

Un modèle paramétrique d'évolution de surface pour matériaux contraints : modélisation

Maité Carrive^a, Jean Grilhé^b

^a *Laboratoire de mathématiques, université de Poitiers, boulevard Pierre et Marie Curie, BP 30179, 86962 Futuroscope Chasseneuil cedex, France*

^b *LMP, université de Poitiers, boulevard Pierre et Marie Curie, BP 30179, 86962 Futuroscope Chasseneuil cedex, France*

Reçu le 2 mai 2005, accepté après révision le 14 mars 2006

Présenté par Gérard Iooss

Résumé

Nous présentons un modèle de description de l'évolution de la surface d'un matériau élastique précontraint valable pour de grandes déformations. Le profil de surface est décrit par une courbe paramétrique autorisant l'apparition de tangentes infinies et de points de retournement susceptibles d'apparaître au cours de l'évolution. Le modèle présenté recouvre différents modèles classiques : Spencer (1994), Yang (1993), Kassner (1994), Chiu (1994). Ces derniers sont valables uniquement pour des profils à représentation univoque et de faibles amplitudes. *Pour citer cet article : M. Carrive, J. Grilhé, C. R. Mecanique 334 (2006).*

© 2006 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Abstract

A parametric model of surface evolution for materials under constraint; part I: modeling. We present a model describing the surface changes of an elastic prestrained material which is valid for large deformations. The surface profile is described by a parametric curve that allows the emergence of infinite tangents and back return point as the surface evolves. The proposed model covers a number of classic models: Spencer (1994), Yang (1993), Kassner (1994), Chiu (1994). These latter models were limited to surface profiles with one-to-one representations and low amplitudes of deformation. *To cite this article: M. Carrive, J. Grilhé, C. R. Mecanique 334 (2006).*

© 2006 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Mots-clés : Mécanique des solides numérique ; Modèle paramétrique ; Matériau élastique précontraint

Keywords : Computational solid mechanics; Parametric model; Elastic prestrained material

1. Introduction

La surface plane d'un solide soumis à des contraintes non hydrostatiques et dont les atomes peuvent diffuser en surface est instable vis-à-vis de l'apparition de rugosités. De telles rugosités ont par exemple été observées à la surface de cristaux hélium solide sous contrainte [1], dans des composants électroniques (films minces de Si-Ge en

Adresses e-mail : carrive@math.univ-poitiers.fr (M. Carrive), jean.grilhe@univ-poitiers.fr (J. Grilhé).

épitaxie sur du silicium [2]), dans des films de polymères collés sur un substrat [3], etc. Les causes de formation de ces rugosités sont aujourd’hui bien comprises grâce aux travaux fondateurs de Asaro [4] en 1972 repris en 1986 par Grinfeld [5]. Une longueur d’onde moyenne a été calculée en fonction des contraintes initiales. Elle coïncide avec celle des rugosités observées. Une description du développement de ces rugosités a été proposée par Spencer [6], Kassner et Misbah [7], Chui et Gao [8], Yang et Srolovitz [9] en 1993–94. Ceux-ci reprennent les équations de Mullins projetées sur la normale à la surface plane de façon à conserver au cours du temps une représentation cartésienne du profil. Ce type d’équation est valable pour de faibles amplitudes et de faibles désorientations de la surface mais ne peut générer des profils multivoques pouvant conduire à des dislocations à partir de la surface comme l’ont envisagé Grilhé [10] et Gao [11]. Pour pouvoir décrire les résultats expérimentaux, il est donc nécessaire d’aller au-delà de cette approximation. Notre but est de développer un modèle capable de décrire des profils plus complexes (multivoques, avec tangentes verticales, etc.) et à fortes amplitudes.

2. Formulation du problème physique

On considère un solide soumis à une contrainte initiale σ_0 dont seule la composante de compression σ_{0xx} est non nulle. Le solide est limité par les surfaces ($y = 0$) et ($y = h$) avec $h > 0$ suffisamment grand pour que les contraintes soient négligeables sur le plan ($y = 0$). A l’instant initial $t = 0$, on introduit une perturbation périodique de la surface indépendante de z , $y = g_0(x)$, avec $g_0(x + \lambda) = g_0(x)$, où λ représente la longueur d’onde et g_0 est une fonction réelle donnée. Sous l’action de la diffusion des atomes en surface, celle-ci se déplace au cours du temps. Nous nous proposons de déterminer sa position à l’instant $t > 0$ en supposant que la périodicité est conservée et que son profil reste indépendant de z . L’étude est donc restreinte à celle d’un problème bidimensionnel dont l’inconnue $\mathcal{C}(t)$ est la trace sur le plan ($0xy$) d’une longueur d’onde du profil. On note $\Omega(t)$ le domaine compris entre la courbe $\mathcal{C}(t)$, le segment horizontal $\Gamma_-(y = 0, z = 0)$ et les deux segments latéraux $\Gamma_g(x = 0, z = 0)$ et $\Gamma_d(x = \lambda, z = 0)$. A chaque instant t , tout point $M(t)$ de $\mathcal{C}(t)$ est repéré par le rayon vecteur

$$\vec{OM}(t) = \vec{r}(s, t) = x(s, t)\vec{i} + y(s, t)\vec{j}$$

où s désigne l’abscisse curviligne. En chaque point on définit le repère local $(M, \vec{\tau}, \vec{n})$ et la courbure κ

$$\vec{\tau} = \vec{r}_{,s}; \quad \vec{n} = \vec{k} \wedge \vec{\tau} = -y_{,s}\vec{i} + x_{,s}\vec{j}; \quad \kappa = \vec{n} \cdot \vec{r}_{,ss} = x_{,s}y_{,ss} - x_{,ss}y_{,s} \tag{1}$$

Les fonctions $x_{,s}$ et y sont périodiques de période λ ainsi que les vecteurs $\vec{\tau}, \vec{n}$ et la courbure κ .

Conservation de la masse : Le problème étant périodique, la conservation de la masse totale implique la conservation de la masse d’une période. Le matériau étant homogène ceci se traduit par la conservation de l’aire du domaine étudié $S(t) = \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega(t)} \vec{r}\vec{n} \, ds$. Si $l(t)$ désigne la longueur de la courbe $\mathcal{C}(t)$ on obtient l’identité

$$\int_0^{l(t)} x_{,s}y \, ds = S(0) = h\lambda. \tag{2}$$

Energie élastique : On désigne par $\vec{u} = (u_1, u_2)$ le déplacement élastique du solide défini en chaque point $(x, y) \in \Omega(t)$. Le tenseur de contrainte $\sigma(\vec{u})$ (resp. σ_0) est relié au tenseur de déformation linéarisé $\varepsilon(\vec{u})$ (resp. ε_0) par la loi de comportement de Hooke. A chaque instant t , l’équilibre du système est atteint dès que \vec{u} est solution de l’équation d’élasticité

$$\begin{cases} \text{div}(\sigma(\vec{u})) = 0 & \text{dans } \Omega(t) \\ (\sigma(\vec{u}) + \sigma_0 - \gamma\kappa I)\vec{n} = 0 & \text{sur } \mathcal{C}(t) \\ u = 0 & \text{sur } \mathcal{C}(t); \quad u|_{\Gamma_g} = u|_{\Gamma_d} \end{cases} \tag{3}$$

où la constante γ désigne la tension de la surface. Dans la plupart des cas σ_0 est très supérieure à $\gamma\kappa$ que l’on néglige alors dans le calcul des déformations élastiques [6,11,12]. La densité d’énergie élastique à la surface du solide à l’instant t se calcule alors aisément à la surface :

$$E_u(s, t) = \frac{1}{2}(\sigma(\vec{u}(x(s, t), y(s, t))) + \sigma_0) : (\varepsilon(\vec{u}(x(s, t), y(s, t))) + \varepsilon_0 I)$$

Diffusion des atomes en surface : Les atomes du solide ne sont pas mobiles excepté en surface où ils peuvent diffuser : un atome de la surface peut en effet se détacher du solide, se déplacer sur la surface pendant un certain

temps et se fixer ensuite. Ces atomes mobiles, appelés adatoms, induisent un déplacement de la surface. Ils forment un gaz bidimensionnel de concentration $C(s, t)$ dont l'évolution est régie par la physique statistique et dépend des propriétés du solide sous-jacent. On désigne par $\delta\mu_i$ la différence de potentiel chimique entre atomes et adatoms à l'état plan, C_i la concentration en atomes associée, k la constante des gaz et Θ la température du milieu. A l'équilibre thermodynamique la concentration en adatoms est donnée par [13]

$$C(s, t) = C_i(s) e^{\frac{\delta\mu_i(s)}{k\Theta}} e^{-\frac{E_u(s,t) + \gamma\kappa}{k\Theta}} \quad (4)$$

La variation de concentration des adatoms en un point $M(t)$ est reliée au flux $J(s, t)$ par la première et seconde loi de Fick [14], moyennant l'introduction d'un coefficient de diffusion D_s :

$$J(s, t) = -D_s \partial_s C(s, t); \quad \partial_t C(s, t) = -\partial_s J(s, t) \quad (5)$$

Loi d'évolution de la couche : L'arrivée d'adatoms en un point de la surface, obtenue à partir de $\partial_t C(s, t)$ permet de déterminer sa vitesse de déplacement suivant la normal à la surface [13]. Moyennant une approximation d'ordre un de $C(s, t)$ (l'énergie $(E_u + \gamma\kappa)$ est faible devant $k\Theta$) on aboutit à la formule

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = -V \partial_s J \vec{n} = K \partial_{ss} (E_u + \gamma\kappa) \vec{n} \quad \text{avec } K = V D_s \frac{C_i}{k\Theta} e^{\frac{\delta\mu_i}{k\Theta}} \quad (6)$$

Solution stationnaire sans terme élastique : Si le solide est à l'état stationnaire et que ses déformations élastiques sont négligeables, alors l'équation d'évolution se réduit à $\partial_{ss}(\kappa(s)) = 0$. La courbure $\kappa(s)$ du profil est donc linéaire, de plus elle est périodique, donc constante. Si cette constante est non nulle alors la solution est un arc de cercle. Sinon la solution est une droite horizontale dont la hauteur, compte tenu de la conservation de la masse, est $y = h$.

3. Modélisation mathématique

La surface libre du solide est décrite par l'abscisse curviligne s lorsque s parcourt l'intervalle $[0, l(t)]$. Cet intervalle varie avec t ce qui rend l'étude mathématique du phénomène évolutif difficile. Une paramétrisation laissant invariant le domaine de définition du paramètre est obtenue en interprétant la courbe $\mathcal{C}(t)$ définissant le profil à l'instant t comme la déformée du profil $\mathcal{C}(t_0)$ à l'instant t_0 . A chaque instant t , l'image déformée $M(t) \in \mathcal{C}(t)$ d'un point $M_0 \in \mathcal{C}(t_0)$ est entièrement définie par deux fonctions réelles à déterminer, $f(t)$ et $g(t)$ tel que

$$\overrightarrow{OM}(t) = f(\theta, t) \vec{i} + g(\theta, t) \vec{j}, \quad \theta \in [0, \lambda] \text{ avec } f(\theta, t_0) = \theta, g(\theta, t_0) = g_0(\theta)$$

En utilisant les règles de dérivations composées, l'équation d'évolution (6) en paramètre fixe θ prend la forme

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} f_{,t} \\ g_{,t} \end{pmatrix} &= K \frac{1}{f_{,\theta}^2 + g_{,\theta}^2} \partial_\theta \left(\frac{1}{(f_{,\theta}^2 + g_{,\theta}^2)^{1/2}} \right) \partial_\theta (E_u + \gamma\kappa(f, g)) \begin{pmatrix} -g_{,\theta} \\ f_{,\theta} \end{pmatrix} \\ \kappa(f, g) &= \frac{f_{,\theta} g_{,\theta\theta} - f_{,\theta\theta} g_{,\theta}}{(f_{,\theta}^2 + g_{,\theta}^2)^{3/2}} \end{aligned} \quad (7)$$

On en déduit à chaque instant $t < 0$ la position du profil $\mathcal{C}(t)$ et le nouveau domaine $\Omega(t)$. Cette équation d'évolution paramétrique autorise l'apparition de pentes de direction quelconque du profil.

Compte tenu de la périodicité de $f_{,\theta}$ et g , on montre que la conservation de la masse est automatiquement vérifiée. Il suffit de dériver par rapport au temps l'identité (2) en utilisant le changement de variable $s \rightarrow \theta$.

Approximation pour de faibles pentes : Si à chaque instant t on projette le vecteur vitesse $\vec{r}_{,t}$ sur l'axe vertical y parallèlement à la pente de la courbe on aboutit alors à l'équation explicite : $y = g(x)$; $g_{,t} = -V \partial_x J(\text{id}, g)$. On retrouve ainsi le modèle de Spencer, Gao et al. Cette approximation est valable pour des profils de faible pente. Par contre, dès que la pente devient grande, cette projection de la vitesse devient très grande et il y a explosion en temps de la solution numérique associée [15], ce qui n'est plus cohérent avec la physique.

Le modèle proposé se présente sous la forme d'un problème couplé aux limites :

Etant donné un profil initial $(g_0 : [0, \lambda] \rightarrow \mathbb{R})$ régulier et une précontrainte σ_0 , trouver $(f, g) : ([0, \lambda] \times [0, T]) \rightarrow \mathbb{R}^2$ et $\vec{u} = (u_1, u_2) : \Omega(t) \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^2$ tel que

$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{array}{l} \left(\begin{array}{l} f_{,t} \\ g_{,t} \end{array} \right) = K \frac{1}{f_{,\theta}^2 + g_{,\theta}^2} \partial_\theta ((f_{,\theta}^2 + g_{,\theta}^2)^{1/2}) \partial_\theta (E_u + \gamma \kappa(f, g)) \begin{pmatrix} -g_{,\theta} \\ f_{,\theta} \end{pmatrix} \quad \text{sur } [0, \lambda] \times [0, T] \\ \text{div} \sigma(\vec{u}) = 0 \quad \text{dans } \Omega(t) \quad \forall t \in [0, T] \end{array} \\ \begin{array}{l} (\sigma(\vec{u}(f, g)) + \sigma_0 - \gamma \kappa(f, g) I) \begin{pmatrix} -g_{,\theta} \\ f_{,\theta} \end{pmatrix} = 0 \quad \text{sur } [0, \lambda] \times [0, T] \\ \vec{u}(x, 0) = 0; \quad \vec{u}(0, y) = \vec{u}(\lambda, y) = 0 \quad \forall (x, y) \in [0, \lambda] \times [0, g(0, t)] \quad \forall t \in [0, T] \\ f(0, t) = 0; \quad f(\lambda, t) = \lambda; \quad g(t) \text{ et } f_{,\theta}(t) \text{ périodiques } \forall t \in [0, T] \\ (f, g)(\theta, 0) = (\theta, g_0(\theta)) \quad \forall \theta \in [0, \lambda] \end{array} \end{array} \right.$$

Ce modèle a été testé numériquement avec succès dans le cas où les déformations élastiques sont négligeables et pour des géométries présentant des points de retournement [16] telles que celles présentées dans [10].

4. Conclusion

Le modèle d'évolution de surface proposé s'écrit sous la forme d'un problème aux limites non-linéaire paramétrique où l'équation d'évolution et l'équation d'élasticité sont couplées. L'intérêt de ce nouveau modèle est de pouvoir être appliqué quand la pente du profil devient grande et lorsqu'il ne peut plus être décrit par une fonction univoque.

Références

- [1] S. Balibar, Journées de matière condensée de la SFP, Lille, 1992.
- [2] D. Dutartre, Effets de gradients dans les semi-conducteurs, Montpellier, septembre 92.
- [3] J. Berréhar, C. Caroli, C. Lapersonne-Meyer, M. Schott, Phys. Rev. B 46 (1992).
- [4] R.J. Asaro, W.A. Tiller, Metall. Trans. 3 (1972) 1789.
- [5] M.A. Grinfeld, Sov. Phys. Dokl. 31 (1986) 831.
- [6] J. Spencer, D.I. Meiron, Acta Metall. Mater. 42 (11) (1994) 3629–3642.
- [7] K. Kassner, C. Mishba, Europhys. Lett. 28 (4) (1994) 245.
- [8] C. Chiu, H. Gao, Numerical simulation of diffusion controlled surface evolution, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 317 (1994).
- [9] W.H. Yang, D.J. Srolovitz, Cracklike surface instabilities in stressed solids, Phys. Rev. Lett. 71 (1993) 10.
- [10] J. Grilhé, Surface instabilities and dislocation formation at free surfaces of stressed solids, Europhys. Lett. 23 (2) (1993) 141–146.
- [11] H. Gao, Some general properties of stress-driven surface evolution in a heteroepitaxial thin film structure, J. Mech. Sol. 42 (5) (1994) 741–772.
- [12] P. Nozière, Amplitude expansion for the Grinfeld instability due to uniaxial stress at a solid surface, J. Phys. I France 3 (1993) 681–686.
- [13] W.W. Mullins, Theory of thermal growing, J. Appl. Phys. 28 (1957) 333–339.
- [14] Y. Adda, J. Philibert, La diffusion dans les solides, Presse Universitaire de France, 1966.
- [15] M. Boutat, Y. D'angelo, S. Hilout, V. Lods, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 337 (8) (2003) 549–552.
- [16] M. Carrive, P. Laug, F. Marche A parametric model of surface evolution : numerical resolution, à paraître.