



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE



وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

جامعة باجي مختار-عنابة

UNIVERSITÉ BADJI MOKHTAR - ANNABA

FACULTÉ DES SCIENCES

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

LABORATOIRE DES SEMI-CONDUCTEURS

THÈSE

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de

DOCTORAT

Filière : Physique

Spécialité : Physique des Matériaux et Composants

***Investigation des propriétés électriques et élastiques
des semi-conducteurs à large gap: SiC***

Par : Souheyr GUERNOUB

Devant le jury :

Président:	Bouزيد HADJOUJA	Professeur	UBM-Annaba
Directeur de Thèse:	Ibtissem TOUATI	MCA	UBM-Annaba
Co-Directeur de Thèse:	Abdellaziz DOGHMANE	Professeur Émérite	UBM-Annaba
Examineurs:	Brahim BELFARHI	Professeur	U. Guelma
	Fares SERRADJ	MCA	U. Guelma
	Abdellaziz BOUASLA	Professeur	UBM-Annaba

Année Universitaire : 2025/2026

Dédicaces

À mes parents, pour leur amour et leur soutien inconditionnels.

À mon mari, pour sa patience et sa présence constante.

À mes enfants, sources de motivation et de joie.

À mes sœurs et à mon frère, pour leur affection et leurs encouragements.

À mon grand-père, jeddi Ahmed, dont la sagesse m'inspire chaque jour.

À toute ma famille, maternelle et paternelle, pour leur bienveillance.

À mes neveux et nièces, avec une pensée particulière pour mon chouchou,

Bouhend Wassim.

Je vous dédie ce travail de tout mon cœur.

Remerciements

Je remercie Allah, le Tout-Puissant, de m'avoir accordé le courage, la volonté et la patience nécessaires pour mener à bien ce travail.

Le travail présenté dans cette thèse a été réalisé au Laboratoire des Semi-Conducteurs (LSC), relevant du Département de Physique de la Faculté des Sciences de l'Université Badji Mokhtar Annaba (UBMA). Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur DOGHMANE Abdellaziz, Professeur Émérite à l'UBMA et Directeur du LSC, pour m'avoir offert les moyens et les conditions favorables à la réalisation de ce travail, ainsi que pour ses échanges scientifiques enrichissants et ses encouragements constants.

Je souhaite exprimer toute ma gratitude à Madame HADJOUR Ilhème, mon ancienne directrice de thèse, qui n'est malheureusement plus parmi nous. Elle m'a accompagnée au début de ce travail avec beaucoup d'attention, de bienveillance et de rigueur. Son souvenir demeure présent dans l'aboutissement de cette thèse, et je garde une profonde reconnaissance pour tout ce qu'elle m'a transmis.

Je remercie très sincèrement Madame TOUATI Ibtissem, Maître de Conférences A à l'Université Badji Mokhtar Annaba (UBMA), pour avoir repris la direction de ma thèse. Elle m'a guidée avec patience, rigueur et générosité. Toujours disponible et à l'écoute, elle m'a aidée à progresser et à finaliser ce travail dans les meilleures conditions. Je lui suis profondément reconnaissante pour son accompagnement, sa bienveillance et la confiance qu'elle m'a témoignée.

Je remercie également mon co-directeur de thèse, le Professeur Émérite DOGHMANE Abdellaziz, pour ses précieux conseils, son soutien constant et ses encouragements tout au long de ce travail. Je garde un souvenir reconnaissant de ses enseignements dispensés durant

Remerciements

mon master, qui ont grandement contribué à nourrir mon intérêt pour ce domaine de recherche.

J'exprime toute ma gratitude à Monsieur HADJOUJA Bouzid, Professeur à l'Université Badji Mokhtar Annaba (UBMA), pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider le jury de ma soutenance.

Je tiens à adresser mes sincères remerciements à Monsieur BELFARHI Brahim, Professeur à l'Université 08 Mai 1945, Guelma, et à Monsieur SERRADJ Fares, Maître de Conférences A à l'Université 08 Mai 1945, Guelma et Monsieur BOUASLA Abdellaziz pour avoir accepté d'examiner cette thèse. Je leur suis vivement reconnaissante pour le temps qu'ils y ont consacré et pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail.

Je tiens à exprimer ma sincère reconnaissance à l'ensemble des enseignants du Département de Physique, ainsi qu'à tous mes collègues et amis, pour leur soutien, leur disponibilité et leurs encouragements tout au long de mon parcours.

Enfin, je souhaite remercier du fond du cœur ma famille pour son soutien constant tout au long de mon parcours universitaire. Une pensée toute particulière à mon père, pour ses encouragements et sa présence rassurante à chaque étape. Je remercie également toutes les personnes qui, de près ou de loin, ont contribué à l'aboutissement de ce travail.

"دراسة الخصائص الكهربائية والمرنة لأشباه الموصلات واسعة الفجوة: (SiC)"

في هذا العمل، تم استخدام برنامج محاكاة يعتمد على مبدأ الميكروسكوبي الصوتي الماسح (SAM) كتقنية تقييم غير مدمرة لتحديد المعاملات المرنة لأنواع السيليكون كاربيد (SiC) المتعددة البلورات وهي: 3C، 6H، 8H، 10H، و 4H-SiC. تم إنشاء علاقات تربط بين المعاملات المرنة وطاقة الفجوة غير المباشرة (E_g) لأنواع SiC المتعددة البلورات، بعد تحقيق مفصل في المعاملات المرنة: معامل يونغ (E)، معامل الانضغاط (B)، ومعامل القص (G) كدوال لطاقة الفجوة E_g . بعد ذلك، تم تحليل تأثير نسبة السداسية (h) على الخصائص العامة لمعامل الانعكاس $R(\theta)$ وكذلك على الإشارات الصوتية $V(z)$ لأنواع SiC المتعددة البلورات، بما في ذلك الزوايا الحرجة، الدور الفضائي، أطياف FFT، وسرعات الموجات الصوتية (V_R , V_L , V_T). كما أخذ التحليل في الاعتبار التغيرات في المعاملات المرنة وطاقة الفجوة غير المباشرة. تشير النتائج إلى أن كل من طاقة الفجوة غير المباشرة والمعاملات المرنة والصوتية تزداد مع زيادة نسبة السداسية (h)، في حين تقل الزوايا الحرجة (θ_L , θ_T , θ_R). يمكن وصف هذه الاتجاهات بعلاقات شبه تجريبية من الشكل $F(h) = \pm \alpha h^\beta$ ، مما يكشف عن وجود ارتباط شبه خطي بين الخصائص المرنة لأنواع SiC المتعددة البلورات ونسبة السداسية الخاصة بها. بشكل عام، يقدم هذا العمل مساهمة نظرية لفهم وتطوير أنواع SiC المتعددة البلورات للتطبيقات التكنولوجية المتقدمة.

الكلمات مفتاحية: كاربون السيليسيوم (SiC)، الأنواع متعددة البلورات، نسبة السداسية المئوية، الخصائص المرنة، طاقة الفجوة، سرعات الموجات الصوتية، الزوايا الحرجة.

Investigation of the Electrical and Elastic Properties of Wide-Bandgap Semiconductors: SiC

Abstract:

In this work, a simulation program based on the principle of Scanning Acoustic Microscopy (SAM) was employed as a non-destructive evaluation technique to determine the elastic parameters of silicon carbide (SiC) polytypes namely 3C, 10H, 8H, 6H, and 4H-SiC. Relationships were established linking the elastic moduli to the indirect band gaps (E_g) of the SiC polytypes, following a detailed investigation of the elastic parameters Young's modulus (E), bulk modulus (B), and shear modulus (G) as functions of the band-gap energy E_g . Subsequently, the influence of the hexagonality percentage (h) was analyzed on the overall characteristics of the reflection coefficient $R(\theta)$ as well as on the acoustic signatures $V(z)$ of the SiC polytypes, including critical angles, spatial periods, FFT spectra, and acoustic wave velocities (V_L , V_T , and V_R). The analysis also considered variations in the elastic moduli and the indirect band-gap energy. The results indicate that both the indirect band-gap energy and the elastic and acoustic parameters increase with the hexagonality percentage (h), whereas the critical angles (θ_L , θ_T , and θ_R) decrease. These trends can be described by semi-empirical relations of the form $F(h) = \pm \alpha h + \beta$, revealing an almost linear correlation between the elastic properties of SiC polytypes and their hexagonality percentage. Overall, this study provides a theoretical contribution to the understanding and development of SiC polytypes for advanced technological applications.

The effect of the hexagonality percentage h was examined on the reflection coefficient $R(\theta)$ and acoustic signatures $V(z)$ (critical angles, spatial periods, FFT spectra, and wave velocities V_L , V_T , and V_R) as well as on the elastic moduli and the indirect band gap energy. The results show that both the indirect band gap energy and the elastic parameters increase with rising hexagonality, while the critical angles

Keywords: Silicon carbide (SiC), polytypes, hexagonality percentage, elastic properties, band gap energy, acoustic velocities, critical angles.

Investigation des propriétés électriques et élastiques des semiconducteurs à large gap: SiC

Résumé:

Dans ce travail, un programme de simulation basé sur la microscopie acoustique à balayage (SAM) a été utilisé comme méthode non destructive pour déterminer les paramètres élastiques des polytypes du carbure de silicium (SiC): 3C, 10H, 8H, 6H et 4H-SiC. Des relations ont été établies entre les modules élastiques et les gaps de bande indirects (E_g), à partir d'une étude détaillée des modules de Young (E), de compressibilité (B) et de cisaillement (G) en fonction de l'énergie du gap de bande. L'influence du pourcentage d'hexagonalité (h) a ensuite été examinée sur les caractéristiques du coefficient de réflexion $R(\theta)$ et les signatures acoustiques $V(z)$, notamment les angles critiques, les périodes spatiales, les spectres FFT et les vitesses acoustiques (V_L , V_T , et V_R). L'analyse a également pris en compte les variations des modules élastiques et de l'énergie du gap de bande indirect. Les résultats montrent que l'énergie du gap de bande indirecte ainsi que les paramètres élastiques et acoustiques augmentent avec le pourcentage d'hexagonalité (h), tandis que les angles critiques (θ_L , θ_T , et θ_R) diminuent. Ces tendances peuvent être décrites par des relations semi-empiriques de la forme $F(h) = \pm \alpha h + \beta$, mettant en évidence une corrélation quasi linéaire entre les propriétés élastiques des polytypes de SiC et leur pourcentage d'hexagonalité. Dans l'ensemble, cette étude apporte une contribution théorique à la compréhension et au développement des polytypes de SiC pour des applications technologiques avancées.

L'effet du pourcentage d'hexagonalité h a été examiné sur le coefficient de réflexion $R(\theta)$ et sur les signatures acoustiques $V(z)$ (angles critiques, périodes spatiales, spectres FFT et vitesses des ondes acoustiques V_L , V_T , et V_R), ainsi que sur les modules élastiques et l'énergie du gap de bande indirecte. Les résultats montrent que l'énergie du gap de bande indirecte et les paramètres élastiques augmentent avec l'hexagonalité, tandis que les angles critiques diminuent.

Mots-clés : carbure de silicium (SiC) ; polytypes ; pourcentage d'hexagonalité ; propriétés élastiques ; énergie de gap de bande ; vitesses acoustiques ; angles critiques.

Sommaire

ملخص.....	I
Abstract.....	II
Résumé.....	III
Sommaire.....	VI
Liste des figures.....	VII
Liste des tableaux.....	VIII
Liste des abréviations et symboles.....	IX

Introduction générale.....	1
-----------------------------------	----------

Chapitre I: Carbure de silicium (SiC): Structure et Propriétés

I.1 Introduction.....	6
I.2 Historique.....	6
I.3 Structure cristalline du carbure de silicium.....	8
I.3.1 Liaison chimique et organisation atomique.....	8
I.3.2 Structures cristallographiques.....	9
I.4 Polytypisme du Carbure de Silicium.....	11
I.5 Propriétés du carbure de silicium.....	13
I.5.1 Propriétés électriques du carbure de silicium.....	13
I.5.2 Propriétés électriques du carbure de silicium.....	16
I.6 Élaboration du carbure de silicium.....	18
I.6.1 Réduction Carbothermique.....	18
I.6.2 Dépôt chimique en phase vapeur (CVD).....	19
I.6.3 Transport physique en phase vapeur (PVT) : Pilier de la croissance monocristalline.....	20
I.6.4 Techniques émergentes et alternatives écologiques.....	21
I.7 Applications du carbure de silicium.....	22
I.7.1 Dispositifs électroniques de puissance: MOSFETs et diodes Schottky en SiC.....	23
I.7.2 Applications dans les domaines aéronautiques, automobiles et énergétiques.....	23
I.7.3 Utilisations industrielles : abrasifs et matériaux réfractaires.....	24
I.8 Conclusion.....	25

Références.....	26
-----------------	----

Chapitre II: Influence de l'anisotropie sur les propriétés acoustiques du SiC

II.1 Introduction.....	33
II.2 Anisotropie des milieux élastiques.....	34
II.3 Propagation des ondes acoustiques dans les milieux élastiques.....	35
II.3.1 Ondes de volume: ondes longitudinales et transversales.....	36
II.3.2 Ondes de surface: ondes de Rayleigh.....	37
II.4 Approche méthodologique et paramètres de simulation SAM.....	38
II.4.1 Étapes de calcul de la vitesse de Rayleigh (V_R).....	38
a) Coefficient de réflexion $R(\theta)$	38
b) Signature acoustique $V(z)$	39
c) Analyse spectrale des $V(z)$ par FFT et détermination de V_R	40
II.4.2 Conditions et paramètres de simulation du SAM.....	41
II.5 Influence de l'anisotropie sur les propriétés acoustiques des polytypes de SiC (2H, 4H, 6H et 3C-SiC).....	41
II.5.1 Détermination des paramètres élastiques.....	42
II.5.2 Effet de l'anisotropie sur le coefficient de réflexion $R(\theta)$	43
a) Analyse du coefficient de réflexion $R(\theta)$ pour les polytypes hexagonaux (2H, 4H et 6H-SiC).....	44
b) Analyse de coefficient de réflexion pour le polytype cubique 3C-SiC.....	45
II.5.3 Effet de l'anisotropie sur les signatures acoustiques et les spectres FFT.....	47
a) Analyse des signatures acoustiques et des spectres FFT pour les polytypes hexagonaux (2 H, 4 H et 6H-SiC).....	48
b) Analyse des signatures acoustiques et des spectres FFT pour le polytype cubique 3C-SiC.....	50
II.5.4 Effet de l'anisotropie sur la vitesse de Rayleigh.....	52
a) Analyse de la vitesse de Rayleigh pour les polytypes hexagonaux (2H, 4H et 6H-SiC).....	52
b) Analyse de la vitesse de Rayleigh pour le polytype cubique 3C-SiC.....	53
II.6 Conclusion.....	54
Références.....	56

Chapitre III : Hexagonalité et propriétés élasto-acoustiques du SiC

III.1 Introduction.....	60
III.2 Concepts des modules élastiques et leurs corrélations.....	61

III.2.1	Caractérisation des modules élastiques.....	61
a)	Module de Young.....	61
b)	Module de cisaillement.....	61
c)	Module de compressibilité.....	62
d)	Coefficient de Poisson.....	62
III.2.2	Relations fondamentales entre les modules élastiques.....	62
a)	Relation entre E, G et ν	62
b)	Relation entre E, B et ν	63
c)	Relation entre E, B et G.....	63
III.3	Justification du choix des polytypes avec un pourcentage d'hexagonalité jusqu'à 50 %.....	63
III.4	Effets du pourcentage d'hexagonalité sur l'énergie de gap et les modules élastiques.....	64
III.5	Relation entre l'énergie du gap et les modules élastiques.....	69
III.6	Effet du pourcentage d'hexagonalité sur les vitesses longitudinales et transversales.....	71
III.7	Étude de l'effet du pourcentage d'hexagonalité sur la détermination de la vitesse de Rayleigh dans les polytypes de SiC.....	73
III.7.1	Effet du pourcentage d'hexagonalité sur le coefficient de réflexion $R(\theta)$	73
III.7.2	Effet du pourcentage d'hexagonalité sur la signature acoustique $V(z)$..	76
III.7.3	Analyse spectrale des signatures acoustique par FFT.....	78
III.7.4	Effet du pourcentage d'hexagonalité sur la vitesse de Rayleigh.....	80
III.8	Généralisation des paramètres élastiques et acoustiques des polytypes de SiC en fonction du pourcentage d'hexagonalité.....	83
III.9	Applications potentielles des relations établies.....	85
III.10	Conclusion.....	86
	Références.....	88

Conclusion générale.....	93
---------------------------------	-----------

LISTE DES FIGURES

Figure	Titre	Page
<u>Chapitre I</u>		
Carbure de silicium (SiC): Structure et Propriétés		
Figure I.1	Liaison tétraédrique entre un atome de silicium (Si) et quatre atomes de carbone (C) premiers voisins ($a=3.08\text{\AA}$, $\text{C-Si}=1.94\text{\AA}$).	09
Figure I.2	Représentation schématique des structures cristallographiques du carbure de silicium (SiC) : polytypes cubique (3C-SiC) et hexagonaux (4H-SiC, 6H-SiC), illustrant leurs séquences d'empilement respectives	11
Figure I.3	Schéma d'empilement des bicouches Si-C dans le carbure de silicium, illustrant les trois positions atomiques possibles (A, B, C) à l'origine de la formation des différents polytypes	12
Figure I.4	Variation de la concentration de porteurs intrinsèques n_i en fonction de la température pour les polytypes 4H-SiC, 6H-SiC et 3C-SiC	14
Figure I.5	Principe du dépôt chimique en phase vapeur (CVD) appliqué au SiC	20
Figure I.6	Procédé de sublimation ou PVT	21
<u>Chapitre II</u>		
Influence de l'anisotropie sur les propriétés acoustiques du SiC		
Figure II.1	Coefficient de réflexion, $R(\theta)$;(a) amplitude, (b) phase des polytypes hexagonaux de SiC ; 2H, 4H et 6H-SiC selon les directions [100] et [001].	45
Figure II.2	Coefficient de réflexion, $R(\theta)$:(a) amplitude, (b) phase du polytype cubique de SiC ; 3C-SiC selon les directions [100], [110] et [111].	47
Figure II.3	(a) Signatures acoustiques, $V(z)$, (b) transformée de Fourier, FFT des polytypes hexagonaux de SiC, 2H, 4H et 6H selon les directions [100] et [001].	49
Figure II.4	(a) Signatures acoustiques, $V(z)$, (b) transformée de Fourier, FFT de polytype cubique de SiC, 3C-SiC selon les directions [100] [110] et [111].	51

<u>Chapitre III</u>		
Hexagonalité et propriétés élasto-acoustiques du SiC		
Figure III.1	Évolution des bandes interdites indirectes en fonction du pourcentage d'hexagonalité.	64
Figure III.2	L'énergie de gap, E_g , des polytypes de SiC ; 3C, 10H, 8H, 6H et 4H en fonction du pourcentage d'hexagonalité h .	67
Figure III.3	Les modules élastiques des polytypes de SiC ; 3C, 10H, 8H, 6H et 4H en fonction du pourcentage d'hexagonalité h	68
Figure III.4	Variation du rapport $(E/B+G)$ et l'énergie du gap des polytypes de SiC : 3C, 10H, 8H, 6H et 4H.	71
Figure III.5	Vitesse longitudinale et transversale des polytypes de SiC, 3C, 10H, 8H, 4H et 6H en fonction du pourcentage d'hexagonalité h .	72
Figure III.6	Angles critiques θ_L , θ_T et θ_R des polytypes de SiC ; 3C, 10H, 8H, 4H et 6H en fonction du pourcentage d'hexagonalité h .	75
Figure III.7	Variation de la période spatiale Δz des polytypes de SiC (3C, 10H, 8H, 6H et 4H) en fonction du pourcentage d'hexagonalité h .	77
Figure III.8	Coefficient de réflexion, $R(\theta)$; (a), Signatures acoustiques, $V(z)$; (b) et transformée de Fourier, FFT ; (c) des polytypes de SiC, 3C, 10H, 8H, 6H et 4H.	79
Figure III.9	Vitesse de Rayleigh des polytypes de SiC 3C, 10H, 8H, 4H et 6H en fonction du pourcentage d'hexagonalité h : (a) par FFT et (b) par Viktorov	81

LISTE DES TABLEAUX

Tableau	Titre	Page
<u>Chapitre I</u>		
Carbure de silicium (SiC): Structure et Propriétés		
Tableau I.1	Comparaison des principales propriétés électriques des semi-conducteurs SiC, Si, GaAs et GaN.	16
Tableau I.2	Propriétés mécaniques de divers polytypes de SiC et du diamant.	16
<u>Chapitre II</u>		
Influence de l'anisotropie sur les propriétés acoustiques du SiC		
Tableau II.1	Relations entre les vitesses acoustiques et les constantes élastiques des polytypes de SiC cas hexagonal ([100] et [001]) et cubique ([100], [110] et [111]).	42
Tableau II.2	Constantes élastiques et vitesses acoustiques du 2H-, 4H- et 6H-SiC selon les directions [100] et [001], ainsi que du 3C-SiC selon les directions [100], [110] et [111].	43
Tableau II.3	Paramètres acoustiques (θ_L , θ_R , Δz et V_R) du 2H, 4H et 6H-SiC selon les directions [100] et [001] et du 3C-SiC selon les directions [100], [110] et [111].	54
<u>Chapitre III</u>		
Analyse de l'influence du pourcentage d'hexagonalité sur les propriétés élastiques et acoustiques des polytypes de SiC		
Tableau III.1	Pourcentage d'hexagonalité (h), densité volumique (ρ) énergie de gap (E_g), module de Young (E), module de cisaillement (G), et module de compressibilité (B) des polytypes 3C, 10H, 8H, 6H et 4H-SiC.	66
Tableau III.2	Valeurs des constantes caractéristiques dans la relation $F(h) = \pm \alpha h + \beta$ (où F représente : E_g , E, G, B, V_L , V_T , V_R , θ_L , θ_T , θ_R et ΔZ).	83

LISTE DES ABREVIATIONS ET SYMBOLES

Symbole	Signification
a	Paramètre de maille du matériau, ou a constante de réseau
A	Facteur d'Anisotropie élastique de Zener
B	Module de Compressibilité
Cij	les constantes élastiques
d	L'épaisseur de la couche
Eg	Energie de gap
Ec	L'énergie de bande de conduction
E _v	L'énergie de bande de valence du matériau
E	Module de Young f
f	Fréquence de fonctionnement
FFT	Transformée de Fourier Rapide
G	Module de Cisaillement
MHz	Mégahertz
n	Densité des électrons
N _A	Concentration des atomes accepteurs
N _D	Concentration des atomes donneurs
P ² (θ)	La fonction pupille de la lentille
R(θ)	Coefficient de réflexion
R(θ)	Module du coefficient de réflexion
SAM	Scanning acoustic microscopie
SAW	Surface acoustic wave
Si	Silicium
SiC	Carbure de silicium
SiO ₂	Silice

Liste des abréviations et symboles

V_{sat}	Vitesse de saturation
V_L	Vitesse longitudinale
V_T	Vitesse transversale
V_{liq}	la vitesse de propagation des ondes dans le liquide
$V(z)$	Signature acoustique d'un matériau
$V_{\text{lens}}(z)$	La réponse de lentille
V_{sample}	La réponse réelle de l'échantillon
z	Distance de défocalisation
Z	Impédance acoustique
Z_{sol}	Impédances acoustiques du solide
Z_{liq}	Impédances acoustiques du liquide
ϵ_{ij}	Le tenseur des déformations
θ	L'angle entre un vecteur d'onde (k) et l'axe de la lentille (z)
θ_i	Angle D'incidence
θ_L	Angle critique d'excitation du mode longitudinale
θ_R	Angle critique d'excitation du mode Rayleigh
θ_T	Angle critique d'excitation du mode transversale
λ	Longueur d'onde
ρ	Densité
ρ_{sol}	la densité du solide
ρ_{liq}	la densité du liquide de couplage
φ	Phase du coefficient de réflexion
ν	Coefficient de Poisson
σ_{ij}	Le tenseur des contraintes.
Δz	Période spatiale
ξ	Champ électrique
μ_n	Mobilité des électrons
μ_p	Mobilité des trous

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Le carbone, sous sa forme de charbon, a dominé le XIX^e siècle, tandis que le silicium s'est imposé comme le matériau clé du XX^e siècle. Aujourd'hui, leur combinaison, le carbure de silicium (SiC), s'impose comme un candidat prometteur pour les technologies du XXI^e siècle. L'essor de l'électronique de puissance et la recherche de composants capables de fonctionner dans des conditions extrêmes ont révélé les limites physiques du silicium, notamment pour les applications à forts courants et hautes tensions. Cette prise de conscience a stimulé l'intérêt pour les matériaux à large bande interdite, définis par une énergie de gap supérieure à 1,7 eV [1,2]. Parmi ces matériaux, le carbure de silicium (SiC) occupe une place particulière. Découvert en 1824 par le chimiste suédois Jöns Jacob Berzelius lors de ses travaux sur la synthèse du diamant [3,4], ce composé ne se rencontre presque pas à l'état naturel sur Terre. Les rares traces identifiées sont d'origine extraterrestre, introduites par des météorites [5,6]. Grâce à sa large bande d'énergie interdite, sa haute conductivité thermique, son champ de claquage environ dix fois supérieur à celui du silicium, ainsi que sa stabilité chimique remarquable et sa résistance exceptionnelle aux chocs thermiques, à la corrosion et à l'oxydation [7–10], le carbure de silicium (SiC) se distingue comme un matériau particulièrement prometteur pour la réalisation de dispositifs électroniques capables de fonctionner à haute température, à fréquence et tension élevées, ou encore dans des environnements extrêmes [8,9,11–15]. De plus, le SiC présente des propriétés mécaniques remarquables, notamment une dureté proche de celle du diamant, une résistance à la rupture supérieure à celle du silicium, ainsi que des modules élastiques très élevés [7,16,17]. Ces caractéristiques font du SiC un excellent candidat pour la fabrication de microcapteurs et de composants susceptibles d'opérer à des températures supérieures à 600 °C [12].

Au-delà de ses nombreuses applications en électronique, le carbure de silicium (SiC) présente un intérêt croissant dans des domaines variés tels que l'automobile, l'aéronautique,

l'aérospatial ainsi que les secteurs énergétiques, notamment dans les centrales thermiques et nucléaires [18–20].

La structure cristalline complexe du SiC résulte de l'existence d'un grand nombre de polytypes, dont les propriétés diffèrent sensiblement les unes des autres, permettant ainsi leur utilisation dans une large gamme de dispositifs [21]. L'étude approfondie de leurs propriétés électroniques, mécaniques et plus particulièrement élastiques revêt une importance majeure pour le développement des applications d'ingénierie de nouvelle génération [7,22]. En effet, les paramètres élastiques d'un matériau — tels que les vitesses des ondes acoustiques, les modules élastiques et les impédances acoustiques — fournissent des informations essentielles sur sa structure interne ainsi que sur la nature des liaisons atomiques qui le constituent [23,24].

Cette thèse est organisée en trois chapitres. Le premier chapitre est consacré à une présentation bibliographique du carbure de silicium. Nous retraçons d'abord son historique et son émergence dans le contexte des matériaux semi-conducteurs, avant de décrire sa structure cristalline et le phénomène de polytypisme, qui influence fortement ses propriétés physiques. Nous examinons ensuite ses principales propriétés électriques et mécaniques, ainsi que les méthodes d'élaboration, telles que la réduction carbothermique, le dépôt en phase vapeur (CVD) et le transport en phase vapeur physique (PVT). Enfin, nous abordons ses principaux domaines d'application.

Le deuxième chapitre est consacré à l'étude de l'influence de l'anisotropie sur les propriétés acoustiques des polytypes 2H, 3C, 4H et 6H du SiC, à travers des simulations numériques basées sur la microscopie acoustique à balayage (SAM). Nous analysons l'effet de la structure cristalline sur différents paramètres acoustiques, tels que le coefficient de réflexion $R(\theta)$, la signature acoustique $V(z)$, les spectres FFT et la vitesse des ondes de Rayleigh.

Le troisième chapitre est dédié à l'analyse de l'effet du pourcentage d'hexagonalité sur les propriétés élastiques et acoustiques de plusieurs polytypes (3C, 4H, 6H, 8H et 10H-SiC), toujours à l'aide de simulations SAM. Nous étudions les relations entre le pourcentage d'hexagonalité, la largeur de bande interdite, les modules élastiques et les vitesses acoustiques, ainsi que leurs effets sur les signatures acoustiques (coefficients de réflexion, signatures $V(z)$, spectres FFT et ondes de Rayleigh).

Enfin, cette étude se termine par une conclusion générale qui regroupe et synthétise l'ensemble des résultats obtenus.

Références bibliographiques :

- [1] Feng, Z. C. (2023). Handbook of Silicon Carbide Materials and Devices. CRC Press.
- [2] Scalise, E., Marzegalli, A., Montalenti, F., & Miglio, L. (2019). Physical Review Applied, 12(2), 021002.
- [3] Berzelius, J. J. (1824). Annalen der Physik und Chemie.
- [4] Choyke, W. J., & Patrick, L. (1997). Silicon Carbide. Springer.
- [5] Amari, S., Anders, E., & Zinner, E. (1990). Nature, 345, 238–240.
- [6] Ott, U. (2014). Philosophical Transactions of the Royal Society A, 372, 20130252.
- [7] Konstantinova, E., Bell, M. J. V., & Anjos, V. (2008). Intermetallics, 16(8), 1040–1042.
- [8] El Mendili, Y., Orberger, B., Chateigner, D., Bardeau, J. F., Gascoin, S., Petit, S., Perez, O., & Khadraoui, F. (2020). Scientific Reports, 10(1), 7562.
- [9] Li, P., Yan, X., Chen, J., Dong, P., & Huang, B. (2021). Journal of Applied Physics, 129(23).
- [10] Zhang, X. D., Cui, S. X., & Shi, H. F. (2014). Chinese Physics Letters, 31(1), 016401.
- [11] Kamitani, K., Grimsditch, M., Nipko, J. C., Loong, C. K., Okada, M., & Kimura, I. (1997). Journal of Applied Physics, 82(6), 3152–3154.
- [12] Djemia, P., Roussigné, Y., Dirras, G. F., & Jackson, K. M. (2004). Journal of Applied Physics, 95(5), 2324–2330.
- [13] Ramakers, S., Maruszyk, A., Amsler, M., Eckl, T., Mrovec, M., Hammerschmidt, T., & Drautz, R. (2022). Physical Review B, 106(7), 075201.
- [14] Ito, T., Akiyama, T., & Nakamura, K. (2013). Journal of Crystal Growth, 362, 207–210.
- [15] Zhao, Q., Zhang, Z., Li, Y., & Ouyang, X. (2017). RSC Advances, 7(45), 28499–28505.
- [16] Yaşar, Z. A., Delucca, V. A., & Haber, R. A. (2022). Processing and Application of Ceramics, 16(4), 384–390.
- [17] Gorai, S., & Bhattacharya, C. (2019). Journal of Applied Physics, 125(18).
- [18] Tahani, M., Postek, E., Motevalizadeh, L., & Sadowski, T. (2023). Molecules, 28(2), 744.
- [19] Lanfant, B. (2014). Doctoral dissertation, Université Paris Sud-Paris XI.

- [20] Xu, W. W., Xia, F., Chen, L., Wu, M., Gang, T., & Huang, Y. (2018). *Journal of Alloys and Compounds*, 768, 722–732.
- [21] Liu, Y. F., Cheng, L. F., Zeng, Q. F., & Zhang, L. T. (2015). *Chinese Physics Letters*, 32(8), 087103.
- [22] Doghmane, A., Al-Suraihy, I., Hadjoub, I., & Hadjoub, Z. (2012). *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 28(1), 012037.
- [23] Al-Suraihy, I., Doghmane, A., & Hadjoub, Z. (2013). *Advanced Materials Research*, 811, 77–82.
- [24] Touati, I., Doghmane, A., Khoualdia, A., & Hadjoub, Z. (2022). *Silicon*, 14(16), 10873–10879.

Chapitre I

Carbure de silicium (SiC): Structure et Propriétés

I.1 Introduction

Le carbure de silicium (SiC), composé de silicium et de carbone, s'impose comme l'un des matériaux semi-conducteurs clés du XXI^e siècle. Depuis les années 1990, son large gap énergétique (compris entre 2,2 et 3,3 eV), sa stabilité thermique ainsi que sa résistance mécanique en font un candidat idéal pour les applications à haute puissance et à haute fréquence, notamment dans des environnements extrêmes où le silicium atteint ses limites [1,2]. Sa conductivité thermique élevée et sa forte résistance chimique élargissent également son champ d'application aux secteurs aérospatial, automobile et nucléaire [3]. Les avancées réalisées dans la croissance cristalline et la fabrication des dispositifs ont permis d'améliorer la qualité des matériaux et de réduire les coûts de production, favorisant ainsi une adoption plus large du SiC dans l'électronique de puissance et les technologies des énergies renouvelables [4,5]. Dès lors, le SiC apparaît comme un matériau stratégique pour les technologies de demain.

Dans ce chapitre, nous présentons tout d'abord l'historique du carbure de silicium afin de mieux situer son émergence dans le contexte des matériaux semi-conducteurs. Nous décrivons ensuite sa structure cristalline, en mettant l'accent sur le phénomène de polytypisme, qui influence de manière significative ses propriétés physiques. Par la suite, nous analysons les principales caractéristiques électriques et mécaniques du SiC, en particulier celles qui le rendent particulièrement adapté aux applications en électronique de puissance. Nous abordons également les différentes méthodes de synthèse, telles que la réduction carbothermique, le dépôt chimique en phase vapeur (CVD) et le transport en phase vapeur physique (PVT), en soulignant leur influence sur la qualité du matériau. Enfin, nous concluons par un aperçu de ses principaux domaines d'application, notamment dans l'électronique de puissance, l'aéronautique, l'automobile, le nucléaire et les matériaux industriels avancés.

I.2 Historique

C'est au cours d'expériences de synthèse du diamant que le chimiste Jöns Jacob Berzelius découvrit, en 1824, un nouveau composé désormais connu sous le nom de carbure de silicium (SiC) [1,6]. Au cours de ses travaux, il identifia ce matériau et réalisa également les premières analyses physiques. Il convient de préciser que ce composé n'a été observé que très rarement

à l'état naturel dans la croûte terrestre, ses rares occurrences étant généralement d'origine extraterrestre, transportées par des météorites [7].

En 1905, le chimiste français Henri Moissan identifia du SiC sous forme de petites plaques hexagonales à l'intérieur d'une météorite découverte dans le cratère de Canyon Diablo, en Arizona. En hommage à cette découverte, la forme minérale reçut le nom de moissanite, un terme encore employé aujourd'hui pour désigner le minéral naturel ainsi que les gemmes synthétiques [8].

Par ailleurs, le premier procédé industriel de production du SiC fut mis au point en 1891 par l'ingénieur américain Edward G. Acheson. Celui-ci parvint à synthétiser le matériau en chauffant un mélange de sable et de carbone dans un four électrique, obtenant ainsi une substance très dure qu'il baptisa Carborundum. Ce procédé, connu plus tard sous le nom de procédé Acheson, est généralement considéré comme marquant la naissance du SiC synthétique [9,10]. Fait rare dans l'histoire des matériaux, la synthèse artificielle précéda la découverte du SiC naturel.

Au début du XX^e siècle, en 1907, Henry J. Round mit en évidence les propriétés électroluminescentes du SiC et réalisa la première diode électroluminescente (LED) à base de ce matériau [11]. Toutefois, ce n'est qu'à partir des années 1950 qu'un regain d'intérêt scientifique pour les propriétés électroniques du SiC se manifesta, en particulier en lien avec les besoins des secteurs militaire et aérospatial, qui nécessitent des composants capables de résister à des conditions extrêmes de rayonnement, de température et de tension.

En 1955, Lely mit au point une méthode innovante permettant la croissance de cristaux uniques de SiC, relativement purs et présentant peu de défauts, reposant sur le principe de la sublimation sous vide. Ce progrès ouvrit une nouvelle ère pour la recherche sur le SiC, à une période où l'intérêt pour les semi-conducteurs croissait rapidement [12]. De nombreux laboratoires aux États-Unis, en Russie, en Allemagne et au Japon se consacrèrent alors à l'étude approfondie du SiC. Cependant, les difficultés rencontrées pour produire des substrats de taille suffisante freinèrent cet engouement, entraînant une baisse temporaire de l'intérêt pour ce matériau à l'exception de la Russie, où la recherche se poursuivit de manière plus discrète.

Un nouvel essor fut donné en 1978 par Tairov et Tsvetkov, qui introduisirent un procédé dérivé de celui de Lely, appelé procédé Lely modifié, fondé sur la croissance par sublimation à partir de semences. Dès le début des années 1980, la taille des substrats augmenta

considérablement, relançant les recherches sur le SiC dans de nombreux pays, notamment aux États-Unis, au Japon et en Europe [13].

En 1987, la société Cree Research Inc. fut fondée à partir des travaux menés à l'Université d'État de Caroline du Nord. Elle devint la première entreprise à produire et commercialiser des substrats monocristallins de carbure de silicium (SiC) dès 1991. Bien que confrontée à certaines difficultés techniques à ses débuts, cette réalisation constitua une étape déterminante dans le développement des matériaux semi-conducteurs à large bande interdite [14]. À partir de 2001, la commercialisation des dispositifs électroniques de puissance à base de SiC devint une réalité. À titre d'exemple, des diodes électroluminescentes SiC (600 V / 6 A) furent alors mises sur le marché par la société Infineon.

Au cours des années suivantes, de grandes entreprises et institutions de recherche intensifièrent leurs efforts afin d'améliorer la qualité cristalline du SiC, d'accroître la taille des plaquettes et d'optimiser les performances des dispositifs électroniques. Ces avancées conduisirent à l'introduction commerciale de composants de puissance tels que les diodes Schottky, les transistors MOSFET, puis les diodes Schottky à barrière de jonction (JBS), tous fabriqués à partir de SiC. Ces dispositifs présentèrent une efficacité énergétique nettement supérieure, ainsi que des pertes de commutation considérablement réduites par rapport à leurs équivalents en silicium, faisant du SiC un matériau de choix pour les applications à hautes performances dans le domaine de l'électronique de puissance [1,10].

I.3 Structure cristalline du carbure de silicium

I.3.1 Liaison chimique et organisation atomique

Le carbure de silicium (SiC) est un composé binaire exceptionnel, constitué de deux éléments tétravalents, le silicium (Si) et le carbone (C). Dans toutes ses structures cristallines, chaque atome de silicium est covalamment lié à quatre atomes de carbone, tandis que chaque atome de carbone est, de manière réciproque, entouré de quatre atomes de silicium. Cette disposition forme une structure tétraédrique tridimensionnelle, illustrée à la figure I.1, caractéristique de l'hybridation sp^3 et analogue à celle du diamant [15,16]. Une telle configuration confère au réseau cristallin une cohésion remarquable et une stabilité mécanique élevée.

La liaison Si-C est principalement covalente (environ 88 %), mais elle présente également une faible composante ionique, liée à la différence d'électronégativité entre le carbone (2,55)

et le silicium (1,90) selon l'échelle de Pauling [17]. Cette polarisation modérée contribue à renforcer la stabilité du réseau cristallin. L'énergie de liaison est particulièrement élevée, de l'ordre de 5 eV, conférant au SiC une stabilité chimique et thermique exceptionnelle [18].

La distance interatomique entre un atome de silicium et un atome de carbone varie entre 1,89 Å et 1,94 Å, tandis que la distance entre atomes de même nature (C–C ou Si–Si) dépend légèrement du polytype, mais demeure proche de 3,08 Å, avec de faibles variations selon la structure considérée [19]. Ces valeurs traduisent un empilement atomique dense, régulier et ordonné. La structure de base, constituée de tétraèdres Si–C, se répète ainsi dans toutes les formes cristallines du carbure de silicium.

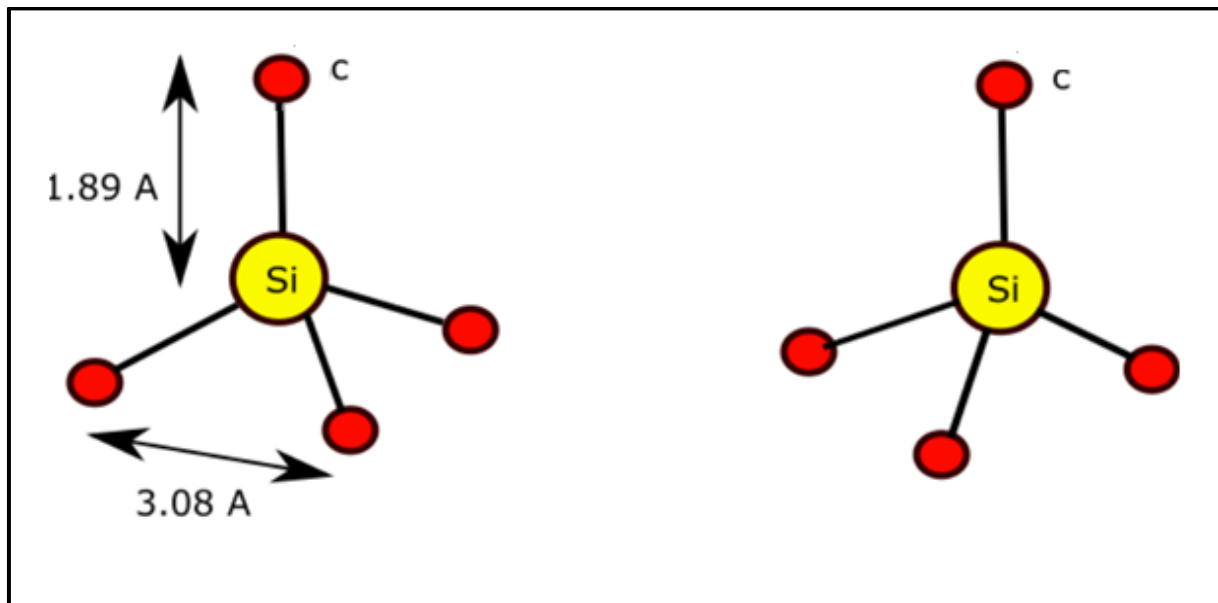


Figure I.1 : Liaison tétraédrique entre un atome de silicium (Si) et quatre atomes de carbone (C) premiers voisins ($a=3.08\text{\AA}$, $\text{C-Si}=1.94\text{\AA}$) [20].

I.3.2 Structures cristallographiques

Bien que tous les polytypes du carbure de silicium (SiC) présentent la même composition chimique et le même arrangement local, caractérisé par une coordination tétraédrique entre les atomes de silicium (Si) et de carbone (C), leur structure à longue distance varie selon la séquence d'empilement des couches atomiques. Ces différences d'empilement donnent

naissance à diverse structure cristallographique, principalement cubique, hexagonale ou rhomboédrique [21].

Les polytypes du carbure de silicium (SiC) peuvent être regroupés en deux grandes catégories : ceux à empilement périodique, caractérisés par une répétition régulière des bicouches Si-C dans la maille cristalline, et ceux présentant des séquences d'empilement désordonnées. Dans cette section, nous nous concentrons sur les polytypes à empilement périodique, qui constituent la base des structures les plus stables du SiC. Deux familles structurales principales peuvent ainsi être distinguées.

D'une part, la structure cubique, notée 3C-SiC ou β -SiC, constitue le seul polytype cubique connu du carbure de silicium. Elle présente une séquence d'empilement de type ABC, identique à celle de la blende de zinc (ZnS), et appartient au groupe d'espace F-43m. Cette forme se développe généralement à basse température et se rencontre principalement dans les couches minces ou les dispositifs microélectroniques [22].

D'autre part, l'ensemble des polytypes à structure hexagonale ou rhomboédrique est désigné sous le nom de α -SiC. La structure hexagonale regroupe plusieurs polytypes couramment étudiés et utilisés, notamment 2H, 4H, 6H, 8H et 10H, chacun étant défini par un motif d'empilement spécifique. Par exemple, le 2H-SiC présente un empilement AB, le 4H-SiC suit la séquence ABAC, tandis que le 6H-SiC possède une séquence ABCACB. Les 8H-SiC et 10H-SiC, plus rares, se caractérisent par des motifs d'empilement plus longs, constitués respectivement de huit et dix bicouches. Bien qu'ils présentent tous une symétrie hexagonale, ces polytypes se distinguent par la périodicité de leur motif de répétition, laquelle influence directement leurs propriétés physiques, électroniques et acoustiques. Leur direction de croissance naturelle est généralement parallèle à l'axe cristallographique [0001] [1]. La structure rhomboédrique se distingue par une symétrie cristalline propre, différente de celles des structures cubiques et hexagonales. Elle se caractérise par des séquences d'empilement plus complexes, souvent tridimensionnelles, et par une période de répétition plus longue.

Bien qu'elle soit rarement utilisée dans les applications industrielles, cette structure revêt un intérêt fondamental pour l'étude des propriétés électroniques anisotropes et des défauts cristallins. Elle fait également l'objet de recherches dans les domaines de la photonique et des dispositifs à haute fréquence [23,24].

Parmi l'ensemble des polytypes connus, les plus répandus sont le 3C-SiC (cubique) ainsi que les formes hexagonales 4H-SiC et 6H-SiC, largement utilisées en électronique de puissance et en optoélectronique. La Figure I.2 ci-dessous illustre les principales structures

cristallographiques du SiC, en mettant en évidence les séquences d'empilement caractéristiques des polytypes hexagonaux.

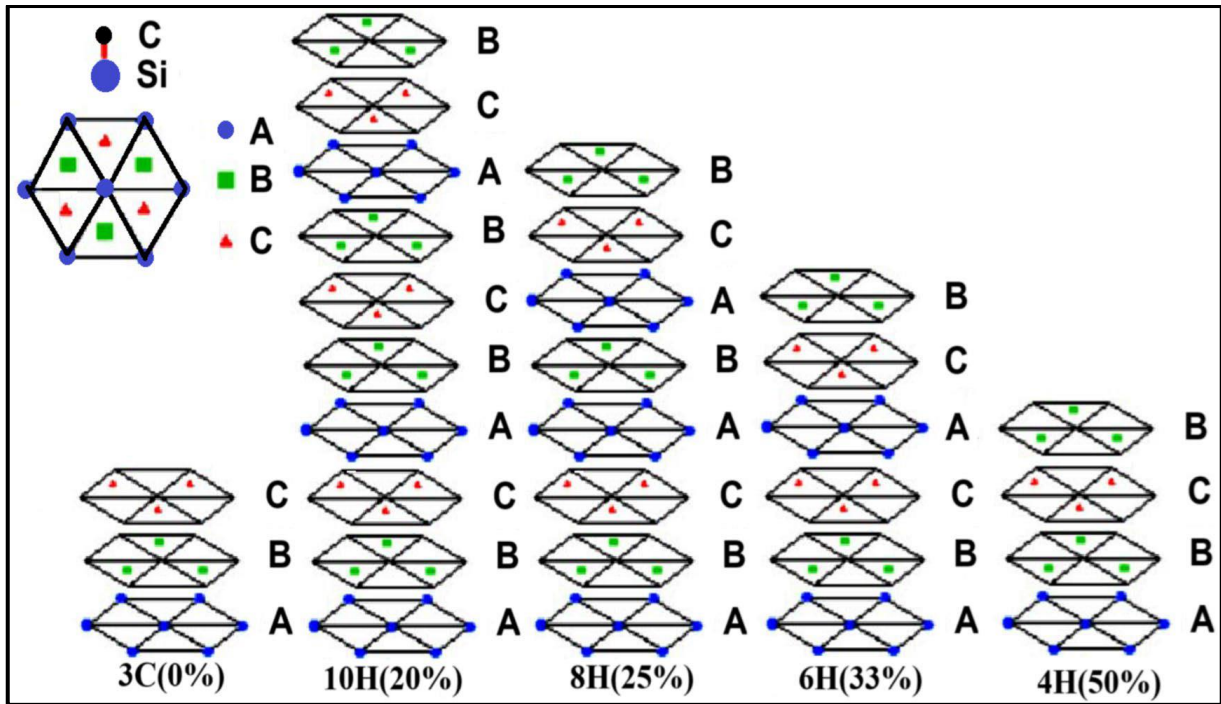


Figure I.2 : Représentation schématique des structures cristallographiques du carbure de silicium (SiC) : polytypes cubique (3C-SiC) et hexagonaux (4H-SiC, 6H-SiC), illustrant leurs séquences d'empilement respectives [25].

I.4 Polytypisme du Carbure de Silicium

Le carbure de silicium (SiC) est l'un des rares matériaux semi-conducteurs capables de se cristalliser sous différentes formes structurales, actuellement répertoriées à environ 250 polytypes [26]. Ce phénomène, appelé polytypisme, constitue l'une des particularités majeures du SiC et représente même l'une de ses caractéristiques les plus remarquables et avantageuses [27]. En effet, il n'altère ni la composition chimique ni l'environnement local des atomes, mais modifie uniquement la séquence d'empilement des bicouches silicium-carbone. Le polytypisme peut être considéré comme une forme particulière de polymorphisme, se manifestant selon une direction cristallographique privilégiée. Autrement dit, c'est l'arrangement séquentiel des bicouches Si-C qui détermine la formation des

différents polytypes du SiC [28]. Une bicouche correspond à la superposition d'un plan compact d'atomes de silicium et d'un plan compact d'atomes de carbone [29]. L'empilement de ces bicouches peut s'effectuer selon trois positions distinctes, notées A, B et C, comme illustré à la Figure I.3.

La classification des polytypes du carbure de silicium repose généralement sur la notation de Ramsdell [30]. Dans ce système, chaque structure cristallographique est représentée par le symbole NX, où N désigne le nombre de bicouches Si-C contenues dans une maille élémentaire (c'est-à-dire la période de répétition), et X indique le système cristallin correspondant. À titre d'exemples :

- 4H-SiC : structure hexagonale comportant quatre bicouches Si-C par maille élémentaire;
- 3C-SiC : structure cubique comportant trois bicouches par maille élémentaire ;
- 15R-SiC : structure rhomboédrique comportant quinze bicouches par maille élémentaire.

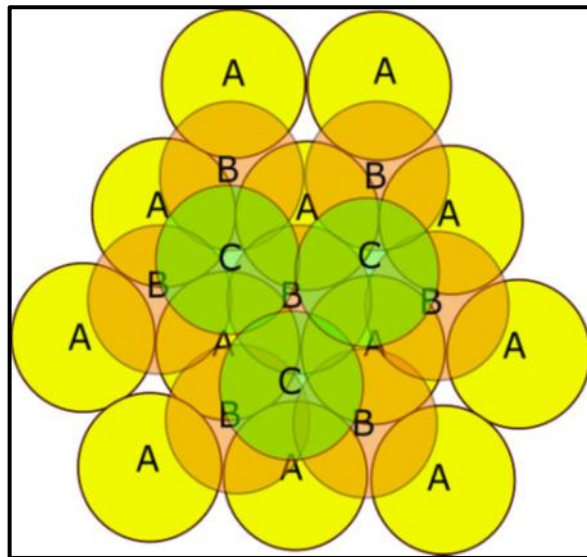


Figure I.3 Schéma d'empilement des bicouches Si-C dans le carbure de silicium, illustrant les trois positions atomiques possibles (A, B, C) à l'origine de la formation des différents polytypes [20].

I.5 Propriétés du carbure de silicium

I.5.1 Propriétés électriques du carbure de silicium

Les propriétés du carbure de silicium dépendent étroitement de sa structure cristalline. Ce matériau présente des caractéristiques remarquables qui le rendent particulièrement adapté aux domaines de l'électronique et de la mécanique. Grâce à sa large bande interdite, sa haute conductivité thermique et sa grande résistance mécanique, le SiC s'impose comme un candidat de choix pour les dispositifs fonctionnant sous fortes puissances, à hautes fréquences et à températures élevées [31]. De plus, son intégration dans le domaine des microsystèmes (MEMS) ouvre de nouvelles perspectives pour des applications exigeant robustesse et stabilité dans des environnements extrêmes. Dans le cadre des objectifs du présent travail, l'attention sera portée plus spécifiquement sur les propriétés électriques du SiC, détaillées ci-après.

Le carbure de silicium a été reconnu dès le début des années 1960 pour l'excellence de ses propriétés électriques, notamment son champ électrique critique, sa vitesse de saturation électronique et sa conductivité thermique élevées [32]. Le SiC est un semi-conducteur à large bande interdite dont la valeur, à 300 K, varie entre 2,4 eV pour le polytype 3C-SiC et 3,35 eV pour le 2H-SiC, soit environ trois fois supérieure à celle du silicium (Si) [27].

Cette large bande interdite entraîne une réduction significative de la génération de porteurs intrinsèques, notés n_i . Il devient ainsi peu probable que des électrons thermiquement excités franchissent la bande interdite. Par conséquent, les dispositifs réalisés à base de SiC peuvent fonctionner à des températures nettement plus élevées que ceux en silicium.

Contrairement au Si, les propriétés semi-conductrices du SiC demeurent stables au-delà de 500°C [33]. Il convient de rappeler que, dans les semi-conducteurs, la concentration intrinsèque n_i dépend de la largeur de bande interdite E_g ainsi que des densités effectives d'états dans la bande de conduction (N_C) et de valence (N_V):

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{\left(\frac{E_g}{2kT}\right)} \quad (\text{I.1})$$

D'après l'équation (I-1), il ressort que la concentration intrinsèque n_i augmente avec la température. À 300 K, la concentration des porteurs de charge intrinsèques dans le polytype 6H-SiC n'est que de $1,6 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-3}$, alors que celle du silicium dépasse $8,9 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$ [1].

Les porteurs de charge intrinsèques (n_i) sont à l'origine des courants de fuite dans les semi-conducteurs. Grâce à sa très faible valeur de n_i , le SiC présente donc un courant de fuite négligeable, même à température élevée. Ainsi, le SiC surpasse largement le silicium pour les applications à haute température.

La Figure I.4 illustre l'évolution de la concentration des porteurs intrinsèques en fonction de la température, en tenant compte de la variation de la largeur de bande interdite E_g avec la température, pour les polytypes 4H-SiC, 6H-SiC et 3C-SiC. Il apparaît que, pour les polytypes hexagonaux (4H et 6H), la concentration intrinsèque demeure inférieure aux niveaux de dopage typiques du SiC, généralement supérieurs à 10^{14} cm^{-3} . Par conséquent, le SiC fonctionne en régime extrinsèque jusqu'à environ 1000 K au minimum [34].

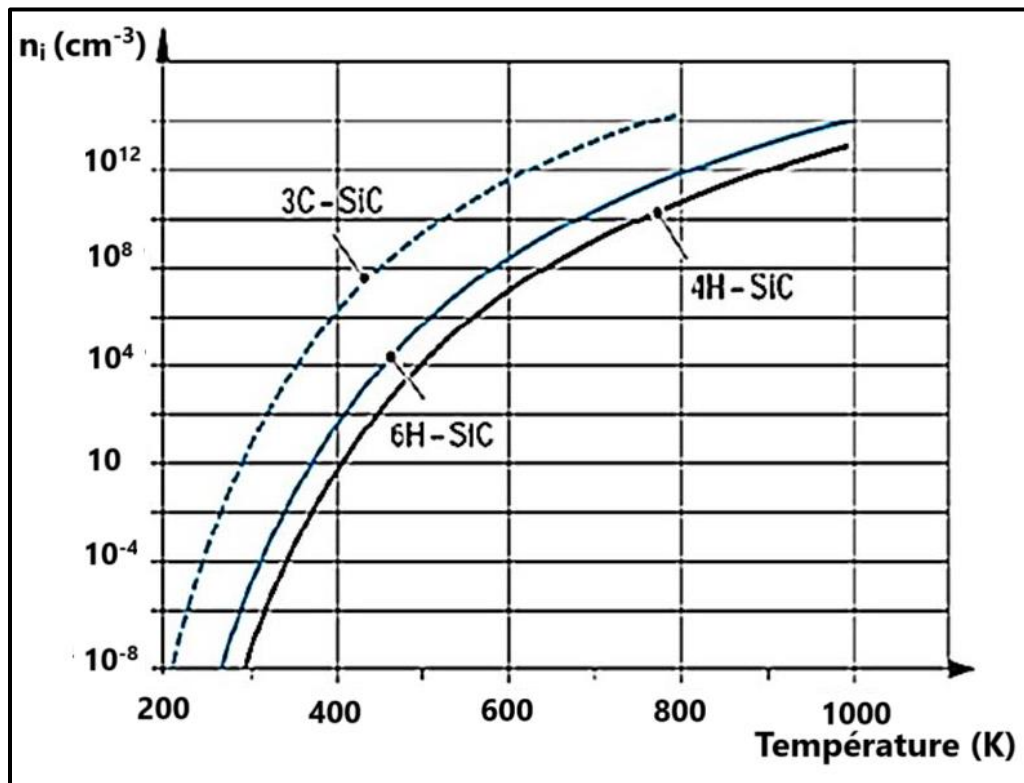


Figure I.4 : Variation de la concentration de porteurs intrinsèques n_i en fonction de la température pour les polytypes 4H-SiC, 6H-SiC et 3C-SiC [1].

Le tableau I.1 présente les principales propriétés électriques des polytypes du SiC, comparées à celles d'autres semi-conducteurs de référence tels que le silicium (Si), le GaAs et le GaN.

On constate que le SiC se distingue par une stabilité physique et chimique exceptionnelle, attribuée à la forte énergie de liaison Si-C, de l'ordre de 5 eV. Par ailleurs, la vitesse de

saturation des porteurs (v_{Sat}) y est particulièrement élevée, atteignant environ $2 \times 10^7 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$, soit près du double de celle du silicium ($1 \times 10^7 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$). Cette propriété confère aux dispositifs à base de SiC une grande efficacité de fonctionnement à hautes fréquences, notamment dans les domaines des radiofréquences et des micro-ondes.

La mobilité des porteurs de charge dans le carbure de silicium (SiC) dépend sensiblement du polytype considéré, bien qu'elle demeure relativement faible par rapport à d'autres semi-conducteurs. Cette limitation constitue l'un des principaux inconvénients du matériau.

En effet, pour une densité de dopage typique de l'ordre de $10^{17} \text{ atomes}\cdot\text{cm}^{-3}$, la mobilité électronique se situe généralement entre 370 et $1000 \text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$, la valeur correspondant au 4H-SiC étant presque deux fois supérieure à celle du 6H-SiC. En revanche, le champ de claquage électrique du SiC est exceptionnellement élevé environ dix fois supérieur à celui du silicium avec des valeurs comprises entre $2,1 \times 10^6$ et $2,5 \times 10^6 \text{ V}\cdot\text{cm}^{-1}$, selon le polytype.

Cette caractéristique permet aux transistors MESFET et aux autres dispositifs de puissance à base de SiC de supporter de fortes tensions au drain, tout en assurant un fonctionnement stable à haute température et une densité de puissance RF particulièrement élevée.

De plus, la conductivité thermique du SiC est excellente, environ trois fois supérieure à celle du silicium, variant entre 4,9 et $5 \text{ W}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ selon les polytypes. Cette haute conductivité thermique favorise une évacuation efficace de la chaleur, rendant possible le fonctionnement à des puissances et fréquences très élevées. Enfin, sa permittivité, plus faible que celle du silicium, constitue également un avantage notable. Ainsi, comme présenté précédemment, le SiC présente des propriétés physiques et électriques exceptionnelles, dépassant les limites du silicium et ouvrant la voie à une électronique de puissance plus performante.

Tableau I.1 : Comparaison des principales propriétés électriques des semi-conducteurs SiC, Si, GaAs et GaN [35-37].

	4H-SiC	6H-SiC	3C-SiC	Si	GaAs	GaN
E_g (eV)	3.25	3	2.2	1.1	1.4	3.4
T_{max} (°K)	1720	1580	1200	600	760	1930
T_F (°K)	1825	1825	1825	1415	1238	1800
V_{sat} (10⁷ m/s)	2	2	2.5	1	1	2.7
μ_n (cm².V⁻¹.s⁻¹)	800	370	1000	1100	6000	900
E_c (10⁶ V.cm⁻¹)	2.2	2.5	2.12	0.25	0.4	5
ε_r	9.7	9.66	9.72	11.8	12.8	9
λ (W.cm⁻¹.K⁻¹)	4.9	4.9	5	1.5	0.5	1.3
Stabilité physique	Excellente	Excellente	Excellente	Bonne	Correcte	Bonne

1.5.2 Propriétés mécaniques du carbure de silicium

Le carbure de silicium (SiC) est reconnu pour ses propriétés mécaniques exceptionnelles, étroitement liées à son polytype cristallin. Le tableau I.2 présente les principaux paramètres mécaniques des polytypes courants du SiC : 2H, 4H, 6H et 3C-SiC, ainsi que ceux du diamant, utilisé ici comme référence. Ces paramètres comprennent l'énergie de bande interdite, E_g, la densité ρ, le module de Young E, le coefficient de Poisson ν, le module de cisaillement G, le module d'élasticité volumique B, ainsi que le rapport G/B.

Tableau I.2 : Propriétés mécaniques de divers polytypes de SiC et du diamant.

Polytype	E _g (eV)	ρ (kg/m ³)	E (GPa)	ν	G (GPa)	B (GPa)	G/B
2H-SiC	3.01 ^[26]	3219 ^[38]	441 ^[26]	0.157 ^[26]	191 ^[26]	213 ^[26]	0.89
4H-SiC	3.27 ^[39]	3215 ^[38]	448.2 ^[39]	0.134 ^[39]	197.7 ^[39]	204 ^[39]	0.96
6H-SiC	3.02 ^[39]	3215 ^[38]	442.6 ^[39]	0.138 ^[39]	194.4 ^[39]	204 ^[39]	0.95
3C-SiC	2.39 ^[39]	3215 ^[38]	425.3 ^[39]	0.170 ^[39]	181.8 ^[39]	215 ^[39]	0.84
Diamant-C	5.45 ^[40]	3513 ^[40]	1029.4 ^[41]	0.102 ^[41]	523.6 ^[41]	431.2 ^[41]	1.21

L'analyse de ces paramètres mécaniques montre que les polytypes du SiC présentent une grande rigidité et une résistance élevée à la déformation, comme en témoignent leurs valeurs élevées de modules de Young, de cisaillement et de compression. Par exemple, le 4H-SiC présente la plus grande rigidité parmi les polytypes, avec $E=448,2$ GPa, suivi de près par les polytypes 6H et 2H, tandis que le 3C-SiC est légèrement moins rigide. Cependant, l'étude de la fragilité ou de la ductilité d'un matériau peut être estimée à partir du rapport G/B . Selon le critère de Pugh, les matériaux ayant $G/B < 0,57$ sont considérés comme ductiles, tandis que ceux avec $G/B > 0,57$ sont fragiles [41].

Tous les polytypes de SiC du tableau I.2 présentent des valeurs de G/B bien supérieures à 0,57 (entre 0,84 et 0,96), indiquant que les polytypes de SiC sont intrinsèquement fragiles.

On peut également tirer la même conclusion en se basant sur le coefficient de Poisson ν , qui est généralement corrélé à la ductilité d'un matériau [41,26]. Les valeurs de ν sont de 0,157 pour le 2H, 0,134 pour le 4H, 0,138 pour le 6H et 0,170 pour le 3C-SiC. Toutes ces valeurs étant inférieures à 0,33, il en découle que les quatre polytypes présentent un comportement fragile, les matériaux ductiles ayant typiquement un ν proche ou supérieur à 0,33 [26,42].

De plus, ces données montrent que le 4H-SiC est légèrement plus rigide que les autres polytypes, suivi du 6H, du 2H, puis du 3C. Globalement, la rigidité du SiC se situe entre celle du diamant, très élevée (environ 1029 GPa), et celle du silicium cristallin, beaucoup plus faible (environ 137 GPa) [43,26]. Même si le SiC est moins rigide et dur que le diamant, il offre d'excellentes performances mécaniques, constituant un compromis intéressant entre efficacité, coût et facilité de mise en œuvre [44].

Avec une dureté de Mohs proche de 13, le SiC fait partie des matériaux non oxydes les plus durs. Seuls quelques composés, comme le nitrure de bore cubique (c-BN), le carbure de bore (B₄C) et le diamant (dureté Mohs = 15), le surpassent. Cette dureté élevée rend le SiC adapté aux applications nécessitant une grande résistance à l'usure : outils de coupe, abrasifs ou protections balistiques [45]. Cependant, sa ténacité à la rupture reste relativement faible, comprise entre 2 et 4 MPa·m^{1/2}, ce qui peut entraîner une rupture fragile sous fortes contraintes [46]. Pour remédier à cette limitation, des recherches ont été menées sur le développement de composites à matrice SiC, notamment par l'ajout de renforts tels que TiB₂ ou le graphène, ainsi que par l'optimisation de sa microstructure [47].

Enfin, les propriétés mécaniques du SiC dépendent du polytype en raison de leur structure cristalline. Le 3C-SiC, de structure cubique, est relativement isotrope, tandis que les polytypes hexagonaux (2H, 4H, 6H) présentent une rigidité plus directionnelle. Cette anisotropie

influence la réponse du matériau aux contraintes ainsi que la propagation des fissures [48]. Grâce à sa stabilité thermique, sa résistance à l'oxydation et au maintien de ses propriétés à haute température, le SiC est largement employé dans les secteurs de l'aéronautique, de l'automobile, des dispositifs MEMS et de l'électronique de puissance [49].

I.6 Élaboration du carbure de silicium

Le carbure de silicium (SiC) est un matériau céramique et semi-conducteur de haute performance, combinant des propriétés mécaniques, thermiques et électroniques exceptionnelles. Grâce à sa dureté élevée, son point de fusion important, sa résistance remarquable à la corrosion et sa conductivité thermique élevée, le SiC s'impose comme un matériau de choix pour des applications exigeantes, allant de l'électronique de puissance à l'aérospatial, en passant par les abrasifs et les procédés de traitement chimique [50]. Sa capacité à fonctionner sous des températures extrêmes et dans des environnements agressifs en fait une alternative plus performante que le silicium ou l'alumine [1].

Cependant, les performances du SiC dépendent fortement du procédé de fabrication employé, celui-ci influençant directement sa pureté, sa structure cristalline, sa porosité, la taille de ses grains, la densité de défauts, et par conséquent, ses propriétés physiques et électroniques [51]. Au fil des années, plusieurs techniques de synthèse ont été développées pour produire le SiC sous différentes formes et avec des niveaux de qualité adaptés à chaque application. Parmi les procédés les plus courants figurent la réduction carbothermique, le dépôt chimique en phase vapeur (CVD) et la croissance par transport en phase vapeur (PVT). Chacun de ces procédés présente des caractéristiques techniques et des domaines d'application spécifiques. Il est donc essentiel de sélectionner la méthode de fabrication la plus appropriée en fonction de l'usage final visé [50].

I.6.1 Réduction Carbothermique

La réduction carbothermique constitue l'une des plus anciennes méthodes de synthèse du carbure de silicium (SiC) et demeure la plus répandue pour la production de SiC sous forme de poudre. Elle repose sur la réaction entre la silice (SiO_2) et le carbone à haute température (généralement comprise entre 1700 et 2000 °C), selon l'équation chimique suivante :



Ce procédé, mis au point à la fin du XIX^e siècle par Acheson, demeure largement utilisé en raison de sa simplicité, de son faible coût et de sa capacité de production à grande échelle [50]. Le SiC obtenu par cette voie est généralement polycristallin, ce qui le rend particulièrement adapté aux applications mécaniques telles que les abrasifs, les composants réfractaires ou les matériaux de protection.

Cependant, le manque de maîtrise du polytype cristallin, combiné à une porosité relativement élevée, limite son emploi dans les applications électroniques avancées [51].

Des recherches récentes ont cherché à optimiser la réduction carbothermique afin d'améliorer la pureté et le contrôle structural du matériau. Ainsi, l'utilisation de précurseurs de silice sous forme de sphères préformées, associée à des conditions de réaction finement contrôlées, permet d'obtenir des particules de SiC sphériques, microniques et à morphologie homogène [52]. Malgré ces progrès, le passage à l'échelle industrielle tout en préservant la précision cristallographique et morphologique du matériau demeure un défi majeur.

I.6.2 Dépôt Chimique en Phase Vapeur (CVD)

Le dépôt chimique en phase vapeur (Chemical Vapor Deposition, CVD) est une méthode précise et polyvalente utilisée pour la croissance épitaxiale de couches minces de SiC sur un substrat monocristallin. Ce procédé repose sur la décomposition thermique de précurseurs gazeux contenant le silicium et le carbone, généralement le silane (SiH_4) et le propane (C_3H_8), dans une atmosphère d'hydrogène, à des températures comprises entre 1300 °C et 1600 °C (Fig. I.5).

La réaction chimique globale peut être représentée comme suit :



Cette réaction conduit à la formation d'un film solide de SiC à la surface du substrat, tandis que l'hydrogène est libéré sous forme gazeuse.

Cette méthode permet un contrôle précis de l'épaisseur des couches déposées, de leur orientation cristalline ainsi que de la concentration en impuretés. Elle joue un rôle essentiel

dans la fabrication des dispositifs de puissance à base de semi-conducteurs, en particulier pour le polytype 4H-SiC, réputé pour sa tension de claquage élevée et son bon rendement en régime haute fréquence [1]. Toutefois, le procédé CVD présente plusieurs limites, telles que le coût important des installations, l'emploi de gaz dangereux (toxiques ou inflammables) et un taux de dépôt relativement faible. Malgré ces inconvénients, il demeure l'une des techniques les plus fiables pour l'obtention de couches de SiC ultrapures caractérisées par une très faible densité de défauts cristallins [53].

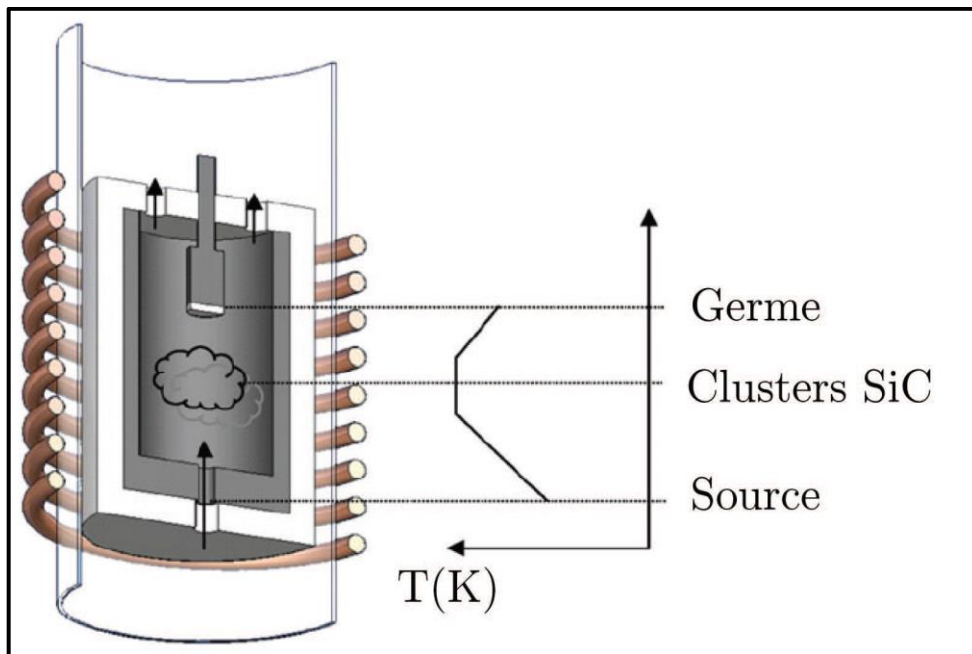


Figure I.5 : Principe du dépôt chimique en phase vapeur (CVD) appliqué au SiC [54]

I.6.3 Transport Physique en Phase Vapeur (PVT) : Pilier de la Croissance Monocristalline

La méthode PVT (Physical Vapor Transport), également appelée méthode par sublimation, constitue aujourd'hui la technique de référence pour la croissance de monocristaux massifs de SiC, essentiels à la fabrication des substrats destinés à l'électronique de puissance.

Le procédé repose sur la sublimation d'une poudre de SiC ultra-pure placée dans un creuset en graphite porté à très haute température (entre 2000 et 2500 °C) (Figure I.6). Les vapeurs générées se condensent sur un germe cristallin, conduisant à la croissance progressive d'un monocristal [3]. Cette technique permet la production de cristaux de grande taille présentant

un polytype bien défini le plus souvent 4H-SiC ou 6H-SiC, une condition indispensable pour garantir la stabilité structurale et la performance électronique des dispositifs. Enfin, le contrôle précis des paramètres de croissance (gradient thermique, pression interne et orientation du germe) joue un rôle déterminant dans la qualité finale du cristal obtenu [46].

L'élaboration du carbure de silicium (SiC) ne se limite pas à une simple production de matériau ; elle conditionne directement ses propriétés intrinsèques et son domaine d'application. Qu'il s'agisse de poudres, de couches minces ou de monocristaux, chaque procédé réduction carbothermique, dépôt chimique en phase vapeur (CVD) ou transport en phase vapeur (PVT) répond à des exigences technologiques spécifiques.

Une maîtrise approfondie de ces techniques et de leur influence sur la formation du polytype permet aujourd'hui d'exploiter pleinement le potentiel exceptionnel du SiC, notamment pour le développement des technologies émergentes dans les domaines de l'électronique de puissance, des capteurs et des matériaux avancés.

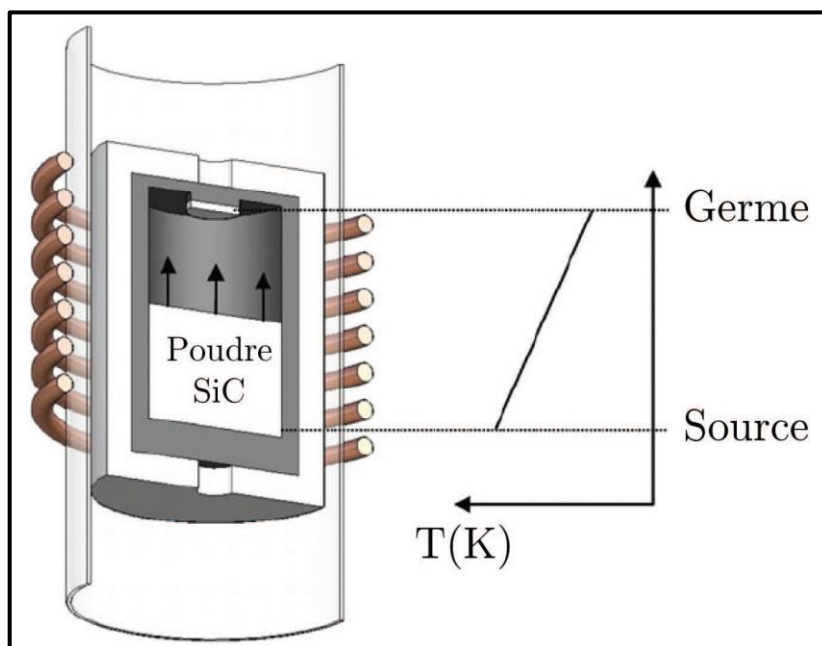


Figure 1.6 : Procédé de sublimation ou PVT [54]

I.6.4 Techniques Émergentes et Alternatives Écologiques

En complément des approches conventionnelles, plusieurs méthodes de synthèse innovantes font aujourd'hui l'objet d'intenses recherches :

- i) Le procédé sol-gel associé au nanomoulage permet d'obtenir un carbure de silicium méso-poreux à grande surface spécifique, particulièrement adapté aux applications en catalyse et en capteurs chimiques [55,56].
- ii) Le chauffage micro-ondes constitue une alternative prometteuse pour la synthèse rapide de poudres nanométriques de SiC, avec une consommation énergétique réduite. Toutefois, son adaptation à la production industrielle reste encore limitée en raison de difficultés liées à l'homogénéité du chauffage et au contrôle des phases [57,58].
- iii) La synthèse verte, basée sur l'utilisation de biomasses naturelles riches en silice (telles que les balles de riz ou la bagasse de canne à sucre), suscite un intérêt croissant. Cette approche combine faible impact environnemental et compatibilité avec la réduction carbothermique, ouvrant la voie à une production plus durable du SiC [59,60].

Malgré ces avancées, plusieurs défis technologiques persistent [61,62] :

- Le contrôle précis du polytype reste difficile à maîtriser lors de la production à grande échelle.
- La réduction de la porosité et des défauts cristallins demeure essentielle pour garantir la fiabilité des dispositifs électroniques.
- L'optimisation de l'efficacité énergétique des procédés est nécessaire pour abaisser les coûts et minimiser l'empreinte écologique.
- La reproductibilité des structures nano- et mésoporeuses reste insuffisante pour un passage à une exploitation industrielle stable.

Ainsi, l'exploration de ces nouvelles voies de synthèse ouvre des perspectives prometteuses pour la production de SiC aux propriétés contrôlées et adaptées à des usages variés. Toutefois, la maîtrise fine des paramètres de croissance et la réduction des défauts cristallins demeurent des conditions essentielles pour exploiter pleinement le potentiel de ces approches dans les applications technologiques avancées.

I.7 Applications du carbure de silicium

Le carbure de silicium (SiC) suscite un intérêt croissant en raison de ses propriétés physiques et mécaniques exceptionnelles, qui lui confèrent une remarquable résistance aux conditions extrêmes. Sa conductivité thermique élevée, sa large bande interdite, sa dureté importante et sa stabilité chimique en font un matériau de choix pour de nombreuses applications, depuis

l'électronique de puissance jusqu'aux environnements industriels sévères. Les progrès récents dans les procédés de synthèse et le contrôle des polytypes ont permis la mise au point de dispositifs fiables et hautement performants, consolidant ainsi la place du SiC dans les technologies stratégiques de nouvelle génération [63].

I.7.1. Dispositifs électroniques de puissance : MOSFETs et diodes Schottky en SiC

Dans le domaine de l'électronique de puissance, le carbure de silicium (SiC) constitue une alternative hautement performante au silicium, notamment pour les dispositifs fonctionnant à haute tension, haute fréquence et température élevée. Les transistors MOSFET et les diodes Schottky réalisés en SiC présentent des performances électriques supérieures, caractérisées par une tension de claquage plus élevée, une résistance à l'état passant réduite et une remarquable aptitude à la commutation, même dans des environnements thermiques extrêmes [64]. Ces propriétés découlent directement des caractéristiques intrinsèques du matériau, telles que sa large bande interdite (3,2 eV pour le polytype 4H-SiC), son champ de claquage élevé ($> 2 \text{ MV/cm}$) et sa conductivité thermique importante ($\approx 490 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) [65].

Aujourd'hui, ces composants sont intégrés dans de nombreux systèmes électroniques avancés : convertisseurs pour véhicules électriques, onduleurs photovoltaïques, alimentations industrielles et dispositifs de conversion pour les réseaux intelligents. Les diodes Schottky, en particulier, sont très recherchées pour leur temps de récupération quasi nul, réduisant considérablement les pertes de commutation et améliorant ainsi le rendement énergétique global des systèmes [66].

I.7.2. Applications dans les domaines aéronautique, automobile et énergétique

Les performances thermomécaniques remarquables du carbure de silicium (SiC) en font un matériau de choix dans le secteur aéronautique, notamment sous forme de composites SiC/SiC. Ces composites se distinguent par leur légèreté, leur résistance exceptionnelle à l'oxydation et leur stabilité à très haute température, des qualités essentielles pour la réalisation de composants structuraux tels que les aubes de turbines, les parois de chambres de combustion ou encore les systèmes de protection thermique des moteurs d'avion [67].

Dans l'industrie automobile, le SiC connaît une adoption croissante, en particulier dans les convertisseurs de puissance des véhicules électriques. Sa capacité à fonctionner à haute fréquence permet de réduire la taille des composants passifs et d'optimiser la dissipation thermique, améliorant ainsi l'efficacité énergétique globale. De plus en plus de constructeurs intègrent aujourd'hui des dispositifs à base de SiC dans leurs architectures électroniques afin d'augmenter les performances tout en diminuant les besoins en refroidissement [68].

Dans le domaine des systèmes énergétiques, le carbure de silicium (SiC) occupe une place stratégique dans la conception des convertisseurs de puissance destinés aux installations solaires, aux parcs éoliens et aux infrastructures de stockage ou de distribution d'énergie. Grâce à sa résistance thermique élevée et à sa capacité à supporter d'importantes densités de courant, le SiC permet le développement de systèmes plus compacts, plus performants et mieux adaptés aux exigences des réseaux électriques modernes [69]. Par ailleurs, dans le secteur nucléaire, le SiC fait l'objet de recherches approfondies en tant que matériau candidat pour les gaines de combustible et les structures internes des réacteurs de nouvelle génération. Sa résistance exceptionnelle à l'irradiation, sa stabilité chimique et sa tenue mécanique à haute température en font un matériau prometteur pour améliorer la sûreté et la durabilité des installations nucléaires avancées [67].

I.7.3. Utilisations industrielles : abrasifs et matériaux réfractaires

Le carbure de silicium (SiC) demeure largement exploité dans l'industrie comme matériau d'ingénierie pour les applications exigeant une dureté élevée, une forte résistance à l'usure et une excellente inertie chimique. Il est couramment employé comme abrasif dans la fabrication de meules, d'outils de découpe, de poudres de polissage et de supports de rectification de haute précision, notamment pour l'usinage des matériaux durs tels que les aciers, les céramiques avancées ou les verres techniques [70].

En outre, le SiC occupe une place importante dans la conception de matériaux réfractaires destinés aux environnements à très haute température. Sa stabilité thermique, sa faible dilatation et sa bonne conductivité thermique en font un matériau de choix pour la réalisation de creusets, de plaques de fours, de brûleurs et de revêtements dans les industries métallurgique, céramique et verrière. Ces composants améliorent la durabilité et la fiabilité des équipements soumis à des cycles thermiques intenses. Enfin, dans les domaines de l'optoélectronique et du spatial, le carbure de silicium (SiC) est utilisé pour la conception de

miroirs légers, de substrats optiques et de structures mécaniquement stables. Grâce à sa rigidité spécifique élevée, son faible poids et sa remarquable stabilité dimensionnelle aux variations de température, le SiC garantit des performances optiques fiables et durables. Ces qualités en font un matériau de choix pour les systèmes embarqués à bord de satellites, de télescopes spatiaux et d'instruments d'observation à haute précision [68].

I.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté le carbure de silicium (SiC) en mettant en lumière les caractéristiques qui font de lui un matériau d'exception. Historiquement, le SiC a été synthétisé artificiellement bien avant d'être observé à l'état naturel, témoignant de son intérêt technologique précoce et durable. Nous avons retracé les principales étapes de son développement, depuis ses premières formes naturelles jusqu'à sa production industrielle et sa large diffusion dans divers secteurs. Le SiC se distingue par sa structure cristalline polymorphe, caractérisée par l'existence de nombreux polytypes. Bien que chimiquement identiques, ces polytypes diffèrent par leur mode d'empilement atomique, ce qui induit des variations notables dans leurs propriétés physiques et électroniques. Ce phénomène de polytypisme constitue un atout majeur, car il permet d'ajuster les performances du matériau sans en modifier la composition chimique. Sur le plan électronique, nous avons mis en évidence la large bande interdite du SiC, sa forte tenue au champ électrique, sa conductivité thermique élevée et sa stabilité exceptionnelle à haute température. Ces propriétés font du SiC un candidat privilégié pour les dispositifs de puissance et les environnements extrêmes. La comparaison avec d'autres semi-conducteurs a permis de souligner la supériorité du SiC dans de nombreuses applications. Enfin, les procédés d'élaboration du SiC qu'il s'agisse de la réduction carbothermique, du dépôt chimique en phase vapeur (CVD) ou de la croissance par sublimation (PVT) ont été examinés en détail, en insistant sur leur influence directe sur la qualité cristalline et la pureté du matériau. Chaque méthode offre des avantages spécifiques selon l'application visée, de la production de poudres techniques à la croissance de monocristaux destinés à l'électronique avancée. En résumé, le carbure de silicium s'impose aujourd'hui comme un matériau stratégique aux performances exceptionnelles, réunissant à la fois robustesse mécanique, stabilité thermique et excellence électronique. Ces qualités en font un pilier des technologies émergentes, notamment dans les domaines de l'électronique de puissance, de l'aéronautique, du spatial et des systèmes énergétiques du futur.

Références bibliographiques :

- [1] Kimoto, T., & Cooper, J. A. (2014). Wiley-IEEE Press.
- [2] Camassel, J., Robert, J.-L., & Contreras, S. (1998). Techniques Ingénieur.
- [3] Snead, L. L., et al. (2007). Journal of Nuclear Materials, 371, 329–377.
- [4] Agarwal, S., et al. (2019). Materials Today: Proceedings, 19, 1951–1956.
- [5] Roccaforte, F., et al. (2016). Journal of Physics D: Applied Physics, 49(13), 133001.
- [6] Berzelius, J. J. (1824). Chez Crochard, Libraire, Paris.
- [7] Bernatowicz, T. J., Zinner, E., Amari, S., Croat, T. K., & Fraundorf, G. (1996). The Astrophysical Journal, 472, 760–782.
- [8] Moissan, H. (1905). Comptes rendus hebdomadaires des séances de l'Académie des Sciences, 140, 405–408.
- [9] Acheson, E. G. (1893). Cité dans Zolper (2007).
- [10] Zolper, J. C. (2007). In R. K. Willardson & E. R. Weber (Eds.), Semiconductors and Semimetals: Silicon Carbide Materials and Devices (Vol. 52, pp. 167–222). Elsevier.
- [11] Round, H. J. (1907). Electrical World, 49, 309.
- [12] Lely, J. A. (1955). Berichte der Deutschen Keramischen Gesellschaft, 32(8), 229–232.
- [13] Tairov, Y. M., & Tsvetkov, V. F. (1978). Journal of Crystal Growth, 43(2), 209–212.
- [14] Blevins, J. D. (2020). IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing, 33(3), 390–396.
- [15] Lambrecht, W. R. L. (1994). MRS Online Proceedings Library.
- [16] Carter, C. B., & Norton, M. G. (2007). Springer.
- [17] Zhang, H., et al. (2018). AIP Advances, 8(7).
- [18] Bu, H., et al. (2018). AIP Advances, 8(7).
- [19] Matović, B., & Yano, T. (2013). In Handbook of Advanced Ceramics. Elsevier.
- [20] Sadow, S. E., & Agarwal, A. K. (2004). Artech House.
- [21] Madar, R. (1995). Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 6(2), 89–102.
- [22] Choyke, W. J., Patrick, L., & Pensl, G. (1997). Springer Series in Materials Science. Springer.
- [23] Sridhara, K., & Singh, R. (2004). Journal of Crystal Growth, 271(1–2), 251–259.
- [24] Tairov, Y. M., & Tsvetkov, V. F. (1981). Semiconductor Science and Technology, 1(2), 110–120.

-
- [25] Guernoub, S., Touati, I., Khoualdia, A., Doghmane, H. E., & Doghmane, A. (2025). *Silicon*, 17, 2027.
- [26] Nuruzzaman, M. D., Islam, M. A., & Alam, M. A. (2015). *International Journal of Engineering Research and Applications*, 5(5), 48–52.
- [27] Zetterling, C. M. (Ed.). (2002). *INSPEC/IET*.
- [28] Zhao, Y. (2022). *Journal of Crystal Growth*, 586, 126591.
- [29] Djemia, P. (2009). PhD thesis, Université Paris XIII.
- [30] Ramsdell, L. S. (1947). *American Mineralogist*, 32, 64–82.
- [31] Neudeck, P. G. (1995). *Journal of Electronic Materials*, 24(4), 283–288.
- [32] Casady, J. B., & Johnson, R. W. (1996). *Solid-State Electronics*, 39(10), 1409–1422.
- [33] Choyke, W. J., Matsunami, H., & Pensl, G. (1997). Springer.
- [34] Matsunami, H. (2004). *Japanese Journal of Applied Physics*, 43(10), 6835–6844.
- [35] Camassel, J., Contreras, S., & Robert, J.-L. (2000). 1(1), 5–21.
- [36] Dhanaraj, G., Xu, R. H., Dudley, M., Prasad, V., & Ma, R.-H. (2003). Springer-Verlag.
- [37] Shur, M. (1998). Academic Press.
- [38] Snead, L. L., Nozawa, T., Katoh, Y., et al. (2007). *Journal of Nuclear Materials*, 371(1–3), 329–377.
- [39] Konstantinova, E., Bell, M. J. V., & Anjos, V. (2008). *Intermetallics*, 16(8), 1040–1042.
- [40] Hirai, H., Terauchi, M., Tanaka, M., & Kondo, K. (1999). *Diamond and Related Materials*, 8(8), 1703–1706.
- [41] Zhao, Q., Zhang, Z., & Li, Y. (2017). *RSC Advances*, 7(45), 28499–28505.
- [42] Haines, J., Leger, J. N., & Bocuillon, G. (2001). *Annual Review of Materials Science*, 31, 1–23.
- [43] Xuejie, L., Liangfang, L., & Feng, L. (2013). ArXiv: 1301.1745v2.
- [44] Gielisse, P. J. (2018). In *Handbook of Industrial Diamonds and Diamond Films*. Taylor & Francis.
- [45] Yaşar, Z. A., & Haber, R. A. (2020). *Materials*, 13(17), 3768.
- [46] Zhang, H., Li, X., Wang, Y., & Chen, Y. (2020). *Ceramics International*, 46(5), 6184–6190.
- [47] Asl, M. S., Ahmadi, Z., Moghanlou, F. S., & Vajdi, M. (2022). *Materials Chemistry and Physics*, 289, 126465.

-
- [48] Peivaste, I., Alahyarizadeh, G., & Aghaie, M. (2018). *Vacuum*, 156, 37–45.
- [49] Luo, X., Goel, S., & Reuben, R. L. (2012). *Journal of the European Ceramic Society*, 32(12), 3123–3134.
- [50] Wei, J., Zhang, H., Zhang, G., Zhang, Y., & Duan, X. (2020). *Ceramics International*, 46(4), 3894–3905.
- [51] Mazaheri, M., et al. (2020). *Journal of the European Ceramic Society*, 40(2), 433–443.
- [52] Bhatt, R., Bhatt, S., & Fedorov, A. (2018). *Journal of the European Ceramic Society*, 38(9), 3075–3082.
- [53] Pécz, B., et al. (2021). *Materials Science in Semiconductor Processing*, 123, 105540.
- [54] Chaussende, D., Wellmann, P. J., & Pons, M. (2007). *Journal of Physics D: Applied Physics*, 40(20), 6150.
- [55] Awadallah, A. E., & Mostafa, A. G. (2020). *Journal of Sol - Gel Science and Technology*, 93(2), 321–332.
- [56] Zhang, C., Wang, S., & Zhao, X. (2019). *Microporous and Mesoporous Materials*, 288, 109586.
- [57] Ghosh, S., & Roy, P. (2018). *Ceramics International*, 44(17), 21412–21425.
- [58] Niu, X., Chen, J., & Zhang, L. (2021). *Journal of the European Ceramic Society*, 41(3), 1452–1460.
- [59] Rani, S., Singh, G., & Kumar, P. (2020). *Ceramics International*, 46(14), 22764–22771.
- [60] Anandan, C., & Rajendran, R. (2019). *Materials Letters*, 255, 126559.
- [61] Wu, Z., Li, Y., & Jiang, D. (2022). *Journal of Crystal Growth*, 581, 126464.
- [62] Tanaka, H., & Ito, K. (2018). *Journal of the American Ceramic Society*, 101(12), 5331–5346.
- [63] Di Paolo Emilio, M. (2024). Springer.
- [64] Yaakub, M. F., Radzi, M. A. M., Mohd Noh, F. H., & Azri, M. (2020). *International Journal of Power Electronics and Drive Systems*, 11(4), 2194–2202.
- [65] Matsunami, H. (2020). *Proceedings of the Japan Academy, Series B*, 96(7), 346–367.
- [66] Kumar, A., & Aspalli, M. S. (2014). *International Journal of Research in Engineering and Technology*, 3(15), 264–269.
- [67] Ng'andwe, C. (2023). In *Silicon Carbide Cerics: Structure, Properties, and Manufacturing*. Elsevier.

- [68] La Via, F., Alquier, D., Giannazzo, F., Kimoto, T., Neudeck, P. G., Ou, H., & Roncaglia, A. (2023). Emerging SiC Applications beyond Power Electronic Devices. *Micromachines*, 14(6), Article 1200.
- [69] (2023). A new look at silicon carbide. *IMAPS Symposia and Conferences*.
- [70] Wang, J. L. (2022). *Open Journal of NanoScience*, 3(3), 237–245.

Chapitre

II

Influence de l'anisotropie sur les propriétés acoustiques du SiC

II-1 Introduction

La propagation des ondes acoustiques dans les milieux élastiques constitue un domaine fondamental pour la caractérisation des matériaux et le développement de techniques de contrôle non destructif. Ces ondes, qu'elles soient de volume (longitudinales et transversales) ou de surface, telles que les ondes de Rayleigh, offrent un moyen précis d'accéder aux propriétés mécaniques intrinsèques des matériaux qu'elles traversent. Leur interaction avec la matière dépend étroitement des caractéristiques physiques, cristallographiques et élastiques du milieu considéré.

Dans les matériaux anisotropes, les constantes élastiques varient selon la direction cristallographique, rendant la propagation des ondes acoustiques plus complexe. En effet, la vitesse de propagation, la polarisation ainsi que les conditions de réflexion et de transmission dépendent fortement de l'orientation de l'onde dans le matériau [1,2]. Une compréhension approfondie de ces phénomènes est essentielle pour interpréter correctement les signaux acoustiques et pour développer des méthodes avancées de caractérisation des milieux solides.

Parmi les différentes techniques utilisées pour l'étude de ces phénomènes, la microscopie acoustique à balayage (Scanning Acoustic Microscopy, SAM) se distingue par son efficacité et sa haute résolution. Cette méthode permet d'obtenir des images précises tout en fournissant des informations détaillées sur les propriétés mécaniques locales des matériaux étudiés. La SAM repose sur l'utilisation d'ondes ultrasonores focalisées de haute fréquence, généralement comprises entre 50 MHz et plusieurs gigahertz, transmises à travers un fluide de couplage le plus souvent de l'eau afin d'interagir avec la surface et les couches sub-superficielles du matériau solide.

Le faisceau acoustique est balayé point par point sur l'échantillon, et les signaux réfléchis sont enregistrés afin de former une image dont le contraste dépend des variations locales d'impédance acoustique [3]. Étant donné que cette impédance est liée à la fois à la densité et aux constantes élastiques du matériau, la microscopie acoustique à balayage (SAM) se révèle particulièrement performante pour la détection des défauts mécaniques tels que les fissures, vides, inclusions ou encore les dégradations d'adhérence. Au-delà de la simple imagerie, la SAM permet un accès quantitatif à

plusieurs grandeurs physiques fondamentales, notamment le coefficient de réflexion $R(\theta)$, la signature acoustique $V(z)$ et la vitesse des ondes de Rayleigh V_R . Cette dernière est déterminée par analyse spectrale (transformée de Fourier des signaux $V(z)$) et fournit une estimation locale de la rigidité élastique en surface [4,5].

Dans ce chapitre, nous avons analysé l'influence de l'anisotropie sur les propriétés acoustiques de plusieurs polytypes du carbure de silicium (SiC), en particulier les structures hexagonales (2H, 4H et 6H-SiC) et la structure cubique (3C-SiC), à l'aide de la microscopie acoustique à balayage (SAM), appuyée par des simulations numériques.

Le SiC se présente sous différents polytypes cristallins notamment 2H, 3C, 4H et 6H qui se distinguent par la séquence d'empilement atomique, influençant directement leurs propriétés élastiques et, par conséquent, leur interaction avec les ondes acoustiques. Les simulations réalisées ont permis de mettre en évidence l'impact de l'anisotropie sur plusieurs paramètres acoustiques caractéristiques, tels que le coefficient de réflexion $R(\theta)$, la signature acoustique $V(z)$, les spectres fréquentiels (FFT) et la vitesse des ondes de Rayleigh V_R . Les résultats obtenus révèlent que chaque polytype présente une réponse acoustique spécifique, étroitement liée à sa structure cristalline, avec des différences notables entre les polytypes hexagonaux (2H, 4H et 6H-SiC) et le polytype cubique (3C-SiC).

II-2 Anisotropie des milieux élastiques

L'anisotropie désigne la propriété d'un matériau dont les caractéristiques physiques qu'elles soient mécaniques, électriques, thermiques ou optiques varient selon la direction dans laquelle elles sont mesurées. Autrement dit, un matériau anisotrope ne présente pas le même comportement dans toutes les directions. Cette dépendance directionnelle confère aux matériaux anisotropes un intérêt particulier dans de nombreux domaines technologiques et scientifiques, tels que l'aérospatiale, les capteurs avancés, la robotique souple et le génie biomédical [6].

Parmi les différentes formes d'anisotropie, l'anisotropie élastique revêt une importance particulière, car elle permet de comprendre la réponse mécanique d'un matériau soumis à une contrainte. Elle se manifeste par la variation directionnelle de propriétés telles que la rigidité ou la résistance à la déformation. Ce phénomène est particulièrement prononcé

dans les matériaux cristallins, où la symétrie du réseau atomique influence fortement le comportement mécanique du solide [7,8]. L'anisotropie élastique joue également un rôle crucial dans les applications industrielles, car elle permet d'évaluer la tendance à la formation de microfissures ou de défauts structuraux. Ainsi, la quantification du degré d'anisotropie élastique constitue une étape essentielle pour une caractérisation précise et fiable des matériaux.

Pour évaluer cette anisotropie, les chercheurs recourent fréquemment au facteur d'anisotropie de Zener [9], défini comme suit :

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} + C_{12}} \quad (\text{II.1})$$

Où C_{11} , C_{12} et C_{44} représentent les constants élastiques indépendants du cristal.

Une valeur du facteur d'anisotropie de Zener $A = 1$ correspond à un comportement élastiquement isotrope, indiquant que le matériau réagit de manière identique dans toutes les directions. En revanche, une valeur de A différente de 1 traduit une anisotropie élastique, impliquant que la réponse mécanique du matériau varie selon la direction de sollicitation.

II-3 Propagation des ondes acoustiques dans les milieux élastiques

Les ondes acoustiques sont des perturbations mécaniques se propageant dans un solide en induisant des vibrations des particules autour de leurs positions d'équilibre. Ces vibrations obéissent aux lois de l'élasticité et de la dynamique du mouvement, et leur comportement dépend étroitement de la nature et de la structure du matériau considéré [10]. Les solides constituent ainsi un milieu de propagation privilégié pour différents types d'ondes acoustiques, notamment les ondes de volume et les ondes de surface.

II-3.1 Ondes de volume : ondes longitudinales et transversales

Les ondes de volume se propagent à l'intérieur du matériau et sont classées selon la direction du mouvement des particules par rapport à celle de la propagation de l'onde [11]. Leur vitesse de propagation dépend des propriétés élastiques et de la densité du matériau. En général, cette vitesse augmente avec la profondeur, car le matériau tend à devenir plus dense et plus rigide.

Elles se propagent principalement selon deux modes distincts :

- Les ondes transversales se caractérisent par un déplacement des particules perpendiculaire à la direction de propagation. Leur vitesse de propagation, notée V_T , fournit des informations essentielles sur la rigidité au cisaillement du matériau.
- Les ondes longitudinales, quant à elles, présentent des oscillations parallèles à la direction de propagation. Leur vitesse, notée V_L , constitue l'un des paramètres fondamentaux permettant de les caractériser. Ces ondes engendrent des phases successives de compression et de dilatation et représentent les ondes acoustiques les plus rapides dans les milieux solides. Contrairement aux ondes transversales, elles peuvent également se propager dans les liquides et les gaz [12].

Les vitesses des ondes transversales et longitudinales (V_T et V_L) peuvent être déterminées à partir du module de cisaillement (G), du module de compressibilité (B), et de la densité (ρ), selon les relations suivantes [12,13] :

$$V_T = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (\text{II.2})$$

$$V_L = \sqrt{\frac{3\beta + 4G}{3\rho}} \quad (\text{II.3})$$

Les ondes de volume sont largement exploitées dans les essais ultrasonores et la caractérisation des matériaux, car leurs vitesses de propagation et leurs modes de comportement sont étroitement sensibles à la structure interne du matériau ainsi qu'à la présence éventuelle de défauts [2].

II-3.2 Ondes de surface : ondes de Rayleigh

Les ondes de Rayleigh ont été prédites théoriquement par Lord Rayleigh en 1885. Elles se propagent le long de la surface libre d'un solide et leur amplitude décroît exponentiellement avec la profondeur. Ces ondes résultent de la superposition des mouvements longitudinaux et transversaux, entraînant un déplacement elliptique rétrograde des particules à proximité de la surface (Achenbach, 1973). Plus lentes que les ondes longitudinales et transversales, les ondes de Rayleigh se distinguent par leur forte sensibilité aux altérations superficielles du matériau, telles que les fissures, la corrosion ou les variations d'adhérence. La vitesse des ondes de Rayleigh, notée V_R , peut être déterminée en appliquant les conditions aux limites à l'interface liquide/solide, selon une approche dérivée de la formulation de Viktorov, qui l'exprime en fonction des vitesses longitudinale (V_L) et transversale (V_T) [14] :

$$V_R = V_T \left[0.718 - \left(\frac{V_T}{V_L} \right)^2 \right] / \left[0.75 - \left(\frac{V_T}{V_L} \right)^2 \right] \quad (\text{II.4})$$

Les ondes de Rayleigh jouent un rôle essentiel dans les techniques de contrôle non destructif et en exploration géophysique, notamment pour la détection des structures superficielles et des caractéristiques peu profondes [2,10]. Dans ce travail, nous nous concentrons sur l'analyse des paramètres acoustiques caractéristiques des polytypes du carbure de silicium (SiC) à savoir 2H, 4H, 6H et 3C-SiC en utilisant la microscopie acoustique à balayage (SAM) opérant en mode réflexion. Cette approche permet une évaluation complète et comparative des propriétés acoustiques des différents polytypes étudiés.

II-4 Approche méthodologique et paramètres de simulation SAM

II-4.1 Étapes de calcul de la vitesse de Rayleigh (V_R)

La détermination de la vitesse des ondes de Rayleigh V_R repose sur une méthodologie rigoureuse combinant des modèles analytiques et des simulations numériques. Cette approche s'appuie sur le calcul du coefficient de réflexion $R(\theta)$, la génération de la courbe de signature acoustique $V(z)$ et l'analyse spectrale par transformée de Fourier rapide (FFT). L'ensemble de ces étapes permet d'extraire la période spatiale caractéristique Δz , à partir de laquelle la valeur de V_R est déduite pour chaque polytype étudié. La méthodologie de calcul adoptée repose sur plusieurs étapes successives, décrites comme suit :

a) Coefficient de réflexion $R(\theta)$

Le coefficient de réflexion $R(\theta)$, défini comme le rapport entre l'amplitude de l'onde acoustique réfléchiée et celle de l'onde incidente à l'interface de deux milieux, constitue un paramètre fondamental en microscopie acoustique [15,16]. Il dépend directement de l'impédance acoustique des matériaux, laquelle exprime leur résistance à la propagation de l'énergie acoustique [17]. La détermination de $R(\theta)$ permet ainsi d'accéder à des informations précieuses sur les propriétés mécaniques et structurales des matériaux, ainsi que sur la présence éventuelle de défauts internes ou d'hétérogénéités [18]. De manière générale, la compréhension et l'exploitation de $R(\theta)$ sont essentielles pour l'imagerie et la caractérisation avancées dans divers contextes scientifiques et industriels. Sur le plan analytique, $R(\theta)$ est une fonction complexe, caractérisée par son amplitude et sa phase, et définie à l'interface liquide/solide selon l'équation (II.5) [12]. Sa résolution analytique permet ensuite de calculer explicitement ses valeurs et d'en déduire les propriétés acoustiques associées.

$$R(\theta) = \frac{Z_{\text{Sol}} - Z_{\text{Liq}}}{Z_{\text{Sol}} + Z_{\text{Liq}}} \quad (\text{II.5})$$

Où Z_{sol} et Z_{liq} représentent respectivement les impédances acoustiques du solide et du liquide. L'impédance acoustique d'un milieu est définie par la relation :

$$Z_i = \rho_i \cdot V_i / \cos \theta_i \quad (II.6)$$

L'indice i désigne le mode de propagation considéré : transversal (T), longitudinal (L) ou celui du liquide (Liq). Les grandeurs V_i , θ_i et Z_i représentent respectivement la vitesse de propagation, l'angle d'incidence et l'impédance acoustique du mode correspondant. L'impédance acoustique du solide est exprimée par la relation :

$$Z_{sol} = Z_L \cos^2 2\theta_T + Z_T \sin^2 2\theta_T \quad (II.7)$$

b) Signature acoustique $V(z)$

La signature acoustique $V(z)$ constitue un paramètre fondamental en microscopie acoustique, technique reposant sur l'utilisation d'ondes sonores à haute fréquence pour produire des images à haute résolution des matériaux [19,20]. Cette signature traduit la variation de l'amplitude du signal acoustique V en fonction du déplacement vertical z de l'échantillon par rapport à la lentille acoustique [21]. Elle représente l'un des paramètres expérimentaux les plus significatifs obtenus par microscopie acoustique à balayage (SAM) [22–24]. Sur le plan analytique, la courbe $V(z)$ peut être décrite à l'aide du modèle de spectre angulaire, fondé sur la formulation de Sheppard et Wilson [25]:

$$V(z) = \int_0^{2\pi} R(\theta) P^2(\theta) e^{i2kz \cos \theta} \sin \theta \cos \theta d\theta \quad (II.8)$$

Où $R(\theta)$ représente le coefficient de réflexion, $P^2(\theta)$ la fonction pupille de la lentille acoustique, et θ l'angle formé entre le vecteur d'onde k et l'axe optique de la lentille z .

c) Analyse spectrale des $V(z)$ par FFT et détermination de V_R

L'analyse spectrale des courbes $V(z)$ est effectuée à l'aide de la transformée de Fourier rapide (FFT, Fast Fourier Transform), permettant d'extraire la période spatiale des pseudo-oscillations Δz . Cette dernière sert ensuite à déterminer la vitesse des ondes de Rayleigh V_R , laquelle peut également être mesurée expérimentalement. Le traitement par FFT est appliqué exclusivement à la réponse réelle de l'échantillon, notée $V_{\text{sample}}(z)$, puisque la courbe $V(z)$, qu'elle soit obtenue par mesure ou par simulation, traduit la réponse globale du système lentille–échantillon [26]. Afin d'isoler la réponse propre au matériau étudié, il est nécessaire de soustraire la contribution de la lentille acoustique, selon la relation :

$$V_{\text{sample}}(z) = V(z) - V_{\text{lens}}(z) \quad (\text{II.9})$$

Les spectres issus de la FFT peuvent présenter un ou plusieurs pics caractéristiques. Cependant, dans des conditions expérimentales standards de microscopie acoustique à balayage (SAM), le pic dominant est généralement associé au mode de Rayleigh. À partir du pic principal du spectre, correspondant à une période spatiale caractéristique Δz [27,28], la vitesse de Rayleigh V_R peut être déterminée théoriquement à l'aide de la relation suivante :

$$V_R = \frac{V_{\text{Liq}}}{\sqrt{1 - \left(1 - \frac{V_{\text{Liq}}}{2f\Delta z}\right)^2}} \quad (\text{II.10})$$

Où f est la fréquence de fonctionnement.

Par ailleurs, la vitesse de Rayleigh V_R , qui constitue une propriété intrinsèque du matériau, peut également être déterminée à partir des conditions aux limites appliquées à l'interface liquide/solide, en utilisant l'approximation de Viktorov ou la relation (II.10) [14]. Cette dernière fournit une expression approchée de V_R en fonction des vitesses des ondes longitudinales et transversales du matériau (relation II.4). Ensemble

de la procédure décrite précédemment est ensuite appliqué à chacun des polytypes étudiés (2H, 4H, 6H et 3C-SiC).

II-4.2 Conditions et paramètres de simulation du SAM

L'onde de Rayleigh constitue le mode prédominant dans ces conditions, jouant un rôle central à la fois dans la détection des défauts de surface et dans la mise en œuvre des techniques de contrôle non destructif des matériaux. Elle est également d'une importance majeure dans le fonctionnement des dispositifs à ondes acoustiques de surface. Dans le cadre de cette étude, nous avons analysé les paramètres acoustiques du carbure de silicium (SiC) à l'aide de la microscopie acoustique à balayage (SAM), opérant en mode de réflexion. L'ensemble des calculs nécessaires à la détermination des paramètres acoustiques a été réalisé au sein du Laboratoire des Semi-Conducteurs (LSC).

Les conditions de simulation adoptées dans cette étude reproduisent fidèlement celles utilisées expérimentalement dans un microscope acoustique à balayage (SAM). Les paramètres retenus sont les suivants [29] :

- Demi-angle d'ouverture de la lentille : 50° ;
- Fréquence de travail : 142 MHz ;
- Milieu de couplage : eau, caractérisée par une vitesse de propagation de $1500 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ et une densité de $1000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$.

II-5 Influence de l'anisotropie sur les propriétés acoustiques des polytypes de SiC (2H, 4H, 6H et 3C-SiC)

L'analyse de l'anisotropie dans les polytypes du carbure de silicium (SiC) revêt une importance particulière, car la disposition atomique propre à chaque structure influence directement ses propriétés élastiques et acoustiques. L'étude comparative des polytypes 2H, 4H, 6H et 3C-SiC permet ainsi de mieux comprendre le rôle de la symétrie cristalline sur la propagation des ondes acoustiques et sur la réponse mécanique du matériau.

II-5.1 Détermination des paramètres élastiques

Étant donné que les vitesses de propagation des ondes élastiques sont directement liées aux constantes élastiques C_{ij} et à la densité ρ du matériau, elles varient selon l'orientation cristallographique considérée $[hkl]$. Ainsi, la relation générale peut s'écrire comme suit :

$$(V_L, V_T)_{\langle hkl \rangle} = f(C_{ij}, \rho) \quad (\text{II.11})$$

Par ailleurs, les matériaux présentant une symétrie hexagonale sont décrits par cinq constants élastiques indépendants : C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} et C_{44} [30], tandis que les matériaux à symétrie cubique ne possèdent que trois constantes élastiques indépendantes : C_{11} , C_{12} et C_{44} [31]. Les relations permettant de calculer les vitesses de propagation de l'onde longitudinale (V_L) et des ondes transversales (V_T) selon les directions cristallographiques $[100]$ et $[001]$ dans le cas d'un matériau hexagonal (α -SiC) [32] sont présentées dans le tableau II.1.

De même, les expressions correspondantes pour un matériau cubique (β -SiC), selon les trois directions principales $[100]$, $[110]$ et $[111]$, figurent également dans le tableau II.1.

Tableau II.1 : Relations entre les vitesses acoustiques et les constantes élastiques des polytypes de SiC cas hexagonal ($[100]$ et $[001]$) et cubique ($[100]$, $[110]$ et $[111]$).

Type de SiC	Directions cristallographiques	V_T (m/s)	V_L (m/s)
α -SiC	$[100]$	$[(C_{11} - C_{12})/2\rho]^{1/2}$	$(C_{11}/\rho)^{1/2}$
	$[001]$	$(C_{44}/\rho)^{1/2}$	$(C_{33}/\rho)^{1/2}$
β -SiC	$[100]$	$(C_{44}/\rho)^{1/2}$	$(C_{11}/\rho)^{1/2}$
	$[110]$	$(C_{44}/\rho)^{1/2}$	$[(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})/2\rho]^{1/2}$
	$[111]$	$[(C_{11} - C_{12} + C_{44})/3\rho]^{1/2}$	$[(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})/3\rho]^{1/2}$

En se basant sur les relations résumées dans le tableau II.1, ainsi que sur les valeurs de la densité et des constantes élastiques C_{ij} , les vitesses de propagation des modes longitudinal et transversal ont été déterminées pour chaque orientation cristallographique.

Les résultats obtenus, regroupés dans les tableaux II.2, mettent clairement en évidence l'influence de l'anisotropie sur les vitesses acoustiques calculées.

Tableau II.2 : Constantes élastiques et vitesses acoustiques du 2H-, 4H- et 6H-SiC selon les directions [100] et [001], ainsi que du 3C-SiC selon les directions [100], [110] et [111].

Polytype	Type de directions	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{13} (GPa)	C_{33} (GPa)	C_{44} (GPa)	ρ (Kg/m ³)	V_T (m/s)	V_L (m/s)
2H-SiC	[100]	506 ^[33]	92 ^[33]	46 ^[33]	542 ^[33]	154	3219 ^[43]	8019	12538
	[001]							6917	12976
4H-SiC	[100]	507 ^[30,35]	108	55,8	547	170	3211	7882	12566
	[001]						^[36]	7276	13052
6H-SiC	[100]	501 ^[30]	111	52	553	163	3215 ^[34]	7788	12483
	[001]							7120	13115
3C-SiC	[100]	395 ^[37]	132	/	/	236	3210	8574	11093
	[110]							8574	12474
	[111]							7198	12902

II-5.2 Effet de l'anisotropie sur le coefficient de réflexion $R(\theta)$

Le coefficient de réflexion $R(\theta)$ se distingue par son amplitude et sa phase. Afin de mettre en évidence l'influence de l'anisotropie des polytypes hexagonaux (α -SiC) selon les directions [100] et [001], ainsi que celle du polytype cubique (β -SiC) selon les directions [100], [110] et [111], sur ces deux composantes, les modules et les phases de $R(\theta)$ ont été dissociés puis représentés de façon superposée pour chaque orientation cristallographique. Cette approche permet une comparaison plus précise et une analyse approfondie des effets induits par l'anisotropie.

a) Analyse du coefficient de réflexion $R(\theta)$ pour les polytypes hexagonaux (2H, 4H et 6H-SiC)

La figure II.1 illustre l'évolution du coefficient de réflexion $R(\theta)$ en fonction de l'angle d'incidence θ_i pour les polytypes hexagonaux du SiC (2H, 4H et 6H-SiC), étudiés suivant les directions [100] et [001]. On observe que l'augmentation de l'angle d'incidence s'accompagne de l'apparition de plusieurs caractéristiques marquées, tant au niveau de l'amplitude que de la phase du coefficient de réflexion.

La figure II.1.a présente les variations de l'amplitude de $R(\theta)$

- La première fluctuation repérée correspond à l'angle critique longitudinal θ_L . Le mode longitudinal est respectivement excité selon les directions [001] puis [100] pour les polytypes 2H, 4H et 6H-SiC.
- Au-delà de cet angle, l'énergie incidente est totalement réfléchie, entraînant une valeur constante de $|R(\theta)|=1$, signe de l'absence de transmission dans le solide.
- On note également une variation de l'intensité des fluctuations associées à θ_L selon la direction cristallographique : la direction [001] montre une fluctuation plus nette et plus prononcée que [100].

La figure II.1.b illustre les variations de la phase de $R(\theta)$.

- Les courbes présentent deux fluctuations majeures : la première, modérée, à θ_L , et la seconde, plus marquée, à l'angle critique de Rayleigh θ_R .
- À ce niveau, la phase subit un saut brusque pouvant atteindre 2π pour une variation angulaire très faible, révélant la forte sensibilité du système à la génération de l'onde de Rayleigh, dominante parmi les modes présents.
- Un léger décalage angulaire entre les directions [100] et [001] traduit la différence de vitesse de propagation des ondes de Rayleigh selon l'orientation cristallographique.

Le tableau II.3 regroupe les valeurs des angles critiques θ_L et θ_R pour les polytypes 2H, 4H et 6H-SiC dans les directions [100] et [001]. Ces angles, généralement inférieurs à $13,5^\circ$, varient selon l'anisotropie élastique du matériau, expliquant les écarts observés entre les directions cristallographiques. Ainsi, bien que ces polytypes partagent une

structure hexagonale commune, leurs différences dans les angles critiques mettent clairement en évidence l'influence combinée du polytypisme et de l'anisotropie cristalline sur le comportement du coefficient de réflexion $R(\theta)$, aussi bien en amplitude qu'en phase.

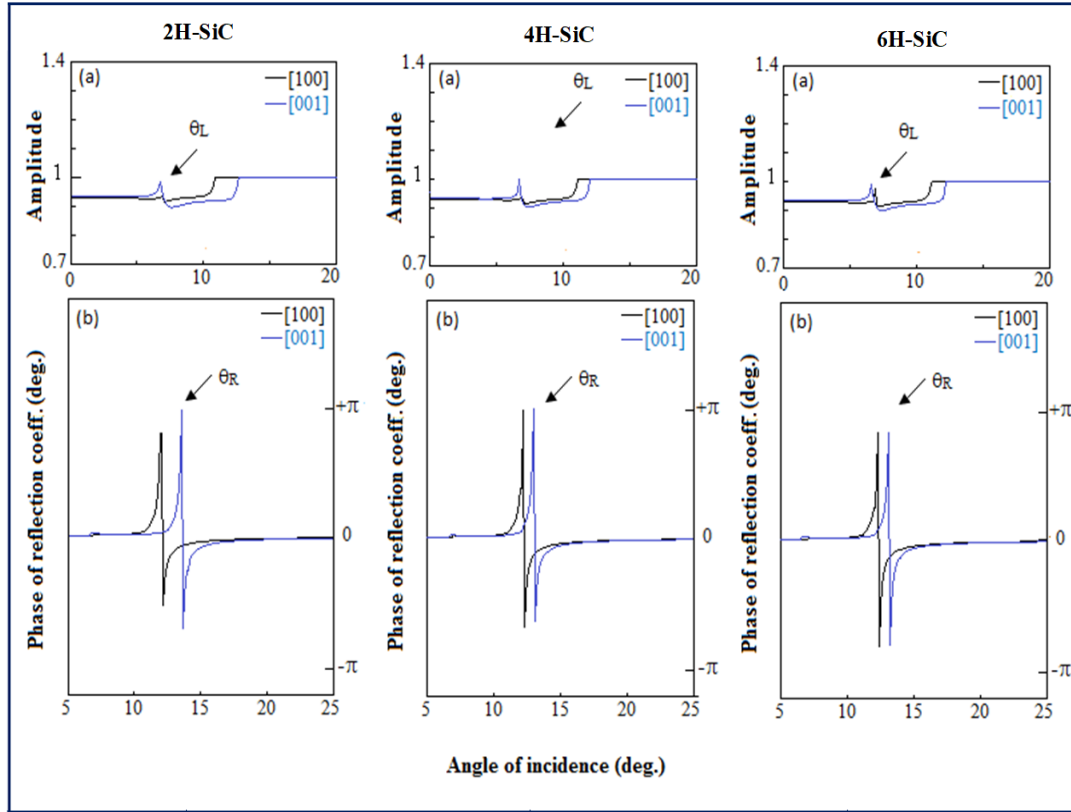


Figure II.1 : Coefficient de réflexion, $R(\theta)$;(a) amplitude, (b) phase des polytypes hexagonaux de 2H, 4H et 6H-SiC selon les directions [100] et [001].

b) Analyse de coefficient de réflexion pour le polytype cubique 3C-SiC

La figure II.2 présente l'évolution du coefficient de réflexion $R(\theta)$ en fonction de l'angle d'incidence θ_i pour le polytype cubique du SiC, 3C-SiC, étudié selon les directions cristallographiques [100], [110] et [111]. On remarque que l'augmentation de

θ_i s'accompagne de l'apparition de caractéristiques marquées, tant sur l'amplitude que sur la phase de $R(\theta)$, révélant des comportements distincts selon l'orientation cristallographique.

La figure II.2.a illustre les variations de l'amplitude de $R(\theta)$.

- La première fluctuation observée correspond à l'angle critique longitudinal θ_L . Pour le 3C-SiC, l'excitation du mode longitudinal intervient successivement selon les directions [111], [100] puis [110].
- Au-delà de cet angle, l'énergie incidente est totalement réfléchie, entraînant une valeur constante de $|R(\theta)|=1$, ce qui traduit l'absence de transmission dans le matériau.
- Par ailleurs, la variation de l'amplitude des fluctuations associées à θ_L diffère d'une direction à l'autre, indiquant une anisotropie dans l'efficacité de l'interaction du mode longitudinal.

La figure II.2.b montre les variations de la phase de $R(\theta)$.

- Deux fluctuations principales sont identifiées : la première, de faible amplitude, apparaît à θ_L , tandis que la seconde, plus prononcée, correspond à l'angle critique de Rayleigh θ_R .
- À ce dernier, la phase subit un saut brusque pouvant atteindre 2π pour une variation angulaire minime, traduisant la forte sensibilité du système à la génération de l'onde de Rayleigh.
- Un léger décalage angulaire entre les directions [100], [110] et [111] met en évidence les différences de vitesse de propagation des ondes de Rayleigh selon la direction cristallographique.

Les valeurs des angles critiques θ_L et θ_R du 3C-SiC sont regroupées dans le tableau II.3, conjointement à celles des polytypes hexagonaux (2H, 4H et 6H-SiC). L'analyse comparative montre que la variation de la direction cristallographique entraîne une modification notable des angles critiques des modes longitudinaux et de Rayleigh, dont les valeurs demeurent inférieures à 13° . Ainsi, l'anisotropie influence non seulement la position des angles critiques, mais également l'efficacité de génération des différents modes acoustiques, avec une nette prépondérance du mode de Rayleigh. Ces résultats

confirment l'impact significatif de l'anisotropie cristalline sur le comportement du coefficient de réflexion $R(\theta)$ dans le cas du polytype cubique 3C-SiC.

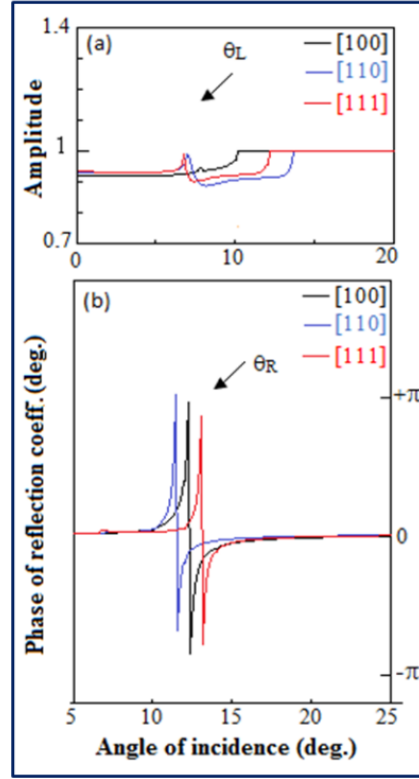


Figure II.2 : Coefficient de réflexion, $R(\theta)$: (a) amplitude, (b) phase du polytype cubique de SiC selon les directions [100], [110] et [111].

II-5.3 Effet de l'anisotropie sur les signatures acoustiques et les spectres FFT

La signature acoustique $V(z)$ d'un matériau représente la variation de l'amplitude du signal acoustique en fonction du déplacement vertical Δz de la lentille vers l'échantillon. Cette courbe présente généralement une allure pseudo-périodique et amortie, résultant des interférences entre l'onde axiale incidente et les faisceaux réfléchis issus des différents modes de propagation [12, 28]. L'application de la transformée de Fourier rapide (FFT) permet d'analyser le spectre discret de $V(z)$ et d'en identifier les pics caractéristiques, chacun correspondant à un mode acoustique particulier (longitudinal, transversal ou de Rayleigh). Cette méthode constitue un outil d'analyse performant pour l'identification et la

caractérisation des modes de propagation intervenant dans le phénomène d'interférence, offrant ainsi une meilleure compréhension du comportement acoustique du matériau étudié [12, 28, 32].

a) Analyse des signatures acoustiques et des spectres FFT pour les polytypes hexagonaux (2H, 4H et 6H-SiC)

La figure II.3.a présente les signatures acoustiques des polytypes hexagonaux du SiC à savoir 2H, 4H et 6H-SiC selon les directions cristallographiques [100] et [001]. L'analyse des courbes révèle qu'au niveau du point focal ($z = 0 \mu\text{m}$), un maximum d'amplitude est suivi d'un régime oscillatoire amorti, caractérisé par des variations notables d'amplitude et de période. L'effet de l'anisotropie apparaît clairement :

- (i) Sur le plan amplitudinal, la décroissance du signal est plus rapide le long de la direction [100] que suivant [001], indiquant une absorption plus prononcée dans cette direction. Cette atténuation varie également d'un polytype à l'autre, traduisant une sensibilité aux paramètres cristallins spécifiques à chaque structure.
- (ii) En ce qui concerne la période des oscillations, un léger décalage des maxima et minima est observé, aussi bien entre les directions qu'entre les polytypes, mettant en évidence des différences dans les vitesses de propagation des ondes acoustiques.

La figure II.3.b illustre les spectres issus de la transformée de Fourier rapide (FFT) appliquée aux courbes $V(z)$. Un pic principal y est clairement visible, correspondant au mode de Rayleigh, avec une amplitude plus marquée pour la direction [100], indiquant une efficacité de génération supérieure dans cette orientation. Des pics secondaires de faible intensité apparaissent également, correspondants à d'autres modes de propagation. La position du pic principal, directement liée à la vitesse de phase, varie à la fois selon la direction et le polytype. Ces décalages sont attribués aux différences de propriétés mécaniques notamment les constantes élastiques et la densité propres à chaque structure cristalline.

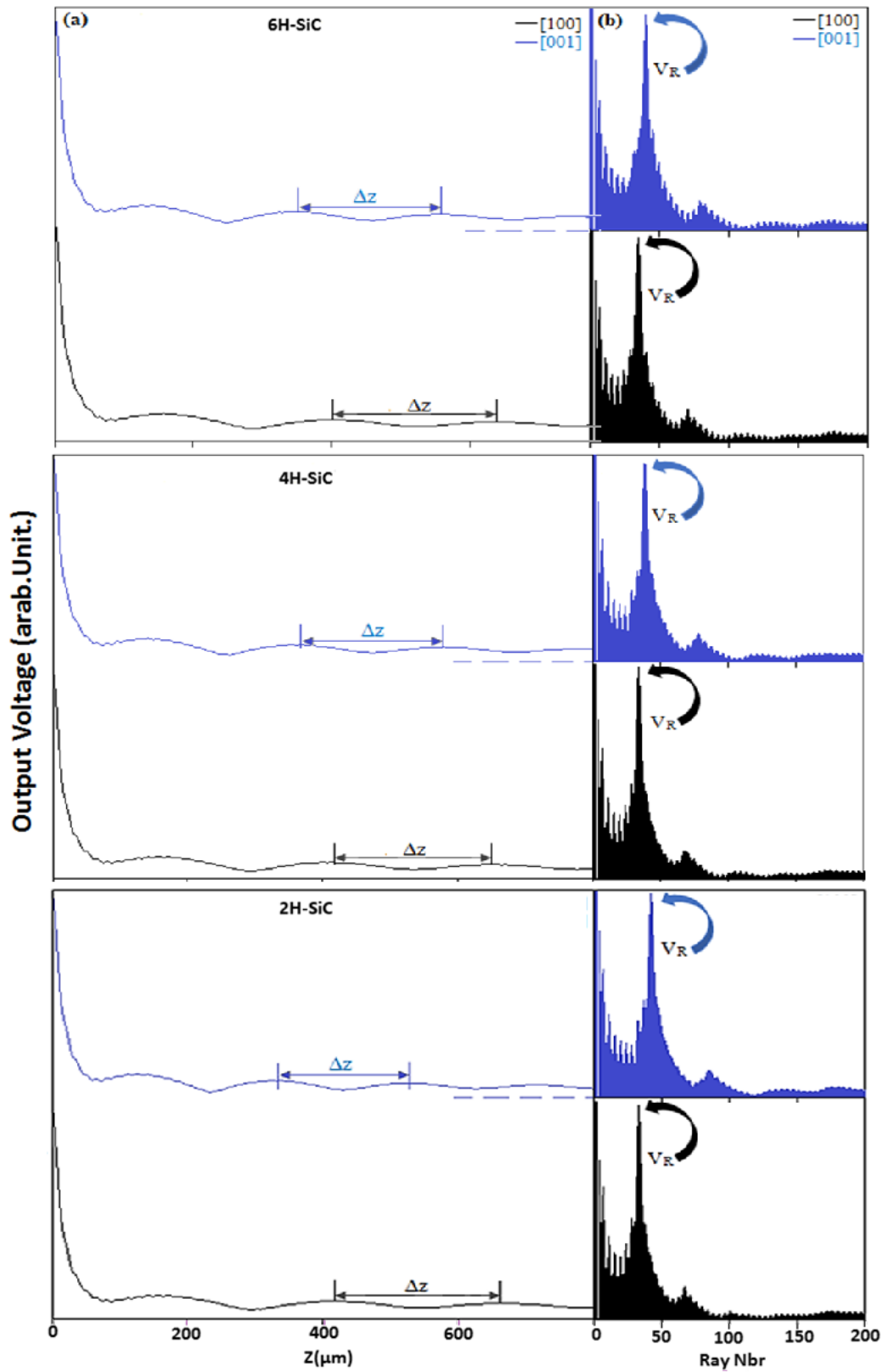


Figure II.3 : (a) Signatures acoustiques, $V(z)$, (b) transformée de Fourier, FFT des polytypes hexagonaux de SiC, 2H, 4H et 6H selon les directions [100] et [001].

L'analyse de la période spatiale Δz , extraite par FFT, confirme ces observations. Cette période, correspondant à la distance séparant deux maxima successifs de $V(z)$, est directement proportionnelle à la vitesse de Rayleigh. Les valeurs de Δz , récapitulées dans le tableau II.3, varient selon les directions [100] et [001], ainsi qu'en fonction du polytype. En général, une période plus longue est observée dans la direction [100], traduisant une densité atomique plus élevée que dans [001]. Chaque polytype présente une valeur propre de Δz ; par exemple, le 2H-SiC affiche une période plus grande que le 6H-SiC en [100], soulignant l'influence de la structure interne sur la réponse acoustique. Ces variations de Δz se traduisent par un décalage des raies caractéristiques dans les spectres FFT.

b) Analyse des signatures acoustiques et des spectres FFT pour le polytype cubique 3C-SiC

Les figures II.4.a et II.4.b illustrent respectivement les signatures acoustiques $V(z)$ et leurs spectres FFT pour le 3C-SiC selon les directions cristallographiques [100], [110] et [111]. Sur les courbes $V(z)$, un pic initial apparaît au point focal ($z=0 \mu\text{m}$), suivi d'oscillations résultant des interférences entre différents types d'ondes acoustiques.

L'effet de l'anisotropie se manifeste :

- (i) dans l'amplitude la direction [110] présente une décroissance rapide, traduisant une absorption plus importante ; la direction [100] montre une atténuation intermédiaire ; tandis que [111] conserve une amplitude plus élevée sur une plus longue distance, indiquant une absorption plus faible. Cette hiérarchie est liée à la densité atomique et à la symétrie cristalline propre à chaque direction.
- (ii) dans la période des oscillations un léger décalage est observé entre les directions, signifiant que la distance entre deux maxima (ou minima) varie selon l'orientation cristallographique.

Les spectres FFT mettent également en évidence l'anisotropie du 3C-SiC : chaque direction présente un pic principal correspondant au mode de Rayleigh, dont la position varie légèrement selon la direction. Des pics secondaires apparaissent à des périodes plus longues avec une intensité plus faible. Le pic le plus marqué est observé pour la

direction [110], indiquant une excitation plus efficace du mode de Rayleigh ; autrement dit, l'onde se propage initialement mieux dans cette direction, bien qu'elle s'atténue ensuite plus rapidement.

L'analyse de la période spatiale Δz associée au mode de Rayleigh, déterminée à partir de la FFT, confirme l'influence de l'anisotropie cristallographique dans le 3C-SiC. Bien que le matériau soit identique, les valeurs de Δz varient selon les directions [100], [110] et [111], comme le montre le tableau II.3. La direction [110] présente la plus grande période spatiale ($\Delta z=275,1 \mu\text{m}$), suivie de [100] ($237,1 \mu\text{m}$), tandis que [111] affiche la plus faible ($207 \mu\text{m}$). Ainsi, la hiérarchie observée $\Delta z_{[110]} > \Delta z_{[100]} > \Delta z_{[111]}$ traduit clairement une anisotropie marquée : plus le plan cristallographique est dense, plus la période spatiale Δz s'allonge.

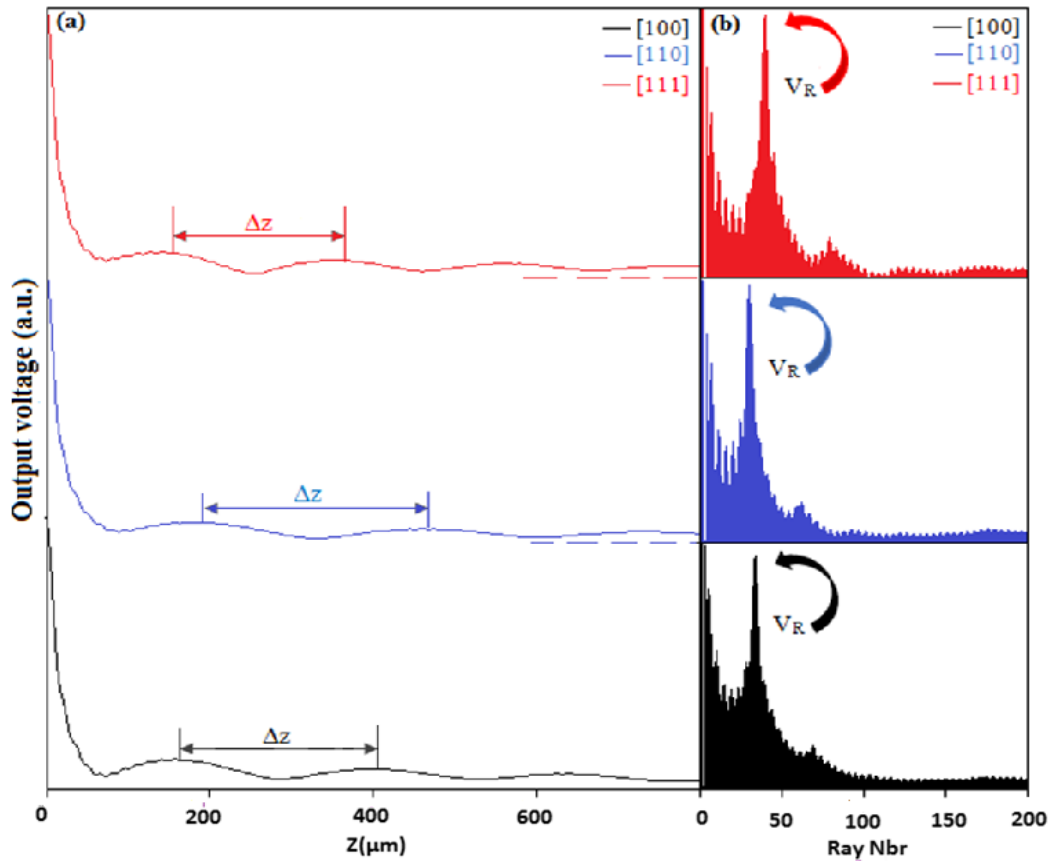


Figure II.4 : (a) Signatures acoustiques, $V(z)$, (b) transformée de Fourier, FFT de polytype cubique de SiC, 3C-SiC selon les directions [100] [110] et [111].

II-5.4 Effet de l'anisotropie sur la vitesse de Rayleigh

La vitesse de Rayleigh V_R , caractérisant la propagation des ondes acoustiques de surface, dépend fortement de l'orientation cristallographique du matériau. Pour les polytypes hexagonaux du carbure de silicium (2H, 4H et 6H-SiC) ainsi que pour le polytype cubique 3C-SiC, cette vitesse a été déterminée à partir des périodes spatiales Δz extraites des spectres FFT des signaux acoustiques $V(z)$, en appliquant la relation analytique donnée par l'équation (II.10).

a) Analyse de la vitesse de Rayleigh pour les polytypes hexagonaux (2H, 4H et 6H-SiC)

L'étude des vitesses de Rayleigh pour les polytypes hexagonaux du SiC (2H, 4H et 6H-SiC) révèle une anisotropie marquée en fonction de la direction de propagation. Les données du tableau II.3 montrent que, pour chaque polytype, la vitesse V_R est systématiquement plus élevée dans la direction [100] que dans la direction [001]. Cette différence s'explique par une densité atomique plus importante dans la direction [100], correspondante au plan basal, malgré une distance interatomique légèrement plus grande (environ a). Une densité atomique élevée favorise ainsi une propagation plus rapide des ondes de surface.

En revanche, dans la direction [001], parallèle à l'axe c , bien que les distances interatomiques ($c/2$, $c/4$, $c/6$ selon le polytype) soient plus courtes, l'espacement entre les plans atomiques successifs réduit la densité effective, ce qui ralentit la propagation des ondes. Ce comportement est cohérent avec les travaux de Goel et al. (2022), qui attribuent cette anisotropie aux variations de densité atomique et de distance entre atomes voisins selon la direction [38]. De même, Tleukenov et Yeltinova (2013) soulignent que le module d'élasticité plus élevé en [100] favorise une vitesse accrue [39]. Qin et al. (2009) confirment, à travers leurs simulations, que la vitesse des ondes de choc dans le SiC varie selon la direction, corroborant ainsi l'anisotropie du matériau [40].

On observe également des différences de vitesse de Rayleigh entre les polytypes: en [100], V_R diminue légèrement de 7281 m/s pour le 2H-SiC à 7080 m/s pour le 6H-SiC, tandis qu'en [001], elle augmente légèrement de 6454 m/s à 6601 m/s. Ces variations traduisent l'influence

du polytypisme, via la séquence d'empilement atomique, sur les propriétés élastiques du matériau. Ainsi, la vitesse de Rayleigh dans le SiC est modulée à la fois par la direction de propagation et par la nature du polytype.

b) Analyse de la vitesse de Rayleigh pour le polytype cubique 3C-SiC

Dans le 3C-SiC, la vitesse des ondes de Rayleigh varie selon la direction cristallographique : elle est maximale en [110], intermédiaire en [100] et minimale en [111], comme l'indique le tableau II.3. Cette hiérarchie reflète les différences structurelles internes propres à la structure cubique à faces centrées du 3C-SiC. La direction [110] présente la plus forte densité atomique et la distance interatomique la plus courte $\frac{\sqrt{2}}{2}a$, favorisant ainsi une propagation rapide des ondes. En [100], la densité atomique est plus faible et la distance interatomique est maximale (a), ce qui ralentit modérément la propagation. Quant à la direction [111], bien que la distance interatomique $\frac{\sqrt{3}}{2}a$ soit plus courte que celle de [100] et que la densité atomique soit relativement élevée, la complexité de l'empilement atomique réduit l'efficacité de propagation des ondes.

Plusieurs études confirment l'anisotropie des propriétés élastiques du 3C-SiC. Chen et al. (2023) ont montré que la direction [110] présente une dureté plus élevée, un taux d'enlèvement de matière plus faible et une meilleure résistance au glissement plastique par rapport à [100] [41]. Elahi et al. (2022) ont observé que la résistance et la ténacité varient selon la direction cristallographique, atteignant un maximum en [100] et un minimum en [111], ce qui indique que cette dernière direction est mécaniquement moins favorable [42]. Enfin, Goel et al. (2022) expliquent que ces différences anisotropes résultent des variations de densité atomique et des distances interatomiques selon la direction cristallographique, influençant directement la propagation des ondes et le comportement mécanique du matériau [38].

Tableau II.3 : Paramètres acoustiques (θ_L , θ_R , Δz et V_R) du 2H, 4H et 6H-SiC selon les directions [100] et [001] et du 3C-SiC selon les directions [100], [110] et [111].

Polytypes de SiC	direction	θ_L (°)	θ_R (°)	Δz (μm)	V_R (m/s)
2H-SiC	[100]	6.8	12	249.7	7281
	[001]	6.7	13.5	195.6	6454
4H-SiC	[100]	6.8	12.1	242.9	7182
	[001]	6.6	12.9	215.8	6775
6H-SiC	[100]	6.9	12.2	235.9	7080
	[001]	6.6	13.1	204.8	6601
3C-SiC	[100]	7.8	12	237.1	7096
	[110]	6.9	11.5	275.1	7641
	[111]	6.7	13	207	6637

II-6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons analysé de manière approfondie l'effet de l'anisotropie élastique sur les propriétés acoustiques de différents polytypes du SiC (2H, 4H, 6H et 3C), en utilisant des simulations numériques basées sur la microscopie acoustique à balayage (SAM). L'étude s'est focalisée sur des paramètres clés tels que le coefficient de réflexion $R(\theta)$, la signature acoustique $V(z)$, les spectres de fréquence (FFT) et la vitesse des ondes de Rayleigh V_R .

L'analyse du coefficient de réflexion a mis en évidence des variations significatives de l'amplitude et de la phase selon la direction et l'angle d'incidence, avec des angles critiques distincts pour les modes longitudinal et de Rayleigh. Les signatures $V(z)$ ont révélé des

oscillations pseudopériodiques dont les caractéristiques dépendent fortement de la direction et du polytype. Ces observations ont été corroborées par l'analyse spectrale FFT, permettant d'identifier des pics spécifiques à chaque configuration et d'estimer avec précision la vitesse de Rayleigh.

La vitesse de Rayleigh, paramètre essentiel pour la caractérisation des surfaces, est fortement influencée par l'anisotropie. Pour les polytypes hexagonaux, V_R est plus élevée dans la direction [100] (plan basal) que dans la direction [001] (axe c), en raison d'une densité atomique plus importante dans le plan basal. Dans le 3C-SiC, malgré sa symétrie cubique apparente, l'anisotropie persiste : la vitesse maximale est observée en [110], suivie de [100], avec un minimum en [111]. Ces variations reflètent les différences de densité atomique et de rigidité selon les directions cristallographiques.

En conclusion, nos résultats démontrent que l'anisotropie cristallographique influence de manière significative la propagation des ondes acoustiques dans le SiC. Même pour des structures apparemment isotropes comme le 3C-SiC, ces effets doivent être pris en compte pour interpréter correctement les mesures SAM, optimiser les dispositifs à ondes de surface (SAW) et améliorer les techniques de contrôle non destructif. L'intégration systématique de l'orientation cristalline est donc cruciale dans la conception et l'analyse des systèmes acoustiques basés sur le SiC.

Références Bibliographiques :

- [1] Achenbach, J. D. (1999). Elsevier.
- [2] Rose, J. L. (2004). Cambridge University Press.
- [3] Briggs, A. (2010). Oxford University Press.
- [4] Saijo, Y. (2004). IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control, 51(5), 717–725.
- [5] Nguyen, T. M., Dakhlaoui, H., & Legros, M. (2015). Ultrasonics, 62, 210–217.
- [7] Nye, J. F. (1985). Oxford University Press.
- [8] Ledbetter, H. M. (1981). U.S. Department of Commerce, National Bureau of Standards.
- [9] Zener, C. (1948). University of Chicago Press.
- [10] Graff, K. F. (1991). Dover Publications.
- [11] Achenbach, J. D. (1973). North-Holland.
- [12] Briggs, A. (1992). Reports on Progress in Physics, 55(7), 851.
- [13] R. G., M. (1997). J. Phys. Chem. Ref. Data, 26(5).
- [14] Viktorov, I. A. (1967). Plenum Press.
- [15] Wachinger, C., Shams, R., & Navab, N. (2009). In Bildverarbeitung für die Medizin 2009 (pp. 405–409). Springer Berlin Heidelberg.
- [16] Shokrollahi, N., Tobocman, W., Roth, S., & Izatt, J. (2001). U.S. Patent No. 6,200,266. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.
- [17] Syed, A. A. (1980). Doctoral dissertation, Loughborough University.
- [18] Weglein, R. D. (1993). In Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation (Vols. 12A–12B, pp. 2137–2144). Springer US.
- [19] Briggs, G. A. D., Daft, C. M. W., Fagan, A. F., Field, T. A., Lawrence, C. W., Montoto, M., ... & Scruby, C. B. (1989). Acoustical Imaging, 1–16.
- [20] Martin, R. W., Ruddell, M. J., Fox, J. A., Matikas, T. E., & Karpur, P. (1996). In Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation (Vol. 15A, pp. 2031–2038).

-
- [21] Doghmane, A., Hadjoub, Z., Alami, K., Saurel, J. M., & Attal, J. (1992). *The Journal of the Acoustical Society of America*, 92(3), 1545–1550.
- [22] Doghmane, A., Al-Suraihy, I., Hadjoub, I., & Hadjoub, Z. (2012). *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 28(1), 012037.
- [23] Al-Suraihy, I., Doghmane, A., & Hadjoub, Z. (2013). *Advanced Materials Research*, 811, 77–82.
- [24] Hadjoub, Z., Doghmane, A., Hadjoub, F., & Boumaiza, Y. (1994). *Journal of Materials Science Letters*, 13(10), 759–761.
- [25] Sheppard, C. J. R., & Wilson, T. (1981). *Applied Physics Letters*, 38(11), 858–859.
- [26] Sathish, S., Martin, R. W., & Matikas, T. E. (1999). In *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation* (pp. 2025–2030). Springer.
- [27] Adler, L. (1991). In *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation* (pp. 3–12). Springer.
- [28] Kushibiki, J. I., & Chubachi, N. (1985). Doctoral dissertation, Tohoku University.
- [29] Doghmane, A., Al-Suraihy, I., Hadjoub, I., & Hadjoub, Z. (2012). *Materials Science and Engineering*, 28, 012037.
- [30] Kamitani, K., Grimsditch, M., & Nipko, J. C. (1997). *Journal of Applied Physics*, 82(6), 3152–3154.
- [31] Dieulesaint, E., & Royer, D. (1974). Masson et Cie.
- [32] Salem, J. A., Li, Z., & Bradt, R. C. (1994). Unpublished manuscript.
- [33] Nuruzzaman, M., Islam, M. A., Alam, M. A., Shah, M. H., & Karim, A. M. M. T. (2015). *International Journal of Engineering Research and Applications*, 5(5), 48–52.
- [34] Nozawa, L. L., Katoh, Y., Byun, T. S., Kondo, S., & Petti, D. A. (2007). *Journal of Nuclear Materials*, 371(1–3), 329–377.
- [35] Takagaki, Y., Santos, P. V., & Wiebicke, E. (2002). *Physical Review B*, 66(15), 155439.
- [36] Contreras, S., Camassel, J., Pernot, J., Neyret, E., Di Cioccio, L., & Billon, T. (2002). *Sensors and Actuators A: Physical*, 97, 27–32.

- [37] Djemia, P., Roussigné, Y., Dirras, G. F., et al. (2004). *Journal of Applied Physics*, 95(5), 2324–2330.
- [38] Goel, R., Gautam, S., Patel, R., & Jain, R. (2022). *Journal of Materials Research and Technology*, 17, 2414–2425.
- [39] Tleukenov, A., & Yeltinova, A. (2013). *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 54(3), 422–427.
- [40] Qin, Q., Zhang, Z., Li, J., & Wang, Y. (2009). *Computational Materials Science*, 45(4), 1006–1010.
- [41] Chen, Y., Li, J., Zhang, Q., Xie, J., Wang, Z., Wu, W., & Zhang, Y. (2023). *Materials Characterization*, 200, 112963.
- [42] Elahi, F., Xu, J., & Wang, J. (2022). *Computational Materials Science*, 208, 111345.

Chapitre

III

Hexagonalité et propriétés élasto-acoustiques du SiC

III.1 Introduction

Le carbure de silicium (SiC) est un matériau d'intérêt majeur dans les domaines de l'électronique de puissance, de l'aérospatiale ainsi que dans les industries militaire et nucléaire, en raison de ses propriétés remarquables, notamment sa conductivité thermique élevée, sa large bande interdite et sa grande résistance aux radiations [1,2]. Grâce à ses propriétés mécaniques exceptionnelles, notamment ses modules élastiques élevés, le SiC se distingue par une rigidité et une résistance remarquables face aux déformations [3–5].

La combinaison de son module de Young, de son module de cisaillement et de son module de compressibilité élevés en fait un matériau de choix pour les applications nécessitant une grande stabilité structurelle dans des conditions extrêmes, telles que les outils de coupe, les revêtements de protection et l'électronique de puissance [6–8]. Cette synergie de propriétés confère au SiC un rôle essentiel dans les technologies de pointe et dans les applications soumises à de fortes contraintes. Parmi les nombreux polytypes du SiC, seuls quelques-uns sont actuellement les plus étudiés pour des applications industrielles.

Ce chapitre est consacré à l'étude de l'influence du pourcentage d'hexagonalité des polytypes de SiC (4H, 6H, 8H, 10H et 3C-SiC) sur leurs propriétés élastiques et acoustiques, en appliquant un programme de simulation reposant sur le principe du microscope acoustique à balayage (SAM), dans la perspective d'une utilisation comme méthode de contrôle non destructif. Dans un premier temps, une présentation des concepts fondamentaux relatifs aux modules élastiques ainsi que des relations mathématiques qui les relient sera proposée. Par la suite, l'influence du pourcentage d'hexagonalité sur l'énergie de gap et sur les modules élastiques sera examinée, suivie d'une analyse des corrélations entre l'énergie de gap et les paramètres élastiques. L'étude sera ensuite approfondie par l'exploration de l'impact du pourcentage d'hexagonalité sur les vitesses acoustiques des ondes longitudinales et transversales. Une attention particulière sera portée aux propriétés acoustiques des polytypes de SiC, en évaluant l'effet du pourcentage d'hexagonalité sur le coefficient de réflexion, la signature acoustique $V(z)$ et la vitesse des ondes de surface de Rayleigh. Une analyse spectrale, fondée sur la transformée de Fourier rapide (FFT), permettra d'affiner l'interprétation des signatures acoustiques.

L'ensemble de ces investigations vise à approfondir la compréhension de l'influence de la structure cristalline sur les propriétés mécaniques et acoustiques des polytypes du SiC,

ouvrant ainsi la voie à des applications potentielles dans le domaine des dispositifs acoustiques et optoélectroniques.

III.2 Concepts des modules élastiques et leurs corrélations

Les modules élastiques sont des paramètres fondamentaux qui caractérisent la réponse mécanique des matériaux lorsqu'ils sont soumis à des contraintes [9]. Parmi eux, le module de Young (E), le module de cisaillement (G), le module de compressibilité (B) et le coefficient de Poisson (ν) occupent une place particulièrement importante. Chaque module décrit une réponse mécanique spécifique, traduisant des phénomènes tels que l'allongement, la compression ou la déformation par cisaillement. Bien qu'ils représentent des propriétés distinctes, ces modules demeurent étroitement liés par des relations mathématiques fondamentales, permettant une compréhension intégrée du comportement mécanique des matériaux.

III.2.1 Caractérisation des modules élastiques

a) Module de Young

Il quantifie la rigidité d'un matériau, c'est-à-dire sa capacité à résister à une déformation sous l'effet d'une contrainte longitudinale. Un module de Young élevé indique un matériau rigide, peu susceptible de se déformer sous tension ou compression [10].

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} \quad (\text{III.1})$$

Où σ représente la contrainte appliquée et ε la déformation résultante.

b) Module de cisaillement

Il mesure la résistance d'un matériau aux forces de cisaillement, qui induisent un glissement des couches internes les unes par rapport aux autres [11].

$$G = \frac{\tau}{\gamma} \quad (\text{III.2})$$

Où τ est la contrainte de cisaillement et γ la déformation associée.

c) Module de compressibilité

Il exprime la capacité d'un matériau à résister à une compression uniforme, autrement dit à une variation de volume sous pression [12].

$$B = -V \frac{\Delta V}{\Delta P} \quad (\text{III.3})$$

Où P représente la pression appliquée et V le volume initial.

d) Coefficient de Poisson

Il traduit la manière dont un matériau se contracte ou s'expande latéralement lorsqu'il est soumis à une contrainte axiale. Un matériau présentant un coefficient de Poisson élevé aura tendance à se dilater latéralement lorsqu'il est comprimé [13].

$$\nu = - \frac{d\varepsilon_{trans}}{d\varepsilon_{axial}} \quad (\text{III.4})$$

Où ε_{trans} est la contrainte transversale ε_{axial} est la contrainte axiale

III.2.2 Relations fondamentales entre les modules élastiques

Ces grandeurs ne sont pas indépendantes et sont liées par plusieurs équations fondamentales. Voici les principales relations entre eux :

a) Relation entre E , G et ν :

$$E = 2G(1 + \nu) \quad (\text{III.5})$$

b) Relation entre E , B et ν

$$E = 3B(1 - 2\nu) \quad (\text{III.6})$$

c) Relation entre E , B et G

$$E = 9BG/(3B + G) \quad (\text{III.7})$$

Les relations entre les modules élastiques constituent un moyen rigoureux et cohérent d'estimer les propriétés mécaniques d'un matériau à partir de données expérimentales. Les comprendre permet d'optimiser son utilisation et d'adapter ses performances aux conditions extrêmes.

III.3 Justification du choix des polytypes avec un pourcentage d'hexagonalité jusqu'à 50 %

Dans cette étude, nous avons limité l'analyse aux polytypes de SiC présentant un pourcentage d'hexagonalité, h comprise entre 0 % et 50 %, afin de mettre en évidence une relation linéaire entre le pourcentage d'hexagonalité, h sur l'énergie de gap et les paramètres élastiques et acoustiques (E_g , E , G , B , V_L , V_T , V_R , θ_L , θ_T , θ_R). Ce choix est appuyé par plusieurs études antérieures. P.Kackell et al 1994 ont montré une augmentation linéaire de l'énergie de gap entre 0 % (3C-SiC) et 50 % (4H-SiC), suivie d'un comportement quasi constant jusqu'à 100 % (2H-SiC), comme illustré à la figure III.1, ce qui confirme une rupture de linéarité au-delà de 50 % [14]. De même, W.H.Backes et al 1994 ont reproduit cette tendance linéaire pour $h \leq 50$ %, tout en signalant des écarts à très faible h , et une exclusion notable du 2H-SiC dans la linéarité observée [15]. J.Fan et al 2014 confirment aussi une tendance quasi linéaire entre l'énergie de gap et le pourcentage d'hexagonalité, avec une exception marquée pour le polytype 2H, qui s'écarte de cette tendance [16].

Ces résultats convergent vers l'idée que l'inclusion du 2H-SiC ($h = 100$ %), dont le gap et les modules élastiques sont plus faibles que ceux du 4H-SiC, compromettrait la validité du modèle linéaire observé dans l'intervalle 0–50 %. C'est pourquoi notre analyse s'est concentrée sur cette gamme, scientifiquement cohérente et structurellement représentative.

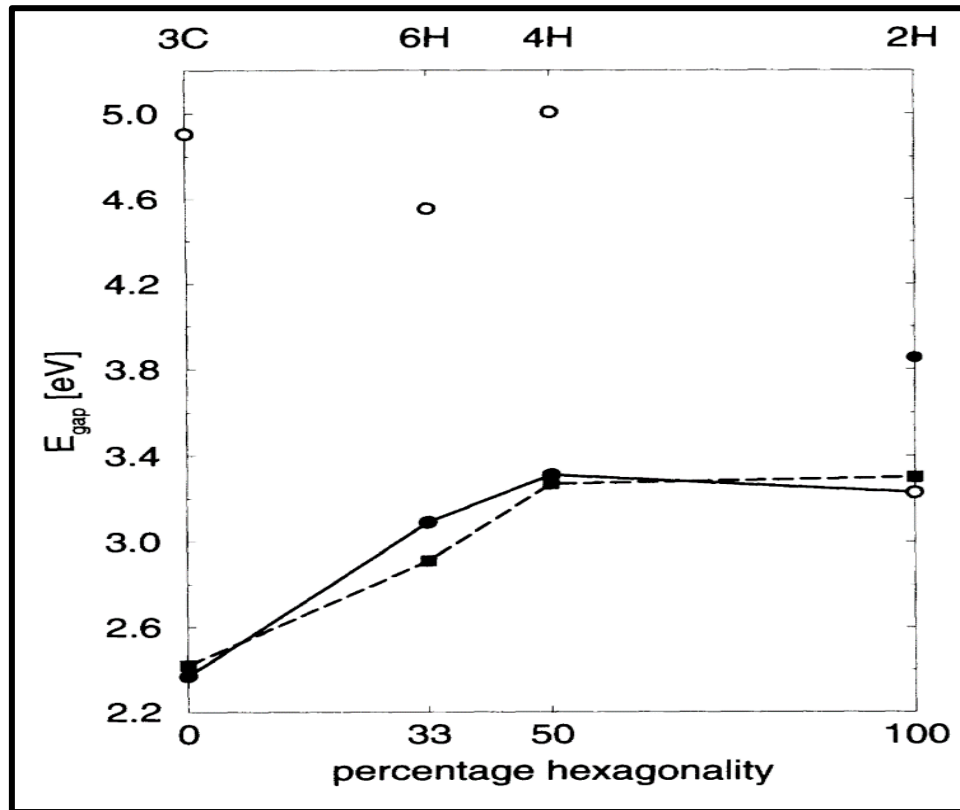


Figure III.1 : Évolution des bandes interdites indirectes en fonction du pourcentage d'hexagonalité [14].

III.4 Effets du pourcentage d'hexagonalité sur l'énergie de gap et les modules élastiques

Une première analyse du tableau III.1 montre que le module de compressibilité, B , et le module de cisaillement, G , ont des valeurs élevées pour les cinq polytypes, ce qui témoigne d'une grande dureté de ces matériaux ainsi que de leur résistance à la déformation. Le module de Young est 425.3, 437.4, 435.3, 440, 448.2 GPa pour le 3C, 10H, 8H, 6H, 4H-SiC respectivement, cela indique que le 4H-SiC est plus rigide que les autres polytypes mentionnés [17,18]. Quant aux propriétés élastiques du 8H- et 10H-SiC, elles ont été rarement présentées dans la littérature existante [19].

L'énergie de gap indirecte (E_g) du SiC varie entre 2,26 eV et 3,28 eV, selon le polytype considéré, allant du polytype cubique 3C-SiC au polytype hexagonal 4H-SiC. Cela confirme que le carbure de silicium est un semi-conducteur à large bande interdite indirecte. Rappelons

que, quel que soit son polytype, le SiC présente un gap indirect, c'est-à-dire que le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent en des points différents du réseau réciproque du cristal. Plus précisément, le maximum de la bande de valence se trouve toujours au point T, tandis que le minimum de la bande de conduction varie selon le polytype [20–23].

On peut également observer à partir du tableau III.1 que la structure cristalline des polytypes de SiC, c'est-à-dire les différents empilements des bicouches Si-C, influence de manière remarquable les propriétés électriques et élastiques des polytypes de SiC mentionnés. Le tableau 1 montre également comment l'Eg et les modules élastiques varient en fonction du pourcentage d'hexagonalité du SiC. Sachant que c'est à partir de la notation proposée par Jagodzinski qu'il est possible de calculer le pourcentage d'hexagonalité, h , où le site hexagonal est noté h et le site cubique est noté k (kubisch) [24,25]. Ainsi, le pourcentage d'hexagonalité h est le rapport entre les sites (bicouches Si-C) hexagonaux et le nombre total des sites dans la maille élémentaire, soit $h/(h+k)$. Ainsi, elle est de 0 % pour 3C, 20% pour 10H, 25% pour 8H, 33 % pour 6H, 50 % pour 4H et 100 % pour 2H [24,26-28]. Par exemple, dans 6H-SiC, il existe un site hexagonal et deux sites cubiques notés k_1 et k_2 par conséquent 33% (1/3) des atomes Si et C sont dans des sites hexagonaux et 66% dans des sites cubiques. Dans le but de mieux comprendre l'effet du pourcentage d'hexagonalité (h) sur l'énergie de gap, E_g ainsi que sur les propriétés élastiques des polytypes de SiC, nous avons analysé l'évolution de l'énergie de gap, E_g et des modules élastiques (E , B et G) pour les différents polytypes de SiC à savoir 3C-SiC, 10H, 8H, 6H et 4H-SiC en fonction du pourcentage d'hexagonalité, h . Les résultats de cette analyse sont représentés sur les figures III.2 et III.3, correspondant aux polytypes dont l'hexagonalité est inférieure à 50 %.

Tableau III.1 : Pourcentage d'hexagonalité (h), densité volumique (ρ), énergie de gap (Eg), module de Young (E), module de cisaillement (G), et module de compressibilité (B) des polytypes 3C, 10H, 8H, 6H et 4H-SiC.

Polytype de SiC	h (%)	ρ (Kg/m ³)	Eg (eV)	E(GPa)	G(GPa)	B(GPa)
3C-SiC (ABC)	0	3215 ^[29]	2.26 ^[30]	425.3 ^[31]	186.23 ^[30]	200 ^[32]
10H-SiC (ABCABCACB)	20	3217 ^[33]	2.67 ^[34]	437.4 ^[19]	190.4 ^[19]	207.3 ^[19]
8H-SiC (ABCABACB)	25	3217 ^[33]	2.77 ^[30]	435.3 ^[19]	189.3 ^[19]	207 ^[19]
6H-SiC (ABCACB)	33	3215 ^[29]	2.94 ^[30]	440.0 ^[19]	194.4 ^[31]	212.7 ^[30]
4H-SiC (ABCB)	50	3215 ^[29]	3.28 ^[35]	448.2 ^[28]	197.7 ^[31]	215.6 ^[30]

La figure III.2 illustre la variation de l'énergie de gap, Eg en fonction du pourcentage d'hexagonalité, h du SiC, pour des polytypes présentant une hexagonalité inférieure à 50 %. Comme on peut le constater, l'énergie de gap indirecte augmente proportionnellement à l'accroissement du pourcentage d'hexagonalité des polytypes, ce qui est en bon accord avec les résultats rapportés dans la littérature [30, 34, 36–38]. Selon Ching et al 2006 [39], bien que la structure atomique de tous les polytypes de SiC soit de type tétraédrique, des différences apparaissent dans la configuration atomique au-delà du deuxième plus proche voisin, entraînant de légères variations dans la structure électronique et, par conséquent, dans l'énergie de gap. Cette différence structurale subtile explique ainsi la dépendance d'Eg vis-à-vis du pourcentage d'hexagonalité h.

De plus, une relation linéaire entre l'énergie de gap et le pourcentage d'hexagonalité des polytypes de SiC a été démontrée à la fois expérimentalement par Choyke et al 1964 [24] et théoriquement par W.H. Backes et al 1994, ainsi que par V.N. Brudnyi et A.V. Kosobutsky 2017 [34,35]. Conformément à notre approche d'ajustement, les valeurs de Eg obtenues pour les polytypes de SiC ont également été modélisées par une droite, décrite par la relation (III.8):

$$E_g = 0.0204h + 2.26 \quad (\text{III.8})$$

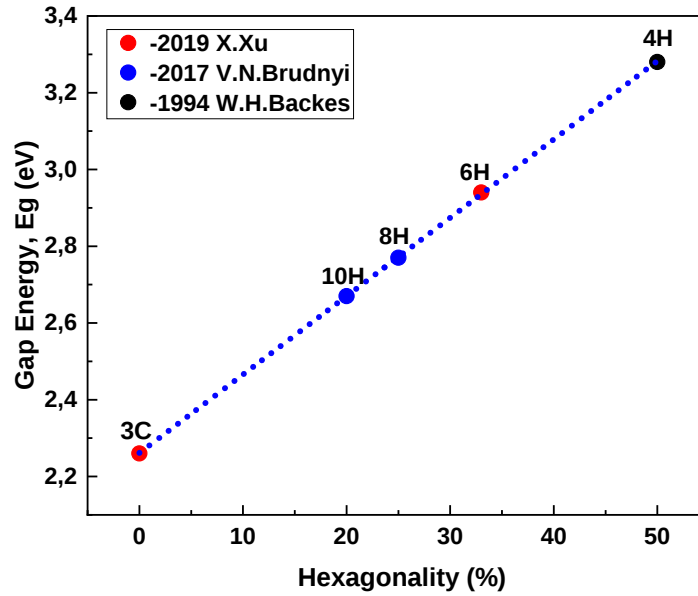


Figure III.2 : L'énergie de gap, E_g , des polytypes de SiC ; 3C, 10H, 8H, 6H et 4H en fonction du pourcentage d'hexagonalité h .

Nos résultats mettent également en évidence une relation linéaire entre l'énergie de gap indirecte des polytypes de SiC et leur pourcentage d'hexagonalité.

La figure III.3 illustre la variation des modules élastiques tels que, le module de Young (E), le module de cisaillement (G) et le module de compressibilité, B en fonction du pourcentage d'hexagonalité pour les polytypes de SiC présentant un taux inférieur à 50 %. Les courbes obtenues montrent que ces trois modules évoluent de manière significative avec l'augmentation du pourcentage d'hexagonalité, h . En particulier, E , G et B augmentent progressivement lorsque h croît, traduisant un renforcement global de la rigidité mécanique du matériau. Cette tendance est en bon accord qualitatif avec les travaux théoriques de Konstantinova et al 2008 [31], Remkers et al 2022 [26] et Hofmann et al 1994 [28], qui rapportent des comportements similaires dans leurs analyses cristallographiques et *ab initio*.

Par ailleurs, l'analyse des courbes expérimentales révèle un comportement quasi linéaire des modules élastiques en fonction de l'hexagonalité. En ajustant ces données à une droite de régression linéaire, nous avons cherché à optimiser la corrélation entre les modules élastiques

(E, G, B) et le pourcentage d'hexagonalité, h, conformément aux équations (III.9), (III.10) et (III.11).

$$E = 0.447h + 425,90 \quad (\text{III.9})$$

$$B = 0,321h + 200,29 \quad (\text{III.10})$$

$$G = 0,236h + 185,573 \quad (\text{III.11})$$

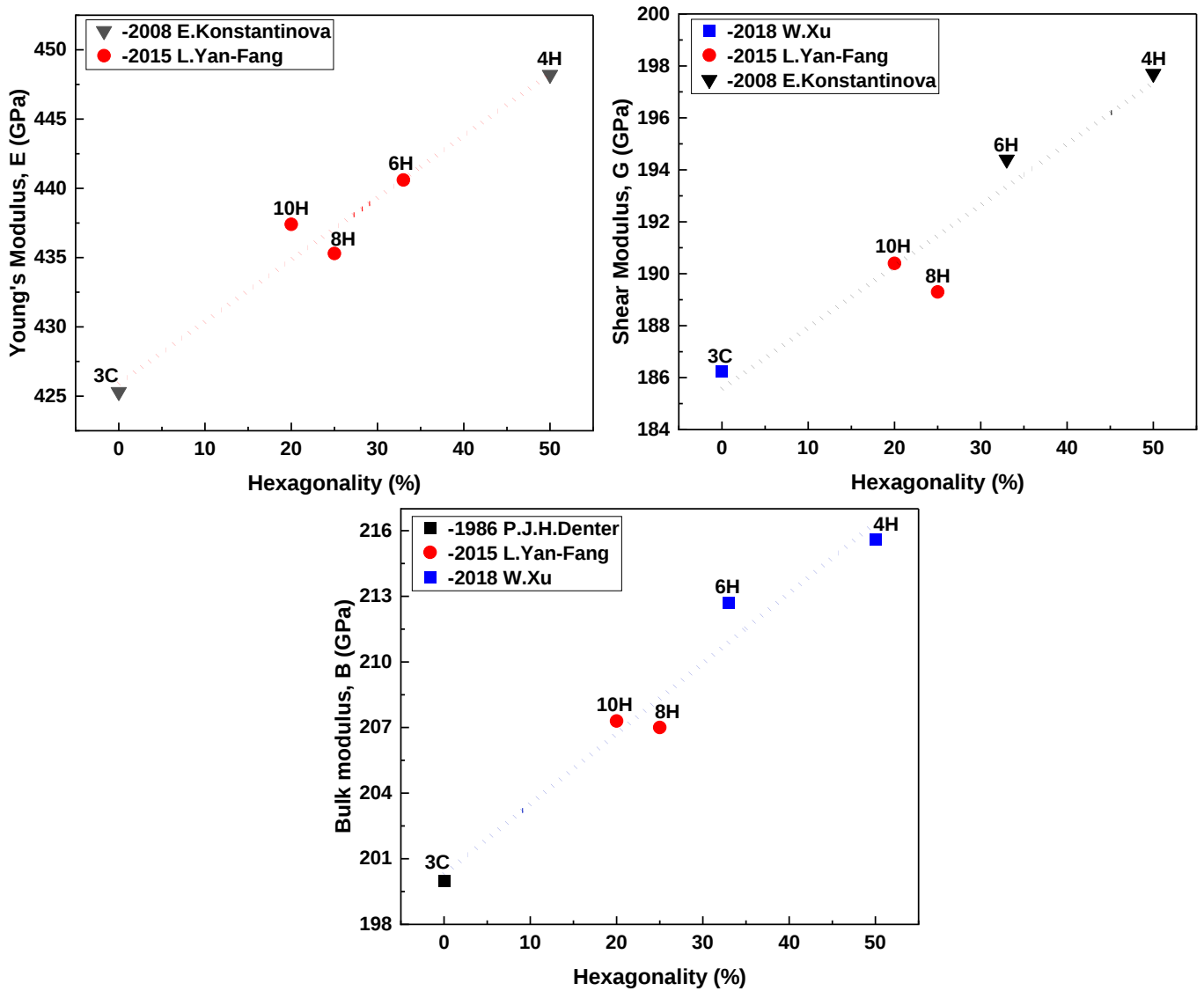


Figure III.3 : Les modules élastiques des polytypes de SiC ; 3C, 10H, 8H, 6H et 4H en fonction du pourcentage d'hexagonalité h

Ces équations illustrent la dépendance linéaire des modules élastiques en fonction du pourcentage d'hexagonalité des polytypes de SiC. En se référant à la figure III.3 ainsi

qu'aux équations (III.9), (III.10) et (III.11), on constate que les modules élastiques sont plus élevés pour les structures hexagonales que pour les structures cubiques, et qu'ils augmentent avec l'accroissement du pourcentage d'hexagonalité. Une explication possible de cette hiérarchie dans les propriétés élastiques des polytypes de SiC est la suivante : le degré d'hexagonalité du polytype 4H est supérieur à celui des polytypes hexagonaux 6H, 8H et 10H, ce qui confère au 4H-SiC une dureté et une rigidité plus élevées. En revanche, le polytype cubique 3C est moins favorable à l'obtention de modules élastiques importants. Il n'est donc pas surprenant que les écarts entre les polytypes 4H et 3C soient plus marqués que les variations observées entre les polytypes hexagonaux.

Cette différence s'explique par le fait que le 3C-SiC n'est pas réellement hexagonal, et que l'énergie des liaisons atomiques dans l'arrangement cubique diffère de celle observée dans l'arrangement hexagonal [28,31]. De manière générale, il est naturel de s'attendre à une certaine dépendance entre la structure cristalline et les propriétés élastiques : en modifiant la structure cristalline, on modifie la nature des liaisons entre les couches ainsi que les interactions entre les premiers plus proches voisins, même si la structure interne de chaque couche demeure identique [27,31].

III.5 Relation entre l'énergie du gap et les modules élastiques

Afin d'enrichir davantage l'analyse et de mieux comprendre les corrélations entre les propriétés électroniques et mécaniques, nous avons cherché à établir des relations globales reliant l'énergie de gap aux modules élastiques des polytypes de SiC. Cette approche vise à mettre en évidence un lien direct entre la structure électronique représentée par le gap et la rigidité mécanique du matériau.

Pour ce faire, le paramètre d'hexagonalité h a été extrait de la première relation reliant le gap au pourcentage d'hexagonalité, puis substitué dans les équations (III.9), (III.10) et (III.11). Cette opération permet d'exprimer directement les modules élastiques (E , G et B) en fonction de l'énergie de gap, conduisant ainsi aux équations suivantes :

$$E = 21.91E_g + 376.38 \quad (\text{III.12})$$

$$B = 15.37E_g + 164.73 \quad (\text{III.13})$$

$$G = 11.57Eg + 159.426 \quad (\text{III.14})$$

$$\frac{E}{B+G} = \frac{21.91Eg + 376.38}{26.94Eg + 324.16} \quad (\text{III.15})$$

Avec une analyse approfondie de ces relations, on observe que, lorsqu'on remplace le gap par les valeurs issues de la relation (III.8), le rapport étudié prend systématiquement la valeur 1,1. Cette invariance est clairement mise en évidence par la figure III.4.

La variation illustrée par la figure III.4 permet d'énoncer une relation globale liant les modules élastiques aux gaps des différents polytypes de SiC, caractérisée par une constante de proportionnalité ($\approx 1,1$). Ce résultat suggère une corrélation robuste et quasi-universelle entre les propriétés électroniques (énergie de gap) et élastiques (E, G, B) au sein des polytypes étudiés, ce qui peut faciliter des estimations rapides des modules élastiques à partir de mesures du gap et renforcer la compréhension structure-propriété pour la conception de matériaux.

$$\frac{E}{B+G} = 1.1 \quad (\text{III.16})$$

Cette proportionnalité quasi constante entre l'énergie de gap et les modules élastiques peut s'expliquer par la corrélation intrinsèque entre la densité de liaison atomique et la rigidité du réseau cristallin. En effet, l'énergie de gap dépend directement de la force des liaisons covalentes Si-C, tout comme les modules élastiques (E, G et B), qui traduisent la résistance du réseau aux déformations mécaniques.

Ainsi, lorsque le pourcentage d'hexagonalité augmente, la configuration atomique devient légèrement plus compacte et les liaisons Si-C s'intensifient, ce qui entraîne simultanément une augmentation de la rigidité mécanique et de la largeur du gap électronique. La constance du rapport obtenu ($\sim 1,1$) traduit donc une coévolution harmonisée entre la structure électronique et la réponse mécanique du matériau, liée à la nature fortement covalente et directionnelle des liaisons dans le SiC.

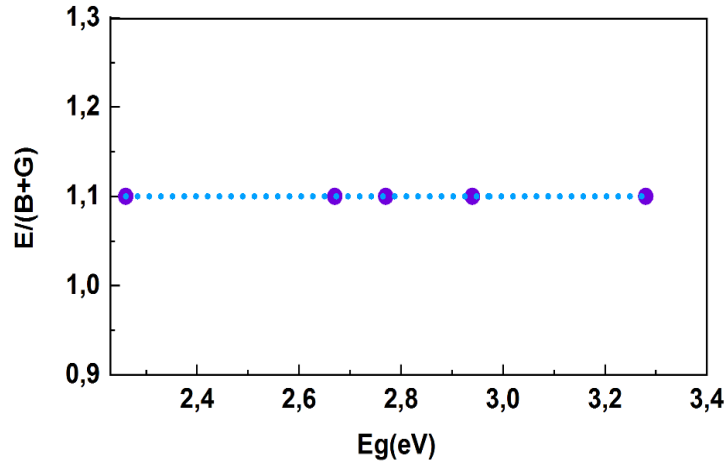


Figure III.4 : Variation du rapport $(E/B+G)$ et l'énergie du gap des polytypes de SiC : 3C, 10H, 8H, 6H et 4H.

III.6 Effet du pourcentage d'hexagonalité sur les vitesses longitudinales et transversales

Les ondes de volume se propagent à l'intérieur du matériau. Leurs vitesses de propagation dépendent du matériau considéré ; en général, elles augmentent avec la profondeur, car le milieu traversé devient plus dense. Elles peuvent se propager selon deux modes distincts :

- (i) Les ondes longitudinales dont le mouvement des particules est parallèle à la direction de propagation de l'onde et dont la vitesse de propagation est V_L
- (ii) Les ondes transversales se propagent perpendiculairement à la direction de vibration des particules et leur vitesse de propagation est V_T [40].

Les valeurs des vitesses longitudinales (V_L) et transversales (V_T) de 4H, 6H, 8H, 10H et 3C-SiC ont été calculées à partir des valeurs des modules de cisaillement (G), modules de compressibilité (B) et de la densité (ρ) via les relations suivantes [40,41] :

$$V_T = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (\text{III.17})$$

$$V_L = \sqrt{\frac{3B+4G}{3\rho}} \quad (\text{III.18})$$

Les vitesses longitudinales et transversales des polytypes de SiC, en fonction du pourcentage d'hexagonalité h , peuvent être déterminées analytiquement en remplaçant l'équation (III.11), qui exprime $G(h)$, dans l'équation (III.17), ainsi qu'en substituant les équations (III.11) de $G(h)$ et (III.10) de $B(h)$ dans l'équation (III.18). Cette démarche permet d'obtenir les relations analytiques suivantes :

$$V_T = \sqrt{\frac{0,236h + 185,573}{\rho}} \quad (\text{III.19})$$

$$V_L = \sqrt{\frac{3(0,321h + 200,29) + 4(0,236h + 185,573)}{\rho}} \quad (\text{III.20})$$

Afin de mettre en évidence l'effet du pourcentage d'hexagonalité h des polytypes de SiC sur les vitesses longitudinales (V_L) et transversales (V_T), nous avons tracé les courbes correspondantes, illustrées à la figure III.5.

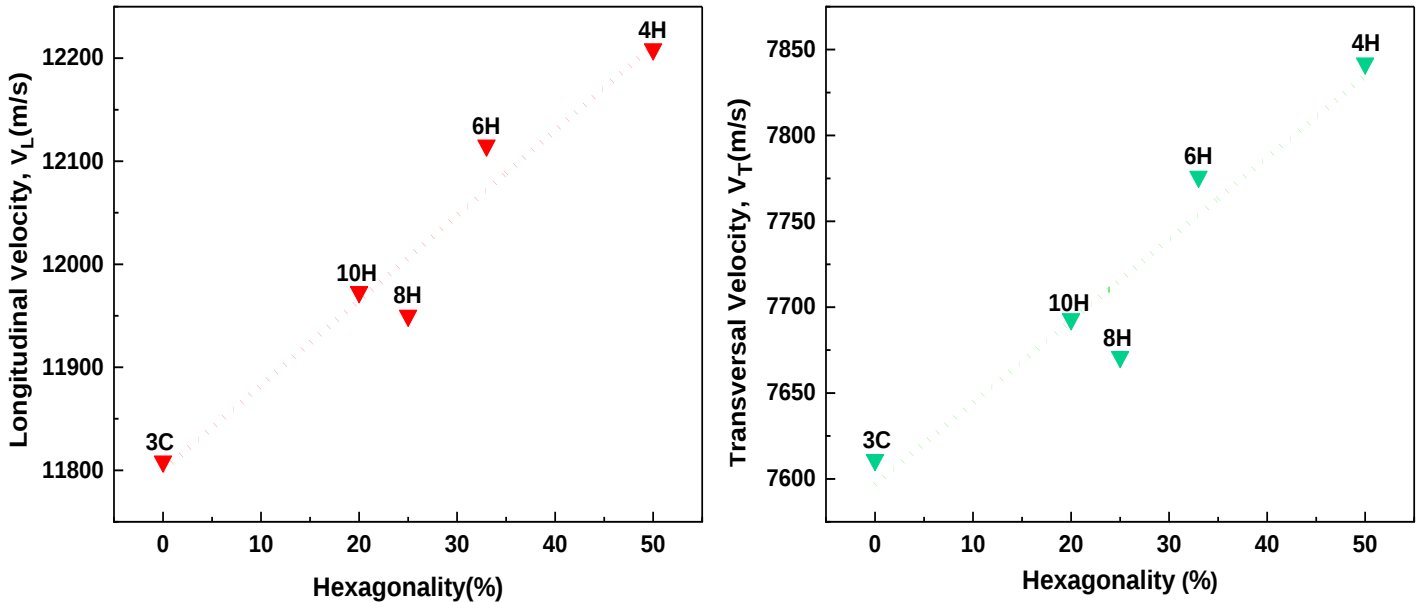


Figure III.5 : Vitesse longitudinale et transversale des polytypes de SiC, 3C, 10H, 8H, 4H et 6H en fonction du pourcentage d'hexagonalité h .

Nous observons un comportement quasi linéaire des vitesses V_L et V_T en fonction du pourcentage d'hexagonalité h . Ces vitesses augmentent progressivement avec l'accroissement

de h. En procédant à un ajustement linéaire des courbes, nous obtenons les relations (III.21) et (III.22), dont les formulations se révèlent plus simples que celles des équations précédentes :

$$V_L = 8.246h + 11800.026 \quad (\text{III.21})$$

$$V_T = 4.758h + 7596.799 \quad (\text{III.22})$$

III.7 Etude de l'effet du pourcentage d'hexagonalité sur la détermination de la vitesse de Rayleigh dans les polytypes de SiC

III.7.1 Effet du pourcentage d'hexagonalité sur le coefficient de réflexion R (θ)

Le coefficient de réflexion, R (θ), est une fonction à valeurs complexes qui admet une amplitude et une phase qui est définie à l'interface liquide/solide par la relation (III.23) et à partir de sa résolution, on peut le calculer

$$R(\theta) = Z_{Sol} - Z_{Liq} / Z_{Sol} + Z_{Liq} \quad (\text{III.23})$$

Où Z_{sol} et Z_{liq} sont les impédances acoustiques du solide et du liquide respectivement.

La formule de l'impédance est :

$$Z_i = \rho_i \cdot V_i / \cos \theta_i \quad (\text{III.24})$$

L'indice, i, représente le mode transversale (T) ou longitudinale (L) ou celui du liquide (L_{iq}). V_i , θ_i et Z_i sont respectivement les vitesses, les angles et les impédances acoustiques du mode considéré.

L'impédance acoustique du solide est donnée par :

$$Z_{Sol} = Z_L \cos^2 2\theta_T + Z_T \sin^2 2\theta_T \quad (\text{III.25})$$

La figure III.8.a regroupe les courbes des coefficients de réflexion en fonction de l'angle d'incidence θ_i pour les polytypes de SiC : 4H, 6H, 8H, 10H et 3C-SiC. Elle met clairement en évidence que, lorsque l'angle d'incidence θ_i augmente, plusieurs caractéristiques distinctes apparaissent, aussi bien sur les courbes d'amplitude que sur celles de phase de $R(\theta)$. Ces caractéristiques peuvent être résumées comme suit :

- En amplitude : deux fluctuations principales sont observées. La première correspond à l'angle critique d'excitation des ondes longitudinales (θ_L), tandis que la seconde, plus atténuée, correspond à celui des ondes transversales (θ_T). Au-delà de ce dernier angle, toute l'énergie incidente est réfléchiée, en l'absence de transmission dans le solide ; par conséquent, la valeur absolue du coefficient de réflexion devient constante, $|R| = 1$.
- En phase : on observe également deux fluctuations notables. La plus marquée correspond à l'angle critique de Rayleigh (θ_R), à partir duquel les ondes de Rayleigh sont excitées. À proximité de cet angle, la phase de $R(\theta)$ subit une variation brusque d'environ 2π pour une très faible variation de θ , ce qui témoigne de l'efficacité et de la forte génération de ce mode. De ce fait, il domine les autres modes pouvant coexister.

Enfin, il est important de noter que la génération de l'ensemble de ces modes se produit pour des angles d'incidence inférieurs à 13° , et que ces angles varient légèrement d'un polytype à l'autre.

L'incidence d'une onde ultrasonore sur une interface liquide/solide engendre l'apparition d'angles critiques correspondant à l'excitation de différents modes d'ondes : l'angle critique θ_L pour les ondes longitudinales, θ_T pour les ondes transversales et θ_R pour les ondes de Rayleigh. Les valeurs de ces angles critiques pour les différents polytypes de SiC, associées à l'excitation des modes respectifs, ont été déterminées à partir de la loi de Snell-Descartes, exprimée comme suit :

$$\theta_i = \arcsin \frac{V_{liq}}{V_x} \quad (III.26)$$

Tels que θ_i représentent les angles critiques : longitudinal (θ_L), transversal (θ_T) et de Rayleigh (θ_R), tandis que V_x désigne les vitesses correspondantes, à savoir la vitesse longitudinale (V_L), la vitesse transversale (V_T) et la vitesse de Rayleigh (V_R). À partir des valeurs obtenues, on constate que l'ensemble des angles critiques θ_L , θ_T et θ_R diminuent avec l'augmentation du pourcentage d'hexagonalité.

Cette tendance peut s'expliquer par le caractère strictement croissant de la fonction $\arcsin(x)$ sur l'intervalle $[-1, 1]$. Ainsi, lorsque les vitesses V_L , V_T et V_R augmentent, les angles critiques correspondants θ_L , θ_T et θ_R diminuent respectivement. Pour voir nettement l'influence du pourcentage d'hexagonalité des polytypes de SiC mentionnés sur les angles critiques θ_L , θ_T et θ_R , nous avons tracé les courbes qui sont illustrées sur la figure III.6.

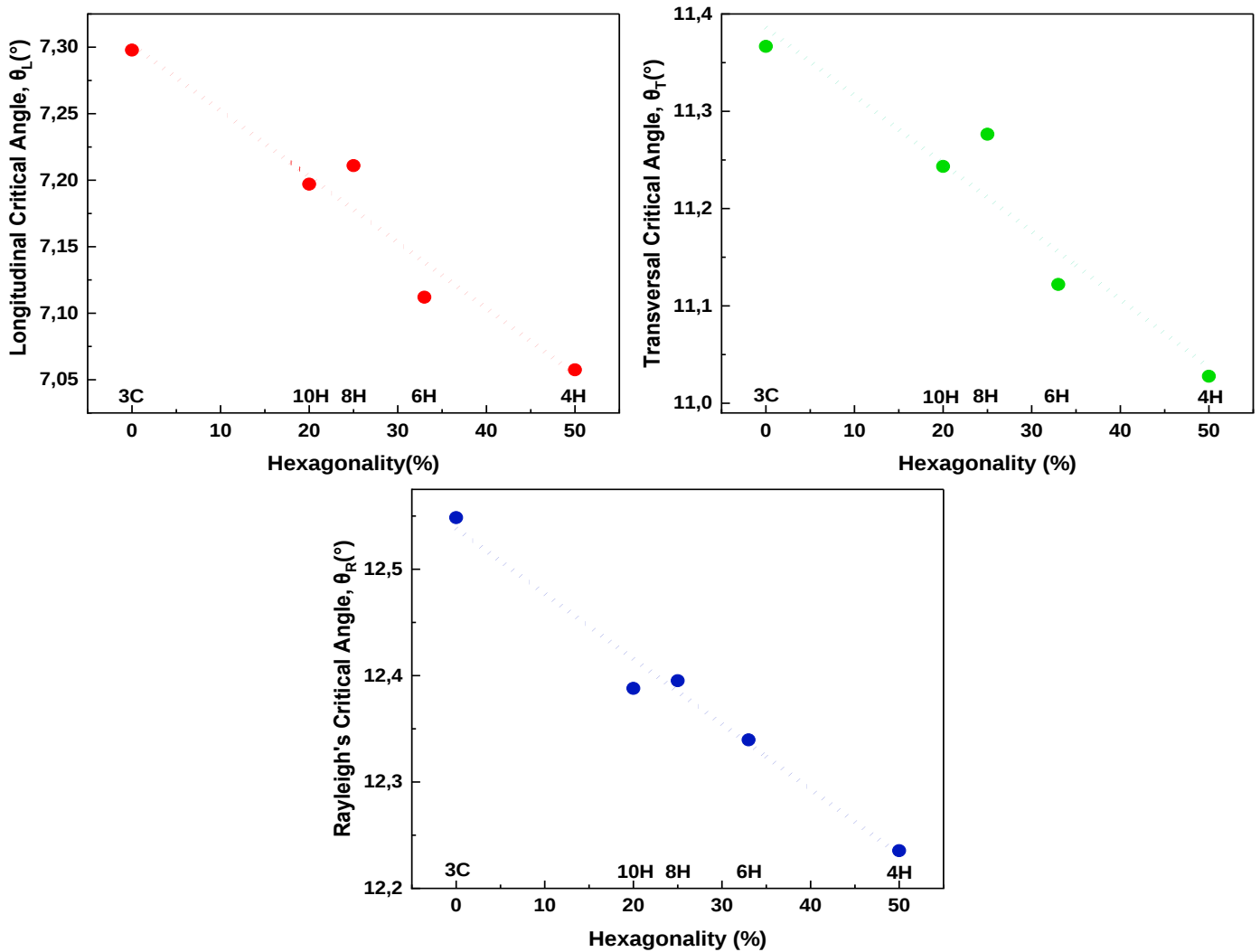


Figure III.6 : Angles critiques θ_L , θ_T et θ_R des polytypes de SiC ; 3C, 10H, 8H, 4H et 6H en fonction du pourcentage d'hexagonalité h .

La figure III.6 met en évidence un comportement quasi linéaire des angles critiques en fonction du pourcentage d'hexagonalité (h). En ajustant ces données par une droite de régression, afin d'optimiser la représentation de leur évolution linéaire avec le pourcentage d'hexagonalité, nous obtenons les équations (III.27), (III.28) et (III.29) :

$$\theta_{L=} = 7.3018 - 0.00495h \quad (\text{III.27})$$

$$\theta_{T=} = 11.386 - 0.00698h \quad (\text{III.28})$$

$$\theta_{R=} = 12.538 - 0.00613h \quad (\text{III.29})$$

II.7.2 Effet du pourcentage d'hexagonalité sur la signature acoustique $V(z)$

La signature acoustique, $V(z)$, désigne le signal de sortie qui varie entre la lentille et l'échantillon avec une distance, z , quand l'échantillon est déplacé verticalement vers la lentille acoustique [42]. La signature acoustique représente le plus important paramètre qui peut être mesuré expérimentalement via le SAM [43-45]. La courbe de $V(z)$ est également exprimée analytiquement par le modèle de spectre angulaire à partir de la formule de Sheppard et Wilson [46] :

$$V(z) = \int_0^{2\pi} R(\theta) P^2(\theta) e^{i2kz \cos\theta} \sin\theta \cos\theta d\theta \quad (\text{III.30})$$

Où R est le coefficient de réflexion, $P^2(\theta)$ est la fonction pupille de la lentille, θ est l'angle entre le vecteur d'onde k et l'axe de la lentille z .

Les courbes des signatures acoustiques des différents polytypes du SiC: 3C, 10H, 8H, 6H, 4H et 2H-SiC sont illustrées dans la figure III.8.b. Ces courbes présentent une série d'oscillations périodiques résultant des interférences constructives et destructives entre l'onde axiale incidente et les différents faisceaux réfléchis [43–45].

Il est observé que la forme oscillatoire varie d'un polytype à un autre. Par ailleurs, la période spatiale Δz , correspondant à la distance séparant deux minima ou maxima successifs, est respectivement de 216.5, 222.1, 221.9, 223.9 et 226.5 μm pour les polytypes 3C, 10H, 8H, 6H, 4H et 2H du SiC.

Ces variations des signatures acoustiques, propres à chaque polytype, jouent un rôle fondamental dans la détermination de la vitesse des ondes de Rayleigh (V_R). L'analyse des valeurs de Δz révèle une tendance claire : la période spatiale Δz augmente progressivement avec le degré d'hexagonalité du polytype.

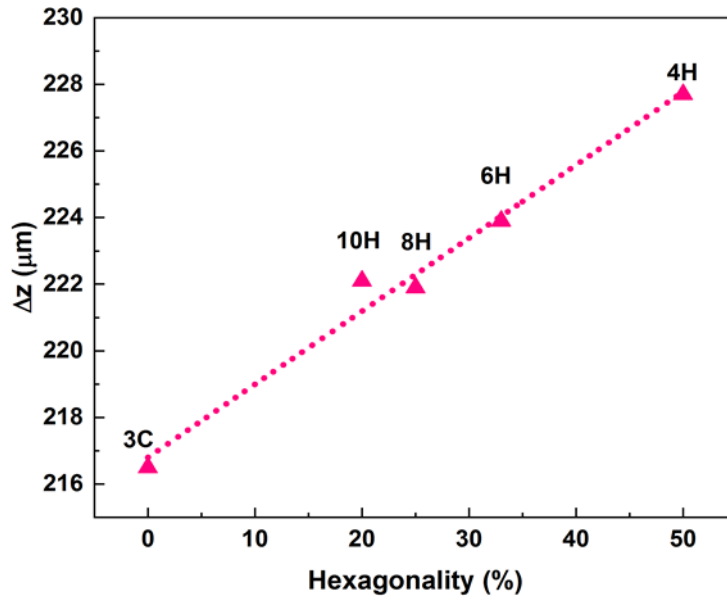


Figure III.7 : Variation de la période spatiale Δz des polytypes de SiC (3C, 10H, 8H, 6H et 4H) en fonction du pourcentage d'hexagonalité h .

À partir de la figure III.7, la variation de la période spatiale Δz en fonction du pourcentage d'hexagonalité h peut être décrite par la relation suivante :

$$\Delta z = 0.219h + 216.80 \quad (\text{III.31})$$

Cette évolution a été obtenue dans le cadre des simulations réalisées sous le logiciel SAM, où les conditions de travail ont été maintenues constantes, notamment la fréquence d'excitation fixée à 142 MHz. Dans ces conditions, la fréquence étant invariable, les variations de la période spatiale Δz reflètent uniquement les différences intrinsèques de comportement acoustique entre les polytypes de SiC.

L'analyse montre que Δz augmente progressivement avec le degré d'hexagonalité, traduisant une modification de la vitesse de Rayleigh et, par conséquent, une influence directe de la structure cristallographique sur la propagation acoustique. Ce résultat confirme que, même à fréquence fixe, la réponse acoustique simulée dépend fortement de la rigidité élastique et de la configuration atomique propres à chaque polytype du SiC.

II.7.3 Analyse spectrale des signatures acoustique par FFT

Le traitement de la signature acoustique $V(z)$ a été effectué à l'aide de la transformée de Fourier rapide (FFT). La figure III.8.c présente les spectres de FFT obtenus à partir des courbes $V(z)$ des polytypes de SiC: 3C, 10H, 8H, 6H et 4H-SiC. L'analyse de cette figure révèle la présence d'un unique pic principal, correspondant au mode de Rayleigh, qui se manifeste comme le mode le plus dominant dans les conditions de simulation adoptées. Par ailleurs, on observe une variation notable de la position et de l'amplitude de ce pic d'un polytype à un autre. Cette variation traduit les différences de vitesses de Rayleigh (V_R) liées à la nature cristallographique propre à chaque polytype.

La hauteur du pic représente l'efficacité de génération de l'onde de Rayleigh, tandis que sa position spectrale indique la valeur de la vitesse V_R [42,47].

Ces résultats confirment que la transformée de Fourier rapide constitue un outil puissant pour extraire des informations quantitatives précises à partir des signaux acoustiques simulés. L'évolution systématique des pics FFT avec l'hexagonalité met clairement en évidence l'impact direct de la structure cristalline sur la dynamique de propagation des ondes élastiques. En d'autres termes, le décalage progressif des pics de Rayleigh traduit la sensibilité du matériau aux variations de son arrangement atomique, ce qui ouvre la voie à une caractérisation non destructive des polytypes de SiC à partir de leur réponse acoustique. Enfin, l'apparition et l'intensité du mode de Rayleigh dépendent fortement des conditions de fonctionnement du microscope acoustique à balayage (SAM), notamment de la fréquence d'excitation, du liquide de couplage utilisé et de l'angle d'ouverture de la lentille acoustique [40, 42, 45, 46, 48].

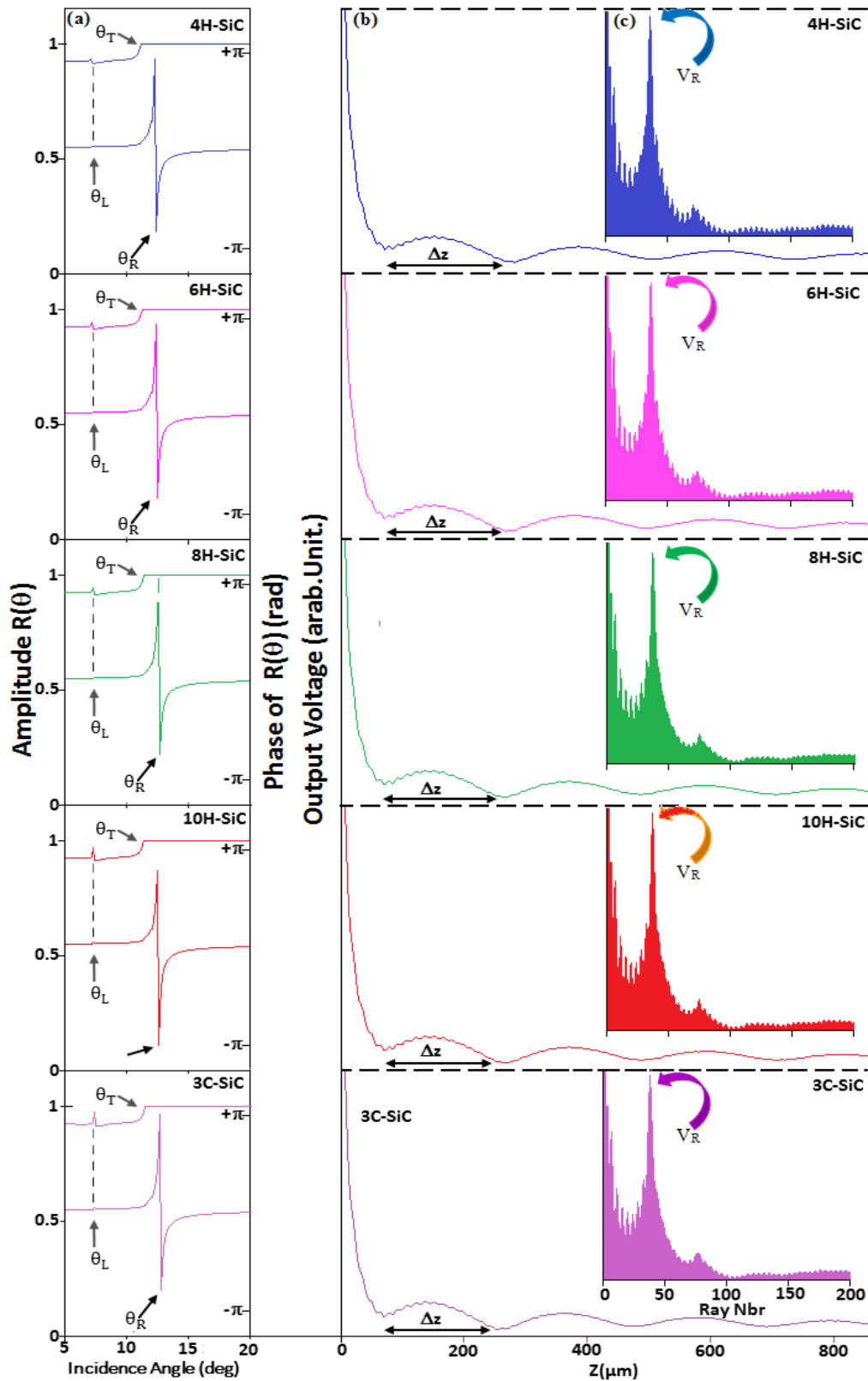


Figure III.8 : Coefficient de réflexion, $R(\theta)$; (a), Signatures acoustiques, $V(z)$; (b) et transformée de Fourier, FFT; (c) des polytypes de SiC, 3C, 10H, 8H, 6H et 4H.

III.7.4 Effet du pourcentage d'hexagonalité sur la vitesse de Rayleigh

La vitesse de Rayleigh peut être déterminée expérimentalement ou théoriquement en utilisant la relation (III.32) [47]. Tel que :

$$V_R = \frac{V_{Liq}}{\sqrt{1 - \left(1 - \frac{V_{Liq}}{2f \cdot \Delta z}\right)^2}} \quad (III.32)$$

En introduisant les valeurs de la période spatiale Δz issues des signatures acoustiques dans l'équation (III.32), il est possible de déterminer les vitesses de Rayleigh, V_R , pour les différents pourcentages d'hexagonalité correspondant aux polytypes de SiC étudiés. Les valeurs calculées de V_R pour les cinq polytypes sont respectivement de 6882, 6969, 6970, 7019 et 7078 m/s pour le 3C-, 10H-, 8H-, 6H- et 4H-SiC. Il convient de noter que très peu de données expérimentales ou théoriques sont disponibles dans la littérature concernant les vitesses de Rayleigh des polytypes de SiC. Néanmoins, certaines études ont rapporté des valeurs de 6940 m/s pour le 3C-SiC [49] et 6851 m/s pour le SiC [50], ce qui montre une bonne concordance avec nos résultats calculés.

L'analyse comparative des vitesses obtenues met en évidence une tendance croissante de V_R avec le pourcentage d'hexagonalité : la vitesse la plus élevée est observée pour le polytype 4H-SiC, suivie du 6H-SiC, du 8H-SiC, du 10H-SiC, et enfin du 3C-SiC. Cette évolution reflète directement l'influence de la structure cristalline sur les propriétés élastiques du matériau. En effet, la même hiérarchie est observée pour les modules élastiques calculés (E , G et B), confirmant la corrélation entre rigidité mécanique et vitesse de propagation des ondes de surface.

La vitesse de Rayleigh V_R présente une hiérarchie similaire à celle observée pour les modules élastiques des polytypes 3C, 10H, 8H, 6H et 4H du SiC. Cette cohérence peut s'expliquer par le fait que V_R est déduite à partir des vitesses longitudinale (V_L) et transversale (V_T), elles-mêmes directement dépendantes des constantes élastiques du matériau. Par conséquent, toute variation des modules élastiques se répercute sur la valeur de V_R , traduisant une augmentation progressive de la vitesse de Rayleigh avec l'augmentation du pourcentage d'hexagonalité. Afin de mieux visualiser cette évolution, la figure III.9.a présente la variation de V_R en fonction du pourcentage d'hexagonalité, calculée à partir des spectres FFT selon l'équation (III.32). Il apparaît clairement que l'accroissement de l'hexagonalité conduit à une

augmentation de la vitesse de Rayleigh, confirmant la forte corrélation entre la structure cristalline et le comportement acoustique de la matière.

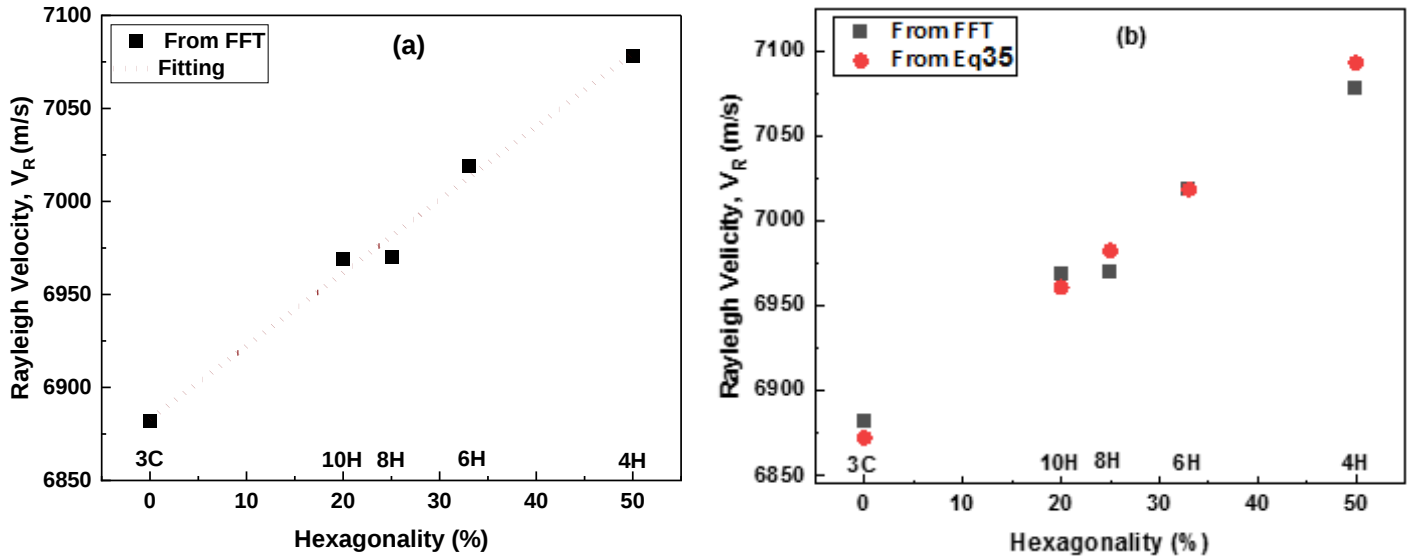


Figure.III.9 : Vitesse de Rayleigh des polytypes de SiC 3C, 10H, 8H, 4H et 6H en fonction du pourcentage d'hexagonalité h : (a) par FFT et (b) par Viktorov

Afin de quantifier l'influence du pourcentage d'hexagonalité h (lorsqu'il est inférieur à 50 %) sur les vitesses de Rayleigh précédemment déterminées, un ajustement linéaire des données expérimentales a été effectué à partir de la courbe présentée dans la figure III.9.a. Cet ajustement permet de mettre en évidence une relation proportionnelle claire entre V_R et h , traduisant une évolution quasi linéaire des vitesses de Rayleigh avec l'augmentation du degré d'hexagonalité. Cette corrélation est formulée par la relation (III.33), qui exprime explicitement la dépendance linéaire de V_R vis-à-vis de h .

$$V_R = 3.930h + 6882.97 \quad (\text{III.33})$$

Il est clairement observé qu'à mesure que le pourcentage d'hexagonalité augmente de 0 à 50 %, la vitesse de Rayleigh V_R croît progressivement, passant de la valeur caractéristique du polytype cubique 3C-SiC à celle, plus élevée, du polytype hexagonal 4H-SiC. Cette évolution traduit l'influence directe de la structure cristalline sur la propagation des ondes de

surface : plus la structure devient hexagonale, plus la rigidité élastique du réseau augmente, entraînant une élévation de la vitesse des ondes de Rayleigh.

Afin de vérifier la validité des valeurs de la vitesse de Rayleigh V_R obtenues à partir des spectres de Fourier (FFT), une seconde approche de calcul a été adoptée. Celle-ci repose sur la formule empirique de Viktorov [51], largement utilisée pour estimer V_R à partir des vitesses des ondes longitudinales (V_L) et transversales (V_T). Cette méthode permet une validation croisée des résultats issus des simulations SAM et offre une évaluation indépendante du comportement de V_R en fonction du pourcentage d'hexagonalité.

$$V_R = V_T \left[0.718 - \left(V_T/V_L \right)^2 \right] / \left[0.75 - \left(V_T/V_L \right)^2 \right] \quad (\text{III.34})$$

En remplaçant les relations (III.21) et (III.22) dans (III.34), on trouve

$$V_R = (4.758h + 7596.799) \frac{\left[0.718 - \left(\frac{4.758h + 7596.799}{8.246h + 11800.026} \right)^2 \right]}{\left[0.75 - \left(\frac{4.758h + 7596.799}{8.246h + 11800.026} \right)^2 \right]} \quad (\text{III.35})$$

En remplaçant les valeurs du pourcentage d'hexagonalité h par 0 % (3C-SiC), 20 % (10H-SiC), 25 % (8H-SiC), 33 % (6H-SiC) et 50 % (4H-SiC) dans la relation (III.35), nous obtenons respectivement les vitesses de Rayleigh suivantes : 6872.21, 6960.91, 6982.41, 7018.63 et 7093.20 m/s. Ces valeurs sont reportées sur la figure III.9.b, qui met clairement en évidence une tendance croissante de V_R avec l'augmentation du pourcentage d'hexagonalité.

Cette évolution traduit le fait que la structure cristalline plus hexagonale du SiC présente une plus grande rigidité élastique, ce qui favorise une propagation plus rapide des ondes de surface. La comparaison entre les vitesses obtenues par la méthode FFT et celles calculées à l'aide de la formule de Viktorov montre une excellente concordance, confirmant ainsi la fiabilité et la cohérence des deux approches. Cette cohérence valide également le modèle de simulation SAM employé, démontrant sa capacité à reproduire fidèlement le comportement acoustique des différents polytypes du SiC.

III.8 Généralisation des paramètres élastiques et acoustiques des polytypes de SiC en fonction du pourcentage d'hexagonalité

Une analyse attentive des relations précédemment établies sur l'influence du pourcentage d'hexagonalité h sur les paramètres élastiques et acoustiques des polytypes de SiC révèle une même tendance linéaire de ces grandeurs vis-à-vis du taux d'hexagonalité. Cette dépendance peut être décrite par une relation du type : $F(h) = \pm \alpha h + \beta$, où α et β représentent respectivement les coefficients caractéristiques de variation et l'ordonnée à l'origine propres à chaque paramètre. Ces constantes traduisent la sensibilité de chaque propriété à la structure cristalline et permettent ainsi de quantifier l'effet progressif de l'hexagonalité sur les comportements mécaniques et acoustiques du SiC.

L'ensemble de ces coefficients est récapitulé dans le Tableau III.2, offrant une vue globale et comparative de la manière dont l'augmentation de h modifie les propriétés du matériau.

Tableau III.2 : Valeurs des constantes caractéristiques dans la relation $F(h) = \pm \alpha h + \beta$ (où F représente : E_g , E , G , B , V_L , V_T , V_R , θ_L , θ_T , θ_R et ΔZ).

Constants		α	β
Energie de gap (eV)	E_g	0.020	2.26
Modules élastiques (GPa)	E	0.45	425,90
	G	0,24	185,57
	B	0,32	200,29
Vitesses (m/s)	V_L	8.25	11800.03
	V_T	4.76	7596.80
	V_R	3.93	6882.97
angles critiques (°)	θ_L	-0.005	7.30
	θ_T	-0.007	11.39
	θ_R	-0.006	12.54
Période spatiale (μm)	Δz	0.219	216.80

Ces paramètres ont été quantifiés à l'aide de relations semi-empiriques exprimées sous la forme générale suivante :

$$F(h) = \pm \frac{f(50) - F(0)}{50} h + F(0) \quad (\text{III.36})$$

L'analyse de cette expression montre que :

- La pente $\alpha = \pm \frac{f(50) - F(0)}{50}$, où $F(50)$ et $F(0)$ traduit la variation du paramètre étudié entre les structures cubique ($h = 0\%$) et hexagonale ($h = 50\%$).
- L'ordonnée à l'origine, $\beta = F(0)$, correspond à la valeur du paramètre pour le polytype cubique (3C-SiC).

Ces formules peuvent fournir des informations précieuses et s'avérer particulièrement utiles pour la caractérisation des polytypes de SiC dont le pourcentage d'hexagonalité est inférieur à 50 %. Afin de mieux comprendre les origines physiques de cette dépendance linéaire, il est essentiel d'examiner l'évolution de la structure atomique des polytypes avec l'augmentation du pourcentage d'hexagonalité, ainsi que l'impact de cette évolution sur les propriétés mécaniques, électroniques et acoustiques du matériau.

Lorsque le pourcentage d'hexagonalité augmente, la proportion d'empilement de type hexagonal (ABAB...) devient progressivement dominante par rapport à celle de type cubique (ABCABC...). Cette transformation modifie localement les distances interatomiques et les angles de liaison, entraînant une réorganisation du réseau cristallin. En conséquence, la compacité structurale s'accroît et la densité de charge covalente est optimisée, ce qui renforce les interactions interatomiques au sein des plans basaux et accroît la rigidité globale du matériau [31,52].

À l'échelle microscopique, ces ajustements géométriques induisent une stabilisation accrue de la symétrie hexagonale et une réduction progressive de l'anisotropie élastique, se traduisant par une augmentation quasi linéaire des modules élastiques (E , G , B) avec le pourcentage d'hexagonalité [53,54]. Cette rigidité renforcée témoigne d'une organisation plus ordonnée des liaisons de premier voisin, particulièrement marquée pour les polytypes intermédiaires tels que 4H et 6H-SiC, où la combinaison d'empilements cubiques et hexagonaux favorise un équilibre optimal entre cohésion et stabilité.

Sur le plan électronique, bien que les environnements locaux des atomes de Si et de C demeurent similaires, l'ordre à moyenne portée est influencé par la séquence d'empilement hexagonal. Cette modification entraîne une redistribution des états électroniques autour des bords de bande, rompant certaines dégénérescences orbitales et induisant des champs de contrainte localisés. De ce fait, l'énergie du gap augmente de manière linéaire avec l'hexagonalité, en accord avec les prédictions *ab initio* et les résultats expérimentaux de spectroscopie optique [55,56].

Du point de vue acoustique, la cohérence cristalline renforcée par l'empilement hexagonal se traduit par une augmentation des vitesses de propagation des ondes longitudinales et transversales (V_L , V_T), en corrélation directe avec la rigidité mécanique du matériau [54,55]. Parallèlement, les angles critiques de réfraction (θ_L , θ_T , θ_R) diminuent avec l'hexagonalité, conformément à la loi de Snell-Descartes, puisque l'accroissement des vitesses acoustiques réduit les contrastes d'impédance aux interfaces [50].

En résumé, le pourcentage d'hexagonalité agit comme un paramètre structuro-fonctionnel fondamental, gouvernant de manière systématique les propriétés mécaniques, électroniques et acoustiques des polytypes de SiC. Il établit un lien direct entre la symétrie cristalline locale et les réponses macroscopiques du matériau, confirmant la validité physique des relations linéaires empiriques formulées dans cette étude.

II.9 Applications potentielles des relations établies

La corrélation mise en évidence entre le pourcentage d'hexagonalité et les propriétés élastiques, électroniques et acoustiques du SiC ouvre des perspectives notables pour la conception de matériaux fonctionnels destinés à des technologies avancées. L'augmentation progressive et maîtrisée du pourcentage d'hexagonalité se traduit par un élargissement quasi linéaire de la bande interdite (E_g), permettant d'ajuster avec précision les performances des composants électroniques de puissance tels que les MOSFETs et les diodes Schottky. Ces dispositifs, essentiels dans les réseaux de communication de nouvelle génération (5G/6G), les convertisseurs d'énergie et les systèmes à haute tension, bénéficient ainsi d'un meilleur compromis entre tension de claquage élevée, rendement énergétique et stabilité thermique [57–60].

Parallèlement, l'évolution des modules élastiques et des vitesses acoustiques en fonction de l'hexagonalité soutient la mise au point de dispositifs à ondes acoustiques de surface (SAW) et de capteurs piézoélectriques de haute précision. Grâce à leur robustesse mécanique et à leur résistance aux environnements extrêmes, les polytypes hexagonaux du SiC représentent des candidats prometteurs pour des applications dans les domaines de l'aérospatial, de l'électronique embarquée et des systèmes microélectromécaniques (MEMS) [61–63]. De plus, l'établissement de relations empiriques simples, telles que $E_g = 0,02h + 2,26$, ouvre la voie à la conception rationnelle de polytypes hybrides aux propriétés ajustables. De tels modèles prédictifs facilitent la synthèse de structures adaptées à des besoins spécifiques, notamment dans les dispositifs quantiques, les mémoires non volatiles, ou encore les composants destinés à l'électronique flexible et à l'ingénierie quantique émergente [64–65].

En somme, le pourcentage d'hexagonalité apparaît comme un paramètre de conception clé, reliant de manière cohérente la structure cristallographique du SiC à ses performances électroniques, mécaniques et acoustiques. Cette approche ouvre de nouvelles perspectives pour l'optimisation de matériaux multifonctionnels à haute valeur ajoutée technologique.

II.10 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié de manière approfondie l'influence du pourcentage d'hexagonalité (h) sur les propriétés élastiques et acoustiques des principaux polytypes du carbure de silicium (3C, 10H, 8H, 6H et 4H-SiC).

L'approche adoptée, fondée sur la microscopie acoustique, a permis d'établir une compréhension à la fois quantitative et qualitative de l'évolution des propriétés mécaniques et électroniques en fonction de la structure cristallographique. Les résultats obtenus montrent que l'énergie de la bande interdite (E_g) ainsi que les modules élastiques (E , G , B) présentent une évolution quasi linéaire avec le pourcentage d'hexagonalité. De même, les vitesses acoustiques longitudinales (V_L) et transversales (V_T) suivent une tendance similaire, traduisant la cohérence entre les propriétés mécaniques et les caractéristiques acoustiques du matériau.

L'analyse des coefficients de réflexion acoustique $R(\theta)$ et des signatures acoustiques $V(z)$ a permis de déterminer les périodes spatiales Δz et, par conséquent, les vitesses de Rayleigh (V_R), qui obéissent elles aussi à une relation linéaire avec h . Les angles critiques associés à l'excitation du différent mode longitudinal (θ_L), transversal (θ_T) et de Rayleigh (θ_R) diminuent

avec l'augmentation de l'hexagonalité, conformément à la loi de Snell-Descartes, confirmant ainsi la cohérence physique des résultats obtenus.

L'ensemble de ces observations a permis d'établir une relation linéaire générale entre le pourcentage d'hexagonalité et les propriétés fondamentales des polytypes de SiC, exprimée sous la forme : $F(h) = \pm \frac{f(50) - F(0)}{50} h + F(0)$. Ces relations semi-empiriques constituent un outil efficace pour la caractérisation prédictive des polytypes de SiC présentant un pourcentage d'hexagonalité inférieur à 50 %. Elles mettent en évidence le rôle structuro-fonctionnel de l'hexagonalité, qui relie la symétrie cristalline à la réponse mécanique et acoustique du matériau.

Ainsi, les résultats obtenus dans ce chapitre apportent une contribution importante à la compréhension du comportement élastique et acoustique du SiC, tout en ouvrant la voie à la conception de matériaux semi-conducteurs optimisés pour des applications électroniques, optoélectroniques et acoustiques avancées.

Références bibliographiques :

- [1] Chen, D., Zhang, H., Zhao, G., Zhu, Z., Yang, J., He, J., Li, J., Yu, Z., & Zhu, Z. (2024). *Langmuir*, 40(24), 12322–12342.
- [2] Veliadis, V. (2024). ECS Meeting Abstracts, PRIME2024*(36), 2519. The Electrochemical Society.
- [3] Xue, K., Niu, L. S., & Shi, H. J. (2011). Silicon carbide-materials, processing and applications in electronic devices, 4-22.
- [4] Cheng, G., Chang, T. H., Qin, Q., Huang, H., & Zhu, Y. (2014). *Nano letters*, 14(2), 754-758.
- [5] Morisada, Y., Miyamoto, Y., Takaura, Y., Hirota, K., & Tamari, N. (2007). *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 25(4), 322-327.
- [6] Kwon, W. T., & Kim, Y. W. (2004). *KSME international journal*, 18(3), 388-394.
- [7] Jones, S., & Menon, C. S. (2014). *physica status solid (b)*, 251(6), 1186-1191.
- [8] Lanni, L. (2012). (Doctoral dissertation, KTH Royal Institute of Technology).
- [9] Askeland, D. R., Prabhakar Phulé, P., Wright, W. J., & Bhattacharya, D. K. (2003). *The science and engineering of materials*. 357-374.
- [10] Alasfar, R. H., Ahzi, S., Barth, N., Kochkodan, V., Khraisheh, M., & Koç, M. (2022). A review on the modeling of the elastic modulus and yield stress of polymers and polymer nanocomposites: effect of temperature, loading rate and porosity. *Polymers*, 14(3), 360.
- [11] Ahmed, R., Mahamudujjaman, M., Afzal, M. A., Islam, M. S., Islam, R. S., & Naqib, S. H. (2023). *Journal of Materials Research and Technology*, 24, 4808–4832.
- [12] Choudhary, K., Cheon, G., Reed, E., & Tavazza, F. (2018). *Physical Review B*, 98(1), 014107.
- [13] Gercek, H. (2007). *Revue internationale de mécanique des roches et des sciences minières*, 44(1), 1–13.
- [14] Käckell, P., Wenzien, B., & Bechstedt, F. (1994). *Physical Review B*, 50(15), 10761.
- [15] Backes, W. H., Bobbert, P. A., & Van Haeringen, W. (1994). *Physical Review B*, 49(11), 7564.
- [16] Fan, J., & Chu, P. K. (2014). *Silicon carbide nanostructures: fabrication, structure, and properties*. Springer.

-
- [17] Yaghoubi, A., Singh, R., & Melinon, P. (2018). *Crystal Growth & Design*, 18(11), 7059-7064.
- [18] Nuruzzaman, M., Islam, M. A., Alam, M. A., Shah, M. H., & Karim, A. M. T. (2015). *International Journal of Engineering Research and Applications*, 5(5), 48-52.
- [19] Liu, Y. F., Cheng, L. F., Zeng, Q. F., & Zhang, L. T. (2015). *Chinese Physics Letters*, 32(8), 087103.
- [20] Lanfant, B. (2014). (Doctoral dissertation, Université Paris Sud-Paris XI).
- [21] Xu, W. W., et al. (2018). *Journal of Alloys and Compounds*, 768, 722-732.
- [22] Zhang, J., Liang, T., Lu, Y., Xu, B., Deng, T., Zhang, Y. & Wang, R. (2022). *New Journal of Physics*, 24(11), 113015.
- [23] Goel, S., Stukowski, A., Luo, X., Agrawal, A., & Reuben, R. L. (2013).. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 21(6), 065004.
- [24] Choyke, W. J., Hamilton, D. R., & Patrick, L. (1964). *Physical Review*, 133(4A), A1163.
- [25] Jagodzinski, H. (1949). *Acta crystallographica*, 2(4), 201-207.
- [26] Ramakers, S., Maruszyk, A., Amsler, M., Eckl, T., Mrovec, M., Hammerschmidt, T., & Drautz, R. (2022). Effects of thermal, elastic, and surface properties on the stability.
- [27] Vlaskina, S. I., Mishinova, G. N., Vlaskin, V. I., Rodionov, V. E., & Svechnikov, G. S. (2013). 8H-, 10H-, 14H-SiC formation in 6H-3C silicon carbide phase transitions. *Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics*.
- [28] Hofmann, M., Zywietz, A., Karch, K., & Bechstedt, F. (1994). Lattice dynamics of SiC polytypes within the bond-charge model. *Physical Review B*, 50(18), 13401.
- [29] Snead, L. L., Nozawa, T., Katoh, Y., Byun, T. S., Kondo, S., & Petti, D. A. (2007). Handbook of SiC properties for fuel performance modeling. *Journal of nuclear materials*, 371(1-3), 329-377.
- [30] Xu, W. W., Xia, F., Chen, L., Wu, M., Gang, T., & Huang, Y. (2018). *Journal of Alloys and Compounds*, 768, 722-732.
- [31] Konstantinova, E., Bell, M. J. V., & Anjos, V. (2008). *Intermetallics*, 16(8), 1040-1042.
- [32] Denteneer, P. J. H., & Van Haeringen, W. (1986). Ground-state properties of polytypes of silicon carbide. *Physical Review B*, 33(4), 2831.
- [33] Thibault, N. W. (1944). *Journal of Earth and Planetary Materials*, 29(9-10), 327-362.

-
- [34] Brudnyi, V. N., & Kosobutsky, A. V. (2017). *Superlattices and Microstructures*, 111, 499-505.
- [35] Backes, W. H., Bobbert, P. A., & Van Haeringen, W. (1994). *Physical Review B*, 49(11), 7564.
- [36] Fan, J., & Chu, P. K. (2014). *Silicon carbide nanostructures: fabrication, structure, and properties*. Springer.
- [37] Zhang, X., & Kioupakis, E. (2023). *Physical Review B*, 107(11), 115207.
- [38] Park, C. H., Cheong, B. H., Lee, K. H., & Chang, K. J. (1994). *Physical Review B*, 49(7), 4485.
- [39] Ching, W. Y., Xu, Y. N., Rulis, P., & Ouyang, L. (2006). *Materials Science and Engineering: A*, 422(1-2), 147-156.
- [40] Briggs, A. (1992). Acoustic microscopy-a summary. *Reports on Progress in Physics*, 55(7), 851.
- [41] R G, M. (1997). Material properties of a sintered a-SiC. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 26(5).
- [42] Doghmane, A., Hadjoub, Z., Alami, K., Saurel, J. M., & Attal, J. (1992). *The Journal of the Acoustical Society of America*, 92(3), 1545-1550.
- [43] Doghmane, A., Al-Suraihy, I., Hadjoub, I., & Hadjoub, Z. (2012). *Materials Science and Engineering*, 28(1), 012037.
- [44] Al-Suraihy, I., Doghmane, A., & Hadjoub, Z. (2013). *Advanced Materials Research*, 811, 77-82.
- [45] Hadjoub, Z., Doghmane, A., Hadjoub, F., & Boumaiza, Y. (1994). *Journal of materials science letters*, 13(10), 759-761.
- [46] Sheppard, C. J. R., & Wilson, T. (1981). *Applied Physics Letters*, 38(11), 858-859.
- [47] Kushibiki, J. I., & Chubachi, N. (1985). Material characterization by line-focus-beam acoustic microscope (Doctoral dissertation, Tohoku University).
- [48] Hadjoub, Z., Alami, K., Doghmane, A., Saurel, J. M., & Attal, J. (1991). *Electronics Letters*, 11(27), 981-982.
- [49] Djemia, P., Roussigné, Y., Dirras, G. F., & Jackson, K. M. (2004). *Journal of applied physics*, 95(5), 2324-2330.
- [50] Ben Slama, S., Chérif, I., & Bessaïs, B. (2021). *Journal of Applied Physics*, 129(13), 135103.

-
- [51] Viktorov, I. A. (1967). Rayleigh and Lamb Waves: physical theory and applications. Plenum Press.
 - [52] Ching, W. Y., Rulis, P., & Ritchie, R. O. (1997). Physical Review B, 56(10), 5775–5786.
 - [53] Hofmann, M., Christen, T., & Schulz, S. (2002). Journal of Applied Physics, 91(7), 5070–5075.
 - [54] Camassel, J., Zielinski, M., & Portail, M. (2000). Materials Science and Engineering: B, 80(1-3), 170–174.
 - [55] Remák, S., Loumagne, H., & Nguyen, H. T. (1999). Ultrasonics, 37(6), 417–422.
 - [56] Matsunami, H., Kimoto, T., & Kondo, H. (1997). Recent advances in SiC technology. Materials Science and Engineering: R: Reports, 20(3), 125–166.
 - [57] Kimoto, T., & Cooper, J. A. (2014). Fundamentals of Silicon Carbide Technology: Growth, Characterization, Devices and Applications. John Wiley & Sons.
 - [58] Neudeck, P. G., Okojie, R. S., & Chen, L.-Y. (2002). High-temperature electronics-A role for wide bandgap semiconductors? Proceedings of the IEEE, 90(6), 1065–1076.
 - [59] Umezawa, H. (2020).. Japanese Journal of Applied Physics, 59, SI0801.
 - [60] Zetterling, C.-M., Östling, M., & Linnarsson, M. (2011). Process Technology for Silicon Carbide Devices. Institution of Engineering and Technology (IET).
 - [61] Pensl, G., & Choyke, W. J. (2001). Physica Status Solidi (a), 186(1), 79–94.
 - [62] Zainullina, M., Ivanov, M., & Kiselev, E. (2021). Materials Chemistry and Physics, 272, 124945.
 - [63] Saddow, S. E. (Ed.). (2012). Silicon Carbide Technology for Advanced Human plications. Springer.
 - [64] Choyke, W. J., Matsunami, H., & Pensl, G. (Eds.). (2004). Silicon Carbide: Recent Major Advances. Springer.
 - [65] Wu, Y., Zhang, L., Yang, X., & Liu, J. (2022). Materials Today Electronics, 3, 100071.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à l'étude et à la caractérisation des propriétés élastiques et acoustiques du carbure de silicium (SiC) à travers une approche théorique et numérique fondée sur les principes de la microscopie acoustique à balayage (SAM). L'objectif de ce travail était d'approfondir la compréhension de la corrélation entre la structure cristalline, l'anisotropie et le comportement acoustique de ses différents polytypes.

L'analyse des coefficients de réflexion $R(\theta)$, des signatures acoustiques $V(z)$ et de leurs spectres FFT a permis de déterminer avec précision plusieurs paramètres acoustiques essentiels, tels que la vitesse des ondes de Rayleigh (V), les angles critiques de propagation et les périodes spatiales (Δz). Il a été démontré que ces paramètres dépendent fortement de la structure cristalline et de l'orientation du matériau.

L'étude de l'effet de l'anisotropie élastique sur les propriétés acoustiques des polytypes du SiC a mis en évidence son influence déterminante sur la propagation des ondes dans le matériau. Les coefficients de réflexion $R(\theta)$, les signatures acoustiques $V(z)$, leurs spectres FFT, ainsi que la vitesse des ondes de Rayleigh (V_R) ont été simulées et analysées pour différents polytypes. Les résultats ont révélé que les variations de la direction cristallographique entraînent des modifications notables des amplitudes et des phases des signaux acoustiques, ainsi que des différences significatives dans les vitesses de propagation.

Même pour le 3C-SiC, à symétrie cubique, une anisotropie marquée a été observée : la vitesse maximale est enregistrée dans la direction $[110]$, suivie de $[100]$, avec un minimum en $[111]$.

Ces résultats démontrent que l'anisotropie cristalline exerce une influence importante sur la réponse acoustique du SiC et qu'elle doit être prise en compte dans toute interprétation expérimentale ou conception de dispositifs acoustiques basés sur ce matériau.

Par ailleurs, l'effet du pourcentage d'hexagonalité h sur le comportement élastique et acoustique des différents polytypes du SiC a été établi de manière quantitative. Il a été

démontré qu'à mesure que le pourcentage d'hexagonalité h augmente, l'énergie de la bande interdite E_g , les modules élastiques (E , G , B), ainsi que les vitesses acoustiques (V_L , V_T , V_R) et les périodes spatiales (Δz) varient de façon quasi linéaire. Cette dépendance a été exprimée sous forme de relations semi-empiriques du type $F(h) = \pm \alpha h + \beta$, offrant ainsi un outil prédictif pertinent pour estimer les propriétés d'un polytype intermédiaire. De plus, les angles critiques associés à l'excitation des modes longitudinaux, transversaux et de Rayleigh diminuent progressivement avec l'augmentation du pourcentage d'hexagonalité h , confirmant la forte corrélation entre le comportement acoustique et la configuration structurale du matériau.

Les résultats globaux de ce travail mettent en évidence le rôle essentiel du polytypisme, de l'anisotropie cristallographique et du pourcentage d'hexagonalité dans la détermination des propriétés élastiques et acoustiques du SiC. Les corrélations établies entre la structure, les paramètres élastiques et acoustiques contribuent à une meilleure compréhension des mécanismes fondamentaux régissant la propagation des ondes dans ce matériau et constituent une base solide pour le développement et l'optimisation de dispositifs acoustiques à base de SiC.