

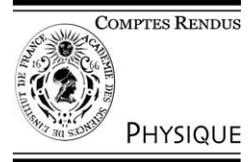


ELSEVIER

Available online at www.sciencedirect.com

SCIENCE @ DIRECT®

C. R. Physique 4 (2003) 961–966



Physique/Surfaces, Interfaces, Films

Champ élastique d'une dislocation rectiligne parallèle aux interfaces : une nouvelle approche

Roland Bonnet

Institut national polytechnique de Grenoble, laboratoire de thermodynamique et physico-chimie métallurgiques (unité mixte de recherche associée au CNRS 5614), École nationale supérieure d'électrochimie et d'électrometallurgie de Grenoble, domaine universitaire, BP 75, 38402 Saint Martin d'Hères, France

Reçu le 28 janvier 2003 ; accepté le 17 juillet 2003

Présenté par Guy Laval

Résumé

Le champ élastique d'un défaut cristallin parallèle aux deux surfaces libres d'une lame mince isotrope est étudié, en déformation plane, avec une nouvelle approche utilisant de façon répétée la solution classique du problème de Flamant. Le cas d'une dislocation coin ayant une position quelconque dans la lame mince et un vecteur de Burgers parallèle aux surfaces est traité plus en détail. **Pour citer cet article :** R. Bonnet, C. R. Physique 4 (2003).

© 2003 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Abstract

Elastic field of a straight dislocation parallel to interfaces: a new approach. The elastic field of a crystalline defect parallel to the two free surfaces of an isotropic thin foil is studied, for plane strain, with a new approach using repeated applications of the classical solution of the Flamant's problem. The case of an edge dislocation placed at any position in the foil and with a Burgers vector parallel to the surfaces is considered in greater detail. **To cite this article :** R. Bonnet, C. R. Physique 4 (2003).

© 2003 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Mots-clés : Dislocation ; Champ élastique ; Lamme mince

Keywords : Dislocation; Elastic field; Thin foil

1. Introduction

Depuis une cinquantaine d'années, le calcul du champ élastique (déplacement \mathbf{u} , contrainte σ_{ij}) d'une dislocation rectiligne parallèle aux deux surfaces libres d'une lame mince a attiré l'attention des chercheurs, voir par exemple les citations 7 à 17 de Gutkin et Romanov [1]. L'une des applications est par exemple la représentation théorique de son contraste en microscopie électronique à transmission (MET) [2–4]. Ce calcul a reçu des solutions partielles ou mathématiquement approchées en adoptant diverses méthodes d'analyse en déformation plane. Pour les rappeler brièvement, adoptons le repère $Oxyz$ décrit sur la Fig. 1(a). La direction de la dislocation est $\mathbf{U} // Oz$; son vecteur de Burgers est \mathbf{b} ; la normale à la lame mince est $\mathbf{N} // Oy$; l'épaisseur est $h = L_1 + L_2$ où L_1 est la profondeur de la ligne de dislocation.

Plusieurs auteurs se sont succédés pour traiter le cas particulier d'un matériau élastiquement homogène et isotrope, hypothèse admise dans cette Note. Leibfried et col. [5] donnent une solution complète pour $\mathbf{b} // \mathbf{U}$ en réduisant le problème à une sommation de « dislocations-miroirs » placées en milieu infini, solution confirmée dans [6]. Dix ans plus tard, Kroupa [7] s'intéresse au cas $\mathbf{b} // Ox$. Après deux travaux partiels cités dans [7], il parvient à donner explicitement le champ σ_{ij} quelle que soit L_1 . Pour

Adresse e-mail : rbonnet@ltpcm.inpg.fr (R. Bonnet).

cela, il remarque que Sneddon [8] a donné une solution formelle au champ des contraintes d’une plaquette mince uniquement soumise à des contraintes extérieures appliquées sur ses deux faces et de façon symétrique par rapport à Oy . Il l’applique en imposant que ces contraintes extérieures sont exactement opposées à celles de la même dislocation mais placée en milieu infini. Puis, en utilisant le théorème de superposition, il obtient le champ des contraintes cherché. Cependant, bien que le champ \mathbf{u} puisse aussi être déduit de son analyse, il ne l’écrit pas explicitement. Le troisième cas $\mathbf{b} // Oy$ sera finalement traité (quatorze ans après Kroupa) par Lee et col. [9] qui utilisent les potentiels de Papkovitch–Neuber. Les expressions de ce champ \mathbf{u} , entachées de quelques erreurs typographiques, seront corrigées par la suite [10]. Les solutions des Réfs. [5,7,9] demeurent cependant peu connues du grand public de l’époque puisqu’un ouvrage classique de MET [4] datant de 1977 qualifie ce problème de très difficile (« intractable » en anglais). Peu après, ignorant le travail de Kroupa, quelques auteurs [11,12] s’efforceront encore de résoudre le cas particulier $\mathbf{b} // Ox$, mais avec la condition simplificatrice $L_1 = L_2$. Plus récemment, le présent auteur [13] a proposé une solution entièrement explicite, pour \mathbf{b} quelconque, en développant \mathbf{u} sous forme de séries de Fourier, solution également applicable à un bicristal hétérogène mince.

Le but de cette Note est de répondre à deux questions qui demeurent. D’un côté, la solution en série de Fourier converge lentement près du coeur de la dislocation à cause du phénomène de Gibbs. D’un autre côté, personne (à la connaissance de l’auteur) n’a encore vérifié les calculs de Kroupa et obtenu in extenso le champ \mathbf{u} correspondant à $\mathbf{b} // Ox$. Plutôt que de vérifier et d’exploiter les formules proposées par Kroupa, le présent auteur a préféré une nouvelle approche, plus globale puisqu’elle peut inclure n’importe quel vecteur \mathbf{b} . Cette approche est élémentaire puisqu’elle est basée sur l’application répétée de la solution d’un vieux problème résolu d’abord par Flamant en 1892 [14–16] à partir des formules de Boussinesq [17,18]. Il s’agit du champ élastique généré dans un milieu semi-infini homogène par une force appliquée sur sa surface et uniformément distribuée le long d’une droite. Cette approche donne aussi une voie pour résoudre d’autres problèmes posés par la MET, par exemple le contraste d’une famille de dislocations parallèles aux deux surfaces ou celui d’une facette cohérente inclinée dans la lame mince. Des applications numériques subsidiaires sont brièvement discutées à la fin du texte.

2. Méthode de résolution

Considérons tout d’abord, en déformation plane, un défaut générateur de contraintes dans un milieu élastique infini, homogène, de module de cisaillement μ et de coefficient de Poisson ν . Son champ des déplacements est noté $\mathbf{u}^{(\infty)}$ dans le repère cartésien $Oxyz$. Les vecteurs contraintes qui s’appliquent sur les plans de cote $y = L_1$ et $y = -L_2$ (de normale commune \mathbf{N}) sont notés respectivement $\mathbf{F}^{(1)}$ et $\mathbf{F}^{(2)}$. En particulier, si le défaut est une dislocation, $\mathbf{F}^{(1)}$ et $\mathbf{F}^{(2)}$ sont des fonctions élémentaires bien connues qui ne dépendent que de (x, y) et des trois composantes du vecteur \mathbf{b} , cf. [19].

Indépendamment de ce qui précède, supposons maintenant qu’une lame mince du même matériau, de même épaisseur et initialement sans contraintes internes, soit déformée par des contraintes appliquées, ou vecteurs contraintes, $\mathbf{F}^{(1)}$ et $-\mathbf{F}^{(2)}$ sur ses deux surfaces libres supérieure et inférieure respectivement. Son champ des déplacements est noté avec un indice supérieur m (m pour « mince ») $\mathbf{u}^{(m)}$. En appliquant le théorème de superposition, le champ \mathbf{u} du défaut placé dans la lame mince (Fig. 1(a)) est :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^{(\infty)} - \mathbf{u}^{(m)} \tag{1}$$

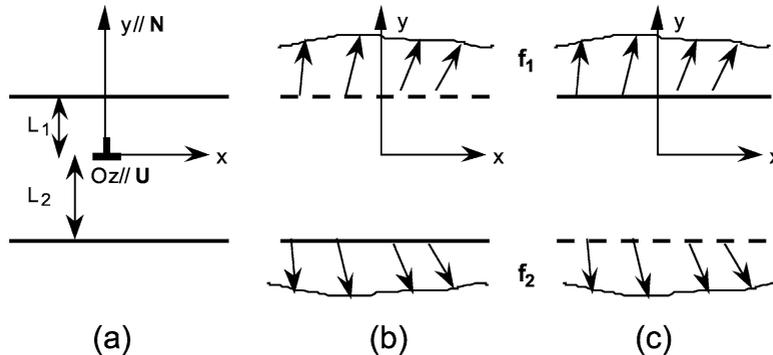


Fig. 1. Conventions et symboles utilisés pour le calcul : (a) repère cartésien $Oxyz$ avec $Oz // \mathbf{U}$ et $Oy // \mathbf{N}$; (b) milieu semi-infini limité par le bas le long de $y = -L_2$; (c) milieu semi-infini limité par le haut le long de $y = L_1$.

Fig. 1. Conventions and symbols used for the calculation: (a) Cartesian frame $Oxyz$ with $Oz // \mathbf{U}$ and $Oy // \mathbf{N}$; (b) bottom-limited semi-infinite medium along $y = -L_2$; (c) top-limited semi-infinite medium along $y = L_1$.

La question est maintenant de déterminer la fonction $\mathbf{u}^{(m)}$. L'idée est d'appliquer de façon répétitive la solution de Flamant le long d'un plan de chacun des deux milieux semi-infinis décrits sur les Figs. 1 (b), (c). Dans la Fig. 1(b) la fonction inconnue $\mathbf{f}^{(1)}$ est un vecteur contrainte qui s'applique sur le plan interne $y = L_1$ (normale \mathbf{N}) du premier milieu semi-infini ; la fonction inconnue $\mathbf{f}^{(2)}$ est aussi un vecteur contrainte, mais il est lié localement à une force extérieure $\mathbf{f}^{(2)}.dx dz$ appliquée sur une facette $dx dz$ de la surface libre $y = -L_2$ (normale $-\mathbf{N}$) ; si cette force est rapportée à l'unité de longueur le long de Oz , on trouve la force linéaire locale $\mathbf{f}^{(2)}.dx$. Dans la Fig. 1(c) la force locale par unité de longueur $\mathbf{f}^{(1)}.dx$ est appliquée sur la surface libre $y = L_1$ (normale \mathbf{N}), tandis que le vecteur contrainte interne $-\mathbf{f}^{(2)}$ est appliquée sur le plan $y = -L_2$ (normale \mathbf{N}). La condition d'égalité des contraintes le long de chaque plan interne (Figs. 1(b) et 1(c)), s'écrit donc avec une intégrale. Elle se traduit par les deux équations intégrales où X est l'abscisse courante ($i, j = 1, 2, 3$)

$$f_i^{(1)} + \int_{-\infty}^{\infty} t_{ij}(x - X, h).f_j^{(2)}(X).dX = F_i^{(1)} \tag{2a}$$

$$-f_i^{(2)} + \int_{-\infty}^{\infty} t_{ij}(x - X, -h).f_j^{(1)}(X).dX = F_i^{(2)} \tag{2b}$$

Dans ces équations, la matrice t_{ij} est tirée de la solution de Flamant et est donc complètement indépendante du défaut cristallin. Elle est facile à déterminer à partir des résultats de la littérature [14–16]. En modifiant le système (2a), (2b) par une transformée de Fourier (TF), puis en résolvant le système linéaire obtenu, il est possible d'en déduire les TF des fonctions inconnues $\mathbf{f}^{(1)}$ et $\mathbf{f}^{(2)}$, notées $\hat{\mathbf{f}}^{(1)}$ et $\hat{\mathbf{f}}^{(2)}$. Elles sont explicites si $\hat{\mathbf{F}}^{(1)}$ et $\hat{\mathbf{F}}^{(2)}$ sont explicites. Le champ élastique ($\mathbf{u}^{(m)}, \sigma_{ij}^{(m)}$) en un point (x, y) peut être déterminé en suivant la procédure suivante : (a) sommation sur X des effets des contraintes appliquées sur les deux surfaces libres, en répétant la solution de Flamant ; (b) TF de cette somme et insertion des solutions explicites $\hat{\mathbf{f}}^{(1)}$ et $\hat{\mathbf{f}}^{(2)}$; (c) TF inverse.

3. Application à une dislocation $\mathbf{b} // Ox$

Ce raisonnement, appliqué à une dislocation $\mathbf{b} // Ox$, conduit à des solutions $\hat{\mathbf{f}}^{(1)}$ et $\hat{\mathbf{f}}^{(2)}$ relativement simples puisque la troisième composante des vecteurs est nulle. En notant I la matrice identité, A et B deux matrices symétriques 2×2 dépendant de la variable de Fourier k et de h , elles s'écrivent

$$\hat{\mathbf{f}}^{(1)} = (I + A.B)^{-1}.(\hat{\mathbf{F}}^{(1)} + A.\hat{\mathbf{F}}^{(2)}) \tag{3a}$$

$$\hat{\mathbf{f}}^{(2)} = (I + B.A)^{-1}.(B.\hat{\mathbf{F}}^{(1)} - \hat{\mathbf{F}}^{(2)}) \tag{3b}$$

Dans ces expressions, les éléments a_{11}, a_{22}, a_{12} de la matrice A sont, respectivement, les TF des fonctions de $-2hx^2/(\pi(h^2 + x^2)^2)$, $-2h^3/(\pi(h^2 + x^2)^2)$ et $-2h^2x/(\pi(h^2 + x^2)^2)$ multipliées par $\sqrt{2\pi}$. Les éléments b_{ij} de la matrice B sont tels que $b_{11} = -a_{11}$, $b_{22} = -a_{22}$ et $b_{12} = a_{12}$. Pour obtenir le champ $\mathbf{u}^{(m)}$, la procédure indiquée ci-dessus n'est pas possible car la solution de Flamant implique des fonctions Log ou Arctg pour lesquels il n'y a pas de TF. Le problème a été contourné en calculant la fonction $d\mathbf{u}/dx$ avec la même procédure puis, sur la TF inverse, en effectuant une intégration en x . Après simplification des expressions, le champ des déplacements $\mathbf{u}^{(m)}$ s'écrit :

$$u_1^{(m)} = \frac{-b}{4\pi(1-\nu)} \int_{k \rightarrow 0}^{\infty} C(y) \frac{\sin(kx)}{k\Delta} dk \tag{4a}$$

$$u_2^{(m)} = \frac{-b}{4\pi(1-\nu)} \int_{k \rightarrow 0}^{\infty} D(y) \frac{\cos(kx)}{k\Delta} dk \tag{4b}$$

où

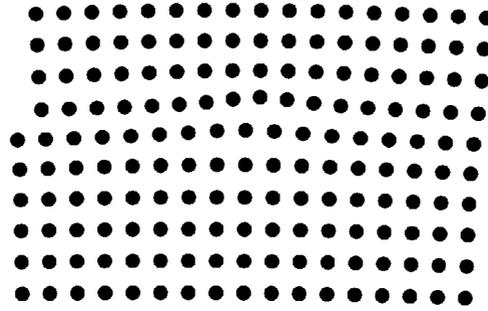


Fig. 2. Lamelle mince de silicium courbée par une dislocation coin avec $\mathbf{b} = 1/2\langle 110 \rangle // Ox$. Un motif carré de points (période \mathbf{b} le long de Ox) est déformé élastiquement. Le demi-plan de coupure est matérialisé par la marche, visible à gauche. Le point $(0, L_1)$ est supposé fixe. Pour une meilleure lisibilité de la composante u_2 , celle-ci a été exagérée d'un facteur 10.

Fig. 2. Silicon thin foil curved by an edge dislocation with $\mathbf{b} = 1/2\langle 110 \rangle // Ox$. A square pattern of points (period \mathbf{b} along Ox), is elastically deformed. The cut half plane is materialized by the ledge visible on the left hand side. The point $(0, L_1)$ is supposed fixed. The u_2 component has been multiplied by a factor 10 for better readability.

$$\begin{aligned}
 C(y) = & \left\{ 2 - 2\nu - ky + (-ky + 2(-1 + \nu)) \exp[2ky] \right. \\
 & + [2 - 2\nu + k(-y + 2L_2(k(L_2 + y) + 2(-1 + \nu)))] \exp[2k(h + L_1)] \\
 & - [2 - 2\nu + k(y + 2L_1(-2 + kL_1 - ky + 2\nu))] \exp[2k(h + L_2 + y)] \\
 & + [2 - 2\nu + k(2h^2k + y + h(4 - 4kL_1 + 2ky - 4\nu) + 2L_1(-2 + kL_1 - ky + 2\nu))] \exp[2k(L_2 + y)] \\
 & + [-2 + 2\nu + k(-2h^2k + y - 2L_2(-2 + kL_2 + ky + 2\nu) + 2h(-2 + 2kL_2 + ky + 2\nu))] \exp[2kL_1] \\
 & + [2 - 2\nu - k(h - y + h(-1 + 2kL_2) \cdot (-3 + 2k(L_1 - y) + 4\nu))] \exp[2k(h + y)] \\
 & \left. + [-2 + 2\nu + k(h + y + h(-1 + 2kL_1) \cdot (-3 + 2k(L_2 + y) + 4\nu))] \exp[2hk] \right\} \exp[-ky] \quad (5)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D(y) = & \left\{ -1 + 2\nu - ky + (-1 + 2\nu + ky) \exp[2ky] \right. \\
 & + [1 - 2\nu + k(h - y + h(-1 + 2kL_2)(3 + 2k(L_1 - y) - 4\nu))] \exp[2k(h + y)] \\
 & + [1 - 2\nu + k(h + y + h(-1 + 2kL_1) \cdot (3 + 2k(L_2 + y) - 4\nu))] \exp[2hk] \\
 & + [1 - 2\nu + k(-2h^2k + y + 2h(1 + 2kL_2 + ky - 2\nu) - 2L_2(1 + k(L_2 + y) - 2\nu))] \exp[2kL_1] \\
 & + [-1 + 2\nu + k(y + 2L_1(1 + k(L_1 - y) - 2\nu))] \exp[2k(h + L_2 + y)] \\
 & + [-1 + 2\nu + k(-y + 2L_2(1 + k(L_2 + y) - 2\nu))] \exp[2k(h + L_1)] \\
 & \left. - [-1 + 2\nu + k(2h^2k + y + 2L_1(1 + k(L_1 - y) - 2\nu) + h(-2 - 4kL_1 + 2ky + 4\nu))] \exp[2k(L_2 + y)] \right\} \\
 & \cdot \exp[-ky] \quad (6)
 \end{aligned}$$

et

$$\Delta = 1 + \exp[4hk] - 2(1 + 2h^2k^2) \cdot \exp[2hk] \quad (7)$$

La solution au problème posé dans l'introduction est donc obtenue en appliquant la relation (1). Les expressions des contraintes qui en découlent sont exactement identiques aux formules (6)–(9) données par Kroupa [7], compte tenu des axes différents et des symboles choisis par cet auteur.

Le champ des déplacements et les répartitions des contraintes sont illustrés sur les Figs. 2 et 3 pour une lame ultramince de silicium et une dislocation avec $\mathbf{b} = 1/2\langle 110 \rangle // Ox$. Les autres données sont les suivantes : $\mu = 68,1$ GPa et $\nu = 0,218$ [19]; $L_1 = 6$ nm, $L_2 = 10$ nm ; paramètre cristallin = 0,54282 nm [20], ce qui donne $b = 0,38383$ nm. Les iso-contraintes correspondent à 0 et $\pm 0,050$ GPa. Il est remarquable de constater que les valeurs de σ_{11} pour $x = 0$, près des surfaces libres du haut et du bas, sont respectivement négatives (compression) du côté du plan supplémentaire et positives (traction) de l'autre, ce qui est contraire au cas d'un milieu infini. Elles atteignent des pics très élevés dans ces régions : les maximums sont sur l'axe Oy aux points d'ordonnées $(0, L_1)$ et $(0, -L_2)$, pour lesquels $\sigma_{11} = 1,766$ GPa et $-1,888$ GPa respectivement. Ces effets de surfaces sont donc très importants sur les échantillons observés en MET à haute résolution. Les Figs. 2 (b), (c) montrent bien

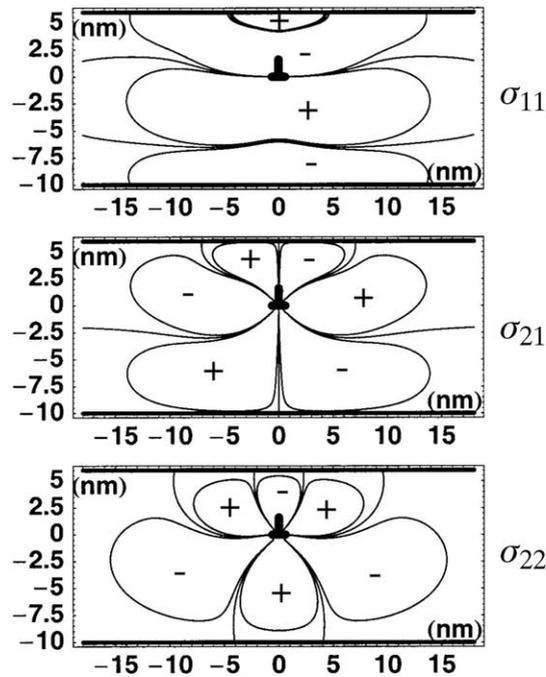


Fig. 3. Courbes iso-contraintes 0 and ± 40 MPa dans une lame ultramince ($h = 16$ nm) de silicium déformée par une dislocation coin de vecteur de Burgers $\mathbf{b} = 1/2(110)\parallel Ox$. Les signes + et – indiquent les régions à contraintes positives et négatives.

Fig. 3. Equistress curves 0 and ± 40 MPa in an ultrathin foil ($h = 16$ nm) of silicon deformed by an edge dislocation with a Burgers vector $1/2(110)\parallel Ox$. The signs + and – indicate the regions with positive or negative stresses.

l'écrantage des iso-contraintes σ_{21} et σ_{22} par les surfaces libres. Les iso-contraintes $\sigma_{21} = \sigma_{22} = 0$ rencontrent bien sûr les deux surfaces libres.

À partir des expressions (4)–(7), il est facile d'obtenir l'angle de flexion θ de la lame mince à longue distance. Il correspond à deux fois la composante selon Oz du vecteur de rotation lorsque $x \rightarrow \infty$, soit

$$\theta = -\text{Limite} \left[\frac{\partial u_2^{(m)}}{\partial x} - \frac{\partial u_1^{(m)}}{\partial y} \right]_{x \rightarrow \infty} \quad (8)$$

Après dérivation, on constate qu'il s'agit d'évaluer la limite d'une intégrale de Dirichlet [21]. Cette limite est indépendante de y et des constantes élastiques du milieu et vaut $-6bL_1L_2/h^3$. L'angle θ a déjà été obtenu antérieurement par d'autres méthodes [2,3,7,22]. Pour la Fig. 2, il vaut $2,0^\circ$.

Références

- [1] M.Y. Gutkin, A.E. Romanov, Straight edge dislocation in a thin two-phase plate. I Elastic stress field, *Phys. Stat. Sol. (a)* 125 (1991) 107–124.
- [2] R. Siems, P. Delavignette, S. Amelinckx, The buckling of a thin plate due to the presence of an edge dislocation, *Phys. Stat. Sol. 2* (1962) 421–438.
- [3] M. Wilkens, M. Rühle, F. Häussermann, On the nature of the long-range dislocation contrast in electron transmission micrograph, *Phys. Stat. Sol. 22* (1967) 689–708.
- [4] P. Hirsch, A. Howie, R.B. Nicholson, D.W. Pashley, M.J. Whelan, *Electron Microscopy of Thin Crystals*, 2^{ème} édition, Robert E. Krieger Pub. Co., Malabar, Florida, USA, 1977, p. 248.
- [5] G. Leibfried, H.D. Dietze, Zur Theorie der Schraubenversetzung, *Z. Phys.* 126 (1949) 790–808.
- [6] R. Bonnet, K. Rousseau, F. Fournel, Analyse du contraste d'un sous-joint de torsion (001) dans le silicium en MET à deux ondes, *C. R. Physique 3* (2002) 657–663.
- [7] F. Kroupa, Die Abhängigkeit der Banddurchbiegung von der Lage des Stufenversetzungen, *Czech. J. Phys.* 9 (1959) 488–494.
- [8] I.N. Sneddon, *Fourier Transforms*, McGraw-Hill Book Company, Inc., 1951.
- [9] M.S. Lee, J. Dundurs, Edge dislocation in a surface layer, *Int. J. Engrg. Sci.* 11 (1973) 87–94.

- [10] R. Bonnet, Courbure élastique d'une hétéro-interface cohérente dans une lame mince, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. IIB 323 (1996) 33–38.
- [11] W.C. Moss, W.G. Hoover, Edge-dislocation displacements in an elastic strip, J. Appl. Phys. 49 (1978) 5449–5451.
- [12] F.R.N. Nabarro, E.J. Kostlan, The stress field of a dislocation lying in a plate, J. Appl. Phys. 49 (1978) 5445–5448.
- [13] R. Bonnet, Une lame mince biphasée déformée par une dislocation interfaciale, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. II 318 (1994) 289–295.
- [14] M. Flamant, Sur la répartition des pressions dans un solide rectangulaire chargé transversalement, C. R. Paris, Gauthier-Villars 114 (1892) 1465–1468.
- [15] V.V. Novozhilov, Theory of Elasticity, Pergamon Press, Oxford, 1961, p. 440.
- [16] J. Courbon, Résistance des Matériaux, t. 1, 2^{ème} édition, Dunod, Paris, 1964, p. 120.
- [17] M.J. Boussinesq, Application des potentiels à l'étude de l'équilibre et du mouvement des corps élastiques, 1885, cité dans [18] à la p. 834.
- [18] J. Mandel, Cours de Mécanique des milieux continus, t. II, Gauthier-Villars, 1966, p. 627.
- [19] J.P. Hirth, J. Lothe, Theory of Dislocations, 2^{ème} édition, Wiley, New York, 1982, pp. 76 et 837.
- [20] B.D. Cullity, Elements of X-ray Diffraction, 3^{ème} impression, Addison-Wesley Pub. Co. Inc., Reading, USA, 1967, p. 484.
- [21] J. Bass, Cours de Mathématiques, Vol. I, 3^{ème} édition, Masson et Cie, Paris, 1964, p. 290.
- [22] J.D. Eshelby, The distortion and electrification of plates and rods by dislocations, Phys. Stat. Sol. 2 (1962) 1021–1028.