

# **3D discrete dislocation dynamics simulation of polycrystalline films and silicon electrostatics**

**Hareesh TUMMALA**

Sous la direction de Marc Fivel et Thomas Pardoen (Univ. Catholique de Louvain)

**Lundi 12 décembre à 9h30**

Amphithéâtre Jean Besson – Phelma Campus

**Résumé :** En général, la déformation plastique des matériaux cristallins est essentiellement dominée par le mouvement des dislocations et leurs interactions mutuelles. Pour les métaux nanocristallins (nc), les joints de grains influencent le mouvement des dislocations de différentes façons. Ainsi, la forme des grains, l'orientation des grains, la densité de dislocation initiale qu'il contient, la structure des joints de grains et la nature de chargement extérieur sont autant de paramètres qui sont susceptibles de faire varier la réponse du chargement mécanique du polycristal.

Dans le cadre de cette thèse, ces effets sont étudiés en réalisant des simulations de dynamique des dislocations discrète 3D (DDD). Dans un premier temps, le rôle de la forme du grain est étudié en réalisant des simulations du comportement en traction uniaxial de trois grains isolés de taille micrométrique de même volume, mais qui diffèrent par leur facteur de forme. On observe une diminution de la localisation de la déformation plastique avec l'augmentation de rapport d'aspect du grain. La réponse plastique anisotrope des grains allongés a été quantifiée en termes de contrainte interne développée sur chaque système de glissement.

En outre, une version polycristalline du code de dynamique des dislocations couplée avec des éléments finis a été utilisée pour étudier le comportement mécanique des films minces de palladium ayant une structure de grain colonnaire. La densité de dislocations initiale prise en compte dans les simulations est proche de celle mesurée expérimentalement. Les simulations de DDD d'un polycristal reproduisent correctement le comportement d'écrouissage. L'augmentation de la résistance observée avec la diminution de l'épaisseur du film a été atteinte en utilisant une distribution hétérogène de la taille des grains du polycristal. Le résultat principal est que la probabilité d'avoir des grains plus petits sans dislocations initiales augmente avec la diminution de l'épaisseur du film. L'effet de la distribution de tailles des grains voisins sur la contrainte interne développée à l'intérieur du grain central a été étudié.

Enfin, en adaptant le modèle de Read, l'influence d'une dislocation statique électriquement chargée sur les propriétés électriques des semi-conducteurs à être modélisée.