Couche épitaxiale mince sur un substrat semi-infini: rôle du désaccord paramétrique et de l'épaisseur sur les distortions élastiques

R. Bonnet, Jean-Louis Verger-Gaugry

► To cite this version:

R. Bonnet, Jean-Louis Verger-Gaugry. Couche épitaxiale mince sur un substrat semi-infini: rôle du désaccord paramétrique et de l'épaisseur sur les distortions élastiques. *Philosophical Magazine a*, 1992, 66 (5), pp.849-871. hal-03135968

HAL Id: hal-03135968

<https://hal.science/hal-03135968>

Submitted on 13 Feb 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**Couche épitaxiale mince sur un substrat
semi-infini : rôle du désaccord paramétrique et de
l'épaisseur sur les distortions élastiques**

R. Bonnet and J.-L. Verger-Gaugry

*LTPCM/ENSEEG/INPG (CNRS UA 29), BP 75, Domaine Universitaire, 38402 Saint
Martin d'Hères, France*

Abstract.

The elastic deformation field associated with a thin crystal epitaxially deposited on a semi-infinite single-crystal substrate of different nature is determined by a method previously proposed by one of the authors for the case of two semi-infinite media, with isotropic elasticity. Two assumptions are envisaged for the calculation in the frame of the planar deformation, the stress field being periodic along a direction parallel to the interface for both cases. First, it is assumed that misfit dislocations (or intrinsic dislocations) are present and regularly spaced. Second, it is supposed that translation dislocations (or extrinsic dislocations) are introduced by plastic deformation. The displacement fields of the two kinds of dislocation, expressed relative to a Cartesian frame linked to the interface, differ only by a linear function of the coordinates. Expressions for them are explicitly formulated from the analytical inversion of a system of nine linear complex equations with nine unknowns. Detailed expressions for the stresses and volumic dilatations are presented.

For the case of a single family of intrinsic dislocations, the elastic energy stored in the material is calculated explicitly against h . Results are extended to a square network of edge intrinsic dislocations with numerical applications to the systems GaSb/GaAs and GaAs/Si.

Le champ des déformations élastiques associé à un cristal mince en épitaxie sur un cristal de nature différente, monocristallin et semi-infini, est déterminé en utilisant une méthode antérieurement proposée par l'un des auteurs dans le cas de deux milieux semi-infinis à élasticité isotrope. Deux hypothèses de calcul sont envisagées dans le cadre de la déformation plane, le champ des contraintes étant dans les deux cas périodique dans une direction parallèle à l'interface. L'une admet la présence de dislocations de désaccord paramétrique (ou dislocations intrinsèques) régulièrement réparties; l'autre suppose la présence de dislocations de translation (ou dislocations extrinsèques) introduites par déformation plastique. Les champs des déplacements de ces deux types de dislocations, exprimés dans un repère Cartésien lié à l'interface, ne diffèrent que d'une fonction linéaire des coordonnées. Leurs expressions sont rendues explicites en inversant analytiquement un système de neuf équations linéaires complexes à neuf inconnues. Les expressions détaillées des contraintes et dilatations volumiques sont présentées.

Dans le cas d'une famille de dislocations intrinsèques, l'énergie élastique stockée dans le matériau est calculée explicitement en fonction de h . Les résultats sont étendus à un réseau carré de dislocations intrinsèques coin, avec des applications numériques aux systèmes GaSb/GaAs et GaAs/Si.

§ 1. INTRODUCTION

Depuis environ une décennie, les études expérimentales des couches épitaxiales sur substrat monocristallin se sont développées considérablement, depuis les premiers instants de la nucléation jusqu'à l'obtention de l'épaisseur désirée, celle-ci dépassant en général 10 nm dans les applications sur substrat de silicium (par exemple Cherns, Smith, Krakow et Batson 1982), Gibson, Tung, Phillips et Hull (1985), Catana (1990), Catana *et al.* (1990), Feuillet (1990) et Rocher, Da Silva et Raisin 1990b)). Lorsque ces couches ont des épaisseurs suffisantes, les interfaces sont souvent tapissées de dislocations disposées plus ou moins régulièrement suivant l'orientation cristallographique de la face du substrat et les traitements de recuit subis par l'échantillon. La densité et le caractère de ces dislocations dépendent des écarts paramétriques et angulaires entre les cristaux le long de l'interface, mais aussi de la rapidité avec laquelle a été refroidi l'échantillon. Pour des cristaux cubiques en épitaxie, l'écart paramétrique ('lattice mismatch' ou 'Vernier') peut atteindre 15% en étant accommodé par des dislocations dont les coeurs sont bien observables en microscopie électronique à haute résolution voir par exemple les dislocations de Lomer visibles aux interfaces CdTe(001)/GaAs(001) (Feuillet 1990). Les champs des déplacements élastiques régnant au voisinage de ces interfaces sont étudiés en microscopie électronique à transmission (par exemple Cherns *et al.* (1982), Bulle-Lieuwma, van Ommen et Hornstra (1988), Rocher *et al.* (1990b) et Tietz, Summerfelt et Carter (1990)) et par diffraction de rayons X (Bourret, Fuoss, Rocher et Raisin 1991). Il est donc nécessaire de disposer de modèles aussi réalistes que possible qui puissent décrire ces champs de déplacements en fonction de l'épaisseur h de la couche déposée, surtout lorsque la distance moyenne entre les dislocations d'interface et l'épaisseur h sont du même ordre de grandeur (fig. 1).

Les premiers, Frank et van der Merwe (1949) se sont attaqués au problème de l'épitaxie en utilisant les propriétés élastiques des cristaux et les désaccords paramétrique des réseaux cristallins. Plus récemment, dans trois articles successifs, van der Merwe (1982a, b, c) a amélioré son modèle en tenant compte de l'effet de l'épaisseur sur l'énergie élastique stockée dans le matériau, et présente des applications aux accolements de faces (111) de cristaux c.f.c. sur des faces (110) de cristaux c.c. Dans le cas

Schéma d'une couche monocristalline, d'épaisseur h , en épitaxie sur un substrat monocristallin. La période des dislocations interfaciales est λ . Les modules de cisaillement et de Poisson sont quelconques. Le volume parallélépipédique ABCDEF entourant une singularité de déformation (cœur d'une dislocation) est en équilibre.

particulier d'une épitaxie liée à des dislocations de désaccord paramétrique ('dislocations de Vernier' ou 'dislocations intrinsèques') ce modèle a cependant l'inconvénient d'utiliser un paramètre mal défini (un module de cisaillement propre à l'interface) et de donner une expression de l'énergie élastique emmagasinée qui ne dépend pas de rayons de coupure, ni d'un éventuel caractère mixte des dislocations. L'emploi d'un module de cisaillement interfacial est d'autant plus gênant que ce modèle suppose que les cristaux conservent leurs structures atomiques jusqu'à l'interface elle-même (van der Merwe 1982a), c'est-à-dire leurs propriétés élastiques respectives.

Dans un article récent, Willis, Jain et Bullough (1990) abordent ce problème, dans le cadre de la déformation plane, en admettant que les dislocations interfaciales sont des dislocations extrinsèques provenant de la déformation plastique de la couche épitaxiale. Ils prennent en compte, pour la première fois, le problème de l'interaction du champ élastique de ces dislocations avec la surface libre, lorsque le joint interphase sépare deux milieux élastiquement isotropes, mais différents; leurs résultats ne sont fonction que des coefficients de Lamé des deux matériaux et des grandeurs géométriques du système. Ils admettent que l'interface est abrupte en ce qui concerne les propriétés élastiques. Ils parviennent à formuler les contraintes et l'énergie élastique emmagasinée dans le matériau, mais sous la forme de séries dont les coefficients ne sont pas déterminés analytiquement dans le cas général. Dans le cas particulier où les deux milieux ont les mêmes propriétés élastiques, ils expriment cependant ces coefficients analytiquement et donnent une expression compacte de l'énergie.

Dans cette note, les auteurs reconsidèrent ce même problème, mais dans les deux hypothèses de dislocations intrinsèques et extrinsèques. De plus, une solution entièrement analytique est donnée pour deux milieux à propriétés élastiques différentes. La démarche s'inspire d'un article paru dans ce journal (Bonnet 1981), traitant le cas de deux milieux semi-infinis, et dont les résultats ont été appliqués récemment pour décrire le champ des déplacements de dislocations intrinsèques à l'interface GaSb/GaAs, pour une épaisseur moyenne de GaSb variant de $h = 4,2\text{nm}$ à 30nm (Bourret *et al.* 1991). Une solution plus appropriée devrait donner des expressions analytiques dépendantes de h . Nous nous proposons dans cette note de donner ces expressions et d'illustrer le résultat pour un réseau carré de dislocations purement coin à l'interface GaSb/GaAs dont le désaccord paramétrique, ou Vernier, vaut 7% environ.

§ 2. SOLUTION GÉNÉRALE DES ÉQUATIONS DE L'ÉLASTICITÉ PLANE CORRESPONDANT À UN CHAMP DE DÉFORMATION PÉRIODIQUE LE LONG D'UNE INTERFACE SÉPARANT DEUX MILIEUX DIFFÉRENTS

Soit un milieu élastiquement isotrope. En combinant les équations d'équilibre d'un élément de volume aux relations linéaires de Hooke, nous obtenons l'équation différentielle classique de l'élasticité, où u_k représente les trois composantes du champ des déplacements ($i, k = 1, 2, 3$). En adoptant la convention de sommation d'Einstein et en notant par une virgule l'opération de dérivation, cette équation s'écrit

$$(\lambda + \mu)u_{i,jj} + \mu u_{j,ji} = 0. \quad (1)$$

λ et μ sont les coefficients de Lamé du milieu déformé. Dans la suite du texte, une grandeur algébrique qui n'a pas un signe + ou - affecté en indice supérieur est utilisable indifféremment pour chacun des milieux. Le coefficient de Poisson est ν .

La déformation est plane et supposée strictement périodique le long de l'axe Ox_1 (fig. 1) avec la période Λ . Le repère cartésien est centré sur le coeur d'une dislocation interfaciale. Posons $\omega = 2\pi/\Lambda$, et adoptons Re et Im comme symboles signifiant respectivement 'partie réelle de' et 'partie complexe de'. En admettant que le champ des déformations est périodique selon l'axe Ox_1 , il est facile de montrer que les composantes du champ des déplacements u_k peuvent s'écrire sous l'une ou l'autre forme suivante (Bonnet 1981, éqn. (5)):

$$u_k = \sum_{n=-\infty}^{\infty} U_k^{(n)} \exp(in\omega x_1) \quad (2a)$$

$$u_k = u_k^0 + v_{k1}^0 x_1 + v_{k2}^0 x_2 + \sum_{n=1}^{\infty} [2 \text{Re}(U_k^{(n)}) \cos(n\omega x_1) - 2 \text{Im}(U_k^{(n)}) \sin(n\omega x_1)], \quad (2b)$$

où les termes de rang $n=0$, pour $k=1, 2, 3$, sont des fonctions linéaires réelles de x_1 et x_2 , et où les $U_k^{(n)}$ ne dépendent que de x_2 .

En insérant l'éqn. (2a) dans l'éqn. (1), nous obtenons, pour chaque harmonique de rang n non nul,

$$(\lambda + 2\mu)(-n^2\omega^2)U_1 + (\lambda + \mu)(in\omega)U_{2,2} + \mu U_{1,22} = 0, \quad (3)$$

$$\mu(-n^2\omega^2)U_2 + (\lambda + \mu)(in\omega)U_{1,2} + (\lambda + 2\mu)U_{2,22} = 0, \quad (4)$$

$$(-n^2\omega^2)U_3 + U_{3,22} = 0 \quad (5)$$

La solution générale du système (3)+(4)+(5) est donnée par

$$U_1 = (P + On\omega x_1) \exp(-n\omega x_1) + (R + Sn\omega x_1) \exp(n\omega x_1), \quad (6)$$

$$U_2 = i[P + Q(3 - 4\nu) + Qn\omega x_2] \exp(-n\omega x_2) - i[R - S(3 - 4\nu) + Sn\omega x_2] \exp(n\omega x_2), \quad (7)$$

$$U_3 = T \exp(-n\omega x_2) + U \exp(n\omega x_2). \quad (8)$$

Les constantes complexes P, Q, R, S, T et U dépendent des conditions aux limites. Dans le cas limite de deux milieux semi-infinis, les constantes R^+, S^+, P^-, Q^-, U^+ et T^- sont choisies nulles pour assurer la convergence du champ des déformations loin de l'interface (Bonnet 1981).

L'équation différentielle (1) n'implique aucune condition particulière sur les constantes $u_k^0, v_{k1}^0, v_{k2}^0$ qui ne dépendent donc que des conditions aux limites.

§ 3. CRITÈRES DE CONVERGENCE ET D'ÉQUILIBRE DES SOLUTIONS OBTENUES

3.1. Condition de convergence des solutions

Nous admettons que dans le milieu $x_2 < 0$, l'énergie élastique stockée par unité de surface demeure finie, pour les deux types de dislocations intrinsèques et extrinsèques. Comme toutes les contraintes tendent vers zéro dans le milieu $x_2 < 0$ loin du joint ($|x_2| \rightarrow \infty$), les constantes v_{k1}^0 et v_{k2}^0 sont nulles. Pour la même raison, avec l'éqn. (2b) substitué dans l'éqns. (6)-(8), on a

$$P^- = O^- = T^- = 0 \quad (9)$$

3.2. Condition d'équilibre d'un volume entourant une singularité de déformation (cœur d'une dislocation)

Nous vérifions que la résultante et le moment des forces agissant sur un cylindre de matière renfermant une singularité de déformation est bien nulle pour la solution générale donnée ci-dessus. Puisque les conditions d'équilibre de la matière sont vérifiées dans le matériau en dehors du cœur, n'importe quel volume de matière contenant une singularité peut être choisi pour calculer cette résultante (voir par exemple Hirth et Lothe 1982). Le schéma de la fig. 1 représente un parallélépipède rectangle ABCDEF, en pointillés, qui entoure le cœur d'une dislocation. Ce volume est limité le long de Ox_3 par une longueur unité. Le long de Ox_1 , les points A et D sont distants d'une période et sont situés à égale distance des coeurs des dislocations les plus proches. Le segment BC se trouve sur la surface libre. Les forces extérieures agissant sur CE et BF, sur deux facettes de largeur dx_2 placées le long d'une même ordonnée, sont exactement opposées puisque la longueur AD est égale à une période. Ces forces sont nulles le long de BC. Elles sont aussi nulles le long de EF lorsque ce segment se trouve infiniment loin de l'interface. Au total, la résultante des forces cherchée est donc bien nulle. Le moment de ces forces, pris par rapport au cœur de la dislocation placé entre A et D, est aussi nul pour les mêmes raisons de symétrie.

§ 4. CONDITIONS AUX LIMITES CORRESPONDANT AUX DISLOCATIONS INTRINSÈQUES

4.1. Condition en déplacement

Nous admettons ici que l'interface est plane avec une seule famille de dislocations intrinsèques réparties périodiquement et que le champ des déplacements est strictement périodique (période λ). Cette dernière condition implique que $v_{k1}^0 = v_{k2}^0 = 0$. Le champ des déplacements est discontinu le long de l'interface, avec une discontinuité variant linéairement à l'intérieur d'une période (Bonnet 1981).

Cette propriété exprime qu'à partir d'un état non déformé, obtenu en coupant les liaisons atomiques le long de l'interface, l'état final est obtenu en raccordant les plans réticulaires de façon que le déplacement relatif $u_k^+ - u_k^-$ soit périodique le long de Ox_1 et nul à mi-chemin entre deux coeurs de dislocations, en A sur la fig. 1. Cette hypothèse traduit, au niveau atomique, le rétablissement des unités structurales atomiques le long d'une facette interfaciale. Ainsi, une dizaine d'images à haute résolution de divers joints interphases comportant des singularités du champ des déplacements ont pu être interprétées avec une bonne précision (Loubradou 1990, Bonnet, Loubradou, Catana et Stadelmann 1991, Pénisson 1991). Il est facile de montrer (Bonnet 1981) qu'au voisinage immédiat d'une dislocation intrinsèque, le champ des déplacements est très proche de celui d'une dislocation extrinsèque, orientée selon l'axe Ox_3 , de vecteur de Burgers b_k ($k = 1, 2, 3$).

La linéarité du déplacement relatif peut être exprimée de trois façons (ici $x_2 = 0$):

$$u_k^+ - u_k^- = \left(\frac{b_k}{\lambda}\right) x_1 - \frac{b_k}{2}, \quad (10a)$$

$$u_k^+ - u_k^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{ib_k}{2\pi n} \exp(in\omega x_1), \quad (10b)$$

$$u_k^+ - u_k^- = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{-b_k}{\pi n} \sin(n\omega x_1), \quad (10c)$$

où n décrit l'ensemble des entiers relatifs non nuls dans l'éqn. (10b).

La série (2 a), appliquée aux deux milieux + et -, et l'éqn. (10 b) imposent donc que

$$U_k^+ - U_k^- = \frac{b_k}{2n\pi}, \quad (11 a)$$

$$u_k^{0+} = u_k^{0-} \quad (11 b)$$

Le champ des déplacements est donc défini à un vecteur translation près, identique pour les milieux + et -. Ce vecteur, qui peut être choisi de façon arbitraire, a des composantes que nous choisissons nulles pour simplifier $u_k^{0+} = u_k^{0-} = 0$.

Le champ des déplacements (2 b) s'écrit donc finalement

$$u_k = 2 \sum_{n=1}^{\infty} [\operatorname{Re}(U_k^{(n)}) \cos(n\omega x_1) - \operatorname{Im}(U_k^{(n)}) \sin(n\omega x_1)]. \quad (12)$$

4.2. Condition en contraintes

La continuité des forces au travers de l'interface impose que pour $x_2 = 0$

$$\sigma_{21}^+ = \sigma_{21}^- \quad (13)$$

Explicitons maintenant cette condition en déterminant tout d'abord les expressions des déformations ($i, j = 1, 2, 3$)

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}). \quad (14)$$

A partir des relations de Hooke appliquées à la déformation plane

$$\sigma_{11} = (\lambda + 2\mu)\varepsilon_{11} + \lambda\varepsilon_{22}, \text{ etc.}, \quad (15)$$

et de l'expression du champ des déplacements, série (12), nous obtenons les déformations (non nulles)

$$\varepsilon_{11} = \sum_1 [-2n\omega \operatorname{Im}(U_1) \cos(n\omega x_1) - 2n\omega \operatorname{Re}(U_1) \sin(n\omega x_1)], \quad (16)$$

$$\varepsilon_{22} = \sum_1 [2 \operatorname{Re}(U_{2,2}) \cos(n\omega x_1) - 2 \operatorname{Im}(U_{2,2}) \sin(n\omega x_1)], \quad (17)$$

$$\varepsilon_{12} = \sum_1 \{ [\operatorname{Re}(U_{1,2}) - n\omega \operatorname{Im}(U_2)] \cos(n\omega x_1) + [-\operatorname{Im}(U_{1,2}) - n\omega \operatorname{Re}(U_2)] \sin(n\omega x_1) \}, \quad (18)$$

$$\varepsilon_{13} = \sum_1 [-n\omega \operatorname{Im}(U_3) \cos(n\omega x_1) - n\omega \operatorname{Re}(U_3) \sin(n\omega x_1)], \quad (19)$$

$$\varepsilon_{23} = \sum_1 [\operatorname{Re}(U_{3,2}) \cos(n\omega x_1) - \operatorname{Im}(U_{3,2}) \sin(n\omega x_1)]. \quad (20)$$

Les contraintes σ_{2k} (réelles) ont donc les expressions (complexes) suivantes:

$$\sigma_{22} = \sum_{-\infty}^{\infty} [i\lambda n\omega U_1 + (\lambda + 2\mu)U_{2,2}] \exp(in\omega x_1), \quad (21 a)$$

$$\sigma_{21} = \sum_{-\infty}^{\infty} \mu(U_{1,2} + in\omega U_2) \exp(in\omega x_1), \quad (21 b)$$

$$\sigma_{23} = \sum_{-\infty}^{\infty} \mu U_{3,2} \exp(in\omega x_1), \quad (21 c)$$

ce qui donne, en termes réels

$$\begin{aligned} \sigma_{22} = \sum_1 \{ & [\lambda(-2n\omega) \operatorname{Im}(U_1) + 2(\lambda + 2\mu) \operatorname{Re}(U_{2,2})] \cos(n\omega x_1) \\ & + [\lambda(-2n\omega) \operatorname{Re}(U_1) - 2(\lambda + 2\mu) \operatorname{Im}(U_{2,2})] \sin(n\omega x_1) \}, \end{aligned} \quad (22 a)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{21} = \sum \{ & 2\mu[\operatorname{Re}(U_{1,2}) - n\omega \operatorname{Im}(U_2)] \cos(n\omega x_1) \\ & + 2\mu[-\operatorname{Im}(U_{1,2}) - n\omega \operatorname{Re}(U_2)] \sin(n\omega x_1) \}, \end{aligned} \quad (22 b)$$

$$\sigma_{23} = \sum [2\mu \operatorname{Re}(U_{3,2}) \cos(n\omega x_1) - 2\mu \operatorname{Im}(U_{3,2}) \sin(n\omega x_1)]. \quad (22 c)$$

Dans ces expressions, les dérivées $U_{1,2}$ et $U_{2,2}$ et $U_{3,2}$, facilement calculables, sont les suivantes:

$$U_{1,2} = [Qn\omega - n\omega(P + Qn\omega x_2)] \exp(-n\omega x_2) + [Sn\omega + n\omega(R + Sn\omega x_2)] \exp(n\omega x_2), \quad (23 a)$$

$$\begin{aligned} U_{2,2} = & -in\omega[P + Q(2 - 4\nu) + Qn\omega x_2] \exp(-n\omega x_2) - in\omega[R - S(2 - 4\nu) \\ & + Sn\omega x_2] \exp(n\omega x_2), \end{aligned} \quad (23 b)$$

$$U_{2,3} = -n\omega T \exp(-n\omega x_2) - n\omega U \exp(n\omega x_2). \quad (23 c)$$

La condition (13), combinée avec l'éqns. (21 a), (21 b) et (21 c) implique donc les trois relations suivantes, dans lesquelles il faut faire $x_2 = 0$:

$$\Gamma i\lambda^+ n\omega U_1^+ + (\lambda^+ + 2u^+)U_2^+ - \Gamma i\lambda^- n\omega U_1^- + (\lambda^- + 2u^-)U_2^- = 0. \quad (24 a)$$

$$u^+(U_1^+ + in\omega U_2^+) - u^-(U_1^- + in\omega U_2^-) = 0. \quad (24 b)$$

$$u^+ U_{2,3}^+ - u^- U_{2,3}^- = 0. \quad (24 c)$$

4.3. Condition aux limites à la surface libre ($x_2 = h$)

Les contraintes de surface sont nulles à la surface. Cette condition est exprimée par les trois équations suivantes, pour lesquelles $x_2 = h$:

$$i\lambda^+ n\omega U_1^+ + (\lambda^+ + 2\mu^+) U_{2,2}^+ = 0, \quad (25 a)$$

$$U_{1,2}^+ + i n\omega U_2^+ = 0, \quad (25 b)$$

$$U_{3,2}^+ = 0. \quad (25 c)$$

§ 5. DÉTERMINATION EXPLICITE DU CHAMP DES DÉPLACEMENTS ET DES CONTRAINTES DES DISLOCATIONS INTRINSÈQUES

5.1. Détermination des constantes complexes

Pour trouver explicitement chacun des coefficients de Fourier $U_k^{(n)}$ du champ des déplacements (12), il faut résoudre analytiquement les éqns. (11), (24) et (25). Pour le milieu $x_2 < 0$, les conditions (9) s'appliquent. Il demeure donc à résoudre un système linéaire de neuf équations à neuf inconnues en

$$P^+, Q^+, R^+, S^+, T^+, U^+, R^-, S^- \text{ et } U^-.$$

Ce système se découple en fait en deux sous-systèmes indépendants. Le premier comporte seulement les inconnues T^+ , U^+ et U^- . Il s'écrit

$$T^+ + U^+ - U^- = \frac{ib_3}{2n\pi}, \quad (26 a)$$

$$\mu^+(-T^+ + U^+) - \mu^- U^- = 0, \quad (26 b)$$

$$-T^+ + U^+ \exp(2n\omega h) = 0. \quad (26 c)$$

Les solutions sont purement complexes. En notant $k = \mu^+/\mu^-$, elles s'écrivent

$$U^+ = \frac{ib_3}{2n\pi} \frac{1}{1 - k + (1 + k) \exp(2n\omega h)}, \quad (27)$$

$$T^+ = U^+ \exp(2n\omega h) = \frac{ib_3}{2n\pi} \frac{\exp(2n\omega h)}{1 - k + (1 + k) \exp(2n\omega h)}, \quad (28)$$

$$U^- = k(-T^+ + U^+) = \frac{ib_3}{2n\pi} \frac{k(1 - \exp(2n\omega h))}{1 - k + (1 + k) \exp(2n\omega h)}. \quad (29)$$

La composante du champ des déplacement parallèlement aux dislocations ne dépend donc que de la composante vis du vecteur de Burgers b et du rapport k des modules de cisaillement.

L'autre système d'équations comporte les six inconnues P^+ , Q^+ , R^+ , S^+ , R^- et S^- . Il s'écrit sous la forme d'un produit matriciel, où la matrice colonne X_j ($j = 1-6$) renferme ces six inconnues complexes écrites dans le même ordre de haut en bas:

$$\mathbf{A} \mathbf{X} = \mathbf{B}. \quad (30)$$

Dans cette équation, les matrices $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$ sont respectivement une matrice carrée réelle 6×6 et une matrice colonne. En posant $E = \exp(n\omega h)$, l'éqn. (30) s'écrit aussi l'éqn. (30a).

Ainsi, la seule quantité complexe intervenant dans cette équation est le premier élément de la matrice $\mathbf{B}$. Cette équation a été résolue analytiquement en utilisant le

$$\begin{bmatrix}
 1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\
 1 & 3-4v^+ & -1 & 3-4v^+ & 1 & -(3-4v^+) \\
 -\mu^+ & -(\lambda^+ + 2\mu^+)(1-2v^+) & -\mu^+ & (\lambda^+ + 2\mu^+)(1-2v^+) & \mu^- & -(\lambda^- + 2\mu^-)(1-2v^-) \\
 -\mu^+ & -\mu^+(1-2v^+) & \mu^+ & -\mu^+(1-2v^+) & -\mu^- & \mu^-(1-2v^-) \\
 \frac{-\mu^+}{E} & \frac{-\lambda^+(1-2v^+) - \mu^+(2-4v^+ + n\omega h)}{E} & -\mu^+ E & [-\lambda^+(-1+2v^+) - \mu^+(-2+4v^+ + n\omega h)]E & 0 & 0 \\
 \frac{-\mu^+}{E} & \frac{-\mu^+(1-2v^+ + n\omega h)}{E} & \mu^+ E & \mu^+(-1+2v^+ + n\omega h)E & 0 & 0
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 P^+ \\
 Q^+ \\
 R^+ \\
 S^+ \\
 R^- \\
 S^-
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 \frac{jb_1}{2n\pi} \\
 \frac{b_2}{2n\pi} \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 0
 \end{bmatrix}
 \quad (30a)$$

logiciel de calcul formel Mathematica. Le résultat peut se mettre sous la forme suivante:

$$X_j = \frac{[t_{j1} + t_{j2} \exp(2hn\omega) + t_{j3} \exp(4hn\omega)]b_2 + [t_{j4} + t_{j5} \exp(2hn\omega) + t_{j6} \exp(4hn\omega)]ib_1}{2n\pi\Delta}, \quad (31a)$$

$$\Delta = \alpha + \beta \exp(2hn\omega) + \gamma \exp(4hn\omega). \quad (31b)$$

Les termes t_{jm} ($j, m = 1-6$) et α, β et γ sont explicités dans l'Annexe en fonction de k , du produit $hn\omega$ et des coefficients de Poisson v^+ et v^- . La solution (31a) a été vérifiée en calculant de deux façons les solutions X_j : d'une part en inversant numériquement l'éqn. (30), pour quelques harmoniques de rang n ; d'autre part en utilisant les expressions analytiques des éléments t_{ij} (Annexe). L'expression (31a) est obtenue en simplifiant une fraction par le produit $(-1 - 3k + 4kv^-)(3 + k - 4v^+)$. Ce produit est toujours différent de zéro comme il est facile de le vérifier, puisque chacun des coefficients de Poisson est compris entre 0 et $\frac{1}{2}$ et que k est toujours positif (il suffit que $-1 \leq v^\pm \leq \frac{1}{2}$). Lorsque $hn\omega$ devient suffisamment grand (c'est-à-dire, pour n tendant vers l'infini), les solutions ont des comportements différents: nS^+ et nR^+ tendent vers zéro avec un terme $\exp(-2n\omega h)$, tandis que nP^+ , nQ^+ , nR^- et nS^- tendent vers des constantes

$$(nP^+)_{\lim} = \frac{2k(2 - 3v^- - 3v^+ + 4v^-v^+)b_2 - (3 + 5k - 6kv^- - 4v^+ - 6kv^+ + 8kv^-v^+)ib_1}{2\pi(-1 - 3k + 4kv^-)(3 + k - 4v^+)} \quad (32)$$

$$(nQ^+)_{\lim} = \frac{b_2 - ib_1}{2\pi(3 + k - 4v^+)} \quad (33)$$

$$(nR^-)_{\lim} = \frac{-2k(2 - 3v^- - 3v^+ + 4v^-v^+)b_2 - k(-5 - 3k + 6v^- + 4kv^- + 6v^+ - 8v^-v^+)ib_1}{2\pi(-1 - 3k + 4kv^-)(3 + k - 4v^+)} \quad (34)$$

$$(nS^-)_{\lim} = \frac{k(b_2 + ib_1)}{2\pi(-1 - 3k + 4kv^-)} \quad (35)$$

La convergence du champ des déplacements (12) est donc lente puisque en $1/n$. Ce résultat est conforme aux propriétés des séries de Fourier de fonctions discontinues (Bass 1964).

5.2. Expression analytique du champ des déplacements

En insérant dans les eqns. (6-8) et (12) les expressions des solutions trouvées ci-dessus, nous obtenons les expressions explicites du champ des déplacements pour les deux milieux:

$$\begin{aligned} u_1^+ = \sum_1^\infty & \left(b_2 \{ (t_{12} + n\omega t_{22}x_2) \exp[n\omega(2h - x_2)] + (t_{13} + n\omega t_{23}x_2) \exp[n\omega(4h - x_2)] \right. \\ & + (t_{31} + n\omega t_{41}x_2) \exp(n\omega x_2) + (t_{32} + n\omega t_{42}x_2) \exp[n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\cos(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \\ & + b_1 \{ (-t_{15} - n\omega t_{25}x_2) \exp[n\omega(2h - x_2)] + (-t_{16} - n\omega t_{26}x_2) \exp[n\omega(4h - x_2)] \\ & + (-t_{34} - n\omega t_{44}x_2) \exp(n\omega x_2) + (-t_{35} - n\omega t_{45}x_2) \exp[n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\sin(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \Big), \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned}
u_2^+ = \sum_1^{\infty} & \left(b_1 \{ [-t_{15} + t_{25}(-3 + 4v^+ - n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h - x_2)] \right. \\
& \times [-t_{16} + t_{26}(-3 + 4v^+ - n\omega x_2)] \exp [n\omega(4h - x_2)] \\
& + [t_{34} + t_{44}(-3 + 4v^+ + n\omega x_2)] \exp (n\omega x_2) \\
& + [t_{35} + t_{45}(-3 + 4v^+ + n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\cos(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \\
& + b_2 \{ [-t_{12} + t_{22}(-3 + 4v^+ - n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h - x_2)] \\
& + [-t_{13} + t_{23}(-3 + 4v^+ - n\omega x_2)] \exp [n\omega(4h - x_2)] \\
& + [t_{31} + t_{41}(-3 + 4v^+ + n\omega x_2)] \exp (n\omega x_2) \\
& + [t_{32} + t_{42}(-3 + 4v^+ + n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\sin(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \Big), \quad (37)
\end{aligned}$$

$$u_3^+ = \frac{-b_3}{\pi} \sum_1^{\infty} \frac{\exp [n\omega(x_2 - 2h)] + \exp (-n\omega x_2)}{n\{1 + k + (1 - k) \exp [-2n\omega h]\}} \sin(n\omega x_1), \quad (38)$$

$$\begin{aligned}
u_1^- = \sum_1^{\infty} & \left(b_2 \{ (t_{51} + n\omega t_{61} x_2) \exp (n\omega x_2) + (t_{52} + n\omega t_{62} x_2) \exp [n\omega(2h + x_2)] \right. \\
& + (t_{53} + n\omega t_{63} x_2) \exp [n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\cos(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \\
& + b_1 \{ [-t_{54} - n\omega t_{64} x_2] \exp (n\omega x_2) + [-t_{55} - n\omega t_{65} x_2] \exp [n\omega(2h + x_2)] \\
& + [-t_{56} - n\omega t_{66} x_2] \exp [n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\sin(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \Big), \quad (39)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_2^- = \sum_1^{\infty} & \left(b_1 \{ [t_{54} + t_{64}(-3 + 4v^- + n\omega x_2)] \exp (n\omega x_2) \right. \\
& + [t_{55} + t_{65}(-3 + 4v^- + n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h + x_2)] \\
& + [t_{56} + t_{66}(-3 + 4v^- + n\omega x_2)] \exp [n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\cos(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \\
& + b_2 \{ [t_{51} + t_{61}(-3 + 4v^- + n\omega x_2)] \exp (n\omega x_2) \\
& + [t_{52} + t_{62}(-3 + 4v^- + n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h + x_2)] \\
& + [t_{53} + t_{63}(-3 + 4v^- + n\omega x_2)] \times \exp [n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\sin(n\omega x_1)}{n\pi\Delta} \Big), \quad (40)
\end{aligned}$$

$$u_3^- = \frac{-b_3}{\pi} k \sum_1^{\infty} \frac{\exp [n\omega(x_2 - 2h)] - \exp (n\omega x_2)}{n[1 + k + (1 - k) \exp (-2n\omega h)]} \sin(n\omega x_1). \quad (41)$$

5.3. Expression du champ des contraintes et de la dilatation volumique

Les expressions analytiques des contraintes sont obtenues en appliquant les éqns. (16)–(20) puis l'éqn. (15). Les contraintes σ_{33} sont calculées par la relation classique $\sigma_{33} = \nu(\sigma_{11} + \sigma_{22})$.

(a) Milicu $x_2 > 0$,

$$\begin{aligned}
\sigma_{11}^+ = 2\omega\mu^+ \sum_1^{\infty} & \left(b_1 \{ [-t_{15} + t_{25}(2v^+ - n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h - x_2)] \right. \\
& + [-t_{16} + t_{26}(2v^+ - n\omega x_2)] \exp [n\omega(4h - x_2)] \\
& + [-t_{34} + t_{44}(-2v^+ - n\omega x_2)] \exp (n\omega x_2) + [-t_{35} + t_{45}(-2v^+ - n\omega x_2)] \\
& \times \exp [n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\cos(n\omega x_1)}{\pi A} \\
& + b_2 \{ [-t_{12} + t_{22}(2v^+ - n\omega x_2)] \exp (n\omega(2h - x_2)] \\
& + [-t_{13} + t_{23}(2v^+ - n\omega x_2)] \exp [n\omega(4h - x_2)] \\
& + [-t_{31} + t_{41}(-2v^+ - n\omega x_2)] \exp (n\omega x_2) + [-t_{32} + t_{42}(-2v^+ - n\omega x_2)] \\
& \times \exp [n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\sin(n\omega x_1)}{\pi A} \Big), \quad (42)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{22}^+ = 2\omega\mu^+ \sum_1^{\infty} & \left(b_1 \{ [t_{15} + t_{25}(2 - 2v^+ + n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h - x_2)] \right. \\
& + [t_{16} + t_{26}(2 - 2v^+ + n\omega x_2)] \exp [n\omega(4h - x_2)] \\
& + [t_{34} + t_{44}(-2 + 2v^+ + n\omega x_2)] \exp (n\omega x_2) \\
& + [t_{35} + t_{45}(-2 + 2v^+ + n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\cos(n\omega x_1)}{\pi A} \\
& + b_2 \{ [t_{12} + t_{22}(2 - 2v^+ + n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h - x_2)] \\
& + [t_{13} + t_{23}(2 - 2v^+ + n\omega x_2)] \exp [n\omega(4h - x_2)] \\
& + [t_{31} + t_{41}(-2 + 2v^+ + n\omega x_2)] \exp (n\omega x_2) \\
& + [t_{32} + t_{42}(-2 + 2v^+ + n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\sin(n\omega x_1)}{\pi A} \Big) \quad (43)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{21}^+ = 2\omega\mu^+ \sum_1^{\infty} & \left(b_2 \{ [-t_{12} + t_{22}(-1 + 2v^+ - n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h - x_2)] \right. \\
& + [-t_{13} + t_{23}(-1 + 2v^+ - n\omega x_2)] \exp n\omega(4h - x_2)] \\
& + [t_{31} + t_{41}(-1 + 2v^+ + n\omega x_2)] \exp (n\omega x_2) \\
& + [t_{32} + t_{42}(-1 + 2v^+ + n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\cos(n\omega x_1)}{\pi A} \\
& + b_1 \{ [t_{15} + t_{25}(1 - 2v^+ + n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h - x_2)] \\
& + [t_{16} + t_{26}(1 - 2v^+ + n\omega x_2)] \exp [n\omega(4h - x_2)] \\
& + [-t_{34} + t_{44}(1 - 2v^+ - n\omega x_2)] \exp (n\omega x_2) \\
& + [-t_{35} + t_{45}(1 - 2v^+ - n\omega x_2)] \exp [n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\sin(n\omega x_1)}{\pi A} \Big), \quad (44)
\end{aligned}$$

$$\sigma_{23}^+ = \frac{\omega\mu^+}{\pi} b_3 \sum_1^{\infty} \frac{\exp(-n\omega x_2) - \exp[n\omega(x_2 - 2h)]}{1 + k + (1 - k)\exp(-2n\omega h)} \sin(n\omega x_1), \quad (45)$$

$$\sigma_{13}^+ = \frac{-\omega\mu^+}{\pi} b_3 \sum_1^{\infty} \frac{\exp(-n\omega x_2) + \exp[n\omega(x_2 - 2h)]}{1 + k + (1 - k)\exp(-2n\omega h)} \cos(n\omega x_1). \quad (46)$$

Willis *et al.* (1990) ont aussi donné l'éqn. (46), à une petite erreur d'homogénéité près. En effet, leur eqn. (A 25) doit être divisée par la période Δ .

(b) Milieu $x_2 < 0$,

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^- = 2\omega\mu^- \sum_1^{\infty} & \left(b_1 \{ [-t_{54} + t_{64}(-2v^- - n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \right. \\ & + [-t_{55} + t_{65}(-2v^- - n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \\ & + [-t_{56} + t_{66}(-2v^- - n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\cos(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \\ & + b_2 \{ [-t_{51} + t_{61}(-2v^- - n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \\ & + [-t_{52} + t_{62}(-2v^- - n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \\ & + [-t_{53} + t_{63}(-2v^- - n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\sin(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \Big), \quad (47) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{22}^- = 2\omega\mu^- \sum_1^{\infty} & \left(b_1 \{ [t_{54} + t_{64}(-2 + 2v^- + n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \right. \\ & + [t_{55} + t_{65}(-2 + 2v^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \\ & + [t_{56} + t_{66}(-2 + 2v^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\cos(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \\ & + b_2 \{ [t_{51} + t_{61}(-2 + 2v^- + n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \\ & + [t_{52} + t_{62}(-2 + 2v^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \\ & + [t_{53} + t_{63}(-2 + 2v^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\sin(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \Big), \quad (48) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{21}^- = 2\omega\mu^- \sum_1^{\infty} & \left(b_2 \{ [t_{51} + t_{61}(-1 + 2v^- + n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \right. \\ & + [t_{52} + t_{62}(-1 + 2v^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \\ & + [t_{53} + t_{63}(-1 + 2v^- + n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\cos(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \\ & + b_1 \{ [-t_{54} + t_{64}(1 - 2v^- - n\omega x_2)] \exp(n\omega x_2) \\ & + [-t_{55} + t_{65}(1 - 2v^- - n\omega x_2)] \exp[n\omega(2h + x_2)] \\ & + [-t_{56} + t_{66}(1 - 2v^- - n\omega x_2)] \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\sin(n\omega x_1)}{\pi\Delta} \Big), \quad (49) \end{aligned}$$

$$\sigma_{23}^- = \frac{k\omega\mu^-}{\pi} b_3 \sum_1^{\infty} \frac{(1 - \exp(-2n\omega h)) \exp(n\omega x_2)}{1 + k + (1 - k)\exp(-2n\omega h)} \sin(n\omega x_1), \quad (50)$$

$$\frac{-\omega\mu^-}{\pi} b_3 \sum_1^{\infty} \frac{-\exp(n\omega x_2) + \exp[n\omega(x_2 - 2h)]}{1 + k + (1 - k) \exp(-2n\omega h)} \cos(n\omega x_1). \quad (51)$$

La validité de ces expressions a été testée en vérifiant numériquement les conditions (13) et (25).

Pour les systèmes couche épitaxiale/substrat, il est utile d'avoir une idée des variations de la dilatation volumique $\theta = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}$ qui contrôle les flux de diffusion des espèces atomiques:

$$\begin{aligned} \theta^+ = \frac{2\omega(1 - 2\nu^+)}{\pi} \sum_1^{\infty} & \left(b_1 \{ t_{25} \exp[n\omega(2h - x_2)] + t_{26} \exp[n\omega(4h - x_2)] - t_{44} \right. \\ & \times \exp(n\omega x_2) - t_{45} \exp[n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\cos(n\omega x_1)}{A} \\ & + b_2 \{ t_{22} \exp[n\omega(2h - x_2)] + t_{23} \exp[n\omega(4h - x_2)] - t_{41} \\ & \times \exp(n\omega x_2) - t_{42} \exp[n\omega(2h + x_2)] \} \frac{\sin(n\omega x_1)}{A} \Big) \end{aligned} \quad (52 a)$$

$$\begin{aligned} \theta^- = \frac{2\omega(-1 + 2\nu^-)}{\pi} \sum_1^{\infty} & \left(b_1 \{ t_{64} \exp(n\omega x_2) + t_{65} \exp[n\omega(2h + x_2)] + t_{66} \right. \\ & \times \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\cos(n\omega x_1)}{A} \\ & + b_2 \{ t_{61} \exp(n\omega x_2) + t_{62} \exp[n\omega(2h + x_2)] + t_{63} \\ & \times \exp[n\omega(4h + x_2)] \} \frac{\sin(n\omega x_1)}{A} \Big). \end{aligned} \quad (52 b)$$

§ 6. CONDITION AUX LIMITES CORRESPONDANT AUX DISLOCATIONS EXTRINSÈQUES

Les dislocations interfaciales, dites 'extrinsèques', sont des dislocations de translation (Friedel 1979). Le champ élastique de telles dislocations à l'interface couche épitaxiale/substrat a récemment été étudié par Willis *et al.* (1990). Ces auteurs les introduisent par une déformation plastique du substrat, préalablement déformé élastiquement de façon homogène. Cette déformation plastique est engendrée par des glissements périodiques, depuis la surface libre du substrat, d'un type déterminé de dislocation de translation. Les auteurs parviennent à donner une solution explicite lorsque les deux milieux ont les mêmes propriétés élastiques, et que les dislocations sont purement vis. Pour les dislocations coin, ils donnent une solution en séries de Fourier qui nécessite néanmoins l'inversion numérique d'une matrice complexe 4×4 , pour chaque harmonique de la série.

Dans ce paragraphe, des solutions explicites applicables à deux milieux différents sont présentées.

6.1. Condition en déplacement le long de l'interface

Dans ce travail, les dislocations extrinsèques sont introduites différemment de Willis *et al.*, par des glissements successifs le long de l'interface. La conséquence mathématique est décrite par l'éqn. (40) de Bonnet (1981). Elle exprime simplement que, le long de l'interface, les trois composantes de $u_k^+ - u_k^-$, doivent varier par paliers, selon une courbe brisée en escalier (voir la fig. 3(b) de la référence ci-dessus). D'autre part,

les composantes $u_k^+ - u_k^-$ ont des expressions générales imposées par l'éqn. (2 b). Les conséquences sont donc les suivantes.

- (1) Les coefficients $U_k^{(n)}$ de rang n non nul, équa. (2 a, b) sont les mêmes que pour les dislocations intrinsèques. Il s'ensuit que tous les termes harmoniques sont identiques pour les dislocations intrinsèques et extrinsèques. Les deux champs ne se distinguent l'un de l'autre que par des termes linéaires en x_1 et x_2 .
- (2) Les relations suivantes doivent être vérifiées:

$$u_k^{0+} - u_k^{0-} = -\frac{b_k}{2}, \quad (53 a)$$

$$v_{k1}^{0+} - v_{k2}^{0-} = -\frac{b_k}{A}, \quad (53 b)$$

A l'éqn. (53 a), il est possible d'ajouter une condition supplémentaire (arbitraire) pour définir l'état de translation global des deux milieux, par exemple

$$u_k^{0-} = 0, \quad (53 c)$$

$$u_k^{0+} = -\frac{b_k}{2}, \quad (53 d)$$

Par contre, pour déterminer les six constantes $v_{kj}^0 = 0$ ($j = 1, 2$), il faut expliciter les conditions aux limites en contraintes.

6.2. Condition en contraintes

6.2.1. Le long de l'interface

En dérivant l'éqn. (2 b) et en appliquant la relation de Hooke, il s'ensuit que le champ des dislocations extrinsèques est égal à celui des dislocations intrinsèques auquel il faut ajouter un champ des contraintes constant σ_{ij}^0 dont l'expression est

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^0 &= (\lambda + 2\mu)v_{11}^0 + \lambda v_{22}^0, \\ \sigma_{22}^0 &= \lambda v_{11}^0 + (\lambda + 2\mu)v_{22}^0, \\ \sigma_{33}^0 &= \lambda v_{11}^0 + \lambda v_{22}^0, \\ \sigma_{23}^0 &= \mu v_{32}^0, \\ \sigma_{31}^0 &= \mu v_{31}^0, \\ \sigma_{12}^0 &= \mu v_{12}^0 + \mu v_{21}^0. \end{aligned} \quad (54 a)$$

La continuité des contraintes à l'interface exige donc les trois conditions suivants:

$$\begin{aligned} \lambda^+ v_{11}^0 + (\lambda^+ + 2\mu^+) v_{22}^0 &= \lambda^- v_{11}^0 + (\lambda^- + 2\mu^-) v_{22}^0, \\ \mu^+ v_{32}^0 &= \mu^- v_{32}^0, \\ \mu^+ v_{12}^0 + \mu^+ v_{21}^0 &= \mu^- v_{22}^0 + \mu^- v_{21}^0. \end{aligned} \quad (54 b)$$

6.2.2. Dans le substrat, très loin de l'interface

Nous admettons qu'il n'y a pas de champ de contraintes à longue distance dans le substrat. En effet, si ce champ était non nul, il engendrerait une énergie élastique stockée infinie, ce qui n'a pas de sens physique. Il s'ensuit donc que ($k = 1, 2, 3; j = 1, 2$)

$$v_{kj}^0 = 0. \quad (54 c)$$

§ 7. DÉTERMINATION EXPLICITE DU CHAMP DES DÉPLACEMENTS ET DES CONTRAINTES DES DISLOCATIONS EXTRINSÈQUES

Il résulte de ce qui précède que le champ des déplacements des dislocations extrinsèques, dans le substrat, est strictement identique à celui des dislocations intrinsèques.

Par contre, dans la couche épitaxique, le champ des déplacements diffère de celui des dislocations intrinsèques par des termes additifs, linéaires en x_1 et x_2 , suivant l'éqn. (2 b). En résolvant le système formé par les eqns. (53 b), (54 b) et (54 c), nous obtenons les expressions

$$v_{k1}^{0+} = -\frac{b_k}{\lambda} \quad (k=1, 2, 3); \quad v_{12}^{0+} = \frac{b_2}{\lambda}; \quad v_{22}^{0+} = \frac{v^+ b_1}{(1-v^+)\lambda}; \quad v_{32}^{0+} = 0. \quad (55 a)$$

En insérant ces relations dans l'éqn. (54 a), les contraintes moyennes non nulles dans la couche sont les suivantes:

$$\sigma_{11}^{0+} = \frac{-2\mu^+ b_1}{(1-v^+)\lambda}; \quad \sigma_{33}^{0+} = \frac{-2\mu^+ v^+ b_1}{(1-v^+)\lambda}; \quad \sigma_{13}^{0+} = \frac{-\mu^+ b_3}{\lambda} \quad (55 b)$$

Ce résultat confirme l'éqns. (15) de Willis *et al.* (1990).

§ 8. CALCUL DE L'ÉNERGIE ÉLASTIQUE STOCKÉE E POUR UNE FAMILLE DE DISLOCATIONS INTRINSÈQUES PARALLÈLES, EN FONCTION DE L'ÉPAISSEUR h DE LA COUCHE

Une coupure est tout d'abord effectuée le long de l'interface $x_2 = 0$. Pour rétablir les liaisons atomiques, il faut exercer des contraintes de surface. Le travail des forces de surface correspondantes est calculé pour le déplacement relatif indiquée par l'éqn. (10 a). Dans cette intégrale, les contraintes σ_{2k} sont exprimées par l'éqns. (48)–(50) relatives au milieu, calculées pour $x_2 = 0$. Formellement, elles sont plus simples à écrire pour le milieu $x_2 < 0$ à cause des eqns. (9). La surface d'intégration s'étend sur une longueur unité le long de Ox_3 , et le long de Ox_1 sur l'intervalle $(r_0, \lambda - r_0)$, r_0 étant le rayon de coupure (Hirth et Lothe 1982). L'énergie élastique stockée par unité de surface, notée E_{s1} , est donc

$$E_{s1} = \frac{1}{2\lambda} \int_{r_0}^{\lambda-r_0} b_k (-\sigma_{2k})_{x_2=0} \left(\frac{x_1}{\lambda} - \frac{1}{2} \right) dx_1. \quad (56 a)$$

L'intégration donne le résultat suivant:

$$E_{s1} = \frac{\mu^- \omega k}{\pi} \sum_1^\infty \left(\frac{4N_1}{\lambda} + \frac{(1 - \exp(-2hn\omega))b_3^2}{1+k+(1-k)\exp(-2hn\omega)} \right) \left[\left(1 - \frac{2r_0}{\lambda} \right) \frac{\cos(n\omega r_0)}{4n\pi} + \frac{\sin(n\omega r_0)}{4n^2\pi^2} \right] \quad (56 b)$$

avec λ donnée par l'éqn. (31 b) et

$$\begin{aligned} N_1 = & (b_1^2 + b_2^2)[1 - v^+ - k + kv^- + (-1 + v^+ - k + kv^-) \\ & \times \exp(4hn\omega)] + [(b_1^2 + b_2^2)2k(1 - v^-)(1 + 2h^2n^2\omega^2) \\ & + (b_2^2 - b_1^2)4hn\omega(1 - v^+)] \exp(2hn\omega). \end{aligned} \quad (56 c)$$

L'exactitude des eqns. (56 b) et (56 c) a été vérifiée en intégrant numériquement (56 a) avec des données correspondant au système GaSb/GaAs (§ 10).

§9. CHAMP ÉLASTIQUE D'UN RÉSEAU CARRÉ DE DISLOCATIONS INTRINSÈQUES

Grâce au principe de superposition, le champ élastique de deux réseaux de dislocations intrinsèques sur la même interface peut être résolu simplement. A titre d'exemple, le champ élastique d'un réseau carré de dislocations est calculé ci-dessous.

Notons $u_k(x_1, x_2, x_3)$ le champ des déplacements lié au réseau de dislocations de la famille I (fig. 2) pour laquelle les dislocations ont un vecteur de Burgers b_k . Pour noter les champs régnant dans chacun des milieux, il suffit d'affecter un indice supérieur + ou -, selon le cas, aux symboles correspondant à l'un ou l'autre milieu.

Construisons une autre famille de dislocations de Vernier, la famille II, déduite de la précédente par rotation de $+\pi/2$ autour de Ox_2 . Au point $M'(-x_3, x_2, x_1)$ correspond donc le point $M(x_1, x_2, x_3)$. Le champ des déplacements total se déduit de l'addition des champs des familles I et II. La contribution de la famille II est donnée par l'équation matricielle suivante, où u_k^I est donné par les équ. (36)–(41):

$$[u_k^{\text{II}}(M)] = [R] \begin{bmatrix} u_1^I(M') \\ u_2^I(M') \\ u_3^I(M') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_3^I(M') \\ u_2^I(M') \\ -u_1^I(M') \end{bmatrix} \quad (57 a)$$

avec

$$E_{S2} = \frac{1}{2A^2} \int_{r_0}^{A-r_0} \int_{r_0}^{A-r_0} (-\sigma_{2k}^{(I+II)})_{x_2=0} [(u_k^+ - u_k^-)^I + (u_k^+ - u_k^-)^{\text{II}}] dx_1 dx_3. \quad (57 b)$$

Le champ des déplacement total obtenu est donc

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1^I(M) + u_3^I(M') \\ u_2^I(M) + u_2^I(M') \\ u_3^I(M) - u_1^I(M') \end{bmatrix}. \quad (57 c)$$

Fig. 2

Schéma d'un réseau de dislocations à motif carré, formé de deux familles I et II. Les dislocations sont orientées respectivement selon les axes Ox_3 et Ox_1 . La période est A .

Pour le champ des contraintes, la contribution de la famille II est calculée d'une façon analogue. En notant $\sigma_{ij}^I(\mathbf{M})(i, j = 1, 2, 3)$ le champ des contraintes en $\mathbf{M}(x_1, x_2, x_3)$ de la famille I, l'éqns. (15), nous obtenons

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

Le champ des contraintes total obtenu est alors

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

L'énergie élastique emmagasinée par unité de surface, notée E_{S2} , est calculée en intégrant le travail des forces de surfaces le long d'un carré de côté $A - 2r_0$ et en le rapportant à la surface A^2 (éqn. (57b)).

Ce calcul est effectué ci-dessous dans le cas où les dislocations sont purement coins. Cette intégrale se simplifie alors beaucoup puisque les déplacements relatifs $(u_k^+ - u_k^-)^I$ sont parallèles à l'axe Ox_1 , les déplacements relatifs $(u_k^+ - u_k^-)^{II}$ sont parallèles à l'axe Ox_3 , et que, pour la famille I, $b_2 = b_3 = 0$. L'intégrale s'écrit dans ce cas

$$E_{S2} = \frac{1}{2A^2} \int_{r_0}^{A-r_0} \int_{r_0}^{A-r_0} \{ [-\sigma_{21}^I(\mathbf{M})]_{x_2=0} (u_1^+ - u_1^-)^I + [\sigma_{23}^{II}(\mathbf{M})] (u_3^+ - u_3^-)^{II} \} dx_1 dx_3. \quad (59)$$

Compte tenu des éqns. (45), (57a) et (58a), de la variation en dents de scie du déplacement relatif (10a), et de

$$(u_1^+ - u_1^-)^{II} = -b_1 \left(\frac{-x_3}{A} + \frac{1}{2} \right) = b_1 \left(\frac{x_3}{A} - \frac{1}{2} \right), \quad (60)$$

il s'ensuit que l'intégrale (59) se découple en deux intégrales de même valeur, avec, sous le signe somme, soit la variable x_1 , soit la variable x_3 . Cette propriété exprime en fait l'indépendance des travaux des cisssions interfaciales, l'un selon Ox_1 et l'autre selon Ox_3 . Au total

$$E_{S2} = \frac{1}{A^2} \int_{r_0}^{A-r_0} \int_{r_0}^{A-r_0} [-\sigma_{21}^I(\mathbf{M})]_{x_2=0} b_1 \left(\frac{x_1}{A} - \frac{1}{2} \right) dx_1 dx_3. \quad (61)$$

L'intégration en x_1 est identique à l'équa. (56a). Il est donc facile d'en déduire le résultat suivant:

$$E_{S2} = 2 \left(1 - \frac{2r_0}{A} \right) E_{S1} \quad (62)$$

pour lequel E_{S1} doit être calculée avec $b_2 = b_3 = 0$, l'éqns. (56b) et (56c). L'expression complète de E_{S2} est donc finalement

$$E_{S2} = \frac{2\mu^- \omega k}{\pi^2} \left(1 - \frac{2r_0}{A} \right) b_1^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{N_2}{nA} \left[\left(1 - \frac{2r_0}{A} \right) \cos(n\omega r_0) + \frac{\sin(n\omega r_0)}{n\pi} \right], \quad (63)$$

où Δ est donné par l'éqn. (31 b) avec les expressions reportées à l'Annexe, et où

$$N_2 = 1 - v^+ - k + kv^- + (-1 + v^+ - k + kv^-) \exp(4h n \omega) \\ + [2k(1 - v^-)(1 + 2h^2 n^2 \omega^2) - 4h n \omega(1 - v^+)] \exp(2h n \omega). \quad (64)$$

§ 10. APPLICATION AUX INTERFACES ÉPITAXIQUES GaSb/GaAs ET GaAs/Si

10.1. GaSb/GaAs

La croissance épitaxiale de très fines couches de GaSb sur un substrat de GaAs dont la surface est orientée (001) a été étudiée par plusieurs équipes, dont Rocher *et al.* (1990a) et Bourret *et al.* (1991). Les réseaux cubiques de ces cristaux sont disposés parallèlement. La figure 3 est une micrographie électronique en faisceau faible obtenue par Rocher *et al.* (1990b). Elle met en évidence des défauts linéaires qui se répètent avec une périodicité de 5.6 nm le long de deux directions orthogonales $\langle 100 \rangle$. Selon ces auteurs, l'origine de ces défauts n'est pas reliée à un mécanisme conventionnel de source de dislocations qui glisseraient suivant des plans (111), hypothèse qui conduirait à une nature extrinsèque de ces dislocations interfaciales. En fait, les expériences de diffraction des RX de Bourret *et al.* (1991) ont permis d'établir la nature intrinsèque de ces dislocations en comparant, indirectement, le champ des déplacements expérimentaux avec le champ théorique de dislocations intrinsèques (les équa. (32 a) and (32 c)† de Bonnet (1981)). Le motif carré de ces défauts est observable dès qu'une épaisseur de 1 nm est obtenue. La nature intrinsèque des dislocations a été également confirmée par des simulations du champ des déplacements des colonnes atomiques, observable sur des images de microscopie électronique à haute résolution (Loubradou 1990).

Dans ce paragraphe, nous appliquons l'éqn. (63) pour examiner l'influence de l'épaisseur h sur la valeur de l'énergie élastique stockée par unité de surface. Les

Fig. 3

Aspect d'un îlot de GaSb en épitaxie sur une surface (001) de GaAs. L'interface est tapissée d'un réseau bipériodique de dislocations intrinsèques purement coin, formant un motif carré de côté $\Delta = 5.6$ nm. (Micrographie communiquée par A. Rocher, CEMES, Laboratoire d'Optique Electronique Toulouse).

† Dans l'éqn. (32 c), le coefficient de l'exponentiel de F_6 doit être $+2\pi g|x_2|$.

Paramètres cristallins et modules d'élasticité utilisés dans les calculs de l'énergie élastique emmagasinée (figs. 4 et 5).

	a (nm)	μ (GPa)	ν
GaSb	0.6096	33.9	0.26
GaAs	0.5653	46.0	0.25
Si	0.54282	66.1	0.23

Fig. 4

Variation des énergies élastiques emmagasinées, par unité de surface, en fonction de l'épaisseur h de la couche de GaSb déposée sur GaAs dans deux hypothèses: la courbe (I), une seule famille de dislocations intrinsèques; la courbe (II), deux familles orthogonales. La courbe (II) se déduit de la courbe (I) par l'éqn. (62).

paramètres des cristaux sont ceux donnés par Bourret *et al.* (1990). Les modules μ et ν (tableau) sont déterminés par le calcul à partir des constantes d'élasticité anisotropes de Hearmon (1979), selon la méthode indiquée dans l'Annexe 2 de Bonnet et Morton (1987). Ces constantes sont, pour GaSb $C_{11}=88.4$ GPa, $C_{12}=40.3$ GPa et $C_{44}=43.4$ GPa et, pour GaAs, $C_{11}=118$ GPa, $C_{12}=53.5$ GPa et $C_{44}=59.4$ GPa. Les modules de cisaillement obtenus sont dans le rapport $k=\mu^+/\mu^-=0.737$.

Dans cet exemple, GaSb est le cristal + et GaAs est le cristal -. Le désaccord paramétrique est d'environ 7%; la période est $\Lambda=5.6$ nm. Pour la famille I, (fig. 2), chaque dislocation intrinsèque a un vecteur de Burgers ($b_1=-0.3997$ nm; $b_2=b_3=0$); le rayon de coupure est $r_0=|b_1|$.

La figure 4 indique les variations avec l'épaisseur h des énergies élastiques stockées, dans l'hypothèse d'une seule famille de dislocations (I), puis de deux familles orthogonales (II) comme ceci est visible sur la fig. 3. Ces énergies atteignent des valeurs asymptotiques respectivement égales à 114 et 195 mJ m⁻², dès que l'épaisseur atteint 5 nm environ.

Fig. 5

Même chose que pour la fig. 4, mais pour le système GaAs/Si.

10.2. GaAs/Si

Ce système a déjà fait l'objet de plusieurs études lorsque le silicium est le substrat orienté (001), par exemple celles de Gerthsen, Ponce, Anderson et Chung (1988) et Rocher, Charasse, Bartenlian et Chazelas (1990a). Les dislocations intrinsèques de cette interface sont les mêmes que précédemment. Les constantes d'élasticité anisotropes sont, pour Si (Hirth et Lothe 1982), $C_{11}=165.7$ GPa, $C_{12}=63.9$ GPa et $C_{44}=79.6$ GPa.

Les modules d'élasticité isotropes sont calculés comme précédemment. Le rapport des modules de cisaillement est plus petit que précédemment puisque $k=0.696$. Le paramètre cristallin du silicium (Cullity 1967) conduit ici à $b_1=-0.3838$ nm. La période, qui permet de rattraper le désaccord paramétrique de 4%, est calculée égale à 9.7 nm. Elle est en bon accord avec les observations.

Pour le calcul de l'énergie stockée (fig. 5), le rayon de coupure est aussi $r_0=|b_1|$. Les courbes (I) et (II) indiquent que l'énergie est plus faible que dans le cas précédent, malgré des modules d'élasticité supérieurs. La valeur de la période Λ du motif carré est donc à l'origine de cette baisse d'énergie.

§ 11. CONCLUSION

Ce travail donne la solution explicite complète du champ élastique (déplacements, contraintes, dilatations volumiques, énergie) d'une famille de dislocations réparties périodiquement le long d'une interface plane, celle-ci séparant un cristal (d'épaisseur finie h) en épitaxie sur un substrat monocristallin semi-infini. Certains résultats obtenus récemment par Willis *et al.* (1990) pour des dislocations à caractère extrinsèque sont confirmés, notamment la présence dans la couche de contraintes moyennes dont les valeurs sont inversement proportionnelles à la période Λ . Notre analyse indique que le champ des déplacements des dislocations extrinsèques ne diffère de celui des dislocations intrinsèques que par l'addition de termes linéaires.

La solution obtenue est appliquée pour le champ des déplacements et des contraintes d'un réseau carré de dislocations intrinsèques, dont la période est imposée par la valeur du désaccord paramétrique. Dans le cas où ces dislocations sont coin, avec un vecteur de Burgers parallèle à l'interface, l'énergie élastique emmagasinée est exprimée sous la forme d'une série de Fourier semi-convergente dépendant exponentiellement du rapport h/Λ . Deux applications numériques ont été présentées, l'une pour une couche de GaSb déposée sur un substrat de (001) de GaAs, l'autre pour une couche de GaAs déposée sur un substrat de (001) de Si. Ces systèmes ont des réseaux cubiques parallèles et ont des désaccords paramétriques de 7 et 4% respectivement, accommodés par des dislocations intrinsèques coin. Pour GaSb/GaAs, l'énergie stockée par le réseau de dislocations cesse de croître dès que l'épaisseur h de la couche est de l'ordre de la période (5-6 nm), et atteint une valeur limite voisine de 195 mJ m^{-2} . Pour GaAs/Si, l'énergie stockée par le réseau de dislocations est inférieure, malgré des modules d'élasticité plus élevés pour les deux cristaux.

A N N E X E

En posant $k = \mu^+/\mu^-$, $\omega = 2\pi/\Lambda$, et h , l'épaisseur de la couche épitaxiée, les coefficients t_{ji} et α, β, γ des X_j (éqns. (31 a) et (31 b) qui dépendent de manière naturelle de $n \geq 1$, sont donnés par.

$$\begin{aligned}
t_{11} &= 0, \\
t_{12} &= 2[2 - (h\omega)^2 - 2k + k(h\omega)^2 + 3kv^- + 2kv^-(h\omega) - 6v^+ + 3kv^+ - 2kv^+(h\omega) \\
&\quad - 4kv^+v^- + 4(v^+)^2], \\
t_{13} &= 2k(2 - 3v^- - 3v^+ + 4v^+v^-), \\
t_{14} &= 0, \\
t_{15} &= -5 - 6(h\omega) - 2(h\omega)^2 + 5k + 6k(h\omega) + 2k(h\omega)^2 - 6kv^- - 4kv^-(h\omega) + 12v^+ \\
&\quad + 8v^+(h\omega) - 6kv^+ - 4kv^+(h\omega) + 8kv^+v^- - 8(v^+)^2, \\
t_{16} &= -3 - 5k + 6kv^- + 4v^+ + 6kv^+ - 8kv^+v^-, \\
t_{21} &= 0, \\
t_{22} &= -3 + 2(h\omega) + 3k - 2k(h\omega) - 4kv^- + 4v^+, \\
t_{23} &= -1 - 3k + 4kv^-, \\
t_{24} &= 0, \\
t_{25} &= 3 + 2(h\omega) - 3k - 2k(h\omega) + 4kv^- - 4v^+, \\
t_{26} &= 1 + 3k - 4kv^-, \\
t_{31} &= 2k(v^- - v^+), \\
t_{32} &= -2[2 - (h\omega)^2 + 4k(h\omega) - 3k(h\omega)^2 + kv^- - 6kv^-(h\omega) + 4kv^-(h\omega)^2 - 6v^+ \\
&\quad - kv^+ - 6kv^+(h\omega) + 8kv^+v^-(h\omega) + 4(v^+)^2], \\
t_{33} &= 0, \\
t_{34} &= -3 + 3k - 2kv^- + 4v^+ - 2kv^+, \\
t_{35} &= -5 + 6(h\omega) - 2(h\omega)^2 - 3k + 10k(h\omega) - 6k(h\omega)^2 + 2kv^- - 12kv^-(h\omega) \\
&\quad + 8kv^-(h\omega)^2 + 12v^+ - 8v^+(h\omega) + 2kv^+ - 12kv^+(h\omega) + 16kv^+v^-(h\omega) - 8(v^+)^2, \\
t_{36} &= 0, \\
t_{41} &= -1 + k, \\
t_{42} &= -3 - 2(h\omega) - k - 6k(h\omega) + 8kv^-(h\omega) + 4v^+, \\
t_{43} &= 0, \\
t_{44} &= -1 + k, \\
t_{45} &= -3 + 2(h\omega) - k + 6k(h\omega) - 8kv^-(h\omega) + 4v^+, \\
t_{46} &= 0, \\
t_{51} &= 2k(v^- - v^+), \\
t_{52} &= -4k[1 + 2(h\omega) - 2(h\omega)^2 - v^- - 4v^-(h\omega) + 2v^-(h\omega)^2 - 2v^+ - 2v^+(h\omega) \\
&\quad + 2v^+v^- + 4v^+v^-(h\omega)], \\
t_{53} &= 2k(2 - 3v^- - 3v^+ + 4v^+v^-),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
t_{54} &= -k(3 - 3k - 2v^- + 4kv^- - 2v^+), \\
t_{55} &= 2k[-1 + 8(hn\omega) + 2(hn\omega)^2 - 3k - 6k(hn\omega)^2 + 2v^- - 8v^-(hn\omega) - 4v^-(hn\omega)^2 + 4kv^- \\
&\quad + 8kv^-(hn\omega)^2 + 2v^+ - 8v^+(hn\omega) - 4v^+v^- + 8v^+v^-(hn\omega)], \\
t_{56} &= -k(-5 - 3k + 6v^- + 4kv^- + 6v^+ - 8v^+v^-), \\
t_{61} &= k(-1 + k), \\
t_{62} &= -2k[1 + 4(hn\omega) - 2(hn\omega)^2 + k + 2k(hn\omega)^2 - 2v^+ - 4v^+(hn\omega)], \\
t_{63} &= k(3 + k - 4v^+), \\
t_{64} &= k(-1 + k), \\
t_{65} &= -2k[1 - 4(hn\omega) - 2(hn\omega)^2 + k + 2k(hn\omega)^2 - 2v^+ + 4v^+(hn\omega)], \\
t_{66} &= k(3 + k - 4v^+), \\
\alpha &= (-1 + k)(3 - 3k + 4kv^- - 4v^+), \\
\beta &= -2[5 + 2(hn\omega)^2 - 2k + 4k(hn\omega)^2 - 3k^2 - 6k^2(hn\omega)^2 + 4kv^- - 8kv^-(hn\omega)^2 + 4k^2v^- \\
&\quad + 8k^2v^-(hn\omega)^2 - 12v^+ + 4kv^+ - 8kv^+v^- + 8(v^+)^2], \\
\gamma &= (-1 - 3k + 4kv^-)(3 + k - 4v^+).
\end{aligned}$$

RÉFÉRENCES

- BASS, J., 1964, *Cours Mathématiques*, **1**, 297.
- BONNET, R., 1981, *Phil. Mag. A*, **43**, 1165.
- BONNET, R., LOUBRADOU, M., CATANA, A., et STADELMANN, P., 1991, *Metall. Trans. A*, **22**, 1145.
- BONNET, R., et MORTON, A. J., 1987, *Phil. Mag. A*, **56**, 815.
- BOURRET, A., FUOSS, P. H., ROCHER, A., et RAISIN, C., 1991, *Advances in Surface and Thin Film Diffraction*, édité par T. C. Huang, P. I. Cohen, et D. J. Eaglesham, Vol. 208 (Pittsburgh, Pennsylvania: Materials Research Society), p. 303.
- BULLE-LIEUWMA, C. W. T., VAN OMMEN, A. H., et HORNSTRA, J., 1988, *High Resolution Electron Microscopy of Defects in Materials*, édité par R. Sinclair, D. J. Smith, et U. Dahmen, Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol. 102 (Pittsburgh, Pennsylvania: Materials Research Society), p. 377.
- CATANA, A., 1990, Thèse 864, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne.
- CATANA, A., SCHMID, P. E., HEINTZE, M., LÉVY, F., STADELMANN, P., et BONNET, R., 1990, *J. Appl. Phys.*, **67**, 1820.
- CHERNS, D., SMITH, D. A., KRAKOW, W., et BATSON, P. E., 1982, *Phil. Mag. A*, **45**, 107.
- CULLITY, B. D., 1967, *X-ray Diffraction*, (Reading, Massachusetts: Addison-Wesley), p. 484.
- FEUILLET, G., 1990, *Evaluation of Advanced Semiconductor Materials by Electron Microscopy*, édité par D. Cherns (New York: Plenum), p. 33.
- FRANK, F. C., et VAN DER MERWE, J. H., 1949, *Proc. R. Soc. A*, **198**, 205, 216.
- FRIEDEL, J., 1979, *Dislocations in Solids*, Vol. 1, édité par F. R. N. Nabarro (Amsterdam: North-Holland), p. 1.
- GERTHSON, F. A., PONCE, F. A., ANDERSON, G. B., et CHUNG, H. F., 1988, *Interfacial Structure, Properties, and Design*, édité par M. H. Yoo, W. A. T. Clark, et C. L. Briant, Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol. 122 (Pittsburgh, Pennsylvania: Materials Research Society), p. 21.
- GIBSON, J. M., TUNG, R. T., PHILLIPS, J. M., et HULL, R., 1985, *J. Phys., Paris*, **46**, C4-369.
- HIRTH, J. P., et LOTHE, J., 1982, *Theory of Dislocations*, deuxième édition (New York: Wiley).
- HEARMON, R. F. S., 1979, *Numerical Theory and Functional Relationship in Science and Technology*, Landolt-Bernstein, New Series, Vol. 11, édité par K.-H. Hellwege and A. M. Hellwege (Berlin: Springer), p. 27.
- LOUBRADOU, M., 1990, Thèse, Institut National Polytechnique de Grenoble.
- PÉNISSON, J. M., 1991, *J. Phys. Materials III*, **1**, 1015.
- ROCHER, A., CHARASSE, M. N., BARTENLIAN, B., et CHAZELAS, J., 1990a, *Proceedings of the International Congress on Intergranular and Interphase Boundaries in Materials*, Paris, 4-8 September 1989 (Paris: Les Éditions de Physique, Av. du Hoggar, ZI de Courtaboeuf, BP 112, France t. 51, C1-915).
- ROCHER, A., DA SILVA et C. RAISIN, 1990b, *Rev. Phys. Appl.*, **25**, 957.
- TIETZ, L. A., SUMMERFELT, S. R., et CARTER, C. B., 1990, *Atomic Scale Structure of Interfaces*, édité par R. D. Bringans, R. M. Feenstra, et J. M. Gibson, Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol. 159 (Pittsburgh, Pennsylvania, Materials Research Society), p. 209.
- VAN DER MERWE, J. H., 1982a, *Phil. Mag. A*, **45**, 127; 1982b, *Ibid.*, **45**, 145; 1982c, *Ibid.*, **45**, 159.
- WILLIS, J. R., JAIN, S. C., et BULLOUGH, R., 1990, *Phil. Mag. A*, **62**, 115.