

# SIMULATION NUMERIQUE DE LA CROISSANCE DU FER SUR UN SUBSTRAT EN COBALT ET EN NICKEL PAR LA DYNAMIQUE MOLECULAIRE



NUMERICAL SIMULATION OF IRON GROWTH ON A COBALT AND NICKEL SUBSTRATE USING MOLECULAR DYNAMICS

| Toky Harivelo Andriambintsoa <sup>1</sup> | Dimbimalala Randrianasoloharisoa <sup>1\*</sup> | and | Fils Lahatra Razafindramisa <sup>1</sup> |

<sup>1</sup>: Université d'Antananarivo | Département de Physique | Laboratoire de Physique de la Matière et du Rayonnement | Antananarivo, Madagascar |

| Received June 01, 2022 |

| Accepted June 04, 2022 |

| Published June 12, 2022 |

| ID Article | Dimbimalala-Ref012-ajira020622 |

## RESUME

**Introduction** : Le fer est le métal le plus utilisé dans le monde. Le fer cristallise dans la structure cubique centré BCC (Body Centered Cubic) dans les conditions normales de température et de pression. Au-dessus de 912°C, il bascule dans la structure cubique à faces centrées FCC (Face Centered Cubic). Par ailleurs, le fer de structure FCC ou fer  $\gamma$  est très recherché pour ses propriétés mécaniques et magnétiques. **Objectif** : L'objectif de ce travail est d'obtenir de couches minces de fer de structure FCC en utilisant de substrat de structure FCC comme le cobalt et le nickel. **Méthodes** : Dans ce travail, nous avons utilisé la simulation numérique basée sur la Dynamique Moléculaire classique. Les interactions entre les atomes du système ont été modélisées par le potentiel EAM (Embedded Atom Method). Nous avons constitué un substrat soit en cobalt soit en nickel. Ce substrat est porté à une température de 300°K. Nous avons ensuite déposé sur ce substrat les atomes de fer pour former des couches. Les atomes de fer ont une énergie initiale de 1eV. Lorsque tous les atomes de fer sont déposés, nous avons étudié et comparé les structures des couches obtenues. L'étude des structures consiste à déterminer les distances intercouches et les distances interatomiques. **Résultats** : Pour le système Fe/Co, les distances interatomiques sont de 2.55Å pour la 2<sup>ème</sup> couche et 2.54Å pour la 3<sup>ème</sup> couche. Pour la 1<sup>ère</sup> couche ainsi que la 4<sup>ème</sup> à la 8<sup>ème</sup> couche, ces distances varient de 2.43Å à 2.49Å. Ces valeurs montrent que le fer a la structure FCC dans la 2<sup>ème</sup> et 3<sup>ème</sup> couche et la structure BCC dans les autres. Pour le système Fe/Ni, les distances interatomiques pour la 1<sup>ère</sup> à la 5<sup>ème</sup> couche varient de 2.54Å à 2.58Å et pour la 6<sup>ème</sup> à la 8<sup>ème</sup> couche ces distances varient de 2.45Å à 2.51Å. D'après ces valeurs, les cinq premières couches de fer ont une structure FCC tandis que les couches supérieures ont une structure BCC. D'après ces résultats, on constate que l'on obtient du fer de structure FCC plus stable pour le système Fe/Ni que pour le système Fe/Co. **Conclusions** : Dans cette étude, les résultats des deux systèmes Fe/Co et Fe/Ni montrent que l'on peut obtenir du fer FCC pour quelques couches si l'on utilise un substrat de structure FCC. Néanmoins, la température de 300°K du système induit la présence des structures BCC. La structure du substrat ainsi que la température sont donc deux paramètres importants pour obtenir du fer de structure FCC.

**Mots-clés**: Couches minces, Fer, Cobalt, Nickel, Dynamique moléculaire classique, potentiel EAM.

## ABSTRACT

**Introduction**: Iron is the most used metal in the world. Iron crystallizes in the BCC (Body Centered Cubic) structure under normal conditions of temperature and pressure. But above 912°C, it switches to the FCC (Face Centered Cubic) structure. Iron with FCC structure or  $\gamma$  iron is highly preferred for its mechanical and magnetic properties. **Objective**: The objective of this work is to obtain thin films of iron with FCC structure using substrate with FCC structure such as cobalt and nickel. **Methods**: In this work, we used numerical simulation based on classical Molecular Dynamics. The interactions between the atoms of the system were modeled by the potential EAM (Embedded Atom Method). We first prepared a substrate either in cobalt or in nickel. This substrate is brought to a temperature of 300° K. We then deposited the iron atoms on this substrate to form layers. Iron atoms have an initial energy of 1eV. When all the iron atoms have been deposited, we studied and compared the structures of the layers obtained. The study of structures consists to determine the interlayer distances and the interatomic distances. **Results**: For the Fe/Co system, the interatomic distances are 2.55Å for the 2<sup>nd</sup> layer and 2.54Å for the 3<sup>rd</sup> layer. For the 1<sup>st</sup> layer as well as the 4<sup>th</sup> to the 8<sup>th</sup> layer, these distances vary from 2.43Å to 2.49Å. These values show that the iron has the FCC structure in the 2<sup>nd</sup> and 3<sup>rd</sup> layer and the BCC structure in the others. For the Fe/Ni system, the interatomic distances for the 1<sup>st</sup> to the 5<sup>th</sup> layer vary from 2.54Å to 2.58Å and for the 6<sup>th</sup> to the 8<sup>th</sup> layer, these distances vary from 2.45Å to 2.51Å. From these values, the first five layers of iron have an FCC structure while the upper layers have a BCC structure. From these results, it can be seen that iron with FCC structure obtained from Fe/Ni system is more stable than iron with FCC structure obtained from the Fe/Co system. **Conclusion**: In this study, the results of the two systems Fe/Co and Fe/Ni show that FCC iron can be obtained for a few layers if a substrate with FCC structure is used. Nevertheless, the temperature of 300°K of the system induces the presence of BCC structures. The structures of the substrate as well as the temperature are therefore two important parameters to obtain iron with an FCC structure.

**Keywords**: Thin films, Iron, Cobalt, Nickel molecular dynamics, EAM potential.

## 1. INTRODUCTION

Actuellement, les technologies de systèmes embarqués se perfectionnent de plus en plus et les ingénieurs et scientifiques étudient tous les aspects et propriétés des composants utilisés pour les miniaturiser sans réduire leur rendement de fonctionnement. Les composants à base de couches minces jouent un rôle prépondérant dans cette course à la miniaturisation. Une couche mince d'un matériau donné est un élément de ce matériau dont l'une des dimensions, l'épaisseur, a été fortement réduite, de telle sorte qu'elle s'exprimera habituellement en nanomètres. La différence

essentielle entre le matériau à l'état massif et à l'état de couche mince est en effet liée au fait que, dans l'état massif, on néglige généralement le rôle des surfaces limites dans les propriétés, tandis que dans une couche mince, ce sont au contraire les effets liés aux surfaces limites qui peuvent être prépondérants. Les couches minces sont très étudiées en raison de leurs intérêts à la fois fondamentaux et technologiques. Les couches minces trouvent de nombreuses applications notamment dans le domaine de l'optoélectronique, dans la fabrication des divers circuits intégrés, dans le domaine industriel et même dans le domaine médical [1-8]. Pour étudier la structure et le comportement d'une couche mince, d'où ses caractéristiques physico-chimiques, il est essentiel de faire appel à des expérimentations et à des simulations numériques pour connaître à l'avance si le système sera rentable. Le fer à l'état brut est peu utilisable et possède deux structures différentes: le réseau cubique à faces centrées qui est paramagnétique et le réseau cubique centré d'un qui est ferromagnétique. Certains secteurs qui travaillent dans le domaine du traitement du signal exigent une structure stable de fer en cubique faces centrées. Les couches minces à base du fer, du cobalt et du nickel ou de leurs alliages sont très étudiées actuellement en raison de leurs nombreuses applications technologiques [1-8]. Notre travail est basé sur l'utilisation de la Dynamique Moléculaire pour étudier les systèmes constitués de couches de fer déposées sur du cobalt Fe/Co et de couches de fer déposées sur du nickel Fe/Ni.

## 2. MATERIELS ET METHODES

### 2.1 La Dynamique Moléculaire :

Malgré les progrès récents de la technologie, l'échelle atomique reste difficilement accessible expérimentalement dans de nombreux domaines. La Dynamique Moléculaire est une technique de simulation qui permet d'étudier le comportement au niveau atomique d'un système. En Dynamique Moléculaire, l'objectif est de calculer des moyennes par rapport à la mesure de Boltzmann-Gibbs associée à un potentiel d'interaction. La qualité d'une simulation de Dynamique Moléculaire est liée à la qualité de l'algorithme utilisé et à ses propriétés. La rapidité de l'exécution du programme peut être aussi déterminante. Notons que l'essentiel du temps de calcul dans une dynamique moléculaire est consommé dans le calcul des forces. En effet avec la dynamique moléculaire on cherche à résoudre l'équation du mouvement donnée par la relation de Newton en mécanique classique :

$$\vec{f} = m\vec{\gamma} \quad (1)$$

$\vec{f}$  étant la force appliquée,  $m$  la masse du système et  $\vec{\gamma}$  l'accélération du système

Pour intégrer numériquement des équations différentielles, il est nécessaire de les discrétiser en temps. Une grande variété de choix d'algorithme est a priori possible, comme celui de Verlet et de Leap-Frog, pour résoudre les équations du mouvement mais il est important que l'énergie du système soit conservée au cours du temps [9]. L'algorithme proposé par Verlet est historiquement l'un des premiers introduits et il reste encore l'un des plus utilisés actuellement [9,10].

Pour des raisons de simplicité, nous considérons un système conservatif constitué de  $N$  particules identiques et nous appelons  $r$ , un vecteur à  $3N$  composantes :  $r = (r_1, r_2, \dots, r_N)$ , où  $r_i$  désigne le vecteur position de la particule  $i$ .

En remplaçant  $\vec{\gamma}$  de l'équation (1) par  $\frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2}$ , l'équation d'évolution du système devient: [10]

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

soit pour une particule  $i$  soumise à la force  $\vec{f}_i$  :

$$\vec{f}_i = m_i \frac{d^2\vec{r}_i(t)}{dt^2} \quad (3)$$

Ou encore :

$$\frac{\vec{f}_i}{m_i} = \frac{d^2\vec{r}_i(t)}{dt^2} \quad (4)$$

$m_i$  est la masse de la particule et  $\vec{r}_i(t)$  sa position à l'instant  $t$ .

La résolution de l'équation différentielle (4) donne les différentes positions  $\vec{r}_i(t)$  de la particule  $i$  à chaque instant  $t$ . Une des méthodes pour résoudre l'équation (4) est l'algorithme de Verlet qui consiste à faire le développement en série de Taylor d'ordre 4 de  $\vec{r}_i(t + \Delta t)$  au voisinage de  $t$  [10]:

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{d^2\vec{r}_i(t)}{dt^2} \Delta t^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3\vec{r}_i(t)}{dt^3} \Delta t^3 + O(\Delta t^4) \quad (5)$$

En remplaçant  $\frac{d^2\vec{r}_i(t)}{dt^2}$  par  $\frac{\vec{f}_i}{m_i}$  on obtient :

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{\vec{f}_i}{m_i} \Delta t^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3\vec{r}_i(t)}{dt^3} \Delta t^3 + O(\Delta t^4) \quad (6)$$

De même, le développement de  $\vec{r}_i(t - \Delta t)$  donne :

$$\vec{r}_i(t - \Delta t) = \vec{r}_i(t) - \frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{\vec{f}_i}{m_i} \Delta t^2 - \frac{1}{3!} \frac{d^3\vec{r}_i(t)}{dt^3} \Delta t^3 + O(\Delta t^4) \quad (7)$$

En sommant les équations (5) et (6), on obtient :

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) + \vec{r}_i(t - \Delta t) = 2\vec{r}_i(t) + \frac{\vec{f}_i(t)}{m_i} \Delta t^2 + O(\Delta t^4) \quad (8)$$

Finalement :

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = 2\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t - \Delta t) + \frac{\vec{f}_i(t)}{m_i} \Delta t^2 + O(\Delta t^4) \quad (9)$$

L'équation (9) constitue l'algorithme de Verlet pour la particule  $i$ . Cet algorithme permet de déterminer la position de chaque particule  $i$  à l'instant  $(t + \Delta t)$ .

Le calcul de la nouvelle position est donc effectué avec une précision de l'ordre de  $\Delta t^2$ . Cet algorithme n'utilise pas les vitesses des particules pour calculer les nouvelles positions. On peut toutefois déterminer celles-ci de la manière suivante :

$$\vec{v}_i(t) = \frac{\vec{r}_i(t + \Delta t) - \vec{r}_i(t - \Delta t)}{2\Delta t} + O(\Delta t^2) \quad (10)$$

On remarque que l'algorithme de Verlet satisfait la notion de symétrie par renversement du temps contenu dans les équations de Newton. En effet, en changeant  $dt$  en  $-dt$ , l'équation (9) reste inchangée. En conséquence, si à un instant  $t$  de la simulation, on inverse le temps, c'est-à-dire que  $-dt$  sera changé en  $dt$ , la trajectoire de la dynamique moléculaire revient sur ses pas.

## 2.2 Le potentiel interatomique :

D'une manière générale, la force  $\vec{f}_i$  à laquelle est soumise la particule  $i$  dérive d'un potentiel  $U(\vec{r}_{ij})$  créé par les particules autres que  $i$  du système :

$$\vec{f}_i = -\sum_{j \neq i} \vec{\nabla} U(\vec{r}_{ij}) \quad (11)$$

$\vec{r}_{ij}$  est la distance entre deux particules  $i$  et  $j$ .

L'emploi d'un potentiel est donc nécessaire dans l'utilisation de la méthode Dynamique Moléculaire pour modéliser les interactions entre les particules. Le potentiel EAM (Embedded Atom Method) a été introduit dans les années 80 par Daw et al., (1984) [11]. Le principe de cette méthode consiste à traiter chaque atome comme une impureté vis à vis des autres atomes du système. Ce potentiel a été développé pour traiter les systèmes métalliques.

Dans ce formalisme, l'énergie d'un atome  $i$  est donnée par: [12]

$$E_i = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \Phi_{ij}(\vec{r}_{ij}) + F(\rho_i(\vec{r}_{ij})) \quad (12)$$

Cette équation se traduit par: l'énergie totale d'un atome  $i$  est égale à la somme de toutes les énergies d'interaction de paire ( $\sum_{j \neq i} \Phi_{ij}(\vec{r}_{ij})$ ) de cet atome avec ses atomes voisins, situés à une distance  $\vec{r}_{ij}$  augmentée de l'énergie ( $F(\rho_i(\vec{r}_{ij}))$ ) nécessaire pour insérer cet atome dans le milieu où règne une densité électronique ( $\rho_i(\vec{r}_{ij})$ ) créée par les autres atomes de ce milieu. L'énergie totale du cristal est obtenue en sommant l'énergie de chaque atome, soit:

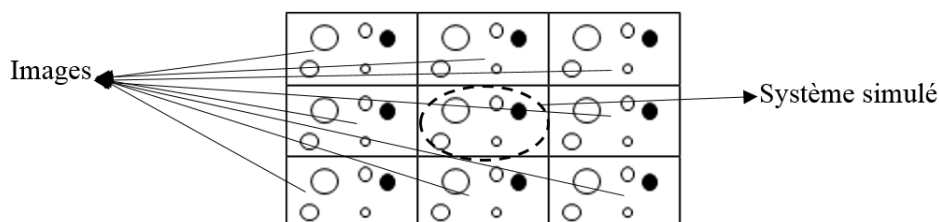
$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j(i \neq j)} \Phi_{ij}(\vec{r}_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i) \quad (13)$$

Où  $\Phi_{ij}$  est le potentiel d'interaction de paire entre les atomes  $i$  et  $j$  et  $F_i$  un paramètre spécifique de l'atome.

Pour calculer  $\sum_{i,j(i \neq j)} \Phi_{ij}(\vec{r}_{ij})$ ,  $F(\rho_i(\vec{r}_{ij}))$ , et  $F(\rho_i(\vec{r}_{ij}))$  nous utilisons la méthode proposée par Johnson et al., (2001) [13].

## 2.3 Les conditions aux limites périodiques :

Il est à noter que dans la simulation en Dynamique moléculaire, les particules à étudier sont placées dans des cellules ou boîtes fictives. De ce fait, il faut limiter les effets de bords car cela risque de déplacer les particules qui sont dans la boîte centrale de taille finie. Ainsi, on applique les conditions aux limites périodiques ou la méthode de minimum image: chaque cellule est répliquée dans les trois (ou deux) dimensions, en gardant la même position relative pour chaque particule, pour avoir un système de taille infinie ou de surface infinie dans le cas où les répliques sont faites à deux dimensions. La figure 1 illustre l'application de la méthode de minimum image.



**Figure 1** : Illustration de la méthode de minimum image.

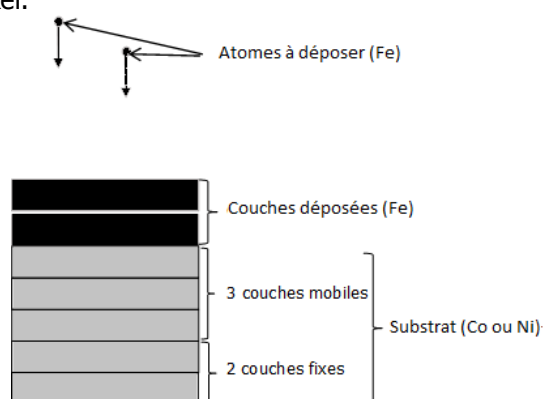
Au cours de la simulation, lorsqu'une particule se déplace dans la boîte originale, ses images périodiques dans chaque boîte avoisinante se déplacent exactement de la même manière. Ainsi, si l'un des mouvements aura pour effet de déplacer l'une des particules en dehors de la boîte centrale, celui-ci aura pour effet secondaire de déplacer l'une de ses images à l'intérieur de la cellule centrale; le nombre total de particules reste ainsi inchangé. Il n'est pas nécessaire, non plus, de stocker les coordonnées de toutes les particules images dans une simulation, mais uniquement celles de la boîte centrale. De même, les forces appliquées sur une particule dans la boîte centrale sont identiques à celles appliquées sur chaque image de cette particule dans les boîtes images. Cependant, bien qu'étant très utiles, les conditions aux limites

périodiques présentent quelques inconvénients. En effet, tout défaut présent dans la boîte centrale sera répété à l'infini avec la périodicité de la boîte. La vigilance doit être de rigueur lors de la modélisation initiale. L'énergie de la particule noire dans la boîte centrale doit être calculée à partir des interactions avec toutes les particules, y compris les particules images.

En général, les potentiels d'interaction des particules ont une portée très longue, comme c'est le cas pour les interactions coulombiennes. Néanmoins, leurs intensités deviennent négligeables à partir d'une certaine distance. On impose alors un rayon de coupure  $r_c$  pour le calcul explicite des interactions. Lorsqu'on calcule l'énergie d'une particule donnée à partir des contributions des autres particules, on ne considère que les particules dont la distance par rapport à ce centre est inférieure à  $r_c$ , les interactions entre centres de force situés à une distance supérieure à  $r_c$  ne sont pas prises en compte.

## 2.4 Les systèmes étudiés:

Nous avons étudié deux systèmes à savoir le système formé de fer déposé sur un substrat en cobalt et le système formé de fer déposé sur un substrat en nickel.



**Figure 2 :** La figure illustre schématiquement le système étudié.

Chaque substrat est constitué de 5 couches, orientées (111), dont les 2 inférieures sont figées pour garder l'orientation et la structure des couches tandis que les 3 supérieures sont mobiles pour tenir compte de l'effet de la température. Chaque couche du substrat est constituée de 400 atomes (Co ou Ni) soit 2000 atomes au total pour les 5 couches. La température du substrat est maintenue à 300°K.

La déposition des couches consiste à lancer un à un sur le substrat les atomes de fer qui vont s'étaler pour former les couches. L'énergie initiale de l'atome à déposer est de 1eV. Nous donnons ci-après les caractéristiques des atomes mis en jeu dans cette étude à savoir le fer, le cobalt et le nickel. Le fer peut exister sous deux formes cristallines: la structure cubique à faces centrées (FCC: Face Centerd Cubic) et la structure cubique centré (BCC: Body Centered Cubic). La structure BCC est la structure à l'état naturel du fer à basse température. Le fer de structure BCC aussi appelé fer  $\alpha$  a un paramètre de maille de 2.87Å et il est fortement ferromagnétique. Sa température de Curie est de 770 °C. A partir de 912 °C, le fer, appelé fer  $\gamma$ , a une structure cubique à faces centrées. Son paramètre de maille est alors de 3.66Å. Au-delà de 1 394 °C, il redevient un minéral de maille cubique centré (fer  $\delta$ ). Le cobalt peut aussi adopter deux structures suivant la température. En dessous de 400°C, le cobalt a une structure hexagonale compacte (HC) et au-delà de cette température, il a une structure FCC de paramètre de maille 3.54Å. Le nickel se cristallise dans la structure FCC avec un paramètre de maille de 3.51Å.

## 3. RESULTATS

### 3.1 Système Fe/Co(111) :

Le tableau 1 résume les résultats sur les distances entre deux couches consécutives tandis que le tableau 2 donne les distances interatomiques pour le système constitué de couches de fer sur un substrat de cobalt.

**Tableau 1 :** Distances intercouches pour le système Fe/Co.

Couches	Distances intercouches (Å)
7 <sup>ème</sup> -8 <sup>ème</sup>	2.04
6 <sup>ème</sup> -7 <sup>ème</sup>	2.02
5 <sup>ème</sup> -6 <sup>ème</sup>	2.04
4 <sup>ème</sup> -5 <sup>ème</sup>	2.03
3 <sup>ème</sup> -4 <sup>ème</sup>	2.02
2 <sup>ème</sup> -3 <sup>ème</sup>	2.03
1 <sup>ère</sup> -2 <sup>ème</sup>	2.03
Substrat-1 <sup>ère</sup>	2.02
Substrat	2.11

D'après le tableau 1, la distance intercouche de 2.11 Å du substrat indique une relaxation du plan supérieur de ce substrat par rapport à la valeur normale qui est de 2.04 Å. Par contre, les distances intercouches de la 1<sup>ère</sup> à la 8<sup>ème</sup> couche des adatoms se situent entre 2.02Å et 2.04 Å. Ces valeurs sont proches de celles du fer cubique centré (BCC) selon la face (110) qui est de 2.03Å.

**Tableau 2:** Distances interatomiques pour le système Fe/Co.

Couches	Distances interatomiques (Å)
8 <sup>ème</sup>	2.46
7 <sup>ème</sup>	2.44
6 <sup>ème</sup>	2.46
5 <sup>ème</sup>	2.44
4 <sup>ème</sup>	2.49
3 <sup>ème</sup>	2.54
2 <sup>ème</sup>	2.55
1 <sup>ère</sup>	2.43
Substrat	2.42

D'après le tableau 2, la moyenne des distances interatomiques relatives à la 1<sup>ère</sup> couche qui est de 2.43Å se rapproche de la structure BCC du fer qui est de 2.48Å. Par contre, celles de la 2<sup>ème</sup> et de la 3<sup>ème</sup> couche, respectivement de 2.55Å et 2.54Å, se rapprochent de celle de la structure FCC(111) du fer qui est de 2.58Å. Ensuite, de la 4<sup>ème</sup> à la 8<sup>ème</sup> couche, les distances interatomiques varient entre 2.44Å et 2.49Å. Ces distances sont proches de celle de la structure BCC du fer qui est de 2.48Å.

D'après ces résultats sur les distances intercouches et interatomiques, on constate que : la première couche de fer déposée a une structure BCC(110), ensuite pour la 2<sup>ème</sup> et 3<sup>ème</sup> couche, le fer adopte la structure FCC(111), et enfin de la 4<sup>ème</sup> couche à la surface on a de nouveau la structure BCC(110).

### 3.2 Système Fe/Ni(111) :

Le tableau 3 donne les distances entre deux couches consécutives pour le système constitué de couches de fer sur un substrat de Nickel. D'après le tableau 3, la distance intercouche de 2.10 Å du substrat indique une relaxation du plan supérieur de ce substrat par rapport à la valeur normale qui est de 2.02 Å. Les distances intercouches des couches de fer déposées varient de 2.02Å à 2.05Å. Ces valeurs sont proches de la distance intercouche pour le fer ayant une structure BCC(110).

**Tableau 3 :** Distances intercouches pour le système Fe/Ni.

Couches	Distance intercouche (Å)
8 <sup>ème</sup> _9 <sup>ème</sup>	2.02
7 <sup>ème</sup> _8 <sup>ème</sup>	2.02
6 <sup>ème</sup> _7 <sup>ème</sup>	2.03
5 <sup>ème</sup> _6 <sup>ème</sup>	2.05
4 <sup>ème</sup> _5 <sup>ème</sup>	2.04
3 <sup>ème</sup> _4 <sup>ème</sup>	2.04
2 <sup>ème</sup> _3 <sup>ème</sup>	2.04
1 <sup>ère</sup> _2 <sup>ème</sup>	2.05
Substrat-1 <sup>ère</sup>	2.02
Substrat	2.10

Le tableau 4 donne les distances interatomiques pour le système constitué de couches de fer sur un substrat de Nickel.

**Tableau 4 :** Distances interatomiques pour le système Fe/Ni.

Couches	Distances interatomiques (Å)
9 <sup>ème</sup>	2.47
8 <sup>ème</sup>	2.45
7 <sup>ème</sup>	2.46
6 <sup>ème</sup>	2.51
5 <sup>ème</sup>	2.58
4 <sup>ème</sup>	2.58
3 <sup>ème</sup>	2.55
2 <sup>ème</sup>	2.56
1 <sup>ère</sup>	2.54
Substrat	2.53



Les distances interatomiques de la 1<sup>ère</sup> à la 5<sup>ème</sup> couche se situent entre 2.54Å et 2.58Å. Ces distances sont proches de celle de la structure FCC(111) du fer qui est de 2.58 Å. Par contre, celles de la 6<sup>ème</sup> à la 9<sup>ème</sup> couche qui varient entre 2.45Å et 2.51Å se rapprochent de la structure BCC(110) du fer qui est de 2.48 Å.

## 4. DISCUSSION

Pour le système Fe/Co, les couches de fer adoptent sur la 1<sup>ère</sup> couche une structure BCC(110) et ensuite en FCC(111) sur la 2<sup>ème</sup> et 3<sup>ème</sup> couche et ensuite revenir en BCC(110) pour les couches supérieures. On peut dire donc que ce système est instable. Cette instabilité peut provenir de la structure de cobalt. En effet, à basse température, la structure la plus stable pour le cobalt est le HCP (hexagonale compacte) la structure FCC, bien qu'elle puisse exister, est beaucoup moins stable. La structure FCC du cobalt devient stable seulement pour les températures supérieures à 400°C, or dans notre étude, la température du substrat en cobalt est de 300°K. Il est donc probable que le substrat a eu tendance à adopter une structure HCP ce qui a influé sur la structure des couches de fer déposées en dessus. Par contre, pour le système Fe/Ni, le fer a adopté la structure FCC(111) et reste stable jusqu'à la 5<sup>ème</sup> couche et bascule ensuite en BCC(110) à partir de la 6<sup>ème</sup> couche jusqu'à la surface.

On voit pour les deux systèmes, Fe/Co et Fe/Ni, que même si le fer adopte une structure FCC(111), les distances intercouches de 2Å à 2.05Å dans les tableaux ... restent inférieures à celle calculée qui est de 2.11Å. Cette compression des couches vient du bombardement de la surface par les atomes de fer. En effet les atomes de fer d'énergie 1eV sont lancés vers la surface avec une certaine vitesse et à leur arrivée ils sont arrêtés mais en contrepartie, la surface s'affaisse donc les couches se rapprochent entre eux.

D'après les résultats sur les deux systèmes, on constate que la structure du fer tend vers le BCC lorsqu'on s'éloigne du substrat. En effet, le BCC est la structure stable du fer lorsque la température est inférieure à 912°C or la température de nos systèmes est de 300°K. Il est donc prévisible d'avoir la structure BCC. Néanmoins on constate aussi la présence de la structure FCC près de l'interface avec le substrat. Cette présence est due à la contrainte imposée par le substrat qui a une structure FCC d'une part et à l'élévation momentanée de la température d'autre part. En effet, lorsque l'atome incident arrive sur la surface, son énergie initialement à 1eV se dissipe sous forme de chaleur qui fait augmenter localement la température avant de se stabiliser à la température de la surface à 300°K.

## 5. CONCLUSION

La méthode de la simulation par la Dynamique Moléculaire, nous a permis d'étudier la croissance et les structures des couches de fer sur les substrats en cobalt et en nickel orientés dans un plan (111). Le but de notre étude est de déterminer si l'on peut avoir des couches minces de fer ayant la structure FCC, cette structure étant recherchée par des industries travaillant dans les technologies de pointe. Lors de cette étude, nous avons constaté une différence notable selon que l'on dépose du fer sur un substrat en cobalt ou sur un substrat en nickel.

Le fer déposé sur du cobalt a une instable : on a une alternance de structure BCC et FCC. Cette instabilité est causée par la structure FCC du cobalt qui tend vers la structure HCP à basse température. Par contre le fer déposé sur le nickel est plus stable car il adopte d'abord la structure FCC près du substrat puis BCC vers la surface. La présence de la structure BCC pour les deux systèmes est due à la basse température du système. Pour conclure, le choix du substrat ainsi que la température joue donc un rôle important pour avoir des couches minces de fer ayant une structure FCC stable.

## 6. REFERENCES

- [1] Belzons M., Préparation de couches minces de fer, cobalt et nickel et étude de leur absorption optique. *Journal de Physique Appliquée*. 1965; 26 : 259-262.
- [2] Nawaz Rizwan M., Kalyar M.A., Bell C., Anwar-UI-Haq M., et Makhdoom A.R., Nickel thin films grown by pulsed laser deposition: influence of substrate and substrate temperature. *Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures*. 2020; 15: 1141-1151.
- [3] Jiao D., Li J., Ni x., et Zhang X., Microstructures and magnetic properties of cobalt thin films. *Modern Physics Letters B*. 2008; 22: 3079-3086.
- [4] Kaloyeros A.E., Pan Y., Goff J., et Arkles B., Cobalt Thin Films: Trends in Processing Technologies and Emerging Applications. *Journal of Solid State Sciences and Technology*. 2019; 8: 119-152.
- [5] Nadzri N.I.M., Che Halin D.S., Khemar A., M. Hasbi M.A., et Wahab Y., Development of iron thin films by electron beam physical vapour deposition (EBPVD): A Review. *IOP Conf. Series: Material Science and Engineering*. 2020; 957: 012043.
- [6] Kampfrath T., et Ulbrich R.G., Ultrafast magneto-optical response of iron thin films. *Physical Review B*. 2002; 65: 104429.
- [7] Vautier C., L'effet hall dans les couches minces de fer. *Journal de Physique*. 1966; 27 : 531-535.
- [8] Andrieu S., Piecuh M., Bobo J., Lenoble O., et Bauer Ph., Epitaxie de phases métastables de fer. *Journal de Physique IV Proceedings EDP Sciences*. 1992; 2 :147-157.
- [9] Viot P., Simulation numérique en physique statistique. *Cours de Master 2<sup>ème</sup> année « Physique théorique des systèmes complexes » et « Modélisation, statistique et algorithme des systèmes hors d'équilibre »*. 2016. p33 – 45 (Chap 3) disponible sur <https://cel.archives-ouvertes.fr/cel-00092945>
- [10] Randrianasoloharisoa D., Andrianaivontseheno H., Lahatra Razafindramisa F., Etude par la Dynamique Moléculaire de la croissance de couches de platine. *American Journal of Innovative Research and Applied Sciences*. 2020 ; 11(3) : 165-172.
- [11] Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces and other defects in metals. *Physical Review B*. 1984; 29: 6443.

[12] Zou W., Wadley H.N.G., Zhou X.W., Johnson R.A., and Brownell D. Surfactant-mediated growth of giant magnetoresistance multilayers. *Physical Review B*. 2001; 64: 174418.

[13] Wadley H.N.G., Zhou X.W., Johnson R.A., Atomic assembly of giant magnetoresistive multilayers. *Material Research Society Symposium Proceeding*. 2001; 672: 4.1.1-4.1.14.



Cite this article: **Toky Harivelo Andriambintsoa, Dimbimalala Randrianasoloharisoa, Fils Lahatra Razafindramisa.** SIMULATION NUMERIQUE DE LA CROISSANCE DU FER SUR UN SUBSTRAT EN COBALT ET EN NICKEL PAR LA DYNAMIQUE MOLECULAIRE. *Am. J. innov. res. appl. sci.* 2022; 14(6): 288-290.

This is an Open Access article distributed in accordance with the Creative Commons Attribution Non-Commercial (CC BY-NC 4.0) license, which permits others to distribute, remix, adapt, build upon this work non-commercially, and license their derivative works on different terms, provided the original work is properly cited and the use is non-commercial. See: <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>