

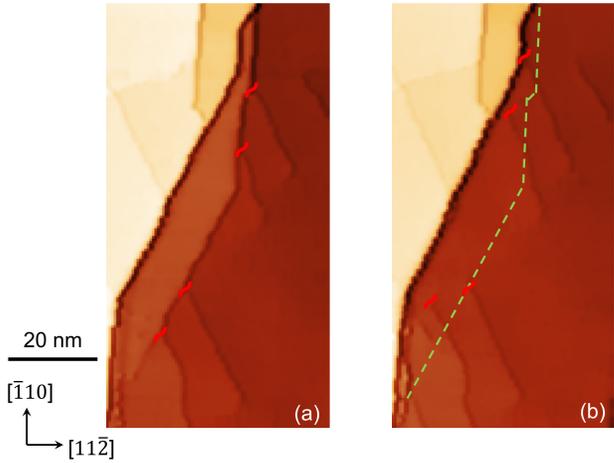
Motivations

La poursuite de la miniaturisation des dispositifs électroniques et optoélectroniques nous rapproche de la nécessité d'assemblages de structures nanométriques pour assurer la fonction d'ordinateur, de laser, de stockage de données, de capteurs et de communication. Par conséquent, pour l'auto-assemblage et l'auto-organisation des nanostructures, les forces agissant à l'échelle nanométrique doivent être identifiées.

Méthode expérimentale

Nous avons utilisé des monocristaux de niobium de haute pureté (Ta, C et O respectivement à 180, 25 et 15 ppm) de surface d'observation (111) orientée avec une précision angulaire meilleure que 0,5°. La surface, de rugosité initiale inférieure au nm, a été préparée *in situ* par des cycles de bombardement (Ar 1kV, 6µA/cm²) et recuits à 1250 K pendant 2h. Les images STM ont été obtenues sous environnement UHV (3.10⁻¹¹ mbar) avec un microscope VT-STM permettant la déformation *in situ* des échantillon [1].

Observations UHV-STM



Un monocristal de niobium, de surface d'observation (111), a été déformé plastiquement à 200 K jusqu'à une contrainte nominale de 164 MPa appliquée le long de l'axe [112]. On observe alors sur l'image STM (a) des traces de glissement de dislocations et des marches vicinales. Après une augmentation de la contrainte nominale jusqu'à 167 MPa, on observe sur l'image (b) qu'outre le glissement des dislocations, l'augmentation de contrainte a également entraîné la disparition d'une marche vicinale.

-- position initiale de la marche
 - - - position de dislocations

Afin de comprendre le mécanisme correspondant, le système est modélisé comme suit :

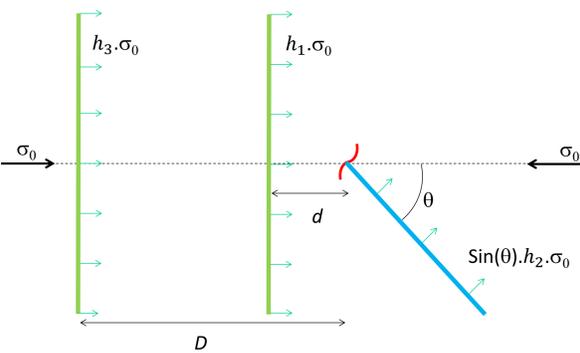
Pour simplifier les calculs on considère des marches vicinales perpendiculaires à l'axe de compression, une dislocation vis perpendiculaire à la surface et sa trace semi-infinie inclinée d'un angle θ .

— marches vicinales de hauteur $h_1 = 0,3 \text{ nm}$, $h_3 = 1 \text{ nm}$

— trace de glissement d'une hauteur $h_2 = 0,1 \text{ nm}$

— dislocation vis perpendiculaire à la surface

→ force par unité de longueur $h_i \cdot \sigma_0$ modélisant les marches sous contrainte



D la distance entre la marches h_3 et la dislocation en surface
 d la distance entre la marches h_1 et la dislocation en surface

➤ La configuration observé en (a) correspond à $\frac{d}{D} \sim 0$ et (b) à $\frac{d}{D} \sim 1$.

Calcul du grand potentiel

Le grand potentiel comprend l'énergie élastique du système et le travail des forces extérieures.

- On ne considère pas, pour l'instant, la marche vicinale h_3 .
- On pose U_0 qui regroupe tous les termes qui ne dépendent pas de d .
- Le tenseur de déformation ($\bar{\epsilon}^{dislo.}$) et le champ de déplacement ($\bar{U}^{vici.}$) de la dislocation vis sont la somme des champs d'une dislocation vis en volume et d'une dislocation image modélisant le milieu semi-infini [2].

$$(1) \quad \Phi = U_0 + \int \text{Trace}[\bar{\sigma}^{vici.}, \bar{\epsilon}^{dislo.}] dV + \int \text{Trace}[\bar{\sigma}^{vici.}, \bar{\epsilon}^{trace}] dV - \int \bar{f}_{ext.} \cdot \bar{U}^{dislo.} dS - \int \bar{f}_{ext.} \cdot \bar{U}^{trace} dS - \int \bar{f}_{ext.} \cdot \bar{U}^{vici.} dS$$

$$\left. \begin{aligned} \int \text{Trace}[\bar{\sigma}^{vici.}, \bar{\epsilon}^{dislo.}] dV &= 0 \\ \int \bar{f}_{ext.} \cdot \bar{U}^{dislo.} dS &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \text{➤ La dislocation n'intervient pas dans l'énergie totale du système}$$

$$\Phi = U_0 + \int \text{Trace}[\bar{\sigma}^{vici.}, \bar{\epsilon}^{trace}] dV - \int \bar{f}_{ext.} \cdot \bar{U}^{trace} dS - \int \bar{f}_{ext.} \cdot \bar{U}^{vici.} dS = U_0 - \frac{1}{2} \int \bar{f}_{vici.} \cdot \bar{U}^{trace} dS$$

Le grand potentiel se résume à l'énergie d'interaction élastique des marches [3]. et U_0 .

$$(2) \quad \Phi = U_0 - \frac{1}{2} \int \left(\frac{1-\nu^2}{\pi E} \frac{\bar{f}_{trace} \cdot \bar{f}_{vici.}}{|\bar{r}' - \bar{r}|} + \frac{\nu(1+\nu)}{\pi E} \frac{(\bar{f}_{trace} \cdot (\bar{r}' - \bar{r})) (\bar{f}_{vici.} \cdot (\bar{r}' - \bar{r}))}{|\bar{r}' - \bar{r}|^3} \right) d\bar{r}' d\bar{r}$$

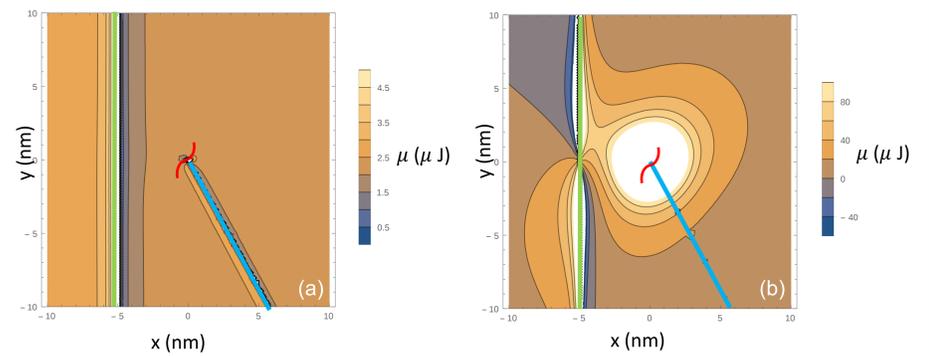
\bar{r} et \bar{r}' les coordonnées de la marche vicinale et de la trace de glissement d'une dislocation.
 \bar{f}_{trace} et $\bar{f}_{vici.}$ les forces par unité de longueur modélisant la trace de glissement et la marche vicinale sous contrainte.
 $\bar{\epsilon}^{trace}$ et \bar{U}^{trace} tenseur de déformation et champ de déplacement de la trace de glissement d'une dislocation.
 $\bar{\sigma}^{vici.}$ et $\bar{U}^{vici.}$ tenseur de contrainte et champ de déplacement de la marche vicinale.
 ν et E le coefficient de Poisson et le module d'Young.

*benjamin.douat@univ-poitiers.fr

Densité de potentiel chimique

A partir de l'équation (1) de Φ ,

$$\mu = \frac{d(\Phi)}{d(N)} = v_a \frac{d(\Phi)}{d(V)}$$



Sur le graphique (a) est tracé la densité de potentiel chimique sans les termes liés à la dislocation et en (b) la densité de potentiel chimique totale.

La dislocation n'est pas négligeable dans le calcul local du potentiel

Force d'interaction

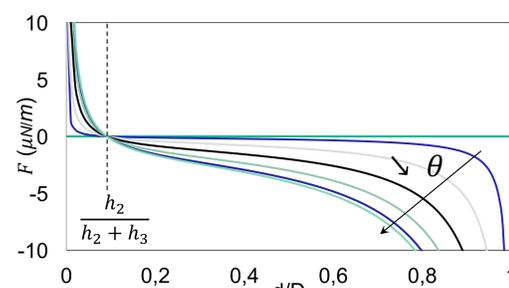
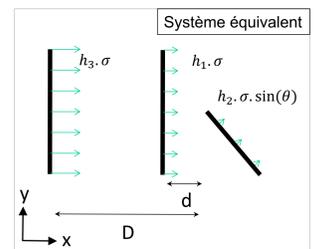
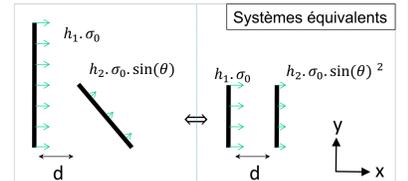
A partir de l'équation (2) de Φ ,

$$\vec{F}_{12} = - \frac{d(\Phi)}{d(d)} \vec{x} = - \frac{h_1 h_2 \sigma_0^2 (1-\nu^2) \sin^2(\theta)}{\pi Y d} \vec{x} = \frac{\vec{F}_{\parallel}}{2} \sin^2(\theta)$$

\vec{F}_{\parallel} la force d'interaction entre deux marches parallèles sous contrainte.

➤ On considère maintenant les marches h_1 , h_2 et h_3 .

$$\vec{F}_{123} = \vec{F}_{12} - \vec{F}_{13} = - \frac{h_1 (d(h_2+h_3) - D h_2) (1-\nu^2) \sigma_0^2 \sin^2(\theta)^2}{\pi Y d (D-d)} \vec{x}$$



Graphique de la force par unité de longueur de marche s'exerçant sur la marche h_1 en fonction du rapport $\frac{d}{D}$.

Il y a une position d'équilibre instable en $\frac{d}{D} = \frac{h_2}{h_2+h_3}$; en dessous h_1 est attiré vers h_2 et au dessus h_1 est attiré vers h_3 .

Conclusions et perspectives

Nous avons observé la réorganisation, voir la disparition, de terrasse sur la surface (111) d'échantillons de niobium sous contrainte. Nous avons identifié que les configurations observées résultaient de l'interaction entre les marches vicinales et les traces de glissement dues aux dislocations. La modélisation indique que les dislocations ont une très faible influence sur la position d'équilibre obtenue. Par contre, le potentiel qu'elles créent intervient certainement dans l'établissement des chemins de diffusion. Cette étude devra être poursuivie par le calcul du potentiel chimique le long de la marche h_1 en effectuant une dérivée variationnelle de Φ . Cela permettra de ne pas se limiter à une marche rectiligne et de connaître les configurations intermédiaires.

[1] Y. Nahas, F. Berneau, J. Bonneville, C. Coupeau, M. Drouet, B. Lamongie, M. Marteau, J. Michel, P. Tanguy and C. Tromas, *Rev. Sci. Instrum.* **84** 105117 (2013)

[2] J. D. Eshelby and A. N. Stroh, *Phil. Mag. Series 7* **42** 1401 (1951)

[3] P. Müller and A. Saul, *Surf. Sci. Rep.* **54** 157 (2004)