



HAL
open science

ETUDE DU COMPORTEMENT THERMIQUE D'UN MATERIAU MULTICOUCHES LACUNAIRES ET CONTRIBUTION A LA MODELISATION ET LA SIMULATION NUMERIQUE DES DEPOTS A STRUCTURE COLONNAIRE.

Thu Huong Vo Thi

► **To cite this version:**

Thu Huong Vo Thi. ETUDE DU COMPORTEMENT THERMIQUE D'UN MATERIAU MULTICOUCHES LACUNAIRES ET CONTRIBUTION A LA MODELISATION ET LA SIMULATION NUMERIQUE DES DEPOTS A STRUCTURE COLONNAIRE.. Mathématiques [math]. Université d'Orléans, 2007. Français. NNT : . tel-00340855

HAL Id: tel-00340855

<https://theses.hal.science/tel-00340855v1>

Submitted on 22 Nov 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



UNIVERSITE D'ORLEANS

**THESE PRESENTEE A L'UNIVERSITE D'ORLEANS
POUR OBTENIR LE GRADE DE
DOCTEUR DE L'UNIVERSITE D'ORLEANS**

Discipline : Mathématiques Appliquées

PAR

VO Thi Thu Huong

**Titre de la Thèse : ETUDE DU COMPORTEMENT THERMIQUE D'UN MATERIAU
MULTICOUCHES LACUNAIRES ET CONTRIBUTION A LA MODELISATION ET LA
SIMULATION NUMERIQUE DES DEPOTS A STRUCTURE COLONNAIRE.**

Soutenu le : **21 mai 2007**

MEMBRES DU JURY (indiqués comme suit Mlle/Mme ou M. Prénom NOM) :

	(Fonction/Etablissement)
- M. BRAULT Pascal	<i>Examineur - Université d'Orléans</i>
- M. CORDIER Stéphane	<i>Co-directeur de thèse - Université d'Orléans</i>
- M. DEBUSSCHE Arnaud	<i>Rapporteur - ENS Cachan Bretagne</i>
- M. JOUVE François	<i>Examineur - Université Paris 7 - Denis Diderot</i>
- M. MISBAH Chaouqi	<i>Rapporteur - Université Joseph Fourier Grenoble I</i>
- M. ROUET Jean-Louis	<i>Directeur de thèse - Université d'Orléans</i>

ETUDE DU COMPORTEMENT
THERMIQUE D'UN MATERIAU
MULTICOUCHES LACUNAIRES ET
CONTRIBUTION A LA
MODELISATION ET LA SIMULATION
NUMERIQUE DES DEPOTS A
STRUCTURE COLONNAIRE

REMERCIEMENT

Je tiens tout d'abord à exprimer toute ma reconnaissance et ma profonde gratitude à Monsieur Jean-Louis ROUET et Monsieur Stéphane CORDIER, mes directeur et co-directeur de thèse, pour leur encadrement, leurs nombreux conseils et leur soutien constant tout au long de ma thèse dans la continuité de mon stage de DESS.

J'aimerais souligner la contribution importante réalisée par Monsieur Pascal BRAULT, professeur au GREMI. Ses conseils et ses suggestions ont été fort utiles et judicieux. Je le remercie également pour avoir accepté de présider le jury de cette thèse.

Monsieur Misbah CHAOUQI, professeur au Laboratoire de Spectrométrie Physique - Université Joseph Fourier Grenoble I, et Monsieur Arnaud DEBUSSCHE, professeur à l'ENS Cachan Bretagne, m'ont fait l'honneur d'accepter d'être les rapporteurs de cette thèse et de juger ce travail. Je les remercie vivement pour la rapidité avec laquelle ils ont lu mon manuscrit et l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail.

Mes plus chaleureux remerciements s'adressent aux autres membres du jury qui ont accepté d'évaluer mon travail de thèse : JOSSERAND Christophe, JOUVE François. Je remercie profondément Madame Michèle GRILLOT, professeur au Laboratoire MAPMO, d'avoir apporté sa contribution aux certains éléments de cette thèse.

Mes plus sincères remerciements vont également à Madame Maitine BERGOUNIOUX, professeur au Laboratoire MAPMO, pour son soutien et son aide.

Je tiens à remercier tous les chercheurs, enseignants et membres du personnel du Département de Mathématiques de l'Université d'Orléans pour leur accueil chaleureux, leur aide, et tous les services rendus.

Je tiens enfin à remercier les amis, thésards de m'avoir encouragé et aidé au cours de ma thèse.

Finalement, j'adresse un grand merci à ma famille pour le soutien moral elle m'a apporté tout au long de la réalisation de ces travaux.



Table des matières

PRELIMINAIRE	9
I ETUDE DU COMPORTEMENT THERMIQUE D'UN MATERIAU MULTICOUCHES LACUNAIRES	11
1. COEFFICIENT DE CONDUCTIVITE THERMIQUE EFFECTIF POUR UN MATERIAU A TROUS	15
1.1 Étude mathématique d'homogénéisation	15
1.2 Étude numérique du problème auxiliaire/microscopique	20
2. PROBLÈME HOMOGENEISE-MACROSCOPIQUE 2D	25
2.1 Équation de la chaleur, description des termes	25
2.1.1 Dépôt de la chaleur	25
2.2 Le problème plan stationnaire	26
2.2.1 Méthode itérative	27
2.2.2 Adimensionnement	27
2.2.3 Résultats numériques	28
2.3 Problème plan non stationnaire	31
3. LE PROBLÈME CYLINDRIQUE	37
3.1 Adimensionnement	37
3.2 Redimensionnement (Problème des couches minces)	38
3.3 Schéma numérique FREEFEM	39
3.3.1 Données numériques	39
3.3.2 Résultats numériques	40
4. RÉOLUTION DU PROBLÈME CYLINDRIQUE PAR LA MÉTHODE DES DIFFÉRENCES FINIES	43
4.1 Maillage	43
4.2 Discrétisation de l'équation cylindrique et des conditions aux limites en différence finie centrée	44
4.3 Schéma numérique	48
4.3.1 L'algorithme BiCGStab	48
4.3.2 Validation du programme C	49
4.3.3 Maillage adapté	50
4.3.4 Solution du problème SC dans le cas multicouche proche les conditions réalistes	52
5. RÉSISTANCE THERMIQUE	57
5.1 Bilan de flux d'énergie échangé par le rayonnement entre deux couches de différents matériaux	57
5.2 Étude numérique de la résistance thermique	60

CONCLUSION	65
BIBLIOGRAPHIE	67

II MODELISATION ET SIMULATION NUMERIQUE DES DEPOTS A STRUCTURE COLONNAIRE 69

6. INTRODUCTION	71
6.1 Notations et caractérisation de la croissance et de la rugosité des interfaces	74
7. ÉTUDE DES MODÈLES 1D.	77
7.1 Modèles discrets	77
7.1.1 Modèle de dépôt aléatoire (MC1D-d)	77
7.1.2 Modèles de dépôt aléatoire avec relaxation	78
7.1.2.1 Introduction	78
7.1.2.2 Modèle de dépôt aléatoire avec relaxation reliée à l'énergie d'activation thermique (MC1D-d+R)	79
7.1.2.3 Résultats du modèle de dépôt aléatoire avec relaxation thermique	82
7.1.3 Modèle de dépôt aléatoire avec ombrage	86
7.1.3.1 Modèle de dépôt aléatoire avec ombrage sans relaxation (MC1D-d+O)	87
7.1.3.2 Modèle de dépôt aléatoire avec ombrage incluant une relaxation thermique (MC1D-d+O+R)	96
7.2 Modèles continus	102
7.2.1 Equation d'Edwards-Wilkinson (EW1D)	102
7.2.1.1 Lois d'échelle de l'équation EW.	103
7.2.1.2 Résolutions numériques de l'équation EW.	104
7.2.2 Equation Kardar-Parisi-Zhang (KPZ1D).	107
7.2.2.1 Lois d'échelle de l'équation KPZ	108
7.2.2.2 Résolutions numériques de l'équation KPZ	108
7.2.3 Modèle continu incluant l'effet non-local de l'ombrage	111
7.2.3.1 Modèle de dépôt avec ombrage seul (EDP1D+ Ω)	113
7.2.3.2 Modèle de dépôt aléatoire avec ombrage et diffusion (EW1D+ Ω)	116
7.2.3.3 Modèle KPZ avec ombrage (KPZ1D+ Ω)	118
7.2.4 Nouveau modèle continu (EDP1D+ $g(\Omega)$)	120
7.2.4.1 Résolutions numériques	120
7.2.4.2 Remarque sur le calcul numérique de l'ombrage	125
7.2.4.3 Analyse de stabilité par une perturbation en ondes planes	126
7.2.5 Une première analyse des propriétés du nouveau modèle continu avec ombrage	129
7.2.5.1 Propriété de continuité de l'angle d'ouverture	129
7.2.5.2 Absence du principe du maximum	131

8. ÉTUDE DES MODÈLES 2D.	135
8.1 Modèles discrets	135
8.1.1 Modèle de dépôt aléatoire incluant la relaxation thermique (MC2D-d+R)	135
8.1.2 Modèle de dépôt aléatoire incluant l'ombrage	141
8.1.2.1 Modèle de dépôt aléatoire incluant l'ombrage sans diffusion (MC2D-d+O)	142
8.1.2.2 Modèle de dépôt aléatoire avec ombrage incluant une diffusion thermique (MC2D-d+O+R) :	157
8.2 Modèle continu (EDP2D+ $g(\Omega)$)	164
8.2.1 Résolution numérique du modèle continu EDP2D+ $g(\Omega)$	164
CONCLUSION	175
BIBLIOGRAPHIE	179



PRELIMINAIRE

Le travail présenté dans cette thèse a été fait pour et à l'occasion d'un contrat avec le CRT plasma-laser et dans le cadre de la création du pôle Européen de télévision numérique de Dreux. La thèse a été financée par ce contrat qui met en jeu plusieurs partenaires dont le laboratoire GREMI, et plus particulièrement P. Brault, avec lequel mes travaux ont fait l'objet à la fois de concertations et de discussions. Les recherches menées au MAPMO ont eu pour vocation à modéliser et simuler (souvent dans des géométries plus simples) les problèmes de physique traités au GREMI de façon expérimentales.

À l'origine de ce travail vient un problème technique (et de coût) pour l'amélioration des écrans à tube cathodique et plus précisément du masque qui est une grille dont les trous permettent de diriger le faisceau électronique vers photophores situés sur la dalle de verre : l'écran. L'apport d'énergie des électrons qui se déposent sur le masque entraîne son échauffement et du coup sa déformation nuisant à la qualité de l'image. Une réponse a été proposée par Pascal Brault qui consiste à déposer des couches minces de matériaux choisis, entre autres, pour leurs propriétés thermiques.

Cette thèse présente deux parties. La première consiste à modéliser l'échauffement du masque soumis au balayage électronique et vérifier si les solutions proposées permettent de réduire les gradients thermiques. La seconde partie s'intéresse au dépôt des couches sur le masque qui ont été faites au GREMI par procédé plasma. L'objet de cette partie a été d'étudier et imaginer des modèles dont les solutions permettent de retrouver des structures de dépôts similaires à celles obtenues expérimentalement.



Première partie

**ETUDE DU COMPORTEMENT
THERMIQUE D'UN MATERIAU
MULTICOUCHES LACUNAIRES**

Dans la première partie de cette thèse nous nous intéressons au problème de propagation de la chaleur dans un masque de téléviseur perforé et tester des matériaux multicouches pour améliorer les propriétés thermiques des masque. Le but de cette partie est donc de résoudre l'équation de la chaleur dans un milieu contenant la présence des trous et des couches fines de différents matériaux.

Un téléviseur à tube cathodique comprend les éléments principaux suivants :

- le canon triple à électrons : à chaque faisceau est associé une couleur (rouge, vert, bleu),
- les bobines permettant de commander la déviation du faisceau,
- l'écran et son revêtement de photophores (bande alternativement rouge verte et bleu),
- et enfin le masque qui est l'objet de la présente étude.

Le masque est une grille dont la fonction est d'assurer la bonne définition de l'image à l'écran. Cette grille est composée d'un grand ensemble de trous répartis régulièrement de formes rectangulaire ou circulaire dont chacun est associé à un photophore particulier de l'écran. Le nombre de trous donne le nombre de pixels de l'image reçue sur l'écran. L'exacte adéquation entre un trou du masque et la position de son photophore associé est un facteur crucial pour une bonne qualité des images. Ainsi lors de la construction d'un téléviseur, le dépôt des bandes de photophores se fait en fonction du masque attribué à l'écran.

En fonctionnement, les zones du masque soumises au flux d'électrons reçoivent 80% de la puissance du faisceau, les seuls 20% restant servant à exciter les photophores. Aussi le masque est soumis à un fort échauffement. Comme il est placé dans une ampoule sous vide, les seuls effets permettant son refroidissement sont les effets de radiations. Pour des images fixes et présentant un fort contraste (comme c'est le cas des télétextes ou des sous-titres en noir sur fond blanc), des gradients de température apparaissent qui provoquent une déformation élastique du masque. Ces dernières brisent la correspondance entre les trous de la zone déformée avec les photophores associés, entraînant une détérioration de l'image. Cet effet de défocalisation du faisceau est appelé "Domming".

Des études ont été menées pour réduire le Domming (ref. Philips [9]). En passant en revue les divers paramètres qui causent la déformation du masque, il a été proposé

- soit d'augmenter la rétrodiffusion des électrons sur le masque, grâce à un revêtement dont le coefficient de rétrodiffusion est important,
- soit d'adopter des matériaux dont le coefficient de conductivité thermique est grand de sorte à limiter les gradients de température,
- soit de choisir des matériaux dont le coefficient d'expansion thermique est faible, réduisant la déformation induite par le gradient de température.

L'Invar, s'il ne satisfait pas simultanément les trois critères, est cependant un bon candidat. Il a été malheureusement jugé coûteux et une autre alternative a été proposées par P. Brault.

Celle-ci consiste à fabriquer le masque dans un matériaux moins coûteux (même s'il ne répond pas exactement aux critères en faisant un bon masque) mais en lui apportant un revêtement composé de plusieurs couches minces. P. Brault a préconisé dans un premier temps un empilement de Tungstène-Cuivre-Tungstène. Le premier matériau a un bon coefficient de rétrodiffusion des électrons, ce qui limite l'échauffement du masque –les électrons renvoyés ne participant pas à son échauffement– le second a un bon coefficient de diffusion thermique ce qui amène une réduction des gradients de température. Un autre effet est attendu du bon coefficient de rétrodiffusion des électrons de la part du tungstène : bon nombre des électrons du faisceau déposés dans le cuivre vont avoir tendance, par réflexions multiples sur les deux couches de tungstène qui délimite celle de cuivre, à y rester et s'y propager. Ce dernier effet qui doit encore permettre de réduire les gradients thermiques n'est pas étudié ici.

La présence de trous dans le masque modifie les processus de diffusion de la chaleur et partant les coefficients de diffusion thermique des matériaux. La première partie de cette étude consiste à donner une formulation prenant en compte la présence des trous.

Dans la deuxième partie, nous menons une étude préliminaire pour laquelle la masque est considéré comme une feuille infiniment fine. Son épaisseur n'est alors pas prise en compte. Dans cette partie, la réponse transitoire du matériau à une sollicitation de type créneau est étudiée. Celle-ci correspond à des cas tests permettant de sélectionner les masques satisfaisant son cahier des charges. Les résultats des simulations numériques sont comparées avec les résultats expérimentaux réalisés par la société Philips.

Dans la troisième partie, nous menons une étude numérique de la propagation de la chaleur dans un matériau composé d'un empilement des couches fines de différents matériaux, initialement envisagé pour un modèle à symétrie circulaire. Ces résultats sont comparés avec ceux obtenus avec un matériau monocouche.

Chapitre 1

COEFFICIENT DE CONDUCTIVITÉ THERMIQUE EFFECTIF POUR UN MATÉRIAU À TROUS

La présence des trous dans le masque modifie la propagation de la chaleur. Il est possible de prendre en compte ces trous via des conditions aux limites de l'équation de la chaleur. Cependant, cela conduit ensuite à des modèles numériques difficiles à implémenter et de plus à de longs temps de calculs. Une première alternative est de résoudre numériquement le système sur une cellule représentative. Le résultat moyenné permet de déduire des valeurs effectives utilisées pour des simulations établies sur des domaines plus larges. Cette approche a été réalisée par S. Avril [2].

Nous proposons ici de déterminer mathématiquement des grandeurs de conductivité thermiques effectives qui ensuite seront utilisées dans un modèle moyenné. La présence de deux échelles de grandeurs distinctes conduit à utiliser les techniques d'homogénéisation [3]. La séparation des échelles petites (données ici par les dimensions caractéristiques d'un trou) et des échelles plus grandes (dimensions du masque) est quantifiée par un paramètre ε d'autant plus petit que la séparation des échelles est grande. Il est ainsi possible de séparer la solution suivant ces deux échelles en commençant par la plus petite. Les coefficients (ici le coefficient de diffusion) moyenné sur la cellule de base est ensuite utilisé pour décrire le comportement du masque à large échelle sans pour cela explicitement prendre en compte les trous.

1.1 Étude mathématique d'homogénéisation

Nous considérerons le problème numérique du calcul du coefficient de conductivité thermique effectif (*i.e* homogénéisé). L'équation de la chaleur, l'équation elliptique, avec opérateur sous "forme divergence" s'écrit :

$$\rho C \partial_t u - \nabla \cdot (K \nabla u) = f, \tag{1.1}$$

où ρ est la densité du matériau, C sa capacité thermique, K sa conductivité thermique, f un terme source d'énergie.

Les trous modifient essentiellement le comportement thermique dans les directions perpendiculaires à leur axe. Comme de plus le masque est (ou sera) composés de couches de différents matériaux parallèles entre elles perpendiculaire à l'axe des trous, on restreint le problème à un problème à 2

dimensions $\vec{r} = (x, y)$. Suivant l'axe z , qui s'enfonce dans la profondeur du masque, le coefficient de diffusion est soit 0 (dans le trou), soit celui du matériau, sans autre modification. Il n'est besoin que de regarder selon le plan (x, y) qui est celui du masque.

On supposera pour cela que le masque est plan, percé de façon régulière de trous de section constante. Ces trous peuvent-être circulaires ou rectangulaires. On appellera cellule un morceau du masque percé d'un seul de ces trous (cf figure 1.1). On suppose que les effets dû à un trou sont locaux et n'entraînent pas de modification sur de grandes distances (comparées aux dimensions du trou).

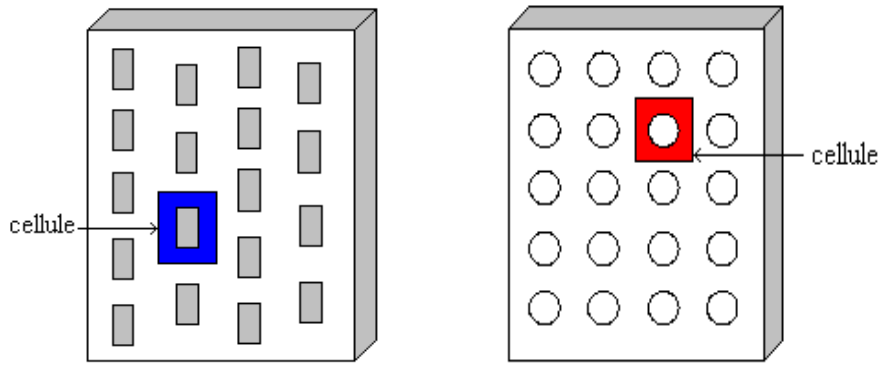


FIG. 1.1. Illustration de la cellule, élément de base du masque.

On introduit formellement un paramètre ϵ qui traduit la petitesse des effets thermiques à faible échelle, et on cherche une solution sous la forme du développement asymptotique suivant ϵ . Afin d'alléger les expressions, on écrira $\vec{r} = x$ et on introduira la notation $\vec{r}/\epsilon = y$.

$$u^\epsilon(x) = u^0(x, \frac{x}{\epsilon}) + \epsilon \cdot u^1(x, \frac{x}{\epsilon}) + \epsilon^2 \cdot u^2(x, \frac{x}{\epsilon}) + \dots \quad (1.2)$$

On introduit alors deux variables l'une x , qui prend en compte les effets à large échelle et l'autre $x/\epsilon = y$ prend en compte les effets à faible distance.

Ici $u^i(x, y)$ est Y -périodique en y , $\forall i$ et K^ϵ est uniformément elliptique de la même forme :

$$K^\epsilon(x) = K(x, \frac{x}{\epsilon}),$$

telle que $K(x, y)$ soit périodique en y appartenant à une cellule. Pour simplifier on pourra supposer que $K(x, y)$ est indépendant de x et de la forme :

$$K(y) = K_1 \cdot \mathbb{1}_{y \in T} + K_0 \cdot \mathbb{1}_{y \notin T},$$

où Γ représente le trou dans une cellule avec $K_1 \ll K_0$. Ici K_0 est le coefficient de conductivité thermique dans la matière et $K_1 = 0$ est celui dans le vide ¹).

La dérivée d'une fonction de type double échelle, *i.e* $v^i(x) = u(x, \frac{x}{\varepsilon})$ s'écrit comme suit :

$$\partial_x v^i(x) = \partial_x u^i(x) + \frac{1}{\varepsilon} \partial_y v^i(x).$$

Avec ces hypothèses l'équation (1.1) s'écrit :

$$\rho C \partial_t u^\varepsilon(x) - \nabla_x \left(K \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \cdot \nabla_x u^\varepsilon(x) \right) = f.$$

En injectant le développement (1.2) dans cette équation on obtient :

$$\begin{aligned} \rho C \partial_t u^\varepsilon(x) - (\nabla_x K^\varepsilon) [\nabla_x u^0 + \frac{1}{\varepsilon} \nabla_y u^0 + \varepsilon \nabla_x u^1 + \nabla_y u^1 + \varepsilon^2 \nabla_x u^2 + \varepsilon \nabla_y u^2 + \dots] - \\ - K^\varepsilon \cdot \nabla_x [\nabla_x u^0 + \frac{1}{\varepsilon} \nabla_y u^0 + \varepsilon \nabla_x u^1 + \nabla_y u^1 + \varepsilon^2 \nabla_x u^2 + \varepsilon \nabla_y u^2 + \dots] = f. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho C \partial_t u^\varepsilon(x) - \frac{1}{\varepsilon} (\nabla_y K) [\nabla_x u^0 + \frac{1}{\varepsilon} \nabla_y u^0 + \varepsilon \nabla_x u^1 + \nabla_y u^1 + \varepsilon^2 \nabla_x u^2 + \varepsilon \nabla_y u^2 + \dots] - K [\nabla_{xx}^2 u^0 + \\ + \frac{2}{\varepsilon} \nabla_{xy}^2 u^0 + \frac{1}{\varepsilon^2} \nabla_{yy}^2 u^0 + \varepsilon \nabla_{xx}^2 u^1 + 2 \nabla_{xy}^2 u^1 + \frac{1}{\varepsilon} \nabla_{yy}^2 u^1 + \varepsilon^2 \nabla_{xx}^2 u^2 + 2 \varepsilon \nabla_{xy}^2 u^2 + \nabla_{yy}^2 u^2 + \dots] = f. \end{aligned}$$

Puis on regroupe et identifie les termes de même degré de ε :

$$\begin{aligned} - \frac{1}{\varepsilon^2} [(\nabla_y K)(\nabla_y u^0) + K \nabla_{yy}^2 u^0] - \frac{1}{\varepsilon} [(\nabla_y K) \cdot \nabla_x u^0 + (\nabla_y K) \cdot \nabla_y u^1 + K(\nabla_{yy}^2 u^1 + 2 \nabla_{xy}^2 u^1)] - \\ - [-\rho C \partial_t u^0(x) + (\nabla_y K)(\nabla_x u^1 + \nabla_y u^2) + K(\nabla_{xx}^2 u^0 + 2 \nabla_{xy}^2 u^1 + \nabla_{yy}^2 u^2) + \dots] = f. \end{aligned}$$

Les termes en ε^{-2} peuvent s'écrire sous la forme :

$$\nabla_y (K(y) \nabla_y u^0(x, y)) = 0 \quad \begin{cases} \forall x \in \mathbb{R}^2 \\ y \in \text{cellule} + \text{condition périodique} \end{cases}$$

Ici x est un paramètre, donc pour tout x , c'est une équation elliptique en y . Ça implique que :

$$\int \nabla_y \cdot (K \nabla_y u^0) u^0 = 0.$$

Par intégration par parties (notant que les termes au bords de l'intégration s'annulent) on obtient :

¹Pour la partie numérique on va donner au K_1 une valeur presque nulle

$$\int (\nabla_y u^0)^T K (\nabla_y u^0) = 0.$$

Comme K est uniformément elliptique, on a :

$$\begin{aligned} 0 &\leq \int \alpha |\nabla_y u^0|^2 \leq \int (\nabla_y u^0)^T K (\nabla_y u^0) = 0 \quad \text{avec } \alpha > 0 \\ &\Rightarrow |\nabla_y u^0| = 0. \end{aligned}$$

Par conséquent, on trouve que u^0 ne dépend pas de y et on peut éliminer les termes en $\nabla_y u^0$.

On identifie alors les termes en ε^{-1} en tenant compte du fait que u^0 ne dépend pas de y :

$$\begin{aligned} (\nabla_y K) \cdot \nabla_x u^0 + (\nabla_y K) \cdot \nabla_y u^1 + K \nabla_{yy}^2 u^1 + K 2 \nabla_{xy}^2 u^0 &= 0 \\ -\nabla_y \cdot (K \nabla_y u^1) &= (\nabla_y K) \cdot (\nabla_x u^0). \end{aligned}$$

C'est une équation elliptique dont le second membre est linéaire en $\nabla_x u^0$, on peut alors la résoudre par linéarité et obtenir le premier ordre u^1 en décomposant $\nabla_x u^0$ sur une base $\{\vec{e}_j\}$ et en calculant des solutions de cette base. On a :

$$\nabla_x u^0 = \sum_j \partial_{x_j} u^0 \cdot \vec{e}_j.$$

Alors on obtient l'équation suivante :

$$-\nabla_y \cdot (K \nabla_y u^1) = \sum_j \partial_{x_j} u^0 [(\nabla_y K) \cdot (\vec{e}_j)].$$

On note χ_j la solution sur une cellule avec condition périodique des problèmes auxiliaires suivants :

$$-\nabla_y \cdot (K \nabla_y \chi_j) = (\nabla_y K) \cdot (\vec{e}_j), \quad j = 1, 2. \tag{1.3}$$

Alors par linéarité on obtient :

$$u^1 = \sum_j \partial_{x_j} u^0 \cdot \chi_j,$$

et on peut réécrire cette relation sous la forme suivante :

$$u^1 = \chi \cdot \nabla_x u^0.$$

Enfin, nous allons considérer les termes en ε^0 :

$$\begin{aligned} \rho C \partial_t u^0(x) - (\nabla_y K)(\nabla_x u^1 + \nabla_y u^2) - K(\nabla_{xx}^2 u^0 + 2\nabla_{xy}^2 u^1 + \nabla_{yy}^2 u^2) &= f \\ \iff \rho C \partial_t u^0(x) - [(\nabla_y K)\nabla_x u^1 + K\nabla_{xy}^2 u^1] - K(\nabla_{xy}^2 u^1 + \nabla_{xx}^2 u^0) - [(\nabla_y K)\nabla_y u^2 + K\nabla_{yy}^2 u^2] &= f \\ \iff \rho C \partial_t u^0 - [\nabla_y(K\nabla_x u^1) + \nabla_y(K\nabla_y u^2) + K(\nabla_{xx}^2 u^0 + \nabla_{xy}^2 u^1)] &= f. \end{aligned}$$

En remplaçant u^1 par sa formule ci-dessus et notant que u^0 ne dépend pas de y (mais u^1 dépend de y car χ dépend de y), on obtient :

$$\begin{aligned} K(\nabla_{xy}^2 u^1 + \nabla_{xx}^2 u^0) &= K[\nabla_x(\nabla_y(\chi \cdot \nabla_x u^0)) + \nabla_{xx}^2 u^0] \\ &= K[\nabla_x(\nabla_y \chi \cdot \nabla_x u^0) + \nabla_{xx}^2 u^0] \quad (\text{car } \nabla_{xy}^2 u^0 = 0) \\ &= \nabla_x[(K\nabla_y \chi \cdot \nabla_x u^0) + (K\nabla_x u^0)] \quad (\text{car } K \text{ ne dépend pas de } y) \\ &= \nabla_x(K(Id + \nabla_y \cdot \chi) \cdot \nabla_x u^0). \end{aligned}$$

Alors,

$$\rho C \partial_t u^0 - [\nabla_y(K\nabla_x u^1) + \nabla_y(K\nabla_y u^2) + \nabla_x(K(Id + \nabla_y \cdot \chi) \cdot \nabla_x u^0)] = f.$$

En prenant la moyenne sur une cellule périodique, les termes $\nabla_y(K\nabla_x u^1)$ et $\nabla_y(K\nabla_y u^2)$ vont disparaître grâce aux la conditions périodiques et et il vient :

$$\rho C \partial_t u^0 - \nabla_x(\overline{K(Id + \nabla_y \cdot \chi)} \cdot \nabla_x u^0) = \bar{f}. \quad (1.4)$$

Remarque 1.1

. Les équations sont du même type avec $\lambda \rho C u$ au lieu de $\rho C \partial_t u$ (le terme $\partial_t u$ disparaît dans le cas stationnaire) . Donc pour résoudre le problème homogénéisé il nous faut :

1. Calculer χ (i.e résoudre le problème auxiliaire (1.3) sur une cellule)
2. Calculer u^0 (i.e résoudre le problème macroscopique (1.4))

. Les trous (microscopiques) ont un effet déterminant sur la solution (macroscopique) puisque le coefficient de conductivité thermique K est modifié par le terme χ qui est du même ordre de grandeur.

1.2 Étude numérique du problème auxiliaire/microscopique

Dans cette section nous allons utiliser le logiciel **FreeFem++** pour générer la solution χ du problème microscopique afin de calculer la matrice de conductivité effective du problème macroscopique :

$$\widehat{K} = \frac{1}{S_C} \int_C K(y)(Id + \nabla_y \cdot \chi) dy,$$

où S_C est la surface de cellule.

FreeFem++ [5] est un logiciel qui permet de résoudre les équations aux dérivées partielles avec des conditions aux bords (des conditions de type périodique et Neumann pour nos problèmes) en utilisant la méthode des éléments finis. Dans notre cas le trou est circulaire et on a deux approches du problème auxiliaire.

- Pour la première approche, on donne au coefficient de conductivité thermique deux valeurs, celle du matériau en dehors des trous et 0 dans les trous. On considère donc la fonction $K^\varepsilon(x)$ comme suit :

$$K^\varepsilon(x) = \begin{cases} K_1 & \text{en dehors du trou,} \\ K_2 & \text{dans le trou.} \end{cases}$$

Et l'on résout le problème macroscopique avec des conditions périodiques aux bords de la cellule.

- Pour la deuxième approche, la fonction $K^\varepsilon(x)$ n'est définie qu'en dehors du trou, elle vaut K_1 et on impose la condition de Neumann au bord du trou (et les conditions périodiques aux bords de la cellule)

$$\nabla_y \chi \cdot \nu = \nu \quad \text{au bord du trou.}$$

Les résultats obtenus pour une cellule carré de longueur unité percé par un trou centré de rayon 0.5 pour les deux approches sont reportés figures 1.2. Les courbes d'isovaleurs de χ sont identiques en dehors du trou validant l'équivalence des deux approches.

Après avoir obtenu la solution χ , on peut calculer la matrice de conductivité effective \widehat{K} . Elle est de la forme :

$$\widehat{K} = \begin{pmatrix} \widetilde{K} & 0 \\ 0 & \widetilde{K} \end{pmatrix} = \widetilde{K} \cdot Id,$$

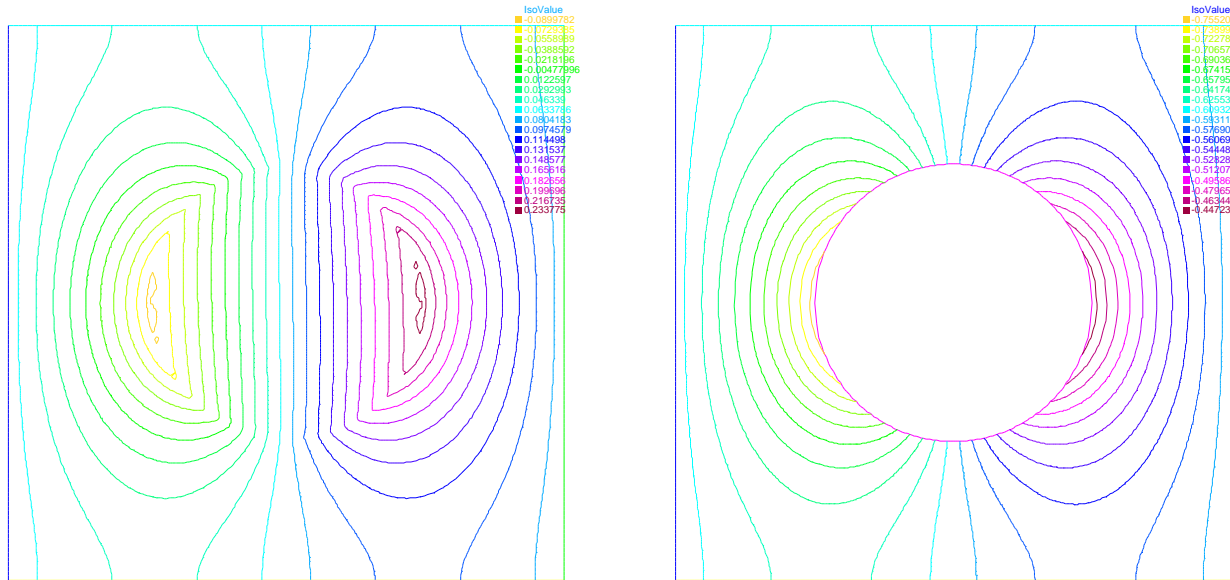
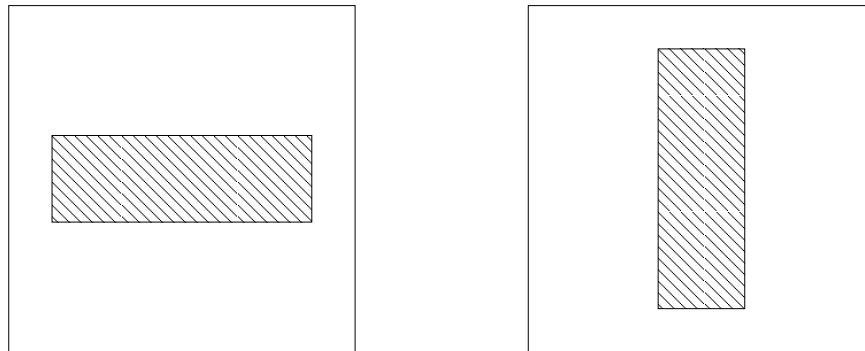


FIG. 1.2. Courbes d'isovaleurs de χ_1 pour un cellule comportant un trou central. À gauche K prend 2 valeurs, dont 0 dans le trou, à droite la présence du trou est donnée par les conditions aux limites (Neumann).

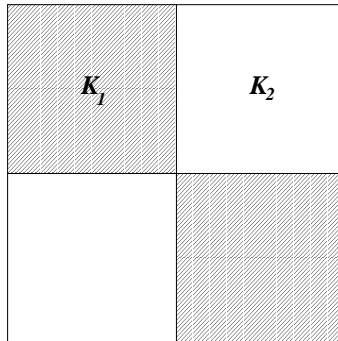
où \tilde{K} est une constante. Si on fait bouger le trou dans la cellule, la matrice \hat{K} ne change pas. Notons que cette matrice est bien symétrique grâce à la symétrie géométrique de trou. En effet, si on remplace un trou circulaire par un trou rectangulaire, alors la matrice \hat{K} n'est plus de la forme $\tilde{K}.Id$, elle sera écrite :

$$\hat{K} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} \quad \hat{K} = \begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & a \end{pmatrix}$$



les deux valeurs a , b de diagonal de la matrice $\tilde{K}.Id$ sont permutés, ça correspondant avec la rotation du trou dans la cellule. Enfin, pour valider les calculs numériques de la matrice de conductivité effective on va essayer de résoudre le problème auxiliaire pour le cas où la cellule a la structure

échiquier, elle est constituée de 4 carrés élémentaires comme suit :



Dans ce cas le coefficient homogénéisé est égale à la moyenne géométrique de K_1 et K_2 :

$$\tilde{K} = \sqrt{K_1 K_2},$$

(voir l'article [1]). Les résultats numériques que nous obtenons sont :

K_1	K_2	\tilde{K}
1	1	1
1	4	1.99878
1	9	3.0501
4	16	7.99552
4	25	10.0402

Revenons maintenant au cas le trou est de forme circulaire, la valeur \tilde{K} en fonction du rayon r est donné figure 1.3. Pour $r = 0$, le coefficient de conductivité est celui du matériau plein (normalisé ici à 1), pour $r = 0.5$, les disques de 2 cellules contiguës se touchent, le coefficient de conductivité est nul, comme on peut s'y attendre. Entre ces deux valeurs, le coefficient de conductivité varie de façon monotone. Dans le cas du masque de téléviseur, le rayon r du trou varie entre 0.2 et 0.4.

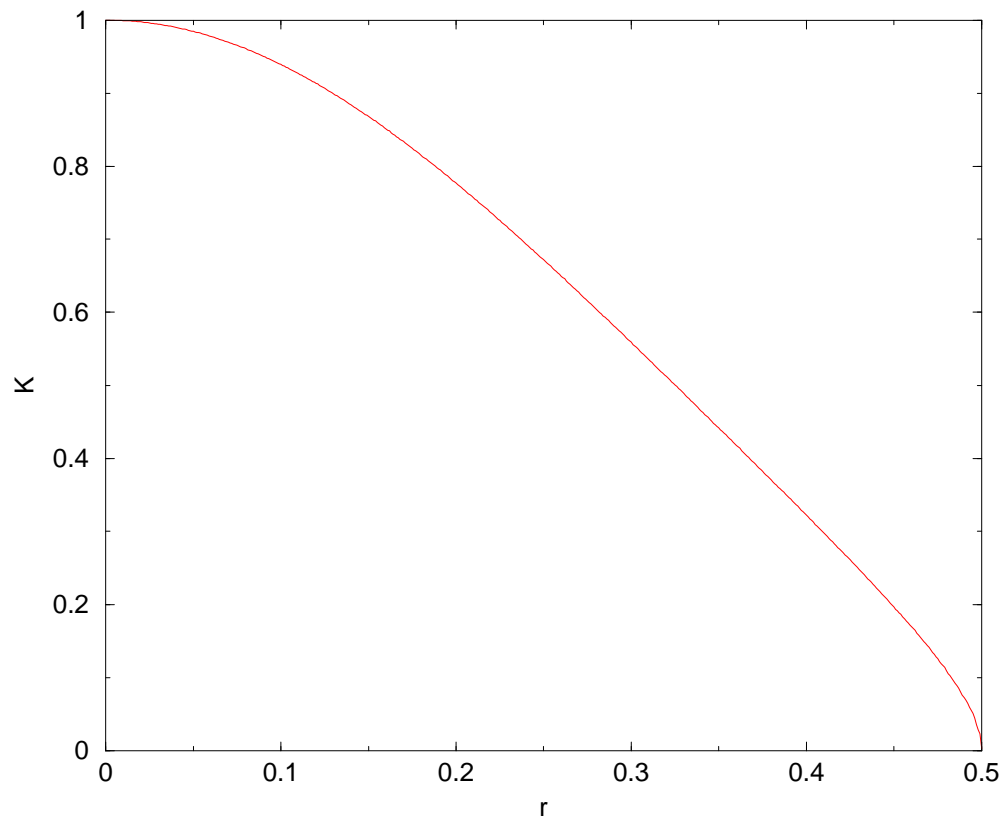


FIG. 1.3. Valeur du coefficient de conductivité moyen \tilde{K} en fonction du rayon r du trou percé dans une cellule carré de longueur unité.

Chapitre 2

PROBLÈME HOMOGENÉISÉ–MACROSCOPIQUE 2D

La technique d’homogénéisation de la section précédente permet de prendre en compte la diffusion de la température sur la taille de la cellule en supposant, ce qui est le cas, que la structure est périodique. En prenant en compte les coefficients de diffusion effectif déduit de cette étude, il reste donc à étudier la propagation de la chaleur à l’échelle du masque.

2.1 Équation de la chaleur, description des termes

L’équation à résoudre est celle qui régit la diffusion de la chaleur à savoir

$$\frac{\partial \rho_E(\vec{r}, t)}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot \kappa(\vec{r}, t) \vec{\nabla} T(\vec{r}, t) = g(\vec{r}, t), \quad (2.1)$$

où $\rho_E(\vec{r}, t)$ est une densité volumique d’énergie, $\kappa(\vec{r}, t)$ la conductivité thermique, ici prise comme une matrice diagonale pour tenir compte de l’hétérogénéité des matériaux, $g(\vec{r}, t)$ la source de chaleur, ici le faisceau électronique qui dépose son énergie sur l’une des surfaces du masque et ce sur une profondeur qui dépend du matériau mais qui ici sera faible comparée à l’épaisseur du masque (typiquement le 1/100 de l’épaisseur du masque).

Il faut adjoindre à l’équation (2.1) les conditions aux limites :

$$\vec{\nabla}_{\vec{n}} T(\vec{r}, t) = \varepsilon \sigma (T^4(\vec{r}, t) - T_{ext}^4), \quad (2.2)$$

qui indique que la perte d’énergie sur les bords est due à des phénomènes de radiation.

2.1.1 Dépôt de la chaleur

Le faisceau balaye le masque avec une fréquence de $f_0 = 100$ Hz. Chaque pixel est donc visité tous les 1/100 seconde. Aussi, en supposant que le temps Δt de l’éclairement d’un pixel est instantané,

$$g(\vec{r}, t) = \Delta t g_0 \delta(t - t_0(\vec{r})), \quad (2.3)$$

où g_0 est le flux d’énergie reçue par le pixel. En écrivant l’énergie ΔE déposée par le faisceau pendant le temps Δt sur un pixel de surface ΔS et sur une profondeur δ , on a

$$\Delta E = W \Delta t = U \Delta Q, \quad (2.4)$$

où ΔQ est la quantité de charges déposée pendant le temps Δt et U la différence de potentiel sous laquelle les charges sont accélérées. Aussi la puissance W s'écrit (dans la limite $\Delta t \rightarrow 0$) :

$$W = UI. \quad (2.5)$$

La puissance par unité de volume est alors

$$g_0 = \frac{UI}{\Delta S \delta}. \quad (2.6)$$

Chaque pixel est éclairé tous les 1/100 seconde, temps qui est grand par rapport aux constantes de temps thermiques des matériaux mis en jeu (typiquement la centaine de seconde (voir partie suivante et [10])). Ainsi l'excitation est lissée par le masque et l'on peut considérer que chaque pixel reçoit en moyenne une puissance volumique donnée par

$$\langle g \rangle = \frac{UI}{\Delta S \delta} f_0 \Delta t, \quad (2.7)$$

compte-tenu de

$$\frac{\Delta S}{\Delta t} = f_0 S, \quad (2.8)$$

on a finalement l'excitation moyenne suivante :

$$\langle g \rangle = \frac{UI}{S \delta}. \quad (2.9)$$

Le dépôt d'énergie est considéré donc comme permanent (ou stationnaire) sur l'ensemble de la surface éclairée (soumise au flux d'électrons), le balayage n'est pas pris en compte. Cette excitation moyenne fait intervenir la surface totale du masque et non la surface éclairée. Cela est dû au fait qu'une portion du masque est explorée tous les périodes T .

Dans un premier temps, seule la recherche de solution stationnaire est menée. L'étude de la réponse temporelle d'un masque initialement froid à une excitation de type échelon est donnée dans un deuxième temps.

2.2 Le problème plan stationnaire

Dans cette partie nous avons fait une simplification du problème stationnaire tridimensionnel en un problème stationnaire bidimensionnel en intégrant l'équation de la chaleur suivant l'axe z avec $z \in [0, \alpha]$, où α est l'épaisseur du masque. On obtient :

$$\begin{cases} -K\Delta T = g - CT^4 + \frac{1}{\alpha}\sigma\varepsilon_\alpha T_\alpha^4 + \frac{1}{\alpha}\sigma\varepsilon_0 T_0^4, \\ \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \quad \text{au bord du masque,} \end{cases} \quad (2.10)$$

où $C = \frac{1}{\alpha}\sigma(\varepsilon_0 + \varepsilon_\alpha)$, $g = \langle g \rangle .g(x, y)$ ici $g(x, y)$ est le profil de dépôt d'énergie qui dépend de l'image affichée sur l'écran à valeur dans $[0,1]$ et T_0, T_α représentent respectivement les températures extérieures du côté du canon à électrons et du côté de l'écran. Le masque est considéré comme un plan dont la conductivité est celle du Fer. Nous résoudrons ce problème stationnaire 2D afin de déterminer numériquement le paramètre ε et retrouver les résultats trouvés par Philips qui eux ont estimé un même paramètre par une étude de facteur de forme du masque tenant compte de son environnement.

2.2.1 Méthode itérative

Notons que le problème plan (2.10) n'est pas linéaire. Afin de le traiter numériquement, nous proposons le schéma itératif suivant :

1. Initialement on choisit une température $T^0 = T_0$ où T_0 est la température extérieure.
2. À l'itération k , T^k est connu. On cherche $T^{k+\frac{1}{2}}$ comme solution du problème linéarisé :

$$-K\Delta T^{k+\frac{1}{2}} = g + \frac{1}{\alpha}\sigma\varepsilon_\alpha T_\alpha^4 + \frac{1}{\alpha}\sigma\varepsilon_0 T_0^4 - C[4(T^k)^3.T^{k+\frac{1}{2}} - 3(T^k)^4].$$

3. On pose

$$T^{k+1} = \theta T^{k+\frac{1}{2}} + (1 - \theta)T^k \quad \text{avec } \theta < 1.$$

4. Si $T^k \rightarrow \bar{T}$, \bar{T} est la solution de (2.10), sinon on revient à la deuxième étape.

2.2.2 Adimensionnement

On introduit les variables sans dimensions suivantes :

- . $\hat{T} = T/T_1$, où T/T_1 est une température de référence,
- . $\hat{x} = x/L$, L la taille du masque simulé, de même $\hat{y} = y/L$,
- . $\hat{K} = \frac{K}{K_{fer}}$,
- . $\hat{g} = \frac{\langle g \rangle L^2}{T_1 K_{fer}} g(x, y)$,

$$\widehat{C} = \frac{L^2 \sigma T_1^3 (\varepsilon_0 + \varepsilon_\alpha)}{\alpha K_{fer}},$$

$$\widehat{C}_1 = \frac{L^2 \sigma}{\alpha K_{fer} T_1} (\varepsilon_\alpha T_\alpha^4 + \varepsilon_0 T_0^4).$$

L'équation adimensionnée s'écrit :

$$-\widehat{K} \Delta \widehat{T} = \widehat{g} - \widehat{C} \widehat{T}^4 + \widehat{C}_1.$$

2.2.3 Résultats numériques

Le tableau 7.1 reprend les données numériques utilisées pour le problème plan. Ces données sont pour la plupart issues d'un rapport Philips [9] :

notation	description	valeur
U	Tension d'accélération	30000 V
I	Courant du faisceau	4 mA
L	Taille du masque	50 cm
α	Épaisseur du masque	200 μm
K_{Fe}	Coefficient de conductivité thermique du Fer	55 $W.m^{-1}K^{-1}$
σ	Constante de Stefan-Boltzman	5.71 $10^{-8} W.K^{-4}.m^{-2}$
ε_0	Émissivité côté du champ magnétique	0.7
ε_α	Émissivité côté de l'écran	0.7
T_0	Température côté du champ	308° K
T_α	Température côté de l'écran	298° K

TAB. 2.1. Données numériques pour le problème plan.

Les solutions numériques du problème stationnaire sont cherchées dans le cas où l'énergie est déposée sur une zone carrée de dimension $10\text{ cm} * 10\text{ cm}$ située près d'un bord du masque (le carré a pour centre $(x, y) = (\frac{2}{3} * L, \frac{1}{2} * L)$). Cette situation correspond à l'un des cas tests utilisé par Philips car permettant de mettre en évidence le Domming. En effet, l'énergie est déposée sur une zone où la courbure du masque est importante, aussi la déformation, proportionnelle à cette courbure, en sera accentuée. Notons ici que le problème est plan et que, par conséquent, la courbure du masque n'a pas été prise en compte. Cela n'aurait d'ailleurs que peu de conséquences sur les profils thermiques recherchés.

Nous considérons un masque comportant des trous circulaires de rayon $r \simeq 0.3 l_C$ où l_C est la taille d'une cellule. Avec cette valeur, la valeur de coefficient de conductivité thermique effectif calculé dans la partie d'homogénéisation est $\widehat{K}_{eff} \simeq 0.5 K$. Le résultat obtenu est donné par la figure 2.2.

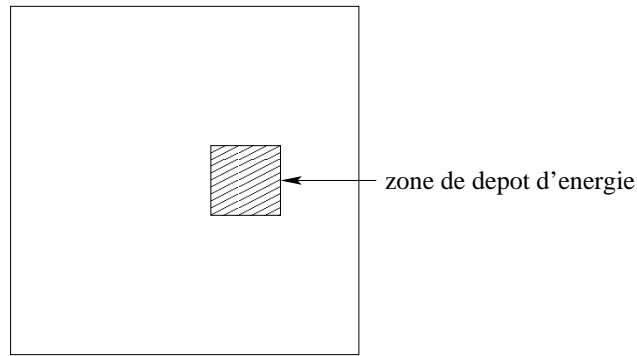


FIG. 2.1. La partie hachurée représente la zone de dépôt d'énergie pour le cas test considéré.

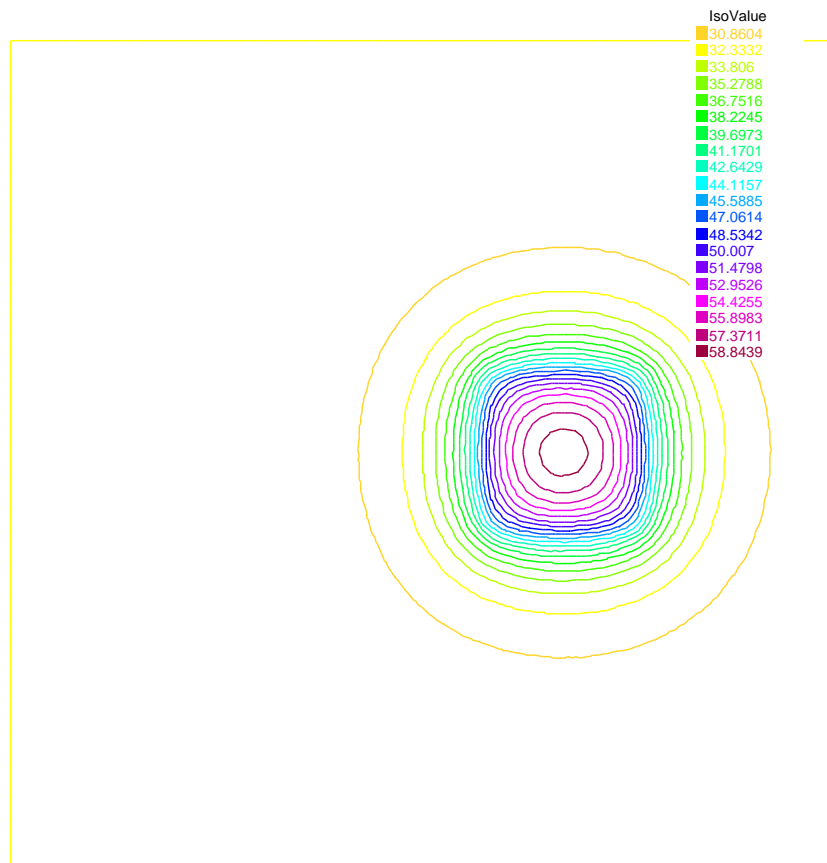


FIG. 2.2. Solution stationnaire avec $\widehat{K}_{eff} \simeq 0.5 * \widehat{K}_{Fe}$ et $\varepsilon = 0.7$, courbes d'isovaleurs de la température du masque.

La valeur maximale de la température de $T_{max} = 59^{\circ}C$ est plus petite que celle trouvée par Philips. Pour l'augmenter, nous avons 2 paramètres à notre disposition, soit nous diminuons la conductivité thermique du matériau, soit nous diminuons la perte d'énergie par radiation en diminuant ε . Le coefficient de conductivité thermique est une donnée ²qui dépend du matériau lui-même et non de

²Il est à noter que nous adoptons la valeur d'un matériau massif. La valeur pour des couches minces n'est pas

sa forme ni de son environnement. Pour obtenir la même valeur maximale de la température que celle donnée par Philips (environ de 70°C à 80°C), nous avons pris $\varepsilon = 0.4$ au lieu de $\varepsilon = 0.7$ comme dans le tableau des données numériques précédent. Le résultat obtenu est donné par la figure 2.3. Notons que la condition de bords $\frac{\partial T}{\partial n} = 0$ impose que les lignes d'isotempérature leurs soient perpendiculaires. Les courbes d'isovaleurs de la figure 2.3 respectent cette condition indiquant que la grille est suffisamment fine. Ce sera par la suite l'un des critères du choix de la grille.

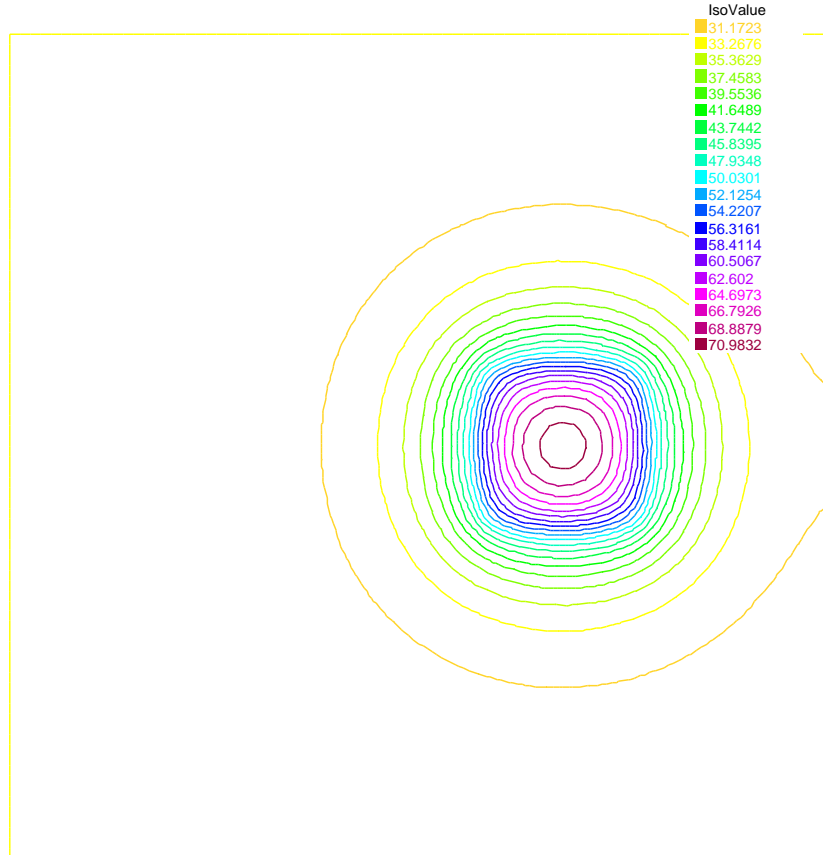


FIG. 2.3. Solution du problème bidimensionnel stationnaire avec $\widehat{K}_{eff} \simeq 0.5 * \widehat{K}_{Fe}$ et $\varepsilon = 0.4$.

Si, de plus, nous prenons en compte la rétrodiffusion des électrons par l'Invar (la valeur du coefficient de rétrodiffusion β vaut 0.45, donnée Philips [9]), l'apport d'énergie sur le masque est plus faible, aussi il faudra baisser la perte d'énergie et donc diminuer ε pour conserver une valeur de la température maximale autour de 70° . Les calculs numériques donnent une température maximale de 71°C pour ε réglée à 0.14 (cf. figure 2.4). Notons que cette valeur est proche d'une donnée Philips ($\simeq 0.16$). Ce coefficient tient compte de l'environnement du masque qui, soumis au rayonnement, rayonne à son tour et renvoie au masque une partie d'énergie. Aussi le processus d'évacuation de

connue et il est possible qu'elle soit plus faible que celle du matériau massif []

l'énergie est moins efficace que si le masque était isolé (sans retour de rayonnement possible).

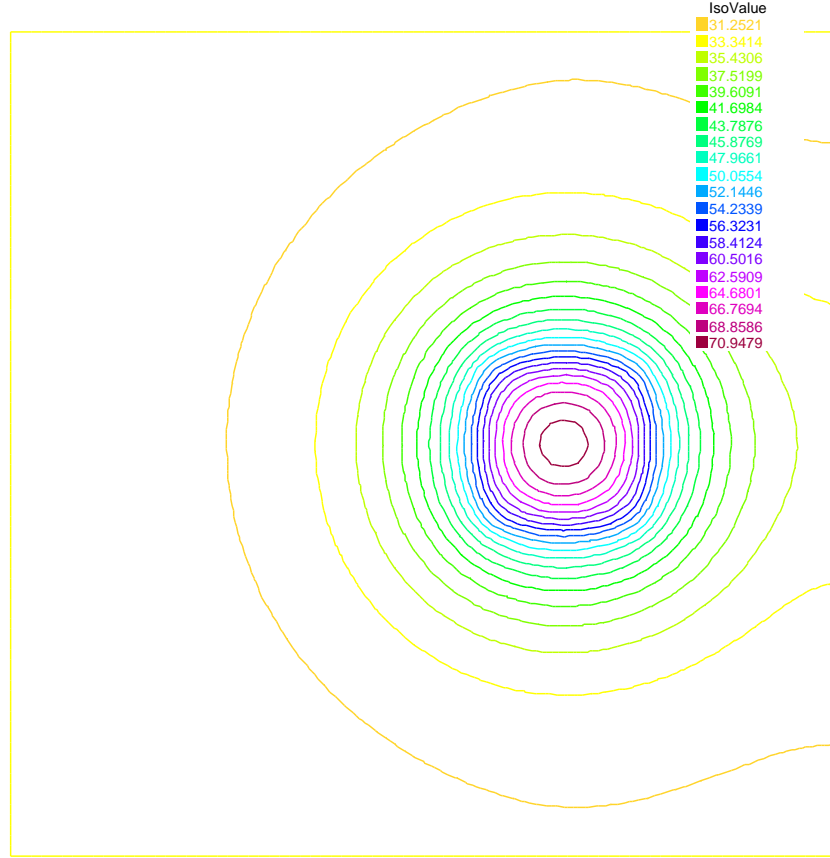


FIG. 2.4. Solution du problème bidimensionnel stationnaire avec $\widehat{K}_{eff} \simeq 0.5 * \widehat{K}_{Fe}$ et $\varepsilon = 0.14$.

2.3 Problème plan non stationnaire

Dans cette partie nous étudions le problème non stationnaire 2D :

$$\begin{cases} \rho C \frac{\partial T}{\partial t} - K \Delta T = f(T) & \text{où } f(T) = g - C_1 T^4 + \frac{1}{\alpha} \sigma \varepsilon_\alpha T_\alpha^4 + \frac{1}{\alpha} \sigma \varepsilon_0 T_0^4, \\ \frac{\partial T}{\partial n} = 0 & \text{au bord du masque,} \end{cases} \quad (2.11)$$

où ρ et C sont respectivement la densité volumique et la chaleur massique du matériau constituant le masque, $C_1 = \frac{1}{\alpha} \sigma (\varepsilon_0 + \varepsilon_\alpha)$.

Pour résoudre ce problème nous avons choisi le schéma implicite suivant :

1. On appelle T^0 la température du masque en $t = 0$.

2. On choisit un pas de temps Δt et on pose $t^n = n\Delta t$, on a alors

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T^{n+1} - T^n}{\delta t},$$

où T^n et T^{n+1} sont les températures aux temps t^n et t^{n+1} avec $t^{n+1} = t^n + \Delta t$.

3. On connaît T^n , alors T^{n+1} est la solution du problème de discrétisé :

$$\rho C \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} - K \Delta T^{n+1} = f(T^{n+1}),$$

$$\frac{\partial T^{n+1}}{\partial n} = 0 \quad \text{au bord du masque.}$$

Les variables sont adimensionnées comme pour le problème stationnaire, cependant pour ce problème d'évolution, il faut aussi adimensionner le temps :

$$\Delta \hat{t} = \frac{\Delta t \cdot K_{fer}}{\rho C L^2}.$$

On prend un pas de temps $\Delta t = 10s$, l'énergie est déposée de la même façon que pour le cas problème stationnaire. Les figures 2.5, 2.6, 2.7, 2.8 présentent l'évolution de la température du masque aux temps $t = 100s$, $t = 200s$, $t = 400s$ et $t = 600s$ respectivement.

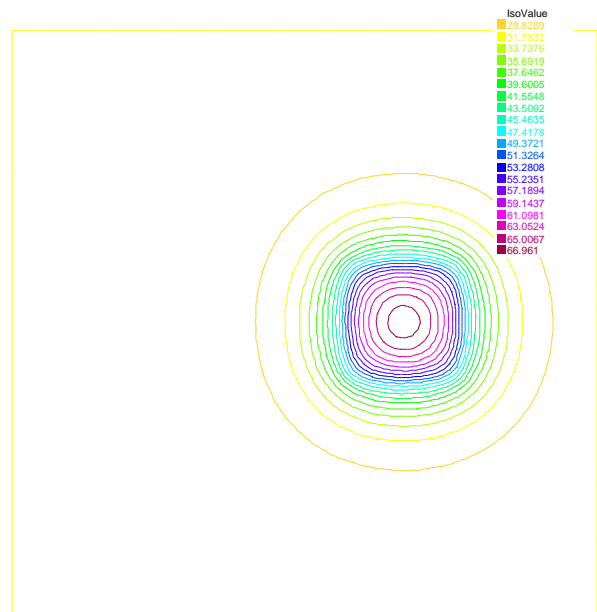
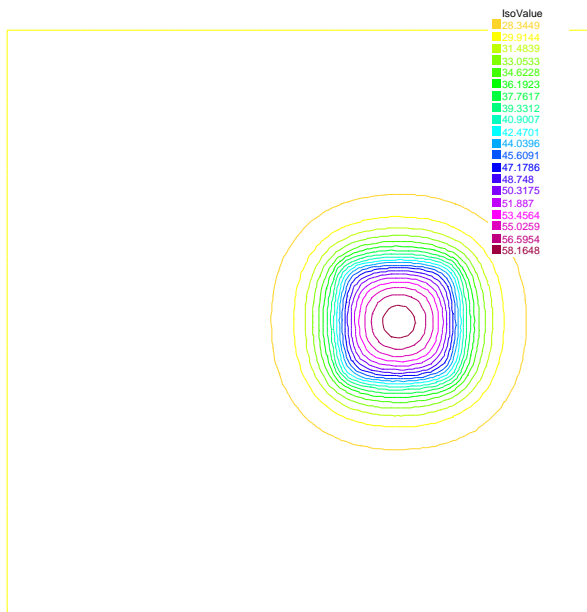


FIG. 2.5. Courbes d'isovaleur de la température à $t = 100s$.

FIG. 2.6. Courbes d'isovaleur de la température à $t = 200s$.

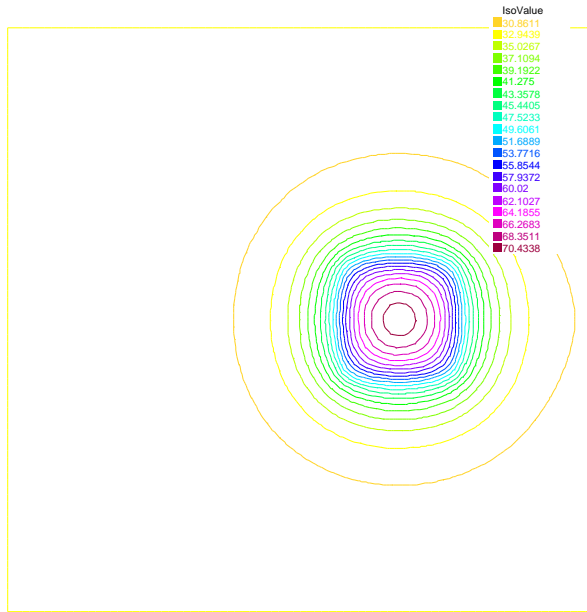


FIG. 2.7. Courbes d'isovaleur de la température à $t = 400$ s.

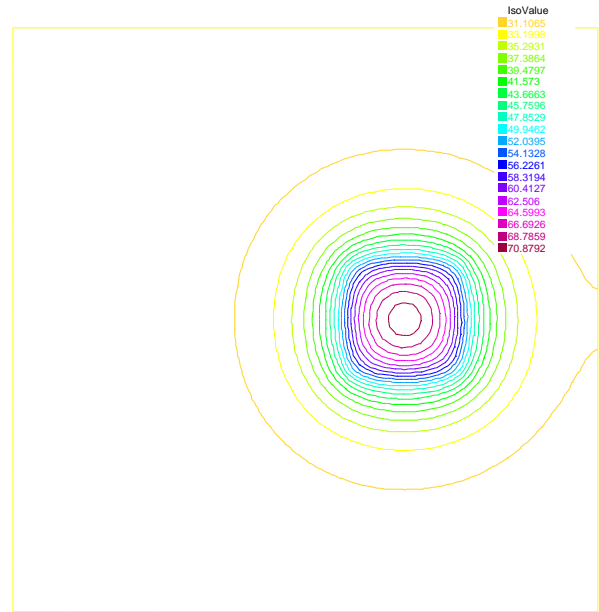


FIG. 2.8. Courbes d'isovaleur de la température à $t = 600$ s.

Il est aussi possible de suivre l'évolution de la température en fonction du temps en chaque point du masque. La figure 2.9 donne l'évolution temporelle de la température en 5 points du masque.

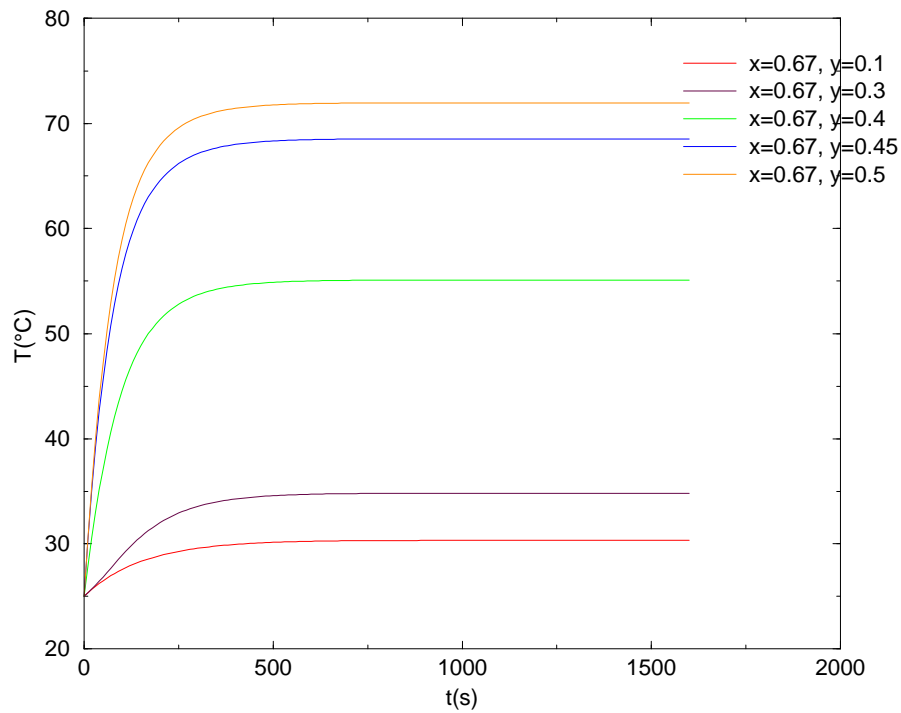


FIG. 2.9. Évolution temporelle de la température en 5 points (x, y) du masque. $(0, 0)$ est le point en bas à gauche, $(1, 1)$ repère le point en haut à droite du masque

Les courbes de la figure 2.9 font penser à celle obtenue par un système modélisé simplement par une capacité thermique et une résistance thermique et soumis à une brusque variation de température. La montée en température est alors donnée par :

$$T(t) = (T_\infty - T_0) \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right) + T_0, \quad (2.12)$$

où T_0 est la température en $t = 0$, et τ la constante de temps caractéristique du matériau (donnée par le produit résistance×capacité). La figure 2.10 illustre la façon de calculer les valeurs du temps de montée en température τ pour un point (x, y) sur le masque.

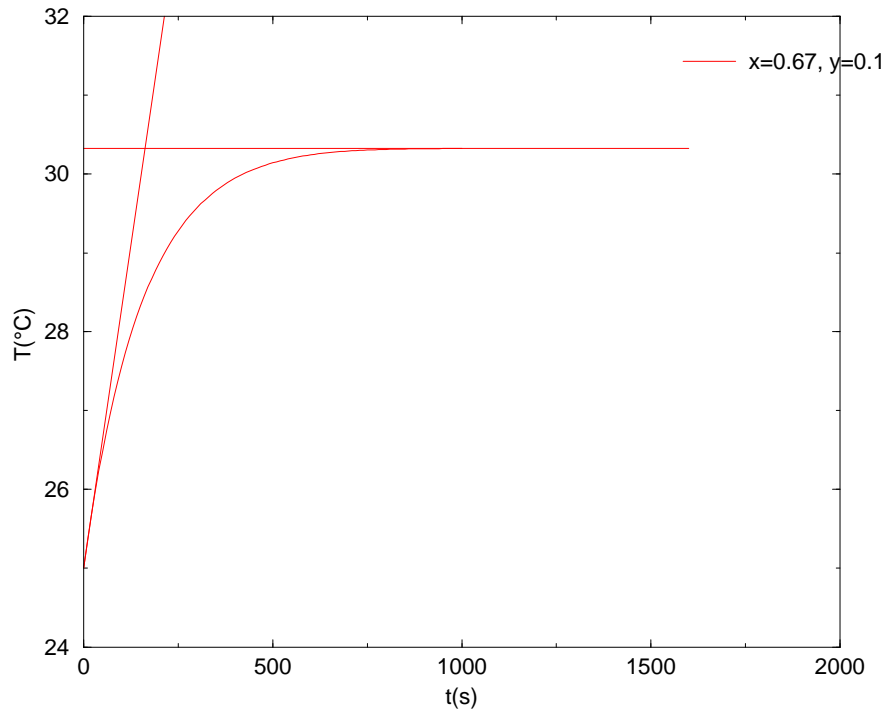


FIG. 2.10. Le temps caractéristique τ est calculé par le point d'intersection de deux tangentes à la courbe.

De fait, si on ajuste la valeur de τ qui s'accorde le mieux avec cette formule, on obtient les courbes de la figure 2.11. Les valeurs de τ adoptées pour la figure 2.11 sont : $\tau = 159$ s pour le point $(x, y) = (0.67, 0.1)$, $\tau = 101$ s pour le point $(0.67, 0.4)$, $\tau = 85$ s pour le point $(0.67, 0.5)$. Les courbes bleues pointillées sont les courbes recalculées avec la formule (2.12). Les valeurs du temps de montée τ trouvées en différents points sont tout-à-fait compatible avec celle expérimentalement obtenue par Philips qui est de l'ordre de $\tau \simeq 100$ s.

Le temps moyen de montée en température trouvé par les calculs numériques, de l'ordre de la centaine seconde est largement plus grande que le temps de balayage du faisceau d'électrons qui est

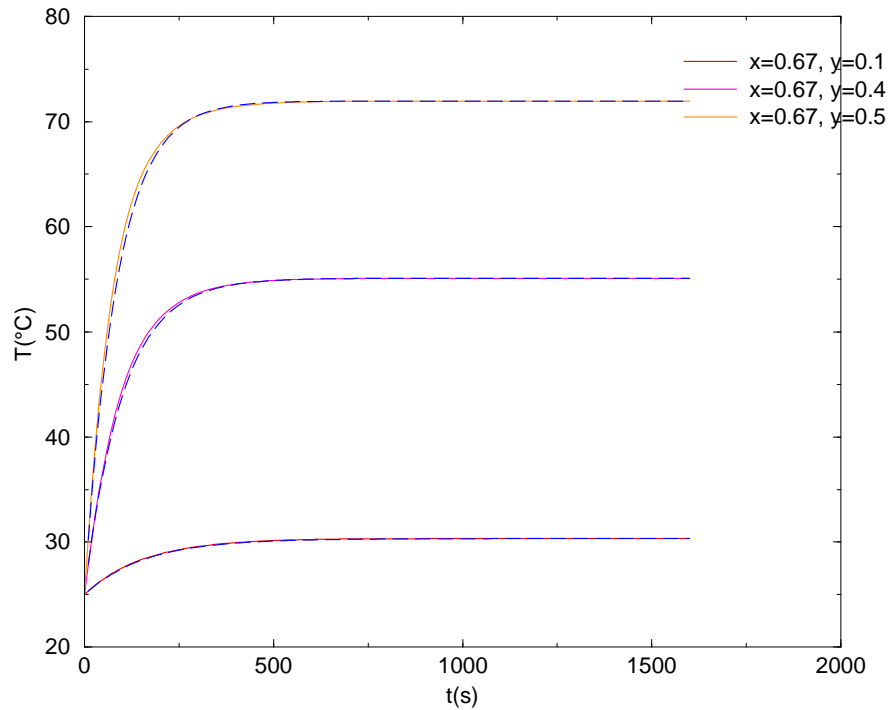


FIG. 2.11. Évolution temporelle de la température en 3 points (x, y) du masque donné par le modèle numérique en trait tireté. En trait plein, représentation de $T(t)$ donné par l'équation (2.12), avec $\tau = 159$ s pour le point $(x, y) = (0.67, 0.1)$, $\tau = 101$ s pour le point $(0.67, 0.4)$ et $\tau = 85$ s pour le point $(0.67, 0.5)$.

de 1/100 seconde. Par conséquent un pixel ne réagit que lentement par rapport au temps passé par le faisceau à l'éclairer. Cela justifie que le balayage du faisceau n'a été pris en compte que via une moyenne sur une période. Donc, désormais nous nous limitons à l'étude des problèmes stationnaires.

Chapitre 3

LE PROBLÈME CYLINDRIQUE

Afin de simplifier la géométrie, il est possible, maintenant que l'effet des trous est pris en charge par un coefficient de conductivité thermique effectif, de passer d'un problème à 3 dimensions à un problème cylindrique à symétrie angulaire. La portion de masque prise en compte sera alors un disque fin de rayon R et d'épaisseur $z = \alpha$. Dans cette géométrie, l'équation (2.1) s'écrit :

$$-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r K_r(z) \frac{\partial T(r, z)}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial z} K_z(z) \frac{\partial T(r, z)}{\partial z} = \langle g \rangle h(z). \quad (3.1)$$

Les coefficients de conductivité thermique K_r et K_z ne dépendent que de la profondeur z , ainsi que le dépôt d'énergie ($h(z) = 1$ pour $0 \leq z \leq \delta$ et $h(z) = 0$ sinon)

3.1 Adimensionnement

On introduit les variables sans dimensions suivantes :

- . $\hat{T} = T/T_0$, où T/T_0 est une température de référence,
- . $\hat{r} = r/R$, R rayon du masque simulé, de même $\hat{z} = z/R$,
- . $\hat{z} = z/R$,
- . $\hat{\kappa}_* = \kappa_*/\kappa_{Fe}$, avec les valeurs numériques des conductivités du cuivre, du tungstène et du fer, on a :
 - . $\hat{\kappa}_{cu} = 5$,
 - . $\hat{\kappa}_W = 2$,
 - . $\langle \hat{g} \rangle = \frac{\langle g \rangle R^2}{T_0 \kappa_{fer}}$,
 - . $\hat{\sigma}_* = \frac{\varepsilon_* \sigma R T_0^3}{\kappa_{fer}}$.

Les équations adimensionnées s'écrivent :

$$-\frac{1}{\hat{r}} \frac{\partial}{\partial \hat{r}} \hat{r} \hat{K}_r(\hat{z}) \frac{\partial \hat{T}(\hat{r}, \hat{z})}{\partial \hat{r}} - \frac{\partial}{\partial \hat{z}} \hat{K}_z(\hat{z}) \frac{\partial \hat{T}(\hat{r}, \hat{z})}{\partial \hat{z}} = \langle \hat{g} \rangle h(\hat{z}), \quad (3.2)$$

et

$$\pm \hat{K}_z(\hat{z}) \frac{\partial \hat{T}(\hat{r}, \hat{z})}{\partial \hat{z}} \Big|_{z=0, \alpha} = \hat{\sigma} (\hat{T}^4 - \hat{T}_{ei}^4). \quad (3.3)$$

3.2 Redimensionnement (Problème des couches minces)

L'un des problèmes numériques soulevés par cette étude est la grande diversité des échelles de longueur mises en jeu. Les dépôts de cuivre et tungstène sont de l'ordre de la centaine de nanomètre tandis que le substrat en fer a une épaisseur d'environ $200 \mu\text{m}$. Le rapport est d'environ 100. La dimension du masque est aussi de l'ordre de 500 fois supérieure à son épaisseur ($200 \mu\text{m}$ à comparer aux 10 cm des échantillons). Les trous ont aussi des dimensions 1000 fois plus petites que le masque, mais leur influence a été prise en compte par l'homogénéisation introduite dans le chapitre 1. Il n'est pas possible, sinon souhaitable, de simuler avec autant de précision le fer et les couches de tungstène et cuivre. On redimensionne donc l'échelle \hat{z} (pour le fer) en introduisant la nouvelle variable (on omet dorénavant les postiches)

$$\bar{z} = \alpha z.$$

On choisit de rendre l'équation de flux invariante par cette transformation, ainsi

$$-K_z \frac{dT}{dz} = J,$$

devient

$$-\alpha K_z \frac{dT}{d\bar{z}} = \bar{J},$$

qui reste invariante lorsque l'on introduit le coefficient de conductivité redimensionné

$$\bar{K}_z = \alpha K_z.$$

L'équation de la chaleur devient alors

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r K_r(\bar{z}) \frac{\partial T(r, \bar{z})}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \bar{K}_z(\bar{z}) \frac{\partial T(\bar{r}, \bar{z})}{\partial \bar{z}} = \langle g \rangle h(\bar{z}). \quad (3.4)$$

On introduit un coefficient de conductivité radial redimensionné

$$\bar{K}_r = \frac{K_r}{\alpha},$$

ainsi que la nouvelle source

$$\langle \bar{g} \rangle = \frac{\langle g \rangle}{\alpha}.$$

L'équation obtenue est alors invariante. Notons que cette transformation conserve le flux (l'équation de perte d'énergie par radiation sera alors elle aussi conservée sans autre modification), mais aussi

la puissance totale :

$$Q = \int_0^\delta \int_r < g > 2\pi r dr dz = \int_0^{\bar{\delta}} \int_r < \bar{g} > 2\pi r dr d\bar{z} = \bar{Q}.$$

Cette approche sera utilisée pour multiplier l'épaisseur des couches et du substrat par un facteur d'environ 50. Ce coefficient est une limite supérieure, car alors on reporte la disparité des échelles de longueur sur celle des coefficients de conductivité thermique. En effet les coefficients radiaux sont multipliés par le facteur d'échelle, les axiaux, eux, sont divisés.

3.3 Schéma numérique FREEFEM

FreeFem++ [5] est un logiciel qui permet de résoudre les équations aux dérivées partielles avec des conditions aux bords (des condition de type périodiques et Neumann pour nos problèmes) en utilisant la méthode des éléments finis [4].

3.3.1 Données numériques

Les données adoptées dans les simulations, reportées dans le tableau 3.1 sont pour la plupart issues d'un rapport Philips Eindhoven [9]. Les valeurs servant à la normalisation sont reportées dans le tableau 3.2.

variable	notation	valeur
Tension d'accélération	U	2500 V
courant du faisceau	I	90 μ A
rayon du masque	$R = R_0$	2 cm
épaisseur du substrat	h	200 μ m
épaisseur des totale des couches	δ	1 μ m
épaisseur des couches de tungstènes	δ_W	0.4 μ m
épaisseur de la couche de cuivre	δ_{Cu}	0.2 μ m
conductivité du fer	$\kappa_{Fe} = \kappa_0$	55 W/°Km
conductivité du cuivre	κ_{Cu}	275 W/°Km
conductivité du tungstène	κ_W	110 W/°Km
coefficient de radiation du fer	ε_{Fe}	0.7
coefficient de radiation du tungstène	ε_W	0.7
constante de Stefan	σ	5.71 10^{-8} W/°K ⁴ m ²

TAB. 3.1. Données numériques.

En adoptant les valeurs des tableaux 3.1 et 3.2, on obtient :

$$\bar{g} = 1.7,^3$$

³dans les simulations numériques, pour obtenir des température réalistes, on prendra le double de cette valeur. Il faut noter que le processus de dépôt de chaleur est ici décrit de façon grossière (en tout ou rien), la valeur numérique déduite peut, dans ces conditions, être un peu ajustée.

variable	notation	valeur
rayon du masque	R_0	2 cm
conductivité du fer	$\kappa_{Fe} = \kappa_0$	55 W/°Km
température de référence	T_0	596 °K

TAB. 3.2. Valeurs servant à la normalisation.

- . $\bar{\sigma} = 0.003$,
- . épaisseur du masque $\bar{\alpha} = 0.01$,
- . épaisseur des couches $\bar{\delta} = 0.0001$.

3.3.2 Résultats numériques

Dans la présente étude, nous voulons évaluer les modifications des effets thermiques dues au dépôt de couches minces sur un substrat de fer. Pour les mettre en évidence, seuls les effets purement thermiques seront pris en compte (diffusion et radiation), les autres effets et notamment celui de rétrodiffusion n'est pas introduit. Il n'est besoin que de signaler que ce dernier effet aura tendance à diminuer le dépôt de chaleur et donc à diminuer le domming. Ce dernier effet étant plus important avec le matériau multicouche, la couche superficielle de Tungstène ayant été choisie pour cette propriété.

L'effet des trous est pris en compte en prenant un coefficient effectif radial deux fois plus petit que celui du matériau plein. Cela correspond à un rapport rayon d'un trou/dimension d'une cellule de 0.3 (voir figure 1.3).

Les figures 3.1 et 3.2 montrent un résultat typique des courbes d'isotherme. Pour la représentation graphique, l'épaisseur a été multiplié par un coefficient 50 ce qui fait que les lignes sont très étirées et semblant quasi-verticale. Il existe en fait un gradient dans l'épaisseur du matériaux, mais il est très faible.

En supposant une face à température fixée, l'intégration (numérique) de l'équation (3.3) donne une variation de 10^{-4} °C. Le fer est assez bon conducteur et la plaque est fine. L'approche faite par Philips [9] pour un précédent calcul de domming, tirait parti de cette remarque pour envisager un calcul 2D selon la surface de la plaque. Ici, comme nous voulons voir l'effet des couches, il n'était pas possible de s'affranchir de la variable z .

Ces deux figures montrent que le gradient de température est principalement dans la direction radiale. L'effet des couches pour la figure 3.2 (délimité par le premier trait en bas) n'est pas très visible.

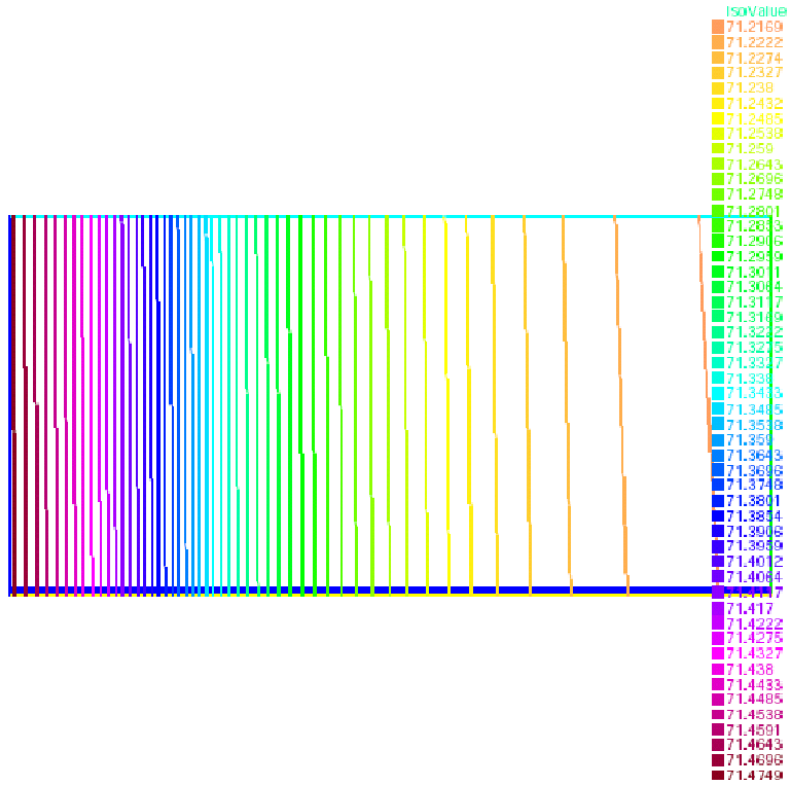


FIG. 3.1. Cas d'un masque en fer éclairé en son centre par un disque de rayon $0.2R_0$ avec la valeur $g_0 = 3.2$ et par $0.8 * a_0$ partout ailleurs

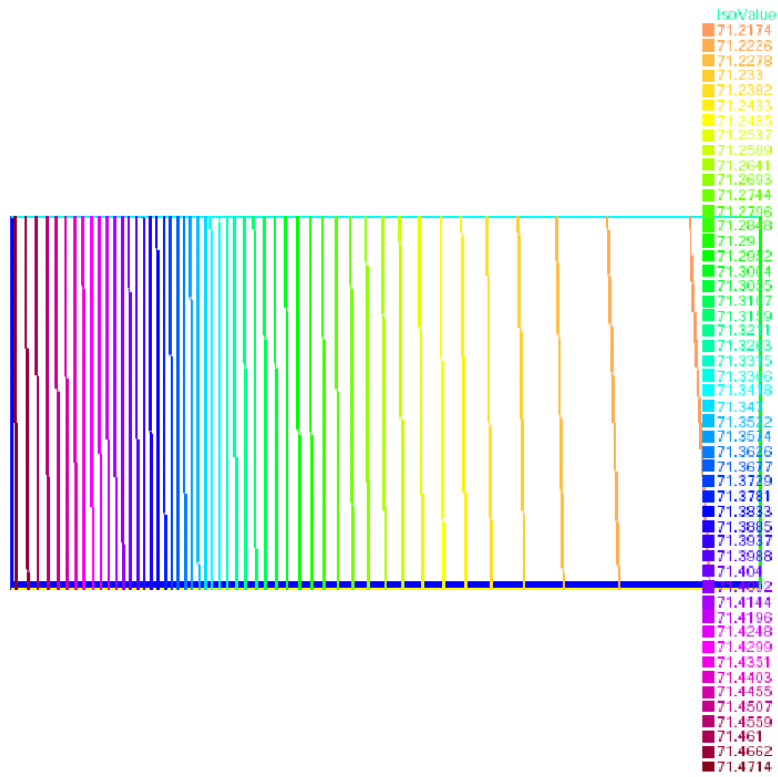


FIG. 3.2. Même dépôt d'énergie que pour la figure 3.1 mais pour un masque possédant trois couches (W-CU-W)

Les figures 3.3 et 3.4 suivantes donnent des coupes radiales de la température pour $z = .005$, soit au milieu de la couche de cuivre.

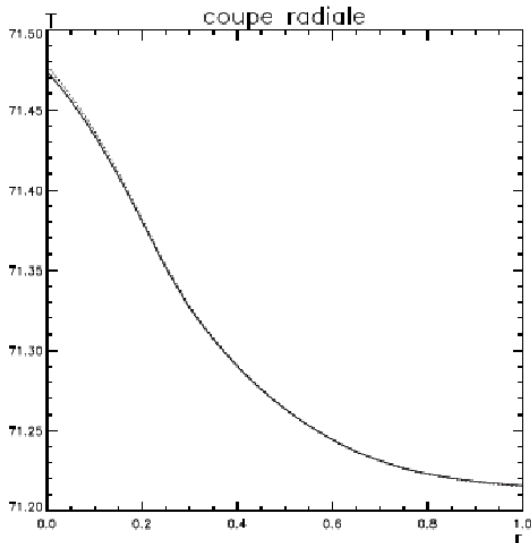


FIG. 3.3. Profil de température pour un masque en fer (courbe en pointillé) et avec revêtement (courbe continue). Le dépôt d'énergie est celui des figures 3.1 et 3.2

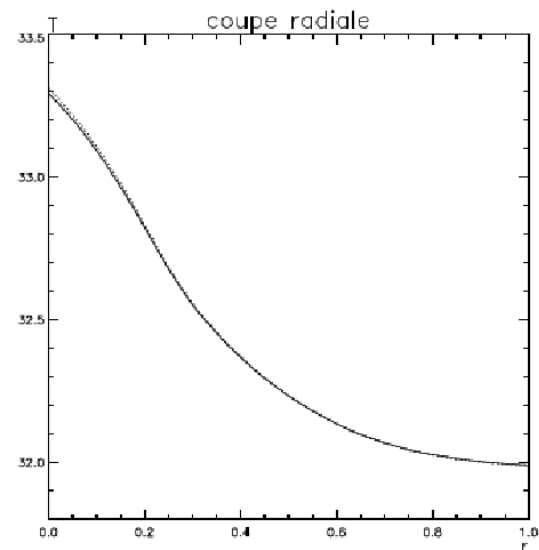


FIG. 3.4. Idem que pour la figure 3.3 mais le dépôt d'énergie n'est fait que sur le disque central de rayon $0.2R_0$.

Pour chacune de ces courbes l'effet des couches n'est pas flagrant. Il y a un effet systématique de réduction à la fois de la température et du gradient radial, mais il est très faible. D'autres coupes faites à différentes profondeurs donnent des résultats similaires.

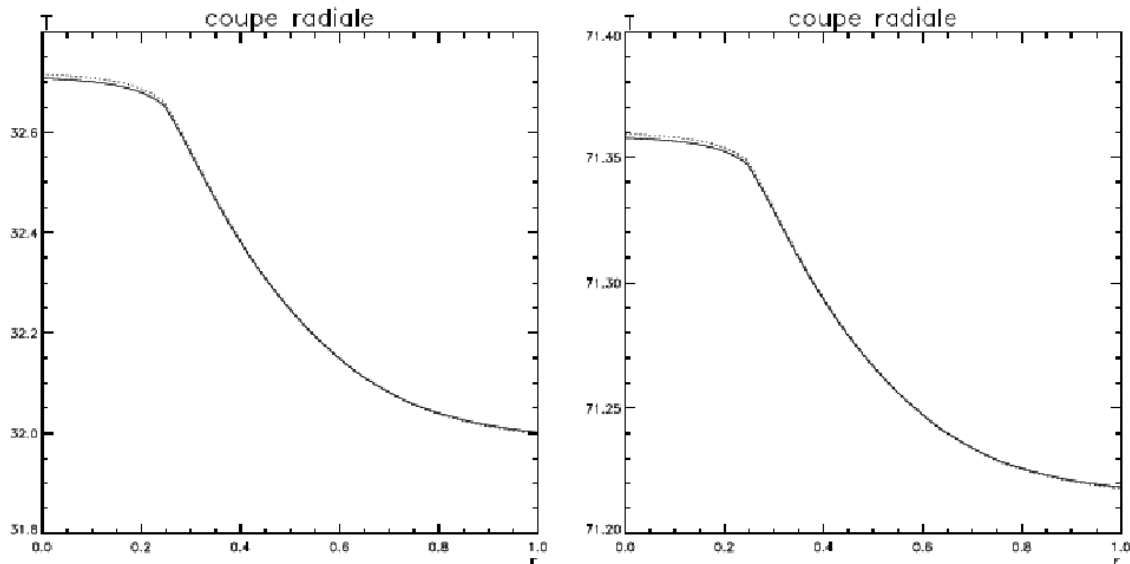


FIG. 3.5. Idem que pour la figure 3.3. A gauche le dépôt d'énergie de valeur g_0 est fait dans une couronne comprise entre $0.2R_0$ et $0.2\sqrt{2}R_0$ (rien ailleurs), a droite le dépôt d'énergie de valeur g_0 est fait dans une couronne comprise entre $0.2R_0$ et $0.2\sqrt{2}R_0$ et $0.8g_0$ ailleurs.

Chapitre 4

RÉSOLUTION DU PROBLÈME CYLINDRIQUE PAR LA MÉTHODE DES DIFFÉRENCES FINIES

Dans la partie précédente nous avons résolu le problème à symétrie cylindrique (SC) redimensionné par la méthode des éléments finis. L'épaisseur du masque est multiplié avec un facteur 50, cependant l'épaisseur total des couches reste encore extrêmement fine par rapport à ses dimensions latérales. L'effet thermique de la présence des couches de différents matériaux n'est pas flagrant, il nécessite de bien mailler le volume dans lequel les couches sont déposées suivant la direction de la variable z . Dans cette section, nous essayons de résoudre le problème (4.1) par la méthode des différences finies en utilisant un maillage adapté au cas qui nous concerne (multi-couches fines) et de comparer avec les résultats obtenus par la méthode des éléments finis.

$$\begin{cases} -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r K_r(z) \frac{\partial T(r,z)}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial z} K_z(z) \frac{\partial T(r,z)}{\partial z} = g(r, z), \\ \frac{\partial T(r,z)}{\partial r} \Big|_{r=0,R} = 0, \\ K_z(z) \frac{\partial T(r,z)}{\partial z} \Big|_{z=0} = \sigma(T^4 - T_{e1}^4), \\ K_z(z) \frac{\partial T(r,z)}{\partial z} \Big|_{z=h} = -\sigma(T^4 - T_{e2}^4). \end{cases} \quad (4.1)$$

4.1 Maillage

Nous voulons trouver la solution T du problème cylindrique (4.1) avec des conditions aux limites dans un domaine rectangulaire $\Omega = [0, R] \times [0, \alpha]$. Nous choisirons évidemment les directions orthogonales \vec{r} , \vec{z} . Nous discrétisons l'intervalle $[0, R]$ à l'aide de N_1 points intermédiaires tels que $0 = r_0 < r_1 < r_2, \dots, < r_{N_1} < r_{N_1+1} = R$ et l'intervalle $[0, \alpha]$ à l'aide de N_2 points intermédiaires tels que $0 = z_0 < z_1 < z_2, \dots, < z_{N_2} < z_{N_2+1} = \alpha$. Nous traçons alors un réseau de droites $r = r_i$ parallèles à l'axe de z , ainsi qu'un réseau de droites $z = z_j$ parallèles à l'axe de r . Les intersections de deux réseaux à l'intérieur du domaine Ω sont les points $M_{i,j}$ de coordonnées (r_i, z_j) . Ces points constituent un maillage de Ω . La figure 4.1 montre le maillage correspondant sur le domaine Ω et la numérotation des index i, j des points de grilles r, z respectivement.

Au lieu de chercher la solution T dans Ω vérifiant l'équation cylindrique (3.1) et des conditions aux limites, nous cherchons les valeurs approchées de la solution T aux seuls points $M_{i,j}$ du maillage. Pour cela, nous discrétisons cette équation grâce à la méthode des différences finies en faisant intervenir les valeurs de T aux points du maillage.

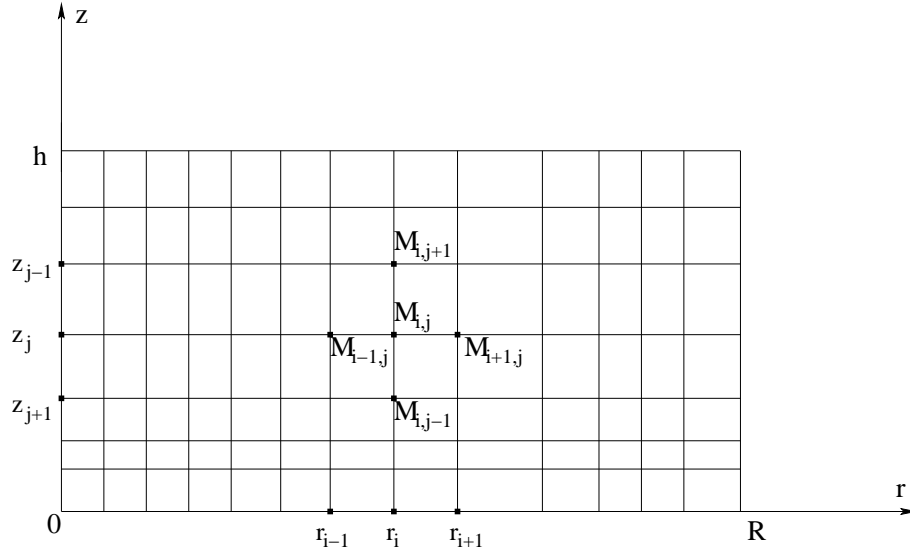


FIG. 4.1. Maillage utilisé pour la méthode des différences finies

4.2 Discrétisation de l'équation cylindrique et des conditions aux limites en différence finie centrée

Les distances entre les points $\{r_i\}_{i=0, N_1+1}$ et $\{z_j\}_{j=0, N_2+1}$ étant supposées petites par rapport aux dimensions de Ω , *i.e* par rapport à l'échelle de variation de T , on peut estimer que T varie peu lorsqu'on passe de $M_{i,j}$ aux points voisins, et qu'on peut approcher les dérivées de T par des combinaisons des valeurs de cette fonction aux points du maillage (méthode appelée différences finies). Notons :

$$T(r_i, z_j) = T_{i,j},$$

$$K_r(z_j) = K_r^j,$$

$$K_z(r_i) = K_z^i,$$

$$g(r_i, z_j) = g_{i,j}.$$

Nous avons les formules suivantes pour un maillage quelconque :

$$\frac{\partial T_{i+\frac{1}{2},j}}{\partial r} = \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{r_{i+1} - r_i} \quad \text{idem pour} \quad \frac{\partial T_{i,j+\frac{1}{2}}}{\partial z}.$$

$$\frac{\partial}{\partial r} K_r^j \frac{\partial T_{i,j}}{\partial r} = K_r^j \frac{\partial_r T_{i+\frac{1}{2},j} - \partial_r T_{i-\frac{1}{2},j}}{\frac{r_{i+1}-r_{i-1}}{2}} = \frac{2}{r_{i+1} - r_{i-1}} K_r^j \left(\frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{r_{i+1} - r_i} - \frac{T_{i,j} - T_{i-1,j}}{r_i - r_{i-1}} \right).$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} K_z^j \frac{\partial T_{i,j}}{\partial z} &= \frac{K_z^{j+\frac{1}{2}} \partial_z T_{i,j+\frac{1}{2}} - K_z^{j-\frac{1}{2}} \partial_z T_{i,j-\frac{1}{2}}}{\frac{z_{j+1}-z_{j-1}}{2}} \\ &= \frac{2}{z_{j+1}-z_{j-1}} \left(K_z^{j+\frac{1}{2}} \frac{T_{i,j+1}-T_{i,j}}{z_{j+1}-z_j} - K_z^{j-\frac{1}{2}} \frac{T_{i,j}-T_{i,j-1}}{z_j-z_{j-1}} \right). \end{aligned}$$

A l'aide de ces formules, nous écrivons une équation approchée de l'équation (3.1) aux points $M_{i,j}$ à l'intérieur du domaine Ω :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{r_i} \frac{T_{i+1,j}-T_{i-1,j}}{r_{i+1}-r_{i-1}} - \frac{2}{r_{i+1}-r_{i-1}} K_r^j \left(\frac{T_{i+1,j}-T_{i,j}}{r_{i+1}-r_i} - \frac{T_{i,j}-T_{i-1,j}}{r_i-r_{i-1}} \right) \\ - \frac{2}{z_{j+1}-z_{j-1}} \left(K_z^{j+\frac{1}{2}} \frac{T_{i,j+1}-T_{i,j}}{z_{j+1}-z_j} - K_z^{j-\frac{1}{2}} \frac{T_{i,j}-T_{i,j-1}}{z_j-z_{j-1}} \right) = g_{i,j}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Pour $i = 1$, $i = N_1$, $j = 1$, $j = N_2$, ce schéma (4.2) fait intervenir des conditions aux limites que l'on peut approcher comme suit :

$$\begin{cases} \frac{T_{1,j}-T_{0,j}}{r_1-r_0} = \frac{T_{N_1+1,j}-T_{N_1,j}}{r_{N_1+1}-r_{N_1}} = 0, & (1) \\ K_z^{\frac{1}{2}} \frac{T_{i,1}-T_{i,0}}{z_1-z_0} = \sigma(T_{i,1}^4 - T_{e1}^4), & (2) \\ \text{et } K_z^{N_2+\frac{1}{2}} \frac{T_{i,N_2+1}-T_{i,N_2}}{z_{N_2+1}-z_{N_2}} = -\sigma(T_{i,N_2}^4 - T_{e2}^4). & (3) \end{cases} \quad (4.3)$$

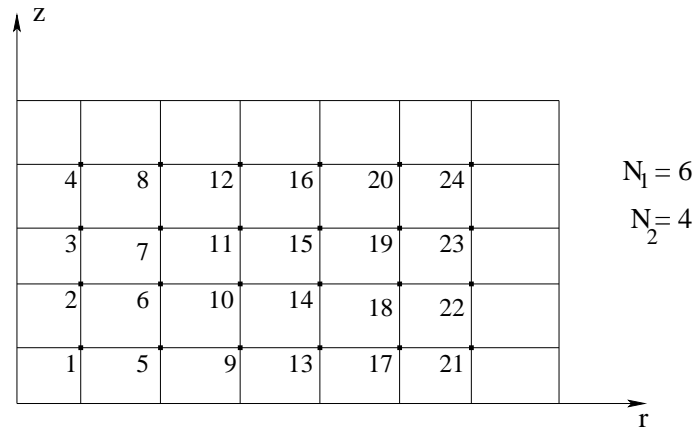
(1) indique une condition de flux nul.

(2) et (3) imposent un flux proportionnel à la température à la puissance 4 donnée par la condition de perte d'énergie par radiation.

En conclusion, l'approximation du problème (4.1) consiste à chercher les valeurs inconnues, $T_{i,j}$ aux $N_1.N_2$ points intérieurs $M_{i,j}$ satisfaisant les équations (4.2) et (4.3) écrites en ces mêmes points. Il s'agit donc de résoudre un système linéaire de $N_1.N_2$ équations à $N_1.N_2$ inconnues. Pour résoudre ce système nous allons d'abord l'écrire sous forme matricielle :

$$AT = B, \quad (4.4)$$

où T est une matrice-colonne de dimension $N = N_1.N_2$ où nous rangeons les inconnues $T_{i,j}$ aux points intérieurs au domaine rectangulaire Ω . Nous numérotions les points $M_{i,j}$ par ordre de i croissant et pour chaque i par ordre de j croissant comme sur la figure 4.2.


 FIG. 4.2. Numérotation les points $M_{i,j}$

Ainsi le points $M_{i,j}$ a le numéro $k = (i - 1)N_2 + j$. Le vecteur T correspondant est donc :

$$T = \begin{pmatrix} T_{1,1} \\ T_{1,2} \\ \vdots \\ T_{1,N_2} \\ T_{2,1} \\ \vdots \\ T_{2,N_2} \\ \vdots \\ \vdots \\ T_{N_1,1} \\ \vdots \\ T_{N_1,N_2} \end{pmatrix}$$

Avec cette numérotation la matrice A du système linéaire prend la forme suivante :

	1	2	·	·	N_2	N_2+1	·	·	·	·	·	·	·	N
1	b_1	c_1				d_1								
2	a_2	b_2	c_2			d_2								
·		a_3	b_3	c_3			d_3							
·														
N_2														
N_2+1	e_{N_2+1}				a_{N_2+1}	b_{N_2+1}	c_{N_2+1}			d_{N_2+1}				
·														
·														
·														
·					e_{N-N_2}			a_{N-N_2}	b_{N-N_2}	c_{N-N_2}			d_{N-N_2}	
·														
·														
·														
·														c_{N-1}
N									e_N				a_N	b_N

Au point numéroté $k = (i - 1)N_2 + j$ les valeurs a_k, b_k, c_k, d_k, e_k traduisent respectivement les coefficients des termes en $T_{i,j-1}, T_{i,j}, T_{i,j+1}, T_{i+1,j}, T_{i-1,j}$ dans l'équation (4.2). De façon précise, nous avons :

$$a_k = -\frac{2K_z^{j-\frac{1}{2}}}{(z_{j+1} - z_{j-1})(z_j - z_{j-1})},$$

$$b_k = \frac{2K_r^j}{(r_{i+1} - r_{i-1})(r_{i+1} - r_i)} + \frac{2K_r^j}{(r_{i+1} - r_{i-1})(r_i - r_{i-1})} \\ + \frac{2K_z^{j+\frac{1}{2}}}{(z_{j+1} - z_{j-1})(z_{j+1} - z_j)} + \frac{2K_z^{j-\frac{1}{2}}}{(z_{j+1} - z_{j-1})(z_j - z_{j-1})},$$

$$c_k = -\frac{2K_z^{j+\frac{1}{2}}}{(z_{j+1} - z_{j-1})(z_{j+1} - z_j)},$$

$$d_k = -\frac{2K_r^j}{(r_{i+1} - r_{i-1})(r_{i+1} - r_i)} - \frac{K_r^j}{r_i(r_{i+1} - r_{i-1})},$$

$$e_k = -\frac{2K_r^j}{(r_{i+1} - r_{i-1})(r_i - r_{i-1})} + \frac{K_r^j}{r_i(r_{i+1} - r_{i-1})}.$$

Notons que tous ces termes doivent tenir compte des conditions aux limites (4.3) pour les cas $i = 1$, $i = N_1$, $j = 1$, $j = N_2$, et que l'on peut faire passer les données de ces conditions au second membre de l'équation. Enfin B est une matrice-colonne faisant intervenir la fonction de dépôt d'énergie g et des données aux limites.

Remarque 4.1 *Les conditions aux limites en $z = 0$ et $z = \alpha$ font apparaître des termes non linéaire $T_{i,1}^4$, T_{i,N_2}^4 que l'on peut linéariser de même façon que dans le problème plan (voir partie 2.2.1).*

4.3 Schéma numérique

4.3.1 L'algorithme BiCGStab

Il existe de nombreuses méthodes pour résoudre un système linéaire $Ax = B$. Comme dans notre cas la matrice A est pentadiagonale, creuse, mais non symétrique nous choisirons l'algorithme de "Stabilized BiConjugate Gradient (BiCGStab)" (Ref. [6]) pour résoudre le système (4.4). La méthode de BiCGStab permet de résoudre ce système pour une matrice A régulière quelconque.

1. On initialise en choisissant x_0 et $r_0 = B - Ax_0$

$$\hat{r}_0 = r_0$$

$$\rho_0 = \alpha = \omega_0 = 1$$

$$v_0 = p_0 = 0$$

2. Pour $i=1,2,\dots$ $\rho_i = \hat{r}_0^t r_{i-1}$

$$\beta = (\rho_i / \rho_{i-1})(\alpha / \omega_{i-1})$$

$$\rho_i = r_{i-1} + \beta(p_{i-1} - \omega_{i-1}v_{i-1})$$

$$v_i = Ap_i$$

$$\alpha = \rho_i / \hat{r}_0^t v_i$$

$$s = r_{i-1} - \alpha v_i$$

$$t = As$$

$$\omega_i = t^t s / t^t t$$

$$x_i = x_{i-1} + \omega_i s + \alpha p_i$$

$$r_i = s - \omega_i t$$

Le test d'arrêt des itérations porte sur $\|r\|$

Nous pouvons maintenant passer à la partie de programmation en C++ pour résoudre notre l'équation (4.4) avec l'algorithme BiCGStab.

4.3.2 Validation du programme C

Afin de valider notre code C++ pour résoudre le problème à symétrie cylindrique (4.1) nous faisons des calculs sur un cas test particulier de ce problème où nous pouvons donner exactement sa solution analytique. Pour un tel cas test nous prenons par exemple $R = h = 1$, les fonctions de coefficients de conductivité thermique $K_r(z)$, $K_z(z)$ sont constantes et la fonction de dépôt d'énergie g ne dépend que de variable z et elle est définie comme suit :

$$g(z) = \begin{cases} g_0 & \text{pour } \alpha < z < 1 - \alpha, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Les températures extérieures sont égales et :

$$T_{e1} = T_{e2} = T_0.$$

La solution du problème (4.1) dans ce cas est symétrique et elle ne dépend pas de r . Résoudre le problème cylindrique 2D revient à résoudre un problème 1D :

$$\begin{cases} -K_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = g, \\ K_z \frac{\partial T}{\partial z} |_{z=0,1} = \pm \sigma (T^4 - T_0^4). \end{cases} \quad (4.5)$$

Ainsi nous pouvons résoudre le problème (4.1) sur cet exemple avec deux méthodes (éléments finis 2D programmé avec **FreeFem++**, différences finies 2D programmé en **C++**, et 1D programmé avec **Scilab** (pour le problème 1D (4.5)), puis nous comparons les résultats trouvés par ces programmes avec la solution exacte de (4.5).

Afin de simplifier des calculs dans le programme C++ pour ce cas test nous avons fait un maillage régulier à pas constants $\Delta r = \frac{1}{N_1}$, $\Delta z = \frac{1}{N_2}$, *i.e* les points r_i , z_j sont équidistants tels que $r_i = i\Delta r$ pour $i = \overline{1, N_1}$, et $z_j = j\Delta z$ pour $j = \overline{1, N_2}$. Avec ce maillage notre l'équation discrète (4.2) peut s'écrire sous une forme habituelle :

$$-\frac{1}{r_i} K_r \frac{T_{i+1,j} - T_{i-1,j}}{\Delta r} - K_r \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta r^2} - K_z \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta z^2} = g_{i,j}.$$

Nous prenons les valeurs $\sigma = 0.02$, $g_0 = 0.03$, $K_z = 1$, $\alpha = 0.4$ pour notre exemple et nous trouvons les résultats reportés figure 4.3.

Nous constatons que les trois programmes donnent le même résultat que la solution analytique. De plus, sur ce cas test, nous trouvons que le programme C++ nous permet de gagner environ un facteur 6 par rapport aux temps de calcul du programme FreeFem++ pour une même taille du

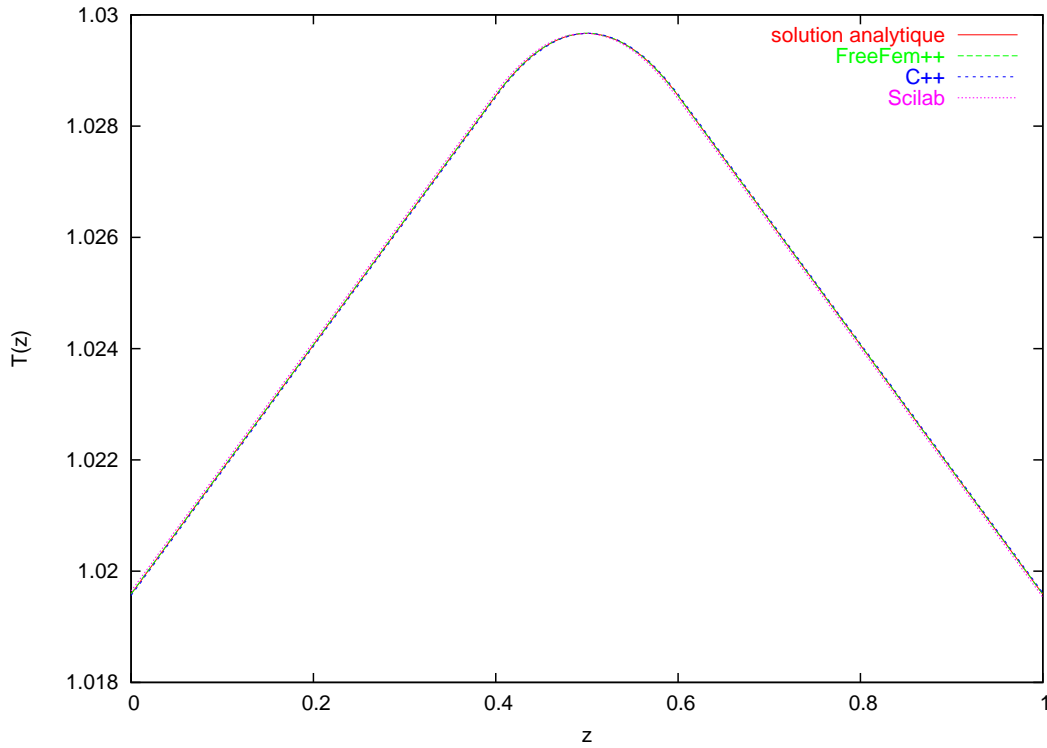


FIG. 4.3. Solution $T(z)$ du problème (4.5)

maillage (*i.e* nombre de mailles du maillage). Nous pouvons donc valider notre programme C++ pour résoudre le problème cylindrique et passer à la suite.

Remarque 4.2 Les solutions $T(z)$ calculées par deux programmes **FreeFem++**, **C++** montrées dans la figure 4.3 sont des coupes en un point $r = r_0$ quelconque de solutions 2D $T(r, z)$ trouvés par ces programmes, comme $T(r, z)$ ne dépend que de z alors tous ces coupes en r sont évidemment identiques. C'est la même chose pour des autres coupes en direction de z et elles sont évidemment droites

4.3.3 Maillage adapté

Revenons maintenant dans notre cas d'étude où le masque est couvert d'un revêtement composé des couches minces de différents matériaux. Ces couches ont une épaisseur totale très petite par rapport à l'épaisseur total du masque, alors afin de résoudre notre problème SC sans faire trop d'efforts numériques pour prendre en compte l'effet thermique des couches, nous devons faire un maillage "adapté" à la position des couches et ainsi au terme de la fonction de dépôt d'énergie g , *i.e* un maillage qui est plus fin dans la zone de couches et de dépôt d'énergie que les autres zones du masque (figure 4.4).

Dans un premier temps afin de tester l'efficacité de la technique de maillage adapté nous faisons un cas test simple pour le problème SC dans le domaine $\Omega = [0, 1] * [0, 1]$ comportant une couche de

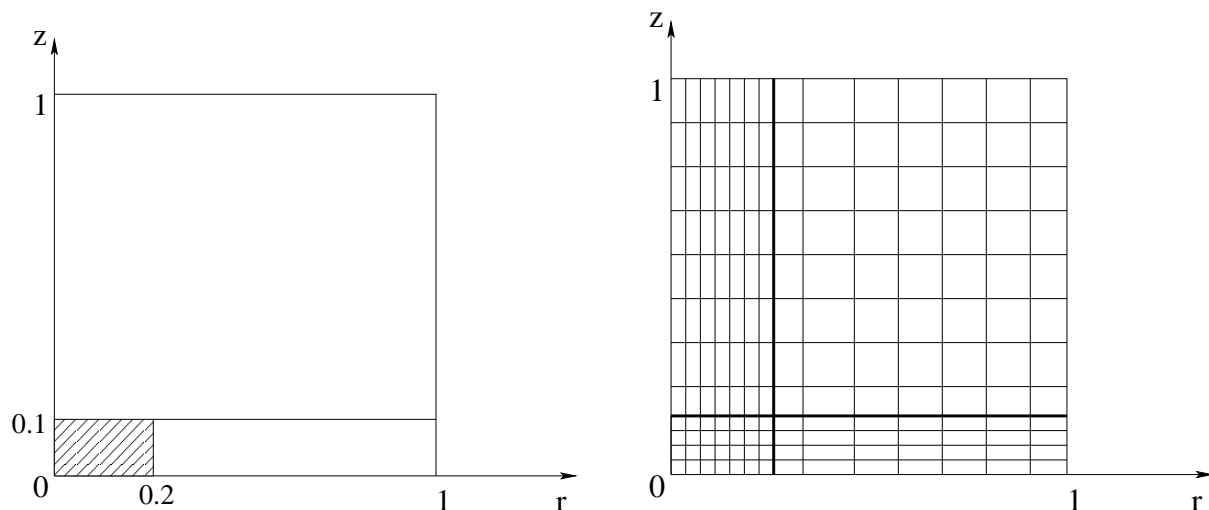


FIG. 4.4. Maillage adapté au problème (4.1) pour le schéma numérique des différences finies

l'épaisseur 0.1 déposé sur un substrat de Fer de conductivité thermique $\widehat{K}_{Fe} = 1$. Le coefficient de conductivité thermique de cette couche est celui de Cuivre $\widehat{K}_{Cu} = 5$ et l'énergie est envoyée dans la couche et sur un disque de rayon 0.2.

Pour ce cas test d'abord nous allons résoudre le problème SC avec le code C++ sur un maillage bien fin et régulier partout de taille 300×300 mailles (300 points suivant la direction de rayon r , et 300 points suivant l'axe z), nous prenons la solution calculé avec ce maillage comme la solution de référence. Après nous cherchons aussi la solution du problème SC avec un maillage adapté à ce cas test de taille 50×50 et puis avec un maillage à pas constante de même taille que le maillage adapté. Les résultats trouvés sont montrés dans les figures 4.5 et 4.6.

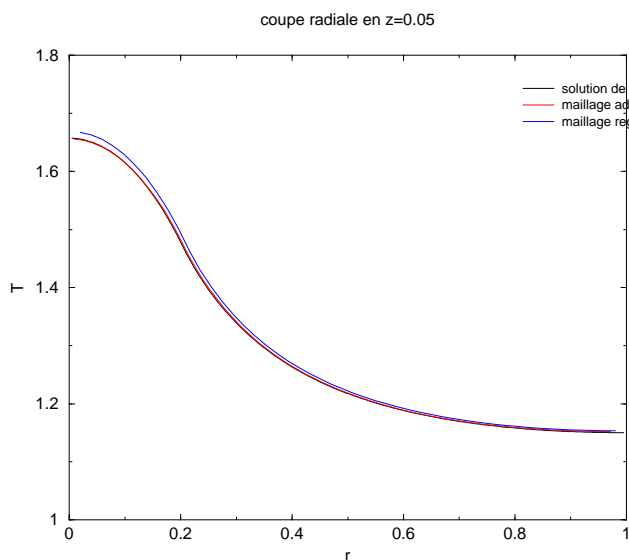


FIG. 4.5. Profil de température du cas test ob-

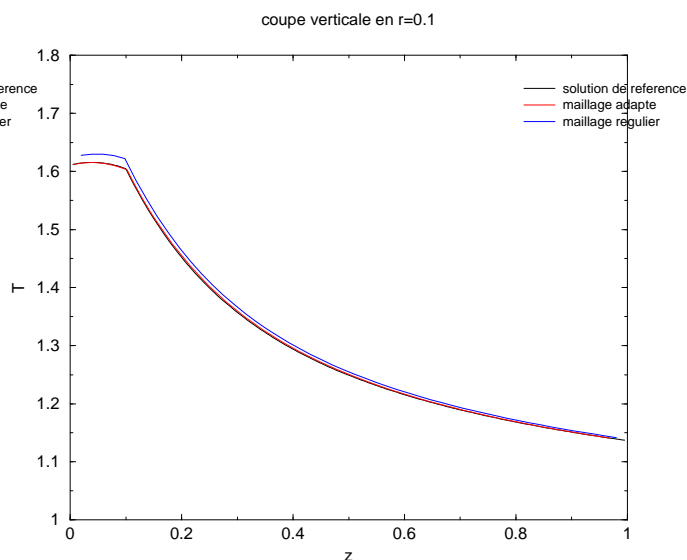


FIG. 4.6. Idem que pour la figure 4.5, la coupe est faite en direction verticale

Les courbes dans deux figures 4.5, 4.6 montrent que pour un même coût de calcul numérique la solution obtenue par le maillage adapté approchée mieux à la solution de référence que celle-ci du maillage régulier. Grâce à cette méthode de maillage adapté maintenant nous pouvons essayer de traiter les conditions réalistes sur la taille des couches déposées dans le problème SC.

4.3.4 Solution du problème SC dans le cas multicouche proche les conditions réalistes

En réalité, l'épaisseur total du masque est de l'ordre de $200\mu m$, et l'épaisseur total des couches déposées sur le substrat Fer est de l'ordre $1\mu m$, le rayon du masque est environ 5cm. Avec ces conditions nous avons un facteur 50000 entre la taille latérale du masque et l'épaisseur de couches déposées et ça exige beaucoup d'efforts numériques si nous voulons mailler dans le volume de couches pour calculer la solution du problème SC. Afin de tester l'importance des performances thermiques de couches déposées nous pouvons commencer par le calcul de la solution du problème SC pour un cas test où le masque possède une seule couche de revêtement de Cuivre sur le substrat Fer, qui est déposée pour avoir un effet de réduction des gradients de température, avec les dimensions (adimensionnées) présentées dans la figure 4.7.

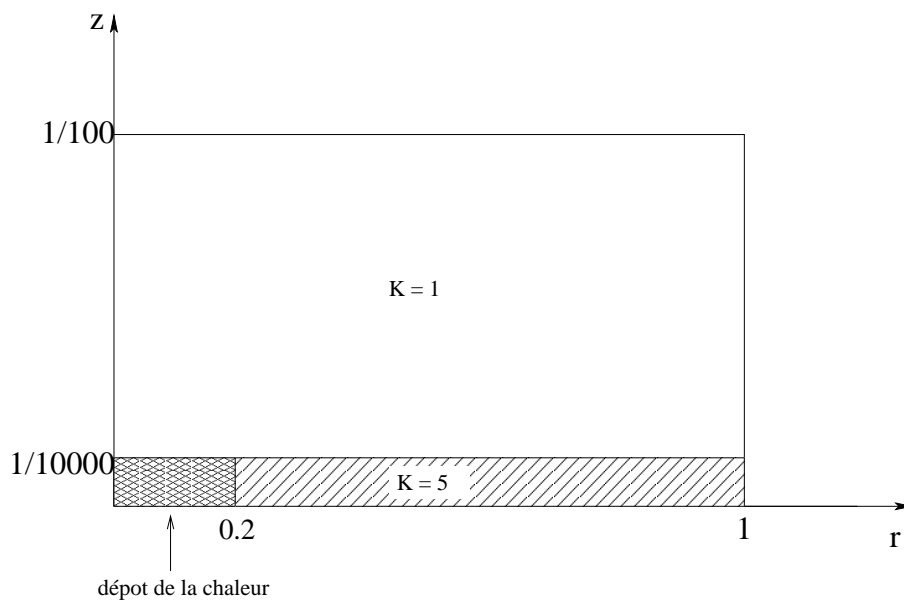
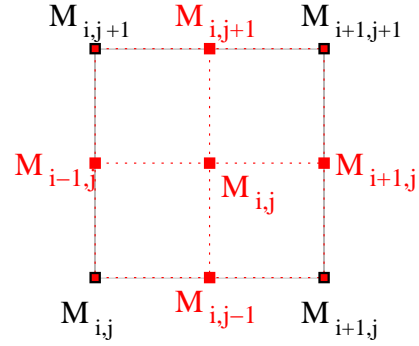
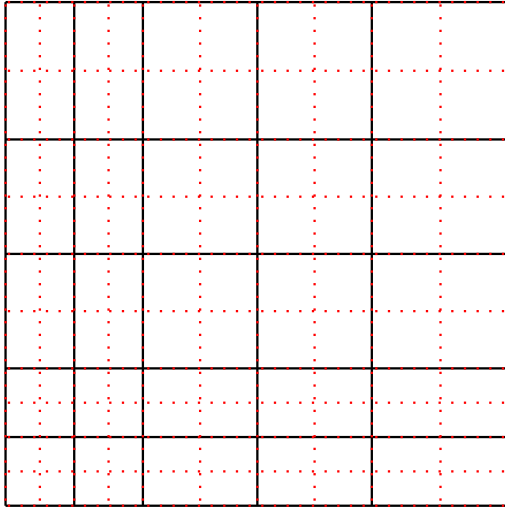


FIG. 4.7. La taille adimensionnées proche les conditions réalistes du masque

Pour trouver la solution de ce problème, nous utilisons évidemment le maillage adapté à la couche Cu déposée et à la zone de dépôt de la chaleur. Comme nous voulons mailler dans la couche Cu, il y a donc un grand écart entre la taille des mailles dans la zone de couches et de dépôt d'énergie avec la tailles des mailles dans autres zones du masque. Cet écart peut provoquer une difficulté pour la convergence de la méthode BiCGStab. Afin d'améliorer la convergence nous allons utiliser

la méthode d'interpolation.

1. On calcule la solution T sur un maillage de départ "grosier".
2. On raffine ce maillage grosier en r et en z en adaptant à la position de couches et dépôt d'énergie. Puis, on projette la solution trouvée sur le maillage raffiné avec la méthode d'interpolation



————— Maillage "grosier"
 Maillage raffiné

$$T_{i,j} = \langle T_{i,j} + T_{i+1,j} + T_{i,j+1} + T_{i+1,j+1} \rangle,$$

ou bien

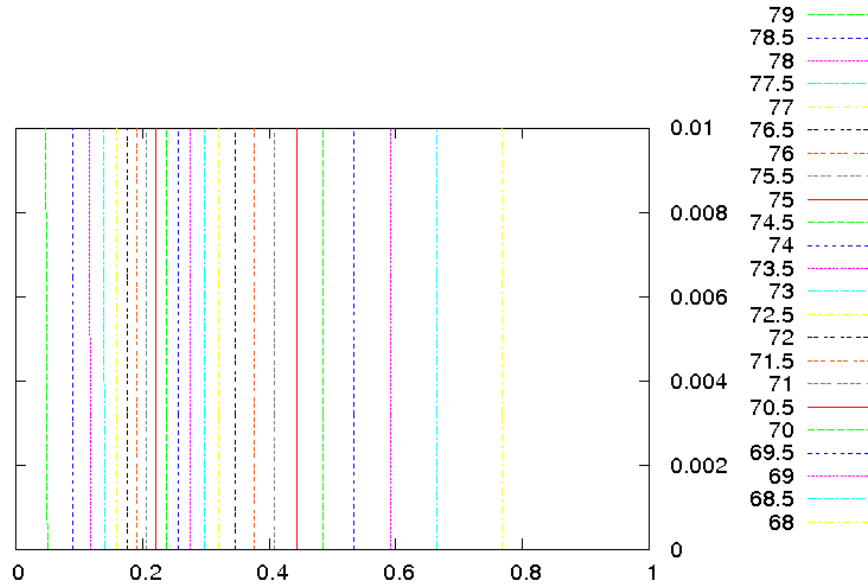
$$T_{i-1,j} = \langle T_{i,j} + T_{i,j+1} \rangle \quad (T_{i,j-1}, T_{i,j+1}, T_{i+1,j} \text{ sont calculés de même façon}).$$

3. On utilise cette solution T comme donnée initiale de la méthode BiCGStab sur le maillage raffiné.

Enfin, à l'aide de deux méthodes de maillage adapté et d'interpolation nous obtenons la solution du problème SC avec des conditions sur la dimension des couches déposées reportées dans la figure 4.7, cette solution illustrée dans la figure 4.8 est comparée avec la solution du problème SC pour les deux cas dont le masque est monocouche, premier cas $\widehat{K} = \widehat{K}_{Fe} = 1$ partout et deuxième cas $\widehat{K} = \widehat{K}_{Cu} = 5$ partout, avec les mêmes conditions et sur le même maillage. Les données numériques adoptés pour ces simulations sont reportés dans le tableau 4.1

variable	notation	valeur
Tension d'accélération	U	30000 V
courant du faisceau	I	4 mA
rayon du masque	$R = R_0$	2 cm
épaisseur du substrat	h	200 μm
épaisseur de la couche de cuivre	δ_{Cu}	1 μm
conductivité du fer	$\kappa_{Fe} = \kappa_0$	55 W/°Km
conductivité du cuivre	κ_{Cu}	275 W/°Km
coefficient de radiation	ε	0.4
constante de Stefan	σ	$5.71 \cdot 10^{-8}$ W/°K ⁴ m ²

TAB. 4.1. Données numériques.


 FIG. 4.8. Solution du problème (4.1) pour le cas d'un masque possédant un revêtement du cuivre, le dépôt est fait sur un disque au centre du masque de rayon $0.2R_0$

La figure 4.9 illustre des coupes radiales de solutions numériques faites au milieu de la profondeur de la couche cuivre. En comparant des courbes présentées dans cette figure nous constatons qu'avec ces conditions de dimensions, la couche Cu n'a pas un effet thermique important sur la diffusion latérale de la chaleur dans le masque et elle ne diminue pas beaucoup le gradient de température par rapport au cas le masque du Fer et sans couches. Ce gradient de température reste encore assez grand en comparaison avec celui du cas le masque Cuivre et sans couches. En conclusion, avec ces conditions de dimension, la performance thermique des couches n'est pas suffisante pour améliorer les propriétés thermiques du masque.

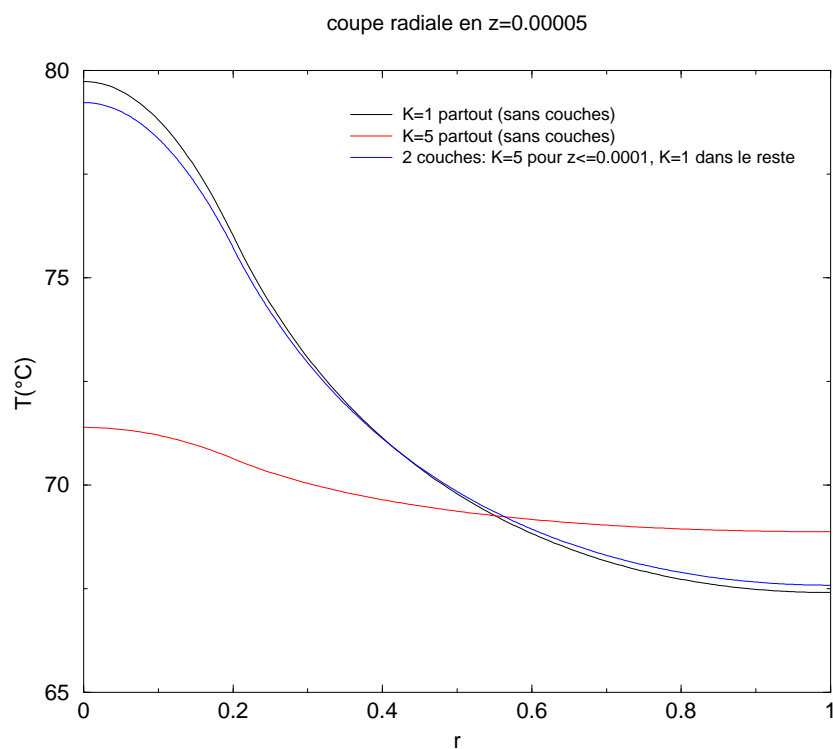
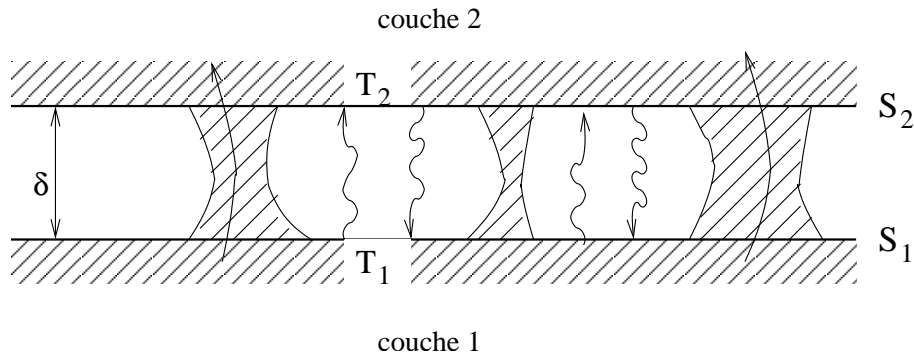


FIG. 4.9. Profil de température pour trois cas test : soit un masque en fer, soit un masque en cuivre, soit un masque composé de deux couches Cu-Fe avec les dimensions reportées dans la figure 4.7. Le dépôt est celui de figure 4.8

Chapitre 5

RÉSISTANCE THERMIQUE

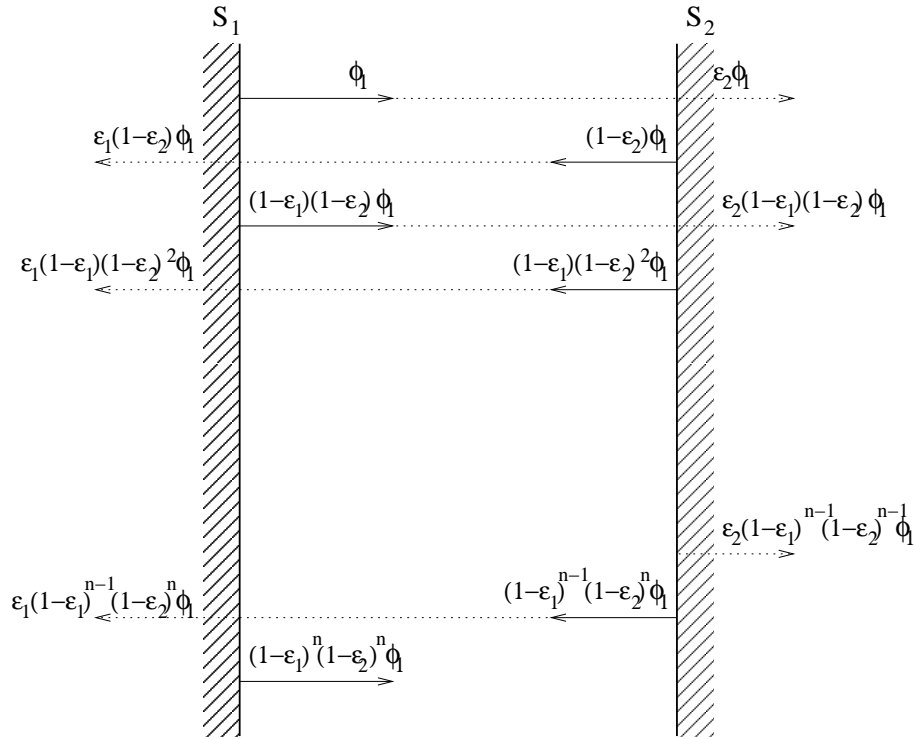
Les études menées jusqu'à présent concernant des masques dont les différentes couches sont en contact thermique parfait. En réalité, il y a une rupture de la structure cristalline lors du passage d'une couche à une autre, ou une présence d'impuretés ou encore l'imbrication des mailles cristallines d'une couche à une autre,... qui changent les propriétés thermiques des matériaux concernés. On suppose qu'il existe une lame d'air entre deux couches en "contact", les surfaces en contact n'ont donc pas la même température.



Il y a alors deux types de transferts de chaleur entre deux couches de contact : un flux net d'énergie émis par le rayonnement entre deux surfaces gris S_1 et S_2 supposées parallèles et un flux thermique de conduction passant de couche 1 à la couche 2 ($T_1 > T_2$). La première question posée est que le rayonnement est-il efficace pour transmettre de l'énergie entre deux couches ?

5.1 Bilan de flux d'énergie échangé par le rayonnement entre deux couches de différents matériaux

Dans cette section nous nous intéressons au problème qui consiste à déterminer le flux net Φ échangé par le rayonnement de S_1 à S_2 . Dans ce cas simple on est certain que le flux émis par chaque plan vient frapper l'autre. La surface S_1 émet un flux Φ_1 et ce flux vient frapper S_2 , qui absorbe une partie $\varepsilon_2\Phi_1$ et réfléchit $(1 - \varepsilon_2)\Phi_1$ (loi de Kirchhoff). Le schéma ci-après amorce les répartitions de Φ_1 .



Ici, ε_1 et ε_2 sont effectivement émissivités de S_1 et S_2 . On voit que les flux absorbés successifs, tant pour S_1 que pour S_2 , sont en progression géométrique de raison $(1 - \varepsilon_1)(1 - \varepsilon_2)$. Le bilan pour S_1 est donc :

- S_1 perd Φ_1 .
- S_1 absorbe

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon_1 (1 - \varepsilon_1)^{n-1} (1 - \varepsilon_2)^n \Phi_1 &= \varepsilon_1 (1 - \varepsilon_2) \Phi_1 \sum_{n=0}^{\infty} (1 - \varepsilon_1)^n (1 - \varepsilon_2)^n \\ &= \frac{\varepsilon_1 (1 - \varepsilon_2)}{1 - (1 - \varepsilon_1)(1 - \varepsilon_2)} \Phi_1. \end{aligned}$$

- S_2 absorbe

$$\sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon_2 (1 - \varepsilon_1)^{n-1} (1 - \varepsilon_2)^{n-1} \Phi_1 = \frac{\varepsilon_2}{1 - (1 - \varepsilon_1)(1 - \varepsilon_2)} \Phi_1.$$

Il faut également effectuer le même calcul relativement au flux Φ_2 émis par S_2 :

- S_2 perd Φ_2 .
- S_2 absorbe

$$\frac{\varepsilon_2 (1 - \varepsilon_1)}{1 - (1 - \varepsilon_1)(1 - \varepsilon_2)} \Phi_2.$$

- S_1 absorbe

$$\frac{\varepsilon_1}{1 - (1 - \varepsilon_1)(1 - \varepsilon_2)} \Phi_2.$$

Il est maintenant possible de faire le bilan complet de S_1 , on trouve que S_1 perd (et donc S_2 reçoit) un flux net Φ égal à :

$$\Phi = \Phi_1 - \frac{\varepsilon_1(1 - \varepsilon_2)}{1 - (1 - \varepsilon_1)(1 - \varepsilon_2)}\Phi_1 - \frac{\varepsilon_1}{1 - (1 - \varepsilon_1)(1 - \varepsilon_2)}\Phi_2 = \frac{\varepsilon_2\Phi_1 - \varepsilon_1\Phi_2}{1 - (1 - \varepsilon_1)(1 - \varepsilon_2)}.$$

Dans ce cas, Φ_1 et Φ_2 peuvent s'exprimer en fonction de température par la loi de Stefan : $\Phi_1 = \varepsilon_1\sigma S_1 T_1^4$ et $\Phi_2 = \varepsilon_2\sigma S_2 T_2^4$. Comme les aires des surface en regard ont même valeur S :

$$\Phi = \varepsilon_{eff}\sigma S(T_1^4 - T_2^4),$$

avec

$$\varepsilon_{eff} = \frac{1}{\frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_2} - 1}.$$

La densité de flux d'énergie transfert par rayonnement de S_1 à S_2 est donc $\phi_R = \varepsilon_{eff}\sigma(T_1^4 - T_2^4)$ et elle est à comparer avec la densité de flux d'énergie par diffusion $\phi_D = \frac{K}{\delta}(T_1 - T_2)$.

$$\frac{\phi_R}{\phi_D} = \frac{\varepsilon_{eff}\sigma\delta(T_1^4 - T_2^4)}{K(T_1 - T_2)}.$$

Posons $u = \frac{T_1}{T_2}$

$$\begin{aligned} \frac{\phi_R}{\phi_D} &= \frac{\varepsilon_{eff}\sigma\delta}{K} \frac{(u^4 - 1)}{(u - 1)} T_2^3 \\ &\sim \frac{\varepsilon_{eff}\sigma\delta}{K} T_2^3 u^3 \\ &\sim \frac{\varepsilon_{eff}\sigma\delta}{K} T_1^3. \end{aligned}$$

On prend par exemple

- . $\delta = 2nm$
- . $\varepsilon_{eff} = 0.7$
- . $\sigma = 5.71 \cdot 10^{-8} \text{ W.K}^{-4}.\text{m}^{-2}$
- . $K = 173 \text{ W.K}^{-1}.\text{m}^{-1}$ ($= K_{tungsten}$)
- . $T_1 = 350\text{K}$

alors on obtient

$$\frac{\phi_R}{\phi_D} \simeq 2.10^{-11} \quad \text{donc } \phi_R \ll \phi_D,$$

celui implique qu'on ne peut pas compter sur la radiation pour faire un échange d'énergie entre matériaux.

5.2 Étude numérique de la résistance thermique

Comme il y a une discontinuité de température à la surface de contact de deux couches, on associe maintenant à cet écart de température une résistance thermique de contact R_{th} , elle prend en compte et intègre la modification de la conductivité thermique sur l'épaisseur (faible) de contact entre les 2 matériaux. On introduit l'existence de cette résistance de contact dans le schéma numérique en considérant le flux d'énergie en contact entre eux.

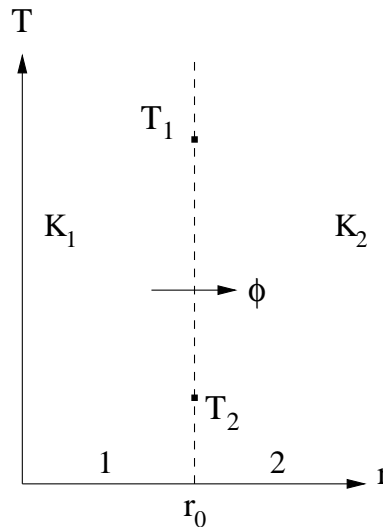


FIG. 5.1. *Le flux d'énergie en contact entre deux couches différentes*

La figure 5.1 montre deux couches différentes avec la conductivité thermique K_1 pour la couche 1 et K_2 pour la couche 2. Les couches sont en contact en r_0 du fait de la présence de la résistance thermique de contact. La température subit une discontinuité à cette interface (température T_1 pour la couche 1 et température T_2 pour la couche 2, nous supposons $T_1 > T_2$). On peut imaginer que microscopiquement, on introduit une couche fine d'épaisseur ε dont la conductivité traduit l'imbrication des deux matériaux. Il serait alors possible de calculer la solution de l'évaluation de la chaleur comme dans l'étude précédente. Pour ne pas alourdir l'effort numérique on fait appel pour traiter cette interface à une loi de Fourier (formellement $\varepsilon \rightarrow 0$) et on fait apparaître une discontinuité de la température.

La densité du flux d'énergie sortant de la couche 1 par la surface r_0 est égal à : $\phi_1 = -K_1 \frac{\partial T_1}{\partial z} |_{r=r_0}$.

La densité du flux d'énergie entrant dans la couche 2 par la surface r_0 est égal à : $\phi_2 = -K_2 \frac{\partial T_2}{\partial z} |_{r=r_0}$.

Ces deux flux sont égaux et ils sont calculés par $\phi_1 = \phi_2 = \phi = \frac{1}{R_{th}}(T_1 - T_2)$, ici R_{th} apparaît comme la résistance thermique de contact en entre les deux couches, c'est une résistance thermique

par unité de surface exprimée en $m^2.K.W^{-1}$.

Les solutions numériques que nous avons obtenu dans la partie 4.3.4 ne comptent pas encore l'existence de la résistance thermique de contact entre les couches du masque. Afin de vérifier l'influence thermique de cette résistance nous allons faire un schéma numérique pour le problème SC prenant en compte la résistance R_{th} . Nous avons d'abord effectué des simulations pour un cas test simple du problème cylindrique avec la présence du R_{th} pour voir si cette présence peut améliorer la diffusion latérale de la chaleur dans les couches du masque. On introduit le paramètre sans dimension R_{th} :

$$\widehat{R}_{th} = \frac{R_{th}.K_{Fe}}{R_0}$$

Le flux d'énergie adimensionné pris en contact entre des couches s'écrit alors :

$$\widehat{K}_* \frac{\partial \widehat{T}_*}{\partial \widehat{z}} = \frac{1}{\widehat{R}_{th}} (\widehat{T}_1 - \widehat{T}_2).$$

Les premières simulations sont prises pour un cas test où le système est constitué de deux couches différentes avec les conductivités thermiques $\widehat{K}_1 = \widehat{K}_2 = 1$. Ce système est de dimensions $\widehat{R} = \widehat{h} = 1$, l'épaisseur de dépôt d'énergie est $\widehat{\delta} = 0.1$, l'énergie est déposée sur un disque de rayon $r_d = 0.2$, et les épaisseurs des couches sont $\widehat{h}_1 = \widehat{h}_2 = 0.5$. Nous avons pris différentes valeurs pour la résistance thermique \widehat{R}_{th} et puis nous comparons ces résultats avec celui pour lequel le contact thermique est parfait. Les résultats obtenus sont donnés figures 5.2, 5.3, 5.4, 5.5, pour respectivement un contact thermique parfait ($\widehat{R}_{th} = 0$), $\widehat{R}_{th} = 0.01$, $\widehat{R}_{th} = 0.1$, $\widehat{R}_{th} = 1$.

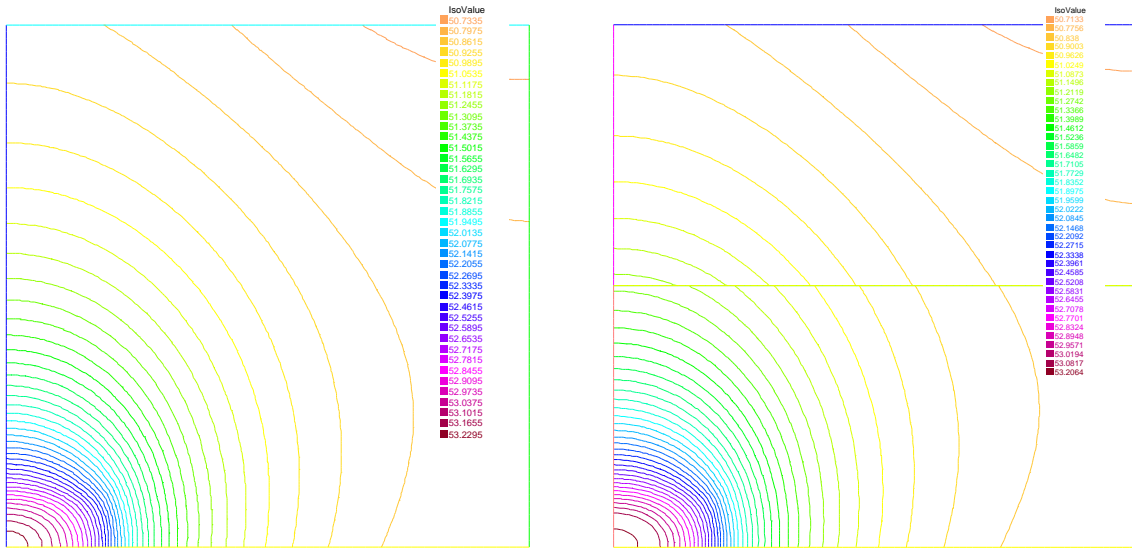


FIG. 5.2. Solution du cas test sans résistance thermique FIG. 5.3. Solution du cas test où $\widehat{R}_{th} = 0.01$

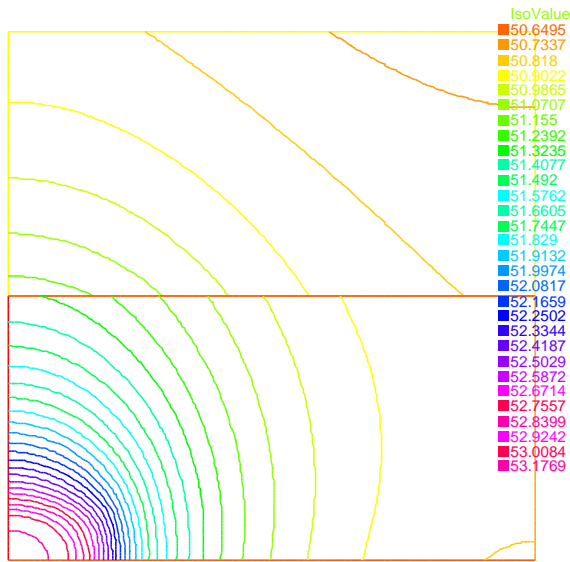


FIG. 5.4. Solution du cas test où $\widehat{R}_{th} = 0.1$

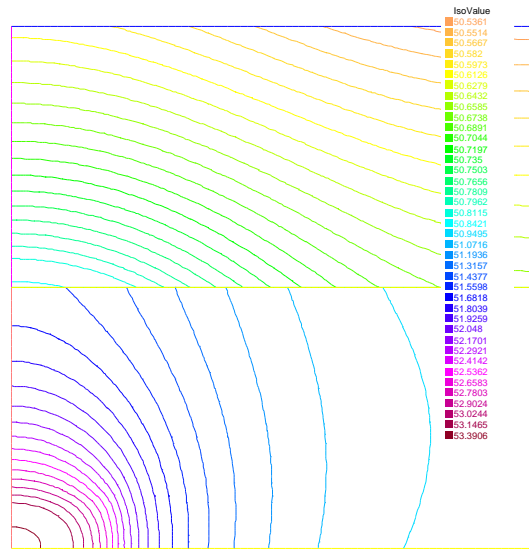


FIG. 5.5. Solution du cas test où $\widehat{R}_{th} = 1$

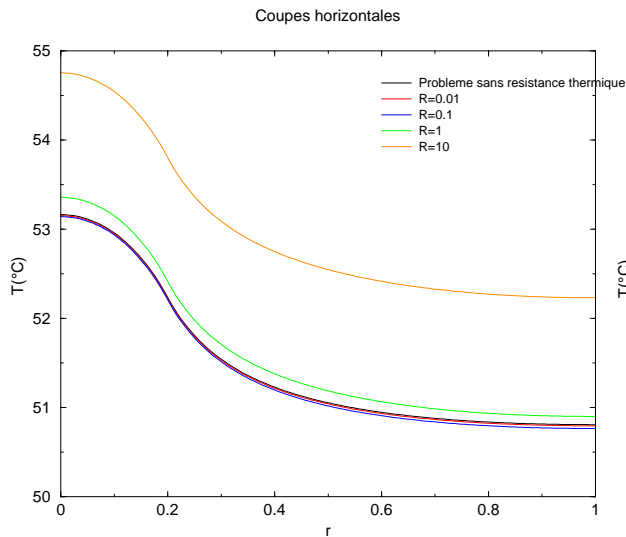


FIG. 5.6. Coupes radiales avec $\widehat{z} = 0.5$ pour les solutions numériques illustrées dans figures 5.2, 5.3, 5.4, 5.5

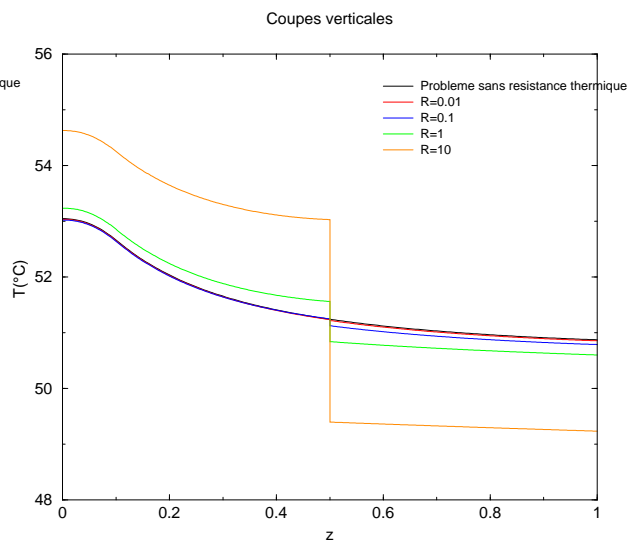


FIG. 5.7. Idem que pour la figure 5.6 mais les coupes sont faites en direction verticale en $\widehat{r} = 0.1$

Les coupes radiales et verticales des simulations numériques présentés les figures 5.6, 5.7 montrent que, avec une résistance thermique assez petite (par exemple $\widehat{R}_{th} = 0.01$), la différence de température entre les deux couches est-elle aussi assez petite, lorsque la valeur $\widehat{R}_{th} \rightarrow 0$ alors le résultat obtenu devient de plus en plus proche du résultats du cas où le problème ne contient pas la résistance thermique. En revanche, dans le cas où \widehat{R}_{th} est assez grand, le flux d'énergie traversant la surface entre deux couches est presque nul, la discontinuité de température est alors très importante. La température de la couche sur laquelle se fait le dépôt d'énergie est devenue plus grande et celle de l'autre couche a beaucoup baissé et présente un gradient d'autant plus faible qu'elle est mieux isolée

thermiquement de l'autre couche. De plus, les gradients de température dans la couche où l'énergie est déposée ne diminue pas quand la valeur de \widehat{R}_{th} augmente. Les résultats sont obtenus ici sur un empilement des matériaux épais (les dimensions en profondeur sont de l'ordre de la dimension radiale). Cependant ils montrent que la prise en compte du mauvais contact thermique entre matériaux augmente la température de l'un (celui qui reçoit le flux d'énergie) et diminue la température de l'autre sans pour cela diminuer les gradients de température selon la dimension radiale. Ce phénomène doit rester valable dans le cas des couches minces. On ne peut donc pas compter sur elle pour augmenter la diffusion thermique radial. Cela est en fait assez raisonnable puisque la diffusion dépend de K qui lui ne change pas.

CONCLUSION

Les performances thermiques d'un matériau lacunaire constitué d'un empilement de plusieurs couches de matériaux différents ont été étudié. Cette étude est motivée afin de trouver des solutions pour limiter l'effet de "domming" dû à l'apparition de forts gradients de température à la surface du masque ; ces gradients produisant une déformation mécanique élastique locale du masque qui diminue la qualité de "filtrage" des faisceaux électronique. Il en résulte une dégradation des images à l'écran. Cet effet est d'autant plus sensible que l'image affichée est fixe sur un temps long et présente de forts gradients (par exemple pour les textes écrits qui sont fixes et nécessitent de forts contrastes).

On peut noter que le masque étant situé dans un tube à vide, le seul mécanisme de refroidissement est dû à la radiation. Cet effet important a été pris en compte.

Le masque est une sorte de grille, plaque extrêmement fine (ses dimensions latérales sont 10000 fois plus grande que sa dimension transversale) et percés de milliers de trous quasi identiques répartis régulièrement. La présence des trous modifie de façon importante la propagation de la chaleur dans le masque. En supposant que l'échelle de gradient de température est large comparée à la dimension d'un trou, un calcul d'homogénéisation a été mené. On en a déduit alors un coefficient de conductivité thermique effectif. Pour un masque de téléviseur, on montre que la présence des trous diminue d'environ 30% le coefficient de conductivité du matériau.

Dans une seconde étape, on étudie le problème d'évolution bidimensionnel, obtenu en intégrant sur l'épaisseur du masque, qui montre que les temps de montée de la température en ses différents points est en accord avec les mesures expérimentales. Cela permet de valider l'approche par homogénéisation et de donner un outil numérique permettant de prédire l'effet de domming.

Une étude de l'influence de la présence de couches sur la propagation latérale de la chaleur est présentée dans la troisième partie. Nous avons mené ce calcul en deux temps. Dans un premier temps, un modèle axisymétrique est pris en compte, le masque est supposé cylindrique et présentant une symétrie angulaire. L'étude numérique d'un empilement de quatre matériaux de conductivité prises dans un rapport 2,5,2,1 et d'épaisseur respectives 1,1,1,3, montre, par comparaison avec un matériau simple de conductivité 1, que la conductivité radiale est améliorée de façon sensible, cependant que des gradients de température demeurent importants. Il faut noter que les rapports d'épaisseur des couches sont loin d'être celles du masque, ces dernières seront beaucoup plus faibles (dans un rapport 2/100, 1/100, 2/100). Ainsi les effets d'amélioration de la conductivité radiale et transversale

de notre étude sont-ils très surévalués.

Une étude portant sur un modèle cylindrique à deux dimensions (r, z) a été menée. Les dimensions traitées sont celles qui se situent selon le plan du masque. La conductivité du matériau à couches est dominée par celle du support en Fer. On peut penser, dans ces conditions, que l'effet des couches est assez faible.

Des simulations réalisées à l'aide de méthodes aux différences finies, dont le maillage est adapté aux disparités entre épaisseurs des couches et dimensions latérales du masque donnent des résultats en accord avec ceux donnés par les méthodes d'éléments finis.

Un paramètre important pour ces problèmes est celui de la résistance thermique qui existe entre les différentes couches. Sa valeur dépend non seulement des matériaux en contact, mais aussi est sensible à l'existence des couches [11]. Il n'existe pas de donnée concernant sa valeur pour les empilements qui nous concerne et elle n'a pas été prise en compte dans les résultats donnés ici. Cependant des études sur ce paramètre montrent que ses effets sont d'augmenter les températures régnant dans les couches, de diminuer celle du substrat, d'augmenter les gradients de température dans les couches et de diminuer celles dans le substrat. Une comparaison entre les températures en surface d'un masque recouvert et d'un masque non traité, permettra de savoir si ces effets de résistance thermiques entre couches sont ou non importants.

Il faut noter cependant que le terme de source est traité de façon grossière et qu'une étude plus fine devra permettre de comprendre comment l'énergie des faisceaux électroniques se dépose dans cet empilement de matériaux.

D'autre part, l'effet de propagation des électrons dans la couche de cuivre par réflexions successives sur les couches de tungstène n'a pas été prise en compte. Cet effet, non encore modélisé, devrait permettre aussi d'améliorer la diffusion longitudinale de la chaleur.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] HEDY. ATTOUCH. *Homogénéisation*. Séminaire BOURBAKI 40ème année, 1987-88, n° 686.
- [2] S. Avril, *Modélisation de l'échauffement d'un masque de téléviseur*, Université d'Orléans, rapport de DESS IMOI, 2001.
- [3] D. Cioranescu and P. Donato, *An introduction to homogenization*, Oxford University Press Inc, New York, 1999
- [4] D. Euvrard, *Résolution numérique des équations aux dérivées partielles de la physique, de la mécanique et des sciences de l'ingénieur. Différences finies, éléments finis*, Masson, 1988.
- [5] <http://www.freefem.org/>
- [6] A. Frommer, V. Hannemann and B. Nöckel. Th. Lippert and K. Schilling. *Accelerating Wilson Fermion Matrix Inversion by Means of the Stabilized Biconjugate Gradient Algorithm*, Int.J.Mod.Phys. C5 (1994) 1073-1088.
- [7] J. L. Lions, G. Papanicolaou, R. T. Rockafellar, *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*, North-Holland, Amsterdam 1978.
- [8] D. Marchio, P. Reboux. *Introduction aux transferts thermiques*, Collection : les cours de l'École de Mines, Paris, 2003.
- [9] Philips, rapport interne Philips : *Technology status report, Anti Doming technology*, TVR-698-00-TvD/C033, PPD, 2000.
- [10] Philips, données Philips Dreux.
- [11] N. Semmar, C. Georges, C. Le Borgne, *Simulation de l'influence de la résistance thermique de contact sur le traitement de couches minces par lasers pulsés*, preprint.
- [12] R. Théodor, P. Lascaux. *Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur. Tome 2 : Méthodes itératives*, Dunod, Paris, 2000.

Deuxième partie

**MODELISATION ET SIMULATION
NUMERIQUE DES DEPOTS A
STRUCTURE COLONNAIRE**

Chapitre 6

INTRODUCTION

La fabrication artificielle des films minces de matériels par le dépôt de couches d'atomes vaporisés sur un substrat s'est développée très rapidement pendant les années récentes avec plusieurs techniques comme l'épitaxie par jet moléculaire, la déposition chimique en phase vapeur, etc... Cette technologie de croissance de surface a motivé le développement de la recherche des modèles théoriques afin de décrire la croissance dynamique des interfaces et obtenir des informations quant-à la structure de la surface, ainsi que sur ses propriétés statistiques. Dans notre cadre d'étude nous nous intéressons à étudier l'évolution du processus de dépôt de couches minces de matériaux, qui est une application importante des procédés plasma. L'épaisseur et la structure des couches dépendent des paramètres du plasma (température, pression, densité) ainsi que des différents matériaux mis en jeu (substrat, revêtement) via leurs énergies de liaisons notamment. La structure de ces couches minces, l'importance de leur rugosité conditionnent en partie leur tenue mécanique, c'est pourquoi il est important de pouvoir les mesurer, mais aussi de les prédire. L'objet de cette étude est de donner des outils de modélisation permettant de qualifier la structure des couches suivant les paramètres du plasma, ainsi que des matériaux mis en jeu dans le réacteur. Expérimentalement des dépôts, de cuivre notamment, réalisés par P. Brault [13] au GREMI, montrent la formation d'une structure colonnaire. Il est donc important que les modèles mis en oeuvre permettent de retrouver ces structures si singulières. Ces structures font apparaître évidemment des gradients importants. Les outils numériques qui vont être mis en jeu pour suivre l'interface devront être capable de garder cette structure.

Deux types de modèles peuvent-être utilisés, soit des modèles continus pour lesquels les solutions sont données par la résolutions d'équations aux dérivées partielles stochastiques, soit des modèles probabilistes basés sur des méthodes de Monte Carlo (MC).

- Les modèles continus sont basés sur des équations aux dérivées partielles stochastiques dont les solutions fournissent la hauteur $h(x,t)$ du dépôt au temps t , repéré par sa position x selon un plan de référence perpendiculaire à sa croissance. Parmi ces modèles, l'un des plus simples est le modèle d'Edward-Wilkinson (EW) [32] pour lequel le dépôt est régit par un terme de source (dû au flux des atomes incidents), auquel s'ajoute un terme aléatoire (qui prend en compte les fluctuations locales du dépôt) et enfin un terme qui modélise la relaxation des atomes à la surface, dû à la tension de surface (ce terme s'apparente à un terme de diffusion). Le modèle de Kardar, Parisi et Zhang (KPZ) [28] ajoute au modèle (EW) un terme non-linéaire qu'implique une croissance du dépôt selon sa normale locale.

Dans le modèle de Kuramoto-Shivashinski, on introduit un terme prenant en compte le déplacement des atomes à la surface (adsorption et désorption) qui se traduit par l'apparition d'un terme en $\nabla^4 h$. D'autres modèles introduisent des effets d'ombrage [29, 41]. Cependant, à notre connaissance, aucun de ces modèles n'est capable de reproduire des structures de type "colonne", comme celles observées par P. Brault. Il faut sortir du cadre des EDP pour obtenir des modèles permettant de créer une interface présentant des structures colonnaires, voire donnant des surface réentrantes (impossible à décrire avec une fonction $h(x, t)$) [6].

- Les modèles discrets, basés sur des méthodes de type Monte Carlo, découpent la surface en autant de sites sur lesquels se déposent ou se déplacent des "atomes" selon des règles probabilistes. L'agrégation limitée par la diffusion (DLA) [48] est un premier modèle pour lequel les particules lancées une à une (loin du site d'agrégation) se déplacent aléatoirement sur un réseau et stoppe leur progression dès que l'une des cases voisines est déjà occupée. Ces règles donnent naissance à des structures dendritiques semblables à celle observées autour des électrodes de batteries à électrolyte. Dans le modèle d'Eden [17], les particules s'agrègent autour d'un site de nucléation. Les sites de dépôt possibles sont ceux qui ont au moins un site voisin occupé. Les deux précédents modèles sont lacunaires, au sens où à la fin de la simulation, il reste beaucoup de sites vides entourés de sites occupés. Les modèles dits, Solid-On-Solid model (SOS) [15], sont des modèles pour lesquels cette possibilité est interdite. Comme ils décrivent le processus de dépôt dont relève cette étude, ce sont eux auxquels nous allons nous intéresser.

Les deux types de modèles (probabilistes et continus) sont tous les deux plutôt phénoménologiques, les différents termes sont introduits de façon *ad hoc* et ne sont généralement pas sous tendus par des modèles microscopiques. Les modèles discrets sont bien adaptés aux simulations numériques du type MC avec une description simplifiée des principes généraux du mécanisme de croissance à l'échelle élémentaire. Par ailleurs, avec des approches aux grandes échelles, les équations continues peuvent représenter chacune une classe d'universalité de croissance. L'un des principaux objectifs de la partie théorique de la croissance de l'interface est de construire des équations continues dont les propriétés dynamiques sont équivalentes à celles-ci des modèles atomiques discrets, permettant ainsi d'établir des connexions entre les modèles continus et discrets. L'analyse des situations particulières de la croissance ainsi que le comportement asymptotique des solutions numériques des modèles discrets permet de construire les expressions caractérisant leurs mécanismes d'évolution pour les équations continues. Un modèle discret est probablement décrit par une équation continue et réciproquement, une équation continue peut aussi être associée avec de différents modèles discrets.

Les modèles probabilistes peuvent engendrer de fortes discontinuités, qui doivent nécessairement apparaissent si l'on veut reproduire des structures colonnaires. C'est pourquoi on se focalisera, dans cette étude, sur ce type de modèles et plus précisément sur les modèles faisant apparaître des effets d'ombrage [41]. Nous souhaitons également établir des correspondances entre les modèles discrets et continus étudiés qui présentent les mêmes propriétés, particulièrement l'apparition des structures du type colonnaire.

Depuis son apparition en 1986 [28], l'équation KPZ a attiré de nombreux travaux qui sont basés sur des résultats numériques et leur interprétation [1][2][3][9][39][33]. La question du caractère bien posé de cette EDP stochastique était déjà abordée dans le livre de J. Krug et H. Spohn [31]. L'analyse mathématique des équations aux dérivées partielles stochastiques ou déterministes liées à KPZ a également motivé de nombreuses études pour donner un cadre rigoureux aux études de l'évolution dynamique des interfaces. Cependant, elle n'est pas l'objet de ce travail de thèse, mais nous donnons maintenant, dans l'ordre chronologique, quelques éléments de bibliographie sur ces sujets. On pourra notamment se référer à [11] qui montre le lien entre les modèles particuliers de type SOS ([26][40][15][34][35]) et l'équation KPZ. Dans [11], Bertini et Giacomin ont aussi prouvé que l'équation KPZ peut être considérée comme la limite des fluctuations renormalisées pour des processus d'exclusion asymétriques. Il existe également les travaux antérieurs sur les processus d'exclusion asymétriques et l'équation de Burgers [30][36]. Quelques résultats récents de l'analyse mathématique de l'EDP stochastique dans cette direction ont été présentés par B. Toth et W. Werner [46]. En effet, la transformation de Cole-Hopf [24] permet de transformer l'équation de Burgers en une équation de diffusion stochastique et est souvent utilisée dans [4][49][38]. Il existe des liens entre l'équation KPZ avec des domaines a priori déconnectés, comme par exemple la physique des polymères, la connection entre les modèles continus de polymères en environnement aléatoire et l'équation KPZ a été donnée par Comets et Yoshida [14].

Le formalisme probabiliste nécessaire pour donner un cadre rigoureux à ce type d'analyse est assez pointu et a été présenté par A. Debussche lors de son cours à Orléans en Mars 2006 et on pourra consulter les notes du cours réalisé en 2004 avec A. de Bouard [12]. En fait, le terme de bruit sans corrélation génère des irrégularités de l'interface qui entrent en compétition avec les termes différentiels nécessitant de la régularité. Ces difficultés ont conduit de nombreux auteurs à s'intéresser à une version déterministe de l'équation KPZ et à ses généralisations. On pourra citer [23][20][21][22] et les références qu'elle contiennent. Il existe aussi des liens entre l'équation KPZ déterministe et les équations d'Hamilton-Jacobi et de Burgers visqueux [47][10][27]. Notons que de tels modèles (déterministes) décrivent l'évolution de l'interface lorsque la source de dépôt aléatoire cesse.

Après cette introduction, l'étude portera sur les modèles à 1+1 dimension, tout d'abord par une approche probabiliste (section 7.1), puis à l'aide de modèles basés sur des équations aux dérivées partielles (section 7.2). Pour chacune de ses sections, nous partirons du modèle le plus simple pour aller au modèle avec ombrage qui, nous le verrons, permet de retrouver les structures colonnaires. L'étude préliminaire permet entre autre de tester nos algorithmes pas à pas (grâce à l'introduction progressive de nouveaux termes).

6.1 Notations et caractérisation de la croissance et de la rugosité des interfaces

Dans cette étude, nous considérons des modèles de croissance discretisés pour lesquels la surface de dépôt est représentée par un réseau de sites d'absorption notés x_i , $i = 1, \dots, L^d$ où d est la dimension du problème ($d = 1$ ou 2) et L le nombre de sites. Pour $d = 1$, on ne considère qu'un seul axe sur lequel se fait le dépôt, pour $d = 2$, il se fait sur un réseau carré. Dans les deux cas, le dépôt croît perpendiculairement à la ligne ou plan de référence. On parle alors de modèle $d = 1 + 1$ ou $d = 2 + 1$, la dimension supplémentaire étant celle selon laquelle se fait le dépôt. Nous appellerons $h(x, t)$ avec $x \in \mathbb{R}^d$ la hauteur de la surface selon la position x , au temps t par rapport à un substrat initialement plat.

Le dépôt est caractérisé par la hauteur moyenne $\langle h(t) \rangle$ de sa surface à l'instant t , définie par :

$$\langle h(t) \rangle = \frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^{L^d} h(x_i, t). \quad (6.1)$$

La rugosité $W(L, t)$ de l'interface est caractérisée par l'amplitude de fluctuation de sa hauteur par rapport à sa moyenne et mesure la moyenne de la racine de l'écart quadratique de $h(x, t)$ (écart type de la hauteur) :

$$W(L, t) = \left[\frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^{L^d} [h(x_i, t) - \langle h(t) \rangle]^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (6.2)$$

Expérimentalement, il a été observé sur divers types de dépôt que la fonction $W(L, t)$ vérifie une relation universelle (6.3), aussi appelée loi d'échelle, qui relie entre W , L et t [32] :

$$W(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right), \quad (6.3)$$

où f est une fonction satisfaisant les propriétés suivantes :

$$\begin{cases} \lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = C = \text{constante,} \\ f(x) \sim x^\beta \text{ pour } x \text{ assez petit.} \end{cases} \quad (6.4)$$

La loi d'échelle (6.3) et les propriétés (6.4) de la fonction f décrivent le comportement suivant de

la rugosité $W(L, t)$:

- Pour des temps intermédiaires $0 < t < \tau$, W croît avec le temps comme une loi de puissance :

$$W \sim t^\beta. \quad (6.5)$$

Il n'y a plus de dépendance en L , dès que $z = \alpha/\beta$.

- Pour des temps longs $t > \tau$, W atteint une saturation à une valeur qui dépend de la taille L de la surface :

$$W \equiv W_{sat} = CL^\alpha.$$

- La transition entre le premier et le second régime est donnée par le temps τ tel que $W(L, \tau) \sim \tau^\beta \sim L^\alpha$ soit $\tau \sim L^{\frac{\alpha}{\beta}} \sim L^z$.

La croissance de la surface est donc caractérisée par deux des trois exposants α , β , et z reliés par $z = \alpha/\beta$.

Pour le type de structures que nous recherchons (de type colonnaire), nous proposons d'adopter d'autres grandeurs caractéristiques. La première est la histogramme $f(h)$ des hauteurs qui donne, à un instant donné, le nombre (ou la proportion) de cellules dont la hauteur est comprise dans l'intervalle $[h, h + \Delta h]$. Si la hauteur h fluctue autour d'une valeur moyenne, cette distribution est constante dans la gamme de hauteurs couvertes (la distribution est une fenêtre rectangulaire). Si la structure comporte des colonnes de même hauteur, la histogramme des hauteurs fait apparaître deux pics qui correspondent aux plateaux et au creux des colonnes. La grandeur relative de ces deux pics indiquent si la structure est plutôt de type larges colonnes séparées par des canyons étroits ou le contraire (pics étroits séparées par de larges plaines). La figure 6.1 illustre la façon dont la distribution $f(h)$ est construite. Cela ne donne rien quant-au nombre de colonnes. Cette information est apportée en comptant le nombre de structures au dessus et en dessous de la valeur moyenne. L'évolution temporelle des hauteurs maximale et minimale permet d'avoir une information, certes moins précise (car très globale) à un instant donné, sur le type de structures qui se forment (colonnes ou fluctuations plus ou moins grande autour de la moyenne). On définit aussi dans la partie 7.1.3.1 la notion de la taille moyenne de colonnes.

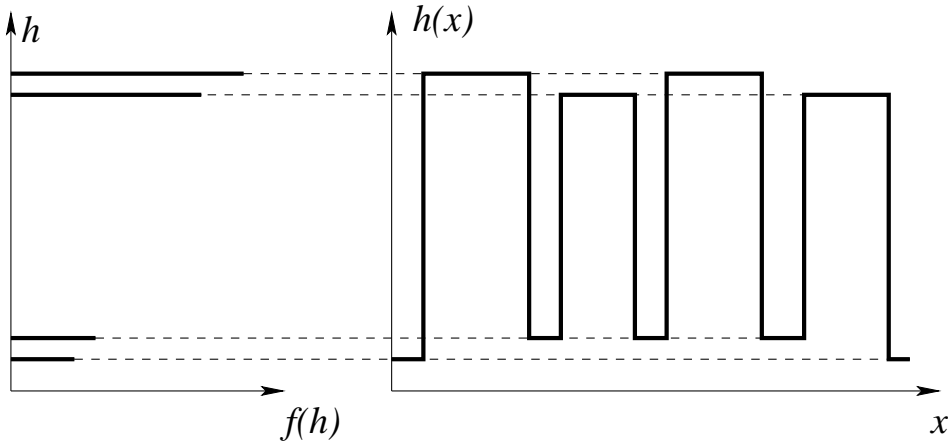


FIG. 6.1. Histogramme $f(h)$ des hauteurs (à gauche) réalisé à partir de la hauteur de l'interface $h(x)$ (à droite).

Chapitre 7

ÉTUDE DES MODÈLES 1D.

Dans cette partie nous étudions des modèles discrets et les équations continues correspondantes en une dimension, soit l'étude d'une fonction à 1 dimension (dépôt h) à partir d'un substrat lui même de dimension 1 : $d = 1 + 1$.

7.1 Modèles discrets

7.1.1 Modèle de dépôt aléatoire (MC1D-d)

Le processus de croissance par dépôt le plus simple, est le processus de dépôt aléatoire, illustré figure 7.1. Dans ce processus la surface du dépôt reçoit un flux F de particules (nombre de particules par site par seconde) constant qui sera normalisé à 1. Cela revient à dire que, en moyenne, on dépose sur la surface une monocouche d'atomes par unité de temps. L'algorithme est très simple, on choisit une des L cases au hasard (selon une loi uniforme), cette case voit sa hauteur augmenter de 1. Le temps t de la simulation est augmenté du temps t_i obtenu via une loi de Poisson :

$$p = R \exp(-Rt),$$

où $p(t)dt$ est la probabilité de dépôt entre t et $t+dt$. Le temps moyen de dépôt est donc $\frac{1}{R}$. On choisit ici une fréquence R des événements de type "dépôt" tel que $R = L$, ainsi, en moyenne, pendant une unité de temps, on a L dépôts et l'on dépose une couche d'atomes. On réitère le processus en choisissant de nouveau un site de dépôt.

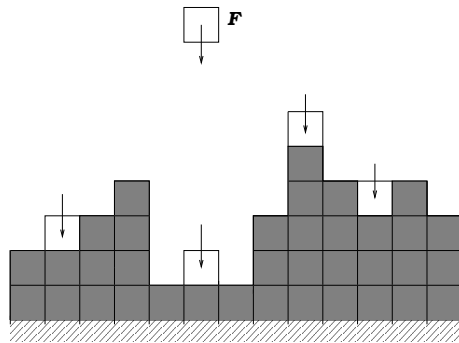


FIG. 7.1. Mécanisme du dépôt aléatoire.

Pour ce modèle la rugosité $W(L, t)$ évolue comme $t^{\frac{1}{2}}$ (figure 7.2) et elle ne sature jamais. On ne trouve donc pas totalement les lois d'échelle présentées précédemment. Cela est attendu, puisque chaque site est indépendant des autres, il n'y a donc pas d'effet dû à la taille finie du système. De plus, pendant une unité de temps, tous les sites sont, en moyenne, visités une fois. Pendant une unité de temps, un site donné sera visité (et il y aura dépôt) ou non visité (et sa hauteur reste inchan-

Algorithme 1 . Algorithme du processus de dépôt aléatoire.

T : temps simulé ;

L : taille de la surface ;

$t = 0$;

tantque ($t \leq T$) **faire**

- Choix aléatoire d'une case i (entre 1 et L) avec une distribution uniforme.
- Dépôt d'un atome sur cette case, *i.e* $h(i, t) = h(i, t) + 1$.
- Calculer le pas de temps MC t_i par la distribution des événements Poisson avec le taux $R = L$, $t = t + t_i$.

fin tantque

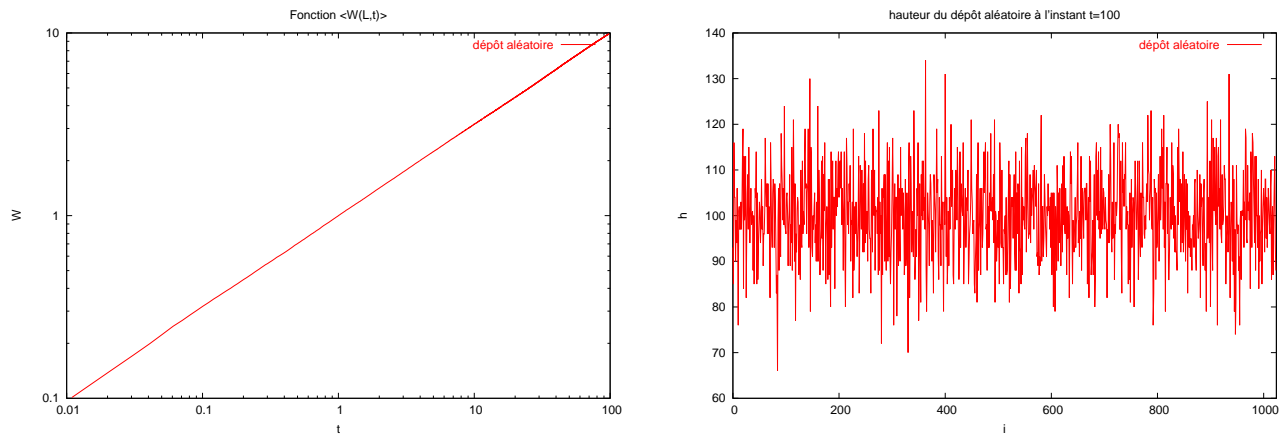


FIG. 7.2. Modèle MC1D-d : la figure de gauche présente en échelle log-log la rugosité de l'interface W en fonction du temps t , moyennée sur un ensemble de 50 expériences, la figure de droite montre la hauteur de la surface simulée comportant 1024 cases à l'instant $t = 100$, pour une expérience.

gée). Le dépôt est de type pile ou face, pour lequel on sait que l'écart entre le nombre de "piles" et le nombre de "faces" varie comme \sqrt{N} où N est le nombre de tirages. Comme $N \sim t$, on a $W \sim t^{1/2}$.

Il est clair que l'on ne peut pas se contenter d'un tel modèle qui ne correspond pas aux dépôts expérimentaux et qu'il faut lui ajouter d'autres termes.

7.1.2 Modèles de dépôt aléatoire avec relaxation

7.1.2.1 Introduction

Dans ce modèle, une fois déposé, un atome va chercher un site d'énergie favorable avant de se fixer de façon permanente. Cette diffusion de surface peut-être modélisée de plusieurs manières. La plus

simple est celle de la recherche du minimum local de la hauteur de l'interface. L'atome déposé descend ensuite vers la position la plus basse possible. Ce processus lisse la surface et donne des résultats qui s'accordent avec la loi d'échelle donnée par l'équation (6.3) pour laquelle $\alpha \approx 0.48 \pm 0.01$, $\beta \approx 0.24 \pm 0.01$.

Dans le cas du modèle RSOS (Restricted Solid On Solid), c'est le dépôt lui-même qui est contraint. Un atome ne peut se déposer que si la différence de hauteur avec les sites voisins est inférieur à 1. On pourrait généraliser cela avec des hauteurs maximales admises de 2, 3 etc. . . , voire en regardant cette différence sur plusieurs sites autour du site pressenti pour le dépôt. La version la plus simple vérifie la loi d'échelle donnée par l'équation (6.3) pour laquelle $\alpha \sim 0.5$, $\beta \sim 0.3$.

Une autre approche, plus réaliste d'un point de vue physique, est détaillée dans le paragraphe suivant. Cette approche consiste à imposer aux atomes, une fois déposés, de franchir des barrières énergétiques pour passer d'un site à un autre. L'algorithme cherchera à déplacer les atomes vers les sites d'énergie minimum.

7.1.2.2 Modèle de dépôt aléatoire avec relaxation liée à l'énergie d'activation thermique (MC1D-d+R)

Dans ce modèle, la relaxation des atomes dépend de la température de la surface simulée et de l'énergie de liaison atomique. Dans le modèle dit "Molecular Beam Epitaxy" (MBE), la relaxation de surface est basée sur l'énergie d'activation qui suit la loi d'Arrhenius (7.1) [44, 37].

L'évolution repose sur deux phénomènes :

1. Soit un dépôt aléatoire avec le taux $R_d = 1$ (R_d s'apparente au flux F de particules), *i.e.* une particule est déposé en moyenne par site et par unité de temps.
2. Soit un déplacement des atomes déposés sur la surface vers les sites voisins avec les conditions périodiques aux bords tels que la hauteur de la destination ne soit pas plus grande que la hauteur initiale. La probabilité d'acceptation du déplacement est régit par une loi d'Arrhenius. Elle est caractérisée par le rapport entre l'énergie d'activation $E_{i,j}$, énergie que doit payer la particule i pour le déplacement de type j (un type de déplacement j est défini par la direction du mouvement et le nombre de liaisons à briser pour libérer l'atome à déplacer) et la température de surface T :

$$R_{i,j} = R_0 \exp \frac{-E_{i,j}}{k_B T}. \quad (7.1)$$

R_0 , facteur pré-exponentiel, dépend également de la température T

$$R_0 = 2 \frac{k_B T}{h},$$

où $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{J/K}$ est la constante de Boltzmann et $h = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{J/s}$ est la constante de Planck. Avec ces valeurs, on a $R_0 = 4.16 \cdot 10^{10} T$. $E_{i,j}$ est l'énergie de l'atome i candidat au déplacement de type j . Dans ce modèle, on suppose que cette énergie, qui dépend du nombre des voisins de i , est définie ici par :

$$E_{i,j} = E_0 + n_i E_b + n_d E_d. \quad (7.2)$$

Dans la formule (7.2), E_0 est l'énergie d'activation d'un atome libre, E_b est l'énergie nécessaire pour briser une liaison avec un voisin et n_i est le nombre de liaisons que l'atome i possède dans sa position initiale. Plus grand est le nombre de ses voisins, plus le terme E_i est grand et moins la probabilité de déplacement sera grande. E_d est l'énergie d'activation pour un atome qui veut descendre à une destination plus basse que sa position initiale ($n_d = 0$ si l'atome déplace vers un site située à la même hauteur que la position initiale, $n_d = 1$ sinon).

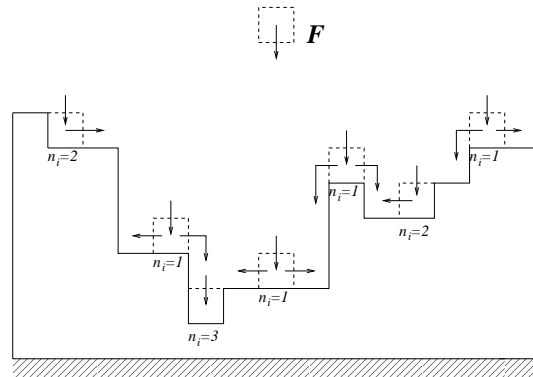


FIG. 7.3. Dépôt aléatoire avec relaxation thermique.

Le nombre de liaisons n_i s'établit comme suit (voir figure 7.3) :

1. $n_i = 1$ correspond au cas où la particule i a un lien avec sa voisine située juste en dessous,
2. Pour $n_i = 2$, à la liaison du type précédent s'ajoute celle due à une voisine située à sa droite ou à sa gauche.
3. Pour $n_i = 3$, la particule a le même type de liaison que dans le cas $n_i = 1$. En plus, elle a deux voisines situées à sa droite et aussi à sa gauche.

Pour les modèles SOS, une particule a nécessairement une particule située en dessous (les lacunes ne sont pas acceptées) et, pour des problèmes à une dimension, seules les particules

ayant 1 ou 2 liaisons seront susceptibles de se déplacer. Ainsi, ce processus a tendance à augmenter le nombre de voisins d'une particule donnée et, par conséquent à lisser les aspérités. L'évènement j sera effectué avec une probabilité qui dépend de son taux d'exécution. Ce taux est calculé en faisant la somme totale des fréquences de réalisations $R_{i,j}$ de tous les déplacements de types j possibles concernant toutes les particules i .

$$R_j = \sum_i N_i R_{i,j},$$

où N_i le nombre total d'atomes candidats aux déplacements de type j . L'algorithme est alors le suivant. A chaque essai, tous les évènements possibles sont listés et le taux total R_t est calculé :

$$R_t = R_{td} + \sum_j R_j,$$

où $R_{td} = R_d L$ est le taux total de déposition et R_j le taux d'acceptation d'un évènement de type j . On choisit alors au hasard l'un des évènements possibles selon sa fréquence d'apparition : on tire un nombre ε au hasard dans $[0, 1[$ selon une distribution uniforme :

- Si $\varepsilon \leq R_d L / R_t$, on opère un dépôt, dans ce cas, il reste à choisir au hasard l'une des L cases puis à incrémenter de 1 la case choisie.
- Si $\varepsilon > R_d L / R_t$, on choisit au hasard le type de saut, puis une particule parmi toutes les particules candidates. On réalise le saut choisi, pour la particule choisie.

Enfin, tout comme pour les dépôts aléatoires, on calcule le temps t grâce à une loi de Poisson donnant la probabilité p de n'avoir aucun évènement pendant ce temps t [19] :

$$p = R_t \exp(-R_t t).$$

Ainsi, on incrémente le temps t de $-\frac{1}{R_t} \ln(\varepsilon)$ après chaque évènement, où ε est un nombre aléatoire choisi uniformément entre 0 et 1.

Remarque 7.1 *Dans notre cas, nous ne prendrons pas en compte le terme de coût supplémentaire que demande un atome candidat à un déplacement vers une case plus basse. Ainsi $E_d = 0$ et il y a quatre différents types de déplacement (une particule i se déplace d'une case : à droite (respectivement à gauche) avec une ou deux liaisons à briser, éventuellement vers le bas si les cases de droite ou de gauche sont vides).*

Algorithme 2 . Algorithme du processus de dépôt aléatoire avec la relaxation thermique.

T : temps simulé ;

L : taille de la surface ;

$t = 0$;

tantque ($t \leq T$) **faire**

- Calculer le taux total des événements possibles

$$R_t = R_d L + \sum_j^{N_j} R^j, \quad N_j \text{ est le nombre de types de déplacement.}$$

- Choix aléatoire d'un nombre x entre 0 et 1 avec une distribution uniforme.

si $x \leq \frac{R_d L}{R_t}$ **alors**

Effectuer un dépôt aléatoire :

- Choix aléatoire d'un site i
- Dépôt d'un atome sur ce site, *i.e* $h(i, t) = h(i, t) + 1$.

sinon

Effectuer un déplacement :

- Choix aléatoire d'un nombre y entre 0 et 1 suivant une distribution uniforme.
- **si** $\sum_1^{k-1} R^j < y \sum_1^{N_j} R^j \leq \sum_1^k R^j$ ($1 \leq k \leq N_j$) **alors**
 - Choix aléatoire d'un atome i qui peut effectuer le type de déplacement k .
 - Effectuer le déplacement k pour l'atome choisit i .

fin si

fin si

- Calculer le pas de temps MC t_i par la distribution des événements Poisson avec le taux $R = R_t$, $t = t + t_i$.

fin tantque

7.1.2.3 Résultats du modèle de dépôt aléatoire avec relaxation thermique

Les figures 7.4, 7.5 et 7.6 donnent l'évolution temporelle de la rugosité (moyenné sur 128 ou 500 simulations) pour trois valeurs de température (400, 500 et 600 K) et différentes longueurs L du système. Pour toutes les simulations nous avons pris $E_0 = 1$ eV et $E_B = 0.3$ eV.

Pour de faibles valeurs de température (400K, figure 7.4), la rugosité croît comme $t^{1/2}$ et ne présente pas de saturation, comme pour le cas du dépôt aléatoire seul. Cela est expliqué par le fait qu'à basse température, le taux de déplacement d'un atome est très petit par rapport au taux de dépôt d'atomes. Par exemple $R_{i,j} \sim 7.10^{-4}$ pour un atome ayant un seul lien à briser et $R_{i,j} \sim 10^{-7}$ pour un atome qui a deux voisins. Ainsi l'effet de diffusion est négligeable par rapport au dépôt aléatoire (de valeur $R = 1$), et la probabilité d'effectuer un déplacement est presque nulle.

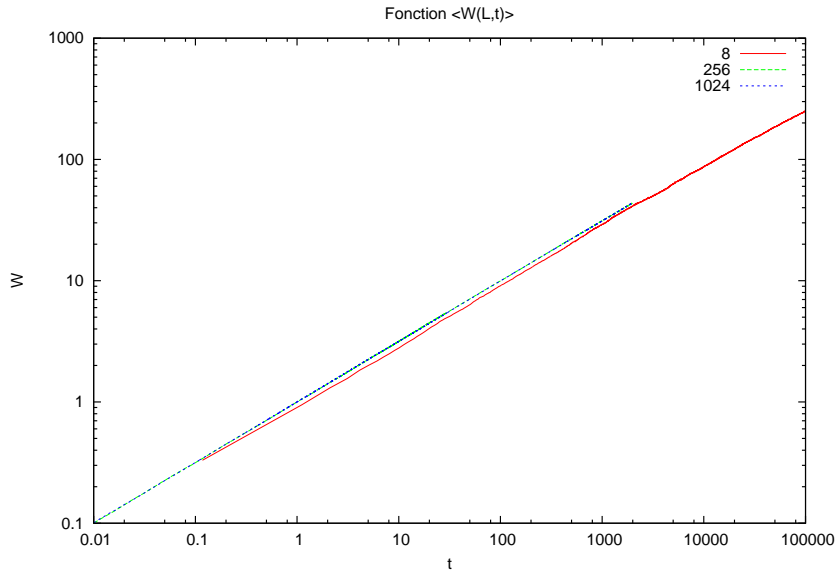


FIG. 7.4. Modèle MC1D-d+R : Rugosité W en fonction du temps t selon une échelle log-log avec $T = 400K$ et $L = 8, 256, 1024$. Les résultats sont moyennés sur un ensemble de 500 expériences pour $L = 8$ et de 128 expériences pour $L = 256, 1024$.

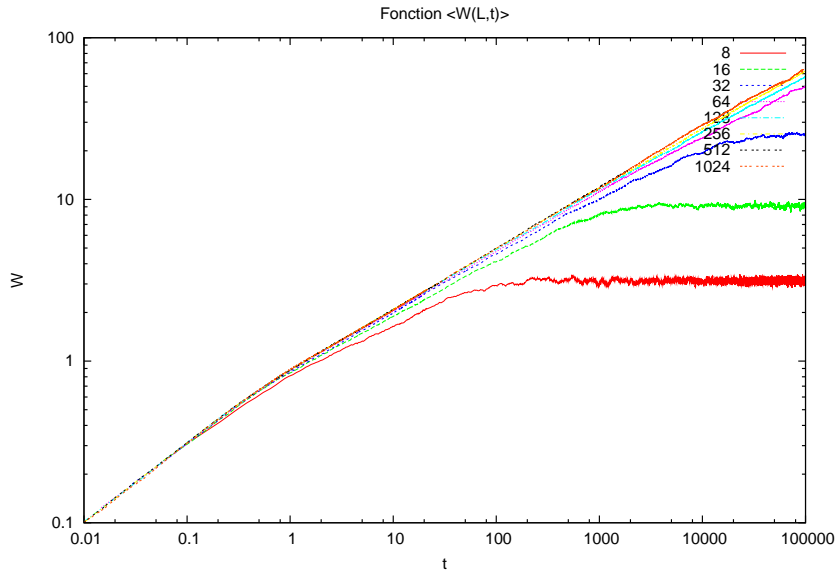


FIG. 7.5. Modèle MC1D-d+R : Rugosité W en fonction du temps t selon une échelle log-log avec $T = 500K$ et $L = 8, 16, 32, 64, 128, 256, 1024$ (moyennés sur 500 expériences pour $L = 8, 16, 32, 64, 128$ et 128 expériences pour $L = 256, 1024$).

A une température intermédiaire, $T = 500K$ le taux $R_{i,j}$ prend les valeurs approximatives 1.6 et 10^{-3} pour $n = 1$ et $n = 2$ respectivement. Le déplacement des atomes alors devient plus importante, essentiellement pour des atomes ne possédant qu'un seul voisin. La loi d'échelle $W \sim t^\beta$ est satisfaite, avec β différent de $\frac{1}{2}$ pour les temps intermédiaires ($\tau > t > 1$) alors que la saturation intervient à des temps d'autant plus longs que le système est grand (la saturation de surface n'est

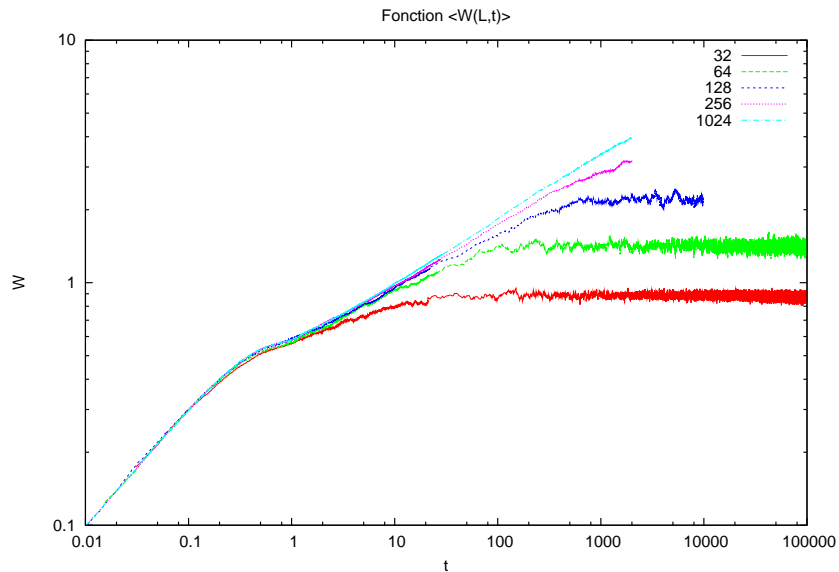


FIG. 7.6. *Modèle MC1D-d+R : Rugosité W en fonction du temps t selon une échelle log-log avec $T = 600K$ et $L = 32, 64, 128, 256, 1024$ (résultats moyennés sur 500 expériences pour $L = 32, 64, 128$ et 128 expériences pour $L = 256, 1024$).*

observée pour le temps maximum de calcul ($t = 10^5$) que pour $L \leq 64$).

En revanche, pour $T = 600K$, on observe les 3 phases d'évolution de W , celle en $t^{1/2}$, puis t^β et enfin la saturation. À cette température le taux de déplacement est beaucoup plus grand que dans les autres cas ($R_{i,j} \sim 307$ pour $n = 1$ et $R_{i,j} \sim 1$ pour $n = 2$). Le temps caractéristique de déplacement d'un atome est plus faible et le processus de lissage est plus rapide. Ceci peut être observé en comparant deux courbes à $T = 500K$ et $T = 600K$ pour système de longueur $L = 32$. Pour $600K$, le système atteint la saturation plus rapidement et la valeur W_{sat} est plus petite qu'à $500K$.

Notons que dans tous les cas tests, pour les temps très petits ($t \ll 1$) la rugosité n'est due qu'au seul processus de dépôt aléatoire, puisque, pour ces temps, l'effet de diffusion est faible car la surface est initialement plane.

La figure 7.7 montre la hauteur du dépôt prise au même instant pour les 3 valeurs de température. Comme attendu, plus la valeur de la température est grande, plus la surface déposée est lissée. À $400K$, l'interface se confond avec celle donnée par un dépôt aléatoire, la diffusion n'étant pas notable. À $500K$, l'interface est un plus lisse mais elle reste encore rugueuse, par ailleurs à $600K$, elle est presque plate par rapport aux deux autres cas, la valeur importante de la température déplaçant efficacement les atomes isolés.

Ainsi, le comportement des interfaces dépend effectivement de la température, et il en va de même

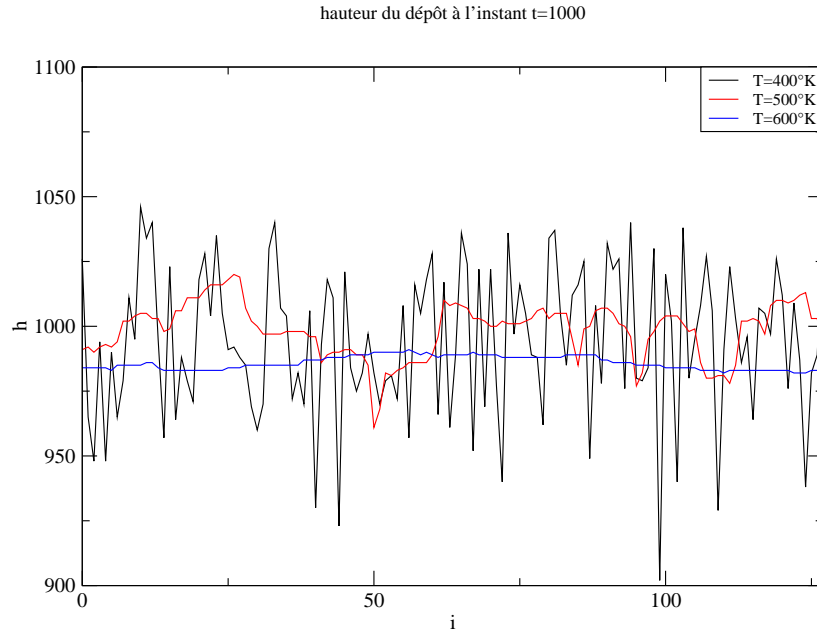


FIG. 7.7. Modèle MC1D-d+R : Hauteur h de l'interface pour un système de longueur $L = 128$ cases à l'instant $t = 1000$, pour trois différentes températures : $T = 400K$, $500K$ et $600K$.

des exposants α , β . Leur dépendance, en fonction de la température est donnée figure 7.9 et 7.8.

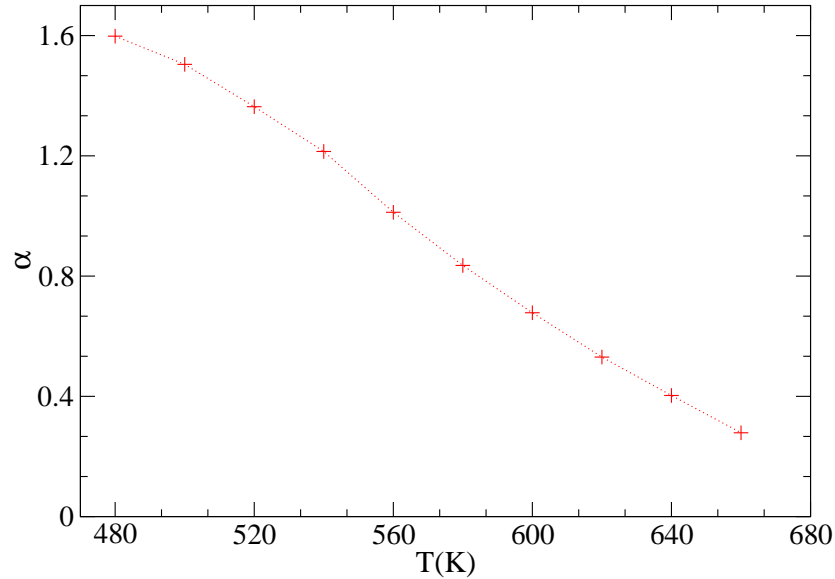


FIG. 7.8. Modèle MC1D-d+R : Exposant α en fonction de la température T . La valeur effective de α est obtenue par la pente de la droite de régression linéaire de $\log W_{sat}$ sur $\log L$. A $T = 480K$, les simulations sont faites pour un ensemble des surfaces de taille $L = 8, 12, 16$, pour les autres températures le calcul de α est fait sur un ensemble des systèmes de taille $L = 16, 32, 64$.

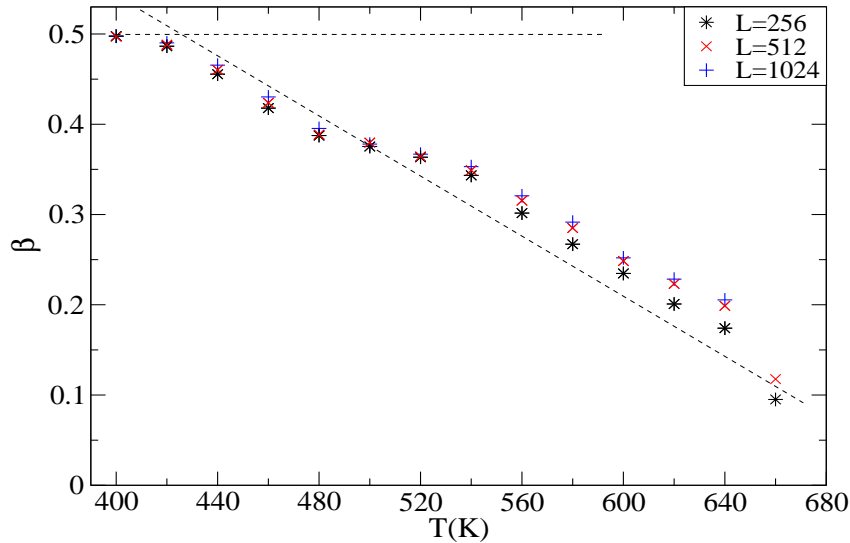


FIG. 7.9. Modèle MC1D-d+R : Exposant β en fonction de la température T calculé pour des systèmes de tailles $L = 256, 512, 1024$. Ces résultats sont moyennés sur un ensemble de 128 expériences.

Pour $T = 400\text{K}$, le coefficient $\beta = 0.5$ et donc $W \sim t^{\frac{1}{2}}$. Aussi la diffusion n'a pas de rôle et la rugosité évolue comme le modèle à dépôt aléatoire seul. A partir de la température critique $T_0 \approx 420\text{K}$ (donnée par l'intersection de la droite obtenue par régression linéaire de $\beta(T)$ et l'horizontale à $\beta = 0.5$) la diffusion diminue la rugosité W . Nous avons donc $W \sim t^{\beta(T)}$ et, si T augmente, les valeurs effectives de α et β diminuent, ce qui est la traduction du lissage de dépôt par la diffusion. Dans la limite $T \rightarrow \infty$ toutes les irrégularités de l'interface doivent disparaître et β, α tendent vers 0.

7.1.3 Modèle de dépôt aléatoire avec ombrage

Dans les modèles étudiés précédemment, les atomes sont envoyés vers le substrat selon la direction perpendiculaire à la surface plane initiale. La croissance de l'interface n'est alors caractérisée que par ses propriétés locales. Cette approche est insuffisante pour décrire de façon complète les trajectoires des atomes incidents. Aussi pour obtenir une meilleure description, l'angle d'incidence ne sera pas nul mais compris entre $\pm\theta_{max}$. Tout comme précédemment, l'atome incident se dépose lorsqu'il atteint la surface. Mais ici, l'atome peut être stoppé dans sa trajectoire par un flanc et l'atome glissera alors à sa verticale, jusqu'à rencontrer la surface pour respecter la contrainte du modèle SOS. Ce nouvel effet est appelé effet d'ombrage (cf. figure 7.10). Dans un premier temps, afin de bien comprendre l'influence de ce nouvel effet, on étudie le modèle de croissance aléatoire avec ombrage mais sans la relaxation. Un autre modèle de croissance aléatoire avec ombrage incluant une relaxation thermique est étudié dans un second temps (voir section 7.1.3.2).

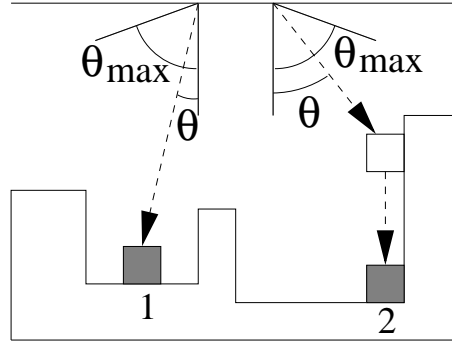


FIG. 7.10. Mécanisme de dépôt aléatoire avec ombrage : l'angle d'incidence de la particule est pris au hasard avec une distribution uniforme entre $-\theta_{max}$ et θ_{max} . Les particules ont une trajectoire balistique jusqu'à ce qu'elle rencontre l'interface (particule 1). Si la particule rencontre, dans sa trajectoire, le flanc d'une colonne, elle est déposée selon la verticale (particule 2), respectant ainsi la contrainte du modèle RSOS.

7.1.3.1 Modèle de dépôt aléatoire avec ombrage sans relaxation (MC1D-d+O)

La source d'atomes de même taille L que la surface de dépôt est placée à distance d du substrat. On choisit aléatoirement une position de départ d'un atome de la source, de même son angle d'incidence θ est pris au hasard dans une distribution uniforme entre $\pm\theta_{max}$. On prendra $d = 10^8$. Cette distance est à comparer avec 1, la taille normalisée d'un atome. Cette distance est environ celle entre le substrat et la cible d'un réacteur plasma. Notons que, dès que $h \ll d$, alors sa valeur exacte n'influe pas sur la structure du dépôt. Notons que pour l'algorithme, il suffit de prendre la hauteur H à laquelle part la particule telle que $H = h_{max}$, puisque celle-ci est balistique entre la source et sa position de dépôt.

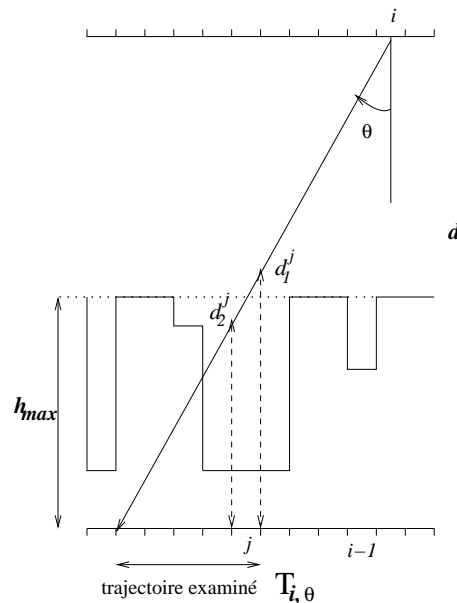


FIG. 7.11. Mécanisme de dépôt avec l'effet non-local de l'ombrage

Algorithme 3 . Algorithme du processus de dépôt aléatoire avec ombrage.

T : temps simulé ;

L : taille de la surface ;

θ_{max} : angle incident maximal ;

d : distance entre la source et le substrat ;

$t = 0$;

tantque ($t \leq T$) **faire**

- Choix aléatoire d'une position de départ i (entre 1 et L) et un angle incident θ (entre $-\theta_{max}$ et θ_{max}) avec une distribution uniforme.

si $\theta_{max} < 0$ **alors**

$\varepsilon = -1$;

sinon

$\varepsilon = 1$;

fin si

- Examiner l'ensemble de cases d'adsorption j de trajectoire $T_{i,\theta}$ calculé par h_{max} , θ_{max} , et d (cf. figure 7.11). A la position j :

si ($d_1^j > h(j, t)$) et ($d_2^j > h(j, t)$) **alors**

passer à la case suivante : $j \rightarrow j + \varepsilon$

sinon

si $d_1^j < h(j, t)$ **alors**

Déposer un atome à la position $j - \varepsilon$;

sinon

Déposer un atome à la position j ;

fin si

fin si

- Calculer la hauteur maximale h_{max} de la surface et le pas de temps MC t_i par la distribution des événements Poisson avec le taux $R = L$, $t = t + t_i$.

fin tantque

Les figures 7.12 et 7.13 donnent la hauteur du dépôt à des instants différents pour deux valeurs de θ_{max} (30° et 60°). Pour ces deux valeurs, la structure du dépôt est radicalement différente de celle obtenue jusqu'à présent. Des colonnes apparaissent d'autant plus larges que θ_{max} est grand croissent, séparées par des canyons, eux-mêmes plus ou moins étroits. L'aspect de ces structures colonnaires semble dépendre fortement à la fois du temps et de θ_{max} , ce que confirment les courbes 7.14 qui donnent la largeur moyenne des colonnes en fonction du temps pour les deux valeurs de θ_{max} choisies précédemment. Cette largeur moyenne est obtenue en comptant le nombre des sites d'adsorption dont leurs hauteurs sont au dessus de la hauteur moyenne et moyenné sur le nombre de colonnes, *i.e* le nombre de structures au dessus la hauteur moyenne.

La figure 7.14 représente l'évolution temporelle de la largeur moyenne des colonnes l_c pour $\theta_{max} =$

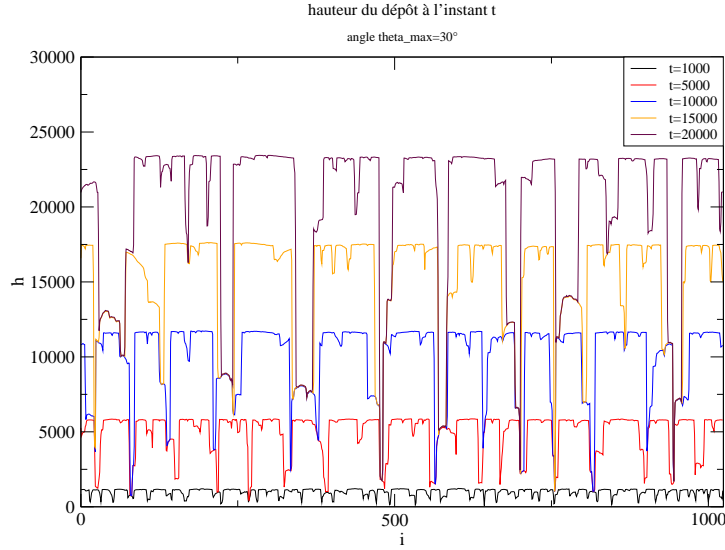


FIG. 7.12. Modèle MC1D-d+O : Hauteur de l'interface pour un système de taille $L = 1024$ aux différents instants $t = 1000, 5000, 10000, 15000, 20000$ pour $\theta_{max} = 30^\circ$.

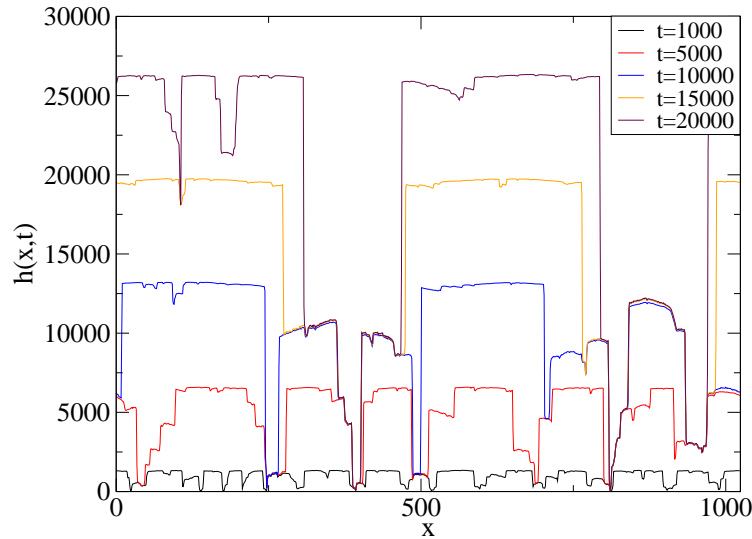


FIG. 7.13. Modèle MC1D-d+O : Hauteur de l'interface pour un système de taille $L = 1024$ aux différents instants $t = 1000, 5000, 10000, 15000, 20000$ pour $\theta_{max} = 60^\circ$.

30° et 60° . Elles indiquent que l_c se comporte comme une loi de puissance :

$$l_c(t) = t^p, \quad (7.3)$$

loi pour laquelle l'exposant p dépend de l'angle θ_{max} . Les résultats numériques montrent qu'il varie entre 0.34 et 0.57 pour θ_{max} prenant les valeurs comprises entre 2° et 80° . La figure 7.15 donne les

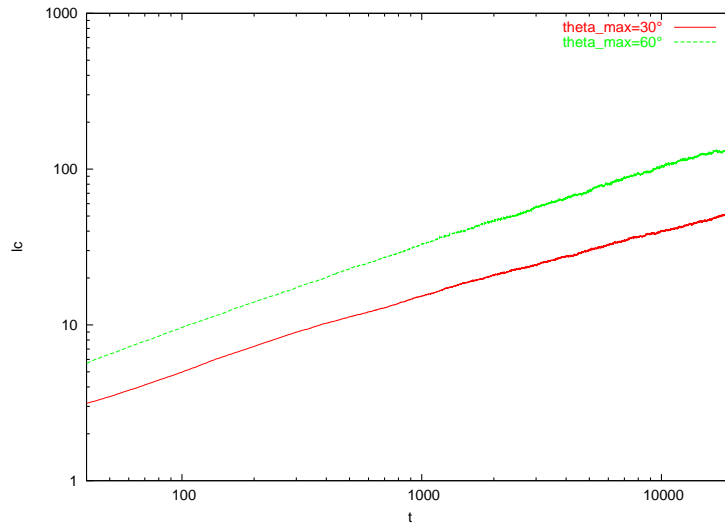


FIG. 7.14. Modèle MC1D-d+O : Largeur moyenne l_c des colonnes en fonction du temps t , en échelle log-log, pour $\theta_{max} = 30^\circ$ et 60° et pour $L = 1024$. Les résultats sont moyennés sur un ensemble de 100 expériences.

valeurs prises par l'exposant p en fonction de θ_{max} (en radian) et on observe une variation linéaire de $p(\theta_{max})$ pour $0.1(\text{rad}) < \theta_{max} < 1.4(\text{rad})$. On notera que l'effet de l'ombrage est négligeable lorsque $\theta_{max} < 2^\circ$, c'est-à-dire lorsque l'on se rapproche du dépôt normal à la surface initiale. Ces résultats contrastent avec ceux de Yao et Guo [50], pour qui l'exposant p n'est pas ou peu en fonction de θ_{max} . Guo et al ont fait leurs calculs pour $\theta_{max} = 30^\circ, 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ$ et 70° et ils ont trouvé que p varie entre 0.55 et 0.58. Notre approche systématique permet de mettre à jour la dépendance de p avec θ_{max} .

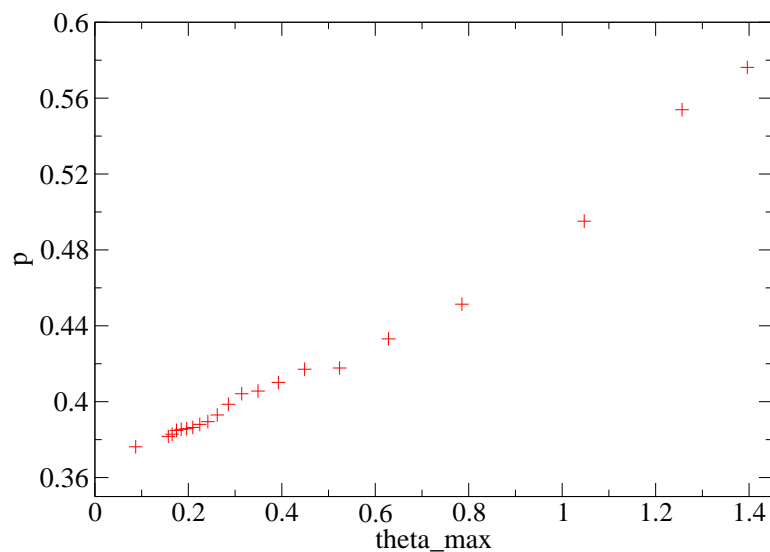


FIG. 7.15. Modèle MC1D-d+O : Valeurs de l'exposant p en fonction de θ_{max} (en radian) avec $L = 1024$. Les résultats sont moyennés sur un ensemble de 100 expériences.

La fonction de distribution de la hauteur d'interface $f(h)$ pour le cas $\theta_{max} = 30^\circ$ et à $t = 5000$ est donnée figure 7.16. Elle montre la présence de la structure colonnaire avec un pic autour de la hauteur maximale de l'interface qui correspond aux plateaux des colonnes. Si la hauteur à laquelle culmine l'ensemble des plateaux est bien marquée, les creux des canyons sont quant-à eux distribués uniformément entre 1000 et 5500.

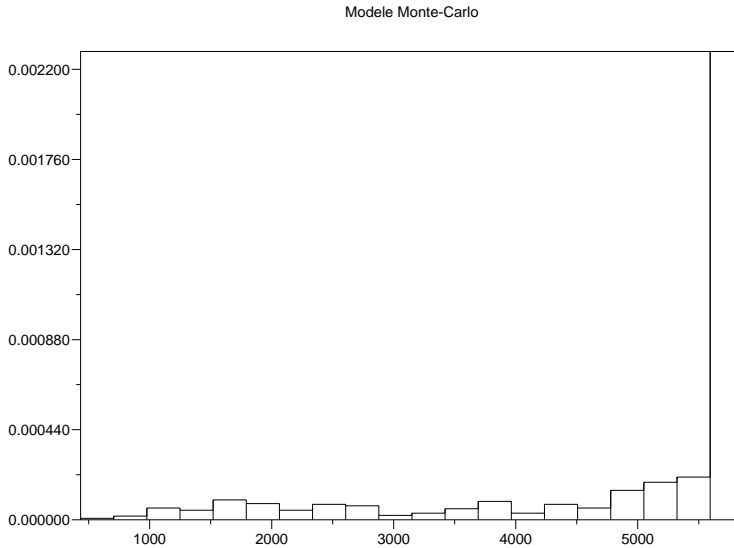


FIG. 7.16. Modèle MC1D-d+O : *Fonction de distribution $f(h)$ pour les cas $\theta_{max} = 30^\circ$ et à l'instant $t = 5000$*

Une autre façon de caractériser les colonnes est d'observer l'évolution de la hauteur maximale h_{max} et de la hauteur minimale h_{min} en fonction du temps. Les figures 7.17a et 7.17b donnent ce résultat pour $\theta_{max} = 30^\circ$ et $\theta_{max} = 60^\circ$ respectivement. Lorsque θ_{max} augmente, l'angle solide sous lequel sont vus les trous diminue (les colonnes ombrent davantage les trous) limitant l'accès des atomes à ces derniers. Cela favorise les colonnes au détriment des trous. On observe figures 7.17a et 7.17b une évolution temporelle linéaire de $h_{max}(t)$ et $h_{min}(t)$:

$$h_{max}(t) \sim at \quad h_{min}(t) \sim bt.$$

Les valeurs des coefficients a et b , pente des droites des figures 7.17a et 7.17b, dépendent de l'angle θ_{max} comme l'indiquent les figures 7.18a et 7.18b. Comme l'exposant p de largeur des colonnes, le coefficient a évolue aussi linéairement en fonction de θ_{max} et nous avons trouvé $a(\theta_{max}) \approx 1.02 + 0.3\theta_{max}$. Quant-au coefficient b , nous avons $b(\theta_{max}) \approx 0.033(0.2 + \theta_{max})^{-2.1}$. Lorsque $\theta_{max} \rightarrow 0$, l'ombrage est nul, le dépôt redevient un simple dépôt à flux constant (sur toute la surface, au terme aléatoire près). La surface croît de façon linéaire ($h = t$). C'est bien le résultat trouvé dans la limite où $\theta_{max} \rightarrow 0$ puisqu'alors $a \approx b \approx 1$ et donc $h_{max} \approx h_{min} \approx t$. Quand θ_{max} augmente, l'ombrage est

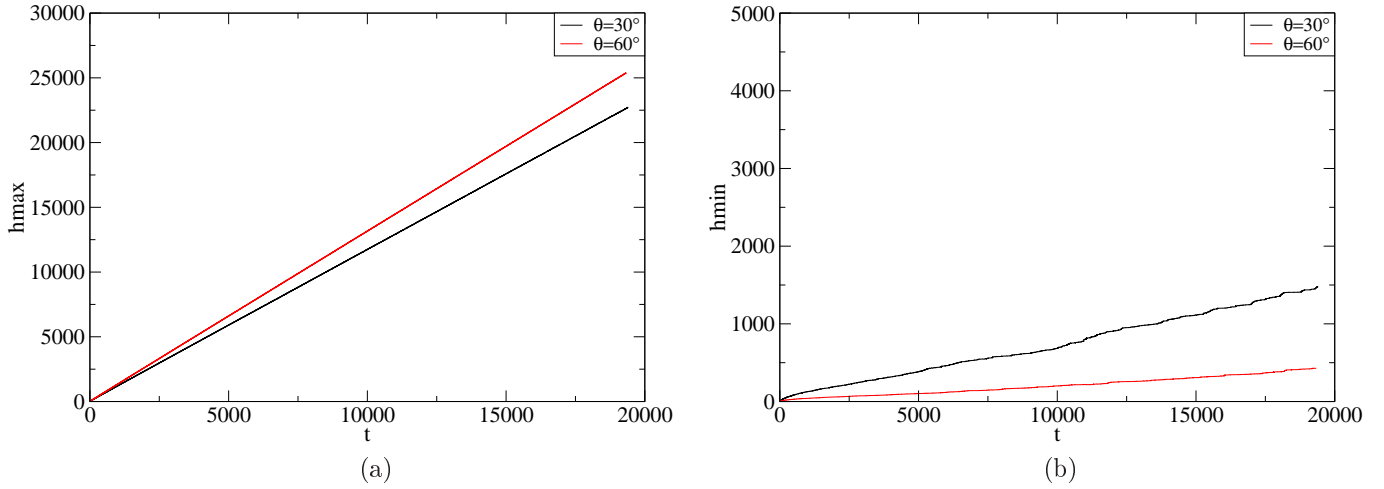


FIG. 7.17. Modèle MC1D-d+O : Hauteurs maximale h_{max} (figure a) et minimale h_{min} (figure b) de l'interface en fonction de temps pour un système de taille $L = 1024$ et $\theta_{max} = 30^\circ, 60^\circ$. Ces résultats sont moyennés sur un ensemble de 100 expériences.

plus fort ce qui permet aux colonnes de grandir plus vite (a augmente) et aux trous d'être moins alimentés (b diminue).

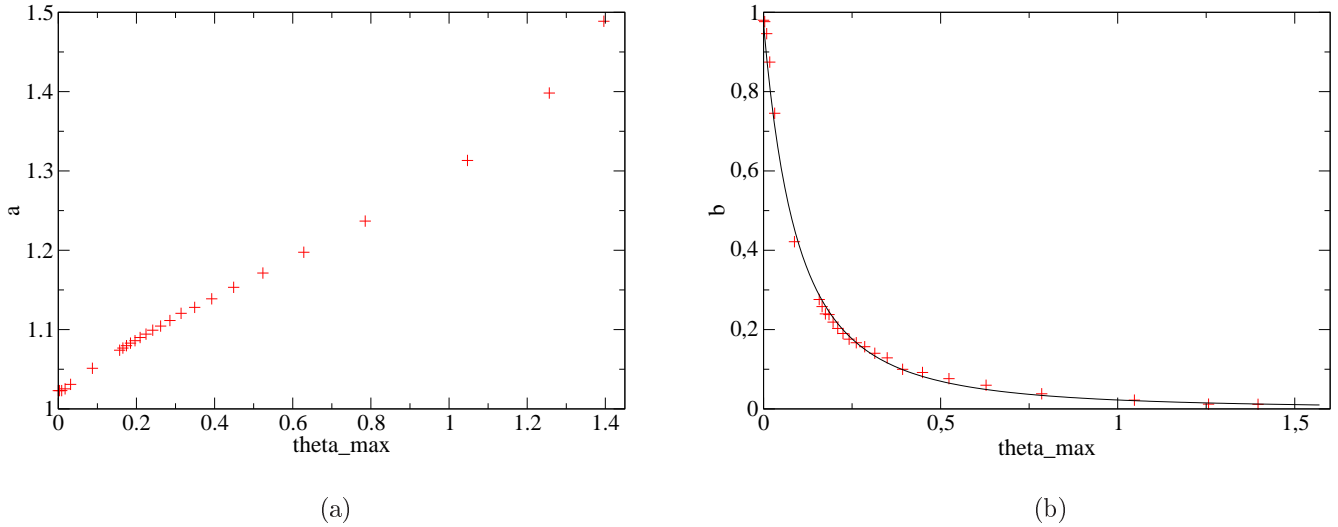


FIG. 7.18. Modèle MC1D-d+O : Valeurs des coefficients a (figure (a)) et b (figure (b)) en fonction de θ_{max} (en radian).

Dans ce modèle de croissance, nous avons un flux d'atomes incidents constant et donc une hauteur moyenne proportionnelle à t ($\langle h(t) \rangle \sim t$). D'autre part, comme la surface obtenue par le mécanisme de dépôt avec ombrage se forme selon une structure colonnaire et que le dépôt se fait principalement (voire quasi-exclusivement) sur les plateaux des colonnes, nous pouvons alors approcher la hauteur moyenne de l'interface de la façon suivante :

$$\langle h(t) \rangle \sim \frac{1}{L} n_c l_c h_{max},$$

où n_c est le nombre moyen des colonnes. Cette relation implique que $n_c \sim t^{-p}$ car nous avons $l_c h_{max} \sim t^{1+p}$ et $\langle h(t) \rangle \sim t$. La figure 7.19 présente la courbe $n_c(t)$, en échelle log-log, pour les deux cas $\theta_{max} = 30^\circ$ et 60° . Elle prouve bien que n_c se comporte comme une loi de puissance et les calculs donnent $n_c \sim t^{-0.43}$ pour $\theta_{max} = 30^\circ$ et $n_c \sim t^{-0.49}$ pour $\theta_{max} = 60^\circ$, ce sont exactement les valeurs de p correspondantes données dans la figure 7.15.

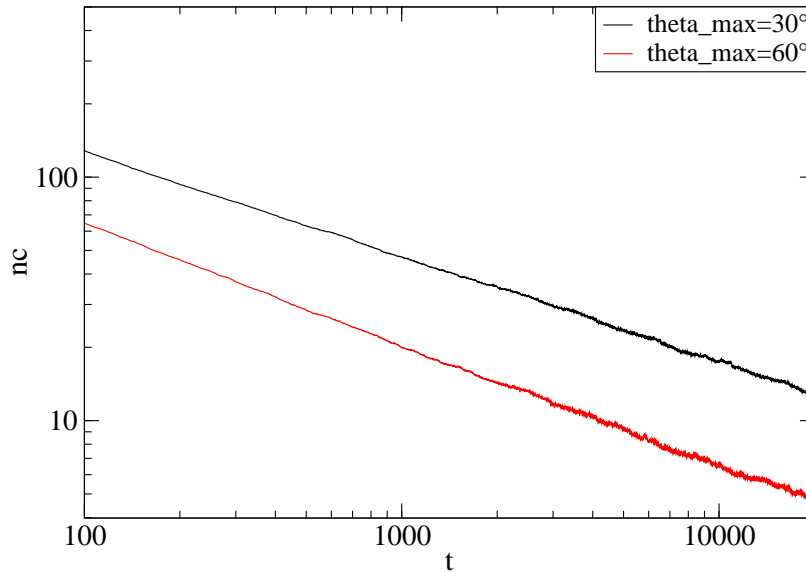


FIG. 7.19. Modèle MC1D-d+O : Nombre moyen des colonnes en fonction de temps t , en échelle log-log, pour $\theta_{max} = 30^\circ$, 60° et pour $L = 1024$. Les résultats sont moyennés sur un ensemble de 100 expériences.

Les caractéristiques importantes du dépôt sont données par la rugosité de l'interface et ses lois d'échelle. Une première remarque est que l'apparition de la structure des colonnes renforce progressivement les irrégularités de la surface. Cela empêche la saturation de la rugosité contrairement aux précédents modèles. Les courbes de la figure 7.20 donnent l'évolution de W pour différentes valeurs de θ_{max} .

Pour $\theta_{max} \neq 0$, on observe deux régimes différents :

- . Au début du dépôt la surface est plate, la rugosité est donc nulle. Pour des temps t petits ($t < t_c$), la rugosité est la même que celle donnée par un dépôt aléatoire, $W \sim t^{1/2}$, et l'ombrage n'a pas d'effet.
- . Pour $t > t_c$, ici t_c est le moment où les colonnes apparaissent, on observe que la rugosité croît linéairement $W \sim t$. Le temps caractéristique t_c de transition entre les deux régimes dépend de θ_{max} . Il est d'autant plus grand que θ_{max} est petit et dans la limite $\theta_{max} \rightarrow 0$, on est évidemment dans le cas dépôt sans l'ombrage et $t_c \rightarrow \infty$. La figure 7.21 donne t_c en

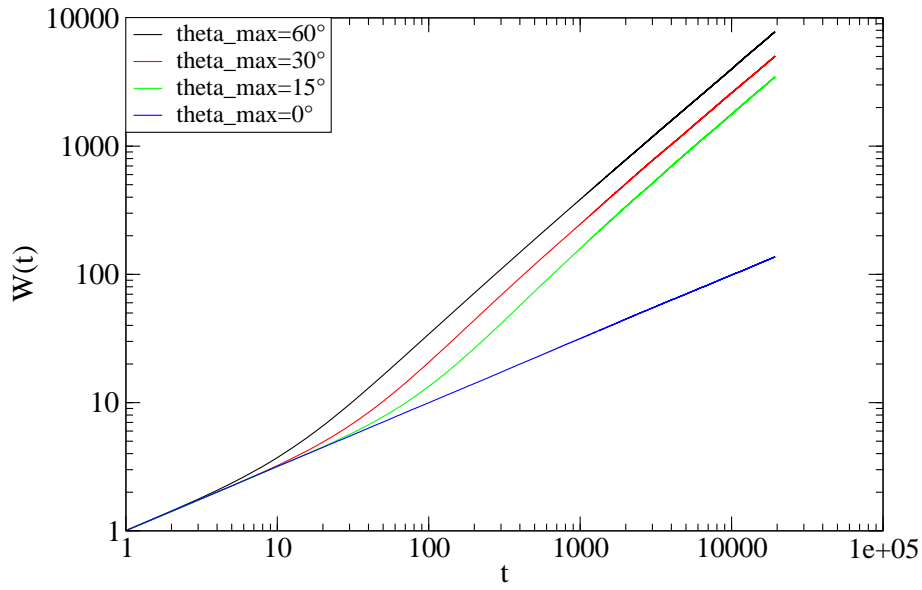


FIG. 7.20. Modèle MC1D-d+O : Rugosité W en temps t moyennée sur un ensemble de 100 expériences. Les paramètres sont $\theta_{max} = 15^\circ, 30^\circ, 60^\circ$ et $L = 1024$.

fonction de θ_{max} en échelle log-log et donne :

$$t_c \sim \theta_{max}^{-1.4}. \quad (7.4)$$

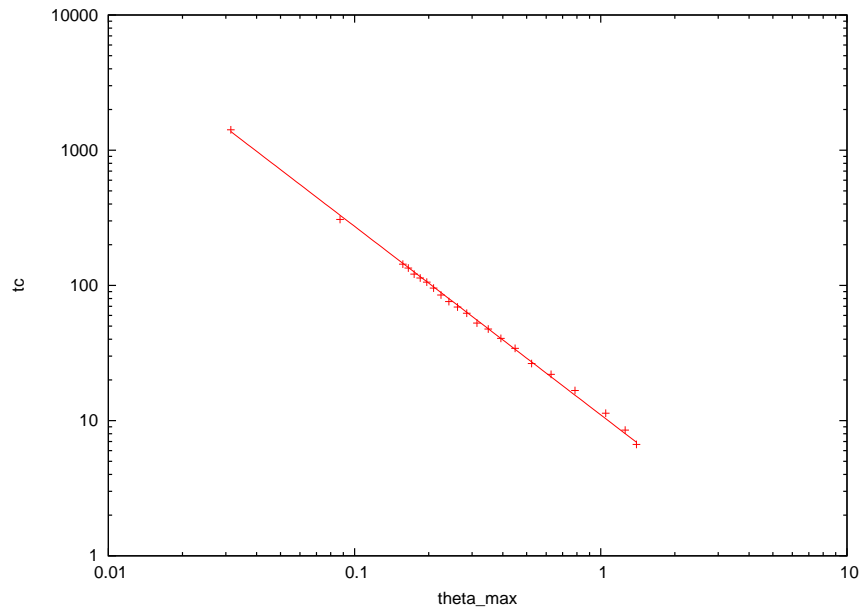


FIG. 7.21. Modèle MC1D-d+O : Temps t_c en fonction de θ_{max} (en radian) pour $L = 1024$

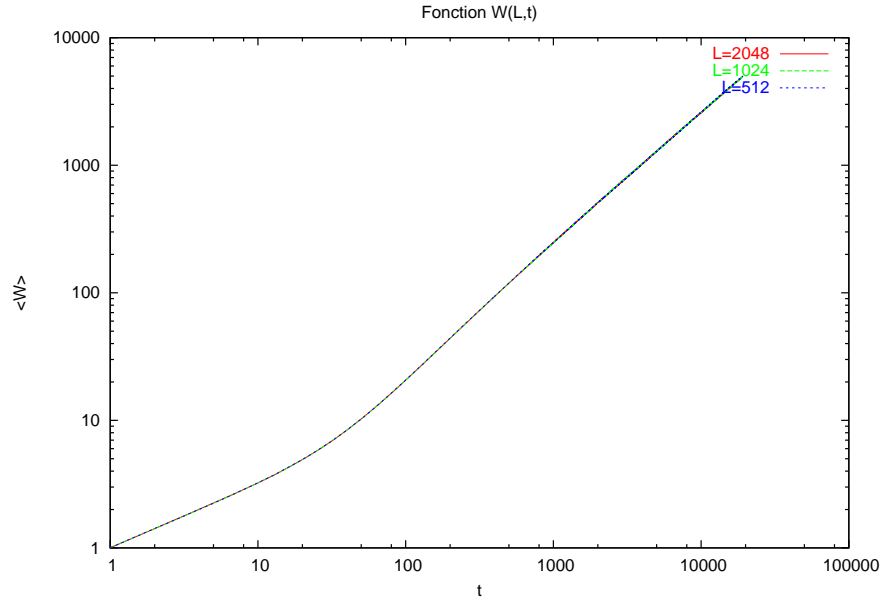


FIG. 7.22. Modèle MC1D-d+O : Rugosité W fonction du temps t , moyennée sur un ensemble de 300, 100 et 50 expériences respectivement pour $L = 512, 1024, 2048$ pour $\theta_{max} = 30^\circ$.

La figure 7.22 donne la rugosité W en fonction du temps t mais ici l'angle θ_{max} est fixé à 30° alors que le système prend les dimensions $L = 512, 1024$ et 1048 . Les trois courbes se superposent parfaitement indiquant qu'il n'y a pas d'effet dû à la taille finie du système et que la relation (7.4) est correcte pour tout L suffisamment grand pour faire apparaître 1 à 2 colonnes.

Ainsi, en résumé, le nouvel effet apporté par l'ombrage, nous permet de trouver une structure colonnaire. Cette nouvelle structure est caractérisée comme indiqué tableau 7.1.

TAB. 7.1. Caractéristique des colonnes fonction de l'angle maximum d'incidence θ_{max} .

Caractérisation des colonnes			
largeur l_c	$l_c \sim t^{p(\theta_{max})}$	avec	$p(\theta_{max}) = 0.16 \theta_{max} + 0.34$
nombre n_c	$n_c \sim t^{-p(\theta_{max})}$		
hauteur max h_{max}	$h_{max} \sim a(\theta_{max})t$	avec	$a(\theta_{max}) = 0.3 \theta_{max} + 1.02$
hauteur min h_{min}	$h_{min} \sim b(\theta_{max})$	avec	$b(\theta_{max}) \approx 0.033(0.2 + \theta_{max})^{-2.1}$
Caractérisation de la rugosité de l'interface			
	$W \sim t^{0.5}$	pour $t < t_c$	avec $t_c \sim \theta_{max}^{-1.4}$
	$W \sim t$	pour $t > t_c$	

7.1.3.2 Modèle de dépôt aléatoire avec ombrage incluant une relaxation thermique (MC1D-d+O+R)

Le modèle, donné ici, comprend en plus du dépôt avec ombrage du processus précédent, une relaxation thermique comme présentée dans la section 7.1.2.2. L'algorithme est basé sur l'algorithme 2 du modèle de dépôt aléatoire avec relaxation thermique sauf que l'étape de dépôt utilise l'algorithme 3 (ombrage). Pour mettre en évidence l'effet de la diffusion introduite ici, les résultats des simulations numériques obtenus pour ce modèle sont comparés avec ceux du modèle avec ombrage (mais sans relaxation) donné section 7.1.3.1.

Les simulations sont faites dans le cas où la température de la surface est $T = 500K$. Le profil des hauteurs h de l'interface pour deux valeurs de $\theta_{max} = 30^\circ$ et 60° sont donnés figures 7.23 et 7.24 respectivement. Pour cette valeur de température, la structure colonnaire persiste malgré l'effet de lissage dû au processus de relaxation. La comparaison entre les deux figures 7.12 et 7.23 ou 7.13 et 7.24 indique que la relaxation permet de diminuer la hauteur maximale des colonnes et de remplir des trous. De plus, avec la relaxation, les colonnes sont moins larges, le nombre des colonnes est plus grand (voir figure 7.25), les trous ont des largeurs presque identiques.

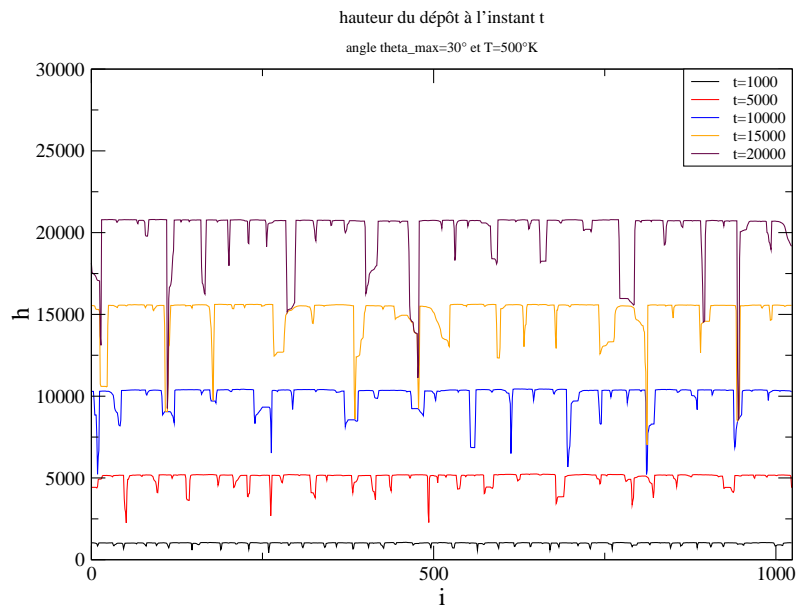


FIG. 7.23. Modèle MC1D-d+O+R : Hauteur de l'interface de taille $L = 1024$ aux instants $t = 1000, 5000, 10000, 15000, 20000$ pour $\theta_{max} = 30^\circ$ et $T = 500K$.

Rappelons que, pour le modèle de dépôt avec ombrage sans relaxation, la largeur moyenne des colonnes (7.3) est reliée à l'angle θ_{max} par une loi de puissance dont l'exposant p prend respectivement les valeurs 0.42 et 0.49 pour les angles $\theta_{max} = 30^\circ$ et 60° respectivement. Avec la relaxation, on obtient encore une loi de puissance mais les valeurs de p sont de 0.33 et 0.39, la température étant

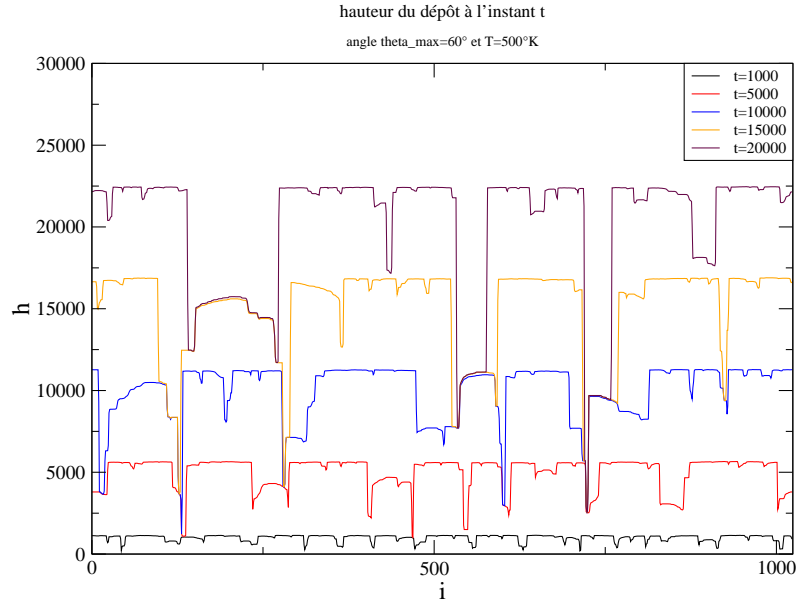


FIG. 7.24. Modèle MC1D-d+O+R : Hauteur de l'interface de taille $L = 1024$ aux instants $t = 1000, 5000, 10000, 15000, 20000$ pour $\theta_{max} = 60^\circ$ et $T = 500K$.

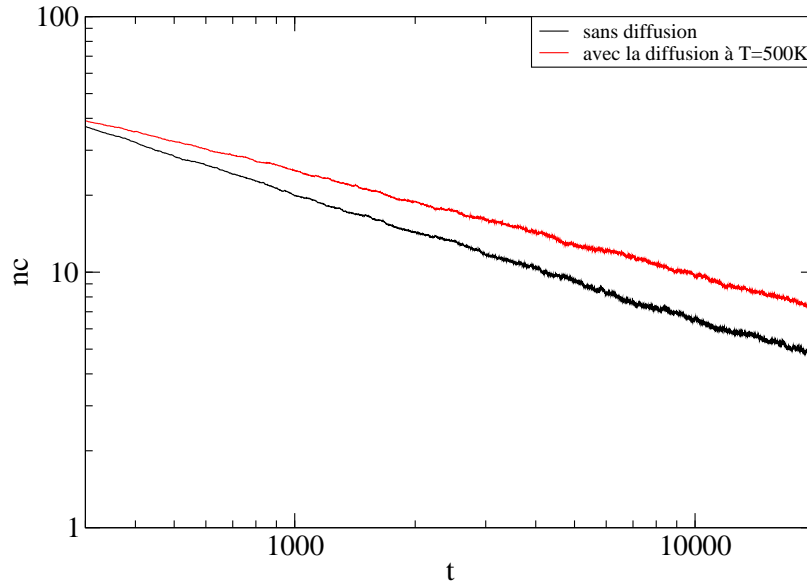


FIG. 7.25. Modèle MC1D-d+O+R : Nombre moyen de colonnes en fonction du temps t pour $\theta_{max} = 60^\circ$, $L = 1024$. La courbe rouge correspond au cas où il y a une diffusion à $T = 500K$, la courbe noire correspond au cas sans relaxation. Les résultats sont moyennés sur un ensemble de 100 expériences.

fixée à $T = 500K$.

À température fixée, pour les cas où l'influence de l'ombrage est plus forte que la diffusion, les propriétés principales de la surface, comme la largeur moyenne des colonnes, le nombre moyen de

colonnes, les hauteurs maximale h_{max} , minimale h_{min} , ne dépendent que de l'angle θ_{max} comme dans le cas sans diffusion, au moins pour des temps longs. Cependant, l'évolution temporelle de la rugosité W porte la marque de la présence de cette relaxation pour des temps intermédiaires.

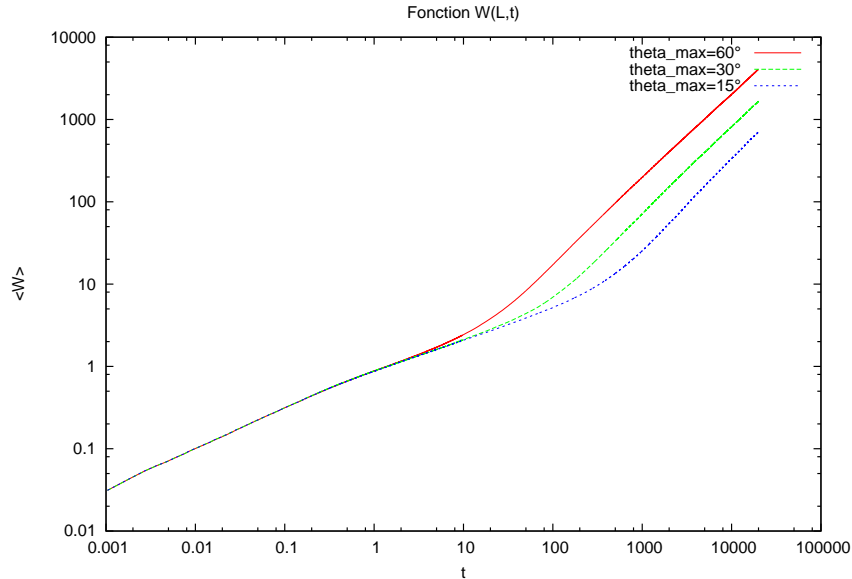


FIG. 7.26. Modèle MC1D-d+O+R : Rugosité W en fonction du temps t , moyennée sur un ensemble 100 expériences pour un système de taille $L = 1024$ cases. Les paramètres sont $\theta_{max} = 15^\circ$, 30° , 60° et $T = 500K$.

Comme pour les modèles précédents, $W(L, t) \sim t^{\frac{1}{2}}$ pour des temps courts. Pour des temps intermédiaires $1 < t < t_c$, W évolue comme une loi de puissance t^β avec $\beta \neq \frac{1}{2}$ et $\beta < 1$. L'exposant β prend la même valeur que celle obtenue dans le cas du modèle de dépôt aléatoire sans ombrage mais avec diffusion thermique à la même température T . Dans le cas où l'ombrage est plus fort que la diffusion, pour des $1 < t < t_c$ on peut observer l'influence de la diffusion des atomes sur l'évolution de la rugosité W , mais pour des temps plus long l'ombrage domine la diffusion et fait apparaître de grandes colonnes. Le temps t_c est déterminé par θ_{max} . Notons qu'à $T = 500K$ l'effet d'ombrage est négligeable pour $\theta_{max} < 5^\circ$. Par ailleurs dans le cas sans diffusion, il n'est négligeable que si $\theta_{max} < 2^\circ$. Pour des temps longs $t > t_c$, W se comporte comme t et n'atteint jamais la saturation comme dans le cas sans relaxation.

Étant donné un angle θ_{max} , on renforce la diffusion de surface en augmentant la température de manière à ce que la structure des colonnes ne disparaît pas, le processus de lissage va permettre de réduire plus encore la hauteur maximale des colonnes et de diminuer aussi la profondeur des trous (voir figures 7.27 et 7.28). Les figures 7.27 et 7.28 montrent que l'augmentation de la température permet de gommer progressivement la présence de l'ombrage en remplissant les gros trous et di-

minuant l'écart entre la hauteur maximale et minimale de la surface par la diffusion des atomes. Cependant, si la température n'est pas assez haute la structure des colonnes ne disparaître complètement et les colonnes continuent d'augmenter avec le temps.

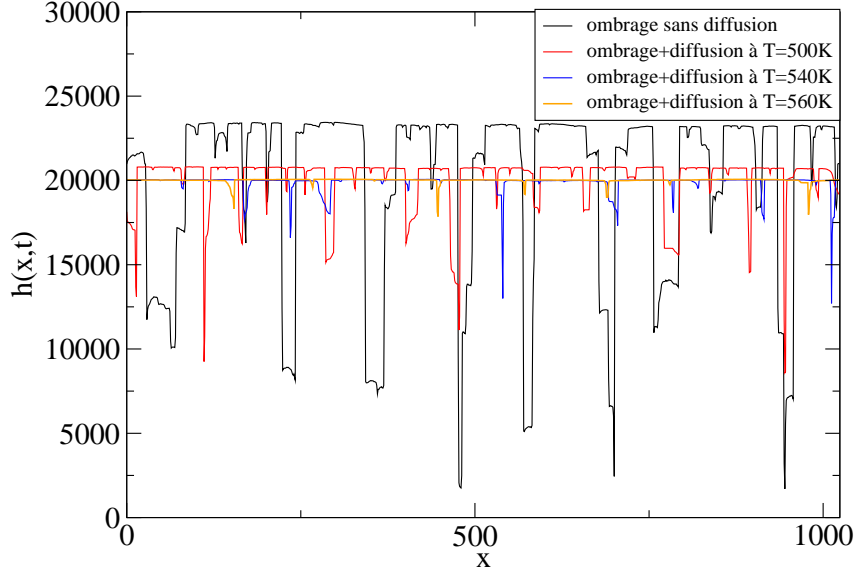


FIG. 7.27. Modèle MC1D-d+O+R : Hauteur h pour des systèmes de taille $L = 1024$ à l'instant $t = 20000$, pour $\theta_{max} = 30^\circ$, pour le modèle de dépôt avec ombrage sans diffusion, et pour le même modèle de dépôt avec ombrage et relaxation donnés par les températures $T = 500K, 540K, 560K$.

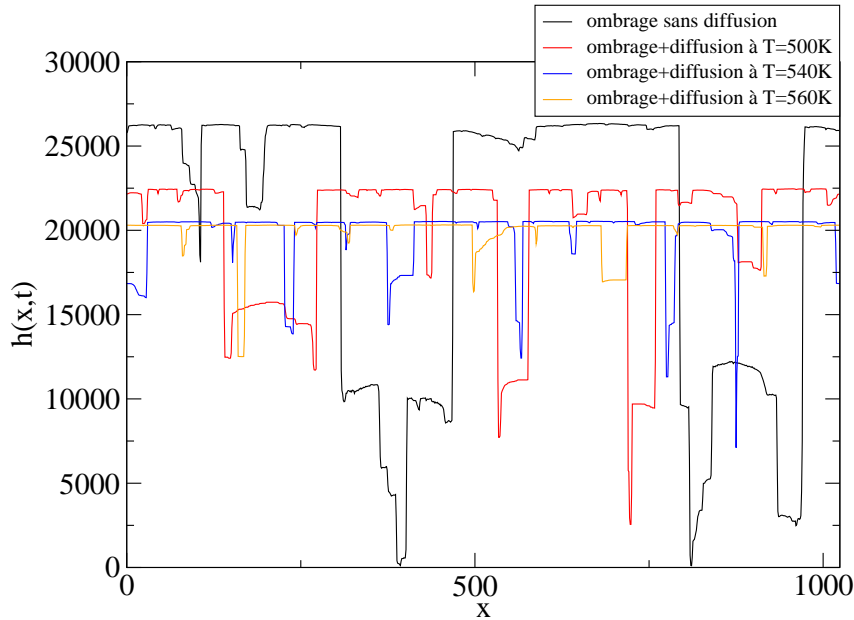


FIG. 7.28. Modèle MC1D-d+O+R : Hauteur h pour des systèmes de taille $L = 1024$ à l'instant $t = 20000$, pour $\theta_{max} = 60^\circ$, pour le modèle de dépôt avec ombrage sans diffusion, et pour le même modèle de dépôt avec ombrage et relaxation donnés par les températures $T = 500K, 540K, 560K$.

La figure 7.29 donne la largeur moyenne l_c des colonnes pour un angle maximum fixé et plusieurs valeurs de température de relaxation en échelle log-log. Il est clair que la largeur des colonnes l_c évolue encore comme une loi de puissance t^p . L'effet de la relaxation étant de réduire cette largeur et donc de diminuer la valeur de p par rapport au modèle sans diffusion. Néanmoins, la figure 7.29, indique que p reste assez stable quand la température ne change pas fortement. Pour $\theta_{max} = 60^\circ$, on obtient $p \approx 0.39$ à $T = 500K$, $p \approx 0.37$ à $T = 520K$ et $p \approx 0.36$ à $T = 540K$ (les valeurs de p sont assez proches). Pour $\theta_{max} = 30^\circ$, on obtient $p \approx 0.32 \pm 0.01$ pour les trois températures $T = 500K$, $520K$ et $540K$.

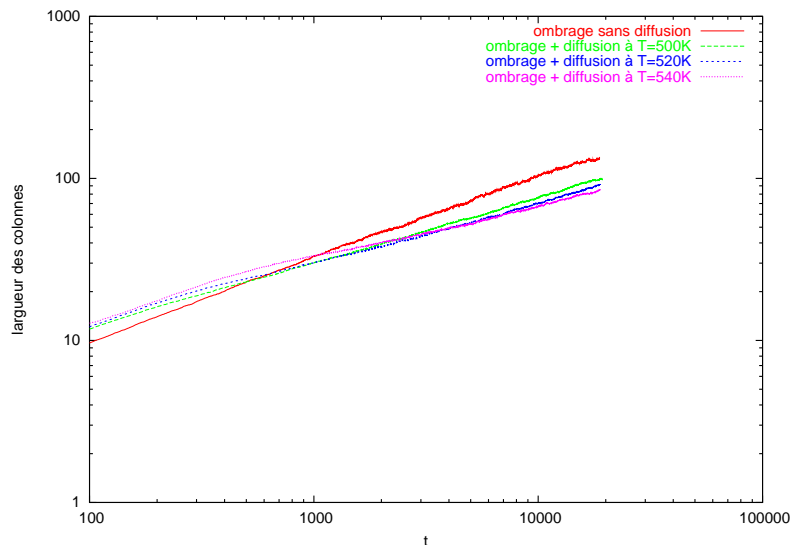


FIG. 7.29. Modèle MC1D-d+O+R : Largeur moyenne des colonnes en fonctions de temps pour $\theta_{max} = 60^\circ$ et un système de taille $L = 1024$. La courbe rouge correspond au cas sans relaxation, les autres courbes correspondent au cas incluant la relaxation donnée par les températures $T = 500K$, $520K$, $540K$. Les résultats sont moyennés sur un ensemble de 100 expériences.

Les simulations numériques nous montrent qu'à partir d'une température suffisamment haute, la structure colonnaire disparaît, cela signifie que la rugosité va atteindre la saturation en temps long (voir figure 7.30). Appelons T_0 cette température limite. Celle-là n'est pas la même pour des angles θ_{max} différents, elle baisse quand on réduit θ_{max} . Il existe ainsi une compétition entre l'ombrage qui pousse à la formation de colonnes et la relaxation thermique qui a tendance à lisser toutes les aspérités. Le comportement de l'interface est déterminé par l'ensemble des valeurs (θ_{max}, T_0) . Pour un couple (θ_{max}, T) situé en dessous la droite de température limite T_0 (cf. figure 7.31), la surface forme une structure colonnaire, la rugosité W évolue comme t en temps long et elle ne dépend que de l'angle θ_{max} . Réciproquement si (θ_{max}, T) se trouve au dessus de la droite T_0 , la structure colonnaire disparaît et l'interface se comporte comme celle du processus de croissance sans ombrage mais avec la relaxation thermique, c'est à dire W est proportionnel à t^β en temps intermédiaires puis se sature en temps longs. Les paramètres critiques sont définis par la température T et la taille

L . La figure 7.31 donne la température critique T_0 en fonction de θ_{max} qui marque la limite entre les deux comportements.

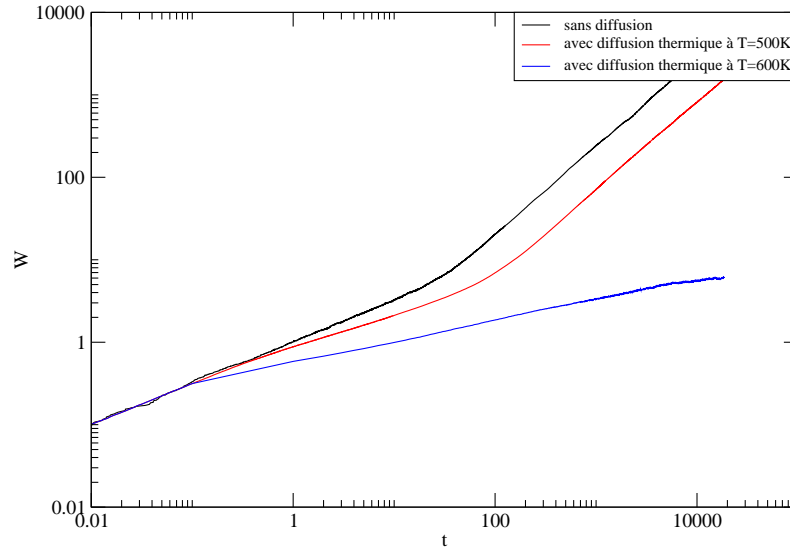


FIG. 7.30. Modèle MC1D-d+O+R : Rugosité W en fonction du temps t , moyennée sur un ensemble 100 expériences et un système de taille $L = 1024$ cases pour le cas $\theta_{max} = 30^\circ$ sans ou avec diffusion thermique à différentes température : $T = 500K, T = 600K$. À $T = 600K$ la structure colonnaire disparaît et la rugosité de l'interface se comporte comme dans le cas de dépôt aléatoire sans ombrage mais avec diffusion thermique, elle peut atteindre la saturation en temps long.

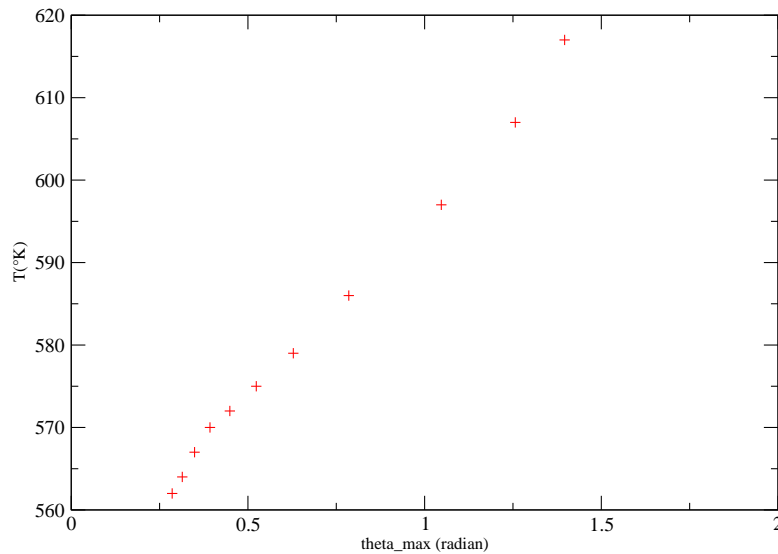


FIG. 7.31. Modèle MC1D-d+O+R : Température limite T_0 en fonction de θ_{max} .

7.2 Modèles continus

Le modèle continu le plus simple est celui qui décrit le processus de dépôt aléatoire sans relaxation

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = F(x, t) + \eta(x, t), \quad (7.5)$$

le terme $F(x, t)$ exprime le flux d'atomes, comme présenté dans le modèle MC, au point x à l'instant t . On supposera que tous les points de la surface sont équivalents du point de vue de la source et que celle-ci a déjà atteint un régime stationnaire. Aussi on prendra plus simplement un flux constant en temps et en espace $F(x, t) = F$. η est un bruit de moyenne nulle, sans corrélations ni spatiales ni temporelles. Il exprime la partie stochastique du mécanisme de dépôt et l'indépendance d'évolution entre les sites de l'interface :

$$\langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle = 2Da \delta(x - x') \delta(t - t'). \quad (7.6)$$

La résolution numérique de l'équation (7.5) donne aussi une fonction W qui évolue comme $t^{\frac{1}{2}}$. Il est évident que l'on doit ajouter d'autres termes à cette équation pour décrire des processus de croissance de l'interface plus complets.

7.2.1 Equation d'Edwards-Wilkinson (EW1D)

Pour décrire le mécanisme de dépôt avec relaxation de surface, on ajoute un terme de diffusion $\nabla^2 h$ dans l'équation (7.5) et on obtient l'équation d'Edwards-Wilkinson (EW) :

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = F(x, t) + \nu \nabla^2 h(x, t) + \eta(x, t),$$

où ν est le coefficient de diffusion de surface.

On remarque que le flux de dépôt F est constant et uniforme, il n'influence pas le comportement asymptotique de la rugosité d'interface W . L'équation EW peut donc s'écrire simplement sous cette forme :

$$\frac{\partial \tilde{h}(x, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 \tilde{h}(x, t) + \eta(x, t), \quad (7.7)$$

avec $\tilde{h} = h - \bar{h}$ où $\bar{h} = Ft$ et elle ne changera pas les propriétés statistiques de la croissance du modèle étudié. Il en est de même pour l'équation KPZ (7.17), aussi pour ces deux modèles on se placera dans un référentiel qui se déplace avec la hauteur moyenne \bar{h} et on omettra le postiche \sim à \tilde{h} sans ambiguïté.

7.2.1.1 Lois d'échelle de l'équation EW.

Nous calculons maintenant les exposants de croissance par des arguments d'échelle. Les lois d'échelle supposent que :

$$W \sim t^\beta, W_{sat} \sim L^\alpha, \tau \sim L^z.$$

On cherche alors des relations entre h (ou W) et x (ou L), entre h et t , et entre t et x (L).

On effectue un changement d'échelle de paramètre b ($b > 0$) suivant :

$$\begin{cases} t = b^\gamma \bar{t}, \\ h = b^\mu \bar{h}, \\ x = b^\chi \bar{x}, \\ \nu = b^\theta \bar{\nu}, \\ D = b^\delta \bar{D}, \\ \eta = b^\phi \bar{\eta}. \end{cases} \quad (7.8)$$

En remplaçant les équations (7.8) dans l'équation (7.7) on obtient :

$$b^{\mu-\gamma} \frac{\partial \bar{h}}{\partial \bar{t}} = b^{\mu+\theta-2\chi} \bar{\nu} \frac{\partial^2 \bar{h}}{\partial \bar{x}^2} + b^\phi \bar{\eta}. \quad (7.9)$$

On souhaite que l'interface obtenue par ce changement d'échelle ait le même comportement que celui donné par l'équation origine. Ceci signifie que l'équation (7.7) doit être invariante lors de la transformation (7.8), c'est-à-dire l'équation (7.9) ne dépend pas de la valeur b . On en déduit que :

$$\mu - \gamma = \mu + \theta - 2\chi = \phi. \quad (7.10)$$

Les propriétés du bruit, données par l'équation (7.6), doivent aussi être invariantes par la transformation (7.8). On obtient la relation :

$$\phi = \frac{\delta - \chi - \gamma}{2}. \quad (7.11)$$

Le système (7.10), (7.11) s'écrit :

$$\begin{cases} \gamma + \theta - 2\chi = 0, \\ 2\mu + \theta - \chi - \delta = 0, \\ 2\phi + 3\chi - \theta - \delta = 0. \end{cases} \quad (7.12)$$

De (7.8) et (7.12) on déduit

$$\begin{cases} \frac{\nu t}{x^2} = \frac{\bar{\nu} \bar{t}}{\bar{x}^2}, \\ \frac{\nu h^2}{Dx} = \frac{\bar{\nu} \bar{h}^2}{D\bar{x}}, \\ \frac{x^3 \eta^2}{D\nu} = \frac{\bar{x}^3 \bar{\eta}^2}{D\bar{\nu}}. \end{cases} \quad (7.13)$$

On obtient ainsi :

$$h \sim x^{\frac{1}{2}}, \quad t \sim x^2, \quad h \sim t^{\frac{1}{4}}.$$

En dimension 1, les valeurs des exposants de lois d'échelle de l'équation EW sont donc :

$$\beta = \frac{1}{4}, \quad \alpha = \frac{1}{2}, \quad z = 2, \quad (7.14)$$

qui vérifient la relation $z = \alpha/\beta$. Les relations (7.13) permettent d'obtenir les variables sans dimensions :

$$\begin{cases} \hat{x} = \frac{x}{L}, \\ \hat{t} = \frac{\nu t}{L^2}, \\ \hat{h} = \sqrt{\frac{\nu}{LD}} h, \\ \hat{\eta} = \frac{L^{3/2}}{\sqrt{\nu D}} \eta. \end{cases} \quad (7.15)$$

Avec ces nouvelles variables l'équation (7.7) devient :

$$\frac{\partial \hat{h}}{\partial \hat{t}} = \nabla^2 \hat{h} + \hat{\eta}. \quad (7.16)$$

Ceci signifie que, pour une surface de taille L fixée, le comportement de \hat{h} (ou \widehat{W}) ne dépend d'aucun paramètre, y compris de ν . Dans ce modèle, afin de décrire l'évolution de la hauteur h au cours du temps, pour une interface de taille L , il suffit d'effectuer une seule simulation numérique avec une valeur donnée du coefficient ν . Nous allons le vérifier dans la partie suivante.

7.2.1.2 Résolutions numériques de l'équation EW.

Nous utilisons la méthode de différences finies implicite de type "splitting" pour résoudre l'équation EW avec des conditions de bords périodiques :

- Initialement à $t = 0$, la surface est vide, *i.e* $h(x, 0) = 0$.
- Choisir un pas de temps Δt . A l'étape n , $t_n = n\Delta t$, $h_i^n = h(x_i, t_n)$ est connu, ici $i = \overline{1, L}$ et $n = \overline{0, N}$ avec $N = \frac{T}{\Delta t}$, T est le temps simulé.

- Étape de dépôt, calculer :

$$h_i^{n+\frac{1}{2}} = h_i^n + \sqrt{\frac{2D\Delta t}{\Delta x}} \xi_i^n$$

où ξ_i^n est une variable aléatoire indépendante de moyenne nulle suivant une distribution uniforme entre -1 et 1 (on choisit loi uniforme ce qui ne change pas les résultats et correspond aux choix faits par d'autres auteurs [33]).

- Étape de diffusion, calculer h_i^{n+1} qui vérifie

$$\frac{h_i^{n+1} - h_i^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} = \nu \frac{h_{i+1}^{n+1} - 2h_i^{n+1} + h_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}$$

Généralement Δx est fixé à 1

Avec cette méthode nous obtenons les résultats numériques présentés figures 7.32, 7.33. Elles donnent respectivement la rugosité $W(t)$ pour des systèmes de longueurs L différentes et la valeur de sa saturation en fonction de L , paramétrée selon ν .

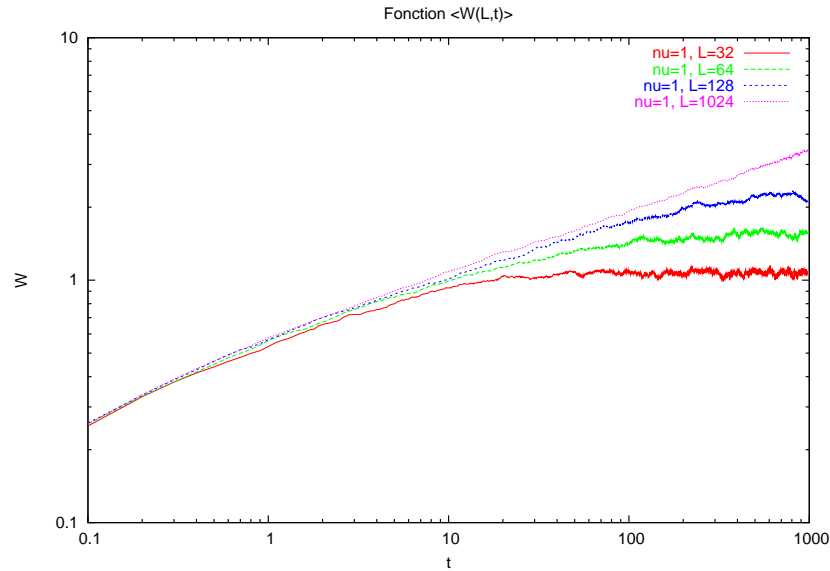


FIG. 7.32. EW1D : Rugosité $W(L,t)$ pour le modèle EW, en échelle log-log, $\nu = 1$ et $L = 32, 64, 128$ et 1024 . Pour les petits systèmes (32, 64, 128) les résultats sont moyennés sur un ensemble de 300 expériences, et pour $L = 1024$, W est moyenné sur un ensemble de 50 expériences.

Nous observons, figure 7.32, que la rugosité $W(t)$ obéit aux lois d'échelle prévues et que la saturation dépend de la taille du système : plus la taille est petite, plus nous pouvons voir rapidement l'effet de la saturation. Les courbes de la figure 7.33 représentent la valeur W_{sat} en fonction de la taille du système pour trois valeurs du paramètre ν . Toutes les courbes présentées dans la figure 7.33 (en échelle log-log) sont des droites, la valeur de cette pente nous donnera la valeur de l'exposant α de la loi d'échelle (6.3). Toutes les droites sont de même pente, la valeur de α est donc indépendante du

coefficient de diffusion ν . Elle est calculée par la régression linéaire et nous obtenons $\alpha \approx 0.5 \pm 0.01$.

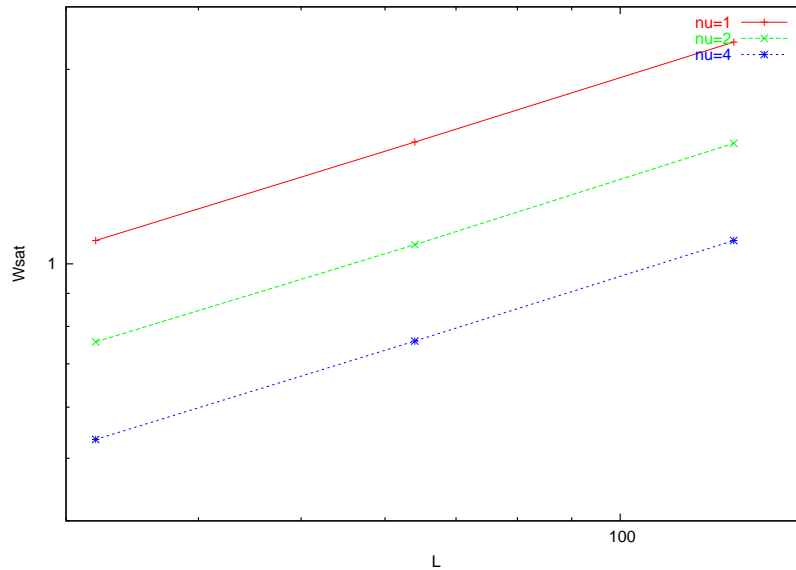


FIG. 7.33. EW1D : W_{sat} en fonction de taille L en échelle log-log (calculée pour $L=32, 64$ et 128) et pour trois valeurs du coefficient ν (1, 2 et 4).

Après la période de diffusion, pour laquelle $W \sim t^{1/2}$, et avant la saturation, les courbes $W(t)$ fonction de t montrent l'apparition d'une autre loi d'échelle. Cette loi d'échelle est piloté par l'exposant β . Nous donnons figure 7.34 l'évolution de la rugosité W fonction du temps donné par le modèle EW pour $L = 1024$ et pour plusieurs valeurs de ν . Les courbes dans la figure 7.34 prouvent que le coefficient ν n'affecte pas la valeur de l'exposant β . Son rôle est d'exprimer le processus de diffusion de l'interface : l'effet de lissage du processus de diffusion est autant plus rapide que ν est grand. En effet, lorsque ν est petit, nous constatons qu'au début de simulation W évolue comme la croissance aléatoire sans diffusion ($\beta = \frac{1}{2}$) mais qu'ensuite, pour les temps plus grand, nous pouvons voir cet effet de lissage illustré par le changement de la pente de courbe $\log W$ sur $\log t$. Plus ν est grand plus la diffusion intervient rapidement. Nous obtenons $\beta = 0.25 \pm 0.003$. Les valeurs des exposants α, β que nous avons trouvés ici sont très proches de celles calculées dans le processus de dépôt aléatoire avec relaxation vers le minimum local [32]. Nous pouvons donc considérer que l'équation EW représente bien le modèle discret de dépôt aléatoire incluant la relaxation "minimum local".

Le dernier résultat de cette partie consiste à valider l'équation adimensionnée (7.16) en indiquant que pour un système de taille L donnée on obtient bien la même évolution de \hat{h} (ou \widehat{W}) en fonction de \hat{t} . Cela est montré par le fait que les deux courbes $\widehat{W}(\hat{t})$ avec deux différentes valeurs de ν sont superposées dans la figure 7.35.

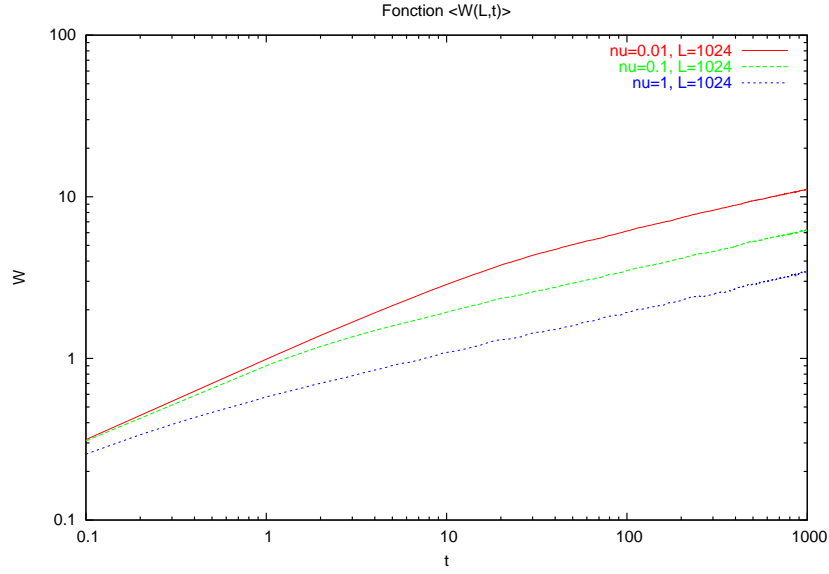


FIG. 7.34. EW1D : Fonction $W(L,t)$ en échelle log-log : calculée pour $\nu = 0.01, 0.1, 1$ et $L = 1024$. Les résultats sont moyennés sur un ensemble de 50 expériences.

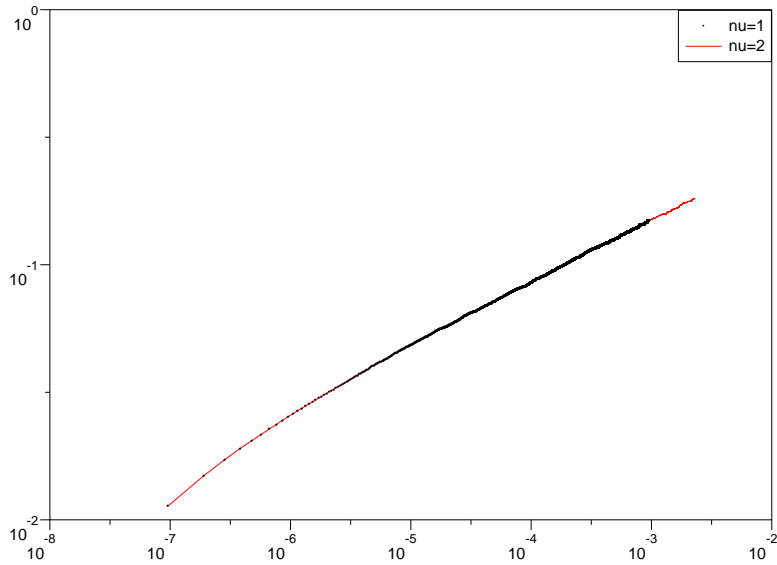


FIG. 7.35. EW1D : Log-log plot de \widehat{W} en fonction de \widehat{t} pour $L = 1024$.

7.2.2 Equation Kardar-Parisi-Zhang (KPZ1D).

En 1986, Kardar, Parisi, Zhang ont proposé un modèle prenant en compte que le dépôt croît selon la normale locale à la surface. Ils proposent alors l'équation non linéaire qui porte leur nom (KPZ) :

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(x,t) + \frac{\lambda}{2} (\nabla h(x,t))^2 + \eta(x,t). \quad (7.17)$$

Le mécanisme de dépôt est illustré figure 7.36 : une "particule" de rayon $F\delta t$ qui tombe sur la

surface, fait croître celle-la d'une hauteur δh avec :

$$\delta h = F\delta t\sqrt{1 + (\nabla h)^2}.$$

Dans le cas où la variation de la hauteur h est petite, le terme non linéaire $\sqrt{1 + (\nabla h)^2}$ peut être approximé par un terme du type $1 + \frac{(\nabla h)^2}{2}$, on obtient alors l'expression suivante :

$$\delta h = F\delta t \left[1 + \frac{(\nabla h)^2}{2} \right].$$

Dans l'équation KPZ le coefficient $\lambda > 0$ présente le flux de dépôt à la normale locale de l'interface.

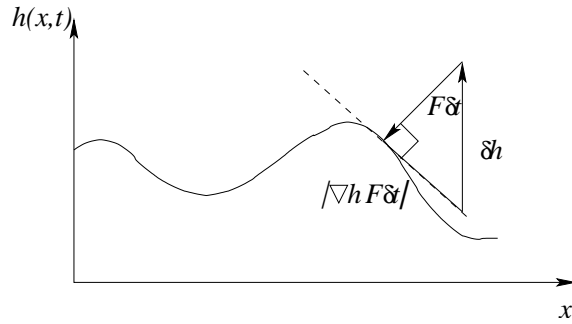


FIG. 7.36. Description du mécanisme de dépôt perpendiculaire à la surface locale donnant lieu au terme non-linéaire de l'équation KPZ.

7.2.2.1 Lois d'échelle de l'équation KPZ

L'introduction du terme non-linéaire dans l'équation de KPZ ne permet pas d'obtenir, par la technique d'invariance par changement d'échelle, utilisée précédemment pour l'équation d'EW, les bonnes valeurs des exposants α et β . Il faut faire appel à des méthodes plus compliquées et parmi eux, les méthodes de renormalisation sont les plus utilisées. Comme ce n'est pas le sujet principal de ce travail, nous ne présentons pas en détails des calculs donnés par renormalisation. Nous nous contentons de renvoyer à la référence [32], [8].

7.2.2.2 Résolutions numériques de l'équation KPZ

Pour résoudre numériquement l'équation KPZ avec des conditions au bords périodiques, nous utilisons le schéma numérique aux différences finies explicite suivant :

$$h_i^{n+1} = h_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left[\nu(h_{i+1}^n - 2h_i^n + h_{i-1}^n) + \frac{\lambda}{8}(h_{i+1}^n - h_{i-1}^n)^2 \right] + \sqrt{\frac{2D\Delta t}{\Delta x}} \xi_i^n, \quad (7.18)$$

où Δt et Δx sont respectivement les pas de discrétisation temporel et spatial, x_i est le i -ième point du maillage d'interface et $h_i^n = h(x_i, t^n)$. ξ_i^n est un nombre aléatoire tiré entre -1 et 1 dans une distribution uniforme. Le but de ce calcul est de retrouver les exposants des lois d'échelle de la rugosité W pour différentes valeurs des coefficients λ et ν . Nous prendrons $\Delta x = 1$ et $\Delta t = 0.001$

suffisamment petit afin d'assurer la stabilité du schéma numérique (7.18).

Dans l'équation KPZ, le terme λ a pour effet de renforcer la pente locale de l'interface, donc d'augmenter la rugosité W . Au contraire, le terme de diffusion piloté par le coefficient ν a pour effet de lisser l'interface. La figure 7.37 présente W en fonction du temps, en échelle log-log, d'une surface de taille $L = 1024$ et $\nu = 1$, avec trois différentes valeurs du coefficient $\lambda = 1, 3, 9$. Ces courbes prouvent que pour une valeur fixée de diffusion ν , la rugosité est d'autant plus forte que λ est grand. Contrairement à λ , le coefficient ν a pour l'effet de réduire les irrégularités de l'interface et donc de diminuer W . Cet effet est montré par les courbes de $W(t)$ dans la figure 7.38 pour un système de taille $L = 1024$, $\lambda = 1$ et $\nu = 1, 3$ et 9 . La rugosité W diminue lorsque ν augmente.

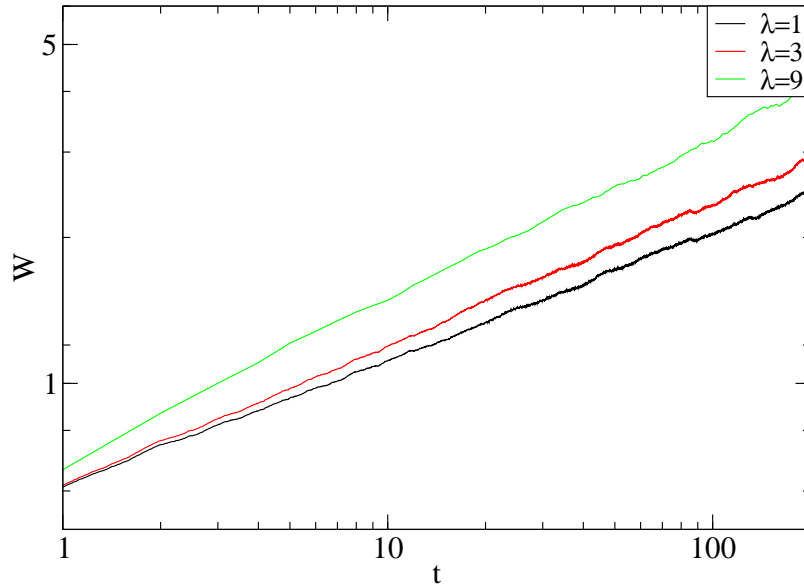


FIG. 7.37. KPZ1D : Rugosité W de l'interface en fonction du temps pour le modèle KPZ donné pour $\lambda = 1, 3$ et 9 . Les autres paramètres sont $\nu = 1$ et $L = 1024$. Les résultats sont moyennés sur un ensemble de 50 expériences.

Lorsque l'on examine les courbes $\log(W)$ en $\log(t)$ des figures 7.37 et 7.38 obtenues en prenant de différentes valeurs de λ et ν , on observe qu'elles n'ont pas exactement la même pente. Cela signifie que la valeur effective de l'exposant β varie en fonction de λ et ν . La courbe de la figure 7.39 présente la dépendance de l'exposant effectif β de la rugosité W en fonction du rapport $\frac{\lambda}{\nu}$. Nous trouvons que, dans la limite $\frac{\lambda}{\nu} \rightarrow 0$, l'exposant β tend vers la valeur effective de l'équation EW : $\beta \rightarrow 0.25$. Le cas trivial où β prend la valeur 0.25 est le cas où le terme non-linéaire $\lambda = 0$, l'équation KPZ (7.17) se réduit à l'équation EW (7.7). Si le rapport $\frac{\lambda}{\nu}$ est suffisamment grand, alors l'effet du terme non-linéaire domine la diffusion et nous obtenons $\beta \simeq 0.33$. Cette valeur effective de β a été trouvée

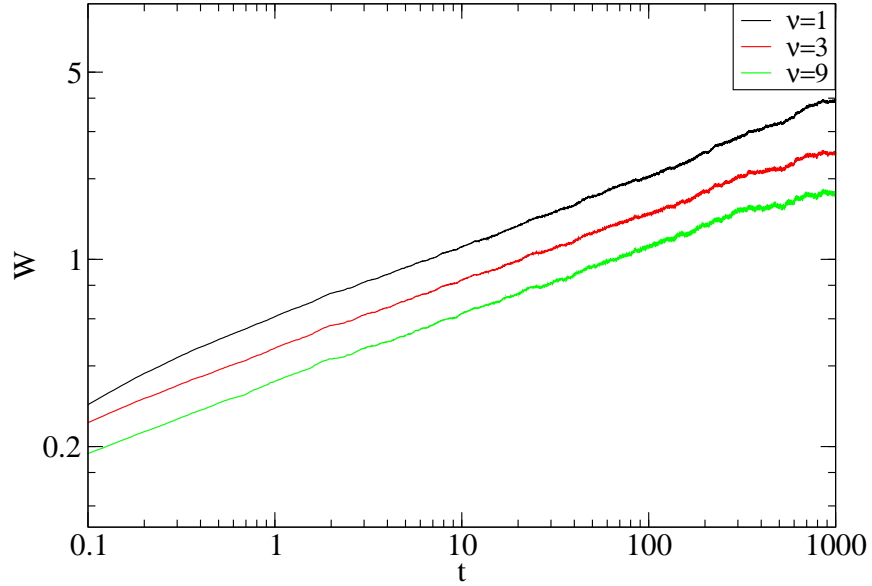


FIG. 7.38. KPZ1D : Idem que pour la figure 7.37 mais pour trois valeurs de $\nu = 1, 3, 9$ et $\lambda = 1$.

par une analyse de renormalisation [28].

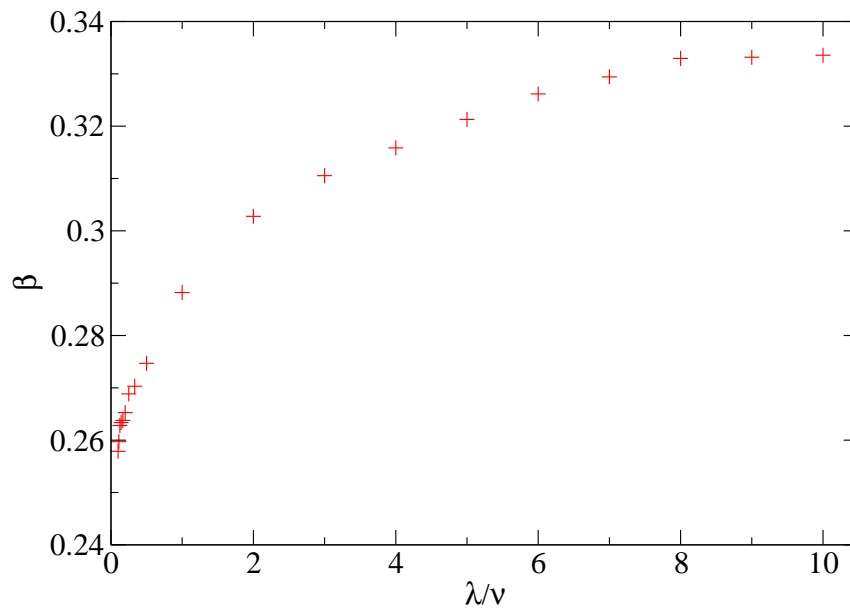


FIG. 7.39. KPZ1D : Valeur effective de l'exposant β du modèle KPZ en fonction du rapport $\frac{\lambda}{\nu}$

Pour des temps plus longs que ceux des figures 7.37 et 7.38, la rugosité sature tout comme pour le modèle EW. Cette saturation est due à la taille finie du système. La valeur W_{sat} atteinte par la rugosité dans sa phase de saturation est reportée figure 7.40 en fonction de la taille L et pour plusieurs valeurs de λ et ν . La valeur de W_{sat} dépend plus fortement de ν que de λ , cependant les pentes des trois droites sont les mêmes et donne la valeur effective de l'exposant α de l'équation KPZ. Nous trouvons $\alpha \simeq 0.49 \pm 0.01$ quelque soit la valeur de λ et ν . Le temps τ où la rugosité de l'interface commence à saturer vérifie également la loi d'échelle $\tau \sim L^z$ et les résultats numériques obtenus assurent que $z = \frac{\alpha}{\beta}$.

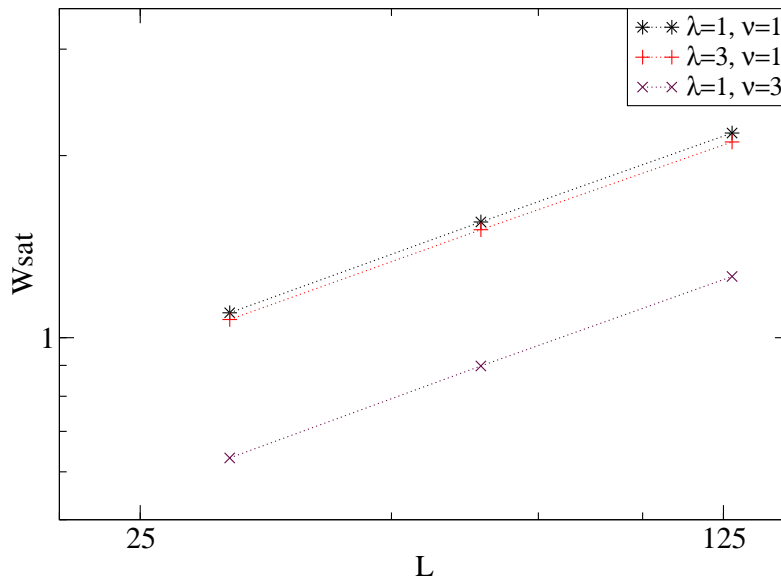


FIG. 7.40. KPZ1D : Valeur de la saturation W_{sat} de la rugosité en fonction de la taille L du système. Pour un couple de valeurs λ, ν donné, nous mesurons W_{sat} pour trois systèmes de taille $L = 32, 64, 128$. Ces résultats sont moyennés sur un ensemble de 300 expériences

7.2.3 Modèle continu incluant l'effet non-local de l'ombrage

Un modèle de dépôt Monte Carlo incluant l'effet non-local d'ombrage a été étudié section 7.1.3. L'interface fournie par ce modèle montre au cours du temps une structure colonnaire qui ne peut pas être reproduite avec des équations continues comme celle d'Edward-Wilkinson ou de KPZ. A notre connaissance, aucun modèle, basé sur une EDP n'est capable de reproduire de telles structures. Nous souhaitons donc trouver une EDP permettant de trouver des structures colonnaires. Rappelons que cet objectif est dicté par les observations d'expériences de dépôt par procédés plasma qui sont de ce type et que nous voulons modéliser [13].

Dans ce but, des effets d'ombrage ont été introduits dans les équation EW et KPZ. Une façon simple de décrire l'ombrage, proposé par Karunasiri, Bruinsma, et Rudnick [29] est basée sur l'idée de calculer le taux local de dépôt des atomes à chaque position de l'interface selon l'angle d'ouverture Ω vu de cette position.

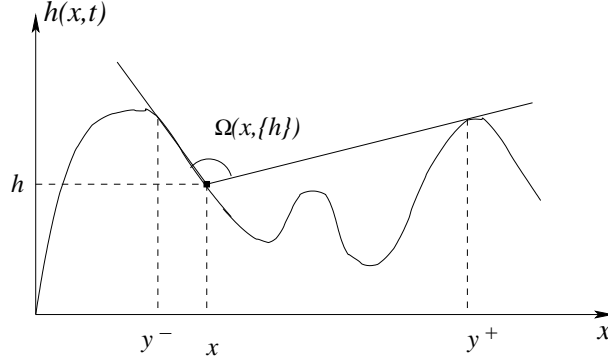


FIG. 7.41. Angle d'ouverture $\Omega(x, \{h\})$ pour la valeur $h(x)$. Il dépend de l'ensemble de h de la surface.

Dans un premier temps, nous considérons le modèle continu proposé par Jian Hua Yao, Christopher Roland, et Hong Guo [50] qui est l'équation KPZ (7.17) modifiée en introduisant le terme de l'angle d'ouverture Ω :

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(x, t) + \frac{\lambda}{2} (\nabla h(x, t))^2 + R \Omega(x, \{h(x, t)\}) + \eta(x, t), \quad (7.19)$$

où R est le flux des atomes incidents multiplié par l'angle solide $\Omega(x, \{h\})$ qui est l'angle sous lequel la surface au point x voit la source (cf figure 7.41). Le problème de ce terme est qu'il est non local, sa valeur dépend de l'ensemble des valeurs de l'interface. Cela présente des difficultés à la fois d'ordre mathématiques (natures de solution...) et aussi d'ordre numérique (un tel terme ralentit beaucoup les programmes. Nous avons mis en oeuvre des solutions pour essayer de les calculer de façon plus rapide). En 1 dimension, l'angle Ω est défini par :

$$\Omega(x, \{h\}) \stackrel{def}{=} \pi - \Omega_1(x, \{h\}) - \Omega_2(x, \{h\}), \quad (7.20)$$

où

$$\Omega_1(x, \{h\}) = \begin{cases} \sup_{y>x} \left[\arctan \left(\frac{h(y) - h(x)}{y - x} \right) \right] & \text{si } \exists y > x \text{ tel que } f(y) > f(x), \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (7.21)$$

$$\Omega_2(x, \{h\}) = \begin{cases} \sup_{y<x} \left[\arctan \left(\frac{h(y) - h(x)}{x - y} \right) \right] & \text{si } \exists y < x \text{ tel que } f(y) > f(x). \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (7.22)$$

7.2.3.1 Modèle de dépôt avec ombrage seul (EDP1D+ Ω)

Afin de mettre en évidence l'importance de l'effet d'ombrage, nous examinons d'abord l'équation simplifiée (7.19) ne contenant que le terme de dépôt incluant l'angle solide $\Omega(x, \{h\})$ et en omettant donc les autres termes (diffusion et dépôt non-linéaire).

$$\frac{\partial h}{\partial t} = R\Omega(x, \{h\}) + \eta(x, t). \quad (7.23)$$

La solution de (7.23) est calculée numériquement en utilisant la méthode des différences finies avec un schéma numérique explicite en prenant les valeurs $\Delta x = 1$ et $\Delta t = 0.05$ respectivement pour la discrétisation en espace et en temps. Le flux de dépôt des particules $R = 1$. L'angle d'ouverture Ω sera normalisé de la façon suivante : à un instant t fixé, nous calculons l'angle d'ouverture Ω en chaque position x (avec condition périodique) et il est alors divisé par la valeur moyenne $\langle \Omega \rangle (t)$ afin d'assurer que le flux de dépôt moyen soit R et que l'on dépose en moyenne une monocouche d'atomes par unité de temps.

La figure 7.42 nous montre le profil de la fonction $h(x, t)$ obtenu pour une surface de taille $L = 1024$ aux instants $t = 100, 300$ et 500 . Rappelons que le modèle MC donne dans ce cas (dépôt avec ombrage) une structure colonnaire bien marquée (cf figures 7.12 et 7.13). Nous n'observons pas de colonnes ici mais seulement une série de pics étroits de hauteurs différentes. Au fur et à mesure que le temps augmente, cette différence de hauteur s'accroît et finalement un seul pic domine qui va ombrer définitivement le reste de la surface. Ce dernier effet est dû à la taille finie du système. Par comparaison entre les résultats des modèles MC et EDP, il est clair que les deux ombrages n'ont pas les mêmes effets (colonnes pour le modèle MC et pics pour le modèle continu). Il convient donc de s'interroger sur cette différence de comportement.

En fait, la façon dont est vue la source est différente pour les deux modèles. Pour le modèle continu, la source est vue de l'interface et un point de cette interface situé à une distance x reçoit le flux de particules situé dans l'angle solide vu de ce point (voir figure 7.43a). Pour le modèle discret, un point de l'interface est alimenté non seulement par les particules qui arrivent dans l'angle solide vu de l'interface (voir figure 7.43b), mais aussi, pour les points qui se trouvent à l'aplomb d'une colonne des particules qui heurte le flanc de cette colonne et qui vont l'alimenter (voir figure 7.43c). Numériquement, la différence entre les deux processus est claire, pour le modèle continu, seul compte le point d'arrivée du flux, pour le modèle Monte Carlo, toute la trajectoire est calculée, de la source au point de dépôt des atomes.

Le type de dépôt par les flancs permet de réduire la distance entre les colonnes et transforme la surface en structure colonnaire. Il est possible de vérifier cette hypothèse en introduisant un nouveau modèle discret. Nous reprenons le modèle de dépôt Monte Carlo de la section 7.1.3 pour lequel les

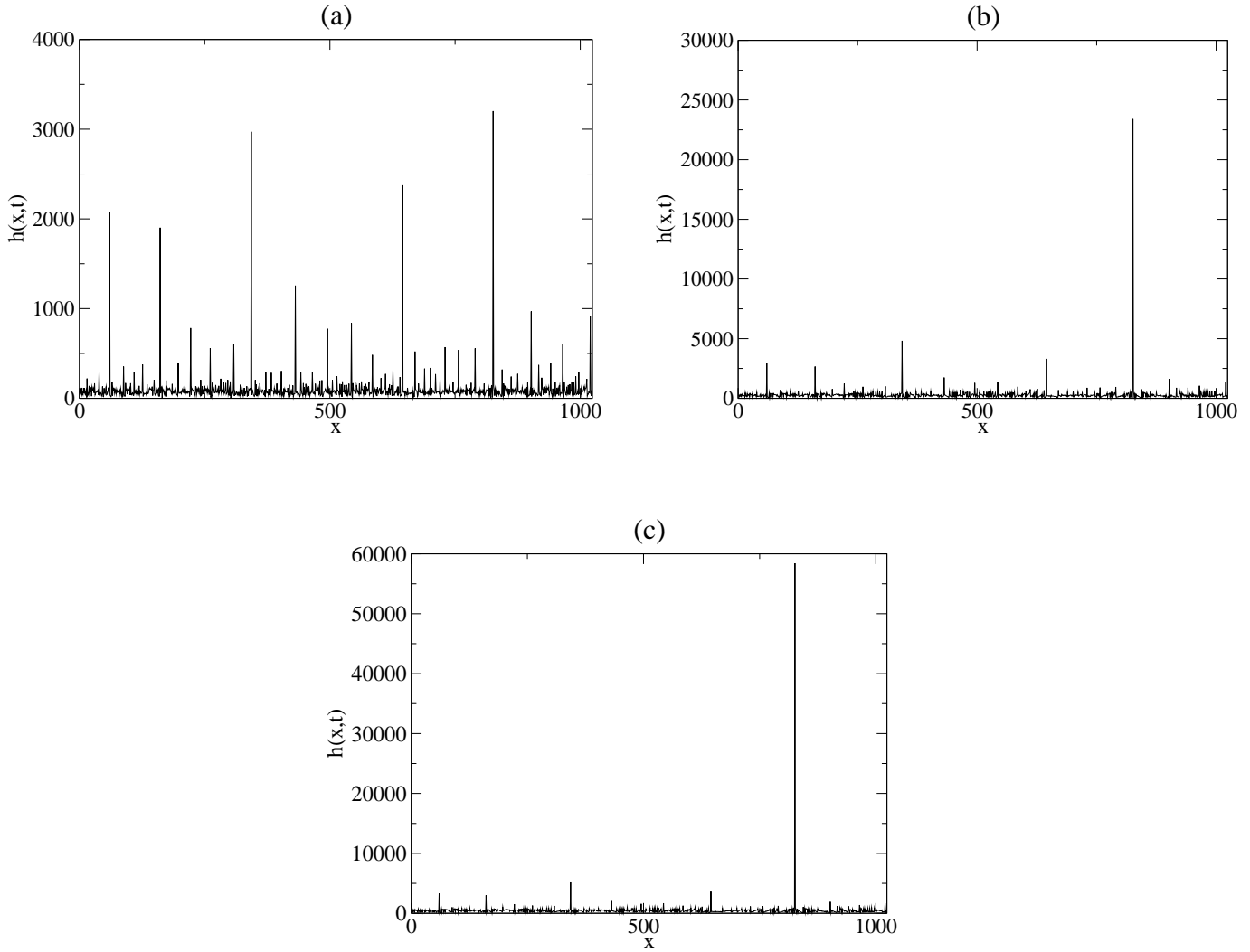


FIG. 7.42. $\text{EDP1D}+\Omega$: Hauteur $h(x,t)$ pour un système de taille $L = 1024$ aux instants $t = 100(a)$, $t = 300(b)$, $t = 500(c)$.

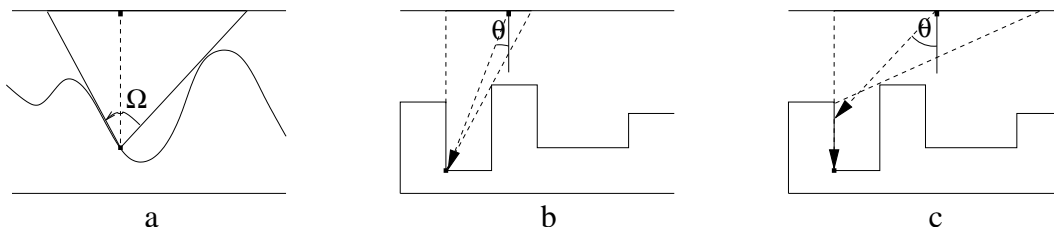


FIG. 7.43. Mécanisme de d'alimentation de l'interface : Selon l'angle d'ouverture pour le modèle continu (a) et pour le modèle Monte Carlo, par les atomes dont l'angle d'incidence permet d'atteindre un point donné (b) et par les atomes heurtant le flanc d'une colonne et alimentant le point à son aplomb (c).

seuls ingrédients sont le dépôt, l'angle d'incidence et l'ombrage (pas de diffusion), mais lorsqu'un atome heurte le flanc d'une colonne, il est éliminé. Cela signifie que si la particule choisie au départ

touche un flanc sur sa trajectoire déterminée par son angle incident θ , alors le dépôt de cette particule sera refusé. Ce nouveau modèle Monte Carlo de dépôt avec ombrage et l'effet de flanc interdit nous donne une configuration de la hauteur $h(x,t)$ de l'interface (figure 7.44) très similaire à celle obtenue grâce au modèle continu (figure 7.42). Il n'y a aucune raison physique d'interdire le dépôt à partir des flancs des colonnes seulement d'obtenir un processus discret qui imitent le continu. Il reste que le dépôt à partir des flancs est effectivement responsable de l'apparition des colonnes dans les modèles Monte Carlo et qu'il faut essayer de le modéliser dans les modèles continus.

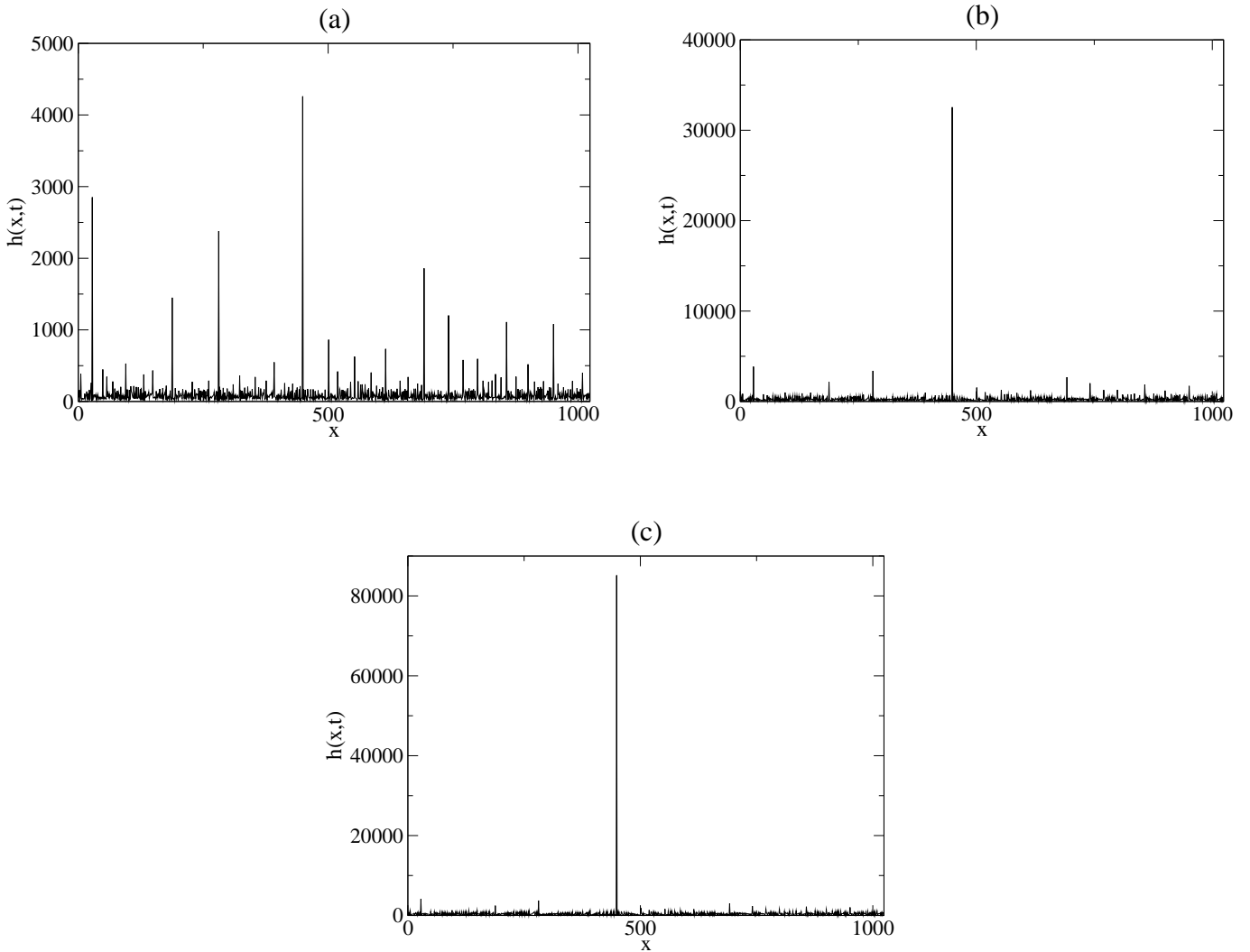


FIG. 7.44. Hauteur $h(x,t)$ pour un système de taille $L = 1024$ du nouveau modèle discret avec ombrage et de flanc interdit aux instants $t = 100$ (a), $t = 300$ (b), $t = 500$ (c).

Notons que dans les limites $\Omega \rightarrow 1$ pour le modèle continu (7.23) et $\theta_{max} \rightarrow 0$ pour le modèle discret nous retrouvons le processus de dépôt aléatoire présenté dans la partie 7.1.1.

7.2.3.2 Modèle de dépôt aléatoire avec ombrage et diffusion (EW1D+ Ω)

Afin d'avoir une étude aussi exhaustive que possible, nous regardons maintenant les solutions numériques du modèle continu avec le terme de l'angle d'ouverture incluant la diffusion et sans le terme de diffusion, *i.e* le modèle EW modifié en incluant l'ombrage par l'intermédiaire de l'angle d'ouverture (7.24). L'équation étudiée est donc la suivante :

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + R\Omega(x, \{h\}) + \eta(x, t), \quad (7.24)$$

en utilisant un schéma aux différences finies explicite :

$$h_i^{n+1} = h_i^n + \Omega_i^n \Delta t R + \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2} (h_{i+1}^n - 2h_i^n + h_{i-1}^n) \sqrt{\frac{2D\Delta t}{\Delta x}} \xi_i. \quad (7.25)$$

Nous comparons les résultats obtenus avec ceux du modèle Monte Carlo comportant l'ombrage, le dépôt sur les flancs interdits comme présenté ci-dessus et prenant en compte la relaxation thermique (figure 7.45).

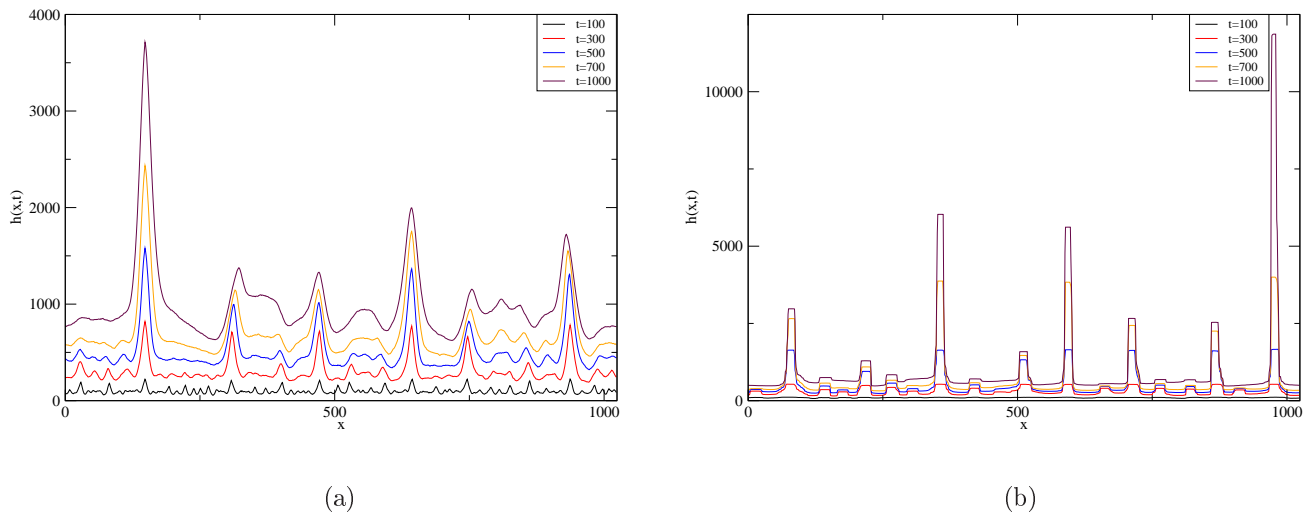


FIG. 7.45. Interface $h(x, t)$ à différents instants t pour le modèle continu $EW1D+\Omega$ (figure a) et le modèle Monte Carlo de dépôt flanc interdit (figure b). Les paramètres sont $L = 1024$, $\nu = 0.1$ pour le modèle continu (7.24) et $T = 600$ K pour le modèle discret (avec ombrage et dépôt sur les flancs interdit).

Dans le cas du modèle continu (7.24) et pour une diffusion de surface qui reste faible, concrètement $\nu = 0.1$, on observe que l'interface est lissée par rapport au cas sans diffusion (figure 7.42) : des pics, comme dans le cas sans diffusion, émergent. Cependant, ils présentent un profil plus ou moins gaussiens. En revanche, si l'on observe aussi des pics dans le nouveau modèle discret, leur forme est très différente. On obtient ici des colonnes très étroites dont la largeur n'évolue pas avec le temps.

Le processus de relaxation thermique qui permet de lisser la surface et d'élargir les pics dans le cas continu n'est pas à l'oeuvre ici. Cette différence entre les deux modèles est due au fait que le déplacement latéral des particules dans les modèles MC ne correspond pas vraiment à un processus de diffusion modélisé par le laplacien dans les équations continues.

Il est possible de mettre en évidence cette différence de comportement entre les 2 modèles grâce au cas test pour lequel le dépôt est supprimé avec la condition initiale particulière suivante : un pic de matière est mis au milieu de la surface. Pour le modèle continu, cela revient à résoudre l'équation de diffusion :

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h, \\ h(x, 0) = \delta(x - x_0), \end{cases} \quad (7.26)$$

dont la solution est la gaussienne

$$h(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sigma} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right),$$

pour laquelle l'écart-type σ dépend de la valeur du coefficient de diffusion ν selon $\sigma^2 = 2\nu t$. Dans le cas du modèle Monte Carlo, nous déposons initialement une colonne de 1000 atomes au centre de la boîte, puis nous laissons l'algorithme décider de leur déplacement donné par une température de $T = 600\text{K}$. Les résultats numériques obtenus par l'un et l'autre modèle sont donnés figures 7.46(a) pour le cas continu et 7.46(b) pour le cas discret. La figure 7.46(a) montre l'émergence d'un profil gaussien, ce qui n'est pas le cas de la figure 7.46(b) pour lequel le dépôt prend une forme de plateau avec des bords qui s'étalent davantage au cours du temps. De fait le processus de relaxation thermique du modèle Monte Carlo n'est pas une diffusion. A $t = 0$, seul l'atome situé en haut de la colonne peut se déplacer. Puis, à sa suite, et au cours du temps, les atomes qui n'ont pas de voisin au dessus d'eux (et qui en plus, si c'est le cas, ont au moins une case libre à leur droite ou à leur gauche). Cela explique la formation de plateau dans lesquels seuls les atomes sur les 2 bords ont des chances de se déplacer. Pour obtenir des solutions similaires, il aurait fallu permettre à tous les atomes de se déplacer à droite ou à gauche à tous les pas de temps, quel que soit le nombre de leurs voisins (même s'ils étaient couverts par d'autres atomes). Bien sûr, si l'interface est initialement plate de hauteur h_0 , un déplacement de l'ensemble des atomes ne modifiera pas, en moyenne, la hauteur h_0 (et dans le modèle continu, il n'y aurait aucun changement). Aussi d'un certain point de vue, la condition initiale très piquée choisie exacerbe la différence entre les 2 modèles, elle n'est pas aussi importante pour des dépôts habituels. Ainsi cela ne remet pas en cause l'équivalence des modèles entre EW et modèle MC de dépôt avec relaxation via les paramètres d'échelle α , β et z .

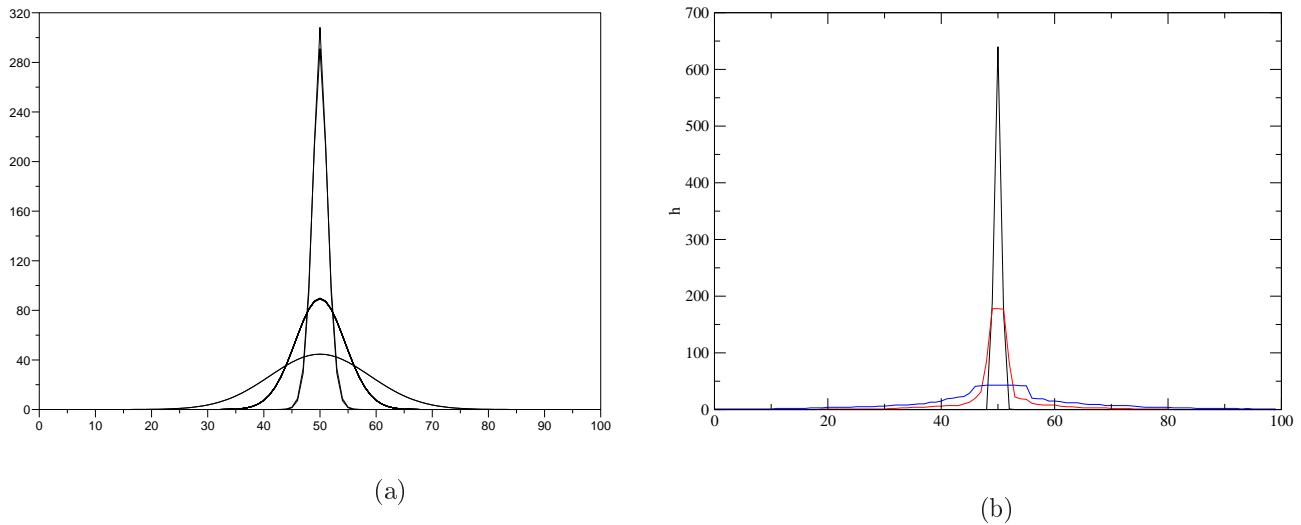


FIG. 7.46. Profils de l'interface à différents instants obtenus par la diffusion de l'équation continue EW (a) et la relaxation thermique MC (b). La condition initiale est $h(x, t = 0) = \delta x - x_0$ pour $t = 10, 100, 400$.

Remarque 7.2 La diffusion de surface est, à strictement parler, pris en compte par un terme en $\nabla^4 h$. Cependant, ce terme lissera davantage le pic initial, plus que ne l'aurait fait le terme de diffusion en $\nabla^2 h$.

7.2.3.3 Modèle KPZ avec ombrage (KPZ1D+ Ω)

Pour terminer ce tour d'horizon, nous présentons brièvement figure 7.47 un résultat typique du modèle KPZ incluant l'effet d'ombrage. La résolution numérique du modèle continu (7.19) est obtenu par un schéma numérique aux différences finies explicites, similaire au schéma donné en (7.25), ici pour les valeurs $\lambda = 0.05$, $\nu = 0.1$ et $\Delta t = 0.05$. Nous revenons à la condition initiale habituelle $h(x, t = 0) = 0$.

Le terme non linéaire $\frac{\lambda}{2}(\nabla h)^2$ décrit la croissance selon la normale locale de l'interface. Dans le cas où celle-ci reste faible, ce terme ne fait pas apparaître de structure colonnaire satisfaisante (cf section précédente, pour laquelle $\lambda = 0$ et où se forment de petites colonnes de profils plus ou moins gaussiens séparées par de larges vallées). La croissance latérale, modélisée par le terme non linéaire, conduit au développement de grosses colonnes triangulaires qui s'élargissent avec le temps (cf figure 7.47).

Manifestement, la nature de l'interface donnée figure 7.47 ne correspond pas à celle obtenue par les modèles discrets (cf. figure 7.23, 7.24). En effet, en considérant la fonction de distribution $f(h)$ donnée figure 7.48 à l'instant $t = 5000$, nous trouvons que la distribution de la hauteur $f(h)$ est

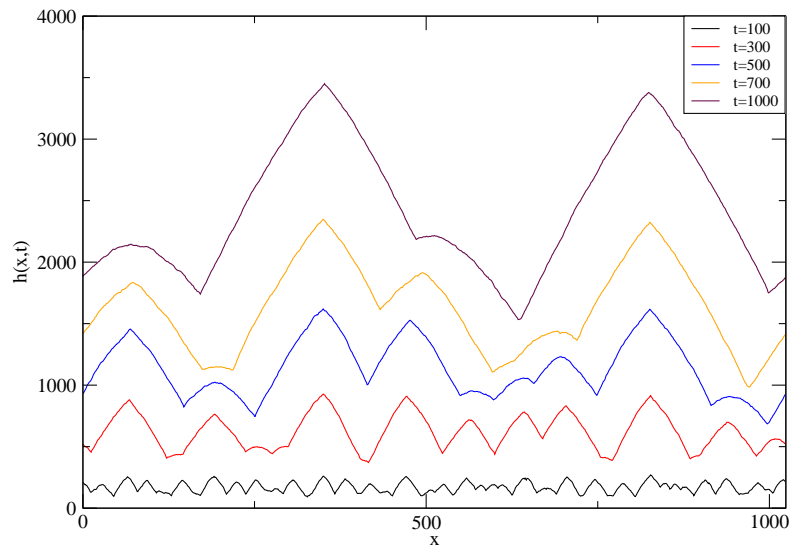


FIG. 7.47. $\text{KPZ1D}+\Omega$: Interface $h(x,t)$ obtenue par la résolution numérique de l'équation (7.19) avec ombrage aux instant $t = 100, 300, 500, 700$ et 1000 . Les paramètres sont $L = 1024, \nu = 0.1, \lambda = 0.05, \Delta x = 1, \Delta t = 0.05, R = 1$.

plutôt uniforme et ne fait pas apparaître des diracs traduisant la présence de plateaux.

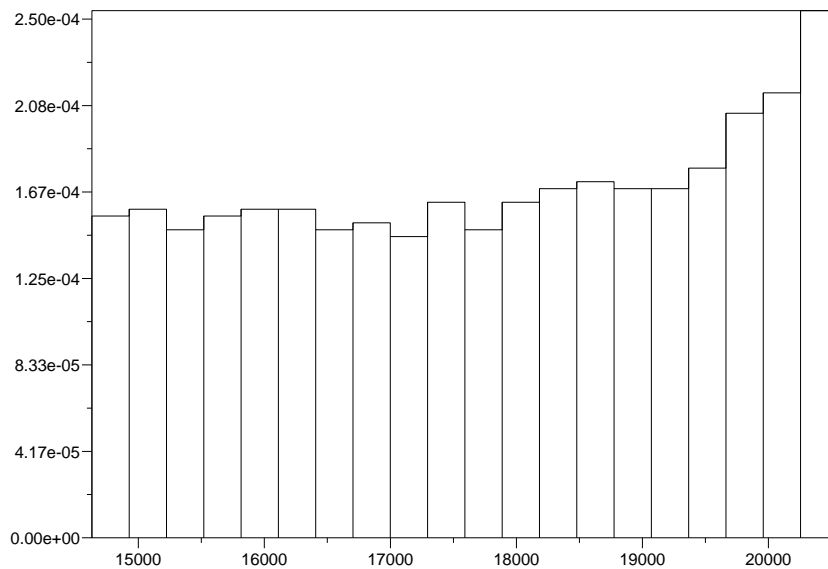


FIG. 7.48. $\text{KPZ1D}+\Omega$: Fonction de distribution de la hauteur de l'interface de l'équation (7.19) à l'instant $t = 5000$. Les paramètres sont ceux de la figure 7.47.

7.2.4 Nouveau modèle continu (EDP1D+ $g(\Omega)$)

Nous avons observé que la formation de hautes colonnes dans les modèles de Monte Carlo est due non seulement à l'effet d'ombrage, mais aussi au dépôt de particules qui heurtent le flanc des colonnes et viennent se déposer à la verticale de ces flans. Si on enlève ce dernier effet, seuls des pics étroits prennent naissance. Cet effet n'est pas présent dans tous les modèles continus proposés précédemment et aucun de ces modèles n'est capable de donner des interfaces à structure colonnaire.

Ainsi, la comparaison entre l'un et l'autre modèle suggère d'introduire dans le modèle continu un terme de déplacement qui dépend de la hauteur des zones hautes et des zones basses. Nous suggérons de modéliser ce déplacement par un terme de diffusion d'autant plus fort que l'on se trouve en haut d'une colonne. Une solution consisterait à prendre ν en fonction de la valeur absolue du gradient de h ($\nu = \nu(|\nabla h|)$). Cependant on peut aussi remarquer que le haut des colonnes (une fois fermé) reçoit l'essentiel de l'éclairement, en contraste avec les zones en bas des colonnes. Aussi, nous proposons de faire dépendre le terme de diffusion de l'angle Ω . Comme nous cherchons des structures colonnaires où la variation de la hauteur h peut-être grande, nous gardons alors le terme de dépôt en $\sqrt{1 + |\nabla(h)|^2}$ sans introduire l'approximation de faible pente proposée dans le modèle KPZ. Nous sommes alors conduits à proposer le modèle suivant :

$$\frac{\partial h}{\partial t} = g(\Omega(x, \{h\})) (R \sqrt{1 + |\nabla(h)|^2} + \nu \nabla^2 h + \eta), \quad (7.27)$$

$g(\Omega(x, \{h\}))$ est une fonction donnée de l'angle solide Ω , les autres termes ν , η sont identiques à ceux présentés dans l'équation (7.19). Il est évident que cette fonction g doit permettre d'augmenter la croissance et la diffusion aux endroits peu ombrés, principalement dans la partie de l'interface qui se trouvent en haut des colonnes, et par contraste la diminuer dans les parties ombrées, *i.e.* dans les trous.

7.2.4.1 Résolutions numériques

Pour résoudre numériquement l'équation (7.27), nous allons utiliser le même schéma explicite que pour (7.25) :

$$h_i^{n+1} = h_i^n + g(\Omega_i^n) \left[\Delta t R \sqrt{1 + \left(\frac{h_{i+1}^n - h_{i-1}^n}{2 \Delta x}\right)^2} + \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2} (h_{i+1}^n - 2 h_i^n + h_{i-1}^n) + \sqrt{\frac{2 D \Delta t}{\Delta x}} \xi_i \right], \quad (7.28)$$

où ξ_i est une variable aléatoire tiré dans une distribution uniforme entre -1 et 1. Dans un premier temps, nous avons pris comme fonction g la plus simple : $g(\Omega) = \Omega$. Ce choix ne nous donne pas

l'interface désirée car, avec cette fonction, dépôt et diffusion restent encore suffisamment forts pour augmenter la hauteur de l'interface dans les zones ombrées et nous n'obtenons pas des colonnes (figure 7.49).

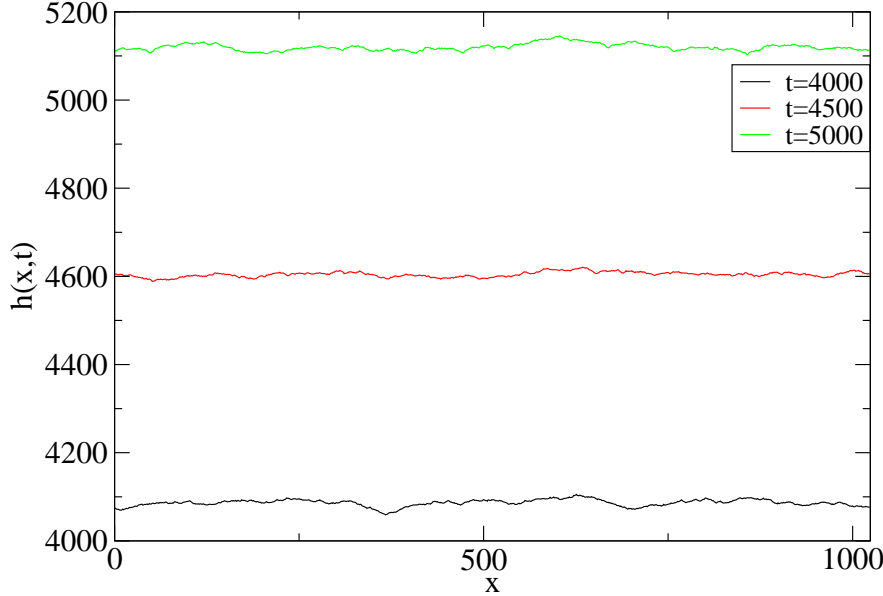


FIG. 7.49. Hauteur de l'interface obtenu pour le modèle continu (7.27) dans le cas $g(\Omega) = \Omega$ et $R = 1$, $\nu = 1$, aux instants $t = 100$, 300 et 500 .

Afin de diminuer la diffusion et le dépôt dans les zones ombrées et la renforcer dans les zones qui ne le sont pas, nous proposons la fonction g suivante $g(\Omega) = \Omega^2$. Les résultats de simulations numériques avec les valeurs $R = 1$, $\nu = 1$ sont illustrés figure 7.50 et l'apparition des colonnes à flancs remarquablement raides est observée sur des temps longs.

Cet aspect colonnaire retrouvé est dû à la compétition entre l'effet de l'ombrage, qui favorise l'émergence de pics, comme nous l'avons vu dans l'étude de la section 7.2.3.1 et la diffusion non-isotrope, qui lisse fortement le haut des plateaux et favorise leur croissance latérale. Ces effets combinés assurent un régime colonnaire au moins jusqu'à la fin de la simulation. En effet, la figure 7.50 montre que la plupart des colonnes construites au début de la simulation (aux alentours de $t = 100$) perdurent (cf figure 7.51). La figure 7.52, montre la fonction de distribution de la hauteur de l'interface à l'instant $t = 4000$. Elle montre un fort pic pour $h \sim 5000$ traduction de la présence de structures hautes séparées par de zones très basse. Cette figure ne dit rien sur le nombre de colonnes. Il reste qu'elle est semblable à celle obtenue dans les modèles discrets (voir la figure 7.16 de la partie 7.1.3.1). Lorsque l'on examine l'évolution de la rugosité W en temps (figure 7.53), on observe l'existence de différents régimes. Le premier régime pour $t < 1$ correspond au processus de dépôt aléatoire sans

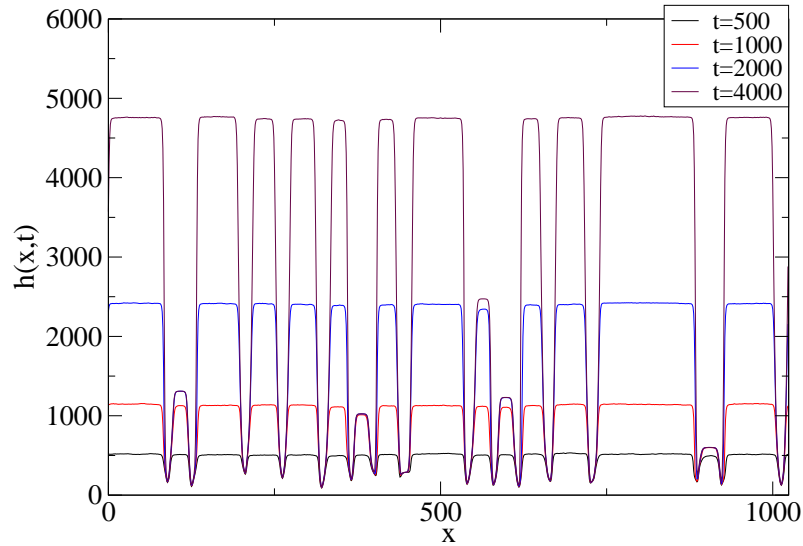


FIG. 7.50. Évolution de l'interface aux instants $t = 500, 1000, 2000, 4000$ pour le modèle continu 7.27 avec $g(\Omega) = \Omega^2$.

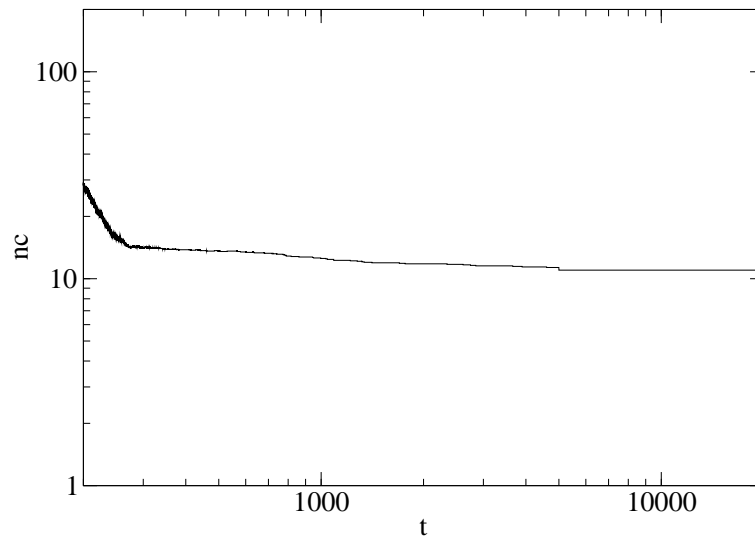


FIG. 7.51. Le nombre de colonnes en fonction du temps pour le modèle continu 7.27 avec $g(\Omega) = \Omega^2$.

l'effet d'ombrage et décrit la fluctuation de la surface avec une rugosité W qui évolue comme $t^{1/2}$. Le deuxième régime dure jusqu'au temps $t \sim 100$, l'effet de diffusion permet de réduire la rugosité de surface et W croît comme $t^{0.4}$. En temps plus long, l'instabilité de l'interface due à l'effet d'ombrage entraîne l'apparition des colonnes, la rugosité augmente très rapidement. Finalement, à partir de temps $t > 1000$, la structure colonnaire est maintenue, et les colonnes continuent à se développer,

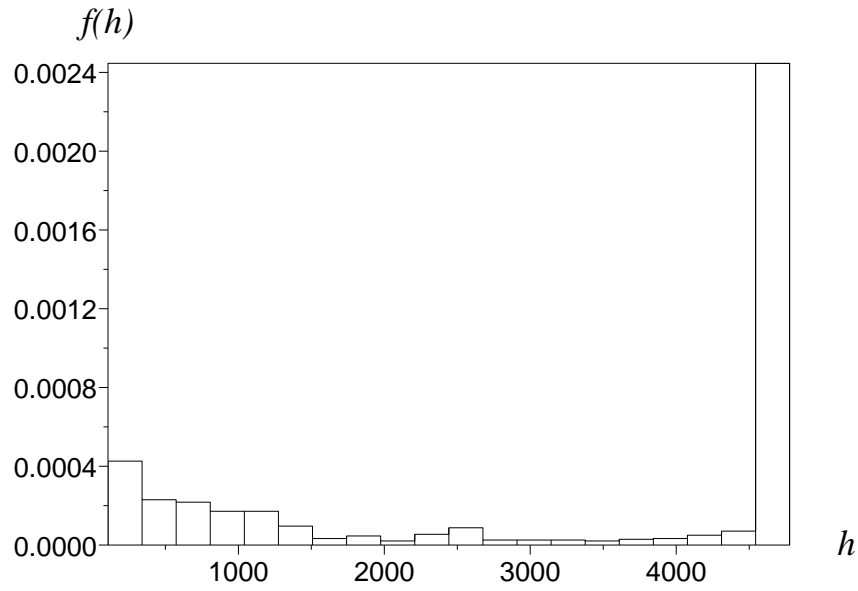


FIG. 7.52. Fonction de distribution $f(h)$ de la hauteur de l'interface donnée figure 7.50 à $t = 4000$.

nous obtenons alors $W \sim t$ comme dans les modèles discrets.

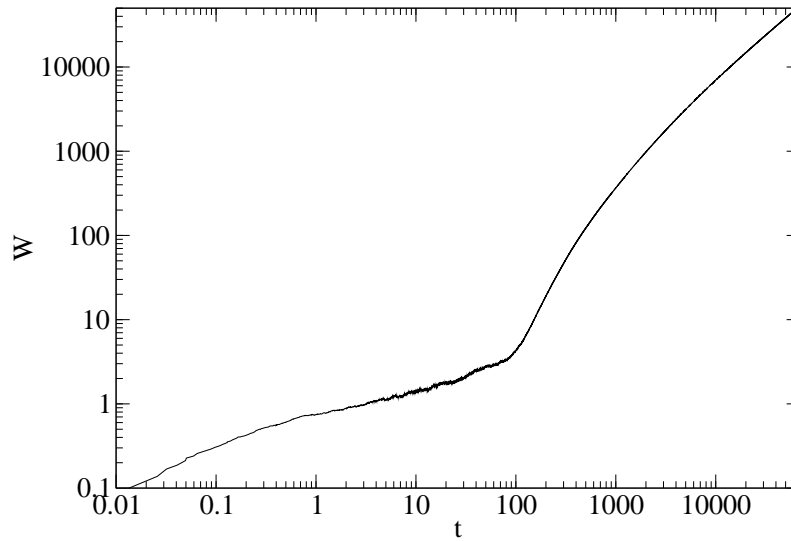


FIG. 7.53. Rugosité $W(t)$ de l'interface dans le cas où $g(\Omega) = \Omega^2$, $R = 1$, et $\nu = 1$.

Une croissance colonnaire avec une proportion constante de plateaux (indépendamment de leur répartition géométrique) est caractérisée par une variation linéaire de la rugosité. En effet, ce résultat s'interprète grâce au modèle phénoménologique suivant :

Appelons α la proportion de la longueur L du système occupé par les plateaux (quelques soit leur nombre, leur largeur et leur répartition) et $1 - \alpha$ la proportion du système occupé par des trous.

Supposons que le dépôt s'effectue principalement sur les plateaux et entre t et $(t + \Delta t)$, il vient (cf figure 7.54) :

$$\alpha \Delta h + h \Delta \alpha = R \Delta t,$$

d'où en passant à la limite :

$$d(h\alpha) = R dt.$$

Cela implique que

$$\alpha h = Rt,$$

ou

$$\begin{cases} h = \frac{Rt}{\alpha} & \text{pour les plateaux} \\ h = 0 & \text{pour les trous,} \end{cases} \quad (7.29)$$

qui donne bien une hauteur moyenne $\bar{h} = Rt$.

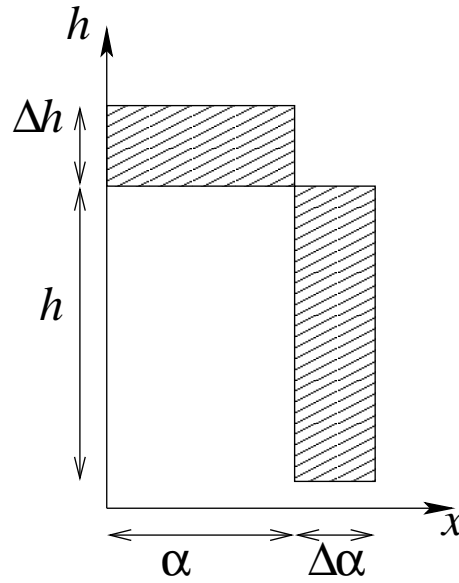


FIG. 7.54. Calcul de la rugosité W pour une surface de dépôt présentant une structure colonnaire.

Alors, la rugosité W de la surface est donnée par :

$$\begin{aligned} W^2 &= \frac{1}{L} \int_0^L (h - \bar{h})^2 \\ &= \alpha \left(\frac{Rt}{\alpha} - Rt \right)^2 + (1 - \alpha) (0 - Rt)^2 \\ &= \alpha R^2 t^2 \left(\frac{1 - \alpha}{\alpha} \right)^2 + (1 - \alpha) R^2 t^2 \\ &= R^2 t^2 \left(\frac{1 - \alpha}{\alpha} \right). \end{aligned} \quad (7.30)$$

Remarquons que $\alpha \rightarrow 1$ correspond à la croissance des colonnes avec une proportion de plateaux qui augmente en temps. Supposons, par exemple, que $\alpha \approx 1 - Ct^a$ avec $a < 1$ et C constante positive.

Nous avons :

$$W^2 = R^2 t^2 \frac{Ct^a}{1 - Ct^a}.$$

Ainsi, en temps longs $W^2 \sim t^{2+a}$, et cela indique que si $a < 0$ la rugosité W est sous-linéaire. L'évolution linéaire en temps t de W n'est obtenue que dans le cas $a = 0$, i.e α est constante, et elle correspond aux résultats de nos calculs numériques dans le cas des modèles discrets où nous avons trouvé

$$\alpha \sim n_{cl_c} \approx \text{constante},$$

(voir tableau 7.1 de la partie 7.1.3.1).

7.2.4.2 Remarque sur le calcul numérique de l'ombrage

La partie du programme qui nécessite le plus de temps de calcul est celui qui concerne l'ombrage. De même que pour les modèles probabilistes, il faut lui porter un effort particulier sous peine de voir croître les temps de calculs. On peut noter que si à une dimension cela n'est pas trop grave, cela va devenir tout à fait crucial en 2+1 dimensions.

A priori, pour calculer l'angle solide vu de la position x , il faut balayer les toutes les autres positions (soient N points). Comme il faut effectuer ce calcul pour chacune des N positions, cela donne un algorithme en N^2 (pour $d = 1+1$). Ce calcul se répète à chaque pas de temps. Un moyen efficace de réduire le temps de calcul est de mettre en mémoire les positions x_1 et x_2 qui déterminent l'angle solide au point x (voir figure 7.55). En admettant qu'entre 2 pas de temps successif l'interface n'a pas beaucoup évoluée, nous avons calculé le nouvel angle solide en x en exploitant l'interface de x_1^- cases à x_2^+ cases ($x_1^- < x_1$ et $x_2^+ > x_1$). Pour une simulation telle que $L = 1024$ et $\Delta x = 1$, on réduit le temps de calcul d'un facteur 6 sans modifier la structure (si ce n'est dans des détails situés dans le bas des colonnes, cf figure 7.56).

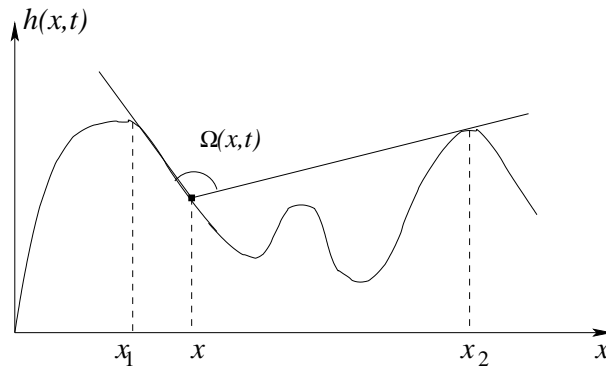


FIG. 7.55. Algorithme du calcul de l'angle d'ouverture $\Omega(x, \{h\})$ en une position x .

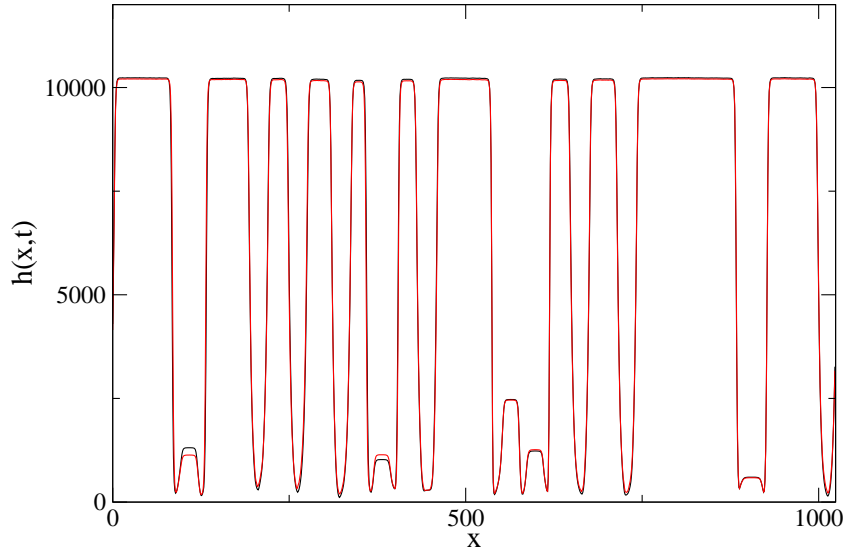


FIG. 7.56. Hauteurs de l'interface pour un système de longueur $L = 1024$ à l'instant $t = 10000$ obtenues par deux méthodes de calcul de l'angle solide $\Omega(x, \{h\})$: l'une est donnée par le calcul de Ω sur toute la longueur du système (courbe noire) et l'autre est donnée par le calcul Ω entre x_1- et x_2+ (courbe rouge).

7.2.4.3 Analyse de stabilité par une perturbation en ondes planes

Afin de vérifier l'instabilité de l'équation (7.27) pour laquelle le bruit est absent ($\eta = 0$), une analyse linéaire de stabilité avec une perturbation en ondes planes est effectuée pour le cas $g(\Omega) = \Omega^2$. Pour cette partie, nous quittons le monde des EDP stochastique pour ne garder que la partie déterministe de (7.27). Étant donné une interface plate et perturbée par un profil sinusoïdal selon x :

$$h(x, 0) = h_0 \cos\left(\frac{2\pi}{l}x\right), \quad (7.31)$$

dans la limite $h_0 \ll l$, l'angle d'ouverture de l'interface s'écrit sous la forme :

$$\Omega = \bar{\Omega} + \Omega_0 \frac{2\pi}{l} \cos\left(\frac{2\pi}{l}x\right),$$

où $\bar{\Omega}$ est la valeur moyenne de l'angle solide Ω sur l'ensemble de l'interface et $\Omega_0 = \delta h_0$ avec $\delta \simeq 0.72$.

Posons

$$\tilde{h}(x, t) = \bar{h}(t) + h_0 \exp(-i(\omega t - kx)), \quad (7.32)$$

alors

$$\tilde{\Omega}(x, t) = \bar{\Omega}(t) + \Omega_0 k \exp(-i(\omega t - kx)), \quad (7.33)$$

avec $k = \frac{2\pi}{l}$. En intégrant (7.32) et (7.33) dans l'équation (7.27) dans laquelle le terme de bruit est nul, un développement au premier ordre donne :

$$\frac{\partial \bar{h}}{\partial t} - i\omega h_0 \exp(-i(\omega t - kx)) = \left(\bar{\Omega}^2(t) + 2\bar{\Omega}\Omega_0 k \exp(-i(\omega t - kx)) \right) (R - \nu k^2 h_0 \exp(-i(\omega t - kx))) \quad (7.34)$$

d'où à l'ordre 0 nous avons :

$$\frac{\partial \bar{h}}{\partial t} = R\bar{\Omega}^2(t),$$

et à l'ordre 1 :

$$-i\omega h_0 \exp(-i(\omega t - kx)) = 2\bar{\Omega}\Omega_0 k R \exp(-i(\omega t - kx)) - \nu \bar{\Omega}^2 k^2 h_0 \exp(-i(\omega t - kx)).$$

On en déduit la relation suivante :

$$-i\omega = 2\bar{\Omega}\delta k R - \nu \bar{\Omega}^2 k^2. \quad (7.35)$$

Avec $\omega = \omega_R + i\omega_I$, l'équation (7.35) implique que l'ombrage donne une interface instable si

$$k < k_* = \frac{2\delta R}{\nu \bar{\Omega}},$$

soit une longueur d'onde instable si

$$l > l_* = \frac{2\pi}{k_*}.$$

Ainsi, dans le cas $g(\Omega) = \Omega^2$, et pour les simulation présentées auparavant (pour lesquelles on part d'une surface plate), c'est le bruit η qui conduit le système (7.27) vers un fort régime non-linéaire.

Le résultat que nous avons trouvé ici peut être vérifié par les simulations numériques. Nous prenons $h_0 = 1$ pour une surface initiale du dépôt à $t = 0$ sous la forme (7.31) et $R = 1$, $\eta = 0$. En supposant $\bar{\Omega} \simeq \pi$, la valeur limite de l'instabilité est $k_* \simeq 0.46$, soit $l_* \simeq 13.6$. Nous avons effectué des simulations numériques pour deux systèmes de longueurs différentes $l = 13 < l_*$ et $l = 15 > l_*$. Les résultats obtenus par ces deux simulations sont donnés figure 7.57. Ils montrent qu'effectivement l'instabilité a lieu si le système est plus grand que l_* et que, dans le cas contraire, il reste stable.

En conséquence de cette analyse d'instabilité, l'aspect colonnaire du modèle (7.27) n'est obtenue qu'à partir d'un système de dépôt de taille L suffisamment grande, *i.e* $L > l_*$, ce qui est confirmée par les courbes du profil de l'interface pour ce modèle à un instant fixé $t = 500$, illustrées dans la figure 7.58, avec deux différentes valeurs de taille : $L = 13, 15$ au cas où la surface initiale est plate et le bruit η non nul. Alors, si le système est assez large, l'instabilité démarre et conduit le modèle

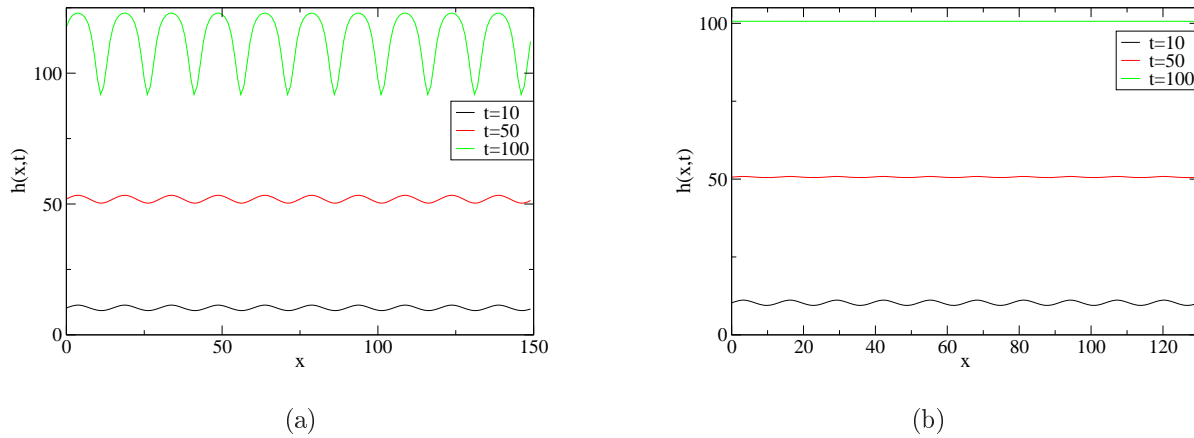


FIG. 7.57. Hauteur $h(x,t)$ pour un système de longueur $L = 150$ (figure a) et $L = 150$ (figure b) ($\Delta x = 1$) pour le modèle (7.27) à différents temps pour $\nu = 1, R = 1, \eta = 0, h_0 = 1$ et les longueurs d'ondes respectivement $l = 15$ et $l = 13$.

vers un régime non-linéaire qui donc permet de construire la structure des colonnes.

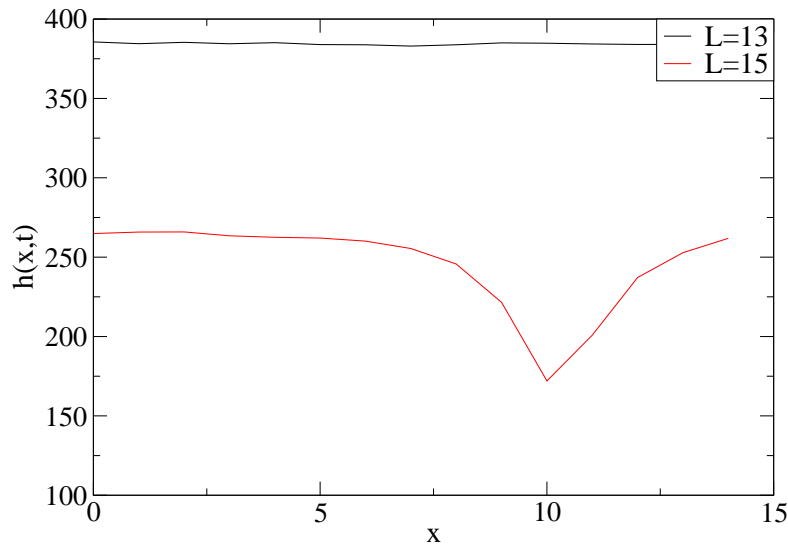


FIG. 7.58. Interface du modèle continu (7.27) à l'instant $t = 500$ pour des systèmes de longueur $L = 13$ et 15 avec $\nu = 1, R = 1$. La surface initiale est plate et le bruit aléatoire est non nul.

Remarque 7.3 Dans nos simulations numériques l'angle d'ouverture Ω est renormalisé par sa moyenne sur la surface, cette renormalisation ne change pas la valeur effective de k_* .

Remarque 7.4 Pour le cas $f(\Omega) = \Omega$ on trouve $k < \frac{\delta R}{\nu \Omega} = \frac{k_*}{2}$, donc la gamme de longueur d'onde instable est moins large et la croissance de l'instabilité est moins rapide.

Ainsi avec le nouveau modèle continu que nous avons proposé, une structure colonnaire a effectivement été trouvée. D'autres simulations numériques du modèle (7.27) dans le cas où on utilise les approximations du terme non-linéaire $\sqrt{1 + |\nabla(h)|^2}$:

$$\sqrt{1 + |\nabla(h)|^2} \sim 1 + \frac{1}{2}|\nabla(h)|^2 \quad \text{pour } |\nabla(h)| \text{ petit,}$$

et

$$\sqrt{1 + |\nabla(h)|^2} \sim |\nabla(h)| \quad \text{pour } |\nabla(h)| \text{ grand,}$$

ont été réalisées. Elles ne donnent pas de colonnes, indiquant que le terme origine de dépôt non-linéaire en $\sqrt{1 + |\nabla(h)|^2}$ est indispensable pour construire l'aspect colonnaire de surface.

7.2.5 Une première analyse des propriétés du nouveau modèle continu avec ombrage

Dans la partie 7.2.4, nous avons proposé un nouveau modèle continu dont le nouvel ingrédient est la fonction $g(\Omega)$ qui est en facteur avec le terme de dépôt non linéaire ainsi que le terme de diffusion. Les simulations numériques ont été faites pour les deux cas $g(\Omega) = \Omega$ et Ω^2 , les résultats du cas $g(\Omega) = \Omega^2$ présentent une structure colonnaire très proche à celle obtenue par des modèles discrets. Une fois que la résolution numérique est réalisée, il convient de s'interroger sur le problème de l'existence de solutions de l'équation (7.27) et de leurs propriétés. Nous nous intéressons d'abord au problème d'analyse mathématique des propriétés de l'équation (7.27) dans le cas $g(\Omega) = \Omega^2$. Cela permettrait d'étudier ensuite l'existence de solutions de cette équation. Dans un premier temps, nous considérons l'équation (7.27) dans le cas déterministe :

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t}(t, x) = \frac{\Omega^2(h, t, x)}{\langle \Omega^2(h, t) \rangle} \left(\Delta h(t, x) + \sqrt{1 + |\nabla h(t, x)|^2} \right) & x \in \mathbb{R}, t > 0 \\ h(0, x) = h_0(x) & x \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (7.36)$$

où h_0 est une donnée initiale, h et h_0 sont périodiques de période L et $\langle \Omega^2(h, t) \rangle$ est la moyenne de l'angle d'ouverture Ω (voir la définition 7.20 de l'angle Ω dans la partie 7.2.3) définie par :

$$\langle \Omega^2(h, t) \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L \Omega^2(h, t, x) dx. \quad (7.37)$$

Notons que pour ce modèle continu, l'angle d'ouverture Ω joue un rôle crucial dans l'évolution de l'interface. Il est donc important d'étudier ce terme et nous obtenons une première estimation de l'angle Ω présentée ci-dessus.

7.2.5.1 Propriété de continuité de l'angle d'ouverture

Lemme 7.5 *Soient f et g deux fonctions réelles définies sur un ensemble D . Alors on a :*

$$\left| \max_{x \in D} f(x) - \max_{x \in D} g(x) \right| \leq \max_{x \in D} |(f - g)(x)|.$$

Preuve : On a pour tout $x \in D$:

$$f(x) - g(x) \leq |f(x) - g(x)| \leq \max_{x \in D} |f(x) - g(x)|,$$

d'où

$$\begin{aligned} f(x) &\leq \max_{x \in D} |f(x) - g(x)| + g(x) \\ &\leq \max_{x \in D} |f(x) - g(x)| + \max_{x \in D} g(x), \end{aligned}$$

et donc

$$\max_{x \in D} f(x) \leq \max_{x \in D} |f(x) - g(x)| + \max_{x \in D} g(x),$$

soit

$$\max_{x \in D} f(x) - \max_{x \in D} g(x) \leq \max_{x \in D} |f(x) - g(x)|.$$

En échangeant les rôles de f et g , on obtient le lemme.

Proposition 7.6 Soient h_1 et h_2 deux fonctions de $W^{1,\infty}(\mathbb{R})$. Alors pour tout $x \in \mathbb{R}$, on a :

$$|\Omega(h_1, x) - \Omega(h_2, x)| \leq 2\|(h_1 - h_2)'\|_\infty.$$

Preuve : Soient donc h_1 et h_2 deux fonctions de $W^{1,\infty}(\mathbb{R})$ ($W^{1,\infty}(\mathbb{R}) \subset C^0(\mathbb{R})$) et x_0 un réel fixé.

$$\begin{aligned} |\Omega(h_1, x_0) - \Omega(h_2, x_0)| &= |\pi - \Omega_1(h_1, x_0) - \Omega_2(h_1, x_0) - \pi + \Omega_1(h_2, x_0) + \Omega_2(h_2, x_0)| \\ &\leq |\Omega_1(h_1, x_0) - \Omega_1(h_2, x_0)| + |\Omega_2(h_1, x_0) - \Omega_2(h_2, x_0)|. \end{aligned} \quad (7.38)$$

Nous allons alors estimer chacun des termes du second membre. Supposons tout d'abord que $\Omega_1(h_1, x_0) = \sup_{x > x_0} \left[\arctan \left(\frac{h_1(x) - h_1(x_0)}{x - x_0} \right) \right]$ et $\Omega_1(h_2, x_0) = \sup_{x > x_0} \left[\arctan \left(\frac{h_2(x) - h_2(x_0)}{x - x_0} \right) \right]$, alors, la fonction \arctan étant strictement croissante :

$$|\Omega_1(h_1, x_0) - \Omega_1(h_2, x_0)| = \left| \arctan \left[\sup_{x > x_0} \left(\frac{h_1(x) - h_1(x_0)}{x - x_0} \right) \right] - \arctan \left[\sup_{x > x_0} \left(\frac{h_2(x) - h_2(x_0)}{x - x_0} \right) \right] \right|.$$

D'autre part, puisque $|\arctan a - \arctan b| \leq |a - b|$, on obtient :

$$|\Omega_1(h_1, x_0) - \Omega_1(h_2, x_0)| \leq \left| \sup_{x > x_0} \left(\frac{h_1(x) - h_1(x_0)}{x - x_0} \right) - \sup_{x > x_0} \left(\frac{h_2(x) - h_2(x_0)}{x - x_0} \right) \right|.$$

Nous pouvons alors utiliser le lemme 7.5 pour en déduire :

$$\begin{aligned} |\Omega_1(h_1, x_0) - \Omega_1(h_2, x_0)| &\leq \left| \sup_{x > x_0} \left(\frac{h_1(x) - h_1(x_0)}{x - x_0} - \frac{h_2(x) - h_2(x_0)}{x - x_0} \right) \right| \\ &\leq \left| \sup_{x > x_0} \left(\frac{(h_1 - h_2)(x) - (h_1 - h_2)(x_0)}{x - x_0} \right) \right| \\ &\leq \|(h_1 - h_2)'\|_\infty \end{aligned}$$

Supposons maintenant $\Omega_1(h_1, x_0) = 0$ et $\Omega_1(h_2, x_0) = \sup_{x > x_0} \left[\arctan \left(\frac{h_2(x) - h_2(x_0)}{x - x_0} \right) \right]$, nous sommes alors dans le cas où $h_1(x) < h_1(x_0)$ pour tout $x > x_0$, c'est-à-dire :

$$\frac{h_1(x) - h_1(x_0)}{x - x_0} < 0,$$

il en découle alors :

$$\begin{aligned} |\Omega_1(h_1, x_0) - \Omega_1(h_2, x_0)| &= \Omega_1(h_2, x_0) \\ &\leq \sup_{x > x_0} \left(\frac{h_2(x) - h_2(x_0)}{x - x_0} \right) \\ &\leq \sup_{x > x_0} \left(\frac{h_2(x) - h_2(x_0)}{x - x_0} - \frac{h_1(x) - h_1(x_0)}{x - x_0} \right) \\ &\leq \left| \sup_{x > x_0} \left(\frac{(h_1 - h_2)(x) - (h_1 - h_2)(x_0)}{x - x_0} \right) \right| \\ &\leq \|(h_1 - h_2)'\|_\infty. \end{aligned}$$

Les autres cas étant analogues, ceci achève la preuve de cette proposition.

7.2.5.2 Absence du principe du maximum

L'objectif ici est de s'intéresser au problème d'existence de solutions de l'équation (7.36). Sans le terme d'ombrage, les méthodes classiques d'étude des équations elliptiques et paraboliques aboutissent à l'existence de solutions. Ces méthodes reposent souvent sur le principe du maximum, par exemple méthode des sur-sous solutions ou solutions de viscosité [7]. Dans le cas de l'équation (7.36), la présence du terme d'ombrage entraîne que ce principe n'est pas satisfait, tout au moins dans une classe restreinte de fonctions. C'est l'objet de la proposition suivante :

Proposition 7.7 *Soient h_1^0 et h_2^0 deux fonctions réelles définies par $h_1^0(x) = 0$ et $h_2^0(x) = (x - 1)^4$ pour tout $x \in [0, 2]$ et prolongées par périodicité de période 2 à \mathbb{R} entier. On a donc $h_1^0 \leq h_2^0$. Soit*

h_1 la fonction définie par $h_1(t, x) = t$ pour $(t, x) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}$. On suppose qu'il existe une fonction h_2 définie sur un ouvert $]0, T[\times \mathbb{R}$ solution de (7.36) de donnée initiale h_2^0 telle que

$$\left\| \frac{\partial h_2}{\partial x}(t, \cdot) - \frac{\partial h_2^0}{\partial x} \right\|_{\infty} \rightarrow 0 \quad \text{quand } t \rightarrow 0, \quad (7.39)$$

$$\left\| \frac{\partial^2 h_2}{\partial x^2}(t, \cdot) - \frac{\partial^2 h_2^0}{\partial x^2} \right\|_{\infty} \rightarrow 0 \quad \text{quand } t \rightarrow 0, \quad (7.40)$$

alors il existe un temps t_0 et un réel $\eta > 0$ tels que $h_1 > h_2$ sur $\{t_0\} \times (1 - \eta, 1 + \eta)$.

Preuve : On a trivialement : $\frac{\partial h_2^0}{\partial x}(x) = 4(x - 1)^3$ et $\frac{\partial^2 h_2^0}{\partial x^2}(x) = 12(x - 1)^2$ pour $x \in]0, 2[$. Puisque

$$\frac{\partial h_2}{\partial x}(t, x) \rightarrow \frac{\partial h_2^0}{\partial x}(x) \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 h_2}{\partial x^2}(t, x) \rightarrow \frac{\partial^2 h_2^0}{\partial x^2}(x),$$

quand $t \rightarrow 0$ uniformément pour $x \in]0, 2[$, on obtient :

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{\Omega^2(h_2, t, x)}{\langle \Omega^2(h_2, t) \rangle} \left[\Delta h_2(t, x) + \sqrt{1 + |\nabla h_2(t, x)|^2} \right] = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\Omega^2(h_2, t, x)}{\langle \Omega^2(h_2, t) \rangle} \left[12(x - 1)^2 + \sqrt{1 + 16(x - 1)^6} \right],$$

pour $x \in]0, 2[$. D'autre part, pour $t > 0$:

$$\begin{aligned} & \left\| \frac{\Omega^2(h_2, t, \cdot)}{\langle \Omega^2(h_2, t) \rangle} - \frac{\Omega^2(h_2^0, \cdot)}{\langle \Omega^2(h_2^0) \rangle} \right\|_{\infty} \\ &= \left\| \frac{\Omega^2(h_2, t, \cdot)}{\langle \Omega^2(h_2, t) \rangle} - \frac{\Omega^2(h_2, t, \cdot)}{\langle \Omega^2(h_2^0) \rangle} + \frac{\Omega^2(h_2, t, \cdot)}{\langle \Omega^2(h_2^0) \rangle} - \frac{\Omega^2(h_2^0, \cdot)}{\langle \Omega^2(h_2^0) \rangle} \right\|_{\infty} \\ &\leq \|\Omega^2(h_2, t, \cdot)\|_{\infty} \frac{|\langle \Omega^2(h_2^0) \rangle - \langle \Omega^2(h_2, t) \rangle|}{\langle \Omega^2(h_2, t) \rangle \langle \Omega^2(h_2^0) \rangle} + \frac{1}{\langle \Omega^2(h_2^0) \rangle} \|\Omega^2(h_2, t, \cdot) - \Omega^2(h_2^0, \cdot)\|_{\infty}. \end{aligned} \quad (7.41)$$

Remarquons que la fonction $\Omega(u_2^0, \cdot)$ est décroissante de $[0, 1]$ sur $[\frac{\pi}{2}, \pi]$ puis croissante de $[1, 2]$ sur $[\frac{\pi}{2}, \pi]$ donc $\langle \Omega^2(h_2^0) \rangle$ est une constante strictement comprise entre $(\frac{\pi}{2})^2$ et π^2 . Par définition : $\|\Omega^2(h_2, t, \cdot)\|_{\infty} \leq \pi^2$ et enfin :

$$\begin{aligned} & |\langle \Omega^2(h_2^0) \rangle - \langle \Omega^2(h_2, t) \rangle| \\ &= \frac{1}{2} \int_0^2 [\Omega^2(u_2^0, x) - \Omega^2(h_2, t, x)] dx \\ &\leq \frac{1}{2} \int_0^2 \|\Omega^2(h_2, t, \cdot) - \Omega^2(h_2^0, \cdot)\|_{\infty} dx \\ &\leq 2\pi^2 \|\Omega(h_2, t, \cdot) - \Omega(h_2^0, \cdot)\|_{\infty} \leq 4\pi^2 \left\| \frac{\partial h_2}{\partial x}(t, \cdot) - \frac{\partial h_2^0}{\partial x} \right\|_{\infty}, \end{aligned}$$

d'après la proposition 7.6. L'hypothèse (7.39) entraîne alors que $\langle \Omega^2(h_2, t) \rangle$ tend vers la constante $\langle \Omega^2(h_2^0) \rangle$ quand t tend vers 0 et l'inégalité (7.41) devient alors :

$$\left\| \frac{\Omega^2(h_2, t, \cdot)}{\langle \Omega^2(h_2, t) \rangle} - \frac{\Omega^2(h_2^0, \cdot)}{\langle \Omega^2(h_2^0) \rangle} \right\|_\infty \leq C \left\| \frac{\partial h_2}{\partial x}(t, \cdot) - \frac{\partial h_2^0}{\partial x} \right\|_\infty,$$

ce qui permet de conclure, d'après (7.39) que

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{\Omega^2(h_2, t, x)}{\langle \Omega^2(h_2, t) \rangle} \left[\Delta h_2(t, x) + \sqrt{1 + |\nabla h_2(t, x)|^2} \right] = \frac{\Omega^2(h_2^0, x)}{\langle \Omega^2(h_2^0) \rangle} \left[12(x-1)^2 + \sqrt{1 + 16(x-1)^6} \right],$$

pour $x \in]0, 2[$. Il en résulte alors que

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{\partial h_2}{\partial t}(t, x) = \frac{\Omega^2(h_2^0, x)}{\langle \Omega^2(h_2^0) \rangle} \left[12(x-1)^2 + \sqrt{1 + 16(x-1)^6} \right],$$

uniformément pour x au voisinage de 1. Or $\Omega^2(h_2^0, 1) = (\pi/2)^2$ et $\langle \Omega^2(h_2^0) \rangle \gg (\pi/2)^2$ d'après les variations de $\Omega(h_2^0, \cdot)$ déjà observées, donc

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{\partial h_2}{\partial t}(t, x) < 1,$$

uniformément pour x au voisinage de 1. On en déduit alors qu'il existe un temps t_0 et un réel η tels que

$$\frac{\partial h_2}{\partial t}(t, x) < 1 = \frac{\partial h_1}{\partial t}(t, x),$$

pour tout $t \in (0, 2t_0)$ et $x \in (1 - \eta, 1 + \eta)$, d'où le résultat.

Chapitre 8

ÉTUDE DES MODÈLES 2D.

Dans ce chapitre, nous allons étudier en deux dimensions ($d = 2 + 1$) les modèles de croissance abordés précédemment en dimension 1 et nous comparerons les résultats avec ceux obtenus en 1D.

La première partie de ce chapitre consiste en l'étude des modèles discrets. L'étude des modèles continus sera présentée dans une deuxième partie. Tout comme pour la partie 1D, les modèles iront des plus simples jusqu'aux modèles avec ombrage pour aboutir à l'étude 2D du modèle avec ombrage et diffusion non-isotrope similaire à celui que nous avons proposé en 1D. Les premiers modèles dont nous donnons les résultats ont déjà été étudiés [15] [37] [50]. Ils permettent à la fois de rendre cette étude plus complète et de valider nos codes (au moins sur ces modèles). Nous adopterons également des conditions aux bords périodiques pour les modèles 2D.

8.1 Modèles discrets

8.1.1 Modèle de dépôt aléatoire incluant la relaxation thermique (MC2D-d+R)

Pour le modèle de dépôt en 2D, les mécanismes de croissance du dépôt sont les mêmes qu'en 1D. Cependant, l'algorithme doit tenir compte de la géométrie bi-dimensionnelle qui autorise de nouvelles configurations qu'il convient de prendre en compte pour établir la liste des déplacements possibles des particules à la surface du dépôt. La figure 8.1 donne la liste des configurations possibles dans laquelle se trouve un atome en fonction de la position de son ou ses voisins. En 1D seuls les atomes qui ont au maximum deux liaisons à briser, *i.e* $n_i \leq 2$ peuvent déplacer (voir section 7.1.2.2). En 2D nous pourrions effectuer le déplacement pour les atomes dont leur nombre de voisins $n_i \leq 4$ (liaison avec le substrat incluse). Tout comme en une dimension, nous ne ferons pas de différences entre les déplacements laissant l'atome à la même hauteur et ceux lui permettant d'accéder à des zones plus basses. La figure 8.1 illustre les différents types de déplacement et leur fréquences.

Rappelons que le taux total des événements dans ce processus est défini par :

$$R_t = R_d N + \sum_j R_j,$$

où $N = L^2$ est le nombre total de sites d'adsorption de la surface, et R_j est le taux d'exécution du déplacement de type j . Un type de déplacement j est défini suivant la direction du mouvement et le nombre de liaisons à briser pour déplacer. En 2D il y a en total 16 types de déplacement possibles.

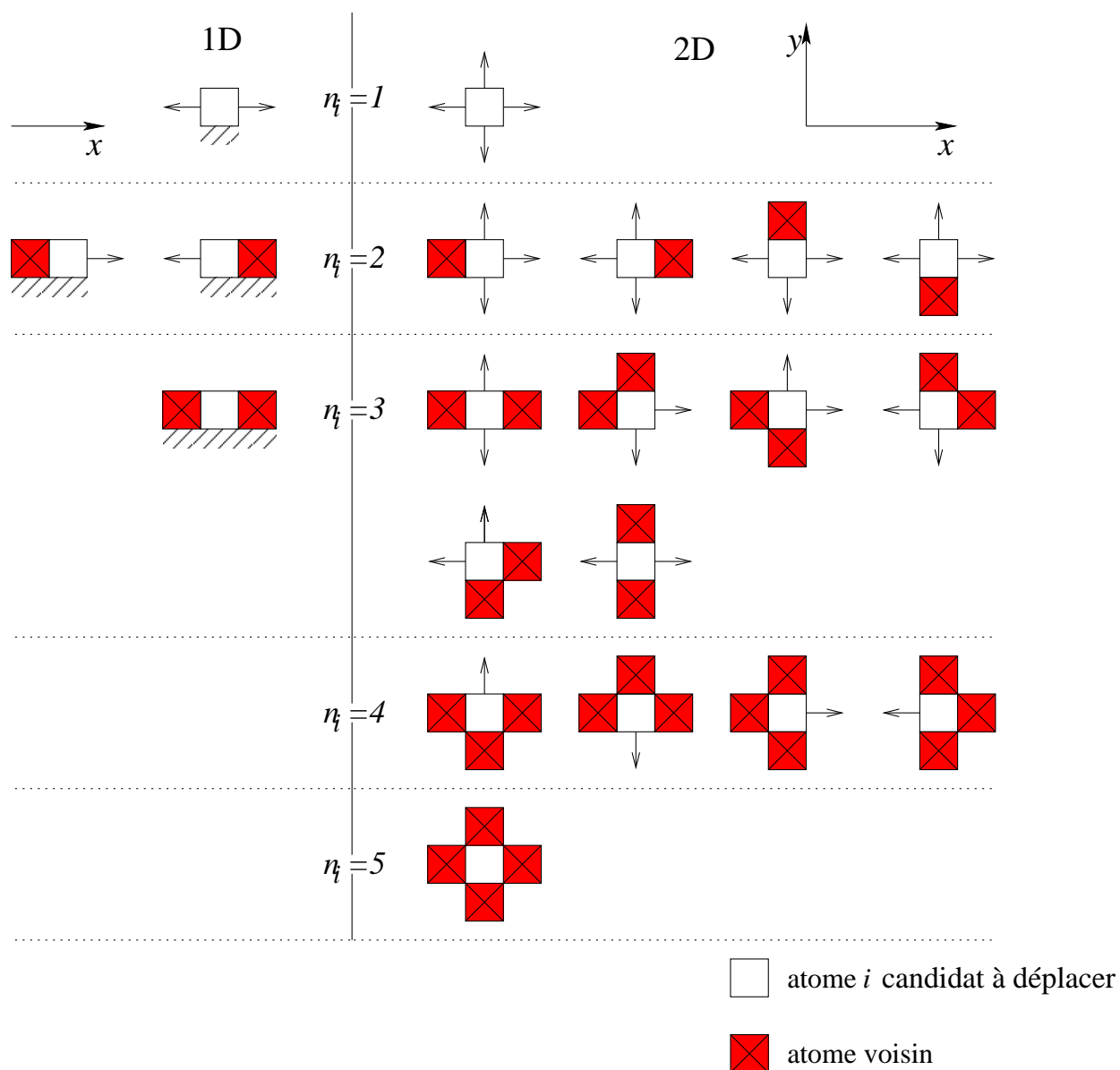
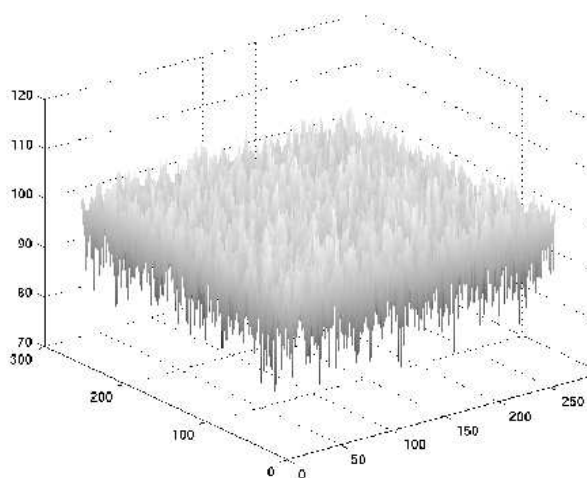


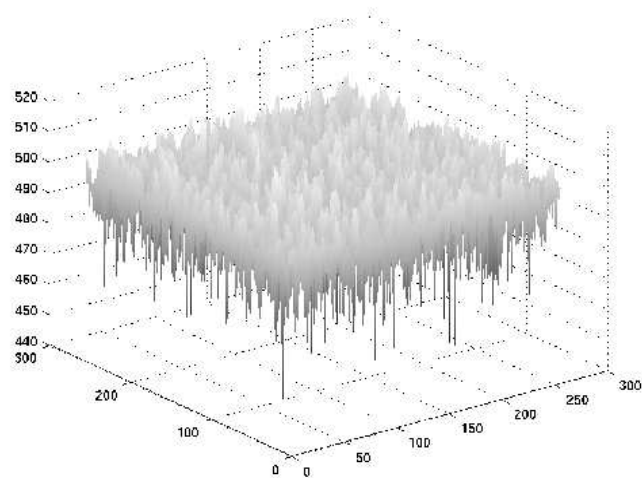
FIG. 8.1. Configurations des atomes candidats à se déplacer en 1D (à gauche) vues de profil et 2D (à droite) vues de dessus. L'atome candidat au déplacement est en blanc, ses voisins comportent une croix. Les déplacements autorisés sont symbolisés par une flèche. n_i est le nombre de liaisons entre l'atome et ses voisins, substrat inclus. En 1D sont autorisées à se déplacer les particules ayant 2 liaisons au maximum. En 2D, l'atome i dont le nombre de voisins $n_i \leq 4$ est susceptible de se déplacer.

Partant d'une surface initialement plate, la figure 8.2 donne l'allure typique d'un dépôt pour une surface de taille $L \times L = 256 \times 256$ prise à différents instants, pour une température $T = 500$ K. Nous remarquons que l'effet de la relaxation permet de réduire les irrégularités de l'interface et conduire le système vers une situation stable.

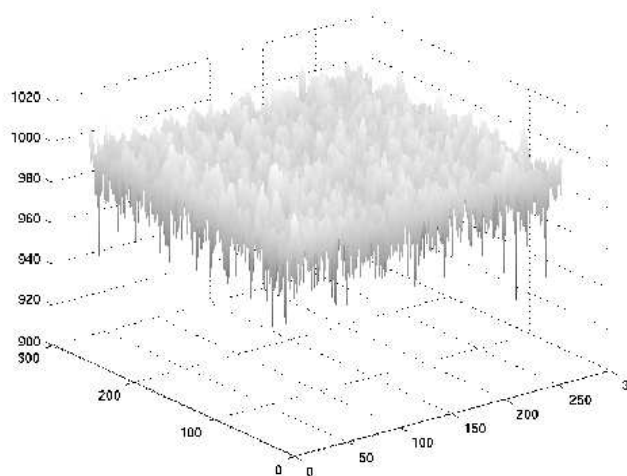
Comme en 1D, l'interface est caractérisée par sa rugosité dont l'évolution temporelle est donnée figure 8.3 pour différentes simulations dont les paramètres est la température comprise entre 400 K



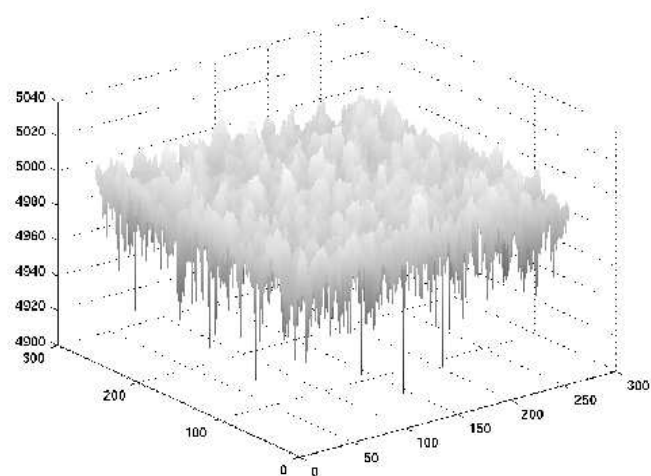
(a)



(b)



(c)



(d)

FIG. 8.2. Modèle MC2D-d+R : Profil h de l'interface pour un système de taille 256×256 et $T = 500K$ pris aux instants $t = 100$ (a), $t = 500$ (b), $t = 1000$ (c), $t = 5000$ (d)

et $640 K$. Nous constatons que, comme dans le cas 1D, le comportement de la rugosité W dépend à la fois de la température T et de la taille $L \times L$ du système. Pour une température assez faible, par exemple $T = 400 K$, l'effet de lissage du processus de relaxation n'est pas remarquable, la rugosité se comporte toujours comme $t^{\frac{1}{2}}$ et la saturation ne sera probablement jamais atteinte. En effet pour $T = 400 K$, $R_1 \approx 10^{-4}$ qui est négligeable devant $R_d = 1$. A partir d'une température proche de

420 K, on peut observer l'influence de la relaxation sur l'évolution de la surface : dans un premier temps, $t \ll 1$, on observe que le régime de dépôt aléatoire sans corrélation l'emporte sur la relaxation (dans ce régime $W \sim t^{\frac{1}{2}}$), pour les temps plus long, la diffusion affecte la pente la rugosité et nous obtenons $W \sim t^{\beta}$ avec $\beta < 0.5$. Plus la température est grande plus la valeur de l'exposant β est faible. Le calcul de la pente des courbes $W(t)$ (voir figure 8.3) nous donne les valeurs effectives de β . Elles sont reportées la figure 8.4. Néanmoins, si la température devient suffisamment forte (ici vers 620 K), la rugosité oscille due à une croissance couche par couche. La relaxation importante pour ces valeurs de température, lisse davantage les aspérités introduites par le dépôt. En effet, comme le taux de déplacement dans ce cas est largement plus grand que celui pour effectuer un dépôt, alors une fois un atome se dépose sur la surface il va chercher à descendre vers une position plus basse et à déplacer vers une position plus stable (*i.e* une position dont le nombre de voisins est plus grand). La rugosité sature dès que la première couche d'atomes sera déposée. La courbe de la figure 8.4 est en accord avec celle de la figure 2 obtenue par Meng et Weinberg [37], cependant nos valeurs de l'exposant β sont plus faibles que ceux donné par Meng et Weinberg car leurs calculs incluent un facteur 1/4 dans l'expression $R_t = R_{td} + \frac{1}{4} \sum_j R_j$.

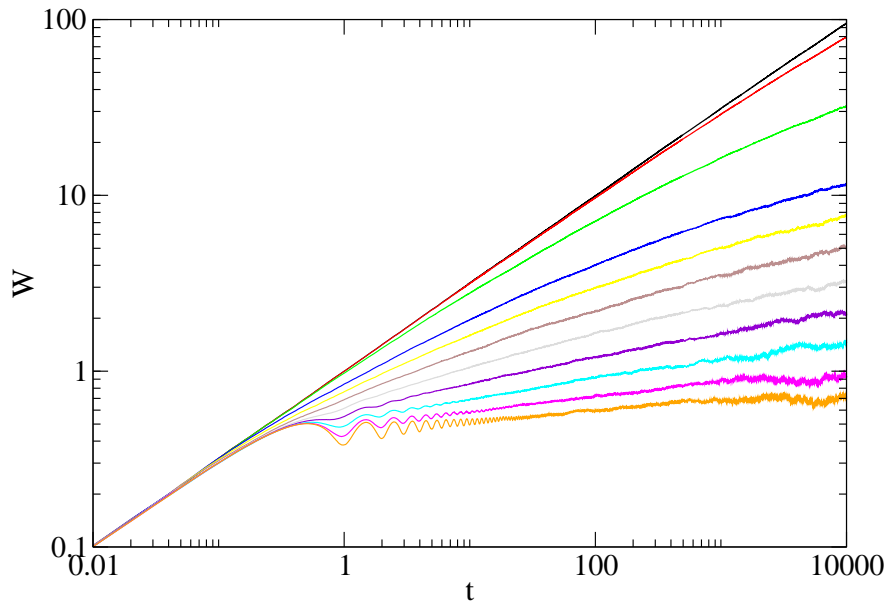


FIG. 8.3. Modèle MC2D-d+R : Rugosité W de l'interface en fonction du temps pour différentes températures $T(K)$ et pour une surface comportant $L \times L$ sites avec $L = 256$. Les courbes correspondent, de haut en bas, à $T = 400, 420, 460, 500, 520, 540, 560, 580, 600, 620$ et 640 K. Elles sont moyennées sur un ensemble de 5 expériences. La pente β est calculée pour t compris entre 10 et 1000.

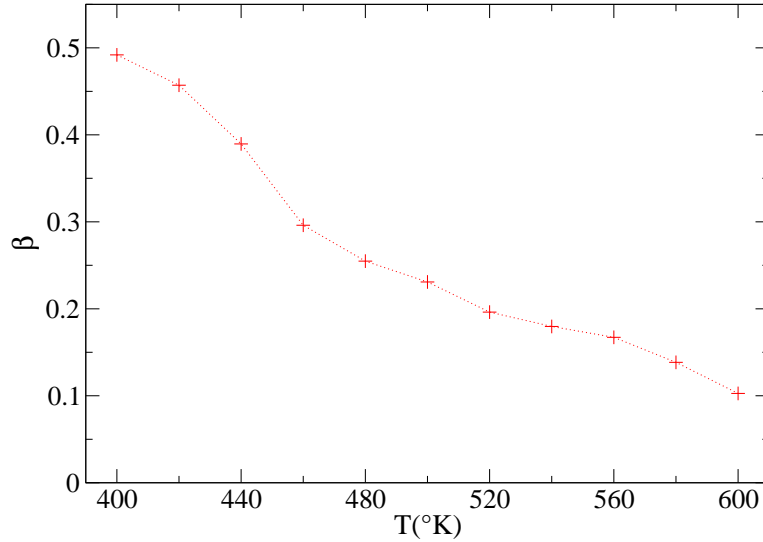


FIG. 8.4. Modèle MC2D-d+R : Exposant β en fonction de la température T calculé par régression linéaire à partir des pentes des courbes $\log W$ fonction de $\log t$ présentées figure 8.3.

En comparant les valeurs effectives β_{eff} donnée figure 8.4 avec celle du cas 1D (voir figure 7.9), notées $\tilde{\beta}_{eff}$, nous trouvons que, pour une température donnée, nous avons $\beta_{eff} < \tilde{\beta}_{eff}$. Par exemple, à $T = 420$ K, en 1D la relaxation reste toujours négligeable devant le dépôt aléatoire et on a $\tilde{\beta}_{eff}$ proche de 0.5. En revanche, en 2D nous obtenons $\beta_{eff} \approx 0.44$: l'effet lissage de la relaxation est présent. L'effet de la relaxation en 2D est donc plus forte qu'en 1D. En effet, comme indiqué figure 8.1, le nombre de configurations permettant un déplacement et donc le rapport entre le taux de déplacement et celui de dépôt est plus élevé en 2D qu'en 1D. Ainsi, le taux d'exécution d'un déplacement, à une température fixée, pour les atomes qui ont le même nombre de liaisons en 2D est plus grand que dans le cas 1D. Cela est illustré par la figure 8.5 qui montre la hauteur h de l'interface pour un système 1D de taille $L = 256$ et une coupe de la hauteur h de l'interface (donnée figure 8.2) pour un système 2D de taille 256×256 prises à l'instant $t = 1000$ avec $T = 500$ K. Comme attendu, la surface obtenue en 2D pour laquelle nous avons $\beta_{eff} \approx 0.23$ est plus lisse que celle obtenue en 1D pour laquelle $\tilde{\beta}_{eff} \approx 0.375$.

Pour terminer cette étude, nous regardons la dépendance de la saturation W_{sat} de la rugosité W en fonction la température T et de la taille $L \times L$ du système. Cela permet de trouver les valeurs effectives de l'exposant α pour la loi d'échelle $W_{sat} \sim L^\alpha$. Pour cela, pour une température fixée et un système de taille donnée, nous calculons la croissance du dépôt et sa rugosité W jusqu'à un temps t suffisamment long pour qu'elle puisse atteindre la saturation W_{sat} . Les simulations portent sur des systèmes de $L = 8, 16$ et 32 . Malgré une taille de dépôt modeste ($L = 32$) et les températures faibles (comme $T = 460$ K), l'effort de calcul est important car il faut d'une part mener les calculs sur des

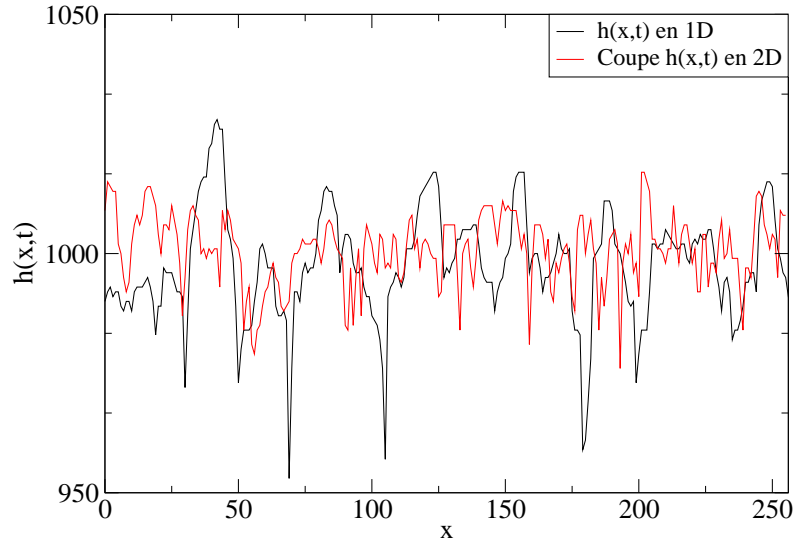


FIG. 8.5. Modèle MC2D-d+R : Comparaison entre la hauteur h de l'interface en 1D d'un système de taille $L = 256$ et une coupe en position y de la hauteur h en 2D (donnée figure 8.2) d'une surface de taille $L \times L = 256 \times 256$ prise au même temps $t = 1000$, pour une température $T = 500$ K.

temps longs pour observer la saturation ($t = 10^6$) et d'autre part moyenner sur 100 expériences pour lisser les fluctuations (d'autant plus grandes que L est petit). De plus, la saturation W_{sat} est moyennée dans le temps (pour t compris entre $t = 5 \times 10^5$ à 10^6).

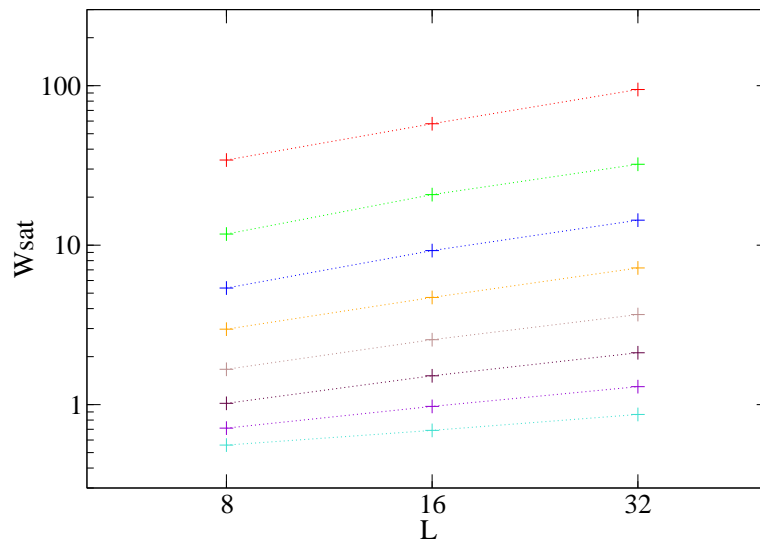


FIG. 8.6. Modèle MC2D-d+R : Valeur de la saturation W_{sat} de la rugosité W en fonction de L à différentes températures T (K). Les courbes correspondent, de haut en bas, à 460, 480, 500, 520, 540, 560, 580, 600 K. Elles sont moyennées respectivement sur un ensemble de 150, 100, 50 expériences pour $L = 8, 16, 32$ respectivement.

La figure 8.6 donne $\log W_{sat}$ en fonction de $\log L$ pour différentes températures T . Les pentes de ces courbes permettent d'obtenir les valeurs α_{eff} en fonction de T reportés figure 8.7. Pour ces valeurs de température, α_{eff} varie entre 0.32 et 0.73. En général, ces valeurs sont près de deux fois plus faibles que celles obtenues en 1D qui varient entre 0.73 et 1.5. Pour une même valeur de β , par exemple $\beta \approx 0.3$ (avec $T = 460\text{K}$ en 2D et $T = 560\text{K}$ en 1D), les valeurs de l'exposant α sont différentes : $\alpha \approx 0.72$ en 2D et $\alpha \approx 1.01$ en 1D.

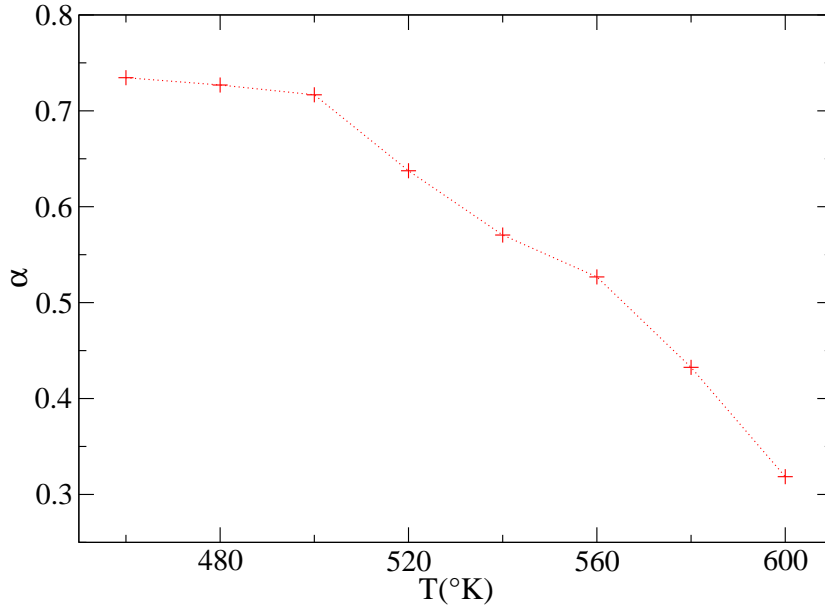


FIG. 8.7. Modèle MC2D-d+R : Exposant α en fonction de la température T .

8.1.2 Modèle de dépôt aléatoire incluant l'ombrage

Nous étudions maintenant deux modèles de croissance incluant effet non-local de l'ombrage, le premier ne contient que le dépôt, le second, plus complet, inclue aussi la diffusion thermique. L'algorithme reprend, pour la relaxation, celui utilisé pour le modèle précédent et pour le dépôt, l'algorithme avec ombrage utilisé en 1D (voir l'algorithme 3). Pour les modèles 2D, les particules sont envoyées vers le substrat selon les directions déterminées par un couple d'angles (θ, φ) (voir figure 8.8), où l'angle φ est choisi aléatoirement suivant une distribution uniforme entre 0 et 2π et l'angle θ est pris au hasard dans une distribution définie par $\frac{\sin \theta}{1 - \cos \theta_{max}}$ où θ_{max} est l'angle maximal. Cela assure que le flux est constant à travers la calotte sphérique déterminé par θ_{max} .

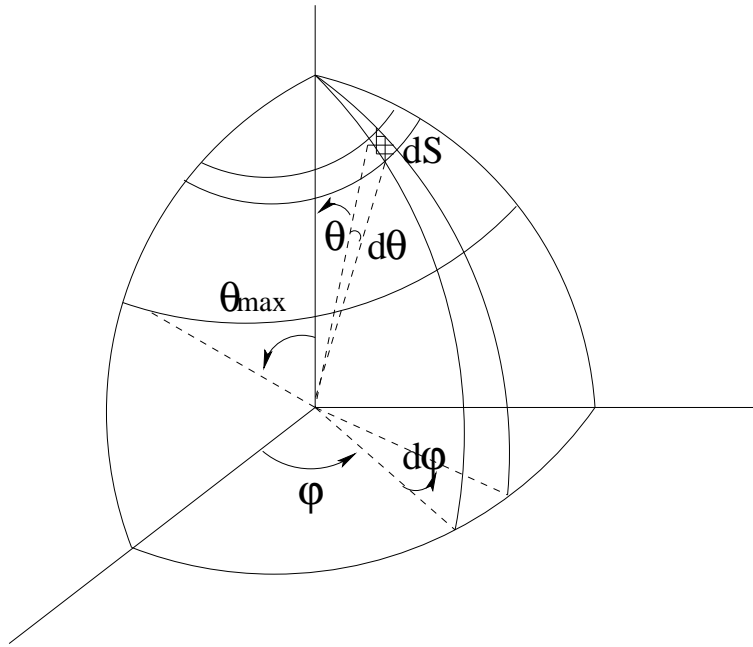


FIG. 8.8. MC2D-d+O : La trajectoire d'un atome envoyé à la surface est définie par un couple d'angle (θ, φ) .

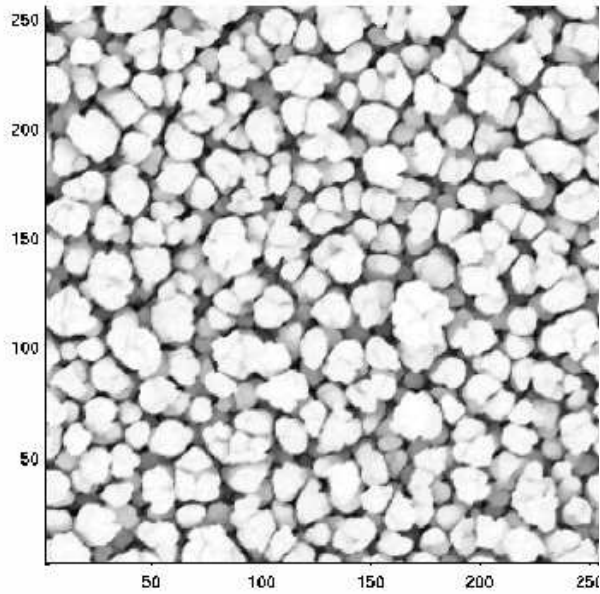
8.1.2.1 Modèle de dépôt aléatoire incluant l'ombrage sans diffusion (MC2D-d+O)

Pour ce modèle, nous faisons les simulations sur un système de taille 256×256 pour plusieurs valeurs de θ_{max} ($1^\circ \leq \theta_{max} \leq 70^\circ$). Pour $\theta_{max} = 1^\circ$, l'effet d'ombrage apparaît que pour t supérieur à 2500. Les images de la surface du dépôt, vue de dessus, pour $\theta_{max} = 30^\circ$ et 60° , prises à différents instants, sont données figures 8.9 et 8.10 respectivement. Les figures 8.11 et 8.12, quant-à elles, présentent le profil des hauteurs h de l'interface correspondante pour ces deux valeurs. Comme attendu, nous observons l'apparition d'une structure colonnaire et observons que la taille des colonnes croît au cours du temps et qu'elle dépend de l'angle maximal θ_{max} .

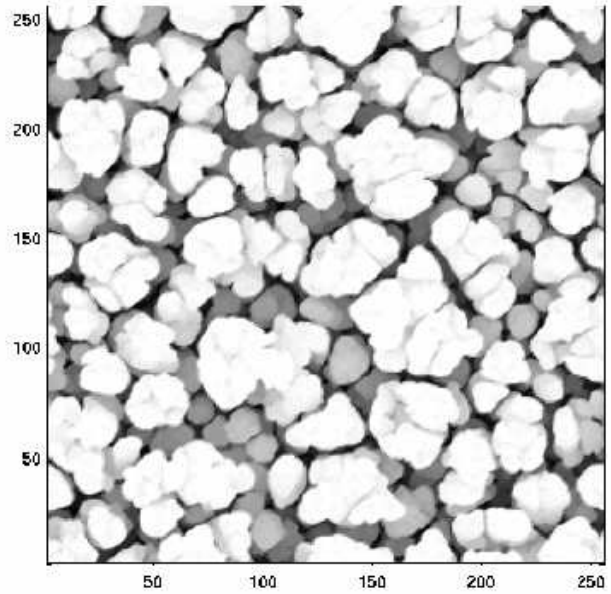
La présence de la structure colonnaire se caractérise, sur la fonction de distribution de la hauteur de l'interface donnée figures 8.13, par un pic pour les hauteurs max. Les figures sont similaires à celles obtenues en 1D (voir section 7.1.3.1) et donnent les pics correspondant à la hauteur maximale des plateaux des colonnes. La hauteur maximale est autour de 6000 pour le cas $\theta_{max} = 30^\circ$ et 7000 pour le cas $\theta_{max} = 60^\circ$, ce qui indique que l'évolution en temps de la hauteur maximale h_{max} dépend aussi de θ_{max} (voir la figure 8.14). Nous constatons que h_{max} évolue linéairement en temps t :

$$h_{max}(t) \sim at,$$

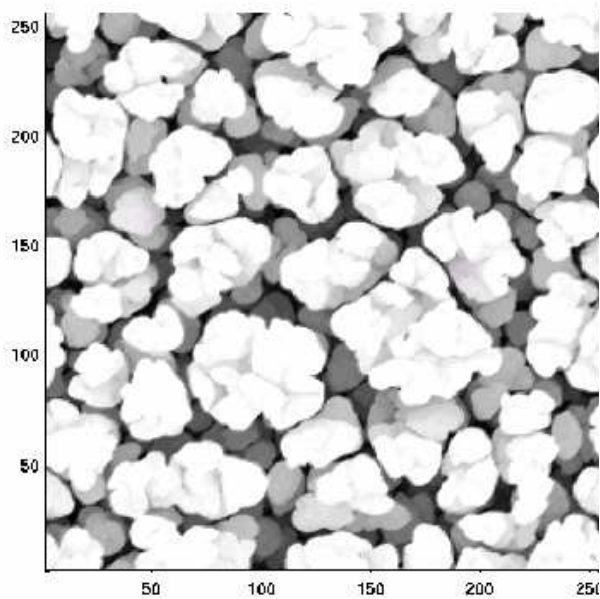
et que la valeur du coefficient a dépend également de θ_{max} comme dans le cas 1D. La courbe de la valeur a en fonction θ_{max} est reportée figure 8.15. Nous avons, tout comme en 1D (cf figure 7.18)



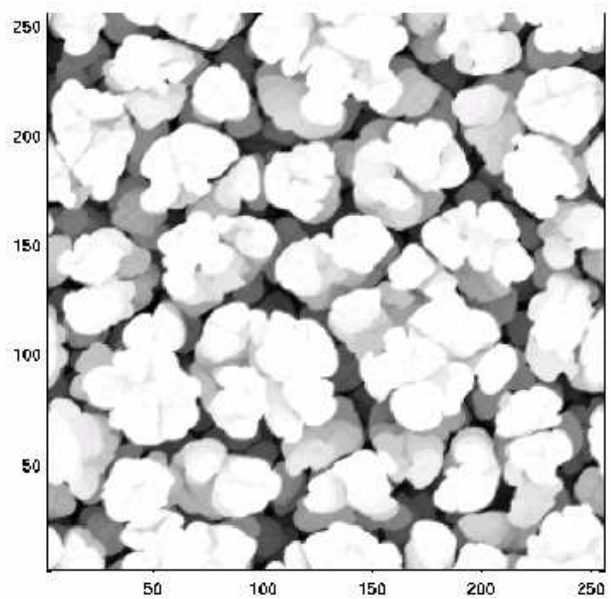
(a)



(b)



(c)



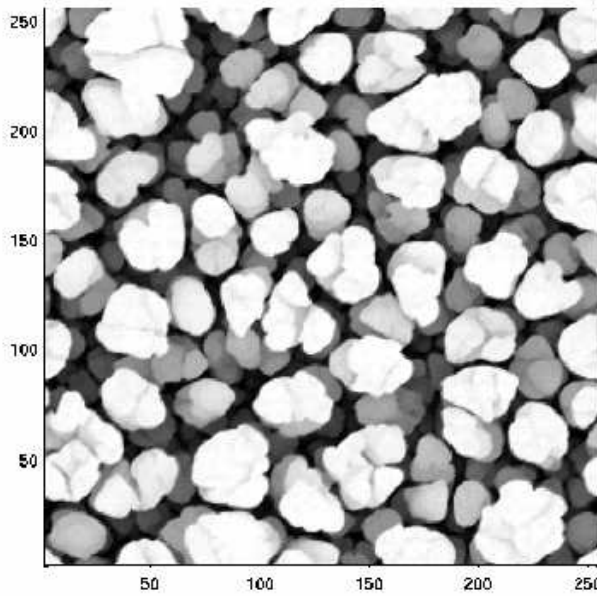
(d)

FIG. 8.9. Modèle MC2D-d+O : Surface du dépôt vue de dessus, pour un système de taille 256×256 et $\theta_{max} = 30^\circ$, prise aux instants $t = 1000$ (a), $t = 3000$ (b), $t = 5000$ (c), $t = 7000$ (d).

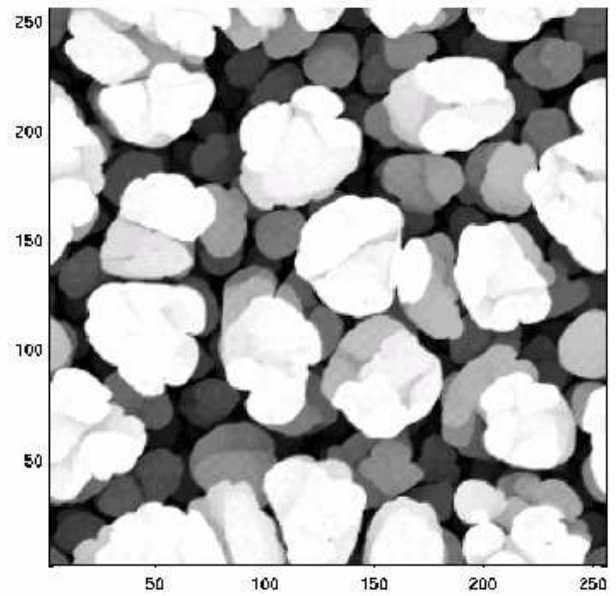
une évolution linéaire de a en fonction θ_{max} pour $0.1(\text{rad}) < \theta_{max} < 1.4(\text{rad})$:

$$a(\theta_{max}) \approx 1.05 + 0.44\theta_{max},$$

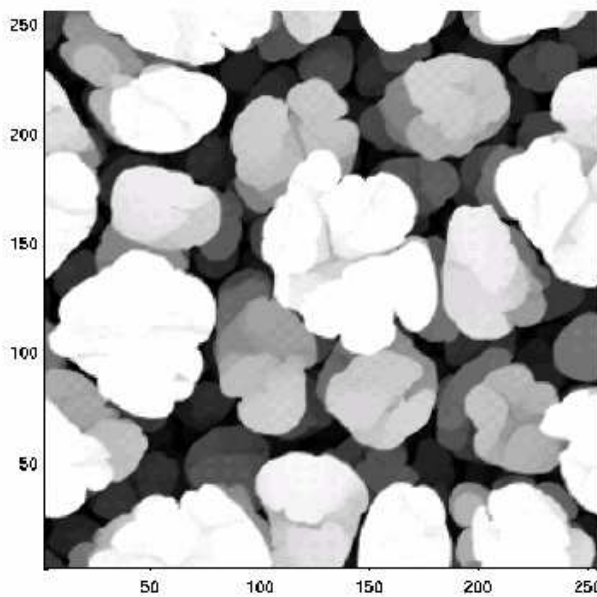
cependant les valeurs ne sont pas exactement les mêmes qu'en 1D (ref section 7.1.3.1). Par exemple,



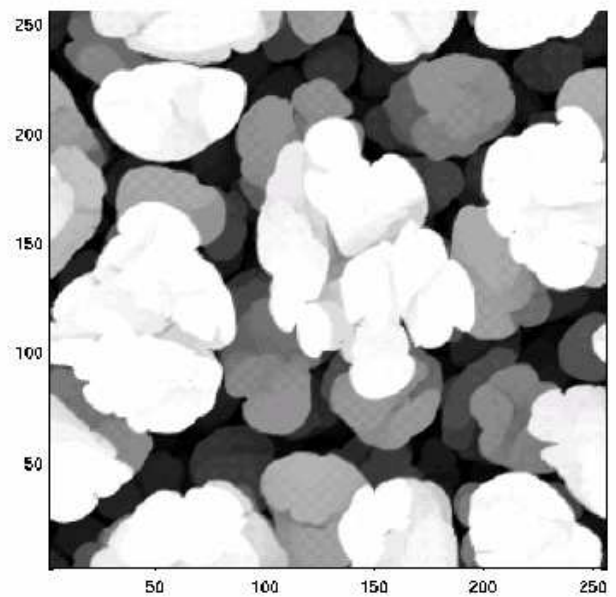
(a)



(b)



(c)



(d)

FIG. 8.10. Modèle MC2D-d+O : *Idem que pour la figure 8.9 mais pour un angle d'incidence maximal de $\theta_{max} = 60^\circ$.*

pour $\theta_{max} = 60^\circ$, nous avons $a \simeq 1.3$ en 1D alors que $a \simeq 1.5$ en 2D. Contrairement au modèle 1D, nous n'avons pas une évolution temporelle linéaire de $h_{min}(t)$. Nous observons qu'en temps petit la hauteur minimale de la surface augmente très peu, puis à partir d'un temps suffisamment long h_{max} sature à une valeur d'autant plus faible que l'angle θ_{max} est grand. Ces sites qui se trouvent

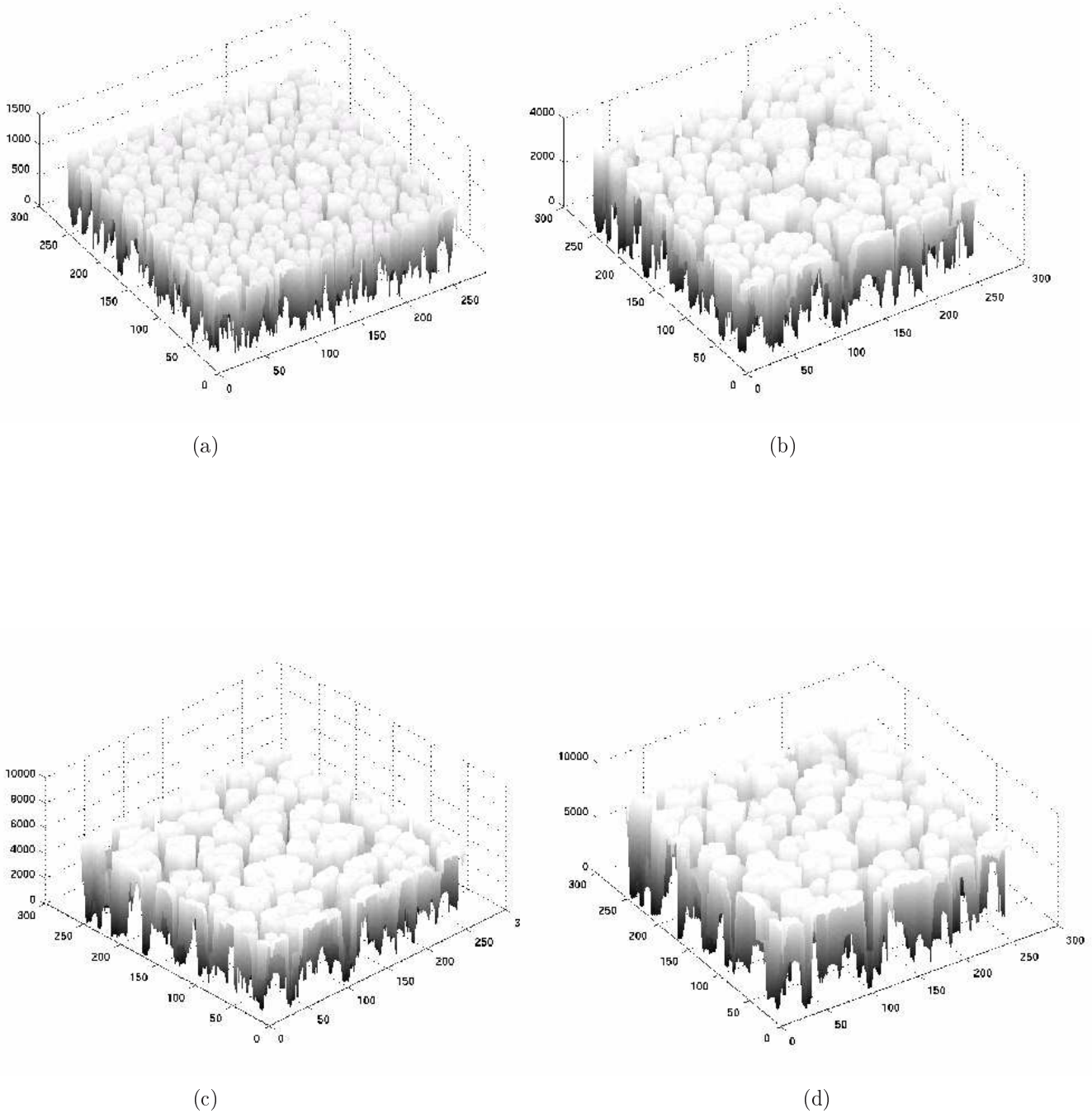


FIG. 8.11. Modèle MC2D-d+O : Profil h de l'interface, pour un système de taille 256×256 et $\theta_{max} = 30^\circ$, pris aux instants $t = 1000$ (a), $t = 3000$ (b), $t = 5000$ (c), $t = 7000$ (d). La représentation en perspective des résultats donne figure 8.9

dans les endroits dont la hauteur est minimale, ne peuvent plus recevoir les atomes provenant de la source. Ils sont bien fermés et ombrés par les autres colonnes situées autour d'eux. La probabilité de dépôt est presque nulle. Déposer une particule sur l'un de ces sites, dépend du choix convenable d'un couple (θ, φ) . En 1D, cela ne dépend que du choix d'une seule valeur et nous avons bien vu que h_{min} augmente linéairement en temps.

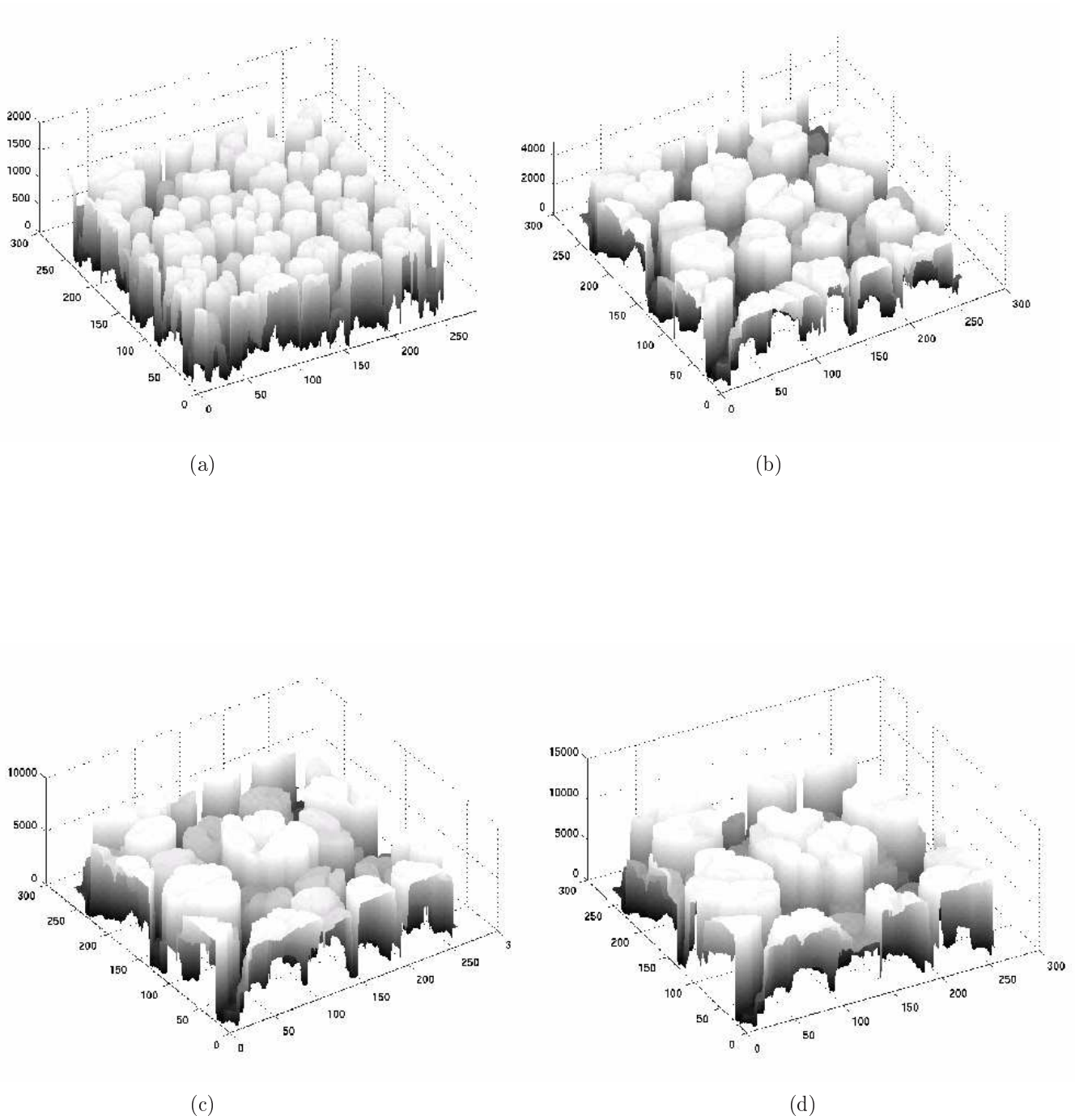


FIG. 8.12. Modèle MC2D-d+O : *Idem que pour la figure 8.11 mais pour un angle d'incidence maximal $\theta_{max} = 60^\circ$.*

L'évolution temporelle de la rugosité d'interface W est donnée figure 8.16 en échelle log-log. Comme en 1D, il existe deux régimes : le premier, pour des temps petits, se comporte comme \sqrt{t} (marque de la phase de dépôt aléatoire habituelle) ; l'autre, après $t = t_c$, évolue linéairement en fonction du temps t . Ce temps critique de changement t_c indique le moment où l'effet de l'ombrage commence à

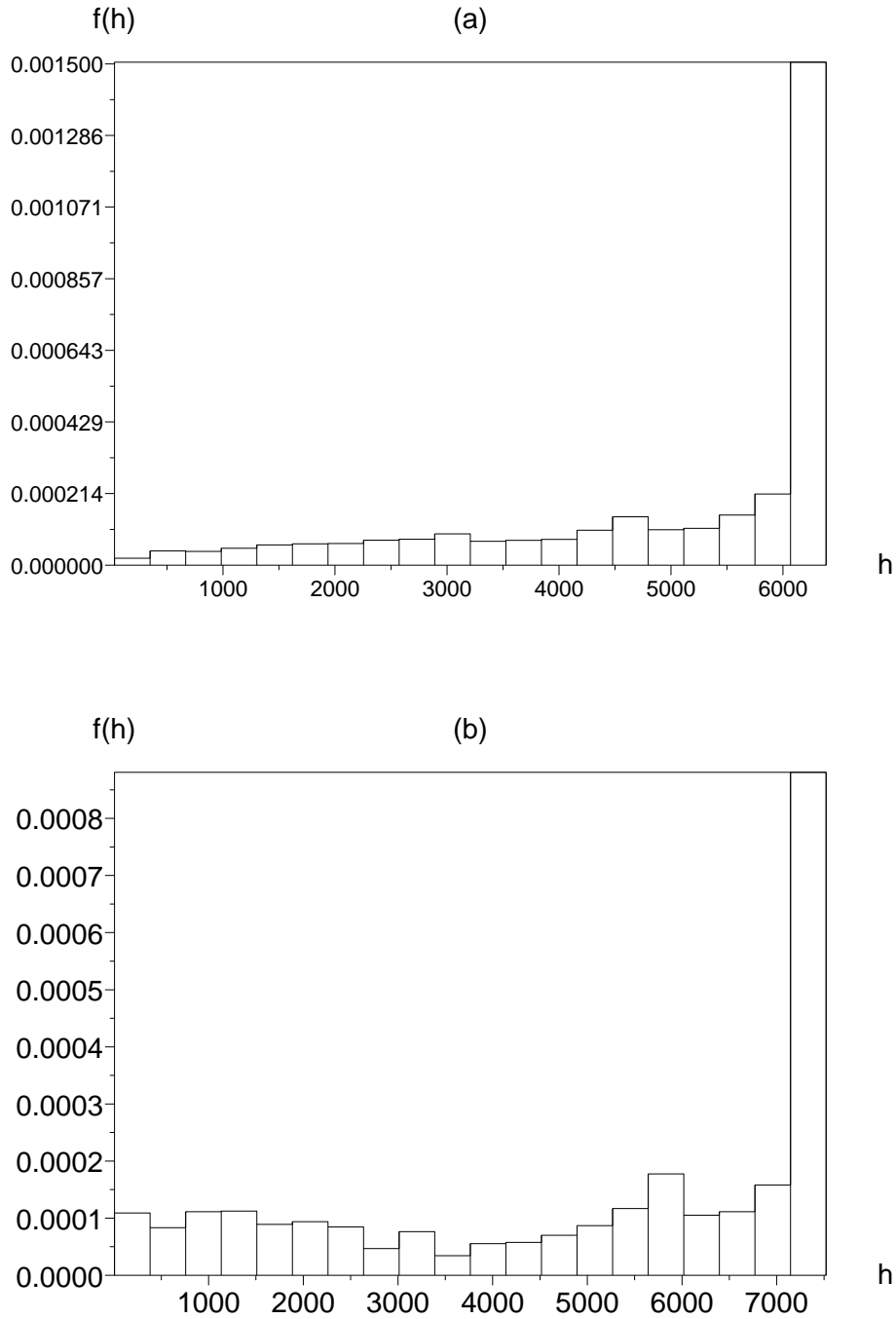


FIG. 8.13. Modèle MC2D-d+O : Fonction de distribution $f(h)$ à l'instant $t = 5000$ pour les deux cas, $\theta_{max} = 30^\circ$ (a) et $\theta_{max} = 60^\circ$ (b).

affecter la structure du dépôt et fait apparaître les colonnes. La figure 8.17 qui donne t_c en fonction de θ_{max} , montre qu'il obéit à la loi de puissance

$$t_c \sim \theta_{max}^{-1.3}.$$

Rappelons que, pour le modèle 1D, nous avons trouvé $t_c \sim \theta_{max}^{-1.4}$. Ces temps sont similaires, la

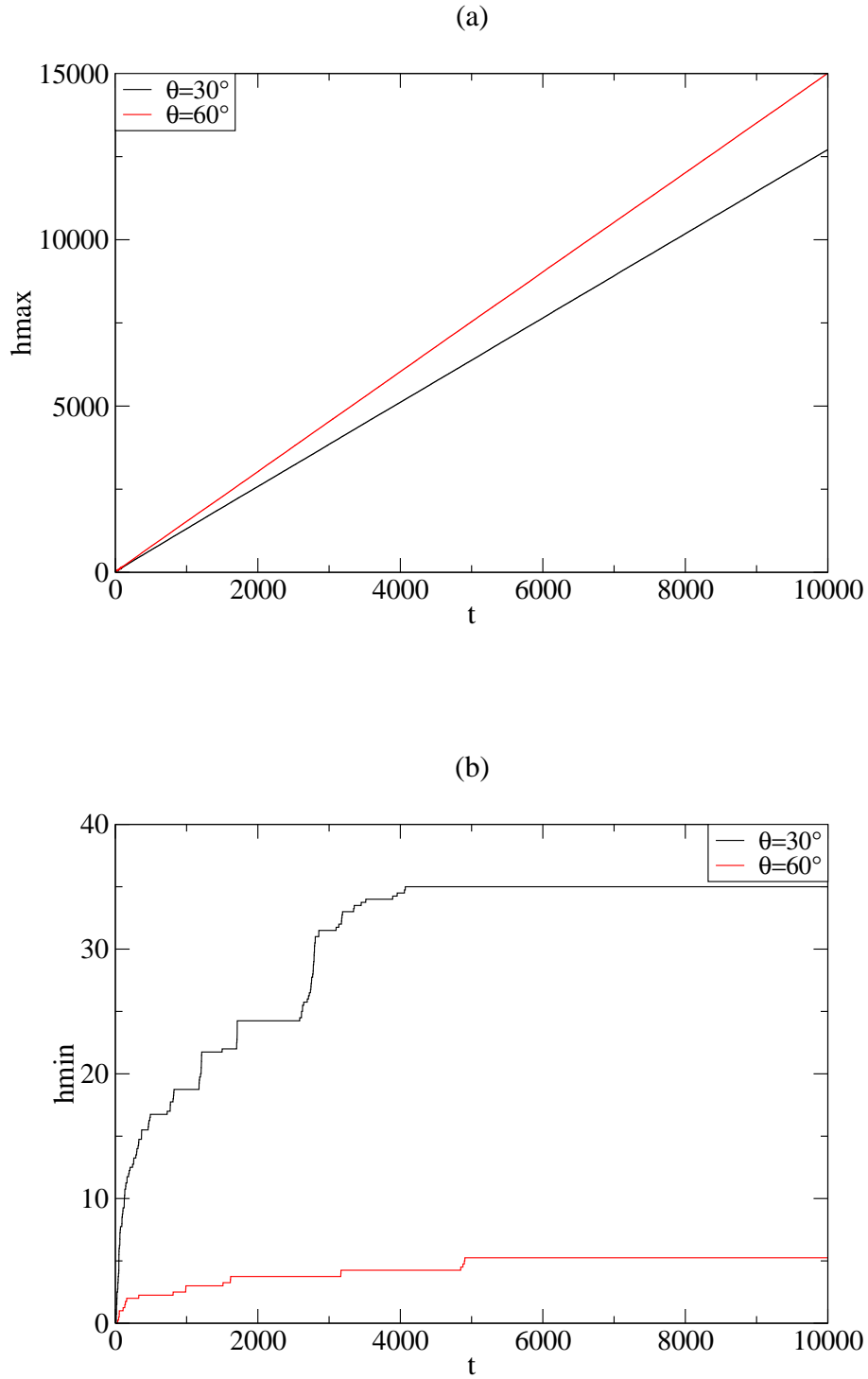


FIG. 8.14. Modèle MC2D-d+O : Hauteurs maximale h_{max} (a) et minimale h_{min} (b) de l'interface en fonction du temps t pour un système contenant 256×256 sites d'adsorption pour $\theta_{max} = 30^\circ$ et $\theta_{max} = 60^\circ$. Les résultats sont moyennés sur un ensemble de 5 expériences.

dimension joue donc peu sur la dépendance de t_c vis à vis de θ_{max} .

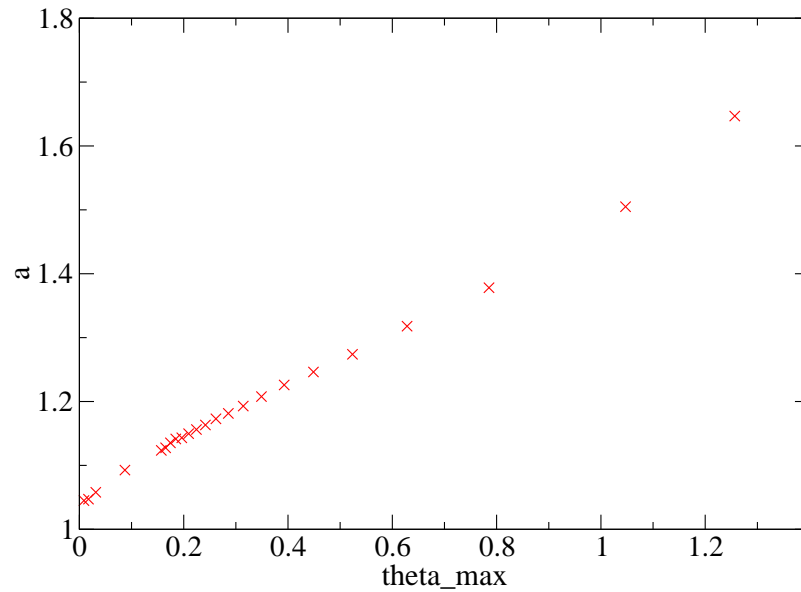


FIG. 8.15. Modèle MC2D-d+O : Valeur du coefficient a de la fonction $h_{max} = at$ en fonction de l'angle θ_{max} (en radian).

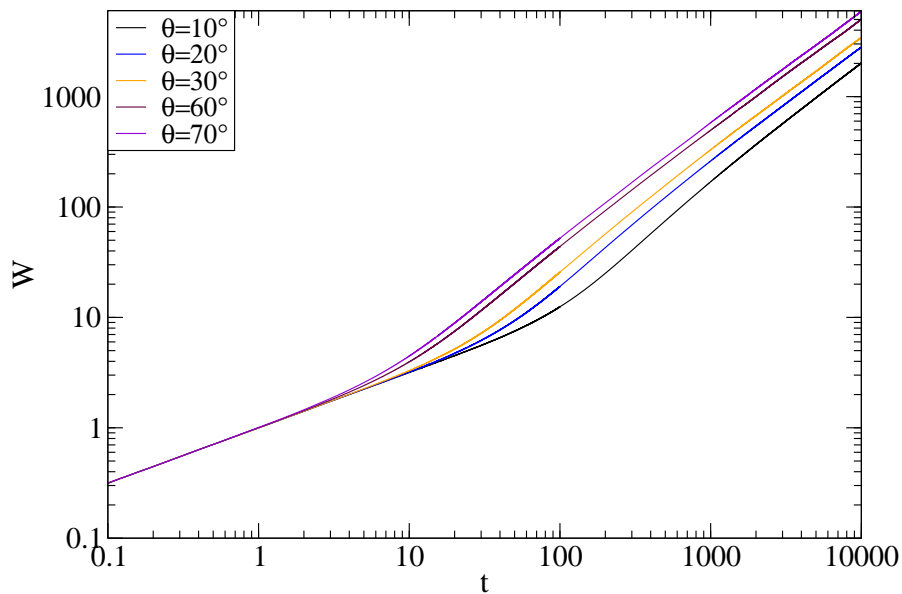


FIG. 8.16. Modèle MC2D-d+O : Rugosité W en fonction du temps t , en échelle log-log, pour une surface de dépôt de taille 256×256 , avec $\theta_{max} = 10^\circ, 20^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Les résultats sont moyennés sur un ensemble de 5 expériences.

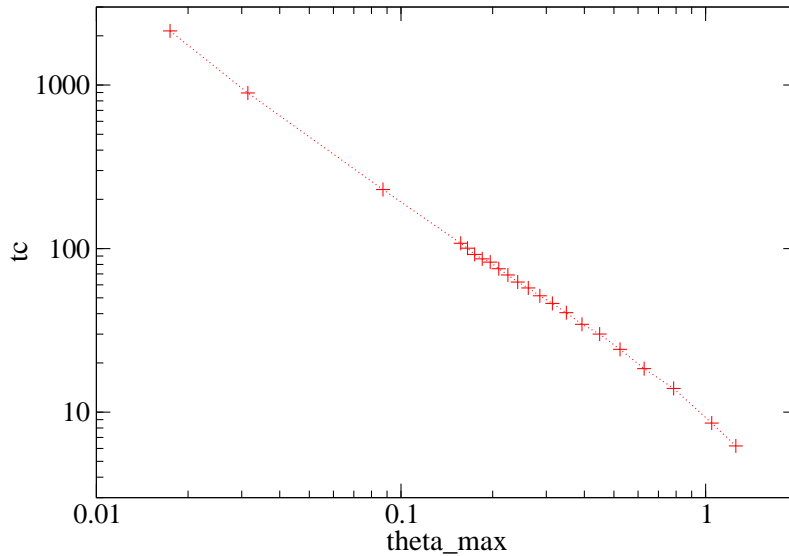


FIG. 8.17. Modèle MC2D-d+O : Instant de transition t_c en fonction de θ_{max} (en radian).

Regardons maintenant comment évolue la taille moyenne S_c des colonnes au cours du temps t . Pour calculer la valeur de S_c d'une surface donnée, il faut que l'on trouve le nombre de colonnes que comporte cette surface, puis le nombre de sites appartenant aux colonnes. Afin d'effectuer ces calculs, nous avons utilisé l'algorithme de Hoshen et Kopelman [25] qui se fait en 3 étapes :

- La première consiste à déterminer si un site fait parti d'une colonne ou pas. La surface est balayée ligne par ligne, de haut en bas par exemple. On examine chaque site, si sa hauteur est supérieure à la hauteur moyenne de la surface alors il fait parti d'une colonne et il est mis à -1, sinon il fait parti d'un trou et est labellisé "0".

0	0	-1	0	0	-1
0	0	-1	-1	-1	-1
-1	0	0	0	0	0
0	-1	-1	-1	0	-1
0	0	-1	-1	0	-1
0	-1	0	0	0	-1

■ site appartenant aux trous

□ site appartenant aux colonnes

FIG. 8.18. Modèle MC2D-d+O : Déterminer les sites appartenant aux colonnes.

- La seconde étape consiste à regrouper par colonne les sites marqués "-1" : sera regrouper les sites "-1" ayant un côté en commun et en tenant compte des conditions aux bords. On effectue le balayage ligne par ligne, la première case "-1" rencontrée sera partie de la colonne 1 et son label est mis à 1. Si la case suivante est à "-1", elle est mise également à 1 (cas appartenant à la même colonne), sinon on continue le balayage jusqu'à rencontrer une case non nulle. Un site suivant, s'il n'est pas connecté à un site déjà numéroté, se voit attribué le numéro suivant, sinon il se voit attribué le numéro de la case avec laquelle il est contiguë et ainsi de suite. Si un conflit de label apparaît (pour une case qui possède 2 voisins de labels différents) alors un tableau intermédiaire permet de mémoriser la correspondance entre les labels.

0	0	1	0	0	2
0	0	1	1	1	1
3	0	0	0	0	0
0	4	4	4	0	5
0	0	4	4	0	5
0	6	0	0	0	5

FIG. 8.19. Modèle MC2D-d+O : Numérotation des colonnes pour une surface en 2D : appartiennent à une même colonne les cellules qui ont au moins un coté en commun.

- Un examen de ce tableau de correspondance permet au final de relabelliser les cases. Le nombre de labels différents utilisés pour numéroté les sites donne le nombre de colonnes (voir figure 8.20).

0	0	1	0	0	1
0	0	1	1	1	1
3	0	0	0	0	0
0	4	4	4	0	1
0	0	4	4	0	1
0	6	0	0	0	1

FIG. 8.20. Modèle MC2D-d+O : L'étape finale du calcul du nombre de colonnes en 2D. Les conditions périodiques sont prises en compte (cf colonne 5).

La figure 8.21 donne la surface moyenne $S_c(t)$ occupée par une colonne, en échelle log-log, pour $\theta_{max} = 30^\circ, 45^\circ$ et 60° . Nous observons que la $S_c(t)$ obéit à une loi de puissance :

$$S_c(t) \sim t^{p_1}, \quad (8.1)$$

pour laquelle l'exposant p_1 dépend de θ_{max} . La dépendance de cet exposant p_1 avec θ_{max} est donné figure 8.22.

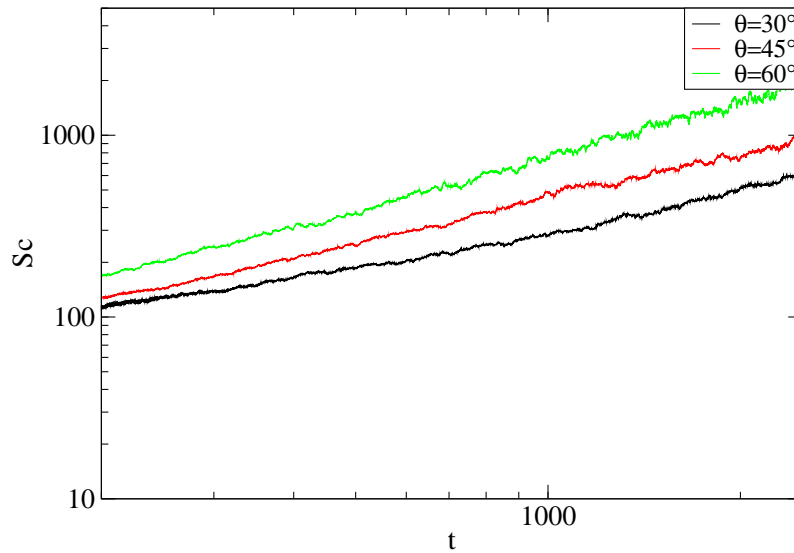


FIG. 8.21. Modèle MC2D-d+O : Taille moyenne des colonnes $S_c(t)$ tracée en échelle log-log pour un système comportant 256×256 sites et avec $\theta_{max} = 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$. Les résultats sont moyennés sur un ensemble de 5 expériences.

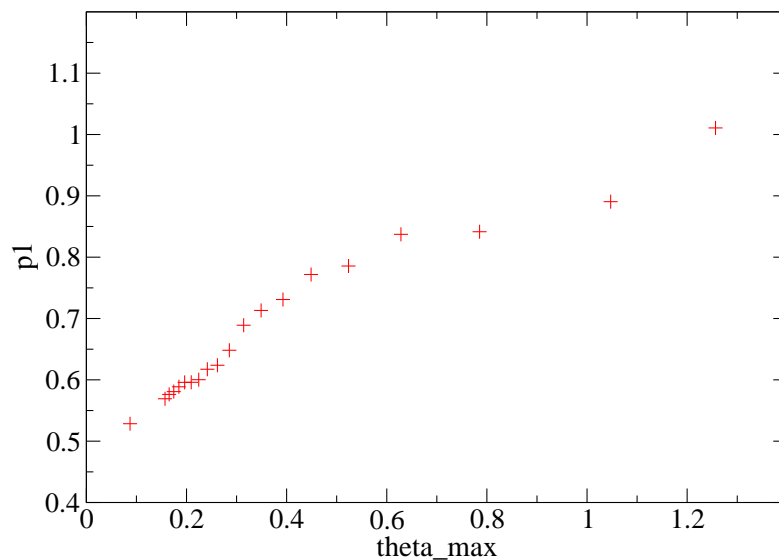


FIG. 8.22. Modèle MC2D-d+O : Valeur de l'exposant p_1 en fonction de θ_{max} (en radian). Les calculs sont faits sur un système de taille 256×256 .

Afin de compléter l'analyse de la structure d'interface de ce modèle de croissance avec ombrage, nous présentons deux coupes de l'interface $h(x, y)$ (à $y = 125$) figures 8.23 et 8.24 à différents instants t pour les valeurs $\theta_{max} = 30^\circ$ et 60° respectivement. Ces courbes donnent le même type de morphologie de la surface du dépôt que celle obtenue par nos simulations numériques en 1D.

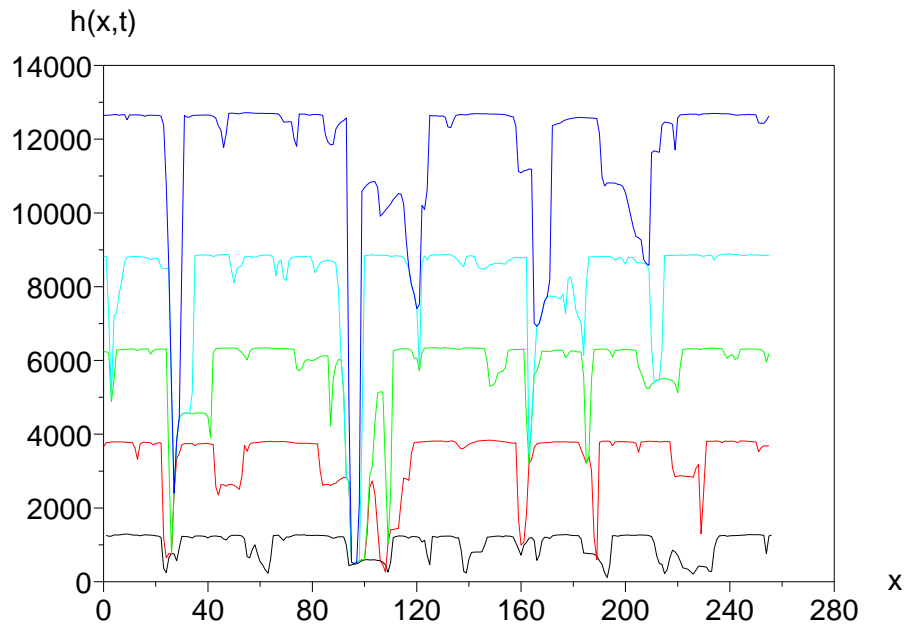


FIG. 8.23. Modèle MC2D-d+O : Coupes en position $y = 125$ de la hauteur d'interface en 2D (figure 8.9) aux différents instants $t = 1000, 3000, 5000, 7000$ et 10000 pour $\theta_{max} = 30^\circ$.

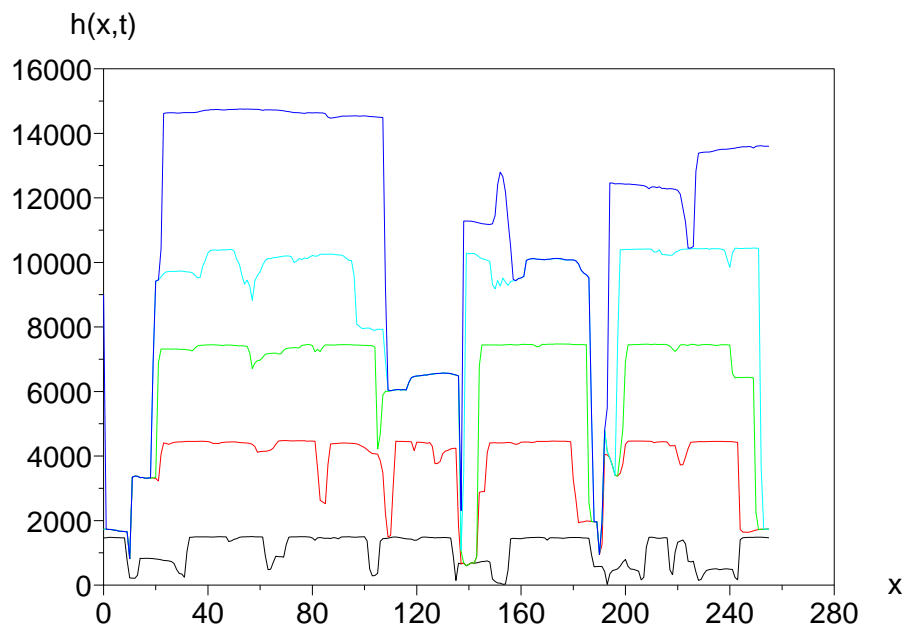


FIG. 8.24. Modèle MC2D-d+O : Idem que pour la figure 8.23 mais l'angle incident maximal est $\theta_{max} = 60^\circ$.

Le calcul de la largeur moyenne l_c des colonnes sur l'ensemble de toutes les coupes (selon Ox et selon Oy soient $2L$ coupes) établi au cours du temps indique que l_c se comporte comme une loi de puissance

$$l_c \sim t^p,$$

pour laquelle nous obtenons $p_1 = 2 * p$ où p_1 est l'exposant de la loi de puissance $S_c \sim t^{p_1}$ donnée équation (8.1) ci-dessus. Par exemple, avec $\theta_{max} = 30^\circ$, nous avons trouvé $p_1 \simeq 0.79$ et $p \simeq 0.39$. Cela confirme la relation $S_c \sim l_c^2$ entre la taille moyenne des colonnes et la largeur moyenne des coupes des colonnes. Nous trouvons également que le nombre moyen des colonnes n_c , pour les coupes en position x , se comporte comme t^{-p} (cf figure 8.25) et cela implique que le nombre moyen de colonne sur l'ensemble de la surface N_c se comporte comme $t^{-p_1} \sim t^{-2p}$. Cependant nous constatons que la valeur p trouvées en 2D est différente de celle obtenue en 1D (figure 8.26).

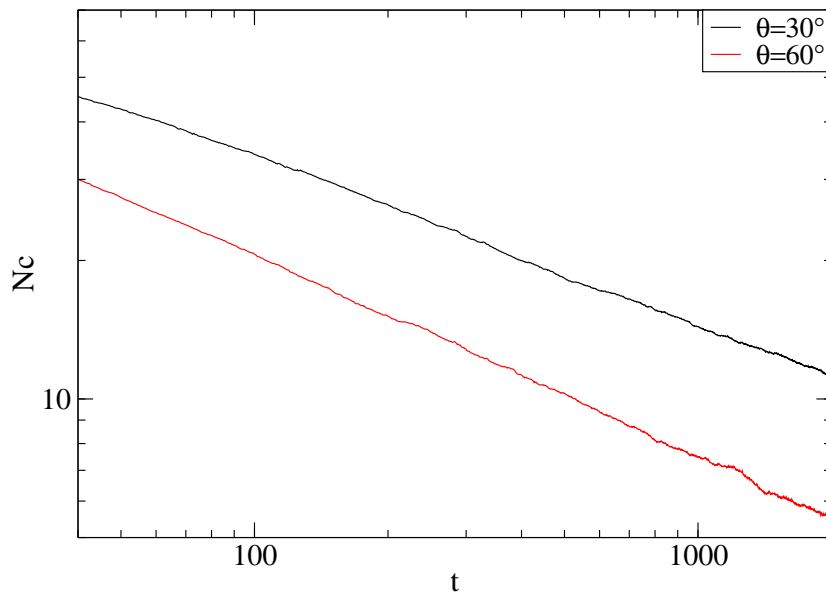


FIG. 8.25. *Modèle MC2D-d+O : Nombre moyen de colonnes n_c , pour toutes les coupes selon Ox et Oy ($2L$ coupes), en fonction de temps t pour un système de taille 256×256 et avec $\theta_{max} = 30^\circ$, 60° .*

Tous les résultats que nous avons présentés dans cette partie sont fait pour des systèmes de taille 256×256 pour des temps allant jusqu'à $t = 10000$ nécessitant des temps de simulations déjà assez long (de l'ordre de 3 jours sur des machines pentiums à 1.8 GHz). Néanmoins, afin de vérifier que la taille du système de dépôt est suffisamment grande pour que des effets de taille finie n'influence pas les propriétés de la structure de surface (comme par exemple la taille moyenne de colonnes), nous avons fait des simulations avec un système de taille 512×512 . Nous constatons que les caracté-

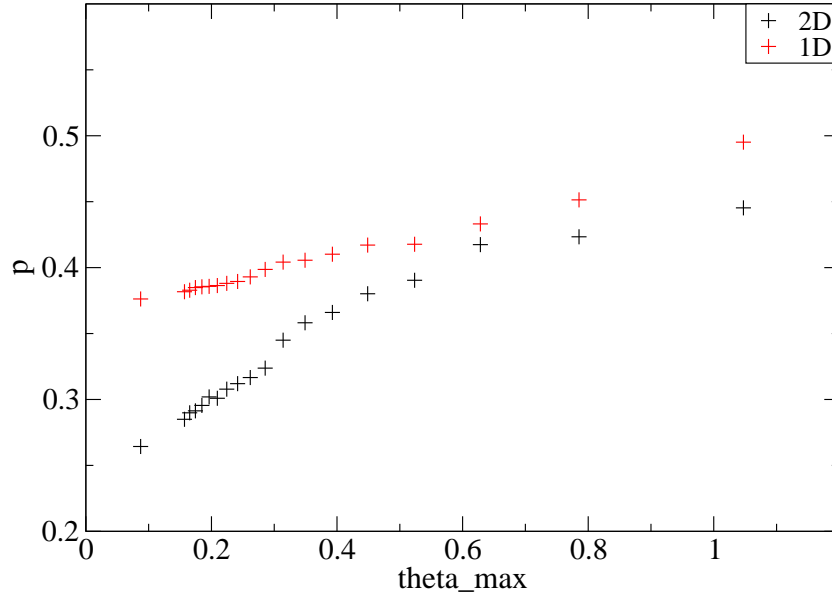


FIG. 8.26. Modèle MC2D-d+O : Comparaison de la valeur d'exposant p pour la loi donnant la largeur des colonnes $l_c \sim t^p$ entre 1D et 2D.

sations de la structure ainsi que de la rugosité d'interface trouvées sont les mêmes qu'avec la taille 256×256 (voir les figures 8.27, 8.28,). Nous restons donc sur la taille 256×256 pour les simulations des modèles suivants.

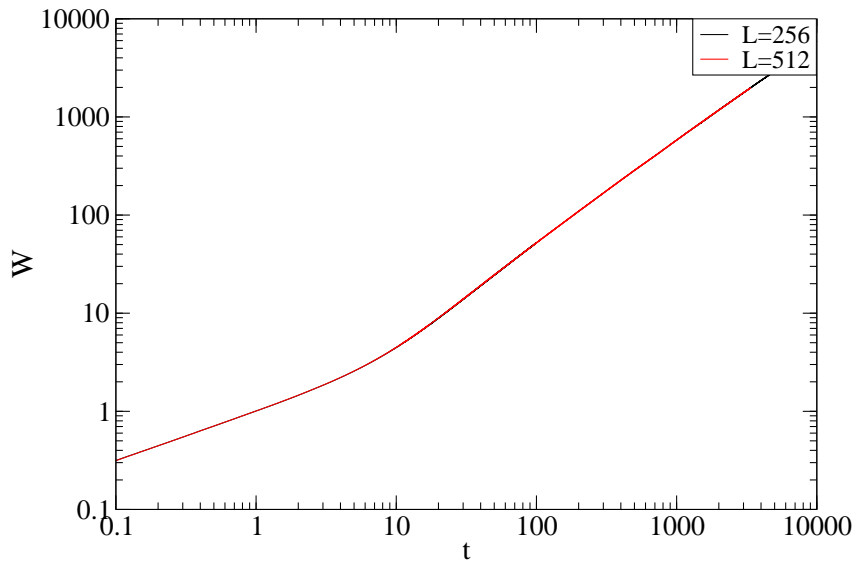


FIG. 8.27. Modèle MC2D-d+O : Rugosité W en fonction du temps t , en échelle log-log, moyennée sur un ensemble de 5 expériences pour des systèmes de taille 256×256 et 512×512 avec $\theta_{max} = 70^\circ$.

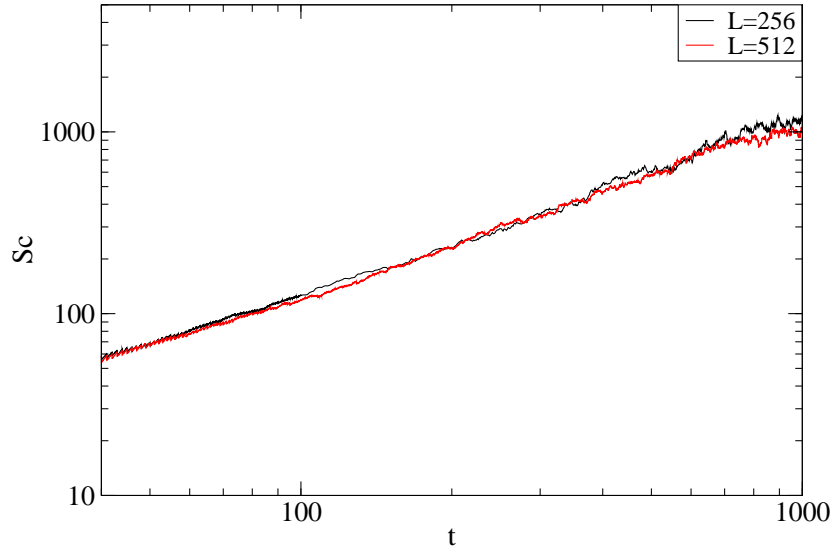


FIG. 8.28. Modèle MC2D-d+O : Taille moyenne des colonnes $S_c(t)$ en échelle log-log pour des systèmes de taille 256×256 et 512×512 pour $\theta_{max} = 70^\circ$. Les résultats sont moyennés sur un ensemble de 5 expériences.

Récapitulatif : pour le modèle de dépôt seul avec ombrage en 2D, nous obtenons des caractérisations de la croissance et de la rugosité d'interface suivantes :

. Caractérisation des colonnes en fonction de θ_{max} :

$$S_c \sim t^{p_1(\theta_{max})} \quad \text{avec } p_1(\theta_{max}) \approx 0.53 + 0.4\theta_{max}.$$

$$S_c \sim l_c^2 \sim t^{2p}.$$

$$N_c \sim t^{-p_1(\theta_{max})} \sim t^{-2p}.$$

$$h_{max} \sim a(\theta_{max})t \quad \text{avec } a(\theta_{max}) \approx 1.05 + 0.44\theta_{max}.$$

. Caractérisation de la rugosité de l'interface :

$$W \sim t^{0.5} \quad \text{pour } t < t_c,$$

$$W \sim t \quad \text{pour } t > t_c,$$

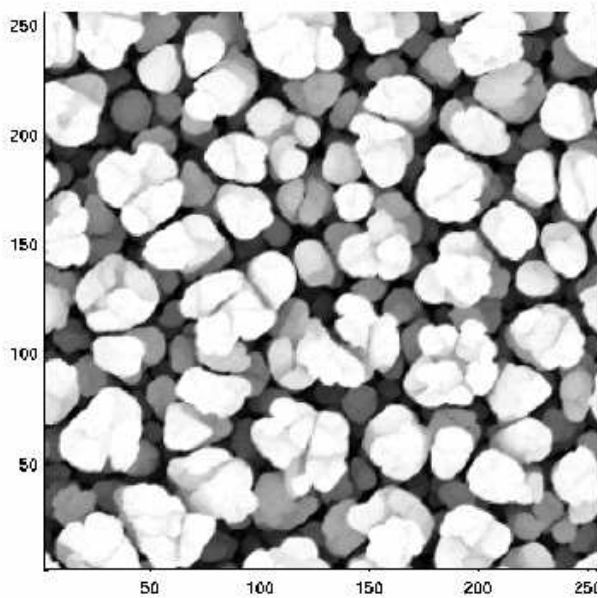
$$\text{avec } t_c \sim \theta_{max}^{-1.3}$$

8.1.2.2 Modèle de dépôt aléatoire avec ombrage incluant une diffusion thermique (MC2D-d+O+R) :

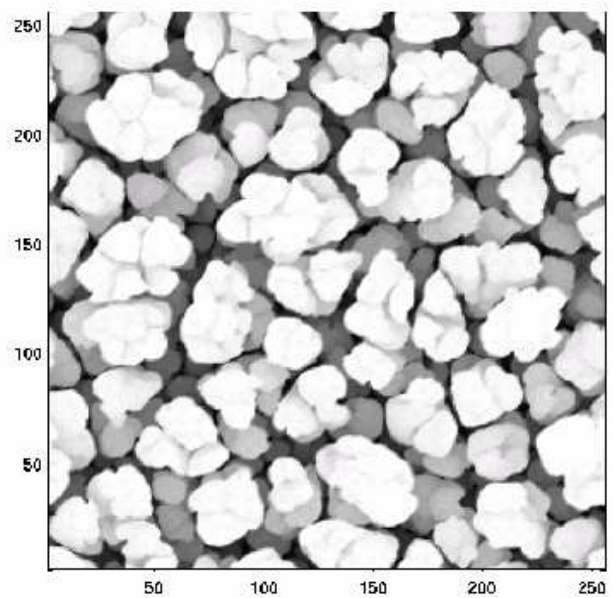
Dans cette partie, nous présentons les résultats des simulations numériques pour le modèle de croissance avec ombrage incluant une diffusion thermique en 2D. Les calculs sont faits pour un système de taille 256×256 , pour plusieurs valeurs de l'angle incident maximal θ_{max} compris entre 18° et 60° , et pour une température T variant entre 440 K et 610 K.

Comme nous avons vu dans la partie 1D (section 7.1.3.2), il existe une compétition entre la relaxation et l'ombrage. Pour les faibles températures, par exemple dans ce modèle $T < 460\text{K}$, l'effet du lissage apporté par la relaxation est négligeable devant l'ombrage, la différence entre la surface obtenue par le processus de croissance avec ombrage incluant une diffusion et celle du processus avec ombrage seul n'est pas significatif. L'allure de la rugosité dans ces deux cas est presque identique. Pour des températures plus élevées, *i.e* pour des températures où l'ombrage finit par dominer la relaxation, l'interface prend une structure colonnaire. Pour des temps intermédiaires, la rugosité d'interface W se comporte comme $W \sim t^\beta$ où l'exposant β prend la même valeur que celle obtenue dans le cas du processus avec relaxation thermique mais sans ombrage à la même température (cf figure 8.4). Néanmoins, en temps plus long, les colonnes apparaissent et W se comporte toujours comme t . Aux températures plus hautes qu'une température limite T_0 , qui dépend de l'angle θ_{max} , la relaxation l'emporte sur l'ombrage et la surface évolue exactement comme dans le cas du processus de croissance sans ombrage, avec relaxation thermique.

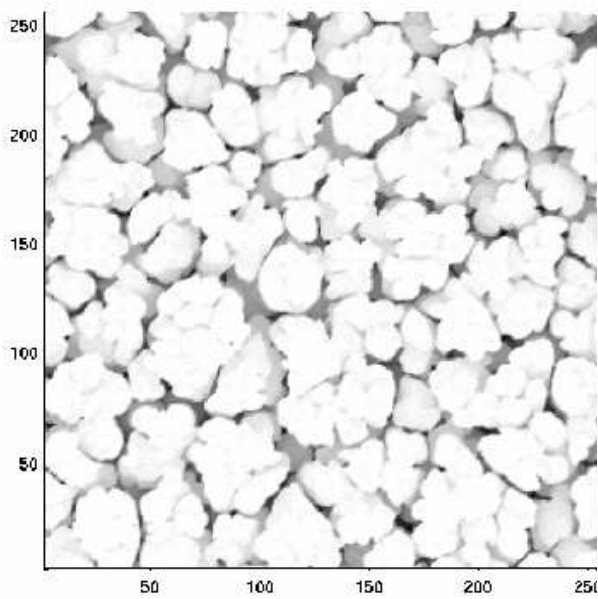
Les figures 8.29 et 8.30 donnent respectivement l'image de la surface vue de dessus et en perspective de l'interface prises à l'instant $t = 1000$ pour $\theta_{max} = 60^\circ$ pour différentes températures $T = 440, 480, 520, 560\text{K}$. Nous voyons que la surface obtenue à $T = 440\text{K}$ ainsi que sa rugosité sont très proches de celles obtenues dans le cas sans diffusion (voir figure 8.32). Lorsque la température augmente, la diffusion devient plus forte et affecte la structure colonnaire de la surface. Elle réduit progressivement les aspérités de l'interface ainsi que les hauteurs maximales des plateaux des colonnes et la profondeur des trous. Il est évident qu'avec la relaxation, les sites qui se trouvent dans les trous vont recevoir plus le dépôt des atomes et donc la hauteur minimale de l'interface sera plus grande que dans le cas sans diffusion. Plus la relaxation est forte, plus cette hauteur minimale sera grande. Cependant les courbes de la hauteur minimale de l'interface en fonction du temps t pour $\theta_{max} = 60^\circ$ et $T = 440, 480, 520\text{K}$, données dans la figure 8.31, nous montrent qu'à partir un temps suffisamment grand, quand le haut des colonnes est bien fermé, la hauteur h_{min} reste stable et les atomes n'arrivent plus à déposer au fond des trous. Nous n'obtenons des évolutions temporelles linéaires de $h_{min}(t)$ que dans le cas où la température T est proche de T_0 . Notons que si $T > T_0$ nous n'obtenons plus les colonnes et alors $h_{max} \approx h_{min} \approx t$.



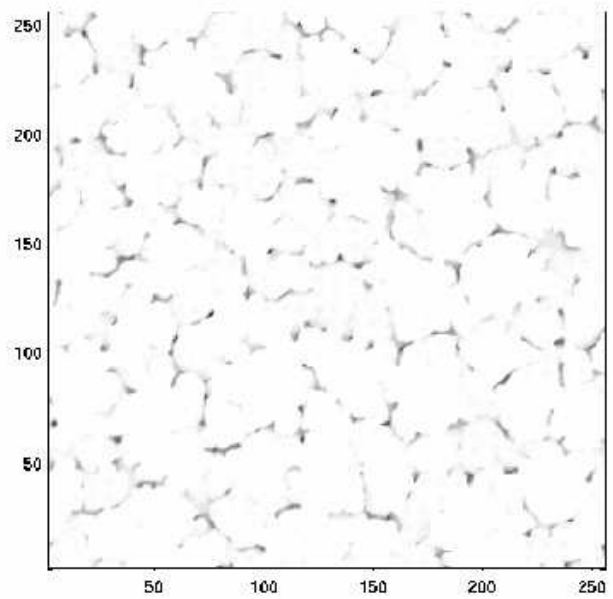
(a)



(b)



(c)



(d)

FIG. 8.29. Modèle MC2D-d+O+R : Surface du dépôt vue de dessus, pour un système de taille 256×256 et $\theta_{max} = 60^\circ$, prise à instant $t = 1000$ avec $T = 440$ K (a), $T = 480$ K (b), $T = 520$ K (c), $T = 560$ K (d).

Nous observons, figure 8.32 qui donne la rugosité en fonction de temps pour différentes valeurs de T que, pour une valeur donnée de l'angle θ_{max} , l'effet du lissage induit par la relaxation retarde l'apparition des colonnes. Le temps t_c de changement de régime entre $W \sim t^\beta$ et $W \sim t$ augmente

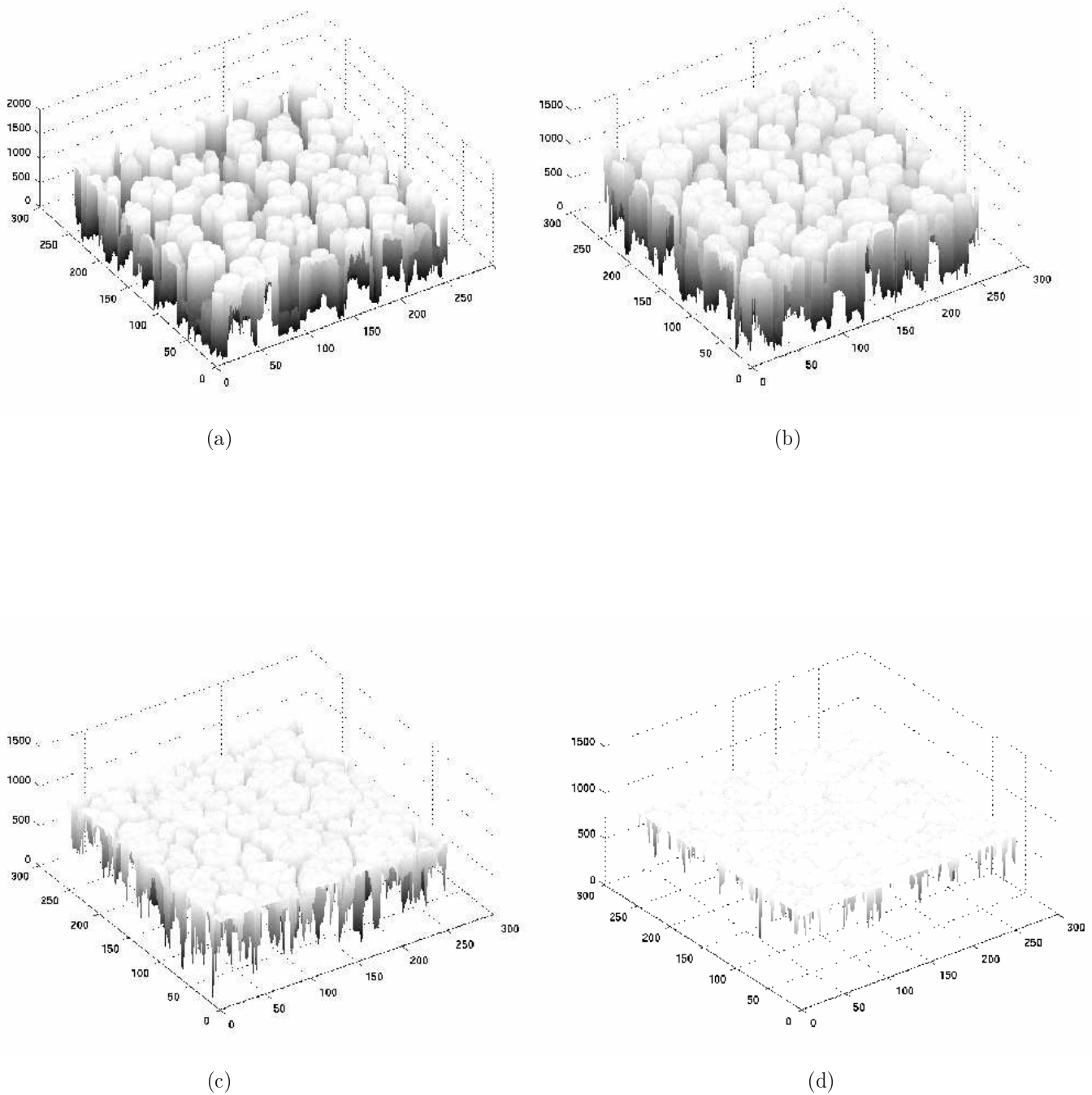


FIG. 8.30. Modèle MC2D-d+O+R : Profil de la hauteur h de l'interface, pour un système de taille 256×256 et $\theta_{max} = 60^\circ$, pris à l'instant $t = 1000$ avec $T = 440$ K (a), $T = 480$ K (b), $T = 520$ K (c), $T = 560$ K (d).

quand la température T croît. Si la température T est plus forte que la limite T_0 , par exemple pour $\theta_{max} = 60^\circ$ et $T = 610$ K, la structure colonnaire disparaît et W sature en temps long. Réciproquement, si l'on fixe la température T et que l'on fait varier l'angle θ_{max} , ce temps t_c dépend de θ_{max} et diminue quand θ_{max} diminue (cf figure 8.33). La structure de la surface de dépôt dépend donc également de l'angle θ_{max} et cette dépendance peut être observée figure 8.34 qui donne

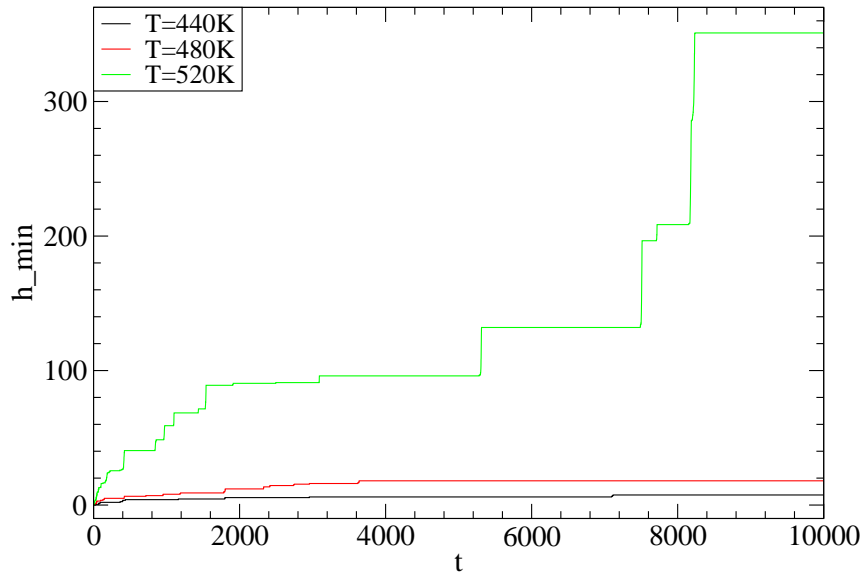


FIG. 8.31. Modèle MC2D-d+O+R : Hauteurs h_{min} de l'interface en fonction du temps t , pour un système de taille 256×256 et pour $T = 440$ k, 480 K, 520 K avec $\theta_{max} = 60^\circ$. Les résultats sont moyennés sur un ensemble de 5 expériences.

la surface vue de dessus prise à l'instant $t = 5000$ pour $T = 520$ K et pour $\theta_{max} = 20^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ et 60° .

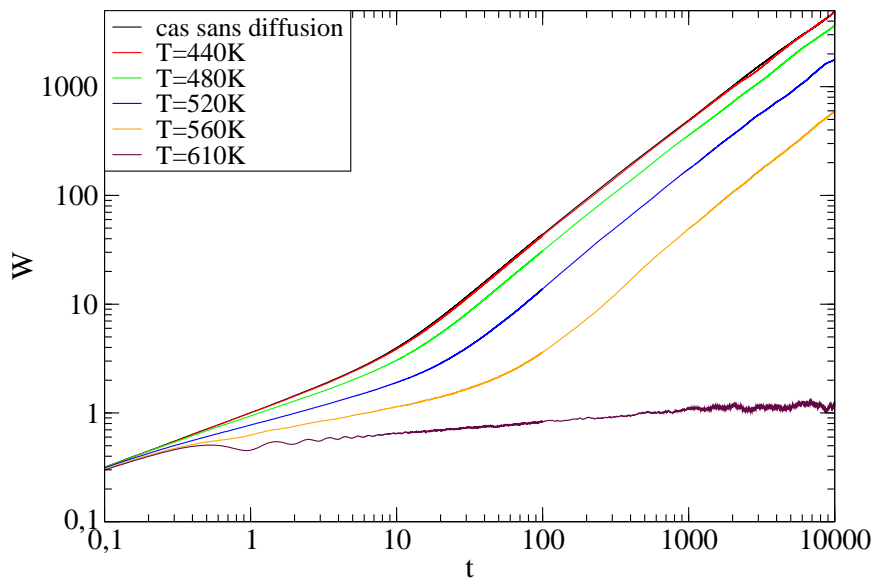


FIG. 8.32. Modèle MC2D-d+O+R : Rugosité W en fonction du temps t , en échelle log-log, pour une surface de dépôt de taille 256×256 avec $\theta_{max} = 60^\circ$, pour les températures $T = 440, 480, 520, 560, 610$ K.

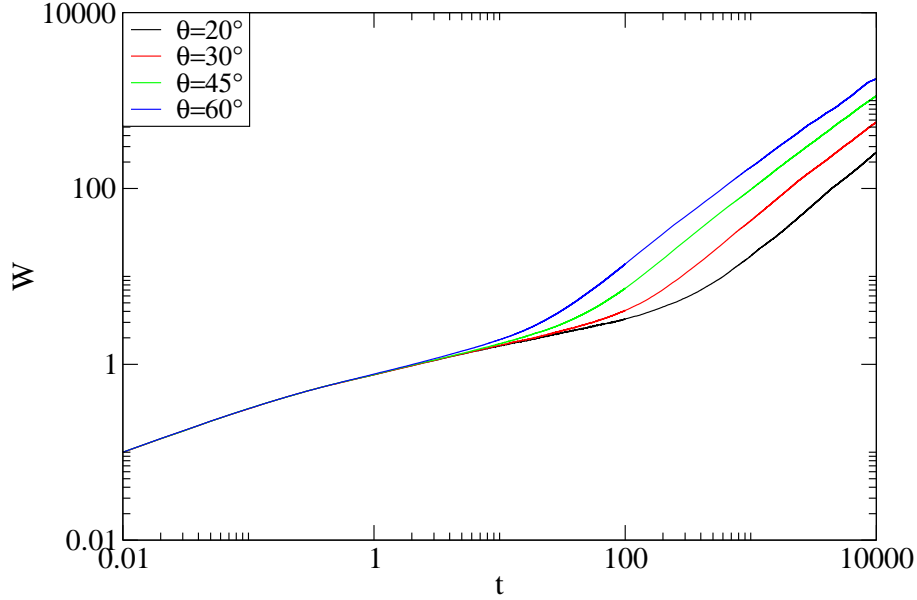
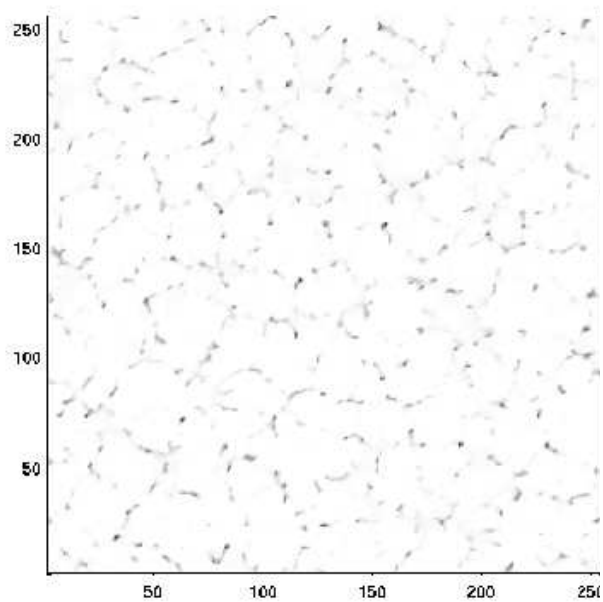


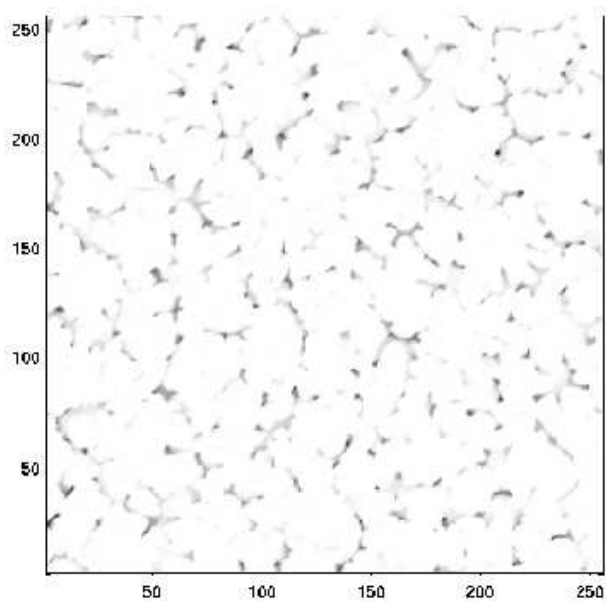
FIG. 8.33. Modèle MC2D-d+O+R : Rugosité W en temps t , en échelle log-log, pour une surface de dépôt de taille 256×256 , à $T = 520$ K, pour $\theta_{max} = 20^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ et 60° .

Regardons maintenant l'évolution de la taille moyenne $S_c(t)$ des colonnes au cours du temps qui est définie comme $l_c^2(t)$. On choisit de calculer l_c pour des questions de rapidité de calcul. La figure 8.35 donne l'évolution temporelle $l_c(t)$, en échelle log-log, pour $\theta_{max} = 60^\circ$ et $T = 440, 480, 520, 560$ K. Ces courbes sont linéaires marquant une dépendance de $l_c \sim t^p$ et assez peu différentes, indiquant une relative indépendance de l_c avec la température. L'exposant p , correspondant à cet angle, prend les valeurs 0.44 ± 0.01 à $T = 440$ K, 0.39 ± 0.01 pour $T = 480$ K, 0.31 ± 0.01 pour $T = 520$ K, et 0.21 ± 0.01 pour $T = 560$ K. En fait, pour $T < 460$ K les valeurs de p sont très proches du cas sans relaxation. A partir de 460 K, p diminue rapidement quand T tend vers T_0 . Dans le cas où l'on fixe la température T et l'on fait varier l'angle θ_{max} , par exemple avec $T = 520$ K, on obtient $p \approx 0.25 \pm 0.01$ pour $\theta_{max} = 45^\circ$, et $p \approx 0.22 \pm 0.01$ pour $\theta_{max} = 30^\circ$.

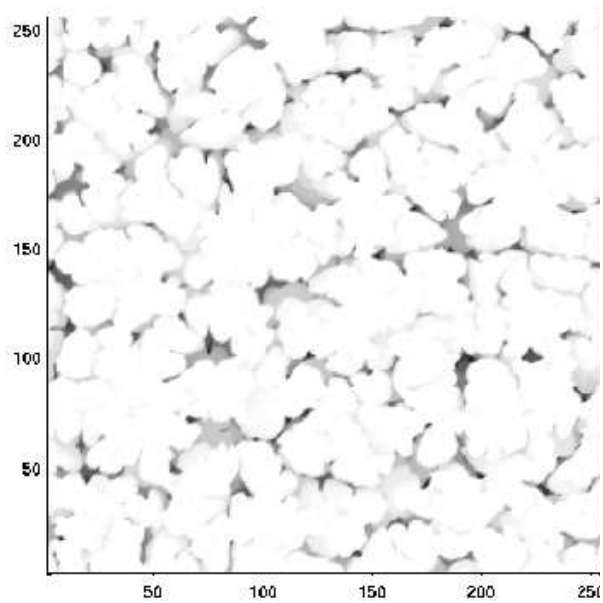
Le dernier résultat présenté figure 8.36 donne la valeur de la température T_0 , qui donne la température critique en fonction de θ_{max} : pour un point au dessus de cette limite, W évolue comme t après $t = t_c$ et le système atteint une structure de type colonnaire, cependant que pour un point situé en dessous, $W \sim t^\beta$ pour les temps intermédiaires puis se sature en temps long et le système atteint le régime donné par le processus de dépôt avec diffusion mais sans ombrage.



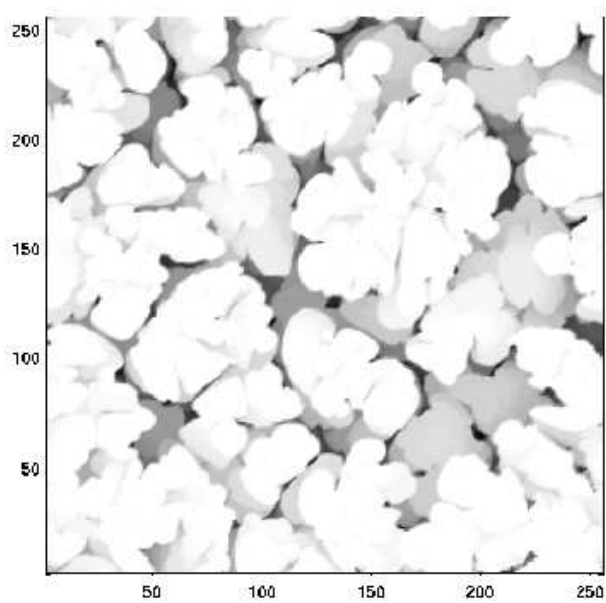
(a)



(b)



(c)



(d)

FIG. 8.34. Modèle MC2D-d+O+R : Surface du dépôt vue de dessus pour un système de taille 256×256 et $T = 520 K$ prise à instant $t = 5000$ avec $\theta_{max} = 20^\circ$ (a), $\theta_{max} = 30^\circ$ (b), $\theta_{max} = 45^\circ$ (c) et $\theta_{max} = 60^\circ$ (d).

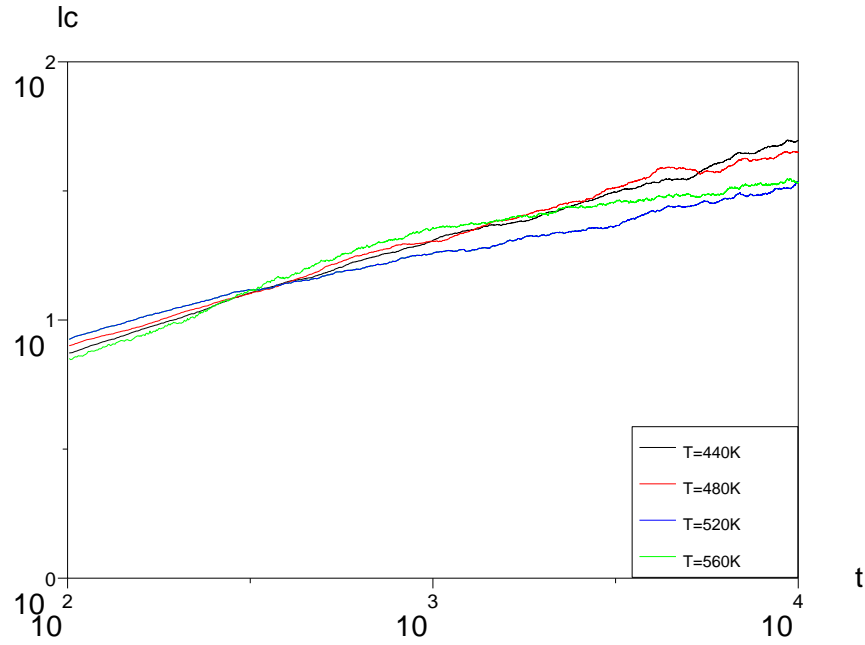


FIG. 8.35. Modèle MC2D-d+O+R : Évolution de l_c au cours du temps t , en échelle log-log, pour un système de taille 256×256 , avec $\theta_{max} = 60^\circ$ et pour $T = 440, 480, 520, 560\text{ K}$.

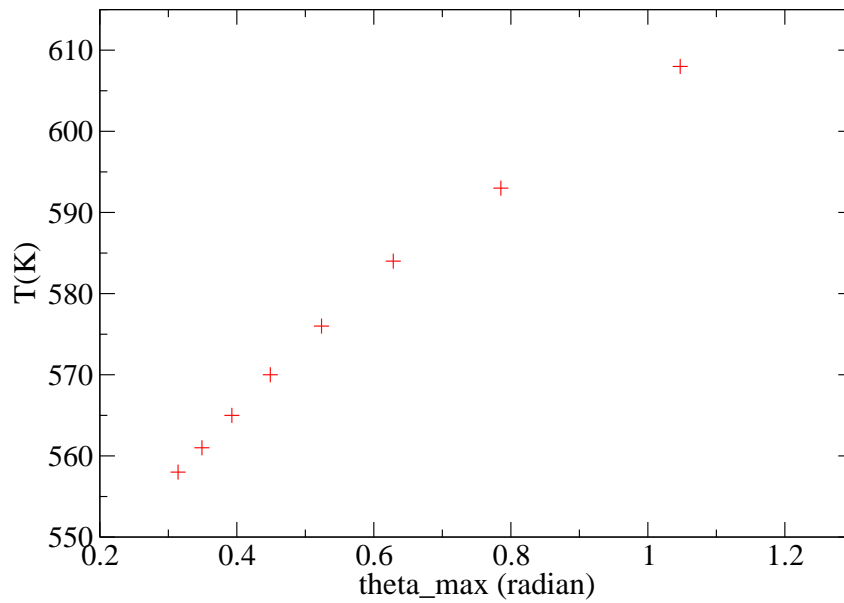


FIG. 8.36. Modèle MC2D-d+O+R : Température limite T_0 en fonction de θ_{max} .

8.2 Modèle continu (EDP2D+ $g(\Omega)$)

Dans cette partie, seul le nouveau modèle continu 7.27, permettant de retrouver la structure colonnaire de la surface du dépôt en 1D, que nous avons proposé dans la partie 7.2.4, sera étudié. Le calcul de l'angle d'ouverture $\Omega(r, \{h\})$, où $r = (x, y)$ en $d = 2 + 1$ dimensions, est plus compliqué qu'en $d = 1 + 1$ dimensions. Pour calculer cet angle, nous allons utiliser la même technique que Yao et Guo ont présenté dans [51]. Nous avons une surface de dépôt discrétisée en $L \times L$ points, l'angle d'ouverture $\Omega_{i,j}$ en un point $M(x_i, y_j)$ sera calculé en utilisant l'algorithme suivant :

- . On coupe l'angle d'azimut Φ en N tranches $\Phi^k = k \frac{2\pi}{N}$.
- . Pour chaque coupe de la surface définie par le point $M(x_i, y_j)$ et Φ^k , on calcule l'angle d'ouverture $\theta_{i,j}^k$ et puis on calcule $\Omega_{i,j}^k = 2\pi \int_0^{\theta_{i,j}^k} \sin \theta' d\theta'$.
- . L'angle d'ouverture $\Omega_{i,j}$ du point $M(x_i, y_j)$ est donné par $\Omega_{i,j} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \Omega_{i,j}^k$.

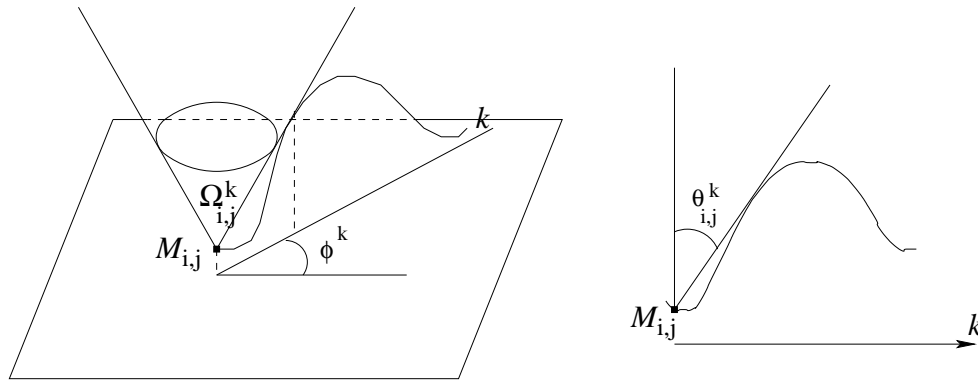


FIG. 8.37. Calcul de l'angle d'ouverture $\Omega(r, \{h\})$ en 2D.

8.2.1 Résolution numérique du modèle continu EDP2D+ $g(\Omega)$

Pour la résolution numérique du modèle continu 7.27 en 2D, nous utilisons le même schéma explicite qu'en 1D (7.29). A chaque point de la surface et pour chaque coupe en ce point, nous allons adopter l'algorithme du calcul de l'angle d'ouverture en 1D (voir la section 7.2.4.2). Cela permet de réduire efficacement le temps de calcul. Cependant, cet algorithme appliqué en 2D exige toujours un effort numérique important car à chaque pas de temps il faut effectuer le calcul pour $L \times L$ points.

Dans un premier temps, nous prenons la fonction $g(\Omega) = \Omega^2$. Les paramètres utilisés pour les simu-

lutions numériques sont $L = 128$, $\Delta x = \Delta y = 1$, $\Delta t = 0.01$, $R = 1$ et $N = 48$. Notons qu'à chaque pas de temps, l'angle d'ouverture Ω sera renormalisé par sa valeur moyenne.

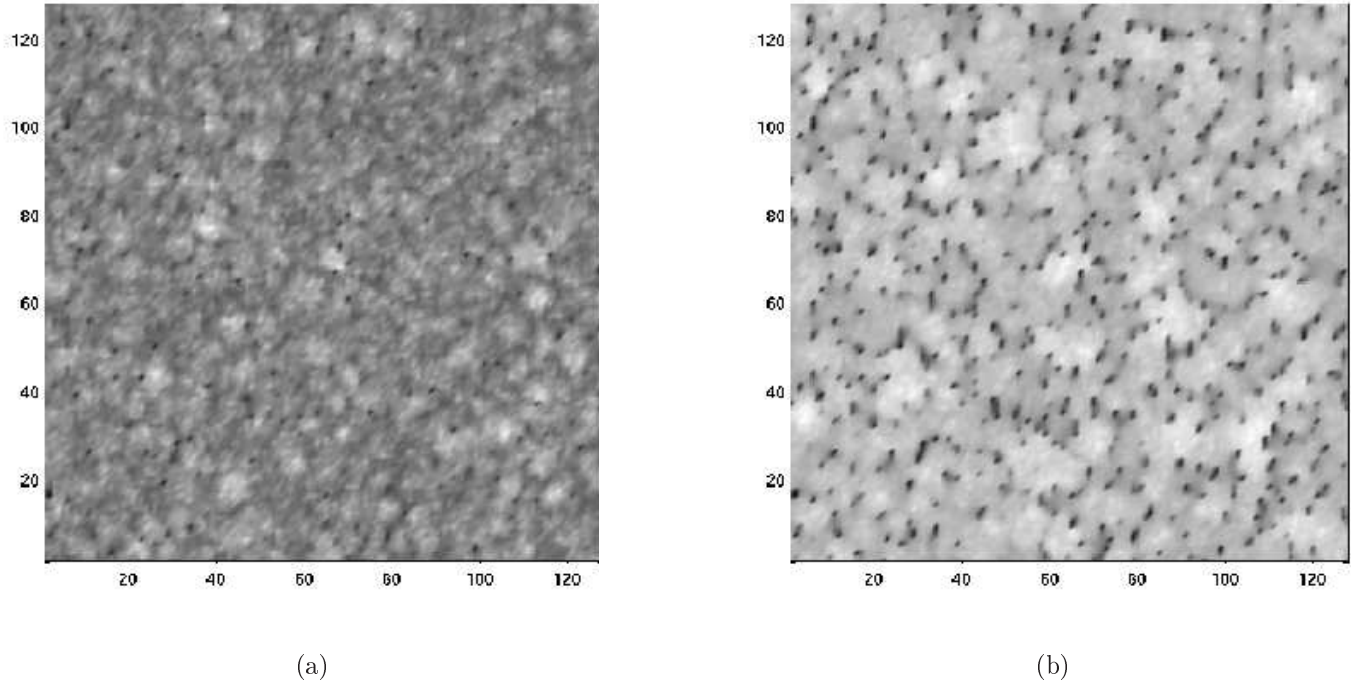


FIG. 8.38. Modèle $\text{EDP2D}+g(\Omega) = \Omega^2$: Surface du dépôt vue de dessus, pour un système de taille 128×128 avec $\nu = 0.5$, prise aux instants $t = 10$ (a), $t = 30$ (b).

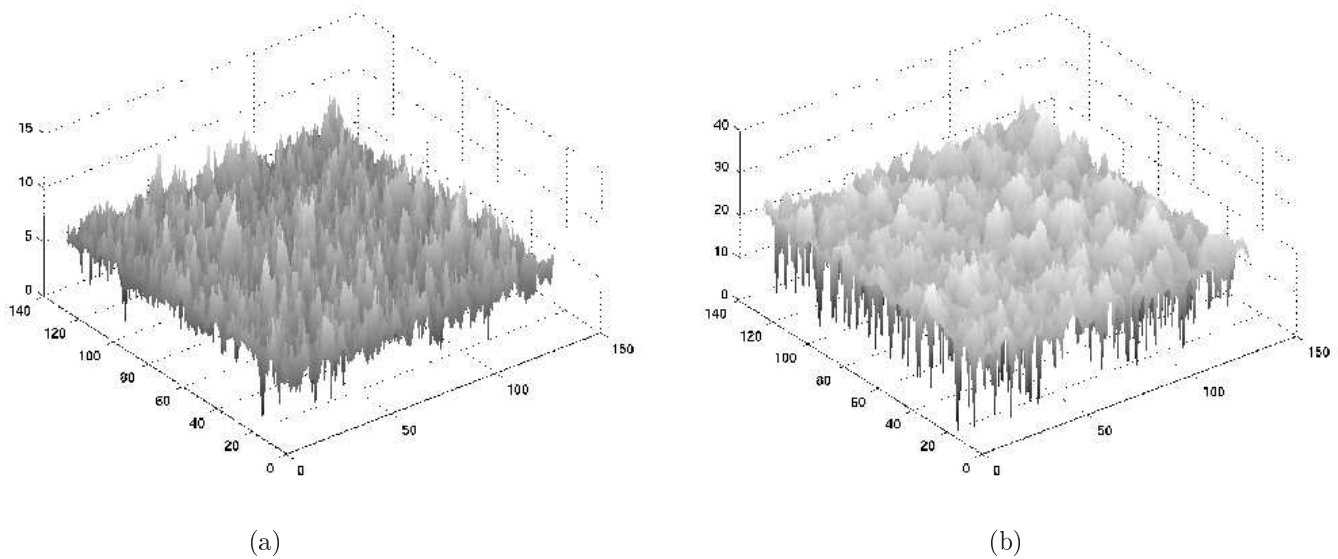
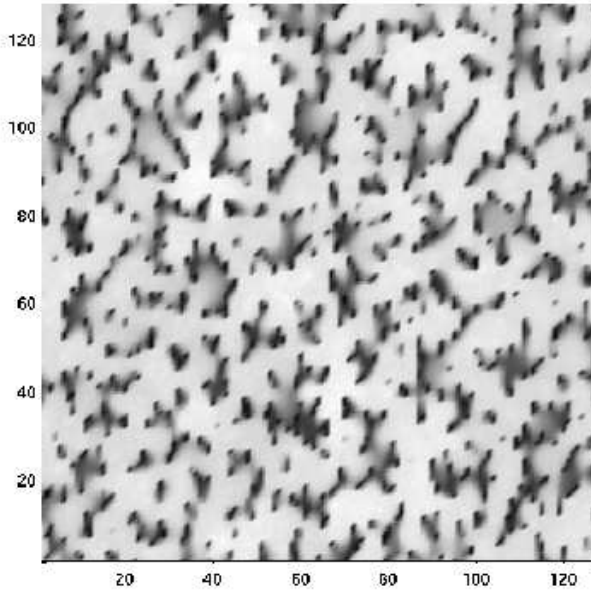
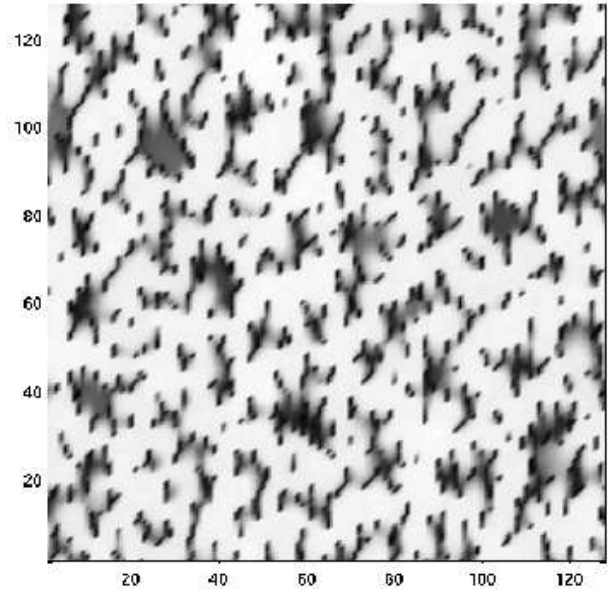


FIG. 8.39. Modèle $\text{EDP2D}+g(\Omega) = \Omega^2$: Profil h de l'interface, pour un système de taille 128×128 et $\nu = 0.5$, pris aux instants $t = 10$ (a), $t = 30$ (b). La représentation en perspective des résultats donne figure 8.38

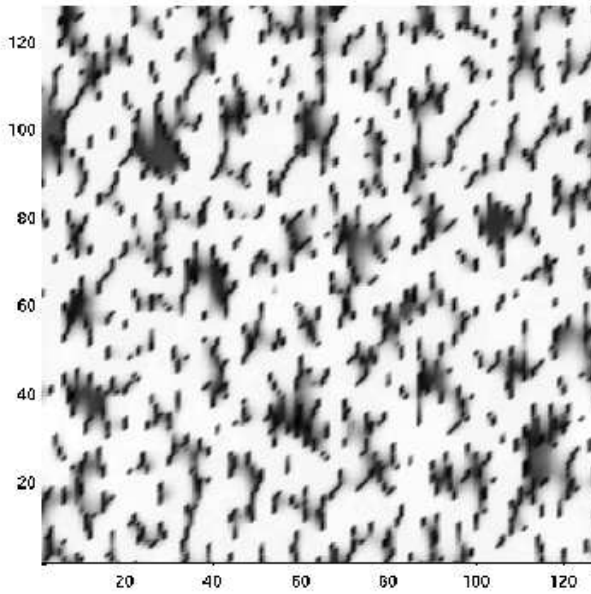
Les figures 8.38, 8.40 et 8.39, 8.41 présentent respectivement l'image de la surface prise à différents



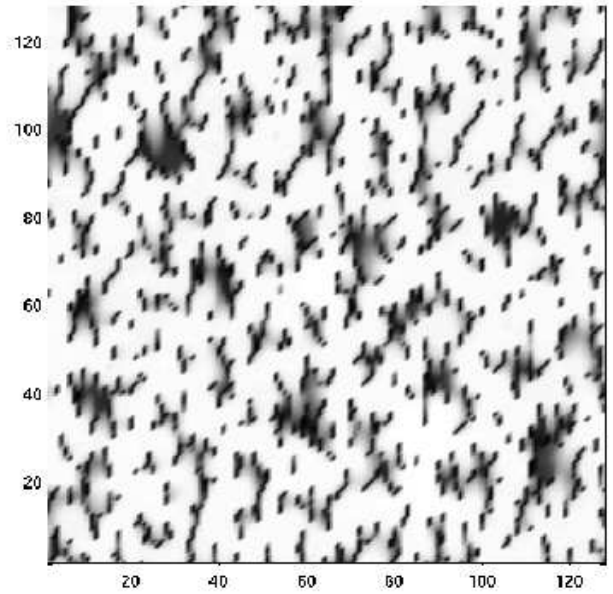
(a)



(b)



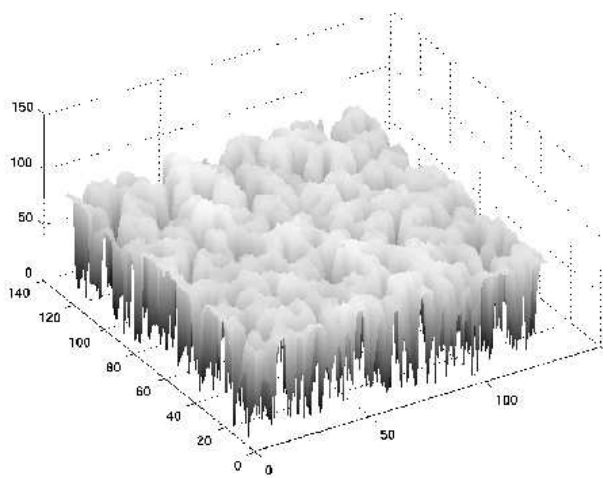
(c)



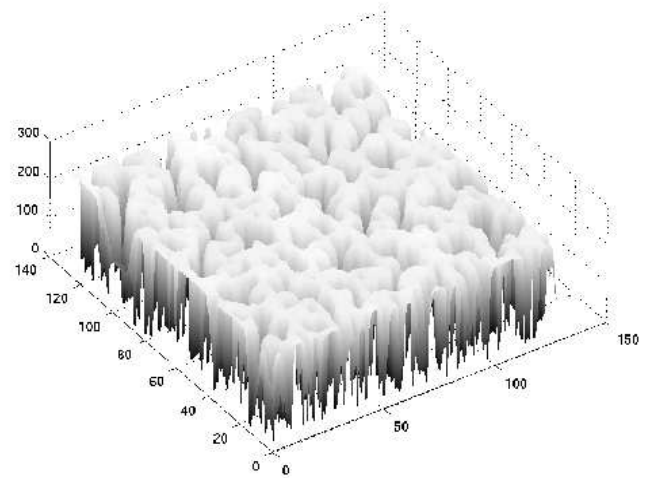
(d)

FIG. 8.40. Modèle $\text{EDP2D}+g(\Omega) = \Omega^2$: Surface du dépôt vue de dessus, pour un système de taille 128×128 avec $\nu = 0.5$, prise aux instants $t = 100$ (a), $t = 300$ (b), $t = 500$ (c), $t = 700$ (d).

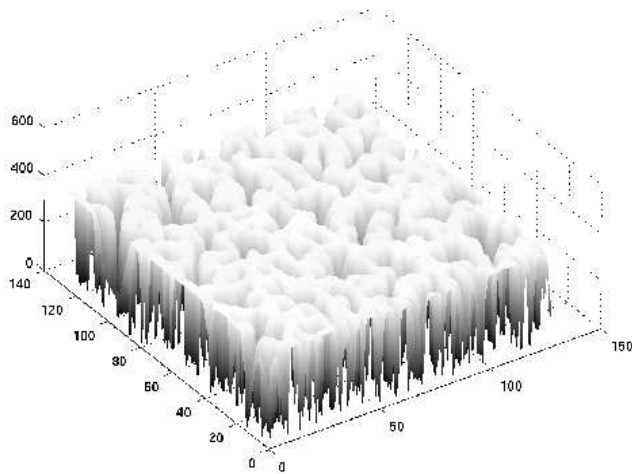
instants et le profil h de l'interface correspondante. Nous remarquons qu'à partir de temps $t = 100$, la surface du dépôt commencer à se former en structure d'un plateau perforé avec plusieurs trous. Au début, l'interface est plutôt rugueuse et en temps t plus long, le haut de l'interface devient plus plate grâce à l'effet du lissage de la diffusion. Nous constatons aussi qu'au fur et à mesure que le



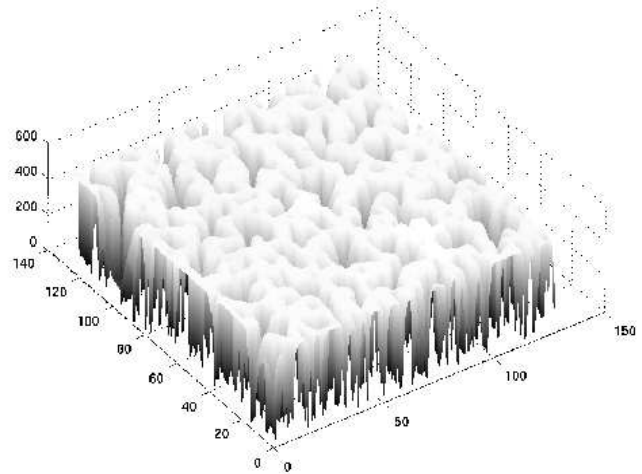
(a)



(b)



(c)



(d)

FIG. 8.41. **Modèle EDP2D**+ $g(\Omega) = \Omega^2$: Profil h de l'interface, pour un système de taille 128×128 et $\nu = 0.5$, pris aux instants $t = 100$ (a), $t = 300$ (b), $t = 500$ (c), $t = 700$ (d). La représentation en perspective des résultats donne figure 8.40

temps augmente, l'effet de l'ombrage empêche le dépôt des atomes dans les trous. Plus le temps t est grand, plus les trous deviennent profonds par rapport à la hauteur du plateau. Cela peut être observé dans la figure 8.40 : les zones noires, correspondant aux trous, deviennent de plus en plus foncées en comparaison avec les zones blanches (elles correspondent au plateau). Cette structure de la surface, obtenue par le modèle continu 7.27 pour le cas $g(\Omega) = \Omega^2$, n'est pas équivalente à

celle donnée par le modèle Monte Carlo. Rappelons qu'avec les modèles discrets, la surface contient plusieurs colonnes séparées par les trous et la taille de ces colonnes évolue au cours du temps. Au contraire, dans le cas continu nous n'obtenons pas de colonnes. Ou encore, toutes les colonnes de la surface sont connectées et forme une structure comportant qu'un seul plateau percé d'un grand nombre de trous. Pourtant la fonction de distribution de la hauteur $f(h)$ reste bien similaire au cas discret, mais cela n'est pas suffisant pour caractériser la structure colonnaire.

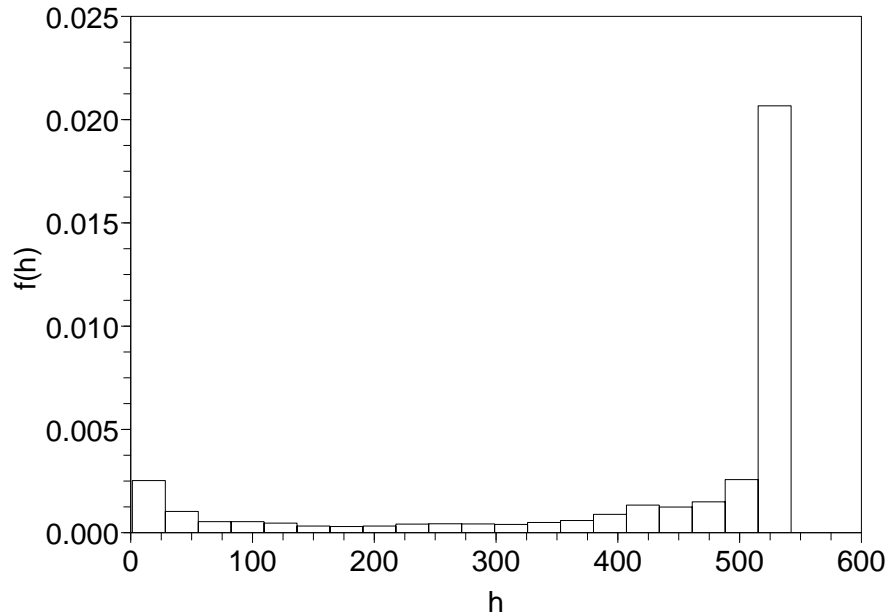


FIG. 8.42. Modèle $\text{EDP2D}+g(\Omega) = \Omega^2$: Fonction de distribution $f(h)$ à l'instant $t = 700$, pour $\nu = 0.5$ (a) et $L = 128$.

Dans la figure 8.43, nous donnons des coupes selon $y = 60$ de la hauteur de l'interface (présentée dans la figure 8.41) d'un système de taille $L \times L = 128 \times 128$. Elle montrent le même type de structure de dépôt que celle obtenue dans le cas continu 1D avec $g(\Omega) = \Omega^2$ (voir figure 7.50), et permet de valider notre algorithme de calcul de l'angle ouverture Ω en 2D.

Regardons maintenant l'évolution de la rugosité de l'interface W au cours du temps t , reportée la figure 8.44, pour deux différentes valeurs du coefficient $\nu = 0.5$ et 1. Pour $\nu = 0.5$, comme dans le cas 1D, on observe l'existence de différents régimes :

- . Pour $t < 1$, W se comporte comme dans le cas dépôt aléatoire sans diffusion et sans ombrage : $W \sim t^{1/2}$, les effets de l'ombrage et de la diffusion restent faibles (voir figure 8.45).
- . En temps intermédiaires $1 < t < 10$, l'effet de la diffusion est remarquable et nous avons

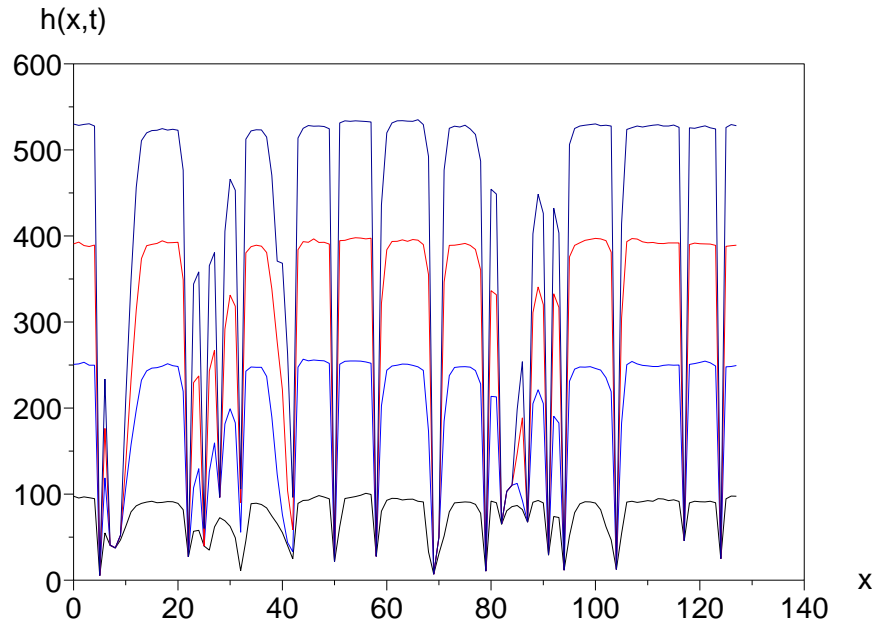


FIG. 8.43. Modèle EDP2D+ $g(\Omega) = \Omega^2$: Coupes selon position $y = 60$ de la hauteur d'interface en 2D (figure 8.41) aux différents instants $t = 100, 300, 500, 700$ avec $L = 128$ et $\nu = 0.5$.

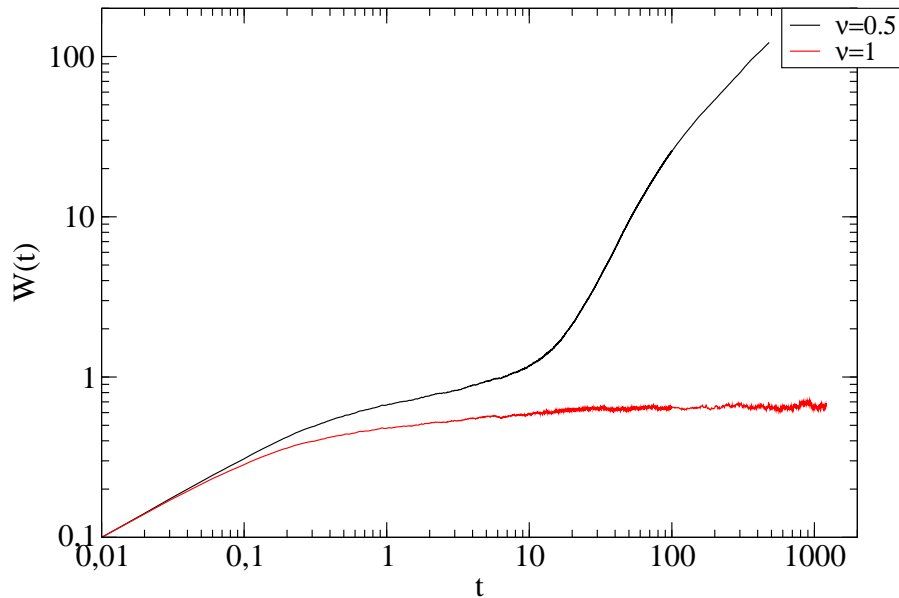


FIG. 8.44. Modèle EDP2D+ $g(\Omega) = \Omega^2$ Rugosité $W(t)$ de l'interface dans le cas où $L = 128$, $R = 1$ avec deux valeurs de $\nu = 0.5, 1$.

$W \sim 0.25$ (voir figure 8.46).

. La dépendance linéaire de W en temps t , $W \sim t$, est observée pour les temps $t > 100$.

Elle indique la présence de structure de type plateau dont la différence de hauteur entre les zones hautes et basses augmente avec temps.

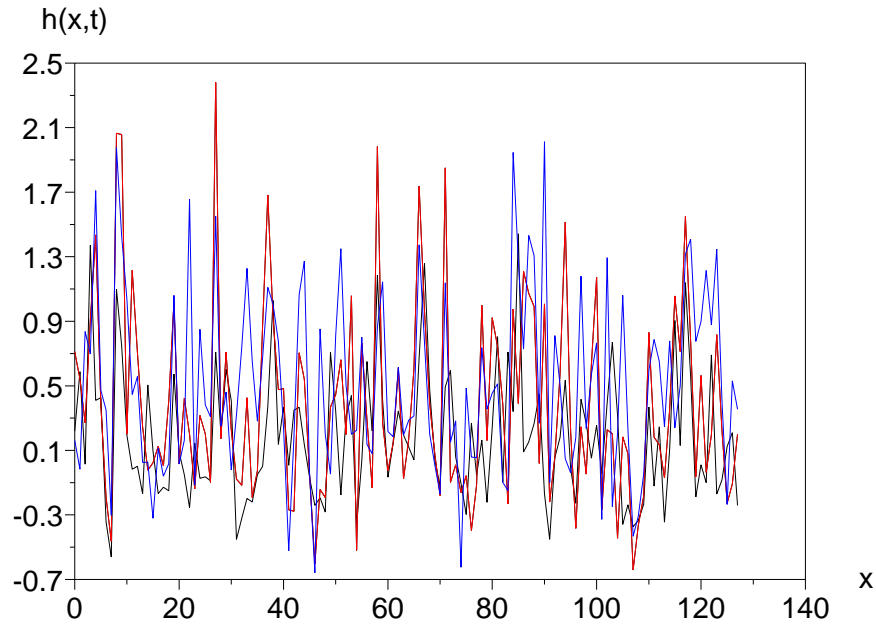


FIG. 8.45. Modèle $\text{EDP2D}+g(\Omega) = \Omega^2$: Coupes selon position $y = 60$ de la hauteur d'interface en 2D aux différents instants $t = 0.2, 0.4, 0.6$ avec $L = 128$ et $\nu = 0.5$.

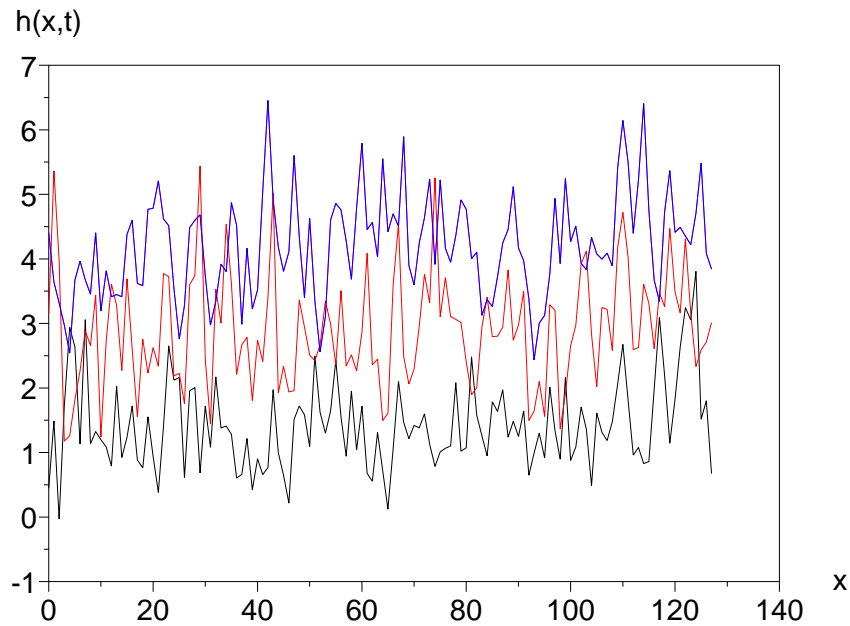


FIG. 8.46. Modèle $\text{EDP2D}+g(\Omega) = \Omega^2$: Idem que la figure 8.45 mais pour $t = 2, 4, 6$.

Pour les grandes valeurs de ν , par exemple dans ce cas $\nu = 1$, la relaxation de la surface est forte

et permet de lisser rapidement toutes les irrégularités. La rugosité W sature dès que $t > 10$ et elle est similaire au cas discret avec ombrage et relaxation thermique dans le cas où la température est suffisamment élevée.

Si, en 1D le nouveau modèle continu 7.27 avec $g(\Omega) = \Omega^2$ permet de reproduire une structure colonnaire ressemblant à celle construite par des modèles Monte Carlo, à deux dimensions, les surfaces obtenues par les modèles continu et discret sont radicalement différentes. Outre le choix des paramètres, une première question se pose sur le choix de la fonction $g(\Omega)$. Il est en effet possible que la loi de puissance choisie dépende de la dimension du système. Il est possible de le vérifier en prenant d'autres fonctions g . Dans le paragraphe suivant, nous présenterons quelques résultats numériques pour les deux cas $g(\Omega) = \Omega$ et $g(\Omega) = \Omega^3$ pour les mêmes valeurs des autres paramètres ν et D .

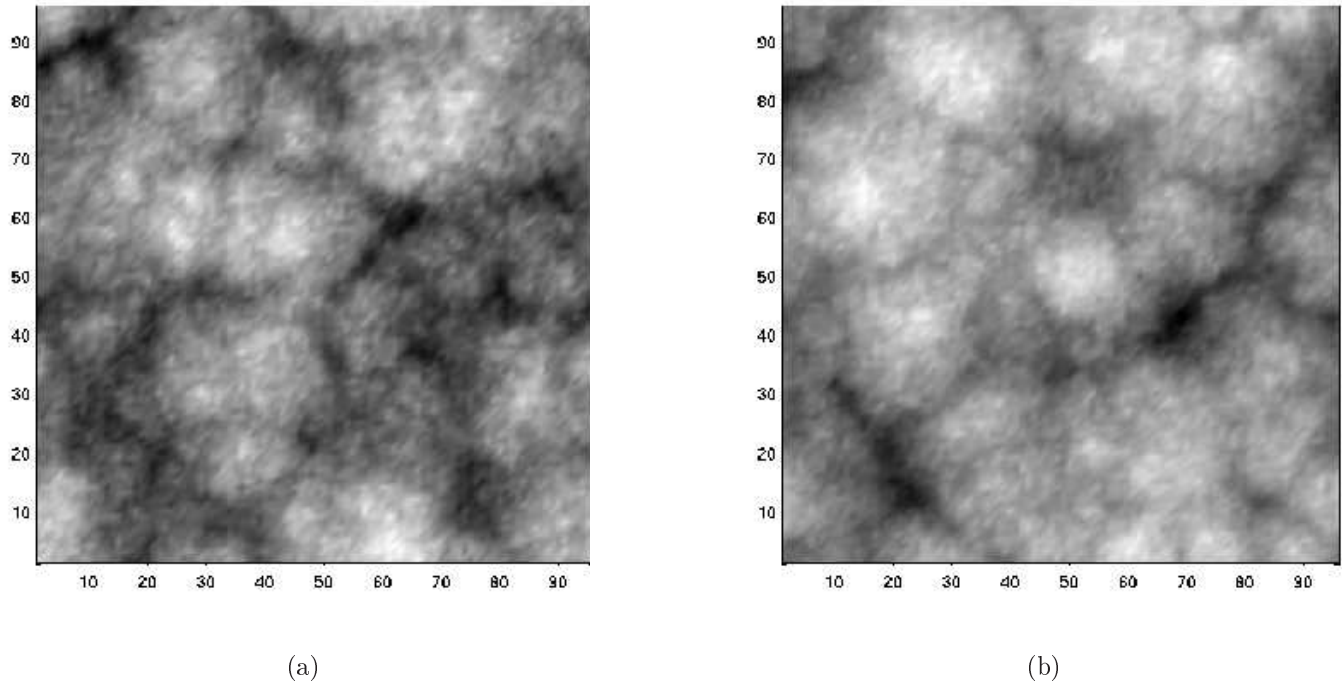


FIG. 8.47. Modèle $\text{EDP2D}+g(\Omega) = \Omega$: Surface du dépôt vue de dessus, pour un système de taille 96×96 avec $\nu = 0.5$, prise aux instants $t = 100$ (a), $t = 200$ (b).

Nous donnons respectivement les résultats numériques pour $g(\Omega) = \Omega$ et $g(\Omega) = \Omega^3$ figures 8.47, 8.48 et 8.49, 8.50 pour $D = 1$ et $\nu = 0.5$. Tout comme dans le cas $g(\Omega) = \Omega^2$, la structure des surfaces obtenues ne présente pas de colonne. Pour $g(\Omega) = \Omega$, l'effet de lissage dû à la diffusion est suffisamment fort, comme en 1D, pour alimenter les creux de la surface et empêcher la construction des colonnes (voir figure 8.51). Par ailleurs, pour $g(\Omega) = \Omega^3$, la diffusion lisse davantage les irrégularités sur le haut de l'interface et l'effet de l'ombrage a fortement limité le dépôt dans les trous. Les trous sont bien fermés et restent stables (cf figure 8.52). La surface obtenue représente une structure

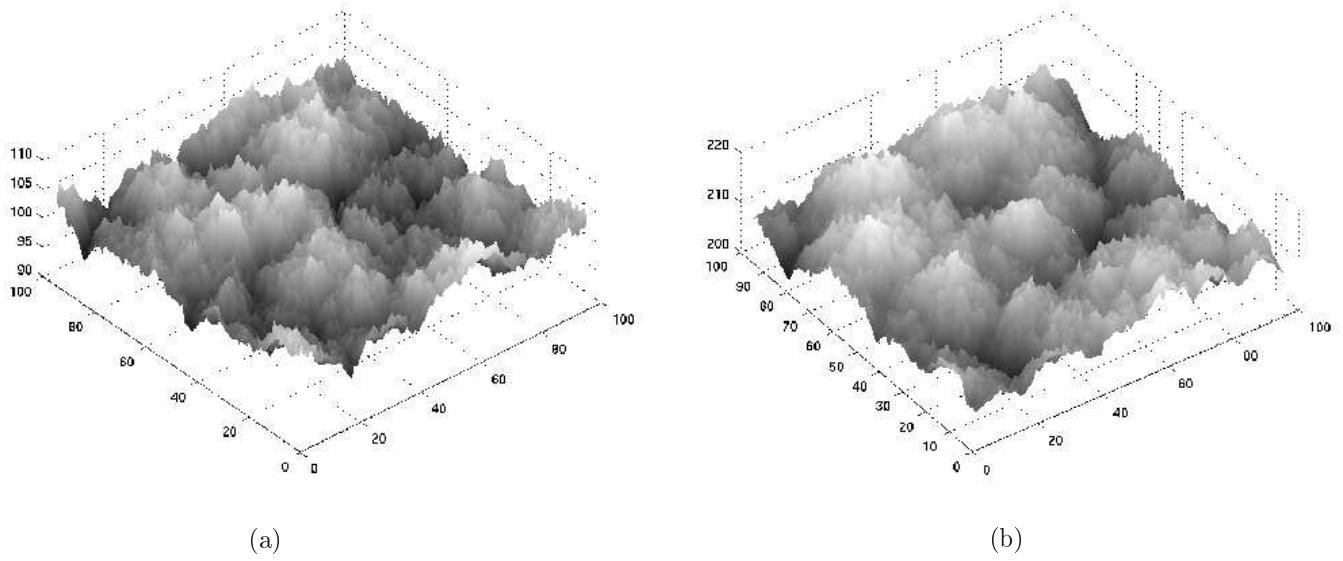


FIG. 8.48. Modèle EDP2D+ $g(\Omega) = \Omega$: Profil h de l'interface, pour un système de taille 96×96 et $\nu = 0.5$, pris aux instants $t = 100$ (a), $t = 200$ (b). La représentation en perspective des résultats donne figure 8.47

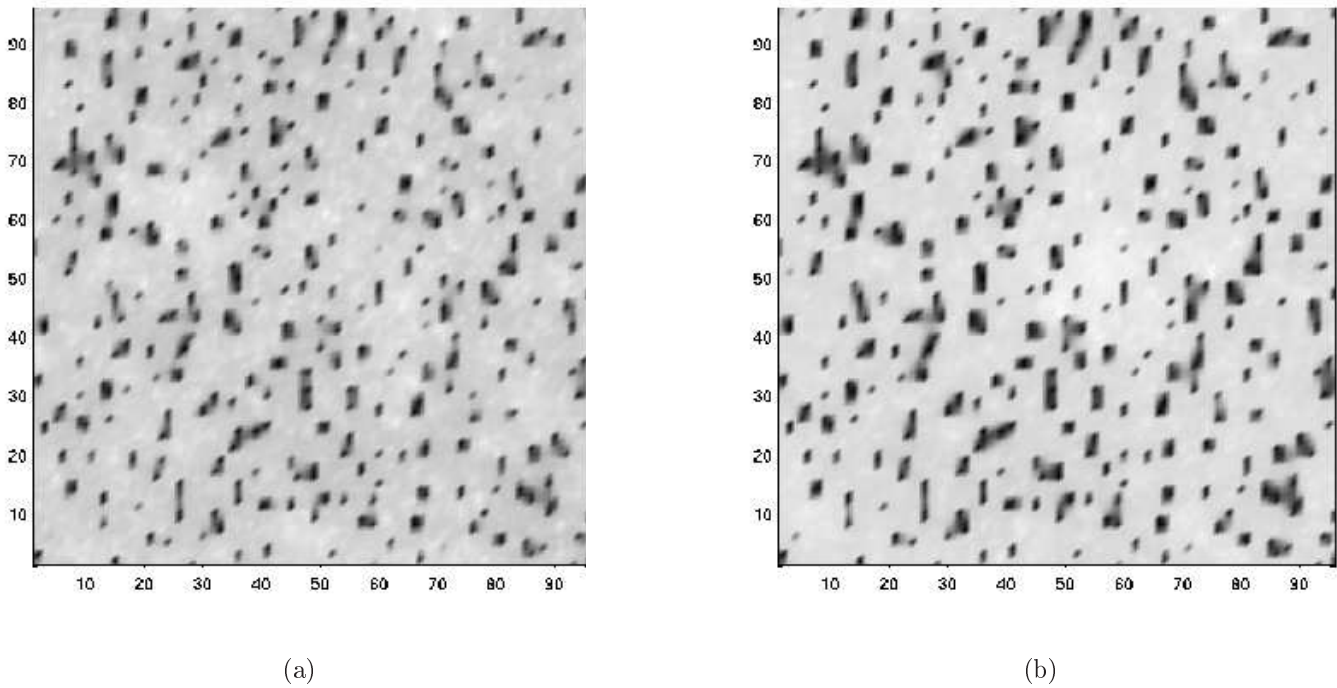


FIG. 8.49. Modèle EDP2D+ $g(\Omega) = \Omega^3$: Surface du dépôt vue de dessus, pour un système de taille 96×96 avec $\nu = 0.5$, prise aux instants $t = 100$ (a), $t = 200$ (b).

d'un plateau percé d'un grand nombre de trous ressemblant à celle donnée par $g(\Omega) = \Omega^2$. Nous observons que, dans ce cas, les trous ont une extension plus limitée que pour $g(\Omega) = \Omega^2$.

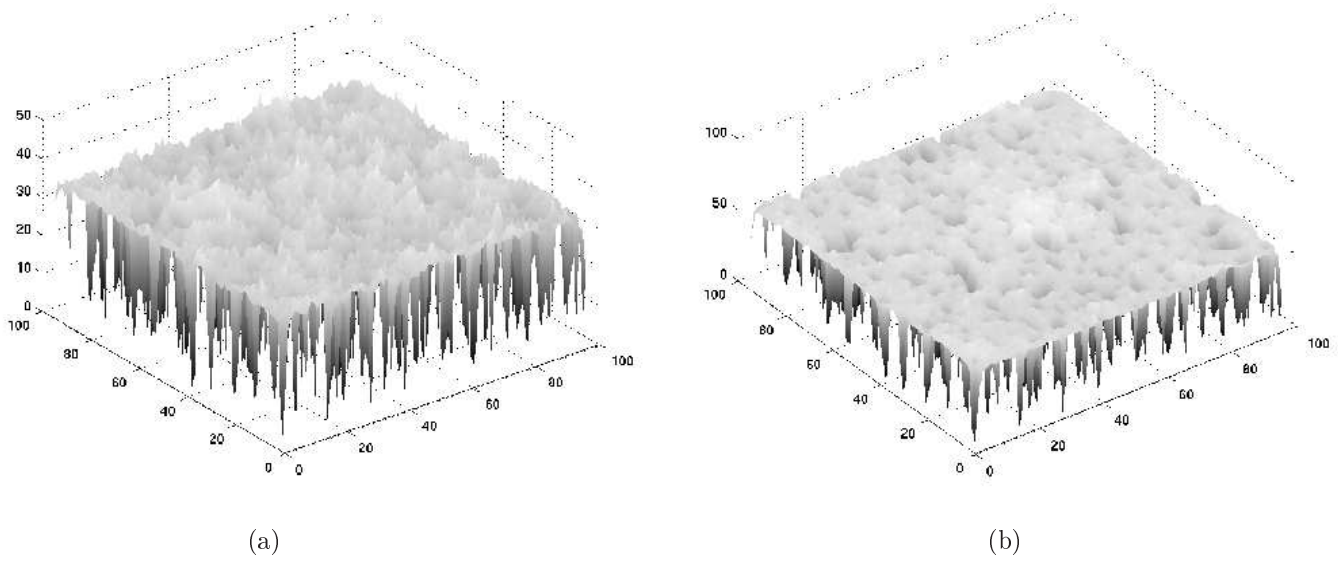


FIG. 8.50. Modèle EDP2D+ $g(\Omega) = \Omega^3$: Profil h de l'interface, pour un système de taille 96×96 et $\nu = 0.5$, pris aux instants $t = 100$ (a), $t = 200$ (b). La représentation en perspective des résultats donne figure 8.49

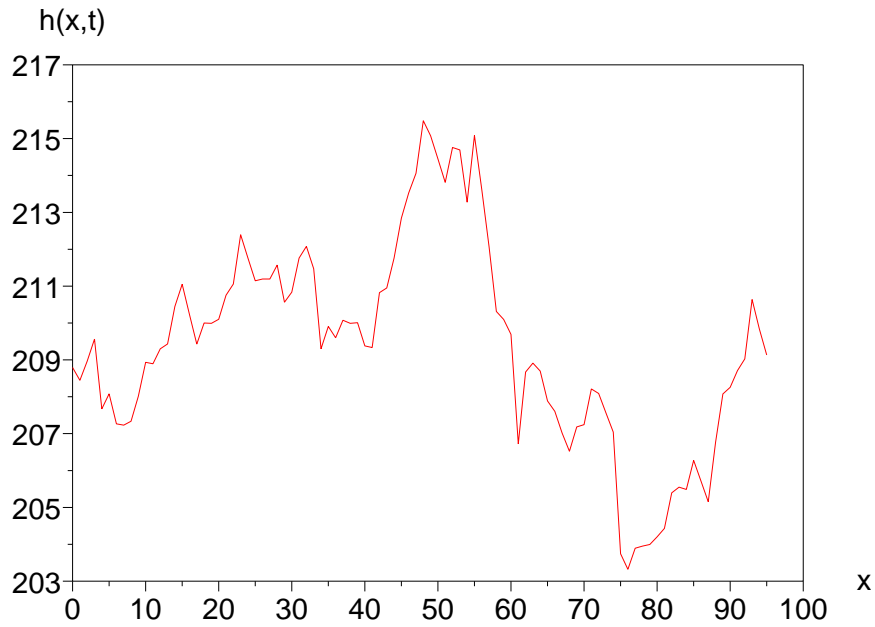


FIG. 8.51. Modèle EDP2D+ $g(\Omega) = \Omega$: Coupe selon position $y = 50$ de la hauteur d'interface en 2D à l'instant $t = 200$, avec $L = 96$ et $\nu = 0.5$.

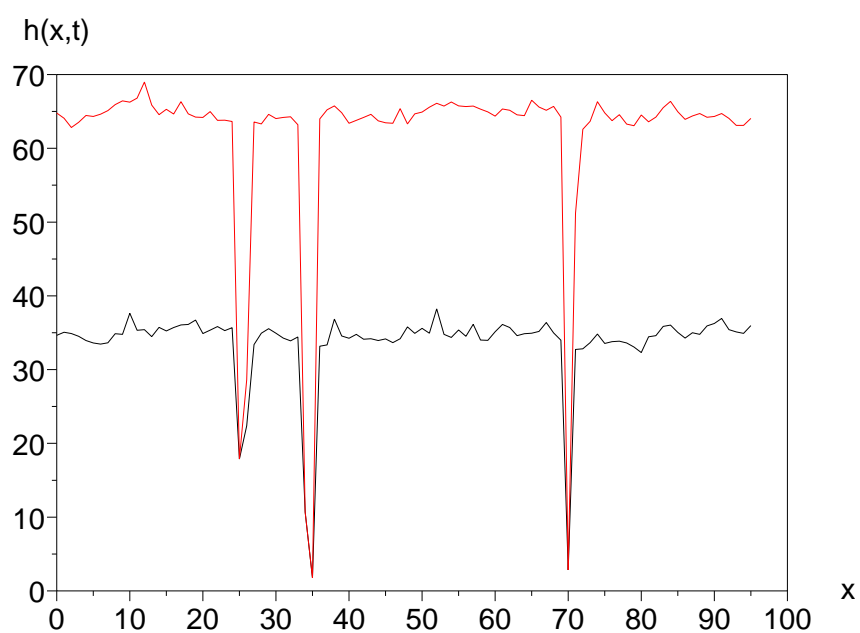


FIG. 8.52. Modèle $\text{EDP2D} + g(\Omega) = \Omega^3$: Coupes selon position $y = 50$ de la hauteur d'interface en 2D aux différents instants $t = 100, 200$, avec $L = 96$ et $\nu = 0.5$.

CONCLUSION

Dans cette deuxième partie, nous avons étudié l'évolution dynamique de la croissance de dépôt pour des modèles à la fois discrets (mise en oeuvre par des simulations de Monte Carlo) et continus (décrit par une EDP), en une et deux dimensions. La modélisation et l'étude numérique des modèles discrets du type SOS ont été détaillées. Nous avons repris quelques modèles discrets qui ont déjà été introduits et étudiés par d'autres auteurs comme, par exemple, le modèle de dépôt aléatoire avec une relaxation thermique [37][44] et le modèle de dépôt RSOS ou modèle de dépôt aléatoire avec relaxation vers le minimum local [32]. L'étude de ces modèles nous a permis, d'une part, de vérifier nos algorithmes pour ces modèles afin de les modifier et les utiliser pour des modèles plus complets (voir le modèle de dépôt aléatoire avec ombrage et relaxation thermique) et d'autre part de mettre en évidence les liens avec des modèles continus.

Pour les modèles discrets, plusieurs cas tests ont été effectués afin de mieux comprendre des mécanismes de croissance de l'interface, comme par exemple l'effet de la relaxation thermique et ou de l'ombrage. Nous avons aussi imaginé plusieurs expériences que seul autorise l'ordinateur pour mettre en évidence des différences de comportement entre les deux types de simulations. Ainsi, en partant d'un dépôt très piqué, nous avons montré que le processus de relaxation du modèle de MC n'amène pas à sa "thermalisation". Ou encore, en retirant du flux incident les particules qui tombent sur le flan de l'interface, dans le cas avec ombrage, nous avons montré que ces particules jouaient un grand rôle dans l'apparition de colonnes, suggérant une diffusion non-isotrope (par la mise en facteur du terme d'ombrage dans notre modèle présenté section 7.2.4).

Une structure colonnaire a été trouvée avec les modèles discrets avec ombrage et cette structure est caractérisée par différentes grandeurs. La rugosité de l'interface, présentant cette structure si particulière, se comporte de façon caractéristique : elle évolue linéairement en temps t et ne présente pas de saturation causée la plupart du temps par des effets de taille finie du système. Dans le cas des modèles discrets avec ombrage, notre étude systématique des solutions pour différentes valeurs des paramètres (température, l'angle d'incidence maximal,..) a permis de donner un critère pour évaluer si la relaxation est prépondérante sur l'ombrage ou le contraire, et donc que la structure sera rugueuse ou colonnaire. Enfin, une étude numérique en deux dimensions des modèles discrets a donné des informations plus complètes sur le comportement de la surface. La morphologie des interfaces obtenue est en accord avec celle trouvée en 1D, *i.e* on obtient en 2D des structures de type colonnaire pour les mêmes modèles qu'en 1D.

Pour les modèles continus, plusieurs simulations numériques des modèles classiques, comme EW et KPZ, ainsi que les modèles incluant l'effet non local de l'ombrage, ont été effectuées. Les résultats du modèle KPZ montrent la dépendance du paramètre d'échelle β en fonction de $\frac{\lambda}{\nu}$. En effet, l'exposant $\beta \rightarrow 0.25$ quand $\frac{\lambda}{\nu} \rightarrow 0$ ($\beta = 0.25$ correspond au modèle EW) et $\beta \approx 0.33 \pm 0.01$ quand $\frac{\lambda}{\nu}$ est suffisamment grand. Une étude de renormalisation présentée dans [32] donne cette valeur effective de $\beta = 1/3$. Après avoir repris l'étude des modèles continus, en mettant en évidence le rôle des différents termes (diffusion, dépôt selon la normale, ombrage), notre étude a principalement porté sur des modèle comportant un ombrage. En effet, dans la littérature, les modèles, basés sur des équations aux dérivées partielles, comportant cet ombrage, sont les seuls à mettre en évidence une structure, sinon colonnaire, au moins présentant de fortes variations de la hauteur de l'interface. Une étude systématique du rôle de chacun des termes du modèle avec ombrage, proposé par Hua Yao et al [50] et leur comparaison avec les effets introduits dans les modèles MC a montré la différence entre le mécanisme d'alimentation de l'interface selon l'angle d'ouverture. Elle nous a conduit à proposer un nouveau modèle continu avec ombrage permettant de créer une surface pour laquelle des colonnes émergent. En 1D, la structure colonnaire obtenue par ce nouveau modèle continu est bien similaire à celle construit par les modèles discrets. Cependant, à deux dimensions, nous n'obtenons pas les mêmes résultats que les modèles MC. Une étude numérique supplémentaire dans le cas 2D sera nécessaire pour comprendre cette différence entre les cas continu et discret. Une première analyse mathématique de notre modèle en 1D a été donnée. L'absence du principe maximum suggère de trouver une autre méthode pour étudier ce problème. De plus, le fait que l'angle d'ouverture Ω est non local, et dépend de l'ensemble des valeur $h(x, t)$, cause des difficultés pour son étude mathématique et le problème de l'existence de solutions reste ouvert.

Notons que dans l'ensemble de ce travail, nous avons établi quelques connexions entre les modèles MC et continus en une dimension. La correspondance entre deux types de modèle est reprise dans le tableau 8.1.

Les simulations numériques réalisées dans cette partie demandent des ressources informatiques très importantes. Pour les modèles discrets, la relaxation thermique et le dépôt avec ombrage exigent de calculer la trajectoire d'un atome à chaque pas de temps. Cela entraîne un temps de calcul important surtout dans le cas 2D. Dans les modèles avec ombrage, on passe d'un temps de calcul d'environ 3h, pour une simulation en 1D, à 4 jours en 2D (sur des machines pentiums à 1.8 GHz). Pour les modèles continus, le terme d'angle d'ouverture Ω nécessite un calcul de l'ordre L^2 en 1D et L^4 en 2D. Notre algorithme de calcul de l'angle Ω permet de réduire le temps de calcul d'un facteur de 6. Cependant, en 2D, le temps de calcul reste encore très long. Nous avons donc restreint nos calculs à des systèmes de taille 128*128 et 96*96. De plus, pour obtenir une bonne statistique des

TAB. 8.1. Tableau de synthèse

Modèles 1D

Modèles discrets	Modèles continus
Modèle de dépôt aléatoire $W \sim t^{0.5}$	$\frac{\partial h}{\partial t}(t, x) = F(x, t) + \eta(x, t)$ $W \sim t^{0.5}$
Modèle de dépôt aléatoire incluant la relaxation "minimum local" $\beta \approx 0.24 \pm 0.01, \alpha \approx 0.48 \pm 0.01$	Equation EW $\beta \approx 0.25 \pm 0.003 \alpha \approx 0.5 \pm 0.01$
Modèle de dépôt aléatoire restrictif RSOS $\beta \approx 0.31 \pm 0.02, \alpha \approx 0.5 \pm 0.05$	Equation KPZ (au cas $\frac{\lambda}{\nu}$ grand) $\beta \approx 0.33 \alpha \approx 0.49 \pm 0.01$
Modèle de dépôt aléatoire avec la relaxation thermique $W \sim t^{\beta(T)}, \alpha \sim L^{\alpha(T)}$	
Modèle de dépôt aléatoire avec ombrage $W \sim t^{0.5}$ en temps petits $W \sim t$ en temps longs	
Modèle de dépôt aléatoire avec ombrage incluant la relaxation thermique $W \sim t^{0.5}$ en temps petits $W \sim t^{\beta(T)}$ en temps intermédiaires $W \sim t$ en temps longs	$\frac{\partial h}{\partial t}(t, x) = g(\Omega(x, \{h\})) [R \sqrt{1 + \nabla(h) ^2} + \nu \nabla^2 h + \eta]$ $W \sim t^{0.5}$ en temps petits $W \sim t^\beta, \beta < 0.5$ en temps intermédiaires $W \sim t$ en temps longs

résultats présentés, nous avons effectué plusieurs expériences pour chacun des cas tests et calculé une solution moyenne. Ces simulations sont réalisées sur un réseau de type condor, installé par E. Le Guirriec, qui permet de lancer plusieurs programmes en même temps sur différentes machines (voir <http://www.cs.wisc.edu/condor/>).

BIBLIOGRAPHIE

- [1] J. G. Amar and F. Family, *Numerical solution of a continuous equation for interface growth in 2+1 dimensions*, Phys. Rev. A **41**, 1990, pp 3399–3402
- [2] J. G. Amar and F. Family, *Universality in surface growth : Scaling functions and amplitude ratios*, Phys. Rev. A **45**, 1992, pp 5378–5393
- [3] J. G. Amar and F. Family, *Deterministic and stochastic surface growth with generalized nonlinearity*, Phys. Rev. E **47**, 1993, pp 1595–1603
- [4] S Assing, *A Pregenerator for Burgers Equation Forced by Conservative Noise*, Commun. Math. Phys. **225**, 2002, pp 611–632
- [5] G. S. Bales, R. Bruinsma, E. A. Eklund, R. P. U. Karunasiri, J. Rudnick, A. Zangwill, *Growth and Erosion of Thin Solid Films*, Science **249**, 1990 , pp 264–268
- [6] G. S. Bales and A. Zangwill, *Macroscopic model for columnar growth of amorphous films by sputter deposition*, J. Vac. Sci. Technol. A **9**, Jan/Feb 1991, pp 145–149
- [7] G. Barles, *Solutions de viscosité des équations de Hamilton-Jacobi*, Mathématique & Applications, **17**, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1994
- [8] A.-L. Barabasi, H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth*, Cambridge University Press, Cambridge, 1995
- [9] M Beccaria, G Curci, *Numerical simulation of the Kardar-Parisi-Zhang equation*, Phys. Rev. A **50**, 1994, pp 4560–4563
- [10] M Ben-Artzi, P Souplet, FB Weissler, *The local theory for viscous Hamilton-Jacobi equations in Lebesgue spaces*, J. Math. Pures Appl, **81**, 2002, pp 343–378
- [11] L. Bertini, G. Giacomin, *Stochastic Burgers and KPZ Equations from Particle Systems*, Communications in Mathematical Physics, 1997
- [12] A. de Bouard et A. Debussche, *Introduction à l'étude des équations aux dérivées partielles stochastiques*, 2004
- [13] P. Brault, P. Dumas, F. salvan, *Roughness scaling of plasma-etched silicon surfaces*, J. Phys. : Condens. Matter **10**, 1998, L27-L32
- [14] F Comets, N Yoshida, *Brownian Directed Polymers in Random Environment*, Communications in Mathematical Physics, **254**, 2005,
- [15] S. Das Sarma, C.J. Lanczycki, R. Kotlyar, S.V. Ghaisas, *Scale invariance and dynamical correlations in growth models of molecular beam epitaxy*, Phys Rev E **53** 1, 1996, pp 359–387
- [16] J. T. Drotar, Y.-P. Zhao, T.-M Lu, G.-C. Wang, *Surface roughening growth and etching in 2+1 dimensions* Phys. Rev. B **62** 3, 2000, pp 2118–2125

- [17] M. Eden, in Symposium on Information Theory in biology, H.P. Yockey, Ed. (Pergamon, New York, 1958), pp 359
H. Gould, J. Tobochnik, *An introduction to computer simulation methods*, Addison-Wesley, 1996
- [18] S.F. Edward, D.R. Wilkinson, *The surface statistics of a granular aggregate*, Proc. Roy. Soc. A **381**, 1982, pp 17–31
- [19] K.A. Fichtorn, W.H. Weinberg, *Theoretical foundations of dynamical Monte Carlo simulations*, J. Chem. Phys. **95** 2, 1991, pp 1090–1096
- [20] BH Gilding, M Guedda, R Kersner, *The Cauchy problem for $u_t = \Delta u + |\nabla u|^q$* , J. Math. Anal Appl, **284**, 2003, pp 733–755
- [21] BH Gilding, *The Cauchy problem for $u_t = \Delta u + |\nabla u|^q$, large-time behaviour*, J. Math. Pures Appl, **84**, 2005, pp 753–785
- [22] A. Gladkov, M. Guedda, R. Kersner, *KPZ growth model with possibly unbounded data : correctness and blow-up*, Nonlinear Analysis, 2007
- [23] M Guedda, R Kersner, *Self-similar solutions to the generalized deterministic KPZ equation*, NoDEA : Nonlinear Differential Equations and Applications, 2003
- [24] E Hopf, Commun. Pure Appl. Math, **3**, 1950, 201 ; J.D Cole, Q. Appl. Math. **9**, 1951, 225
- [25] J.Hoshen, R. Kopelman, *Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm*, Phys. Rev. B **14** 8, 1976, pp 3438-3445
- [26] DA. Huse, JG. Amar and F. Family, *Relationship between a generalized restricted solid-on-solid growth model and a continuum equation for interface growth*, Phys. Rev. A **41**, 1990, pp 7075–7077
- [27] G Karch, WA Woyczynski, *Fractal Hamilton-Jacobi-KPZ equations* , 2006
- [28] M. Kardar, G. Parisi, Y.-C. Zhang, *Dynamic scaling of growing interface*, Phys. Rev. Letters **56** 9, 1986, pp 889–892
- [29] R.P.U. Karunasiri, R. Bruisma, J. Rudnick, *Thin film and the shadow instability*, Phys. Rev. Let. **62** 7, 1989, pp 788–790
- [30] C Kipnis, S Olla, RSR Varadhan, *Hydrodynamics and large deviations for simple exclusion processes*, Comm. Pure Appl. Math, **42**, 1989, pp 115-137
- [31] J Krug, H Spohn, *Kinetic roughening of growing surfaces*. In : Godrèche, C. (ed.) Solids Far from Equilibrium : Growth morphology and defects. Cambridge : Cambridge University Press, 1991
- [32] M. Lagües, A. Lesne, *Invariances d'échelle, des changements d'état à la turbulence*, Belin, 2003, ISBN 2-7011-3175-8

-
- [33] Chi-Hang. Lam and F.G. Shin *Anomaly in numerical integrations of the Kardar-Parisi-Zhang equation*, Phys. Rev. E **57** 6, 1998, pp 6506–6511
- [34] AC Levi, M Kotrla, *Theory and simulation of crystal growth*, Journal of Physics : Condensed Matter, **9** 2, 1997, pp. 299-344
- [35] K. Malarz, AZ. Maksymowicz, *A simple solid-on-solid model of epitaxial thin films growth : surface roughness and dynamics*, Int. J. Mod. Phys. C10, 1999, 645
- [36] A Masi, E Presutti, E Scacciatelli, *The weakly asymmetric simple exclusion process*, Ann. Ins. Henri Poincaré, Prob et Stat, **25**, 1989, pp 1–38
- [37] B. Meng, W.H. Weinberg, *Dynamical Monte Carlo studies of molecular beam epitaxial growth models : interfacial scaling and morphology*, Surface Science **364**, 1996, pp 151–163
- [38] E. Moreau, O. Vallee, *Connection between the Burgers equation with an elastic forcing term and a stochastic process*, Phys. Rev. E **73**, 2006
- [39] Z Neufeld, M Vicsek, T Vicsek, *Complex spatiotemporal patterns in two lattice models with instability*, Phys. A **233**, 1996, 754–766
- [40] K. Park and B. N. Kahng, *Exact derivation of the Kardar-Parisi-Zhang equation for the restricted solid-on-solid model*, Phys. Rev. E **51** 1, 1995, pp 796–798
- [41] C. Roland, H. Guo, *Interface growth with a shadow instability*, Phys. Rev. Let. **66** 16, 1991, pp 2104–2107
- [42] M. Rost and J. Krug, *Coarsening of surface structures in unstable epitaxial growth*, Phys. Rev. E **55**, 1997, 3952-3957
- [43] M. Schimschak and J. Krug *Bulk defects and surface roughening in epitaxial growth*, Phys. Rev. B **52**, 1995, 8550-8563
- [44] P.I. Tamborenea and S. Das Sarma, *Surface-diffusion-driven kinetic growth on one-dimensional substrates*, Phys Rev E, **48** 4, 1993, pp 2575–2594
- [45] W. M. Tong and R. S. Williams, *Kinetics of surface growth : Phenomenology, Scaling, Mechanisms of Smoothing and Roughening*, Ann. Rev. Phys. Chem. **45**, 1994, pp 401–438
- [46] B. Toth, W. Werner, *Hydrodynamic equation for a deposition model*, 2000
- [47] A. Truman and H. Z. Zhao, *On stochastic diffusion equations and stochastic Burgers's equations*, J. Math. Phys. **37** 1996, pp 283–307
- [48] T. Witten and L. Sander, *Diffusion-limited aggregation*, Phys. Rev. B **3** 27, 1983, pp 5686D-5697
- [49] O. Vallee and E. Moreau, *Functional sensitivity of Burgers and related equations to initial conditions*, 2003

- [50] J.H Yao, C. Roland, and Hong Guo, *Interfacial dynamics with long-range screening*, Phys. Rev. A **45** 6, 1992, pp 3903–3912
- [51] J.H. Yao, H. Guo, *Shadowing un the three dimensions*, Phys. Rev. E bf 47 2, 1993, pp 1007–1011