

III-1. INTRODUCTION:

Dans les dernières années de l'évolution de la recherche scientifique dans des nombreux domaines être apparent des nouvelles méthodes s'empressant à la simulation numérique des divers phénomènes.

Les méthodes de simulation que nous s'intéresse (l'interactions atomiques dans les solides) commencent à se provenir progressivement dans les débuts des années 60. Elles sont un des outils de modélisation théoriques qui permettent la simulation de prévisions réalisés afin de pouvoir analyser des résultats futurs (logicielle Kalypso) et réduire les erreurs d'approximations traiter un problème analytique.[1]

A présent, il est remarquable que l'existence de plusieurs choix de logiciel était suffisamment satisfaisantes. On peut classer ces codes en deux méthodes de calcul.[2]:

- Méthode de dynamique moléculaire.
- Méthode d'approximation des collisions binaires.

Les calculs faisant appel au minimum d'approximations sont les calculs de Dynamique Moléculaire (DM).

III-2. Dynamique moléculaire et l'approximation des collisions binaires :

La dynamique moléculaire simule une cible de dimensions finies dont tous les atomes soient pris en compte [2] durant la cascade de collisions « un ensemble des particules », tel qu'on peut prévoir des interactions simultanés avec un nombre d'atomes, et qu'il peut arriver que deux atomes ou moléculaires se rapproche exceptionnellement à une distance infinitésimale, et il se produit alors une interaction plus ou moins violente.

Ce genre de modèle donne des résultats rapprochés à la réalité, mais on perd plus beaucoup de temps de calculs [3].

Pour traiter ces problèmes de temps de calcul, on trouve une autre méthode qui calcule de façon classique « l'approximation des collisions binaires BCA [3] (Binary Collision Approximation) » dont, on considère pas des interactions avec tous les atomes cible, cependant, on enforce uniquement à l'étude en régime de collision simple (ion + atome), et tous les événements seront considérés distinctement les uns des autres. Ces simulations reproduisent des issues très satisfaisantes, ainsi qu'elles permettent un grand gain de temps de calcul.

Important :

Les simulations de type **(BC: BINARY COLLISION)** utilisant des programmes pour déterminer les compositions et les structures des atomes de la cible, ainsi que le suivi temporel du cascade de collisions n'est pas effectuée.

III-2-1 Méthodes de calcul :

L'utilisation efficace d'un nouveau outil repose sur la connaissance de ces possibilités, les ordres de grandeurs des systèmes accessibles à la puissance des ordinateurs permettent d'appréhender le type de phénomène que l'on veut étudier grâce à la dynamique moléculaire. [2] la dynamique moléculaire consiste à l'intégration numériquement des équations différentielles de mouvement des atomes (le traitement par la mécanique classique de Newton), et le choix de potentiel d'interaction est rattaché à la méthode de simulation utilisée.

L'équation d'évolution du système peut s'écrire formellement comme :

$$(iii-1) m_i \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \vec{F}_i(\vec{r}_i(t))$$

Avec :

- m_i : La masse atomique de particule i .
- F_i : Force exercée sur la particule
- r_i : Position de la particule i .

La force s'exerce à chaque atome dans le cas de potentiels paires est de la forme :

$$\vec{F}_i = - \sum_j \vec{\nabla} V(r_{ij}) \quad (iii-2)$$

Avec r_{ij} : désigne le parcours inter-particules i et j .

Pour intégrer numériquement des équations différentielles, il est important de les discrétiser aux moments de temps très courts (le pas d'intégration). Ainsi que le problème de résolution des systèmes d'équations différentielles engendrées des plusieurs algorithmes insistants sur des approximations de l'intégration sur une variable continue par une sommation sur une variable qui prend des valeurs discrètes du type:

$$t_i = (i-1)dt \quad (iii-3)$$

Où : dt : le pas d'intégration dont la valeur est petite mais finie.

Cette intégration est vérifiée par des algorithmes comme : l'algorithme de Range-Kutta Gill , la méthode des différences centrales, méthode d'Euler - Cauchy , méthode de Verlet, méthode de Liouville et le modèle des sphères durs .

Ces grands variétés de choix sont a priori et limités par les lois fondamentales de la dynamique classique qui sont généralement dépendent à la conservation de l'énergie de système au cour du temps, de l'impulsion totale et du moment angulaire.

L'algorithme considéré doit être harmonique à ces conditions et à un autre coté un paramètre généré les variations du pas de temps, qui se traduisent par une carte dans l'espace des $6N$ coordonnées (3d'espace et 3de vitesse par particule).

III-2-2. Algorithme de Verlet :

L'algorithme proposée par L-Verlet, historiquement [4]est l'un des premiers introduit , et il reste encore l'un des plus utilisé actuellement .

Pour des raisons de complexités on considère un système conservative possède un nombre de particules de densité N , et notant r un vecteur a $3N$ composantes (r_1, r_2, \dots, r_N) avec r désigne le vecteur position.

Par la loi dynamique, l'équation de mouvement s'écrit :

$$m d^2r/dt^2 = f(r(t)) \quad (\text{iii-4})$$

En faisant un développement de Taylor.[5] ,on aura :

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{f(r(t))}{2m} (\Delta t)^2 + \frac{d^3r}{dt^3} (\Delta t)^3 + o(\Delta t)^4 \quad (\text{iii-5})$$

De même :

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + \frac{f(r(t))}{2m} (\Delta t)^2 - \frac{d^3r}{dt^3} (\Delta t)^3 + o(\Delta t)^4 \quad (\text{iii-6})$$

Par la sommation de (iii-5) et (iii-6), nous trouvons :

$$r(t + \Delta t) + r(t - \Delta t) = 2r(t) + \frac{f(r(t))}{m} (\Delta t)^2 + \vartheta((\Delta t)^4) \quad (\text{iii-7})$$

Le calcul de la nouvelle position effectué avec une précision d'ordre 4, cette algorithmme n'utilise pas des vecteurs des vitesses des particules pour calculer la nouvelle position ; on peut toute fois déterminer celles - ci de la façon suivant:

$$V(t) = \frac{r(t+\Delta t) - r(t-\Delta t)}{2\Delta t} \vartheta((\Delta t)^2) \quad (\text{iii-8})$$

III-2-3. Conditions aux limites périodiques :

Pour simuler un milieu fini, on utilise dans une simulation des conditions aux limites périodiques. Le calcul de la force interagissant entre deux particules i et j se fait souvent entre l'image de j notée (j') la plus proche voisin de particule i et non entre les deux particules appartenant à la boîte simulation ci-dessous.

Important :

Avec les conditions aux limites périodiques, la distance la plus courte entre i et j n'est pas r mais r' .

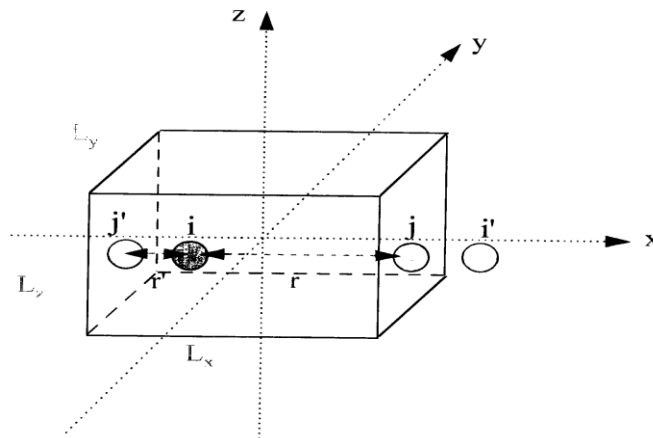


Figure III.1 : Boite de simulation.

III-2-4. La limite de la dynamique moléculaire :

A titre d'information, la limite intrinsèque de la modélisation Monte Carlo de ce qu'on ne considère pas la dynamique 'réelle' du système. Pour des systèmes continus définis apartir d'un

Hamiltonien classique, il est probable de résoudre les équations du mouvement pour un ensemble de particules.

Pour des systèmes atomiques en dehors de la région critique, cela est très suffisant, mais se révèle très limitant pour des édifices moléculaires plus complexes comme les molécules biologiques.

III-3. Codes et logiciels de la dynamique moléculaire :

Le suivi temporel du système (ion+atome) est effectué en intégrant les équations dynamiques du mouvement de Newton. Les données d'entrée sont : les positions et les énergies initiales de l'injecteur et de l'ensemble d'atomes constituant la matière, la plupart du temps, on suppose donc que le réseau a une structure cristalline.

Nous nous intéressons plus particulièrement aux logiciels utilisant la (DM). Ainsi que nous allons étudier KALYPSO beaucoup qui est le logiciel de référence.

III-3-1. Présentation de Kalypso :

L'un des logiciels de simulation les moins célèbres est Kalypso, il est disponible gratuitement. Kalypso effectue de simulation particulièrement performante en temps de calcul.

Ce logiciel de type Monte Carlo simule l'interaction entre un ion (un gaz rare (Ar, Xe, Kr, ...)) simple ou un atome métallique. [5] et un solide, en se basant sur la méthode de « Dynamique Moléculaire ». Un grand nombre de collisions est générée, ce qui permet d'obtenir des données statistiques comme : le rendement de la pulvérisation, les profondeurs de l'injection des ions, et encore le déplacement des atomes recueils.

Les paramètres physiques d'entrée de Kalypso sont les caractéristiques de l'ion et du solide. Ainsi, ce code était spécifié par 6 fichiers input : cible, projectile, run, model, impact et inelastic. Ces fichiers sont générés par un programme utilitaire appelé « SPIDER ». Pour l'exécution des fichiers "input", on lancera le programme (Kalypso). En fin le traitement et l'interprétation des résultats effectués par le programme (Winnow) .

III-3-2. Les types de potentiels utilisés par le kalypso :

A vu analytique, le potentiel d'interaction pour tout couple d'atomes est une fonction du seul paramètre (le rayon réduit). Le Kalypso utilise un potentiel dit le potentiel de coulomb écranté est définie par l'expression :

$$V(r_{ij}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \sum_{k=1}^N c_k \exp(-b_k r_{ij}/a) \quad (\text{iii-10})$$

Où l'index d'addition k varie de 1 à 3 pour les potentiels Molière, et de 1 à 4 pour le potentiel ZBL (Ziegler-Biersack-Littmark), et c_k , b_k et a (le rayon d'écrantage) sont les coefficients définis différemment pour les divers potentiels

III-3-3. Méthode de Monte Carlo :

Parmi les techniques de simulation, pour objectif de modélisation de l'interaction ion-cible, sont plus appropriés pour l'étude des collisions binaires [7]. La méthode de Monte Carlo considère que la cible à l'état amorphe, ainsi que leur constituants étaient susceptibles particulièrement à les collisions binaires. Ce type de code a une bonne statistique, nécessite des temps très réduits [8].

III-3-4. Les codes basés sur l'approximation des collisions binaires :

Elles sont plus simple à l'usage, une durée de temp très raisonnable. On cite deux composés de codes principaux liés à l'approximation des collisions binaires :

III-3-4-1. Cas des cibles amorphes :

Le considérablement de cible est toujours a un structure "désordonnée", les deux particules de système ion-cible étaient isolées, tel que la potentielle compagne est de type "colombien écrantée" qui joue un rôle de simulation d'un groupe de collisions "un cascade de collisions", et la pulvérisation induite.

III-3-4-2. Cas des cibles mono-cristallines :

Ce type de logiciel a l'objectif de traiter la cible ex: code de Marlowe [9], et les emplacements atomiques dans la cible doivent être données.

En point comparative, la différence entre ces codes et le code Kalypso intervenant sur la possibilité d'introduire une dépendance temporelle, ainsi que la simulation des collisions entre deux atomes en mouvement dans la cascade.

Le tableau ci -dessous donne les principales particularités de ces deux groupes de codes :

BCA		Dynamique Moléculaire
BCA: Approximation des Collisions Binaires		Toutes les interactions sont considérées.
		KALYPSO
Cibles amorphes Monte Carlo	Cibles cristallines et aussi amorphes	
TRIM (ne tient pas compte de la structure de la cible)		MARLOWE (cristallographie de la cible et prend en charge la température de la cible)
Temps de calcul		
Rapides		Longs
Bonne statistique		
pour des énergies variables allant de quelques eV jusqu'au KeV		uniquement à faible énergie
Paramètres d'entrée		
énergie de liaison, de surface et de déplacement, le nombre d'ions incidents, l'angle d'incidence,...		position et énergie du projectile et des atomes de la cible + potentiel d'interaction des atomes de la cible avec eux-mêmes et avec l'ion incident

Références

- [1] D.W. Hermann, 'Computer Simulation Methods in Theoretical Physics', Springer, Berlin, 1990.
- [2] W .Eckstein, Computer simulation of ion-solid interaction (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg and New York, 1991).
- [3] G. Betz, K. Wien, "Energy and angular distributions of sputtered particles", International J. Mass Spectrum. and Ion Processes ' 140, 1-110 (1994).

- [4] W .Heiland,"Interaction of low-energy ions, atoms and molecules with surface" ,dans Interaction of charged particles with solids and surfaces,publié par A. Gras-Marti, H.M.Urbassek, N.R. Arista et al. (Plenum Press, New York and London, 1991), Vol. 271,pp. 718.
- [5] M. T. Robinson, phys Rev B9, 12, 1974. [3] W .L. Morgan, "Universal bespattering curve" , Appl. phys. Letts. 55(2), 106-108(1989).
- [6] K. Binder, J. Hogback, W. Kobe, W.Paul, F.Varnik,'Molecular dynamics simulations', J. Phys.Condens. Matter 16 (2004) S429–S453.
- [7] M.A. Karolewski, 'Kalypso: a software package for molecular dynamics simulation of atomic collisions at surfaces', Nuc. Inst.Meth in Phy. B 230 (2005) 402–405.
- [8] J.B. Gibson, A.N. Gland, M. Mailgram, G.H. Vineyard, Phys. Rev. 120 (1960) 1229.
- [9] H.Mdvin, K. Paula, A. Whitlock 'Monte Carlo methods', John Wiley and Sunshine. New York, 1986.
- [10] UT-MARLOWE 4.1 Manual.