



HAL
open science

Modélisation inverse pour une localisation nanométrique tridimensionnelle des charges électrostatiques dans des diélectriques minces

Menouar Azib

► **To cite this version:**

Menouar Azib. Modélisation inverse pour une localisation nanométrique tridimensionnelle des charges électrostatiques dans des diélectriques minces. Electronique. INSA de Toulouse, 2019. Français. NNT : 2019ISAT0047 . tel-03640575

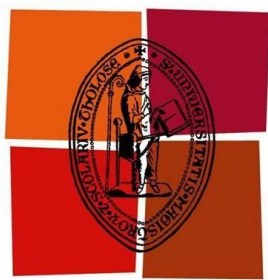
HAL Id: tel-03640575

<https://theses.hal.science/tel-03640575v1>

Submitted on 13 Apr 2022

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.



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par *L'Institut National des Sciences Appliquées – INSA*
Discipline ou spécialité : *Génie Electrique*

Présentée et soutenue Le 28 mai 2019 par

AZIB Menouar

Titre :

**Modélisation inverse pour une localisation nanométrique
tridimensionnelle des charges électrostatiques dans des diélectriques
minces**

Jury

M. Serge AGNEL	Professeur des Universités, Université Montpellier-II	Présentation de jury
Mme Laetitia JOURDAN	Professeure des Universités, Université de Lille	Rapporteur
M. Brice GAUTIER	Professeur des Universités, INSA de Lyon	Rapporteur
M. Stéphane SEGONDS	Maitre de Conférences (HDR), Université Paul Sabatier	Examinateur
M. Fulbert BAUDOIN	Maitre de Conférences, Université Paul Sabatier	Directeur de thèse
M. Nicolas BINAUD	Maitre de Conférences, Université Paul Sabatier	Directeur de thèse

Ecole doctorale : GEET (Génie Electrique, Electronique et Télécommunication)

Unité(s) de recherche : Laboratoire Plasma et Conversion d'Energie (UMR 5213), Institut Clément Ader (UMR 5312)

Directeur(s) de Thèse : Fulbert BAUDOIN, Nicolas BINAUD

Invité(s) : Florian BUGARIN

Remerciements

Ce travail a été réalisé au Laboratoire Plasma et Conversion d'Énergie de Toulouse (LAPLACE) UMR 5213 au sein de l'équipe Diélectriques Solides et Fiabilité (DSF) en collaboration avec l'Institut Clément Ader (UMR 5312).

En premier lieu, je tiens à remercier :

M. Serge AGNEL Professeur des Universités, Université Montpellier-II, de m'avoir fait l'honneur de présider ce jury de thèse. Mme Laetitia JOURDAN Professeure des Universités, Université de Lille et M. Brice GAUTIER Professeur des Universités, INSA de Lyon, d'avoir acceptés d'être rapporteurs de mes travaux de thèse et avoir formulés diverses remarques et suggestions qui mettront davantage en valeur la portée de ce travail ; vos remarques et conseils judicieux ont permis d'améliorer significativement ce mémoire de thèse. M. Stéphane SEGONDS Maître de Conférences (HDR), Université Paul Sabatier, d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse et d'avoir apporté son jugement sur ce travail par ses remarques et conseils qui m'ont permis d'améliorer la qualité de ce document. Mes remerciements s'adressent tout naturellement à mes directeurs de thèse. Je tiens à remercier particulièrement Fulbert BAUDOIN pour sa confiance, ses conseils judicieux, son écoute, sa disponibilité et son soutien tout en me laissant une certaine autonomie. Grâce à sa passion de la recherche et ses qualités humaines, j'ai bénéficié d'un encadrement de premier choix, essentiel à l'aboutissement d'une thèse. Je remercie également très chaleureusement Nicolas BINAUD pour sa disponibilité, sa grande rigueur, la confiance qu'il a toujours témoigné à mon égard ainsi que son très bon accueil au sein de son groupe de recherche à l'ICA. Je tiens à remercier également Christina Villeneuve-Faure et Florian BUGARIN pour leur aide précieuse, leur grande disponibilité et les longues discussions scientifiques que nous avons pu avoir et que j'ai beaucoup apprécié en particulier lors de la rédaction du manuscrit. Je saisis également cette occasion pour adresser mes remerciements à Monsieur Gilbert TEYSSEDE pour sa confiance et ses conseils judicieux, Madame Séverine LE ROY et Monsieur Laurent BERQUEZ, pour m'avoir accueilli au sein de l'équipe DSF durant la période de ma thèse. Un grand merci à tous mes collègues de l'équipe DSF pour tous les moments agréables que j'ai passés avec eux. Merci aux amis thésards et post-doc qui ont contribué de près ou de loin à l'état d'esprit approprié pour ce travail de longue haleine. Je ne trouverai pas les mots pour dire exactement à mes proches tout ce que je leur dois. A chaque pas et à chaque détour du chemin, ils sont là, avec sollicitude et affection, avec la confiance en moi qui en manque parfois... Merci à Femme Sarra, mes parents (Nouara et Tahar), mes enfants (Younès et Soulaymane), mes frères et mes sœurs, à toute ma famille et ma belle-famille.

Table des matières

INTRODUCTION GENERALE	2
CHAPITRE I : CARACTERISATION ELECTRIQUE DES NANOMATERIAUX DIELECTRIQUES.....	6
I.1 LES NANOMATERIAUX DIELECTRIQUES ET CHARGE D'ESPACE	8
I.1.1 Introduction	8
I.1.2 Charge d'espace.....	8
I.1.3 Charge d'espace et champ électrique	10
I.1.4 Les nanomatériaux diélectriques dans le génie électrique	12
I.1.4.1 Exemple : Les nano-diélectriques utilisés dans Les switches radiofréquence (RF-MEMS) ...	12
I.1.4.2 Les effets de la charge d'espace sur le comportement des commutateurs RF-MEMS	14
I.2 LES TECHNIQUES DE MESURE DE LA CHARGE D'ESPACE DANS DES NANO-DIELECTRIQUES	15
I.2.1 La microscopie à champ proche	16
I.2.2 La microscopie à force atomique (AFM).....	16
I.2.2.1 Le principe de fonctionnement.....	16
I.2.2.2 La pointe	18
I.2.2.3 Le bras de levier	19
I.2.2.4 Inventaire et classification des forces à l'échelle nanométrique	20
I.2.2.5 Les différents modes de fonctionnement d'un AFM	26
I.2.2.6 Mode opératoire (mode lift)	29
I.2.2.7 Principe de la mesure du potentiel de surface par AFM.....	29
I.2.3 La microscopie à force de Kelvin (KFM).....	31
I.2.4 La microscopie à force électrostatique (EFM)	31
I.2.5 Injection de charges par la sonde AFM	32
I.2.6 Comment détecter des charges injectées avec AFM ?	33

I.2.7	Mesures de charges par EFM et KFM	33
I.3	MODELISATION DE LA FORCE ELECTROSTATIQUE.....	35
I.3.1	Le modèle plan-plan	36
I.3.2	Le modèle sphère-plan	37
I.3.3	Le modèle cône parfait-plan	38
I.3.4	Le modèle cône tronqué-plan.....	39
I.4	CONCLUSION	45
	BIBLIOGRAPHIE	47
	CHAPITRE II : MODELISATION TRIDIMENSIONNELLE DES EFDCS.....	52
II.1	MODELISATION TRIDEMENSIONNELLE DES EFDCS	54
II.1.1	Introduction.....	54
II.1.2	Géométrie d'étude.....	55
II.1.2.1	La sonde AFM (pointe + bras de levier)	55
II.1.2.1	Le diélectrique	57
II.1.3	Les équations de base et les conditions aux limites.....	58
II.1.3.1	Les équations électrostatiques (pointe-diélectrique)	58
II.1.3.2	Les équations électromécaniques (bras de levier-diélectrique)	59
II.1.4	Maillage	60
II.1.5	Influence du potentiel sur les EFDCs	68
II.2	COMPARAISON MESURE-SIMULATION.....	70
II.2.1	Mesure des courbes de force électrostatiques (EFDCs)	70
II.2.2	Résolution numérique.....	71
II.2.2.1	Adaptation de la géométrie	71
II.2.2.2	Conditions aux limites.....	71

II.2.2.3	Optimisation du maillage pour la géométrie pointe-diélectrique	72
II.2.2.4	Optimisation du maillage pour la géométrie bras de levier-diélectrique	76
II.2.3	Validation du modèle 3D EFDCs	77
II.3	CONCLUSION	79
	BIBLIOGRAPHIE	81
	CHAPITRE III : ETUDE DE SENSIBILITE DES EFDCS A LA LOCALISATION DES	
	CHARGES	82
	III.1 ETUDE DE LA SENSIBILITE DES EFDCS A LA LOCALISATION DES	
	CHARGES 84	
III.1.1	Introduction	84
III.1.2	Adaptation du modèle pour la simulation des EFDCs induites par des charges.....	84
III.1.2.1	Géométrie d'étude.....	84
III.1.2.2	Maillage	85
III.1.2.3	Courbe de Force - EFDC	86
III.1.3	MODELE ELECTROMECHANIQUE – PRISE EN COMPTE DU BRAS DE	
LEVIER	87	
III.1.3.1	Géométrie d'étude.....	87
III.1.3.2	Etude de l'influence du bras de levier sur les EFDCs	87
III.1.4	SENSIBILITE DES EFDCS A LOCALISATION DES CHARGES	89
III.1.4.1	Sensibilité des EFDCs sur la densité de charge.....	89
III.1.4.2	Sensibilité des EFDCs au rayon de la charge	91
III.1.4.3	Sensibilité des EFDCs à la profondeur des charges	93
III.1.4.4	Sensibilité des EFDCs à la quantité totale de charge Q	95
III.1.5	ANALYSE DU POTENTIEL DE SURFACE POUR L'OBTENTION DU	

RAYON DE LA CHARGE	96
III.1.5.1 Principe de mesure du potentiel de surface	96
III.1.5.1 Simulation du potentiel de surface	97
III.1.5.1 Une méthode pour estimer le rayon de la charge.....	101
III.1.6 CONCLUSION.....	104
BIBLIOGRAPHIE	105
CHAPITRE IV : UTILISATION DE TECHNIQUES D’OPTIMISATION COMME OUTILS POUR LOCALISER LA CHARGE : NOTIONS DE BASE ET ETUDE DE LA FAISABILITE.....	106
IV.1 PROBLEMATIQUE.....	108
IV.1.1 Introduction.....	108
IV.1.2 Modélisation inverse pour les EFDCs.....	109
IV.1.3 Modèle direct	111
IV.2 OPTIMISATION : NOTIONS DE BASE	111
IV.2.1 Qu’est-ce qu’un problème d’optimisation	112
IV.2.2 Classification des méthodes d’optimisation	114
IV.2.3 Modélisation mathématique.....	115
IV.2.4 Formulation standard d’un problème d’optimisation	116
IV.2.5 Qu’est-ce qu’une solution ?	117
IV.2.6 Conditions d’optimalité	118
IV.2.6.1 Condition nécessaire d’optimalité locale du 1er ordre.....	119
IV.2.6.2 Condition nécessaire d’optimalité locale du second ordre.....	120
IV.2.6.3 Condition suffisante d’optimalité locale du second ordre	120
IV.2.7 Méthodes d’optimisation locale.....	121

IV.2.7.1	Cas sans contrainte	121
IV.2.7.2	Cas sous contraintes	126
IV.2.8	Méthodes d'optimisation globale	129
IV.2.8.1	Les méthodes déterministes	130
IV.2.8.2	Les méthodes stochastiques	130
IV.3	ETUDE DE LA FAISABILITE : OPTIMISATION COMME OUTILS POUR LOCALISER LA CHARGE	134
IV.3.1	Définition de notre fonction objectif et des contraintes	134
IV.3.2	Première approche : algorithme d'optimisation locale	136
IV.3.3	Deuxième approche : algorithme d'optimisation globale	138
IV.3.4	Troisième approche : le potentiel de surface.....	144
IV.3.5	Optimisation sur des données expérimentales.....	146
IV.4	CONCLUSION	147
	BIBLIOGRAPHIE	149
	CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES	152
	ANNEXES	156

Introduction générale

Les matériaux diélectriques sont largement utilisés en tant qu'isolants électriques dans des applications très variées, allant du composant microélectronique jusqu'aux composants dans l'environnement spatial, dans les satellites par exemple. Afin de pouvoir garantir la fiabilité de ces composants, il est nécessaire de connaître les limites d'utilisation des isolants employés et leur évolution à long terme notamment lorsqu'ils doivent résister à de forts gradients de tension de l'ordre de quelques kV / mm.

En effet, lorsqu'un diélectrique est soumis à un champ électrique élevé il apparaît dans certaines régions de l'isolant, que ce soit à l'interface ou dans le volume, un excès de charges électriques, appelé la charge d'espace. Ces charges sont un facteur potentiel de vieillissement des matériaux à travers l'augmentation du champ électrique interne qu'elles provoquent, et peuvent être à l'origine d'un claquage électrique dans certains cas. Il est donc important de pouvoir les localiser, de pouvoir prédire leur comportement lorsque les matériaux considérés sont soumis à de fortes contraintes électriques, thermiques ou environnementales. De même, il serait nécessaire de développer des outils prédictifs de l'état de charge des matériaux permettant d'en définir les limites d'utilisation et de fournir également des critères de sélection des matériaux, ceci dans un souci d'aide à la conception.

Jusqu'à présent, de nombreuses techniques de mesure de charge d'espace ont été développées. Elles ont été utilisées dans de nombreuses études portant sur les processus de vieillissement des matériaux, les phénomènes de rupture dans les câbles ou les revêtements diélectriques pour le contrôle thermique des satellites géostationnaires. Cependant, ces méthodes fournissent un profil de la densité de charge avec une résolution en profondeur de l'ordre du micromètre, ce qui les rendent inadaptées pour la mesure de charge d'espace dans des diélectriques submicroniques utilisés largement dans la conception de microsystemes.

La microscopie à force atomique (AFM) est considérée comme un instrument utile pour la caractérisation des matériaux à l'échelle nanométrique. En ce qui concerne la mesure de charge d'espace dans les diélectriques submicroniques, des techniques dérivées de l'AFM telles que la microscopie à force électrostatique –EFM, ou à force de Kelvin –KFM, permettent d'obtenir de nouvelles informations à l'échelle nanométrique,

sur l'état de charge des isolants et sur leur capacité à stocker / dissiper les charges. Cependant, ces techniques ne permettent pas de connaître précisément la densité de charge ni sa répartition en profondeur, données indispensables pour une meilleure compréhension des phénomènes de transport et de piégeage de charges. C'est pourquoi, nous travaillons au développement d'une nouvelle méthode, appelée EFDC (Courbes de Force Electrostatique – Electrostatic Force-Distance Curves), basée sur la mesure des forces électrostatiques au cours de phases d'approche / retrait entre la sonde AFM et les charges stockées dans le matériau. Les premiers résultats expérimentaux montrent la sensibilité de cette méthode à la localisation de la charge dans les 3 dimensions.

L'objectif global est une meilleure compréhension des interactions en jeu lors des mesures EFDC pour la caractérisation électrique des matériaux de manière à améliorer la sensibilité de la mesure. En particulier, des réponses devront être apportées quant à la possibilité de connaître la répartition latérale et en profondeur des charges à l'aide des seules courbes EFDC. Il s'agit d'un problème inverse à résoudre pour recouvrer, à partir de mesures expérimentales, ici les forces électrostatiques créées par les charges, la répartition spatiale des charges et leur densité. Une première thèse sur ce sujet a débuté en 2010 où un premier modèle électrostatique 3D basé sur la géométrie réelle de la pointe a été développé sous logiciel COMSOL et validé expérimentalement. Actuellement, il permet d'estimer la force électrostatique en fonction du potentiel appliqué à la pointe pour différentes distances pointe / plan. Les différents résultats obtenus ont permis de comprendre l'influence de la géométrie de la pointe, notamment le rayon de courbure de l'apex et l'angle de demi-ouverture, sur l'aspect qualitatif et quantitatif des courbes de force.

A notre connaissance, la localisation tridimensionnelle de la charge d'espace dans les matériaux diélectriques à des échelles nanométriques n'est actuellement pas possible. Au cours de ces dix dernières années, des techniques dérivées de l'AFM telles que l'EFM ou le KFM ont été utilisées pour estimer les densités de charges piégées dans des matériaux très minces. La méthode KFM par la mesure du potentiel induit par les charges électriques stockées permet seulement une étude qualitative de la distribution de la charge, la localisation en profondeur n'étant pas possible. Un modèle plus évolué basé sur la méthode KFM permet d'obtenir des informations sur la quantité de charges totale moyennant des hypothèses fortes sur leur localisation. Des études récentes montrent que

les données expérimentales obtenues par la méthode EFM pour la localisation des charges présentent une trop forte sensibilité à la polarisation appliquée pendant la mesure et est limitée par les effets de la charge image. Le fait d'utiliser les courbes de forces comme moyen de mesure de la charge implantée est une approche originale qui n'a que très peu été abordée par la communauté internationale.

Le projet s'appuie sur des pré-résultats obtenus au Laplace, sur la mesure et la modélisation des forces électrostatiques d'interaction entre une pointe AFM et la surface d'un diélectrique. Nous avons ainsi pu montrer un excellent accord dans l'amplitude et la forme des courbes de force mesurées et simulées et avons travaillé sur les conditions optimales de la géométrie de pointe et de la sonde concernant la sensibilité et la résolution de la méthode.

Ce modèle doit être généralisé au cas de forces générées par des charges implantées dans le diélectrique selon différentes profondeurs et différents étalements latéraux. Le développement de méthodes inverses pour la localisation tridimensionnelle des charges relève d'une double compétence qu'apporte la collaboration ICA / LAPLACE, l'Institut Clément Ader sur l'utilisation et le développement de méthodes inverses et le LAPLACE sur les techniques de mesure dérivées de l'AFM ainsi que sa modélisation.

Cette thèse est structurée en 4 chapitres :

La première partie du chapitre I porte sur l'effet de la charge d'espace sur le comportement électrique des nano-diélectriques en prenant exemple sur les diélectriques minces utilisés dans les switches radiofréquences (RF-MEMS). Dans une deuxième partie, une étude précise du microscope à force atomique est réalisée. Cette étude porte, d'une part, sur la structure géométrique même de l'AFM avec une description des différents éléments qui le composent et d'autre part, sur son principe de fonctionnement. A partir de là, les différents modes dérivés de l'AFM sont détaillés. La dernière partie de ce chapitre présente les différentes modélisations des interactions électrostatiques (EFDC) qui existent entre une pointe AFM et son échantillon en mettant en avant leurs avantages et leurs limites.

Le modèle EFDC développé par A. Boularas durant sa thèse doit être généralisé au cas de forces générées par des charges implantées dans le diélectrique. C'est l'objet principal du chapitre II. Dans un premier temps, nous allons parfaire la géométrie

existante en prenant en compte l'angle d'inclinaison de la sonde AFM pour s'approcher au mieux d'une sonde réelle. Dans un deuxième temps, nous allons améliorer le temps de calcul de ce modèle en optimisant la structure du maillage de la géométrie d'étude. Finalement, nous allons adapter ce modèle aux cas de courbes de force obtenues par la polarisation d'électrodes enfouies dans le diélectrique de différentes largeurs et à différentes profondeurs. Cette étape est primordiale pour d'une part valider ce modèle avec des données expérimentales sur des géométries et conditions aux limites proches de la réalité du problème à résoudre, et, d'autre part, estimer la sensibilité des EFDCs à la répartition en profondeur et en latéral d'une l'électrode sous potentiel.

Après avoir validé notre modèle 3D par des données expérimentales, l'objectif du chapitre III est d'étudier la sensibilité des courbes de force à la localisation tridimensionnelle des charges implantées dans un diélectrique mince. En effet, le modèle de base sera adapté pour estimer la force électrostatique exercée sur la sonde AFM par une distribution de charge demi-ellipsoïdale. La sensibilité des EFDCs à la charge est analysée en fonction des paramètres du demi-ellipsoïde comme son rayon, sa profondeur et la densité de charge présente à l'intérieur de celui-ci.

L'objectif du chapitre IV est d'initier un travail d'optimisation de paramètres sur le modèle développé et présenté au chapitre II. Il s'agit d'un problème inverse où à partir de courbes de force simulées ou expérimentales on souhaite remonter aux caractéristiques géométrique et électrique de la charge. Dans un premier temps, les notions de base concernant l'optimisation sont abordées et quelques algorithmes classiques d'optimisation locale ou globale sont détaillés. Cette première partie s'adresse principalement à des non spécialistes des méthodes inverses. La deuxième partie de chapitre concerne l'utilisation de ces algorithmes sur des EFDC simulées dites de référence pour travailler, dans un premier temps, sur des cas où les paramètres à identifier sont connus. Cette première étude permet d'analyser la faisabilité de notre problème. Enfin, un algorithme d'optimisation global, MIDACO, est testé sur des EFDC issues de l'expérience afin de retrouver la distribution réelle des charges et leur densité.

Chapitre I : Caractérisation électrique des nanomatériaux diélectriques

I.1 Les nanomatériaux diélectriques et charge d'espace

I.1.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre est de présenter le contexte de nos travaux, il se décompose en quatre parties.

Dans un premier temps la notion de charge d'espace est abordée et l'ampleur de ses effets sur les nanomatériaux diélectriques sont détaillés. Les techniques de mesure de la charge d'espace sont ensuite décrites de manière exhaustive dans le deuxième paragraphe.

Le troisième paragraphe présente l'état de l'art des modélisations de la force électrostatique reflétant la charge d'espace, puis une conclusion qui constitue la quatrième et dernière partie de ce chapitre.

I.1.2 Charge d'espace

Un isolant parfait pourrait être défini comme un matériau ayant une structure cristalline sans défaut et une parfaite pureté de telle sorte qu'il ne devrait pas contenir d'autres charges que les noyaux atomiques et les électrons des couches internes et de valence. En réalité, les matériaux diélectriques utilisés dans l'isolation électrique ne se comportent jamais comme des isolants parfaits. Les matériaux diélectriques sont susceptibles de se charger électriquement par des mécanismes dont la nature est connue et décrite théoriquement dans certaines situations idéalisées. Lorsque un matériau diélectrique est soumis à de fortes contraintes : champ électrique élevé, irradiation, rayonnement solaire UV, efforts et frottements mécaniques importants, il apparaît alors dans certaines régions du matériau un excès de charges électriques, appelées charge d'espace [1, 2, 3].

Nous entendons par charge d'espace, l'ensemble des charges réelles, positives ou négatives, qui peuvent être localisées en volume ou en surface du matériau diélectrique. Il semble aujourd'hui de plus en plus probable que les problèmes de baisse de performances et de rupture des diélectriques soient liés à la présence de la charge d'espace en volume et en surface. En effet, la présence de charge d'espace crée un champ électrique résiduel qui sollicite le diélectrique en continu et augmente localement la contrainte électrique. De plus, l'énergie relaxée lors d'un piégeage massif des charges

peut aussi provoquer une détérioration partielle ou complète du matériau diélectrique [4, 5].

Les charges peuvent être générées sous contrainte d'un courant continu (DC) par différents mécanismes, allant de l'injection aux électrodes, aux phénomènes d'ionisation ou à la présence de résidus ioniques. Les principaux phénomènes de génération de charge d'espace sont présentés à la Figure I. 1.

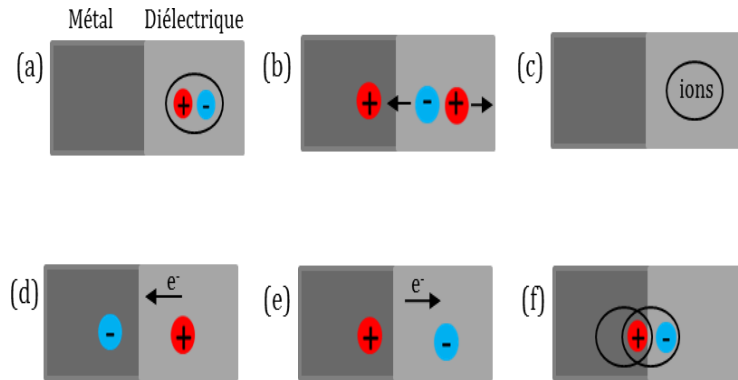


Figure I. 1 Les différents types de génération de la charge d'espace.

Les charges en volume peuvent être :

(a) Des dipôles d'orientation due à l'orientation de molécules polaires sous l'effet du champ électrique :

En l'absence d'un champ électrique, le moment électrique est nul car la somme algébrique des charges dans toutes les molécules dans un volume donné est nulle, ceci du fait que les centres de gravité des charges positives et négatives coïncident. Lors de l'application d'un champ électrique, les centres de gravité ne coïncident plus et les particules (atomes et molécules) sont alignées suivant la direction du champ appliqué, donnant naissance à une polarisation appelée polarisation d'orientation.

(b) Issues d'une dissociation d'espèces initialement neutre :

Les ions peuvent également être générés, aussi, par activation thermique liée à certaines contraintes extérieures, telle que l'absorption de rayonnement. En effet, une molécule étrangère AB peut subir une ionisation dissociative qui va conduire à la création de deux entités A^+ et B^- , comme des molécules d'eau qui peuvent former des ions OH^- en

se dissociant. La quantité d'ions formés est proportionnelle à la concentration en molécules étrangères AB.

(c) Des impuretés ioniques provenant du mode de fabrication ou l'architecture du diélectrique :

La création des ions peut avoir une origine interne ou externe au diélectrique. Les ions présents dans le diélectrique proviennent principalement de la présence de molécules étrangères (eau, additifs, réactifs, produits...) insérées dans sa structure. Elles sont issues des procédés de fabrication et des procédés de mise en œuvre.

Les charges en surface peuvent être :

(d) Issues d'un phénomène d'injection de trous à l'anode.

(e) Issues d'un phénomène d'injection d'électrons à la cathode.

L'injection de charges aux électrodes se manifeste par un transfert d'électrons ou de trous de l'électrode au diélectrique [5]. Les charges injectées possèdent la même polarité que le potentiel de l'électrode adjacente. Les charges injectées sont piégées dans le diélectrique, près de l'électrode où elles sont générées. L'injection conduit ainsi à la formation des homo-charges dans l'isolant. Cependant, si les charges se déplacent dans le diélectrique et le traversent, elles se retrouvent alors localisées à proximité de l'électrode de polarité opposée. Dans ce cas, on a la formation d'hétéro-charges. L'isolant subit alors une augmentation du champ à l'interface et une diminution du champ dans le volume. La quantité de charges injectées dépend de la nature de l'électrode (dimension, matière, rugosité), des défauts à l'interface (contact, vacuoles, pollution de surface) et du champ électrique [2, 6, 7]. L'application d'un champ électrique de l'ordre de la dizaine de $\text{kV}\cdot\text{mm}^{-1}$ à travers une structure métal-isolant-métal permet aux électrons de passer du métal à l'isolant. L'énergie nécessaire pour franchir la barrière de potentiel est alors abaissée sous l'effet du champ électrique appliqué.

(f) Issues d'une réaction chimique ou des décharges en surface de l'isolant.

I.1.3 Charge d'espace et champ électrique

La Figure I. 2 montre la formation de charge d'espace dans un diélectrique soumis à une contrainte électrique (champ électrique) en raison de trois processus différents :

(a) La polarisation des dipôles électriques sous l'effet du champ électrique.

(b) La migration des porteurs ioniques pour former des hétéro-charges aux électrodes : l'anode et la cathode.

(c) L'injection de charges aux interfaces qui conduit à la formation des homo-charges dans le diélectrique. Nous entendons par homo-charges, toute charge d'espace de signe semblable (homo) à la polarité de l'électrode la plus proche, ce qui se traduit par une diminution du champ électrique à l'interface électrode/diélectrique et un renforcement du champ en volume. Le terme hétéro-charges est quant à lui utilisé pour désigner toute charge d'espace de signe autre (hétéro) que celui de la polarité de l'électrode la plus proche, ce qui se traduit par un renforcement du champ électrique à l'interface électrode/diélectrique et sa diminution en volume.

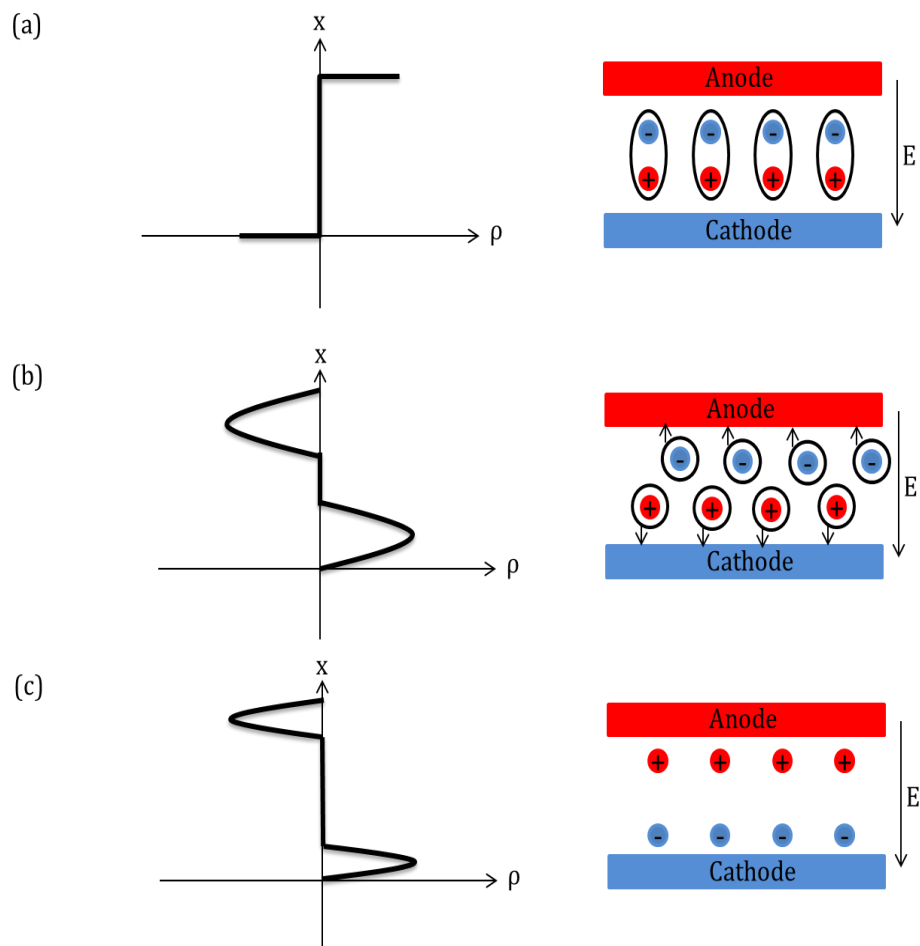


Figure I.2 Profils de densité de charge d'espace ρ dans le diélectrique pour un champ électrique appliqué E dans le cas : (a) de la polarisation des dipôles, (b) de la migration des porteurs ioniques, (c) de l'injection de charges aux interfaces.

La présence de charges à l'intérieur du matériau modifie donc la répartition interne du champ électrique. Il peut en résulter un certain nombre de conséquences plus ou moins importantes et critiques pour le matériau. Cela peut aller du vieillissement prématuré à la rupture du diélectrique [7]. Il apparaît donc important de pouvoir quantifier et localiser la charge d'espace pour évaluer les conséquences sur la fiabilité du matériau diélectrique.

I.1.4 Les nanomatériaux diélectriques dans le génie électrique

I.1.4.1 Exemple : Les nano-diélectriques utilisés dans Les switches radiofréquence (RF-MEMS)

Les Systèmes Micro Électro-Mécanique (Micro Electro Mechanical Systems, MEMS) sont des structures mécaniques ayant de très petites dimensions, allant de quelques microns à quelques dizaines de nanomètres. Les premiers microsystèmes électromécaniques ont été mis au point dans les années 1970 et ont été mis sur le marché dans les années 1980. Ils sont aujourd'hui très présents dans notre vie quotidienne, par exemple dans les systèmes de déclenchement d'airbags, au cœur de la téléphonie, de l'automobile ou du médical.

Ces composants, par le mouvement mécanique, se comportent comme des interrupteurs ouverts ou fermés. Les MEMS les plus répandus et les plus populaires sont les commutateurs radiofréquence (RF-MEMS) [8]. Les RF-MEMS sont des Micro structures mécaniques conçues pour réaliser les fonctions électriques dans les systèmes de radiofréquence. Ils sont utilisés dans plusieurs domaines comme la communication sans fil (la télécommunication et l'industrie mobile), les systèmes de radar, les satellites et la radio militaire. L'objectif des RF-MEMS est de remplacer les composants électroniques et quelques fonctions réalisées par des circuits intégrés, en offrant un meilleur fonctionnement : moins de perte, faible consommation et haute linéarité de fonctionnement. Les commutateurs RF-MEMS se présentent généralement sous la forme d'une poutre ou d'un pont mobile qui ont une position initiale haute et qui s'actionnent dans le but de modifier le signal entrant. Plusieurs méthodes d'activation sont utilisées dans la littérature [9]. Elles se distinguent par l'exploitation de certaines propriétés physiques des matériaux et leur facilité de mise en œuvre. Le choix entre l'une ou l'autre dépend de l'application visée. Dans la majorité des cas, ces commutateurs s'activent grâce à une force électrostatique pour la facilité de mise en place technologique et sa rapidité

de commutation. Les structures les plus connues utilisées sont des ponts de type capacitif. La plupart de ces commutateurs possèdent une architecture de type parallèle trouvant son application dans la configuration coplanaire (cf. Figure I. 3) [9]. Le circuit se compose d'une électrode fabriquée sur la surface d'un circuit intégré CPW (superposé au plan de la ligne radio fréquence), au-dessus de laquelle est suspendue une fine membrane métallique. Cette dernière est connectée directement sur les plans de masse de la ligne coplanaire (CPW).

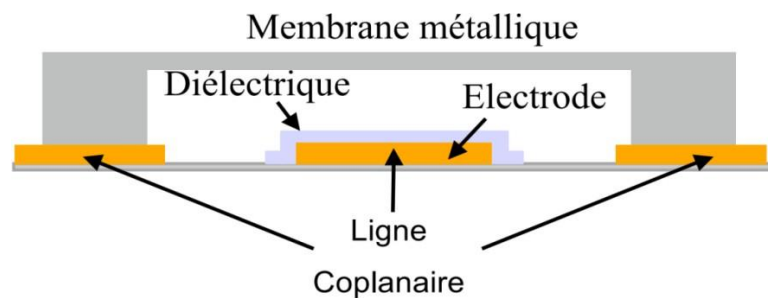


Figure I. 3 Commutateur RF-MEMS de type pont capacitif.

Une couche mince de diélectrique (d'épaisseur nanométrique) située au-dessus de l'électrode permet ainsi d'empêcher un court-circuit entre la masse et le signal continu permettant d'activer l'interrupteur. Sans aucune différence de potentiel appliquée entre l'électrode et le pont (la membrane métallique), le pont reste en position haute grâce à sa raideur et la capacité équivalente parallèle C qui est faible (cf. Figure I. 4 (a)). Dans ce cas, le signal RF appliqué d'un côté du CPW peut se propager librement de l'autre côté. Quand une différence de potentiel est appliquée entre l'électrode et le pont, une force électrostatique tend à rapprocher les deux conducteurs. À partir d'une certaine force électrostatique résultante, qui est égale à la force de rappel de la structure qui correspond à une tension appelée $V_{\text{Pull-down}}$, le pont vient au contact avec le diélectrique (cf. Figure I. 4 (b)). Quand le pont est en position basse, le système (pont et le conducteur central CPW) présente une capacité considérable au plan de masse environnant. Par conséquent les signaux sont réfléchis.

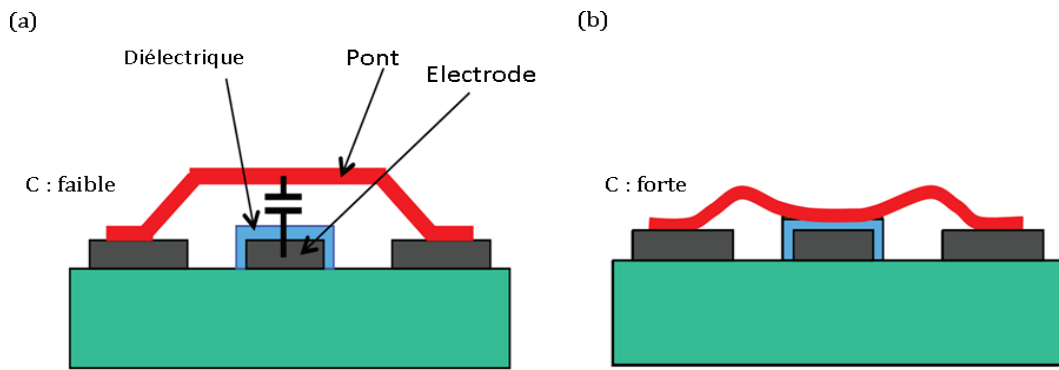


Figure I. 4 Le fonctionnement du switch RF-MEMS.

I.1.4.2 Les effets de la charge d'espace sur le comportement des commutateurs RF-MEMS

Malgré les avantages remarquables que l'actionnement électrostatique représente pour le fonctionnement des commutateurs RF-MEMS capacitifs, il a été démontré expérimentalement que ce type d'actionnement présente des limites [9]. En effet, les tensions mises en œuvre pour réaliser des déplacements importants du pont sont hautes (de l'ordre d'une centaine de Volt pour un gap supérieur à $4\ \mu\text{m}$ par exemple). Ces fortes tensions vont favoriser le chargement du diélectrique submicronique qui est situés entre les deux armatures métalliques (cf. Figure I. 3). Un consensus semble cependant se dessiner sur l'origine de ce chargement. Il proviendrait de la charge d'espace située au niveau des interfaces et au sein même du matériau diélectrique [10]. Cette charge d'espace serait notamment liée à l'état de surface, au type d'interfaces mis en jeu et à l'état de contraintes résiduelles des couches. Le renforcement du champ électrique local dû à la charge d'espace peut être à l'origine de la dégradation rapide du diélectrique. Zhang, Lewiner et Alquié [11] ont observé que le champ appliqué peut être multiplié par un facteur de 5 à 8 au voisinage des électrodes sous une contrainte continue prolongée. Or, un champ électrique important signifie que l'énergie relaxée est importante, ceci peut endommager localement ou complètement le matériau en modifiant sa structure chimique.

En résumé on peut dire que la charge d'espace, à court terme, est responsable de la dégradation du diélectrique conçu pour le bon fonctionnement du commutateur RF-MEMS. À long terme, cette charge qui s'accumule de plus en plus peut provoquer une dérive majeure dans le comportement du commutateur, et c'est, finalement, ce qui limite fortement leur durée de vie. Par conséquent, le développement de techniques de mesure

à haute résolution spatiale pour localiser la charge d'espace dans ce type de diélectrique est nécessaire pour améliorer la fiabilité des commutateurs RF-MEMS.

I.2 Les techniques de mesure de la charge d'espace dans des nano-diélectriques

Il existe plusieurs méthodes de mesure de la charge d'espace dans un matériau diélectrique. Concernant les méthodes ayant une résolution spatiale, leur principe repose, pour la plupart, sur l'étude de la réponse de la charge d'espace à une perturbation extérieure [12, 13, 14]. On distingue alors deux grandes familles :

- Les méthodes utilisant une perturbation thermique.
- Les méthodes utilisant une perturbation acoustique.

Au laboratoire Laplace, nous avons à disposition deux méthodes de mesure de charge d'espace, une à perturbation acoustique, la PEA (Pulsed Electro Acoustic Method) [12, 13] et la deuxième à perturbation thermique, la FLIMM (Focused Laser Intensity Modulation Method) [14]. La méthode PEA admet une résolution de l'ordre de la dizaine de micromètres et n'est utilisable que pour étudier des diélectriques dont l'épaisseur est de l'ordre de quelques centaines de microns. La méthode FLIMM a une excellente résolution près des interfaces et elle est capable d'effectuer des cartographies en trois dimensions de la charge d'espace avec une résolution inférieure à la dizaine de microns. L'ordre de grandeur de l'épaisseur des échantillons étudiés est de quelques dizaines de micromètres.

En raison de facteurs économiques et environnementaux, on assiste depuis plusieurs années dans les domaines de l'énergie et de l'électronique, à une course à la miniaturisation des composants et des systèmes et à l'accroissement des densités de puissances qu'ils véhiculent. Ceci a pour conséquence la diminution des épaisseurs que subissent les isolants. Les méthodes classiques de mesure de charge d'espace ne sont plus adaptées, car leurs résolutions actuelles de quelques micromètres sont bien supérieures aux dimensions nanométriques des systèmes, comme par exemple les commutateurs RF-MEMS.

Il convient donc de développer de nouvelles méthodes permettant de mesurer la densité de charges et leur localisation avec une résolution nanométrique, afin de pouvoir

garantir la fiabilité de ces composants. Pour cela la Microscopie à Force Atomique (AFM) et les méthodes qui en sont dérivées apparaissent comme des candidats particulièrement intéressants.

I.2.1 La microscopie à champ proche

La microscopie à champ proche est une technologie relativement récente développée suite à l'invention du microscope à effet tunnel par G. Binnig et H. Rohrer en 1981 [15]. Cette invention fut récompensée par un prix Nobel de physique.

Après la découverte du microscope à effet tunnel, un grand nombre de méthodes dérivées ont vu le jour et sont regroupées sous l'appellation Microscopie à Champ Proche (SPM) [16, 17, 18] et peuvent être classés en trois grandes catégories :

- La microscopie à force atomique (AFM) [19] : le principe en est le balayage de la surface des objets étudiés à l'aide d'une micro-pointe dont les mouvements sont analysés par ordinateur. Cette technique permet d'obtenir des informations sur la topographie de la surface avec la résolution nanométrique. Différents modes dérivés ont pu être développés : microscopie à force électrostatique (EFM) [20] et microscopie à sonde de Kelvin (KFM) [21] qui permettent la mesure du potentiel de surface. Dans la suite de ce chapitre seule cette catégorie sera discutée en détail.

- La microscopie à effet tunnel (STM) [22] : cette technique consiste en la mesure du courant tunnel entre une pointe conductrice et les atomes de la surface et possède la résolution atomique.

- La microscopie optique en champ proche (SNOM) [23, 24] : technique captant, à l'aide d'une sonde locale (fibre optique taillée en pointe), les ondes évanescentes à la surface des matériaux transparents.

I.2.2 La microscopie à force atomique (AFM)

I.2.2.1 Le principe de fonctionnement

Le microscope [25] est de taille réduite et il ne dépasse pas 30 cm dans sa plus grande dimension (cf. Figure I. 5). Etant très sensible aux vibrations extérieures, il est indispensable de le fixer sur un support muni d'amortisseurs : une table optique, par

exemple. Un ordinateur de type PC se charge de l'acquisition des images et du pilotage du microscope.

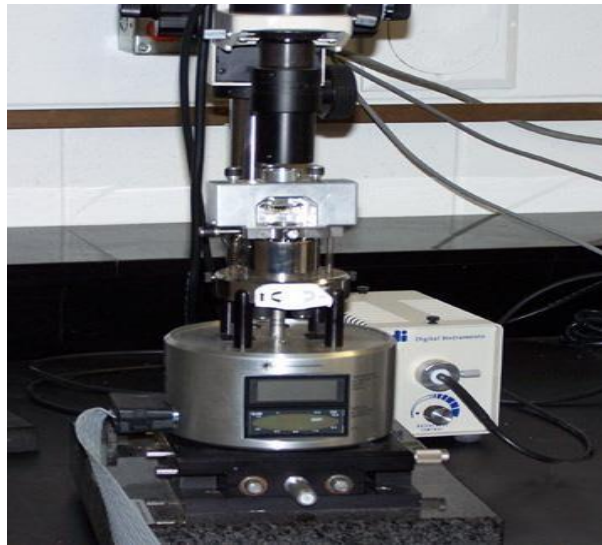


Figure I. 5 Le microscope à force atomique [25].

Le principe de fonctionnement de l'AFM est simple : une pointe en diamant ou en silicium est fixée à l'extrémité d'un levier (cf. Figure I. 6). Celle-ci est caractérisée par un apex qui définit la forme de l'extrémité de la pointe et est caractérisé par son rayon de courbure R_c . Cette pointe est abaissée jusqu'à ce qu'elle touche l'échantillon. Ce contact établi, l'ordinateur provoque le déplacement de l'échantillon de manière à effectuer un balayage de la surface. Le système de déplacement est constitué d'un moteur qui permet l'approche de la sonde vers la surface et de trois tubes piézoélectriques qui permettent le balayage selon les axes X, Y et Z. Un premier tube sert pour les déplacements latéraux selon les directions X et Y et un second tube sert aux déplacements verticaux c'est-à-dire selon la direction Z. Ce même ordinateur enregistre, par l'intermédiaire de capteurs divers, les déflexions verticales du levier. Ces capteurs se composent d'un laser qui se réfléchit sur le dos du levier et d'une photodiode à quatre quadrants permettant de mesurer le signal réfléchi. Un mécanisme de rétrocontrôle (en feedback) maintient la déflexion du levier constante en le déplaçant de bas en haut, suivant la topographie de l'échantillon. L'image de la surface observée est obtenue.

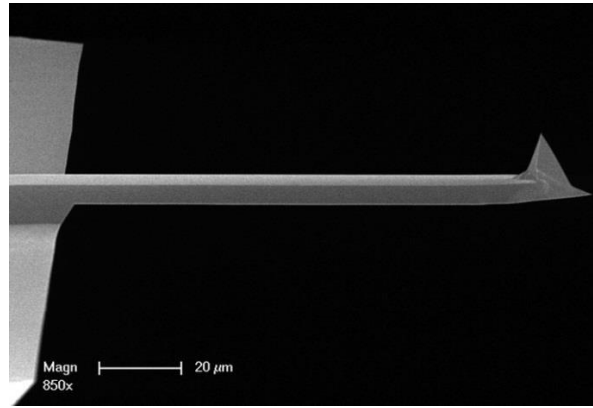


Figure I. 6 Image MEB (Microscopie Electronique à Balayage) de la sonde AFM : pointe et bras de levier.

1.2.2.2 La pointe

La pointe est située à l'extrémité du levier et constitue la première partie de la sonde AFM. C'est elle qui est en interaction directe avec la surface de l'échantillon à étudier. Le choix de la sonde et en particulier la pointe dépend des besoins spécifiques de l'expérience. Dans la plupart des cas, la pointe AFM a une forme pyramidale à trois cotés (cf. Figure I. 7 (a)).

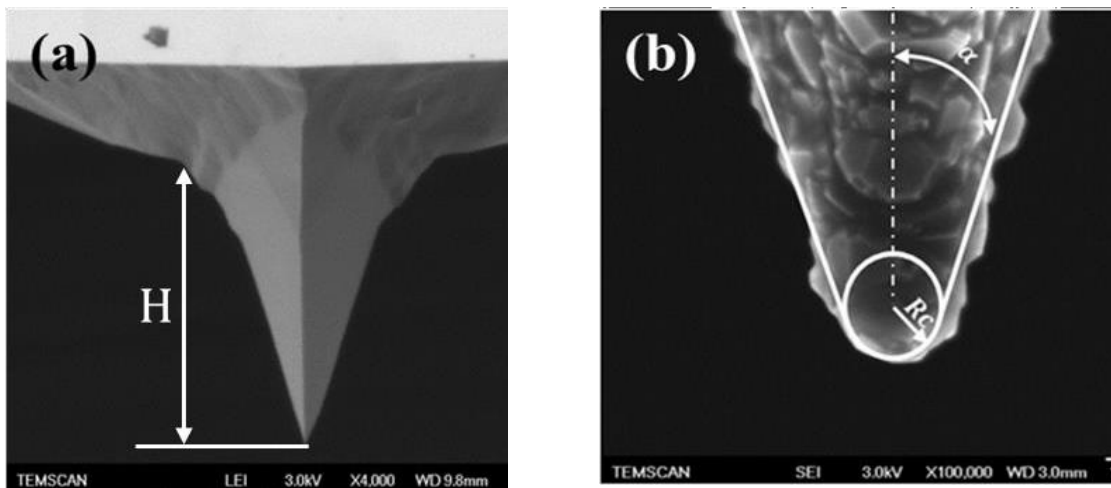


Figure I. 7 Image MEB d'une pointe de microscope à force atomique : (a) vue d'ensemble, (b) zoom sur l'apex de la pointe.

La pointe est caractérisée par une hauteur H (entre $10\ \mu\text{m}$ et $15\ \mu\text{m}$), un rayon de courbure R_c (entre $2\ \text{nm}$ et $200\ \text{nm}$) et un angle de demi-ouverture α (entre 12° et 40°) (cf. Figure I. 7 (b)).

La pointe est généralement en silicium ou en nitrure de silicium et peut présenter un revêtement métallique.

I.2.2.3 Le bras de levier

Le bras de levier constitue la seconde partie de la sonde AFM, il a une forme rectangulaire (rectangular cantilever) et est caractérisé par sa raideur k ($\text{N}\cdot\text{m}^{-1}$) et ses dimensions géométriques (cf. Figure I. 8).

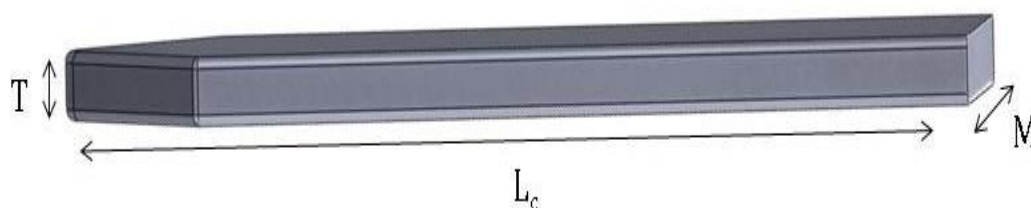


Figure I. 8 Dimensions d'un bras de levier rectangulaire.

La raideur k dépend des propriétés mécaniques et des dimensions géométriques (cf. Tableau I. 1) du bras de levier comme le montre l'équation suivante :

$$k = \frac{M \times Y \times T^3}{4 \times L_c^3} \quad \text{I. 1}$$

Tableau I. 1 Les dimensions usuelles et le module de Young Y du bras de levier.

Paramètres du bras de levier	Valeurs Minimales.	Valeurs Maximales.
Longueur (L_c) [μm]	50	600
Largeur (M) [μm]	20	50
Epaisseur (T) [μm]	0.5	5
Module de Young (Y) [GPa]	130	1050

I.2.2.4 Inventaire et classification des forces à l'échelle nanométrique

Lorsque la sonde AFM cartographie à l'air la surface d'un matériau diélectrique, la sonde est soumise à des interactions dont la portée et l'origine sont diverses. Ces forces d'interactions peuvent être résumées dans l'équation suivante :

$$F_{S/D} = \left(F_B + F_{VDW} + F_{Cap} + F_E \right) \quad \text{I. 2}$$

Où $F_{S/D}$ représente la force totale d'interaction entre la sonde AFM et le diélectrique, F_B la force d'origine chimique, F_{VDW} la force de Van der Waals, F_{Cap} la force de capillarité et F_E la force électrostatique.

Force d'origine chimique F_B

Lorsque la sonde AFM balaye la surface du matériau diélectrique à l'air ou en atmosphère contrôlée, on considère que toutes les liaisons des atomes de l'apex de la pointe sont saturées. Par conséquent, aucune liaison de type ionique ou covalente ne peut se former entre l'apex de la pointe et la surface du diélectrique durant l'interaction, donc $F_B = 0$. Par contre, lorsque le balayage est mené dans le vide, l'échantillon et la sonde sont nettoyés, des liaisons sont présentes et les forces d'origines chimiques ne sont pas nulles [26] (cf. Figure I. 9).

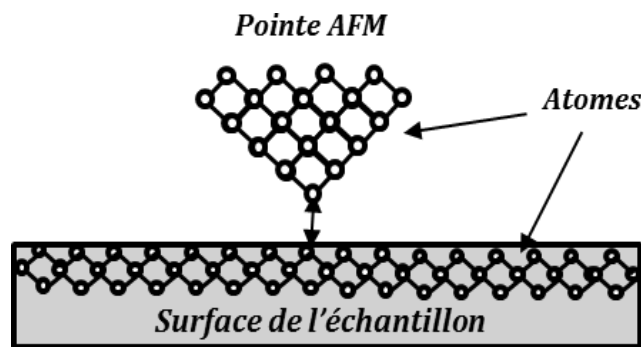


Figure I. 9 Schéma des interactions entre atomes de la pointe AFM et ceux de la surface de l'échantillon.

Force de Van der Waals F_{VDW}

Cette force est induite par les fluctuations des moments électriques dipolaires des atomes et de leur polarisation mutuelle. À l'échelle atomique, son expression est :

$$F_{VDW} = \left(\frac{H}{d^7} \right) \quad \text{I. 3}$$

Où d est la distance entre deux atomes ou molécules et H est la constante de Hamaker qui dépend des matériaux mais aussi du milieu environnant. Si on représente la sonde AFM comme une sphère de rayon R_c et l'échantillon comme un plan son expression donnée par [26] est :

$$F_{VDW}(z) = \frac{HR_c}{6z^2} \quad \text{I. 4}$$

Où z est la distance pointe-surface. Il est important de noter que la nature du milieu qui sépare la sonde AFM du matériau diélectrique peut modifier l'intensité de la force de Van der Waals. Par exemple, le rapport de l'intensité de cette force entre l'eau et dans l'air est :

$$\frac{H_{air}}{H_{eau}} = \frac{10.38 \times 10^{-20}}{1.9 \times 10^{-20}} \cong 5.4 \quad \text{I. 5}$$

La force F_{VDW} qui en résulte sera donc 5 fois plus petite dans l'eau que dans l'air.

Force de capillarité F_{Cap}

Lorsqu'une expérience est effectuée dans les conditions atmosphériques ambiantes, il se forme une couche d'eau très fine à la surface de l'échantillon et sur celle de la pointe AFM. Lorsque la distance pointe/surface devient assez petite de l'ordre du nanomètre, un ménisque d'eau entre l'apex de la pointe et la surface se forme. Ce film liquide est à l'origine de la force de capillarité. La présence de ce ménisque d'eau a été visualisée grâce à un Microscopie Electronique à Balayage (MEB) (cf. Figure I. 10).

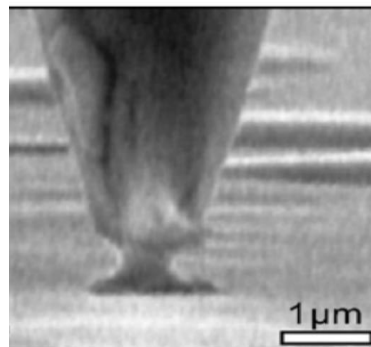


Figure I. 10 Image MEB du ménisque d'eau entre un pointe AFM et la surface d'un matériau diélectrique.

La force de capillarité a été modélisée par Nony et al [27], toujours en représentant la géométrie pointe/surface par une géométrie sphère/plan (cf. Figure I. 11).

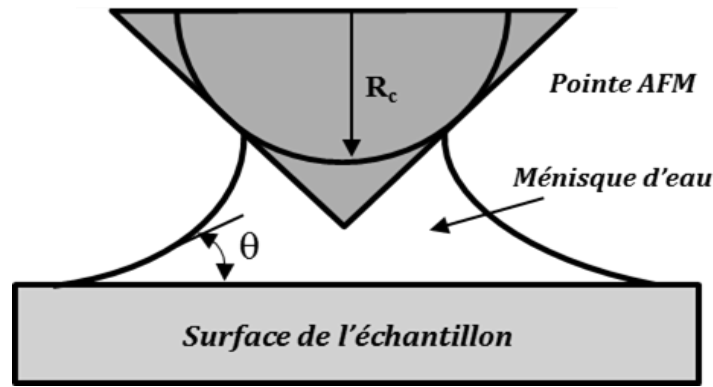


Figure I. 11 Représentation de la géométrie de contact capillaire sphère-plan. R_c le rayon de la sphère et θ l'angle de contact sphère-ménisque [27].

Dans le cas classique considéré en expérience, le rayon de courbure du ménisque formé est égal au rayon de courbure de la pointe R_c , par conséquent l'expression de la force de capillarité est donnée par l'équation suivante :

$$F_{Cap} = -4 \pi R_c \lambda_L \cos(\theta) \quad \text{I. 6}$$

Où λ_L représente le coefficient de tension superficielle du liquide (ici le liquide c'est l'eau, avec $\lambda_L = 73 \text{ mJ.m}^{-2}$).

Force électrostatique F_E

La force électrostatique est due, d'une part à la différence de potentiel entre la sonde AFM et la surface de l'échantillon et d'autre part, de la valeur de la capacité qui se crée entre ces deux éléments (cf. Figure I. 12). L'expression de la force électrostatique est donnée par l'équation suivante :

$$F_E = -\frac{1}{2} \frac{\partial C}{\partial z} V^2 \quad \text{I. 7}$$

Où C représente la capacité formée entre la sonde et le diélectrique, z la distance verticale séparant la sonde de l'échantillon et V est la différence de potentiel appliqué entre la sonde et la surface du diélectrique.

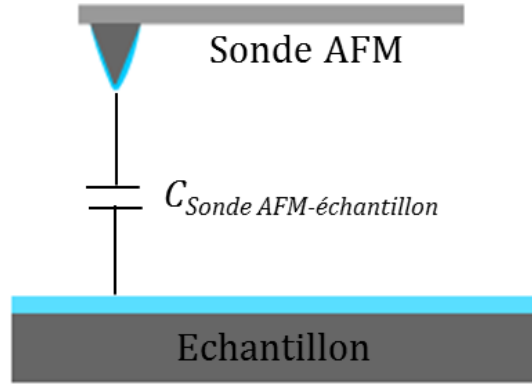


Figure I. 12 Capacité d'interaction entre la sonde AFM et la surface d'un échantillon.

On peut approximer grossièrement la géométrie sonde/échantillon par un condensateur plan/plan dont la surface S est la demi-aire de la sphère ($2\pi R^2$) qui constitue l'apex de la pointe. La force électrostatique est alors exprimée par :

$$F_E(z) = \frac{1}{2} \frac{\epsilon_0 \epsilon_r S}{z^2} V^2 \quad \text{I. 8}$$

Où ϵ_0 et ϵ_r représentent respectivement la permittivité du vide et celle du matériau diélectrique. Avec cette approximation, on constate que la force électrostatique varie en z^{-2} avec la distance, comme la force de Van der Waals pour la géométrie sphère/plan [26]. On peut alors calculer le rapport des deux forces et on obtient :

$$\frac{F_{VDW}(z)}{F_E(z)} = \frac{H}{6\pi\epsilon_0\epsilon_r R_c V^2} \quad \text{I. 9}$$

Si on prend $H = H_{\text{air}} = 10.38 \times 10^{-20}$, $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ F.m}^{-1}$ et pour un $R_c = 100 \text{ nm}$ l'équation I. 9 devient alors :

$$\frac{F_{VDW}(z)}{F_E(z)} = \frac{6 \times 10^{-5}}{\epsilon_r V^2} \quad \text{I. 10}$$

D'après l'équation I. 10, pour que la force électrostatique devienne supérieure à la force de Van der Waals il faut que la différence de potentiel sonde/surface V soit de l'ordre de $10^{-2.5}$ Volt, c'est-à-dire la dizaine de mV. Ainsi, lorsque la tension V est de l'ordre de quelques volts, la force de Van der Waals est négligeable devant la force électrostatique.

L'ensemble des forces d'interaction entre la pointe et la surface de l'échantillon peuvent être classées en trois catégories : les forces à très courte portée, à courte portée et à longue portée (cf. Tableau I. 2).

Tableau I. 2 Exemple de force d'interaction entre la pointe et la surface.

Force	Portée	Amplitude
Les forces chimiques	Très Courte portée	Inférieure au nN
Force de Van der Waals	Courte portée	Quelques nN
Electrostatique	Longue portée	De quelques 0.1 nN à quelques 100 nN
Adhésion/Capillarité	Longue portée	De quelques 10 nN à quelques 100 nN

La mesure de ces différentes forces peut permettre à l'AFM d'obtenir certaines grandeurs physiques telles que des informations sur la topographie (Van der Walls) [26, 27, 28], le potentiel de surface (électrostatique) [29, 30].

L'ensemble de ces forces peut être mesuré grâce aux courbes de forces FDC [31] ou aux courbes approche-retrait. Ces courbes permettent de suivre la déflexion (Δz) du bras de levier de la sonde en fonction de la distance entre la sonde et la surface de l'échantillon D (cf. Figure I. 13). Par conséquent, l'évolution des forces d'interaction F entre la sonde et l'échantillon est obtenue grâce à l'équation suivante :

$$F = k.\Delta z \quad \text{I. 11}$$

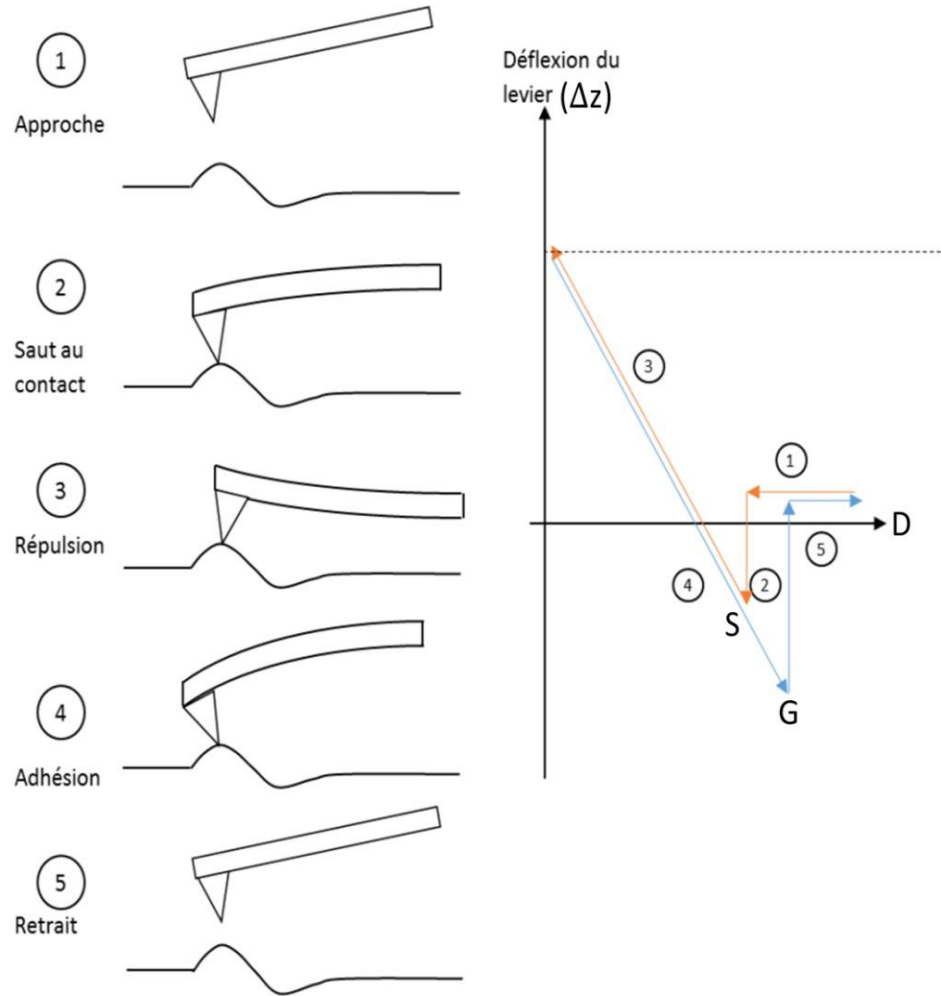


Figure I. 13 Courbe de force théorique obtenue en approche (en orange) et retrait (en bleu) de la sonde en l'absence de force électrostatique.

La courbe approche-retrait consiste à suspendre le balayage en X et Y de l'échantillon et à actionner uniquement le tube piézoélectrique en Z. Ceci permet le balayage selon l'axe Z afin d'étudier de manière détaillée l'établissement puis la rupture du nano-contact pointe / surface. Pour cela on trace l'évolution de la déflexion du levier en fonction de l'écart par rapport à une position d'équilibre du tube piézoélectrique en Z (cf. Figure I. 13).

Dans un premier temps, la sonde est loin de la surface (étape 1), donc les interactions pointe / surface sont négligeables et la courbe du signal de déflexion (en orange) est horizontale ; autrement dit, cette ligne de base correspond à une force nulle. Puis lorsque la sonde se rapproche, les interactions attractives pointe / surface, qui sont principalement dues aux forces de Van der Waals augmentent jusqu'au moment où elles deviennent suffisamment importantes pour faire fléchir le bras de levier. La pointe saute alors au contact de la surface (étape 2), au point S la pointe est en contact avec la surface.

La pointe étant attirée, la force est alors négative. En poursuivant l'approche, on entre en régime répulsif (étape 3) et on passe alors d'une force négative à une force positive (la force de répulsion) jusqu'à une limite définie par l'utilisateur. La phase de retrait de la pointe est engagée en inversant le sens du déplacement imposé par le piézoélectrique en Z. La déflexion du levier diminue alors (courbe bleue, étape 4), passe par la valeur nulle, puis continue à décroître jusqu'à une valeur bien inférieure au minimum atteint à l'approche, cela sous l'effet d'une force d'adhésion dont l'origine est souvent la capillarité. Quand la force de rappel du levier est supérieure à la force d'adhésion, la pointe s'arrache de la surface (étape 5) et la déflexion du levier revient à zéro. Au point G, la force de rappel du levier est égale aux forces d'adhésion de la pointe F_{cap} . Les forces d'adhésion sont quantifiables en faisant la différence entre la déflexion au point G et au point S :

$$F_{cap} = k.(G(z) - S(z)) \quad \text{I. 12}$$

En présence d'une force électrostatique, due à la différence de potentiel entre la sonde et l'échantillon, les phases d'approche et de retrait seront modifiées. En particulier, comme la force électrostatique est à longue portée, une courbure des étapes 1 et 2 sera observée [32]. La sensibilité électrostatique de la courbe de force FDC est exploitée par une nouvelle méthode appelée Electrostatic Force Distance Curve (EFDC). Cette méthode sera détaillée à la fin de ce chapitre.

1.2.2.5 Les différents modes de fonctionnement d'un AFM

Il existe deux modes différents de fonctionnement de l'AFM : en maintenant la pointe en contact avec la surface de l'échantillon (mode contact) [33] ou en faisant osciller la sonde à sa fréquence de résonance, à proximité immédiate de la surface (mode contact intermittent) [34]. Historiquement le mode en contact a été développé en premier. Ces deux modes présentent des avantages et inconvénients qui justifient leur utilisation pour différentes applications.

Le mode contact

Le mode contact est à la base de toutes les techniques AFM dans lesquelles la pointe de la sonde AFM est en contact physique permanent avec la surface de l'échantillon à étudier (cf. Figure I. 14). Pendant que la pointe balaie la surface, la topographie de l'échantillon induit une déflexion verticale du bras de levier.

Il existe deux méthodes d'imagerie en mode contact : force constante ou hauteur constante. En mode hauteur constante, la sonde est maintenue à une hauteur h fixe, et on mesure les variations de la déflexion du bras de levier. La force d'interaction entre la sonde AFM et la surface varie en fonction du relief. Cette méthode est utilisée pour les échantillons avec un faible relief.

En mode de force constante, on va chercher à maintenir la déflexion du bras de levier constante. On mesure alors l'écart entre la déflexion de référence et la déflexion mesurée, cette différence relative de hauteur par rapport au point précédent est calculée. Ensuite la sonde est remise à la hauteur nécessaire pour obtenir la déflexion de référence. Cette méthode permet de contrôler et minimiser la force de contact entre la pointe et l'échantillon, c'est celle qui est la plus utilisée.

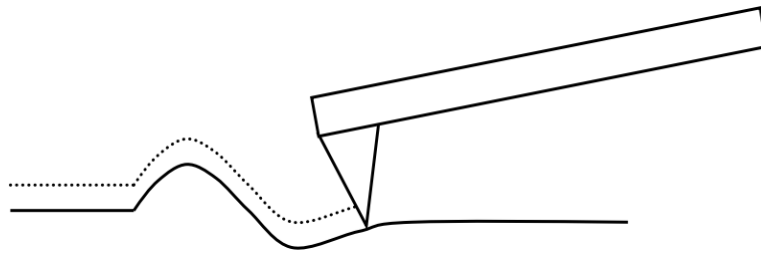


Figure I. 14 Schéma de principe du fonctionnement du mode contact.

Les principaux avantages de ce mode sont la rapidité, la simplicité de mise en œuvre et la possibilité de réaliser simultanément la mesure d'un autre paramètre, mécanique (friction) ou électrique (résistance). Ses inconvénients notables sont l'endommagement possible des échantillons fragiles, l'usure rapide de certains revêtements de pointes, ainsi que les désagréments liés à la présence de contamination sur les surfaces [30]. Pour remédier à ces limites, un nouveau mode d'opération a été développé.

Le mode contact intermittent (Tapping)

Le développement du mode Tapping a permis aux chercheurs d'imager des échantillons trop fragiles pour résister aux forces latérales du mode contact.

Dans ce mode de fonctionnement la pointe oscille et vient taper légèrement la surface durant un court instant (cf. Figure I. 15). Pour cela une tension sinusoïdale est appliquée à un système piézoélectrique en contact avec la pointe :

$$V_{sys} = V_{ac} \sin(\omega t + \varphi) \quad \text{I. 13}$$

Avec V_{ac} l'amplitude de tension, ω la pulsation et φ le déphasage. Cela va entraîner une oscillation du bras de levier, à la même fréquence :

$$\delta(t) = \delta_0 \sin(\omega t + \varphi) \quad \text{I. 14}$$

L'amplitude d'oscillation δ_0 va être fixée par la tension V_{ac} . L'amplitude d'oscillation du bras de levier change avec la topographie de la surface de l'échantillon et l'image de la topographie est obtenue en suivant ces changements. L'asservissement de cette amplitude (cf. la Figure I. 15 (a)) permet de réguler la distance pointe/échantillon et de constituer une image topographique. Une modification de la phase de l'oscillation nous donne à titre qualitatif le degré de dureté de la surface (cf. Figure I. 15 (b)).

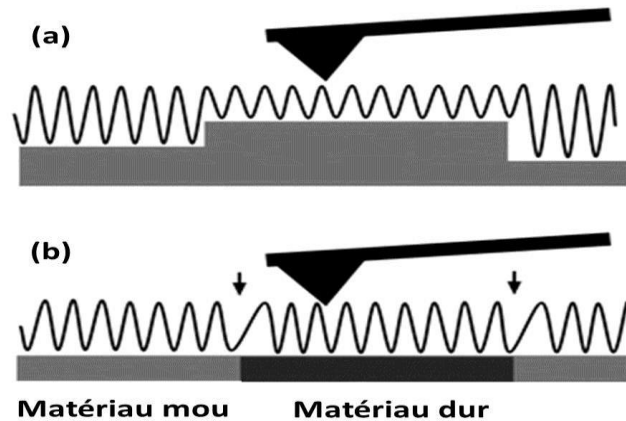


Figure I. 15 Représentation schématique du mode contact intermittent : (a) la modification d'amplitude d'oscillation est induite par la modification de hauteur, (b) la modification de la dureté du matériau introduit un déphasage de l'oscillation (indiqué dans la figure par les flèches).

L'avantage majeur de cette technique est de ne causer aucune usure de la pointe ni dommage à l'échantillon. Son principal inconvénient est une moins bonne résolution spatiale.

La première information recherchée avec l'AFM est le profil topographique de la surface d'un échantillon. Ensuite, l'AFM a permis d'obtenir un grand nombre d'informations sur la surface. En particulier différents modes électriques sont apparus après le développement du mode Tapping. Ces modes ont été développés pour accéder à

différentes grandeurs locales intéressantes pour l'électronique comme la résistance, le courant, la capacité ou le potentiel de surface [35].

I.2.2.6 Mode opératoire (mode lift)

La plupart des mesures AFM sont réalisées par une procédure en deux temps. Premièrement la sonde AFM cartographie la surface en mode contact intermittent (Tapping) (cf. Figure I. 16). Lorsque la pointe balaie la surface de l'échantillon durant cette cartographie, la sonde AFM est soumise à des interactions de différentes portées et d'origines diverses : capillarité, Van der Waals, chimique, électrostatiques etc. décrites au paragraphe précédent. Par conséquent, le signal obtenu est composé d'interactions multiples, ce qui ne permet pas de distinguer aisément les interactions de longues et courtes portées. Pour y parvenir un balayage à 'grande' distance est nécessaire, c'est la deuxième étape. Lors de ce deuxième passage où le système de régulation est inactif, la sonde balaye la ligne préalablement enregistrée en mode Tapping à une distance de plusieurs dizaines de nanomètres au-dessus de la surface (hauteur du lift, typiquement entre 50 nm et 100 nm). Lors de ce second passage, seules les interactions à longues portées agissent avec la sonde et particulièrement la force électrostatique. Ce mode opératoire AFM permet de mesurer à la fois la topographie de la surface du diélectrique mais aussi le potentiel de surface.

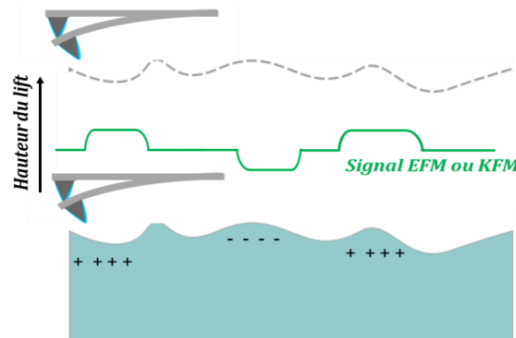


Figure I. 16 Procédure de cartographie en AFM : enregistrement de la topographie et enregistrement du signal électrique à longue portée, Hauteur du lift 50 nm.

I.2.2.7 Principe de la mesure du potentiel de surface par AFM

Pour faire une mesure du potentiel de surface, connu sous le nom de différence de potentiel de contact V_{CPD} , une tension V_{bias} est appliquée sur la sonde. Elle se compose d'une composante continue V_{dc} et d'une composante alternative V_{ac} à la même fréquence que la fréquence de résonance de la sonde :

$$V_{bias} = V_{dc} + V_{ac} \sin(\omega t) \quad \text{I. 15}$$

Lorsque la pointe interagit avec la surface, la différence de potentiel de contact V_{CPD} vient s'ajouter aux autres potentiels appliqués à la sonde :

$$V_T = (V_{dc} + V_{CPD}) + V_{ac} \sin(\omega t) \quad \text{I. 16}$$

Cette différence de potentiel et le potentiel appliqué induisent sur la sonde une force électrostatique définie par l'équation suivante :

$$F_E = -\frac{1}{2} \frac{dC}{dz} [(V_{dc} + V_{CPD} + V_{ac} \sin(\omega t))^2] \quad \text{I. 17}$$

La force électrostatique peut se décomposer alors en trois composantes spectrales (F_{dc} qui est la composante continue, F_{ω} composante oscillant à la fréquence ω et $F_{2\omega}$ composante oscillant à la fréquence 2ω) :

$$F_{dc} = -\frac{1}{2} \frac{dC}{dz} \left[\frac{1}{2} (V_{dc} + V_{CPD})^2 + \frac{V_{ac}^2}{2} \right] \quad \text{I. 18}$$

$$F_{\omega} = -\frac{dC}{dz} (V_{dc} + V_{CPD}) V_{ac} \sin(\omega t) \quad \text{I. 19}$$

$$F_{2\omega} = \frac{dC}{dz} \frac{V_{ac}^2}{4} \cos(2\omega t) \quad \text{I. 20}$$

Avec C la capacité entre la pointe et la surface, V_{CPD} la différence de potentiel de surface entre la pointe et l'échantillon, ω la pulsation, t le temps et z la distance entre la pointe et la surface.

D'après les équations I. 18 et I. 19, la composante continue F_{dc} et la composante F_{ω} oscillant à la fréquence ω dépendent de la différence de potentiel de surface entre la pointe et l'échantillon. Ce sont donc ces deux composantes qui devront être utilisées pour obtenir une cartographie du potentiel de la surface. La composante $F_{2\omega}$ oscillant à la fréquence 2ω est, quant à elle, une composante purement capacitive qui peut donc être utilisée pour évaluer la capacité à 2ω [36, 37].

La mesure du potentiel de surface se fait en exploitant la variation de la force électrostatique en fonction de la différence de potentiel de surface V_{CPD} entre la pointe et

l'échantillon, ce qui a donné lieu à deux modes principaux de mesures : la microscopie à force électrostatique (EFM) et la microscopie à sonde de Kelvin (KFM).

I.2.3 La microscopie à force de Kelvin (KFM)

Pour les mesures KFM en mode lift, le second passage se fait en supprimant l'oscillation mécanique de la pointe et en appliquant une tension alternative comme indiqué dans l'équation I. 15. Le principe de la méthode consiste à annuler la force à la pulsation ω (équation I. 19) en chaque point. Pour cela, le système, via une boucle d'asservissement, va ajuster la valeur de la composante continue du potentiel appliqué V_{dc} , de façon à compenser le potentiel de contact ($V_{dc} = V_{CPD}$) et ainsi annuler la force. De cette façon, la technique KFM permet de mesurer directement la différence de potentiel de surface entre une sonde AFM et l'échantillon.

I.2.4 La microscopie à force électrostatique (EFM)

Historiquement, le mode EFM a été développé avant le mode KFM. Pour les mesures EFM en mode lift, le principe est assez différent du KFM. En effet, pendant le second passage, l'oscillation mécanique de la sonde est maintenue et seulement la composante continue de la tension V_{dc} est appliquée ($V_{ac} = 0$ dans l'équation I. 17). Dans ce cas la force s'exerçant sur la sonde devient :

$$F_E = -\frac{1}{2} \frac{dC}{dz} (V_{dc} + V_{CPD})^2 \quad \text{I. 21}$$

Si la surface de l'échantillon est homogène (donc absence de charges piégées), le signal EFM (la pulsation et la phase de la sonde) est constant sur toute la surface. Cependant si localement une quantité de charges q est piégée, le potentiel de surface V_{CPD} se modifie ($V_{CPD} = V_q$) entraînant donc un changement de la valeur de ΔV ($V_{dc} - V_{CPD}$) qui induit une variation de l'intensité de la force capacitive F_E . Ce changement local de F_E a une répercussion instantanée sur la valeur des paramètres de l'oscillation, la pulsation ω et la phase φ :

$$\Delta\omega = \frac{\omega}{2k} \frac{dF_E}{dz} \quad \text{I. 22}$$

$$\Delta\varphi = -\frac{Q}{k} \frac{dF_E}{dz} \quad \text{I. 23}$$

Où Q est le facteur de qualité du système. Une augmentation ou une diminution de la phase ($\Delta\varphi > 0$) ou de la fréquence de vibration ($\Delta\omega > 0$) nous permettra d'avoir une information sur le potentiel de surface sans pour autant pouvoir le mesurer directement comme dans le cas du KFM.

La méthode EFM du fait de sa sensibilité au gradient de force présente une meilleure résolution spatiale que le KFM mais nécessite une étape de modélisation pour remonter au potentiel de la surface [38, 39].

I.2.5 Injection de charges par la sonde AFM

Pour injecter des charges au sein d'un matériau diélectrique mince, la sonde AFM peut servir d'électrode locale. La procédure d'injection de charges suit les étapes suivantes (cf. Figure I. 17) : A) le balayage X et Y est arrêté lorsque l'utilisateur lance le programme d'injection et la sonde AFM est positionnée au-dessus de la zone à charger, B) diminution de la consigne d'amplitude proche de 0 et la pointe est mise au contact par le tube piézoélectrique de déplacement vertical Z, C) application d'une tension entre + et - 12 V pendant 1 ms à plusieurs secondes et la face arrière de l'échantillon est mise à la masse ; pour une tension négative appliquée entre la pointe et la surface, ce sont des électrons qui seront injectés, tandis que ce seront des trous dans le cas d'une tension positive, D) remise de la consigne d'amplitude à sa valeur initiale et le tube piézoélectrique de déplacement vertical remonte la pointe, E) le balayage reprend là où il avait été interrompu.

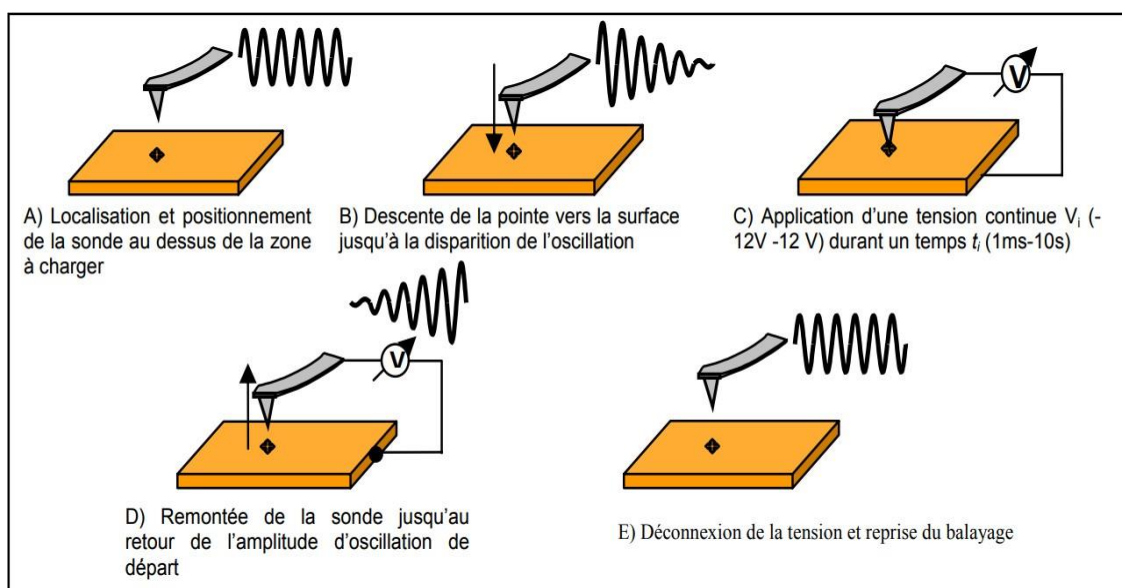


Figure I. 17 Description de la procédure d'injection de charges par l'AFM.

I.2.6 Comment détecter des charges injectées avec AFM ?

Les charges électriques piégées dans le matériau diélectrique peuvent induire une modification du potentiel de surface (KPFM) et de la force électrostatique (EFM). La densité de charges piégées ρ dans l'échantillon entraîne des variations dans la force mesurée F_ω en KPFM (cf. équation I. 19). Par exemple, en considérant une densité de charges ρ ponctuelle, F_ω devient :

$$F_\omega = \left| -\frac{dC}{dz} \left(V_{dc} + \frac{V_{CPD}}{e} \right) - \frac{\rho C}{4\pi\epsilon_0 z^2} \right| V_{ac} \sin(\omega t) \quad \text{I. 24}$$

Ainsi, en théorie la quantité ρ et le signe des charges sont accessibles. Toutefois, dans le cas d'une distribution spatiale non ponctuelle de charges, le calcul de la force électrostatique devient compliqué. De plus, le calcul de la capacité C dépend fortement de la géométrie de la sonde et de l'échantillon, ce qui rend la détermination de ρ difficile comme nous le verrons dans la prochaine section.

I.2.7 Mesures de charges par EFM et KFM

À partir de la mesure de la variation du signal de phase EFM, on constate, en ajustant le potentiel V_{dc} , qu'il est possible de déterminer si les charges piégées sont des trous ou des électrons. Pour illustrer tout ça, une expérience simple est présentée sur la Figure I. 18, où des électrons ont été injectés dans une couche fine de dioxyde de silicium (25 nm de SiO_2) déposée sur un substrat en silicium considéré comme métallique à température ambiante. Les paramètres d'injection sont une tension de -10 V appliquée sur la pointe pendant 10 s, puis pendant l'imagerie du signal de phase la sonde a été portée successivement à -2 V (partie inférieure de l'image) puis à +2 V (partie supérieure) [39]. La Figure I. 18 (a) représente la topographie, la tache claire sur l'échelle des couleurs est la hauteur apparente due aux forces électrostatiques ajoutées aux forces de surface habituelles. La Figure I. 18 (b) représente la phase du signal enregistrée à une distance de 100 nm de la surface. Lorsque la sonde est polarisée positivement, une tache sombre apparaît en phase ce qui correspond à un décalage de phase de -3° (par rapport à la valeur de la phase sur une zone non chargée). À l'inverse, quand la sonde est polarisée négativement, c'est-à-dire de même signe que les charges injectées, alors une tache claire apparaît ce qui correspond à un décalage de phase de $+2^\circ$. Les tailles de balayage font $1 \times 2 \mu\text{m}^2$ et l'écart maximum de phase avec la zone non chargée passe de $+2^\circ$ à -3° .

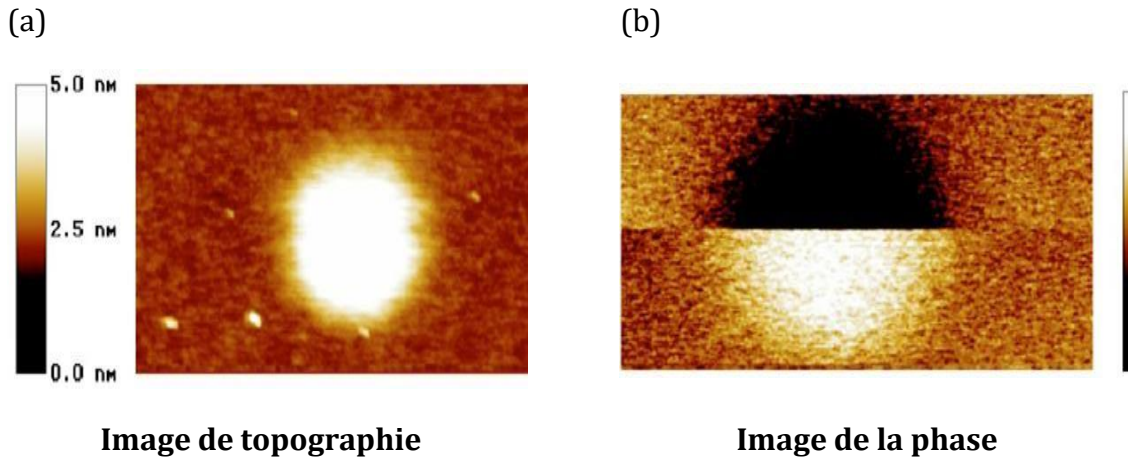


Figure I. 18 Imagerie de la topographie (a) et du signal de phase, (b) sur une couche de SiO_2 de 25 nm d'épaisseur [40].

Comme expliqué précédemment, la microscopie à sonde de Kelvin permet la mesure directe des modifications du potentiel de surface induites par les charges piégées. Une fois les charges injectées localement, la mesure du potentiel de surface induit se fait par KFM.

La Figure I. 19 présente les profils de potentiel KFM pour une injection dans différents matériaux d'Oxynitride de Silicium –SiON- synthétisés par procédé plasma [40, 41]. Le paramètre γ représente le ratio entre les débits de gaz ($\text{N}_2\text{O} / \text{SiH}_4$) lors de la synthèse des couches et est relié à la teneur en silicium dans la couche d'isolant SiON. Pour $\gamma = 100$ nous avons une couche proche de la silice et pour $\gamma = 5$ la teneur en silicium et la conductivité sont plus importantes [40]. Ces différences de propriétés électriques expliquent les différences observées au niveau des mesures KFM. En effet, la couche de composition proche de la silice retient très bien les charges électriques alors que la couche avec un $\gamma = 10$ présente un étalement considérable, interprété comme conséquence d'une conductivité latérale élevée.

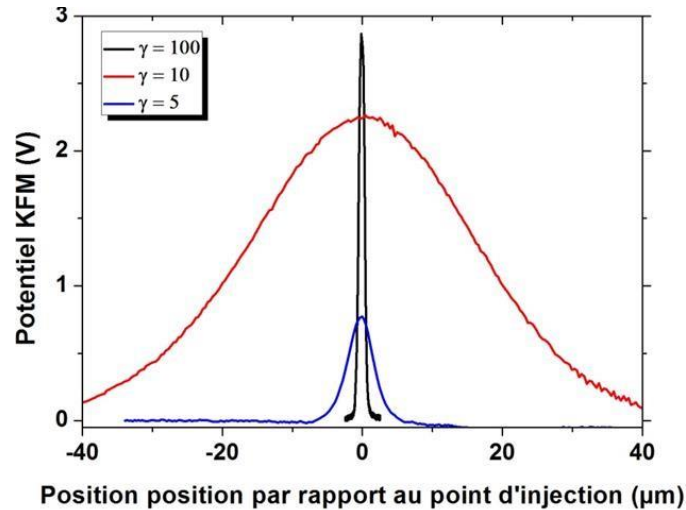


Figure I. 19 Profils du potentiel de surface KPFM mesurés sur des couches de SiON synthétisées par procédé plasma [41].

La Figure I. 19 montre que la largeur du profil du potentiel KFM reflète l'étalement latéral des charges piégées dans la couche du diélectrique. En effet, une faible largeur du profil KPFM indique que les charges injectées restent proches du point d'injection (étalement latéral faible). Lorsque la largeur du profil KFM devient plus importante, les charges injectées s'évalent rapidement dans la couche. Ces résultats illustrent bien que le potentiel de surface KPFM est sensible à la localisation des charges, et montre bien qu'à partir d'un profil du potentiel KPFM on peut qualitativement avoir une information sur l'étalement latéral des charges.

La méthode EFM permet de déterminer si les charges stockées dans le matériau diélectrique sont des électrons ou des trous, et la méthode KFM permet d'obtenir des informations sur l'étalement latéral de ces charges. Par contre, pour une détermination quantitative de charges à partir d'un signal EFM ou à partir d'une mesure du potentiel KPFM, une modélisation de l'interaction électrostatique sonde / diélectrique est nécessaire. Où la détermination de la capacité entre la sonde et la surface est le terme clé (cf. équation I. 17).

I.3 Modélisation de la force électrostatique

Pour une estimation quantitative de la force électrostatique entre une sonde AFM et la surface d'un échantillon, plusieurs études ont été réalisées. Ces études se basent sur des modèles analytiques où des simplifications géométriques sont nécessaires ou bien elles

mettent en œuvre des résolutions numériques. Les modèles développés utilisent des géométries simplifiées de la pointe, ils commencent de la plus simple forme à la plus fidèle : le plan, la sphère, le cône et le cône tronqué par une sphère. Le bras de levier est modélisé par un plan comme pour l'échantillon ou souvent n'est pas pris en compte dans la modélisation.

I.3.1 Le modèle plan-plan

Le modèle plan-plan [42] représente la sonde AFM et l'échantillon comme deux plans parallèles de surface S (cf. Figure I. 20).

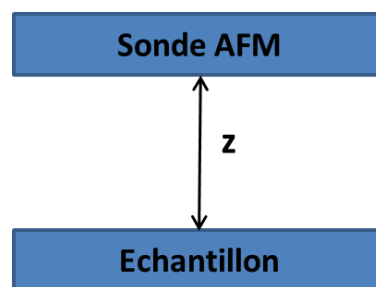


Figure I. 20 Géométrie du modèle plan/plan pour le calcul de la force électrostatique.

Pour la géométrie plan-plan, l'expression de la dérivée seconde de la capacité est donnée par l'équation suivante :

$$C'_{pp}(z) = 2\varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{S}{z^3} \quad \text{I. 25}$$

Où ε_r est la permittivité relative de l'air : $\varepsilon_r \approx 1$. Pour simplifier les expressions, elle ne sera plus mentionnée par la suite. La force électrostatique est alors exprimée par :

$$F_E(z) = \frac{\varepsilon_0 V^2 S}{2 z^2} \quad \text{I. 26}$$

Où V représente la différence de potentiel entre la sonde et la surface de l'échantillon.

I.3.2 Le modèle sphère-plan

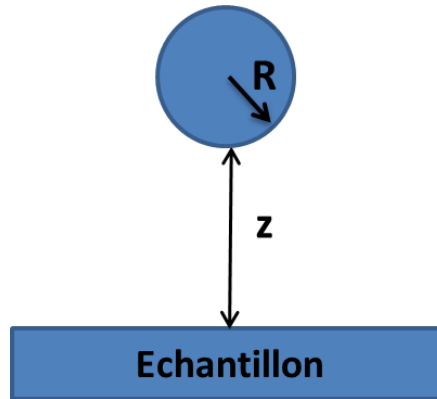


Figure I. 21 Géométrie du modèle sphère-plan pour le calcul de la force électrostatique.

La première dérivée de la capacité entre une sphère et un plan horizontal est donnée par E. Durand [42] :

$$C'_{sp}(z) = 4\pi\epsilon_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\coth(\alpha) - n \coth(n\alpha)}{\sinh(n\alpha)} \quad \text{I. 27}$$

$$\coth(\alpha) = 1 + \frac{z}{R} \quad \text{I. 28}$$

Dans le cas où $z \gg R$ l'expression de la dérivée première de C_{sp} s'écrit :

$$C'_{sp}(z) = -2\pi\epsilon_0 \left[\left(\frac{R}{z} \right)^2 + \left(\frac{R}{z} \right)^3 + \dots \right] \quad \text{I. 29}$$

L'expression de la dérivée seconde est alors donnée par :

$$C''_{sp}(z) = \frac{2\pi\epsilon_0}{z} \left[2 \left(\frac{R}{z} \right)^2 + 3 \left(\frac{R}{z} \right)^3 + \dots \right] \quad \text{I. 30}$$

Dans le cas où $z \ll R$ l'expression de la dérivée première de C_{sp} s'écrit :

$$C'_{sp}(z) = -2\pi\epsilon_0 \frac{R}{z} \quad \text{I. 31}$$

L'expression de la dérivée seconde est alors donnée par :

$$C''_{sp}(z) = 2\pi\epsilon_0 \frac{R}{z^2} \quad \text{I. 32}$$

À partir des expressions de la dérivée seconde de la capacité on obtient l'expression de la force électrostatique :

Pour le cas ou $z \gg R$:

$$F_E(z) = \pi \epsilon_0 \frac{R^2}{z^2} V^2 \quad \text{I. 33}$$

Pour le cas ou $z \ll R$:

$$F_E(z) = \pi \epsilon_0 \frac{R}{z} V^2 \quad \text{I. 34}$$

I.3.3 Le modèle cône parfait-plan

Dans le but de se rapprocher de la géométrie de la pointe AFM réelle, et toujours d'après E. Durand [42, 43], un modèle de la pointe sous forme d'un cône parfait a été développé (cf. Figure I. 22). Le cône est caractérisé par une hauteur H et un angle de demi-ouverture α .

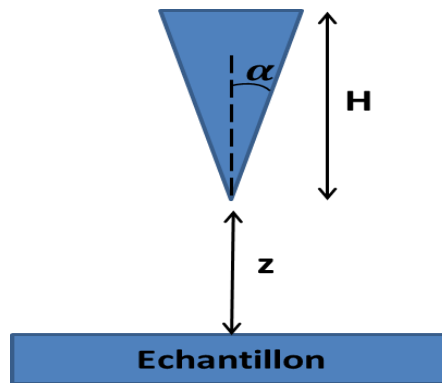


Figure I. 22 Géométrie du modèle cône parfait-plan pour le calcul de la force électrostatique.

Dans cette configuration, la première dérivée de la capacité d'interaction entre le cône et le plan est exprimée par :

$$C'_{cp}(z) = -2\pi \epsilon_0 K^2 \ln \frac{H}{z} \quad \text{I. 35}$$

$$K = \frac{1}{\ln \cot(\alpha/2)} \quad \text{I. 36}$$

Et sa dérivée seconde est :

$$C_{c_p}''(z) = 2\pi\epsilon_0 \frac{K^2}{z} \quad \text{I. 37}$$

Yokoyama [43] a modélisé le cas où $z \ll R$ par une dépendance logarithmique de la force entre un cône de longueur H et un plan comme le montre la formule suivante :

$$\frac{F}{E}(z) \approx AV^2 \ln\left(\frac{H}{z}\right) \quad \text{I. 38}$$

Où A représente une constante qui dépend de l'angle de demi-ouverture α du cône et de sa longueur H .

I.3.4 Le modèle cône tronqué-plan

Le modèle cône tronqué par une sphère représente approximativement la forme réelle de la pointe AFM. En effet, ce modèle prend en compte la forme tridimensionnelle de l'apex (cf. Figure I. 23). C'est le modèle le plus souvent utilisé dans la littérature pour modéliser la pointe AFM.

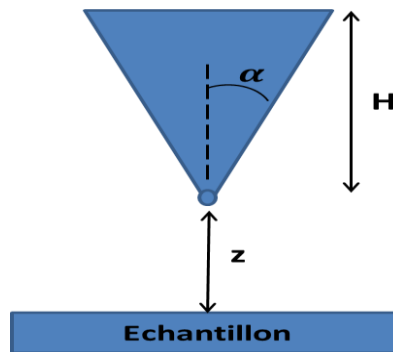


Figure I. 23 Géométrie du modèle cône tronqué-plan pour le calcul de la force électrostatique.

La capacité dans le cas de la géométrie cône tronqué-plan est plus compliquée, elle est expliquée en détails dans les travaux de S. Hudlet [44, 45]. Elle s'exprime comme la somme de la contribution de la fraction conique de la pointe et de la fraction sphérique de l'apex :

$$C'_{ctp}(z) \approx 2\pi\epsilon_0 \left[\frac{R^2(2z+R)}{z^2(z+R)^2} + K^2 \left(\frac{1}{z+R} + \frac{R}{\sin(\alpha)(z+R)^2} \right) \right] \quad \text{I. 39}$$

À partir des expressions de la dérivée seconde de la capacité, on obtient celle de la force électrostatique :

$$F_E(z) = V^2 \pi \epsilon_0 \left[\frac{R^2 (1 - \sin(\alpha))}{z(z + R(1 - \sin(\alpha)))} \right] + V^2 \pi \epsilon_0 K^2 \left[-1 + \ln \left(\frac{z + R(1 - \sin(\alpha))}{H} \right) + \left(\frac{R \cos^2(\alpha)}{\sin(\alpha)(z + R(1 - \sin(\alpha)))} \right) \right] \quad \text{I. 40}$$

Dans le cas des sondes AFM, le demi-angle d'ouverture du cône est faible, moins de 10°, et l'expression de la capacité se simplifie. Finalement, on arrive à l'expression suivante :

$$F_E(z) = V^2 \pi \epsilon_0 \left[\frac{R^2}{z(z + R)} \right] + K^2 \left[-1 + \ln \left(\frac{z + R}{H} \right) + \left(\frac{R}{\sin(\alpha)(z + R)} \right) \right] \quad \text{I. 41}$$

On peut vérifier qu'aux conditions limites on retrouve les expressions pour la géométrie sphère-plan (faible espacement) et la géométrie cône-plan (grand espacement). En effet, on trouve :

Pour le cas où $z \ll R$ (sphère - plan) :

$$C_{s-p}''(z) = 2\pi \epsilon_0 \frac{R}{z^2} \quad \text{I. 42}$$

Pour le cas où $z \ll R \ll H$ (cône - plan) :

$$C_{c-p}''(z) = 2\pi \epsilon_0 \frac{K^2}{z} \quad \text{I. 43}$$

Ces modèles permettent de calculer analytiquement la force électrostatique entre la sonde AFM et la surface d'un échantillon exempt de charges. Même s'ils sont relativement simplifiés, ils ont permis d'obtenir des informations importantes [46, 47] et en particulier la possibilité de détecter une charge unique pour des couches diélectriques extrêmement fines [48].

Pour essayer d'obtenir des résultats plus proches de la réalité, L. Borowik et al [49] ont développé un modèle basé sur le calcul de la force électrostatique par éléments finis sous le logiciel COMSOL. Ce modèle axisymétrique représente la pointe comme un cône tronqué par une sphère avec un rayon d'apex de 25 nm et un demi-angle d'ouverture du cône de 15°. Une couche diélectrique chargée est en forme de disque avec une hauteur fixée $h = 10$ nm posé sur un substrat métallique (les charges sont représentées comme un disque de diamètre 100 nm et de densité de charge uniforme). Le bras de levier est

représenté comme un disque du diamètre $2,9 \mu\text{m}$ et placé à une distance de $10 \mu\text{m}$ au-dessus du substrat (cf. Figure I. 24). Cette modélisation géométrique du bras levier ne représente pas la forme réelle de celui-ci mais il présente le même gradient de capacité qu'un bras de levier réel.

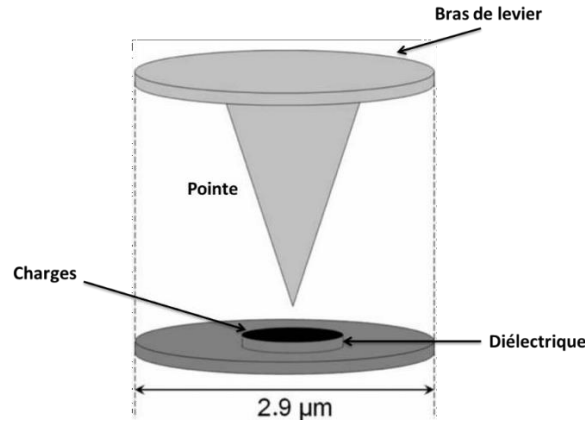


Figure I. 24 Schéma de la géométrie pointe-diélectrique en symétrie axiale [49]. La pointe et le substrat métallique sont mis à la masse et les conditions aux limites de Von Neumann ont été prises au bord du domaine de calcul.

Ce modèle, bien que simplifié reste largement utilisé et a fourni de très bons résultats. Grâce à ce modèle, trois forces sont calculées, F_{Cps0} la force capacitive entre le diélectrique non chargé et la sonde polarisée avec une tension V_{dc} , F_{Ip} la force issue de la charge image vue par la pointe mise à la masse et F_{Cps} la force capacitive entre la pointe et le diélectrique chargé lorsqu'une tension V_{dc} est appliquée. En tenant compte du fait que la mesure KFM n'est pas sensible aux charges images, ils en déduisent une expression du potentiel de surface en fonction de ces forces (dans le cas où les oscillations de la pointe sont négligées)

:

$$V_{CPD} = - \frac{V_{dc} (F_{Cps} - F_{Ip} - F_{Cps0})}{2(F_{Cps0} + F_{Clevier})} \quad \text{I. 44}$$

Avec $F_{Clevier}$ la force capacitive associée au bras de levier.

En utilisant le même modèle, et en prenant différentes hypothèses sur la localisation en profondeur (p) des charges E . Palleau et al [50] (cf. Figure I. 25) ont déterminé la valeur réelle de la densité surfacique de charges pour des motifs de charge carrés (tailles nominales allant de 100 nm à $10 \mu\text{m}$), écrit par l'AFM dans un film mince en PMMA de 100 nm d'épaisseur. Ce travail a révélé que, dans ces conditions, la densité surfacique de

charges est entre 1.5×10^{-3} et 3.8×10^{-3} C.m⁻². De plus, cette densité de ces motifs de charge ne dépend pas de leur taille.

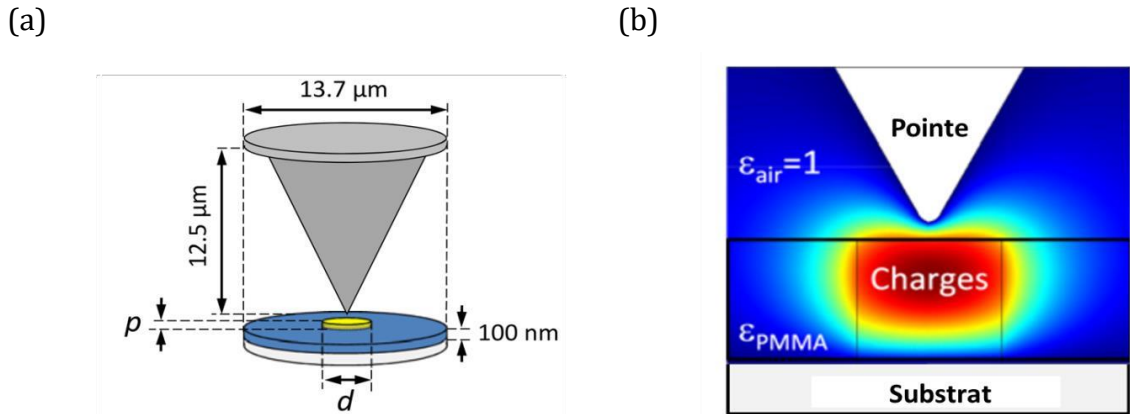


Figure I. 25 (a) Schéma de la géométrie sonde (pointe + cantilever) diélectrique (géométrie en symétrie axiale utilisée pour les simulations numériques), (b) Zoom sur les courbes iso-potentielles de la pointe sondant dans l'air un disque chargé dans un film de PMMA de 100 nm. La pointe et la surface inférieure du substrat sont mises à la masse [50].

Malgré les avantages que peuvent présenter ces modèles et les informations que l'on peut en obtenir, cela reste des modèles avec des géométries très simplifiées par rapport à la géométrie réelle de la sonde AFM. C'est pour cela que, A. Boularas [51] a développé dans sa thèse un modèle 3D à l'aide du logiciel éléments finis COMSOL Multi-physique®. Plusieurs formes de la pointe tronquée par une sphère ont été testées : conique, tétraédrique et pyramidale. Le diélectrique est représenté comme un parallélépipède vierge (cf. Figure I. 26).

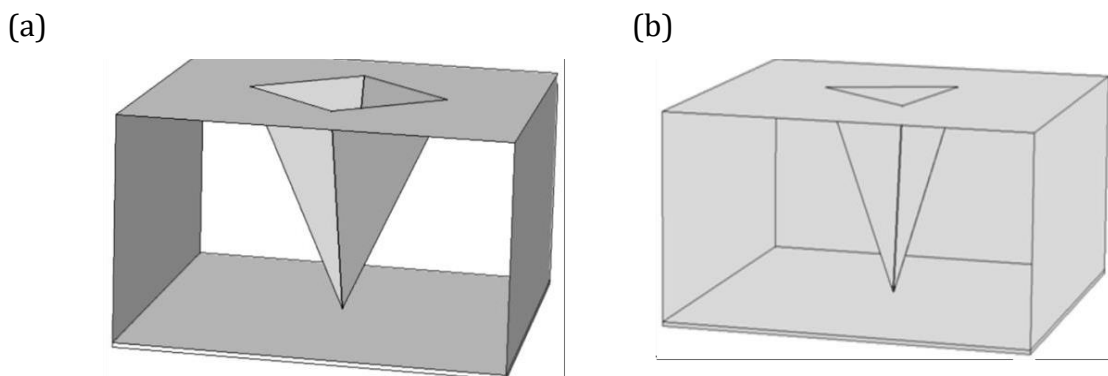


Figure I. 26 Géométrie d'étude pour le système pointe-diélectrique : (a) géométrie 3D de la pointe AFM sous forme de pyramide à quatre cotés tronquée, (b) géométrie 3D de la pointe AFM sous forme de tétraèdre tronqué.

Les courbes de forces électrostatiques, EFDCs, obtenues par ce modèle éléments finis pour les différentes formes de la pointe ont été comparées aux données expérimentales (cf. Figure I. 27). Une courbe de force, EFDC, représente la variation de la force électrostatique en fonction de la distance D séparant la pointe AFM du matériau diélectrique.

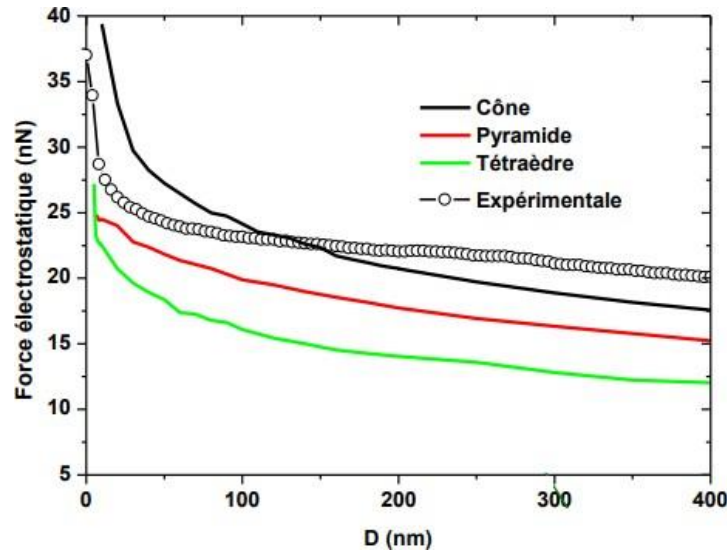


Figure I. 27 Comparaison des EFDCs pour une polarisation sous 20 V de la pointe
Comparaison entre les résultats issus de la simulation pour différentes géométries et les résultats expérimentaux.

On remarque bien que, comparé au résultat expérimental, le modèle de pointe conique surestime la force électrostatique pour D faible ; le modèle avec pointe pyramidale ne reproduit pas bien la forme de la courbe. Le modèle pointe tétraédrique donne les résultats d'EFDC les plus proches des résultats expérimentaux, en particulier sur l'allure de la courbe. De plus, un décalage (sous-estimation) de la force simulée est dû à l'absence de prise en compte du bras de levier.

Un deuxième modèle 3D basé sur les équations électromécaniques a été développé par A. Boularas et al [51] pour prendre en compte l'effet du bras de levier sur les EFDCs obtenues par la pointe seule (cf. Figure I. 28).

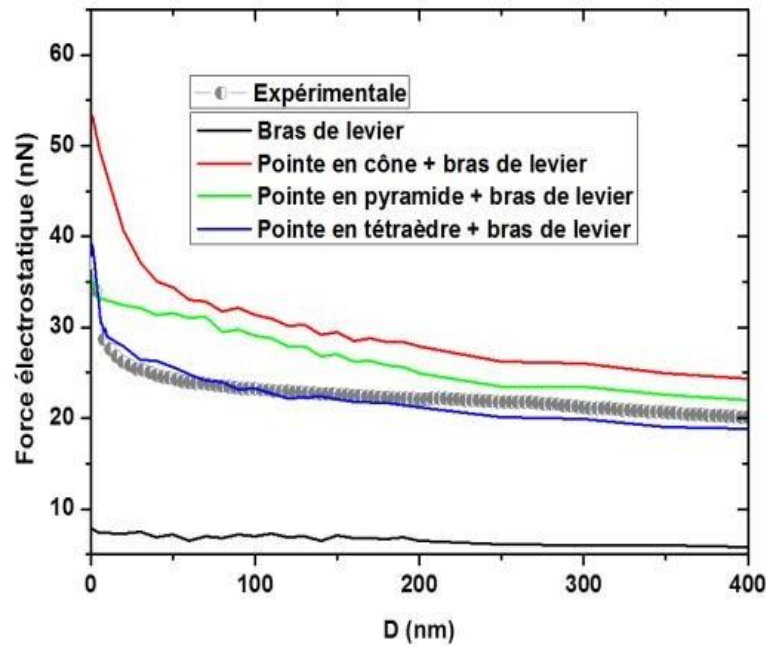


Figure 1.28 Courbes de force électrostatique obtenues avec le modèle électromécanique. Comparaison avec l'expérience.

Pour obtenir une courbe de force proche de la configuration réelle de la sonde AFM (pointe et bras de levier), le théorème de superposition a été appliqué : la somme des forces obtenues par le bras de levier seul et par la pointe est égale à la force électrostatique totale (pointe et bras de levier). Cette force totale est comparée aux résultats expérimentaux. Une bonne corrélation entre mesure et simulation (pointe tétraédrique + bras de levier) est constatée sur cette figure. De plus, ces résultats montrent que le bras de levier ne modifie pas la forme des EFDCs obtenues par la pointe seule, mais rajoute simplement une composante continue sur celles-ci.

Ces deux modèles doivent être généralisés aux cas de forces électrostatiques générées par des charges implantées dans le matériau diélectrique selon différentes profondeurs et extensions spatiales. Pour cela, il faut d'une part enrichir ces deux modèles en prenant en compte l'angle d'inclinaison de la sonde qui peut modifier l'intensité de la force pour un diélectrique chargé et, d'autre part, optimiser le temps de calcul. En effet, puisque l'inconvénient majeur de ces deux modèles est le temps de calcul très important dû à la disparité d'échelle des objets modélisés (entre le rayon de l'apex qui fait 25 nm et la taille totale de la pointe qui fait 10 μm) et le caractère tridimensionnel du système.

I.4 Conclusion

Lorsqu'un isolant est soumis à de fortes contraintes extérieures (champ électrique élevé, irradiation, efforts et frottements mécaniques importants, variation de température), il apparaît dans certaines régions de l'isolant un excès de charges électriques, qu'on appelle charge d'espace. Il semble aujourd'hui que les problèmes de baisse de performances des isolants sont liés à la présence et à l'accumulation de la charge d'espace. La compréhension des mécanismes d'injection et de rétention de charges dans les diélectriques est nécessaire pour améliorer la fiabilité de ces matériaux. Dans le cas de diélectriques d'épaisseur submicronique que l'on retrouve de plus en plus largement dans la réalisation de microsystèmes comme par exemple les RF-MEMS, les techniques classiques possèdent des résolutions spatiales bien supérieures aux dimensions des films étudiés. Il faut donc mettre au point de nouvelles méthodes de mesure de charges. Depuis une vingtaine d'années les méthodes dérivées de la microscopie à force atomique telles que l'EFM ou le KPFM ont largement été utilisées pour étudier l'injection et la rétention de charges dans des couches minces diélectriques. Ces deux méthodes permettent d'obtenir de nouvelles informations sur l'état de charge des diélectriques et sur leur capacité à stocker / dissiper les charges. Cependant, pour mesurer et connaître précisément la répartition spatiale de la charge en latéral et en profondeur, il faut en premier lieu établir une modélisation de la force électrostatique mise en jeu lors des mesures KEM et EFM entre la sonde AFM et le diélectrique chargé. En effet, plusieurs groupes de recherche ont développé des modèles analytiques ou mettent en œuvre des résolutions numériques pour parvenir à estimer la force électrostatique. Des simplifications de la géométrie de la sonde AFM et le diélectrique sont nécessaires. De nos jours, il semble que le modèle 3D élément finis développé par A. Boularas soit le modèle le plus fiable et le plus complet. Il est également celui qui approxime au mieux la géométrie réelle de la sonde AFM et le diélectrique. En effet, son modèle 3D d'une part via des équations électrostatiques permet d'estimer la force électrostatique entre une pointe tétraédrique et un matériau diélectrique exempt de charge, d'autre part via des équations électrotechniques permet d'estimer la force électrostatique entre la deuxième partie de la sonde (le bras de levier) et le même diélectrique. Enfin, la force électrostatique totale est la somme des deux forces obtenues par ces deux sous-modèles et qui est validée par des données expérimentales.

Dans le chapitre suivant, nous proposons une modélisation des courbes de force électrostatique afin de pouvoir estimer la répartition volumique des charges à partir de relevés de courbes de force.

Bibliographie

- [1] A. Von Hippel, "Electrical breakdown of solid and liquid insulators", *J. Appl. Phys.*, vol. 8, 815-832, 1937.
- [2] L. A. Dissado, J. C. Fothergill, "Electrical degradation and breakdown in polymers", London: Peter Peregrinus Ltd., 1992.
- [3] L. Dissado, G. Mazzanti, G. C. Montanari, "The incorporation of space charge degradation in the life model for electrical insulating materials", *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, vol. 2, 1147-1158, 1995.
- [4] A. Toureille, P. Nothinger, J. Castellon, S. Agnel, "Les charges d'espace : définition, historique, mesure dans Matériaux diélectriques pour le génie électrique", vol. 1, Paris: Hermes-Lavoisier, 151-164, 2007.
- [5] C. Laurent, "Diélectriques solides et charge d'espace", *Techniques de l'Ingénieur, Traité Génie électrique*, vol. D 2 305, 1-13, 1999.
- [6] R. Fournié, R. Coelho, "Diélectriques -bases théoriques", *Technique de l'ingénieur*, vol. D2300, 1-21, 2000.
- [7] J. O'Dwyer, "The Theory of electrical conduction and breakdown in solid dielectrics", Clarendon Press, 1973.
- [8] G. M. Rebeiz and J. B. Muldavin, "RF MEMS switches and switch circuits", *IEEE Microw. Mag.*, vol. 2, 59-71, 2001.
- [9] S. Lucyszyn, "Rf MEMS-an introduction", *Proc. Workshop on MEMS for RF and Optoelectronics Applications*, part of the Int. Wireless Design Conf., London, UK, vol. 3, 66 2002.
- [10] W. M. van Spengen, "Capacitive RF MEMS switch dielectric charging and reliability: a critical review with recommendations", *J. Micromech. Microeng.*, vol. 22, 23-074001, 2012.

- [11] Y. Zhang, J. Lewiner, C. Alquié and N. Hampton, "Evidence of strong correlation between space-charge buildup and breakdown in cable insulation", *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, vol. 3, 778–783, 1996.
- [12] A. Mogliori, J.D. Thompson, "A non-destructive acoustic electric field probe" *J. Appl. Phys.*, vol. 51, 479–485, 1980.
- [13] T. Takada, T. Sakai, "Measurement of electric fields at a dielectric/electrode interface using an acoustic transducer technique", *IEEE Trans. Electr. Insul.*, vol. 18, 619–628, 1983.
- [14] J. L. Franceschi, V. Haas, "Laser thermoacoustic modulation for space charge measurement", *Appl. Phys. Lett.*, vol 70, 2236-2237, 1997.
- [15] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber, E. Weibel, "Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy" *Phys. Rev. Lett.*, vol. 49, no. 1, 57–61, 1982.
- [16] S. A. Mann, G. Hoffmann, A. Hengstenberg, W. Schuhmann, I. D. Dietzel, "Pulse-mode scanning ion conductance microscopy--a method to investigate cultured hippocampal cells" *J. Neurosci. Methods*, vol. 116, no. 2, 113–7, May 2002.
- [17] D. Rugar, H. J. Mamin, P. Guethner, S. E. Lambert, J. E. Stern, I. McFadyen, T. Yogi, "Magnetic force microscopy: General principles and application to longitudinal recording media" *J. Appl. Phys.*, vol. 68, no. 3, 1169, 1990.
- [18] I. Giaever, "Energy Gap in Superconductors Measured by Electron Tunneling" *Phys. Rev. Lett.*, vol. 5, no. 4, 147–148, Aug. 1960.
- [19] G. Binnig, C. F. Quate, C. Gerber, "Atomic force microscopy" *Phys. Rev. Lett.*, vol. 56, no. 9, 930–934, 1986.
- [20] S. W. Howell, "Electrostatic force microscopy studies of nanoscale systems" Thesis of Purdue University, 2001.

- [21] W. Melitz, J. Shen, A. C. Kummel, S. Lee, "Kelvin probe force microscopy and its application" *Surf. Sci. Rep.*, vol. 66, no. 1, 1–27, Jan. 2011.
- [22] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber, E. Weibel, "Tunneling through a controllable vacuum gap" *Appl. Phys. Lett.*, vol. 40, no. 2, 178, 1982.
- [23] E. Betzig, J. K. Trautman, T. D. Harris, J. S. Weiner, R.L. Kostelak, "Breaking the Diffraction Barrier : Optical Microscopy" *Science*, Vol. 251, no. 5000, 1468-1470, 1991.
- [24] D. Van Labeke, *Technique d'ingénieur*, "Microscopie optique en champ proche," 862–878, 1998.
- [25] Digital Instruments Inc. 6780 Cortona Drive, Santa Barbara, California 93117.
- [26] J. N. Israelachvili, "Intermolecular and Surface Forces" 2nd editio. New York, 1– 599, 1992.
- [27] L. Nony, "Analyse de la microscopie de force dynamique : application à l'étude de l'A.D.N." Thèse de l'université de Bordeaux I, 2000.
- [28] N. Laboratorium and G. Eindhoven, "The London-van der Waals attraction between spherical particles," *Phys. IV*, vol. 10, no. 1, 1058–1072, 1937.
- [29] Y. Martin, D. W. Abraham, H. K. Wickramasinghe, "High-resolution capacitance measurement and potentiometry by force microscopy" *Appl. Phys. Lett.*, vol. 52, 13, p. 1103, 1988.
- [30] R. Wiesendanger, "Scanning probe microscopy and spectroscopy - Methods and applications" Cambridge university press, 1994.
- [31] B. Cappella, G. Dietler, "Force-distance curves by atomic force microscopy", *Surf. Sci. Rep.*, vol. 34, 1, 1999.

- [32] S. Gómez-Moñivas, L.S. Froufe-Pérez, A.J. Caamaño and J.J. Sáenz, "Electrostatic forces between sharp tip and metallic and dielectric surface", *Appl. Phys. Lett.*, vol. 79, num. 24, 2001.
- [33] M. Hrouzek, "Atomic force microscopy, modeling, estimation and control", thèse université de Joseph Fournier Grenoble, 2007..
- [34] Y. Martin, C. C. Williams, H. K. Wickramasinghe, "Atomic force microscope–force mapping and profiling on a sub 100-Å scale" *J. Appl. Phys.*, vol. 61, no. 10, p. 4723, 1987.
- [35] P. Gleyzes, P. K. Kuo, a. C. Boccara, "Bistable behavior of a vibrating tip near a solid surface" *Appl. Phys. Lett.*, vol. 58, no. 25, p. 2989, 1991.
- [36] S. V. Kalinin, A. Gruverman, "Scanning Probe Microscopy: Electrical and Electromechanical Phenomena at the Nanoscale". Springer, Berlin, Germany, 2007.
- [37] Y. Martin, D. W. Abraham, H. K. Wickramasinghe, "High-resolution capacitance measurement and potentiometry by force microscopy". *Appl. Phys. Lett.*, no 52, 1103–1105, 1988.
- [38] H. W. Hao, A. M. Baró, J. J. Sáenz "Electrostatic and contact forces in force microscopy" *J. Vac. Sci. Technol. B* 9, 1323, 1991.
- [39] C. A. Rezende, R. F. Gouveia, M. A. da Silva, F. Galembeck, "Detection of charge distributions in insulator surfaces", *J. Phys.: Condens. Matter*, vol 21, 263002, 2009.
- [40] K. Makasheva, B. Despax, L. Boudou, G. Teyssedre, "Dielectric layers for RF-MEMS switches: Design and study of appropriate structures preventing electrostatic charging", *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, vol. 19, 1195, 2012.
- [41] C. Villeneuve-Faure, L. Boudou, K. Makasheva, G. Teyssedre, "Towards 3D charge localization by a method derived from atomic force microscopy: the electrostatic force distance curve", *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol 47, 455302, 2014.

- [42] E. Durand. "Electrostatique", Masson et Cie, vol. 2, 1966.
- [43] H. Yokoyama, T. Inoue, J. Itoh, "Nonresonant detection of electric force gradients by dynamic force microscopy", *Appl. Phys. Lett.*, vol. 65, 3143, 1994.
- [44] S. Hudlet. "Etude des propriétés électrostatiques de surface par microscopie à force atomique : l'exemple de la triboélectricité", Thèse de doctorat, Université Denis Diderot, Paris 7, 1997.
- [45] S. Hudlet, M. Saint-Jean, C. Guthmann et J. Berger, "Evaluation of the capacitive force between an atomic force microscope tip and a metallic surface", *Eur. Phys. J.*, vol. B, vol. 2, 5-10, 1998.
- [46] C. Guillemot., "Etude et caractérisation des propriétés électriques de surfaces de semiconducteurs par AFM", thèse, ENST Paris, 2001.
- [47] T. Krauss and L. Brus., "Charge, polarizability, and photoionization of single conductor nanocrystals", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 83, 4840, 1999.
- [48] C. Schönenberger et S. Alvarado, "Observation of single charge carriers by force microscopy", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, 3162, 1990.
- [49] L. Borowik, K. Kusiaku, D. Theron and T. Melin, "Calculating Kelvin force microscopy signals from static force field", *Appl. Phys. Lett.*, vol. 96, 103119, 2010.
- [50] E. Palleau, L. Ressler, Ł. Borowik and T. Mélin, "Numerical simulations for a quantitative analysis of AFM electrostatic nanopatterning on PMMA by Kelvin force microscopy", *Nanotechnology*, vol. 21, 225706, 2010.
- [51] A. Boullaras, F. Baudoin, G. Teysse, C. Villeneuve-Faure and S. Clain "3D modelling of electrostatic interaction between AFM probe and dielectric surface: Impact of tip shape and cantilever contribution", *IEEE Trans. Dielectr. Insul.*, vol. 23, 713, 2016.

Chapitre II : Modélisation tridimensionnelle des EFDCs

II.1 Modélisation tridimensionnelle des EFDCs

II.1.1 Introduction

Comme nous l'avons montré dans la partie précédente, les courbes de force électrostatique sont un axe de recherche à privilégier pour évaluer la répartition volumique des charges électriques dans des matériaux diélectriques. La présente partie de ce manuscrit a pour but de proposer une nouvelle modélisation des EFDCs en fonction de la répartition volumique des charges.

En effet, un modèle tridimensionnel a été développé par A. Boularas et al [1] durant sa thèse sous le logiciel COMSOL pour estimer les courbes de force entre une sonde AFM (pointe et bras de levier) sous potentiel et un diélectrique exempt de charges dont la surface inférieure est reliée à la masse. Ce modèle est fait de deux sous-modèles, un modèle électrostatique pour la géométrie pointe seule avec le diélectrique et un modèle électromécanique pour la géométrie bras de levier seul avec le même diélectrique. Cette dissociation de la géométrie avait pour but d'éviter d'avoir des objets multi-échelles qui peuvent rendre la construction du maillage compliquée à réaliser et coûteuse en termes de temps de calcul.

En se basant sur ce modèle, ils se sont focalisés dans un premier temps sur la géométrie de la pointe AFM. À partir d'images réelles de la pointe AFM, trois géométries ont été testées : conique, pyramidale et tétraédrique. Pour chaque pointe, les EFDCs simulées grâce au modèle électrostatique ont été comparées aux résultats expérimentaux montrant que c'est la pointe tétraédrique qui donne les résultats les plus en phase avec les données expérimentales. Les valeurs de la force simulée sont inférieures d'une dizaine de nN à celles de la force mesurée, ce qui est en accord avec la non prise en compte du bras de levier. C'est pour cela qu'ils ont intégré le bras de levier à leur modèle en couplant les équations électromécaniques. Ce modèle permet d'estimer la force électrostatique induite sur le bras de levier. Les résultats ont montré qu'il rajoute seulement une composante continue. La force électrostatique totale est obtenue en appliquant le théorème de superposition : somme de la force induite sur la pointe et de la force induite sur le bras de levier. Les résultats montrent une bonne corrélation entre cette force et la force mesurée, ce qui a permis de valider leur modèle 3D EFDC.

Le modèle EFDC développé par A. Boularas et al [1] doit être généralisé au cas de forces générées par des charges implantées dans le diélectrique. Dans un premier temps nous allons parfaire la géométrie existante en prenant en compte l'angle d'inclinaison (θ) de la sonde AFM pour s'approcher au mieux d'une sonde réelle. Dans un deuxième temps, nous allons améliorer le temps de calcul de ce modèle en optimisant la structure du maillage de la géométrie d'étude. En effet, les dimensions géométriques des différentes parties du système présentent un aspect multi-échelles malgré la séparation de la pointe et du bras de levier (avec hauteur de la pointe égale à 10 μm et le rayon de l'apex égal à 25 nm). Cette disparité implique des tailles de cellules très différentes conduisant à un maillage fortement non régulier avec des ratios entre grandes mailles et petites mailles allant jusqu'à plusieurs millions.

Finalement, nous allons adapter ce modèle aux cas de courbes de force obtenues par une électrode enfouie dans le diélectrique, sous potentiel, à différentes profondeurs et largeurs. Cette étape est primordiale pour d'une part valider ce modèle avec des données expérimentales sur des géométries et conditions aux limites proche de la réalité du problème à résoudre : les charges sont dans un premier temps assimilées à des électrodes enfouies sous potentiel électrique. D'autre part pour estimer la sensibilité des EFDCs à la répartition en profondeur et en latéral d'une l'électrode sous potentiel.

II.1.2 Géométrie d'étude

La géométrie d'étude est constituée de deux entités : la sonde AFM et un diélectrique d'épaisseur nanométrique.

II.1.2.1 La sonde AFM (pointe + bras de levier)

La Figure II. 1 présente la forme réelle de la sonde AFM. La pointe est accrochée à l'extrémité d'un bras de levier.

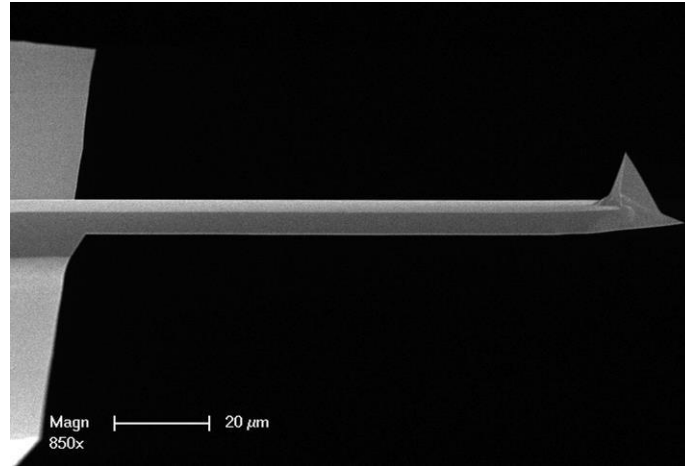


Figure II. 1 Sonde AFM (SCM-PIC-V2-Bruker).

SCM-PIC-V2 (cf. Figure II. 1) est un type de sonde AFM fourni par Bruker. Bruker est le principal fabricant de sondes AFM pour tous les types d'applications et de modes AFM. Pour modéliser la pointe AFM en 3D, nous avons repris les travaux de A. Boularas et al [1] en construisant une pointe tétraédrique tronquée par une sphère sous le logiciel SolidWorks (cf. Figure II. 2 (a)). L'extrémité du tétraèdre est un demi-sphère de rayon R_c (apex). Le bras de levier est modélisé comme une poutre en utilisant aussi SolidWorks pour le concevoir (cf. Figure II. 2 (b)). Pour le tétraèdre et la poutre, les arrêtes ne sont pas saillantes mais arrondies par un congé qui permet de limiter les effets de renforcement de champ non représentatifs de la réalité, mais aussi permet d'assurer une meilleure continuité entre le tétraèdre et l'apex.

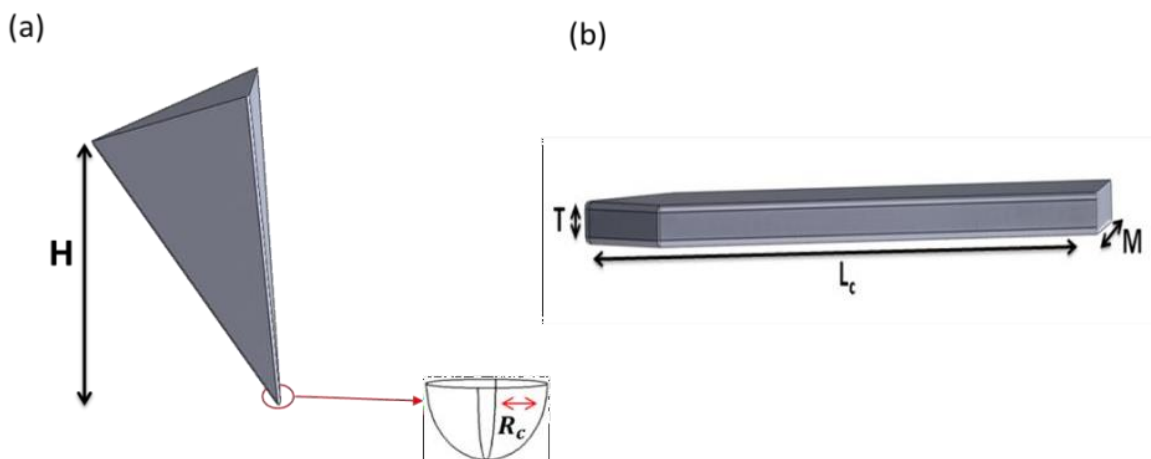


Figure II. 2 Modèle géométrique de la sonde AFM conçu sous SolidWorks : (a) la pointe sous forme tétraédrique tronquée par une demi-sphère (apex), (b) le bras de levier sous forme d'une poutre.

Les dimensions géométriques, les matériaux de revêtement de la pointe et du bras de levier sont fournis par Bruker et sont présentés sur le Tableau II. 1 :

Tableau II. 1 Propriétés géométriques et physiques de la sonde AFM.

Paramètre	Valeur
Longueur de la pointe (H) [μm]	10
Rayon de l'apex de la pointe (R_c) [nm]	25
Longueur du bras de levier (L_c) [μm]	450
Largeur du bras de levier (M) [μm]	50
Epaisseur du bras de levier (T) [μm]	1.5
Constante de raideur (k) [N.m^{-1}]	0.36
Matériau de revêtement de la sonde AFM	Pt-Si
Angle d'inclinaison de la sonde (θ) [$^\circ$]	16

II.1.2.1 Le diélectrique

La deuxième géométrie utilisée dans ce modèle est le diélectrique submicronique. Le diélectrique est modélisé comme un parallélépipède d'épaisseur z et une permittivité relative ϵ (cf. Figure II. 3).

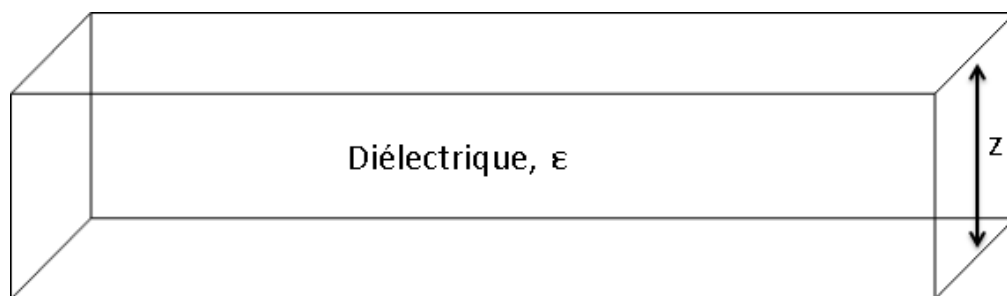


Figure II. 3 Géométrie diélectrique du diélectrique ($z \approx 100 \text{ nm}$).

La géométrie d'étude complète qui représente le système sonde AFM-diélectrique est séparée en deux géométries voir la Figure II. 4 (a) et (b).

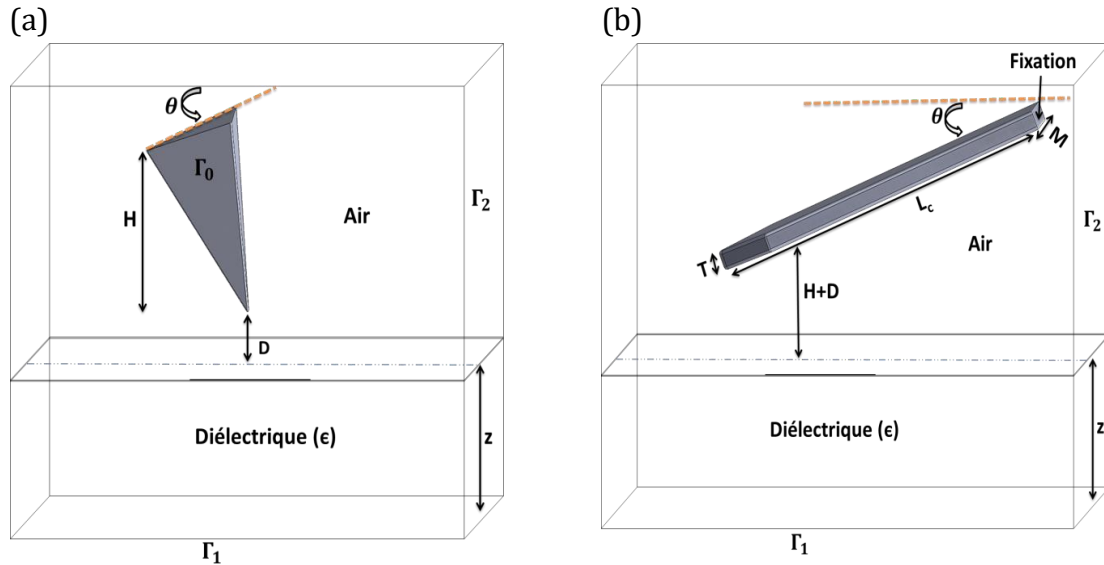


Figure II. 4 Géométrie d'étude pour le système sonde AFM-diélectrique : (a) pointe-diélectrique, où la pointe est située à une distance D de celui-ci, (b) bras de levier-diélectrique, où le bras de levier est placé à une distance $H+D$. θ l'angle d'inclinaison de la sonde AFM.

II.1.3 Les équations de base et les conditions aux limites

Les équations de base pour simuler les EFDCs, pour les deux géométries présentées ci-dessus, sont de deux catégories : les équations électrostatiques et les équations électromécaniques, nous détaillons ci-après.

II.1.3.1 Les équations électrostatiques (pointe-diélectrique)

La première étape pour simuler des EFDCs pour la géométrie pointe-diélectrique consiste à déterminer la distribution spatiale du potentiel électrique V dans l'air et dans le diélectrique. Cette détermination nécessite la résolution de l'équation de Poisson (cf. équation II. 1) dans le domaine (air + diélectrique), en prenant en compte les conditions aux limites sur l'interface Γ (cf. Figure II. 4 (a)). Le bord Γ est décomposé en trois parties Γ_0 , Γ_1 et Γ_2 . Sur les bords Γ_0 et Γ_1 une condition aux limites de type Dirichlet est imposée. Cette condition consiste à imposer la valeur du potentiel électrique sur une partie des frontières du domaine étudié. Dans notre cas, la première condition est portée par le bord Γ_0 (la surface de la pointe), elle permet d'imposer un potentiel électrique constant avec $V = V_0$ (cf. équation II. 2). La seconde condition portée par le bord Γ_1 permet de connecter la partie inférieure du matériau diélectrique à la masse (cf. équation II. 3).

Sur le bord Γ_2 une condition aux limites de type Neumann est introduite. Cette condition est utilisée pour supposer un champ électrique E nul à l'infini ce qui suppose que notre géométrie soit suffisamment grande (cf. équation II. 4).

$$\frac{d^2V(x, y, z)}{dx^2} + \frac{d^2V(x, y, z)}{dy^2} + \frac{d^2V(x, y, z)}{dz^2} = 0 \quad \text{II. 1}$$

$$V = V_0 \text{ sur } \Gamma_0 \quad \text{II. 2}$$

$$V = 0 \text{ sur } \Gamma_1 \quad \text{II. 3}$$

$$\frac{dV}{dn} = 0 \text{ sur } \Gamma_2 \quad \text{II. 4}$$

Où n le vecteur normal unitaire au bord Γ_2 .

Le calcul de la force électrostatique F est possible après la résolution de l'équation de Poisson et l'obtention d'une distribution précise du champ électrique E (cf. équation II. 5). Cette force électrostatique est donnée par l'intégration du tenseur de Maxwell [2] suivant le vecteur normal n par :

$$\vec{E} = -\frac{dV}{dx}\vec{i} - \frac{dV}{dy}\vec{j} - \frac{dV}{dz}\vec{k} \quad \text{II. 5}$$

$$F_{\text{pointe}} = \iint_{\Gamma_0} \frac{\epsilon_0}{2} \vec{E} \cdot \vec{n} \cdot ds \quad \text{II. 6}$$

Où ϵ_0 la permittivité du vide.

II.1.3.2 Les équations électromécaniques (bras de levier-diélectrique)

Les conditions aux limites sont les suivantes : en ce qui concerne la partie électrique, le bras de levier est soumis au même potentiel que la pointe V_0 et la face arrière du diélectrique Γ_1 est à la masse. Pour la partie mécanique, l'extrémité du bras de levier est soumise à une contrainte de fixation (cf. Figure II. 4 (b)).

Les équations électromécaniques sont utilisées pour simuler les EFDCs pour la géométrie bras de levier-diélectrique. Ces équations sont fondées sur l'équation Poisson pour la partie électrique (cf. équation II. 1) et sur les équations de la mécanique qui sont détaillées dans ce qui suit :

$$\nabla \cdot \sigma = F \text{ sur } \Omega \quad \text{II. 7}$$

Avec σ le tenseur de contraintes et F la force électrostatique exercée sur le volume. Le tenseur de contraintes doit être continu à travers les interfaces entre l'air et le bras de levier :

$$n_1(\sigma_{air} - \sigma_{levier}) = 0 \quad \text{II. 8}$$

Avec n_1 le vecteur normal à la surface qui est orienté vers l'extérieur du bras de levier.

Le calcul de la force électrostatique est obtenu par multiplication de la déflexion du bras de levier Δz par la constante de raideur k :

$$F_{bras} = k \cdot \Delta z \quad \text{II. 9}$$

La force totale est obtenue en appliquant le théorème de superposition, donc en additionnant la force obtenue par la pointe seule et par le bras de levier seul.

II.1.4 Maillage

Afin de résoudre numériquement les équations électrostatiques et les équations électromécaniques dans le domaine (air et diélectrique) et afin de déterminer la force électrostatique, la méthode des éléments finis, Finite Element Method (FEM) a été appliquée pour discrétiser ces équations. Une fois discrétisées, dans le domaine d'étude (air + diélectrique) par le logiciel COMSOL, on obtient un système d'équations algébriques. Avec ce système, la FEM permet de déterminer une approximation des solutions de ces équations et donne donc une solution approchée. Pour discrétiser le problème il convient donc de découper les différents objets constituant nos géométries en cellules auxquelles on associe des fonctions de base appelée les éléments finis. Cette étape de découpage est appelé le maillage. Pour la FEM, le maillage est une étape primordiale, car l'erreur numérique est directement liée à sa qualité. Le calcul s'effectuant de manière itérative, la qualité du maillage est un paramètre essentiel car elle conditionne la convergence du calcul global. De manière générale, un maillage très fin augmente la précision de la solution mais rallonge le temps de calcul.

Quand il s'agit de mettre en place et de résoudre un problème avec les éléments finis, le maillage est l'une des étapes les plus coûteuses en mémoire. Notre géométrie d'étude présente une grande disparité entre ses composants : par exemple entre la hauteur de la pointe ($\approx 10 \mu\text{m}$) et le rayon de l'apex ($\approx 25\text{nm}$) pour la géométrie pointe-diélectrique ou encore entre l'épaisseur du diélectrique ($\approx 100 \text{nm}$) et la longueur du bras de levier ($450 \mu\text{m}$) pour la géométrie bras de levier-diélectrique. Cette disparité d'échelle conduira à générer trop de cellules si on applique un maillage standard sous COMSOL et conduira donc à une trop forte augmentation du temps de calcul.

La modélisation des géométries à grande disparité d'échelle est l'une des tâches les plus difficiles pour un numéricien des éléments finis. Dans cette partie on détaillera uniquement le maillage utilisé pour la géométrie pointe-diélectrique.

Un maillage par défaut a été créé automatiquement en utilisant l'option "Default Physique-Controlled Mesh". Ce type de maillage utilise des cellules de type tétraédrique avec une taille extrêmement fine (de $2 \cdot 10^{-9} \text{m}$ pour la taille minimale à $2 \cdot 10^{-7} \text{m}$ pour la taille maximale avec un taux de croissance des éléments fixé à 1.3).

Le maillage résultant pour la géométrie pointe-diélectrique se compose d'environ 3102144 éléments (cf. Figure II. 5). Le temps de calcul nécessaire pour résoudre les équations électrostatiques avec ce maillage pour $D = 20 \text{nm}$, $V_0 = 30 \text{V}$, $z = 500 \text{nm}$ et une permittivité relative $\epsilon = 7.5$ est d'environ 396 secondes (dont 298 secondes juste pour générer le maillage). Pour réaliser nos simulations sous COMSOL Multiphysics, nous avons utilisé un ordinateur Intel cores™ i7-2600 de 8 Go de mémoire vive, doté de quatre cores cadencés à 3.4 GHz. Pour les calculs, 18.8 Go de la mémoire physique et 19.39 Go de la mémoire virtuelle ont été consommées en plus.



Figure II. 5 Maillage par défaut extrêmement fin pour la géométrie pointe-diélectrique.

Les figures suivantes exposent les résultats du modèle électrostatique obtenus en utilisant ce type de maillage, la Figure II. 6 montre la distribution spatiale du potentiel électrique et la Figure II. 7 montre une courbe de force.

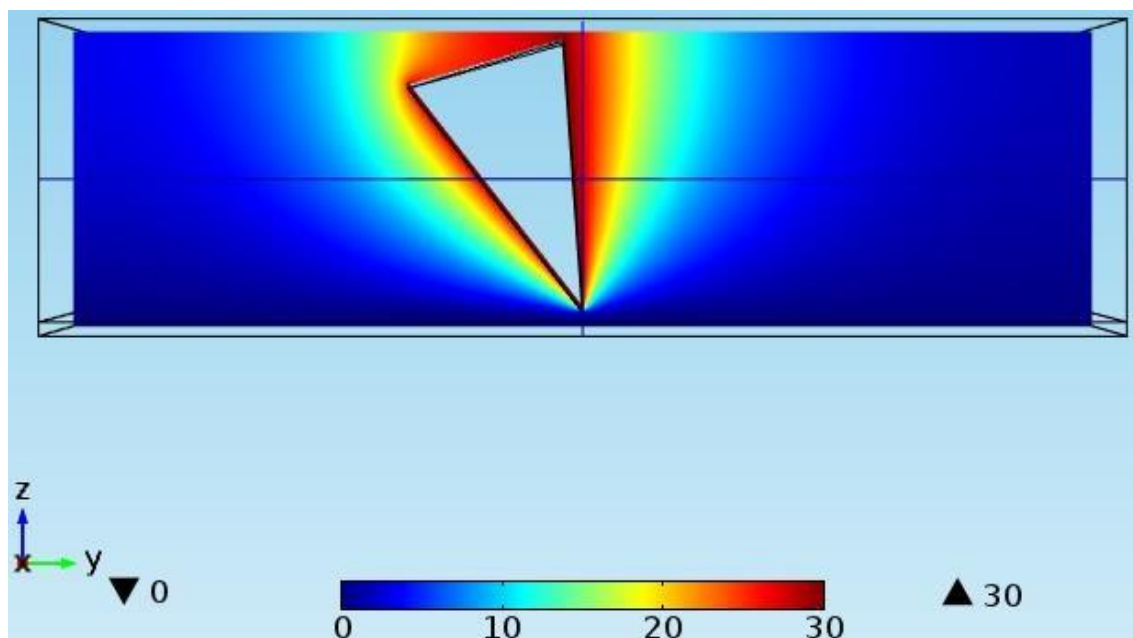


Figure II. 6 La distribution du potentiel électrique V (en Volt) pour $D = 20$ nm, $V_0 = 30$ V, $z = 500$ nm et $\epsilon = 7.5$.

La simulation d'une courbe de force (EFDC) est réalisée en faisant varier la distance D de 0 nm à 200 nm avec un pas de 4 nm (cf. Figure II. 7). Le temps de calcul pour obtenir cette courbe de force est d'environ 20196 secondes soit 5 heures et 36 minutes (51 points \times 396 secondes). Une courbe de force peut être représentée par trois paramètres : la force maximale pour $D = 0$, une courbure et une asymptote horizontale à l'infini lorsque la pointe est suffisamment éloignée de la surface. Cependant, quelle que soit la configuration considérée, cette asymptote reste proche de 0 [3].

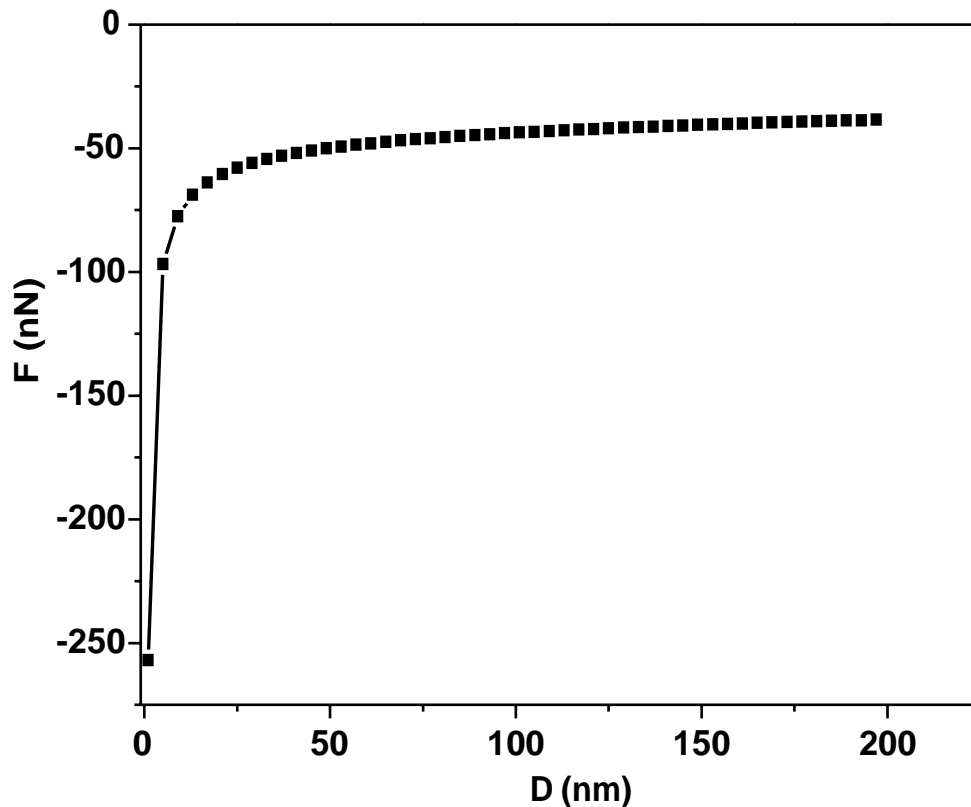


Figure II. 7 EFDC : force électrostatique F en fonction de la distance pointe-diélectrique D pour $V_0 = 30$ V, $z = 500$ nm et $\epsilon = 7.5$.

Afin de réduire le temps de calcul nécessaire pour simuler une courbe de force, il est nécessaire d'optimiser le maillage en utilisant un maillage contrôlé par l'utilisateur au lieu d'un maillage contrôlé par le simulateur. L'idée est que les régions où les interactions électrostatiques sont très élevées doivent être maillées finement et celles représentant des interactions faibles doivent être maillées plus grossièrement. Selon l'équation II. 6), le champ électrique est le paramètre crucial régissant la force d'interaction électrostatique dans la microscopie en champ proche. Par conséquent, nous avons besoin connaître la

distribution du champ électrique E pour repérer les zones où les interactions électrostatiques sont plus élevées pour les mailler plus finement.

La Figure II. 8 montre la distribution spatiale du champ électrique obtenue en utilisant le maillage par défaut. A première vue, le champ électrique est quasiment nul sur toute la géométrie, mais lorsque l'on zoome autour de l'apex, le champ électrique s'intensifie (cf. Tableau II. 2).

Le Tableau II. 2 montre bien que la valeur maximale du champ électrique E_{max} , ($1.88 \times 10^9 \text{ kV.m}^{-1}$), est atteinte sur le sommet de la pointe, ce qui confirme que la force électrostatique est dominée par les contributions de l'apex de la pointe.

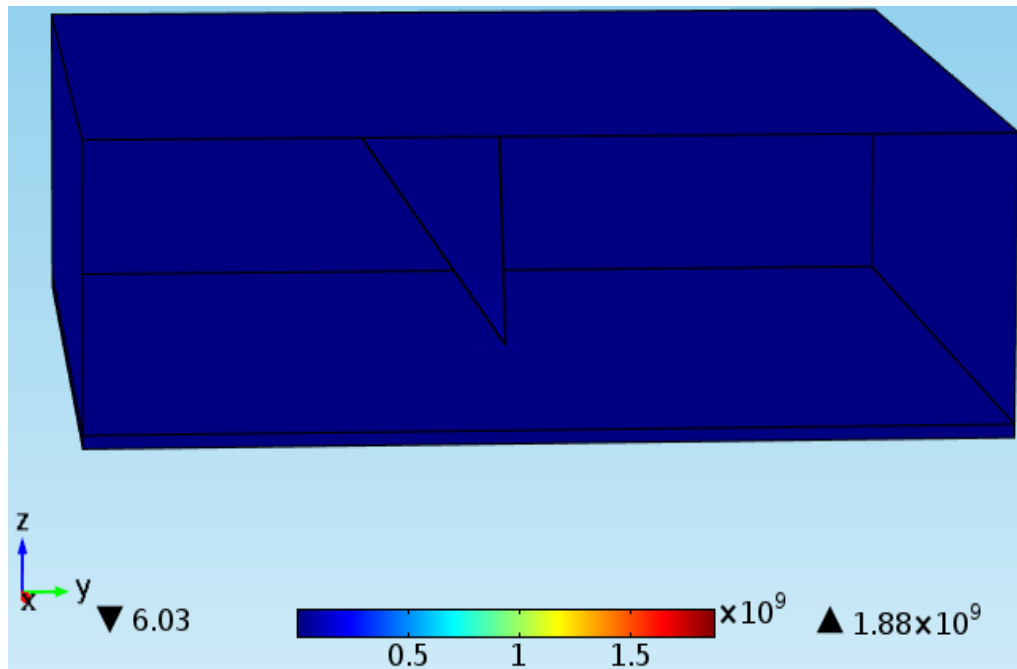
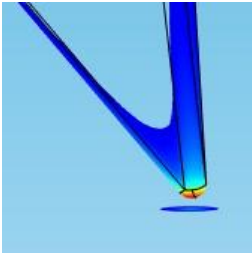
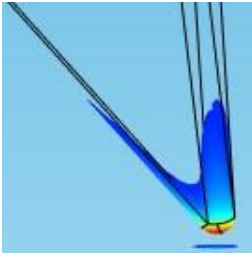
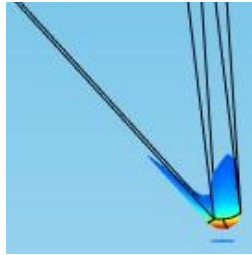
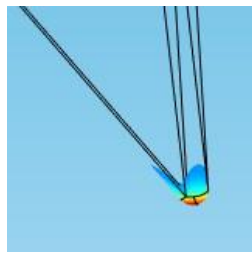

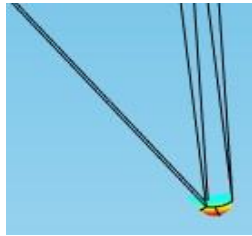
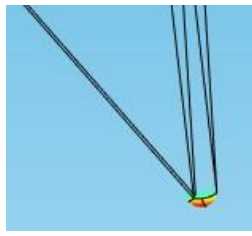



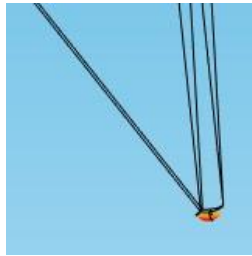



Figure II. 8 La distribution du champ électrique pour $D = 20 \text{ nm}$, $V_0 = 30 \text{ V}$, $z = 500 \text{ nm}$ et $\epsilon = 7.5$.

Afin de sélectionner les régions où le champ électrique est fort, nous avons défini un seuil, qui est ici d'environ 10% de la norme d' E_{max} (cf. Tableau II. 2).

Pour adapter notre maillage, on considère que dans les régions où les valeurs du champ électrique sont supérieures à ce seuil, les interactions électrostatiques sont fortes, sinon les interactions sont faibles.

Tableau II. 2 Les régions où le champ électrique est élevé.

			
$E \geq 0.1 E_{max}$	$E \geq 0.15 E_{max}$	$E \geq 0.20 E_{max}$	$E \geq 0.25 E_{max}$
			
$E \geq 0.30 E_{max}$	$E \geq 0.35 E_{max}$	$E \geq 0.40 E_{max}$	$E \geq 0.45 E_{max}$
			
$E \geq 0.50 E_{max}$	$E \geq 0.55 E_{max}$	$E \geq 0.60 E_{max}$	$E \geq 0.65 E_{max}$

Pour déterminer les dimensions spatiales de la zone à fort champ électrique on a tracé la distribution du champ sur la pointe en fonction de l'axe des X et de l'axe des Z. Cette zone correspond à la région délimitée par les lignes rouges sur les Figure II. 9 (a) et (b).

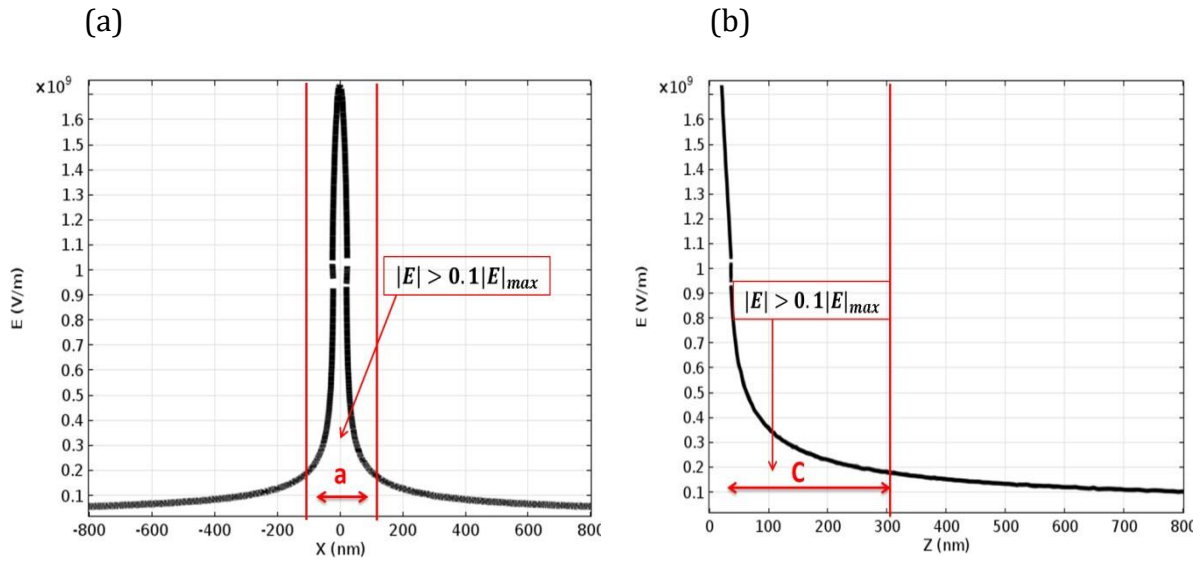


Figure II. 9 Le champ électrique sur la surface de la pointe, pour $D = 20 \text{ nm}$, $V_0 = 30 \text{ V}$, $z = 500 \text{ nm}$ et $\epsilon = 7,5$: (a) le long de l'axe des X, (b) le long de l'axe Z.

Cette zone peut être représentée par un cylindre de rayon égal à $\frac{a}{2}$ (100 nm) et une hauteur égale à C (300 nm). Ce domaine cylindrique est ajouté à notre géométrie sans aucune condition aux limites. Ce nouveau bloc est maillé très finement tandis que le reste de la géométrie est maillé grossièrement (pour les mailles grossières $1.9 \times 10^{-6} \text{ m}$ pour la taille minimale de l'élément et $2.6 \times 10^{-5} \text{ m}$ pour la taille maximale de l'élément avec le taux de croissance de 1.4) voir Figures II.10.

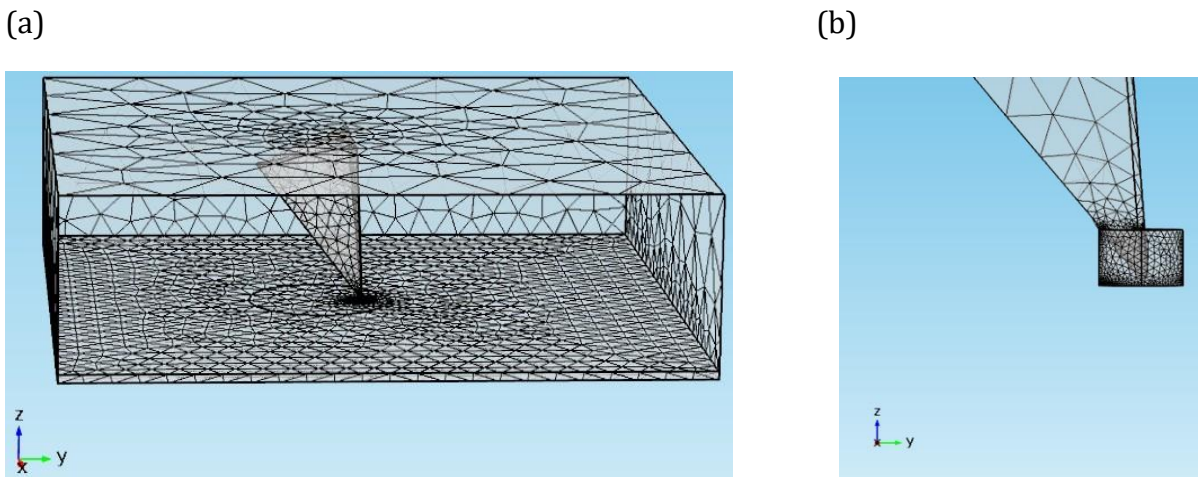


Figure II. 10 (a) Le maillage optimisé pour la géométrie pointe-diélectrique, (b) zoom sur le maillage autour de l'apex.

Pour illustrer la précision du maillage optimisé, on a comparé une courbe de force obtenue avec ce maillage et celle obtenue avec le maillage par défaut (cf. Figure II. 11). La norme L^2 relative à l'erreur entre ces deux courbes est d'environ 0.0408 (4%), ce qui est largement acceptable. Ainsi, pour les prochaines simulations ce seuil de 10 % d' E_{max} est conservé.

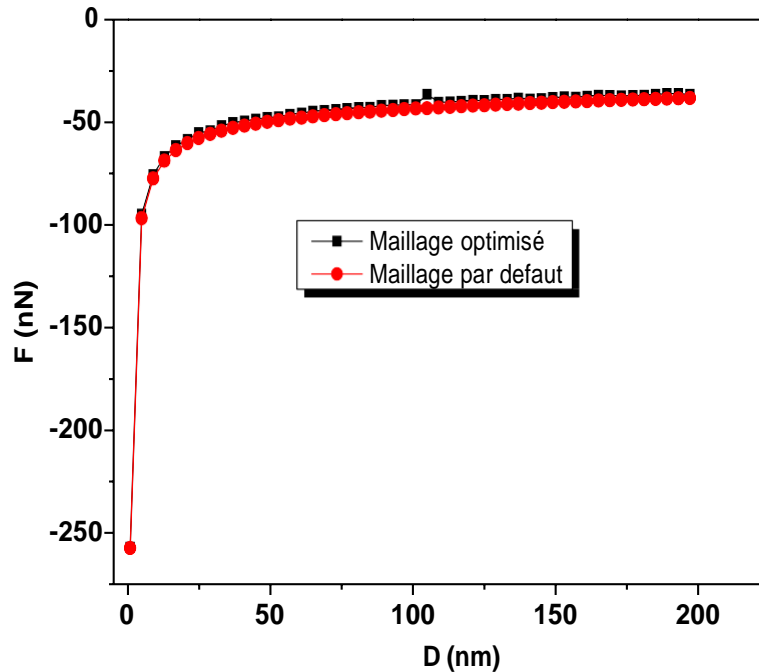


Figure II. 11 Comparaison des courbes de force obtenues par les deux maillages.

Le Tableau II. 3 suivant compare les temps de calcul respectifs (pour $D = 20$ nm) pour le maillage optimisé et pour le maillage par défaut.

Tableau II. 3 Comparaison en termes d'efficacité de calcul entre les deux maillages.

Type de maillage	Nombre d'éléments	Temps de maillage (s)	Temps de calcul (s)	Mémoire Physique (GB)	Mémoire Virtuelle (GB)
Optimisé	254879	2.71	11.71	10	11
Par défaut (extrêmement fin)	3102144	298	396	18.8	19.39

Ce tableau montre bien que le temps de calcul et la mémoire totale sont respectivement divisés par 33 et par 2 en utilisant le maillage optimisé au lieu d'un maillage généré automatiquement par le logiciel COMSOL. Ainsi avec le maillage optimisé, le modèle électrostatique est à la fois précis et performant.

II.1.5 Influence du potentiel sur les EFDCs

Le maillage pour la géométrie pointe-diélectrique étant optimisé et le temps de calcul réduit, on s'intéresse maintenant à l'influence du potentiel appliqué sur la pointe, V_0 sur les courbes de force.

Les courbes de force en fonction du potentiel appliqué sur la pointe (10 V, 20 V et 30 V) sont présentées sur la Figure II. 12 (a). Comme prévu, les valeurs de la force électrostatique augmentent lorsque le potentiel V_0 augmente. La Figure II. 12 (b) représente les courbes de force normalisées en calculant le rapport de la force électrostatique pour chaque distance D sur la force maximale F_{max} . On constate que le potentiel V_0 n'a aucune influence sur la courbure des courbes de force. La Figure II. 12 (c) montre que la force maximale F_{max} augmente linéairement avec le carré du potentiel V_0 . Comme la force maximale F_{max} est linéaire avec V_0^2 , on peut écrire :

$$F_{max}(V_0) = \left(\frac{V_0}{10}\right)^2 \times F_{max}(10) \quad \text{II. 10}$$

Comme indiqué précédemment, une courbe de force peut être représentée par sa force maximale qui est atteinte en $D = 0$ et sa courbure. Ces figures montrent bien que la courbure est indépendante du potentiel V_0 et que la force maximale F_{max} varie linéairement avec le carré du potentiel appliqué sur la pointe. Par conséquent, la force électrostatique F en chaque point D est représentée uniquement par la force maximale F_{max} . Ainsi, à partir de l'équation II. 10 nous pouvons donc déduire directement une relation mathématique entre la force électrostatique en chaque point D et le potentiel appliqué sur la pointe V_0 :

$$F(V_0, D) = \left(\frac{V_0}{10}\right)^2 \times F(10, D) \quad \text{II. 11}$$

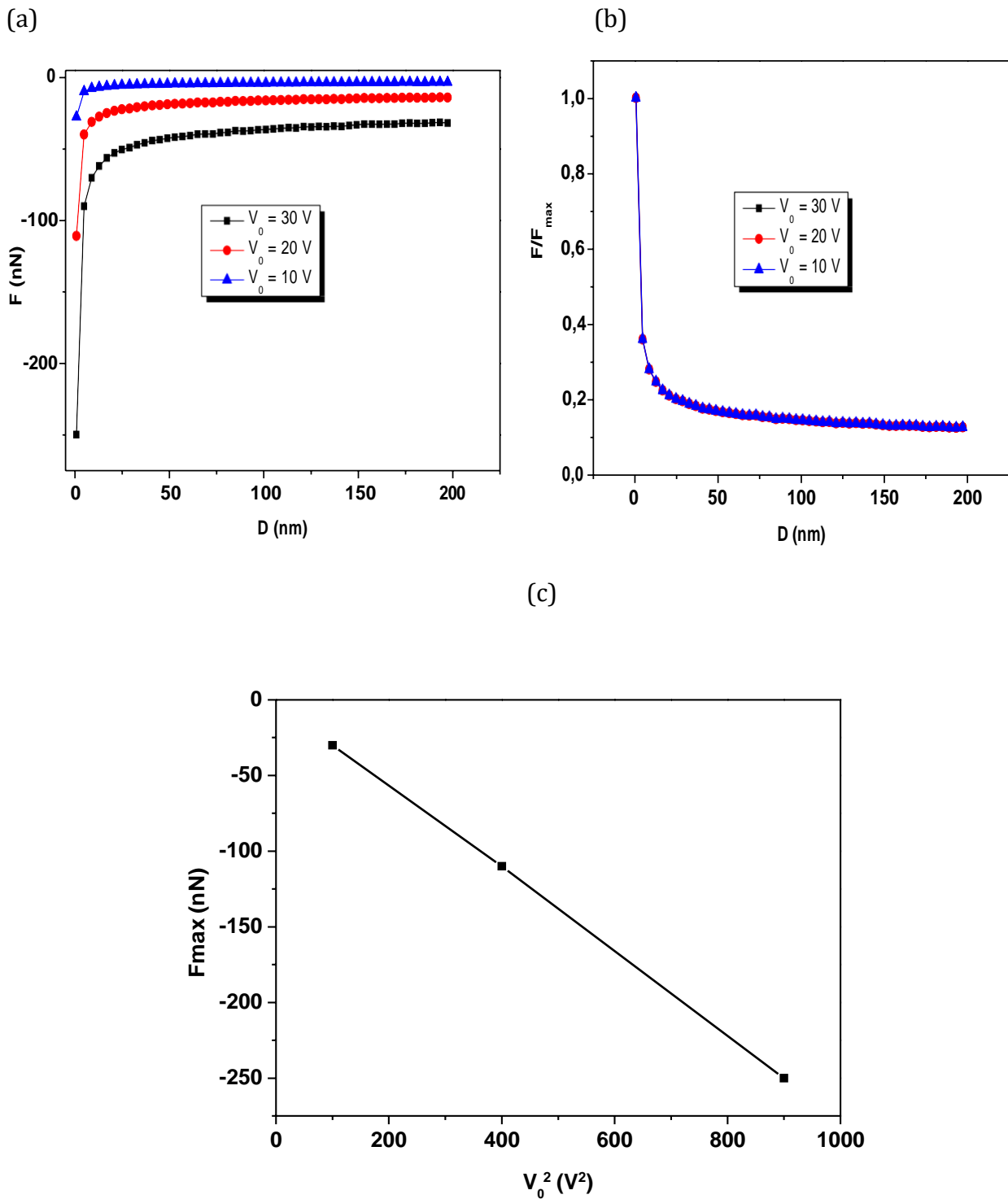


Figure II. 12 (a) Courbes de force calculées pour différents potentiels appliqués sur la pointe V_0 , (c) évolution de la courbure en fonction de V_0 , (c) évolution de F_{\max} en fonction de V_0^2 .

II.2 Comparaison mesure-simulation

II.2.1 Mesure des courbes de force électrostatiques (EFDCs)

Les mesures des EFDCs ont été réalisées sur un diélectrique submicronique SiN d'épaisseur 270 nm et une permittivité relative de 7.5. Cette couche diélectrique a été déposée en utilisant un dépôt chimique en phase gazeuse à haute fréquence [3] sur un substrat de silicium fortement dopé (Si). Pour éviter l'effet parasite de la capillarité, toutes les mesures ont été effectuées dans une atmosphère d'azote après un séchage des échantillons à 100 °C pendant 15 minutes pour éliminer la couche d'eau. Ces mesures ont été effectuées à l'aide d'une sonde AFM de silicium revêtue de Pt fournie par Bruker (SCM-PIC).

Une électrode en aluminium a été noyée dans la couche SiN, comme indiqué sur la Figure II. 13. Dans la suite, les trois paramètres de l'électrode sont définis comme suit : W pour la largeur d'électrode, d pour la profondeur représentant à son tour la position de l'électrode dans le volume et v le potentiel appliqué à l'électrode. Des électrodes de différentes largeurs allant de 6 μm à 40 μm et de plusieurs profondeurs d (10 nm, 50 nm et 100 nm) sont conçues. Elles ont une longueur qui est considérée comme infinie par rapport à la sonde. Toutes les mesures ont été effectuées au milieu de la largeur de l'électrode.

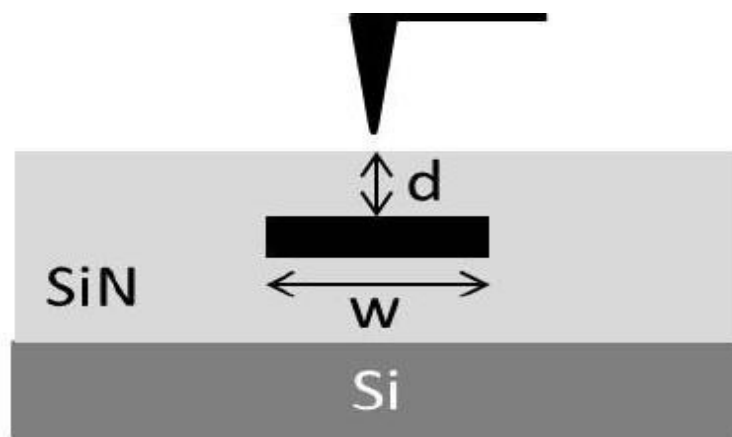


Figure II. 13 Protocole expérimental pour la mesure des EFDCs avec une électrode enfouie dans une couche diélectrique SiN de 270 nm d'épaisseur (l'électrode est représentée en noir).

II.2.2 Résolution numérique

Précédemment, nous avons présenté un modèle 3D permettant de simuler les EFDCs pour un diélectrique non chargé. Pour pouvoir simuler des EFDCs avec la configuration expérimentale présentée ci-dessus (électrode enfouie), une adaptation du modèle a été nécessaire. L'objet de ce paragraphe est donc de décrire l'adaptation de géométrie qui a été mise au point.

II.2.2.1 Adaptation de la géométrie

Les géométries d'étude présentées aux Figure II. 4 (a) et (b) doivent être modifiées pour prendre en compte l'électrode, (cf. Figure II. 14(a) et (b)).

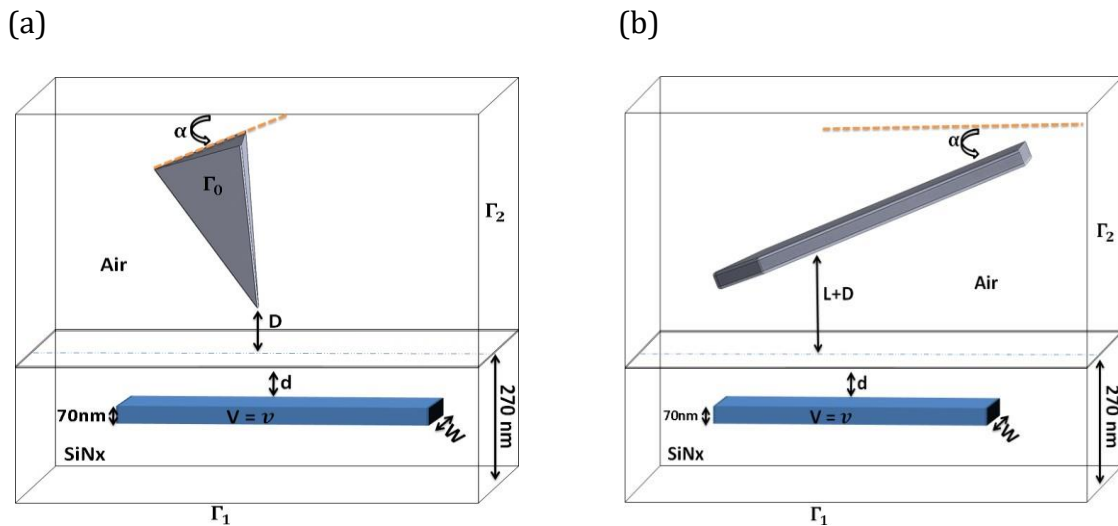


Figure II. 14 Géométries d'étude pour le système AFM et nano-diélectrique avec une électrode enfouie.

Sur ces figures sont présentées les géométries d'étude qui reproduisent exactement les conditions expérimentales mises en place pour l'obtention des EFDCs. L'électrode enfouie (en bleu) dans le diélectrique est modélisée comme un parallélépipède d'épaisseur 70 nm et de largeur W positionnée à une distance d de la surface du diélectrique.

II.2.2.2 Conditions aux limites

Des nouvelles conditions aux limites devront être prises en compte dans ce modèle à savoir : le potentiel V_0 appliqué sur la pointe et le bras de levier est nul et l'électrode est sous potentiel appelé v ($V = v = 15$ V).

II.2.2.3 Optimisation du maillage pour la géométrie pointe-diélectrique

Comme discuté précédemment, la complexité du maillage pour le modèle se manifeste dans la disparité d'échelle de la géométrie entre la hauteur de la pointe, égale à 10 μm et le rayon de l'apex, égal à 25 nm. Ces disparités peuvent nous amener à un maillage ayant un nombre de cellules très important. On retrouve cette difficulté dans la configuration de l'électrode enfouie entre son épaisseur, égale à 70 nm et sa longueur, égale à 500 μm . Afin d'optimiser le nombre de cellules créées lors du maillage, le même processus que celui élaboré dans la première partie concernant l'optimisation du maillage sera utilisé. Ainsi, nous devons déterminer les dimensions spatiales (rayon et hauteur) de la zone caractérisée par $E \geq 0.1 E_{\text{max}}$. Par conséquent, cette zone sera maillée plus fin et le reste de la géométrie sera maillé plus grossièrement. Pour déterminer une distribution spatiale du champ électrique de référence, un maillage extrêmement fin automatique a été effectué sur la géométrie pointe-diélectrique.

Le maillage résultant se compose environ de 3,520,449 éléments (cf. Figure II. 15), le temps de calcul nécessaire pour obtenir une distribution du champ électrique avec ce maillage pour $D = 0$ nm, $d = 100$ nm et $W = 6$ μm est environ 300 secondes. Ainsi, pour obtenir une courbe de force qui représente 51 points de 0 nm à 200 nm avec un pas de 4 nm), il faut plus de 16h.

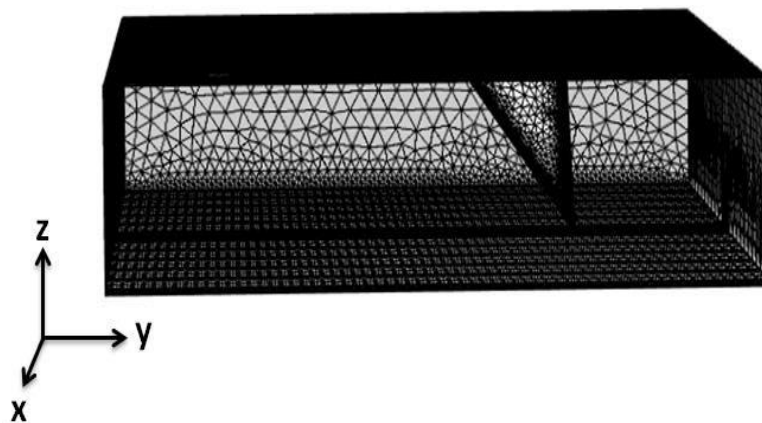


Figure II. 15 Maillage par défaut extrêmement fin pour la géométrie pointe-diélectrique.

Les Figure II. 16 (a) et (b) délimitent les dimensions de la zone à fort champ électrique ($E \geq 0.1 E_{\text{max}}$), avec un rayon de 50 nm et une hauteur de 50 nm. Ainsi, en dehors de cette zone on peut mailler plus grossièrement.

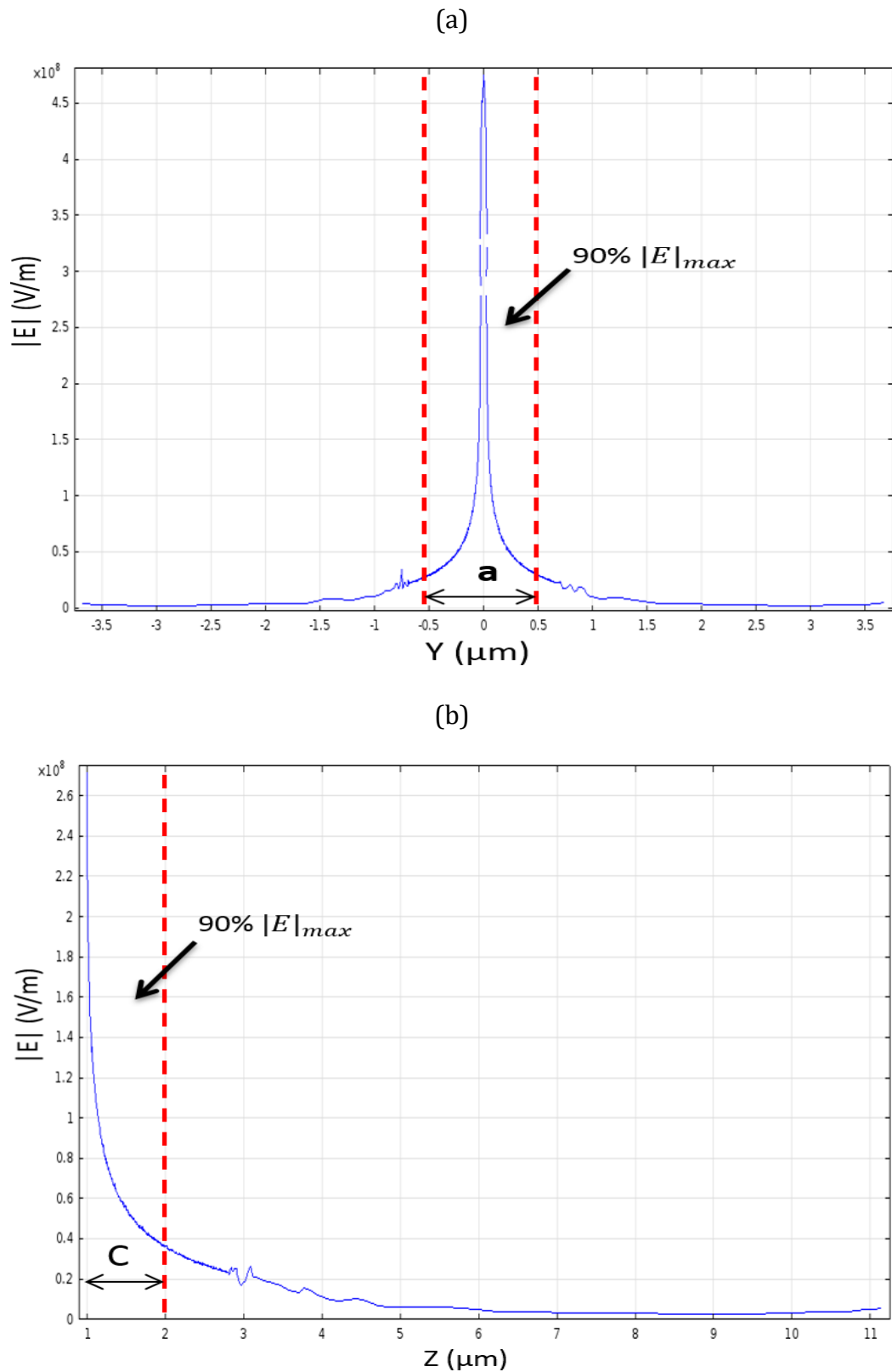


Figure II. 16 Le champ électrique sur la surface de la pointe pour $D = 0 \text{ nm}$, $d = 100 \text{ nm}$, $W = 6 \text{ } \mu\text{m}$: (a) le long de l'axe des X, (b) le long de l'axe Z.

Cependant, pour l'électrode et le diélectrique, tous deux des parallélépipèdes minces, un maillage extrudé a été utilisé. Le maillage extrudé permet d'avoir des éléments fins dans la direction normale et ainsi éviter un maillage trop raffiné dans la direction tangentielle, car nous savons que les interactions électrostatiques entre la pointe et le diélectrique sont principalement verticales. En effet, un maillage quadrilatéral 2D (quadrangles réguliers) a été utilisé sur la face inférieure du diélectrique avec des mailles extrêmement fines. Ensuite, il a été extrudé sur toute la longueur du diélectrique pour créer des éléments prismatiques quadrilatéraux. Finalement, les faces quadrilatérales créées ont été converties en faces triangulaires à cause de la contrainte de face adjacente : c'est la face de contact horizontale entre le bloc d'air et le diélectrique, puisque l'air a été maillé avec des éléments triangulaires.

Pour bien illustrer le fonctionnement du maillage extrudé avec COMSOL, nous avons choisi de mailler un cube avec cette option tout en détaillant les étapes nécessaires. La première étape consiste à mailler la face inférieure du cube avec des quadrangles réguliers avec des mailles de taille moyenne (cf. Figure II. 17 (a)) ou extrêmement fines (cf. Figure II. 17 (b)). Pour notre modèle l'option extrêmement fin était retenue.

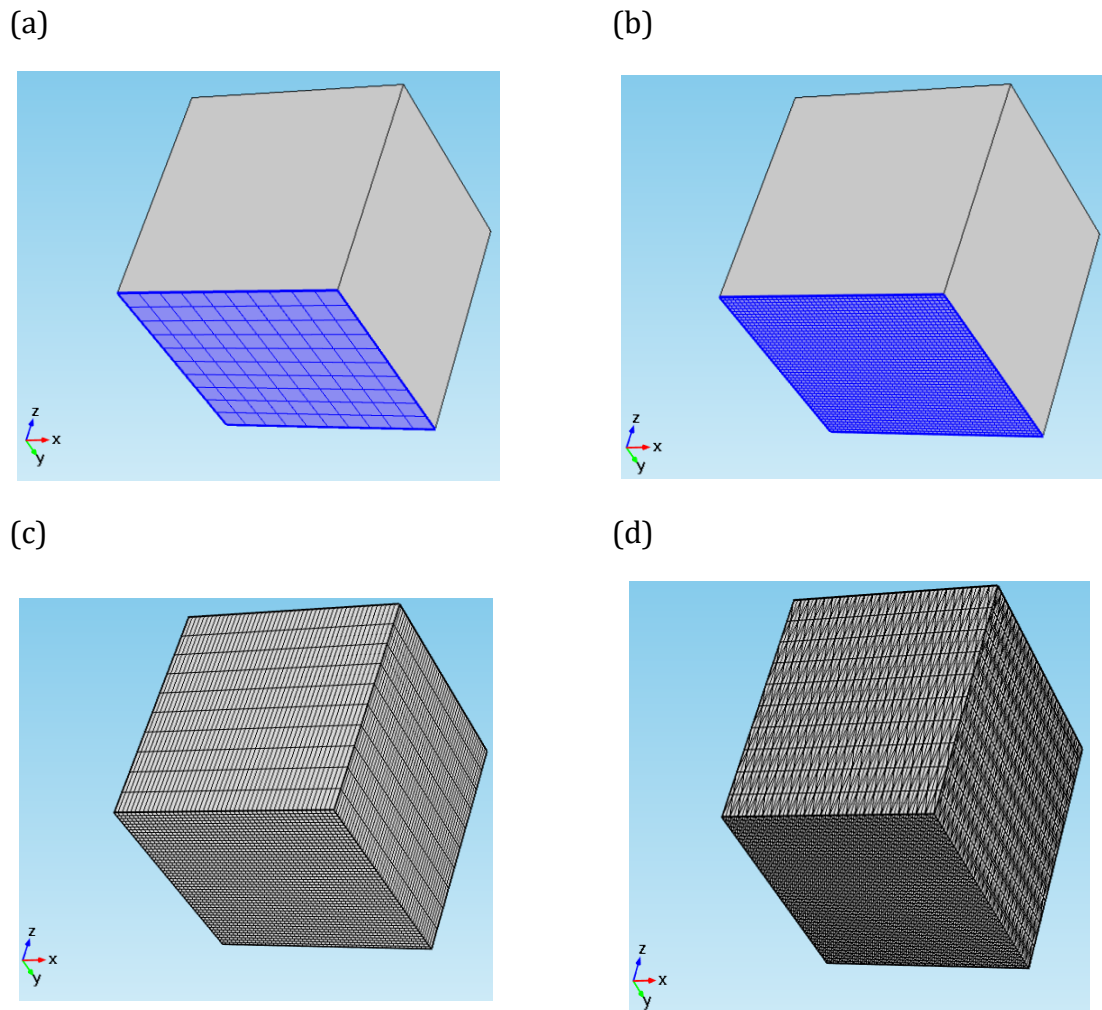


Figure II. 17 Illustration du maillage extrudé avec COMSOL.

La deuxième étape consiste à extruder les mailles de la face arrière sur tout le cube suivant la composante normale pour créer des éléments prismatiques quadrilatéraux (cf. Figure II. 17 (c)). Enfin, la dernière étape consiste à convertir les faces quadrilatérales en face triangulaires. Cette étape est primordiale lorsque nous devons respecter la contrainte des faces adjacentes.

Le maillage structuré et optimisé sur toute la géométrie pointe-diélectrique est illustré sur les Figure II. 18.

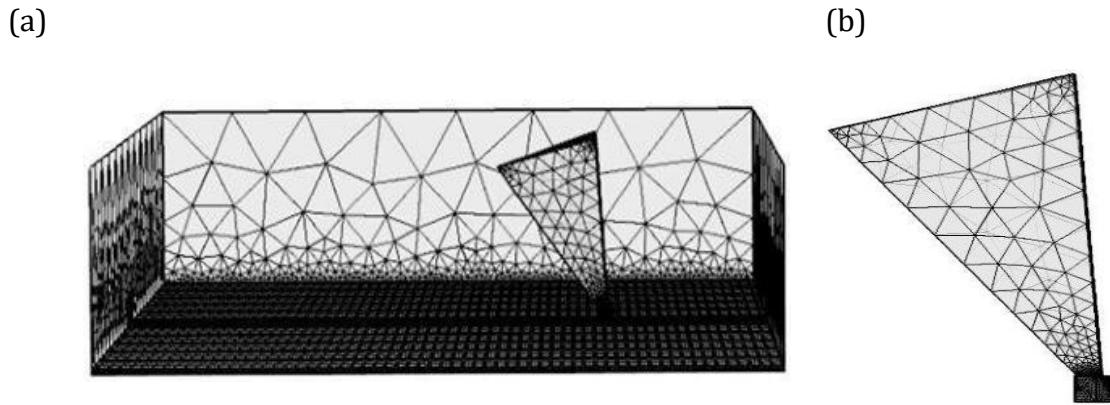


Figure II. 18 (a) Un maillage structuré et optimisé sur toute la géométrie, (b) l'espace autour de l'apex a été maillé finement, le diélectrique et l'électrode ont été maillés en utilisant l'option avancée maillage extrudé et l'espace restant maillé grossièrement.

Le Tableau II. 4 compare le nombre d'éléments et le temps de calcul pour le maillage par défaut et le maillage optimisé. Le temps de calcul pour simuler une courbe EFDC avec le maillage optimisé est 30 fois inférieur à celui avec maillage par défaut (COMSOL Automatic Mesh), la norme L^2 relative à l'erreur entre ces deux courbes est d'environ 4%. On peut en conclure qu'en tenant compte de la disparité de l'échelle des objets modélisés et de la tridimensionnalité du système, l'erreur est acceptable. Par conséquent, le temps de calcul du modèle a été réduit sans affecter la qualité du résultat, ce qui est l'objectif principal de ce travail.

Tableau II. 4 Résultats d'optimisation du maillage.

Le maillage	Eléments	Temps de calcul (s)
Par défaut	3520449	60000
Optimisé	683504	2000

II.2.2.4 Optimisation du maillage pour la géométrie bras de levier-diélectrique

Pour le bras de levier, nous avons également utilisé un maillage extrudé avec une taille normale des éléments afin de réduire le temps de calcul (cf. Figure II. 19). Malgré le fait qu'un maillage structuré et extrudé a été utilisé, un énorme temps de calcul est nécessaire pour obtenir la déflexion du bras de levier et donc une courbe de force. Nous

attribuons ce temps au fait que cette géométrie 3D présente une disparité à grande échelle entre ses composants tels que l'épaisseur de l'électrode de 70 nm et la longueur du cantilever de 450 μm . En outre, comme indiqué précédemment, l'étude électromécanique couple deux physiques : l'électrostatique et la mécanique des solides. Ainsi, au cours du processus de discrétisation, COMSOL va générer un très grand nombre de mailles.

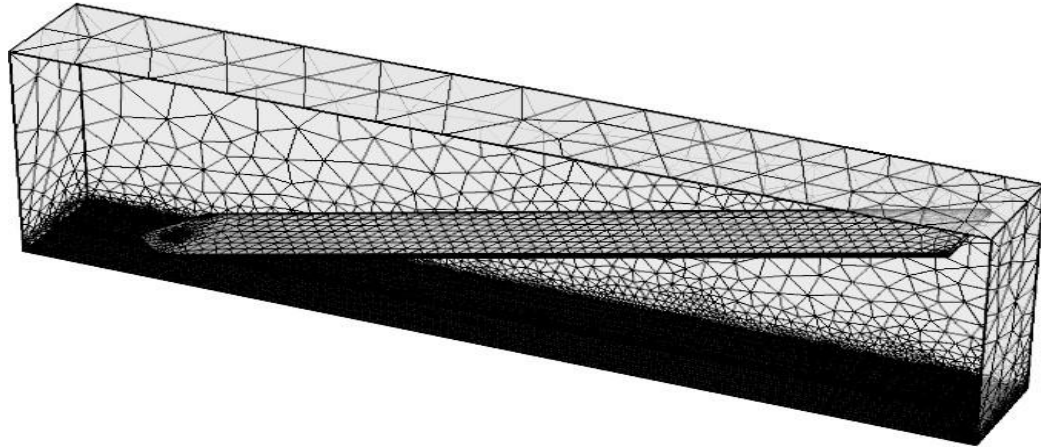


Figure II. 19 Maillage optimisé pour la géométrie bras de levier-diélectrique.

Pour cette géométrie, et en utilisant un maillage optimisé, notre simulation a nécessité 10 heures pour obtenir une courbe de force (51 points avec D allant de 0 nm à 200 nm avec un pas de 4 nm).

II.2.3 Validation du modèle 3D EFDCs

Dans ce qui suit, les résultats numériques obtenus par le modèle électrostatique pour la géométrie pointe-diélectrique et par le modèle électromécanique pour la géométrie bras de levier-diélectrique seront comparés aux résultats expérimentaux. Les EFDCs ont été mesurées et simulées pour une électrode sous potentiel de 15 V, pour deux largeurs différentes ($W = 6 \mu\text{m}$, $W = 20 \mu\text{m}$) voir Figure II.19 (a) et deux profondeurs ($d = 10 \text{ nm}$, $d = 100 \text{ nm}$) voir Figure II.19 (b). Les EFDCs obtenues par le modèle électrostatique (pointe) et par le modèle électromécanique (bras de levier) sont respectivement tracées en trait plein et en trait pointillé. Les courbes mesurées sont quant à elles présentées par un trait plein avec des cercles vides. Les courbes en traits pleins avec des cercles remplis représentent les courbes de force électrostatiques totales (pointe et bras de levier). Ces courbes de force totales sont obtenues en appliquant le théorème de superposition et en additionnant les courbes de force obtenues par la pointe seule et par le bras de levier seul.

Les courbes en rouge / noir représentent respectivement les EFDCs pour une largeur d'électrode $W = 6\mu\text{m}$ / $W = 20\mu\text{m}$ sur la Figure II. 20 (a) et pour une profondeur $d = 100\text{nm}$ / $d = 10\text{nm}$ sur la Figure II. 20 (b).

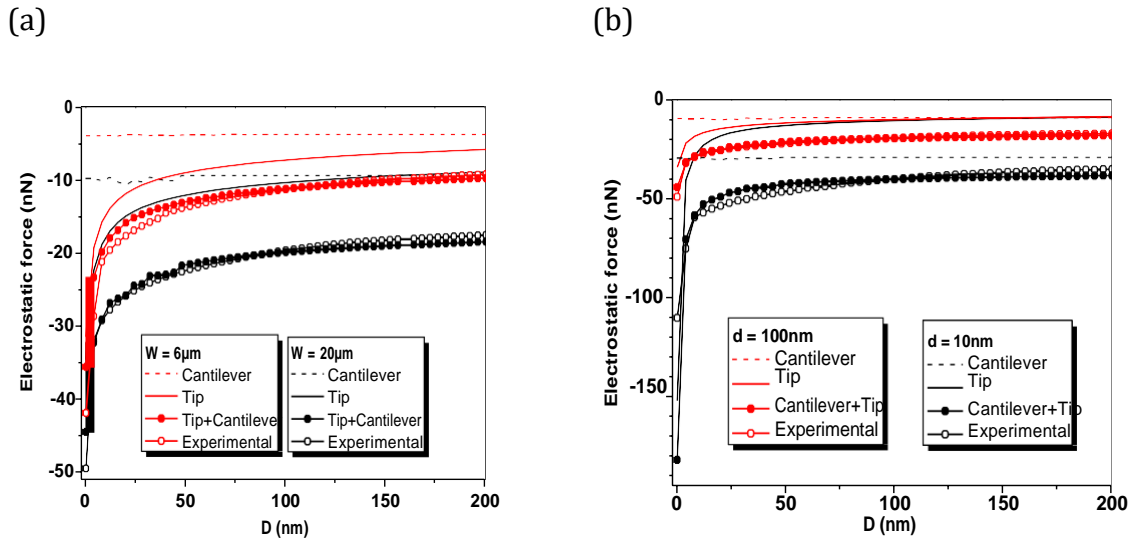


Figure II. 20 Comparaison entre EFDCs (pointe + bras de levier) simulés et expérimentales : (a) pour différentes largeurs d'électrode avec une profondeur d'électrode fixée à 100nm , (b) pour différentes profondeurs d'électrode avec une largeur fixée à $6\mu\text{m}$.
Le potentiel appliqué sur l'électrode est fixé à 15V .

On remarque une bonne corrélation entre les courbes de force obtenues par simulation (pointe + bras de levier) et celles obtenues par la mesure. Dans les deux cas, les courbes de force obtenues augmentent fortement pour des très petites distances D , de plus elles présentent une courbure et une asymptote horizontale pour des distances D importantes.

On constate à partir de ces figures, d'une part, que les EFDCs obtenues par le modèle bras de levier seul sont quasiment constantes avec la distance D (même si on constate une légère diminution en fonction de D) et, d'autre part, qu'elles sont très sensibles à la largeur et à la profondeur de l'électrode. La contribution du levier respectivement pour $W = 6\mu\text{m}$ et $W = 20\mu\text{m}$ est de -4 nN et -10 nN . De plus, la variation de la profondeur d ($d = 100\text{nm}$, $d = 10\text{nm}$) modifie les contributions du levier de -10 nN à -30 nN . Même si bras de levier est loin de l'échantillon, environ $10\mu\text{m}$, il contribue très fortement à la force totale. Ceci est dû aux propriétés des interactions électrostatiques et également à la grande taille de

l'électrode. Ainsi dans cette configuration, la contribution du levier ne peut être négligée lors de l'interprétation des mesures EFDCs.

Bien que la contribution du bras de levier soit sensible à la largeur et à la profondeur de l'électrode, la force électrostatique varie faiblement avec la distance D . Par conséquent, à cette étape, pour une profondeur et une largeur données, la force ne sera calculée qu'à deux points, par exemple au contact ($D = 0$ nm) et à longue distance ($D = 200$ nm). Ainsi, nous réduisons le temps de 10 h à 24 minutes pour le modèle électromécanique.

Pour la pointe, la modification de la largeur de l'électrode n'entraîne pas de modification importante de la force électrostatique à courte distance. Ceci est probablement dû au fait que la largeur de la pointe est beaucoup plus petite que la largeur de l'électrode. Lorsque la distance augmente, la force est d'autant plus grande que l'électrode est plus large, ce qui peut être expliqué par une contribution croissante des bords de l'électrode. Ceci est vérifié à la fois dans la mesure et dans la modélisation. Concernant l'impact de la profondeur de l'électrode, premièrement, la mesure et le modèle montrent que la force d'interaction à courte distance est beaucoup plus grande pour la profondeur la plus courte. Deuxièmement, la limite asymptotique est atteinte à un niveau semblable dans le cas du modèle et à un niveau différent dans le cas des données expérimentales. Ceci est probablement dû au fait que l'apex de la pointe est trop éloigné de la surface de l'échantillon et que la contribution verticale de celui-ci devienne insensible à la distance de séparation ($D + d$).

II.3 Conclusion

Dans ce chapitre, un modèle tridimensionnel complet pour simuler des EFDCs entre une sonde AFM et un diélectrique exempt de charges a été développé à l'aide du logiciel COMSOL. Ce modèle est fait de deux sous-modèles : un modèle électrostatique pour la pointe seule et un modèle électromécanique pour le bras de levier seul. Pour réduire le temps du calcul du modèle une optimisation du maillage a été réalisée. En effet, les zones à fortes interactions électrostatiques ont été maillées plus finement et les zones à faibles interactions ont été maillées plus grossièrement. Ainsi, le temps de calcul a été divisé par 33 par rapport à un maillage contrôlé par COMSOL.

Pour valider notre modèle, des mesures expérimentales ont été effectuées avec une électrode enfouie dans un diélectrique mince de SiN. Afin de comparer les résultats issus de ce modèle et ceux issus de l'étude expérimentale, le modèle a été adapté pour reproduire au mieux les conditions expérimentales. Ainsi, les EFDCs ont été simulées sur une électrode enfouie à l'intérieur du diélectrique. Les résultats révèlent un bon accord entre les simulations et les données expérimentales. Les résultats obtenus montrent que l'EFDC est sensible à la distribution latérale et verticale du potentiel électrique appliqué sur l'électrode. Nous avons constaté que la contribution du bras de levier est quasiment constante mais sensible à la largeur et à la profondeur de l'électrode.

Le modèle étant validé par des données expérimentales, l'objectif maintenant est d'étudier la sensibilité des courbes de force à la localisation tridimensionnelle des charges au sein d'un diélectrique mince. En effet, ce modèle sera adapté pour estimer la force électrostatique induite par une distribution de charge. La sensibilité des EFDCs à la distribution de charges sera étudiée en fonction de l'étalement latéral, l'étalement en profondeur et la densité de charge.

Bibliographie

- [1] A. Boularas, F. Baudoin, G. Teysse, C. Villeneuve-Faure and S. Clain “3D modelling of electrostatic interaction between AFM probe and dielectric surface: Impact of tip shape and cantilever contribution”, *IEEE Trans. Dielectr. Insul.*, vol. 23, 713, 2016.
- [2] J. Colchero, A. Gil, A. M. Baro, “Resolution enhancement and improved data interpretation in electrostatic force microscopy”, *Phys. Rev. B*, vol. 64, 245403, 2001.
- [3] C. Villeneuve-Faure, L. Boudou, K. Makasheva, G. Teysse, “Towards 3D charge localization by a method derived from atomic force microscopy: the electrostatic force distance curve”, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol 47, 455302, 2014..
- [4] A. Boularas, F. Baudoin, G. Teysse, C. Villeneuve-Faure and S. Clain “3D modelling of electrostatic interaction between AFM probe and dielectric surface: Impact of tip shape and cantilever contribution”, *IEEE Trans. Dielectr. Insul.*, vol. 23, 713, 2016.

Chapitre III : Etude de sensibilité des EFDCs à la localisation des charges

III.1 Etude de la sensibilité des EFDCs à la localisation des charges

III.1.1 Introduction

Après avoir validé notre modèle 3D pour la modélisation des EFDCs à l'aide de données expérimentales, l'objectif de ce chapitre est d'étudier la sensibilité des courbes de force à la localisation tridimensionnelle des charges au sein d'un diélectrique mince. L'objectif étant de savoir si avec les seules courbes de forces, les charges peuvent être localisées de manière précise. Pour ce faire, le modèle de base sera adapté pour estimer la force électrostatique exercée sur la sonde AFM par une distribution de charge. La sensibilité des forces à la distribution de charge sera étudiée en fonction de leur rayon, de leur profondeur et de leur densité. Dans notre cas, la géométrie de la distribution des charges est considérée comme étant une distribution semi ellipsoïdale.

III.1.2 Adaptation du modèle pour la simulation des EFDCs induites par des charges

III.1.2.1 Géométrie d'étude

La géométrie d'étude pour le modèle électrostatique est présentée en détail sur la Figure III. 1, elle est constituée d'une pointe tétraédrique positionnée à une distance D d'une couche diélectrique de longueur infinie (SiNx) et d'épaisseur 500 nm avec une permittivité relative de 7,5.

Les charges implantées (représentant la charge injectée par AFM [1]) dans la couche diélectrique est décrite comme un demi-ellipsoïde de densité de charge uniforme ρ , avec un rayon r et une profondeur d . Dans notre étude, le rayon r pourra varier de 10 nm à 1000 nm voire 5000 nm, la profondeur de 25 nm à 490 nm et la densité de charge de $1 \times 10^4 \text{ C.m}^{-3}$ à $5 \times 10^4 \text{ C.m}^{-3}$.

Les dimensions du domaine d'étude Ω sont suffisamment grandes pour éviter les effets de bord.

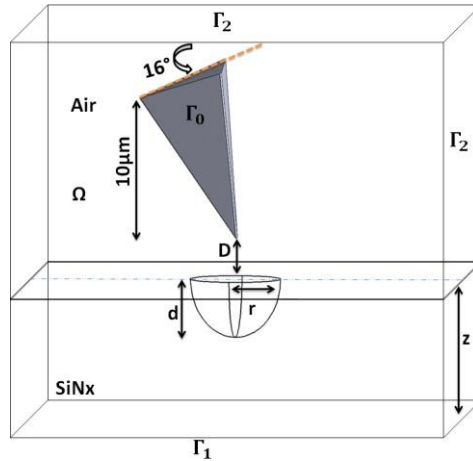


Figure III. 1 Géométrie d'étude

Pour déterminer la force électrostatique créée par la présence des charges dans le diélectrique, les équations électrostatiques détaillées dans le chapitre précédent sont résolues. En ce qui concerne l'équation de Poisson, elle a été modifiée comme suit pour prendre en compte la densité charge :

$$\frac{d^2V(x, y, z)}{dx^2} + \frac{d^2V(x, y, z)}{dy^2} + \frac{d^2V(x, y, z)}{dz^2} = -\frac{\rho(x, y, z)}{\epsilon} \quad \text{sur } \Omega \quad \text{III. 1}$$

Les conditions aux limites sur les bords Γ_1 et Γ_2 sont les suivantes : la pointe et la face inférieure du diélectrique sont à la masse.

III.1.2.2 Maillage

Le maillage associé à la géométrie a été affiné et optimisé à proximité du point de contact entre l'air et le diélectrique en utilisant le même processus présenté dans le chapitre II, cf. Figure III. 2.

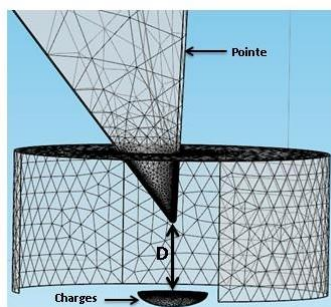


Figure III. 2 Maillage raffiné autour de l'apex.

La Figure III. 3 (a) montre la distribution spatiale du potentiel électrique V et la Figure III. 3 (b) la distribution du champ électrique E calculées pour une distance D de 100 nm et les paramètres ellipsoïdaux de la charge sont les suivants : $d = 100$ nm, $r = 150$ nm et $\rho = 2.5 \times 10^4$ C.m⁻³. Comme prévu, le champ électrique est maximum sur l'apex de la pointe et sa valeur maximale est de 1.2×10^8 V.m⁻¹.

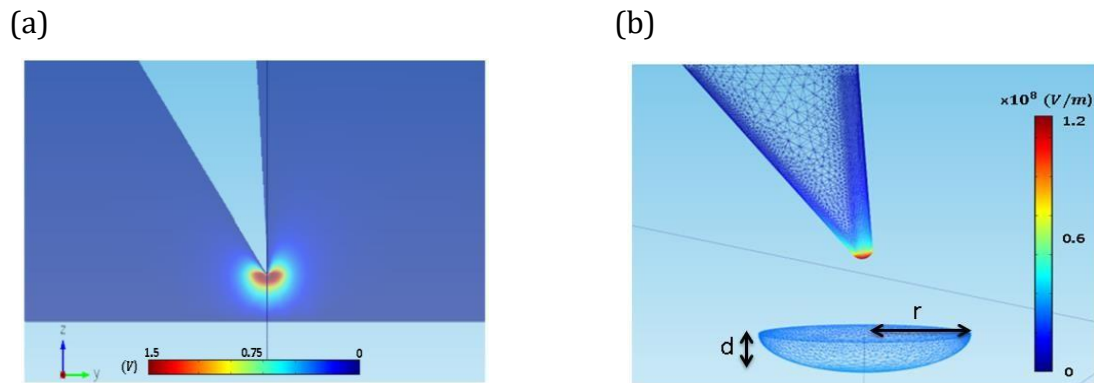


Figure III. 3 Résultats numériques du modèle électrostatique pour $D = 100$ nm, $d = 100$ nm, $r = 150$ nm et $\rho = 2.5 \times 10^4$ C.m⁻³: (a) la distribution du potentiel électrique, (b) la distribution du champ électrique.

III.1.2.3 Courbe de Force - EFDC

La Figure III. 4 montre un exemple d'une courbe de force électrostatique obtenue avec une distribution de charge. On retrouve les caractéristiques classiques à savoir un maximum, une courbure et une asymptote horizontale qui tend vers 0.

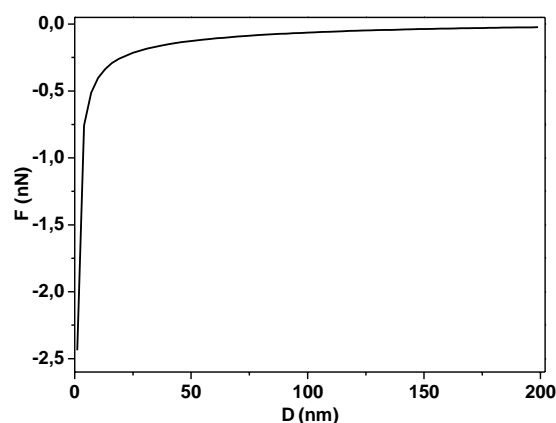


Figure III. 4 Courbe de force (EFDC) pour $d = 100$ nm, $r = 150$ nm et

$$\rho = 2.5 \times 10^4 \text{ C.m}^{-3}.$$

III.1.3 Modèle électromécanique – Prise en compte du bras de levier

Pour simuler la force électrostatique exercée sur le bras de levier induite par la distribution de charges, les équations électromécaniques ont été résolues sur la géométrie d'étude présentée ci-dessous.

III.1.3.1 Géométrie d'étude

La géométrie d'étude (bras de levier et diélectrique) pour le modèle électromécanique est présentée sur la Figure III. 5. Cette géométrie est constituée d'un bras de levier incliné de 16° par rapport au plan horizontal et positionné à une distance égale à $D + 10 \mu\text{m}$ du diélectrique, $10 \mu\text{m}$ étant la hauteur de la pointe.

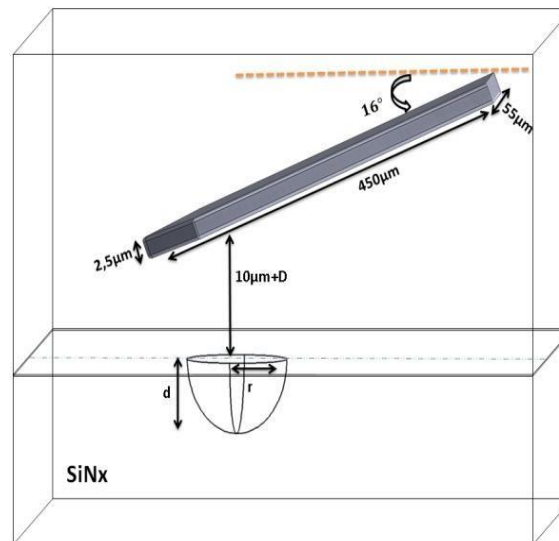


Figure III. 5 Géométrie d'étude pour le modèle électromécanique et la prise en compte du bras de levier.

III.1.3.2 Etude de l'influence du bras de levier sur les EFDCs

Les Figure III. 6 (a) et Figure III. 6 (b) comparent les courbes de force obtenues par le bras de levier en utilisant le modèle électromécanique et celles obtenues avec la pointe seule en utilisant le modèle électrostatique, et ceci pour différentes configurations de la charge.

Les Figure III. 6 (a) et Figure III. 6 (b) ont été respectivement simulées pour le couple ($d = 100 \text{ nm}$, $\rho = 2.5 \times 10^4 \text{ C.m}^{-3}$) et pour le couple ($d = 300 \text{ nm}$, $\rho = 5.3 \times 10^4 \text{ C.m}^{-3}$).

Les courbes en rouge correspondent respectivement à $r = 250$ nm sur la Figure III. 6 (a) et à $r = 5000$ nm sur la Figure III. 6 (b).

Les courbes en noir correspondent à $r = 150$ nm pour la Figure III. 6 (a) et à $r = 500$ nm pour Figure III. 6 (b).

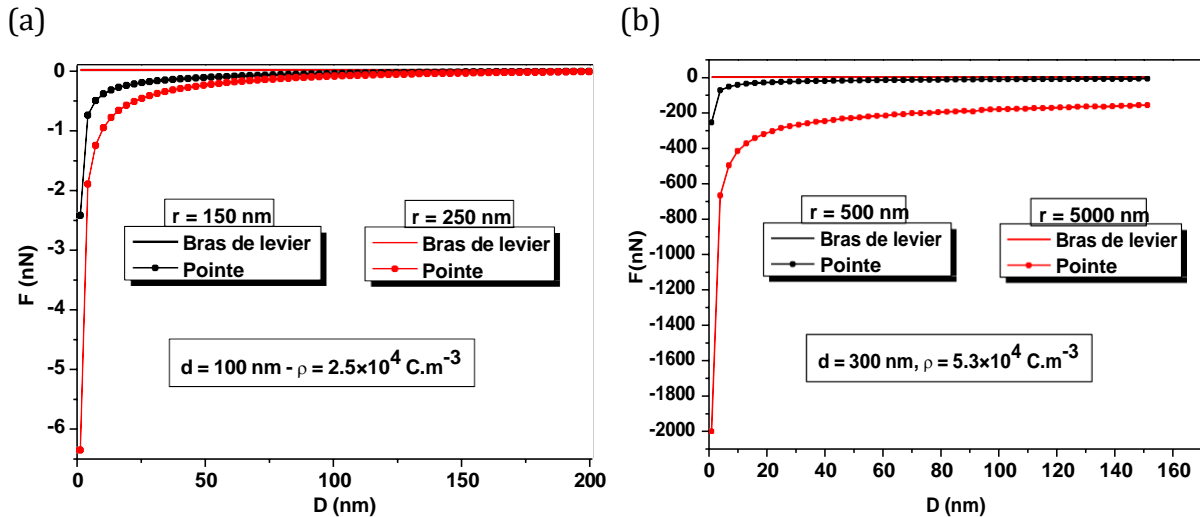


Figure III. 6 Comparaison entre la contribution de la pointe et la contribution du bras de levier.

D'après ces figures, les courbes de force obtenues par le bras de levier sont quasiment nulles. De plus, la force électrostatique associée est indépendante de la distance D dans la plage étudiée. En effet, la contribution de ces forces sur le bras de levier pour $r = 250$ nm ou $r = 150$ nm est de l'ordre de 10^{-8} nN tandis que la contribution de la pointe est de l'ordre du nN. La quantité de charge correspondante et qui est calculée à l'aide de l'équation III. 5 est de l'ordre de 10^{-16} C.

La Figure III. 6 (b) montre que, même si nous multiplions la quantité de charge par un facteur de 2500, la contribution du bras de levier reste négligeable par rapport à la contribution de la pointe. En effet, la contribution du bras de levier dans ce cas-là est de l'ordre de 10^{-1} nN, alors que la contribution de la pointe est de l'ordre de 10^3 nN. Le rapport entre les deux contributions est environ 10^4 , qui est le carré du premier rapport. Si on continue d'augmenter le rayon de la charge, le rapport entre les deux contributions va diminuer.

Étant donné que le diamètre de la zone chargée (5000 nm) est très inférieur aux dimensions du bras de levier, la contribution de celui-ci reste toujours négligeable devant la contribution de la pointe.

Ainsi, dans ce qui suit, seule la pointe a été considérée pour étudier la sensibilité de l'EFDC à la localisation de la charge.

III.1.4 Sensibilité des EFDCs à localisation des charges

Afin d'étudier la sensibilité de la courbe de force électrostatique à la localisation de la charge i.e. étudier l'influence des paramètres de la charge sur les courbes de force, les valeurs de chaque paramètre densité ρ , rayon r et profondeur d ont été modifiées successivement, puis leur impact sur la courbe de force a été déterminé. Pour extraire l'effet individuel de chaque paramètre de la charge, la courbe de force est décrite empiriquement par la loi logistique suivante [1] :

$$F(D) = F_{\infty} + \frac{F_0 - F_{\infty}}{1 + \left(\frac{D}{C}\right)^p} \quad \text{III. 2}$$

Où D est la distance pointe-échantillon, F_{∞} est la force lorsque la pointe est suffisamment éloignée de la surface, F_0 est la force maximale au point de contact ($D = 0$), C et p deux paramètres décrivant la courbure des EFDCs. En considérant différentes configurations de la charge, l'analyse de la force maximale F_0 et des deux paramètres (C , p) permet d'une part d'analyser leur influence à la localisation de la charge et, d'autre part, de mieux comprendre le rôle de chacun des paramètres sur les courbes. Cependant, quel que soit la configuration de la charge considérée, F_{∞} reste proche de 0. Ainsi, étudier l'influence de la distribution de la charge sur les EFDCs revient à étudier leur influence sur les paramètres logistiques F_0 , C et p .

III.1.4.1 Sensibilité des EFDCs sur la densité de charge

La Figure III. 7 (a) montre les courbes de force simulées pour différentes densités de charge ρ allant de 10^4 C.m⁻³ à 5×10^4 C.m⁻³ avec un rayon fixé à 250 nm et une profondeur fixée à 100 nm. La Figure III. 7 (b) montre la variation de la force maximale F_0 en fonction de la densité. En effet, F_0 augmente linéairement avec le carré de la densité de charge ρ^2 avec une pente d'environ -9.22 nN.m⁶.C⁻². La Figure III. 7 (c) quant à elle,

montre la variation des paramètres de la courbure (C , p) toujours en fonction de la densité. Comme attendu, les résultats indiquent que les paramètres C et p sont constants avec la densité de charge. Par conséquent la densité de charge influence uniquement la force maximale.

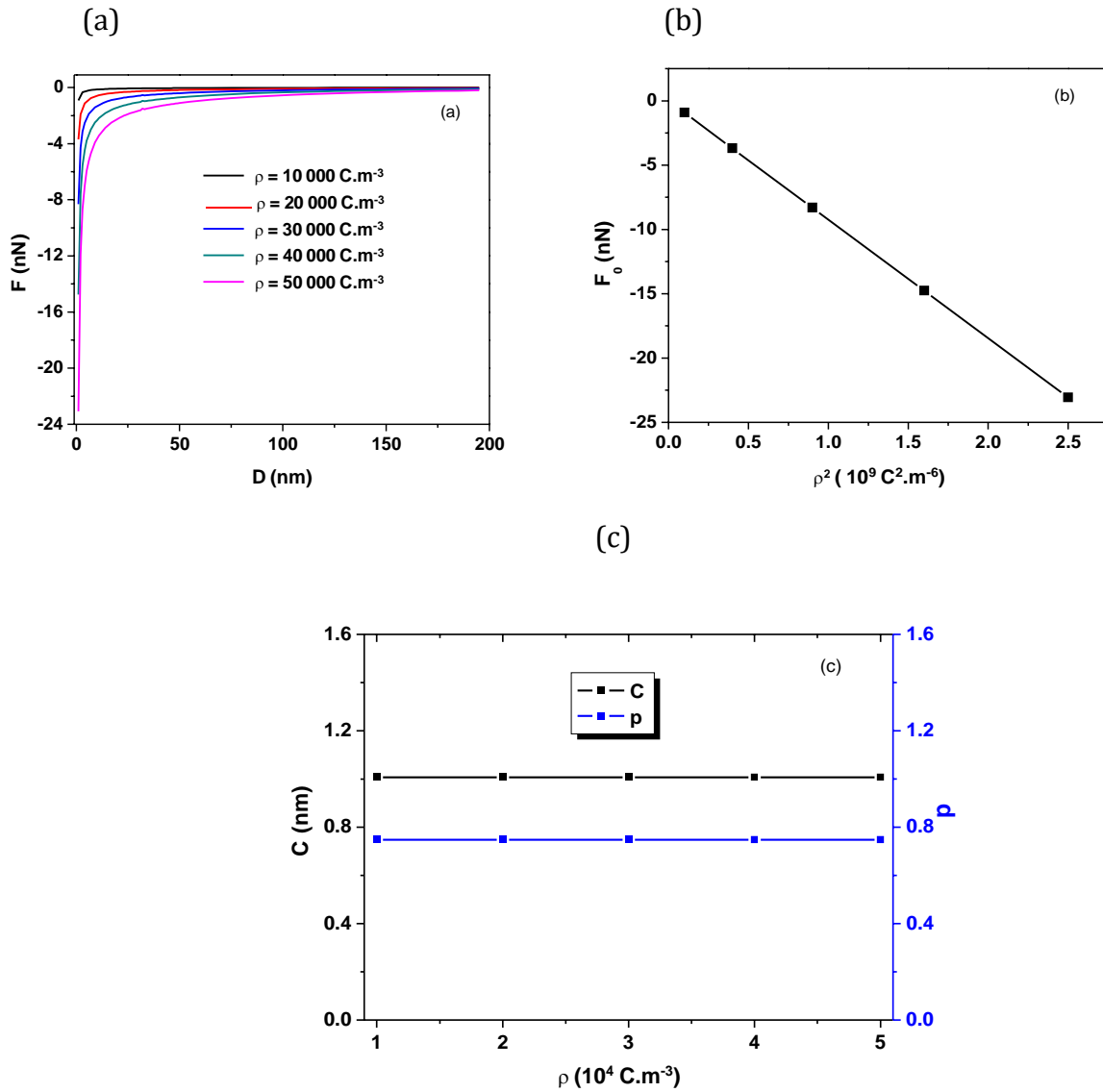


Figure III. 7 (a) Courbes de force simulées pour différentes densités de charge ρ (la profondeur d et le rayon r sont respectivement fixés à 100 nm et 250 nm), (b) évolution de F_0 en fonction de ρ^2 , (c) évolution des paramètres de la courbure (C , p) en fonction de la densité de charge ρ .

Comme la force maximale F_0 est linéaire avec ρ^2 , on peut écrire :

$$F_0(\rho) = \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^2 \times F_0(\rho_0) \quad \text{III. 3}$$

Avec $\rho_0 = 10^4 \text{ C.m}^{-3}$. De plus, comme les paramètres de la courbure sont indépendants de la densité de charge, la force électrostatique F en chaque point D est représentée uniquement par F_0 , dans ce cas, nous pouvons simplifier cette fonction comme suit :

$$F(\rho, D) = \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^2 \times F(\rho_0, D) \quad \text{III. 4}$$

Pour un volume constant de charges, la force maximale dépend linéairement du carré de la densité de charge, ce qui signifie une dépendance linéaire avec le carré de la quantité de charge totale Q . Avec la forme ellipsoïdale des charges prise ici, la relation mathématique qui lie la quantité de charge Q à la densité est donnée par l'équation suivante :

$$Q = \rho \times \frac{2 \times \pi \times r^2 \times d}{3} \quad \text{III. 5}$$

III.1.4.2 Sensibilité des EFDCs au rayon de la charge

Les courbes de force en fonction du rayon de la charge r (r variant de 10 nm à 600 nm) sont présentées sur la Figure III. 8 (a). La profondeur d et la densité ρ sont fixées respectivement à 100 nm et à 10^4 C.m^{-3} . Les Figure III. 8 (b) et Figure III. 8 (c) représentent respectivement la variation de la force maximale F_0 et les paramètres de la courbure (C , p) en fonction du rayon r . D'après ces figures, on constate que les fonctions $C(r)$, $p(r)$ et $F_0(r)$ sont caractérisées par trois zones distinctes avec des pentes différentes. Pour un petit rayon, inférieur à $2R$, R le rayon de l'apex (25 nm), la force maximale et le paramètre p sont constants avec le rayon de la charge alors que le paramètre C diminue fortement. Dans ce cas, seule la pente de la courbe C est sensible au rayon. Pour un rayon supérieur à $6R$, le paramètre C continue de diminuer avec une pente plus petite qu'avant et la force maximale F_0 augmente linéairement avec le rayon de la charge. Dans ce cas et selon l'équation III. 5, la force maximale n'a pas de dépendance linéaire avec le carré de Q . La force maximale F_0 dans la région intermédiaire ($2R < r < 6R$) présente un comportement non linéaire avec le rayon, sorte de transition entre 2 états. De plus, la force maximale augmente de manière non linéaire avec le carré de la quantité de charge (cf. Figure III. 8

(d)). Dans cette zone de transition, les paramètres de la courbure présentent les mêmes comportements que la zone à grand rayon.

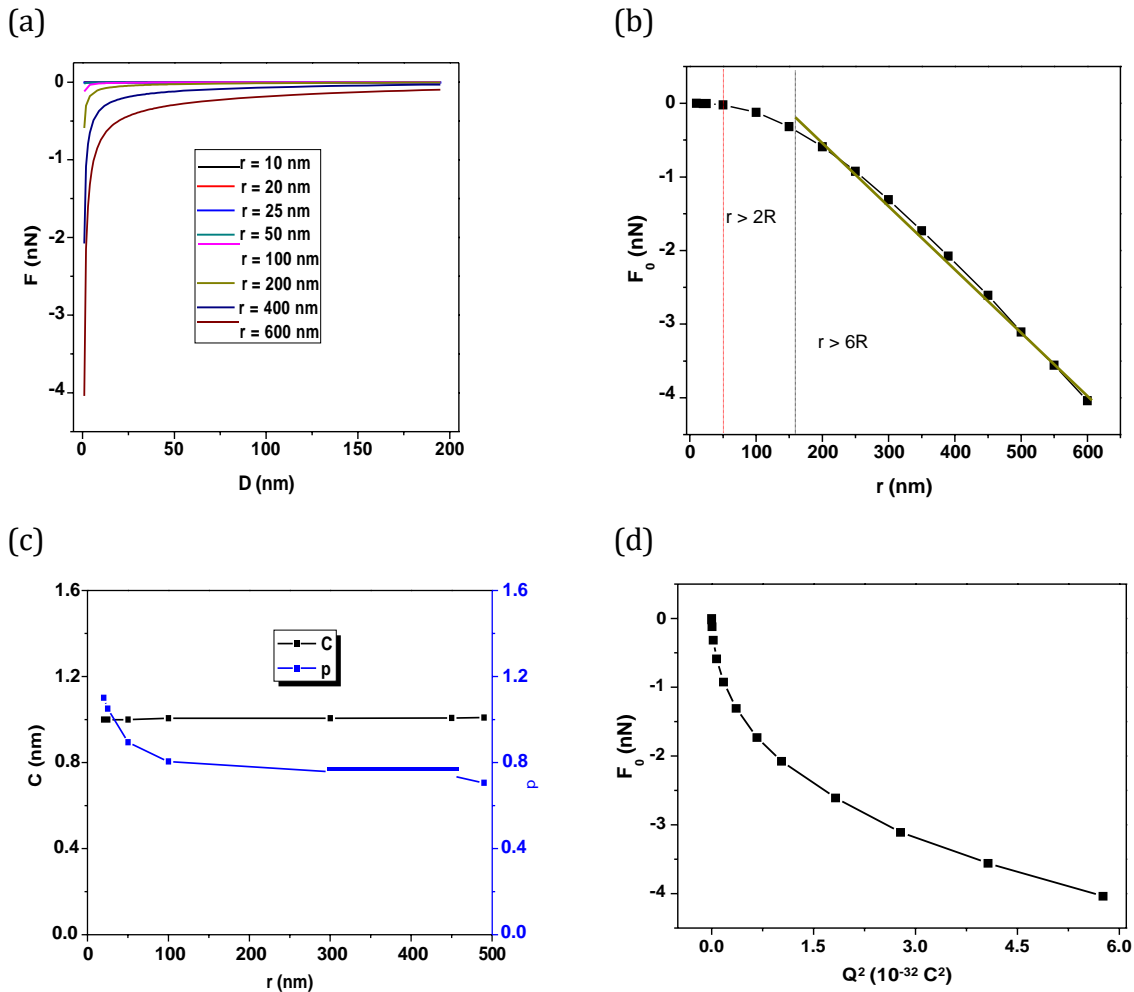


Figure III. 8 (a) La force électrostatique F en fonction de la distance pointe-échantillon D pour différentes valeurs du rayon, (b) F_0 en fonction de r , (c) les paramètres de la courbure (C , p) en fonction de r , (d) F_0 en fonction de Q^2 . La profondeur et la densité de charge ont été respectivement fixées à 100 nm et 10^4 C.m^{-3} .

Les observations ci-dessus montrent que pour un étalement latéral faible de la charge (i.e. rayon inférieur au diamètre de l'apex $r \leq 2R$), ce qui correspond à des situations où les charges sont fortement localisées près de la zone d'injection, la force maximale devient insensible au rayon de la charge. Cette configuration est très intéressante pour déterminer la densité de charge lors des mesures EFDCs. En effet, pour un étalement latéral de charge inférieur à $2R$, la force maximale ne dépend que de la

densité de charge alors que les paramètres de la courbure (C , p) ne sont influencés que par r . Cette configuration peut être utilisée pour quantifier la densité de charges dans une couche mince de SiO_xNy avec $\gamma = 100$ [1]. En effet, en utilisant une pointe revêtue de diamant avec un rayon de courbure R autour de 125 nm et en sachant que la mesure de KFM présente un profil de potentiel de surface de pleine largeur à mi-hauteur autour de 500 nm [1], on peut donc s'attendre à une distribution latérale de charge r de 250 nm soit $(500 / 2)$. On voit bien que la valeur du rayon est égale à $2R$ ce qui correspond à la situation où la force maximale ne dépend que de la densité de charge. Dans ce cas, la force maximale varie linéairement avec la densité de charge et en connaissant expérimentalement la valeur de la force maximale on peut quantifier la densité.

III.1.4.3 Sensibilité des EFDCs à la profondeur des charges

La Figure III. 9 (a) montre l'évolution des courbes de force en fonction de la répartition en profondeur de la charge, le paramètre d . En effet, les Figure III. 9 (b) et Figure III. 9 (c) représentent respectivement l'évolution de la force maximale et l'évolution des paramètres de la courbure (C , p) en fonction de la répartition en profondeur des charges. Comme précédemment, ces figures soulignent que les fonctions $F_0(d)$, $C(d)$ et $p(d)$ sont caractérisées par trois régions. Pour des faibles profondeurs, tous les paramètres logistiques changent lentement lorsque d augmente. Pour une profondeur moyenne par rapport au rayon avec $0.8 < \frac{r}{d} < 5$, la force maximale augmente linéairement avec d et le paramètre p diminue fortement alors que le paramètre C reste constant. Pour une grande profondeur, ce qui correspond à $\frac{r}{d} < 0.8$, F_0 augmente toujours linéairement avec la profondeur avec une pente moins importante que le cas précédant tandis que les paramètres de la courbure restent quasi constants.

De plus, la Figure III. 9 (d) souligne que la force maximale augmente de manière non linéaire avec le carré de la quantité de charge Q .

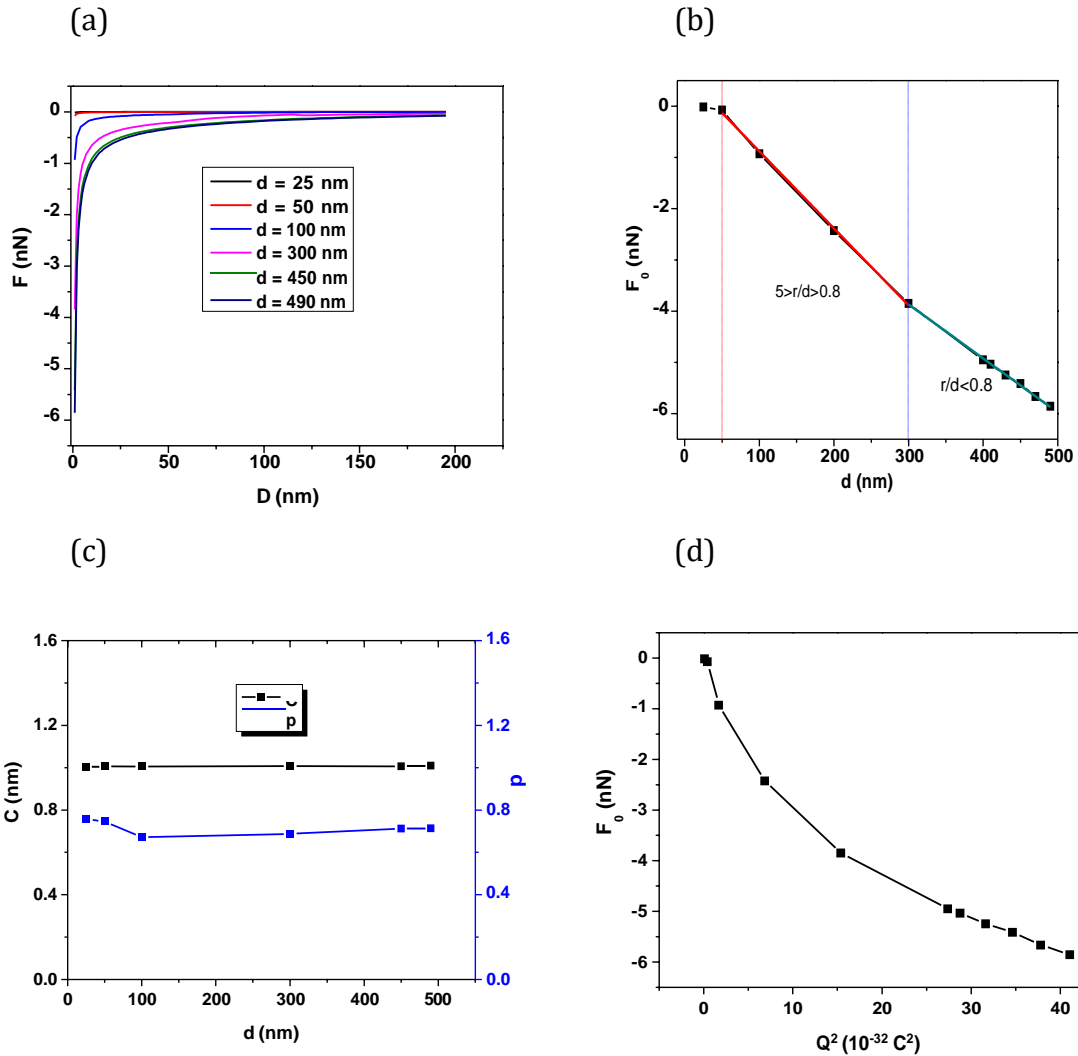


Figure III. 9 (a) La force électrostatique F en fonction de la distance pointe-échantillon D pour différentes profondeurs de la charge d , (b) F_0 en fonction de d , (c) les paramètres de la courbure (C, p) en fonction de r , (d) F_0 en fonction de Q^2 . Le rayon et la densité de charge ont été respectivement fixés à 250 nm et 10^4 C.m^{-3} .

Par conséquent, les EFDCs semblent sensibles à la localisation de la charge dans le volume. En effet, lorsque la charge est située à moins de 50 nm de la surface, la force maximale n'est pas sensible à la profondeur, tandis que les paramètres de la courbure (C, p) sont légèrement influencés par la localisation en profondeur. A l'inverse, lorsque la charge présente un étalement en profondeur important, les paramètres de la courbure deviennent insensibles à la profondeur et la force maximale devient proportionnelle à la profondeur.

III.1.4.4 Sensibilité des EFDCs à la quantité totale de charge Q

Les résultats présentés dans les sections précédentes montrent clairement que les paramètres (C , p) décrivant la courbure de l'EFDC dépendent différemment de la distribution de la charge latérale r et de la charge en profondeur d . En effet, C est indépendant de la distribution des charges alors que p est sensible à la distribution latérale et en profondeur des charges. De plus, comme le montre la Figure III. 10, la façon dont la force maximale augmente avec la quantité de charge Q dépend des paramètres de répartition des charges. Tout d'abord, la force maximale augmente linéairement avec Q^2 uniquement lorsque les dimensions de la répartition de la charge restent constantes. Cependant, en cas de faible dispersion latérale et en profondeur, les paramètres de courbure sont très sensibles à la distribution des charges et la force maximale dépend uniquement de la quantité de charge Q . Lorsque l'étalement de la charge est plus important (latéralement et / ou dans le volume), les paramètres de courbure sont moins sensibles à l'étalement des charges et l'évolution de la force maximale F_0 avec la charge Q dépend de la forme des charges (cf. Figure III. 10). Ainsi, dans ce cas, la détermination de la répartition de la charge dans le volume est moins simple, car pour une force maximale fixée, différentes valeurs de Q sont possibles en fonction de la forme des charges.

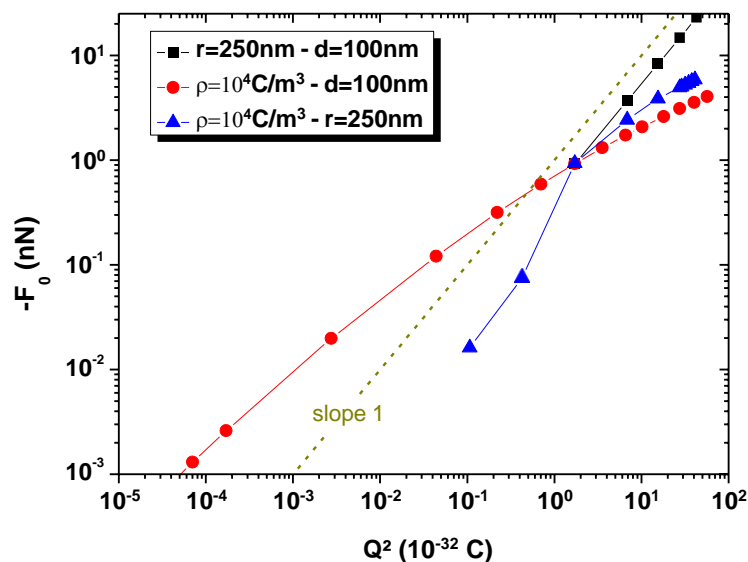


Figure III. 10 Evolution de la force maximale F_0 en fonction du carré de la quantité de charge Q pour différentes configurations de la charge décrite précédemment.

III.1.5 Analyse du potentiel de surface pour l'obtention du rayon de la charge

La méthode KFM permet de mesurer directement le potentiel de surface pour un diélectrique donné. En plus des informations accessibles depuis l'EFDC, le potentiel de surface indique de façon qualitative l'état de charge global du matériau diélectrique étudié et en particulier l'étalement latéral des charges. La Figure III. 11 compare le profil du potentiel de surface et la position du maximum de la courbe de force obtenue expérimentalement pour différentes positions par rapport au point d'injection [1]. Un très bon accord est observé en termes de profils. Néanmoins, la courbe de force électrostatique contient plus d'informations que la force maximale seule, ce qui semble correspondre au potentiel KPFM.

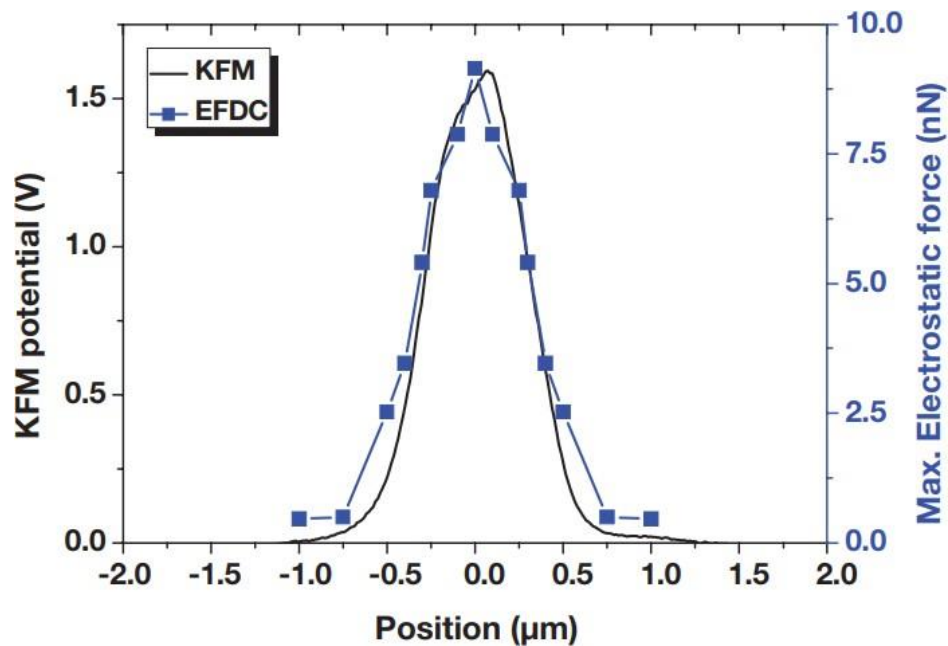


Figure III. 11 Comparaison entre le profil de force maximale d'une courbe de force et le potentiel KFM pour différentes positions par rapport au point d'injection.

III.1.5.1 Principe de mesure du potentiel de surface

Pour faire une mesure du potentiel de surface connu sous le nom de différence de potentiel de contact V_{CPD} , une tension V_{bias} est appliquée sur la sonde AFM. Elle se compose

d'une composante continue V_{dc} et d'une composante alternative V_{ac} à la même fréquence que la fréquence de résonance de la sonde (ω) :

$$V_{bias} = V_{dc} + V_{ac} \sin(\omega t) \quad \text{III. 6}$$

Lorsque la pointe interagit avec la surface, la différence de potentiel de contact V_{CPD} vient s'ajouter aux autres potentiels appliqués à la sonde pour donner une tension totale V_T égale à :

$$V_T = (V_{dc} + V_{CPD}) + V_{ac} \sin(\omega t) \quad \text{III. 7}$$

Cette différence de potentiel et le potentiel appliqué induisent sur la sonde une force électrostatique définie par l'équation suivante :

$$F_E = -\frac{1}{2} \frac{dC}{dz} \left[(V_{dc} + V_{CPD} + V_{ac} \sin(\omega t))^2 \right] \quad \text{III. 8}$$

Le principe de mesure du potentiel de surface consiste à annuler cette force, équation (équation III. 8), en chaque point. Pour cela, la méthode KFM via une boucle d'asservissement, va ajuster la valeur de la composante continue du potentiel appliqué V_{dc} de façon à compenser le potentiel de contact ($V_{dc} = V_{CPD}$) et ainsi annuler la force. De cette façon, la technique KFM permet de mesurer directement la différence de potentiel de surface entre une sonde AFM et un échantillon.

III.1.5.1 Simulation du potentiel de surface

Pour obtenir le potentiel de surface avec le modèle électrostatique, la même procédure que la mesure est utilisée dans le modèle. Tout d'abord, on choisit n points de x_0 à x_{n-1} qui discrétisent la surface du diélectrique, ensuite la pointe va se positionner au-dessus de chaque point x_i avec une distance D , c'est le Lift en AFM (cf. Figure III. 10).

Pour chaque point x_i , plusieurs potentiels sont appliqués successivement à la pointe AFM ($V_{dc} = V_j$). Sachant que la force électrostatique varie de façon parabolique avec le potentiel appliqué [1], il suffit donc de choisir trois potentiels V_1 , V_2 et V_3 pour obtenir la variation complète de la force électrostatique en fonction V_{dc} .

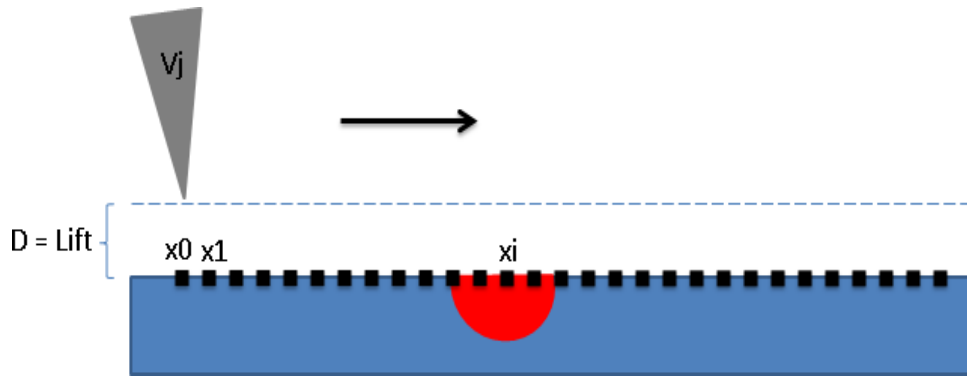


Figure III. 12 Principe d'obtention du potentiel de surface.

En déterminant pour chaque point x_i les coefficients de la parabole a , b et c le potentiel électrostatique V_{dc} qui minimise la force électrostatique F_E est égale à $-\frac{b}{2a}$ ce qui correspond à V_{CPD} (cf. Figure III. 13).

L'équation de la parabole est de la forme $ax^2 + bx + c$.

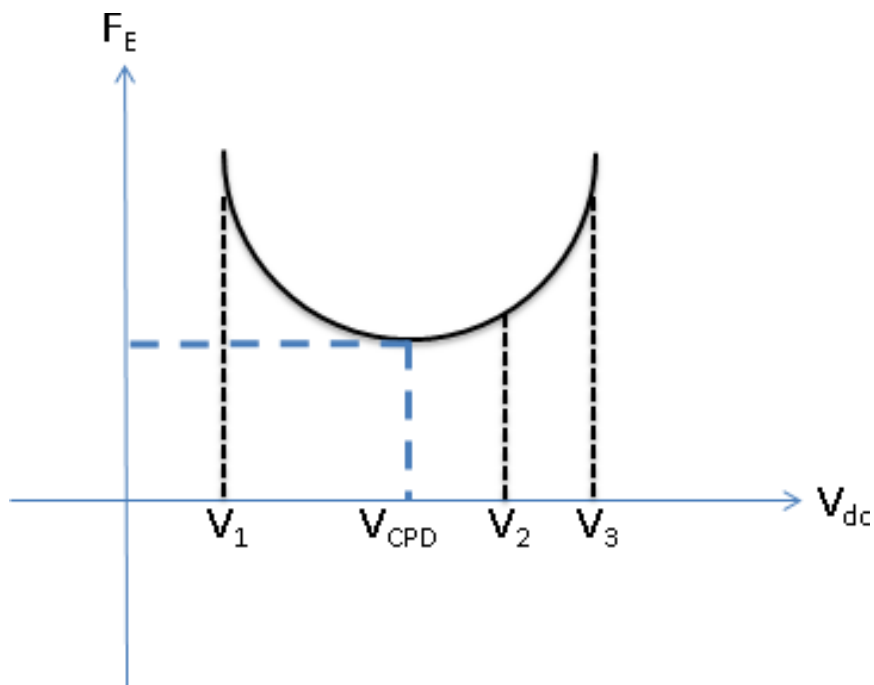


Figure III. 13 La force électrostatique en fonction du potentiel appliqué à la pointe.

En utilisant cette méthode, le potentiel de surface pour une configuration de charge de $r = 250$ nm, $\rho = 5 \times 10^4$ C.m⁻³, $d = 100$ nm et pour des $x_i \in [-1000$ nm, 1000 nm] avec un pas de 1 nm a été simulée en utilisant le modèle électrostatique, cf. Figure III. 14.

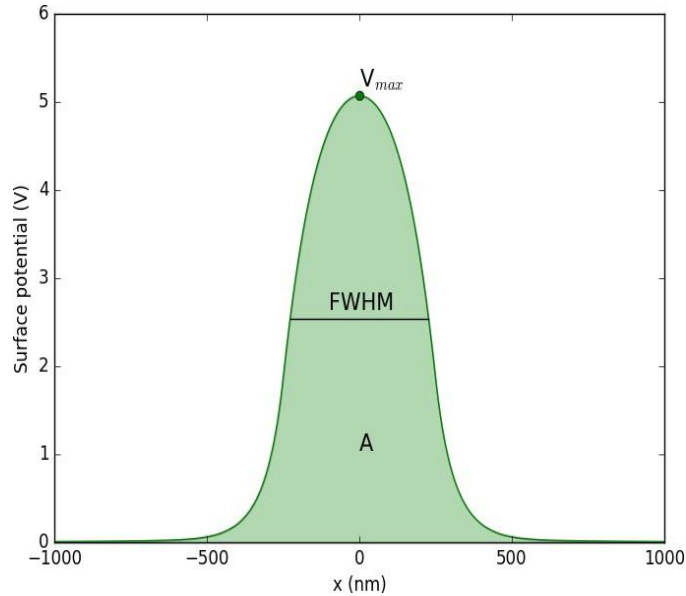


Figure III. 14 Profil du potentiel de surface simulé pour $r = 250$ nm, $\rho = 5.10^4$ C.m⁻³ et $d = 100$ nm.

Le profil de potentiel de surface peut être représenté par trois paramètres Gaussiens : (i) une largeur à mi-hauteur, FWHM, qui représente l'étalement latéral de la charge, (ii) le potentiel maximal V_{max} et (iii) la surface sous le pic du profil qui représente la quantité de charge.

Les Figure III. 15 (a), Figure III. 15 (b) et Figure III. 15 (c) montrent l'influence des paramètres ellipsoïdaux de la charge sur le potentiel de surface. La Figure III. 15 (a) montre l'influence de la densité de charge sur le potentiel de surface en fixant le rayon à 250 nm et la profondeur à 100 nm.

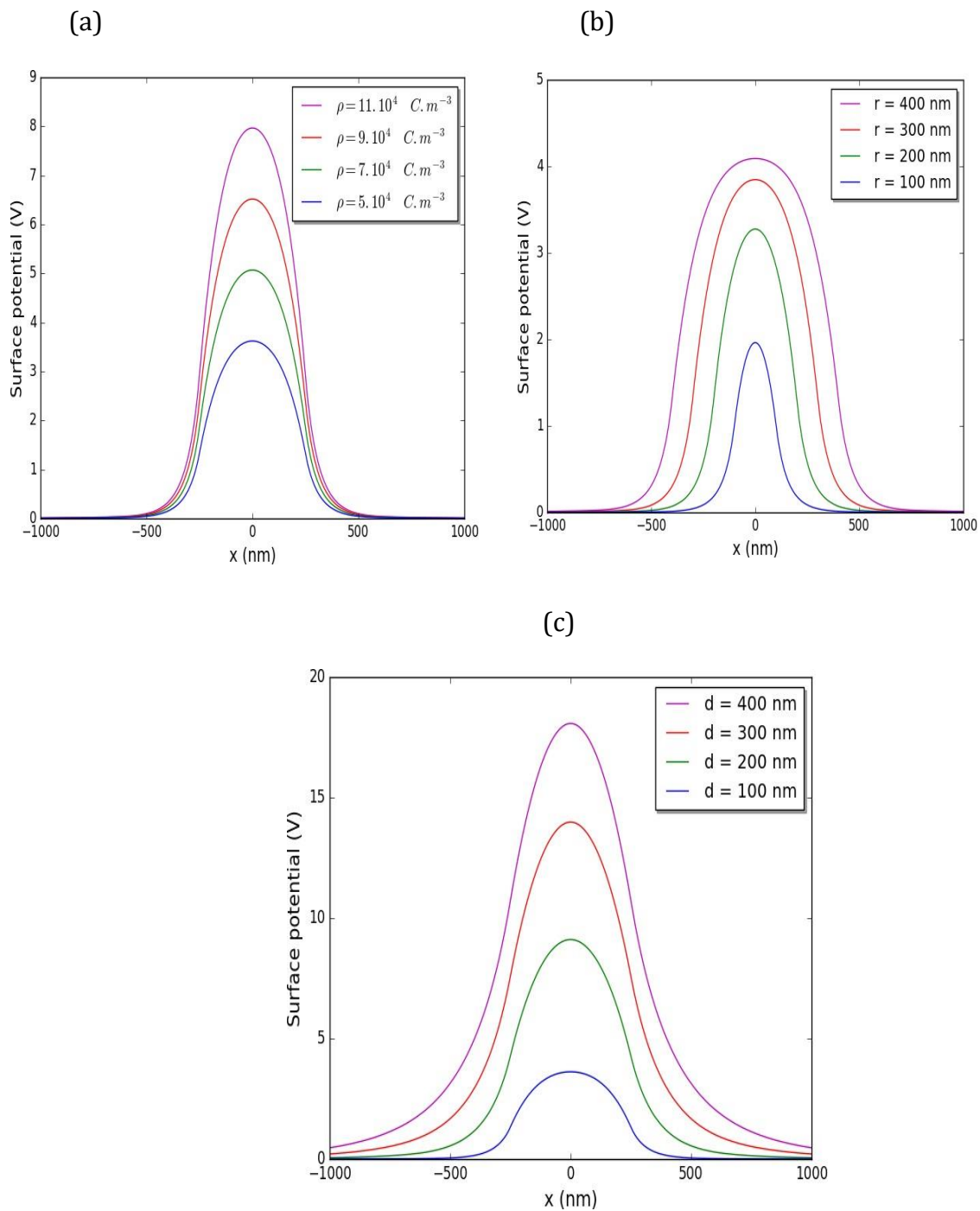


Figure III. 15 L'influence des paramètres de localisation sur le profil du potentiel de surface.

Cette figure souligne que la variation de la densité de charge n'affecte pas le paramètre FWHM qui représente l'étalement latéral des charges. La Figure III. 15 (b) montre l'influence du rayon sur le potentiel de surface en fixant la densité à $5 \cdot 10^4$ C.m⁻³ et la profondeur à 100 nm. On peut directement voir que la variation du rayon de la charge

affecte globalement tous les paramètres Gaussiens du potentiel de surface et en particulier le paramètre FWHM. La Figure III. 15 (c) montre l'influence de la profondeur de la charge sur le profil du potentiel de surface en fixant la densité à 5.10^4 C.m^{-3} et le rayon à 250 nm. Tous les paramètres du potentiel de surface sont affectés par la variation de la profondeur mais on peut constater clairement que la variation du FWHM est beaucoup moins importante par rapport à celle observée avec la variation du rayon.

III.1.5.1 Une méthode pour estimer le rayon de la charge

Les résultats précédents indiquent, que le potentiel de surface est très sensible aux paramètres de charge ρ , d , et surtout à l'étalement latéral des charges, à savoir le paramètre r . En effet, sur la base de ces résultats, nous avons souligné que le paramètre Gaussien FWHM ne dépend globalement que du rayon r . Pour un profil de potentiel de surface donné, obtenu par simulation ou par mesure, nous pouvons immédiatement extraire le paramètre FWHM, puis supposer qu'il s'agisse de l'étalement latéral réel de la charge sur la surface du diélectrique à une constante près. Le raisonnement que nous venons de décrire donne une estimation qualitative du rayon de la charge. Pour une estimation quantitative du rayon, une analyse du paramètre FWHM plus rigoureuse est nécessaire. Dans ce contexte et dans ce qui suit, nous montrerons comment extraire l'étalement latéral exact de la charge r à partir des données de potentiel de surface en n'utilisant que le potentiel de surface et donc sans réaliser aucune modélisation.

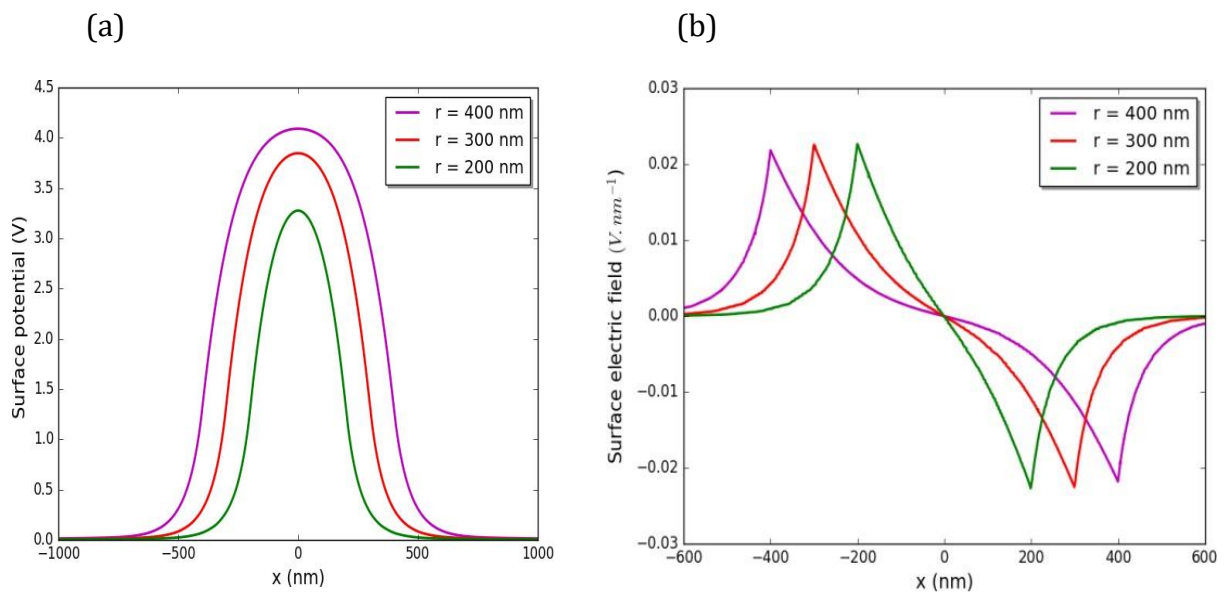
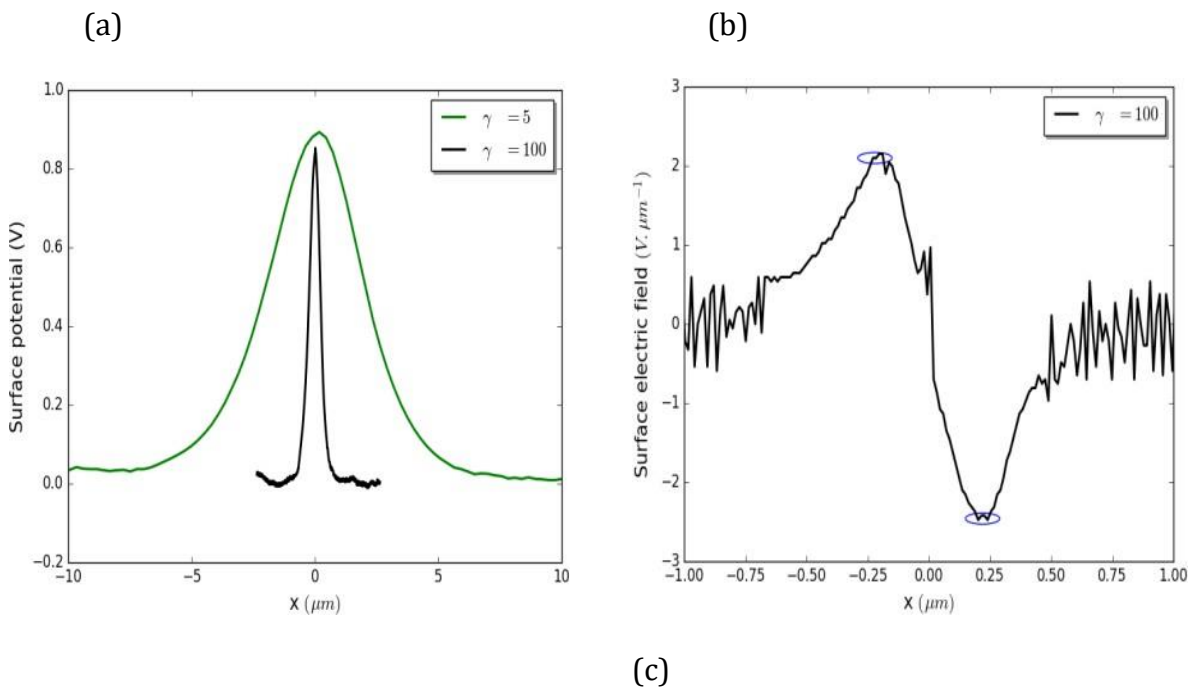


Figure III. 16 Le calcul du rayon de la charge avec le potentiel de surface.

Les Figure III. 16 (a) et Figure III. 16 (b) représentent respectivement le profil du potentiel de surface simulé pour trois valeurs différentes du rayon r et les dérivées premières correspondantes (image des champs électriques de surface). On remarque que ces dérivées possèdent chacune un maximum et un minimum. Le maximum est atteint pour $x = -r$ et le minimum est atteint pour $x = r$, ce qui correspond à la valeur du rayon de la charge. Par exemple, la courbe rouge qui représente le champ électrique de surface obtenu pour $r = 300$ nm, ses points d'extrémums sont (300, -0,022) et (-300, 0,0022). Ainsi, pour un profil du potentiel de surface donné, on peut facilement extraire le rayon de la charge. Cette approche nous allons également la tester sur des données expérimentales obtenues par une mesure KFM.

La Figure III. 17 (a) représente des profils du potentiel de surface obtenus pour des profils de charges injectées au sein de deux couches différentes de matériaux diélectriques. Ces couches ont été déposées sur des substrats de silicium et caractérisées par un paramètre γ , qui représente le rapport de mélange entre SiH₄ et N₂O. Deux valeurs γ différentes (100 et 5) ont été utilisées pour obtenir des caractéristiques électriques différentes. Par exemple, pour un γ de 100, cela signifie que la couche diélectrique correspondante a des propriétés proches de celle de la couche de silice.



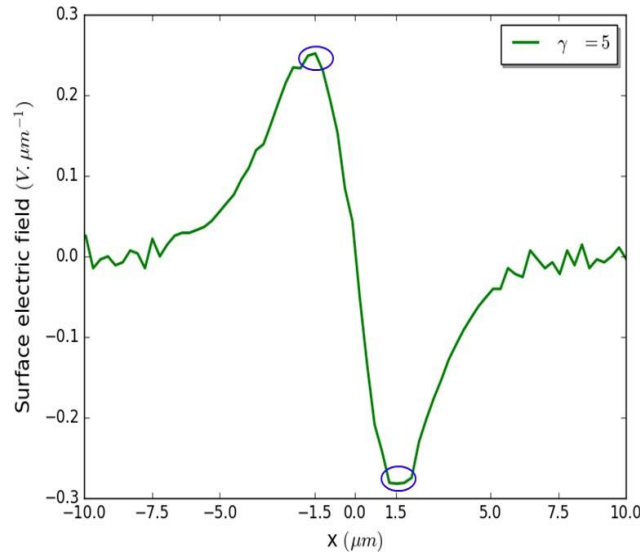


Figure III. 17 Calcul du rayon de la charge à l'aide de données expérimentales.

Comme on peut le voir sur le graphique de la Figure III. 17 (a), les paramètres Gaussiens FWHM, A et V_{max} de la couche $\gamma = 5$ sont plus grands que ceux de la couche γ de 100. Par conséquent, selon les résultats qualitatifs présentés précédemment, nous pouvons dire que pour la couche diélectrique à $\gamma = 100$, les charges sont localisées à proximité du point d'injection donc avec un faible étalement latéral et une faible quantité de charges. Cependant, pour la couche à $\gamma = 5$, celle-ci présente un étalement latéral bien plus élevé et une quantité de charge plus importante.

Les données des profils du potentiel de surface sont issues de procédures expérimentales et sont donc soumis à un bruit aléatoire. Cela conduit à avoir des dérivées premières (image des champs électriques de surface) avec des tracés perturbés. Les Figure III. 17 (b) et Figure III. (c) représentent respectivement la première dérivée du potentiel de surface pour $\gamma = 100$ et pour $\gamma = 5$. Selon la méthode analytique indiquée précédemment, l'étalement latéral des charges peut être obtenu directement à partir des graphiques de ces figures. En effet, pour la couche à $\gamma = 100$, l'étalement latéral exact des charges est d'environ $0,24 \mu\text{m}$ ce qui correspond à 240 nm et pour la couche à $\gamma = 5$ d'environ $1,5 \mu\text{m}$ soit 1500 nm . Ainsi, le calcul de l'étalement latéral exact des charges est vérifié expérimentalement.

III.1.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons constaté que pour des charges à faible étalement latéral (rayon ≤ 5000 nm), la contribution du bras de levier est presque nulle. En effet, pour des charges très localisées au sein du matériau diélectrique, la force électrostatique exercée sur le bras de levier est faible par rapport à celle exercée sur la pointe. Ainsi, dans les investigations à venir concernant l'étude des charges l'utilisation du modèle électrostatique de la pointe est suffisant. Ainsi, en supprimant le bras de levier de la géométrie, le temps de calcul est largement réduit car les équations de la mécanique ne sont pas utilisées.

Le modèle électrostatique de la pointe démontre que les courbes de forces sont sensibles à la localisation de la charge. En effet, nos résultats soulignent que chaque paramètre de la charge a un effet distinct sur les paramètres de la courbe de force : la courbure et la force maximale. L'étalement latéral et en profondeur de la charge n'influence que la courbure alors que la force maximale dépend de tous les paramètres à savoir la densité de charge, les étalements latéral et vertical des charges. Cependant, lorsque la charge reste proche du point d'injection (petit étalement latéral et en profondeur), la force maximale dépend uniquement de la densité. Par conséquent, cette configuration est la plus favorable pour déterminer directement la répartition des charges à partir de l'EFDC.

Nous avons aussi utilisé le modèle électrostatique pour simuler le potentiel de surface KPFM. Ce modèle nous a permis d'étudier la sensibilité du potentiel de surface aux paramètres de charge, tels que la densité de charge, le rayon de charge et la profondeur des charges. Nous avons proposé une méthode très simple pour déterminer l'étalement latérale des charges en connaissant uniquement la distribution du potentiel de surface. Les résultats de ce chapitre montrent bien que les EFDC sont très sensibles à la localisation de la charge ce qui ouvre une possibilité pour la localisation de la charge injectée dans des couches diélectriques minces.

Bibliographie

- [1] C. Villeneuve-Faure, L. Boudou, K. Makasheva, G. Teysseire, "Towards 3D charge localization by a method derived from atomic force microscopy: the electrostatic force distance curve", *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol 47, 455302, 2014.

**Chapitre IV : Utilisation de techniques
d'optimisation comme outils pour localiser la
charge : notions de base et étude de la faisabilité**

IV.1 Problématique

IV.1.1 Introduction

Dans le premier chapitre, nous avons vu que la charge d'espace, à court terme, est responsable de la dégradation des matériaux diélectriques utilisés en micro-électronique : vieillissement prématuré voire leur rupture. À long terme, cette charge qui s'accumule de plus en plus peut provoquer une dérive majeure dans le comportement des composants, et, finalement, limiter fortement leur durée de vie. Par conséquent, le développement de techniques de mesure à haute résolution spatiale pour localiser la charge d'espace dans les diélectriques minces est nécessaire pour améliorer leur fiabilité. Le dispositif retenu durant cette thèse pour atteindre ce type d'objectif est le microscope à force atomique (AFM). Pour ce faire nous avons développé un modèle élément finis qui permet de modéliser la présence des charges très localisées dans le diélectrique par le calcul de la force électrostatique induite par celle-ci. Nous avons pu constater que la force électrostatique induite sur le bras de levier par une distribution de charges très localisée est quasiment nulle. En effet, pour une distribution de charges très localisée il n'y a que la pointe qui est sensible à la charge. Par conséquent, pour des situations analogues, le modèle pointe seule sera utilisé pour étudier l'état de charge des isolants et leur capacité à stocker / dissiper les charges. Les résultats de ce modèle électrostatique discuté ici, permettent d'affirmer qu'une courbe de force peut être simulée en connaissant les paramètres ellipsoïdaux de la charge : le rayon r , la profondeur d et la densité ρ (cf. *Figure IV. 1*).

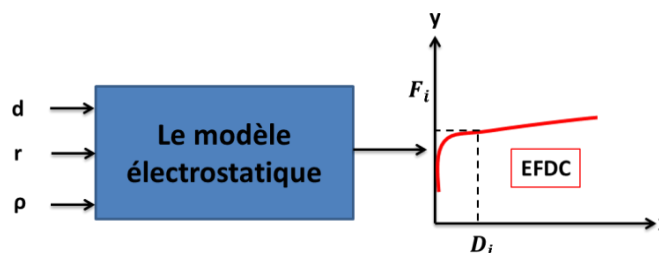


Figure IV. 1 Principe d'obtention d'une courbe de force par le modèle électrostatique.

Le but principal de nos travaux de recherche est de mettre en place un système capable de localiser la charge d'espace piégée dans le matériau à partir d'une courbe de

force obtenue expérimentalement. Nous cherchons donc à inverser le processus du modèle développé jusque-là, c'est à dire à partir d'une courbe de force donnée retrouver les paramètres de la charge correspondants, il s'agit de résoudre un problème inverse.

Le but de ce chapitre est donc de proposer une approche permettant d'inverser le modèle, et de trouver les paramètres de la charge (le rayon r , la profondeur d et la densité ρ) à partir des données expérimentales de la courbe de force obtenue par l'AFM qu'on appelle EFDC-REF (cf. Figure IV. 2).

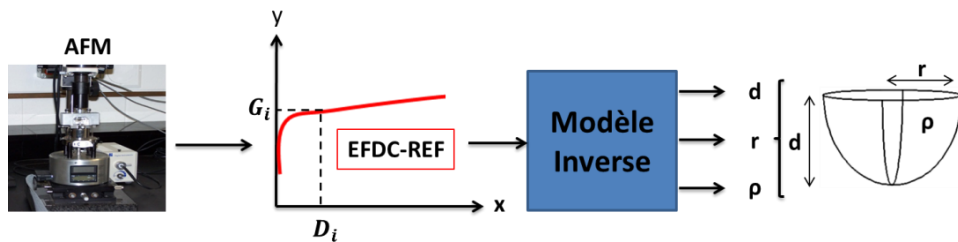


Figure IV. 2 Principe du modèle inverse pour l'EFDC.

La courbe de force de référence EFDC-REF est représentée par un ensemble de points de coordonnées (D_i, G_i) pour $i = 0 \dots N$. G_i représente la force électrostatique obtenue pour une distance sonde-diélectrique D égale à D_i .

IV.1.2 Modélisation inverse pour les EFDCs

La Figure IV. 3 présente globalement le principe de notre modèle inverse qui permettra de trouver les paramètres de la charge à partir d'une courbe de force donnée EFDC-REF. Dans notre cas, il n'est pas possible de déterminer de modèle analytique par inversion du modèle direct. La détermination du modèle inverse est donc formulée comme un problème d'optimisation : nous cherchons, pour chaque configuration étudiée, le triplet (d, r, ρ) qui générera une courbe EFDC la plus proche de celle mesurée au sens des moindres carrés. C'est un processus itératif que nous détaillerons dans la suite du chapitre.

La première étape de l'inversion notre modèle consiste à initialiser les paramètres de la charge d , r et ρ . Pour cela, les intervalles de définition de chaque paramètre sont bien déterminés et sont basés sur des considérations expérimentales et numériques. En effet la résolution nanométrique de l'AFM nous contraint sur l'étalement spatial minimum

de la charge : si celle-ci a un rayon ou une profondeur plus petit que 10 nm alors elle s'avère difficilement détectable en pratique. Par conséquent, dans l'inversion du modèle, la profondeur de la charge sera toujours plus grande que 10 nm mais inférieure à l'épaisseur du diélectrique. De la même manière, le rayon ne doit pas être plus petit que 10 nm. Pour sa borne haute, le rayon doit être inférieur à 5000 nm afin de garantir que l'effet du bras de levier soit bien négligeable (cf. chapitre III). Quant à la densité de charge, elle est supposée positive ou nulle. L'initialisation des paramètres de la charge d , r et ρ est donc choisi dans des intervalles de définition bornés par des critères physiques et géométriques.

La deuxième étape consiste à injecter ces paramètres dans le modèle électrostatique direct afin d'obtenir une courbe de force associée. Cette courbe de force est représentée par un ensemble de couple (D_i, F_i) pour $i = 0 \dots N$.

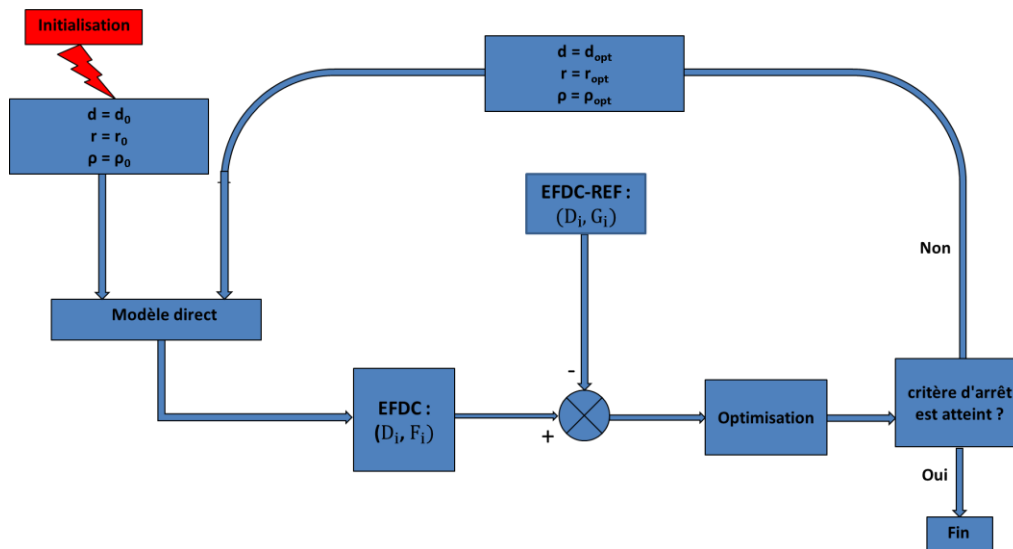


Figure IV. 3 Fonctionnement du modèle inverse avec EFDC.

La troisième étape consiste à calculer la différence en moindres carrés relatifs entre cette courbe de force et la courbe de force de référence EFDC-REF. Cette différence est considérée comme une fonction dite « objectif » qui sera minimisée à l'aide d'un processus d'optimisation itératif. A chaque itération, l'algorithme d'optimisation choisi générera un triplet d , r et ρ , qui sera utilisé par l'étape 2. Une fois que le critère d'arrêt est atteint, l'algorithme d'optimisation s'arrête et nous considérons que les valeurs optimales des paramètres de la charge sont ainsi déterminées. Le critère d'arrêt est choisi afin de

garantir que l'algorithme s'arrête après un nombre fini d'itérations. Ce nombre d'itérations a été déterminé expérimentalement sur diverses configurations afin d'assurer que le dernier itéré soit suffisamment proche d'un minimum local.

Afin de montrer en détail l'utilisation du modèle inverse et les résultats obtenus, nous allons tout d'abord rappeler rapidement ce que nous entendons par modèle direct. Puis dans un second temps, nous présentons des rappels d'optimisation numérique afin d'identifier un panel assez large d'algorithmes d'optimisation qui pourrait être performant à la résolution de notre problème.

IV.1.3 Modèle direct

Pour bien définir l'utilisation inverse du modèle direct, nous avons besoin premièrement de rappeler la définition du modèle direct. Ce modèle n'est autre que le modèle électrostatique détaillé dans le chapitre III. Pour rappel, ce modèle permet de calculer la force électrostatique pour une distance pointe-diélectrique donnée. En faisant varier cette distance sur un intervalle bien défini nous obtenons un ensemble de couple, force et distance. Ce nuage de points permet d'obtenir une courbe de force ou EFDC. Pour des paramètres de charge donnés, trois étapes sont nécessaires pour le modèle afin d'obtenir une courbe de force correspondante. La première étape consiste à construire la géométrie du modèle en se basant sur le dispositif expérimental. La deuxième étape consiste à mailler la géométrie de manière structurée et optimisée afin de réduire le temps de calcul. La dernière étape consiste à résoudre les équations électrostatiques par la méthode des éléments finis.

Avant de présenter en détail l'algorithme d'optimisation utilisé, nous allons tout d'abord rappeler les notions de base de l'optimisation numérique. La section suivante s'adresse donc à des non-spécialistes de l'optimisation.

IV.2 Optimisation : notions de base

Cette section propose, à partir d'exemples simples, une première approche de la problématique de l'optimisation. Il souligne l'importance de l'activité de modélisation (et de la reformulation) des problèmes qui conditionnent largement l'efficacité de la

résolution. Une bonne connaissance et une bonne maîtrise des outils mathématiques sont souvent déterminantes dans cette démarche de modélisation.

IV.2.1 Qu'est-ce qu'un problème d'optimisation

Le but de cette partie est de fournir un exposé des principales méthodes d'optimisation numérique. En effet en optimisation numérique, le point crucial consiste à identifier correctement le type de problème considéré afin de savoir quelle famille d'algorithmes il convient d'utiliser. Ainsi l'objectif de cette partie est de cibler des méthodes d'optimisation utiles à notre problème. Dans une première partie, nous rappellerons succinctement les éléments théoriques nécessaires à la compréhension des approches locales et globales présentées dans les sections suivantes.

De manière assez formelle, un problème d'optimisation se pose lorsque l'on cherche le point d'un ensemble X pour lequel une fonction f définie sur cet ensemble prend une valeur minimale ou maximale. Maximiser f étant strictement équivalent à minimiser $-f$, il suffit d'étudier les problèmes de minimisation. De manière générique, nous écrirons donc les problèmes d'optimisation de la manière suivante :

$$(P) \left\{ \begin{array}{l} \min f(x) \\ \text{Sous la contrainte} \quad x \in X \end{array} \right. \quad \text{IV. 1}$$

Où :

- La variable x est appelée variable de décision.
- L'ensemble X représente l'ensemble admissible ou réalisable.
- La fonction $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ s'appelle fonction objectif (coût, critère).

Suivant la nature de X il est possible de séparer l'optimisation en trois grandes classes : si $X \subset \mathbb{Z}^n$ alors c'est une optimisation discrète (ou combinatoire), si $X \subset \mathbb{R}^n$ alors c'est une optimisation continue, et si $X \subset \mathbb{Z}^n \times \mathbb{R}^n$ alors c'est une optimisation mixte.

Deux approches possibles (locales ou globales) :

- L'optimisation locale dont le but est de trouver des minima locaux. On dit que x^* est un minimum local s'il existe un voisinage $V \subseteq X$ de x^* tel que $f(x^*) \leq f(x)$ pour tout x dans V (cf. Figure IV. 4). Dans le cadre de

ce mémoire un voisinage V de x^* peut se ramener à une boule centrée en x^* de rayon μ (cf. Figure IV. 5) :

$$\forall x \in V, \|x - x^*\| < \mu$$

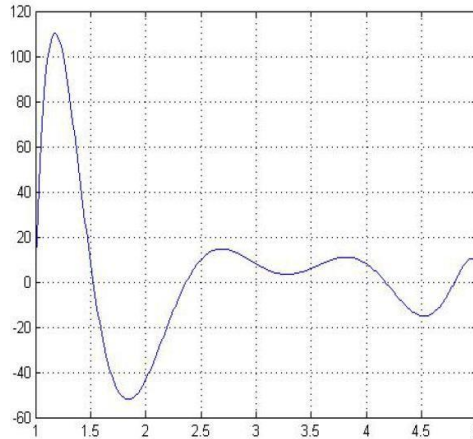


Figure IV. 4 Fonction ayant plusieurs minimas locaux.

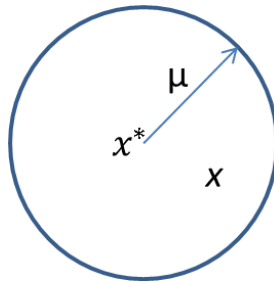


Figure IV. 5 Définition d'un voisinage.

- L'optimisation globale qui s'attache à déterminer le minimum de tout l'espace de recherche : x^* est un minimum global si et seulement si $f(x^*) \leq f(x), \forall x \in X$.

Les méthodes d'optimisation globale n'ont de sens que lorsque le problème considéré n'est pas convexe. En effet, si le problème traité est convexe, alors les méthodes locales fournissent un minimum global à partir de l'initialisation utilisée. Lorsque l'on fait de l'optimisation globale, le point le plus délicat est souvent de certifier que le minimum obtenu est global.

Dans le cadre de cette thèse nous nous intéressons plus particulièrement au minimum local. En effet, une solution locale de notre triplet rayon, profondeur et densité

représente la localisation de la charge d'espace associée à une courbe de force donnée. La question que l'on peut se poser est : existe-t-il plusieurs minimas locaux du triplet qui s'associe à une courbe de force donnée ? Dans ce cas, comment déterminer celle qui correspond à la vraie géométrie et densité de la charge d'espace.

IV.2.2 Classification des méthodes d'optimisation

La résolution d'un problème d'optimisation est étroitement liée à la granularité avec laquelle nous pouvons le caractériser. Ainsi les problèmes d'optimisation sont souvent classés en plusieurs grandes familles permettant une identification rapide, par exemple :

- L'optimisation discrète où $K \subset \mathbb{Z}^n$,
- L'optimisation numérique où $K \subset \mathbb{R}^n$,
- La commande optimale où K est un espace de fonctions (donc infini-dimensionnel).

Avec K un ensemble de contraintes fonctionnelles, c.-à-d. défini par des contraintes égalités et/ou inégalités.

Notons qu'il existe classiquement une autre branche qui peut aussi se décliner selon son domaine de contraintes : l'optimisation multicritères où l'on cherche à minimiser plusieurs fonctions objectifs simultanément. De plus, il existe plusieurs problèmes classiques que nous pourrions potentiellement utiliser, leur description est donnée ci-dessous :

- Les problèmes linéaires : un problème est linéaire si la fonction objectif et les fonctions qui définissent les contraintes sont linéaires.
- Les problèmes quadratiques : un problème est quadratique si la fonction objectif est quadratique et les fonctions qui définissent les contraintes sont affines
- Les problèmes convexes sont les problèmes de la forme $\min f(x)$ dans lesquels f est une fonction convexe et le domaine des contraintes K est un ensemble convexe. Un problème quasi-convexe est défini de manière identique, à l'exception de f qui est, dans ce cas, quasi-convexe.

IV.2.3 Modélisation mathématique

La modélisation mathématique passe par trois étapes afin de formuler le problème d'optimisation sous la forme de l'équation IV. 1. La première étape consiste à définir les variables de décision sur lesquelles nous pouvons agir. Les variables sont des éléments de \mathbb{R}^n . La deuxième étape consiste à définir l'expression de la fonction-objectif, $f(x)$ en termes de variables de décision. La dernière étape consiste à exprimer les contraintes en termes de variables de décision généralement sous la forme d'égalités et d'inégalités :

$$h_i(x) = 0, i = 1, \dots, m; \quad g_j(x) \leq 0, j = 1, \dots, p \quad \text{IV. 2}$$

Pour illustrer cette méthodologie on donne deux exemples concrets, le problème de 'sac à dos' et le problème de 'canettes' modélisés sous forme de problèmes d'optimisation (cf. Annexe I).

La modélisation mathématique repose sur la définition des variables de décisions, des contraintes et de la fonction objectif. Dans notre cas, nos variables de décisions sont les paramètres de la charge, à savoir le rayon, la profondeur et la densité. En effet, l'algorithme d'optimisation doit déterminer quelles valeurs attribuer aux paramètres de la charge afin de reproduire le plus fidèlement possible la courbe de force de référence. Comme déjà expliqué précédemment pour les contraintes, nous devons prendre en compte les variables de décisions sur des intervalles de définition bornés par des critères physiques et géométriques. La fonction objectif quant à elle est l'erreur relative entre une courbe de force de référence et une courbe de force obtenue par modèle électrostatique. Nous détaillerons tout cela dans la section IV. 3.

Dans le cadre de l'optimisation, la modélisation mathématique joue un rôle primordial plus que la résolution du problème elle-même. En effet, une fois que le problème d'optimisation est modélisé, la résolution est facilement mise en place à l'aide de solveurs. S'il est vrai que l'on dispose, depuis quelques années, de solveurs généraux performants pour résoudre beaucoup de problèmes d'optimisation (p.ex. CPLEX [1], XPress [2], ParadisEO-MOEO [3]), la capacité de ces outils à résoudre les problèmes les plus difficiles (du fait de leur taille ou de leur structure) dépend beaucoup de la façon dont les problèmes sont formulés. Une bonne connaissance et une bonne maîtrise des outils

mathématiques qui sont présentés par la suite apparaissent alors indispensables en vue d'une utilisation efficace des logiciels disponibles.

IV.2.4 Formulation standard d'un problème d'optimisation

Il est primordial de formuler son problème d'optimisation suivant un système standard (cf. équation IV. 3) pour bien utiliser les différentes approches de résolution d'un problème d'optimisation. Il faut noter que certains solveurs et logiciels exigent parfois que les problèmes soient formulés d'une manière particulière.

Un problème d'optimisation peut s'écrire de la manière suivante :

$$\begin{array}{ll} \min f(x) & \\ \text{Sous} & h_i(x) = 0, i = 1, \dots, m \\ \text{contraintes} & g_j(x) \leq 0, j = 1, \dots, p \end{array} \quad \text{IV. 3}$$

$$\text{Avec } X = \{x \in \mathbb{R}^n : h_i(x) = 0, i = 1, \dots, m ; g_j(x) \leq 0, j = 1, \dots, p\}$$

Suivant la forme de la fonction objectif f et des contraintes h et g nous pouvons distinguer plusieurs sous classes :

- Optimisation sans contraintes ($m = p = 0$)
 - Optimisation linéaire : f est linéaire.
 - Optimisation non linéaire : f est non linéaire.
 - Optimisation « boîte noire » : pas de forme mathématique explicite de f .
- Optimisation sous contraintes ($m \neq 0$ et/ou $p \neq 0$)
 - Optimisation linéaire : les fonctions f , h et g sont linéaires.
 - Optimisation non linéaire : f est non linéaire, h et g sont quelconques.
 - Optimisation « boîte noire » : pas de forme mathématique explicite de f ou g ou h .

Dans notre cas, l'objectif à minimiser est la différence en moindre carré entre une courbe de force de référence qui est une donnée constante et une courbe de force calculée par le modèle électrostatique qui est une « boîte noire » (cf. Figure IV. 6).

Le terme « boîte noire » est la représentation d'un système sans considérer son fonctionnement interne.

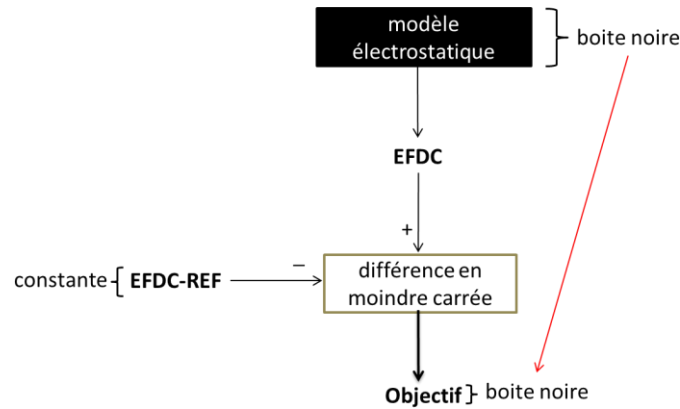


Figure IV. 6 Objectif est boîte noire.

En effet, le modèle électrostatique permet de calculer une courbe de force pour une localisation de charge connue, ce calcul passe par la résolution des équations électrostatique de manière numérique. La géométrie du modèle étant complexe il est impossible de connaître la solution analytique de ces équations. De ce fait, nous considérons que le modèle électrostatique est « boîte noire » et par conséquent, nous ne pouvons pas faire d'hypothèses sur la forme analytique de la fonction objectif puisqu'elle est fonction de l'EFDC et calculée par le modèle électrostatique. Ainsi, la fonction objectif est considérée comme une boîte noire (cf. Figure IV. 6).

IV.2.5 Qu'est-ce qu'une solution ?

Résoudre et trouver une solution du problème IV. 3 signifie de trouver $x^* \in X$ tel que :

$$\forall x \in Z, f(x^*) \leq f(x) \quad \text{IV. 4}$$

Le point x^* est un minimum global du problème IV. 3 si $Z = X$, ou minimum local si $Z = V(x^*)$ i.e un voisinage strict de x^* . Toutefois, le minimum global est généralement difficile à déterminer de manière fiable. Pour cette raison au lieu de chercher des points vérifiant l'inégalité $f(x^*) \leq f(x)$ pour tout $x \in X$, il est possible de le vérifier dans un voisinage de x^* , $V(x^*)$.

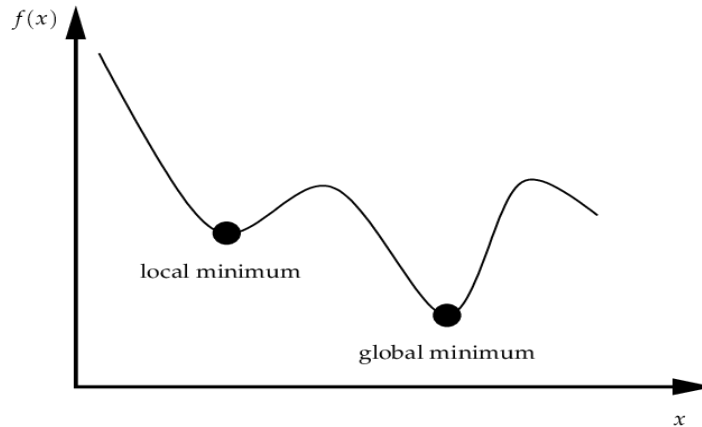


Figure IV. 7 Minimum local et global.

Il est très difficile d'utiliser la définition donnée à l'équation IV. 4 pour retrouver le minimum sauf sur des cas simples. Cependant nous avons à notre disposition des outils théoriques, comme les conditions d'optimalité telles que des *conditions nécessaires* qui permettent de restreindre l'ensemble des candidats potentiels et des *conditions suffisantes* pour attester qu'un candidat est bien un minimum. Ces conditions seront ensuite utilisées pour guider les algorithmes d'optimisation dans la recherche du minimum.

IV.2.6 Conditions d'optimalité

Si une fonction dérivable f de \mathbb{R} dans \mathbb{R} admet un extremum en un point alors sa dérivée doit s'annuler en ce point. Ce principe peut s'étendre à des fonctions définies sur \mathbb{R}^n et les conditions d'optimalité (nécessaires ou suffisantes) sont obtenues à l'aide de la différentielle première (conditions d'ordre 1) ou seconde (conditions d'ordre 2). Les conditions suffisantes reviennent à imposer à f d'être convexe au voisinage du minimum. En mathématiques, une fonction réelle d'une variable réelle est dite convexe si pour deux points A et B du graphe de la fonction, le segment [AB] est entièrement situé au-dessus de ce même graphe (cf. Figure IV. 8).

Dans cette partie nous ne détaillerons que les conditions d'optimalité de l'optimisation sans contraintes ($X = \mathbb{R}^n$).

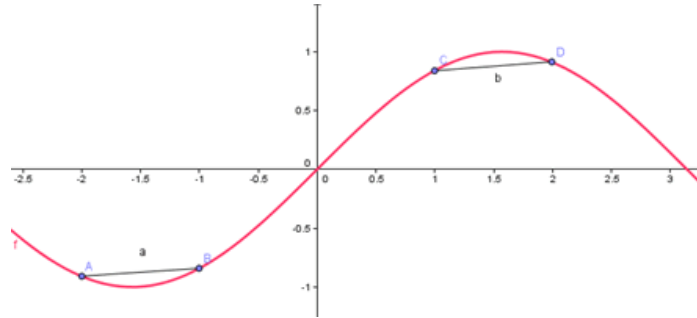


Figure IV. 8 La convexité.

Comme mentionné plus haut, on parle d'optimisation sans contraintes lorsqu'on cherche un minimum local ou global d'un problème d'optimisation sans contraintes :

$$(P) \left\{ \begin{array}{l} \min f(x) \\ x \in \mathbb{R}^n \end{array} \right. \quad \text{IV. 5}$$

Certains problèmes sont naturellement sans contraintes et il est également possible d'approximer des problèmes avec contraintes par des problèmes sans contraintes.

IV.2.6.1 Condition nécessaire d'optimalité locale du 1er ordre

Soit x^* un minimum local de (P). Si l'on suppose que f est différentiable en x^* , alors nous avons :

$$\nabla f(x^*) = 0 \quad \text{IV. 6}$$

La condition nécessaire de premier ordre (cf. équation IV. 6) joue un rôle crucial en optimisation puisqu'elle détermine les candidats à être des optima. Les points vérifiant cette condition sont appelés points critiques ou points stationnaires. Parmi eux, il y a des minimas locaux, des maximas locaux et des points qui ne sont ni l'un ni l'autre. Ces derniers sont dits points selles. Si la fonction f est convexe l'équation IV. 6 est suffisante.

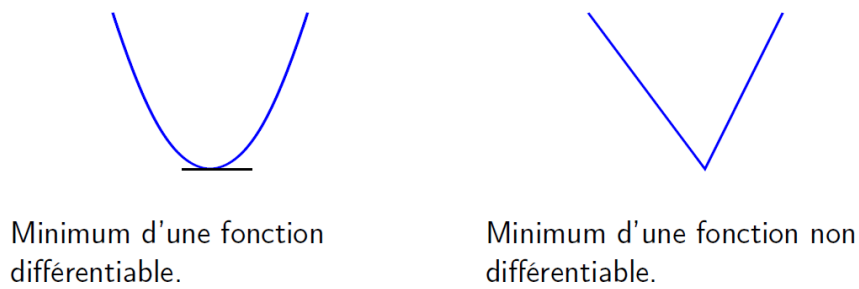


Figure IV. 9 Minimum d'une fonction différentiable et d'une fonction non différentiable.

IV.2.6.2 Condition nécessaire d'optimalité locale du second ordre

Soit x^* un minimum local de (P). Si l'on suppose que f est deux fois différentiable dans le voisinage de x^* , $V(x^*)$, alors :

$$\nabla f(x^*) = 0 \text{ et } \nabla^2 f(x^*) \succeq 0 \quad \text{IV. 7}$$

La matrice hessienne $\nabla^2 f(x^*)$ est semi-définie positive ($\succeq 0$) en x^* et le gradient associé est nul. En algèbre linéaire, la notion de matrice semi-définie positive est analogue à celle de nombre réel positif ou nul. Soit une matrice symétrique réelle, elle est dite semi-définie positive (ou définie positive) si toutes les valeurs propres sont strictement positives ou nulles.

Avoir une matrice hessienne $\nabla^2 f(x)$ semi-définie positive revient à dire que la fonction f est strictement convexe en x .

IV.2.6.3 Condition suffisante d'optimalité locale du second ordre

Supposons que f est deux fois différentiable sur $V(x^*)$. Si nous avons :

$$\nabla f(x^*) = 0 \text{ et } \nabla^2 f(x^*) \succ 0 \quad \text{IV. 8}$$

C'est-à-dire que la matrice hessienne $\nabla^2 f(x^*)$ est définie positive ($\succ 0$) en x^* et le gradient associé est nul. Alors le point x^* est un minimum local strict de (P). Ces conditions de minimalité nécessaires et suffisantes seront ensuite utilisées pour guider les algorithmes locaux ou globaux dans la recherche du minimum local ou global.

IV.2.7 Méthodes d'optimisation locale

IV.2.7.1 Cas sans contrainte

Nous abordons dans cette partie la description des algorithmes utilisés pour résoudre les problèmes d'optimisation sans contraintes. Sur la base des conditions d'optimalité décrites précédemment, nous exposerons dans un premier temps une classe de méthodes appelées méthodes de descente. S'inscrivent dans cette classe de méthodes, les méthodes dites du premier ordre comme les algorithmes de gradient ou des directions conjuguées, ainsi que celles du deuxième ordre comme les algorithmes de Newton ou de quasi-Newton.

La plupart des algorithmes d'optimisation locale [4] sont itératifs et construisent une suite $x_0, x_1, x_2, x_3, x_4, \dots, x_k, \dots, x_n$ convergente vers un point satisfaisant les conditions d'optimalité (cf. Figure IV. 10).

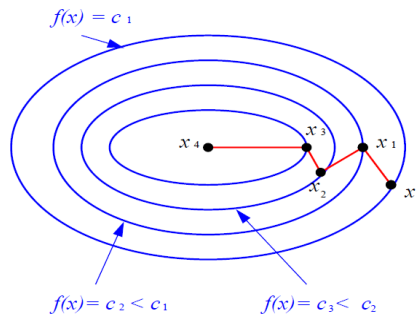


Figure IV. 10 Principe de base des algorithmes itératifs : améliorations successives.

À l'itération k nous disposons d'une « approximation » d'un minimiseur et nous voulons construire un nouvel itéré qui approche « mieux » le minimiseur. L'algorithme s'arrête lorsque l'approximation est jugée satisfaisante. Les algorithmes d'optimisation auront donc la forme suivante (algorithme modèle) :

1. Initialisation

- $k = 0$: choix d'un point initial $x_0 \in \mathbb{R}^n$.

2. Etape courante (itération k) : (cf. Figure IV. 11).

- Calcul d'une direction de recherche d_k .
- Calcul d'un pas α_k tel que $x_k + \alpha_k d_k$ est meilleur que x_k .
- Nouvel itéré $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.

3. Critère d'arrêt

- Si x_k est satisfaisant, STOP.
- Sinon, $k = k + 1$ et retour à l'étape 2.

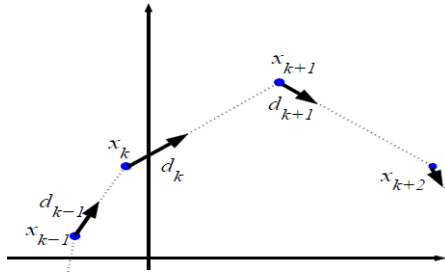


Figure IV. 11 Calcul d'une direction de recherche.

Le point initial est un estimé de la solution ou, à défaut, un point engendré aléatoirement. Le critère d'arrêt peut être :

- $\|\nabla f(x_k)\| \leq \varepsilon$ (Condition nécessaire du premier ordre)
- $\|f(x_{k+1}) - f(x_k)\| \leq \varepsilon$ ou $\|x_{k+1} - x_k\| \leq \varepsilon$ (Stationnarité)
- Nombre d'itérations $k < MaxIter$ ou d'évaluations de $f < MaxEval$

La direction de recherche d_k est usuellement calculée en remplaçant f par une fonction f_k simple (par exemple quadratique) au voisinage de x_k . Le choix de la direction d_k et du pas α_k doivent permettre de diminuer la valeur de f .

Un vecteur $d \in \mathbb{R}^n$ est une direction de descente d'une fonction $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ différentiable en x si :

$$\langle \nabla f(x), d \rangle < 0 \tag{VI. 9}$$

Où le symbole \langle , \rangle désigne le produit scalaire usuel.

D'après cette définition il y a une infinité de directions de descente (cf. Figure VI. 12).

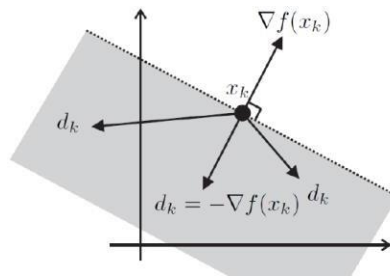


Figure VI. 12 Directions de descente.

Le choix du $d_k = -\nabla f(x_k)$ conduit aux algorithmes de gradient. La direction de plus forte descente est appelé $-\nabla f(x)$.

La convergence de ce type d'algorithme dépend fortement des valeurs du pas α_k . Il convient toutefois d'être prudent : en choisissant α_k trop grand, les valeurs de $f(x_k + \alpha_k d_k)$ ne parviendront pas à décroître, il est même possible d'obtenir un algorithme oscillant ; en choisissant α_k trop petit, l'algorithme aura une convergence lente. Pour trouver le pas optimal pour α_k pour chaque itération k il faut résoudre le sous problème d'optimisation qui consiste à rechercher α_k solution du problème d'optimisation unidimensionnelle suivant :

$$\min_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha d_k) \quad \text{VI. 10}$$

Le sous problème d'optimisation (équation VI. 10) reste difficile à résoudre en général et il est coûteux d'obtenir sa solution. De plus, il n'est pas forcément pertinent d'utiliser du temps de calcul pour le résoudre. En effet, un pas fixe et constant peut être considéré durant toutes les itérations $\alpha_k = \alpha$, mais il n'y a pas de garantie que cela donne un pas qui fait converger.

L'algorithme modèle est la base de tout type d'algorithmes de recherche locale, Par exemple [4] utilise des algorithmes à directions de descente, méthode de gradients conjugués, algorithmes de région de confiance et méthodes newtoniennes.

Méthode de gradients conjugués (CG)

La méthode de gradients conjugués est utilisée pour résoudre les problèmes quadratiques de la forme :

$$\min f(x) = \frac{1}{2} \langle x, Qx \rangle - \langle b, x \rangle \quad \text{VI. 11}$$

avec Q une matrice symétrique et définie positive.

On dit que deux directions $d_1, d_2 \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ sont Q -conjuguées (ou Q -orthogonales) si : $\langle d_1, Qd_2 \rangle = 0$.

L'algorithme des directions conjuguées consiste, à partir d'un point initial x_0 , à définir x_1, x_2, \dots via l'itération : $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.

Où d_0, d_1, \dots sont des directions Q -conjuguées données, le pas optimal est déterminé par l'équation suivante :

$$\alpha_k = - \frac{\langle d_k, \nabla f(x_k) \rangle}{\langle d_k, Qd_k \rangle} = - \frac{\langle d_k, Qx_k + b \rangle}{\langle d_k, Qd_k \rangle}$$

Pour simplifier les écritures nous écrivons $g_k = Qx_k + b$. L'algorithme des gradients conjugués (CG) s'écrit :

1. Initialisation : x_0 donné, $d_0 = -g_0$

2. Etape courante (itération k) : x_k et d_k connus

- $\alpha_k = - \frac{\langle d_k, g_k \rangle}{\langle d_k, Qd_k \rangle}$
- $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
- $\beta_k = - \frac{\langle Qd_k, g_{k+1} \rangle}{\langle d_k, Qd_k \rangle}$
- $d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k$

3. Test d'arrêt

La méthode de gradients conjugués est généralisable à des fonctions non quadratiques (cf. algorithmes de Polak-Ribière et Fletcher-Reeves [4]).

Méthode Newton et BFGS

Pour résoudre un système non linéaire $F(x) = 0$ pour une fonction $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, une méthode très répandue est la méthode de Newton. Elle consiste à construire des points $(x_k)_k$ de la façon suivante. À l'itération k , nous cherchons $d \in \mathbb{R}^n$ tel que $F(x_k + d) = 0$. Nous remplaçons F par son approximation linéaire :

$$F(x_k + d) \approx F(x_k) + JF(x_k)d$$

Où $JF(x_k)$ est la matrice jacobienne de F en x_k . La recherche de la direction d_k tel que $F(x_k + d_k) = 0$ est alors ramenée à la recherche de d tel que $F(x_k) + JF(x_k)d_k = 0$ ou encore tel que $F(x_k) = -JF(x_k)d_k$. L'itéré suivant est alors $x_{k+1} = x_k + d_k$.

Dans le cadre de l'optimisation d'une fonction $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, la première idée est d'appliquer la méthode de Newton, rappelée ci-dessus, à la condition d'optimalité $\square f(x) = 0$ avec, pour faire le lien avec les notations précédentes, $F = \square f$ et $JF = \square^2 f$.

1. Initialisation : x_0 donné.

➤ $k = 0$: choix d'un point initial $x_0 \in \mathbb{R}^n$.

2. Etape courante (itération k) : x_k connu.

➤ Calculer d_k solution de $\nabla f(x_k) = -\square^2 f(x_k)d_k$.

➤ $x_{k+1} = x_k + d_k$.

3. Critère d'arrêt

Pour fonctionner, cet algorithme nécessite que la matrice hessienne soit inversible à chaque itération. De plus, il résout la condition d'optimalité $\square f(x) = 0$ et rien ne garantit que la solution identifiée soit un minimum. Elle ne dispose d'aucun mécanisme permettant de discerner les minimas des maximas et des points selles.

Les méthodes Newtoniennes fonctionnent bien dans des conditions favorables : un point de départ n'est pas trop éloigné de la solution et des hessiennes définie positives.

Le couplage de la méthode de Newton avec un algorithme de gradient [4] a donnée naissance une nouvelle méthode robuste appelée quasi-Newton.

La méthode de Newton requiert le calcul de la hessienne de la fonction à minimiser. Or le calcul des dérivées secondes n'est pas toujours possible : la fonction peut ne pas être 2 fois dérivable, la programmation de la hessienne peut être laborieuse et l'évaluation de cette hessienne (une fois programmé) peut être longue. Pour toutes ces raisons, les méthodes dites quasi-Newton cherchent à construire une approximation H de la hessienne de f (ou une approximation W de son inverse). Donc, en plus de la construction de la suite $(x_k)_k$, elles prennent en charge la construction de la suite des matrices $(H_k)_k$ ou $(W_k)_k$ approchant la hessienne et son inverse. La méthode la plus connue de quasi-Newton est la méthode BFGS [4].

Sachant que notre problème d'optimisation est de type sous contraintes, par conséquent ces méthodes ne sont pas adaptées pour le résoudre. Cependant, avec ces méthodes nous pouvons étudier le comportement local de notre problème d'optimisation, nous détaillerons cette démarche dans la section IV. 3.

Dans l'Annexe II, on donne un exemple d'une fonction à minimiser en utilisant un algorithme de type gradients conjugués (CG) et un algorithme de type Newton (BFGS). La fonction en question est appelée 'Rosenbrock' utilisée comme test pour des problèmes d'optimisation mathématique.

IV.2.7.2 Cas sous contraintes

L'optimisation avec contraintes pose plus de difficultés comparativement aux problèmes sans contraintes. En effet, optimiser une fonction sans tenir compte des contraintes et vérifier a posteriori que les contraintes sont satisfaites ne suffisent pas à trouver cet optimum : les contraintes doivent être intégrées à la résolution du problème en plus de la fonction objectif.

Pour pallier ces difficultés, nous pouvons trouver dans la littérature trois approches de génériques : le gradient projeté [5], la pénalisation de contraintes [6] et la programmation quadratique séquentielle [7].

Gradient projeté

L'algorithme de gradient projeté tente de générer une suite de points (x_k) convergeant vers la solution optimale. Pour chaque point de la suite, il est souvent nécessaire de considérer la projection de la direction sur un ensemble réalisable X . L'inconvénient de ce type d'algorithme est qu'il requiert un temps de calcul important. L'algorithme de gradient projeté a la forme suivante :

1. Initialisation

- $k = 0$: choix d'un point initial $x_0 \in \mathbb{R}^n$.

2. Etape courante (itération k) :

- Calcul d'un pas k tel que $x_k - k\nabla f(x_k)$ est meilleur que x_k
- Nouvel itéré $x_{k+1} = \text{proj}_X(x_k - k\nabla f(x_k))$, proj_X désigne la projection sur X .

3. Critère d'arrêt

- Si x_k est satisfaisant, STOP
- Sinon, $k = k + 1$ et retour à l'étape 2.

La méthode porte le nom de gradient car la direction de descente d_k est égale à l'opposé du gradient au point x_k : $d_k = -\nabla f(x_k)$.

La projection est définie comme suit :

$$proj_X(z) = \min_{y \in X} \|y - z\|_2$$

$$x_{k+1} = proj_X(x_k - k \nabla f(x_k)) = \min_{y \in X} \|y - (x_k - k \nabla f(x_k))\|_2$$

En pratique, il n'est pas simple de calculer la projection sauf sur des cas simples. Dans le cas général $proj_X(x)$ est lui-même un problème d'optimisation avec contraintes. Dans l'Annexe III, on donne un exemple d'application de la méthode.

Méthode de pénalisation

La méthode de pénalisation consiste à remplacer le problème avec contraintes par un problème sans contraintes en introduisant une pénalité sur les contraintes, remplacer le problème (P_{EI}) par (P_R) :

$$(P_{EI}) \left\{ \begin{array}{l} \min f(x) \\ \text{Sous contraintes } h_i(x) = 0, i = 1, \dots, m; \\ g_j(x) \leq 0, j = 1, \dots, p \end{array} \right. \quad \text{IV. 12}$$

$$(P_R) \left\{ \begin{array}{l} \text{minimiser } f(x) + r(x) \\ x \in \mathbb{R}^n, r > 0 \end{array} \right. \quad \text{IV. 13}$$

La fonction $r(x)$ est appelée fonction de pénalisation des contraintes. Elle est définie de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R}^+ . La fonction peut-être présentée par :

$$r(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in X \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

où par exemple $r(x) = \|h(x)\|^2 + \|g^+(x)\|^2$ avec $g^+(x) = \max \{0, g(x)\}$ et

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : h(x) = 0; g(x) \leq 0\}.$$

Dans cette approche basée sur la pénalité, il est possible d'accepter des points non réalisables comme solutions approchées. L'avantage principal de l'approche de pénalité est sa simplicité, car elle trouve une approximation de l'optimum en utilisant des problèmes sans contraintes. Son inconvénient majeur est qu'elle peut générer des approximations non réalisables de la solution. L'algorithme correspondant à la méthode de pénalisation aura la forme suivante :

1. Initialisation

- $k = 1$: choix d'un point initial $x_0 \in \mathbb{R}^n$ et $r_1 > 0$.

2. Etape courante (itération k) :

- Résoudre $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) + r_k(x)$ en prenant x_{k-1} comme point initial.

3. Critère d'arrêt

- Si x_k est satisfaisant, STOP
- Sinon, $k = k + 1$, $r_{k+1} > r_k$ est choisi et retour à l'étape 2.

L'algorithme correspondant à la méthode de pénalisation est simple mais la mise en œuvre est assez délicate à mettre en place (comme par exemple augmenter le facteur r_k progressivement). Pour les fonctions générales, les méthodes par pénalisation ont une précision faible mais elles peuvent être utilisées pour déterminer un point de départ pour des méthodes plus précises et à convergence plus rapide au voisinage de l'optimum (méthode de Newton).

Programmation quadratique successive

Bien que les éléments théoriques présentés dans le cas sans contraintes ne soient plus valables, l'idée directrice selon laquelle les points annulant le gradient de f soient des candidats légitimes à la minimisation peut être reprise. Ainsi, il est possible d'écrire des conditions d'optimalité (conditions appelées KKT pour « Karush-Kuhn-Tucker ») basées sur la recherche des points critiques d'une nouvelle fonction appelée le Lagrangien associé au problème (PEI). Ce dernier est défini par :

$$f(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i h_i(x) + \sum_{j=1}^p \mu_j g_j(x)$$

Le but de la méthode PQS consiste à remplacer le problème initial (P_{EI}) par une suite de problèmes quadratiques pouvant être efficacement résolus à l'aide d'algorithmes d'optimisation sans contraintes. Ces problèmes quadratiques correspondent à une minimisation d'une approximation quadratique du Lagrangien associé à (P_{EI}) contraint par une linéarisation des contraintes $(h_i)_i$ et $(g_j)_j$. La méthode PQS nécessite l'introduction de plusieurs éléments théoriques comme la qualification des contraintes (définissant les conditions d'application des conditions de d'optimalité de KKT) ou les fonctions de mérites (servant à déterminer des longueurs de pas) qui sont au-delà du contexte purement introductif de cette section. Néanmoins, le lecteur intéressé à l'approfondissement de ces notions pourra se référer aux ouvrages [4] et [7]).

IV.2.8 Méthodes d'optimisation globale

Les méthodes d'optimisation globale n'ont de sens que lorsque le problème considéré n'est pas convexe. En effet, si le problème traité est convexe, alors les méthodes locales que nous venons de détailler fournissent un minimum global à partir de l'initialisation utilisée. De manière générale, les algorithmes d'optimisation globale sont classés en deux grandes catégories : les méthodes déterministes et les méthodes stochastiques. Le choix d'un algorithme d'optimisation globale est un compromis entre l'information disponible sur la fonction à minimiser, le temps disponible pour résoudre le problème et le degré de précision que l'on souhaite obtenir. Le dernier point revêt une importance essentielle. En effet, certaines méthodes fournissent un encadrement ou une approximation du minimum global alors que d'autres le fournissent avec un certificat d'optimalité. D'un point de vue purement mathématique, une méthode garantissant la globalité de la solution sera privilégiée. Cependant, de telles méthodes n'existent que pour certains types de problèmes. D'un point de vue pratique une méthode rapide et fournissant un bon minimum local peut être utilisée. En général, ce type de minimum est fourni par des méthodes qui décrivent au mieux (c.-à-d. le plus rapidement possible) l'espace de solutions. Notons que pour les méthodes globales, la notion de vitesse de convergence peut être délaissée, car elle ne peut s'appliquer à l'ensemble des méthodes.

Dans cette section, nous allons présenter de façon la plus pédagogique possible les principaux algorithmes d'optimisation globale.

IV.2.8.1 Les méthodes déterministes

Un algorithme déterministe est un algorithme qui, étant donné un point initial particulier, trouvera toujours le minimum global. Ce type d'algorithmes explore tout l'espace de recherche et requiert une parfaite connaissance de la fonction objectif. La fonction à optimiser est évaluée en chacun des points de l'espace de recherche. Cette méthode générique et le temps de calcul augmentera exponentiellement en fonction du nombre de variables. En effet, considérons une optimisation sur huit variables. Si l'intervalle de définition de chaque variable est discrétisé en seulement 3 points, une exploration systématique nécessite $3^8 = 6561$ exécutions du modèle. Dans le cas d'un modèle physique nécessitant 10 secondes de calcul sur un PC standard, cela représente 18 heures de calcul, pour un résultat qui ne sera pas forcément satisfaisant.

Parmi ces algorithmes nous pouvons citer l'analyse par intervalles, B&B, méthodes de décomposition, Nelder & Mead, etc.

IV.2.8.2 Les méthodes stochastiques

Cette deuxième classe de méthodes d'optimisation globale regroupe les méthodes comportant une forme de recherche aléatoire, généralement un échantillonnage de la fonction objectif en des points choisis aléatoirement dans le domaine réalisable. De manière schématique, ces méthodes font appel à des tirages de nombres aléatoires pour explorer l'espace des solutions. Ces méthodes sont souvent très faciles à mettre en œuvre puisqu'elles ne nécessitent que des calculs directs de la fonction objectif sans avoir besoin des informations sur les dérivées.

L'application des méthodes non déterministes pour des cas complexes en reflète le pragmatisme, tel que, par exemple :

- Temps de calcul important.
- Nombreux optimums locaux.
- Fonctions non dérivables.
- Fonctions bruitées.

Ces méthodes font appel à des tirages de nombres aléatoires. Elles permettent d'explorer l'espace de recherche de manière plus exhaustive. Nous pouvons par exemple citer :

- Les méthodes Monte Carlo : un algorithme de recherche aléatoire qui cherche l'optimum d'une fonction en engendrant une suite aléatoire de nombres en fonction d'une loi uniforme.
- Le recuit simulé : des déplacements aléatoires sont effectués à partir d'un point initial. Si un déplacement mène à une valeur plus optimale de la fonction f , il est accepté, sinon il n'est retenu qu'avec la probabilité p :

$$p = e^{\frac{-|\Delta f|}{kT}}$$

où Δf est la variation de la fonction, T est assimilé à une température qui décroît au cours du temps et k est une constante. Cette méthode est basée sur une analogie avec les processus de recuit utilisés en métallurgie et qui visent à atteindre une configuration d'énergie minimale ($-f$ est alors assimilée à une énergie).

- Les Algorithmes Evolutionnaires : le principe est de simuler l'évolution d'une population d'individus divers auxquels il est appliqué différents opérateurs génétiques où l'on soumet à chaque génération à une sélection propre. Parmi les plus connus nous pouvons citer : génétiques, fourmi, essaims particuliers.

Ces algorithmes sont de plus en plus utilisés dans l'industrie car ils sont particulièrement adaptés aux problèmes d'optimisation comportant de nombreux paramètres. En outre certains d'entre eux, comme ParadisEO-MOEO [8], permettent l'utilisation d'une grande variété d'algorithmes évolutionnaires pour la résolution de problème multi-objectifs.

Dans cette partie nous ne détaillerons que la méthode colonie de fourmis puisque le solveur que nous utilisons pour résoudre notre problème d'optimisation « boîte noire » est basé sur ce type d'algorithme. Le choix du solveur sera discuté dans la section IV. 3.

Algorithme de colonies de fourmis (ACO)

L'idée originale vient de l'observation de l'exploitation des ressources alimentaires chez les fourmis. En effet, bien que les fourmis aient individuellement des capacités cognitives limitées, elles sont collectivement capables de trouver le chemin le plus court entre une source de nourriture et leur nid. Les biologistes ont observé dans une série

d'expériences menées depuis 1989, si une colonie de fourmis a le choix entre deux chemins d'inégales longueurs menant à une source de nourriture alors elle avait tendance à emprunter le chemin le plus court.

D'une manière simplifiée, les fourmis commencent par se déplacer au hasard autour de leur fourmilière. Ensuite, lorsqu'elles trouvent de la nourriture, elles retournent vers leur fourmilière, en marquant leur chemin à l'aide de phéromones [9]. Si d'autres fourmis rencontrent ce chemin, il y a plus de chances qu'elles arrêtent leurs déplacements aléatoires et qu'elles suivent le chemin indexé. Celles-ci à leur retour, vont renforcer le marquage de ce chemin à condition qu'il mène bien vers de la nourriture. En effet, le chemin le plus court sera davantage parcouru, et donc plus indexé par la phéromone et ainsi il sera plus attractif (rétroaction positive). En considérant que la phéromone s'évapore avec le temps, les chemins les moins marqués finissent par disparaître, ce qui amène toutes les fourmis à suivre ce chemin plus court.

L'algorithme de colonies de fourmis a été à l'origine principalement utilisé pour trouver des solutions au problème du voyageur de commerce (TSP) qui appartient aux problèmes d'optimisation combinatoire. Depuis ses débuts, son emploi se généralise à plusieurs domaines, depuis l'optimisation continue jusqu'à la classification. Plus précisément, l'algorithme de colonies de fourmis a été initialement dédié aux problèmes discrets (i.e. le cas où les valeurs possibles des variables d'un problème sont en nombre fini). Dans ce cas, nous pouvons définir un ensemble de composantes de la solution ; la solution optimale est alors un vecteur ordonné de ces composantes. Pour illustrer tout ça, nous prenons l'exemple du problème du voyageur de commerce (TSP), pour plus de détails sur ce sujet, voir l'Annexe IV.

Le TSP peut être représenté par un graphe complètement connecté (un graphe où tous les nœuds sont interconnectés). Les villes sont représentées par N_i nœuds avec $i = \{1, \dots, n\}$ et n désigne le nombre total des nœuds. Un trajet entre deux nœuds (exemple : N_i et N_j) est désigné par e_{ij} . Par conséquent, une solution à un problème est un ensemble ordonné de $n - 1$ composantes $\{e_{ij}\}$ avec $i, j = \{1, \dots, n\}$. Une construction d'une solution dans le cas du TSP consiste à partir d'une solution vide, de choisir une ville de départ et à ajouter les villes l'une après l'autre, puis à répéter le processus jusqu'à ce que le nombre total de composantes ajoutées soit égal au nombre total de villes n . Dans le cas discret, les

solutions ne sont pas connues à l'avance, donc la valeur de la quantité de phéromone ne peut plus être attribuée à une solution complète, mais plutôt aux composantes de la solution.

En mettant à jour la table de phéromones en fonction des informations obtenues sur le domaine de recherche, cette procédure algorithmique conduit à de très bonnes solutions, mais ne garantit cependant pas l'obtention du minimum globale. Ci-dessous nous détaillons l'algorithme de colonies de fourmis (ACO).

Algorithme de ACO.

Tant que le critère d'arrêt n'est pas atteint

 Construction de solution à base de phéromones

 Mise à jour de phéromones

 Utilisation (facultative) d'une heuristique

Fin de Tant que

Le pseudo-code de l'algorithme illustre cet aspect fondamental de la métaheuristique ACO. Communément, le critère d'arrêt utilisé peut-être par exemple une limite maximale de solutions construites ou un de temps de calcul maximal. L'heuristique peut être des recherches locales ou / et les manipulations supplémentaires de phéromones [9].

Contrairement à la métaheuristique ACO originale développée pour l'optimisation combinatoire, le framework ACO considéré dans le solveur que nous utilisons est principalement basé sur l'ACO étendu pour les domaines continus proposé par Socha et Dorigo [10]. La visualisation biologique des fourmis qui choisissent leur chemin dans un domaine de recherche semblable à un graphe ne tient plus pour ces problèmes, car ceux-ci appartiennent à une classe complètement différente. Cependant, l'extension de l'ACO aux domaines continus est possible sans aucun problème majeur ni changement conceptuel, voir Socha [11]. Dans cette méthodologie, ACO fonctionne par la construction incrémentale de solutions en considérant une approche probabiliste selon une fonction

de densité de probabilité (PDF) au lieu d'une table de phéromone comme dans l'ACO d'origine.

IV.3 Etude de la faisabilité : optimisation comme outils pour localiser la charge

IV.3.1 Définition de notre fonction objectif et des contraintes

Comme nous l'avons indiqué précédemment, nous considérons une courbe de force comme un ensemble de points (D_i, F_i) pour $i = 0 \dots N$, avec N le nombre de points simulés (généralement égal au nombre de points expérimentaux), D_i la distance séparant le diélectrique de la pointe AFM et F_i la force électrostatique simulée, induite par les charges dont les caractéristiques, géométriques et électriques, sont données par le triplet (d, r, ρ) . Comme précédemment, on notera G_i la force électrostatique de référence obtenue pour chaque distance D_i .

La formulation de la fonction objectif adoptée ici est classique et est basée sur la minimisation de la norme quadratique relative de l'erreur entre la courbe de force de référence et une courbe simulée avec un triplet (d, r, ρ) donné. La fonction objective $f(d, r, \rho)$ à minimiser s'écrit donc comme suit :

$$f(d, r, \rho) = \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^{i=N} [F_i(D_i, (d, r, \rho)) - G_i(D_i)]^2}{\sum_{i=0}^{i=N} G_i(D_i)^2}} \quad \text{IV. 14}$$

Dans cette formalisation de la fonction objective, l'indice i varie de 0 à N . Dans notre étude et pour réduire le temps de calcul, la fonction objective sera calculée sur 4 points particuliers. En effet, dans le chapitre III, il a été montré que deux courbes de force sont identiques si et seulement si elles ont la même valeur de force maximale, F_0 atteint à D_0 , et la même courbure, représentée par trois points judicieusement choisis : (F_{n1}, D_{n1}) , (F_{n2}, D_{n2}) , (F_{n3}, D_{n3}) , Figure IV. 13. Par conséquent, ces quatre points caractéristiques suffisent pour représenter la totalité de la courbe. Ainsi, à chaque itération, la fonction objectif sera évaluée en seulement 4 points.

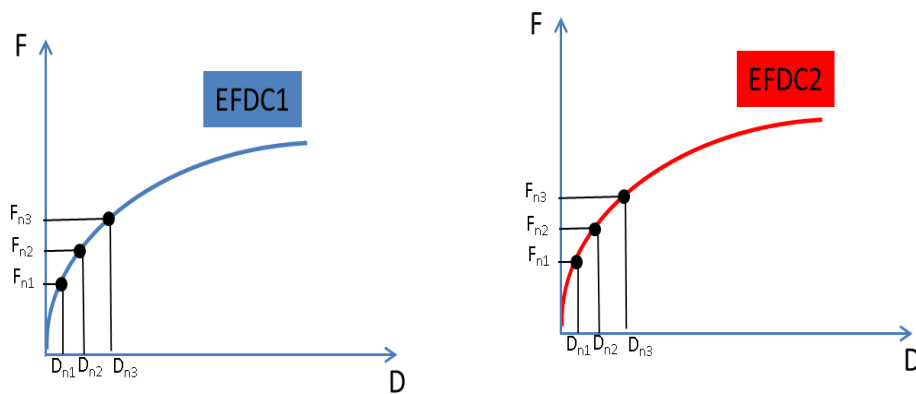


Figure IV. 13 Deux EFDCs égales (EFDC1 et EFDC2) si respectivement leur courbure et leur maximum sont égaux.

Cette fonction objective ainsi définie est utilisée pour les trois paramètres correspondant aux caractéristiques géométrique et électrique de la charge dans le matériau, le triplet (d, r, ρ) . Pour chacun de ces paramètres un intervalle d'étude a été défini en fonction des contraintes expérimentales et surtout pour que la solution obtenue garde un sens physique. Pour les paramètres géométriques, un étalement latéral, r , ou en profondeur, d , inférieur à 10nm est en général indétectable par les sondes actuelles. Cette valeur sera notre limite basse. Concernant le rayon de la charge, r , la valeur maximale est celle garantissant un effet négligeable du bras de levier, à savoir un rayon inférieur à 1000 nm. Pour la profondeur, la limite est celle de l'épaisseur du diélectrique étudié, 500 nm dans notre cas. En ce qui concerne les charges, le seul critère est une valeur de leur densité strictement positive (cf. Tableau IV. 1).

Tableau IV. 1 Contraintes sur les paramètres.

	Profondeur d	Rayon r	Densité ρ
Min	10 nm	10 nm	Strictement positive, $\rho > 0$
Max	500 nm	5000 nm	

En optimisation mathématique, il est recommandé de considérer les paramètres à optimiser comme des variables continues, car résoudre un problème d'optimisation continue est bien plus rapide et simple que résoudre un problème discret. Ainsi, dans un

premier temps, les paramètres du triplet (d, r, ρ) seront considérées comme des variables réelles et continues.

IV.3.2 Première approche : algorithme d'optimisation locale

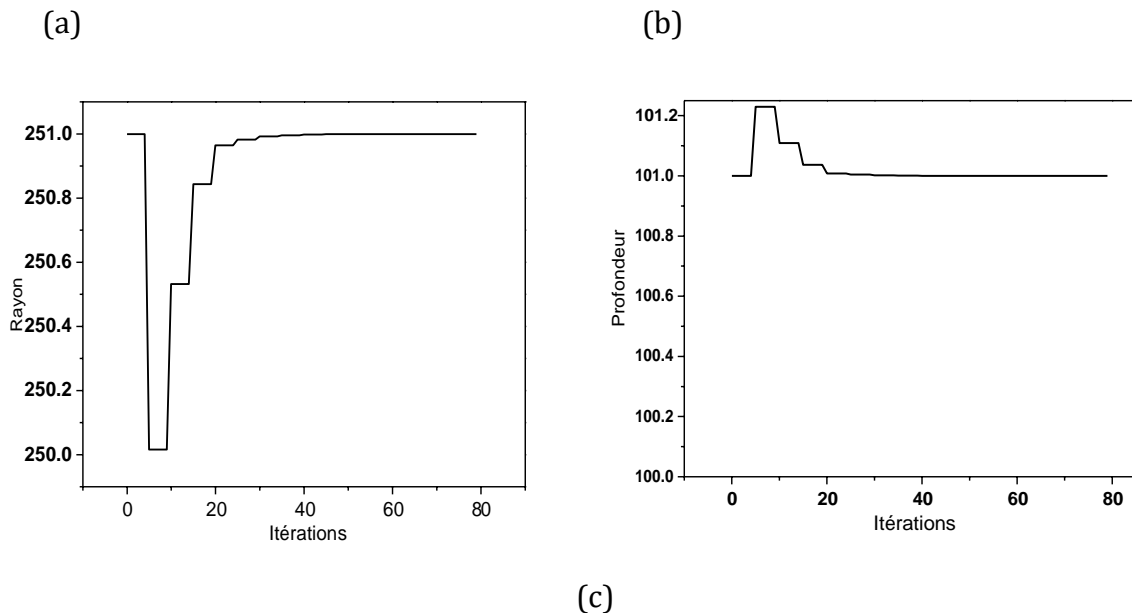
Pour étudier les propriétés de notre fonction objectif, notamment sa convergence, un algorithme d'optimisation locale classique a été utilisé comme première approche. Il s'agit de la méthode BFGS dont le principe de base a été détaillé précédemment. La fonction de référence EFDC-REF est une courbe de force simulée avec les paramètres suivants :

$$r = 250 \text{ nm}, d = 100 \text{ nm et } \rho = 20 \text{ C.m}^{-3}.$$

Dans un premier temps, les valeurs initiales du triplet (d, r, ρ) sont choisies proche de la solution.

$$r_0 = 251 \text{ nm}, d_0 = 101 \text{ nm et } \rho_0 = 21 \text{ C.m}^{-3}.$$

Il est à noter que les contraintes précédemment définies ne sont pas prises en compte avec ce type d'algorithme. Les figures ci-après montrent les résultats de la méthode. Il s'agit des estimés du triplet (d, r, ρ) à chaque itération.



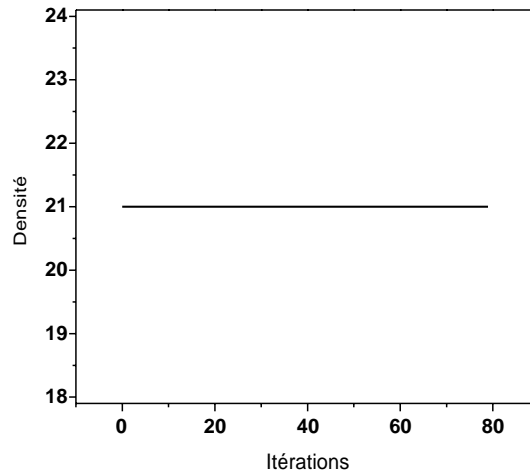


Figure IV. 14 Résultats de l'optimisation obtenus par la méthode BFGS.

Ces premiers résultats montrent la difficulté qu'a notre fonction objective à converger même pour une initialisation proche des « vraies » valeurs de paramètres.

De plus, cette première étude a permis d'identifier un problème lié à la résolution du problème direct. En effet, à chaque itération, l'algorithme BFGS génère des valeurs flottantes (exemple, $d = 101.00002569$ nm pour la profondeur) ce qui a conduit à avoir des erreurs ou des impossibilités dans la construction du maillage pour la résolution du modèle électrostatique : quand le modèle électrostatique est appelé avec des valeurs flottantes des erreurs apparaissent lors du processus de maillage. Ces erreurs, type « impossible d'insérer un point », apparaissent principalement parce que la taille minimale des cellules définies dans le modèle électrostatique est souvent trop grande pour définir une géométrie de la charge avec une précision aussi importante que celle estimée par l'algorithme d'optimisation. Il n'est donc pas possible par exemple de représenter une charge avec une profondeur $d = 101.00002569$ nm. Même si la diminution de la taille minimale des cellules dans le modèle COMSOL est possible, le temps de calcul de celui-ci augmentera considérablement rendant quasi-impossible une opération d'optimisation. C'est généralement le cas lorsque les géométries d'étude présentent de telle disparité d'échelle.

Pour contourner cette problématique, les paramètres seront considérés comme mixtes : le rayon r et la profondeur d , directement liés à la structure du maillage du modèle direct, sont des entiers, quant à la densité, elle reste une variable réelle car indépendant

de la géométrie d'étude. Ainsi notre problème d'optimisation est de type boîte noire mixte et s'écrit comme suit :

$$\min_{(d,r,\rho) \in \mathbb{N}^2 \times \mathbb{R}} f(d, r, \rho) \quad \text{IV. 15}$$

$$10 \text{ nm} \leq d \leq 500 \text{ nm} \quad \text{IV. 16}$$

$$10 \text{ nm} \leq r \leq 5000 \text{ nm} \quad \text{IV. 17}$$

$$\rho > 0 \quad \text{IV. 18}$$

IV.3.3 Deuxième approche : algorithme d'optimisation globale

Pour résoudre notre problème d'optimisation de type boîte noire mixte avec contraintes nous avons décidé d'utiliser l'algorithme MIDACO (Mixed Integer Distributed Ant Colony Optimization. Même si ce type d'algorithme est adapté à notre problème, il semble difficile à ce stade de justifier de manière précise son choix.

MIDACO est un solveur qui permet de résoudre des problèmes d'optimisation mono et multi-objectifs. Initialement développé pour les problèmes de programmation non linéaire en nombres entiers mixtes (MINLP) liés aux applications spatiales complexes de l'Agence spatiale européenne [12], et d'Astrium (Airbus Group) [13], le solveur a été adapté pour un large éventail de problèmes d'optimisation notamment pour les problèmes de type boîte noire. Comme nous l'avons énoncé précédemment, MIDACO est basé sur un algorithme évolutionnaire appelé colonies de fourmis.

Comme tous les algorithmes évolutionnaires, MIDACO ne garantit pas d'atteindre la solution optimale globale, mais des tests numériques étendus sur des centaines de cas (cf. [14]) démontrent sa capacité à obtenir rapidement la solution globale optimale des problèmes. MIDACO est disponible pour plusieurs langages de programmation : Excel, VBA, Java, C #, Matlab, Octave, Python, R, Julia, C / C++ et Fortran.

Comme précédemment, la méthode est testée avec une courbe de force simulée de référence, dont on connaît parfaitement les valeurs des paramètres. Ainsi, les valeurs optimales trouvées par l'algorithme seront comparées aux paramètres de référence.

La courbe de référence, notée EFDC-REF, a été simulée avec :

$r = 250$ nm, $d = 100$ nm et $\rho = 10^4$ C.m⁻³.

L'algorithme a été initialisé avec $r_0 = 1000$ nm, $d_0 = 490$ nm et $\rho_0 = 1$ C.m⁻³. Pour avoir une première information sur la convergence de l'algorithme, nous avons fixé à titre indicatif un temps de calcul maximal de 24h.

Les figures ci-dessous montrent la valeur de la fonction objective pour chaque itération.

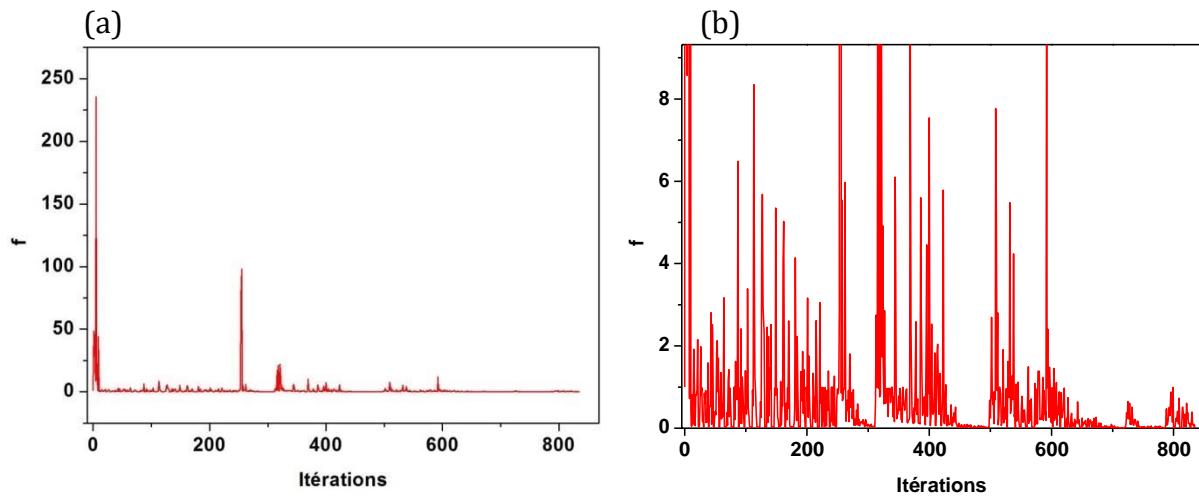


Figure IV. 15 (a) résultats de convergence pour un jour de calcul, (b) zoom sur l'intervalle de fenêtre 0 et 9.

D'après ces figures, la convergence du solveur est non régulière, les valeurs de la fonction objective ne diminuent pas progressivement au fil des itérations. Cette particularité est due principalement à la nature de l'algorithme : choix probabiliste du prochain candidat à visiter par la méta-heuristique ACO. A partir de l'itération 600, la convergence commence à se stabiliser.

Au bout de 24h, soit 830 itérations, le solveur a convergé vers une solution très différente de notre triplet référent. Les paramètres optimisés obtenus sont $d = 395$ nm, $r = 162$ nm, et $\rho = 7511$ C.m⁻³. La valeur de la fonction objective associée est de 0.00779 soit 0.7% d'erreur.

Ainsi, après 24 heures de calcul et pour seulement 3 paramètres à optimiser, le solveur n'a pas réussi à trouver les bons candidats, même si ce triplet donne une EFDC très proche de la EFDC-REF. Le temps de calcul important de l'inversion du modèle est dû principalement au modèle électrostatique qui nécessite 50 secondes pour calculer une

force électrostatique associée une distance donnée, ainsi pour les quatre points qui caractérisent entièrement la courbe de référence il faut environ 3 minutes et 30 secondes de temps de simulation.

Notre problème s'apparente donc à un problème mal posé dans le sens où plusieurs triplets, plusieurs candidats semblent donner une même courbe de force, Figure IV. 16.

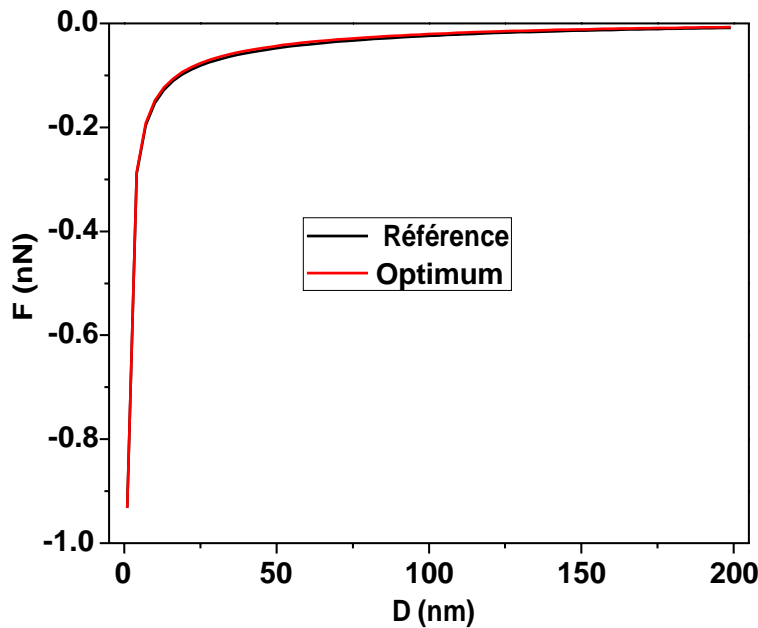


Figure IV. 16 Comparaison entre EFDC référence et EFDC simulée avec les paramètres optimisés.

La Figure IV. 17 montre la distribution du potentiel et celle du champ électrique pour la configuration de référence et celle obtenue par l'inversion du modèle. On note que les ordres de grandeur des valeurs du potentiel électrique et respectivement ceux du champ électrique sont quasiment identiques dans les deux configurations même si les répartitions spatiales sont très différentes. Cette particularité est due à un rayon optimisé plus faible et une profondeur optimisée plus grande que le rayon et la profondeur de référence. Ainsi, la distribution du champ électrique est plus condensée latéralement et s'étale verticalement plus largement. Malgré cette différence dans la distribution spatiale des charges et leur densité entre la référence et l'optimum, la pointe de l'AFM est soumise à une force quasi identique dans les deux situations, à 0.7% près. Le tableau suivant compare les valeurs physiques associées à chaque configuration (cf. Tableau IV. 2).

Tableau IV. 2 Comparaison des valeurs physiques associés à la référence et à l'optimum (24h de simulation).

	r (nm)	d (nm)	ρ (C.m ⁻³)	E _{max} (10 ⁷ V.m ⁻¹)	V _{max} (V)	Q (10 ⁻¹⁶ C)
Référence	250	100	10000	3.83	1.71	1.3083
Optimum	162	395	7511	3.5	1.74	1.6299

E_{max} et V_{max} représentent respectivement les valeurs maximales du champ électrique et du potentiel, qui sont dans les deux cas quasiment identiques. L'erreur sur la charge totale Q, est d'environ 19%.

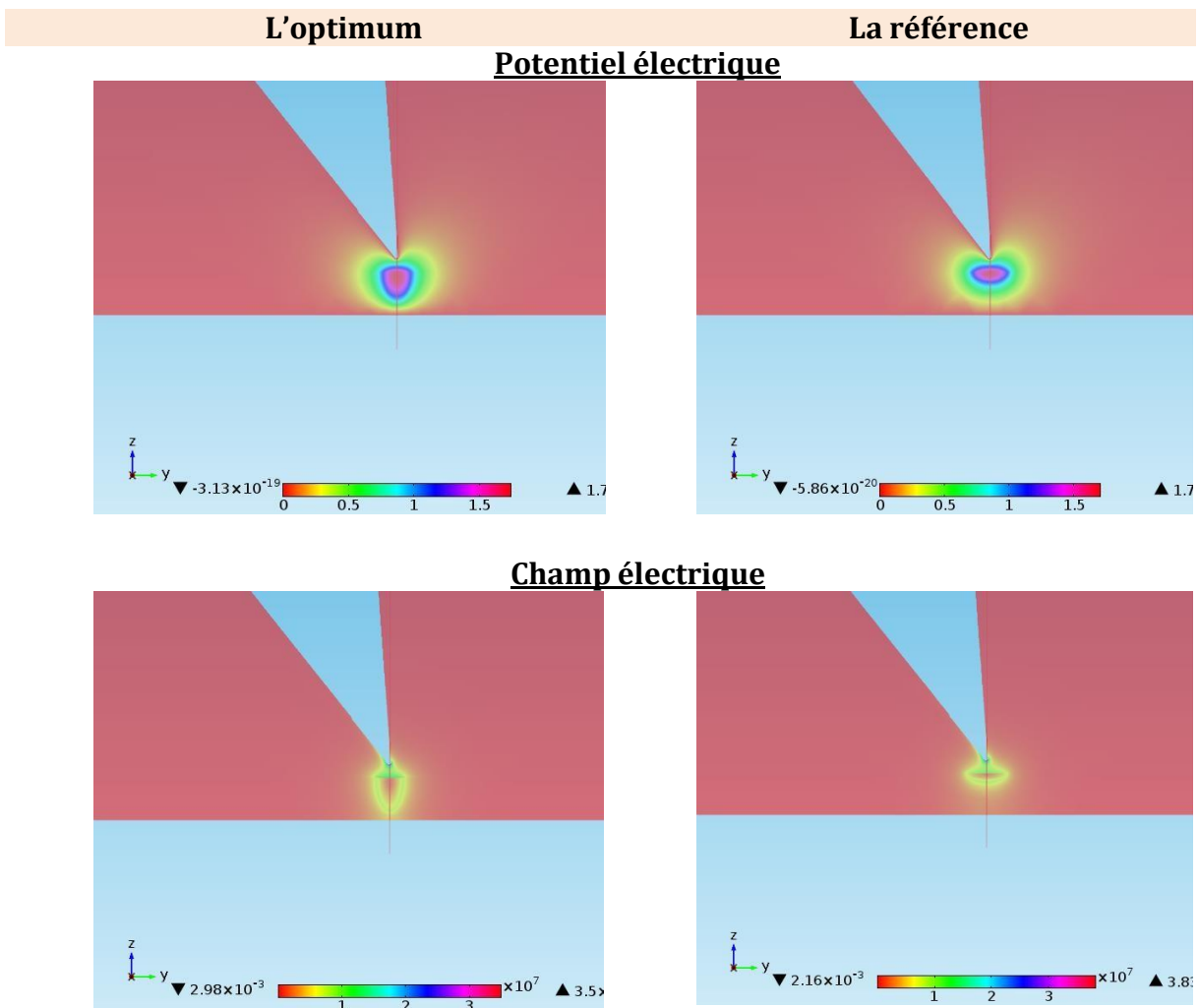


Figure IV. 17 Distribution de potentiel électrique et du champ électrique pour la l'optimum et la référence

Dans les mêmes conditions que précédemment, mêmes valeurs initiales et même courbe de référence, l'algorithme a été relancé avec un critère d'arrêt de 72h. Ceci pour analyser le comportement de la fonction objective lorsqu'on augmente le nombre d'itérations (cf. Figure IV. 18).

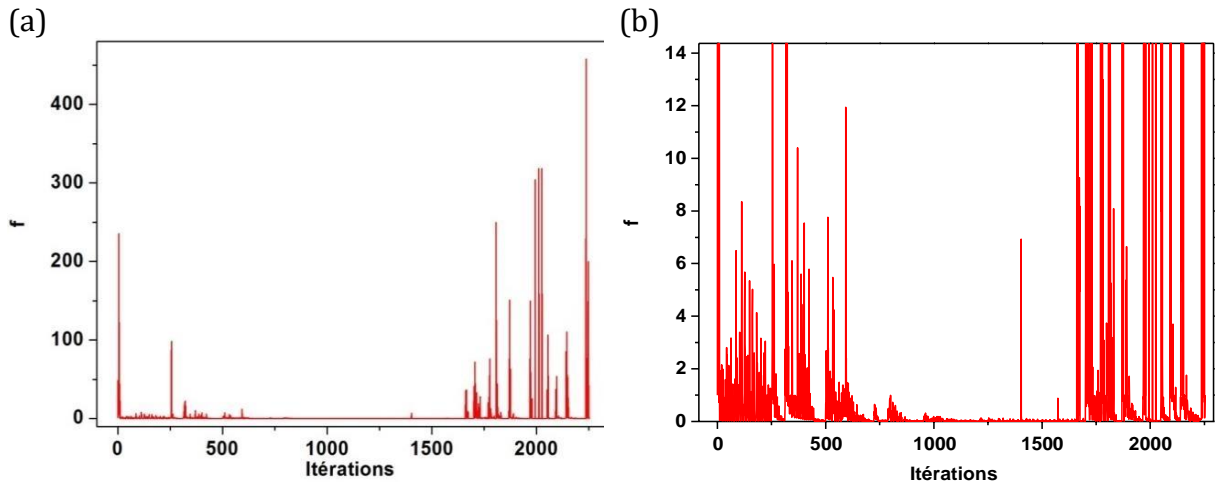


Figure IV. 18 (a) : résultats de convergence pour trois jours de calcul, (b) zoom sur l'intervalle de f entre 0 et 14.

D'après ces figures, on constate qu'entre les itérations 600 et 1700, la convergence du solveur est quasiment stable, mais au-delà on retrouve une convergence non régulière semblable à celle du début *i.e.* les 600 premières itérations. La solution trouvée par le solveur après 72h de calcul est $d = 254$ nm, $r = 216$ nm et $\rho = 6347$ C.m⁻³ et une valeur de la fonction objective de 0.003357, soit 0.33% d'erreur.

Nous ne pouvons rien conclure sur la convergence du solveur au-delà de trois jours de simulation car pas testé même si on constate une diminution de l'erreur relative sur les EFDC. Mais 72h de temps de simulation n'est pas convenable pour notre application, le modèle inverse qu'on souhaite développer doit converger en un minimum de temps, le critère fixé arbitrairement correspond à un temps de simulation maximal de 48h pour converger vers une solution optimale.

La Figure IV. 19 montre la distribution du potentiel et celle du champ électrique pour la configuration de référence et celle obtenue après inversion du modèle. Les figures montrent que l'optimum obtenu après 72h de simulation tend vers la bonne solution : la distribution du champ électrique s'étale moins en direction du matériau ce qui confirme

une géométrie de charge plus proche de la configuration de référence par rapport à la configuration obtenue après 24h de simulation.

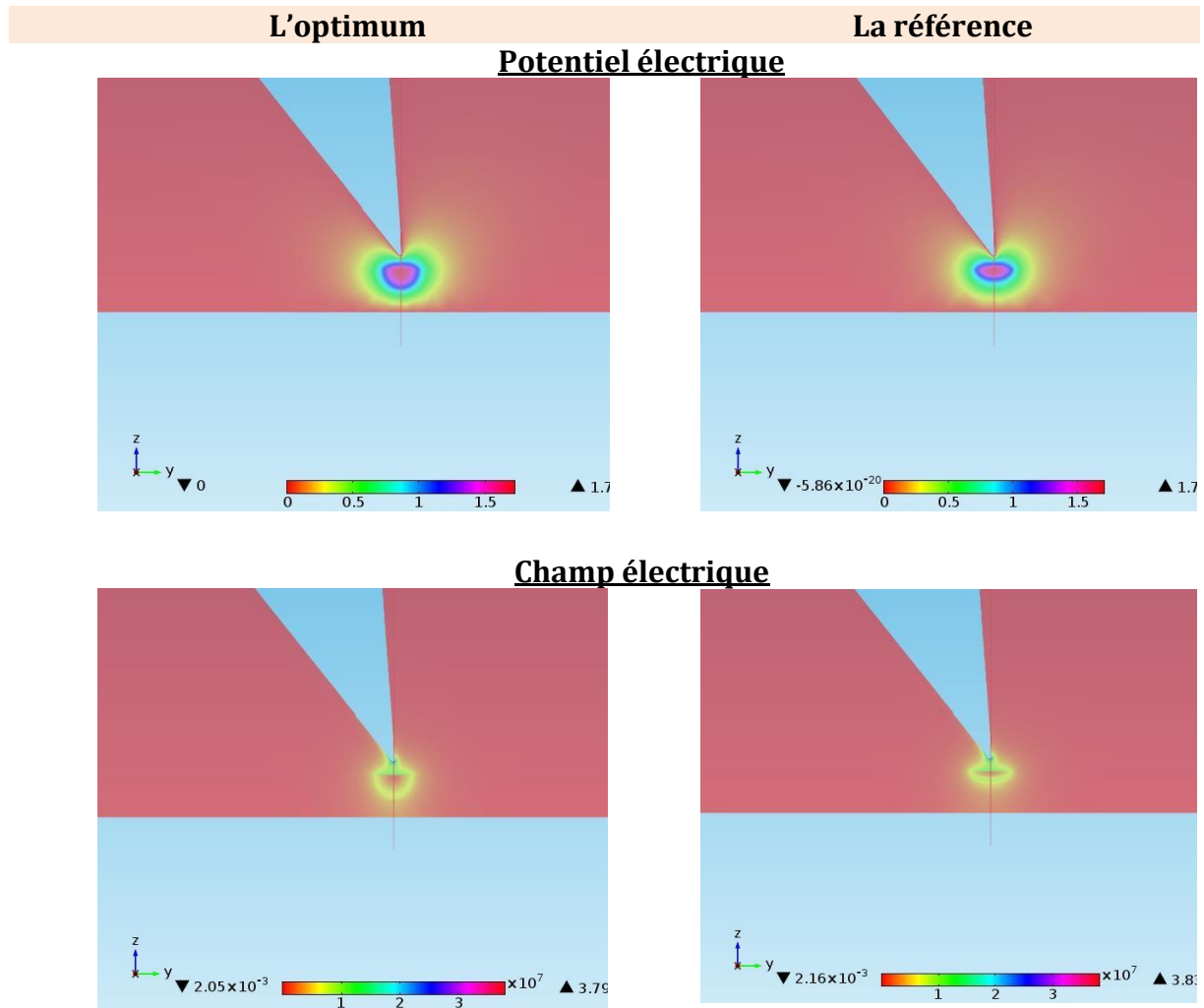


Figure IV. 19 Distribution de potentiel électrique et du champ électrique pour la l'optimum et la référence (3 jours)

Le tableau suivant (cf. Tableau IV. 3) confirme nos propos, L'erreur sur la charge totale Q , est d'environ 15% soit 4 points de moins que précédemment. On rappelle que la charge totale Q est obtenue par le produit entre la densité de charge ρ et le volume occupé par celle-ci.

Tableau IV. 3 Comparaison des valeurs physiques associés à la référence et à l'optimum (3 jours).

	r (nm)	d (nm)	ρ (C.m ⁻³)	E _{max} (10 ⁷ V.m ⁻¹)	V _{max} (V)	Q (10 ⁻¹⁶ C)
Référence	250	100	10000	3.83	1.71	1.3083
Optimum	216	254	6347	3.79	1.73	1.5745

IV.3.4 Troisième approche : le potentiel de surface

Les résultats précédents montrent que l'algorithme d'optimisation converge vers une solution qui n'est pas le minimum global. La solution trouvée du triplet (d, r, ρ) n'est pas celui correspondant à la référence mais donne une EFDC très proche de la EFDC-REF. L'objectif de cette partie est d'enrichir notre modèle en utilisant d'autres données issues de l'expérience comme le potentiel de surface pour forcer l'algorithme à converger vers un minimum global.

Pour ce faire nous allons utiliser les données du potentiel de surface. En effet, une étude précédente a montré qu'à partir d'un profil du potentiel de surface obtenu expérimentalement par une technique KFM (technique dérivée de l'AFM), on peut extraire l'étalement latéral réel de la charge et donc la valeur de son rayon. Connaissant le rayon de la charge, les paramètres à optimiser sont maintenant réduits à 2, à savoir la profondeur d et la densité de la charge ρ .

L'algorithme d'optimisation est donc à nouveau utilisé avec les mêmes valeurs initiales, un temps de calcul maximum de 48h et en fixant le rayon à $r = 250$ nm, la valeur de la référence.

Au bout des 48h de simulation, l'algorithme a trouvé la configuration suivante :

$$d = 88 \text{ nm et } \rho = 11072 \text{ C.m}^{-3}.$$

Proche des valeurs du triplet de référence. La valeur de la fonction objective associée à cette solution est de 0.00021190 soit 0.02% d'erreur. Ce résultat montre que l'algorithme tend à converger vers le minimum global (non atteint en 48h de simulation).

La configuration géométrique de la charge est donc quasi identique à la configuration de référence ce qui est confirmé par l'analyse de la distribution du champ électrique et celle du potentiel obtenues avec le triplet de référence et celles optimisé, Figure IV. 20, et également par la valeur de la charge totale calculée avec les paramètres optimisés qui est de 1,27 C au lieu de 1,3 C (cf. Tableau IV. 4).

Ainsi, en couplant les mesures de l'EFDC et du KFM, le modèle inverse tend à converger vers une solution unique et globale même si les temps de calcul restent conséquents, plus de 48h pour obtenir, semble-t-il, le « bon » triplet.

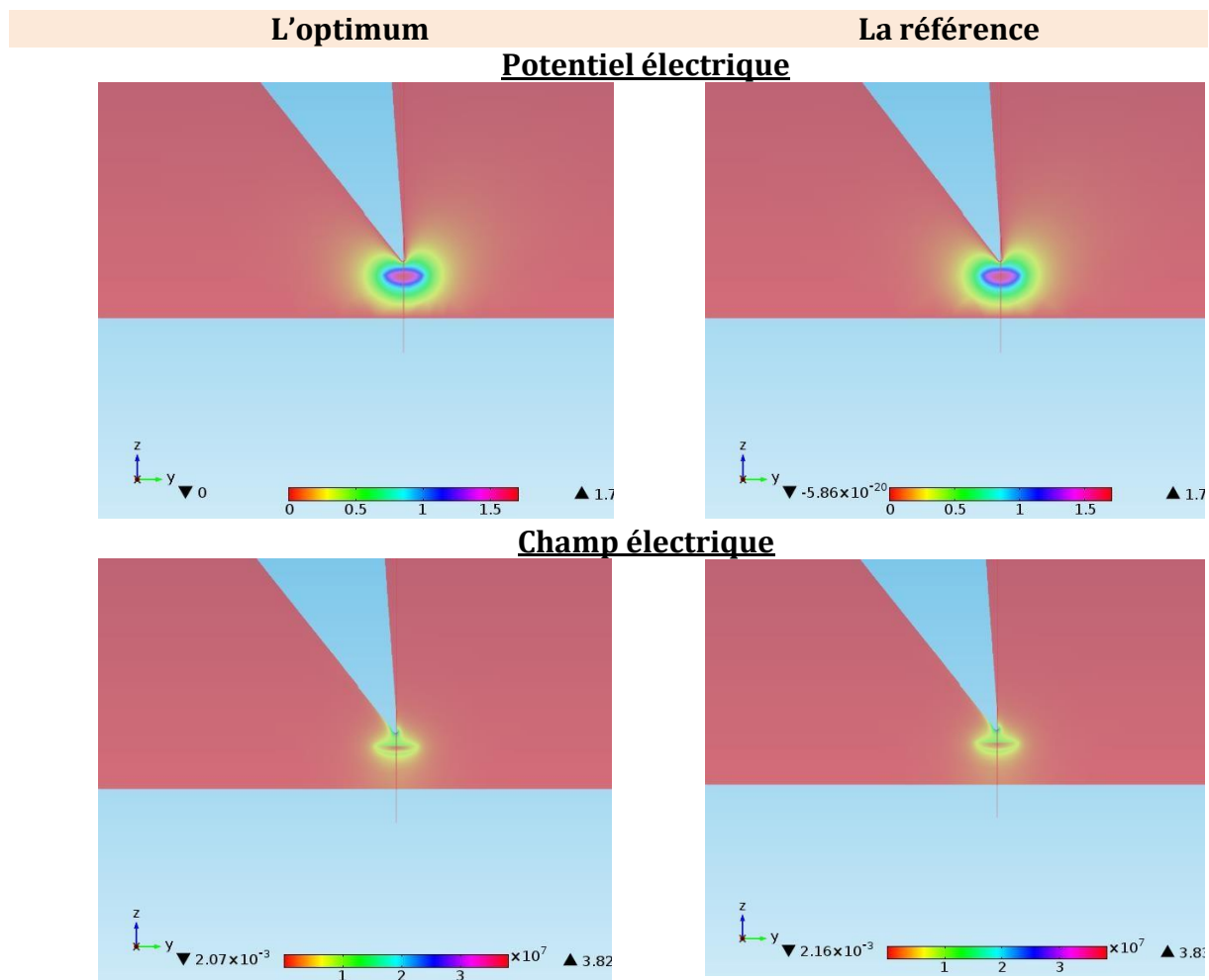


Figure IV. 20 Distribution de potentiel électrique et du champ électrique pour la l'optimum et la référence (2 jours en fixant le rayon à 250 nm).

Tableau IV. 4 Comparaison des valeurs physiques associés à la référence et à l'optimum (2 jours en fixant le rayon à 250 nm).

	r (nm)	d (nm)	ρ (C.m ⁻³)	E _{max} (10 ⁷ V.m ⁻¹)	V _{max} (V)	Q (10 ⁻¹⁶ C)
Référence	250	100	10000	3.83	1.71	1.3083
Optimum	250	88	11072	3.82	1.71	1.2747

IV.3.5 Optimisation sur des données expérimentales

Afin de confronter notre modèle inverse avec des données réelles et non issues de la simulation, une courbe de force (cf. Figure IV. 21 (a)) et un profil de potentiel de surface (cf. Figure IV. 21(b)) obtenus expérimentalement ont été utilisés. Pour ces expériences, l'échantillon considéré est un matériau diélectrique d'épaisseur 130 nm et de permittivité relative de 3.9.

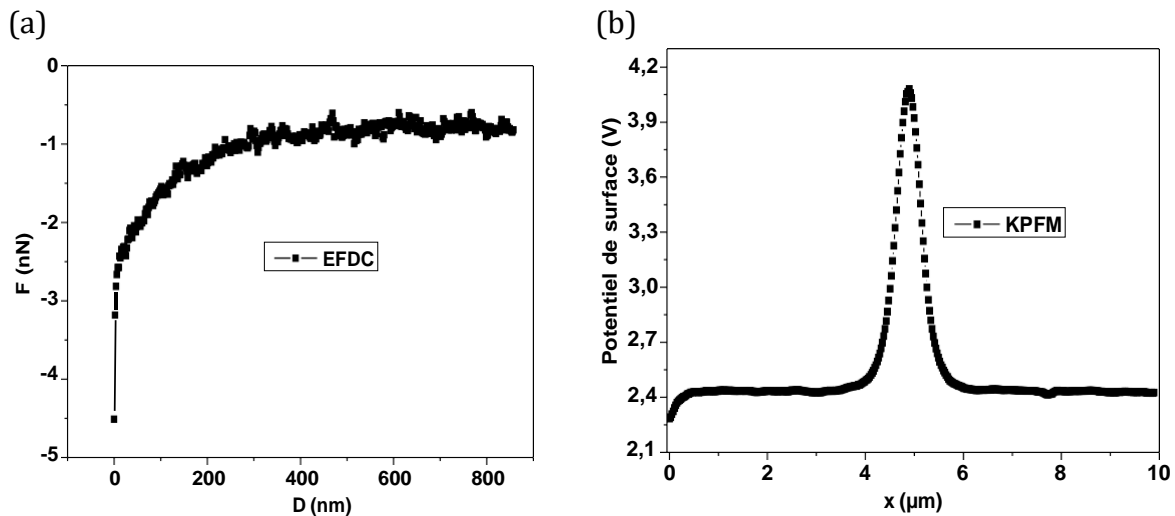


Figure IV. 21 Données expérimentales : (a) EFDC, (b) KPFM.

Comme expliqué au chapitre III, pour déterminer un estimé de la valeur du rayonde la charge nous avons calculé la dérivée du potentiel de surface obtenu expérimentalement. Le rayon de la charge correspond à la valeur minimale de la dérivée. Ainsi, d'après la Figure IV. 22, le rayon est approximativement égal à 5.1 μm .

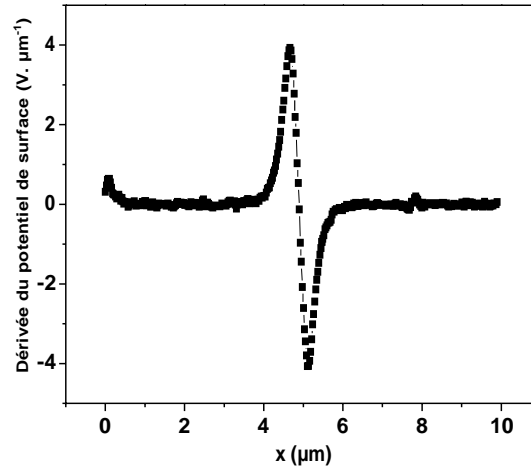


Figure IV.22 Dérivée du potentiel de surface.

Afin de déterminer la densité et la profondeur des charges, nous avons utilisé le modèle inverse avec, cette fois ci, une courbe de force expérimentale. Le critère d'arrêt est fixé à deux jours soit 48h. L'intervalle de variation de la profondeur s'étend de 10 nm à 130 nm, épaisseur de l'échantillon utilisé.

Les résultats obtenus par le modèle inverse sont : une profondeur 70 nm et une densité de charge de 5500 C.m^{-3} . D'après notre étude, cette solution doit représenter la configuration réelle des charges piégées au sein du matériau. Difficilement vérifiable car ce sont des données inaccessibles par l'expérience.

IV.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons, dans une première partie, effectué une présentation des principales familles de l'optimisation mono-objectif. Nous les avons classées en deux grandes catégories : l'optimisation locale et l'optimisation globale. Les méthodes de la première catégorie ne convergent généralement pas vers un minimum global et sont fortement dépendantes de l'estimée initiale choisie. De plus, lorsque le problème présente des contraintes complexes, il peut s'avérer difficile de déterminer un tel point de départ. Les méthodes de la deuxième catégorie ne présentent pas de tels défauts. Mais elles présentent, elles aussi, certains inconvénients. Les méthodes globales décrivent le plus efficacement possible l'espace de recherche. Cette efficacité est étroitement liée à la connaissance qu'elles ont, a priori, du problème et des informations qu'elles peuvent en tirer. Cependant, bien que l'espace de recherche soit balayé de manière exhaustive, les

solutions proposées ne peuvent être qualifiées que de candidats « très probables » à l'optimum global. Dans la partie suivante, nous allons formuler l'inversion de notre modèle et détailler le choix du solveur.

Dans une deuxième partie, nous avons utilisé les techniques d'optimisation pour localiser et quantifier la charge électrique au sein d'un matériau diélectrique mince. Le modèle inverse est défini comme un problème d'optimisation de type boîte noire mixte. Une première étude a été réalisée sur une courbe de force simulée dites de référence, dont on connaît parfaitement les valeurs des paramètres de la charge. Cette démarche a permis d'étudier la faisabilité de notre problème et ainsi d'étudier la convergence de notre fonction objective. Ainsi, nous avons constaté que les paramètres optimisés au bout de 72h sont trop éloignés de la solution en utilisant les courbes de force seules. C'est pourquoi, sur la base des conclusions du chapitre III, le modèle a été enrichi avec des données issues du potentiel de surface, données qui permettent, par dérivation, d'obtenir un estimé du rayon de la charge. En combinant les 2 approches, courbe de force et potentiel de surface, l'algorithme semble converger vers la solution globale. Finalement, cette approche a été utilisée sur des données expérimentales, l'algorithme ayant convergé vers un optimum, la configuration réelle des charges dans le matériau ainsi que leur densité ont pu être ainsi estimées.

Bibliographie

- [1] ["https://www.ibm.com/fr-fr/products/ilog-cplex-optimization-studio"](https://www.ibm.com/fr-fr/products/ilog-cplex-optimization-studio).
- [2] ["https://www.solver.com/xpress-solver-engine"](https://www.solver.com/xpress-solver-engine).
- [3] ["http://paradiseo.gforge.inria.fr/index.php?n=Main.MOEO"](http://paradiseo.gforge.inria.fr/index.php?n=Main.MOEO).
- [4] J. Nocedal, S. J. Wright "Numerical optimization", Springer, 1999.
- [5] J.B. Rosen, "The gradient projection method for nonlinear programming. Part II. Nonlinear constraints", *Indust. Appl. Math*, Vol 9 No 4, aa-bb, 1961.
- [6] C. Coello, "Use of a Self-Adaptive Penalty Approach for Engineering Optimization Problems", *Computers in Industry*, 41(2) :113-127, 2000.
- [7] "J.F. Bonnans, J. Ch. Gilbert, C. Lemaréchal, C. Sagastizábal, "Numerical Optimization - Theoretical and Numerical Aspect", 2006".
- [8] "A. Liefooghe, L. Jourdan, T. Legrand, J. Humeau, E-G. Talbi, "ParadisEO-MOEO: A Software Framework for Evolutionary Multi-objective Optimization. Advances in Multi-objective Nature Inspired Computing", *Studies in Computational Intelligence*, vol 272, cha".
- [9] C. Blum, "The metaheuristics network web site: Ant colony optimization", <Http://www.metaheuristics.org/index.php?main=3&sub=31>, 2008.
- [10] K. Socha and M. Dorigo, "Ant colony optimization for continuous domains" *Eur. J. Oper.*

- [11] K. Socha, "ACO for Continuous and Mixed-Variable Optimization", pages 25–36, Ant Colony, Optimization and Swarm Intelligence. Springer, Berlin, Heidelberg, 2004.
- [12] M.Schlueter , J A.Egea, J R.Banga, "Extended Ant Colony Optimization for non-convex Mixed Integer Nonlinear Programming" Computers & Operations Research (Elsevier), Vol 36 , Issue 7, Pages 2217-2229, 2009.
- [13] M. Schlueter, S. Erb , M.Gerdts, S.Kemble, J J. Rückmann, "MIDACO on MINLP Space Applications" Advances in Space Research (Elsevier), Vol 51, Issue 7, Pages 1116–1131, 2013.
- [14] M.Schlueter, M.Gerdts , J J.Rückmann "A Numerical Study of MIDACO on 100 MINLP Benchmarks" Optimization (Taylor & Francis), Vol 61, Issue 7, Pages 873-900, 2012.

Conclusion générale et perspectives

Cette thèse s'est inscrite dans un projet qui concerne le problème du chargement électrostatique des matériaux diélectriques aux échelles nanométriques. Comme expliqué, une propriété commune à l'ensemble des diélectriques solides, qu'ils soient utilisés comme isolants électriques ou comme éléments de stockage d'énergie, et quelle que soit la taille des dispositifs (électrotechnique, électronique de puissance, microsystemes, microélectronique...) est leur propension à accumuler des charges électriques au-delà d'un champ électrique critique. La présence de ces charges peut représenter une cause de défaillance des systèmes : le renforcement local du champ électrique dans les éléments d'isolation électrique peut mener à une rupture prématurée du diélectrique, en environnement chargeant tel que le spatial, l'accumulation de charges dans les revêtements extérieurs de satellites amène à des phénomènes de décharge électrostatique qui conduisent à la défaillance des équipements, perte du satellite par exemple.

L'utilisation d'isolants de plus en plus minces rend les techniques de mesure de charge inadaptées, résolution de l'ordre du μm , et nécessite l'utilisation de diagnostics localisés comme l'AFM (Microscope à Force Atomique). Cependant, ces techniques ne permettent pas de connaître précisément la densité de charge ni sa répartition en profondeur, données indispensables pour une meilleure compréhension des phénomènes de transport et de piégeage de charges. C'est pourquoi, nous avons travaillé au développement d'une nouvelle méthode, appelée EFDC (Courbes de Force Electrostatique – Electrostatic Force-Distance Curves), basée sur la mesure des forces électrostatiques au cours de phases d'approche / retrait entre la sonde AFM et les charges stockées dans le matériau. L'objectif principal de cette thèse était une meilleure compréhension des interactions en jeu lors des mesures EFDC pour la caractérisation électrique des matériaux de manière à améliorer la sensibilité de la mesure, en d'autres termes : est-ce que l'utilisation des seules courbes EFDCs est suffisante pour connaître la répartition latérale et en profondeur des charges ?

La première étape a été consacrée principalement à la partie modélisation dont le but était d'obtenir un modèle tridimensionnel robuste, rapide et permettant de s'adapter à plusieurs configurations : électrodes enfouies, charges implantées dans le matériau, etc. Pour ce faire, il a fallu s'approprier dans un premier temps le modèle 3D de la sonde AFM

existant en s'intéressant plus particulièrement aux problèmes de maillage. En effet, la disparité d'échelle des objets modélisés, la structure géométrique complexe de la sonde et le caractère tridimensionnel du système peut rendre difficile la convergence du modèle numérique. Cette étape s'est avérée indispensable pour réduire considérablement le temps de calcul. Dans un deuxième temps, ce modèle a été modifié de manière à estimer la force électrostatique créée par des charges électriques et non par la pointe seule sous potentiel en prenant en compte le maximum d'informations sur géométrie réelle de la sonde comme, par exemple, l'angle d'inclinaison de celle-ci. A partir de ce modèle, nous nous sommes intéressés aux cas des courbes de force induites par une électrode enfouie dans le diélectrique, sous potentiel, à différentes profondeurs et largeurs. Cette étape a été l'occasion de valider notre modèle avec des données expérimentales sur des géométries et conditions aux limites proches de la réalité du problème à résoudre : les charges sont dans un premier temps assimilées à des électrodes enfouies sous potentiel électrique. D'autre part, les résultats obtenus ont permis une première analyse de sensibilité des EFDCs suivant la profondeur et la largeur d'une l'électrode enfouie sous potentiel.

Après avoir validé le modèle 3D pour la modélisation des EFDCs à l'aide de données expérimentales, nous avons étudié la sensibilité des courbes de force à la localisation tridimensionnelle des charges au sein d'un diélectrique mince. Pour ce faire, le modèle de base est adapté pour estimer la force électrostatique exercée sur la sonde AFM par une distribution de charge et non plus par des électrodes enfouies. Dans notre cas, la géométrie de la distribution des charges est considérée comme étant une distribution semi ellipsoïdale. Les résultats obtenus ont permis de montrer que l'étalement latéral et en profondeur de la charge n'influence que la courbure des EFDC alors que la force maximale dépend de tous les paramètres à savoir la densité de charge, les étalements latéral et vertical des charges. L'analyse des résultats montrent également que lorsque la charge reste proche du point d'injection (petit étalement latéral et en profondeur), la force maximale dépend uniquement de la densité. Par conséquent, c'est cette configuration qui semble être la plus favorable pour déterminer directement la répartition des charges à partir de l'EFDC.

Ce modèle a été également adapté pour simuler le potentiel de surface KPFM obtenu en mesure. A l'aide de ce modèle, une étude de la sensibilité du potentiel de surface aux

paramètres de la charge, tels que la densité de charge, le rayon de charge et la profondeur des charges a été réalisée. Les résultats ont permis d'identifier une méthode simple et rapide pour déterminer l'étalement latéral des charges en connaissant uniquement la distribution du potentiel de surface.

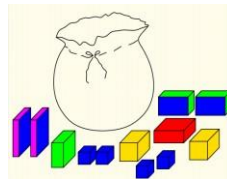
La dernière étape de ces travaux de thèse a été d'initier un travail d'optimisation pour localiser la charge au sein du matériau. Après avoir rappelé le principe de base des méthodes inverses, le solveur commercial MIDACO a été utilisé sur une courbe de force simulée dite de référence dont on connaît parfaitement les valeurs des paramètres de la charge. Lorsque les trois paramètres sont à identifier (l'étalement latéral et en profondeur et la densité de charges), l'algorithme MIDACO converge vers une solution non unique (dépendant des conditions initiales) même si la courbe de force obtenue est quasi identique à celle de référence. Cependant, lorsque le rayon de la charge est fixé à la valeur de référence, le modèle converge vers le minimum global. Sachant que le rayon peut être trouvé par la distribution du potentiel de surface, ce premier résultat est tout à fait acceptable et encourageant pour la localisation tridimensionnelle des charges dans les matériaux diélectriques minces.

La principale perspective à plus ou moins court terme est le développement de modèles inverses adaptés à notre problème et dont la convergence est assurée quelle que soit la configuration de la charge d'espace implantée dans le matériau. Pour l'instant, le code utilisé semble fonctionner lorsque deux paramètres sont à optimiser. Le choix de l'algorithme devra être justifié et optimisé en termes de temps de calcul. L'algorithme choisi devra également être capable de situer la distribution de la charge sur la surface du matériau. Des cartographies d'EFDC devront être réalisées sur toute la surface du matériau et analysées pour recouvrer les coordonnées de la charge ainsi que tous ses paramètres. Enfin, le modèle EFDC développé actuellement et présenté dans ce rapport de thèse concerne uniquement des charges fixes. Pour prendre en considération le déplacement des charges au sein du matériau (la mobilité des porteurs, le piégeage et leur dépiégeage), les équations de transport devront être implémentées.

Annexes

Annexe I

Pour le problème de ‘sac à dos’ : On dispose de N objets possédant chacun un poids $p_k \in \mathbb{R}$ et une utilité $v_k \in \mathbb{R}$ que l’on désire placer dans un sac ne pouvant supporter plus d’un certain poids $P \in \mathbb{R}$. Quels objets faut-il mettre dans le sac de façon à maximiser l’utilité totale sans dépasser la capacité du sac ?



Problème de sac à dos.

Pour modéliser ce problème il faut définir les variables de décision, les contraintes et l’objectif.

Il nous faut définir les variables qui représentent en quelque sorte les actions ou les décisions qui amèneront à trouver une solution. On définit la variable x_k associée à un objet k de la façon suivante : $x_k = 1$ si l’objet k est mis dans le sac, et $x_k = 0$ si l’objet k n’est pas mis dans le sac :

Variables de décision : $x_k = \begin{cases} 1, & \text{si l'objet } k \text{ est mis dans le sac} \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}$

avec $x = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) \in \{0,1\}^N \subset \mathbb{Z}^N$

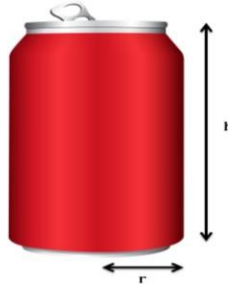
Les contraintes du problème, ici, il n’y en a qu’une, c’est que la somme des poids de tous les objets dans le sac doit être inférieure ou égale au poids maximal du sac à dos :

$$\text{Contraintes : } g_1(x) = \sum_{k=1}^N x_k p_k - P \leq 0$$

Enfin, il faut exprimer la fonction qui traduit notre objectif, ici, c’est maximiser la valeur totale des objets dans le sac.

$$\text{Objectif : } \max f(x) = \sum_{i=1}^n x_k v_k$$

Pour le problème de 'canettes' : Une compagnie de boissons gazeuses désire réduire les coûts de fabrication de ses canettes (qui ont une forme cylindrique de hauteur h et de rayon r) et cela en minimisant la surface d'aluminium nécessaire. Ils doivent s'assurer qu'une canette ait un volume de 125 cm^3 . Quelles sont les dimensions qui réalisent l'objectif ?



Problème de canettes.

On définit la variable de décision x associée à une canette par le couple (h, r) :

Variables de décision : $x = (h, r) \in \mathbb{R}^2$

Les contraintes du problème consistent à dire d'une part que les variables h et r doivent être positives car elles représentent des dimensions géométriques de la canette et d'autre part, il faut que le volume de la canette doit être égal à 125 cm^3 .

$$\text{Contraintes : } \begin{cases} g_1(x) = -h \leq 0 \\ g_2(x) = -r \leq 0 \end{cases}$$

$$h(x) = r^2 h \pi - 125 = 0$$

L'objectif du problème posé est de minimiser la surface totale du cylindre (surface latérale et extrémités du cylindre) :

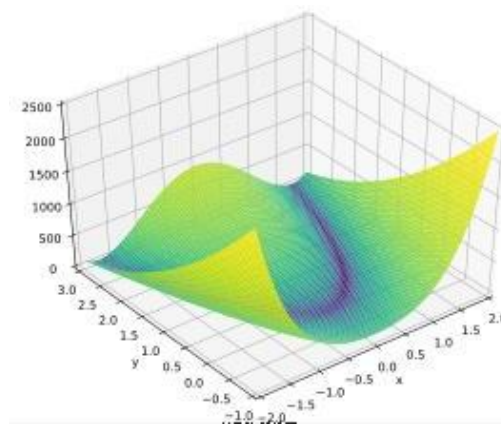
$$\text{Objectif : } \min f(x) = 2 \pi r(r + h)$$

Annexe II

Pour donner un aperçu introductif sur ces méthodes, on donne un exemple d'une fonction à minimiser en utilisant un algorithme de type gradients conjugués (CG) et un algorithme de type Newton (BFGS). La fonction en question est appelée 'Rosenbrock' utilisée comme test pour des problèmes d'optimisation mathématique. Elle a été introduite par Howard H. Rosenbrock en 1960. Elle est aussi connue sous le nom de fonction banane.

Soit la fonction de Rosenbrock $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ définie par :

$$f(x, y) = (1 - x)^2 + 100(y - x^2)^2.$$



Graphique de la fonction de Rosenbrock (Wikipédia).

La fonction présente un minimum global à l'intérieur d'une longue vallée étroite de forme parabolique. Si trouver la vallée analytiquement est trivial, on peut voir que les algorithmes de recherche du minimum global convergent difficilement. Le minimum global est obtenu au point $(x, y) = (1, 1)$, pour lequel la fonction vaut 0. Un coefficient différent est parfois donné dans le second terme, mais cela n'affecte pas la position du minimum global.

Nous avons implémenté les deux méthodes avec Python en utilisant la librairie `scipy.py` :


```

from scipy.optimize import minimize, rosen, rosen_der          (1)

x0=[1.3,0.7]                                                  (2)

res = minimize(rosen, x0, method = 'BFGS', jac = rosen_der,options={'gtol': 1e-6,'disp': True}) (3)

res1 = minimize(rosen, x0, method = 'CG', jac = rosen_der,options={'gtol': 1e-6, 'disp': True}) (4)

print(res.x)                                                  (5)

print(res1.x)                                                 (6)

```

La première ligne du code ci-dessus permet d'importer la fonction minimize, la fonction rosen (Rosenbrock) et la dérivée de la fonction de Rosenbrock (rosen_der). La deuxième ligne permet définir le point initial x0. La troisième et quatrième lignes permettent d'appeler la fonction d'optimisation 'minimize' qui prend comme paramètres : la fonction objectif (ici c'est rosen), le point initial (x0), la méthode d'optimisation (ligne (3) c'est BFGS, ligne (4) c'est gradients conjugués CG), le jacobien de la fonction objective (optionnel) et enfin différentes options par exemple 'gtol' qui représente l'erreur que la norme du gradient que l'algorithme ne doit pas dépasser et 'disp' indique l'affichage des résultat d'optimisation (nombre d'itérations, évaluation de la fonction,...). Les cinquièmes et sixièmes lignes permettent d'afficher les résultats. Le tableau suivant compare les résultats trouvés par les deux méthodes pour différents points de départ x0.

Comparaison de la méthode BFGS et gradients conjugués.

Méthode	x0	x*	Valeur de l'objectif	Itérations	Evaluation de l'objectif	Evaluation du gradient
BFGS	(1.3, 0.7)	(1,1)	0	26	31	31
CG	(1.3, 0.7)	(1,1)	0	56	115	115
BFGS	(13,7)	(1,1)	0	69	77	77
CG	(13,7)	(1,1)	0	174	317	317
BFGS	(130,70)	(1,1)	0	152	187	187
CG	(130,70)	(-0.96, 0.93)	3.93	101	195	195

Les résultats de l'optimisation montrent bien la méthode BFGS ne dépend pas du point de départ alors que la méthode des gradients conjugués échoue à trouver le minimum global quand le point initial est très loin de celui-ci. De plus, cette méthode converge lentement par rapport à BFGS.

Annexe III

On donne ici des exemples où la méthode est applicable.

On cherche à minimiser la fonction $f(x) = (b - ax)^2$ sous contrainte que $x \geq 0$ avec a et b des nombres réels. On peut calculer explicitement le gradient de cette fonction :

$$\nabla f(x) = -2a(b - ax)$$

Comme on travaille avec une seule dimension la projection sur l'ensemble $x \geq 0$ est donnée par :

$$proj_{y \geq 0}(z) = \min_{y \geq 0} |y - z|$$

En utilisant la définition de la valeur absolue on obtient :

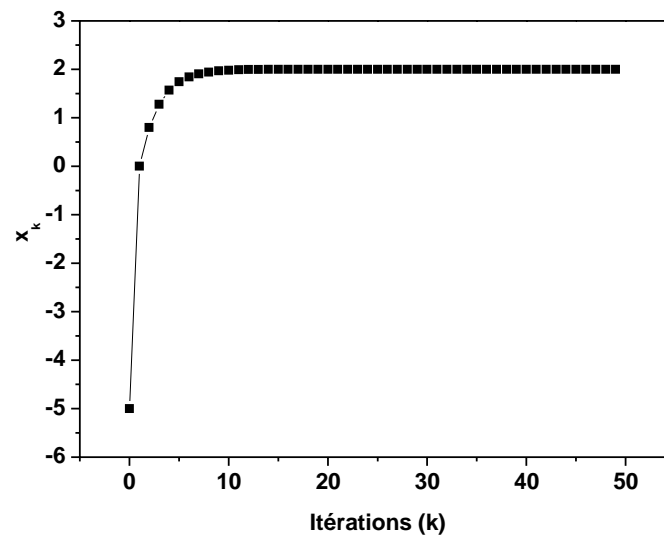
$$|y - z| = \begin{cases} y - z & \text{si } y \geq z \\ z - y & \text{si } y \leq z \end{cases}$$

Ainsi la projection sur l'ensemble $x \geq 0$ est donnée par :

$$proj(z) = \max(0, z)$$

$$proj(x_k - \alpha(-2a(b - ax))) = \max(0, x_k - \alpha(-2a(b - ax)))$$

$$x_{k+1} = \max(0, x_k - \alpha(-2a(b - ax)))$$



Exemple d'application de la méthode de gradient projeté.

Annexe IV

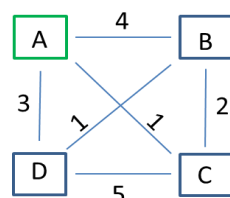
Le problème du voyageur de commerce qui, étant donné une liste de villes (n villes), et des distances entre toutes les paires de villes doit, trouver le plus court chemin parmi les $\frac{1}{2}(n-1)!$ chemins possibles qui permet de visiter chaque ville une et une seule fois et qui termine dans la ville de départ.



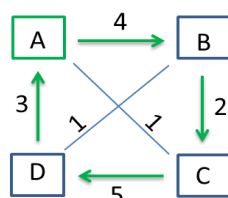
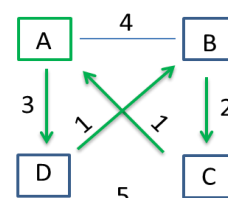
Le problème de voyageur de commerce : calculer un plus court-circuit qui passe une et une seule fois par toutes les villes (Wikipédia).

Pour illustrer comment on résout le problème du voyageur de commerce avec l'algorithme de colonies de fourmis on donne un exemple simple :

On considère la liste des villes A, B, C, D et les distances données par le dessin ci-dessous à gauche. Un premier chemin qui part de A, revient en A et qui visite toutes les villes est ABCDA. Comme on a quatre villes donc le nombre de chemins possibles est 3. Notons le chemin ABCDA par e_1 , le chemin ACDBA par e_2 et le chemin ADBCA par e_3 . Les fourmis partent initialement de la source de la ville A et parcourent les trois chemins possibles jusqu'à la fin. Les quantités de phéromone sont initialement égales et sur leur chemin de retour, les fourmis déposent de la phéromone sur les chemins.



(a) Le début.

(b) Le chemin ABCDA de longueur $4+2+5+3 = 14$ km.(c) Le chemin ADBCA est le chemin le plus court qui part de A, revient A et passe par toutes les villes. Il est de longueur $3+1+2+1=7$ km.

Exemple d'un problème de voyageur de commerce.

On note t_i la quantité de phéromones associée à chaque chemin e_i .

Les valeurs des quantités de phéromone sont renouvelées selon l'équation :

$$t_i = t + \frac{Q}{l_i}$$

avec Q une constante et l_i la longueur du chemin parcouru. Donc la nouvelle valeur de la quantité de phéromone est inversement proportionnelle à la longueur du chemin. Un aller-retour (le parcours du chemin) d'une seule fourmi constitue une construction complète de la solution. Le processus est réitéré, et les fourmis repartent à nouveau de la source (la ville A). Une fourmi donnée va choisir entre les chemins selon la probabilité :

$$P_{e_i} = \frac{t_i}{\sum_1^n t_i}$$

Dans notre exemple les probabilités seront les suivantes :

$$P_{e_1} = \frac{t_1}{t_1 + t_2 + t_3} \quad P_{e_2} = \frac{t_2}{t_1 + t_2 + t_3} \quad P_{e_3} = \frac{t_3}{t_1 + t_2 + t_3}$$

Nous avons $l_3 < l_2 < l_1$, donc $t_3 > t_2 > t_1$. Par conséquent, $P_{e_3} > P_{e_2} > P_{e_1}$. Le chemin choisi sera alors e_3 .

D'autres changements affectent la phéromone, l'évaporation. Ce dernier facteur a pour objectif d'empêcher une augmentation continue d'une seule solution, et de réduire l'importance d'autres solutions. En effet, l'évaporation affectera la quantité de phéromone par :

$$t_i = t_i(1 - \rho)$$

Avec $\rho \in [0, 1]$, ρ est le paramètre qui va régler la quantité de phéromone déposée, donc c'est le paramètre qui va influencer la vitesse de convergence de l'algorithme vers une solution donnée.