



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Comptes Rendus Physique

www.sciencedirect.com



Dislocations hétéro-interfaciales vis perçant une plaquette mince



Screw heterointerfacial dislocations piercing a thin plate

Salem Neily^a, Hajer Ghabri^a, Sami Youssef^a, Roland Bonnet^{b,*}^a Laboratoire de physique de la matière condensée et nanosciences LR 11 ES 40, faculté des sciences, rue de l'Environnement, 5019 Monastir, Université de Monastir, Tunisia^b Université Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, SIMaP, 38000 Grenoble, France

I N F O A R T I C L E

Historique de l'article :

Disponible sur Internet le 26 avril 2018

Mots-clés :

Dislocation
Surface libre
Isotropie
Milieu hétérogène

Keywords:

Dislocation
Free surface
Isotropy
Heterogeneous medium

R É S U M É

En microscopie électronique à transmission et haute résolution, l'échantillon est transparent aux électrons et son épaisseur est souvent inférieure à environ 10 nm. Lorsqu'il contient un défaut linéaire comme une dislocation vis, l'image obtenue peut montrer des perturbations plus ou moins importantes due à la relaxation élastique au voisinage des deux surfaces libres. Par conséquent, l'interprétation théorique d'une image doit inclure cette relaxation dans le modèle de calcul. Dans ce travail, elle est évaluée pour des dislocations de *misfit* vis perçant normalement une plaquette bicristalline élastiquement hétérogène, dans les hypothèses suivantes : aucune force extérieure ne s'exerce sur la plaquette (épaisseur $2h$) et une contrainte de surface éventuellement liée à une structure nanométrique des deux surfaces libres est négligée. La solution combine de façon appropriée des champs élastiques connus dans un milieu bicristallin illimité, ce qui permet d'annuler les contraintes totales s'appliquant sur deux plans distants de $2h$. Cette solution généralise pour la première fois celle d'Eshelby et Stroh (1951) applicable à une dislocation vis isolée perpendiculaire à une plaquette homogène.

© 2018 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Cet article est publié en Open Access sous licence CC BY-NC-ND (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

A B S T R A C T

A specimen observed in high-resolution transmission electron microscopy is electron transparent and its thickness is often less than about 10 nm. When it contains a linear defect like a screw dislocation, the obtained image can exhibit more or less important perturbations due to elastic relaxation nearby both free surfaces. Therefore, the theoretical interpretation of an image should include this relaxation in the calculation model. In the present work, it is evaluated for screw *misfit* dislocations piercing normally an elastically heterogeneous bicrystalline plate (thickness $2h$) from the following assumptions: there is no applied force on the thin plate and any surface stress related to a possible nanometric structure along the two free surfaces is neglected. The solution is found from an appropriate combination of known elastic fields in an infinite medium, which enables total stresses applying on two planes distant of $2h$ to be cancelled. This solution

* Auteur correspondant.

Adresses e-mail : salem.neily@yahoo.fr (S. Neily), hajer.ghabri@yahoo.fr (H. Ghabri), youssefsami@yahoo.fr (S. Youssef), ralbonnet@sfr.fr (R. Bonnet).

generalizes for the first time that of Eshelby and Stroh (1951), who consider an isolated screw dislocation normal to a homogeneous plate.

© 2018 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Cet article est publié en Open Access sous licence CC BY-NC-ND (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

1. Introduction

Compte tenu du développement prévisible de l'industrie électronique, en particulier de circuits intégrés de compositions chimiques de plus en plus variées, il devient important de comprendre les propriétés optoélectroniques des composants à l'échelle des dislocations. En effet, ces composants sont formés de nombreuses interfaces qui permettent d'adapter les structures cristallines les unes aux autres, et leurs propriétés dépendent aussi des dislocations qui tapissent ces hétéro-interfaces. L'observation de ces défauts est généralement effectuée en microscopie électronique en transmission (MET) sur une lame mince orientée favorablement pour observer la nature des dislocations. Comme les échantillons de MET en haute résolution nécessitent souvent l'utilisation d'échantillons ayant des épaisseurs inférieures à environ 10 nm, le champ élastique d'une dislocation est modifié dans le milieu confiné d'une lame ultramince, surtout si elle est à caractère vis [1]. L'évaluation de la relaxation de son champ élastique peut rendre de grands services dans l'interprétation des images de MET, mais elle est difficile à évaluer pour une hétéro-interface.

La relaxation d'une dislocation vis qui émerge sur les deux surfaces libres d'une plaquette mince homogène, élastiquement isotrope, a déjà fait l'objet d'un travail théorique ancien d'Eshelby et Stroh [1], qui en ont donné une élégante solution. Son utilisation a permis d'expliquer plus tard, en imagerie de MET conventionnelle [2], la présence de lobes de contrastes particuliers dus à la relaxation élastique du cristal au voisinage du point d'émergence de cette dislocation ou de dislocations mixtes à forte composante vis. Depuis l'avènement de la MET à haute résolution [3], les effets de contraste de ces dislocations vis sont facilement observés et doivent être pris en compte dans l'interprétation des images à l'échelle atomique, par exemple, [4–6]. Dans ces références, les structures des cœurs de dislocations vis sont simulées en combinant la relaxation élastique de surface (dite *Eshelby twist*) et des méthodes de relaxation atomique. Ces méthodes de relaxation sont utilisées en supposant des conditions aux limites qui utilisent l'élasticité du milieu [6–8]. Comme beaucoup d'observations sont relatives à des dislocations mixtes placées le long d'une hétéro-interface cristalline à structure plus ou moins périodique, il est souhaitable de généraliser le travail d'Eshelby et Stroh à un milieu non homogène, les cristaux ayant en général des propriétés élastiques différentes.

Nous proposons une solution à cette question en nous intéressant d'abord à un problème plus général, celui du champ élastique d'une série de dislocations interfaciales particulières qui n'ont pas le caractère de dislocations de translation comme dans la référence [8]. Ces dislocations interfaciales particulières, appelées dislocations de désaccord paramétrique ou « dislocations de *misfit* » en anglais, par exemple [9–11], ont des champs élastiques plus ou moins périodiques qui dépendent nécessairement de l'écart paramétrique et/ou angulaire des deux cristaux le long de l'hétéro-interface. Cependant, lorsque cet écart tend à s'annuler, la distance entre les dislocations de *misfit* grandit, et le champ élastique autour de chaque ligne de dislocation tend asymptotiquement vers celui d'une dislocation de translation. La solution du problème général donne donc une solution asymptotique à la question posée plus haut.

Le principe de la méthode suivie est tout à fait semblable pour des dislocations à caractère vis ou coin. Pour des raisons de simplicité, elle n'est exposée ici que pour des dislocations à caractère vis, équidistantes, disposées sur une hétéro-interface plane, une configuration déjà étudiée dans [10,12] ou observée, voir par exemple la figure 1 dans la référence [13]. Quelques applications numériques permettent de se rendre compte de l'intérêt qu'il y a à s'affranchir d'un milieu supposé élastiquement homogène.

L'idée directrice repose sur la connaissance de deux champs élastiques périodiques 1 et 2, dont l'addition permet d'annuler les forces qui s'appliquent sur les deux surfaces libres d'une plaquette mince hétérogène. Le champ 1 est généré dans un milieu illimité par une série périodique de dislocations de *misfit* réparties périodiquement (période T_x) sur une interface plane [12], tandis que le champ 2 (champ image) recherché annule les contraintes sur deux plans parallèles perpendiculaires à cette interface.

2. Calcul du champ 1

La Figure 1 est une perspective qui décrit la géométrie du problème, notamment la position et l'orientation du repère cartésien $Oxyz$ utilisé. L'interface ($y = 0$) est perpendiculaire à la plaquette d'épaisseur $2h$ et contient un ensemble de dislocations de *misfit* réparties périodiquement (période T_x). L'une des dislocations est orientée selon Oz , l'origine O étant sur la dislocation et à mi-hauteur de la plaquette. Le vecteur de Burgers commun est $(0, 0, b)$. L'interface sépare deux cristaux, notés cristal + et cristal – selon qu'ils sont placés du côté $y > 0$ ou $y < 0$. Les constantes élastiques traditionnelles de ces cristaux sont notées μ (module d'Young) et ν (coefficient de Poisson), avec un indice supérieur + ou –, selon le cas.

Le champ des déplacements $\mathbf{u}^{(1)}$ de chaque cristal est déduit de l'analyse présentée dans [12]. En termes complexes, il s'exprime par des séries de Fourier simples dont les coefficients pré-exponentiels dépendent de l'ordre n de l'harmonique,

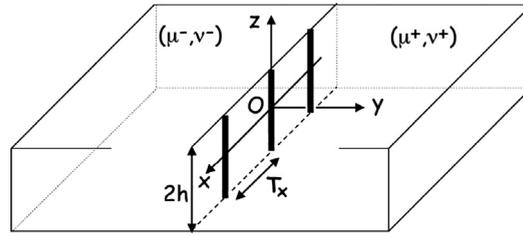


Fig. 1. Vue en perspective d'une plaquette contenant une interface +/- perpendiculaire aux deux surfaces libres. Les dislocations de *misfit* (en traits gras) sont parallèles à la normale Oz .

Fig. 1. Perspective view of a thin plate containing an interface +/- perpendicular to the two free surfaces. Misfit dislocations (bold lines) are parallel to the normal Oz .

de la période T_x et de la variable y . Pour des dislocations vis, seule la composante selon Oz est non nulle. Pour le milieu +, ces composantes s'écrivent ($n \neq 0$) :

$$u_x^{(1)+} = u_y^{(1)+} = 0 \quad (1a)$$

$$u_z^{(1)+} = \sum_n \text{Sign}(y) \{ ib\mu^- / [2\pi n(\mu^+ + \mu^-)] \} \exp[ik_x(x + i|y|)] \quad (1b)$$

dans laquelle $k_x = 2\pi n/T_x$.

Pour le milieu -, le champ des déplacements s'obtient à partir de (1a), (1b) en interchangeant μ^+ et μ^- . Dans la suite du texte, les indices supérieurs + et - sont omis lorsque la variable s'applique à l'un ou l'autre des cristaux.

Comme cela est montré dans [12], le champ (1a), (1b) engendre un déplacement $\mathbf{u}^{(1)}$ et des contraintes $\sigma_{jk}^{(1)}$ qui tendent rapidement vers zéro lorsque l'ordonnée y a des valeurs supérieures à quelques périodes T_x .

Pour résoudre notre problème, nous utilisons des champs élastiques bipériodiques (périodes T_x et T_y). L'idée de base est de rechercher une nouvelle fonction déplacement $\mathbf{U}^{(1)}$ idéalement égale à $\mathbf{u}^{(1)}$ sur un intervalle incluant l'hétéro-interface, défini entre $y = -T_y/2$ à $y = +T_y/2$. Lorsque y est proche de $\pm T_y/2$, valeur choisie très grande par rapport au vecteur de Burgers, les déplacements $u_z^{(1)}$ sont pratiquement nuls et la description du champ élastique sur l'intervalle $y = -T_y/2$ et $y = +T_y/2$ avec $\mathbf{U}^{(1)}$ devient très proche de $\mathbf{u}^{(1)}$. Bien entendu, lorsque $u_z^{(1)}$ est discontinu, le déplacement $U_z^{(1)}$ l'est aussi. Aux ordonnées $y = \pm T_y/2$, les discontinuités seront d'autant plus faibles que T_y sera grand. Le calcul donne donc une expression unique applicable de chaque côté de l'hétéro-interface ($m, n \neq 0$) :

$$U_z^{(1)} = \{ b / [2\pi T_y(\mu^+ + \mu^-)] \} \sum_{m,n} (G/n) [1 - \cos(m\pi) \exp(-k_x T_y/2)] \exp[i\mathbf{k}\mathbf{x}] \quad (2)$$

avec

$$G = [ik_x(\mu^- - \mu^+) + k_y(\mu^- + \mu^+)] / \gamma^2 \quad (3)$$

$$k_y = 2\pi m/T_y, \quad \gamma = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2} \quad \text{et} \quad \mathbf{k}\mathbf{x} = k_x x + k_y y \quad (4)$$

Lorsque T_x et T_y deviennent de plus en plus grands devant $|\mathbf{b}|$, le champ élastique autour de Oz devient très voisin de celui d'une dislocation d'hétéro-interface isolée en milieu illimité, champ déjà calculé dans [14].

3. Calcul du champ 2 (champ image)

La recherche du champ 2 inconnu $\mathbf{u}^{(2)}$ est simplifiée si l'on admet l'absence de pression ou de force extérieure appliquée sur la plaquette. En outre, nous admettons l'absence de contrainte de surface éventuellement générée par une structure nanométrique des deux surfaces libres, telle que la ségrégation de surface, l'adsorption en surface, la reconstruction de surface, la nanostructuration, ou toute autre situation particulière impliquant un effet Shuttleworth [15]. Cet effet est négligé dans notre approche, car il nécessiterait l'introduction d'un modèle structural propre à chaque surface libre. Par exemple, ce modèle peut être très compliqué s'il s'agit d'une reconstruction de surface impliquant des « dislocations de surface » (par exemple, [16]).

Le champ $\mathbf{u}^{(2)}$ est recherché pour annuler les contraintes $\sigma_{3k}^{(1)}$ qui s'appliquent le long de deux plans du milieu bicristallin infini placés aux cotes $z = \pm h$. Elles sont facilement calculables à partir de l'expression $\mathbf{U}^{(1)}$. En conséquence, le long des deux surfaces libres de la plaquette, les contraintes $\sigma_{3k}^{(2)}$ doivent annuler les contraintes $\sigma_{3k}^{(1)}$, ce qui implique pour $z = \pm h$,

$$\sigma_{3k}^{(1)} + \sigma_{3k}^{(2)} = 0 \quad (k = 1-3) \quad (5)$$

Pour trouver $\mathbf{u}^{(2)}$, nous utilisons une solution formelle des équations différentielles de l'élasticité qui est bipériodique selon les périodicités T_x et T_y . En effet, selon la référence [12], chacune des composantes de $\mathbf{u}^{(2)}$ peut être développée en série

double de Fourier. Chaque harmonique d'ordre m et n de ces séries dépend de constantes complexes inconnues $A_k^{(m,n)}$ et $B_k^{(m,n)}$, à déterminer, mais ajustables pour respecter la condition de contrainte appliquée nulle sur les deux surfaces libres des deux cristaux. Une fois que ces constantes complexes seront déterminées, il faudra vérifier que les forces sont bien transmises à travers l'hétéro-interface, c'est-à-dire les trois contraintes σ_{2k} . Pour chacun des cristaux $+$ et $-$, la solution formelle s'écrit ($m, n \neq 0$) :

$$u_x^{(2)} = \sum_{m,n} \{ (A_1^{m,n} + k_x A_3^{m,n} z) \exp[-\gamma z] + (B_1^{m,n} + k_x B_3^{m,n} z) \exp[\gamma z] \} \exp[ik_x x] \quad (6)$$

$$u_y^{(2)} = \sum_{m,n} \{ (A_2^{m,n} + k_y A_3^{m,n} z) \exp[-\gamma z] + (B_2^{m,n} + k_y B_3^{m,n} z) \exp[\gamma z] \} \exp[ik_x x] \quad (7)$$

$$u_z^{(2)} = \sum_{m,n} i \{ [((k_x A_1^{m,n} + k_y A_2^{m,n}) / \gamma) + ((3 - 4\nu) + \gamma z) A_3^{m,n}] \exp[-\gamma z] - [((k_x B_1^{m,n} + k_y B_2^{m,n}) / \gamma) - ((3 - 4\nu) - \gamma z) B_3^{m,n}] \exp[\gamma z] \} \exp[ik_x x] \quad (8)$$

où ν est le coefficient de Poisson du milieu considéré. Les contraintes $\sigma_{3k}^{(2)}$ sont faciles à calculer par dérivation, puis en appliquant la loi de Hooke.

La relation [5] doit être imposée pour chacun des deux cristaux, successivement. Si $y > 0$ et $z = \pm h$, les fonctions formelles (6)–(8) sont appliquées en utilisant les constantes μ^+ et ν^+ , tandis que si $y < 0$ ce sont les constantes μ^- et ν^- qui sont appliquées. Les conditions (5) impliquent qu'un harmonique quelconque d'ordre (m, n) du premier membre doit être nul.

Nous obtenons alors un système d'équations de six équations complexes contenant six inconnues complexes $A_k^{(m,n)}$ et $B_k^{(m,n)}$. Ce système peut être inversé algébriquement, ce qui fournit les coefficients cherchés. En remplaçant leurs valeurs dans les expressions (6)–(8), le résultat du terme général (m, n) en termes réels est le suivant pour le cristal $+$ (m et $n > 0$) :

$$u_x^{(2)+} = \sum_{m,n} F^{(m,n)}(x, y, z) \quad (9)$$

$$u_y^{(2)+} = \sum_{m,n} (-k_x/k_y) F^{(m,n)}(x, y, z) \quad (10)$$

$$u_z^{(2)+} = 0 \quad (11)$$

avec

$$F^{(m,n)}(x, y, z) = (C / (\mu^+ \gamma)) [\sinh(\gamma z) / \cosh(\gamma h)] \sin(k_x x) \quad (12)$$

$$C = 2bk_x k_y \mu^- \mu^+ [1 - \cos(m\pi) \exp(-k_x T_y / 2)] / (n\pi T_y \gamma^2 (\mu^+ + \mu^-)) \quad (13)$$

tandis que le champ $\mathbf{u}^{(2)-}$ est obtenu à partir de $\mathbf{u}^{(2)+}$ en changeant μ^+ en μ^- dans l'expression (12).

Nous avons vérifié algébriquement que la solution (9)–(11) est telle que tout le tenseur contrainte ($\sigma_{jk}^{(1)} + \sigma_{jk}^{(2)}$) est transmis à travers l'hétéro-interface, donc les forces le sont également. Cette propriété était aussi constatée antérieurement dans le cas d'une dislocation vis isolée dans un milieu bicristallin illimité [14].

Les relations (1a), (1b) et (9)–(11) donnent par sommation le champ des déplacements total ($\mathbf{u}^{(1)} + \mathbf{u}^{(2)}$) pour chaque cristal.

4. Application numérique

Les expressions ci-dessus ont été testées numériquement en ce qui concerne les contraintes autour de la dislocation placée le long de Oz , pour de grandes périodes T_x et T_y . Des solutions exactes sont en effet connues pour une plaquette homogène [1] et pour un milieu infini hétérogène [14]. Dans ces cas très particuliers, la sommation des séries nécessite plus de temps près des cœurs de dislocations, et donc le nombre M d'harmoniques à prendre en compte doit être grand.

Quelques courbes de contraintes correspondant à des points placés le long de droites particulières ont été tracées à travers une plaquette mince (épaisseur $2h = 10$ nm) pour donner une idée de l'effet d'hétérogénéité du milieu. Afin de comparer avec la solution d'Eshelby et Stroh [1], les périodes T_x et T_y sont choisies très grandes devant $|\mathbf{b}|$, et trois hypothèses sont envisagées : un milieu hétérogène Al(cristal $+$)/ θ (cristal $-$), un milieu homogène Al et un milieu homogène θ . Les données correspondent à une dislocation vis isolée de vecteur de Burgers $a/2 < 110 > \text{Al}$ ($a = 0,405$ nm) et placée sur une interface séparant un cristal Al, côté $y > 0$, et un cristal $\text{Al}_2\text{Cu}(\theta)$, côté $y < 0$ [17]. Les constantes élastiques sont $\mu^+ = 26,5$ GPa [8] et $\mu^- = 40,46$ GPa [18]. Les courbes ne changent plus à partir de périodes suffisamment grandes, prises ici égales à $T_x = T_y = 800$ nm, c'est-à-dire $2874 |\mathbf{b}|$. L'évolution de la contrainte σ_{11} le long d'une droite parallèle à Oz ($x = y = 2$ nm) et sur la surface supérieure de la plaquette ($x = 2$ nm, $z = h$) est visible sur les Figures 2a et 2b, respectivement.

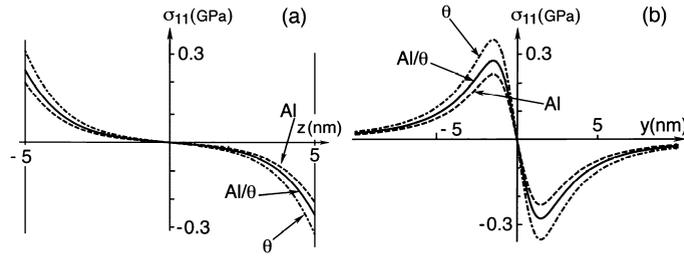


Fig. 2. Variation de la contrainte σ_{11} près d'une dislocation vis isolée et placée (a) le long d'une droite ($x = y = 2$ nm) parallèle à Oz ; (b) le long d'une droite ($x = 2$ nm, $z = h = 5$ nm) sur la surface libre supérieure. En trait plein, cas d'un milieu hétérogène Al/θ ; en traits pointillés et mixtes, cas de milieux homogènes Al et θ .

Fig. 2. Changes of the σ_{11} stress close to an isolated screw dislocation placed (a) parallel to a line parallel to Oz ($x = y = 2$ nm) and (b), along a straight line at the upper free surface ($x = 2$ nm, $z = h$). In plain line, case of a heterogeneous medium Al/θ , while in dotted and dot dashed lines, cases of Al and θ homogeneous mediums.

Dans le cas de ces données, la convergence est relativement lente, car l'ordre des harmoniques m et n doit aller jusqu'à $M = 500$ pour assurer une stabilité visuelle des courbes. Le calcul de chacune de ces figures nécessite environ 1 min avec un ordinateur de bureau. Elles montrent que, pour un milieu hétérogène, la contrainte σ_{11} est toujours placée entre les deux courbes tracées pour les milieux homogènes. Il y a donc un effet de moyenne. Les courbes correspondant aux milieux homogènes Al et θ peuvent aussi être tracées en appliquant la solution d'Eshelby et Stroh [1]. Les courbes de la Figure 2b sont antisymétriques avec l'ordonnée y . En milieu illimité, homogène [8] ou hétérogène [14], la contrainte σ_{11} est nulle dans le bicristal. Ces figures illustrent un effet de relaxation très net pour $z = h$, accentué par l'effet d'hétérogénéité. Par exemple, sur la Figure 2b, pour $y = \pm 1,5$ nm environ, les trois extremums de contrainte atteignent respectivement, en valeurs absolue et en GPa : 0,23, 0,28 et 0,35.

Pour évaluer l'effet de relaxation dans le cas d'une série périodique de dislocations de *misfit* rapprochées des calculs ont aussi été entrepris, avec les mêmes données que ci-dessus mais avec une période T_x de 20 nm. Ce choix correspond à des distances possibles entre dislocations de *misfit* dans les interfaces Al/θ de l'eutectique $Al-\theta$ [15]. Les calculs montrent que les contraintes de surface chutent assez rapidement quand on s'éloigne de l'axe Oz pour s'annuler sur les plans $y = \pm T_x/2$. Par exemple, le long de la droite ($x = 4$ nm, $z = h$) distante de 2 nm de celle utilisée pour la Figure 2b, les courbes des variations de σ_{11} varient de façon homothétique à celles de la Figure 2b, avec des extremums près de trois fois moins grands et placés à $y = \pm 3,2$ nm.

5. Conclusions

Les effets combinés de la relaxation de surface et d'hétérogénéité sur le champ élastique d'une dislocation vis n'ont pas encore été traités à ce jour, à la connaissance des auteurs. Même si la méthode de calcul présentée ici est un peu lourde, puisqu'elle utilise des séries doubles de Fourier, elle permet de quantifier pour la première fois un effet de l'hétérogénéité associé à une série périodique de dislocations de *misfit* qui traverse une plaquette mince. À la limite de grands espacements, elle donne aussi la solution au problème d'une hétéro-interface contenant une dislocation isolée. Elle a donc un intérêt fondamental, puisqu'elle généralise un résultat ancien d'Eshelby et Stroh [1] applicable à une dislocation isolée dans une plaquette mince homogène.

La solution, ici analytique, est adaptable à tous les cas de lame mince formée de deux cristaux de propriétés élastiques connues. Elle permet de calculer facilement les neuf dérivées du champ des déplacements et rend possible, potentiellement, des calculs d'imagerie en microscopie électronique en transmission [2,3,19] plus raffinés qu'auparavant. Bien entendu, cette expression du champ élastique ne s'applique qu'à une distance suffisamment éloignée du cœur théorique d'une dislocation, c'est-à-dire quelques modules $|b|$, voir par exemple [5–7,20]. Dans cette région, la méthode sera évidemment plus dépendante en temps de calcul à cause de la divergence normale du champ élastique au cœur théorique.

Remerciements

Les auteurs sont redevables à l'université Grenoble-Alpes, au CNRS et à l'université de Monastir (Tunisie) pour avoir permis l'accueil de l'un d'entre eux au SIMaP.

Références

- [1] J.D. Eshelby, A.N. Stroh, *Philos. Mag.* 7 (1951) 1401–1405, <https://doi.org/10.1080/14786445108560958>.
- [2] P. Hirsch, A. Howie, R.B. Nicholson, D. Pashley, M.J. Whelan, *Electron Microscopy of Thin Crystals*, 2d revised edition, Robert E. Krieger Publishing Company, Malabar, FL, USA, 1977.
- [3] D.B. Williams, C.B. Carter, *Transmission Electron Microscopy. A Textbook for Materials Science*, Plenum Press, New York, 1996.
- [4] C. Kisielowski, et al., Sub-angstrom imaging of dislocation core structures: how well are experiments comparable with theory, *Philos. Mag.* 86 (2006) 4575, <http://www.tandfonline.com/loi/tphm20>.

- [5] B.G. Mendis, et al., Use of the Nye tensor in analysing HREM images of bcc screw dislocations, *Philos. Mag.* 86 (2006) 4607, <http://www.tandfonline.com/loi/tphm20>.
- [6] R. Gröger, et al., Effect of Eshelby twist on core structure of screw dislocations in molybdenum: atomic structure and electron microscope image simulations, *Philos. Mag.* 91 (2011) 2364, <http://www.tandfonline.com/loi/tphm20>.
- [7] X. Hu, S. Wang, *Philos. Mag.* 98 (2018) 484–516, <https://doi.org/10.1080/14786435.2017.1409442>.
- [8] J.P. Hirth, J. Lothe, *Theory of Dislocations*, 2d revised edition, John Wiley & Sons, New York, 1982, p. 837.
- [9] J.H. van Der Merwe, *Proc. Phys. Soc. A* 63 (1950) 616–637.
- [10] J.W. Matthews, *Philos. Mag.* 29 (1974) 797–802, <http://www.tandfonline.com/loi/tphm19>.
- [11] R. Bonnet, *Phys. Rev. B* 49 (1994) 14398–14402, <https://www.researchgate.net/publication/13277992>.
- [12] R. Bonnet, *Philos. Mag.* 43 (1981) 1165–1187, <http://www.tandfonline.com/loi/tpha20>.
- [13] R. Bonnet, et al., Alternate dissociation of the screw dislocations in a (001) buried small-angle twist boundary in silicon, *Philos. Mag.* 89 (2009) 413, <http://www.tandfonline.com/loi/tphm20>.
- [14] S. Nakahara, J.B.C. Wu, J.C.M. Li, *Mater. Sci. Eng.* 10 (1972) 291–296, [https://doi.org/10.1016/0025-5416\(72\)90101-2](https://doi.org/10.1016/0025-5416(72)90101-2).
- [15] B. Andreotti, J.H. Snoeijer, *EPL J., Lett. J. Explor. Front. Phys.* 113 (2016) 66001, <https://doi.org/10.1209/0295-5075/113/66001>.
- [16] R. Bonnet, *Phys. Rev. B* 61 (2000) 14059–14065, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.14059>.
- [17] R. Bonnet, *Philos. Mag.* 97 (2017) 3055–3083, <https://doi.org/10.1080/14786435.2017.1366082>.
- [18] N. Fribourg-Blanc, et al., Détermination par extensométrie et mesures ultrasonores des six constantes élastiques du cristal Al₂Cu(θ). Discussion de l'anisotropie, *J. Appl. Crystallogr.* 12 (1979) 151, <https://doi.org/10.1107/S0021889879012103>.
- [19] C.T. Forwood, L.M. Clarebrough, *Electron Microscopy of Interfaces in Metals and Alloys*, Adam Hilger, Bristol, UK, 1991, p. 361.
- [20] S. Kret, et al., Measurement of dislocation core distribution by digital processing of high-resolution transmission electron microscopy micrographs: a new technique for studying defects, *J. Phys. Condens. Matter* 12 (2000) 10313, <https://doi.org/10.1088/0953-8984/12/49/325>.