Croissance de cristaux

Benoît Merlet, `merlet@cmap.polytechnique.fr`

On s'intéresse à la déposition épitaxiale d'un film cristallin sur un substrat rigide. Sur la Figure 1, les "atomes" de substrat sont représentés en noir et les "atomes" de cristal en blanc. Le pas de périodicité D du substrat et le pas naturel d du cristal en formation peuvent être distincts ce qui induit une frustration du cristal en formation.

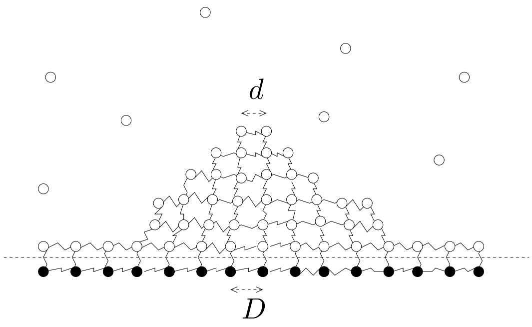

FIGURE 1 – Croissance épitaxiale

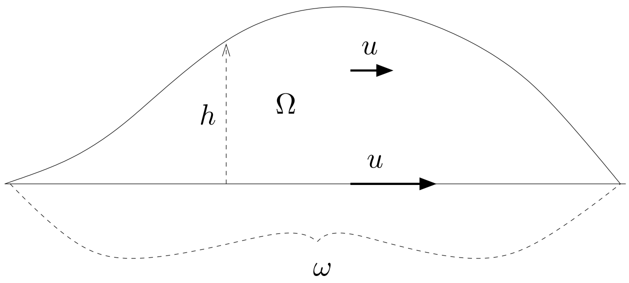

FIGURE 2 – Modèle continu

Cette situation peut conduire à des défauts de dislocation à l'interface substrat-cristal. Ici nous considérons que cette frustration est absorbée de manière élastique. On observe différentes formes pour la croissance des cristaux : croissance uniforme, formation d'un ou plusieurs îlots. Le but du MODAL est de retrouver numériquement ces formes. On commencera par étudier le modèle en dimension 1+1 (en remplaçant ω par $I =]a, b[$ dans le modèle qui suit).

Modèlisation

La surface du substrat occupe le domaine $\omega \subset \mathbf{R}^2$. La hauteur de cristal au dessus d'un point (x, y) de ω est notée $h(x, y)$. On impose $h = 0$ sur $\partial\omega$.
On note $\Omega \subset \mathbf{R}^3$ le domaine occupé par le cristal, soit :

$$\Omega \;:=\; \{(x, y, z) \in \omega \times \mathbf{R} \;:\; 0 < z < h(x, y)\}.$$

Le déplacement horizontal des atomes dans le cristal par rapport à une configuration périodique non frustrée (de pas d) est représenté par une fonction $u : \Omega \to \mathbf{R}^2$. À l'interface $\{z = 0\}$, ce déplacement est imposé par le pas $D \neq d$ du substrat rigide. On a

$$u(x, y, 0) \;=\; (D/d - 1)(xe_x + ye_y).$$

On suppose que le volume total de cristal déposé $V \;=\; \displaystyle\int_\omega h(x, y)\, dx\, dy$ est connu.
Les configurations observées minimisent l'énergie totale du système $\mathcal{E}_{tot}(h, u)$ sous cette contrainte. Cette énergie est la somme de deux termes :

1. L'énergie d'interface est proportionnelle à l'aire de l'interface cristal-milieu extérieur :

$$\mathcal{E}_i(h) \;:=\; \gamma \int_\omega \sqrt{1 + |\nabla h|^2}\, dx\, dy.$$

   (La constante γ dépend de la composition du milieu extérieur)

2. L'énergie de déformation élastique est donnée par

$$\mathcal{E}_e(h, u) \;:=\; \kappa \int_\Omega |\nabla u|^2\, dx\, dy\, dz.$$