

## POTENTIELS INTERATOMIQUES

Plusieurs potentiels interatomiques sont utilisés dans la littérature pour étudier les propriétés du Si et des métaux. Une difficulté rencontrée au cours de ce travail a été la compréhension des équations et la clarification des paramètres utilisés pour chacun des potentiels. Dans la première partie de ce chapitre les potentiels interatomiques sont présentés pour les différents matériaux :

- les potentiels exclusivement utilisés pour le Si ou pour les métaux ;
- les potentiels utilisés pour le Si et les métaux ;
- les potentiels croisés.

Ensuite les fonctions mathématiques et les paramètres utilisés pour l'évaluation de potentiels interatomiques (Chapitre 2) sont explicités. Ce travail est nécessaire pour lever les ambiguïtés sur les paramétrisations qui sont considérées.

### 1.1 Potentiels interatomiques pour le Si

Pour le Si, le potentiel de Stillinger-Weber (SW) [22] est le plus employé pour étudier le transfert de chaleur avec des simulations de DM. Un autre potentiel populaire est le potentiel de Tersoff. La version originale [23] a seulement six paramètres ajustables. Deux autres versions, les potentiels Tersoff II et Tersoff III, incluent plus de sept paramètres pour améliorer les propriétés élastiques [24, 25]. Deux autres potentiels développés par Justo *et al.* (*Environment-dependent interatomic potential* : EDIP) [26] et Lenosky *et al.* (*Highly optimized empirical potential* : HOEP) [27] donnent des améliorations partielles, mais la description des propriétés de surface et d'agrégats sont moins satisfaisantes que par les potentiels de SW et de Tersoff [28]. Trois autres potentiels : Pearson, Takai, Halicioglu, et Tiller (PTHT) [29], Bismas et Hamann (BH) [30] et Dodson (DOD) [31] sont utilisés pour étudier les défauts ponctuels dans le Si massif, les constantes élastiques, les polytypes, les transformations de phase induites par pression et les surfaces. Le potentiel Bolding-Andersen (BA) [32] utilise le potentiel de Tersoff comme base avec plus de 30 paramètres ajustables. Il décrit quelques propriétés correctement (les phases du matériau massif, les défauts, les défauts de surface et de petits agrégats), mais sa complexité rend difficile l'interprétation physique de ses équations.

### 1.2 Potentiels interatomiques pour les métaux

Le potentiel *Embedded Atom Method* (EAM), été développé par Daw et Baskes [33] et il est largement appliqué aux métaux de structure cfc [34]. Il y a trois potentiels basés sur le formalisme d'EAM : *Glue*, *Force-matched* et l'EAM modifié. Pour les potentiels *Glue* et *Force-matched*, la différence repose sur la méthode pour obtenir les paramètres. Pour le modèle *Glue*, Ercolessi *et al.* [35] ont utilisé des valeurs expérimentales de l'énergie cohésive, des constantes élastiques et des paramètres thermiques du matériau massif (température de fusion, coefficient de dilatation et fréquence de phonon) et des propriétés de surface pour définir les paramètres. Le potentiel *Force-matched* est basé sur l'identification des paramètres du potentiel permettant de minimiser l'écart entre les forces atomiques obtenues par calcul *ab initio* et celles obtenues par DM [36]. Un autre potentiel utilisé pour les métaux est le *Second-moment approximation to the tight-binding model* (potentiel SMATB), proposé par Tomanek, Aligia, et Balseiro [37] et amélioré par Cleri et Rosato [38] pour appliquer le modèle à plusieurs éléments ainsi qu'aux métaux de transition et aux alliages.

### 1.3 Potentiels interatomiques applicables pour le Si et les métaux

Le potentiel *Modified Embedded Atom Method* (MEAM) inclue la liaison directionnelle et il peut être appliqué aux systèmes covalents, comme le silicium et aussi aux métaux. Le potentiel MEAM pourrait être très pratique pour simuler des systèmes à plusieurs éléments avec le même type de potentiel interatomique. Le potentiel MEAM proposé par Baskes *et al.* [39] a été développé pour le Si et les métaux à structure cfc (y compris Au, Ag et Cu) [40] et nommé le potentiel du premier voisin le plus proche MEAM (1NN MEAM de Baskes) car il inclue les interactions entre les premiers voisins les plus proches.

Lee et Baskes [41] ont ajouté les interactions du deuxième voisin plus proche dans le potentiel 2NN MEAM. Lee a développé une paramétrisation pour le Si [28] nommée ici 2NN MEAM de Lee. Lee *et al.* ont également développé une paramétrisation pour quelques métaux cfc y compris l’Au, l’Ag et le Cu [42] nommée ici le potentiel 2NN MEAM de Lee *et al.*.

### 1.4 Potentiels interatomiques croisés pour Si/métal

L’analyse de la littérature permet de constater qu’il existe deux paramétrisations croisées pour les systèmes Si/Au. L’élaboration du potentiel croisé pour Si/Au dans le Chapitre 3 sera justifié. Pour les systèmes Si/Cu et Si/Ag il n’y avait pas de paramétrisation croisée existante.

Ryu and Cai [13] ont simulé le système Si/Au. Le potentiel 1NN MEAM de Baskes pour le Si et le 2NN MEAM de Lee *et al.* pour l’Au forment la base pour ajuster les paramètres du potentiel croisé. Tout d’abord, les potentiels sont améliorés pour le Si et l’Au [43] pour obtenir respectivement le point de fusion et la chaleur spécifique de manière plus précise. Comme Ryu *et al.* ont modifié les paramétrisations pour le Si et l’Au, leurs paramétrisations seront également évaluées dans le Chapitre 2. La paramétrisation de Ryu *et al.* pour le Si est nommée ici le potentiel 1NN MEAM de Ryu *et al.*. La paramétrisation de Ryu *et al.* pour Au est nommée ici le potentiel 2NN MEAM de Ryu *et al.*. La paramétrisation croisé pour les systèmes Si/Au de Ryu and Cai [13] est nommée ici le potentiel croisé MEAM de Ryu and Cai.

Pour les systèmes binaires, Kuo et Clancy [11] ont étudié une couche mince d’Au sur un substrat de Si en utilisant le potentiel de 1NN MEAM de Baskes comme potentiel de base pour le Si et l’Au avec un ajustement des paramètres du potentiel croisé. Ainsi, des énergies d’attraction et répulsion qui ne figurent pas dans l’équation de Baskes [39] sont ajoutées. La paramétrisation croisée pour les systèmes Si/Au de Kuo et Clancy [11] est nommée ici le potentiel croisé MEAM de Kuo et Clancy.

### Potentiels interatomiques évalués

Les potentiels interatomiques étudiés sont mis en œuvre dans le logiciel de DM *Large-scale Atomic/ Molecular Massively Parallel Simulator* (LAMMPS) [44].

Six potentiels sont considérés pour étudier le transfert de chaleur avec la DM pour le Si. Le potentiel **SW** [22] est le plus largement utilisé. Les potentiels  **Tersoff II** et  **Tersoff III** [24, 25] ont également été fréquemment utilisés. C’est la raison pour laquelle ces potentiels sont considérés ici. Le potentiel **1NN MEAM de Baskes** [40] et le **2NN MEAM de Lee** [28] sont également évalués. Une autre paramétrisation utilisée pour le Si est évaluée, celle de Ryu et Cai [43] qui ont modifié quelques paramètres pour le Si à partir du potentiel 1NN MEAM (nommé ici le potentiel **1NN MEAM de Ryu** [43]).

Pour les métaux les potentiels évalués sont : **EAM**, **1NN MEAM de Baskes** [40] et **2NN MEAM de Lee et al.** [42]. Pour l’Au une autre paramétrisation est testée, celle de Ryu et Cai [43], le potentiel **2NN MEAM de Ryu et al.**

## 1.5 Description des Potentiels

Une difficulté rencontrée au cours de ce travail était de comprendre les différents potentiels interatomiques et les paramétrisations utilisées. Afin d'éclaircir les modèles théoriques utilisés dans ce travail, les fonctions mathématiques et les paramètres utilisés pour tous les potentiels interatomiques évalués dans le Chapitre 2 sont explicités. Nous commencerons par les potentiels disponibles pour le Si : SW et Tersoff (avec les paramétrisations pour Tersoff II et Tersoff III). Ensuite le potentiel EAM utilisé pour les métaux sera discuté. Puis, le potentiel MEAM, appliqué pour le Si et les métaux sera explicité et les différentes paramétrisations déjà existantes dans la littérature et utilisées dans ce travail seront présentées. Finalement, les équations et les paramétrisations pour les potentiels croisés existants dans la littérature sont expliquées.

### 1.5.1 Le potentiel Stillinger-Webber (SW)

Le potentiel SW [22] est basé sur les interactions de deux ( $\phi_2$ ) et trois-corps ( $\phi_3$ ) pour stabiliser la structure diamant du silicium. L'énergie potentielle interatomique  $E$ , est donné par :

$$E_P = \sum_{i,j} \phi_2(r_{ij}) + \sum_{i,j,k} \phi_3(r_{ij}, r_{ik}, \cos \theta_{ijk}), \quad (1.1)$$

où  $j > i$

$$\phi_2(r) = A_{sw} \varepsilon \left[ B_{sw} \left[ \frac{\sigma}{r} \right]^p - \left[ \frac{\sigma}{r} \right]^q \right] \exp \left[ \frac{1}{r-a} \right], \quad (1.2)$$

$$\phi_3(r_{ij}, r_{ik}, \cos \theta_{ijk}) = \lambda_{sw} \varepsilon \exp \left[ \frac{\gamma_{sw} \sigma}{r_{ij} - a} \right] \times \exp \left[ \frac{\gamma_{sw} \sigma}{r_{ik} - a} \right] \left[ \cos \theta_{ijk} + \frac{1}{3} \right]^2,$$

L'indice  $ij$  indique que le paramètre dépend de l'identité des atomes  $i$  et  $j$ .  $A_{sw}$ ,  $B_{sw}$ ,  $p$ ,  $q$ ,  $\lambda_{sw}$ , et  $\gamma_{sw}$  sont les paramètres ajustables et  $r_{ij}$  la distance interatomique entre les atomes  $i$  et  $j$ .  $\varepsilon$  est l'énergie potentielle qui dépend de la nature de l'élément étudié.  $\sigma a$  est la distance à laquelle les interactions atomiques sont négligeables.  $\theta_{ijk}$  est l'angle constitué entre la liaison  $ij$  et  $ik$ .

Les paramètres du potentiel proposé par Stillinger et Webber [22] pour reproduire les propriétés du silicium cristallin et liquide sont indiqués dans le tableau 1.I.

Tableau 1.I – Paramètres du potentiel SW pour le Si.

SW	
$A_{sw}$	7,0495
$B_{sw}$	0,6022
$p$	4,0
$q$	0,0
$a$	1,8
$\lambda_{sw}$	21,0
$\gamma_{sw}$	1,2
$\sigma$ (Å)	2,09
$\varepsilon$ (J/mol)	$2,09 \times 10^5$

### 1.5.2 Le potentiel Tersoff

Le potentiel Tersoff peut être écrit comme un potentiel de pair de Morse [23] avec une fonctionnelle à trois-corps, qui comprend une contribution angulaire de la force interatomique. L'énergie potentielle est donnée par [24] :

$$E_P = \sum_{i \neq j} \phi_{ij}, \quad (1.3)$$

où

$$\phi_{ij} = f_c(r_{ij}) [a_{ij} f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})], \quad (1.4)$$

où  $a_{ij} = 1$ .

$$\eta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) \exp[\lambda_3^3 (r_{ij} - r_{ik})^3], \quad (1.5)$$

$f_c(r_{ij})$  est une fonction *cutoff* :

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & r < r_c - D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin \left[ \frac{\pi}{2} \left( \frac{r - R}{D} \right) \right] & r_c - D < r < r_c + D \\ 0 & r > r_c + D, \end{cases} \quad (1.6)$$

La valeur pour  $r_c$  est choisie pour inclure seulement le premier voisin.

$f_R$  et  $f_A$  sont des fonction de potentiel de pair respectivement répulsive et attractive :

$$f_R(r) = A_T \exp(-\lambda_1 r), \quad (1.7)$$

$$f_A(r) = B_T \exp(-\lambda_2 r), \quad (1.8)$$

et

$$b_{ij} = \chi_{ij} \left( 1 + \beta_T^n \zeta_{ij}^{n_T} \right)^{\frac{-1}{2n_T}}, \quad (1.9)$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \exp[\lambda_3^3 (r_{ij} - r_{ik})^2], \quad (1.10)$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c^2}{d_T^2} - \frac{c^2}{d^2 + (h - \cos \theta_{ijk})^2}. \quad (1.11)$$

Les paramètres ajustables  $A_T$ ,  $B_T$ ,  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$ ,  $\lambda_3$ ,  $\mu$ ,  $\beta_T$ ,  $n_T$ ,  $c$ ,  $d_T$  et  $h$  ont été déterminés par Tersoff.

Dans cette thèse, deux différents groupes de paramètres sont utilisés : les paramètres des potentiels de Tersoff II [24] et de Tersoff III [25] (Table 1.II).

### 1.5.3 Le potentiel EAM

L'énergie potentielle totale,  $E_P$ , d'un système d'atomes est définie par l'expression :

$$E_P = \sum_i \left\{ F_i(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) \right\}. \quad (1.12)$$

Le premier terme est la fonction *embedding* pour l'atome  $i$  incorporé dans une densité d'électrons de fond  $\bar{\rho}_i$ , et le deuxième terme est un potentiel de pair conventionnel entre les

Tableau 1.II – Paramètres des potentiels Tersoff II [24] et III [25] pour le Si.

	Tersoff II	Tersoff III
$A_T$ (eV)	$3,2647 \times 10^3$	$1,8308 \times 10^3$
$B_T$ (eV)	$9,5373 \times 10^1$	$4,7118 \times 10^2$
$\lambda_1$ ( $\text{\AA}^{-1}$ ) <sup>-1</sup>	3,2394	2,4799
$\lambda_2$ ( $\text{\AA}^{-1}$ ) <sup>-1</sup>	1,3258	1,7322
$\lambda_3$ ( $\text{\AA}^{-1}$ ) <sup>-1</sup>	1,3258	1,7322
$\beta_T$	$3,3675 \times 10^{-1}$	$1,0999 \times 10^{-6}$
$n_T$	$2,2956 \times 10^1$	$7,8734 \times 10^{-1}$
$c$	4,8381	$1,0039 \times 10^5$
$d_T$	2,0417	$1,6218 \times 10^1$
$h$	0,0	$-5,9826 \times 10^{-1}$
$R$ ( $\text{\AA}$ )	3,0	2,85
$D$ ( $\text{\AA}$ )	0,2	0,15

atomes  $i$  et  $j$  séparés par une distance  $r_{ij}$  :

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j(\neq i)} \rho_j^a(r_{ij}), \quad (1.13)$$

où  $\rho_j^a$  est la densité électronique de l'atome  $j$ .

Dans le potentiel EAM, la fonction *embedding*  $F_i(\rho_i)$  est donnée par :

$$F_i(\rho_i) = A_i E_i^0 \bar{\rho}_i \ln \bar{\rho}_i, \quad (1.14)$$

où  $A_i$  est le paramètre à déterminer et  $E_i^0$  est l'énergie de sublimation de la matière.

$\phi_{ij}$  est un terme purement répulsif et les interactions entre les atomes de type  $A$  et  $B$  peuvent être écrits [34] :

$$\phi_{AB}(r) = Z_A(r) Z_B(r) / r. \quad (1.15)$$

Le terme de répulsion de pair de l'Eq.1.15 est :

$$Z(r) = Z_0 (1 + \beta_E r^\nu) \exp^{-\varphi r}, \quad (1.16)$$

Les paramètres  $Z_0$ ,  $\varphi$ ,  $\nu$  sont listés dans le Tableau 1.III [34]. La valeur pour  $\beta_E$  est déterminée initialement par le module de cisaillement et l'énergie de formation de lacune.

Les densités atomiques sont dérivées des fonctions d'onde de Hartree-Fock :

$$\rho^a(R) = n_s \rho_s(r) + n_d \rho_d(r), \quad (1.17)$$

$n_s$  et  $n_d$  sont les nombres d'électrons de couches et  $\rho_s$  et  $\rho_d$  sont les densités associées avec les fonctions d'onde  $s$  et  $d$ . Les configurations utilisées par Foiles *et al.* [34] sont indiquées dans le Tableau 1.III.

Le nombre total d'électrons  $s$  et  $d$ ,  $n_s + n_d$ , est fixé à 11 pour le Cu, l'Ag et l'Au, ainsi la densité atomique dépend uniquement du paramètre  $n_s$ . Initialement, la valeur de  $n_s$  est déterminée par la chaleur de mélange des alliages.

Les fonctions résultantes  $Z$  et  $F$  sont montrées sur les Figs. 1.1 et 1.2 [34].

Tableau 1.III – Les paramètres du potentiel EAM pour l’Au, l’Ag et le Cu. La dernière ligne est utilisée pour définir les configurations atomiques utilisées pour calculer  $\rho_s$  et  $\rho_d$ .

	Au	Ag	Cu
$Z_0$	11,0	11,0	11,0
$\phi_i$	1,4475	2,1395	1,7227
$\beta_E$	0,1269	1,3529	0,1609
$\nu$	2	2	2
$n_s$	1,0809	1,6760	1,000
Configuration atomique	$5d^{10}6s^1$	$4d^95s^2$	$3d^{10}4s^1$

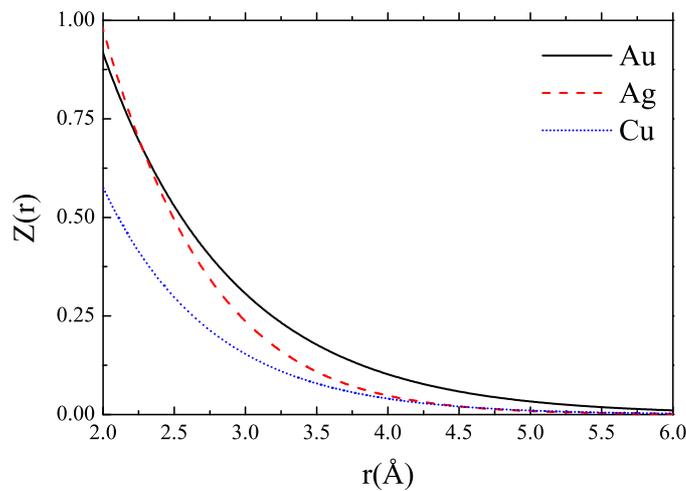


Figure 1.1 – Charge effective  $Z(r)$  utilisée pour définir les interactions de paires (Eq. 1.16) pour l’Au, l’Ag et le Cu.

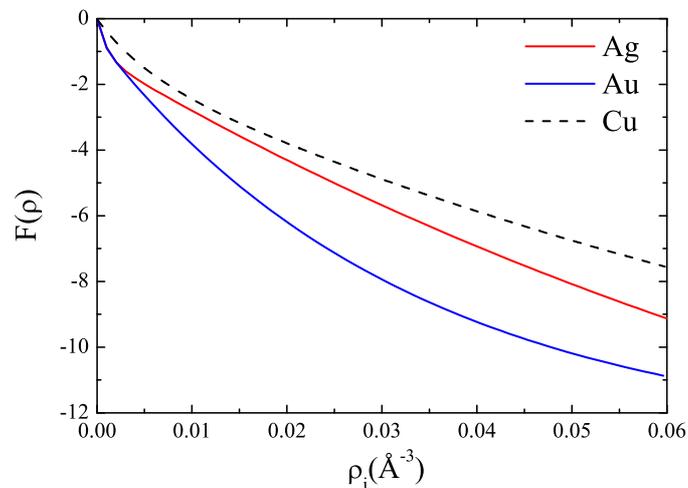


Figure 1.2 – Fonctions *embedding*,  $F(\rho)$ , fonction de la densité électronique de fond pour l’Au, l’Ag et le Cu.

## 1.5.4 Le potentiel MEAM

Le potentiel MEAM est une forme plus générale du potentiel EAM. Les potentiels MEAM pour les métaux cristallins de structure cfc et pour le Si de structure diamant ont été développés en utilisant différents formalismes [28, 40–42].

Dans le potentiel EAM, l'énergie potentielle totale,  $E_P$ , et la fonction *embedding* d'un système d'atomes,  $F_i(\rho_i)$ , sont décrits par les Eqs. 1.12 et 1.14, respectivement, qui sont utilisées aussi pour le potentiel MEAM.

Ce potentiel d'interaction de pair pour l'atome de type  $i$  est alors :

$$\phi_{ii}(R) = \frac{2}{Z_i} \left\{ E_i^u(r) - F_i \left[ \frac{\bar{\rho}_i^0(r)}{Z_i} \right] \right\}, \quad (1.18)$$

$E_i^u$  est l'énergie totale de la structure de référence quand la distance du voisin plus proche est égale à  $r$ , dérivée de l'équation universelle proposé par Rose *et al* [45] :

$$E_i^u(R) = -E_i^0 (1 + a^* + da^{*3}) \exp(-a^*), \quad (1.19)$$

où  $d$  est un paramètre ajustable et  $a^*$  :

$$a^* = \alpha (r/R_i^0), \quad (1.20)$$

$$\alpha_i^2 = \frac{9\Omega_i B_i}{E_i^0}. \quad (1.21)$$

$\Omega_i$  est le volume atomique, et  $B_i$  est la constante élastique pour l'élément  $i$ . La densité électronique de fond,  $\bar{\rho}_i$ , est composée d'une densité électronique partielle à symétrie sphérique,  $\bar{\rho}_i^{(0)}$  :

$$\bar{\rho}_i^{(0)} = \sum_{j(\neq i)} \rho_j^{a(0)}(S_{ij}), \quad (1.22)$$

Cette expression a été généralisée par Baskes [40]. Il a défini une correction pour les densités électroniques qui dépendent explicitement des positions relatives des voisins d'un atome  $i$  :

$$(\bar{\rho}_i^{(1)})^2 = \sum_{\alpha} \left[ \sum_{j(\neq i)} x_{ij}^{\alpha} \rho_j^{a(1)}(S_{ij}) \right]^2, \quad (1.23)$$

$$(\bar{\rho}_i^{(2)})^2 = \sum_{\alpha, \beta} \left[ \sum_{j(\neq i)} x_{ij}^{\alpha} x_{ij}^{\beta} \rho_j^{a(2)}(S_{ij}) \right]^2 - \frac{1}{3} \left[ \sum_{j(\neq i)} \rho_j^{a(2)}(S_{ij}) \right]^2, \quad (1.24)$$

$$(\bar{\rho}_i^{(3)})^2 = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \left[ \sum_{j(\neq i)} x_{ij}^{\alpha} x_{ij}^{\beta} x_{ij}^{\gamma} \rho_j^{a(3)}(S_{ij}) \right]^2 - \frac{3}{5} \sum_{\alpha} \left[ \sum_{j(\neq i)} x_{ij}^{\alpha} \rho_j^{a(3)}(S_{ij}) \right]^2. \quad (1.25)$$

$x_{ij}^{\alpha} = r_{ij}^{\alpha}/r_{ij}$ , où  $r_{ij}^{\alpha}$  est la composante  $\alpha$  du vecteur de distance entre l'atome  $j$  et  $i$ .

L'Eq 1.25 est une modification de l'équation originale du potentiel 1NN MEAM de Baskes *et al.* [39] pour prendre en considération la densité électronique partielle orthogonale [46].  $\rho_i^{a(l)}$  ( $l = 0 - 3$ ) représente la densité atomique électronique d'un atome de type- $i$  à une distance  $r_{ij}$  de l'emplacement  $j$ ;  $l = 0 - 3$  correspond à la symétrie s, p, d, f.

La densité électronique de fond est exprimée par :

$$(\bar{\rho}_i) = \sum_{l=0}^3 t_i^{(l)} \frac{\bar{\rho}_i^0}{\bar{\rho}^0} G, \quad (1.26)$$

où  $\bar{\rho}^0$  est la densité électronique de fond de la structure de référence. Plusieurs expressions ont été proposées pour combiner les densités électroniques partielles, Lee a défini le terme  $G$  [28] pour le potentiel 2NN MEAM :

$$G = \frac{2}{1 + \exp(-\Gamma_i)}. \quad (1.27)$$

Avec :

$$\Gamma = \sum_{l=1}^3 t_i^l \left[ \frac{\bar{\rho}_i^l}{\bar{\rho}_i^0} \right]^2, \quad (1.28)$$

et  $t_i^l$  ( $l = 0 - 3$ ) comme facteurs de pondération déterminés à partir des constantes élastiques de cisaillement. De plus  $t_i^0 = 1$ .

Le facteur *screening*  $S_{ij} = \prod_{k \neq i, j} S_{ikj}$  est inclu comme un facteur *cutoff* pour prendre en compte les contributions relatives des atomes à différents emplacements :

$$S_{ikj} = \begin{cases} 0 & C \leq C_{min}, \\ \left[ 1 - \left( \frac{C_{max} - C}{C_{max} - C_{min}} \right)^4 \right]^2 & \text{for } C_{min} \leq C \leq C_{max}, \\ 1 & C \geq C_{max}, \end{cases} \quad (1.29)$$

Le paramètre  $C$  est déterminé par :

$$C = \frac{2(X_{ik} + X_{kj}) - (X_{ik} + X_{kj})^2 - 1}{1 - (X_{ik} + X_{kj})^2}, \quad (1.30)$$

où  $X_{ik} = \left( \frac{r_{ik}}{r_{ij}} \right)^2$  et  $X_{kj} = \left( \frac{r_{kj}}{r_{ij}} \right)^2$ .

Les valeurs de  $C_{min}$  et  $C_{max}$  sont choisies pour limiter la gamme des interactions atomiques du premier voisin le plus proche. Pour tous les cas utilisant le 1NN MEAM de Baskes pour le Si et les métaux [40], les valeurs sont 2.0 et 2.8, respectivement. Les interactions du deuxième voisin plus proche peuvent être considérées en donnant une valeur moins grande pour le paramètre  $C_{min}$ . Pour ajouter les interactions du deuxième voisin plus proche il suffit d'utiliser une fonction *screening* plus forte. Lee a montré [41] que les interactions entre le deuxième voisin le plus proche pour les potentiels 2NN MEAM de Lee pour le Si [28] et 2NN MEAM de Lee *et al.* [42] pour les métaux, peuvent être incluses en donnant une valeur moins grande que 2.0 pour  $C_{min}$  (voir le Tableau 1.IV).

$\rho_i^{a(l)}$  représente les densités atomiques électroniques pour l'élément  $i$  qui a la forme :

$$\rho_i^{a(l)} = \rho_i^0 \exp \left[ -\beta_i^l \left( \frac{r}{R_i^0} - 1 \right) \right], \quad (1.31)$$

et  $R_i^0$  est la distance d'équilibre du voisin le plus proche.  $\rho_i^0$  est le facteur de densité électronique. Dans la formulation originale, Baskes a considéré chaque densité atomique électronique égale à une unité lors de l'équilibre.

Deux groupes de paramètres sont utilisés pour le Si et les métaux, les paramètres du potentiel 1NN MEAM de Baskes [40] pour le Si et les métaux et 2NN MEAM de Lee [28] pour le Si et Lee *et al.* [42] pour les métaux. Ryu *et al.* ont créé une paramétrisation pour le Si et l'Au (1NN

MEAM de Ryu *et al.* pour Si et 2NN MEAM de Ryu *et al.* pour les métaux). Ils ont modifié l'Eq. 1.19 pour ajouter deux paramètres,  $\lambda$  et  $\gamma$ , pour améliorer la description de point de fusion du Si et de l'Au [43] :

$$E_i^u(R) = -E_i^0 (1 + a^* + da^{*3} + \gamma R a^{*4} \exp(-\lambda R a^{*2}) / r) \exp(-a^*). \quad (1.32)$$

Les paramétrisations sont montrées dans le Tableau 1.IV.

Tableau 1.IV – Paramètres du potentiel 1NN MEAM de Baskes [40] pour le Si, l’Au, l’Ag et le Cu ; paramètres du potentiel 2NN MEAM de Lee pour Si [28] et du potentiel 2NN MEAM de Lee *et al.* [42] pour l’Au, l’Ag et le Cu. Les paramètres pour le potentiel 2NN MEAM de Ryu *et al.* [43] pour l’Au et les paramètres pour le potentiel 1NN MEAM de Ryu *et al.* [43] pour le Si sont également présentés.

	1NN MEAM de Baskes [40]				2NN MEAM de Lee [28]	2NN MEAM de Lee <i>et al.</i> [42]				1NN MEAM de Ryu <i>et al.</i> [43]	2NN MEAM de Ryu <i>et al.</i> [43]
	Si	Au	Ag	Cu	Si	Au	Ag	Cu	Si	Au	
$E_i^0(\text{ev})$	4,63	3,93	2,85	3,54	4,63	3,93	2,85	3,54	4,63	3,93	
$R_i^0(\text{Å})$	2,35	2,88	2,88	2,56	2,350	2,880	2,880	2,555	2,35	2,880	
$\alpha_i$	4,87	6,34	5,89	5,11	4,87	6,34	5,89	5,11	4,87	6,34	
$A_i$	1,00	1,04	1,06	1,07	0,58	1,00	0,94	0,94	1,00	1,00	
$\beta_i^{(0)}$	4,40	5,45	4,46	3,63	3,55	5,7	4,73	3,83	4,40	5,7	
$\beta_i^{(1)}$	5,5	2,2	2,2	2,2	2,50	2,2	2,2	2,2	5,5	2,2	
$\beta_i^{(2)}$	5,5	6,0	6,0	6,0	0,00	6,0	6,0	6,0	5,5	6,0	
$\beta_i^{(3)}$	5,5	2,2	2,2	2,2	-2,61	2,00	1,50	1,95	5,5	2,00	
$t_i^{(1)}$	2,05	1,59	5,54	3,14	1,80	2,90	3,40	2,72	2,05	2,90	
$t_i^{(2)}$	4,47	1,51	2,45	2,49	5,25	1,64	3,00	3,04	4,47	1,64	
$t_i^{(3)}$	-1,80	2,61	1,29	2,95	-2,61	2,00	1,50	1,95	-1,80	2,00	
$C_{min}$	2,00	2,00	2,00	2,00	1,41	1,53	1,38	1,21	1,85	0,8	
$d$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,05	0,05	0,05	0,00	0,05	
$\gamma_R(\text{Å})$									-0,36	-0,182	
$\lambda_R$									16	4	

### 1.5.5 Potentiel croisé MEAM pour les interactions Si/métal

Pour décrire le système d'alliage neuf paramètres sont nécessaires :  $E_{ij}^0$ ,  $R_{ij}^0$ ,  $B_{L12}$ ,  $\frac{\rho_i^0}{\rho_j^0}$ ,  $d$ ,  $C_{min}$  (dont quatre paramètres pour le  $C_{min}$ ). Pour la paramétrisation du potentiel croisé, la structure L12 a été pris comme structure de référence pour les systèmes Si/métal, où l'énergie est définie par :

$$\begin{aligned}
 E_{ij_3}^u(r) &= \frac{1}{4}F_i(\bar{\rho}_i) + \frac{3}{4}F_j(\bar{\rho}_j) \\
 &+ \frac{Z_1}{2} \left[ \frac{1}{2}\phi_{ij}(r) + \frac{1}{2}\phi_{jj}(r) \right] \\
 &+ \frac{Z_2}{2} \left[ \frac{1}{4}S_i\phi_{ii}(ar) + \frac{3}{4}S_j\phi_{jj}(ar) \right]
 \end{aligned} \tag{1.33}$$

et l'interaction de paires entre  $i$  et  $j$  peut être obtenue à partir de :

$$\begin{aligned}
 \phi_{ij}(r) &= \frac{1}{3}E_{ij_3}^u(r) - \frac{1}{12}F_i(\bar{\rho}_i) - \frac{1}{4}F_j(\bar{\rho}_j) \\
 &- \phi_{jj} - \frac{1}{4}S_i\phi_{ii}(ar) - \frac{3}{4}\phi_{jj}(ar)
 \end{aligned} \tag{1.34}$$

Pour les alliages Si/Au deux groupes de paramètres existants dans la littérature sont utilisés : les paramètres développés pour le potentiel croisé MEAM de Ryu et Cai [13] et de Kuo et Clancy [11] :

Tableau 1.V – Paramètres du potentiel MEAM de Ryu et Cai [13] et MEAM de Kuo et Clancy [11] pour l'alliage Si/Au.

	MEAM de Ryu et Cai	MEAM de Kuo et Clancy
$E_{ij}^0$ (eV)	4,155	4,93
$R_{ij}^0$ (Å)	5,400	4,15
$B_{L12}$ (GPa)	127	120
$d$	—	0,0
$C_{min}(1,1,2)$	1,9	2,0
$C_{min}(1,2,1)$	0,95	2,0
$C_{min}(2,2,1)$	1,0	2,0
$C_{min}(1,2,2)$	1,85	2,0
$\gamma_R$ (Å)	0,26	—
$\frac{\rho_{Si}^0}{\rho_{Au}^0}$	1,48	2,35

Une troisième paramétrisation pour le système Si/Au est développée dans le présent travail dans le Chapitre 3. La justificatif de cette paramétrisation sera faite dans le Chapitre 2. Dans le Chapitre 3 une nouvelle paramétrisation sera également faite aussi pour les systèmes Si/Cu et Si/Ag.