

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITE d'ADRAR
FACULTE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
DEPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIERE



MEMOIRE DE FIN D'ETUDE en vue de l'obtention du diplôme de
MASTER en PHYSIQUE DES MATERIAUX

Thème

Contribution à la Modélisation de Potentiel Hybride
Pour la Simulation par Dynamique Moléculaire des
Matériaux Solides

Soutenu le : février 2015

Présenté par :

Mr Maouedj Rachid
Mr Boussaid Mohammed
Mr Omari Boumadiane
Mr Kabbab abdelhamid

Membres de jury :

Président	URERMS
Examineur	Univ.d'ADRAR
Encadreur	Univ.d'ADRAR
co- encadreur	Univ.de Batna

Année universitaire : 2013/2014

Remerciement

Avant tout, louange à **ALLAH** l'Éternel est un secours qui ne manque jamais dans la détresse, de toutes ces boutés, puis de nous avoir donné tout le courage pour terminer ce modeste travail qui a été réalisé à l'Université d'Adrar. Sous la direction de **Mr Omari .B**

On exprime vivement nos vifs remerciements, nos profondes gratitudee et nos reconnaissances à notre encadreur **Omari .B**, **Maitre-assistant A** à l'université D'adrar qui a dirigé ce travail. La pleine confiance qu'elle nous accordée dès le début, nous a permis de progresser régulièrement.

Nous somme redevables pour l'élaboration de ce mémoire à **Mr Maouedj .R** et **Boussaid . M** pour l'honneur qu'ils nous font e n acceptant de jurer la commission d'examen de notre travail.

Nos reconnaissances vont tout spécialement à **Mr Kabbab. A** pour sa générosité, ses discussions scientifiques que nous avons pu avoir, ses justes critiques témoignant de l'intérêt qu'il lui portait ont été un encouragement permanant dont il a su faire preuve malgré ses charges académiques et professionnelles.

Notre très grandes considérations à **M^{eme} Elkharraz M** pour le temps qu'il nous consacré, leur encouragement et sa grande patience avec laquelle ils ont accompagné notre travail tout le long de cette mémoire.

Nous tenons aussi à remercies **Mr Nadjar. A** pour leur amitié, leur soutien inconditionnel, ses précieux conseils, sa franchise et sa grande disponibilité pour l'aboutissement de ce travail.

Nos remerciements s'adressent également tous ceux et celles qui nous ont aidés d'une façon ou d'une autre à l'élaboration de ce travail surtout au **Pr Belhadi. M.**

DEDICACES

J'ai le grand honneur de dédier ce modeste travail à :

Mes très chers parents, et n'ont considérablement aidé et encouragé à pour suivre mes études supérieures et qui sont également sacrées de ma réussite.

A ma femme, celle dont je partage ma vie, pour leur dévouement, leurs encouragements et leurs sacrifices.

A mes frères et mes sœurs.

A tous ma famille

A Mon Binôme Abdelkader et sa famille, en leurs espérant le plein succès dans leurs vie.

A tous mes amis chaque un par son nom.

A tous les collègues et promotionnaires. Soyez toujours guidés par des actions lucides, courage dans la vie et bonne chance.

ABDELLAH

DEDICACES

Aux êtres les plus chers que j'ai au monde ; qui m'ont donné un magnifique modèle de labeur et de persévérance. J'espère qu'ils trouveront dans ce travail toute ma reconnaissance et tout mon amour.

Mes très chers parents

A l'esprit de ma grand-mère, qui mourut une semaine avant de ma soutenance.

A ma femme Qui n'a jamais cessé de me soutenir pour que je puisse finir mes études et avoir une bonne formation et surtout être le meilleur et à qui je voudrais exprimer mes affections et mes gratitude.

Que Dieu le tout puissant vous accorde longue vie, et qu'il puisse me donner les moyens nécessaires pour affronter les épreuves de la vie :

Mes très chers frères et ses femmes Mohammed et Halima, Youcef, Abdelkarime ;

Mes très chères sœurs et ses et ces époux: Fatima et Ahmed, Amina et Ahmed, Aziza et Khawla ;

Mes anges Salsabile et koussaye ;

Mes chères oncles, tantes cousins et cousines.

A mon binôme Abdallah et sa famille, en leurs espérant le plein succès dans leur vie.

Mes amis Nadir et Mustapha pour son amour, pour les moments passé ensemble et tous les excellents souvenirs.

A toute les familles Elkharraz , Boukar, boukadi, Benabderrahmane

A tous les collègues et promotionnaires. Soyez toujours guidés par des actions lucides, courage dans la vie et bonne chance.

Abdelkader

Liste des Figures

Figure		Page
1	Boite de conditions aux limites.....	11
2	Boite de simulation primitive contenant 3 atomes entourée de ses 8 répliques virtuelles en 2D.....	12
3	L'image minimum (en pointillé rouge) est centrée autour de la particule 1. Elle a la même taille et contient le même nombre de particules que la boite primitive dont la longueur est supérieure à 2 fois le rayon de coupure r_c du potentiel d'interaction entre particules	13
4	Comparaison entre les potentiels des interactions: covalente(e^{-r}), ionique ($1/r$) et van der Waals ($1/r^6$). A grandes valeurs de r , l'interaction de Van der Waals est plus forte que l'interaction covalente. L'interaction de Coulomb domine à tous les distances.....	19
5	Zones de forces répulsion et attraction.....	22
6	La loi de Hooke , approximation de la force du ressort expérimental.....	24
7	Graphe de $U(x) = \frac{1}{2}kx^2$	24
8	Potentiel de paire (a) et fonction entourage (b) d'un potentiel EAM de Zirconium	27
9	Le potentiel EAM pour deux atomes en interaction du même type et son 1er dérivé. Ici, les paramètres de : Al $\epsilon = 3.58$ eV , $r_0 = 2.86$ °A, $\alpha = 4.61$ sont utilisés	28
10	Exemple d'un potentiel de Lennard-Jones	31
11	(a) les potentiels de Buckingham et de Lennard-Jones (ligne pointillée). (b) La catastrophe de Buckingham: le potentiel de Buckingham chute rapidement à moins l'infini à courtes séparations	32
12	potentiel de paire de Lennard-Jones (LJ) comparé au potentiel de Morse (M) potentiel et à un potentiel harmonique	34
13	Les Fabrications De L'aluminium	38
14	Structure CFC, où a est constante de réseau	39
15	Courbe contrainte – déformation typique d'un matériau ductile	42
16	Relation entre l'interaction interatomique et la distance	43
17	Composantes du tenseur des contraintes	45

18	les positions idéales des atomes du premier et deuxième voisin concernant notre potentiel hybride	50
19	Coupe dans le réseau, premier et deuxième voisin de l'atome étudié dans la structure CFC	51
20	Longueur de la cellule et l'espace entre deux atomes voisins dans la structure CFC	52
21	schéma des interactions des premiers et deuxièmes voisins dans la structure CFC	52
22	interface du programme de simulation	53
23	la force appliquée dans le réseau	56
24	Les variations de la longueur et le largeur, selon la force	56
25	les courbes $\sigma_x=f(\epsilon_x)$, - $\epsilon_y=f(\epsilon_x)$, - $\epsilon_z=f(\epsilon_x)$, théoriquement	57
26	les courbes : $x=f(t)$, $y=f(t)$, $z=f(t)$, d'une seule atome, dans le cas : $dt=2.9e-2$; $N=365$; ($maxstp=5000 \Rightarrow t=145$ fs).....	58
27	la courbe : $r=f(t)$, dans le même atome précédent, dans le cas : $dt=2.9e-2$; $N=365$; ($maxstp=5000 \Rightarrow t=145$ fs)	58
28	la courbe : $a=f(t)$, dans le cas : $dt=2.9e-2$; $N=365$; ($maxstp=5000 \Rightarrow t=145$ fs).....	59
29	simulation de la courbe $\sigma_x=f(\epsilon_x)$	60
30	simulation de la courbe : - $\epsilon_y=f(\epsilon_x)$	60

Liste des Tableaux

Tableau		Page
1	Types et nature de l'attraction et de la répulsion interatomique	21
2	Buckingham paramètre potentiel réglé pour différents matériaux non-liés	26
3	paramètre du potentiel de Lennard-Jones réglé pour différents matériaux	32
4	paramètres du potentiel de Morse réglé pour différents matériaux	34
5	caractéristiques mécaniques	40
6	Informations générales du l'aluminium	40
7	Propriétés atomiques du l'aluminium	41
8	Propriétés physiques du l'aluminium	41
9	Indices pour basculer entre tenseur et la notation Voigt	46
10	L'ordre de grandeur des coefficients élastiques de quelques matériaux courants	48
11	comparaison entre : a expérimental et a simulé	59
12	Les valeurs simulées de module de Young et coefficient de poisson	61
13	comparaison entre les valeurs expérimentales et les valeurs simulées	61

Liste des abréviations

Chapitre I

$\vec{F}_i(t)$	la force totale qui s'applique à l'atome i
m	La masse d'atome
$\vec{\nabla}_{r_i} U$	Rotation de U l'énergie potentielle
Δt	le pas de temps
\vec{r}_i^p	la $i^{\text{ème}}$ dérivée par rapport au temps des valeurs prédites
\vec{r}_i^c	Les valeurs corrigées

Chapitre II

$s^2 p, sp^2$	la configuration électronique des spins
U, ϕ, v	l'énergie potentielle
Q	La charge électronique
$\Delta E(r)$	Perturbation d'énergie
K	énergie moyenne d'interaction électrostatique d'atomes
A	l'énergie échange
Z	la charge de noyau
α_0	la polarisabilité électronique
I	le potentiel d'ionisation
σ et A	constantes ajustables
Z_1 et Z_2	les charges des particules concernées
x_0	la position d'équilibre
x	la position de masse
K	La constante d'élasticité du ressort
ε	la profondeur du puits de potentiel
r_m	la valeur correspondante de la distance r entre deux atomes.
$\lambda, \lambda', \beta, \alpha$	les constantes du potentiel de Buckingham

$\rho_{h,j}$	la "densité électronique" locale du système hôte. (EAM)
ρ_j	la densité électronique d'un atome j proche de i. (EAM)
$F_i(\rho_{h,i})$	la fonction d'entourage, (EAM)
ε	énergie de sublimation, (EAM)
r_0	séparation à l'équilibre (EAM)
α	facteur de décroissance exponentielle (EAM)
θ_{jk}	l'angle entre r_j et r_k (SW)
θ_{ijk}	l'angle entre r_i et r_k (SW)
θ_{ikj}	l'angle entre r_i et r_j (SW)
ε, σ	Constante du potentiel de Lennard-Jones
ε	en fonction de la température de fusion (Morse)
r_m	représente la séparation intermoléculaire (Morse)

Chapitre III

A	l'aire de la section transversale
L	la longueur du cristal 1D d'équilibre
u	changement de la longueur du cristal
σ	La contrainte
ε	la déformation
$\sigma_{xx} \sigma_{yy} \sigma_{zz}$	Contrainte de compression
$\sigma_{xy} \sigma_{yx} \sigma_{yz} \sigma_{zy}$ $\sigma_{xz} \sigma_{zx}$	Contrainte de cisaillement
C	tenseur de rigidité
E	module de Young
ν	Coefficient de Poisson

Table des Matières

Introduction générale	02
-----------------------------	----

Chapitre I

La Dynamique Moléculaire

I.1 Introduction	06
I.2 Principes de bases	06
I.3 Algorithmes d'intégration.....	07
I.3.1. Algorithme de Verlet.....	08
I.3.2. Algorithme producteur/correcteur	09
I.4 Les conditions aux limites.....	11
I.5 Critère de minimum image	12
I.6 Conclusion.....	13

Chapitre II

Interactions Interatomiques et Fonctions D'énergie Potentielle

II.1 Interactions Interatomiques	
II.1.1 Liaisons Atomique	15
II.1.2 Liaison ionique hétéro-polaire	15
II.1.3 Liaison covalente Homopolaire	16
II.1.4 Liaison de Van der Walls	18
II.1.5 Liaison métallique	20
II.1.6 Nature de Répulsion	20

II.2 Fonctions D'énergie Potentielle	
II.2.1 Définitions et Associations	22
II.2.2 Le potentiel de Hooke	23
II.2.3 Le potentiel de Buckingham	25
II.2.4 Le potentiel de EAM.....	26
II.2.5 Le potentiel de Stillinger	28
II.2.6 Le potentiel de Stillinger-Weber	29
II.2.7 Le potentiel de Biswas-Hamann	30
II.2.8 Le potentiel de Lennard-Jones.....	31
II.2.9 Le potentiel de Morse	33
II.3 Conclusion	35

Chapitre III

Etude Bibliographique sur L'aluminium et Théorie de L'élasticité

III.1 Etude Bibliographique Sur L'aluminium	
III.1.1 Obtention de L'aluminium	37
III.1.1.1- La Bauxite	37
III.1.1.2- L'alumine	37
III.1.1.3- L'aluminium.....	37
III.1.1.4- Principaux Stades Et Flux Dans La Fabrication De L'aluminium	37
III.1.1.5 - Quelques Chiffres.....	39
III.1.2 L'aluminium	39
III.1.2.1- Principales propriétés	39
III.1.2.2 - Emploi	40
III.1.2.3 - Caractéristiques Mécaniques	40
III.2 Theorie De L'elasticite	
III.2.1 Définitions et Associations.....	41
III.2.2 Les constantes élastiques.....	43

Chapitre IV

Discussion des Résultats de la Simulation

IV.1 Potentiel et Forces Interatomiques	50
IV.2 Explication de la Simulation	52
IV.2.1 Initialisation	54
IV.2.2 Equilibration	54
IV.2.3 Prédiction des données	55
IV.2.4 Calcul des constantes élastiques	55
IV.3 Les Résultats	57
IV.3.1 Position des Atomes	57
IV.3.2 La constante de réseau	59
IV.3.3 Les Constantes élastiques	60
Conclusion	63

Introduction générale

Etablir le lien entre l'échelle microscopique et le comportement mécanique macroscopique d'un matériau est un défi important de la physique du solide. En particulier, lorsqu'un matériau métallique est soumis à une sollicitation mécanique, l'identification des mécanismes microscopiques responsables de l'existence de cette limite, dite d'élasticité, est cruciale car elle entre en jeu dans la conception et le dimensionnement de toutes les structures métalliques.

Le concept de simulation numérique est apparu au début des années 1940, il consiste à étudier numériquement le comportement physico-chimique d'un échantillon de matière sur la base d'un modèle d'interaction entre les atomes ou les molécules. Dans les années 1960, des potentiels réalistes furent introduits dans les simulations. Rahman a réalisé les premières simulations dans un système de 864 particules interagissant avec un potentiel de Lennard-Jones[1].

Aux années 1980, des algorithmes ont été développés pour réaliser des simulations dans d'autres ensembles que l'ensemble micro-canonique, l'apparition de machines vectorielles a permis de traiter des systèmes dans un état hors équilibre contenant plusieurs centaines de milliers de particules.

Durant la dernière décennie, l'effort de recherche dédiée à l'étude du comportement des matériaux. Le terme de *nanotechnologie* peut généralement être utilisé pour qualifier la recherche et l'utilisation technologique des propriétés de la matière à des échelles inférieures à un millier de nanomètres. Les microscopes électroniques à haute résolution qui sont aujourd'hui disponibles permettent de discerner les atomes.

En science des matériaux des progrès importants ont pu être réalisés en combinant la simulation numérique à plusieurs échelles et les expérimentations. En effet, grâce à l'augmentation permanente de la puissance des supercalculateurs ainsi que de la connaissance grandissante des comportements des matériaux.

En ce qui concerne les solides, les recherches sur le comportement à l'échelle atomique ont d'ores et déjà conduit à certains succès dans la conception de composants nanométriques.

Bien que l'échelle pertinente soit l'échelle atomique pour la plupart des mécanismes impliqués dans le comportement de ces matériaux, l'échelle nécessaire pour obtenir un comportement « moyen » représentatif est en général bien supérieure aux capacités de calculs actuelles. En effet, les méthodes de dynamique moléculaire classiques permettent tout juste

d'atteindre le micromètre cube (quelques dizaines de milliards d'atomes) sur les calculateurs les plus puissants (nombre de CPU > 1000), une échelle encore inférieure à celle nécessaire pour décrire un comportement représentatif pour la plupart des matériaux (> quelques dizaines de micromètres cubes) [1].

La modélisation des matériaux est utile à différents niveaux. On peut représenter un matériau de différentes manières, avec différents modèles. Selon la propriété que l'on désire observer et le degré de précision voulu. La distinction porte naturellement sur l'échelle à laquelle on modélise le matériau sachant que chaque représentation possède des défauts et des avantages

L'échelle macroscopique, qui est l'échelle de l'observable, dispose d'une description continue de la matière. En effet, les propriétés de la matière convergent vers une telle description pour des phénomènes macroscopiques. On utilise couramment cette vision dans l'industrie. Dans ce domaine, on utilise le modèle continu d'élasticité que l'on discrétise par la méthode des éléments finis [1].

À une échelle plus fine, comme l'échelle microscopique, on décrit la matière de manière discrète pour obtenir une meilleure précision indispensable si on veut capturer les phénomènes de déformations tels les fissures ou les dislocations. Des lors, les simulateurs gèrent chaque atome et les déplacent à l'aide d'un champ de force tiré de la physique. Mais l'échelle atomique n'est pas actuellement utilisable pour des objets réels à cause des temps de calcul prohibitifs compte tenu de la taille des échantillons utilisés dans l'industrie. Par exemple, un cristal d'argon à une température de 0 Kelvin (zéro absolu) d'un centimètre cube comporte 3.10^{20} atomes. Néanmoins la précision apportée par la dynamique moléculaire se révèle incontournable. Par exemple, l'étude des fissures, des nano structures, ou encore des problèmes de frictions ne peuvent trouver actuellement une précision adéquate que dans la définition atomique. [1]

L'idée principale de la DM est de résoudre les équations de mouvement des particules numériquement avec un pas de temps choisi convenablement. En effet, lorsque les atomes bougent, les forces se changent et ainsi le pas de temps doit être très petit, autour de 10^{-15} secondes. Il peut être variable dans certains cas (ex. dans des problèmes de perturbations). Par conséquent, il est nécessaire de choisir le bon pas d'intégration afin de résoudre convenablement les équations de mouvement [2].

Dans ce travail nous nous sommes intéressés d'étudier la modélisation moléculaire spécifiquement et la simulation moléculaire d'un solide en utilisant l'ordinateur, comme étant indispensable pour le langage MATLAB. Notre travail fait l'objet un exemple comme

l'aluminium. D'après notre travail nous avons
potentiel : en traitant l'une des méthodes connues
matériau soit plus stable. On extrait les constantes
obtenait expérimentalement

Le travail est exposé en quatre chapitres

- ✓ Le premier chapitre présente la
particulièrement les principes de base
- ✓ Le second chapitre présente les interactions
potentielle.
- ✓ Le troisième chapitre consiste l'étude
l'élasticité, en particulier les constantes
- ✓ Le quatrième chapitre concerne la diffusion

l'aluminium. D'après notre travail nous avons hybride le potentiel pour obtenir un nouveau potentiel ; en traitant l'une des méthodes connues où on l'a appliqué sur l'aluminium pour que le matériau soit plus stable. On extrait les constantes élastiques par le virtuel réseau dont on les obtenait expérimentalement

Le travail est exposé en quatre chapitres.

- ✓ Le premier chapitre présente la définition de la dynamique moléculaire, particulièrement les principes de base et quelques Algorithmes d'intégration.
- ✓ Le second chapitre présente les interactions interatomiques et les fonctions d'énergie potentielle.
- ✓ Le troisième chapitre consiste l'étude bibliographique sur l'Aluminium et théorie de l'élasticité, en particulier les constantes élastiques.
- ✓ Le quatrième chapitre concerne la discussion des résultats de la simulation.

Chapitre I :

La Dynamique Moléculaire

I.1 Introduction :

La dynamique moléculaire (DM) est une technique de simulation par ordinateur qui utilise la deuxième loi du mouvement de Newtons pour modéliser les propriétés atomiques. Ces propriétés comprennent les positions atomiques, les vitesses, et les accélérations des particules dans un système d'évolution au cours du temps. La connaissance de ces propriétés nous permet de calculer les caractéristiques physiques du système y compris l'énergie cinétique et potentielle, et la température du système. Etant donné que chaque particule se déplace en trois dimensions, (x, y, z), il y a $3N$ coordonnées de position qui doivent être mises à jour à chaque pas de temps, où N est le nombre de particules dans le système. De même, Les forces qui agissent sur les particules induisent des quantités de mouvement dans les trois dimensions, leur mise à jour sur les $3N$ dimensions à chaque pas de temps est nécessaire. Il s'ensuit que nous travaillons dans un espace de phase $6N$ dimensions [3].

La DM est utilisée pour modéliser des systèmes atomiques qui sont de grandes dimensions et complexes, il fournit un moyen de voir comment les systèmes évoluent au cours du temps. Il y a des avantages et des inconvénients à travailler avec la simulation de DM. Les avantages incluent l'essai de nouvelles idées théoriques sur les systèmes trop complexes à travailler par la main, et fournit une vérification et une explication des données de laboratoire expérimental. Dans une simulation, il est également possible de modéliser de façon sûre et peu coûteuse des conditions extrêmes qui peuvent être difficiles à un véritable laboratoire [4]. L'objectif est de faire de chaque simulation aussi réaliste que possible [5].

L'un des principaux inconvénients d'une simulation de DM est qu'elle peut prendre beaucoup de temps. Elle peut aussi être très coûteuse en raison des valeurs qui doivent être stockées (les positions et les vitesses de chaque particule), et le nombre de calculs qu'il faut compléter afin de réduire l'erreur de calcul. En effet, la simulation d'un gramme de matériau est complètement au-delà de la portée de la technologie actuelle ou prévisible [5].

I.2 Principes de bases :

Le but de la dynamique moléculaire est de reproduire, à partir d'un ensemble de positions et de vitesses initiales, l'évolution au cours du temps d'un système de N particules. L'utilisation de la dynamique moléculaire revient à parcourir une trajectoire dans l'espace des phases à $6N$ dimensions ($3N$ pour les positions et $3N$ pour les impulsions).

Pour ce faire, nous considérons N masses ponctuelles représentant les particules que l'on veut simuler, que l'on confine dans une boîte de volume V. Ces N particules sont ensuite soumis à un potentiel d'interaction et évoluent selon le principe fondamental de la dynamique :

$$\vec{F}_i(t) = m \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} \quad (1)$$

où m est la masse d'un atome, $\vec{r}_i(t)$ la position de l'atome i à un instant t et $\vec{F}_i(t)$ la force totale qui s'applique à l'atome i. La force $\vec{F}_i(t)$ est la résultante de toutes les forces que les particules voisines exercent sur la particule i.

Connaissant $\vec{F}_i(t)$ il suffit juste, pour obtenir la position d'une particule i à un instant t, d'intégrer l'équation (1).

$\vec{F}_i(t)$ est donnée par la formule suivante :

$$\vec{F}_i(t) = -\vec{\nabla}_{\vec{r}_i} U = \frac{\vec{r}_{ij}}{|\vec{r}_{ij}|} \sum_{i \neq j} \frac{\partial U(|\vec{r}_{ij}|)}{\partial \vec{r}_{ij}} \quad (2)$$

où U est l'énergie potentielle issue des interactions entre les différentes particules, les valeurs de ces interactions sont données par le potentiel d'interaction utilisé pour modéliser le matériau voulu.

Résoudre l'équation (1) revient à résoudre un système de 3N équations différentielles [6].

1.3 Algorithmes d'intégration

L'algorithme d'intégration est le cœur d'un programme de dynamique moléculaire. Il est basé sur la méthode des différences finies, où le temps est discrétisé en pas de temps Δt [6].

Le but est de déterminer les positions et les vitesses des particules à l'instant $t + \Delta t$ à partir des positions et des vitesses à l'instant t. La position \vec{r}_i de chaque particule est développée en série de Taylor à l'instant t pour un accroissement Δt suffisamment petit :

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} \Delta t + \frac{d^2\vec{r}_i(t)}{dt^2} \frac{\Delta t^2}{2!} + \dots \quad (3)$$

La façon de tronquer et de recombinaer les termes de la série donne lieu à différentes méthodes. Il faut néanmoins faire attention à plusieurs causes d'erreurs possibles :

- Soit une erreur de troncature liée à la précision de la méthode des différences finies, en effet les développements en séries de Taylor utilisés sont habituellement tronqués à plusieurs termes. Cette erreur domine si le pas de temps Δt est grand.
- Soit une erreur d'arrondi liée aux erreurs associées à une implémentation particulière de l'algorithme. Cette erreur domine si Δt est petit.

Il existe plusieurs types de méthode mais les deux méthodes les plus populaires sont les méthodes de Verlet et les méthodes de prédiction /correction que nous utilisons dans notre étude[6].

I.3.1 Algorithme de Verlet

Cette méthode est peu coûteuse en taille mémoire car l'algorithme de Verlet n'effectue qu'un calcul de force par itération. En supposant que chaque particule se déplace sous l'action d'une force constante sur un court intervalle de temps Δt , L'algorithme de Verlet consiste à utiliser le développement de Taylor des positions r_i aux instant $t+\Delta t$ et $t-\Delta t$ à l'ordre 3, [6]

$$r_A(t + \Delta t) = r_A(t) + \frac{dr_A(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 r_A(t)}{dt^2} \Delta t^2 + \dots \quad (4)$$

$$r_A(t - \Delta t) = r_A(t) - \frac{dr_A(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 r_A(t)}{dt^2} \Delta t^2 + \dots \quad (5)$$

dans lesquels les dérivées premières et secondes sont assimilées à la vitesse et à l'accélération. A un instant t la vitesse est donnée par :

$$r_A(t + \Delta t) = 2r_A(t) - r_A(t - \Delta t) + \frac{d^2 r_A(t)}{dt^2} \Delta t^2 \quad (6)$$

Les positions $\vec{r}_i(t + \Delta t)$ sont obtenues en faisant la somme des équations (4) et (5)

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = 2\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t - \Delta t) + \frac{\vec{F}_i(t)\Delta t^2}{m} + O(\Delta t^4). \quad (7)$$

L'algorithme se décompose alors en 4 étapes :

Etape 1 : on choisit une configuration, c'est à dire un ensemble de particules qui ont des positions $\vec{r}_i(t - \Delta t)$ et des vitesses $\vec{V}_i(t - \Delta t) = 0$ car les particules sont immobiles initialement.

Etape 2 : on calcule les forces $\vec{F}_i(t - \Delta t)$ s'exerçant sur l'ensemble des particules avec l'équation (2) et on prédit $\vec{r}_i(t)$ et $\vec{V}_i(t)$

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i(t - \Delta t) + \vec{v}_i(t - \Delta t)\Delta t + \frac{\vec{F}_i(t - \Delta t)}{2m}\Delta t^2 + O(\Delta t^3), \quad (8)$$

$$\vec{v}_i^p(t) = \vec{v}_i(t - \Delta t) + \frac{\vec{F}_i(t - \Delta t)\Delta t}{2m} \quad (9)$$

Etape 3 : à partir des positions à l'instant t, $\vec{r}_i(t)$, on peut calculer les forces $\vec{F}_i(t)$ qui s'exercent sur les particules avec l'équation (2)

Etape4 : avec $\vec{r}_i(t - \Delta t)$, $\vec{r}_i(t)$ et $\vec{F}_i(t)$ on prédit $\vec{r}_i(t + \Delta t)$ avec l'équation (7)

Etape 5 : on calcule la vitesse à l'instant t + Δt, $\vec{V}_i(t + \Delta t)$

$$\vec{v}_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i^p(t) + \frac{\vec{F}_i(t)\Delta t}{2m}. \quad (10)$$

Et ainsi de suite...

Pour démarrer une simulation, il faut seulement connaître les positions de toutes les particules aux instants t et t - Δt ainsi que leurs accélérations au temps t [6].

I.3.2 Algorithme prédicteur/correcteur

L'algorithme prédicteur/correcteur constitue une autre méthode d'intégration des équations du mouvement. Ce type d'algorithme a été mis en œuvre pour la première fois par Rahman et les versions les plus utilisées sont celles de Gear. L'algorithme se décompose en plusieurs étapes [6].

I.3.2.1-Prédicteur

L'ensemble des positions des particules à l'instant (t + Δt) est calculé par un développement de Taylor à l'ordre 5

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \frac{\partial \vec{r}_i(t)}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial^2 \vec{r}_i(t)}{\partial t^2} \frac{\Delta t^2}{2!} + \frac{\partial^3 \vec{r}_i(t)}{\partial t^3} \frac{\Delta t^3}{3!} + \frac{\partial^4 \vec{r}_i(t)}{\partial t^4} \frac{\Delta t^4}{4!} + \theta(\Delta t^5) \quad (11)$$

O pose : $\vec{r}_0(t) = \vec{r}(t)$ $\vec{r}_1(t) = \left(\frac{\partial \vec{r}(t)}{\partial t}\right) \Delta t$ $\vec{r}_2(t) = \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 \vec{r}(t)}{\partial t^2}\right) \Delta t^2$

$$\vec{r}_3(t) = \frac{1}{3!} \left(\frac{\partial^3 \vec{r}(t)}{\partial t^3}\right) \Delta t^3 \quad \vec{r}_4(t) = \frac{1}{4!} \left(\frac{\partial^4 \vec{r}(t)}{\partial t^4}\right) \Delta t^4$$

et on obtient donc :

$$\vec{r}_0(t + \Delta t) = \vec{r}_0(t) + \vec{r}_1(t) + \vec{r}_2(t) + \vec{r}_3(t) + \vec{r}_4(t) + \theta(\Delta t^5) \quad (12)$$

La vitesse s'exprime donc sous la forme :

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \frac{\partial \vec{r}(t)}{\partial t} + \frac{\partial^2 \vec{r}(t)}{\partial t^2} \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{\partial^3 \vec{r}(t)}{\partial t^3} \Delta t^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^4 \vec{r}(t)}{\partial t^4} \Delta t^3 + \theta(\Delta t^5) \quad (13)$$

On peut donc écrire

$$\vec{r}_1(t + \Delta t) = \vec{v}(t + \Delta t) \Delta t = \vec{r}_1(t) + 2\vec{r}_2(t) + 3\vec{r}_3(t) + 4\vec{r}_4(t) + \theta(\Delta t^5) \quad (14)$$

On fait de même pour $\vec{r}_2(t + \Delta t)$, $\vec{r}_3(t + \Delta t)$, $\vec{r}_4(t + \Delta t)$ et on obtient une matrice triangulaire de Pascal dont la forme est facilement étendue aux ordres supérieurs.

$$\begin{pmatrix} \vec{r}_0^p(t + \Delta t) \\ \vec{r}_1^p(t + \Delta t) \\ \vec{r}_2^p(t + \Delta t) \\ \vec{r}_3^p(t + \Delta t) \\ \vec{r}_4^p(t + \Delta t) \\ \vec{r}_5^p(t + \Delta t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 6 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{r}_0(t) \\ \vec{r}_1(t) \\ \vec{r}_2(t) \\ \vec{r}_3(t) \\ \vec{r}_4(t) \\ \vec{r}_5(t) \end{pmatrix} \quad (15)$$

où \vec{r}_i^p représente la $i^{ème}$ dérivée par rapport au temps des valeurs prédites.

Les termes obtenus en $t + \Delta t$ sont des termes prédits et ils sont notés \vec{r}_i^p [6].

1.3.2.2- Correcteur

On calcule ensuite les forces s'exerçant sur les atomes à l'instant $t + \Delta t$ à l'aide du potentiel d'interaction U (équation 2), on obtient alors de nouvelles valeurs pour l'accélération, la vitesse et la position de chaque particule. On se sert ensuite de ces valeurs pour corriger les

termes prédits en utilisant soit la différence entre les accélérations prédites et corrigées, soit entre les vitesses prédites et corrigées au temps $t + \Delta t$ que l'on exprime sous la forme : $\Delta \vec{r}_\alpha(t + \Delta t)$

Les valeurs corrigées \vec{r}_i^c sont de la forme

$$\begin{pmatrix} \vec{r}_0^c(t + \Delta t) \\ \vec{r}_1^c(t + \Delta t) \\ \vec{r}_2^c(t + \Delta t) \\ \vec{r}_3^c(t + \Delta t) \\ \vec{r}_4^c(t + \Delta t) \\ \vec{r}_5^c(t + \Delta t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{r}_0^p(t + \Delta t) \\ \vec{r}_1^p(t + \Delta t) \\ \vec{r}_2^p(t + \Delta t) \\ \vec{r}_3^p(t + \Delta t) \\ \vec{r}_4^p(t + \Delta t) \\ \vec{r}_5^p(t + \Delta t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \end{pmatrix} \Delta \vec{r}_\alpha(t + \Delta t) \quad (16)$$

Les coefficients C_i sont des termes correctifs établis par Gear qui dépendent de l'ordre des équations différentielles à résoudre. Des tables de valeurs reprenant les différentes corrections ont été publiées par Gear à l'ordre 5, $c_0 = \frac{3}{16}$, $c_1 = \frac{251}{360}$, $c_2 = 1$, $c_3 = \frac{11}{18}$, $c_4 = \frac{1}{6}$, $c_5 = \frac{1}{60}$.

Pour une équation du mouvement du premier ordre de la forme $r' = f(r)$, nous avons $\Delta r_\alpha = r_1^c - r_1^p$, où r_1^p est la valeur prédite de la dérivée au premier ordre obtenue grâce à l'équation (14). r_1^c est la valeur corrigée de la dérivée au premier ordre obtenue en substituant r_0^p dans l'équation du mouvement.

Pour une équation du second ordre de la forme $r'' = f(r)$, ou $r' = f(r, r')$, nous avons $\Delta r_\alpha = r_2^c - r_2^p$, où r_2^p est la valeur prédite de la dérivée au premier ordre obtenue grâce à l'équation (14). r_2^c est la valeur corrigée de la dérivée au premier ordre obtenue en substituant r_0^p dans l'équation du mouvement [6].

1.4 Conditions aux limites

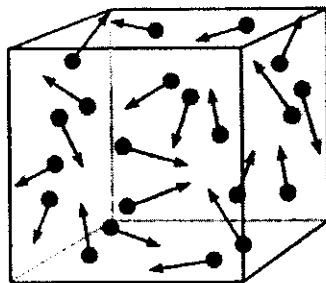


FIGURE .1 : Boite de conditions aux limites [6]

La simulation d'un matériau réel nécessiterait de prendre en compte au moins une mole de matière c'est à dire de 10^{23} atomes, ce qui avec les capacités de calcul actuelles est complètement incalculable, en effet nous ne pouvons simuler que des échantillons de quelques millions d'atomes [6].

Cette situation entraîne une surestimation du rapport entre le nombre d'atomes en surface et le nombre d'atomes en volume. Alors les effets de surface ne sont plus négligeables, ce qui fausse le réalisme d'une simulation en volume [2].

Une solution est d'utiliser des conditions aux limites périodiques. Pour cela on considère une boîte de simulation dite primitive, contenant N particules. Cette boîte est entourée dans toutes les directions de l'espace par des images virtuelles d'elle-même (voir Fig.2).

Chaque mouvement d'une particule dans la boîte primitive correspond un mouvement identique de toutes ses images dans les boîtes voisines [2].

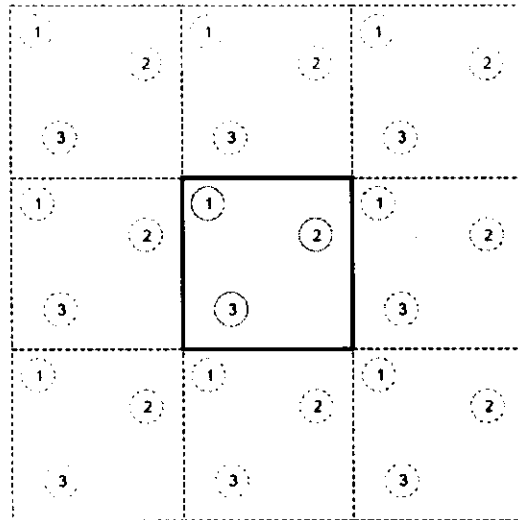


FIGURE .2 : Boîte de simulation primitive contenant 3 atomes entourée de ses 8 répliques virtuelles en 2D. [6]

I.5 Critère de minimum image

L'application des conditions aux limites périodiques n'empêche pas la possibilité qu'une particule puisse interagir avec ses images, ou avec d'autres particules et leurs images en même temps. Afin de supprimer cet artefact qui fausserait le calcul des interactions, le critère de minimum image a été introduit. Cette technique consiste à ne comptabiliser, pour chaque particule, que les forces provenant de ses voisines situées dans une zone fictive identique à la boîte de simulation centrée sur cette particule, comme schématisé dans la figure.3 [6].

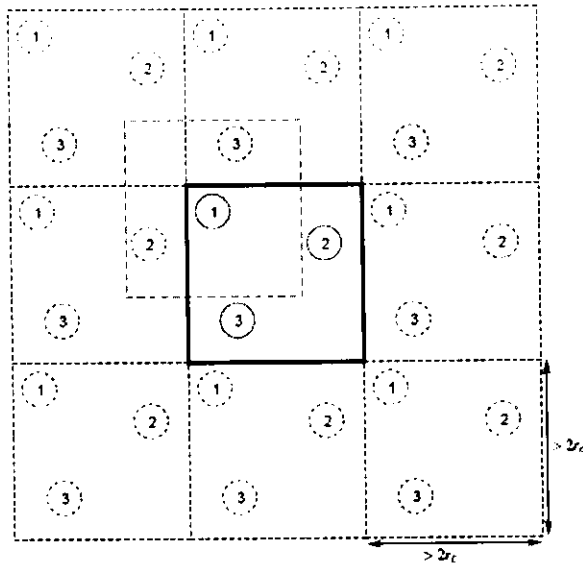


FIGURE 3 : L'image minimum (en pointillé rouge) est centrée autour de la particule 1. Elle a la même taille et contient le même nombre de particules que la boîte primitive dont la longueur est supérieure à 2 fois le rayon de coupure r_c du potentiel d'interaction entre particules. [6]

La convention de l'image minimum restreint en principe la méthode de la dynamique moléculaire à l'utilisation d'interactions à courte portée. Cette caractéristique permet de négliger les interactions au-delà de quelques diamètres inter-particulaires et de définir un rayon de coupure du potentiel r_c qui ne peut dépasser la demi longueur de boîte [6].

L'utilisation du rayon de coupure a plusieurs avantages, notamment le fait qu'il réduise le nombre de particules à prendre en compte lors du calcul des interactions ce qui diminue le temps de calcul machine. Mais il a aussi des désavantages, certaines grandeurs thermodynamiques étant légèrement affectées et doivent être corrigées à posteriori pour certains potentiels.

1.6 Conclusion

La connaissance des propriétés du DM, ses avantages et ses inconvénient nous permettre de choisir des plusieurs types des méthodes ; parmi eux les deux méthodes les plus populaires : Verlet et la méthode de prédiction/correction, et quand la dernières a des valeurs des positions, les vitesses et les accélérations plus exactes et plus proches du réseau réel elle est le meilleur choix que nous utilisons dans notre étude.

Chapitre II :

Interactions Interatomiques et Fonctions D'énergie Potentielle

II.1 INTERACTIONS INTERATOMIQUES

II.1.1 Liaisons Atomique

Les interactions électrostatiques sont essentiellement responsables de toutes liaisons interatomiques et intermoléculaires. Cette déclaration devient possible pour la première fois dans les années 1920 après le grand succès de la théorie quantique et en particulier la compréhension de la structure électronique des atomes. En plus, le théorème de Hellman-Feynman [7] déclare: « Une fois la distribution spatiale des nuages électronique a été déterminée par la résolution de l'équation de Schrödinger, les forces intermoléculaires peuvent être calculées sur la base de l'électrostatique classique simple » [8]. De ce fait, le seul problème est de trouver la solution exacte de l'équation de Schrödinger, qui ne peut être réalisée que pour les systèmes simples. Pour cette raison, l'hamiltonien du système d'intérêt doit être représenté par un développement en série et la considération de chaque terme dans cette expansion conduit à un nouveau type d'interaction[7].

La partie qui suit contient une description des principaux types de liaison. on distingue les liaisons hétéro et homopolaire, les liaisons de van der Waals et les liaisons métallique et chacune d'entre elles devraient être expliquée individuellement [7].

II.1.2 Liaison ionique hétéro-polaire

Le point principal dans la théorie des interactions interatomiques est l'énorme différence entre les masses des atomes et des électrons. En raison de cette différence, les noyaux ont des vitesses plus faibles par rapport aux électrons et peuvent être considérés fixes. Ainsi, le problème se réduit à l'étude du mouvement des électrons dans le champ électrostatique des noyaux fixes. L'énergie totale d'interaction inclut à la fois la partie des électrons et l'énergie électrostatique des noyaux [7].

Comme le montre Heitler et Londres [9], l'habilité des atomes à former des liaisons est liée à leur spins qui doit être compensé mutuellement. En tant que mesure quantitative de cette capacité, le double spin de l'atome d'intérêt peut être utilisé. Ce nombre est égal à la valence chimique de l'élément correspondant. Par exemple, tous les éléments du 3ème groupe du tableau périodique ont la configuration électronique s^2p avec le spin $S=1/2$ dans l'état de repo

(non excité). Mais relativement par une petite excitation d'un électron de la couche rempli S , une transition à l'état sp^2 avec le spin $S = 3/2$ se résulte. Pour cette raison, les éléments du 3ème groupe possèdent une valence 1 ainsi que 3. Ainsi, les 1ers éléments tels que l'aluminium Al ou le bore B leur valence est 3. [7]

Les couches électroniques remplis ne sont presque pas influencés par la formation de liaisons. Au contraire, la distribution de la densité d'électrons dans les couches externe non rempli peut être considérablement modifiée. Dans le cas extrême de ce qu'on appelle la liaison hétéropolaire, tous les électrons de valence se changent d'atomes de sorte que la molécule se compose de deux ions chargés selon leur valence, l'unité de la charge est la charge de l'électron e . [7]

Cette liaison est pratiquement isotrope et peut être caractérisée par le nombre coordination. La liaison ionique est causée par l'interaction de Coulomb et diminue avec la distance, par conséquent cette interaction est de longue portée. Une interaction de deux charges Q_1 et Q_2 séparés par la distance r est donnée par

$$\phi^{Coulomb}(r) = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} \quad (17)$$

Où ϵ est le constant diélectrique du milieu. Selon le signe de charges, les forces qui en résultent peuvent être attractive ou répulsive. Dans le réseau une interaction électrostatique est créé et se diminue à de grande distance en fonction de $\exp(-r)$. Les cristaux possédant des liaisons hétéro-polaires ont tendance à former des structures avec la plus grande densité. La majorité des diélectriques appartient aux cristaux ioniques. Ceci est lié au fait que, contrairement aux métaux où les électrons sont les porteurs de charge, dans ces cristaux les porteurs de charge sont les ions. De ce fait, la conductivité électrique dans les cristaux ioniques est reliée à des phénomènes de transport de masse et dépendant fortement de la température. Un exemple d'un cristal ionique est $NaCl$ [7].

II.1.3 Liaison covalente Homopolaire

Un autre type de liaison est ce qu'on appelle liaison Homopolaire ou covalente. Les atomes constituant restent en moyenne neutre dans ce cas. Le problème de l'interaction de deux atomes électriquement neutres doit être résolu pour trouver comment la liaison Homopolaire diminue avec l'augmentation de la distance. Cette énergie est composée de deux parties: l'énergie d'interaction de Coulomb entre les noyaux (18) et une énergie d'interaction électronique de nature inconnus. À de grandes distances, la partie électronique est la somme des énergies

connus E_0 d'électrons de deux atomes séparés correspondant à ordre 0 de la théorie des perturbations. Cela signifie que l'énergie inconnue peut être donnée par l'expression suivante [7]:

$$\phi^{el}(r) = 2E_0 + \Delta E(r) \quad (18)$$

avec une perturbation $\Delta E(r)$ de l'énergie $2E_0$ des électrons libres à petites distances. La théorie de perturbation au 1er ordre donne des solutions symétriques et antisymétriques pour $\Delta E(r)$, voir par exemple Blochinzew [10].

$$\Delta E_a = \frac{K-A}{1-S^2}$$

$$\Delta E_s = \frac{K+A}{1-S^2} \quad (19)$$

Ici, K désigne une énergie moyenne d'interaction électrostatique d'atomes sans prendre en considération l'énergie d'interaction des noyaux justifiée par le potentiel de Coulomb. A est soit disant l'énergie échange, l'énergie de l'interaction d'échange. Cette interaction est un effet mécanique purement quantique et se produit en raison de l'équivalence de tous les électrons. La condition $0 \leq S \leq 1$ prend en considération la non-orthogonalité des fonctions d'onde électroniques. L'énergie totale de l'interaction de deux atomes peut donc être exprimée comme suit [7]

$$\begin{aligned} \phi_a &= 2E_0 + \frac{Z^2}{r} + \frac{K-A}{1-S^2} \\ \phi_s &= 2E_0 + \frac{Z^2}{r} + \frac{K+A}{1-S^2} \end{aligned} \quad (20)$$

ou Z est la charge de noyau. Le calcul d'intégrales représentant K et A montre une décroissance exponentielle des deux avec l'augmentation de la distance, alors $K \sim \exp(-r)$ et même chose pour A . Les deux intégrales sont différentes de zéro, tant que les couches électroniques des deux atomes sont partagées. En outre, seule la solution symétrique a un minimum et conduit à la formation d'une molécule, tandis que la solution antisymétrique ne donne que la répulsion. Ainsi, la formation d'une molécule Homopolaire est définie seulement par l'interaction d'échange [7].

La liaison covalente est fortement anisotrope; Toutes les liaisons sont orientées à angles bien connus. Tel anisotropie de la liaison covalente provoque par exemple la structure tétraédrique du diamant dans le silicium Si . Les liaisons covalentes sont de courtes porté et agit à des distances d'environ $0.1nm$. un petit nombre de coordination, une forte dépendance à la température de la

largeur de la zone interdite, point fusion et dureté élevés sont les caractéristiques typiques des structures à base des liaisons covalentes. La liaison covalente est un attribut typique des semi-conducteurs tels que le silicium *Si* et le germanium *Ge*. Tous les cristaux covalents suivent la règle $8-N$: chaque atome est relié à $8-N$ proches voisins, où N est un numéro de groupe dans le tableau périodique des éléments, dans lequel appartient le cristal covalent. Ainsi, le silicium et le germanium appartiennent au quatrième groupe et en raison de cela, ils forment un réseau diamant avec quatre voisins [7].

Il n'y a pas de différence principale entre les liaisons hétéro et homopolaires. Cette différence est de nature quantitative: les atomes d'électronégativité équivalente ont tendance à former la liaison covalente et si les électronégativités diffèrent fortement alors les liaisons sont ioniques. Les liaisons hétéro et homopolaires sont deux cas extrêmes de même phénomène et tous les cas de transition entre les deux sont possibles. La liaison covalente polaire résulte de ce fait, par exemple dans l'eau H_2O . Une expression quantitative de cette classification peut être résumée dans les règles suivantes: [7]

- ❖ Différence d'électronégativité inférieure à 0,5 conduit à une liaison covalente non polaire.
- ❖ Différence d'électronégativité entre 0,5 et 1,6 conduit à une liaison covalente polaire.
- ❖ Différence entre électronégativité 1,6 et 2,0 conduit à :
 - Une liaison ionique, si c'est un métal.
 - Si non une liaison covalente polaire.
- ❖ Différence d'électronégativité supérieure à 2,0 conduits à une liaison ionique.

II.1.4 Liaison de Van der Waals

Les liaisons de Van der Waals agissent entre les atomes et les molécules en plus des forces déjà traitées. Ainsi les objets peuvent être électriquement neutre et ne présentent aucun moment électrique (dipôle, quadripolaire etc.) comme est le cas par exemple pour le hélium *He* (symétrique sphérique). Ces forces sont toujours présentes et leur nature se rapporte encore à la mécanique quantique. Cette interaction devient importante à des séparations relativement grandes quand la théorie de perturbation du deuxième ordre est nécessaire. Ce fait c'est par ce que l'énergie de la liaison covalente suit une loi d'exponentielle en fonction de la séparation (théorie du 1er ordre), alors que la perturbation de l'énergie dans la théorie d'ordre 2 montre une dépendance avec $1/r^6$, la diminution est plus lentement que pour la perturbation au 1er ordre, (voir Fig. 4). La liaison de van der Waals est causées par la déformation dynamique des couches électronique et peut être expliqué de la manière suivante: même si la moyenne temporelle de tous

les moments électriques d'un atome non polaire est nulle, le moment dipolaire instantané (pour la théorie des perturbations d'ordre 2 les moments dipolaires sont suffisants) est non nulle. Ces moments instantané induit des moments dipolaires dans les atomes voisins non-polaires, et alors une attraction entre les atomes aura lieu. Une simple dérivation de cette loi en $1/r^6$ est basée sur la représentation des atomes interagies comme des oscillateurs quantiques. Ensuite, un calcul quantique montre que l'énergie de deux oscillateurs en interaction est inférieure à l'énergie de ces deux séparés. En 1937, F.Londres [11] dérive l'énergie d'interaction de van der Waals sous la forme [7]

$$\phi^{vdW}(r) = -\frac{3}{4} \frac{\alpha_0^2 I}{(4\pi\epsilon_0)^2 r^6} \quad (21)$$

avec : I le potentiel d'ionisation, et α la polarisabilité électronique. Un autre nom pour les forces de van der Waals est : forces de dispersion, en raison de leur influence à la dispersion de la lumière visible et UV.

Comme mentionné ci-dessus, les forces de dispersion sont de longue portée et agissent entre des distances de 0.2 nm à 10 nm. Cette liaison est typique pour les cristaux moléculaires électriquement neutres avec des petit points de fusion et de faibles chaleurs latentes de fusion. La phase solide des gaz inertes (par exemple, le néon Ne, l'argon Ar), les cristaux d'oxygène O_2 , hydrogène H_2 , chlorure d'hydrogène HCl , méthane CH_4 ainsi que les cristaux organiques sont considérés parmi les matériaux avec ce type de liaison [7].

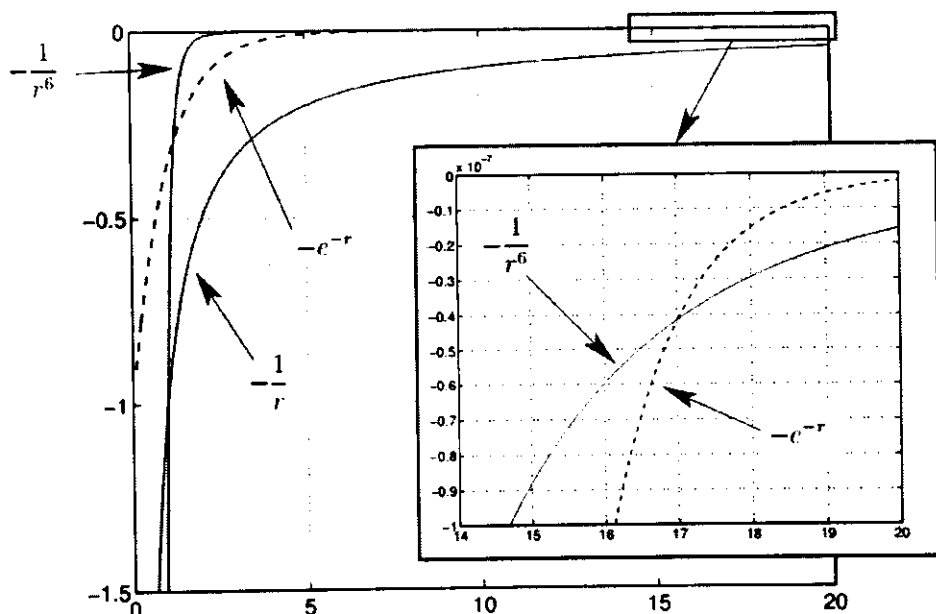


FIGURE 4: Comparaison entre les potentiels des interactions: covalente(e^{-r}), ionique ($1/r$) et van der Waals ($1/r^6$). A grandes valeurs de r , l'interaction de Van der Waals est plus forte que l'interaction covalente. L'interaction de Coulomb domine à tous les distances [7].

II.1.5 Liaison métallique

L'interaction entre les couches électronique externes dans les métaux est tellement forte qu'il est impossible de séparer l'énergie d'un atome et les niveaux d'énergies des états collectifs de tous les électrons dans le matériau. Les couches électroniques internes ne sont presque pas partagées et les métaux peuvent être considérés comme ions positives à l'intérieur d'un environnement électronique chargé négativement. Cette généralisation des électrons conduit à l'énergie de liaison élevée des métaux et provoque les propriétés spécifiques des métaux tels que la bonne conductivité électrique et thermique. En outre, les métaux sont caractérisés par exemple par un grand nombre de coordination et de petite compressibilité [7].

II.1.6 Nature de Répulsion

A très petites distances, les forces de répulsion à courte portée découlant du fait du chevauchement des coques d'électrons doivent être prises en compte. Ces forces peuvent être divisées en groupes lié à l'échange de répulsion, répulsion du noyau dur, répulsion stérique, répulsion de Born (des ions). Il n'y a pas d'équation générale décrivant la dépendance de répulsion avec la distance mais les trois potentiels les plus utilisés sont connus: le potentiel de sphère dure, le potentiel de loi de puissance inverse et le potentiel exponentiel [7].

Le modèle de sphère dure reflète la forte augmentation de répulsion à petites distances obtenues à partir d'expériences et peut être appliquée avec succès dans de nombreux cas. La répulsion du sphère dure est donnée par

$$\phi_{rep}^{hs}(r) = + \left[\frac{\sigma}{r} \right]^n, \quad n \rightarrow \infty \quad (22)$$

Deux autres possibilités de potentiels sont données par (23) (loi de puissance inverse) et (24) (répulsion de Born-Meyer en exponentielle). Alors que la loi de puissance inverse a un peu de motivation théorique, la loi exponentielle décrit la nature de l'échange de répulsion semblable à une liaison covalente [7].

$$\phi_{rep}^{inv pl}(r) = + \left[\frac{\sigma}{r} \right]^n, \quad n \in [9, 16] \quad (23)$$

$$\phi_{rep}^{exp}(r) = + A e^{-\frac{r}{\sigma}} \quad (24)$$

avec des constantes ajustables σ et Λ . Ces deux lois sont plus réalistes car ils considèrent la propriété de compressibilité des atomes.

L'interaction électrostatique est de forme attractive et répulsive.

TABIEAU. 1: Types et nature de l'attraction et de la répulsion interatomique [7]

Attraction			
Type	Coulomb	Covalent	Van der Waals
Nature	Electrostatique	L'interaction d'échange (1er ordre e.)	Déformation dynamique de l'électron Hull (2e ordre e.)
$\phi(r)$	$-1/r$	$- \exp(-r)$	$-1/r^6$
La liaison chimique	Hétéropolaire	Hétéropolaire	Forces de dispersion
Exemple	Cristaux ioniques, par exemple <i>NaCl</i>	Semi-conducteurs, par exemple <i>C, Si, Ge</i>	Solide inerte gaz, <i>H₂, HCl, CH₄</i> , cristaux organiques
Répulsion			
Type	Coulomb		Pauli
Nature	Electrostatique		De Pauli Principe d'exclusion
$\phi(r)$	$1/r$ ou $\exp(-r)/r$ (Yukawa potentiel)		$1/r^{12}$ ou $\exp(-r)$

Le Potentiel de Coulomb est aussi connue sous le non de potentiel Yukawa

$$\phi_{rep}^{Yuk}(r) = + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} e^{-\frac{r}{\sigma}} \quad (25)$$

Où $Z_1 e$ et $Z_2 e$ sont les charges des particules concernées [7].

Une remarque courte mais importante doit être faite à cet endroit. A savoir, les forces répulsives sont principalement responsables de fusion alors que les forces d'attraction sont principalement responsables de l'ébullition.

Enfin, le Tableau 1 rassemble et systématise toutes les déclarations et les définitions de cette section.

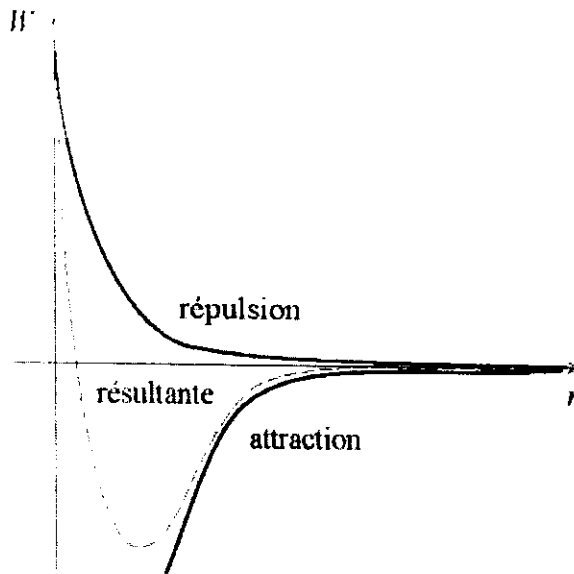


FIGURE. 5: Zones de forces répulsion et attraction.

II.2 FONCTIONS D'ENERGIE POTENTIELLE

II.2.1 Définitions et Associations

Une fonction d'énergie potentielle est une fonction qui modélise l'énergie d'un système en fonction de la position ou l'arrangement des particules du système [12]. Elle est l'énergie stockée dans le système qui peut être utilisé potentiellement. Il est très important de choisir la fonction d'énergie potentielle correcte pour le problème donné.

Toute force conservatrice donne naissance à une fonction d'énergie potentielle [13]. Une force conservatrice est celle dans laquelle le travail est indépendant de la trajectoire choisie. Ainsi, n'importe quel chemin à prendre du point A au point B et retour au point A à un travail égal à zéro. Plus clairement, l'énergie d'un objet soumis uniquement à une force conservatrice dépend de sa position et pas du chemin qu'il a suivi pour atteindre cette position. Ainsi, nous pouvons définir une fonction d'énergie potentielle qui dépend de la position seulement [14].

Une fonction de l'énergie potentielle U est égale au travail qui doit être fait contre la force à appliquer sur un objet afin de déplacer l'objet à partir d'un point de référence x_0 à une position différente x . La définition générale de travail mécanique est donnée par l'intégrale suivant:

$$W_c = \int_c F \cdot dx = \int_c F \cdot v \, dt \quad (26)$$

Où C est le chemin parcouru, F est le vecteur de force, x est le vecteur de position, et $v = \frac{dx}{dt}$ est la vitesse. Si la force est connue et il s'agit une force conservatrice, l'énergie potentielle peut être calculée en intégrant la force jusqu'à ce que le travail effectué est égale à l'énergie potentielle, à trois dimensions on a :

$$U = - \int F \cdot dr \quad (27)$$

Cela signifie que la force est égale au gradient négatif du potentiel

$$F = -\nabla U \quad (28)$$

Il existe différents types de fonctions d'énergie potentielle, chaque une est utilisée pour modéliser un type particulier de la force. Par exemple, si la force est élastique, alors le travail est appelée énergie potentielle élastique, telle que la loi de Hooke. Si la force est la gravité, alors le travail est connu comme l'énergie potentielle gravitationnelle. Le travail associé à une force de Coulomb est connu comme l'énergie potentielle électrique. Le travail des forces intermoléculaires est appelée énergie potentielle intermoléculaire, tel que le potentiel de Lennard-Jones [13]. Ce sont tous des exemples de la façon dont les différentes énergies potentielles sont associées aux différentes forces.

Choix de la fonction potentielle de l'énergie pour une simulation est fondamental [5].

II.2.2 Le potentiel de Hooke :

Robert Hooke a été décrit comme «le plus grand scientifique du 17^{ème} siècle » [15]. Le travail de sa vie était très sélectif, mais il est surtout connu pour la découverte de la loi de Hooke. Il a d'abord découvert la loi bien connue d'élasticité en 1660 [15].

La loi de Hooke indique que la contrainte sur une substance est directement proportionnelle à la déformation produite, à condition que la contrainte soit inférieure à la limite élastique de la substance [12].

Cela signifie simplement que l'équation linéaire $F = -kx$ est une bonne approximation de la force du ressort tant que la masse n'est pas trop loin de la position d'équilibre du ressort [16]. La constante k du ressort est une valeur qui représente la vitesse à laquelle le ressort va tenter de se remettre à sa position d'équilibre. Ainsi, pour les grandes valeurs de k , le ressort est très tendu et robuste, pas facilement à étiré [5].

Les simulations de dynamique moléculaire utilisent la deuxième loi de Newton du mouvement pour modéliser des systèmes moléculaires. Par conséquent, nous avons $F = ma$ depuis Newton et $F = -kx$ depuis Hooke.

Assembler ces deux équations nous obtenons :

$$m a = - k x \quad (29)$$

ce qui implique que la loi de Hooke est une bonne approximation de la force du ressort tan que le déplacement x ne soit pas trop grand, comme le montre la figure 6 ci-dessous [16]

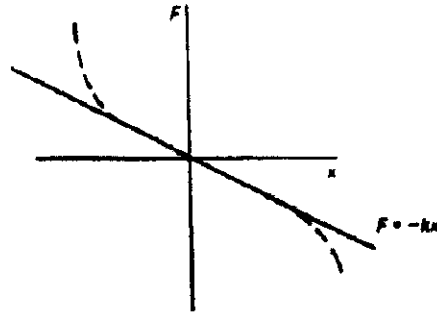


FIGURE. 6 : La loi de Hooke , approximation de la force du ressort expérimental [16]

Puisque la loi de Hooke est une équation de force, on peut appliquer (29) et intégrer pour obtenir la fonction d'énergie potentielle U , comme on le voit ici

$$U_H = - \int_{x_0}^x kx \cdot dx$$

$$U_H = \frac{1}{2} k(x^2 - x_0^2) \quad (30)$$

Cette fonction résulte de la sommation de l'énergie nécessaire pour comprimer le ressort progressivement. Autrement dit, il est intégré sur le déplacement du ressort de la position d'équilibre x_0 à une position x . Le graphe de la fonction d'énergie potentielle de Hooke en deux dimensions est une parabole positive, comme on le voit sur la Fig.7 [5].

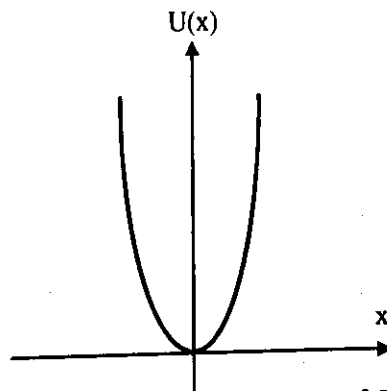


FIGURE.7 : graphe de $U(x) = \frac{1}{2}kx^2$ [5]

Dans ce graphique, x représente le déplacement de la position d'équilibre du ressort. Il est clair que l'énergie potentielle de Hooke est toujours positive. Si le ressort est tendu, le déplacement est positif et l'énergie potentielle augmente. Si le ressort est comprimé, le déplacement est négatif mais le potentiel augmente encore.

La tendance du ressort est de diminuer son potentiel en revenant à son état d'équilibre.

II.2.3 Le potentiel de Buckingham

La version originale du potentiel de Buckingham [17] est de la forme

$$U(r) = Ae^{-Br} - \frac{\lambda}{r^6} - \frac{\lambda'}{r^8} \quad (31)$$

$$\text{Où } A = \left[-\varepsilon + (1 + \beta) \frac{\lambda}{r_m^6} \right] e^\alpha \quad \lambda = \frac{\varepsilon \alpha r_m^6}{\alpha(1+\beta) - 8\beta - 6} \quad , \quad \lambda' = \beta r_m^6 \lambda \quad (32)$$

Avec ε la profondeur du puits de potentiel, et r_m la valeur correspondante de la distance r entre deux atomes.

La pente de l'exponentielle est mesurée par α .

Il existe 4 paramètres constants indépendants, qui peuvent être ajustés à des données expérimentales. Ce potentiel, cependant, a la propriété d'être négative, infini, à distance de séparation zéro. Par conséquent, une variation connue sous le nom de potentiel de Buckingham-Corner élimine le comportement irréaliste à l'origine en postulant une forme plus complexe [18].

Une autre variation, où le terme inverse de puissance 8 a été abandonné, a conduit à une forme plus simple et est connu sous le nom de Buckingham modifié ou le potentiels en exponentielle-6 [20]:

$$U(r) = \frac{\varepsilon}{1-6/\alpha} \left[\frac{6}{\alpha} e^{\alpha(1-\frac{r}{r_m})} - \left(\frac{r}{r_m} \right)^{-6} \right] \quad (33)$$

TABIEAU. 2 : Buckingham paramètre potentiel réglé pour différents matériaux non-liés [20]

Symboles	Type	Mass (10^{-27} Kg)	ϵ (10^{-21} J)	α	r_{in} (10^{-10} m)
C	SP, SP ²	19.925	0.357	12.5	3.88
C	SP ³	19.925	0.357	12.5	3.80
H	Hydrocarbure	1.674	0.382	12.5	3.00
O	Carbonyle	26.565	0.536	12.5	3.48
N	SP ³	23.251	0.447	12.5	3.64
F	Fluorure	31.545	0.634	12.5	3.30
Cl	Chlorure	58.064	1.950	12.5	4.06
Br	Bromure	131.038	2.599	12.5	4.36
I	Iodure	210.709	3.444	12.5	4.64
S	Sulfure	53.087	1.641	12.5	4.22
Si	Silane	46.454	1.137	12.5	4.50
P	Phosphine	51.464	0.525	12.5	4.36
Ne	Noble gaz	33.51	0.525	14.5	3.147
Ar	Noble gaz	66.34	1.701	14.0	3.866
Kr	Noble gaz	139.16	2.185	12.3	4.056

II.2.4 Le potentiel de l'atome immergé EAM

Les potentiels de type EAM (Embed Atom Method) ont été développés par Daw et Baskes en 1984. Ils sont basés sur la théorie du quasi-atome qui considère chaque atome du cristal comme étant une impureté encastrée dans une matrice constituée des autres atomes. [6]

Cette impureté interagit alors avec les noyaux voisins ainsi qu'avec le nuage électronique environnant.

L'énergie d'un quasi-atome est donnée par la formule suivante : [6]

$$E_{quasi} = E_z(\rho_h(r)) \quad (34)$$

Où ρ_h est la densité électronique de la matrice hôte sans l'impureté à l'emplacement r de l'impureté et où E_z est l'énergie d'un quasi-atome d'une impureté de type Z. Cela revient à calculer l'énergie qu'il faut fournir pour implanter un atome dans un gaz d'électron de densité. On peut écrire [6]

$$E_p = F_i(\rho_{h,i}(r_i)) \quad (35)$$

Où F_i est l'énergie d'entourage et $\rho_{h,i}$ la densité à la position r_i du système hôte sans l'impureté i . L'énergie totale est alors obtenue en sommant les contributions pour toutes les impuretés :

$$E_{tot} = \sum_i F_i (\rho_{h,i}(r_i)) \quad (36)$$

En ajoutant un terme d'interactions de paire provenant du modèle de Lennard-Jones, Daw et Baskes ont obtenus l'expression de l'énergie potentielle E_p suivante : [6]

$$E_p = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V(r_{ij}) + \sum_i F_i (\rho_{h,i}) \quad (37)$$

$$\rho_{h,j} = \sum_{j \neq i} \rho_j (r_{ij})$$

où r_{ij} est la distance entre deux atomes i et j ,

V est le potentiel d'interaction de paire entre deux atomes,

$\rho_{h,j}$ est la "densité électronique" locale du système hôte,

ρ_j est la densité électronique d'un atome j proche de i ,

$F_i(\rho_{h,i})$ est la fonction d'entourage.

Remarque : F peut être une fonction linéaire de $\rho_{h,j}$, dans ce cas le potentiel se ramène à un potentiel de paire puisque ρ_j ne dépend que de r_{ij} entre l'atome i et ses voisins. Il faut également noter qu'il n'y a pas de dépendances angulaires de $F_i(\rho_{h,i})$ dans cette formulation. Nous avons représenté à la Fig.8, la fonction paire, la fonction entourage et la densité électronique d'un potentiel EAM de Zirconium [6].

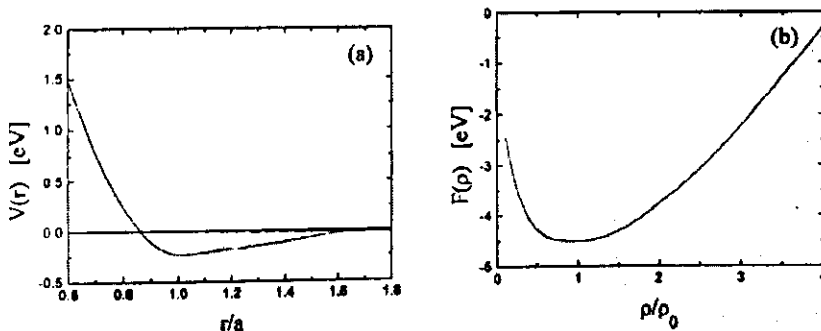


FIGURE 8 : Potentiel de paire (a) et fonction entourage (b) d'un potentiel EAM de Zirconium [6]

Pour obtenir la forme du potentiel EAM, ne considérer que deux atomes en interaction du même type. Dans ce cas, on obtient [11]

$$\Phi^{EAM}(r) = -\varepsilon \left[1 + \alpha \left[\frac{r}{r_0} - 1 \right] \right] e^{-\alpha \left[\frac{r}{r_0} - 1 \right]} \quad (38)$$

Où ε est une énergie de sublimation, r_0 est une séparation à l'équilibre et α est un facteur de décroissance exponentielle.

Fig.9 montre le comportement de cette fonction avec son premier dérivé

$$\left(\Phi^{EAM}(r) \right)' = \frac{\varepsilon \alpha^2}{r_0} \left[\frac{r}{r_0} - 1 \right] e^{-\alpha \left[\frac{r}{r_0} - 1 \right]} \quad (39)$$

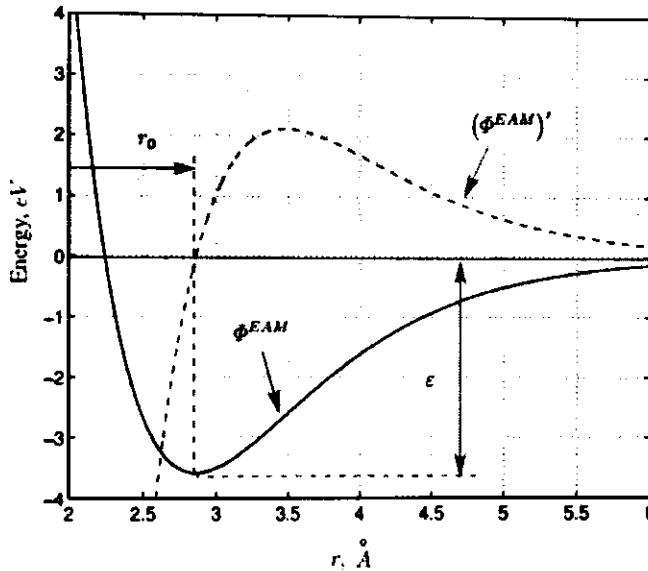


FIGURE. 9: Le potentiel EAM pour deux atomes en interaction du même type et son 1er dérivé.

Ici, les paramètres de Al $\varepsilon = 3.58$ eV, $r_0 = 2.86$ Å, $\alpha = 4.61$ sont utilisés [11].

II.2.5 Le potentiel de Stillinger

Stillinger et al. [21] ont développé un modèle de potentiel pour l'étude des propriétés du volume des gaz rares (Ar, Kr, Xe). En outre, il a été utilisé pour l'étude des agrégats d'Argon à différentes tailles [2].

C'est un potentiel à deux paires dont les particules interagissent selon la formule suivante:

$$\Phi(r_1 \dots N) = \sum_{i < j} V(r_{ij}) \quad (40)$$

tel que :

$$\begin{aligned} V(r) &= A(r^{-12} - r^{-5}) \exp[(r - a)^{-1}] & 0 < r < a \\ V(r) &= 0 & a \leq r \end{aligned} \quad (41)$$

a est la distance de coupure du potentiel. A est un paramètre ajusté à l'énergie de cohésion et au paramètre de réseau [2].

Comme il a été remarqué, ce potentiel possède l'avantage par rapport à celui de Lennard-Jones, de reproduire la structure CFC à basse température, alors que le potentiel de Lennard-Jones prévoit la structure hexagonale compacte (HCP) [2].

II.2.6 Le potentiel de Stillinger-Weber (SW)

Afin de combler les insuffisances des potentiels de paire, Stillinger-Weber [22-23] ont proposé un nouveau modèle de potentiel qui a une dépendance radiale et une autre angulaire. Il est donné par la formule suivante [2]:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j} (i \neq j) V_2(r_i, r_j) + \sum_{i,j,k} (k \neq i,j) V_3(r_i, r_j, r_k) \quad (42)$$

$$V_2(r_{ij}) = \varepsilon f_2 \left(\frac{r_{ij}}{\sigma} \right) \quad (43)$$

$$V_3(r_i, r_j, r_k) = \varepsilon f_3 \left(\frac{r_i}{\sigma}, \frac{r_j}{\sigma}, \frac{r_k}{\sigma} \right)$$

ε est choisi pour donner à f_2 la profondeur -1, et σ est choisi pour que $f_2(2^{1/6})$ tende vers zéro. Notons que f_2 ne dépend que de la distance r . Par contre f_3 possède une symétrie de translation et de rotation. Le potentiel à 2 corps (V_2) utilisé par SW est décrit par les cinq paramètres suivants [2]:

$$\begin{aligned} f_2(r) &= A(B r^{-p} - r^{-q}) \exp[(r - a)^{-1}] & r \leq a \\ &0 & r > a \end{aligned} \quad (44)$$

A , B , p , q et a sont positifs; $r = a$ est la distance de coupure du potentiel à 2 corps et il est utilisé même lorsqu'on tient compte des interactions à 3 corps tel que:

$$f_3(r_i, r_j, r_k) = h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) + h(r_{ji}, r_{jk}, \theta_{ijk}) + h(r_{ki}, r_{kj}, \theta_{ikj}) \quad (45)$$

Où θ_{jik} est l'angle entre r_j et r_k .

θ_{ijk} est l'angle entre r_i et r_k .

θ_{ikj} est l'angle entre r_i et r_j .

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) = \lambda \exp[h(r_{ij} - a) - 1 + \gamma(r_{ik} - a) - 1] * (\cos \theta_{jik} + 1/3)^2 \quad (46)$$

On remarque que h tend vers zéro lorsque $\cos \theta = -1/3$, c'est à dire que $\theta \approx 109^\circ$ (l'angle retrouvé dans une hybridation sp^3). Ce potentiel a été utilisé pour simuler les propriétés du silicium à l'état liquide et modéliser les interfaces solide-liquide. Cependant, il n'est pas adapté pour l'étude des surfaces [2].

II.2.7 Le potentiel de Biswas-Hamann

Biswas et Hamann [24] ont introduit en 1987 une nouvelle forme de potentiel à trois corps qui réduit la complexité du calcul de l'énergie et des forces atomiques depuis n^3 à n^2 où n est le nombre d'atomes en interactions. Il est défini par l'expression suivante [2]:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_2(r_i, r_j) + \sum_{i,j,k(k \neq i,j)} V_3(r_i, r_j, r_k) \quad (47)$$

Le potentiel $V_3(r_i, r_j, r_k)$ peut être exprimé par les deux longueurs r_{ij} , r_{ik} et l'angle θ_i . En supposant que F_l soit séparable et est le produit de deux fonctions g_l , on obtient [2]:

$$V_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_i) = \sum_l C_l g_l(r_{ij}) g_l(r_{ik}) P_l(\cos \theta_i) \quad (48)$$

Le théorème d'addition pour les harmoniques sphériques réduit l'énergie potentiel à trois corps en une somme à deux corps:

$$\sum_{j,k} V_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_i) = \sum_l C_l \left[\frac{4\pi}{2l} + 1 \right] \sum_{m=-l}^l g_{lm}^{*i} g_{lm}^i \quad (49)$$

$$\text{Où} \quad g_{lm}^i = \sum_j g_l(r_{ij}) Y_{lm}(r_{ij}) \quad (50)$$

les vecteurs g_{lm}^i représentent les moments autour de l'atome i .

L'équation (49) ne peut être substituée dans l'équation (47) puisqu'on a ignoré la condition $j \neq k$. Cette correction introduit une modification pour les interactions à deux corps. [2]

$$\sum_{j,k (k \neq j)} V_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_i) = \sum_{j,k} V_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_i) - \sum_j f'(r_{ij}) \quad (50)$$

Où
$$f'(r) = \sum_l C_l g_l^j(r)$$

Ce modèle a été utilisé pour la première fois dans l'étude des propriétés structurales du silicium. Cependant, il est limité pour l'étude de certaines structures tétraédriques [2].

II.2.8 Le potentiel de Lennard-Jones

Les potentiels de Lennard-Jones furent introduits en 1924 par le physicien John Lennard-Jones. Ces potentiels sont des potentiels de paire, c'est à dire qu'ils décrivent l'interaction entre 2 atomes en utilisant uniquement la distance r_{ij} les séparant.

Les potentiels de Lennard-Jones s'écrivent de la manière suivante [6]

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (51)$$

Le terme en $\frac{1}{6}$ décrit un effet attractif entre les atomes à longues distances. Le terme en $\frac{1}{12}$ décrit un effet répulsif entre les atomes à courtes distances. Nous avons représenté un potentiel de Lennard-Jones dans la Fig.10.

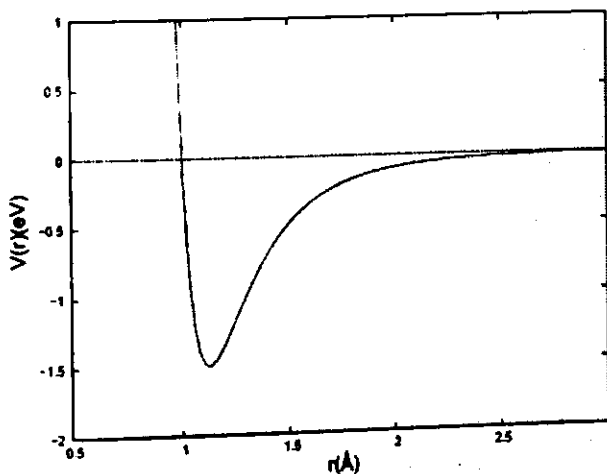


FIGURE. 10 : Exemple d'un potentiel de Lennard-Jones [6].

L'énergie potentielle U du système est donnée par la somme des contributions énergétiques de tous les atomes du système simulé [6]:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(V_{ij}) \quad (52)$$

Les principaux avantages des potentiels de Lennard-Jones sont leurs facilités à mettre en œuvre et leur faible coût en temps de calcul. Ces potentiels sont très efficaces pour simuler les gaz rares. Cependant ces potentiels ont du mal à correctement représenter les métaux. Notamment les potentiels de Lennard-Jones satisfont à la relation de Cauchy $c_{12} = c_{44}$ qui n'est, en général, pas vérifiée pour les métaux. Pour palier à cette lacune d'autres potentiels ont été élaborés [6].

TABLEAU. 3 : paramètre du potentiel de Lennard-Jones réglé pour différents matériaux [20]

Symboles	Mass (10^{-27} Kg)	ϵ (10^{-21} J)	σ (10^{-10} m)
Ne	33.51	0.5315	2.786
Ar	66.34	1.6539	3.405
Kr	139.16	2.2075	3.639
Xe	218.02	3.0497	3.962
Cu	105.52	65.626	2.338
Ag	179.13	55.276	2.644

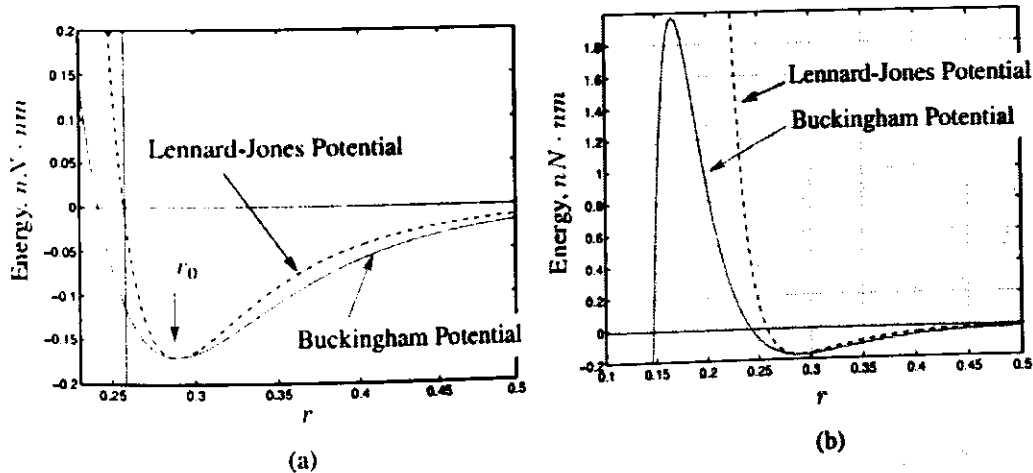


FIGURE. 11: (a) les potentiels de Buckingham et de Lennard-Jones (ligne pointillée). (b) La catastrophe de Buckingham: le potentiel de Buckingham chute rapidement à moins l'infini à courtes séparations [11]

II.2.9 Le potentiel de Morse

Morse a proposé un potentiel interatomique sans dépendance en puissance afin de calculer les niveaux d'énergie des molécules diatomiques [25], tandis que le potentiel doit satisfaire aux conditions suivantes [26] :

- (1) $U(r) \rightarrow 0$ ainsi $r \rightarrow \infty$
- (2) $U(r)$ a un minimum de $r = r_m$ (r_m représente la séparation intermoléculaire)
- (3) $U(r) \rightarrow \infty$ ainsi $r \rightarrow 0$
- (4) $U(r)$ doivent avoir les mêmes niveaux d'énergie permis que ceux donnés par

$$E_n = -\varepsilon + \hbar\omega_0 \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) - x \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \right] \quad (52)$$

qui décrit les données spectroscopiques des molécules.

Morse a choisi la forme suivante pour son potentiel :

$$U(r) = \varepsilon \left[e^{-2\alpha(r-r_m)} - 2e^{-\alpha(r-r_m)} \right] \quad (53)$$

Ou
$$U(r) = \varepsilon \left[\left(1 - e^{-\alpha(r-r_m)} \right)^2 - 1 \right]$$

pour lequel une solution de la partie radiale de l'équation de Schrödinger donne les niveaux du type donné par l'équation d'énergie (52). Toutefois, le potentiel de Morse ne se limite pas aux applications de niveau d'énergie moléculaire. Il a encore été largement utilisé dans l'étude de la dynamique de réseau, la structure des défauts dans les métaux, les gaz inertes dans les métaux, l'équation d'état, propriétés élastiques des métaux, et l'interaction entre les atomes du gaz et des surfaces cristallines, parmi beaucoup d'autres. Le tableau 4 montre les paramètres pour plusieurs métaux [29-30]. Les minimums des puits de ces potentiels sont trop profonds pour quelques considérations, une colonne supplémentaire avec une valeur corrigée pour ε en fonction de la température de fusion ($\varepsilon_c = T_m k_b$) a été insérée [20].

Mais en raison de la redistribution de la charge sur les surfaces métalliques, il est douteux que le potentiel de Morse, ainsi que d'autres potentiels phénoménologiques, peut décrire les propriétés de surface ou de nanostructures. Ici la théorie du pseudo potentiel semble être une bien meilleure approche [20]

TAB. I. 4 : paramètres du potentiel de Morse réglé pour différents matériaux [20]

Symboles	Mass (10^{-27} Kg)	ϵ (10^{-21} J)	ϵ_c (10^{-21} J)	r_m (10^{-10} m)	α (10^{10} m $^{-1}$)
Al	44.806	43.31	12.881	3.253	1.1646
Ni	97.464	67.37	23.829	2.780	1.4199
Cu	105.52	54.94	18.721	2.866	1.3588
Ag	179.13	53.24	17.034	3.115	1.3690
Pb	344.07	37.62	8.289	3.733	1.1836
Ca	66.553	26.00	15.338	4.569	0.80535
Sr	145.50	24.24	14.372	4.998	0.73776
Cr	86.343	70.72	29.655	2.754	1.5721
Fe	92.735	66.88	24.975	2.845	1.3885
Mo	159.32	128.69	39.802	2.976	1.5079
W	305.28	158.71	50.847	3.032	1.4116
Na	38.177	10.15	13.392	5.336	0.58993
K	64.925	8.690	11.873	6.369	0.49767
Rb	141.93	7.441	4.306	7.207	0.42981
Cs	220.71	7.186	4.165	7.557	0.41569
Ba	228.05	22.69	13.626	5.373	0.65698

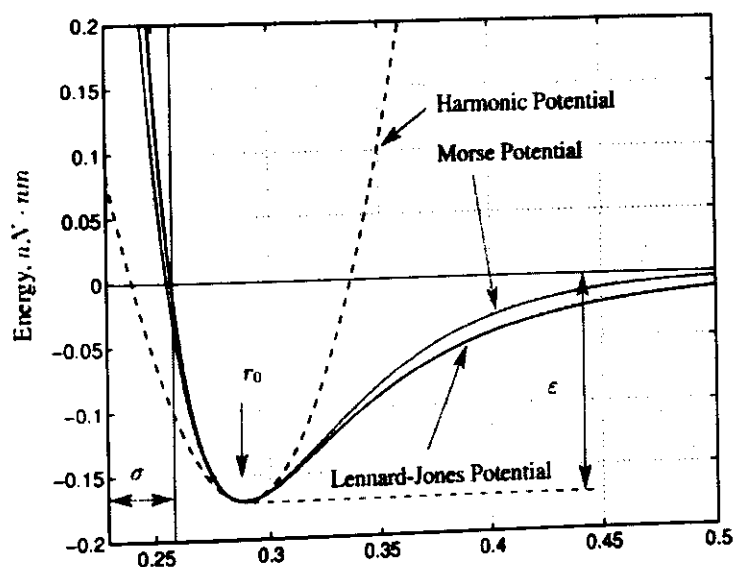


FIGURE. 12: potentiel de paire de Lennard-Jones (LJ) comparé au potentiel de Morse (M) potentiel et à un potentiel harmonique [11].

II.3 Conclusion

Parmi les interactions : les liaisons hétéro et homopolaire, les liaisons de van der Waals et les liaisons métallique. Il est très important de choisir la fonction d'énergie potentielle correcte pour le problème donné. Morse utilise l'équation de Schrödinger qui donne les niveaux du type donné par l'équation d'énergie, la relation du Morse est simple et a une dérivation facile.

Le potentiel de Morse proportionne avec l'état solide pour ces raisons il était proposer de l'utiliser dans notre étude.

Chapitre III :

Etude Bibliographique sur L'aluminium et Théorie de L'élasticité

Théorie de l'élasticité

III.1 ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE SUR L'ALUMINIUM

1854: première apparition de l'aluminium lors d'une présentation à l'Académie des sciences par le chimiste français Sainte-Claire Deville, sous la forme d'un lingot. Cette pièce avait été obtenue par voie chimique [28]

1886: invention du procédé d'électrolyse de l'aluminium par Paul Héroult (France) et Charles Martin Hall (USA)

Depuis l'aluminium a connu un développement très important grâce notamment à son utilisation dans les industries ayant attrait au transport : aviation, automobile, marine. Il est aussi employé dans l'emballage, le bâtiment, l'électricité, la mécanique etc...

III.1.1 Obtention de L'aluminium

III.1.1.1- La Bauxite

L'aluminium est un métal très répandu sur la terre, le troisième élément après l'oxygène et le silicium. Les bauxites qui sont des roches riches en aluminium (45 à 60%) constituent actuellement la source quasi exclusive de ce métal [28].

III.1.1.2- L'alumine

L'alumine est extraite de la bauxite par le procédé Bayer : la bauxite est broyée puis attaquée à chaud par de la soude. On obtient une liqueur qui après séparation des oxydes de fer et de silicium est envoyée dans des décomposeurs pour précipitation de l'alumine.

III.1.1.3- L'aluminium

L'aluminium est obtenu à partir de l'alumine par électrolyse dans une cuve comportant un garnissage en carbone (cathode). L'aluminium formé par électrolyse se dépose au fond de la cuve.

III.1.1.4- Principaux Stades Et Flux Dans La Fabrication De L'aluminium

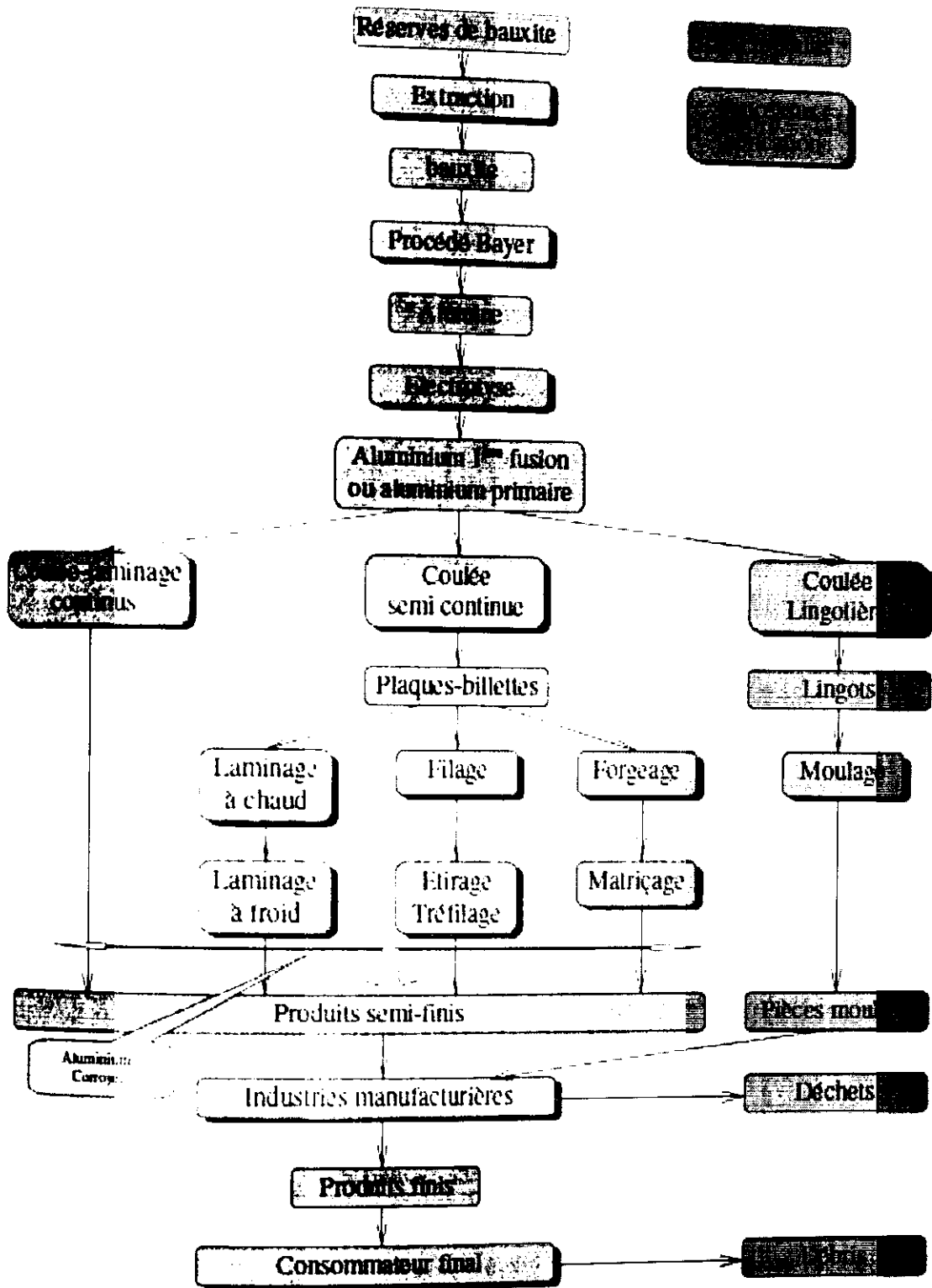


FIGURE. 13 : Les Fabrications De L'aluminium [28]

III.1.1.5 - Quelques Chiffres

- Pour obtenir un tonne d'aluminium, il faut :
- 1900 kg d'alumine
- 380 kg de coke
- 100 kg de brai
- 15 kg de produits caryolytiques
- 13000 kWh sous forme électrique

III.1.2 L'aluminium

Structure : C'est un métal de type cubique à faces centrées (CFC) très malléable.

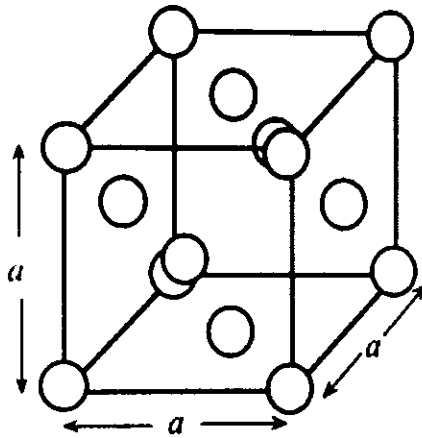


FIGURE. 14 : Structure CFC, où a est constante de réseau.

III.1.2.1- Principales propriétés :

- bon conducteur de la chaleur et de l'électricité
- faible masse volumique : $2,7 \text{ kg/dm}^3$
- point de fusion : $658 \text{ }^\circ\text{C}$
- faible module d'Young : 70000 N/mm^2 70000 Mpa 7000 DaN/mm^2
- le coefficient de rigidité par unité de masse est sensiblement égal à celui de l'acier
- faible limite élastique
- fort allongement à la rupture (tôles minces, feuilles, papier)

La résistance à la corrosion est bonne à condition que la couche d'alumine soit formée car ensuite elle empêche la corrosion de pénétrer dans l'aluminium.

Par contre l'association avec un métal plus électropositif (acier, alliages de cuivre) détruit la couche d'alumine qui ne peut donc plus protéger l'aluminium [28].

III.1.2.2 - Emploi

L'emploi de l'aluminium est surtout motivé par sa **faible masse volumique** (le tiers de celle de l'acier et du cuivre).

C'est un matériau qui se moule bien. Il est aussi utilisé dans l'industrie électrique grâce à sa bonne conductibilité (677 % de celle du cuivre).

L'aluminium est employé aussi comme isolant thermique [28].

III.1.2.3 - Caractéristiques Mécaniques

Tableau. 5 : caractéristiques mécaniques [28]

	Coulé	Laminé recuit
Résistance traction N/mm ²	70 à 100	70 à 90
Limite app d'elast. N/mm ²	30 à 40	30 à 40
Allongement %	15 à 25	40 à 30
Dureté Brinell	15 à 25	15 à 25

L'allongement à l'état recuit (amélioré à chaud) permet d'utiliser les procédés de laminage, forgeage.

La pureté du métal joue un rôle essentiel car plus le métal est pur, plus la dureté, la charge à la rupture diminuent alors que l'allongement augmente.

D'où l'emploi d'éléments alliés dans l'aluminium.

Cette pureté améliore considérablement la résistance chimique du matériau.

Tableau. 6 : Informations générales de l'aluminium [28]

Nom, symbole, numéro atomique	Aluminium, Al, 13
Série chimique	Métal pauvre
Groupe, période, bloc	13(IIIA), 3, p
Masse volumique	2.6989 g/cm ³
Dureté	1.5
Couleur	blanc lustre métallique

Tableau. 7 : Propriétés atomiques du l'aluminium

Masse atomique	$26.9815386 \pm 8 \cdot 10^{-7} \text{ u}$
Rayon atomique (calc)	125 pm (118 pm)
Rayon de Van der Waals	205 pm
Configuration électronique	[Ne] $3s^2 3p^1$
Electrons par niveau d'énergie	2, 8, 3
Etat(s) d'oxydation	3
Oxyde	amphotère
Structure cristallin	cubique à faces centrées

Tableau. 8 : Propriétés physiques du l'aluminium

Etat ordinaire	Solide
Point de fusion	660.323 °C
Point d'ébullition	2519 °C
Energie de fusion	10.79 KJ/mol
Energie de vaporisation	294 KJ/mol (1 atm, 2519 °C)
Volume molaire	$10 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}$
Pression de vapeur	$2.42 \cdot 10^{-6} \text{ pa}$
Vitesse de son	6400 m/s à 20 °C

III.2 THEORIE DE L'ELASTICITE

III.2.1 Définitions et Associations

Soumis à une contrainte, un cristal se déforme de manière linéaire par rapport à cette contrainte pourvu que la déformation engendrée soit faible. Lorsque la contrainte est supprimée, le matériau revient dans son état standard de manière réversible. Ce comportement observé pour tous les matériaux est dit « élastique ». Si la déformation dépasse un certain seuil, deux comportements sont observés [29] :

matériaux fragiles Le matériau rompt avant d'avoir quitté le régime élastique. La rupture dite « fragile » est caractérisée par l'absence de déformation plastique macroscopique, et donc par la propagation très rapide des fissures avec faible consommation d'énergie. La rupture est bien nette, elle suit des plans cristallographiques, on parle de rupture par clivage (par exemple à basse température les métaux cubiques centrés ou certains polymères).

matériaux ductiles Au-delà du régime élastique (marqué par la limite d'élasticité ou *yield strength*) apparaît le régime plastique (voir Fig.15). Le matériau commence à se déformer de manière irréversible. Ceci se produit par un glissement des plans atomiques les uns sur les autres. Ce glissement de plans atomiques se fait grâce au déplacement de défauts linéaires appelés « dislocations ». De la limite d'élasticité à la contrainte ultime (ultimate strength), on observe un régime de durcissement par déformation plastique aussi appelé écrouissage (strength hardening). Ce durcissement est dû aux mouvements des dislocations. Enfin au-delà de la contrainte ultime, une striction se forme (*necking*) puis le matériau rompt. [29]

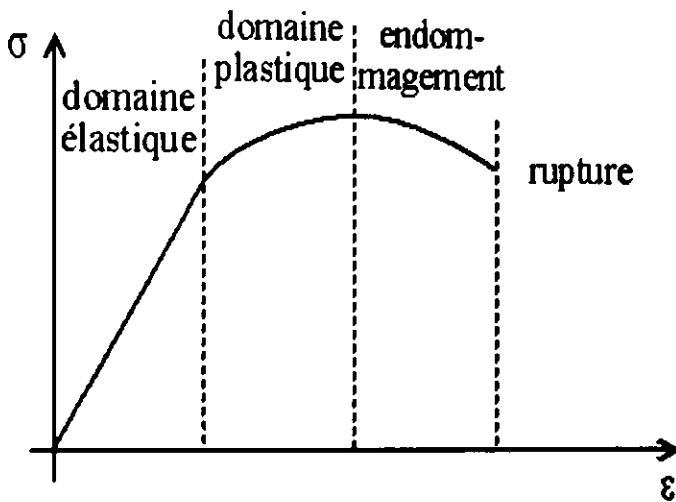


FIGURE 15: Courbe contrainte – déformation typique d'un matériau ductile. [29]

La limite d'élasticité d'un matériau dépend de plusieurs facteurs dont les principaux sont :

- les forces de cohésion interatomique : plus les liaisons entre atomes sont importantes, plus il est difficile de les déplacer donc plus la limite d'élasticité est élevée.
- la structure cristalline : les glissements — les déplacements des dislocations— se font plus facilement sur les plans atomiques ayant une forte densité.
- les atomes étrangers bloquent les dislocations ; les métaux purs sont plus ductiles que les métaux alliés.

- les dislocations sont bloquées par les joints de grain ; plus il y a de joints de grain, donc plus les cristaux sont petits, plus la limite d'élasticité est élevée.

- les dislocations se bloquent entre elles ; plus, le matériau contient de dislocations, plus la limite d'élasticité est élevée (écrouissage).

Ces facteurs dépendent entre autres de la température, donc la limite élastique dépend elle aussi de la température.

Les constantes élastiques peuvent être calculés au moyen de simulations moléculaires de type Monte Carlo. Ce rapport décrit les méthodes existantes et leur mise en œuvre dans des cas simples. [29]

III.2.2 Constantes élastiques

Les propriétés élastiques des solides sont déterminées par des forces interatomiques agissant sur les atomes quand elles sont déplacées à partir des positions d'équilibre.

Pour des faibles déformations ces forces sont proportionnelles aux déplacements d'atomes. A titre d'exemple, considérons un solide 1D [30].

Une courbe de liaison typique a un minimum à la distance interatomique d'équilibre

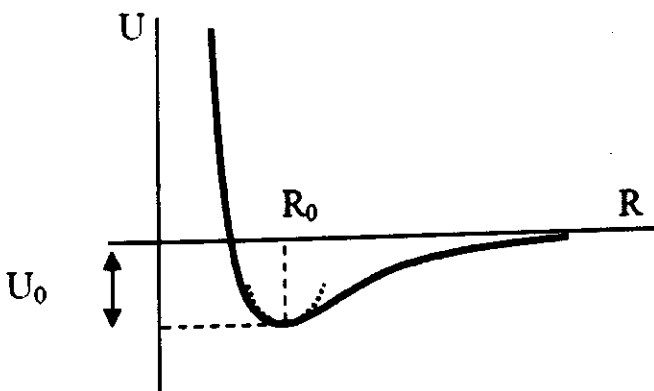


FIGURE. 16 : Relation entre l'interaction interatomique et la distance [30].

L'expansion de l'énergie au minimum dans la série de Taylor, nous trouvons

$$\begin{aligned}
 U(R) &= U(R_0) + \frac{\partial U}{\partial R} \Big|_{R_0} (R - R_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial R^2} \Big|_{R_0} (R - R_0)^2 + \dots \\
 &= U(R_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial R^2} \Big|_{R_0} (R - R_0)^2 + \dots = U_0 + \frac{1}{2} k u^2 + \dots
 \end{aligned}
 \tag{54}$$

Où $k \equiv \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial R^2} \Big|_{R_0}$, $u = R - R_0$

Ensuite, la force est $F = -\frac{\partial U}{\partial R} = -ku$. La constante k est une constante de force interatomique

L'équation ci-dessus représente l'expression la plus simple pour la loi de Hooke démontrant que la force agissant sur un atome de F , est proportionnelle au déplacement u .

Cette loi n'est valable que pour les petits déplacements et caractérise une région linéaire dans laquelle la force de rappel est linéaire par rapport au déplacement d'atomes.

Les propriétés élastiques sont décrites en considérant un cristal comme un milieu continu homogène plutôt qu'un réseau périodique d'atomes.

Dans un cas général, le problème est formulé comme suit:

1. Application des forces, qui sont décrits en termes de contrainte σ , et la détermination des déplacements des atomes qui sont décrits en termes de déformation ϵ .
2. Définir les constantes élastiques C concernant la contrainte σ et la déformation ϵ de sorte que **$\sigma = C \epsilon$ (forme matricielle)**

Exemple: Dans le cas 1D, $F = -ku$, où u est un changement de la longueur du cristal sous la force appliquée F . On peut donc écrire

$$\sigma = \frac{F}{A} = \frac{-kL}{A} \frac{u}{L} = C \epsilon
 \tag{55}$$

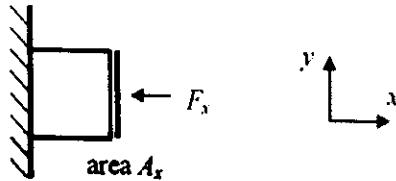
Ici A est l'aire de la section transversale, et L est la longueur du cristal 1D d'équilibre. La contrainte σ est définie comme la force par unité de surface et la déformation ϵ est la constante adimensionnelle, qui décrit le déplacement relatif (déformation). [30]

Dans un cas général d'un cristal 3D, la contrainte et la déformation sont tenseurs qui sont définies comme suit.

► **Contrainte** : a le sens de « pression » local appliqué. Elle comporte des composants σ_{ij} , montrant que la force peut être appliquée le long des trois directions "i" et trois surfaces "j". La contrainte est définie localement, de sorte que $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}(\mathbf{r})$. [30]

Contrainte de compression (σ_{xx} σ_{yy} σ_{zz}):

$$\sigma_{xx} = \frac{F_x}{A_x}$$



Contrainte de cisaillement (σ_{xy} σ_{yx} σ_{yz} σ_{zy} σ_{xz} σ_{zx}):

$$\sigma_{yx} = \frac{F_y}{A_x}$$

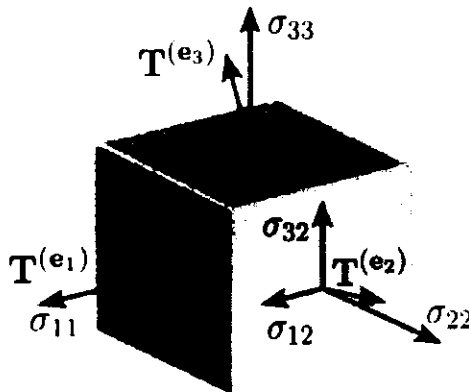


FIGURE.17 : Composantes du tenseur des contraintes.

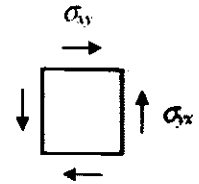
Le tenseur des contraintes, un tenseur de second ordre. Les composantes du tenseur, dans un système tridimensionnel de coordonnées cartésiennes, forment la matrice

$$\sigma = [\mathcal{T}(e_1) \quad \mathcal{T}(e_2) \quad \mathcal{T}(e_3)]$$

$$= \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (56)$$

dont les colonnes sont les contraintes (forces par unité de surface) agissant sur les faces du cube e_1 , e_2 , et e_3 [30].

Les forces de cisaillement doivent être présent en paires pour conserver le moment angulaire à l'intérieur du cristal. Cela rend le tenseur symétrique : [30]



$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad (57)$$

Et par conséquent, les neuf composantes du tenseur sont constituées de six contraintes élémentaires indépendantes. La déformation élastique dans un solide peut également être décrite comme un tenseur symétrique, ϵ_{ij} , liée au tenseur de contraintes par le tenseur de rigidité C_{ijkl} [30] :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (58)$$

Le tenseur de rigidité est également symétrique:

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{klij} \quad (59)$$

Et donc les 81 (3^4) les composants peuvent être réduits à 21 variables indépendantes de rigidité. Les constantes élastiques de l'ingénierie sont généralement exprimées en notation Voigt comme matrice symétrique 6*6 :

Tableau. 9 : Indices pour basculer entre tenseur et la notation Voigt [31]

Indices tenseur	indices Voigt
$i = j = 1$	1
$i = j = 2$	2
$i = j = 3$	3
$i = 1, j = 2$ ou $i = 2, j = 1$	6
$i = 1, j = 3$ ou $i = 3, j = 1$	5
$i = 2, j = 3$ ou $i = 3, j = 2$	4

$$C_{IJ} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ - & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ - & - & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ - & - & - & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ - & - & - & - & C_{55} & C_{56} \\ - & - & - & - & - & C_{66} \end{bmatrix} \quad (60)$$

Par conséquent, la notation de tenseur doit être remplacée par la notation Voigt ($C_{ijk} \rightarrow C_{IJ}$) [31] et les indices appropriés sont présentés dans le tableau 9 [31].

Indice I en notation Voigt est calculée à partir des indices de tenseurs ij et aussi J à partir de lk . Ainsi, par exemple $C_{11,23}$ devient $C_{1,4}$.

Dans le cas d'un matériau isotrope la matrice de rigidité en notation Voigt est: [31]

$$C_{IJ} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ - & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ - & - & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ - & - & - & C_{44} & 0 & 0 \\ - & - & - & - & C_{44} & 0 \\ - & - & - & - & - & C_{44} \end{bmatrix} \quad (61)$$

Où:

$$C_{11} = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)}$$

$$C_{12} = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$$

$$C_{44} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (62)$$

Où:

E : module de Young

ν : Coefficient de Poisson

Tableau. 10 : L'ordre de grandeur des coefficients élastiques de quelques matériaux courants [32]

	Densité (Kg/m ³)	Module de Young (kN/cm ²)	Coefficient de Poisson
Acier	7850	20500	0.3
Aluminium	2700	7000	0.34
Cuivre	2930	12000	0.35
Sapin sec	550	1050	0.46
Chêne sec	800	1150	0.45
Béton	2300	3500	0.18
Verre	2500	6000	0.22
Caoutchouc	1200	5	0.50
Plexiglas	1180	300	0.36

III.3 Conclusion

Les propriétés élastiques sont décrites un cristal comme un milieu continu homogène ; Dans un cas général d'un cristal 3D ; La déformation élastique dans un solide peut être décrite comme un tenseur symétrique, liée au tenseur de contraintes par le tenseur de rigidité (les constantes élastiques), donc ils ont une forme matricielle.

Dans le cas d'un matériau isotrope la matrice de rigidité en notation Voigt garde seulement les éléments : C_{11} , C_{12} et C_{44} .

Chapitre IV : Simulation et Discussion des résultats

des résultats

IV.1 Potentiel et Forces Interatomiques:

Le potentiel est le cœur de la simulation par dynamique moléculaire, il regroupe les interactions atomique dans le réseau cristallin où les erreurs dans les résultats de la simulation sont petites et le comportement du matériau dans la simulation est plus proche de la réalité, on a effectué cette simulation à base température pour éviter les complexité de l'introduction des phonons du réseau dans les calculs du comportement des atomes, on a utilisé le potentiel de Morse et on a ajouté un terme $f(r)$ pour améliorer la stabilité du réseau cristallin, nous avons eu le potentiel final à la forme suivante:

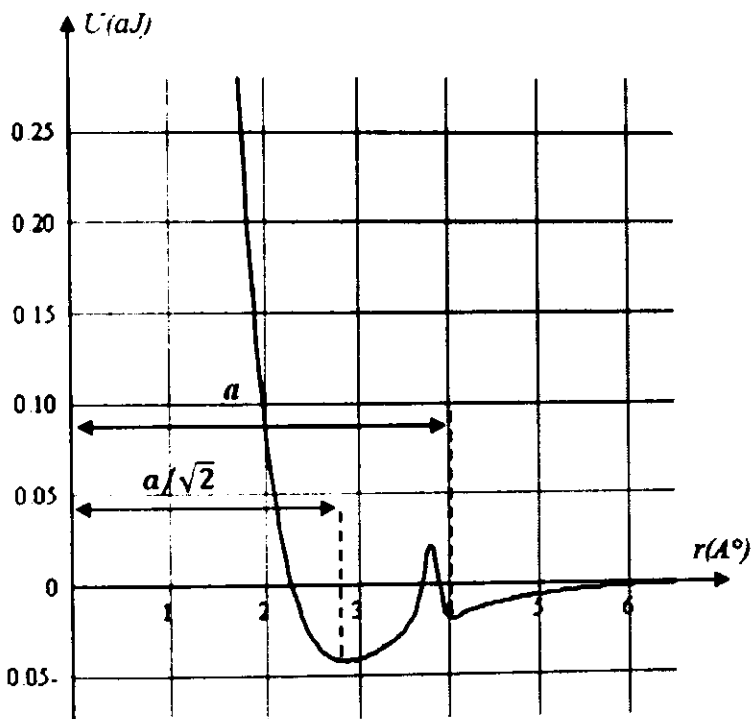


FIGURE. 18 : les positions idéales des atomes du premier et deuxième voisin concernant notre potentiel hybride.

Bien connu que le potentiel de Morse étudié utilise seulement les interactions entre 2 atomes, notre forme utilisée 3 atomes en même temps, c'est-à-dire en a amélioré la forme originale du potentiel pour obtenir la forme de potentiel à plusieurs corps.

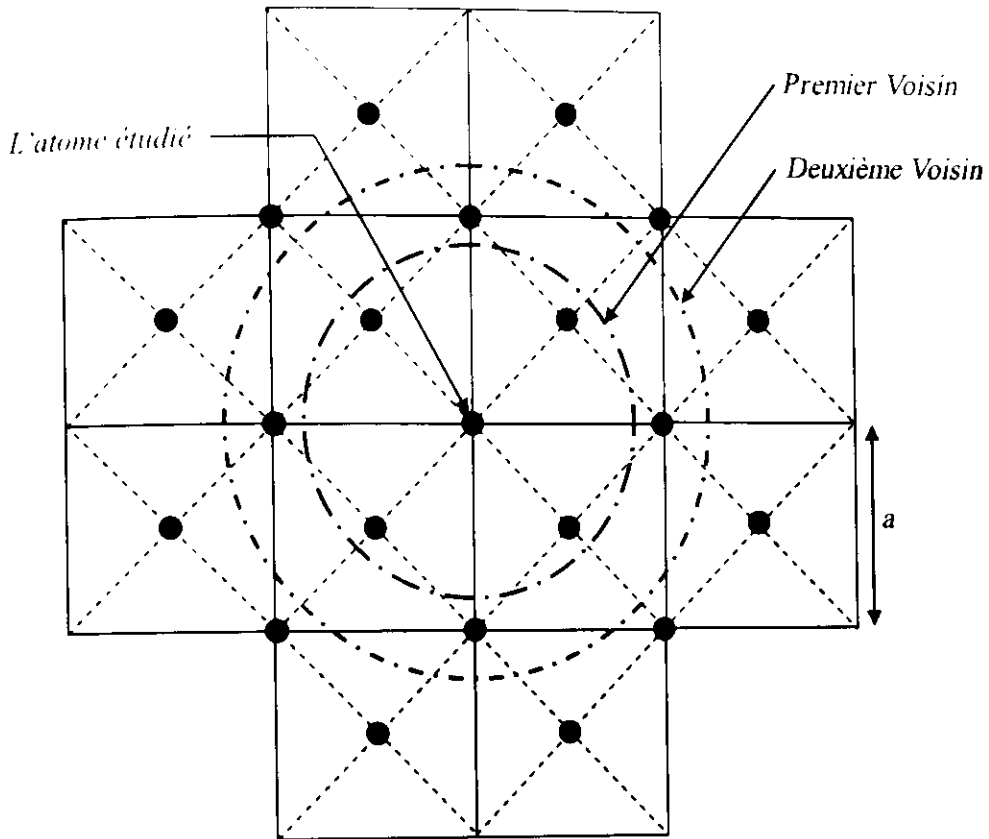


FIGURE. 19 : Coupe dans le réseau, premier et deuxième voisin de l'atome étudié dans la structure CFC

pour la structure CFC chaque atome possède 12 atomes premiers voisins et 6 deuxièmes voisins.

par intégration du potentiel en obtenant la formule suivante de la force entre deux atomes :

A. Interactions des premiers voisins:

$$F_1 = k \frac{q^2}{\left(\frac{a}{\sqrt{2}}\right)^2} = 2k \frac{q^2}{a^2}$$

B. Interactions des deuxièmes voisins :

$$F_2 = k \frac{q^2}{a^2} = \frac{F_1}{2}$$

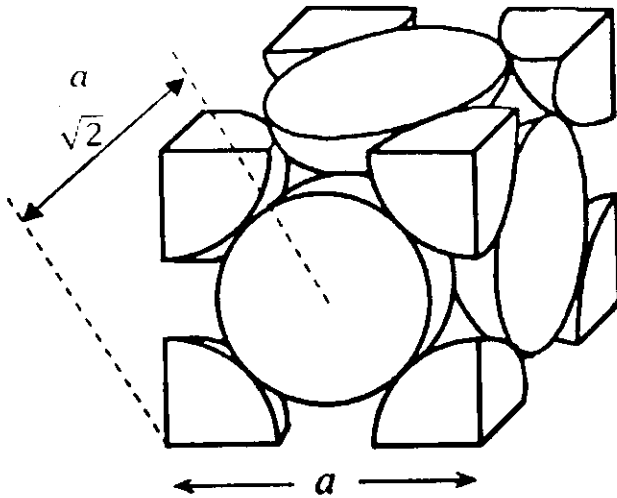


FIGURE.20 : Longueur de la cellule et l'espace entre deux atomes voisins dans la structure CFC.

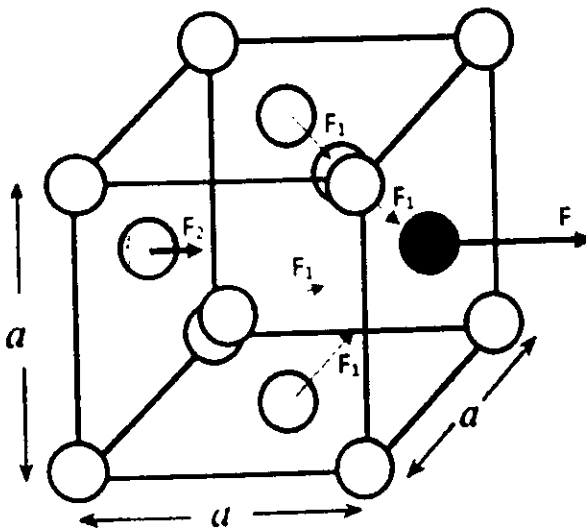


FIGURE.21 : schéma des interactions des premiers et deuxièmes voisins dans la structure CFC.

IV.2 Explication de la Simulation:

Ce programme a été effectué en langage Matlab en se basant sur la méthode prédicteur /correcteur expliquée récemment, où nous avons mis en premier lieu les atomes d'aluminium en structure CFC

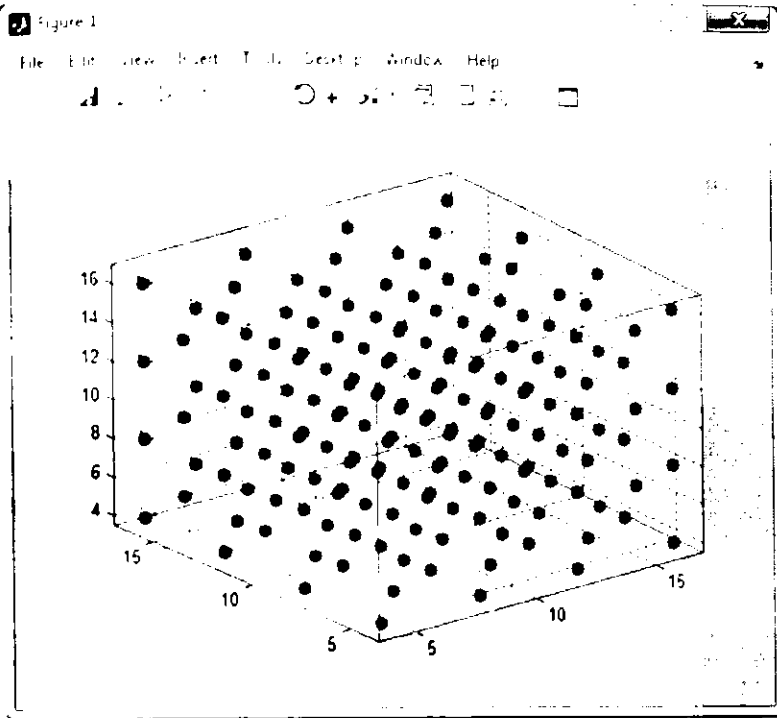


FIGURE 22 interface du programme de simulation.

On a choisi les vitesses initiales aléatoires des atomes à condition que la somme des vitesses moyenne sur les trois axes soient égales à zéro pour assurer que la matière ne soit pas en mouvement lors de la simulation, en plus on a introduit la formule de Boltzmann $V = \frac{3}{2} K_B T$ pour relier les vitesses des atomes à la température supposée de la simulation, ces conditions restent applicables au cours de la simulation.

On a utilisé les données suivantes :

- $N=500$, nombre d'atomes
- $T=273K$, on détermine la valeur de la température T .
- $dt=2.9e-2$ fs, intervalle de temps de la simulation.
- $maxeqb=50$, nombre des retirations jusqu'à l'équilibration.
- $maxstp=5000$, nombre des retirations après équilibration jusqu'à la fin de simulation.
- $Lc=4.05$ °A, la constante du réseau
- $mass=448.06$ ($1e-28 * kg/molécule$), la masse d'un atome.

Le code de simulation est composé de 5 partiels :

IV.2.1 Initialisation :

Dans cette partie du programme, on met tous les constantes du matériau et les conditions thermodynamiques de la simulation, Cette partie est constituée des étapes suivantes:

1- Conditions et constantes thermodynamiques, constantes atomiques, intervalles de temps de chaque partie de la simulation.

Définition des positions initiales d'atomes. Définition des atomes sur chaque face pour l'utiliser dans le calcul des constantes élastiques.

2- choisir les vitesses et les positions initiales des atomes

3- déterminer la liste des premiers voisins et des deuxièmes voisins pour chaque atome.

4- Calcule des valeurs initiales du potentiel et des forces.

IV.2.2 Equilibration :

Dans cette partie de la simulation on laisse les atomes interagissent pendant un intervalle de temps que nous choisissons, pour que la configuration interne du matériau soit la plus proche possible de la configuration à la réalité, les résultats de la simulation dans cette partie ne sont pas pris en considération parce que l'erreur sur les résultats est grande, parce que notre système est à une configuration très loin de sa configuration à la réalité

La partie équilibration contient les opérations suivantes, pour un intervalle de temps défini par la variable logique `maxeqb` qui fixe le nombre des itérations :

1. Prévoir les nouvelles positions et vitesses des atomes.

2. Calculer l'énergie potentielle et les forces.

3. correction des valeurs prévues.

4. ajustement des vitesses des atomes dans le réseau selon la température de la simulation.

5. Mise à jour de la liste des voisins.

6. calcul des propriétés physiques choisies du matériau (température T, constante du réseau à nombre du premier et du deuxième voisin, vitesses des atomes,).

7. affichage des propriétés calculées

8. Enfin, affichage du rapport des résultats d'équilibration.

La raison de l'étape 4 «func_vits_temp.m» est de fixer la température de la simulation, c'est-à-dire ne pas laisser le matériau chauffer ou refroidir.

la vitesse est ajustez en utilisant la formule de Boltzmann, cette formule est généralement la plus utilisée pour les simulations des fluides mais en a fait l'hypothèse qu'on peut utiliser cette formule pour les solides a condition qu'on reste à des faible températures pour ne pas introduire l'effet des phonons.

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \sum_{\alpha=x,y,z} v_{\alpha,i}^2 = \frac{3}{2} N k_b T \Rightarrow \sum_{\alpha=x,y,z} v_{\alpha,i}^2 = \frac{3 N k_b T}{\sum_{i=1}^N m_i}$$

$$v = \sqrt{\frac{3 N k_b T}{m}}$$

Elle représente la valeur de la vitesse à la température T.

IV.2.3 Prédiction des données :

Après que le système est à l'équilibre, nous pouvons calculer les propriétés de notre matériau, les opérations effectués dans cette partie sont les mêmes opérations de la partie équilibration sauf que cette fois les résultats sont pris en considération.

IV.2.4 Calcul des constantes élastiques:

Dans cette partie, nous nous intéressons seulement au calcul des constantes élastiques .

On applique une des contraintes d'élongation suivant l'axe X du matériau est on calcule les déformations correspondantes

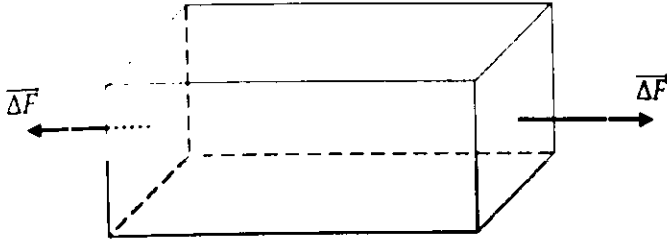


FIGURE. 23 : la force appliquée dans le réseau

Chaque fois que nous calculons les valeurs de : ϵ_x , ϵ_y , ϵ_z , σ_x .

Où: - La contrainte $\sigma_x = \frac{F}{S}$

- La déformation suivant x : $\epsilon_x = \frac{dx}{\Delta x}$

- La déformation suivant y $\epsilon_y = -\frac{dy}{\Delta y}$

Où:

F: La force appliquée.

S: la surface du cube.

dx: L'élongation suivante X

dy: le changement de la dimension suivante Y.

$\Delta x, \Delta y$: la longueur et la largeur avant l'application de la contrainte.

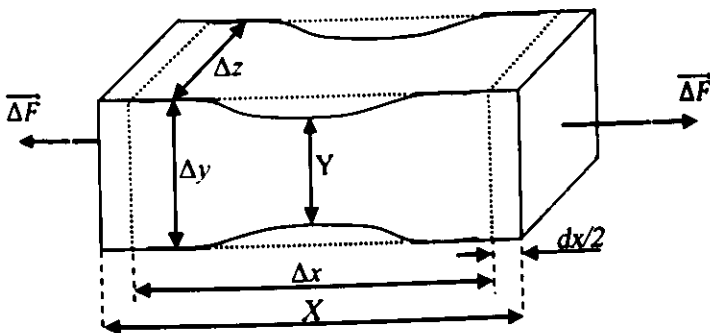


FIGURE. 24 : Les variations de la longueur et la largeur, selon la force

Après, on trace les courbes suivantes:

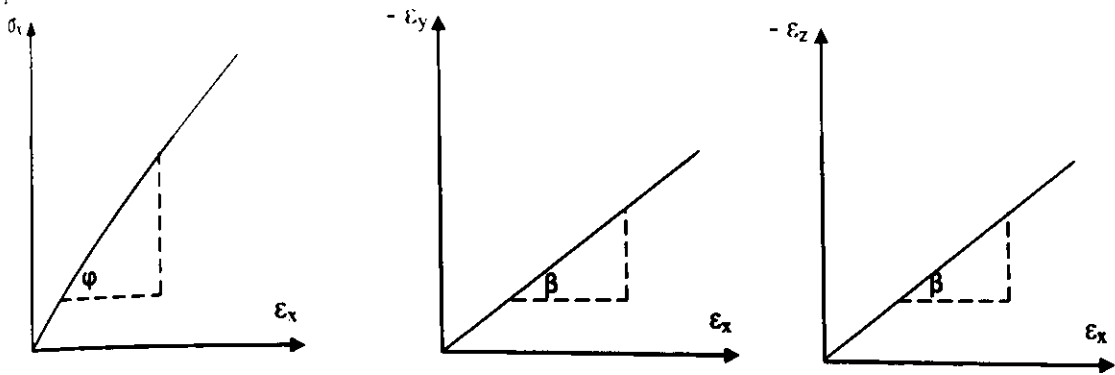


FIGURE. 25 : les courbes $\sigma_x=f(\epsilon_x)$, $-\epsilon_y=f(\epsilon_x)$, $-\epsilon_z=f(\epsilon_x)$, théoriquement

On calcule :

$$\text{tg}(\varphi) = E \text{ (module de Young)}$$

$$\text{tg}(\beta) = \nu \text{ (Coefficient de Poisson)}$$

En fin, nous calculons les constantes élastiques :

$$C_{11} = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)}, \quad C_{12} = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}, \quad C_{44} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) = \frac{E}{2(1+\nu)}$$

IV.3 Les Résultats :

IV.3.1 Position des Atomes :

Le programme calcule les valeurs moyenne d'un échantillon arbitraire des atomes et trace les courbes : $x=f(t)$, $y=f(t)$, $z=f(t)$, $r=f(t)$ des positions des atomes au court de la simulation avant l'application des contraintes

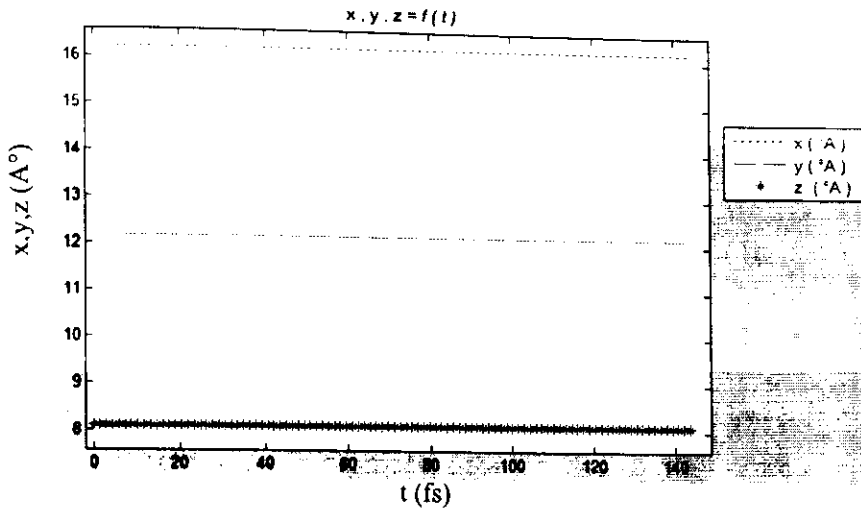


FIGURE. 26 : les courbes : $x=f(t)$, $y=f(t)$, $z=f(t)$, d'un seul atome, dans le cas :

$dt=2.9e-2$; $N=365$; ($maxstp=5000 \Rightarrow t=145$ fs)

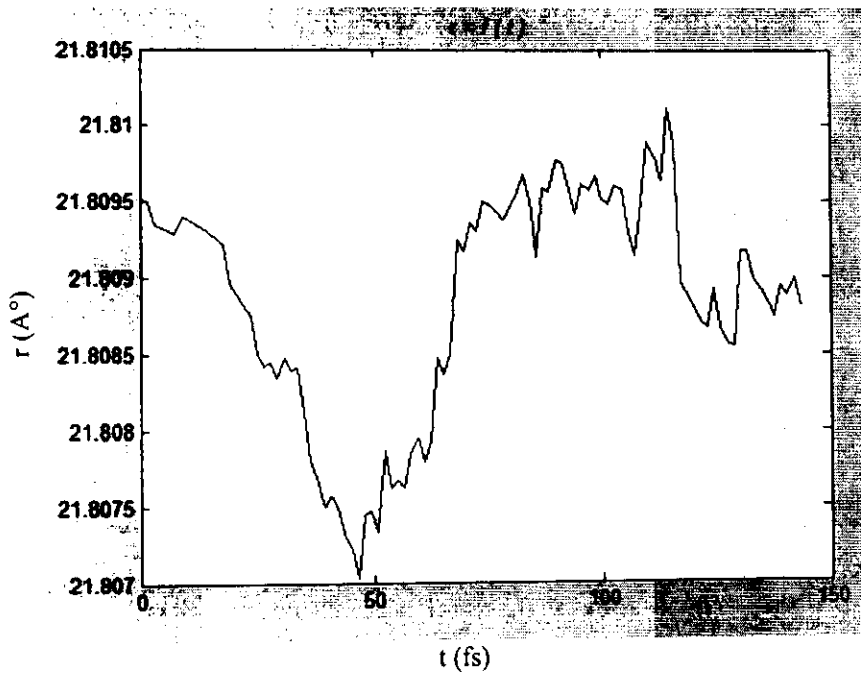


FIGURE. 27 : la courbe : $r=f(t)$, dans le même atome précédent, dans le cas :

$dt = 2.9e-2$; $N=365$; ($maxstp=5000 \Rightarrow t=145$ fs).

D'après les courbes (Fig. 25, Fig. 26) les atomes sont en moyennes stables dans ces positions de la structure CFC, donc la stabilité du réseau est bonne.

IV.3.2 La constante de réseau

Le programme trace aussi la courbe : $a=f(t)$ de l'évolution de la constante du réseau au court de la simulation avant l'application des contraintes

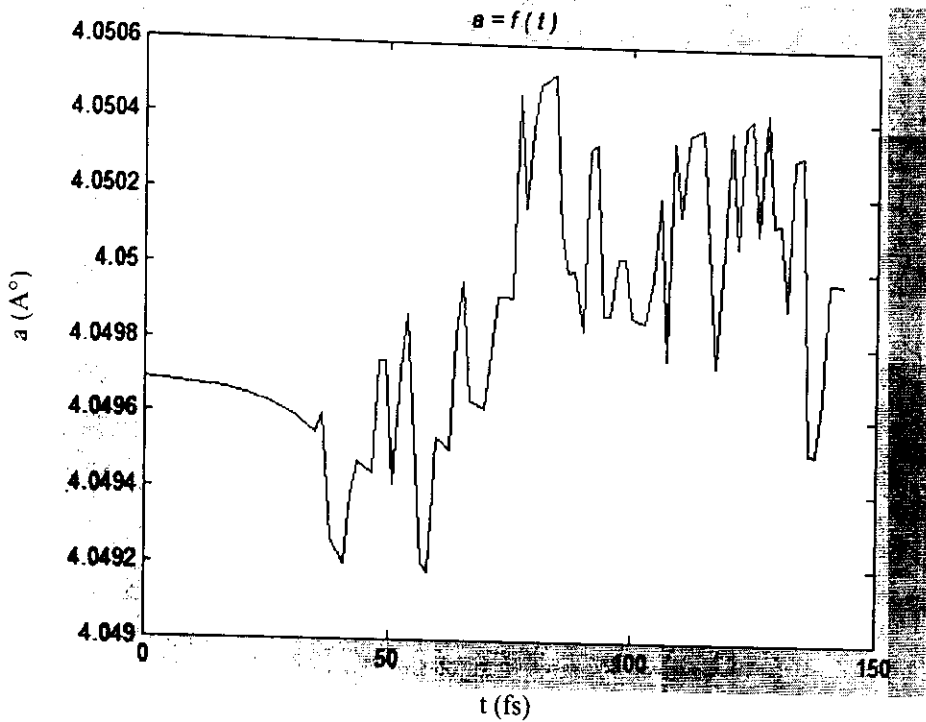


FIGURE. 28 : la courbe : $a=f(t)$, dans le cas :

$dt = 2.9e-2$; $N=365$; ($maxstp=5000 \Rightarrow t=145$ fs) .

La valeur de a , présente des fluctuations autour de sa valeur initiale, alors ça confirme bien la stabilité de notre réseau.

Dans le tableau suivant une comparaison entre la valeur expérimentale et la valeur de la simulation

TABLEAU. 11 : comparaison entre : a expérimental et a simulé

	Valeur expérimental	simulation	erreur
la constante de réseau a (°A)	4.05	4.0497	$7.4 \cdot 10^{-3} \%$

D'après le tableau 11 la valeur expérimentale et la résultat de simulation en bon accord avec l'expérience.

IV.3.3 Les Constantes élastiques :

Le programme trace les courbes suivantes déformation-contraintes :

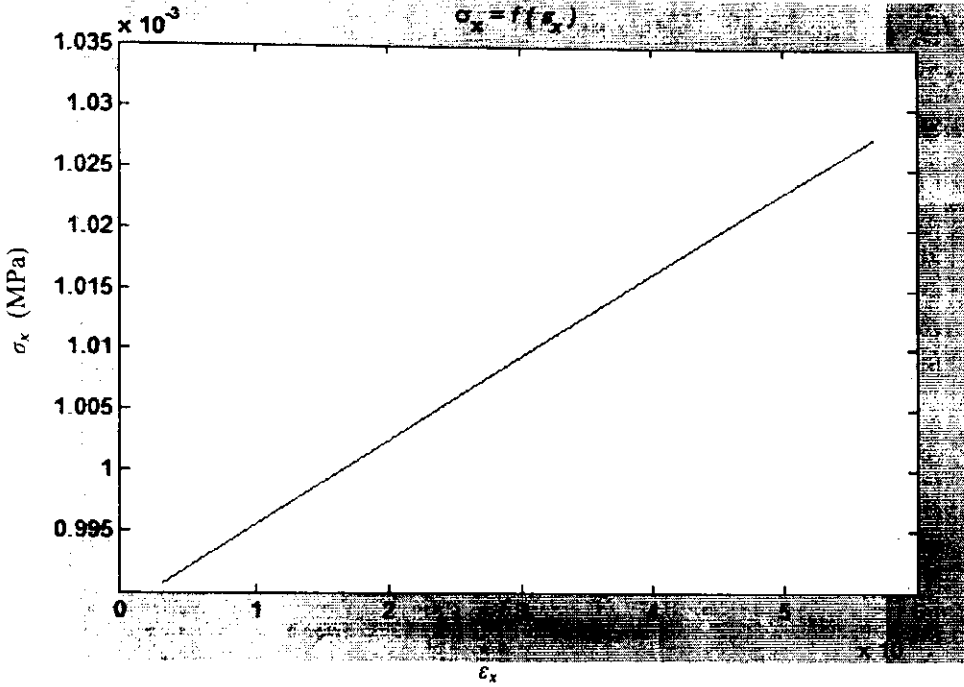


FIGURE. 29: simulation de la courbe $\sigma_x=f(\epsilon_x)$

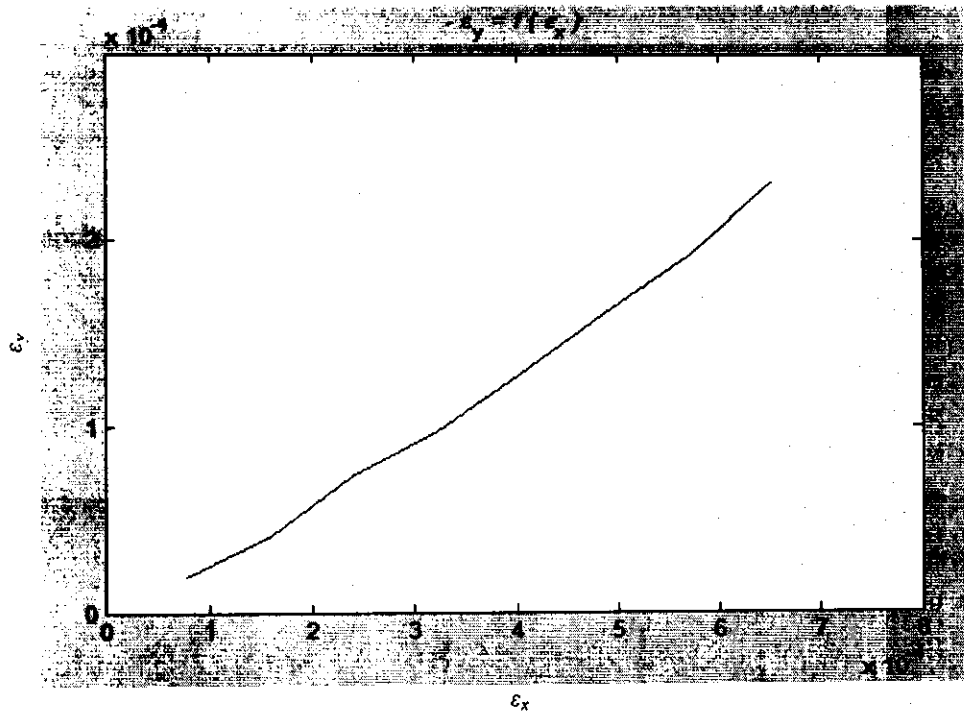


FIGURE. 30 : simulation de la courbe : $-\epsilon_y=f(\epsilon_x)$

Les résultats de calculs du module de Young E et coefficient de Poisson ν sont présentées dans le tableau suivant pour différentes valeurs de contraintes

TABLEAU. 12 : Les valeurs simulées de module de Young et coefficient de poisson

E(GPa)	69.3946	71.6097	71.5992	67.9069	69.4059	71.6015	67.9346	69.4292	69.4285	69.4487
ν	0.3534	0.3331	0.3963	0.3287	0.3799	0.3572	0.3574	0.2963	0.3292	0.3386

On calcule E_{moyen} et ν_{moyen} , et les constantes de la matrice de rigidité, les résultats sont représentés dans le tableau suivant:

TABLEAU. 13: comparaison entre les valeurs expérimentales et les valeurs simulées

	Valeurs expérimentales	Simulation	erreur
E (GPa)	70.0000 [28,32]	69.7759	0.3202 %
ν	0.3400 [32]	0.3470	2.0588 %
C_{11} (GPa)	107.0000	110.5473	3.3152 %
C_{12} (GPa)	60.8000	58.7467	3.3771 %
C_{44} (GPa)	28.3000	25.9003	8.4795 %

D'après le tableau 13 les valeurs expérimentales et les résultats de simulation sont en bon accord.

Conclusion

CONCLUSION

Notre travail fait l'hybridation du potentiel pour obtenir un nouveau potentiel ; on traitant l'une des méthodes connues où on l'a appliqué sur l'aluminium pour que le matériau soit plus stable. On extrait les constantes élastiques par le virtuel réseau dont on les obtenait expérimentalement.

Nous nous sommes intéressés d'étudier les propriétés mécaniques de l'Aluminium par simulation de dynamique moléculaire, le programme utilisé dans cette étude est le MATLAB. Le meilleur choix que nous utilisons dans notre étude est la méthode prédiction/correction qui a des valeurs des positions, les vitesses et les accélérations plus exactes et plus proches du réseau réel ; On propose aussi en simulation, un potentiel hybride, en ajoutant un terme $\Phi(r)$ au potentiel de Morse qui est simple et il a une dérivation facile pour qu'il prenne en considération 3 atomes en même temps.

Les résultats sont :

- ✓ La constante du réseau (a) : valeur 4.0497 (°A) ; erreur $7.4 \cdot 10^{-3}$ % ;
- ✓ module de Young (E) : valeur 69.7759 (GPa) ; erreur 0.3202 % ;
- ✓ coefficient de Poisson (ν) : valeur 0.3470 ; erreur 2.0588 % .

Les constantes élastiques :

- ✓ C11: valeur 110.5473 (GPa) ; erreur 3.3152 %
- ✓ C12 : valeur 58.7467 (GPa) ; erreur 3.3771 %
- ✓ C44 : valeur 25.9003 (GPa) ; erreur 8.4795 %

Nos résultats sont confirmés bien la stabilité de notre réseau ce qui indique notre objet de l'extrait des constantes élastiques par le virtuel réseau et les obtenait expérimentalement ; Le volume et la structure du réseau restera plus stable même après l'application de déformation, on a trouvé aussi les constantes élastiques simulées sont plus proches à des constantes élastiques expérimentales. Nos résultats de la simulation sont en bon accord avec l'expérience ceci est dû à la méthode et les hypothèses qu'on a utilisés qui nous semblent acceptables.

Références

Références

- [1] A. Guillaume. Simulation multi-échelles des solides par une approche couplée dynamique moléculaire/éléments finis. De la modélisation à la simulation haute performance. L'université de Bordeaux. 2007.
- [2] N. TALEB Etude par dynamique moléculaire du comportement élastique et vibrationnel des roches sous pression: cas du carbonate de calcium et de la strontianite. Université de Lille.2009
- [3] R.K. Pathria and Paul D.Beale. Statistical Mechanics. Elsevier Ltd.. Burlington, MA,2011
- [4] Vincent E.Lamberti, Lloyd D. Fosdick, Elizabeth R. Jessup, and Carolyn J.C. Schauble. A hands-on introduction to molecular dynamics. Journal of Chemical Education, 79(5):601,2002.
- [5] B.S. Morgan Groves Molecular Dynamics: Hooke-Lennard-Jones Hybrid Method, Faculty of Texas May, 2012
- [6] A.Kabbab. Cour en Intitulé de la matière: Modélisation Numérique des Matériaux.2014.
- [7] S. Rudolf. On Aspects of Mixed Continuum-Atomistic Material Modelling Kaiserslautern. 2004. D 386
- [8] P. Ehrenfest. Zeitschrift fur Physik, 45:455, 1927.
- [9] W. Heitler and F . London. Wechselwirkung neutraler atome und homäopolare bindung nach der quantenmechanik. Zeitschrift f" ur Physik, 44:455–472, 1927.
- [10] D. I. Blochinzew. Grundlagen der Quantenmechanik. Harri Deutsch, 1988.
- [11] F. London. The general theory of molecular forces. Trans. Faraday Soc., 33:8–26, 1937.
- [12] Jewett Serway. Physics for Scientists and Engineers with Modern Physics, 8th ed. Cengage Learning, 2010.
- [13] D. E. Rutherford. Vector Methods Applied to Di_ erential Geometry, Mechanics, and Potential Theory. Dover Publications, Inc., Mineola, New York, 2004.
- [14] Carl R. Nave. Potential Energy. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/pegrav.html>, August 2000.
- [15] Kathy A. Miles. Seeing further, the legacy of Robert Hooke. June 1996.

- [16] Richard Haberman. *Mathematical Models: Mechanical Vibrations, Population Dynamics, and Traffic Flow*. SIAM, Englewood Cliffs, New Jersey, 1998.
- [17] R. A. Buckingham, *Proc. Roy. Soc. A* 168, 264 (1938).
- [18] R. A. Buckingham, *J. Plan. Space Sci.* 3, 205 (1961).
- [19] I. M. Torrens, *Interatomic Potentials*, Academic Press, New York and London, 1972.
- [20] M. Rieth. *Molecular dynamics calculations for nanostructure d systems* University of Patras
- [21] F. H. Stillinger and A. Rahman, *J. Chem. Phys.* 60, 1545 (1974).
- [22] F. H. Stillinger and T. A weber, *Phys. Rev. B* 31, P5262 (1985).
- [23] Th. A. Weber, F. H. Stillinger, *J. Chem. Phys* 92, 6239; (1990).
- [24] R. Biswas and D. R. Hamann, *Phys.Rev.&* (1987) 6434.
- [25] P. M. Morse, *Phys. Rcv.* 34, 57 (1929).
- [26] I. M. Torrens, *Inter atomic Potentia ls*, Academic Press, New York and London, 1972.
- [27] J. L UBLINER : *Plasticity Theory*. University of California, Berkeley, 2008.
- [28] ALUMINIUM ET ALLIAGES D'ALUMINIUM. Lycée Raymond LOEWY
- [29] N. Desbiens E. Bourasseau, J.-B. Maillat, C. Denoual. *Calcul de constantes élastiques de matériaux solides par simulations Monte Carlo*. 2009.
- [30] *Elastic Properties*. University of Nebraska–Lincoln.2004
- [31] Cerveny V. *Seismic ray theory*. Cambridge University Press, Cambridge .2001
- [32] Guyon, J.-P. Hulin et L. Petit, *Hydrodynamique physique, Savoirs Actuels*, InterEditions/Éditions du CNRS, Paris, 1991.