du précurseur est de 50 Å, et $\varepsilon = 10^{-2}$.

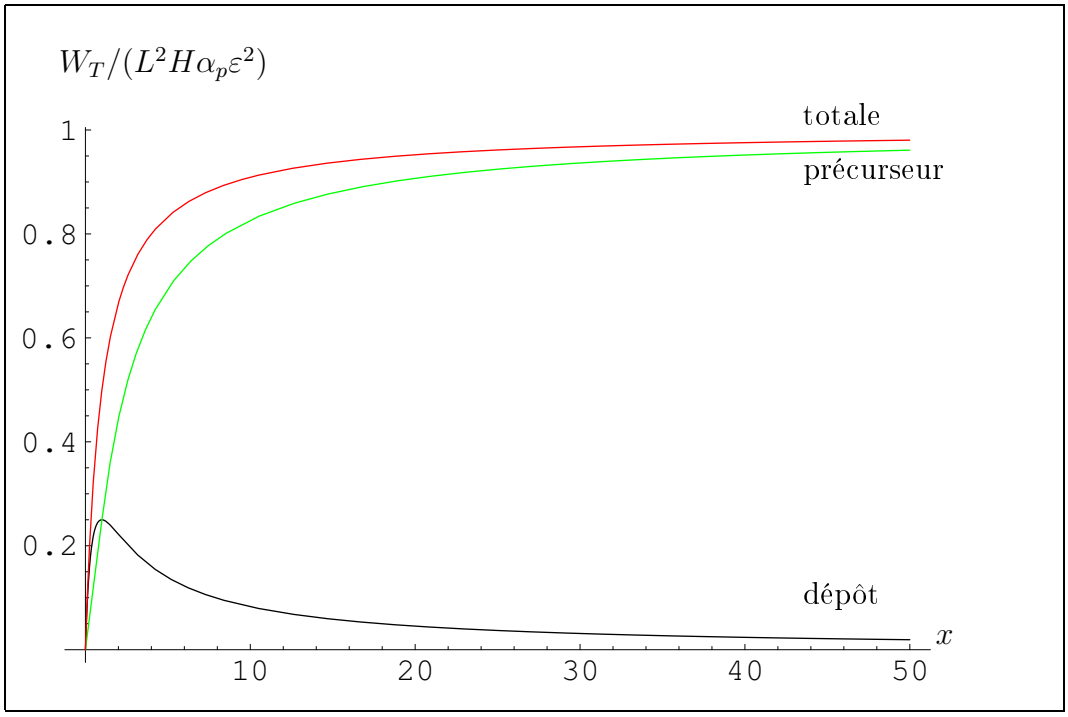

FIG. 2.7 – Variation de l'énergie adimensionnelle en fonction du rapport h/H sous l'hypothèse de la relaxation latérale.

Nous constatons que pour H fixe, et h/H grand, l'énergie dans le dépôt (par unité de surface) tend à s'annuler, et passe par un maximum où l'énergie accumulée dans le dépôt est maximale. On remarque bien que, si cette hauteur maximale est assez petite, la surface ne se dégrade pas et l'énergie élastique dans le dépôt est limitée grâce à la désolidarisation latérale et tend à s'annuler en augmentant l'épaisseur du dépôt.

2.6 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons étudié deux processus de relaxation élastique, celui par courbure et celui par glissement dans le cas des matériaux anisotropes. Nous avons calculé l'énergie élastique emmagasinée dans la structure contrainte au cours de la croissance épitaxiale. L'énergie doit en se relaxant permettre *un processus de glissement sans courbure à partir des bords.*

Le principe est le suivant : aux bords d'une structure contrainte, l'énergie élastique emmagasinée peut se relaxer partiellement sur une profondeur que nous estimons. Dans cette zone, les contraintes normales décroissent jusqu'à s'annuler aux bords (conditions de bords libres) mais dans le même temps, la contrainte de cisaillement nulle loin des bords croit pour atteindre son maximum près des bords. Cette contrainte de cisaillement va provoquer le glissement des bords de la membrane sur le substrat hôte.

Une telle désolidarisation latérale permet une répartition de l'énergie élastique de contrainte entre un substrat compliant et une couche désaccordée. En effet, en dessous d'une épaisseur critique, la couche emmagasine plus d'énergie élastique que le substrat. Mais au delà de cette épaisseur critique, c'est ce dernier qui supporte la plus grande partie de cette énergie élastique, la couche désaccordée tendant peu à peu à retrouver un état de relaxation complète. Si cette "épaisseur critique" correspond à une énergie élastique inférieure à celle du seuil d'apparition des dislocations ou du mode de croissance tridimentionnel, la croissance de la couche pourra se poursuivre infiniment. Nous obtenons alors les mêmes avantages qu'une désolidarisation totale (membrane libre) tout en interdisant la courbure. Cette désolidarisation latérale dans une réalisation parfaite aura :

- une rigidité verticale infinie interdisant la courbure et assurant la tenue mécanique du système

- une souplesse tangentielle infinie.

Chapitre 3

Un Modèle 2D visco-élastique

3.1 Introduction

Afin d'éviter le phénomène de courbure qui accompagne la croissance d'un dépôt en désaccord de maille avec le substrat, nous avons opté pour **la relaxation latérale**, qui consiste à obtenir une relaxation élastique par une déformation latérale, et qui sera implicitement accompagnée d'une déformation verticale du précurseur. Dans ce contexte, nous envisageons la modélisation du comportement de la structure substrat–précurseur–dépôt selon deux voies.

La première voie fait l'objet de la première partie de ce chapitre. Elle consiste en effet en un *couplage solide élastique – solide visqueux* avec la prise en compte d'un volume représentatif. Le comportement du précurseur est purement élastique et le phénomène peut être considéré comme quasi-statique. La répartition initiale des contraintes dans les deux milieux sera celle issue d'un calcul par éléments finis, d'un contact entre deux milieux élastiques.

La deuxième voie faisant l'objet de la deuxième partie consiste en l'étude d'un modèle simplifié pour un solide élastique (le précurseur) avec une interface (précurseur/substrat) qui permet le fluage. Compte tenu de la faible épaisseur de la membrane et de la couche de collage, les propriétés visqueuses de la couche de collage sont modélisées comme des propriétés d'interface.

Nous présentons enfin quelques essais numériques qui confirment nos prédictions théoriques concernant le comportement des solutions.

3.2 Distribution des contraintes à l'interface

L'hypothèse de la relaxation latérale étudiée dans le chapitre précédent dépend de la rhéologie du couple interface-substrat. En effet, lors d'un déplacement latéral du précurseur à l'interface de collage, la contrainte tangentielle σ_{xz} joue un rôle primor-

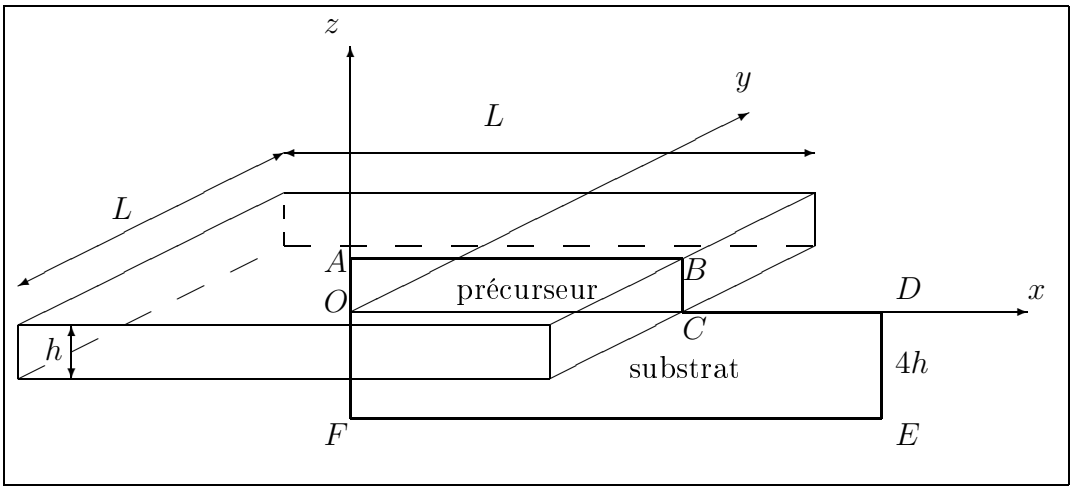

FIG. 3.1 – Membrane *précurseur* sur un substrat élastique ; le domaine $ABCDEF$ est celui pris en compte dans le calcul par éléments finis.

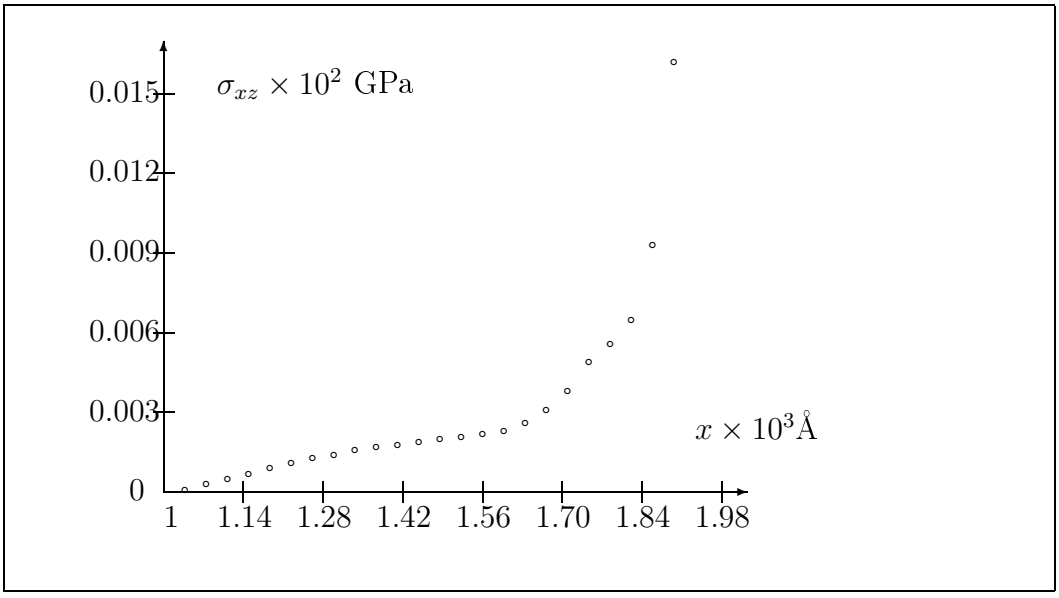

FIG. 3.2 – Evolution de la contrainte de cisaillement σ_{xz} dans le précurseur, à l'interface précurseur/substrat, dans une couche de 400 Å à $z = 0$ Å (sur OC).

dial. Loin des bords, cette contrainte est nulle (nous retrouvons l'état de contraintes planes obtenu lors de la croissance du précurseur) ; donc si la désolidarisation latérale se produit, elle sera activée d'abord sur le bord.

La Figure 3.2 représente les résultats d'un calcul par éléments finis sur un germe de $In_{0.65}Ga_{0.35}As$ déposé sur un substrat d'InP. La taille du domaine pris en compte est de $4000\,Å \times 2000\,Å$ et la taille du germe est $2000\ Å \times 400\,Å$. Le maillage du domaine comporte 9000 éléments, et le précurseur 500 éléments. La Figure 3.2 montre que la contrainte tangentielle varie d'une manière significative à l'interface (OC), engendrant le processus de glissement latéral.

Par conséquent, si la désolidarisation latérale se produit, alors elle se produira aux frontières, tant que le champ élastique dans le film est suffisamment homogène.

3.3 Modèle viscoélastique de type *shear–lag*

Sous l'hypothèse que la désolidarisation latérale est réalisable, cette dernière devrait se faire sur un support capable d'empêcher l'apparition d'une courbure lors de la croissance ultérieure du dépôt, ce qui implique une bonne tenue mécanique verticale.

Nous nous proposons de construire un modèle monodimensionnel viscoélastique de type *shear–lag* pour décrire le comportement d'une couche mince contrainte infinie tenant en compte une éventuelle relaxation latérale à l'interface entre le film mince et le substrat.

✓ **Hypothèses** Supposons que l'interface est localisée à $z = 0$ pour $-l \leq x \leq l$ et définissons

$$F(x,t) = \int_0^h \sigma_{xx} dz,$$

avec h est définie comme étant l'épaisseur de la couche. La distribution des contraintes est supposée constante dans l'épaisseur de la couche. Cette hypothèse est valable dans le cas des films minces homogènes si nous nous plaçons suffisamment loin des bords. Soient :

- $u(x,t)$, le déplacement d'un point de la couche d'abscisse x à un instant t,
- $T(x,t)$, la force de cisaillement par unité de longueur exercée par la couche sur le substrat au point d'abscisse x,
- $v(x,t)$, le glissement à l'interface film mince/substrat,
- $F(x,t)$, la force latérale transmise par la couche au point d'abscisse x,
- ε^0, la pré-déformation initiale dans le film,

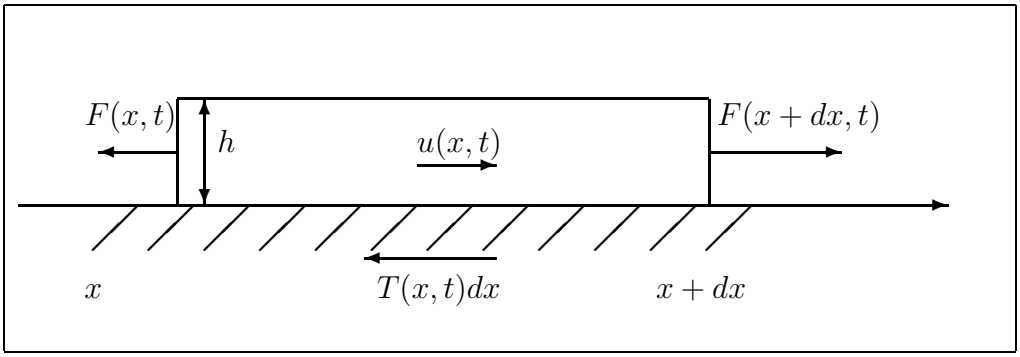

FIG. 3.3 – Représentation schématique des forces appliquées à un élément de film.

– $F_0(x)$, la condition initiale.

✓ **Equation d'équilibre** L'équation d'équilibre d'un élément de film élastique de longueur dx comme indiqué dans la Figure 3.3 est la suivante,

$$\frac{\partial F(x,t)}{\partial x} - T(x,t) = 0, \tag{3.1}$$

cette relation nécessite un bref commentaire. En effet, l'équation d'équilibre

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} = 0,$$

intégrée sur l'épaisseur, donne

$$\frac{\partial F}{\partial x} + \sigma_{xz}(h) = \sigma_{xz}(0).$$

Cependant, la surface supérieure est libre de contraintes, donc $\sigma_{xz}(h) = 0$, ainsi nous identifions T comme étant une contrainte de cisaillement à l'interface.

✓ **Lois de comportement** Le comportement du film est supposé élastique linéaire avec la prise en compte de la pré-déformation. Alors :

$$F(x,t) = k\left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varepsilon^0\right), \tag{3.2}$$

avec k un module d'élasticité.

L'effort tangentiel est lié au déplacement de la couche, généralement par la relation $T/\eta = u$, mais en présence d'un glissement v, nous supposons qu'il est proportionnel à $u - v$ c'est-à-dire

$$T(x,t) = \eta(u - v), \tag{3.3}$$

avec η un module de cisaillement.

Naturellement, la prise en compte de la viscosité de la couche de collage se fait *via* une loi de comportement viscoélastique de type Maxwell, c'est-à-dire,

$$\alpha\frac{\partial T}{\partial t} + \beta T = \frac{\partial v}{\partial t}. \tag{3.4}$$

Un modèle de ce type fait intervenir 4 constantes η, k, α et β. La constante k permet la prise en compte de l'élasticité du film, alors que η, α et β sont liées aux caractéristiques de la couche de collage.

Les dimensions physiques des variables et constantes en (3.1)-(3.4) sont respectivement :

$$\begin{array}{ll} F \to \mathrm{N/m}, & T \to \mathrm{N/m^2}, \\ k \to \mathrm{N/m}, & \eta \to \mathrm{N/m^3}; \\ \beta \to \mathrm{m^3/(sec \times N)}, & \alpha \to \mathrm{m^3/N}; \\ u \text{ et } v \to m & \varepsilon^0 \to \text{adimensionnel.} \end{array} \tag{3.5}$$

La relaxation élastique correspond à la décroissance de F et T en fonction du temps. Afin d'obtenir une relaxation complète du précurseur à $t \to \infty$, nous devons avoir

$$\lim_{t\to\infty} u(x,t) = \varepsilon^0 x, \qquad \lim_{t\to\infty} (F,T,v)(x,t) \to (0,0,0). \tag{3.6}$$

Par ailleurs, le comportement élastique est atteint à la limite $\beta \to 0$. Cependant, il est intéressent de noter que le modèle visco-élastique de type Kelvin-Voigt c'est-à-dire, $\beta T = cv + \gamma\dfrac{\partial v}{\partial t}$ est instable pour modéliser correctement le comportement asymptotique. Si nous prenons le modèle généralisé,

$$\alpha\frac{\partial T}{\partial t} + \beta T = cv + \gamma\frac{\partial v}{\partial t}, \tag{3.7}$$

Le comportement asymptotique peut être obtenu si $c = 0$. Cependant, le comportement élastique n'est pas satisfait à moins d'avoir $\beta = 0$. Ceci explique le choix du modèle de type Maxwell.

✓ **Conditions aux limites** L'origine est prise au centre de la couche, nous considérons alors :

- les conditions aux limites en $x = \mp l$, $\quad F(-l,t) = F(l,t) = 0$;
- les conditions initiales en $t = 0$, $\qquad F(x,0) = F_0(x)$.

✓ **Résolution du problème** Le calcul direct en utilisant (3.1)–(3.4) conduit à des équations en force F. Nous utilisons (3.2) dans (3.1) pour obtenir

$$k\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial F}{dx}, \tag{3.8}$$

en utilisant (3.1) dans (3.3) et en dérivant cette dernière deux fois par rapport au temps il vient

$$\frac{\partial^3 F}{\partial t \partial^2 x} = \eta(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} - \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial t}). \tag{3.9}$$

La dérivation de l'équation (3.2) par rapport au temps remplacée dans l'équation précédente, conduit à

$$\frac{\partial^3 F}{\partial t \partial x^2} = \eta(\frac{1}{k}\frac{\partial F}{\partial t} - \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial t}); \tag{3.10}$$

or

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \beta\frac{\partial F}{\partial x} + \alpha\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial t}; \tag{3.11}$$

donc la derivée de (3.11) par rapport à x donne

$$\frac{\partial^2 v}{\partial t \partial x} = \beta\frac{\partial^2 F}{\partial t^2} + \alpha\frac{\partial^3 F}{\partial x^2 \partial t}. \tag{3.12}$$

Enfin, en remplaçant (3.10) dans (3.12), l'équation différentielle en $F(x,t)$ devient,

$$(\alpha + \frac{1}{\eta})\frac{\partial^3 F}{\partial t \partial x^2} + \beta\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = \frac{1}{k}\frac{\partial F}{\partial t}, \tag{3.13}$$

nous notons $b = k\beta$ et $c = \alpha k + \dfrac{k}{\eta} > 0$, l'équation se réduit alors à

$$c\frac{\partial^3 F}{\partial t \partial x^2} + b\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = \frac{\partial F}{\partial t}. \tag{3.14}$$

3.3.1 Comportement qualitatif des solutions

Estimation de l'énergie

La multiplication de (3.41) par F et son intégration par partie donnent

$$\int_0^l \frac{\partial F}{\partial t} F dx = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\int_0^l F^2 dx = -b\int_0^l \left[\frac{\partial F}{\partial x}\right]^2 dx - c\frac{\partial}{\partial t}\int_0^l \left[\frac{\partial F}{\partial x}\right]^2 dx, \tag{3.15}$$

qui est équivalent à

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_0^l \left[\frac{F^2}{2} + \frac{c}{2}\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)^2\right] dx = -b\int_0^l \left[\frac{\partial F}{\partial x}\right]^2 dx, \tag{3.16}$$

la partie gauche est donc une fonction décroissante en temps. Nous avons deux cas à étudier :

– La partie droite est minorée par 0 ; il existe alors une constante C qui pour $t > 0$,

$$\int_0^l \left[\frac{\partial F}{\partial x}\right]^2 dx \geq C > 0. \tag{3.17}$$

Dans ce cas la partie gauche est majorée par la condition initiale et tend vers zéro quand t tend vers l'infini.

– Si

$$\int_0^l \left[\frac{\partial F}{\partial x}\right]^2 dx \to 0, \tag{3.18}$$

alors F est constante et en utilisant les conditions aux limites, F va tendre vers zéro, quelles que soient les conditions initiales.

3.3.2 Solution générale

Nous avons

$$F(x,t) = \sum_{j=1}^{\infty} C_j(t) \sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right). \tag{3.19}$$

La substitution de (3.19) dans (3.41) donne

$$\sum_{j=1}^{\infty} C_j'(t) \sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right) = \tag{3.20}$$

$$-\sum_{j=1}^{\infty}\left[\frac{j^2\pi^2 b}{4l^2} C_j(t) \sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right) + \frac{j^2\pi^2 c}{4l^2} C_j'(t) \sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right)\right]$$

et la projection en $\sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right)$ conduit à

$$C_j'(t)\left(1 + c\frac{j^2\pi^2}{4l^2}\right) = -C_j(t) b\frac{k^2\pi^2}{4l^2}. \tag{3.21}$$

Ceci est équivalent à

$$\frac{C_j'(t)}{C_j(t)} = \frac{b\dfrac{j^2\pi^2}{4l^2}}{1 + c\dfrac{j^2\pi^2}{4l^2}} \tag{3.22}$$

Nous posons $\gamma = \dfrac{b\dfrac{j^2\pi^2}{4l^2}}{1 + c\dfrac{j^2\pi^2}{4l^2}}$. La résolution de cette équation différentielle conduit à

$$C_j(t) = C_j(0) e^{-\gamma t}. \tag{3.23}$$

Pour $(t = 0)$, la constante $C_j(0)$ est déterminée connaissant la condition initiale $F(x,0)$. Nous posons $F(x,0) = F_0(x)$; en effet

$$F_0(x) = \sum_{j=1}^{\infty} C_j(0) \sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right). \tag{3.24}$$

Multipliant $F_0(x)$ par $\sin\left(i\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right)$ et intégrant l'expression entre $[-l,l]$, il vient

$$\int_{-l}^{l} \sin\left(i\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right) F_0(x)dx = \sum_{j=1}^{\infty} \int_{-l}^{l} C_j(0) \sin\left(i\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right) \sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right) dx \tag{3.25}$$

or

$$\sin\left(i\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right) \sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right) = \tag{3.26}$$

$$1/2\left[\cos\left(\frac{i-j}{2}(\frac{\pi x}{l}+\pi)\right) - \cos\left(\frac{i+j}{2}(\frac{\pi x}{l}+\pi)\right)\right].$$

• Si $i \neq j$ alors

$$\int_{-l}^{l} \cos\left(\frac{i-j}{2}(\frac{\pi x}{l}+\pi)\right) dx = \frac{2l}{(i-j)\pi}\left[\sin\left(\frac{i-j}{2}(\frac{\pi x}{l}+\pi)\right)\right]_{-l}^{l} = 0 \tag{3.27}$$

et

$$\int_{-l}^{l} \cos\left(\frac{i+j}{2}(\frac{\pi x}{l}+\pi)\right) dx = \frac{2l}{(i+j)\pi}\left[\sin\left(\frac{i+j}{2}(\frac{\pi x}{l}+\pi)\right)\right]_{-l}^{l} = 0. \tag{3.28}$$

• Si $i = j$ alors

$$\int_{-l}^{l} \cos\left(\frac{(i-j)}{2}(\frac{\pi x}{l}+\pi)\right) dx = 2l, \tag{3.29}$$

et

$$\int_{-l}^{l} \cos\left(\frac{(i+j)}{2}(\frac{\pi x}{l}+\pi)\right) dx = \int_{-l}^{l} \cos\left(2i(\frac{\pi x}{l}+\pi)\right) dx = \tag{3.30}$$

$$\frac{l}{2i\pi}\left[\sin\left(2i(\frac{\pi x}{l}+\pi)\right)\right]_{-l}^{l} = 0.$$

Par simplification,

$$\sum_{j=1}^{\infty} \int_{-l}^{l} C_j(0) \sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right) \sin\left(i\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right) dx = lC_i(0); \tag{3.31}$$

ce qui veut bien dire que

$$\int_{-l}^{l} \sin\left(i\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right) F_0(x)dx = lC_i(0). \tag{3.32}$$

La constante est alors fournie par

$$C_i(0) = \frac{1}{l}\int_{-l}^{l} \sin\left(i\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right) F_0(x)dx \tag{3.33}$$

et donc

$$C_j(t) = \frac{1}{l}\int_{-l}^{l} \sin\left(i\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right) F_0(x)e^{-\gamma t}dx. \tag{3.34}$$

En exprimant $F(x,t)$ en fonction des paramètres du problème k, β, α et η, ceci est équivalent à

$$F(x,t) = \frac{1}{l}\sum_{j=1}^{\infty} e^{-\frac{\beta j^2\pi^2}{\frac{4}{k}l^2+(\alpha+\frac{1}{\eta})j^2\pi^2}t} \times \sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right)\int_{-l}^{l} F_0(x)\sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right)dx. \tag{3.35}$$

En posant $A_j = \dfrac{\beta j^2\pi^2}{\frac{4l^2}{k}+(\alpha+\frac{1}{\eta})j^2\pi^2}$, $C_j(t)$ s'écrit alors :

$$C_j(t) = \frac{1}{l}e^{-A_j t}\int_{-l}^{l} F_0(x)\sin(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1))dx; \tag{3.36}$$

La condition initiale est donnée avant que le glissement commence, c'est-à-dire lorsque $v = 0$. Dans ce cas, le modèle précédent se simplifie et s'écrit grâce à l'équation différentielle suivante :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\eta}{k}u = 0, \tag{3.37}$$

avec la condition aux limites en

- $x = \pm l$, $\varepsilon = -\varepsilon_0$,
- $x = 0,\ u = 0$.

La solution générale de ce problème est de la forme

$$F(x) = \varepsilon_0 k\left[\frac{\cosh(\sqrt{\frac{\eta}{k}}x)}{\cosh(\sqrt{\frac{\eta}{k}}l)} - 1\right]. \tag{3.38}$$

La condition initiale $F_0(x)$ pour notre modèle est alors supposée solution de ce problème. Nous notons par

$$D_j(x) = \int_{-l}^{l}\left(\frac{\cosh(\sqrt{\frac{\eta}{k}}x)}{\cosh(\sqrt{\frac{\eta}{k}}l)} - 1\right)\sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right)dx \tag{3.39}$$

La solution finale est alors

$$F(x,t) = \frac{\varepsilon_0 k}{l}\sum_{j=1}^{\infty}\left[e^{-A_j t}\sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right)D_j(x)\right]. \tag{3.40}$$

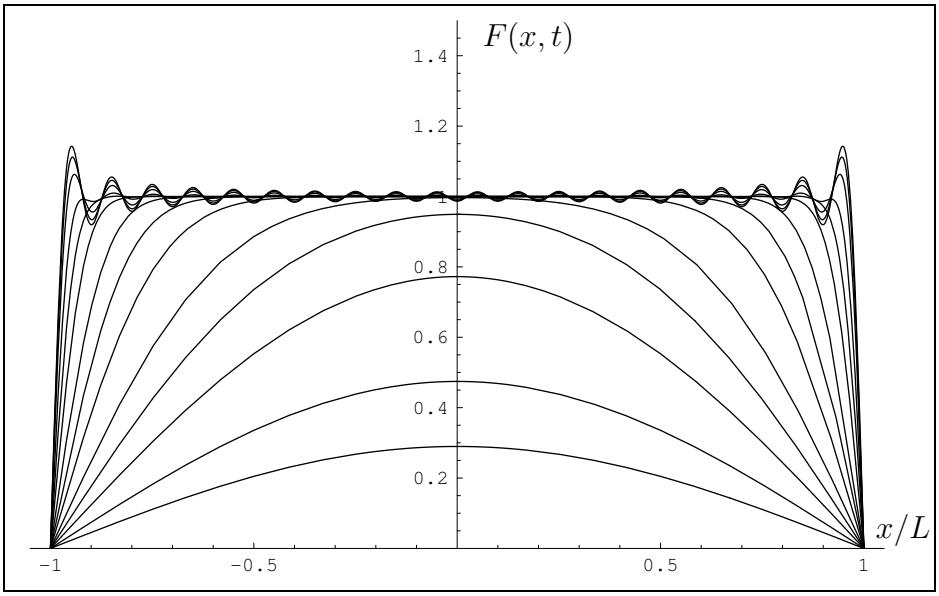

FIG. 3.4 – Présentation qualitative de la relaxation d'un film mince en fonction du temps.

Comme le montre la Figure 3.4, la solution $F(x,t)$ décroît en fonction du temps. Les contraintes normales décroissent jusqu'à s'annuler aux bords, mais la contrainte de cisaillement, nulle loin des bords, croît pour atteindre son maximum près des bords.

3.3.3 Analyse numérique

Nous nous proposons de résoudre numériquement l'équation

$$\frac{\partial F}{\partial t} = c\frac{\partial^3 F}{\partial t \partial x^2} + b\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}, \tag{3.41}$$

avec,

$$b = k\beta,\ c = \alpha k + \frac{k}{\eta} > 0, \tag{3.42}$$

Pour se faire, nous avons choisi le schéma explicite de la méthode des différences finies. Pour N et k fixés, nous notons $x_{k,i} = F(\frac{il}{N}, k\Delta t)$ et nous écrivons les dérivées de $F(x,t)$ comme

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{1}{\Delta t}(x_{k+1,i} - x_{k,i}), \tag{3.43}$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = \frac{1}{(l/N)^2}(x_{k,i+1} - 2x_{k,i} + x_{k,i-1}), \tag{3.44}$$

$$\frac{\partial^3 F}{\partial x^2 \partial t} = \frac{1}{\Delta t (l/N)^2}[(x_{k+1,i+1} - 2x_{k+1,i} + x_{k+1,i-1}) - (x_{k,i+1} - 2x_{k,i} + x_{k,i-1})]. \tag{3.45}$$

L'application de ce schéma dans l'équation (3.41) conduit à l'expression suivante :

$$\frac{-c}{\Delta t(\Delta x)^2}x_{k+1,i-1} + (\frac{1}{(\Delta t)^2} + \frac{2c}{\Delta t(\Delta x)^2})x_{k+1,i} - \frac{c}{\Delta t(\Delta x)^2}x_{k+1,i+1} = \tag{3.46}$$

$$(\frac{b}{(\Delta x)^2} - \frac{c}{\Delta t(\Delta x)^2})x_{k,i-1} + (\frac{1}{\Delta t} + \frac{2c}{\Delta t(\Delta x)^2} - \frac{2b}{(\Delta x)^2})x_{k,i} + \tag{3.47}$$

$$(\frac{b}{(\Delta x)^2} - \frac{c}{\Delta t(\Delta x)^2})x_{k,i+1}.$$

nous notons $\mathbf{F}_k = (x_{k,0}, x_{k,1}, \ldots, x_{k,N})$, la méthode numérique peut être décrite sous la forme

$$\mathbf{A}\mathbf{F}_{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{F}_k, \tag{3.48}$$

où

$$\mathbf{A} = a_1\mathbf{I} + a_2\mathbf{K}, \quad \mathbf{B} = a_1\mathbf{I} + b_2\mathbf{K}, \tag{3.49}$$

et tel que $a_1 = \frac{1}{\Delta t}$, $a_2 = \frac{c}{\Delta t(\Delta x)^2}$ et $b_2 = -(\frac{b}{(\Delta x)^2} - \frac{c}{\Delta t(\Delta x)^2})$. $\mathbf{I}$ représente la matrice d'identité de dimension $N+1$ et $\mathbf{K}$ la matrice

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \ldots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \ldots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 2 \end{bmatrix} \tag{3.50}$$

Tenons compte des conditions initiales $F(0, t+\Delta t) = 0$ et $F(N, t+\Delta t) = 0$. A partir de l'expression (3.48) nous pouvons écrire :

$$\mathbf{F}_{k+1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{F}_k, \tag{3.51}$$

$$\mathbf{F}_1 = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{F}_0, \tag{3.52}$$

$$\mathbf{F}_n = (\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B})^n\mathbf{F}_0, \tag{3.53}$$

Pour b et c fixées, et en couple $(\Delta x, \Delta t)$ fixés, nous présentons sur les graphiques suivants plusieurs étapes d'itération traduisant l'évolution de la solution $F(x,t)$ au cours du temps.

3.4 Cinétique de désolidarisation et croissance du dépôt

L'analyse précédente montre que, dans un film d'épaisseur fixe, l'énergie élastique emmagasinée décroît en fonction du paramètre de matériau β. Cependant, au fur et à mesure que le film croît, l'énergie élastique accumulée croît dans la structure à travers le film déformé.

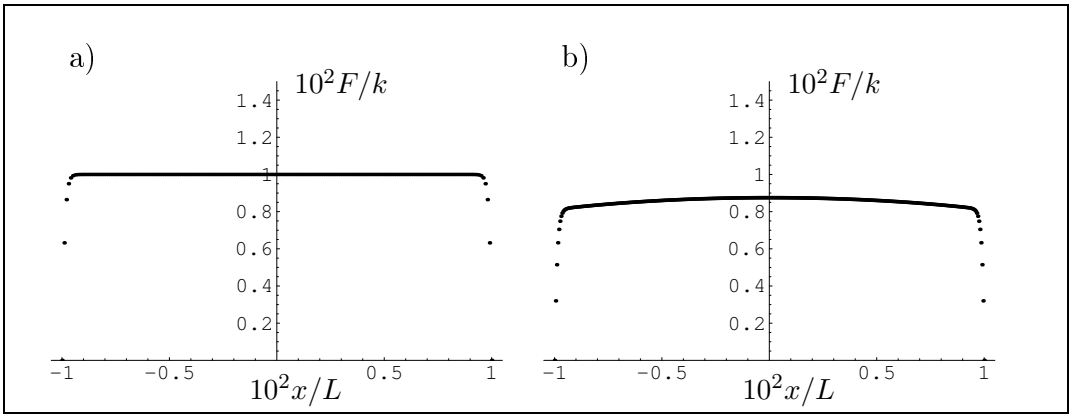

FIG. 3.5 – a) Condition initiale : $F(x,t) = F_0$. b) $F(x,t)$ à l'instant t_1 quelconque.

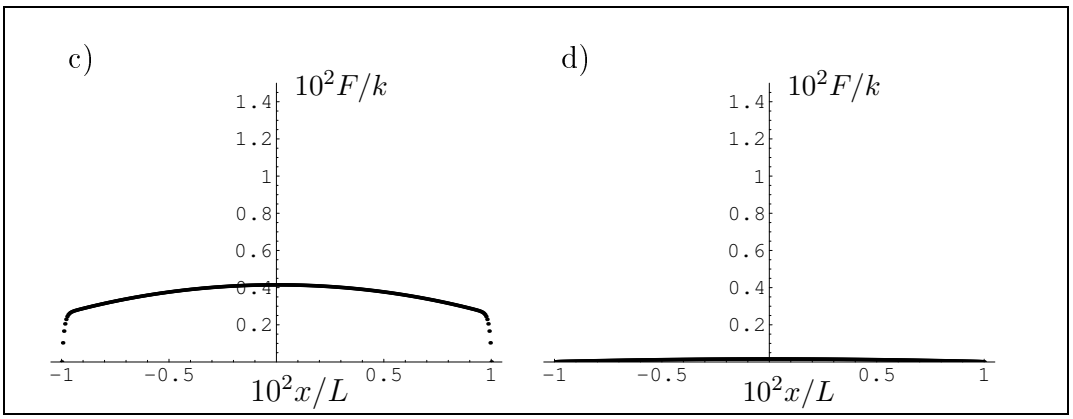

FIG. 3.6 – c) Evolution de la solution pout $t_2 > t_1$. d) $F(x,t)$ s'annule $t_3 >> t_2$.

Nous nous intéressons dans ce paragraphe au développement d'un modèle qui prend en compte l'interaction entre la rhéologie du couple interface substrat, la cinétique de désolidarisation et son influence sur les contraintes dans la structure substrat–film.

Certaines équations du modèle précédent restent inchangées. En effet, l'élément de la couche est considéré loin des bords et l'équilibre dans celle-ci est toujours

$$\frac{\partial F}{\partial x} = T. \tag{3.54}$$

Nous introduisons une loi d'évolution des paramètres k et η. En supposant que le module élastique est une fonction linéaire du temps, la loi de comportement élastique dans le film élastique devient

$$F = k_0(1 + At)(\frac{du}{dx} - \varepsilon^0). \tag{3.55}$$

Essayons de donner une explication à notre hypothèse. En effet, le déplacement $u(x,z)$ peut s'écrire

$$u(x,z) = u_0(x) + \gamma(x)(z - \frac{h}{2}) \tag{3.56}$$

donnant $\varepsilon(x) = \dfrac{\partial u_0}{\partial x} + (z - \dfrac{h}{2})\dfrac{\partial \gamma(x)}{\partial x}$. Par ailleurs, nous avons noté auparavant $F(x,t) = \displaystyle\int_0^h \sigma_{xx} dz$, nous obtenons alors : $F(x,t) = Eh\dfrac{\partial u_0}{\partial x}$. Ceci montre avec l'équation (3.2), que le module d'élasticité est $k = Eh$, il est donc proportionnel à l'épaisseur du film et par la suite au processus de croissance.

Cependant, nous supposons que le module de cisaillement est inversement proportionnel au temps. L'effort tangentiel peut être alors lié au déplacement par

$$T = \frac{h_0}{(1+At)}(u - v), \tag{3.57}$$

tandis que la loi de comportement viscoélatique de la couche de collage reste inchangée et s'écrit toujours

$$\alpha\frac{\partial T}{\partial t} + \beta T = \frac{\partial v}{\partial t}. \tag{3.58}$$

Ce modèle est plus général et la résolution de ce système conduit à une équation différentielle linéaire en F avec un coefficient dépendant du temps. En effet, nous combinons l'équation (3.54) et (3.57) et nous dérivons cette dernière une fois par rapport à x et une autre par rapport à t, nous obtenons

$$\frac{\partial^3 F}{\partial x^2 \partial t} = \frac{h_0}{1+At}(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} - \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial t}) - \frac{Ah_0}{(1+At)^2}(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial x}), \tag{3.59}$$

or la dérivée en x de l'équation (3.57), donne $\dfrac{\partial u}{\partial x} - \dfrac{\partial v}{\partial x} = \dfrac{1+At}{h_0}\dfrac{\partial^2 F}{\partial^2 x}$. Ensuite, nous remplaçons cette dernière dans l'équation (3.59) pour obtenir

$$\frac{\partial^3 F}{\partial x^2 \partial t} = \frac{h_0}{1+At}(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} - \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial t}) - \frac{A}{1+At}\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}. \tag{3.60}$$

Enfin, nous écrivons l'équation (3.58) en terme de force F, puis nous la dérivons par rapport à x, nous obtenons alors l'expression de $\dfrac{\partial^2 v}{\partial x \partial t}$ en fonction de F. De même, l'expression de $\dfrac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}$ est la combinaison de l'équation (3.55) avec sa dérivée par rapport au temps.

Par substitution de ces dernières équations dans l'équation (3.60), nous obtenons une équation différentielle partielle en $F(x,t)$

$$(h_0\alpha + At + 1)\frac{\partial^3 F}{\partial x^2 \partial t} = -(A + h_0\beta)\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} - \frac{Ah_0}{k_0(1+At)^2}F + \frac{h_0}{k_0(1+At)}\frac{\partial F}{\partial t}. \tag{3.61}$$

Cette solution est complétée par les conditions aux limites $F(-l,t) = F(l,t) = 0$ et la condition initiale $F(x,0) = F_0(x)$.

3.4.1 Solution du problème

Encore une fois, l'équation est linéaire, et la solution générale aura la forme :

$$F(x,t) = \sum_{j=1}^{\infty} C_j(t) \sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right). \tag{3.62}$$

où

$$C_j(t) = \frac{1}{l}\exp\int A_j dt \int_{-l}^{l} F_0(x)\sin(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1))dx; \tag{3.63}$$

et

$$A_j = \frac{C_j'(t)}{C_j(t)} = -\frac{(\frac{A}{h_0}+\beta)\frac{j^2\pi^2}{4l^2} - \frac{A}{k_0(1+At)^2}}{(\frac{1+At}{h_0}+\alpha)\frac{j^2\pi^2}{4l^2} + \frac{1}{k_0(1+At)}} \tag{3.64}$$

En suivant la même démarche pour la résolution du modèle précédent, nous obtenons :

$$F(x,t) = \frac{\varepsilon_0 k}{l}\sum_{j=1}^{\infty}\left[\exp\int A_j dt \sin\left(j\frac{\pi}{2}(\frac{x}{l}+1)\right) D_j(x)\right]. \tag{3.65}$$

Si nous posons

$$m_j(t) = \frac{1}{k_0(1+At)} + \frac{j^2\pi^2}{4l^2}\left(\frac{1+At}{h_0}+\alpha\right) \tag{3.66}$$

et

$$\hat{\beta} = \beta\frac{j^2\pi^2}{4l^2}. \tag{3.67}$$

L'équation différentielle en $C_j(t)$ s'écrit alors

$$m_j(t)C_j'(t) = (-\hat{\beta} - m_j'(t))C_j(t). \tag{3.68}$$

En effet, $C_j(t) = C_1 e^{-\int_0^t \frac{\hat{\beta}+m_j'(s)}{m_j(s)}ds}$. Nous notons que,

$$\lim_{A\to 0} C_j(t) = C_1 e^{-\frac{\beta j^2\pi^2}{\frac{4l^2}{k}+(\alpha+\frac{1}{\eta})j^2\pi^2}t}, \tag{3.69}$$

nous retrouvons ainsi le modèle précédent. Cependant, comme m > 0, le comportement qualitatif de $C_j(t)$ va dépendre du signe de $-b - m'(t)$. En effet, la fonction

$$f(A,t) = -m'(t) - \hat{\beta} = \frac{A}{k_0(1+At)^2} - \frac{j^2\pi^2}{4l^2}\left(\frac{A}{h_0}+\beta\right) \tag{3.70}$$

peut être positive, pour t petit, quand

$$f(A,t) \sim \frac{A}{k_0} - \frac{j^2\pi^2}{4l^2}\left(\frac{A}{h_0} + \beta\right). \tag{3.71}$$

Ceci peut être atteint si

$$A\left(\frac{1}{k_0} - \frac{j^2\pi^2}{4l^2}\right) > \hat{\beta}. \tag{3.72}$$

Ce cas se produit uniquement pour des modes faibles (j petit). Ce résultat montre clairement que la compétition entre la relaxation latérale et la vitesse de croissance peut influencer la rugosité de la surface libre. En fait, pour une vitesse de croissance faible (c'est-à-dire pour A petit), le processus de relaxation est dominant, donc, l'énergie élastique du film mince décroît en fonction du temps.

3.4.2 Analyse numérique

Nous avons choisi le même schéma explicite de la méthode des différences finies que celui utilisé pour $A = 0$ (pour k_0 et h_0 fixés).

Si on pose : $b = \frac{k_0}{h_0}(1 + At)(A + h_0\beta)$, $c = (1 + At)(k_0\alpha + \frac{k_0}{h_0}(1 + At))$ et $d = \frac{A}{1 + At}$, l'application de ce schéma à l'equation

$$\frac{\partial F}{\partial t} = b\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + c\frac{\partial^3 F}{\partial t \partial x^2} + dF \tag{3.73}$$

nous conduit à l'expression suivante :

$$\frac{-c}{\Delta t(\Delta x)^2}x_{k+1,i-1} + (\frac{1}{(\Delta t)^2} + \frac{2c}{\Delta t(\Delta x)^2})x_{k+1,i} - \frac{c}{\Delta t(\Delta x)^2}x_{k+1,i+1} = \tag{3.74}$$

$$(\frac{b}{(\Delta x)^2} - \frac{c}{\Delta t(\Delta x)^2})x_{k,i-1} + (\frac{1}{\Delta t} + \frac{2c}{\Delta t(\Delta x)^2} - \frac{2b}{(\Delta x)^2})x_{k,i} + \tag{3.75}$$

$$dx_{k,i} + (\frac{b}{(\Delta x)^2} - \frac{c}{\Delta t(\Delta x)^2})x_{k,i+1}.$$

Nous notons $\mathbf{F}_k = (x_{k,0}, x_{k,1}, \ldots, x_{k,N})$, nous avons alors :

$$\mathbf{A}\mathbf{F}_{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{F}_k, \tag{3.76}$$

où

$$\mathbf{A} = a_1\mathbf{I} + a_2\mathbf{K}, \quad \mathbf{B} = (a_1 + d)\mathbf{I} + b_2\mathbf{K}, \tag{3.77}$$

et tel que $a_1 = \frac{1}{\Delta t}$, $a_2 = \frac{c}{\Delta t(\Delta x)^2}$ et $b_2 = -(\frac{b}{(\Delta x)^2} - \frac{c}{\Delta t(\Delta x)^2})$. $\mathbf{I}$ étant la matrice d'identité de dimension $N + 1$ et $\mathbf{K}$ la matrice

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2 \end{bmatrix}, \tag{3.78}$$

avec les conditions initiales tel que $F(0, t + \Delta t) = 0$ et $F(n, t + \Delta t) = 0$. Nous pouvons écrire :

$$\mathbf{F}_{k+1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{F}_k, \tag{3.79}$$

$$\mathbf{F}_1 = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{F}_0, \tag{3.80}$$

$$\mathbf{F}_n = (\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B})^n\mathbf{F}_0, \tag{3.81}$$

Pour b, c et d fixés et $(\Delta x,\ \Delta t)$ choisis, nous présentons sur les graphiques suivants plusieurs étapes d'itération traduisant l'évolution de la solution $F(x, t)$ en fonction du temps. Comme les graphiques le montrent, $F(x, t)$ augmente d'abord, et puis décroît jusqu'à s'écraser. Les graphiques suivants sont montrés dans les mêmes conditions et aux mêmes instants que ceux données pour $A = 0$. Nous constatons d'après la Figure 3.8 et la Figure 3.6 que la couche décroît plus lentement que dans le cas où $A = 0$. Ce résultat montre la compétition entre la relaxation latérale et la vitesse de croissance.

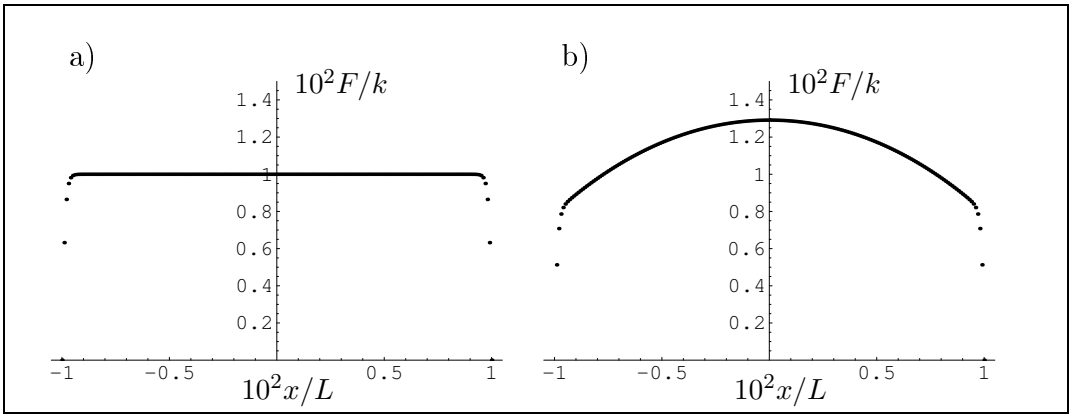

FIG. 3.7 – a) Condition initiale : $F(x, t) = F_0$, (b) $F(x, t)$ à l'instant $t = 2s$.

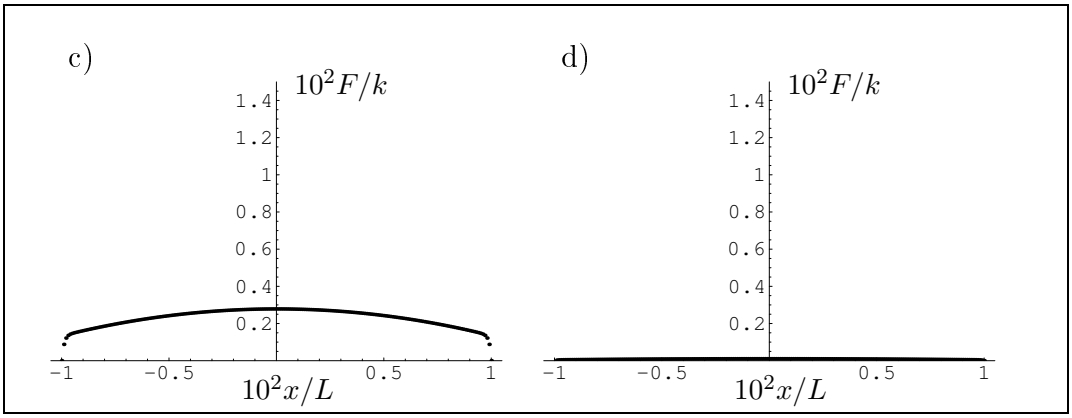

FIG. 3.8 – c) Evolution de la solution pour $t = 12s$, (d) $F(x,t)$ s'annule à l'instant $t = 60s$.

3.5 Conclusion

Le principe de la relaxation latérale s'énonce comme suit : aux bords d'une structure contrainte, l'énergie élastique se relaxe par un mécanisme qui s'initie aux bords et tend à se prolonger au centre.

Cependant, la Figure 3.9 suivante représente une image prise à l'aide d'un microscope optique à effet Nomarski montrant un mésas présentent dans sa partie centrale des ondulations alors que ses coins sont plats. Le glissement, ou la relaxation latérale se fait sur une longueur caractéristique se manifestant à partir des bords. Tout se passe donc comme s'il y avait une compétition entre deux processus de relaxation élastique : le glissement et l'ondulation.

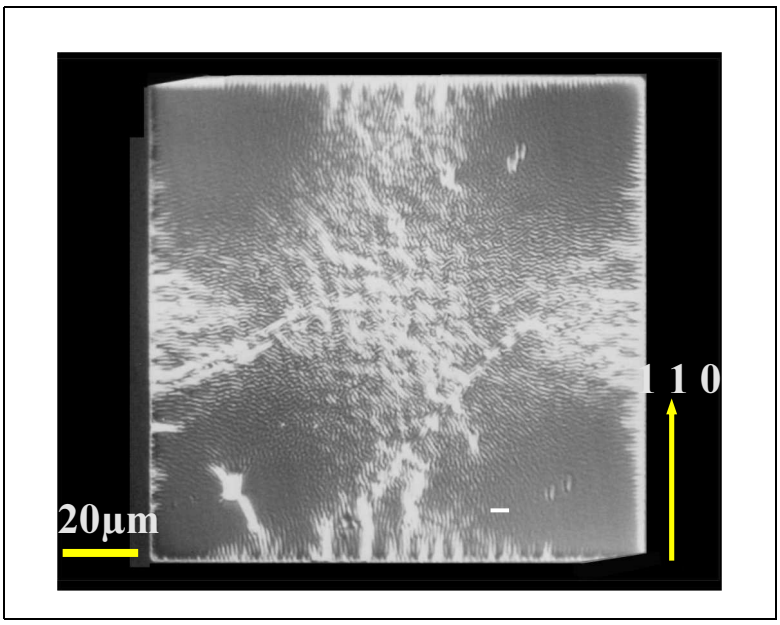

FIG. 3.9 – Image optique montrant la compétition entre le glissement et l'ondulation pour une couche d'$In_{0.65}Ga_{0.35}$ en compression avec $\varepsilon_0 = -0.008$.

L'étude de ce processus de relaxation élastique par ondulations fait l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 4

Instabilité d'une structure film mince précontraint sur une couche visqueuse : cas 2D

4.1 Introduction

Nous avons discuté dans le chapitre 2 les phénomènes de la relaxation élastique par courbure et par glissement. Cependant, lors du dépôt d'une structure contrainte sur un substrat hôte par l'intermédiaire d'une couche visqueuse, un autre phénomène de relaxation élastique peut être envisagé, à savoir, la relaxation par ondulations.

La relaxation par ondulations peut présenter des inconvénients majeurs. En fonction de leur amplitude et de leur longueur d'onde, elle peut conduire à une rugosification de surface de la couche épitaxiale en raison du champ de déformation non homogène qu'elle génère en surface du matériau. L'approche théorique classique de ce phénomène (Grinfeld 1993) consiste à perturber sinusoïdalement la surface.

Une approche analogue consistant à étudier une structure composée par une couche précontrainte , collée sur une couche visqueuse a été introduite par Sridhar et al. (2001) ainsi que par Huang et al. (2002). Pour une structure contrainte, il existe une épaisseur critique du film élastique au delà de laquelle l'énergie élastique emmagasinée dans le film est supérieure à celle correspondant au seuil d'apparition des dislocations. Par conséquent, le film peut onduler afin de réduire son énergie élastique.

Afin d'étudier la stabilité de ce type de structure, nous introduisons une perturbation sinusoïdale du déplacement de la surface du film. Cette approche permet de déterminer les conditions de stabilité, les longueurs d'ondes, les amplitudes et le temps d'apparition des ondulations. Pour ce genre de relaxation, Huang et al. (2001), Sridhar et al. (2001), ont montré qu'il existe un nombre d'onde critique k_c définissant la frontière de stabilité des perturbations. En effet, au delà de k_c l'ampli-

tude des perturbations décroît et le système devient alors stable. Pour des valeurs de nombre d'onde inférieures à k_c, l'amplitude croît d'une manière exponentielle et le système est instable. Par ailleurs, les résultats de HUANG and SUO (2002b) et SRIDHAR et al. (2001), ont montré que la frontière de stabilité est indépendante du rapport entre les épaisseurs de la couche visqueuse et de la couche contrainte. Cependant, dans le domaine d'instabilité, la vitesse de croissance des perturbations est d'autant plus grande que le rapport d'épaisseur fluide/film est élevé. Par conséquent le temps de relaxation par ondulations devient plus court.

Ce chapitre est constitué de trois parties. La première partie décrit les résultats de Suo. Dans ce cas, le film mince élastique et la couche de fluide sont considérés isotrope. Dans la deuxième partie le film élastique est modélisé suivant la théorie des plaques et par conséquent le déplacement de la surface du film fait intervenir outre sa translation, la rotation du segment normal. Le terme de courbure a été négligé au cours de l'étude effectuée par Suo. Cependant, nous avons montré que la prise en compte de ce terme nous permet d'affiner l'analyse de la stabilité. Nous avons montré alors que la longueur d'onde critique dépendra du rapport entre l'épaisseur du film et celle du fluide. Ceci fait l'objet de la deuxième partie de ce chapitre.

Une extension du modèle de Suo à un modèle anisotrope fait l'objet de la troisième partie. En effet, la plupart des matériaux semi-conducteurs III-V utilisés dans ce contexte sont **anisotropes** avec des caractéristiques élastiques dépendant directement de C_{11}, C_{12} et C_{44}. Les résultats obtenus nous ont permis d'étudier le phénomène de relaxation pour ce type de matériaux. Nous avons tout particulièrement étudié les conditions de stabilité de la structure contrainte dans le cas anisotrope avec et sans la prise en compte de la courbure. En effet, nous avons montré que cette anisotropie influence l'orientation des ondulations au cours de la relaxation.

4.2 Problème non linéaire et solution d'équilibre

En suivant HUANG and SUO (2002b) nous nous proposons d'étudier la stabilité d'un film mince élastique précontraint infini, d'épaisseur h, supposée très petite devant ses autres dimensions. Ce dernier est déposé sur une couche visqueuse incompressible de hauteur H. La couche de fluide est déposée sur un substrat rigide comme indiqué sur la Figure 4.1. Nous supposons que les matériaux constituant cette structure sont isotropes.

4.2.1 Écoulement du fluide visqueux :

Le fluide est supposé newtonien et nous supposons que l'écoulement est unidimensionnel sous la condition des contraintes planes. Les composantes du vecteur vitesse sont :

$$v_x = v_x(x,z), \qquad v_z = v_z(x,z), \qquad v_y = 0,$$

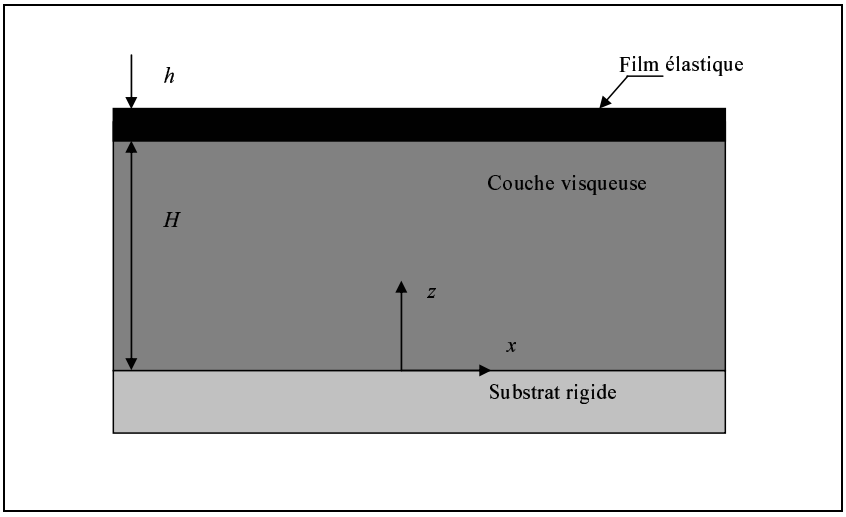

FIG. 4.1 – Dépôt d'un film élastique sur un fluide visqueux.

et la condition d'incompressibilité s'écrit

$$\mathrm{div}\boldsymbol{v} = 0. \tag{4.1}$$

L'écoulement du fluide est supposé lent, nous négligeons alors les forces d'inertie. L'équation de mouvement réduite à l'équation d'équilibre est alors

$$\mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \tag{4.2}$$

Le fluide étant visqueux newtonien, où p représente la pression, $\boldsymbol{D}$ le tenseur gradient de vitesse défini $\boldsymbol{D} = (D_{ij})_{1\leq i,j\leq 3} = \frac{1}{2}(v_{i,j} + v_{j,i})$ et η est la viscosité. Le tenseur de contraintes doit vérifier alors la loi de comportement suivante,

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\boldsymbol{I} + 2\eta\boldsymbol{D}. \tag{4.3}$$

Suivant Suo, nous considérons une condition aux limites en contraintes à la surface de la couche visqueuse de la forme

$$\begin{aligned} \sigma_{zz}(x, H, t) &= q_0(t)\sin(kx), \\ \sigma_{xz}(x, H, t) &= \tau_0(t)\cos(kx), \end{aligned} \tag{4.4}$$

et nous nous proposons de déterminer les composantes du vecteur vitesse correspondant.

Une méthode classique permettant de calculer les contraintes et les vitesses consiste à l'introduction de la fonction d'Airy. Ainsi, les contraintes et les vitesses peuvent être représentées par les deux potentiels, $U(x, z)$ et $\chi(x, z)$, c'est-à-dire

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 U}{\partial z^2}, \quad \sigma_{zz} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}, \quad \sigma_{xz} = \frac{\partial^2 U}{\partial x \partial z} \tag{4.5}$$

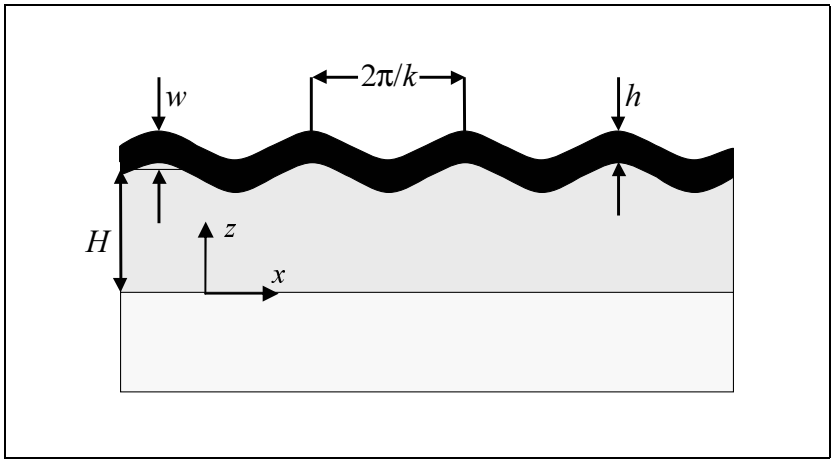

FIG. 4.2 – Ondulation d'un film élastique sur un fluide visqueux.

et

$$v_x = \frac{1}{2\eta}(-\frac{\partial U}{\partial x} + 2\frac{\partial \chi}{\partial z}),$$
$$v_z = \frac{1}{2\eta}(-\frac{\partial U}{\partial z} + 2\frac{\partial \chi}{\partial x}). \tag{4.6}$$

Les équations de l'équilibre (4.2) étant automatiquement vérifiées, les équations (4.2), (4.1) et (4.3) seront vérifiées si et ssi la fonction χ et U vérifient

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \chi}{\partial z^2} = 0,$$
$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = 4\frac{\partial^2 \chi}{\partial x \partial z}. \tag{4.7}$$

La résolution de ce système, nous donne

$$U = \frac{1}{k^2}(C_1\cosh(kz) + C_2\sinh(kz) + C_3 kz\cosh(kz) + C_4 kz\sinh(kz))\sin(kx),$$
$$\chi = -\frac{1}{2k^2}(C_3\cosh(kz) + C_4\sinh(kz))\cos(kx). \tag{4.8}$$

$C_j (j = 1..4)$ sont des constantes à déterminer à partir des conditions aux limites. Par ailleurs, d'après les équations (4.5) et (4.6), nous obtenons les contraintes normales, les contraintes de cisaillement et les composantes du vecteur vitesse. Ainsi,

$$\sigma_{xx} = (C_1\cosh(kz) + C_2\sinh(kz) + C_3(2\sinh(kz) + kz\cosh(kz)) + C_4(2\cosh(kz) + kz\sinh(kz)))\sin(kx)$$
$$\sigma_{zz} = (C_1\cosh(kz) + C_2\sinh(kz) + C_3 kz\cosh(kz) + C_4\sinh(kz))\sin(kx) \tag{4.9}$$
$$\sigma_{xz} = C_1\sinh(kz) + C_2\cosh(kz) + C_3(\cosh(kz) + kz\sinh(kz)) + C_4(\sinh(kz) + kz\cosh(kz)))\cos(kx)$$

$$
\begin{aligned}
&v_x = -\frac{1}{2\eta k}(C_1\cosh(kz) + C_2\sinh(kz) + C_3(\sinh(kz) + kz\cosh(kz)) + \\
&C_4(\cosh(kz) + kz\sinh(kz)))\cos(kx) \\
&v_z = -\frac{1}{2\eta k}C_1\sinh(kz) + C_2\cosh(kz) + C_3 kz\sinh(kz) + C_4 kz\cosh(kz)) \\
&\sin(kx).
\end{aligned}
\tag{4.10}
$$

Nous supposons qu'il y a pas de glissement à l'interface fluide/substrat. Donc pour $z = 0$

$$v_x = v_z = 0. \tag{4.11}$$

La condition aux limites (4.4) à $z = H$, est

$$\sigma_{zz}(z = H) = q_0(t)\sin(kx), \tag{4.12}$$

$$\sigma_{xz}(z = H) = \tau_0(t)\cos(kx). \tag{4.13}$$

Nous pouvons alors déterminer les constantes C_j qui s'écrivent :

$$C_1 = -C_4 = \frac{\cosh(kH) + kh\sinh(kH)}{(kH)^2 + \cosh^2(kH)}q_0(t) + \frac{kH\cosh(kH)}{(kH)^2 + \cosh^2(kH)}\tau_0(t), \tag{4.14}$$

$$C_3 = -\frac{kH\cosh(kH)}{(kH)^2 + \cosh^2(kH)}q_0(t) - \frac{\cosh(kH) - kh\sinh(kH)}{(kH)^2 + \cosh^2(kH)}\tau_0(t), \quad C_2 = 0. \tag{4.15}$$

Nous substituons les équations (4.14) et (4.15) dans l'équation (4.10). Nous obtenons ainsi les composantes du vecteur vitesse à la surface supérieure du fluide visqueux. En effet,

$$v_x(x, H, t) = \frac{1}{2\eta k}\left(\frac{(kH)^2}{(kH)^2 + \cosh^2(kH)}q_0(t) + \frac{1}{2}\frac{2kH + \sinh(2kH)}{(kH)^2 + \cosh^2(kH)}\tau_0(t)\right)\cos(kx) \tag{4.16}$$

et

$$v_z(x, H, t) = \frac{1}{2\eta k}\left(\frac{1}{2}\frac{\sinh(2kH) - 2kH}{(kH)^2 + \cosh^2(kH)}q_0(t) + \frac{(kH)^2}{(kH)^2 + \cosh^2(kH)}\tau_0(t)\right)\sin(kx) \tag{4.17}$$

Nous introduisons désormais les coefficients γ_{ij} définis par

$$
\begin{aligned}
\gamma_{11} &= \frac{\sinh(2kH) - 2kH}{2((kH)^2 + \cosh^2(kH))}, \\
\gamma_{12} &= \frac{(kH)^2}{(kH)^2 + \cosh^2(kH)}, \\
\gamma_{22} &= \frac{\sinh(2kH) + 2kH}{2((kH)^2 + \cosh^2(kH))}.
\end{aligned}
\tag{4.18}
$$

Nous obtenons enfin les expressions du champ de vitesses dans le fluide, dont les valeurs à la surface sont

$$v_z(x,H,t) = \frac{1}{2\eta k}\left[q_0(t)\gamma_{11} + \tau_0\gamma_{12}\right]\sin(kx), \tag{4.19}$$

$$v_x(x,H,t) = \frac{1}{2\eta k}\left[q_0(t)\gamma_{12} + \tau_0\gamma_{22}\right]\cos(kx), \tag{4.20}$$

Dans le cas particulier où $kH \ll 1$, les cœfficients γ_{ij} peuvent s'écrire plus simplement en développant les fonctions 4.18 en séries de Taylor. En ne gardant que le premier terme de ces séries, les cœfficients γ_{ij} s'écrivent

$$\begin{aligned} \gamma_{11} &\sim \frac{2}{3}(kH)^3, \\ \gamma_{12} &\sim (kH)^2, \\ \gamma_{22} &\sim 2kH. \end{aligned} \tag{4.21}$$

4.2.2 Déformation dans le film élastique

Le film élastique précontraint est modélisé en utilisant la théorie des plaques non linéaire du type von Kàrmàn (Timoshenko and Woinowsky-Krieger 1959). Le film est soumis à une force N, une force normale q et une force de cisaillement τ à l'interface film/fluide, comme le montre la figure 4.2. Nous notons respectivement w et u les déplacements verticaux et latéraux du feuillet moyen, par E le module de Young et par ν le coefficient de Poisson.

L'équation d'équilibre dans le plan normal au film et l'équilibre des moments dans le cas d'une modélisation bidimensionnelle s'écrivent :

$$q = \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 M}{\partial y^2} + N_x\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + N_y\frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + T_x\frac{\partial w}{\partial x} + T_y\frac{\partial w}{\partial y} \tag{4.22}$$

$$T_x = \frac{\partial N}{\partial x}, \quad T_y = \frac{\partial N}{\partial y}, \tag{4.23}$$

$$M = -D\left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2}\right), \quad D = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)}, \tag{4.24}$$

Cependant, nous considérons une modélisation unidimensionnelle en négligeant les termes suivant la composante y. Dans ce cas nous posons : $T_x = \tau$, $N_x = N$ et le système précédent s'écrit simplement

$$q = \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} + N\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \tau\frac{\partial w}{\partial x}, \tag{4.25}$$

$$\tau = \frac{\partial N}{\partial x}, \tag{4.26}$$

$$M = -D\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}, \quad D = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)}. \tag{4.27}$$

Nous supposons que le film est initialement précontraint dans les directions x et y et nous supposons que le déplacement est nul à l'état initial. Nous appellerons ε_0 la déformation résiduelle correspondante. Nous avons alors :

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x} - z\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \varepsilon_0, \qquad \varepsilon_{yy} = \varepsilon_0. \tag{4.28}$$

La condition de contraintes planes permet d'écrire la force normale N à partir de l'intégration de σ_{xx} sur l'épaisseur du film et devient

$$N = \int_{\frac{-h}{2}}^{\frac{h}{2}} \left[(C_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}})(\frac{\partial u}{\partial x} - z\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \varepsilon_0) + (C_{12} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}})\varepsilon_0 \right] dz. \tag{4.29}$$

De même M s'écrit,

$$M = -\int_{\frac{-h}{2}}^{\frac{h}{2}} (C_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}}) z^2 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} dz = -\frac{h^3}{12}(C_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}})\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}. \tag{4.30}$$

Dans le cas isotrope,

$$C_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}} = \frac{E}{1-\nu^2} \tag{4.31}$$

et

$$C_{12} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}} = \frac{\nu E}{1-\nu^2}. \tag{4.32}$$

Nous obtenons enfin

$$\begin{aligned} N &= \frac{E\varepsilon_0 h}{1-\nu} + \frac{Eh}{1-\nu^2}\frac{\partial u}{\partial x}, \qquad \text{et} \\ \tau &= \frac{Eh}{1-\nu^2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \end{aligned} \tag{4.33}$$

et d'après (4.30), nous retrouvons

$$D = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)}. \tag{4.34}$$

Nous nous proposons de résoudre le problème formé par les équations (4.25), (4.26), (4.34) et (4.33). Les inconnues à trouver sont u, w, τ, N, M. La *solution d'équilibre* de ce problème défini par un film élastique précontraint infini libre de contraintes à la surface supérieure est

$$u = w = 0, \quad M = 0, \quad \tau = 0, \quad N = \frac{Eh\varepsilon_0}{1-\nu}. \tag{4.35}$$

Pour étudier la stabilité de cette solution, nous allons étudier le comportement d'une famille de perturbations autour de la solution d'équilibre.

Perturbation : Soit le déplacement du feuillet moyen du film de la forme

$$w(x,t) = A(t)\sin(kx), \quad u(x,t) = B(t)\cos(kx), \tag{4.36}$$

où k est le nombre d'onde de la perturbation défini par $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$ et nous supposons que les amplitudes A(t) et B(t) sont faibles. En linéarisant les équations (4.25) et (4.26) , ceci conduit aux valeurs de force normale et de la force de cisaillement de la forme,

$$\begin{aligned} N &= \frac{E\varepsilon_0 h}{1-\nu} - B(t)\frac{Ekh}{1-\nu^2}\sin(kx), \\ \tau &= -\frac{Ehk^2}{1-\nu^2}B(t)\cos(kx), \\ q &= \frac{Ehk^2}{12(1-\nu^2)}\left[-12(1+\nu)\varepsilon_0 - (kh)^2\right]A(t)\sin(kx). \end{aligned} \tag{4.37}$$

4.2.3 Système couplé

A l'interface fluide visqueux/film élastique, nous supposons que les contraintes normales σ_{zz}, la contrainte de cisaillement σ_{xz} ainsi que les vitesses sont continues, c'est-à-dire,

$$q(x,t) = \sigma_{zz}(x,H,t), \quad \tau(x,t) = \sigma_{xz}(x,H,t). \tag{4.38}$$

Substituant l'équation (4.4) dans (4.38), nous déduisons de l'équation (4.37) que

$$q_0 = \frac{Ehk^2}{12(1-\nu^2)}\left[-12(1+\nu)\varepsilon_0 - (kh)^2\right]A(t), \text{et} \quad \tau_0 = -\frac{Ehk^2}{1-\nu^2}B(t). \tag{4.39}$$

Il reste à considérer la continuité du champ de vitesses à l'interface film/fluide, i.e,

$$v_x(x,H,t) = \frac{\partial u(x,t)}{\partial t}, \tag{4.40}$$

$$v_z(x,H,t) = \frac{\partial w(x,t)}{\partial t}. \tag{4.41}$$

Ce dernier système peut s'écrire sous la forme d'un système d'équations différentielles à coefficients constants à partir des équations (4.19), (4.20) et (4.36). Ainsi, nous obtenons,

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} A \\ \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & -\dfrac{\gamma_{12}}{\gamma_{22}}\beta \\ \\ \dfrac{\gamma_{12}}{\gamma_{11}}\alpha & -\beta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ \\ B \end{pmatrix}, \tag{4.42}$$

avec

$$\alpha = -\frac{Ekh}{24\eta(1-\nu^2)}\left[12\varepsilon_0(1+\nu) + (kh)^2\right]\gamma_{11}, \tag{4.43}$$

$$\tag{4.44}$$

$$\beta = \frac{Ekh}{2\eta(1-\nu^2)}\gamma_{22}. \tag{4.45}$$

où les γ_{ij} sont donnés par (4.18). Nous désignons par s_1 et s_2 les deux valeurs propres réelles de la matrice associée au système d'équation (4.42),

$$\begin{aligned} s_1 &= \tfrac{1}{2}\left[(\alpha-\beta)+\sqrt{(\alpha-\beta)^2+4\alpha\beta(1-\frac{\gamma_{12}^2}{\gamma_{11}\gamma_{22}})}\right] \\ s_2 &= \tfrac{1}{2}\left[(\alpha-\beta)-\sqrt{(\alpha-\beta)^2+4\alpha\beta(1-\frac{\gamma_{12}^2}{\gamma_{11}\gamma_{22}})}\right]. \end{aligned} \tag{4.46}$$

La solution générale prend alors la forme

$$\begin{aligned} A(t) &= A_1\exp(s_1 t)+A_2\exp(s_2 t), \\ B(t) &= B_1\exp(s_1 t)+B_2\exp(s_2 t). \end{aligned} \tag{4.47}$$

4.2.4 Analyse de stabilité linéaire

La stabilité des perturbations est determinée par le comportement de $A(t)$ et $B(t)$. En général, ceci est relié au signe de la partie réelle des racines s_1 et s_2 qui peuvent être complexes ou réelles. Ainsi, les amplitudes $A(t)$ et $B(t)$ décroissent exponentiellement si et ssi les parties réelles de s_1 et de s_2 sont négatives. Dans le cas général, il faut que

1. la trace de la matrice (4.42) soit négative c'est-à-dire $\alpha-\beta<0$,

2. le déterminant soit positif.

La valeur propre s_2 étant toujours négative, alors la condition de stabilité est réduite au signe de s_1. Nous commençons par rechercher la deuxième inégalité. Cette dernière nécessite que $-\alpha\beta(1-\frac{\gamma_{12}^2}{\gamma_{11}\gamma_{22}})<0$.

L'étude des fonctions de γ_{22}, γ_{11} ainsi que $(1-\frac{\gamma_{12}^2}{\gamma_{11}\gamma_{22}})$ montre qu'elles sont toujours positives. γ_{22} étant positive alors β l'est aussi et la condition det>0 est équivalente à $\alpha<0$ c'est-à-dire,

$$12\varepsilon_0(1+\nu)+(kh)^2>0. \tag{4.48}$$

Si cette inégalité est vérifiée, la première condition est automatiquement satisfaite. Les résultats de cette analyse peuvent donc être résumés comme suit :

1. Si la précontrainte est du type traction c'est-à-dire $\varepsilon_0\geq 0$, alors toutes les perturbations décroissent.

2. Si la précontrainte est du type compression $\varepsilon_0 < 0$, il existe un nombre d'onde critique
$$k_c = \frac{1}{h}\sqrt{-12\varepsilon_0(1+\nu)}, \tag{4.49}$$
tel que si les perturbations avec un nombre d'onde $k > k_c$, les perturbations décroissent, alors que si $k < k_c$, les perturbations croissent.

3. La Figure 4.3 montre le rapport de croissance normalisé $s\eta/E$, comme fonction du nombre d'onde normalisé kh, pour $\varepsilon_0 = -0.01$, $\nu = 0.3$ et plusieurs valeurs de H/h.

4. La vitesse de croissance à la limite d'une couche visqueuse infinie $H \gg h$ est donnée par
$$s_1 = \frac{Ehk}{24\eta(1-\nu^2)}\left(-12\varepsilon_0(1+\nu) - (kh)^2\right) \tag{4.50}$$
et le nombre d'onde et la vitesse de croissance les maximales sont donnés respectivement par
$$\begin{aligned} k_m &= \frac{1}{h}\sqrt{-4\varepsilon_0(1+\nu)} \\ s_m &= \frac{E}{12\eta(1-\nu^2)}\left(-4\varepsilon_0(1+\nu)\right)^{3/2}. \end{aligned} \tag{4.51}$$

5. La vitesse de croissance pour le cas $H \ll h$ est donné par
$$s_1 = \frac{Ehk}{144\eta(1-\nu^2)}\left(-12\varepsilon_0(1+\nu) - (kh)^2\right), \tag{4.52}$$
le nombre et la vitesse de croissance maximales sont respectivement
$$\begin{aligned} s_m &= \frac{16E}{9\eta(1-\nu^2)}\left(-\frac{H}{h}\varepsilon_0(1+\nu)\right)^3, \\ k_m &= \frac{1}{h}\sqrt{-8\varepsilon_0(1+\nu)}. \end{aligned} \tag{4.53}$$

6. Si l'épaisseur de la couche visqueuse est faible par rapport aux dimensions caractéristiques dans la direction latérale c'est-à-dire $kH \ll 1$, en développant s_1 en series de Taylor, nous obtenons
$$\gamma_{11} \sim \frac{2}{3}(kH)^3, \qquad \gamma_{12} \sim (kH)^2, \qquad \gamma_{22} \sim 2kH, \tag{4.54}$$
$$1 - \frac{\gamma_{12}^2}{\gamma_{11}\gamma_{22}} \sim \frac{1}{4}.$$
Nous remarquons que si nous substituons aux fonctions hyperboliques de l'analyse précédente ces approximations, nous retrouvons les mêmes conditions de stabilité. Ces hypothèses sont équivalentes à celles utilisées dans la théorie de lubrification et sur lesquelles nous reviendrons dans le chapitre suivant.

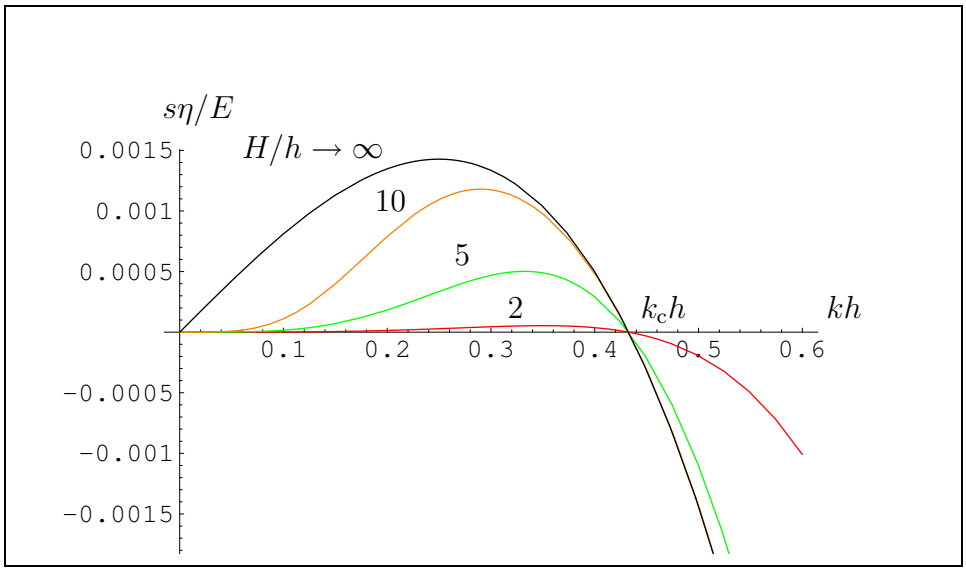

FIG. 4.3 – Vitesse de croissance normalisée des perturbations en fonction de la longueur d'onde normalisée pour une structure contenant un fluide visqueux et une couche contrainte.

Un résultat surprenant de l'analyse ci-dessus est que le nombre d'onde critique est indépendant du rapport H/h. Ceci est une conséquence directe de l'approximation de la composante horizontale du champ de déplacement dans le film à l'interface film/fluide par $u(x,t)$. Nous rappelons ici que la théorie des plaques suppose que le déplacement à l'interface film/substrat est

$$u(x,t) + \frac{h}{2}\frac{\partial w}{\partial x}(x,t). \tag{4.55}$$

Le premièr membre représente le déplacement dans la membrane alors que le deuxième terme est relié à la courbure.

Dans l'approximation faite dans la fonction (4.40), le deuxième terme de l'équation (4.55) a été négligé. Cependant, la prise en compte de ce terme change l'analyse qualitative de la stabilité linéaire.

4.3 Isotropie avec courbure

4.3.1 Formulation

Une des principales hypothèses de la théorie des plaques considère le déplacement latéral comme une fonction affine de z. Si l'on tient compte de ce terme, la continuité de champ de vitesse à l'interface film/fluide décrite par (4.40) et (4.41) s'en trouve modifiée. En effet

$$v_x(x,H,t) = \frac{\partial(u(x,t) + \frac{h}{2}\frac{\partial w}{\partial x})}{\partial t}, \tag{4.56}$$

$$v_z(x,H,t) = \frac{\partial w(x,t)}{\partial t}. \tag{4.57}$$

Ce dernier système peut s'écrire sous la forme d'un système d'équations différentielles en A et B à coefficients constants à partir des équations (4.19), (4.20) comme suit

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} A \\ \\ B \end{pmatrix} = \overbrace{\begin{pmatrix} \alpha & -\frac{\gamma_{12}}{\gamma_{22}}\beta \\ \\ \left(\frac{\gamma_{12}}{\gamma_{11}} - \frac{kh}{2}\right)\alpha & -\left(1 - \frac{kh}{2}\frac{\gamma_{12}}{\gamma_{22}}\right)\beta \end{pmatrix}}^{\Pi} \begin{pmatrix} A \\ \\ B \end{pmatrix}, \tag{4.58}$$

avec $s_{1,2}$, les valeurs propres définies par :

$$s_{1,2} = \frac{1}{2}\left[(\alpha - \beta(1 - \frac{kh}{2}\frac{\gamma_{12}}{\gamma_{22}})) \pm \sqrt{(\alpha - \beta(1 - \frac{kh}{2}\frac{\gamma_{12}}{\gamma_{22}})^2 + 4\alpha\beta(1 - \frac{\gamma_{12}^2}{\gamma_{11}\gamma_{22}})}\right]. \tag{4.59}$$

Encore une fois, la stabilité est obtenue si et ssi les parties réelles des valeurs propres $s_1$et s_2 sont négatives. Nous devons avoir comme a été expliqué dans le cas isotrope :

$$\begin{aligned} &\mathrm{tr}(\Pi) < 0 \Longrightarrow \alpha - (1 - \frac{hk}{2}\frac{\gamma_{12}}{\gamma_{22}})\beta < 0 \\ &\det(\Pi) > 0 \Longrightarrow \alpha < 0. \end{aligned} \tag{4.60}$$

4.3.2 Analyse de la stabilité

Les deux conditions précédemment citées sont nécessaires et suffisantes pour obtenir la stabilité du film. Elles peuvent se résumer ainsi :

1. La condition relative à (4.60.2). Nous pouvons la reécrire en posant le changement de variables $r = h/H$, $X = kH$ et $\hat{\varepsilon}_0 = -12\varepsilon_0(1+\nu)$. Ceci implique
$$\hat{\varepsilon}_0 < (Xr)^2, \tag{4.61}$$
2. La condition donnée par (4.60.1), soit
$$\hat{\varepsilon}_0 < (Xr)^2 + 12\frac{\sinh(2X) + 2X - rX^3}{\sinh(2X) - 2X}. \tag{4.62}$$

Il est évident que la condition 2. est plus restrictive que la condition 1. si et seulement si le second terme de la partie droite de l'équation (4.62) est négatif. Nous notons que pour chaque X positif fixé, il existe une seule valeur de $r(X)$ donnée par

$$r(X) = \frac{\sinh(2X) + 2X}{X^3}, \tag{4.63}$$

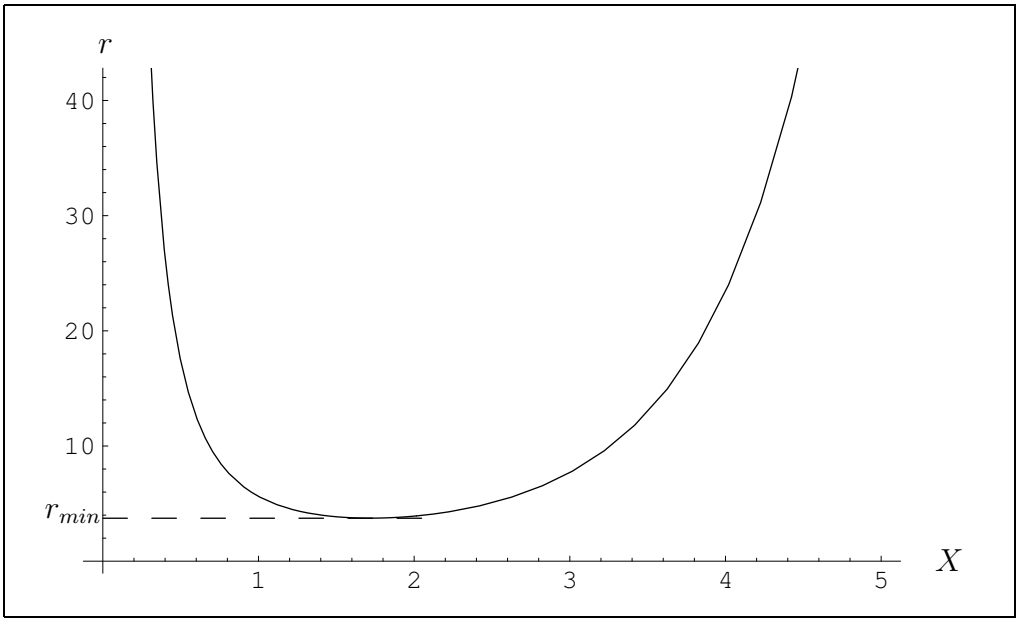

FIG. 4.4 – Graphe de $r(X)$ donné par l'équation (4.63).

telle que la partie droite de l'équation (4.62) soit positive si $r < r(X)$, et négative pour $r > r(X)$. Le graphe de la fonction $r(X)$ est présenté dans la Figure 4.4. Le minimum de cette fonction est de l'ordre $r_{\text{min.}} = 3.7374$ et il est atteint en $X_{\text{min}} = 1.71$.

Nous pouvons conclure que pour des valeurs de $r = h/H$ plus petites que r_{min}, la condition de stabilité obtenue en introduisant le terme de courbure est la même que celle obtenue par la méthode de Suo (LIANG et al. 2002). Cependant pour $r > r_{\text{min}}$ la condition de stabilité est

$$\hat{\varepsilon}_0 < \min((Xr)^2, (Xr)^2 + 12\frac{\sinh(2X) + 2X - rX^3}{\sinh(2X) - 2X}). \tag{4.64}$$

L'analyse précédente montre que pour r fixé, le minimum des inégalités (4.61) et (4.62) est la fonction

$$(Xr)^2 \text{ pour } X \in (0, X_{\text{min}}) \cup (X_{\text{max}}, \infty)$$

et

$$(Xr)^2 + 12\frac{\sinh(2X) + 2X - rX^3}{\sinh(2X) - 2X} \text{ pour } X \in (X_{\text{min}}, X_{\text{max}}),$$

comme nous pouvons le constater sur les figures 4.5 et 4.6.

Nous avons déjà vu que la frontière de stabilité d'un film mince élastique précontraint sur un fluide visqueux ne dépend pas du rapport entre l'épaisseur de la couche du fluide ni celle du film. Cependant, nous venons de montrer que la prise en compte du terme de courbure dans la fonction (4.55) change la condition de stabilité. En effet, le nombre d'onde critique k_c dépend du rapport h/H. Par ailleurs, nous retrouvons le résultat de Suo dans l'équation (4.49) pour un rapport particulier de h/H.

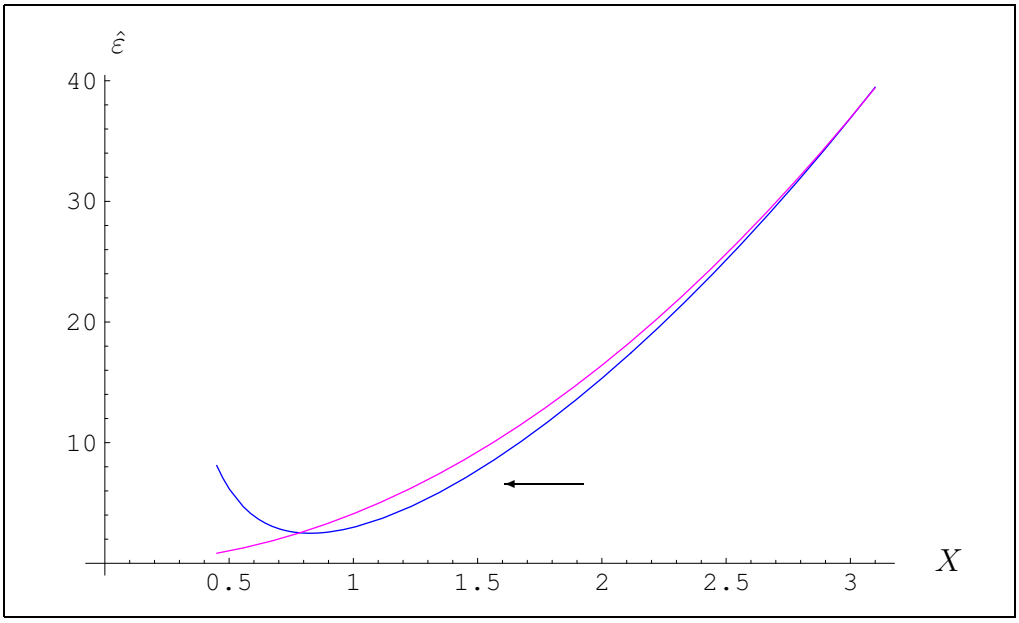

FIG. 4.5 – Représentation de la déformation $\hat{\varepsilon}$ en fonction de X pour les deux fonctions représentées par l'équation (4.64) pour r fixé. La courbe supérieure représente. $(Xr)^2 + 12\dfrac{\sinh(2X)+2X-rX^3}{\sinh(2X)-2X}$

4.4 Etude de la stabilité dans le cas anisotrope

Le principal résultat de stabilité de Suo est obtenu pour les matériaux isotropes. Une question très importante se pose : quel est le rôle de l'anisotropie sur la longueur d'onde critique, quel est son effet sur la vitesse de croissance maximale des modes instables et l'orientation des perturbations ? Pour traiter ce problème nous nous proposons d'étudier le problème pour des matériaux cubiques. Dans ce cas, les perturbations seront orientées d'un angle θ par rapport aux axes de symétrie du cristal cubique. Dans cette partie, nous ignorons les effets de courbure, et nous imposons les mêmes conditions de continuité que celles données par HUANG, YIN, HOBART, STURM , and SUO (2002).

4.4.1 État des contraintes dans le film

Nous allons désormais utiliser les coordonnées $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z})$ pour les axes de symétrie du cristal cubique et $(\boldsymbol{x'}, \boldsymbol{y'}, \boldsymbol{z})$ pour les axes des perturbations 2D.

Nous notons θ l'angle que fait l'axe $\boldsymbol{x}$ avec l'axe $\boldsymbol{x'}$. Les composantes du vecteur $\boldsymbol{v}$ dans le repère $(\boldsymbol{x'}, \boldsymbol{y'}, \boldsymbol{z})$ s'expriment dans le repère $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z})$ selon la relation

$$\begin{pmatrix} v_{x'} \\ v_{y'} \\ v_z \end{pmatrix} = \boldsymbol{Q} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} \tag{4.65}$$

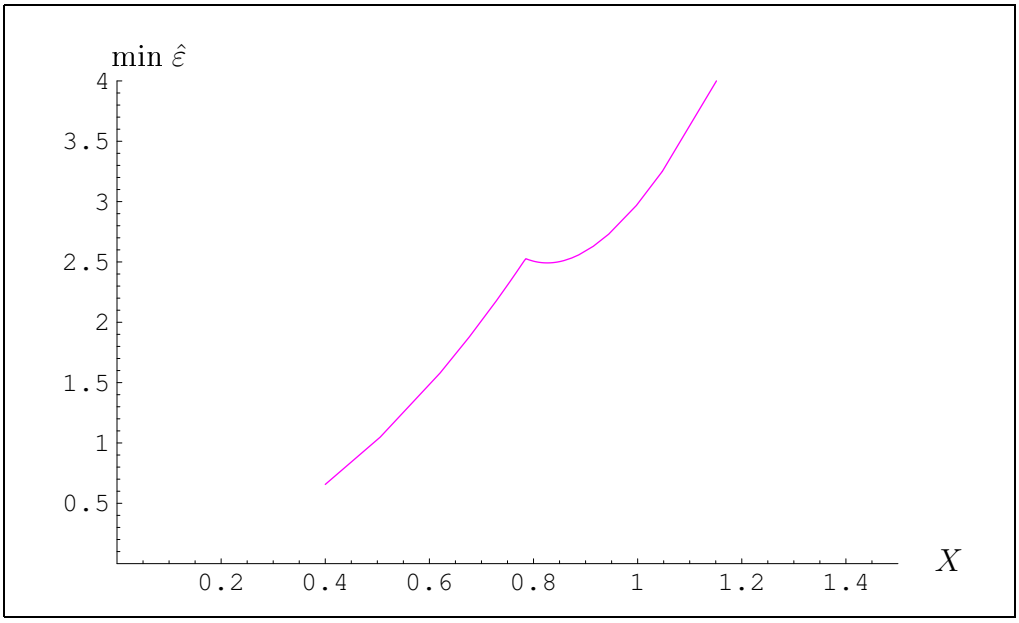

FIG. 4.6 – Représentation de la fonction minimum des fonctions $(Xr)^2$ et $(Xr)^2 + 12\dfrac{\sinh(2X) + 2X - rX^3}{\sinh(2X) - 2X}$ en fonction de X pour r donné.

où

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{4.66}$$

De même, nous remplacerons $\cos\theta$ et $\sin\theta$ respectivement par c et s. Nous obtenons alors pour les composantes du tenseur des contraintes

$$\begin{aligned}
\sigma_{x'x'} &= c^2\sigma_{xx} + 2cs\tau_{xy} + s^2\sigma_{yy}, && (4.67)\\
\sigma_{y'y'} &= c^2\sigma_{yy} - 2cs\tau_{xy} + s^2\sigma_{xx}, && (4.68)\\
\sigma_{zz} &= \sigma_{zz}, && (4.69)\\
\tau_{x'y'} &= (c^2 - s^2)\tau_{xy} + sc(\sigma_{yy} - \sigma_{xx}), && (4.70)\\
\tau_{x'z} &= c\tau_{xz} + s\tau_{yz}, && (4.71)\\
\tau_{y'z} &= c\tau_{yz} - s\tau_{xz}. && (4.72)
\end{aligned}$$

Nous suggérons d'utiliser pour les réponses anisotropes la notation de l'ingénieur, par rapport aux axes de symétries du cristal cubique :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{xz} \\ \tau_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix}. \tag{4.73}$$

Nous retrouvons le cas isotrope si nous prenons $C_{11} = \lambda + 2\mu$, $C_{12} = \lambda$ et $C_{44} = 2\mu$. Mais en général, pour un matériau cubique les trois constantes sont indépendantes.

On introduit le paramètre suivant pour mesurer l'anisotropie

$$\xi = \frac{C_{12} + C_{44}}{C_{11}} - 1. \tag{4.74}$$

Suivant le signe de ξ, nous allons pouvoir diviser les matériaux cubiques en deux classes, pour $\xi < 0$ et pour $\xi > 0$.

Dans le repère $(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{y}', \boldsymbol{z})$, les composantes du tenseur de Hooke seront

$$\begin{pmatrix} C'_{11} & C'_{12} & C_{12} & 0 & 0 & C'_{16} \\ C'_{12} & C'_{11} & C_{12} & 0 & 0 & C'_{26} \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ \frac{C'_{16}}{2} & \frac{C'_{26}}{2} & 0 & 0 & 0 & C'_{66} \end{pmatrix} \tag{4.75}$$

où, en utilisant s_2 et s_4 respectivement pour $\sin 2\theta$ et $\sin 4\theta$, on a :

$$C'_{11} = C_{11}(1 + \frac{s_2^2 \xi}{2}) \tag{4.76}$$

$$C'_{12} = C_{12} - C_{11}\frac{s_2^2 \xi}{2} \tag{4.77}$$

$$C'_{16} = \frac{C_{11} s_4 \xi}{2} \tag{4.78}$$

$$C'_{26} = -\frac{C_{11} s_4 \xi}{2} \tag{4.79}$$

$$C'_{66} = C_{44} - s_2^2 \xi C_{11} \tag{4.80}$$

L'étape suivante consiste à trouver les forces induites dans le film par les perturbations du champ de déplacement de la membrane. Pour obtenir les équations analogues à (4.42) dans le cas anisotrope, nous commençons par la condition des contraintes planes dans le repère $(\boldsymbol{x'}, \boldsymbol{y'}, \boldsymbol{z})$, qui s'écrit

$$\sigma_{x'x'} = (C'_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}})(\varepsilon_0 + \frac{\partial u_{x'}}{\partial x'} - z\frac{\partial^2 w}{\partial x'^2}) + (C'_{12} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}})\varepsilon_0, \tag{4.81}$$

donc, en tenant compte de (4.77)-(4.78)

$$\sigma_{x'x'} = (C'_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}})(\frac{\partial u_{x'}}{\partial x'} - z\frac{\partial^2 w}{\partial x'^2}) + (C_{11} + C_{12} - 2\frac{C_{12}^2}{C_{11}})\varepsilon_0. \tag{4.82}$$

L'intégration de $\sigma_{x'x'}$ sur l'épaisseur du film donne dans le cas anisotrope l'analogue de (4.33), tel que

$$N' = \int_{\frac{-h}{2}}^{\frac{h}{2}} \left[(C'_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}})(\frac{\partial u_{x'}}{\partial x'} - z\frac{\partial^2 w}{\partial x'^2}) + (C_{11} + C_{12} - 2\frac{C_{12}^2}{C_{11}})\varepsilon_0 \right] dz \tag{4.83}$$

$$\Longrightarrow N' = (C_{11} + C_{12} - 2\frac{C_{12}^2}{C_{11}})\varepsilon_0 h + h(C'_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}})\frac{\partial u_{x'}}{\partial x'}. \tag{4.84}$$

et

$$\tau' = h(C'_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}})\frac{\partial^2 u_{x'}}{\partial x'^2} \tag{4.85}$$

L'équation (4.84) est une extension de (4.33) donnée dans le cas isotrope. En effet, il suffit de prendre les constantes suivantes pour retrouver le cas isotrope.

$$C_{11} = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)}, \quad C_{12} = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad C_{44} = \frac{E}{1+\nu}. \tag{4.86}$$

Par définition, M' est obtenue par intégration sur l'épaisseur du film de $z\sigma_{x'x'}$. Nous obtenons,

$$M' = \int_{\frac{-h}{2}}^{\frac{h}{2}} \left[(C'_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}})(\frac{\partial u_{x'}}{\partial x'} - z\frac{\partial^2 w}{\partial x'^2}) + (C_{11} + C_{12} - 2\frac{C_{12}^2}{C_{11}})\varepsilon_0 \right] z\, dz, \tag{4.87}$$

ou

$$M' = \int_{\frac{-h}{2}}^{\frac{h}{2}} \left[(C'_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}}) \left(\frac{\partial u_{x'}}{\partial x'} + (C_{11} + C_{12} - 2\frac{C_{12}^2}{C_{11}})\, \varepsilon_0 \right) \right] z\, dz - \tag{4.88}$$

$$(C'_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}}) \int_{\frac{-h}{2}}^{\frac{h}{2}} \frac{\partial^2 w}{\partial x'^2}\, z^2\, dz.$$

Nous notons

$$M' = -D'\frac{\partial^2 w}{\partial x'^2}, \tag{4.89}$$

où

$$D' = \frac{h^3}{12}\left(C_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}} + \frac{C_{11}\xi s_2^2}{2} \right). \tag{4.90}$$

Encore une fois, l'équilibre dans le film mince dans le cas d'une modélisation unidimensionnelle en négligeant la dépendance de la composante y est

$$q' = \frac{\partial^2 M'}{\partial x'^2} + N'\frac{\partial^2 w}{\partial x'^2} + \tau'\frac{\partial w}{\partial x'}, \quad \tau' = \frac{\partial N'}{\partial x'}. \tag{4.91}$$

Nous supposons que le film est un milieu avec une condition de surface libre infini. La solution du problème formé par les équations (4.84), (4.85), (4.89) et (4.91) donne

$$u = w = 0, \quad \tau = 0, \quad M = 0 \quad et \quad N = (C_{11} + C_{12} - 2\frac{C_{12}^2}{C_{11}})\varepsilon_0 h. \tag{4.92}$$

Pour étudier la stabilité de la solution, nous nous proposons de perturber le champ de déplacements dans le film de la forme suivante

$$w(x', t) = A(t)\sin(kx'), \quad u(x', t) = B(t)\cos(kx'). \tag{4.93}$$

Dans le cas des faibles amplitudes, nous obtenons pour q' et τ'

$$\begin{aligned} q' &= A(t)k^2\sin(kx')\left[(C_{11}-\frac{C_{12}^2}{C_{11}}+C_{11}\xi s_2^2/2)\frac{h^3k^2}{12}\right. \\ &\quad \left.-\left(C_{11}+C_{12}-2\frac{C_{12}^2}{C_{11}})\varepsilon_0 h\right]\right., \end{aligned} \tag{4.94}$$

$$\tau' = -B(t)k^2h(C_{11}-\frac{C_{12}^2}{C_{11}}+C_{11}s_2^2\xi/2)\cos(kx'). \tag{4.95}$$

4.4.2 Equations dans le fluide

Le fluide visqueux est considéré isotrope. Par ailleurs, les équations d'équilibre et la loi de comportement sont identiques à celles utilisées précédemment.

Pour une perturbation dans la direction $\boldsymbol{x'}$ nous obtenons

$$v_z(x',H,t)=\frac{1}{2\eta k}\left[q_0'\gamma_{11}+\tau_0'\gamma_{12}\right]\sin(kx'), \tag{4.96}$$

$$v_{x'}(x',H,t)=\frac{1}{2\eta k}\left[q_0'\gamma_{12}+\tau_0'\gamma_{22}\right]\cos(kx'), \tag{4.97}$$

où les cœfficients γ_{ij} sont ceux développés dans les équations (4.18).

4.4.3 Film mince et fluide couplés

La couche visqueuse et le film sont couplés à l'interface où nous supposons que les contraintes et les vitesses sont continus. En effet,

$$q(x,t)=\sigma_{zz}(x,H,t), \tag{4.98}$$

$$\tau(x,t)=\tau_{xz}(x,H,t), \tag{4.99}$$

et en déplacement,

$$v_x(x,H,t)=\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}, \tag{4.100}$$

$$v_z(x,H,t)=\frac{\partial w(x,t)}{\partial t}. \tag{4.101}$$

Il suit que le système analogue à (4.42) est exprimé dans le cas d'un film anisotrope à symétrie cubique par

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} A \\ \\ B \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \alpha' & -\frac{\gamma_{12}}{\gamma_{22}}\beta' \\ \\ \frac{\gamma_{12}}{\gamma_{11}}\alpha' & -\beta' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ \\ B \end{pmatrix}, \tag{4.102}$$

tel que

$$\alpha' = -\frac{hk}{24\eta}\left(E_2(kh)^2 + 12E_1\varepsilon_0\right)\gamma_{11} \tag{4.103}$$

$$\beta' = \frac{E_2 kh}{2\eta}\gamma_{22} \tag{4.104}$$

et

$$E_1 = C_{11} + C_{12} - 2\frac{C_{12}^2}{C_{11}} \tag{4.105}$$

$$E_2 = C_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}} + C_{11}\xi s_2^2/2. \tag{4.106}$$

4.4.4 Analyse de la stabilité

Les conditions nécessaires et suffisantes pour la décroissance exponentielle des solutions (qui traduisent la stabilité du film) sont exprimées respectivement par det$>$0 et tr$<$0, c'est-à-dire,

$$\alpha' - \beta' \leq 0, \qquad \alpha'\beta' \leq 0. \tag{4.107}$$

Commençons par la seconde inégalité. Tout d'abord, nous avons trois conditions assurant la positivité du tenseur de Hooke,

$$C_{11} > 0, \quad -\frac{1}{2} < \frac{C_{12}}{C_{11}} < 1, \quad C_{44} > 0. \tag{4.108}$$

Donc si nous exprimons E_2 par

$$E_2 = C_{11}\left((1 - \frac{s_2^2}{2}) + \frac{s_2^2}{2}\frac{C_{12}}{C_{11}} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}^2}\right) + C_{44}\frac{s_2^2}{2}, \tag{4.109}$$

il est suffisant de prouver que le facteur de C_{11} est positif. Ainsi, si nous étudions la fonction définie par :

$$f(X) = -X^2 + \frac{s_2^2}{2}X + (1 - \frac{s_2^2}{2}), \qquad X = \frac{C_{12}}{C_{11}} \tag{4.110}$$

nous remarquons qu'elle est croissante entre $]-1/2, s_2^2/2[$ et décroissante dans l'intervalle $]s_2^2/2, 1[$ en restant toujours positive entre $]-1/2, 1[$ et donc β' est positive. Finalement la seconde inégalité de l'équation (4.107) est équivalente à $\alpha' < 0$. Il suit que la première inégalité est automatiquement satisfaite. Par conséquent, la condition de stabilité est donnée par $\alpha' < 0$ et le nombre d'onde critique k_c est obtenue par

$$\left(E_2(kh)^2 + 12E_1\varepsilon_0\right) = 0. \tag{4.111}$$

Nous prouvons aussi que E_1 est positif entre $]-1/2, 1[$ en étudiant la fonction :

$$E_1(X) = f(X) = -2X^2 + X + 1, \quad X = \frac{C_{12}}{C_{11}}.$$

Nous obtenons alors pour le nombre d'onde critique

$$k_{\rm c} = \frac{1}{h}\sqrt{-12\varepsilon_0\frac{E_1}{E_2}} = \frac{1}{h}\sqrt{-12\varepsilon_0\frac{C_{11}^2 - 2C_{12}^2 + C_{11}C_{12}}{C_{11}^2 - C_{12}^2 + C_{11}^2\xi s_2^2/2}}. \tag{4.112}$$

L'expression du nombre d'onde critique $k_{\rm c}$ permet de voir que celui là dépend du coefficient d'anisotropie ξ et de θ. Par ailleurs, l'instabilité ne peut apparaître qu'en compression c'est-à-dire si $\varepsilon_0 < 0$.

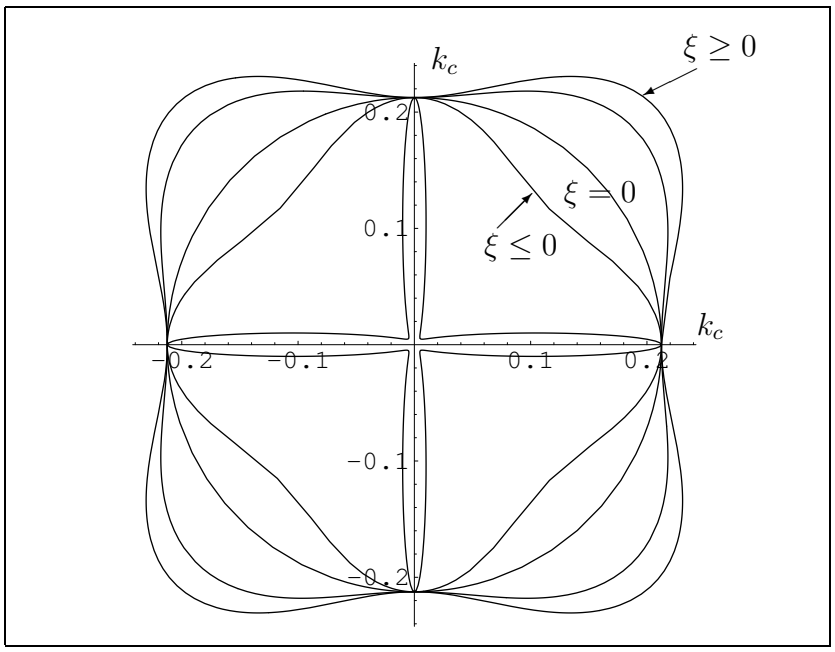

FIG. 4.7 – Courbes de $k_{\rm c}$ en fonctions de θ pour différentes valeurs de ξ; la courbe supérieure représente la limite inférieure obtenue pour $C_{44} \to 0$; la courbe inférieure est obtenue pour une valeur de C_{44} très grande ; les trois courbes restantes sont des exemples typiques de $\xi < 0$, $\xi = 0$ et $\xi > 0$.

La Figure 4.7 montre l'évolution du nombre d'onde critique k_c en fonction de θ pour différentes valeurs de ξ. Il existe en effet une dépendance de la longueur d'onde critique qui limite le domaine de stabilité vis à vis de l'angle θ.

Vitesse de croissance

La vitesse de croissance des perturbations est donnée par la formule utilisée en (4.46), c'est-à-dire,

$$s = \frac{1}{2}\left[\alpha' - \beta' + \sqrt{(\alpha'-\beta')^2 + 4\alpha'\beta'(1-\gamma_{12}^2/(\gamma_{11}\gamma_{22}))}\right] \tag{4.113}$$

et à la limite $1/r = H/h \to \infty$ nous obtenons

$$s_1 = -\frac{hk}{24\eta}\left[E_2(kh)^2 + 12E_1\varepsilon_0\right]. \tag{4.114}$$

La vitesse de croissance des perturbations dépend de θ et du coefficient d'anisotropie ξ dans l'expression de E_2. Il existe alors des directions pour lesquelles la vitesse de développement des ondulations sera plus rapide et d'autres plus lente.

Longueur d'onde maximale

Les résultats ci-dessus nous permettent de discuter l'influence de l'anisotropie sur l'orientation des perturbations et la longueur d'onde critique. En effet, d'un point de vue qualitatif, si nous partons d'une perturbation arbitraire du déplacement de la surface, la composante qui se manifeste sera celle qui a la plus grande vitesse de croissance. Il existe alors un nombre d'onde noté k_m qui donne la vitesse de croissance maximale. Nous interprétons que ce nombre d'onde est lié à la longueur des ondes des ondulations qui apparaissent expérimentalement. Il est obtenu par $\dfrac{\partial s_1}{\partial k} = 0$, nous obtenons alors

$$k_m h = 2\sqrt{\frac{-\varepsilon_0(C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2 + C_{11}^2)}{C_{11}^2 - C_{12}^2 + C_{11}^2\xi\sin(2\theta)^2}}. \tag{4.115}$$

Nous remarquons que le nombre d'onde k_m varie suivant ξ et θ et nous rencontrons trois situations :

1. Si $\xi > 0$, alors k_m atteint son maximum lorsque $C_{11}^2 - C_{12}^2 + C_{11}^2\xi\sin(2\theta)^2$ est minimal, c'est-à-dire lorsque $\sin(2\theta)^2 = 0$ c'est-à-dire $\theta = 0$. Nous concluons que le nombre d'onde maximal est atteint pour $\theta = 0$. Par ailleurs, dans ce cas, la

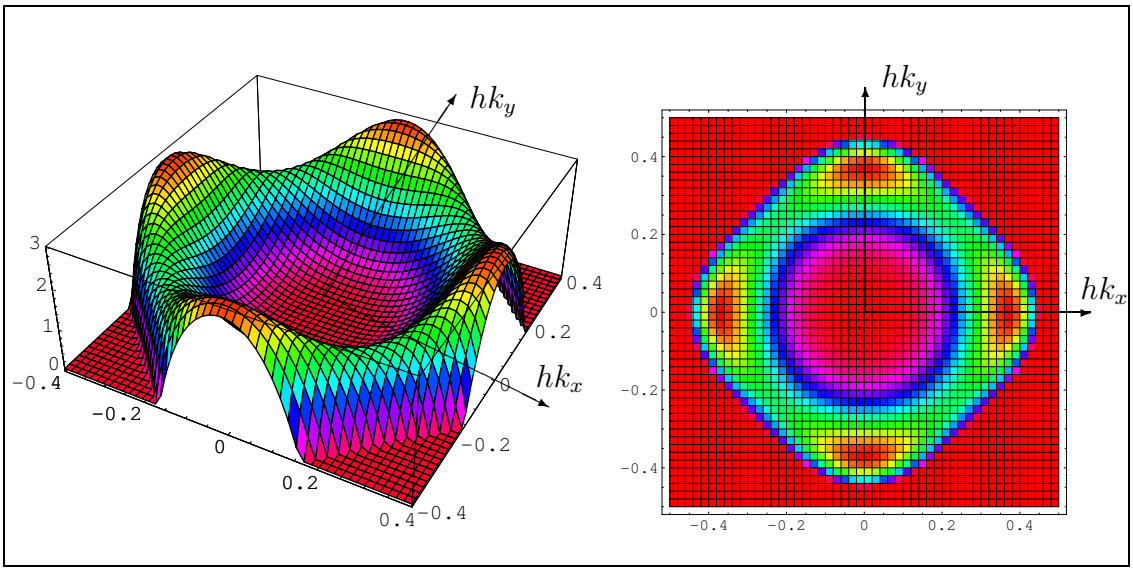

FIG. 4.8 – Vitesse de croissance normalisé s comme fonction de kh et θ pour $\xi > 0$.

vitesse de croissance maximale est atteinte dans la direction cristallographique [100].

En effet, $s_m = \dfrac{1}{12\eta}\dfrac{(-4\varepsilon_0 E_1)^{3/2}}{\sqrt{E_2}}$, est fonction de θ et son maximum est atteint lorsque E_2 est minimal c'est à dire $\sin(2\theta)^2 = 0$ c'est-à-dire lorsque $\theta = 0$ comme nous le présentons sur la Figure 4.8. Dans ce cas, l'expression de s_m devient :

$$s_m = \frac{1}{12\eta}\frac{(-4\varepsilon_0(C_{11}+C_{12}-2\dfrac{C_{12}^2}{C_{11}}))^{3/2}}{\sqrt{C_{11}-\dfrac{C_{12}^2}{C_{11}}}},$$

2. Si $\xi < 0$, alors k_m est maximal lorsque $C_{11}^2 - C_{12}^2 + C_{11}^2\xi\sin(2\theta)^2$ est maximal, ceci est atteint lorsque $\sin(2\theta)^2 = 1$ c'est-à-dire pour $\theta = \pm\pi/4$. La vitesse de croissance maximale est alors atteinte dans la direction cristallographique [110] comme indiqué sur la Figure 4.9. Nous obtenons alors :

$$s_m = \frac{1}{12\eta}\frac{(-4\varepsilon_0(C_{11}+C_{12}-2\dfrac{C_{12}^2}{C_{11}}))^{3/2}}{\sqrt{C_{11}(1+\xi/2)-\dfrac{C_{12}^2}{C_{11}}}}.$$

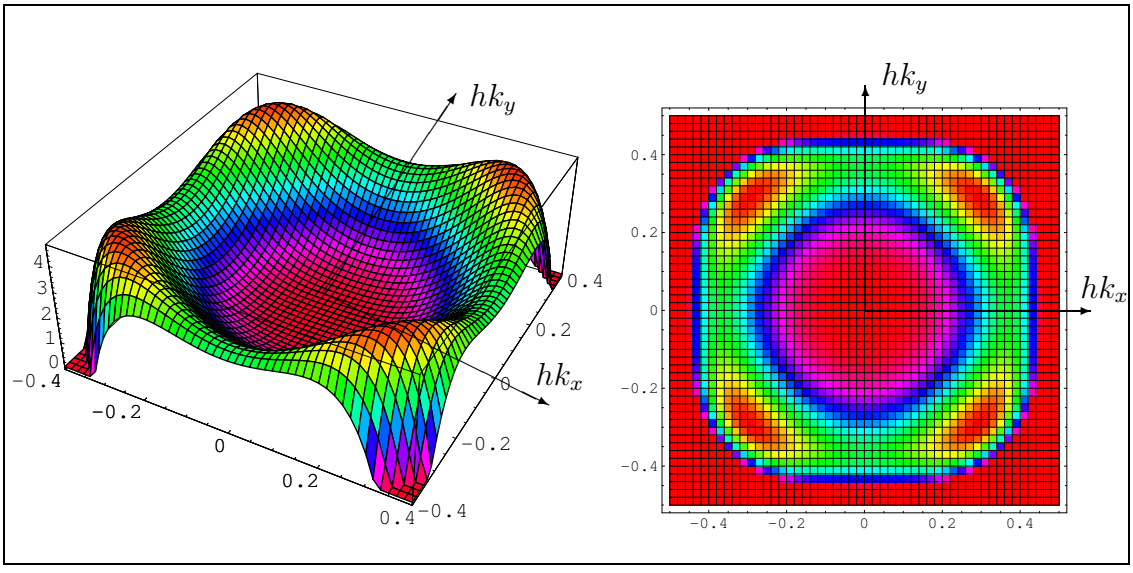

FIG. 4.9 – Vitesse de croissance normalisée s comme fonction de hk et θ pour $\xi < 0$.

Par ailleurs, il est intéressant d'observer que ξ peut être négatif si C_{44} est assez petit, et ceci apparaît exactement quand

$$0 < C_{44} < C_{11} - C_{12}. \tag{4.116}$$

Dans ce cas, non seulement k_m atteint son maximum à $\pi/4$, mais la vitesse maximale de croissance est aussi atteinte dans cette direction.

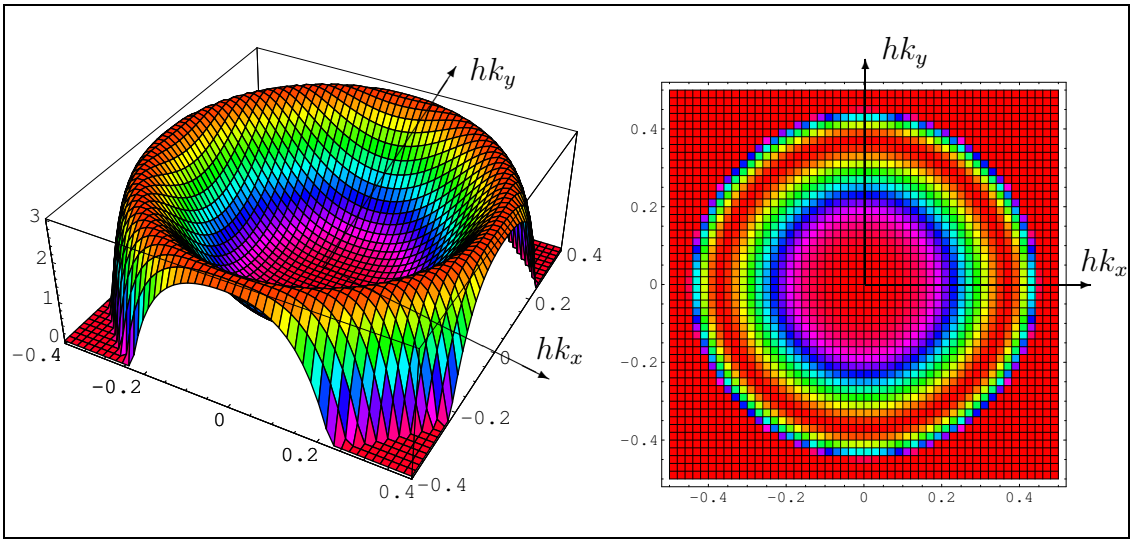

FIG. 4.10 – Vitesse de croissance normalisée s comme fonction de kh et θ pour $\xi = 0$, relatif à un matériau de constantes élastiques.

3. Si $\xi = 0$, la vitesse de croissance et le nombre d'onde k sont indépendants de l'orientation des perturbations. Dans ces conditions nous retrouvons le cas isotrope présenté sur la Figure 4.10.

4.4.5 Applications numériques

Nous nous proposons dans ce qui suit de confronter quelques résultats expérimentaux issus de la littérature au modèle théorique anisotrope décrit précédemment. Pour cela, nous étudions deux structures différentes. La première décrit le comportement d'une couche de $In_{0.65}Ga_{0.35}As$ (matériaux III-V) sur un matériau de très faible viscosité, la cire Apiezon. La deuxième structure est formé d'un alliage SiGe (matériaux II-VI) déposé sur une couche de verre boro-phosphoro-silicate (BPSG) de viscosité élevée.

• **Cas I : $In_{0.65}Ga_{0.35}As/InP$**

Nous considérons les matériaux semi-conducteurs III-V étudiés par KOSTRZEWA (2003) et plus précisément l'alliage d'$In_{0.65}Ga_{0.35}As$.

Une bonne approximation des constantes élastiques des alliages ternaires s'obtient à l'aide de la loi du mélange. Nous résumons dans le tableau 4.1 les éléments des tenseurs d'élasticité ainsi que les paramètres de maille de InAs, GaAs, $In_{0.65}Ga_{0.35}As$.

	a (10^{-9}m)	C_{11} (10^{10}N/m^2)	C_{12} (10^{10}N/m^2)	C_{44} (10^{10}N/m^2)
InAs	0.605	8.32	4.52	7.90
GaAs	0.565	11.90	5.38	11.9
$In_{0.65}Ga_{0.35}As$	0.591	9.57	4.82	9.30

TAB. 4.1 – Valeurs numériques des paramètres de maille, des constantes élastiques pour InAs et GaAs et $In_{0.65}Ga_{0.35}As$.

Soit $a_0 = 0.586\,\text{nm}$ le paramètre de maille du substrat d'InP. La déformation résiduelle due au dépôt de la couche $In_{0.65}Ga_{0.35}As$ sur l'InP est $\varepsilon_0 = 1 - a/a_0$, soit $\varepsilon_0 = -0.008$. La préstructure est ensuite déposée sur une couche de cire (Apiezon) de viscosité $\eta = 10^2\,\text{Po}$. L'élimination de la couche d'InP conduit à la réalisation d'une structure d'$In_{0.65}Ga_{0.35}As$ d'épaisseur $h = 30\,\text{nm}$ sur un substrat visqueux d'épaisseur $H = 20\,\mu\text{m}$ (Figure 4.11).

Dans ce cas, le paramètre d'anisotropie calculé à partir des constantes élastiques et de l'équation (4.74) est $\xi = 0.475$. Le rapport entre l'épaisseur du film visqueux et la couche contrainte étant très grand ($H/h = 667$), la vitesse de croissance s donnée par l'équation (4.113) peut être approchée à la limite $H/h \to \infty$ par :

$$s_1 = -\frac{kh}{24\eta}\left[E_2(kh)^2 + 12E_1\varepsilon_0\right]. \tag{4.117}$$

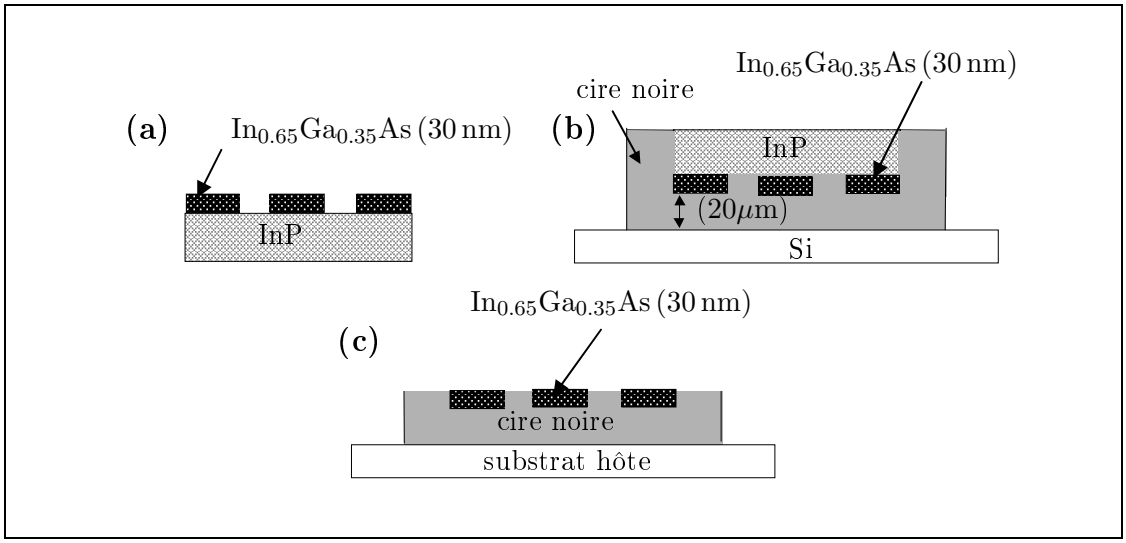

FIG. 4.11 – Schéma simplifié de préparation des structures : (a) formation d'une préstructure, (b) collage sur la cire, (c) élimination de la couche d'InP.

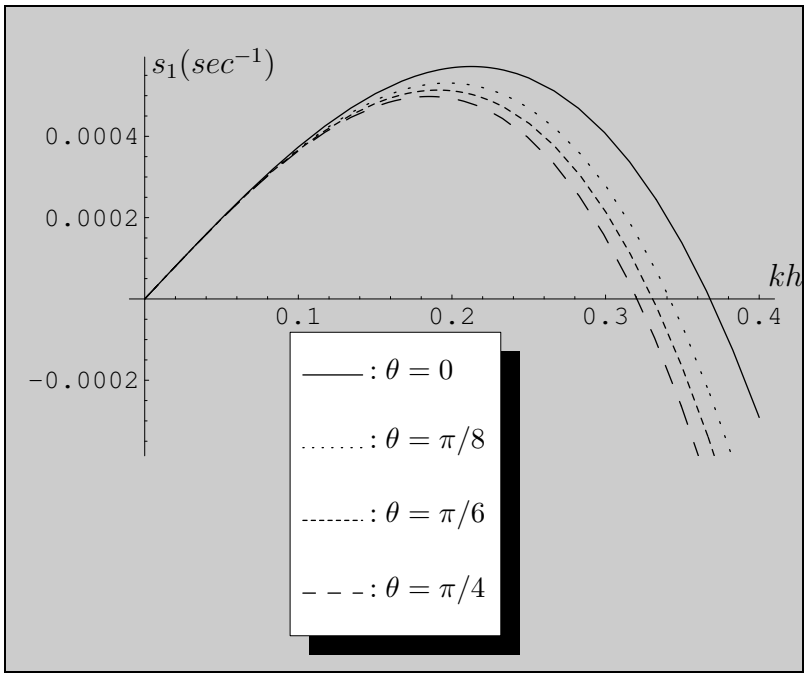

FIG. 4.12 – Vitesse de croissance s en fonction de kh pour différentes valeurs de θ.

Les deux courbes relatives aux vitesses de croissance s et s_1 étant confondues, nous traçons alors la vitesse de croissance s_1 en fonction de kh pour plusieurs valeurs de θ ($\xi = 4.75$). La Figure 4.12 montre que la vitesse maximale de croissance des ondulations décroît en fonction de θ et du nombre d'onde critique k_c. Nos prédictions théoriques montrent que la direction privilégiée des ondulations est celle relative à

la plus grande vitesse de croissance ($\theta = 0$), c'est à dire celle qui suit la direction cristallographique [100].

En remplaçant les constantes élastiques présentées dans le tableau 4.1 dans l'équation (4.111), nous obtenons $\lambda_c = 0.371\,\mu$m. Dans ce cas, la longueur d'onde qui correspond à la vitesse de croissance maximale est $\lambda_m = 0.643\,\mu$m.

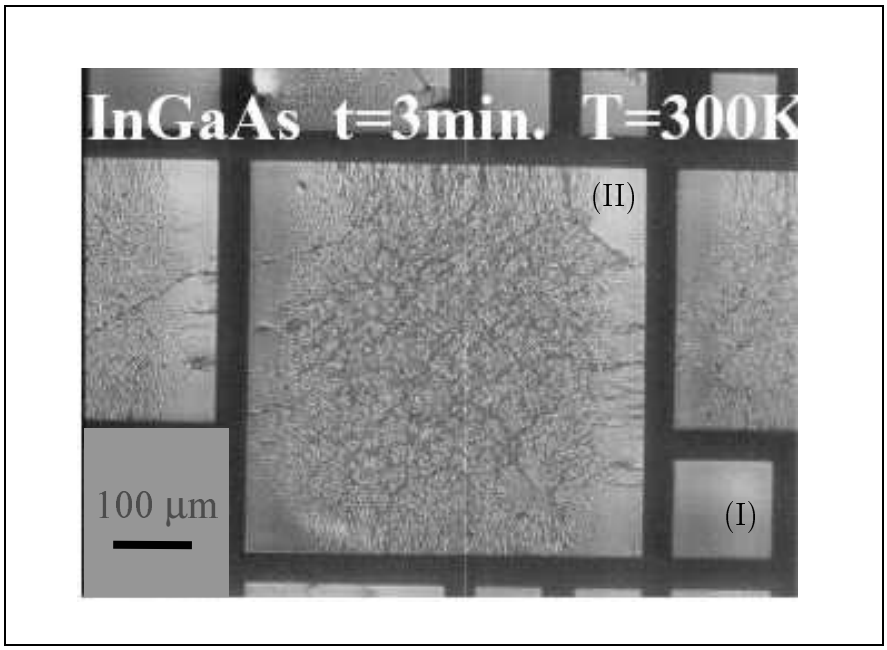

FIG. 4.13 – Image obtenue par AFM de plusieurs mésas d' $In_{0.65}Ga_{0.35}As$ relaxés complètement par glissement (mésas (I)), ou relaxés partiellement par ondulations et glissement (mésas (II)) (Kostrozewa (2003)).

Les images de la surface du film obtenues par KOSTRZEWA (2003) (Figure 4.13 et Figure 4.14) montrent qu'en réalité, les perturbations croissent dans toutes les directions. Cependant, les ondulations les plus accentuées sont bien orientées suivant l'axe cristallographique [100] (Figure 4.14), ce qui confirme nos prédictions théoriques reliant l'origine de cette orientation à la faible anisotropie des semi-conducteurs III-V. Par ailleurs, comme le montre la Figure 4.13, les petits mésas (mésas(I)) de $150\,\mu$m x $150\,\mu$m sont lisses et probablement complètement relaxés alors que les mésas de plus de $150\,\mu$m x $150\,\mu$m (mésas(II)) présentent une croix caractéristique. Tout se passe comme si un processus de relaxation par glissement entrait en compétition avec un processus de relaxation par ondulations.

Nous nous intéressons pour le moment à l'étude du phénomène de relaxation par ondulations dans le cas de grands mésas. La longueur d'onde expérimentale calculée à partir du graphique (4.15a) est $\lambda_m exp = 2.8\,\mu$m, elle est de même ordre de grandeur que celle calculée théoriquement ($\lambda_m exp = 0.643\,\mu$m). Cependant, il y a un facteur

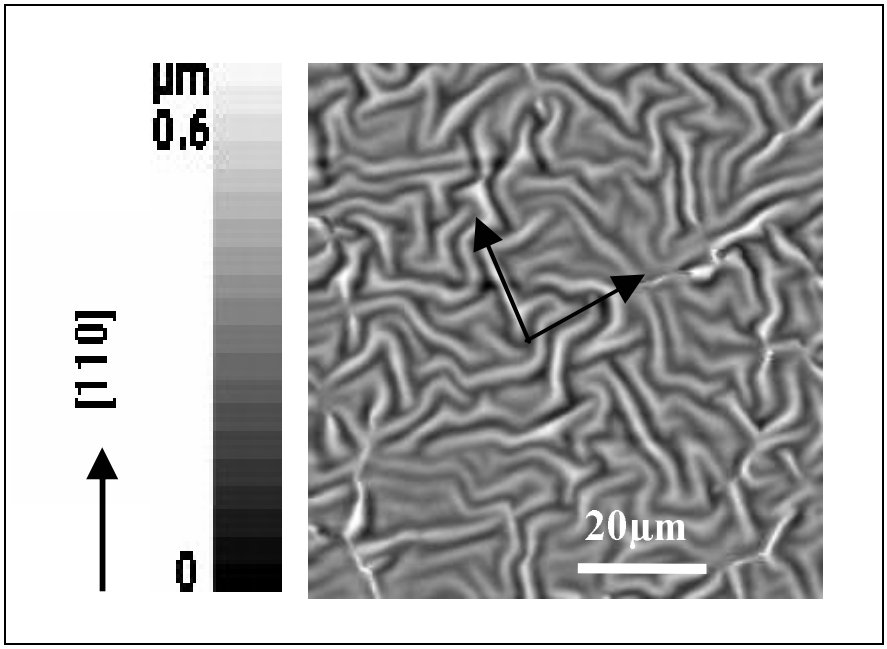

FIG. 4.14 – Images obtenues par AFM des ondulations de la couche d'$In_{0.65}Ga_{0.35}As$ prises au centre (Kostrozewa (2003)).

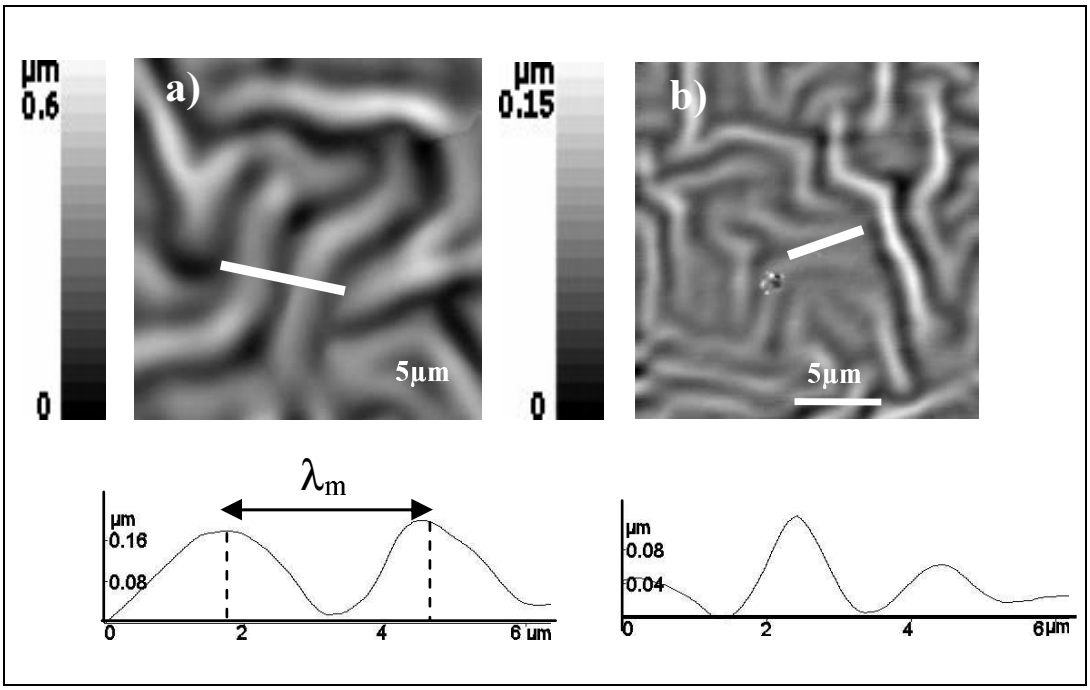

FIG. 4.15 – Images obtenues par AFM à haute résolution. L'image a) représente la couche $In_{0.65}Ga_{0.35}As$ relaxée par ondulations, l'image b) représente la couche de la cire après élimination de la couche précontrainte. Les profils marqués sont présentés au dessous de ces images (Kostrozewa (2003)).

4 entre la valeur calculée et celle mesurée ; cet écart peut être dû à un phénomène de

décollement de la couche d'InGaAs au cours du collage ou à un éventuel glissement à l'interface film/fluide. Nous allons essayer d'analyser qualitativement l'évolution de la vitesse de croissance sous l'effet de la présence du glissement en fin du chapitre suivant.

• **Cas II : $Si_{0.7}Ge_{0.3}/Si$**

Nous comparons maintenant les résultats du modèle anisotrope avec les résultats expérimentaux obtenus pour une couche de $Si_{0.7}Ge_{0.3}$ étudiée par YIN et al. (2002a).

Dans le tableau 4.2, nous présentons les paramètres de maille ainsi que les constantes élastiques relatifs à l'alliage $Si_{0.7}Ge_{0.3}$ déterminés à partir de la loi du mélange.

	a $(10^{-9}m)$	C_{11} $(10^{10}N/m^2)$	C_{12} $(10^{10}N/m^2)$	C_{44} $(10^{10}N/m^2)$
Si	0.541	16.57	6.39	15.92
Ge	0.565	12.40	4.13	13.66
SiGe	0.548	15.31	5.71	15.24

TAB. 4.2 – Valeurs numériques des paramètres de maille et des constantes élastiques pour Si, Ge et $Si_{0.7}Ge_{0.3}$.

Nous considérons une préstructure définie par une couche de Si sur laquelle on a déposé une couche de SiGe. La prédéformation résultante de la différence de paramètre de maille entre les deux couches est $\varepsilon_0 = -0.013$ calculée de la même façon que dans l'exemple précédent. La préstructure est ensuite déposée à l'envers sur une couche de BPSG de viscosité $\eta = 1.2\ 10^{10}\,\mathrm{Ns/m^2}$. Après élimination de la couche de Si, nous obtenons alors une structure définie par : $Si_{0.7}Ge_{0.30}$ d'épaisseur $h = 30$ nm déposée sur un substrat visqueux (BPSG) d'épaisseur $H = 200\,\mathrm{nm}$.

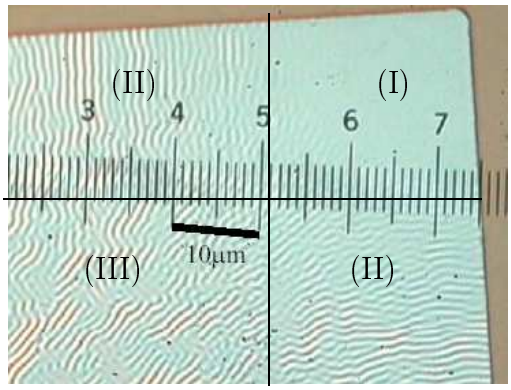

FIG. 4.16 – Images optiques d'une couche de $Si_{0.7}Ge_{0.3}$ de $100\,\mu$m x $100\,\mu$m déposée sur une couche de BPSG de 200 nm (Yin2002) à 790° C.

Dans ce cas, le paramètre d'anisotropie est $\xi = 0.367$. La longueur d'onde qui donne la vitesse maximale des perturbations est $\lambda_m = 0.798\,\mu m$.

D'après YIN et al. (2002a), la Figure 4.16 représente une relaxation de mésas de dimensions 100μm x 100 μm de $Si_{0.7}Ge_{0.3}$. Nous distinguons trois régions : la région (I) où la relaxation se fait par glissement, la région (II) au sein de laquelle apparaissent des ondulations suivant une seule direction normale aux bords, la région (III) au sein de laquelle la relaxation se fait par ondulations qui sont diagonales à celles obtenues sur les bords.

La longueur d'onde expérimentale obtenue d'après la Figure 4.16 est $\lambda_m exp = 1\,\mu$m. Cette valeur est du même ordre de grandeur de celle que nous avons calculée à partir du modèle (2D) anisotrope.

4.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié le processus de relaxation élastique par ondulations. En effet, ceci s'étend vers l'étude d'instabilité d'une couche précontrainte en compression d'épaisseur h, collée sur une couche visqueuse caractérisée par une viscosité η et une épaisseur H. Les principaux résultats de ce chapitre sont :

- Dans le cas des matériaux isotropes, si nous prenons en compte l'effet de la courbure, dans le calcul des déplacements, nous constatons que le seuil de stabilité en terme de $k_c h$ dépend du rapport entre les épaisseurs de la couche visqueuse et le film. Les deux conditions régissant la stabilité sont

$$\hat{\varepsilon}_0 < (Xr)^2, \tag{4.118}$$

et

$$\hat{\varepsilon}_0 < (Xr)^2 + 12\frac{\sinh(2X) + 2X - rX^3}{\sinh(2X) - 2X}. \tag{4.119}$$

- Dans le cas des matériaux anisotropes, le nombre d'onde critique est obtenu par :

$$k_c h = \sqrt{-12\varepsilon_0 \frac{C_{11}^2 - C_{12}^2 + C_{11}C_{12}}{C_{11}^2 - C_{12}^2 + C_{11}^2 \xi s_2^2/2}}.$$

Par conséquent, si nous avons un nombre d'onde supérieur à k_c, les perturbations décroissent et le film est stable, alors que si $k < k_c$, les perturbations croissent.

- A la limite d'une couche visqueuse infinie, soit $H >> h$, la vitesse de croissance des perturbations s'écrit :

$$s_1 = -\frac{hk}{24\eta}\left[C_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}} + C_{11}\xi s_2^2/2(kh)^2 + 12(C_{11} + C_{12} - 2\frac{C_{12}^2}{C_{11}})\varepsilon_0\right].$$

- Le nombre d'onde relatif à la vitesse de croissance maximale et la vitesse maximale sont donnés par :

$$k_m h = 2\sqrt{\frac{-\varepsilon_0(C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2 + C_{11}^2)}{C_{11}^2 - C_{12}^2 + C_{11}^2 \xi s_2^2}} \tag{4.120}$$

et

$$s_m = \frac{1}{12\eta} \frac{(-4\varepsilon_0(C_{11} + C_{12} - 2\frac{C_{12}^2}{C_{11}}))^{3/2}}{\sqrt{(C_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}} + C_{11}\xi s_2^2/2)}}. \tag{4.121}$$

Nous montrons que le critère de stabilité ainsi que les vitesses de croissance des perturbations dépendent du coefficient d'anisotropie ainsi que de l'angle θ.

La confrontation des résultats théoriques à quelques résultats expérimentaux a montré que les prédictions concernant la prise en compte de l'anisotropie des matériaux est confirmée. Plus précisément, la direction privilégié des ondulations et la longueur d'onde maximale sont en accord avec l'expérience.

Par ailleurs, une étude numérique a été effectuée par HUANG and SUO (2002b) et LIANG et al. (2002) en utilisant un modèle (1D). Ils ont déterminé les dimensions caractéristiques des îlots à partir desquels un processus de relaxation par ondulation entre en compétition avec celui par glissement. Dans la même voie, il serait intéressant d'étudier numériquement le modèle (2D) afin de visualiser les directions des perturbations au bords, dans les coins ainsi qu'au centre des mésas.

Chapitre 5

Ondulation et anisotropie : cas 3D

5.1 Introduction

Lors du chapitre précédent, nous avons étudié la stabilité d'un film élastique mince précontraint déposé sur une couche visqueuse dans le cas d'une modélisation bidimensionnelle. Nous étendons cette étude à l'analyse de ce comportement dans le cadre d'une modélisation tri-dimensionnelle dont le but est de se rapprocher de la réalité physique du problème. Dans ce contexte, il est impossible d'utiliser la fonction d'Airy pour résoudre le problème dans le fluide visqueux. Cependant, pour des perturbations bidimensionnelles, le résultat de stabilité obtenu en utilisant la fonction d'Airy reste inchangé si nous utilisons les hypothèses de la théorie de la lubrification.

Pour formuler le problème, nous décrivons le film élastique avec la théorie des plaques non-linéaire de type von-Kàrmàn et la couche visqueuse suivant la théorie de la lubrification.

5.2 Perturbations 3D du film mince - cas isotrope

Nous nous proposons d'étudier la stabilité d'un film mince élastique précontraint infini, d'épaisseur h déposé sur une couche visqueuse incompressible de hauteur H. Le fluide est déposée sur un substrat rigide comme indiqué sur la Figure 5.1. Nous supposons que les matériaux constituant cette structure sont isotropes. L'épaisseur de la couche visqueuse est supposée faible par rapport aux longueurs caractéristiques dans les directions x et y. Par conséquence, nous pouvons la décrire suivant la théorie de la lubrification.

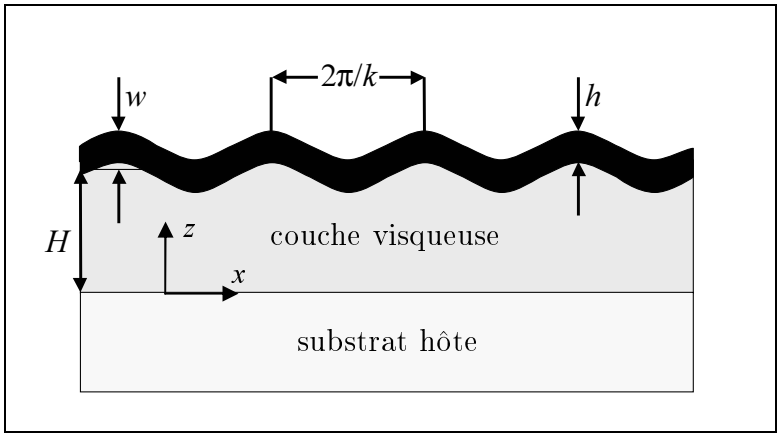

FIG. 5.1 – Ondulation d'un film élastique sur un fluide visqueux.

5.2.1 État des contraintes dans le fluide

Nous considérons une couche de fluide visqueux incompressible Newtonien homogène et de viscosité η. Son champ de vitesse s'écrit :

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v_\alpha} + v_z \boldsymbol{e_z}. \tag{5.1}$$

Les équations qui doivent vérifier la vitesse $\boldsymbol{v}$ et la pression p sont :

$$\mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} = 0; \tag{5.2}$$

$$\mathrm{div}\boldsymbol{v} = 0; \tag{5.3}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\eta \boldsymbol{D} - p\boldsymbol{I} \quad \text{où} \qquad \boldsymbol{D}_{ij} = \frac{1}{2}(v_{i,j} + v_{j,i}). \tag{5.4}$$

Les conditions aux limites sont données à la surface libre du fluide visqueux et à l'interface fluide/substrat. En effet, nous définissons les contraintes de cisaillement à la surface libre du fluide visqueux par

$$\tau_{zx} = T_x, \qquad \tau_{zy} = T_y. \tag{5.5}$$

Le glissement à l'interface fluide/substrat rigide est interdit, nous avons donc

$$v_z(x, y, 0) = 0 \quad \text{et} \quad v_\alpha(x, y, 0) = 0. \tag{5.6}$$

Pour résoudre les équations de la théorie de la lubrification, nous partons de l'équation de continuité div $v = 0$ que nous intégrons suivant z et nous utilisons les conditions aux limites (5.6). Il vient alors

$$\int_0^H \mathrm{div}(\boldsymbol{v}_\alpha)\mathrm{dz} = -v_z(x, y, H); \tag{5.7}$$

où $\boldsymbol{v}_\alpha = v_x \boldsymbol{e_x} + v_y \boldsymbol{e_y}$ représente les composantes du vecteur vitesse dans le plan (x, y), ainsi nous pouvons écrire :

$$\mathrm{div}(\int_0^H \boldsymbol{v}_\alpha \mathrm{dz}) = -v_z(x, y, H). \tag{5.8}$$

Nous obtenons de ce que nous l'appellerons, de par sa forme, l'équation des débits

$$\mathrm{div}(\boldsymbol{Q}_\alpha) = -v_z(x,y,H) \quad \text{où} \qquad \boldsymbol{Q}_\alpha = \int_0^H \boldsymbol{v}_\alpha \, dz \tag{5.9}$$

La deuxième étape utilise les deux principales hypothèses de la théorie de la lubrification tel que :

1. La pression hydrostatique p ne dépend pas de z c'est-à-dire $p = p(x,y)$.
2. Le terme en $\dfrac{\partial v_\alpha}{\partial z}$ est prédominant dans le calcul du tenseur des taux de déformation $\boldsymbol{D}$.

La loi de comportement (5.4) s'écrit alors

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = -p, \qquad \sigma_{xz} = \eta\frac{\partial v_x}{\partial z}, \quad \sigma_{yz} = \frac{\partial v_y}{\partial z} \quad \text{et} \quad \sigma_{xy} = 0. \tag{5.10}$$

En utilisant (5.10), les composantes en x et en y de l'équation d'équilibre (5.2) sont données par :

$$\nabla p(x,y) = \eta\frac{\partial^2 \boldsymbol{v_\alpha}}{\partial z^2}, \tag{5.11}$$

où ∇ désigne le gradient bi-dimensionnels $(\dfrac{\partial}{\partial x}, \dfrac{\partial}{\partial y})$. Les contraintes de cisaillement s'écrivent suivant le tenseur des contraintes (5.4) :

$$\tau_{z\alpha} = \eta\frac{\partial \boldsymbol{v_\alpha}}{\partial z}. \tag{5.12}$$

La pression p est indépendante de z de sorte que l'équation (5.11) peut être intégrée deux fois en utilisant la condition au limite (5.5). Une première intégration par rapport à z nous donne :

$$\eta\frac{\partial \boldsymbol{v_\alpha}}{\partial z} = (z-H)\boldsymbol{\nabla} p(x,y) + \boldsymbol{T}_\alpha. \tag{5.13}$$

Nous intégrons maintenant une deuxième fois en prenant en compte la condition au limite du vecteur vitesse $\boldsymbol{v}_\alpha$ à la surface inférieure du fluide c'est-à-dire à $z = 0$, donnée par (5.6). Finalement, nous obtenons :

$$\boldsymbol{v_\alpha}(x,y,z) = \frac{1}{2\eta}z(z-2H)\boldsymbol{\nabla} p(x,y) + \frac{z}{\eta}\boldsymbol{T}_\alpha. \tag{5.14}$$

A la limite $z = H$, la vitesse de fluide est :

$$\boldsymbol{v_\alpha}(x,y,H) = -\frac{H^2}{2\eta}\boldsymbol{\nabla} p(x,y) + \frac{H}{\eta}\boldsymbol{T}_\alpha. \tag{5.15}$$

En utilisant la définition (5.9) de $\boldsymbol{Q} = (q_x, q_y)$, il vient :

$$\boldsymbol{Q}_\alpha = -\frac{H^3}{3\eta}\boldsymbol{\nabla} p(x,y) + \frac{H^2}{2\eta}\boldsymbol{T}_\alpha \tag{5.16}$$

La pression p étant indépendante de z, les équations (5.9) et (5.16) se réécrivent alors sous la forme du système d'équation suivant, régissant le problème de la lubrification :

$$\begin{cases} \mathrm{div}(\boldsymbol{Q}_\alpha) = -v_z(x,y,H) \\ \\ \boldsymbol{Q}_\alpha = -\dfrac{H^3}{3\eta}\boldsymbol{\nabla} p(x,y) + \dfrac{H^2}{2\eta}\boldsymbol{T}_\alpha \end{cases} \tag{5.17}$$

Nous obtenons enfin à la limite $z = H$:

$$v_z(x,y,H) = \boldsymbol{\nabla}(\frac{H^3}{3\eta}\boldsymbol{\nabla} p(x,y) - \frac{H^2}{2\eta}\boldsymbol{T}_\alpha). \tag{5.18}$$

5.2.2 Equations de von-Kàrmàn pour un film élastique isotrope

Nous nous intéressons maintenant au comportement du film élastique contraint. Soient u_x et u_y les déplacements du feuillet moyen du film suivant les directions respectives x et y. Soit w le déplacement dans la direction z. Le film est soumis à la pression p, aux contraintes de cisaillement T_x, T_y, à la contrainte normale N et aux déplacements u_x, u_y et w. Nous supposons que le film est précontraint dans son état initial dans lequel la déformation du feuillet moyen est ε_0 dans les directions x et y. Il est par ailleurs supposé isotrope et modélisé suivant la théorie des plaques non-linéaire de von-Kàrmàn (Timoshenko and Woinowsky-Krieger 1959). Nous notons D, le module de rigidité du film élastique définit par :

$$D = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)},$$

avec ν est le coefficient de poisson, E est le module de Young et h est l'épaisseur du film.

L'équilibre dans la direction perpendiculaire au plan et l'équilibre des moments se traduisent par :

$$p = D \cdot \triangle(\triangle w) - \boldsymbol{T} \cdot \nabla w - \boldsymbol{N} : \nabla(\nabla w), \tag{5.19}$$

La loi de Hooke dans le cas des contraintes planes s'écrit :

$$\boldsymbol{N} = \boldsymbol{N}_0 + C[\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) + \boldsymbol{f}(\nabla w)], \tag{5.20}$$

où

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x} \otimes \boldsymbol{x}/2,\ \boldsymbol{N}_0 = C[\boldsymbol{\varepsilon}_0], \quad \boldsymbol{C}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \frac{Eh}{1-\nu^2}\left(\nu \mathrm{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})\boldsymbol{I} + (1-\nu)\boldsymbol{\varepsilon}\right). \tag{5.21}$$

Par ailleurs, nous avons

$$\boldsymbol{T} \ = \ \mathrm{div}\boldsymbol{N} = \mathrm{div}(\boldsymbol{C}[\boldsymbol{\varepsilon}]) \tag{5.22}$$

$$= \frac{Eh}{(1-\nu^2)}\left[\nu\nabla(\mathrm{div}\boldsymbol{u}) + \frac{(1-\nu)}{2}\nabla(\mathrm{div}\boldsymbol{u}) + \frac{(1-\nu)}{2}\triangle\boldsymbol{u}\right]. \quad (5.23)$$

Par conséquent nous obtenons,

$$\boldsymbol{T} = \frac{Eh}{2(1-\nu^2)}\left[(1+\nu)\nabla(\mathrm{div}\boldsymbol{u}) + (1-\nu)\triangle\boldsymbol{u}\right], \quad (5.24)$$

$$\boldsymbol{N}_0 = \frac{Eh}{1-\nu}\varepsilon_0\boldsymbol{I}, \quad (5.25)$$

5.2.3 Système couplé et solution d'équilibre

Nous considérons maintenant un film précontraint, infini suivant les directions x et y et déposé sur une couche visqueuse. Soit H_0 l'épaisseur initiale de la couche du fluide. Nous avons alors à un instant t quelconque : $H(x,y,t) = H_0 + w(x,y,t)$. A l'interface fluide/film mince, le vecteur vitesse est continu, c'est-à-dire,

$$v_z(x,y,H) = \frac{\partial w}{\partial t} \quad (5.26)$$

$$\boldsymbol{v}_\alpha(x,y,H) = \frac{\partial \boldsymbol{u}_\alpha}{\partial t}. \quad (5.27)$$

A la limite de la surface supérieur du fluide visqueux, les vitesses v_α et v_z s'écrivent respectivement suivant les équations (5.15) et (5.18) :

$$\boldsymbol{v_\alpha}(x,y,H) = -\frac{H^2}{2\eta}\boldsymbol{\nabla}p(x,y) + \frac{H}{\eta}\boldsymbol{T}_\alpha. \quad (5.28)$$

$$v_z(x,y,H) = \nabla\left(\frac{H^3}{3\eta}\boldsymbol{\nabla}p(x,y) - \frac{H^2}{2\eta}\boldsymbol{T}_\alpha\right) \quad (5.29)$$

Les équations (5.19)-(5.20)-(5.21) et (5.22) relient les forces, N, p et T_α aux déplacements $\boldsymbol{u}_\alpha$ et w. Ces équations couplées avec (5.28)-(5.29) forment un système complet qui gouverne le processus de la relaxation du film. La solution d'équilibre est

$$p = w = 0, \quad \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{N}_0 = C[\boldsymbol{\varepsilon}_0], \quad \boldsymbol{T} = \boldsymbol{0}. \quad (5.30)$$

Cependant, nous nous proposons alors d'étudier l'instabilité de cette solution le comportement des perturbations autour de la solution d'équilibre.

5.2.4 Stabilité linéaire - formulation

Le problème linéarisé s'écrit suivant (5.26) et (5.27) comme

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}_\alpha}{\partial t} = -\frac{H^2}{2\eta}\boldsymbol{\nabla}\ p\ (x,y) + \frac{H}{\eta}\boldsymbol{T}, \quad (5.31)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{H^3}{3\eta}\triangle\ p\ (x,y) - \frac{H^2}{2\eta}\mathrm{div}\boldsymbol{T}. \quad (5.32)$$

avec

$$p = D \cdot \triangle(\triangle w) - \boldsymbol{N}_0 : \nabla(\nabla w), \tag{5.33}$$
$$\boldsymbol{T} = \mathrm{div}\boldsymbol{N}, \tag{5.34}$$
$$\boldsymbol{N} = \boldsymbol{N}_0 + C[\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})], \quad \text{où} \quad \boldsymbol{N}_0 = C[\boldsymbol{\varepsilon}_0]. \tag{5.35}$$

Soit le déplacement du feuillet moyen du film de la forme :

$$u_x = \hat{u}_x(t)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{5.36}$$
$$u_y = \hat{u}_y(t)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{5.37}$$
$$w = i\hat{w}(t)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{5.38}$$

et $k^2 = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k} = k_x^2 + k_y^2$, nous obtenons successivement

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\hat{u}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{k}\otimes\hat{\boldsymbol{u}} + \hat{\boldsymbol{u}}\otimes\boldsymbol{k})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{5.39}$$
$$\triangle w = -i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k})\hat{w}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{5.40}$$
$$\triangle\triangle w = ik^4\hat{w}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{5.41}$$
$$\nabla w = -\hat{w}\boldsymbol{k}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{5.42}$$
$$\nabla\nabla w = -i\hat{w}(\boldsymbol{k}\otimes\boldsymbol{k})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}. \tag{5.43}$$

Donc

$$\boldsymbol{N}_0 : \nabla(\nabla w) = -i\frac{Eh}{1-\nu}\varepsilon_0\hat{w}k^2e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{5.44}$$

et

$$\boldsymbol{T} = \frac{-Eh}{2(1-\nu^2)}\left((1+\nu)(\hat{\boldsymbol{u}}\cdot\boldsymbol{k})\boldsymbol{k} + (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k})\hat{\boldsymbol{u}}(1-\nu)\right)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}. \tag{5.45}$$

La pression s'écrit

$$p = \frac{iE\hat{w}hk^2}{12(1-\nu^2)}\left((hk)^2 + 12\varepsilon_0(1+\nu)\right)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}. \tag{5.46}$$

Par ailleurs, nous notons $\overline{\varepsilon} = (hk)^2 + 12\varepsilon_0(1+\nu)$ et nous obtenons

$$\nabla p = \frac{-E\hat{w}hk^2}{12(1-\nu^2)}\boldsymbol{k}\overline{\varepsilon}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{5.47}$$

qui conduit à

$$\triangle p = \frac{-iE\hat{w}hk^3}{12(1-\nu^2)}\boldsymbol{k}\overline{\varepsilon}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}. \tag{5.48}$$

Nous obtenons aussi

$$\mathrm{div}\boldsymbol{T} = \frac{-iE}{1-\nu^2}k^2\hat{\boldsymbol{u}}\cdot\boldsymbol{k}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}. \tag{5.49}$$

Le système (5.31)-(5.32) s'écrit enfin

$$\frac{d\hat{w}}{dt} = -\frac{H^3}{3\eta}\frac{Ehk^4}{12(1-\nu^2)}\overline{\varepsilon}\hat{w} + \frac{H^2}{2\eta}\frac{Ehk^2}{1-\nu^2}\hat{\boldsymbol{u}}\cdot\boldsymbol{k}, \tag{5.50}$$

$$\tag{5.51}$$

$$\frac{d\hat{\boldsymbol{u}}}{dt} = \frac{H^2}{2\eta}\frac{Ehk^2}{12(1-\nu^2)}\overline{\varepsilon}\hat{w}\boldsymbol{k} - \frac{H}{2\eta}\frac{Eh}{1-\nu^2}((1+\nu)(\hat{\boldsymbol{u}}\cdot\boldsymbol{k})\boldsymbol{k} + (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k})(1-\nu)\hat{\boldsymbol{u}}), \tag{5.52}$$

ce système est équivalent à

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\hat{w}\\ \hat{u}_x\\ \hat{u}_y\end{pmatrix} = \frac{EHh}{2\eta(1-\nu^2)}\boldsymbol{A}\begin{pmatrix}\hat{w}\\ \hat{u}_x\\ \hat{u}_y\end{pmatrix}, \tag{5.53}$$

où $\boldsymbol{A}$ est donné par

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -\frac{H^2k^4}{18}\overline{\varepsilon} & Hk^2k_x & Hk^2k_y \\ \frac{Hk^2}{12}k_x\overline{\varepsilon} & -(2k_x^2+(1-\nu)k_y^2) & -(1+\nu)k_xk_y \\ \frac{Hk^2}{12}k_y\overline{\varepsilon} & -(1+\nu)k_xk_y & -(2k_y^2+(1-\nu)k_x^2) \end{pmatrix}. \tag{5.54}$$

Le film mince est isotrope, nous pouvons ainsi étudier son comportement suivant les axes formés par le vecteur d'onde k et l'axe perpendiculaire à lui, dans ce cas $k_y = 0$ et $\|\boldsymbol{k}\| = k_x$. Enfin, la matrice précédente se simplifie comme

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -\frac{H^2k^4}{18}\overline{\varepsilon} & Hk^3 & 0 \\ \frac{Hk^3}{12}\overline{\varepsilon} & -2k^2 & 0 \\ 0 & 0 & -(1-\nu)k^2 \end{pmatrix}. \tag{5.55}$$

Ainsi, nous retrouvons la matrice (4.42) étudiée dans le chapitre précédent en utilisant la fonction d'Airy.

5.2.5 Analyse de la stabilité linéaire

La stabilité de la solution dépend du signe de la partie réelle des valeurs propres associées à la matrice $\boldsymbol{A}$. En effet, la solution est stable ssi *les parties réelles des racines de l'équation du troisième degrée*

$$\lambda^3 + a\lambda^2 + b\lambda + c = 0 \tag{5.56}$$

sont négatives c'est-à-dire si

$$a > 0, \qquad c > 0, \qquad ab - c > 0. \tag{5.57}$$

Dans notre cas, a, b, c sont les invariants de la matrice $\boldsymbol{A}$ tel que

$$a = -\mathrm{tr}\boldsymbol{A}, \quad b = ((\mathrm{tr}\boldsymbol{A})^2 - \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^2))/2, \quad c = -\mathrm{det}\boldsymbol{A}. \tag{5.58}$$

Les inégalités (5.126) peuvent être exprimées en termes de valeurs propres de $\mathbf{A}$, notés par λ_i, comme suit

$$\mathrm{tr}\boldsymbol{A} = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = -\frac{1}{18}k^4H^2\overline{\varepsilon} - (3-\nu)k^2 < 0 \tag{5.59}$$

$$\mathrm{det}\boldsymbol{A} = \lambda_1\lambda_2\lambda_3 = -\frac{1}{36}(1-\nu)k^8H^2\overline{\varepsilon} < 0. \tag{5.60}$$

La relation $ab - c > 0$ est plus compliquée et nous avons

$$\lambda_1\lambda_2\lambda_3 - (\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3)(\lambda_1\lambda_2+\lambda_2\lambda_3+\lambda_3\lambda_1) = C_1\overline{\varepsilon}^2 + C_2\overline{\varepsilon} + C_3 > 0, \qquad (5.61)$$

où

$$C_1 = \frac{1}{648}k^{10}H^4(3-2\nu), \qquad (5.62)$$

$$C_2 = \frac{1}{18}k^8H^2(\nu^2-6\nu+6), \qquad (5.63)$$

$$C_3 = 2k^6(1-\nu)(3-\nu). \qquad (5.64)$$

Nous commençons par chercher la condition qui satisfait l'inégalité (5.60) et par suite nous notons que det $\boldsymbol{A} < 0$ est équivalent à $\overline{\varepsilon} > 0$. Par conséquence

$$\overline{\varepsilon} > 0, \Leftrightarrow (kh)^2 > -12\varepsilon_0(1+\nu) \qquad (5.65)$$

Il est évident que (5.60) implique (5.59) et nous allons prouver que (5.61) est positive.

Du fait que $-1 < \nu < 1/2$, nous obtenons $C_3 > 0$ et $C_1 > 0$. L'étude de fonction de C_2 en fonction de ν montre que celle là est décroissante mais reste positive dans l'intervalle [-1,1/2]. Les coefficients C_1, C_2 et C_3 de l'équation de second degré (5.61) sont positifs, ceci montre que l'inégalité $ab - c > 0$ est vérifiée pour $\overline{\varepsilon} > 0$. Le domaine de stabilité dans l'espace de (k_x, k_y) est donc la région définie par (5.65). Nous obtenons les trois racines de l'équation caractéristique (5.61) comme suit

$$\lambda_1 = k^2(\nu-1) < 0, \qquad (5.66)$$

$$\lambda_{2,3} = \frac{-1}{36}k^2\left[(kH)^2\overline{\varepsilon} + 36 \pm \sqrt{k^4H^4\overline{\varepsilon}^2 + 36k^2H^2\overline{\varepsilon} + 1296}\right]. \qquad (5.67)$$

La vitesse de croissance des perturbations est alors donnée par

$$s_{1,2} = \frac{EhH}{2\eta(1-\nu^2)}\lambda_{1,2}, \qquad (5.68)$$

et finalement nous obtenons

$$s_{1,2} = -\frac{Ehk(kH)}{72\eta(1-\nu^2)}\left[(kH)^2\overline{\varepsilon} + 36 \pm \sqrt{k^4H^4\overline{\varepsilon}^2 + 36k^2H^2\overline{\varepsilon} + 1296}\right]. \qquad (5.69)$$

D'après la forme de $s_{1,2}$, nous remarquons que le comportement des perturbations est indépendant de leur direction. Ainsi, nous concluons que la prise en compte de la dimension y confirme la condition de stabilité en 2D.

Nous nous proposons d'étudier le cas des matériaux anisotropes afin d'analyser l'effet de l'anisotropie sur la croissance des perturbations et son effet sur l'analyse de l'anisotropie.

5.3 Perturbations 3D du film mince - cas cubique

5.3.1 Equation anisotrope de von-Kàrmàn

Nous nous intéressons maintenant au cas des matériaux anisotropes à symétrie cubique. Nous nous proposons d'utiliser le modèle non linéaire de von-Kàrmàn, dans le contexte anisotrope pour modéliser le film élastique. Le fluide est toujours considéré comme newtonien isotrope et il est modélisé en suivant les hypothèses de la lubrification. Nous définissons

$$Q_{11} = C_{11} - C_{12}^2/C_{11}, \qquad Q_{12} = C_{12} - C_{12}^2/C_{11}.$$

L'équation d'équilibre dans le plan normal au film et l'équilibre des moments s'écrivent

$$p = \frac{h^3}{12}\left[Q_{11}\left(\frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 w}{\partial y^4}\right) + 2(Q_{12}+C_{44})\frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial y^2}\right] - \boldsymbol{T}\cdot\nabla w - \boldsymbol{N} : \nabla(\nabla w), \quad (5.70)$$

$$\boldsymbol{T} = \nabla\cdot\boldsymbol{N}, \qquad \boldsymbol{N} = C[\boldsymbol{\varepsilon}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) + \boldsymbol{f}(\nabla w)], \quad \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}\otimes\boldsymbol{x}/2, \quad (5.71)$$

et

$$C[\boldsymbol{\varepsilon}] = h\left[Q_{12}\mathrm{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})\boldsymbol{I} + (Q_{11}-Q_{12})\boldsymbol{\varepsilon}\right] \quad (5.72)$$

5.3.2 Système couplé

La couche visqueuse est isotrope, nous récupérons alors les équations relatives aux vecteurs vitesses du modèle isotrope précédent tel que,

$$\boldsymbol{v}_\alpha(x,y,H) = -\frac{H^2}{2\eta}\nabla p + \frac{H}{\eta}\boldsymbol{T}, \quad (5.73)$$

$$v_z(x,y,H) = \frac{H^3}{3\eta}\triangle p - \frac{H^2}{2\eta}\mathrm{div}\boldsymbol{T} \quad (5.74)$$

La solution stationnaire de ce problème s'écrit alors

$$p = w = 0, \quad \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{N}_0 = C[\boldsymbol{\varepsilon}_0], \quad \boldsymbol{T} = \boldsymbol{0} \quad (5.75)$$

La vitesse est continue à l'interface film /fluide et nous obtenons alors

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} = -\frac{H^2}{2\eta}\nabla p + \frac{H}{\eta}\boldsymbol{T}, \quad (5.76)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{H^3}{3\eta}\triangle p - \frac{H^2}{2\eta}\mathrm{div}\boldsymbol{T} \quad (5.77)$$

avec

$$p = \frac{h^3}{12}\left[Q_{11}\left(\frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 w}{\partial y^4}\right) + 2(Q_{12}+C_{44})\frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial y^2}\right] - \boldsymbol{N}_0 : \nabla(\nabla w), \quad (5.78)$$

$$\boldsymbol{T} = \nabla\cdot\boldsymbol{N}, \quad (5.79)$$

$$\boldsymbol{N} = \boldsymbol{N}_0 + C[\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})], \quad \boldsymbol{N}_0 = C[\boldsymbol{\varepsilon}_0]. \quad (5.80)$$

Nous obtenons ainsi

$$T_x = \frac{\partial N_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial N_{xy}}{\partial y} \tag{5.81}$$

$$T_y = \frac{\partial N_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial N_{yy}}{\partial y} \tag{5.82}$$

Finalement,

$$T_x = h(Q_{11}\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + Q_{12}\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{1}{2}C_{44}(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2})), \tag{5.83}$$

$$T_y = h(Q_{11}\frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + Q_{12}\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{1}{2}C_{44}(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2})). \tag{5.84}$$

Nous nous proposons ensuite d'étudier le comportement des perturbations autour de la solution d'équilibre.

5.3.3 Stabilité linéaire - formulation

Soit les déplacements

$$\boldsymbol{u} = \hat{\boldsymbol{u}}(t)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{5.85}$$

$$w = i\hat{w}(t)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{5.86}$$

et nous notons $k^2 = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k} = k_x^2 + k_y^2$ pour $\boldsymbol{k} = (k_x, k_y)$. Les contraintes de cisaillement s'écrivent alors comme

$$T_x = h/2(-(2Q_{11}k_x^2 + C_{44}k_y^2)\hat{u}_x - k_x k_y(C_{44} + 2Q_{12})\hat{u}_y)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{5.87}$$

de même nous calculons

$$T_y = h/2(-k_x k_y(C_{44} + 2Q_{12})\hat{u}_x - (2Q_{11}k_y^2 + C_{44}k_x^2)\hat{u}_y)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{5.88}$$

$$\boldsymbol{N}_0 = h\left(C_{11} + C_{12} - 2C_{12}^2/C_{11}\right)\varepsilon_0\boldsymbol{I},$$

donc

$$\boldsymbol{N}_0 : \nabla(\nabla w) = -i\left(C_{11} + C_{12} - 2C_{12}^2/C_{11}\right)\varepsilon_0\hat{w}k^2 e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{5.89}$$

et l'équation (5.78) devient

$$p = \frac{i\hat{w}hk^2}{12}\left((hk)^2(C_{11}\xi s_2^2/2 + Q_{11}) + 12\varepsilon_0(Q_{11} + Q_{12})\right)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}. \tag{5.90}$$

Nous notons

$$\overline{\varepsilon} = \left((hk)^2(C_{11}\xi s_2^2/2 + Q_{11}) + 12\varepsilon_0(Q_{11} + Q_{12})\right) \tag{5.91}$$

et nous obtenons

$$\nabla p = \frac{-\hat{w}hk^2}{12}\boldsymbol{k}\overline{\varepsilon}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}, \tag{5.92}$$

qui donne

$$\triangle p = \frac{-i\hat{w}hk^3}{12}\boldsymbol{k}\overline{\varepsilon}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}. \tag{5.93}$$

et

$$\mathrm{div}\boldsymbol{T} = -ih\left(Q_{11}(k_x^3\hat{u}_x + k_y^3\hat{u}_y) + (Q_{12}+C_{44})(k_x^2k_y\hat{u}_x + k_y^2k_x\hat{u}_y)\right)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}. \tag{5.94}$$

Les équations (5.73)-(5.74) s'écrivent alors sous forme de système d'équations différentielles est maintenant

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\hat{w}\\ \hat{u}_x\\ \hat{u}_y\end{pmatrix} = \frac{Hh}{2\eta}\boldsymbol{B}\begin{pmatrix}\hat{w}\\ \hat{u}_x\\ \hat{u}_y\end{pmatrix}, \tag{5.95}$$

où $\boldsymbol{B}$ est donnée par

$$\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} -\dfrac{H^2k^4}{18}\overline{\varepsilon} & Hk_x(Q_{11}k_x^2 + (Q_{12}+C_{44})k_y^2) & Hk_y(Q_{11}k_y^2 + (Q_{12}+C_{44})k_x^2)\\ \dfrac{Hk^2k_x}{12}\overline{\varepsilon} & -(2Q_{11}k_x^2 + C_{44}k_y^2) & -k_xk_y(C_{44}+2Q12)\\ \dfrac{Hk^2k_y}{12}\overline{\varepsilon} & -k_xk_y(2Q_{12}+C_{44}) & -(2Q_{11}k_y^2 + C_{44}k_x^2)\end{pmatrix}. \tag{5.96}$$

Encore une fois, la stabilité de la solution dépend du signe de la partie réelle des valeurs propres associées à la matrice $\boldsymbol{B}$. Nous nous proposons par la suite d'étudier ces conditions.

5.3.4 Analyse de la stabilité linéaire

La solution $\hat{\boldsymbol{u}}(t)$ et $\hat{w}(t)$ est stable ssi *les parties réelles des racines de l'équation du troisième degrée* sont négatives, c'est-à-dire

$$a = -\mathrm{tr}\boldsymbol{B} > 0, \quad c = -\mathrm{det}\boldsymbol{B} > 0, \tag{5.97}$$

$$\mathrm{ab} - \mathrm{c} = \mathrm{det}\boldsymbol{B} - \mathrm{tr}\boldsymbol{B}((\mathrm{tr}\boldsymbol{B})^2 - \mathrm{tr}(\boldsymbol{B}^2))/2 > 0$$

qui seront exprimés ainsi

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = -\frac{1}{18}(18C_{44} + \overline{\varepsilon}H^2k^2 + 36Q_{11}) < 0, \tag{5.98}$$

et

$$\begin{aligned}\lambda_1\lambda_2\lambda_3 \;=\; & -\frac{1}{144}H^2k^2\overline{\varepsilon}\left(3C_{44}Q_{11} + Q_{11}^2 - C_{44}Q_{12} + \right.\\ & \left. -Q_{12}^2 + (C_{44} - Q_{11} + Q_{12})(Q_{11}+Q_{12})\cos(4\theta)\right) < 0.\end{aligned} \tag{5.99}$$

Par la suite nous allons montrer que (5.97.2) implique les inégalités (5.97.1) et (5.97.3).

L'inégalité $c > 0$: Nous allons montrer que, pour C_{11}, C_{12} et C_{44} compatible avec (4.108) nous avons

$$3C_{44}Q_{11} + Q_{11}^2 - C_{44}Q_{12} - Q_{12}^2 + (C_{44} - Q_{11} + Q_{12})(Q_{11} + Q_{12})\cos(4\theta) > 0. \quad (5.100)$$

En effet, en utilisant ξ introduite en (4.74) et les définitions de Q_{11} et Q_{12} nous écrivons la partie gauche en (5.99) comme

$$\frac{(C_{11} - C_{12})}{C_{11}} \left(4(C_{11}^2 - C_{12}^2) + \xi(3C_{11}^2 + 2C_{11}C_{12} + C_{11}(C_{11} + 2C_{12})\cos(4\theta))\right). \quad (5.101)$$

Comme le coefficient $(C_{11} - C_{12})/C_{11}$ est positif du fait que $-1/2 \leq C_{12}/C_{11} \leq 1$, il suffit d'étudier le signe de

$$4(C_{11}^2 - C_{12}^2) + \xi(3C_{11}^2 + 2C_{11}C_{12} + C_{11}(C_{11} + 2C_{12})\cos(4\theta)), \quad (5.102)$$

qui est une fonction linéaire de ξ. Il est facile de prouver ceci parce que $-1 \leq \cos(4\theta) \leq 1$. Nous avons alors

$$2C_{11}^2 \leq 3C_{11}^2 + 2C_{11}C_{12} + C_{11}(C_{11} + 2C_{12})\cos(4\theta) \leq 4C_{11}(C_{11} + C_{12}), \quad (5.103)$$

donc le coefficient de ξ est positif. Rappelons que la condition assurant la positivité du tenseur d'élasticité est

$$C_{11} > 0, \quad -\frac{1}{2} < \frac{C_{12}}{C_{11}} < 1, \quad C_{44} > 0. \quad (5.104)$$

Nous déduisons alors que la valeur minimale de ξ est atteinte lorsque C_{44} tend vers 0. Dans ce cas, ξ devient $C_{12}/C_{11} - 1$ et la relation (5.102) devient

$$2(C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2)s_2^2, \quad (5.105)$$

qui est positive pour $-\dfrac{1}{2} \leq \dfrac{C_{12}}{C_{11}} \leq 1$. Il suit que l'inégalité $c > 0$ est vraie si et seulement si $\overline{\varepsilon} > 0$.

L'inégalité $a > 0$: Étudions maintenant le signe de la trace donnée par l'équation (5.98). En effet, l'inégalité $c > 0$ implique $a > 0$, cette affirmation est simple parce que Q_{11} et C_{44} sont tous les deux positifs. Il reste à chercher le signe de $ab - c$.

L'inégalité $ab - c > 0$: L'implication $c > 0 \Rightarrow ab - c > 0$. Cette implication est plus complexe. Nous adoptons le même raisonnement suivi pour la relation (5.61). Premièrement, nous notons que l'expression $ab - c$ peut être écrite comme un polynôme de second degré en $Hk\overline{\varepsilon}$ comme

$$ab - c = C_1(\theta, \xi)(H^2k^2)^2\overline{\varepsilon}^2 + C_2(\theta, \xi)(Hk)^2\overline{\varepsilon} + C_3(\theta, \xi), \quad (5.106)$$

où

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{2592}\left(5C_{44}+7Q_{11}-3Q_{12}+3\cos(4\theta)(C_{44}-Q_{11}+Q_{12})\right), \qquad (5.107)\\ C_2 &= \frac{1}{144}\big(5C_{44}^2+26C_{44}Q_{11}+17Q_{11}^2-6C_{44}Q_{12}-6Q_{11}Q_{12}-3Q_{12}^2+\\ &\quad +3(C_{44}^2-3Q_{11}^2+2Q_{11}Q_{12}+Q_{12}^2+2C_{44}\cos(4\theta)(Q_{11}+Q_{12}))\big)\\ C_3 &= \frac{1}{2}(C_{44}+2Q_{11})(3C_{44}Q_{11}+Q_{11}^2-C_{44}Q_{12}-Q_{12}^2+\\ &\quad (C_{44}-Q_{11}+Q_{12})(Q_{11}+Q_{12})\cos(4\theta)). \end{aligned}$$

nous prouvons que $C_1>0, C_2>0$ et $C_3>0$. Nous commençons avec $C_3>0$ et nous notons que le premier facteur est positif donc nous devons montrer que

$$3C_{44}Q_{11}+Q_{11}^2-C_{44}Q_{12}-Q_{12}^2+(C_{44}-Q_{11}+Q_{12})(Q_{11}+Q_{12})\cos(4\theta)>0. \quad (5.108)$$

En effet, si nous utilisons ξ et nous posons $f=C_{12}/C_{11}$, cette inégalité sera équivalente à

$$(1-f)\left(4(1-f^2)+\xi(2+(1+2f)(1+\cos(4t)))\right). \qquad (5.109)$$

Or $-1/2<f<1$, nous obtenons alors

$$\xi(2+(1+2f)(1+\cos(4t)))>(f-1)(2+(1+2f)(1+\cos(4t)))>4(f^2-1) \quad (5.110)$$

et donc

$$(1-f)\left(4(1-f^2)+\xi(2+(1+2f)(1+\cos(4t)))\right)>0 \qquad (5.111)$$

ce qui montre que le coefficient C_3 est positif. Ensuite, nous prouvons que $C_1>0$; nous devons montrer que

$$5C_{44}+7Q_{11}-3Q_{12}+3\cos(4\theta)(C_{44}-Q_{11}+Q_{12})>0. \qquad (5.112)$$

En fonction de f,ξ et pour $f-1<\xi$ et $-1/2<f<1$ cette inégalité sera équivalente à

$$12-8f-4f^2+\xi(5+3\cos(4\theta))>0. \qquad (5.113)$$

Par ailleurs, nous avons

$$12-8f-4f^2+\xi(5+3\cos(4\theta))\geq 12-8f-4f^2+(f-1)(5+3\cos(4\theta)), \quad (5.114)$$

et $f-1<0$ donc

$$12-8f-4f^2+(f-1)(5+3\cos(4\theta))\geq 12-8f-4f^2+8(f-1)= \qquad (5.115)$$

$$4(1-f^2)\geq 0$$

Il reste à montrer que $C_2\geq 0$; c'est-à-dire

$$(5C_{44}^2+26C_{44}Q_{11}+17Q_{11}^2-6C_{44}Q_{12}-6Q_{11}Q_{12}-3Q_{12}^2+ \qquad (5.116)$$

$$+3(C_{44}^2-3Q_{11}^2+2Q_{11}Q_{12}+Q_{12}^2+2C_{44}\cos(4\theta)(Q_{11}+Q_{12}))).$$

Une autre fois, en utilisant f et ξ ceci est équivalent à

$$\xi^2(5+3\cos(4\theta))+4\xi\left((5+3\cos(4\theta))(1-f^2)+4(1-f)\right)+$$
$$8(1-f)^2(6+6f+f^2)\geq 0, \tag{5.117}$$

qui est un polynôme de second degré en ξ. Cherchons alors le Δ_1, nous obtenons alors

$$\Delta_1 = 9(1+f)^2\cos(4\theta)^2+6(3+8f+4f^2)\cos(4\theta)+3(7+10f+5f^2). \tag{5.118}$$

Cette dernière est aussi une équation de second degré en θ. Le Δ_2 est alors

$$-432-864f-288f^2+144f^3+36f^4. \tag{5.119}$$

Cette fonction est négative pour $-1/2<f<1$, ceci montre que (5.118) c'est-à-dire Δ_1 est positive. Un calcul direct de la somme et du produit des racines, montre que C_2, considéré comme un polynôme en ξ, possède toujours deux racines réelles $\xi_{\inf}(f,\theta)\leq\xi_{\sup}(f,\theta)\leq 0$. Si nous prouvons que

$$\xi_{\sup}\leq f-1, \tag{5.120}$$

il suit que C_2 est positif, qui implique $ab-c>0$. $\xi_{\sup}$ est donné par

$$\frac{1}{5+3\cos(4t)}\left(-18+8f+10f^2+6(-1+f^2)\cos(4t)+\right.$$
$$\left.\sqrt{6((-1+f)^2(17+26f+13f^2+4(3+8f+4f^2)\cos(4t)+3(1+f)^2\cos(8t))}\right) \tag{5.121}$$

et l'inégalité (5.126) suit comme une conséquence. En effet, cette dernière inégalité peut s'écrire

$$\frac{1}{5+3\cos(4t)}\left(-\overbrace{(13-3f-10f^2+(3+3f-6f^2)\cos(4\theta))}^{\mathrm{A}}+\right.$$
$$\left.\overbrace{\sqrt{6((-1+f)^2(17+26f+13f^2+4(3+8f+4f^2)\cos(4\theta)+3(1+f)^2\cos(8\theta))}}^{\mathrm{B}}\right). \tag{5.122}$$

d'autre part pour $-1/2<f<1$

$$A=(13-3f-10f^2+(3+3f-6f^2)\cos(4\theta))>10-6f-4f^2>0. \tag{5.123}$$

Nous avons aussi

$$B^2-A^2=(-1+f)^2(5+3\cos(4\theta))(-17-28f-8f^2+3(3+4f)\cos(4\theta)). \tag{5.124}$$

or

$$-17-28f-8f^2+3(3+4f)\cos(4\theta)<-8(1+f)^2<0 \tag{5.125}$$

Cette inégalité est négative, donc $B^2 < A^2$ et comme $B > 0$ et $A > 0$, ainsi $B - A < 0$ et donc

$$\xi_{\text{sup}} \leq f - 1, \tag{5.126}$$

C_2 est positif pour $\xi > f - 1$ donc pour $\overline{\varepsilon} > 0$ nous avons $ab - c > 0$.

Ainsi, nous avons prouver que les inégalités $a > 0$, $c > 0$, $ab - c > 0$ sont satisfaites si et ssi $\overline{\varepsilon} > 0$. La stabilité de la solution est donc donnée par

$$(hk)^2(C_{11}\xi s_2^2/2 + Q_{11}) + 12\varepsilon_0(Q_{11} + Q_{12}) > 0 \tag{5.127}$$

ce qui revient au nombre d'onde critique :

$$k_{\text{c}} = \frac{1}{h}\sqrt{-12\varepsilon_0\frac{E_1}{E_2}} = \frac{1}{h}\sqrt{-12\varepsilon_0\frac{C_{11}^2 - 2C_{12}^2 + C_{11}C_{12}}{C_{11}^2 - C_{12}^2 + C_{11}^2\xi s_2^2/2}}. \tag{5.128}$$

A la suite de cette analyse utilisant la théorie de la Lubrification, les conditions d'instabilité déjà obtenues avec le modèle bidimentionnel anisotrope sont confirmées.

5.4 Prise en compte du glissement - aspects qualitatifs

Nous avons montré dans le chapitre précédent qu'il y a un écart significatif entre la longueur d'onde donnée expérimentalement et celle calculée à partir du modèle théorique.

Rappelons les conditions de continuité à l'interface du modèle isotrope unidimensionnel développé dans le chapitre 4 (Huang and Suo 2002b). En effet, à l'interface entre le fluide visqueux et le film élastique, nous supposons que les contraintes normales σ_{zz}, la contrainte de cisaillement σ_{xz} ainsi que le champ de vitesses sont continus à l'interface film/fluide, c'est-à-dire,

$$q(x,t) = \sigma_{zz}(x,H,t), \quad \tau(x,t) = \sigma_{xz}(x,H,t). \tag{5.129}$$

Le champ de vitesse est continu à l'interface film/fluide, i.e,

$$v_x(x,H,t) = \frac{\partial u(x,t)}{\partial t}, \tag{5.130}$$

$$v_z(x,H,t) = \frac{\partial w(x,t)}{\partial t}. \tag{5.131}$$

Cependant, la différence entre la longueur d'onde expérimentale (Kostrzewa 2003) et celle théorique peut être attribuée au fait qu'il existe un glissement à l'interface film mince/fluide visqueux. Ce glissement s'exprime par la discontinuité du vecteur vitesse v_x à l'interface, c'est-à-dire,

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} - v_x(x,H,t) = \zeta\tau, \tag{5.132}$$

et dans ce cas les équations à l'interface film/fluide du vecteur vitesse deviennent

$$v_x(x,H,t)+\zeta\tau=\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}\quad o\grave{u}\quad \zeta>0 \tag{5.133}$$

$$v_z(x,H,t)=\frac{\partial w(x,t)}{\partial t}. \tag{5.134}$$

Les contraintes normales σ_{zz}, les contraintes de cisaillement σ_{xz} sont supposées continues à l'interface film/fluide. Ces équations peuvent s'écrire sous la forme d'un système d'équations différentielles à coefficients constants à partir des équations (4.19), (4.20) et (4.36).

Ainsi, nous obtenons,

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} A \\ \\ B \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \alpha & -\frac{\gamma_{12}}{\gamma_{22}}\beta \\ \\ \frac{\gamma_{12}}{\gamma_{11}}\alpha & -\beta(1+\frac{2\zeta\eta k}{\gamma_{22}}) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ \\ B \end{pmatrix}, \tag{5.135}$$

où γ_{ij}, α et β sont donnés respectivement par (4.18), (4.43) et (4.45). Nous désignons par s_1 et s_2 les deux valeurs propres réelles de la matrice associée au système d'équation (5.135) tel que,

$$s_{1,2}=\frac{1}{2}\left[(\alpha-\beta(1+\frac{2\zeta\eta k}{\gamma_{22}}))\pm\sqrt{(\alpha-\beta(1+\frac{2\zeta\eta k}{\gamma_{22}}))^2+4\alpha\beta(1-\frac{\gamma_{12}^2}{\gamma_{11}\gamma_{22}}+\frac{2\zeta\eta k}{\gamma_{22}})}\right]. \tag{5.136}$$

La stabilité des perturbations est toujours déterminée par

$$12\varepsilon_0(1+\nu)+(kh)^2>0. \tag{5.137}$$

La dépendance de la vitesse de croissance par rapport à ζ n'est pas aisée à élucider. La vitesse dans le fluide ainsi que dans le film sont positives et faibles par rapport à la contrainte de cisaillement. Ces grandeurs ne peuvent pas être quantifier. Le coefficient ζ s'écrivant selon l'équation

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}-v_x(x,H,t)=\zeta\tau\quad o\grave{u}\quad \zeta>0 \tag{5.138}$$

est alors très petit.

En terme qualitatif, nous traçons la vitesse de croissance pour des valeurs croissantes de ζ. La Figure 5.2 montre qu'en présence d'un glissement à l'interface film/fluide, le nombre d'onde critique k_m diminue en fonction de ζ. Par conséquent, la longueur d'onde maximale λ_m augmente, ce qui va dans le même sens que les prédictions expérimentales. Celles-ci associent la différence entre les longueurs d'onde expérimentale (λ_m) et théorique à la présence d'un glissement à l'interface fluide/film.

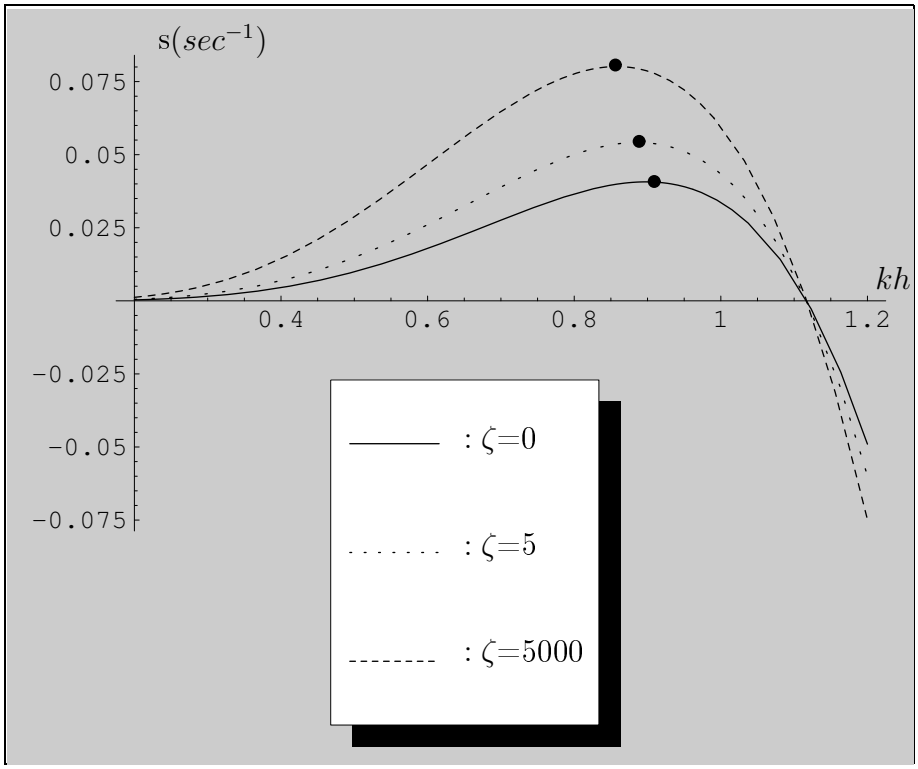

FIG. 5.2 – Vitesse de croissance des perturbations en fonction de la longueur d'onde normalisée pour une structure avec plusieurs valeurs de frottement à l'interface.

Conclusions et perspectives

Dans ce travail, une analyse des mécanismes de relaxation des couches contraintes épitaxiales et une explication des phénomènes mis en jeu ont pu être proposées. Nous nous sommes en particulier intéressés à la distribution et au rôle des contraintes liés à l'hétéroépitaxie sur l'évolution structurale des couches semi-conducteurs.

Nous avons étudié plusieurs aspects qualitatifs des modes de relaxation élastique des couches minces contraintes à savoir *la relaxation par courbure*, celle par *glissement* et de façon plus approfondie celle par *ondulation*.

La première partie de ce travail a été consacrée à l'étude d'une couche mince contrainte infiniment étendue par une analyse énergétique. Nous avons discuté le cas d'une désolidarisation complète dont le processus de relaxation s'accompagne d'une courbure. Ensuite, nous avons étudiée la relaxation dite *par le bord* (ou *désolidarisation latérale*) autorisant un glissement de la couche contrainte, tout en interdisant les déplacements verticaux. Dans ce cas, l'énergie élastique tend à relaxer tout en permettant un processus de glissement sans courbure. L'idéal est que la relaxation latérale permette une rigidité verticale infinie de la structure globale, mais cela est encore difficile à réaliser technologiquement.

Nous avons alors étudié la modélisation de la relaxation latérale et l'effet de bord dans le cadre du développement d'un modèle simple de type *shear lag* avec l'introduction d'une loi d'interface viscoélastique. Ce modèle a permis de décrire et d'analyser le processus de relaxation élastique initié au bord.

En pratique, pour permettre la relaxation latérale, il a été envisagé le report d'un film élastique précontraint sur un substrat par l'intermédiaire d'une couche visqueuse. La question qui se pose : quels sont les phénomènes génériques qui peuvent apparaître lors de cette relaxation ? Ainsi, nous avons étendu l'étude à l'analyse des phénomènes d'instabilité associés à l'apparition des ondulations d'un film élastique précontraint sur un substrat visqueux. Dans une étude précédente (Huang and Suo 2002b), le fluide avait été supposé incompressible obéissant à un comportement de type Navier-Stokes et le film avait été modélisé selon la théorie des plaques non linéaire de type von-Kàrmàn en négligeant le terme de courbure. En tenant compte de ce terme, nous avons montré que le rapport entre l'épaisseur du film et celle du fluide régit la limite d'instabilité.

Ensuite, nous avons généralisé notre démarche en prenant en compte l'anisotropie élastique du film. En effet, nous avons étudié l'apparition de l'instabilité en fonction de l'orientation des perturbations par rapport aux axes d'anisotropie du film. Le modèle développé a permis de fournir un ordre de grandeur correct pour les ondulations du film, mais aussi pour la direction de l'instabilité.

L'étude théorique présentée ici a permis d'expliquer certains phénomènes observés par KOSTRZEWA (2003) ainsi que par YIN et al. (2003b) lors de leurs études expérimentales. Entre autres, nous avons étudié

- La dépendance de la vitesse de croissance des perturbations en fonction du paramètre d'anisotropie. En effet, il existe des directions privilégiées pour lesquelles la vitesse de développement des ondulations sera plus rapide. Par ailleurs, nos prédictions théoriques ont confirmé que l'orientation des ondulations d'un film d'$In_{0.65}Ga_{0.35}As$ déposé sur la cire (Apiezon) est suivant la direction cristallographique [100].

- La longueur d'onde critique définissant la limite d'instabilité. Nous avons montré que pour le cas d'une couche précontrainte de $Si_{0.7}Ge_{0.3}$, la longueur d'onde théorique est du même ordre de grandeur que celle donnée par les essais expérimentaux. Le cas de $In_{0.65}Ga_{0.35}As$ est aussi confirmé mais avec un faible écart qui peut être associé à un phénomène de décollement du film élastique au cours du collage ou à un éventuel glissement à l'interface film/fluide.

La dernière partie de ce travail a permis de proposer une extension du modèle bidimensionnel isotrope proposé par HUANG et al. (2002) au cas anisotrope tridimensionnel, en utilisant la théorie de la lubrification pour le fluide. Les conditions d'instabilité déjà obtenues avec un modèle 2D anisotrope sont confirmées.

Plusieurs suite à ce travail peuvent être proposées. En particulier, nous pouvons envisager plusieurs développements pour simuler numériquement la relaxation élastique tridimensionnelle. Par exemple, il serait intéressant de décrire numériquement les deux processus de relaxation, celui par glissement et celui par ondulations. Nous pouvons en effet, visualiser les directions des ondulations aux bords, au centre ainsi que la longueur caractéristique sur laquelle la relaxation se fait par glissement.

Une quête commence toujours par la Chance du Débutant.
Et s'achève toujours par l'Épreuve du Conquérant

Paulo COELHO (L'Alchimiste)

Références

Asaro, R. J. and W. A. Tiller (1972). Interface morphology development during stress corrosion cracking : Part I via surface diffusion. *Metallurgical Transactions* (3), pp 1789–1796.

Bec, S. *Thèse Ecole Centrale de Lyon n° 92-92 Micro-Pyrolyse de Couches Minces de Polymères Precurseurs De Céramiques.*

Boudaa, M. (2003). *Thèse de Doctorat.* Ecole Centrale de Lyon (2003).

Carter-Coman, C., A. S. Brown, and Bicknell-Tassius (1996). *Appl. Phys. Lett 69.*

Carter-Coman, C., A. S. Brown, R. Bicknell-Tassius, N. M.Jokerst, F. Fournier, and D. E. Dawson (1996). *J. Vac. Sci. Technol B 14.*

Danescu, A. (2001). The asaro-tiller-grinfeld instability revisited. *Int. Journal of Solids and Structures 38*(3), pp 4671–4684.

Fierling, G. *Thèse Ecole Centrale de Lyon n° 98-54 Simulation des Phénomènes de Relaxation Elastique dans les dispositifs Opto-Electroniques Contraints.*

Floro, J. A. and B. Chanson (1999). Extensions of the stoney formula for substrate curvature to configurations with thin substrates or large deformations. *Appl. Phys. Lett 74.*

Freund, L. B. (1997). The asaro-tiller-grinfeld instability revisited. *Appl. Phys. Lett 70.*

Freund, L. B. and R. Hull (1992). On the dodsonŰtsao excess stress for glide of a threading dislocation in a strained epitaxial layer. *J. Appl. Phys 71.*

Freund, L. B. and W. D. Nix (1996). A critical thickness condition for a strained compliant substrate/epitaxial film system. *Appl. phys. Lett 69.*

Gosele, U. and Q.-Y. Tong (1998). *Annu. Rev. Mater. Sci* (28), pp 215.

Grinfeld, M. A. (1993). The stress driven instabilities in crystals : mathematical models and physical manifestations. *J. Nonlinear Science 3*, pp 35–83.

Guyer, J. E. and P. W. Voorhees (1996). Morphological stability of alloy thin films. *Phys. Rev. B 54.*

Hansen, D. M., P. D. Moran, K. A. Dunn, R. J. Matyi. S. E. Babcock, and T. F.Kuech (1998). Development of a glass-bonded compliant substrate. *Journal of Crystal Growth 195.*

Hobart, K. (2000). Compliant substrates : A comparative study of relaxation mechanisms of strained films bondes to high and low viscosity oxides. *J. Electron. Mater 29.*

Huang, R. and Z. Suo (2002a). Instability of a compressed elastic film on a viscous layer. *International Journal of Solids and Structures 39.*

Huang, R. and Z. Suo (2002b). Wrinkling of a compressed elastic film on a viscous layer. *Appl. Phys. Rev 91*(3).

Huang, R., H. Yin, K. D. Hobart, J. C. Sturm, and Z. Suo (2001). Mechanics of relaxing SiGe islands on a viscous glass. In *Workshop on Mechanics and Materials in the new centry, Xian, China*.

Huang, R., H. Yin, K. D. Hobart, J. C. Sturm , and Z. Suo (2002). Relaxation of a strained elastic film on a viscous layer. *Materials Research Society 695*.

Jiang, H. and L. He (2004). Morphological stability of films deposited on an **SOI** sibstrate. *Crystal Growth 262*.

Jin-Phillipp, N. Y., W. Sigle, A. Black. D. Babic, J. E. Bowers, E. L. Hu, and M. Ruhle (2001). Interface of directly bonded gaas and inp. *J. Appl. Physics* (89), pp 1017–1024.

Kallel-Kamoun, I. (1999). *Thèse de Doctorat, Analyse mécanique de l'éssai de flexion par flambement post-critique*. Ecole Centrale de Lyon (1999).

Kassner, K. and C. Misbah (1999). A phase-field approach for stress-induced instabilities. *Europhys. Lett 46*.

Kastner, G. and U. Gosele (2000). Principles of strain relaxation in heteroepitaxial films growing on compliant substrates. *J. Appl. Phys 88*.

Kastner, G. and U. Gosele (2003). Principles of strain relaxation in heteroepitaxial films growing on compliant substrates. *Appl. Phys. Lett 82*.

Kastner, G., U. Gosele, and T. Tan (1998). Principles of strain relaxation in heteroepitaxial films growing on compliant substrates. *Appl. Phys. A 66*.

Kostrzewa, M. (2003). *Thèse de Doctorat, Vers le développement de nouveaux substrats compliants et paramorphiques pour l'Hétéropitaxie de matériaux désaccordés en maille*. Ecole Centrale de Lyon (2003).

Kostrzewa, M., G. Grenet, P. Regreny, G. Hollinger, N. Mokni, A. Danescu, and F. Sidoroff (2003). Experimental premises for compliant substrate technology. *J. Appl. Phys à soumettre en décembre 2003*.

Kuang, J. B., Y. K. Chen, D. Sivco, A. Y. Cho, and L. F. Eastman (1999). *Appl.Phys. Lett 57*, pp 1784.

Leonard, F. and R. C. Desai (1999). Implications of a model for instability during film growth for strained ingaas and sige layers. *Appl. Phys. Rev 74*, pp 40–42.

Liang, J., R. Huang, H. Yin, J. Sturm, K. Hobart, and Z. Suo (2002). Relaxation of compressed elastic islands on a viscous layer. *Acta Material 50*, pp 2933–2944,.

Lo, Y. H. (1991). New approch to grow pseudomorphic structures over the critical thickness. *J. Appl. Phys. 59*.

Lo, Y. H., R. Bhat, D. M. Hwang, C.Chua, and C.-H. Lin (1993). New approch to grow pseudomorphic structures over the critical thickness. *Appl. Phys. Lett 62*.

Mokni, N., F. Sidoroff, and A. Danescu (2003). A one dimentional viscoelastic model for lateral relaxation in thin films. *Computationnal Materials 26*.

Park, S. K., J. I. Han, and W. K. Kim. M. Kwak (2001). Chip bonding on non-rigid and flexible substrates with new stepped processes. *Jpn. J. Appl. Phys 40*.

Spencer, B. J., P. W. Voorhees, and S. H. Davis (1993). Morphological instability in epitaxially strained dislocation-free solid films : Linear stability theory,. *J. Appl. Phys 73*.

Sridhar, N., D. J. Srolovitz, and Z. Suo (2001). Kinetics of buckling of a compressed film on a viscous substrate. *Appl. Phys. Lett 78*(17).

Srolovitz, D. J. (1989). On the stability of surfaces of stressed solids. *Acta. Metall 40*.

Suo, Z. and Z. Zhang (1998). Epitaxial film stabilized by long-range forces. *Physical Review B 58*(8).

Tersoff, J. and F. K. Legoues (1994). Competing relaxation mechanisms in strained layers. *Phys. Rev. Lett 72*.

Timoshenko, S. and S. Woinowsky-Krieger (1959). *Theory of plates and Shells*, pp. Second edition 580P. Mc Graw-Hill Book Co.

Wessels, B. W. (1997). Morphological stability of strained-layer semiconductors. *J. Vac. Sci. Tech 15*.

Yin, H., R. Huang, K. Hobart, Z. Suo, T. Kuan, C. K. Inoki, S. R. Shieh, T. S. Duffy, and J. C. Sturm. F. J. Kub (2002a). Strain relaxation of SiGe islands on compliant oxide. *J. Appl. Phys. 91*.

Yin, H., R. Huang, K. Hobart, Z. Suo, T. Kuan, C. K. Inoki, S. R. Shieh, T. S. Duffy, and J. C. Sturm. F. J. Kub (2003b). Buckling suppression of SiGe islands on compliant substrates. *J. Appl. Phys. 94*(10).

Zah, C., R. Bhat, K. Cheung, N. C. Andreadakis, F. Favire. G. Menocol, E. Yablonovitch, D. M. Hwang, M. Koza, T. J. Gmitter, and T. P. Lee (1990). *Appl. Phys. Lett 57*.

Zhang, T. Y. and Y. J. Su (1999). Elasticity studies of the critical thickness of an epilayer deposited on a compliant substrate. *Acta. Mater 47*.

Le développement de substrats permettant l'épitaxie en couches épaisses de matériaux de haute qualité optoélectronique désaccordées en maille fait l'objet d'investigation considérable dans le domaine de la recherche tant appliquée que fondamentale.

Une caractéristique essentielle de ces matériaux est leur structure nonocristalline avec l'inconvénient de pouvoir *a priori* combiner des matériaux présentant des paramètres de maille identiques ou très voisins.

Le développement de tels matériaux se trouve limité par leur procédé de fabrication même qui rend la relaxation élastique des contraintes inévitable à leur périphérie. La relaxation peut se traduire par la formation des dislocations, des irrégularités des surfaces ou l'apparition des ondulations...

Ce travail s'attache à faire le lien entre les études expérimentales des films minces de type semi-conducteur épitaxiés et les résultats issus de la modélisation de ces structures. Nous nous sommes en particulier intéressés à la distribution et au rôle des contraintes liés à l'hétéroépitaxie sur l'évolution structurale des couches semi-conducteurs.

Une modélisation de la relaxation latérale et l'effet de bord dans le cadre du développement d'un modèle simple de type *shear lag* avec l'introduction d'une loi d'interface viscoélastique a été proposé. Ce modèle a permis de décrire et d'analyser le processus de relaxation élastique initié au bord.

En pratique, il a été envisagé le report d'un film élastique précontraint sur un substrat par l'intermédiaire d'une couche visqueuse. Ainsi, nous avons étendu l'étude à l'analyse des phénomènes d'instabilité associés à l'apparition des ondulations d'un film élastique précontraint sur un substrat visqueux. Dans une étude précédente, le fluide avait été supposé incompressible obéissant à un comportement de type Navier-Stokes et le film avait été modélisé selon la théorie des plaques non linéaire de type von-Kàrmàn dans le cas isotrope. Cependant, les matériaux semi-conducteurs présentent une certaine anisotropie représentée par une symétrie cubique. Nous avons par conséquent élargie notre modélisation en prenant en compte ce paramètre.

Le modèle ainsi développé a montré qu'il y a une forte dépendance de la vitesse de croissance des perturbations en fonction du paramètre d'anisotropie. Nos prédictions théoriques ont confirmé que l'orientation des ondulations d'un film d'$In_{0.65}\,Ga_{0.35}As$ précontraint déposé sur la cire (Apiezon) est suivant la direction cristallographique [100]. Ce modèle a par ailleurs permis de fournir un ordre de grandeur correct pour les ondulations du film dans le cas des couches contraintes d' $In_{0.65}\,Ga_{0.35}As$ et d'$Si_{0.7}\,Ge_{0.3}$.

Cette analyse est étendue en considérant la configuration réelle 3D, la solution est établie dans le cas des matériaux anisotrope en utilisant la théorie de la lubrification dans la couche visqueuse.

Mots clés

Couches minces	Prédéformation	Relaxation êlastique	Anisotropie
Ondulations	Viscoélasticité	Courbure	Glissement