

# جامعة قاصدي مرياح ورقلة

## كلية الرياضيات وعلوم المادة

\*\*\*\*\*

### قسم الفيزياء



### مذكرة

ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

فرع: فيزياء

تخصص : فيزياء الإشعاع، كاشف وبصريات إلكترونية

من إعداد: قادي راضية

### بعنوان:

حساب توزيع سرعات الأيونات باستعمال محاكاة الديناميكا الجزيئية عند التصادم  
مع الهدف في تقنية الرش المهبطي لنظام كهربائي مستمر  $DC$

نوقشت يوم: 2015/05/27

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

رئيسا	جامعة ورقلة	أستاذ تعليم عال	عيادي كمال الدين
ممتحنا	جامعة ورقلة	أستاذة مساعدة (أ)	زغيشي ليلي
ممتحنا	جامعة ورقلة	أستاذ مساعد (أ)	بن زاهي يوسف
مشرفا	جامعة ورقلة	أستاذ تعليم عال	خلفاوي فتحي

الموسم الجامعي: 2015/2014

## الإهداء

الى من تجرعا الكاس فارغا ليسقياني قطرة حب  
الى ينبوع الصبر والتفاؤل، ابويا الحبيبين ادامهما الله لي  
الى ربحان حياتي زوجي المستقبلي عبد العزيز قعري رعاه الله  
الى سندي وقوتي وملاذي بعد الله اخوتي الاعزاء سيف الدين،  
آمنة وزوجها، يسرى، محمد العيد، عبد الجليل، مطيع حفظهم الله  
الى جدريا، عمي وعماتي، اخوالي وخالاتي وكافة افراد عائلتي  
الى من اضنن ظلمة غربتي صديقاتي العزيزات والى كافة صديقاتي  
الى كل زميلاتني في تخصص فيزياء الاشعاع دفعة 2015

الى كل من سقط من قلبي سهوا

اهدي ثمرة عملي

قادي راضية



# تَشْكُرَات

الحمد لله الذي هدانا وما كنا لنهتدي لو أن هدانا الله.

أشكر المولى القدير ذي الجودي والفضل الكبير على توفيقه لي لإتمام هذا العمل.

اتقدم بجزيل الشكر والعرفان لكل من ساهم في اعداد هذه المذكرة وخاصة الأستاذ

خلفاوي فتحي استاذ تعليم عال بجامعة قاصدي مرباح على كل الجهود التي بذلها

والنصائح السامية التي قدمها لي خلال مسيرتي في أنجاز هذه المذكرة.

كما اشكر الأستاذ عيادي كمال الدين أستاذ تعليم عال بجامعة ورقلة رئيس لجنة

المناقشة، كما اشكر كلا من الأستاذة زغيشي ليلي أستاذة مساعدة أ بجامعة ورقلة

والأستاذ بن زاهي يوسف أستاذ مساعد أ بجامعة ورقلة اللذين شرفاني بقبولهما

مناقشة هذه المذكرة.

ولا يفوتني أن اتقدم بجزيل الشكر للأستاذ قادي البشير استاذ تعليم ثانوي على ما

ذلل لي من صعوبات في اللغة كما اشكر كل اعضاء فريق البحث بمخبر الاشعاع

والبلازما وفيزياء السطوح بقسم الفيزياء جامعة قاصدي مرباح ورقلة.

كما اقدم خالص الشكر للزميلات فايذة، زينب، نور، يمينة، يسمين، حليلة، سعيدة.

## فهرس الأشكال

- الشكل (1-1): يمثل نموذج السحابة الإلكترونية لتعريف طول ديبراي..... 2
- الشكل (3-1): رسم تخطيطي للرش المهبطي المستمر DC ..... 6
- الشكل (4-1): يمثل مبدأ الرش المهبطي المتناوب..... 7
- الشكل (5-1): يمثل كمون اولر..... 8
- الشكل (6-1): يمثل آلية تنقل الذرات في الصلب..... 16
- الشكل (1-2): يمثل نموذج ذرة السليسيوم si على طول المستوي (100)..... 18
- الشكل (2-2): يمثل نموذج لتوضع ذرات السليسيوم si على طول المستوي (100)..... 18
- الشكل (3-2): يمثل كمون Firsov-Molière..... 19
- الشكل (4-2): يمثل الخلية الأولية لبلورة السليسيوم..... 21
- الشكل (5-2): يمثل رسم تخطيطي للشروط الحدودية في بعدين..... 23
- الشكل (3 - 1): توزيع السرعات  $F$  عند  $h1$  بدلالة  $w$ ..... 32
- الشكل (3 - 2): توزيع السرعات  $F$  عند  $h1$  بدلالة  $w$  عند التغيير في الجهد المطبق..... 32
- الشكل (3 - 3): توزيع السرعات  $F$  عند  $h0$  بدلالة  $w = 1000V$ ..... 33
- الشكل (3 - 4): توزيع السرعات  $F$  عند  $h0$  بدلالة  $w$  عند التغيير في الجهد المطبق..... 34
- الشكل (3 - 5): توزيع السرعات  $F$  لذرات السليسيوم المقتلعة بدلالة  $w = 1000V$ ..... 35
- الشكل (3 - 6): توزيع السرعات  $F$  لذرات السليسيوم المقتلعة بدلالة  $w$  عند التغيير في قيمة الجهد المطبق .. 33
- الشكل (3 - 7) يعطي نسب امتصاص وانعكاس الأيونات لما  $V = 0.3KV$ ..... 39
- الشكل (3 - 8) يعطي نسب امتصاص وانعكاس الأيونات لما  $V = 0.5KV$ ..... 40
- الشكل (3 - 9) يعطي نسب امتصاص وانعكاس الأيونات لما  $V = 1KV$ ..... 40
- الشكل (3 - 10) يعطي نسب امتصاص وانعكاس الأيونات لما  $V = 1.5KV$ ..... 37

## فهرس الجداول

- الجدول (1 - 3): يعطي قيم السرعة المتوسطة والسرعة العظمى عند  $h_1$  عند التغيير في قيمة الجهد. .... 31
- الجدول (2 - 3): يعطي قيم السرعة المتوسطة والسرعة العظمى عند  $h_0$  عند التغيير في قيمة الجهد. .... 32
- الجدول (3 - 3): يعطي قيم السرعة المتوسطة والسرعة العظمى لذرات السليسيوم المقتلعة عند التغيير في قيمة الجهد. .... 33
- الجدول (4 - 3): يوضح تغير السرعة والطاقة الحركية والمردود عند التغيير في قيمة الجهد المطبق. .... 34
- الجدول (5 - 3): يعطي نسب امتصاص وانعكاس الأيونات عند التغيير في قيمة الجهد. .... 35

## فهرس المحتويات

الإهداء

تشكرات

فهرس الأشكال

فهرس الجداول

المقدمة العامة..... أ

### الفصل الأول عموميات حول البلازما والرش المهبطي

المقدمة:..... 1

I البلازما:..... 1

1. تعريف البلازما:..... 1

2. درجة التأين:..... 1

3. درجة الحرارة:..... 2

4. طول ديبي:..... 2

5. نصف قطر الكرة الإلكترونية:..... 3

6. نصف قطر الكرة الأيونية:..... 3

7. تواتر البلازما:..... 4

II. الرش المهبطي:..... 4

1. الطرق العامة لتوضع الطبقات الرقيقة:..... 4

أ- طريقة التوضع الكيميائي في الطور البخاري:..... 5

ب- طريقة التوضع الفيزيائي في الطور البخاري:..... 5

2. مبدأ الرش المهبطي: ..... 5
3. انواع الرش المهبطي: ..... 6
- أ- الرش المهبطي المستمر: ..... 6
- ب- الرش المهبطي المتناوب: ..... 7
- ت- الرش المهبطي للصلمام الثلاثي: ..... 8
- III. طاقات الجهود في محاكاة الديناميكا الجزيئية: ..... 8
1. مجموعات كمونات التفاعل: ..... 9
- IV الطاقات المميزة: ..... 14
1. طاقة الاحتراق: ..... 15
3. طاقة الانزياح: ..... 15
4. طاقة ربط ذرة البلورة: ..... 16
5. طاقة السطح: ..... 16
- الفصل الثاني المحاكاة بطريقة الديناميكا الجزيئية
- المقدمة..... 18
- I. الوصف الفيزيائي لغرفة الرش: ..... 18
- II. الظاهرة الفيزيائية: ..... 19
- III. المحاكاة العددية: ..... 21
1. مفهوم المحاكاة: ..... 21

21..... 2. طرق المحاكاة:

21..... أ- طريقة مونت كارلو:

22..... ب- طريقة الديناميكا الجزيئية:

22 ..... IV. النموذج الرياضي:

23..... 1. خوارزمية فرلي (*Algorithme de Verlet*):

24..... 2. الوضعيات الابتدائية.

24..... 3. السرعات الابتدائية:

25..... 4. الشروط الحدودية:

25..... أ- مبدأ الشروط الحدودية:

25..... ب- بعض المعالم المهمة:

26..... V. تصميم النموذج:

### الفصل الثالث النتائج ومناقشتها

31..... المقدمة

31 ..... I. توزيع السرعات:

31..... 1. توزيع السرعة الأيونات المسرعة بالقرب من سطح الهدف:

35..... 2. توزيع سرعات ذرات السليسيوم المقتلعة:

36..... 3. مردود الرش:

39..... 4. معدل الأيونات الممتصة والمنعكسة:

41..... الخلاصة العامة



# المقدمة العامة

## المقدمة العامة

عرفت استخدامات الطبقات الرقيقة توسعا كبيرا وخاصة في مجال الالكترونيات الدقيقة والانظمة الكهربائية والخلايا الشمسية، لذلك أصبح من المهم التحكم في عملية تحضيرها بالإضافة إلى معرفة مختلف المتغيرات التي تميز المواد. الهدف في عملنا هذا، هو حساب توزيعات سرعات الأيونات عند التصادم مع الهدف بواسطة محاكاة الديناميكا الجزيئية لتفاعل بلازما الأرجون مع سطح الهدف (السليسيوم). عند إجراء الحساب أخذنا في الاعتبار مختلف العوامل الفيزيائية في جهاز الرش، حيث تبقى هذه الأخيرة مستقرة خلال تطور الظاهرة. قمنا بتقسيم هذا العمل إلى ثلاث فصول.

✓ الفصل الأول نتطرق فيه لدراسة عامة عن البلازما تعريفها وأهم المفاهيم الفيزيائية لخصائصها كدرجة التأين، درجة الحرارة الالكترونية، وكذلك بعض خصائص ظواهر التفاعل كطول ديبيي وطول لوندي ثم سنتكلم عن تقنية الرش المهبطي ومبدأ عمله ومختلف أنواعه.

✓ الفصل الثاني: سنتطرق إلى تعريف الظاهرة المدروسة والنموذج العددي لديناميك الجزيئية و خوارزمية فريي وكذلك كمون موليير الذي يؤثر على الأيون بالقرب من سطح الهدف. وفي الأخير نضع مخطط سير الحساب العددي لبرنامجنا.

✓ الفصل الثالث: سنقوم بعرض النتائج المتحصل عليها المتعلقة بتوزيع سرعات الأيونات البعيدة عن سطح الهدف والقريبة منه وكذلك توزيع سرعات ذرات السليسيوم المقتلعة من الهدف ومناقشتها.

الفصل الأول: عموميات حول

البلازما والرش المهبطي

## الفصل الأول: عموميات حول البلازما والرش المهبطي

### المقدمة:

إن استخدام الطبقات الرقيقة في ميدان الإلكترونيات الدقيقة يستوجب خصائص محددة لهذه الشرائح وطريقة التوضع تختار بدقة. ومن بين الطرق المستعملة لتوضع الطبقات الرقيقة طريقة الرش المهبطي، والتي تعتمد على التفريغ الكهربائي بين المصعد والمهبط، لهذا السبب ارتأينا أن نقدم في هذا الفصل المفاهيم الأساسية للبلازما ثم نتطرق لطريقة الرش المهبطي، وكذلك طاقات وجهود الأيونات [1].

### I البلازما:

#### 1. تعريف البلازما:

البلازما حالة الرابعة للمادة وهي عبارة عن وسط غازي متأين يحتوي عددا كبيرا و كافيا من الجسيمات المشحونة سلبيا ( إلكترونات و أيونات سالبة ) والجسيمات المشحونة إيجابيا ( أيونات موجبة ) والجسيمات المحايدة. هذا الوسط يحجب نفسه إلكتروستاتيكية عند مسافة صغيرة [2].

#### 2. درجة التأين:

في الحالة الطبيعية تكون درجة التأين راجعة إلى عدم وجود جسيمات حرة مشحونة. و تعرف بأنها النسبة بين عدد الجسيمات المشحونة ( إلكترونات، أيونات ) والكثافة العددية للجسيمات المحايدة تصاغ رياضيا بالمعادلة الآتية

$$\alpha = \frac{n}{n_0 + n} \quad (1 - 1)$$

حيث:

$n_0$  تمثل الكثافة العددية للجسيمات المحايدة (عدد الجزيئات في وحدة الحجم).

$n$  تمثل عدد الجسيمات المشحونة ( إلكترونات و أيونات ). [3].

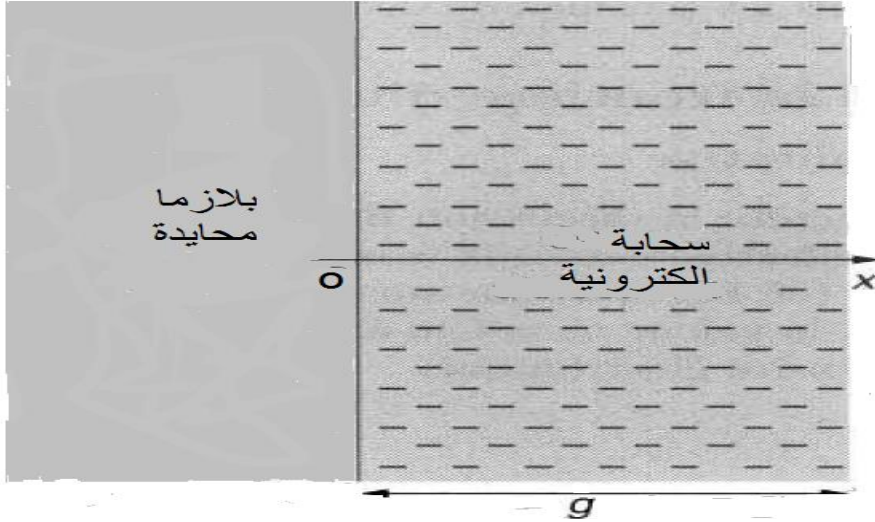
3. درجة الحرارة:

نعبر عن درجة حرارة البلازما بالرمز  $T$  وهي تختلف باختلاف نوع البلازما، لذا من السهل تمثيل البلازما فإذا كان الغاز في حالة توازن حراري فإن درجة الحرارة تشير إلى درجة حرارة الإلكترونات  $T_e = T$  وعادة ما يعبر عليها بالإلكترون فولت بدل درجة الكلفن إذن في تحول وفقا للعلاقة الآتية:

$$(1eV = 1.16 \times 10^4 K)$$

4. طول ديبي:

نستطيع تعريف طول ديبي على أنه الطول المرح للتعامل المتبادل بين مختلف الجسيمات. عند معالجة بلازما حيادية وكثافة ثابتة  $n_e$  تستطيل بسحابة إلكترونية بكثافة أيضا ثابتة  $n_0$  والمجال الكهربائي في البلازما ثابت، حسب الشروط الحدية التي نفترض أنها منجزة عندما  $x \rightarrow \pm\infty$  [3].



الشكل (1 - 1): يمثل نموذج السحابة الإلكترونية لتعريف طول ديبي. [3].

ومنه نستطيع تعريف طول ديبي بالشروط

$$\frac{kT}{2} = \left| q_e \left( n_e q_e / 2\epsilon_0 \right) x^2 \right| \quad (1 - 2)$$

قيمة  $x$  هي طول ديبي  $\lambda_D$  والتي تحسب بالعلاقة الآتية:

$$\lambda_D = \frac{\epsilon_0 kT}{n_e q_e^2} \quad (1 - 3)$$

ويتعويض الثوابت الاساسية بقيمها نجد:

$$\lambda_D \approx 6.9 \left( T_e / n_e \right)^{1/2} \quad (CGS)$$

حيث قيمة هذا الطول في بلازما التفريغ تتراوح بين (1 و10 micr)

و عموما، فإن للتفاعلات الجماعية دورا أكثر أهمية من التفاعلات الثنائية، في ديناميكا البلازما [3].

### طول لوندي:

و هو الطول الحرج للتفاعل الثنائي  $r_0$  المعروف بالعلاقة الآتية:

$$KT = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \quad (1 - 4)$$

$$r_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 KT} \quad (1 - 5) \text{ ومنه}$$

نرى أن  $r_0$  هي المسافة التي يجب أن يقتربها إلكترونين حتى يحدث بينهما التفاعل. وطول لوندي يتدخل في تحليل

ظواهر التصادمات، و الصلة المتبادلة في وضعية البلازما [3].

### 5. نصف قطر الكرة الإلكترونية:

و هو يميز البعد المتوسط بين إلكترونين ؛ ويستخرج من العلاقة:

$$\frac{4}{3} \pi r_e^3 n_e = 1 \Rightarrow r_e = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi n_e}} \quad (1 - 6)$$

حيث  $n_e$  الكثافة الإلكترونية [4].

### 6. نصف قطر الكرة الأيونية:

و هو يميز البعد المتوسط بين أيونين ؛ ويستخرج من العلاقة:

$$\frac{4}{3} \pi r_i^3 n_i = 1 \Rightarrow r_i = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi n_i}} \quad (1 - 7)$$

حيث  $n_i$  الكثافة الأيونية [4].

7. تواتر البلازما:

عند دراسة إهتزازات أمواج البلازما نميز حالتين:

الأولى: بلازما غير ممغنطة وفي هذه الحالة نميز تواترين هما:

في جملة: (cgs)

$$w_{p_i} = \left( \frac{4\pi n_i e^2}{m} \right)^{1/2} \quad (1 - 8)$$

الثانية: بلازما ممغنطة وفي هذه الحالة يوجد بالإضافة إلى التواترين السابقين تواتر إضافي يسمى التواتر السيكلتروني.

في جملة: (mks) [5]

$$w_{p_e} = \left( \frac{e^2 n_e}{\epsilon_0 m} \right)^{1/2} \quad (1 - 9)$$

في جملة: (cgs) [5]

$$w_{p_e} = \left( \frac{4\pi n_e e^2}{m} \right)^{1/2}$$

في جملة: (cgs) [5]

$$w_{c_e} = \left( \frac{eB}{cm_e} \right)^{1/2} \quad (1 - 10)$$

**II. الرش المهبطي:**

**1. الطرق العامة لتوضع الطبقات الرقيقة:**

توجد عدة طرق لتوضع الطبقات الرقيقة نذكر منها التقنيتين [6]:

- ✓ تقنية التوضع الفيزيائي للطور البخاري PVD (Physical Vapor Deposition)
- ✓ تقنية التوضع الكيميائي للطور البخاري CVD (Chemical Vapor Deposition)

أ- طريقة التوضع الكيميائي في الطور البخاري (CVD): طريقة التوضع الكيميائي في الطور البخاري

عبارة عن طريقة تتفاعل فيها مكونات الغاز لتكوين شريحة صلبة فوق المسند. هذه الطريقة تستخدم منذ عدة سنوات في قطاعات النشاط المتقدمة كالألكترونيك و علم الطيران والزخرفة [6].

ب- طريقة التوضع الفيزيائي في الطور البخاري (PVD):

طريقة التوضع الفيزيائي في الطور البخاري تتمثل في تكاثف تحت الضغط المنخفض، لبخار مادة معينة على المسند. حسب طريقة الحصول على البخار وطريق تكثيفه.

هذه الطريقة لها مميزات معتبرة، الشرائح فيها كثيفة، التقنية سهلة المراقبة و ليست ملوثة.

سنتطرق في الفقرة الموالية لطريقة الرش المهبطي [6].

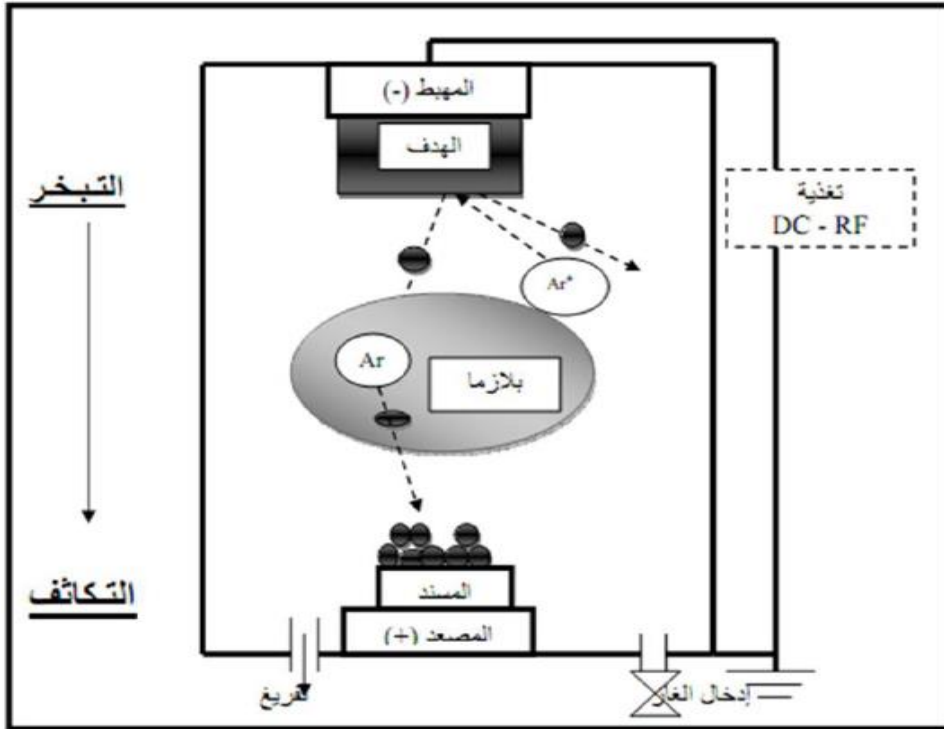
2. مبدأ الرش المهبطي:

تعتمد هذه الطريقة على استخدام التفريغ الكهربائي بين الكترودين ناقلين (المصعد والمهبط) بينهما فراغ يحتوي على غاز حامل في ضغط منخفض (كغاز الأرجون لأنه أكبر حجما و حيادي كهربائيا. حيث تثبت مادة الهدف على المهبط الذي يحمل جهدا سالبا (3 إلى 5KV) بالنسبة للمصعد ويكون موازيا له تفصل بينهما مسافة بضع سنتيمترات (بين 3 و 5cm). الضغط المطبق بين اللبوسين يتراوح بين  $(1 \sim 10^2 \text{ Pa})$ .

تتسارع الأيونات الطاقوية تحت تأثير الحقل الكهربائي الناتج، متجهة نحو المهبط فتتصادم مع مادة الهدف ويتبادلان كمية الحركة في ما بينهما، ينتج عن ذلك إقلاع ذرات محايدة كهربائيا، هذه الأخيرة ترسب على صحيفة مستوية

متصلة بالمصعد تسمى المسند، مشكلة شريحة تمثل الطبقة الرقيقة [1].





الشكل (2 - 1): رسم تخطيطي لمبدأ الرش المهبطي [6].

تتميز هذه الظاهرة بالمرود  $S$  والذي يمثل النسبة بين الذرات المتقلعة والذرات الواردة.

$$S = \frac{N_P}{N_i} = \frac{\text{عدد الذرات المتقلعة}}{\text{عدد الذرات الواردة}} \quad (1 - 11)$$

حيث يتعلق هذا المرود بالمعاملات الآتية:

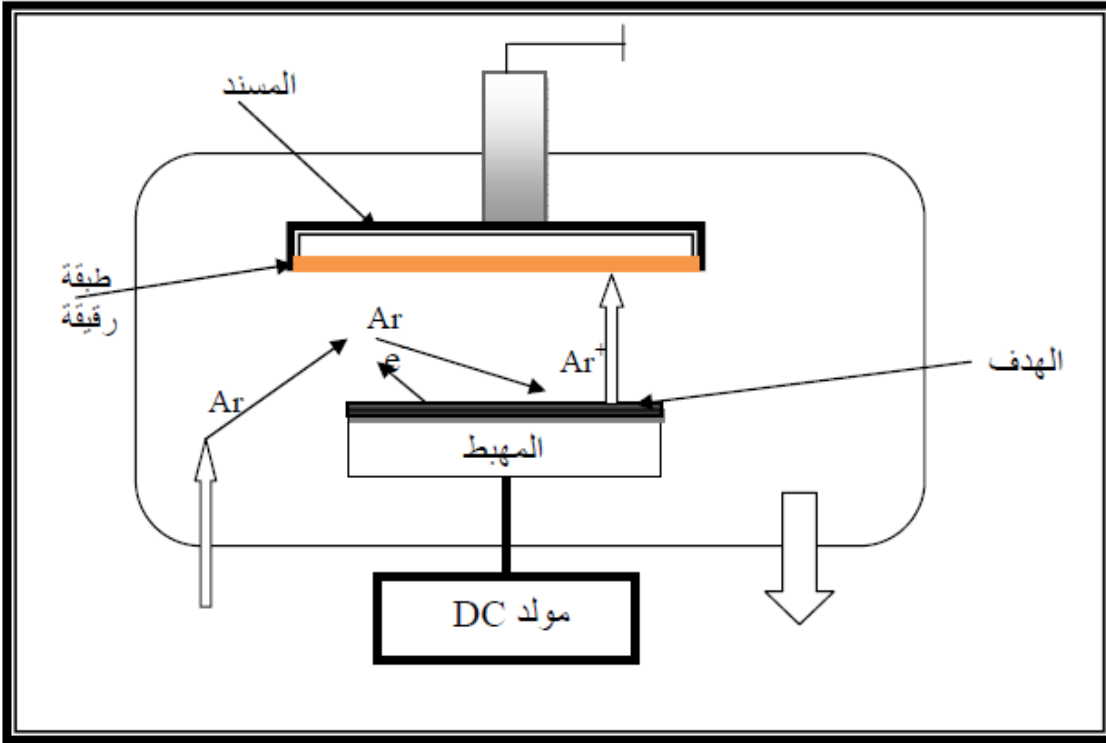
- ✓ طبيعة الهدف (المادة وحالة السطح).
- ✓ طبيعة الأيونات الواردة (أيونات غاز نادر أو غاز فعال).
- ✓ طاقة الأيونات الواردة.
- ✓ زاوية الورود.

### 3. أنواع الرش المهبطي:

أ- الرش المهبطي المستمر: الرش المهبطي المستمر يسمح فقط بتوضع المواد الناقلة أو نصف الناقلة, حيث يتم

تطبيق جهد سالب ومستمر على المهبط, مما يولد تفريغا كهربائيا (تأين الغاز) وظهور أيونات طاغوية ذات طاقة

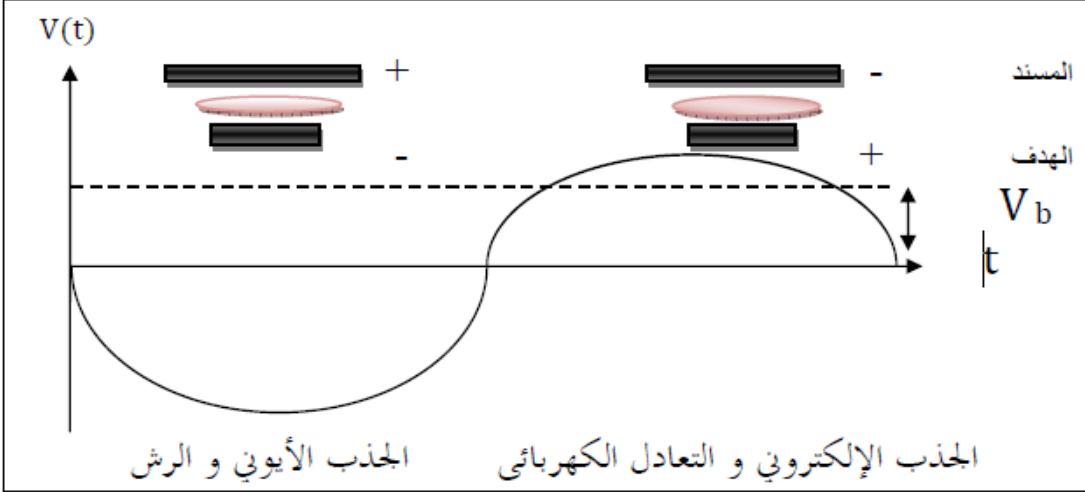
حركية عالية تتجه نحو المهبط لاقتلاع ذراته وترسيبها على المسند, مشكلة طبقة رقيقة. [6]



الشكل (3 - 1): رسم تخطيطي للرش المهبطي المستمر DC

### ب- الرش المهبطي المتناوب:

ذكرنا في الفقرة السابقة أن الرش المهبطي المستمر يسمح فقط بتوضع المواد الناقلة ونصف الناقلة، أما إذا كانت مادة هدف عازلة فإن الجهد المستمر المطبق لا يمضنه فصل الشحنات المحمولة مع الأيونات، والتي تتراكم على سطح الهدف، مشكلة مجالا كهربائيا يعمل على إبعاد الأيونات إذا طبقنا جهدا متناوبا يزول فعل هذا المجال الكهربائي خلال الاهتزازة السالبة منها حيث يتم الجذب الأيوني نحو المهبط إلى أن يشحن بكمون موجب. في هذه المرحلة تحدث عملية الرش، وتوضع الطبقات، أما خلال الاهتزازة الموجبة من هذا الاستقطاب تتسارع الإلكترونات نحو المهبط ويحدث التعادل الكهربائي بين الشحنات الموجبة والإلكترونات [6].



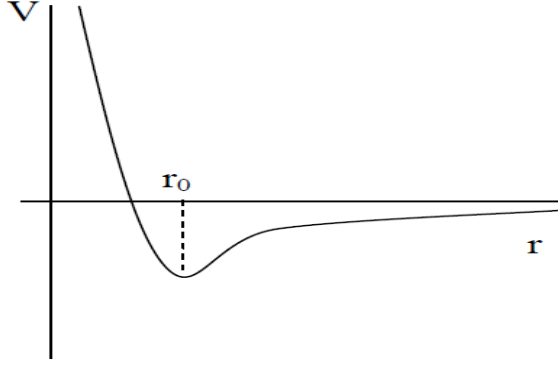
الشكل (4 - 1): يمثل مبدأ الرش المهبطي المتناوب [6].

### ت- الرش المهبطي للصبام الثلاثي:

لتسهيل عملية إنتاج إلكترونات إضافية لتأين الغاز يمكن استعمال سلك ساخن يلعب دور مصعد ثان يطبق عليه استقطاب سالب بالنسبة للبلازما، ويتم إخراج الإلكترونات الصادرة حرارياً للحفاظ على الاستقطاب والتقليل من إمكانية إعاقه عملية التوضع، تدعى هذه الطريقة بطريقة الرش المهبطي للصبام الثلاثي (PCT)، وتكون سرعة التوضع فيها مرتفعة، وسمك الطبقات المتوضعة كبيراً نوعاً ما [6].

### .III طاقات الجهود في محاكاة الديناميكا الجزيئية:

تحتاج محاكاة الديناميكا الجزيئية إلى تعريف دالة طاقة الجهد التي تُعطي وصفاً لطبيعة القوة التي بواسطتها تتفاعل الجسيمات في المحاكاة. هناك الكثير من طاقات الجهود المستخدمة في محاكاة الديناميكا الجزيئية. التفاعلات المتبادلة بين الذرات في المواد يمكن حسابها، عندما نعرف الشكل التحليلي لكمون التفاعل بينها حيث  $r_0$  هي مسافة التوازن بين الذرات، وطاقة تجاذب الكمونات تضم الجزء الغالب، إذا كان  $r_0 < r$ ، وذلك بسبب الترابط الكيميائي، وعندما تكون  $r_0 > r$  يكون هذا الجزء هو الغالب نظراً للتفاعل بين الطبقات العميقة (انظر الشكل) فيما يلي بعض الأمثلة على الكمونات:



الشكل (5 - 1): يمثل كمون اولر [7].

الطريقة الأكثر استعمالا لدراسة البنية تركز على إهمال طاقة التجاذب كما هو مبين في العلاقة وهو يعطي تقييم جد ضعيف للطاقة [7].

منحنى الكمون مساوي للفرع الغالب الذي عبارته التحليلية تكون بصفة عامة بالشكل الآتي:

$$U(r) = u_0 \exp\left(-\delta r / \rho\right) \quad (1 - 12)$$

حيث:  $\delta r$  هو الانحراف عن مسافة التوازن بين الذرات  $u_0$  في الشبكة البلورية المثالية.

$\rho u_0$ : هي ثابت مميزة للمادة.

إذا كانت الذرات المجاورة لديها عيوب نقطية تكون أكثر قرب من الوحدات الأخرى، هذا في الشبكة المثالية.

تصبح قوة التجاذب كبيرة عندما تكون طاقات النظام منخفضة جدا [8].

هذه الاعتبارات سمحت بالوصول إلى تصنيف الكمونات المتفاعلة إلى عدة مجموعات.

### 1. مجموعات كمونات التفاعل:

الكمونات المذكورة في هذا الفصل هي لتفاعلات الثنائية.

أ- كمون كولون (potentiel coulombiens) بفعل الشاشة: هذه المجموعة تحتل مكانة

مهمة جدا لأنها تتضمن أساسا على تواترات الكمونات المستعملة في المحاكاة العددية. و توصف هذه التفاعل

كما في العلاقة الآتية: [15].

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (1-13)$$

حيث  $Z_1 Z_2$ : هي الاعداد الذرية لذرتي التفاعل و  $e$ : هي شحنة الالكترون و  $r$ : هي المسافة بين الذرات و  $\Phi(r)$ : هي وظيفة حجب الشاشة, وتعطى بالتقريب الآتي:

$$\Phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^n c_i \exp\left(-d_i \frac{r}{a}\right) \quad ; \quad \sum_{i=1}^n c_i = \Phi(0) = 1 \quad (1-14)$$

$d_i$  و  $c_i$  هي ثوابت تحدد أنواع مختلفة من الكمونات لها عدة قيم.  
و طول الشاشة يعتمد على  $Z_1$  و  $Z_2$  وتعبّر عليها بالشكل الآتي:

$$a = \left[ \frac{9\pi^2}{128} \right] a_B Z_{12}^{-\frac{1}{3}} = 0.8853 a_B Z_{12}^{-\frac{1}{3}} \quad (1-15)$$

حيث  $a_B$ : هي نصف قطر بور و  $Z_{12} = (Z_1^x + Z_2^x)^y$

في نموذج Tomas-Fermi  $xy = 1$  حيث اقترح Firzov [14] أن  $x = \frac{1}{2}$ ,  $y = 2$  ومنه يصبح طول الشاشة بالشكل الآتي:

$$a_f = 0.88534 a_B \left( Z_1^{\frac{1}{2}} + Z_2^{\frac{1}{2}} \right)^{-\frac{2}{3}} \quad (1-16)$$

و اقترح Lindhard و رفقائه [16]  $x = \frac{2}{3}$ ,  $y = \frac{3}{2}$

$$a_{LS} = 0.88534 a_B \left( Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (1-17)$$

و اقترح Robinson [17] أن طول الشاشة في التفاعلات المتجانسة

$$a_R = 0.075 A^\circ \quad (Z_1 = Z_2)$$

أ-1- أنواع كمونات الشاشة:

مختلف كمونات الشاشة تكون بصفة عامة معرفة حسب الثابت  $c_i$  و  $d_i$  موضحة في الجدول السابق.

✓ **كمون Bohr**: وهو الأسهل ويستعمل للفصل بين الذرات على نطاق واسع ويعبر عليه بالعلاقة الآتية [9]:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \exp\left(\frac{-r}{a}\right) \quad (1 - 18)$$

من أجل  $a = \lambda_D$  يصبح الكمون كمون ديبي

✓ **كمون Molière**: له استخدام واسع في مجال المحاكاة العددية لدراسة تباطؤ الجسيمات السريعة وانتشار الصدمات في الشبكة. الخ, و يتألف من ثلاث حدود, الثاني والثالث يكون أكبر من الأول. طول الشاشة الذي تم اختياره لهذا الكمون يكون غالبا من Firsov; ومع ذلك فإن استخدام طول أو آخر ليس أكثر أهمية لتصحيحات المجالات تحت الطاقة الكمونية. هذا النوع من الكمون يكون صالح لتحديد التفاعلات المتجانسة أو غير المتجانسة حسب العلاقة الآتية [9]:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[ 0.35e^{-0.3\frac{r}{aF}} + 0.55e^{-1.2\frac{r}{aF}} + 0.1e^{-6.0\frac{r}{aF}} \right] \quad (1 - 19)$$

✓ **كمون Kr-C**: أسسه Wilson و رفقائه [18], يأخذ اعتبارات Günther التي تستطيع أن تكون كمون جيد لأنه يتوافق مع كمون Molière, في حالة طول الشاشة ل Firsov( $a_F$ ), ومع Ziegler [19], Biersak و Littmark تختصر ZBL إذا طول الشاشة يكون خاص عند  $ZBL(a_U)$ . شكل الكمون يكون كتالي [9]:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[ 0.190945e^{-0.278544\frac{r}{a}} + 0.473674e^{-0.637174\frac{r}{a}} + 0.3353812e^{-1.919249\frac{r}{a}} \right] \quad (1 - 20)$$

اختيار طول شاشة معين ( $a_F, a_L, a_U$ ) اوغيرها) لديه أهمية كبيرة وخاصة في تصحيح المجالات تحت الطاقات الكمونية [8]:

✓ **كمون ZBL**: يتميز بطول خاص لشاشة المعرفة ب:

$$a_u = 0.88534a_B (Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})^{-1} \quad (1 - 21)$$

يعبر عليه بالشكل الآتي:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[ 0.01018 e^{-0.2062 \frac{r}{a_U}} + 0.28022 e^{-0.4029 \frac{r}{a_U}} + 0.50986 e^{-0.94229 \frac{r}{a_U}} + 0.18175 e^{-3.1998 \frac{r}{a_U}} \right] \quad (1 - 22)$$

✓ **كمون Lenz et Jensen**: يطرح عبارتين لوظيفة الشاشة الواحدة مثبت من الكمونات المشار لها سابقا

شكلها كما يلي [8]:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[ 0.01018 e^{-0.206 \frac{r}{a}} + 0.2433 e^{-0.3876 \frac{r}{a}} + 0.7466 e^{-1.038 \frac{r}{a}} \right] \quad (1 - 23)$$

والشكل التحليلي الآخر:

$$\Phi(r) = [1 + y + 0.3344y^2 + 0.485y^3 + 0.002647y^4] e^{-y}; y = \sqrt{9.76x}; x = \frac{r}{a_{LS}} \quad (1 - 24)$$

✓ **كمون Born-Mayer**: نموذج الكمونات للتنافر غير المحمي هو الأكثر الاستعمال من خلال معايره

التي لها قيم محددة لمختلف المواد ومن جهة اخرى نجد لنفس العنصر قيم كثيرة ل  $(a_{BM} و A_{BM})$  الذي يترك لك الاختيار الكافي على نطاق واسع [8].

هذا الكمون يكون صالح فقط للمسافات الكبيرة ما بين الذرات فقد عجز هذا الكمون لمسافة قصيرة ولكن يترك

لنا البديل عند Molière في ترتيب المسافة الجذ قربة المجاورة عبارته [9]:

$$U(r) = A_{BM} \exp\left(\frac{-r}{a_{BM}}\right) \quad (1 - 25)$$

للحصول على معاملات الكمون ل Born-Mayer في حالة تفاعل غير متجانس يمكن تطبيق العلاقات:

$$A_{12} = \sqrt{A_{11} A_{22}} \quad , \quad a_{12} = \frac{2a_{11} a_{22}}{a_{11} + a_{22}} \quad (1 - 26)$$

حيث  $a_{ii} a_{ij}, A_{ii} A_{ij}$  هي المعايير الطاقوية وأطوال الشاشات في حالة التفاعلات غير المتجانسة على

التوالي.

تعتبر العبارة الأخير (1 - 26) صالحة لكل كمونات وظيفة الشاشة كما في شكل العلاقة (1 - 14).

✓ كمونات التجاذب: كما ذكرنا سابقا في تصبح هذه الكمونات أساسية لأنها متعلقة بنظام ضعيف الطاقة وواسع

التقسيمات بين الذرات, كمونات التجاذب المتذبذبة المستعملة هي [9]:

✓ **كمون Morse**:

$$U(r) = D \exp[-2a(r - r_0)] - 2D \exp[-a(r - r_0)] \quad (1 - 27)$$

حيث  $r_0$  مسافة التوازن الحراري (كمون الحد الأدنى),  $[eV]D$ , عمق البئر,  $[A^{-1}]a$ , مسافة الانحراف

عندما يكون الكمون مساوي لصفر [9].

✓ **كمون Lennard et Jones**: يستعمل أحيانا في المحاكاة العددية ويأخذ الشكل:

$$U(r) = \lambda_n r^{-n} - \lambda_m r^{-m} \quad (1 - 28)$$

هذا متعلق بقوة Van Der Waals, بين جزء الغاز الخامل  $m = 6, n = 12$ , وبالتالي نطلق عليه

اسم  $6 - 12$ . الكمون  $10 - 4$  الذي يكون دالة ل  $z$  ودوري وفقا ل  $x, y$  ويستخدم من أجل تحديد

تفاعل غاز- سطح عبارتها من الشكل [9]:

$$U(z) = U_0(x, y) \left[ \left( \frac{1}{r} \right)^{10} - \left( \frac{1}{r} \right)^4 \right] \quad (1 - 29)$$

بصفة عامة حاجز الكمون  $U_0$  يكون من رتب  $0.3$  إلى  $1$  Kcal/mol. والتغير الزمني له يكون حسب

$$.KT \gg U_0$$

✓ الكمونات المشتركة:

كمونات التجاذب معروفة ليست كلها صالحة لدراسة جميع المواد, في هذا الصدد يحاول الحصول على

الكمونات المناسبة, باشتراك كمونات مختلفة العائلات كمثال: كمون Born-Mayer-Morse et

Molière-Morse للنحاس [8].



✓ الكمونات التجريبية:

وهي مشتقة من جزء الطاقة الكلية لشبكة وفقا للثوابت المرنة والطاقة المتماسكة. Lam وآخرون [20] أسسوا نموذج تجريبي باعتمادهم على نموذج نظري مطور من طرف Dagens مرتبط بالمعادن النبيلة  $Cu, Ag, Au$  من الشكل:

$$U(r) = [1 - \exp(-a(r - n)^2)] \left[ C_0 + \frac{C_1 \cos x}{r^2} + \frac{S_1}{r^5} \sin x \right] + \sum_{i=0}^3 \frac{B_i \exp(-\beta r^2)}{r^{3-i}} + D \exp(-\gamma r) \quad (1 - 30)$$

كمثال آخر عن الكمون التجريبي يكون من *Weber* و *Stillinger* [8].

هذا يكون كمون أصلي لوجهين من السليسيوم البلوري والسائل. وهو ينقسم إلى مخرجين:

❖ الكمون الذي يأخذ التفاعلات الثنائية شكله:

$$U(r) = \varepsilon A \left[ B \left( \frac{r}{\sigma} \right)^{-p} - 1 \right] \exp \left( \frac{1}{\frac{r}{\sigma} - a} \right) r < a \quad (1 - 31)$$

❖ الكمون الذي يأخذ التفاعلات الثلاثية شكله:

$$U(r_{ij}, r_{ik}) = \varepsilon \lambda \exp \left[ \frac{\gamma}{\frac{r_{ij}}{\sigma} - a} + \frac{\gamma}{\frac{r_{ik}}{\sigma} - a} \right] \left( \cos \theta_{ijk} + \frac{1}{3} \right)^2 H \left( a - \frac{r_{ik}}{\sigma} \right) \quad (1 - 32)$$

و  $H(X)$  دالة لـ Heaviside, أو

$$H(X) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases}$$

IV الطاقات المميزة:

في مجال النمذجة العددية توجد مجموعة من الطاقات مهمة يتم استخدامها لمحاكاة بعض العمليات في المواد الصلبة.

1. طاقة الاختراق:

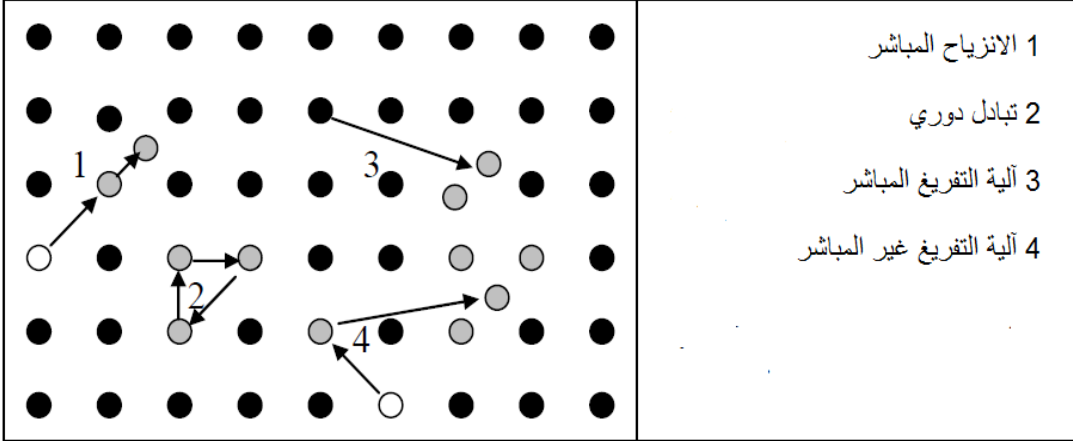
إذا كان الجسم المتفاعل لديه طاقة كافية , فإنه يستطيع اجتياز سطح الهدف ويتوقف في بعض المسافات بين الذرات. قياس عتبة الاختراق لبعض التفاعلات أيون-هدف لاتزال معقدة. طيف Auger يمكن أن يعطي لمحة عن الطاقة لعبئة الاختراق ولكن لا يمكن أن تميز بين مواقع السطح. اجريت عدة محاولات لحساب عتبة الدخول , بالتحاكي على الكمبيوتر منها تجربة Shapiro الذي قام بدراسة اختراق ذرات الفضة على سطح الفضة. كذلك اعمال Sylke على غاز حامل -غرافيت و سليسيوم -سليسيوم. العتبة المتحصل عليها بالنسبة لسليسيوم - سليسيوم هي  $(100) \pm 2 eV$  [8].

2. طاقة الكبح:

واضح أنه في المحاكاة العددية مسار الجسم المتحرك قد يكون حتما مكبوح. طاقة الانكباح تكون مختارة بدقة حسب طبيعة المشكل المراد معالجته, إذا كنا نهتم فقط بظاهرة الاستشعاع, الطاقة  $E_C$  ينبغي أن تأخذ بحيث تكون طاقة الانتقال العظمى مساوية لطاقة الانزياح  $E_d$ . بينما في حسابات الرش تكون مختارة بصفة كافية كطاقة قصوى حيث تساوي طاقة السطح , في حالة رش الهدف لحاجز الطاقة ل I. Pàzsit و R. Cakarova , ثبتت ب  $5 eV$  أكبر بقليل من  $E_S$  التي تساوي  $4.7 eV$ .

3. طاقة الانزياح:

أدخل هذا المفهوم من طرف Seitz وتعني الحد الأدنى من طاقة التنشيط لاقتلاع ذرة من موقعها, وتشكيل زوج مستقر للفونون. هذه الطاقة ترتبط بالاتجاه الأولي للحركة المتعلقة بالطاقة البلورية للاقتلاع. الشكل (6 - 1) يمثل آلية تنقل الذرات في الصلب [9].



الشكل (6 - 1): يمثل آلية تنقل الذرات في الصلب [9].

#### 4. طاقة ربط ذرة البلورة:

كل ذرة من الشبكة مرتبطة بموقعها تسمى طاقة الربط  $E_b$  , إذا حتى تكون الذرة محررة من موقعها نحتاج إلى طاقة تساوي  $E_b$  . إذا كانت الطاقة المحمولة إلى ذرة الهدف هي  $T$  . تكون لها طاقة مساوية لـ:

$$E = T - E_b \quad (1 - 33)$$

حيث  $E$  طاقة اقتلاع الذرة من موقعها.

هناك اختلاف في قيمة  $E_b$  التي يجب اتخاذها , يقول البعض بانها يجب أن تكون مساوية لطاقة تشكيل الفجوة. النموذج العددي TRIM.SP  $E_b = 0$  , لكن MARLOWE  $E_b = 0.25 \text{ eV}$  . فيما يخص

السليسيوم [9] و R. Cakarova et I. Pàzsit وضعا  $E_b = 2 \text{ eV}$  .

#### 5. طاقة السطح:

هذه القيمة لها أهمية معتبرة في وسط ظاهرة اخراج الذرات المستعملة في الرش المهبطي حسب Srolovitz

كمون السطح يمكن أن يكون له نفس الخواص وطاقة الذرة المقتلعة تعطى بالعلاقة [9]:

$$E = \dot{E} - E_s \quad (1 - 34)$$

$\dot{E}$ : طاقة الذرة بعد التصادم الاخير.

الفصل الثاني: المحاكاة بطريقة

الديناميكا الجزيئية

## الفصل الثاني: المحاكاة بطريقة الديناميكا الجزيئية

### المقدمة

تعد المحاكاة أداة مهمة للمصمم، فقد استخدم هذا الأسلوب بشكل واسع في بداية الأمر في مجال الفيزياء لوصف الظواهر الفيزيائية والطرق العشوائية لتصادم بين الذرات وقياس الخصائص الترموديناميكية وتعريف الكمونات. ولهذا كان الاتجاه إلى تنفيذ النماذج على شكل محاكاة للمشكلة بظروف مشابهة حقيقية. ولكن سرعان ما أنتقل هذا الأسلوب إلى الحياة المدنية وتطبيقات هائلة في مجالات مختلفة وواسعة نذكر منها على سبيل المثال محاكاة طيران طائرة في نفق هوائي أو محاكاة معارك عسكرية واسعة النطاق لتقويم نظم الأسلحة الدفاعية والهجومية أو محاكاة نظام اتصالات هاتفية لتحديد طاقة المكونات الخاصة بها لتوفير خدمة للمستهلكين بشكل كفؤ اقتصادياً... الخ. كما أنها أصبحت أداة هامة للمهندسين والكيميائيين والصيادلة خلال العشرين. حيث أصبحت جسر بين التجارب والنظريات فالمحاكاة تمدنا بالمعلومات في المستوى الميكروسكوبي وهذا يساعد على فهم الخصائص الميكروسكوبية كما أنها تسمح من خلال التجارب الفكرية بأشياء يستحيل تنفيذها واقعياً ولكن نتائجها تزيد من فهمنا للظاهرة بحيث يمكن تحقيقها [21].

### I. الوصف الفيزيائي لخلية المحاكاة:

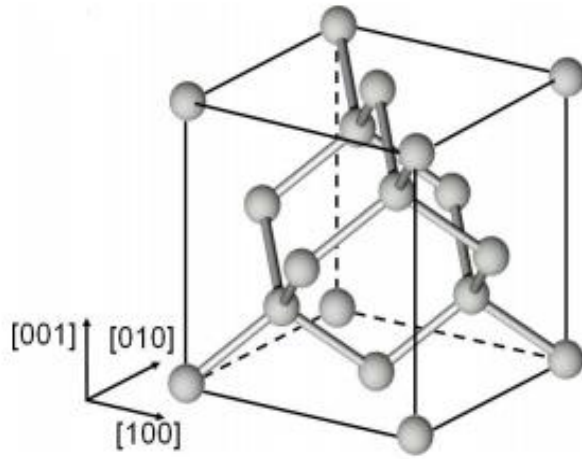
تتكون الخلية من هدف السليسيوم وبلازما من الأرجون والهيدروجين.

#### ✓ الهدف:

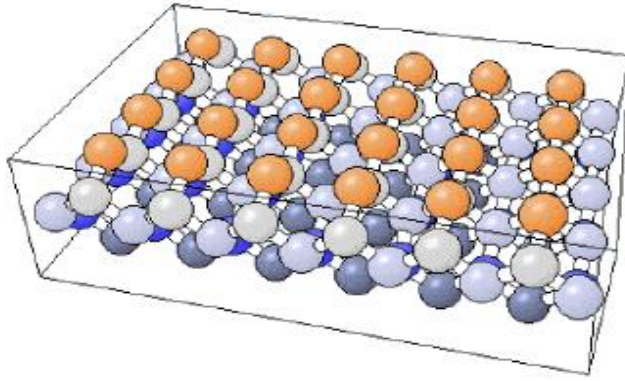
يتم ترتيب الذرات السليسيوم Si البلوري في بنية بلورة الماس مع ثابت بلوري  $5.43 \text{ \AA}$  ولكل ذرة لها 4 ذرات جوار

اقرب وتوزيع إلكتروني  $([Ne]3S^23P^2)$  Si [10].

الاشكال الموالية توضح نماذج لذرة السليسيوم



الشكل (1 - 2): يمثل نموذج ذرة السليسيوم si على طول المستوي (100)



الشكل (2 - 2): يمثل نموذج توضع ذرات السليسيوم si على طول المستوي (100)

### ✓ البلازما:

- البلازما المتأينة بواسطة التفريغ الكهربائي. إذا يتم بواسطة جهد كهربائي مباشر (DC)، يتراوح ما بين (1.5 و 5) KV. وتستخدم هذه الطاقة الكهربائية ليس فقط للتأين ولكن أيضا لتسريع الأيونات نحو الهدف. يتم تشكيل البلازما من نوعين من الهيدروجين والأرغون ونحن نهتم فقط بأيونات الأرغون التي تقصف الهدف.

### II الظاهرة الفيزيائية:

المقصود بهذا كما سبق أن الاصطدامات الثنائية بين ذرات الأرغون ( $Ar$ ) للبلازما الباردة والذرات المكونة للهدف السليسيوم المتبلور.

نوع البلازما المعتبرة هي خارج التوازن الترويديناميكي ذو كثافة ضعيفة (ضغطه من رتبة الميل بار) بارد  
 $(T_{\text{Macroscopique}} \approx T_a)$  مكونة من عنصرين الأرجون ( $Ar$ ) والهيدروجين ( $H$ ). الأرجون يعمل على  
 قصف الهدف والهيدروجين يحسن مميزات الطبقات الرقيقة. الهدف المعتبر في هذه الدراسة هو من السليسيوم وحيد  
 البلورة، سطحه أملس (100). ولتحاكي هذه الظاهرة ندرس القوة المؤثرة على أيونات القصف وهي:

- القوة الكهربائية الناتجة عن التوتر المعطى من المولد تعمل على تسارع الجسيم القاصف للهدف

$$.500 \leq V \leq 1500 \text{ Volt}$$

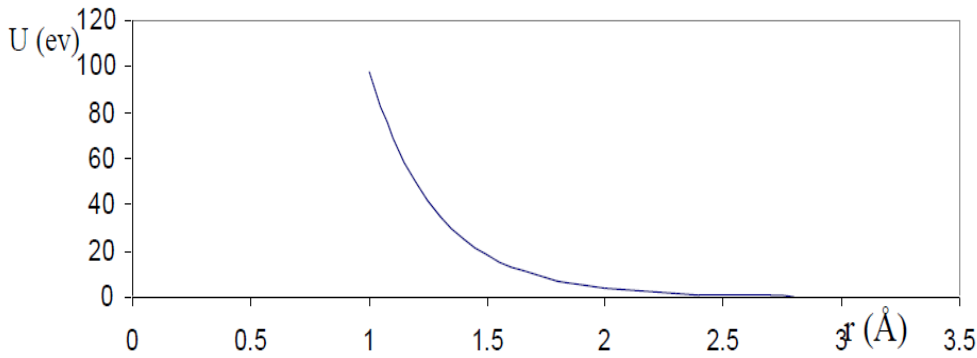
- القوة الناتجة عن الطاقة الحرارية للبلازما تعتبر ضعيفة أمام الطاقة الكهربائية (DC).
- القوة الناتجة عن الكمون لسطح البلور في هذه الحالة أخذنا كمون Molière-Firsov الموضح في الشكل  
 (2-3) وهو يستعمل من أجل دراسة تفاعل غاز-سطح عبارته من الشكل:

$$U(r) = \frac{A}{r} \left[ 0.35e^{-0.3\frac{r}{B}} + 0.55e^{-1.2\frac{r}{B}} + 0.1e^{-6\frac{r}{B}} \right] , r < r_c \quad (2-1)$$

حيث  $r_c$  هي نصف قطر الانكباح ,  $r$  المسافة بين أيون الارغون وذرة السليسيوم و  $B$  و  $A$  هما ثابتان يتعلقان بنوع

المادة.

في حالة التفاعل بين السليسيوم والأرجون  $A = 3628.8 \text{ eV}/A^\circ$  ,  $B = 0.1172A^\circ$



الشكل (2-3): يمثل كمون Molière-Firsov [9].

**III. المحاكاة العددية:****1. مفهوم المحاكاة:**

المحاكاة في اللغة: هي التقليد [21]. وفي الاصطلاح هناك عدة تعاريف للمحاكاة يمكن تلخيص أهمها على النحو الآتي:

" المحاكاة العددية هي عبارة عن محاولة إيجاد صورة طبق الأصل من نظام أو نشاط دون أن نحاول الحصول على النظام الحقيقي نفسه". أو يمكن القول أنه "أسلوب رياضي يستلزم تنفيذه على الحاسب الإلكتروني لمعالجة المشاكل التي تتداخل فيها أنواع معينة من العلاقات الرياضية والمنطقية الضرورية لوصف سلوك أو هيئة نظام لعالم حقيقي معقد ولفترات زمنية طويلة" [21].

**2. طرق المحاكاة:**

نحن نقوم بإجراء محاكاة على الحاسب بهدف فهم خصائص مكونات الجزيئات بالتعبير عن تركيبها والتفاعلات الميكروسكوبية بينها وهذه المحاكاة تكمل التجارب التقليدية وتعطينا المقدرة على تعلم شيئاً جديداً لا يمكن إيجاده بالطرق الأخرى. وهناك طريقتان رئيسيتان للمحاكاة هما: طريقة تحديدية وهي طريقة الديناميكا الجزيئية وطريقة احتمالية وهي طريقة مونت كارلو وستتناول هاتين الطريقتين بالشرح كالاتي:

**أ- طريقة مونت كارلو:**

طريقة مونت كارلو هي طريقة لحل المشاكل المختلفة في الرياضيات الحاسوبية عن طريق بناء عملية عشوائية لكل مشكلة تكون لها متغيرات تساوي الكميات المطلوبة في المشكلة. ويتم تحديد المجاهيل تقريباً عن طريق عمل ملاحظات على العملية العشوائية وحساب الخصائص الإحصائية والتي تتساوى تقريباً مع المتغيرات المطلوبة [11].



ب- طريقة الديناميكا الجزيئية:

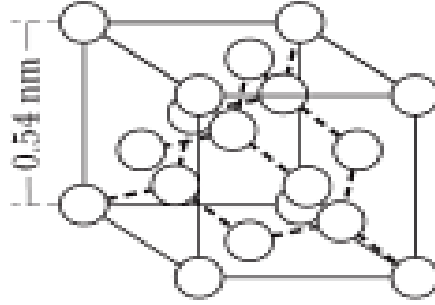
الديناميكا الجزيئية عبارة عن شكل من أشكال محاكاة الحاسوب حيث يسمح للذرات والجزيئات بالتفاعل لفترة زمنية في ظل قوانين الفيزياء ويتم تتبع التطور مع الزمن لمجموعة من الذرات المتفاعلة ومن ثم تكامل معادلات الحركة [12]. وتبنى طريقة محاكاة الديناميكا الجزيئية على القانون الثاني لنيوتن أو معادلة الحركة: (2 - 1)

$$F_i = m_i a_i \quad (2 - 2)$$

حيث:  $F_i$  القوة المؤثرة على الجسيم  $i$  بسبب تفاعله مع الذرات،  $m_i$  كتلته و  $a_i$  تسارعه [12].

IV. النموذج الرياضي:

نحن نعتبر أن أيونات الأروغون في البلازما، كما تشارك الجسيمات المسرعة في قصف سطح الهدف على الخلية الابتدائية.



الشكل (2 - 4): يمثل الخلية الأولية لبلورة السليسيوم

معادلة الحركة لجسيم إحداثياته  $r(t)$  وكتلته  $m_i$  تكون من الشكل:

$$m_i a_i = m_i \frac{\partial^2 r_i}{\partial t^2} = \vec{F}_i(t) \quad (2 - 3)$$

$\vec{F}_i(t)$ : القوى الناتجة عن الجسيم،  $a_i$ : التسارع.

$$a_i(t) = \frac{F_i(t)}{m_i} \quad (2 - 4)$$

$$F_i(t) = F_i^{DC}(t) + F_i^P(t) \quad (2 - 5)$$

$F_i^{DC}(t)$ : القوة المطبقة من طرف المولد الكهربائي وهي صالحة بعيدا عن السطح ومهملة بجواره،  $F_i^P(t)$ : القوة

الناتجة عن تفاعل الكمونات بين الجسيمات أو بين الجسيمات و السطح تعطى بالعلاقة الآتية: [13]

$$F_i^P(t) = \sum_{j \neq i} F_{ji}^P(t) \quad (2-6)$$

$F_{ji}^P(t)$ : هي القوة التي يؤثر بها الجسيم  $j$  على الجسيم  $i$ ، باستعمال كمون موليار:

$$F_{ji}^P(r) = -grad U_{ji}(r) \quad (2-7)$$

$$\vec{F}_{ji} = \left[ \left( \frac{0.35A}{r^2} + \frac{0.105}{B} \right) e^{-0.3r/B} + \left( \frac{0.55A}{r^2} + \frac{0.66}{B} \right) e^{-1.2r/B} + \left( \frac{0.1A}{r^2} + \frac{0.6}{B} \right) e^{-6r/B} \right] \frac{\vec{r}}{\|\vec{r}\|} ; r_{ji} < r_c \quad (2-8)$$

حيث:  $r = r_{ji} = \|r_j - r_i\|$  هي المسافة بين الجسيم  $j$  (الايون) والجسيم  $i$  (ذرة السيليسيوم).

### 1. خوارزمية فرلي (Algorithm de Verlet):

اختيار الخوارزمية هو مهم لحل معادلة الحركة لان دقة النتائج أو سرعة الحسابات ترتبط بالخوارزمية أم عن اختيار

الخوارزمية فيرتبط بالمشكل الفيزيائي المراد حله. نظرا لتعقيد مسارات الأيونات اخترنا خوارزمية فرلي.

خوارزمية فرلي أتخذ مبدئيا من طرف فرلي وهي تقوم بحل مباشر لمعادلات من الدرجة الثانية نستطيع أن نحسب

[13]. وضعيات الجسيمات في الزمن  $t + \Delta t$  من خلال وضعيات في الزمن  $t$  و  $t - \Delta t$ .

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i(t) - r_i(t - \Delta t) + (\Delta t)^2 a_i(t) \quad (2-9)$$

حيث نعوض  $a_i(t)$  بعبارتها نجد

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i(t) - r_i(t - \Delta t) + \frac{1}{m_i} (\Delta t)^2 \sum_{j \neq i} F_{ji}(t) \quad (2-10)$$

نلاحظ أن السرعات  $V_i(t)$  لا تظهر في المعادلة (2-12)، بإضافة نشر تايلور لدوال الوضعيات  $r_i(t)$  في

الأزمنة  $t + \Delta t$  و  $t - \Delta t$  نجد:

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + \Delta t V_i(t) + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 a_i(t) \quad (2-11)$$

$$r_i(t - \Delta t) = r_i(t) - \Delta t V_i(t) + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 a_i(t) \quad (2-12)$$

السرعات ليست ضرورية لحساب المسارات ولكن تستعمل لتقدير الطاقة الحركية وبعد ذلك الطاقة الكلية , يمكن الحصول عليهم بالقانون الآتي:

$$V_i(t) = \frac{r_i(t + \Delta t) - r_i(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (2 - 13)$$

الخطأ الكلي يقدر ب  $\Delta t^4$  على حساب الوضعيات بدرجة  $\Delta t^2$  على حساب السرعات. المعادلة (2 - 12) تحتاج لمعرفة وضعية خطوتين للزمن  $t$  و  $t - \Delta t$ . للخطوة الاولى للزمن  $t = \Delta t$  , و لا نعلم إلا الوضعيات والسرعات الاولى (الابتدائية) نستعمل [13] إذن القانون:

$$r_i(\Delta t) = r_i(0) + \Delta t V_i(0) + \frac{1}{2m_i} (\Delta t)^2 \sum_{j \neq i} F_{ji}(0) \quad (2 - 14)$$

### 2. الوضعيات الابتدائية:

الوضعيات  $r_i(0)$  ممكن حسب الحالات أن تكون موزعة عشوائيا حسب قانون منتظم , أو يكون لها تناظر معطى في بلازما , اختيار الوضعيات الابتدائية عشوائي يسمح بحرية كبيرة على اختيار عدد الجسيمات في الخلية. إذا كان  $a_c$  هو ضلع الخلية و  $RAN(ii)$  هو مولد لأعداد عشوائية حسب قانون منتظم. في قانون منتظم الاحتمال هو نفسه لكل القيم مجال معطى. لكل نداء للمولد  $RAN(ii)$  لدينا العدد الطبيعي  $(ii)$  وعدد عشوائي يساوي  $RAN$ . هذا العدد العشوائي محصور بين (1 و 0) والاحداثيات الابتدائية للجسيمات  $i$  [13] معطاة بالمعادلة الآتية:

$$r_{i,j}(0) = a_c RAN(ii) \quad ; j = x, y, z \quad (2 - 15)$$

عندما تكون الوضعيات الأولية معلومة نعطي شحنات كهربائية وكتل لهذه الجسيمات. البلازما مكونة من نوع واحد من الكتلة  $(m_i = m_1, z_i = z_1)$ .

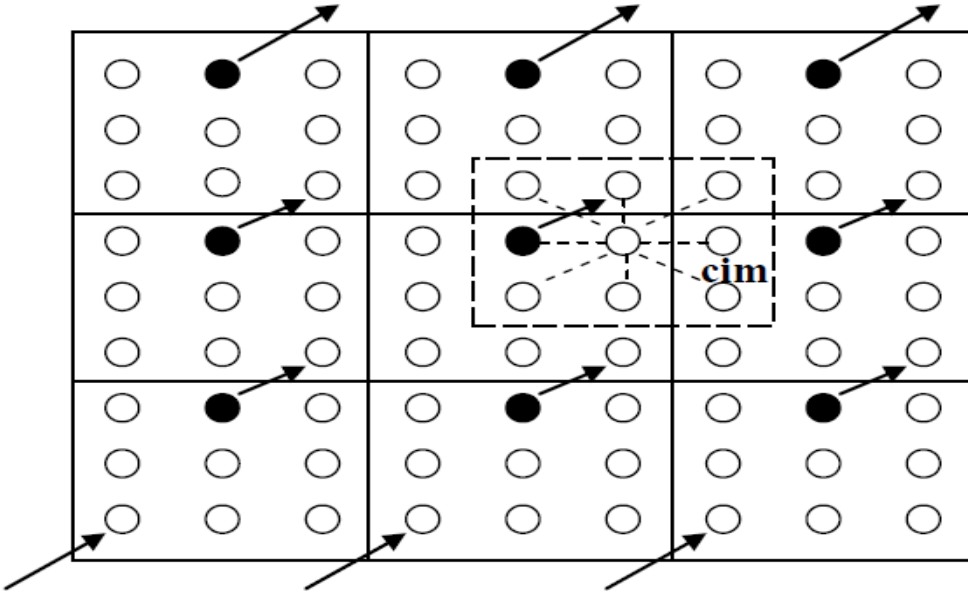
### 3. السرعات الابتدائية:

في هذه الدراسة قرانا الطاقة المكتسبة بفعل الجهد الكهربائي مع الطاقة الحرارية، وجدنا أن الطاقة المكتسبة بفعل الجهد الكهربائي كبيرة جدا امام الطاقة الحرارية أي أن الطاقة الحرارية مهملة وبالتالي السرعات الابتدائية تكون معدومة.

$$v_i = 0$$

4. الشروط الحدودية:

الاصطدام المستمرة مع جدران خلية المحاكاة يمكن أن يسبب عبور الجسيمات حدود الخلية المقابلة , هذا التأثير أكثر أهمية من عدد الجسيمات ولتجنب هذا تم افتراض شروط حدودية دورية , حيث اختيرت الخلية وحدة العينة في جميع أنحاء الفضاء [9] كما في الشكل:



الشكل (5 - 2): يمثل رسم تخطيطي للشروط الحدودية في بعدين [9].

وفي ما يتعلق بعملنا فإن تجاوز الجسيم السطح  $(xOy)$  لا يشكل مشكل وهذا باعتبار أن الجسيمات يمكن إخراجها من خلية المحاكاة [9].

أ- مبدأ الشروط الحدودية:

هذا المبدأ لتسهيل دراسة خصائص النظام والتفاعل بين الجسيمات القريبة من بعضها البعض بالإضافة إلى شبكة تكون الدورية (بلورة الصلب).

ب- بعض المعالم المهمة:

تصميم البرنامج يتطلب بعض المتغيرات الهامة لوصف تطور هذه الظاهرة مثل تحديد الوقت, الطاقة المحددة, فقدان الطاقة.

✓ تحديد الوقت: تقدير الوقت النسبي يحسب على أساس خوارزمية *Verlet* الرقمية وذلك عن طريق تحديد الوقت

اللازم لإتمام التفاعل, وسيتم تقسيم هذا الوقت إلى فترات صغيرة لمتابعة شكل الحركة والوقت اللازم وحساب وقت

الاسترخاء وفقا للمعادلة:  $T = \frac{L}{V}$  حيث:

$L$ : متوسط المسار الحر.

$V$ : متوسط سرعة الجسيمات.

✓ الطاقة المحددة:

معرفة الطاقة في مثل هذه الظواهر مهم لنمذجتها , هنا ندرس عملية القصف التي تهدف إلى انتزاع الذرات

المستخدمة للرش وهي كالآتي:

❖ جهد كهربائي المطبق  $V$ .

❖ الحقل الكهربائي المتوسط الناتجة عن الجهد الكهربائي المطبق  $E = V/h_2$

❖ الطاقة الحركية المكتسبة بفعل الحقل الكهربائي  $E_C = eEr_i$

حيث:  $h_2$  البعد اللبوسين.  $r_i$  احداثيات الأيون.  $e$  شحنة الجسيم المتحرك (أيون الارغون).

✓ تصميم النموذج:

لقد انجزنا برنامج بلغة الفورتران لنمذجة الظاهرة المدروسة الخطوات التي اتبعناها خلال تصميم النموذج هي كالتالي:

❖ توزيع ذرات السليسيوم بشكل منتظم.

❖ اختيار أيون عشوائيا من المجال  $h_1 = 5 \text{ \AA}$  و  $h_2 = 2 \text{ cm}$

❖ تحفيز أيون  $A_1$  بتطبيق جهد كهربائي مستمر فيكتسب طاقة حركية من خلالها يمكن للأيون أن يتحرك بها بسرعة  $V_i$

نحو الهدف.

❖ تتبع هذا الأيون خلال أزمنة صغيرة  $\Delta t = h_1/(v \times 100)$  في المجال  $h_1 = 5 \text{ \AA}$  و  $h_0 = 0.5 \text{ \AA}$  وهذا

من خلال العلاقات التي تحكم خوارزمية فيرلي.

❖ حساب عدد الأيونات المنعكسة من خلال اختبار سرعتها

❖ حساب عدد الأيونات المنعكسة والامتصة من خلال اختبار طاقة كل أيون على حدا فإذا كان له طاقة أقل من الطاقة اللازمة لكسر رابطة من ذرات سطح الهدف، هنا نقول أن هذا الأيون سوف ينعكس أما إذا كان له طاقة أكبر من طاقة سطح الهدف، في هذه الحالة نقول أن هذا الأيون سوف يمتص. علما أن هذا الاختبار يجري فقط على الأيون الذي تجاز  $h_0$ .

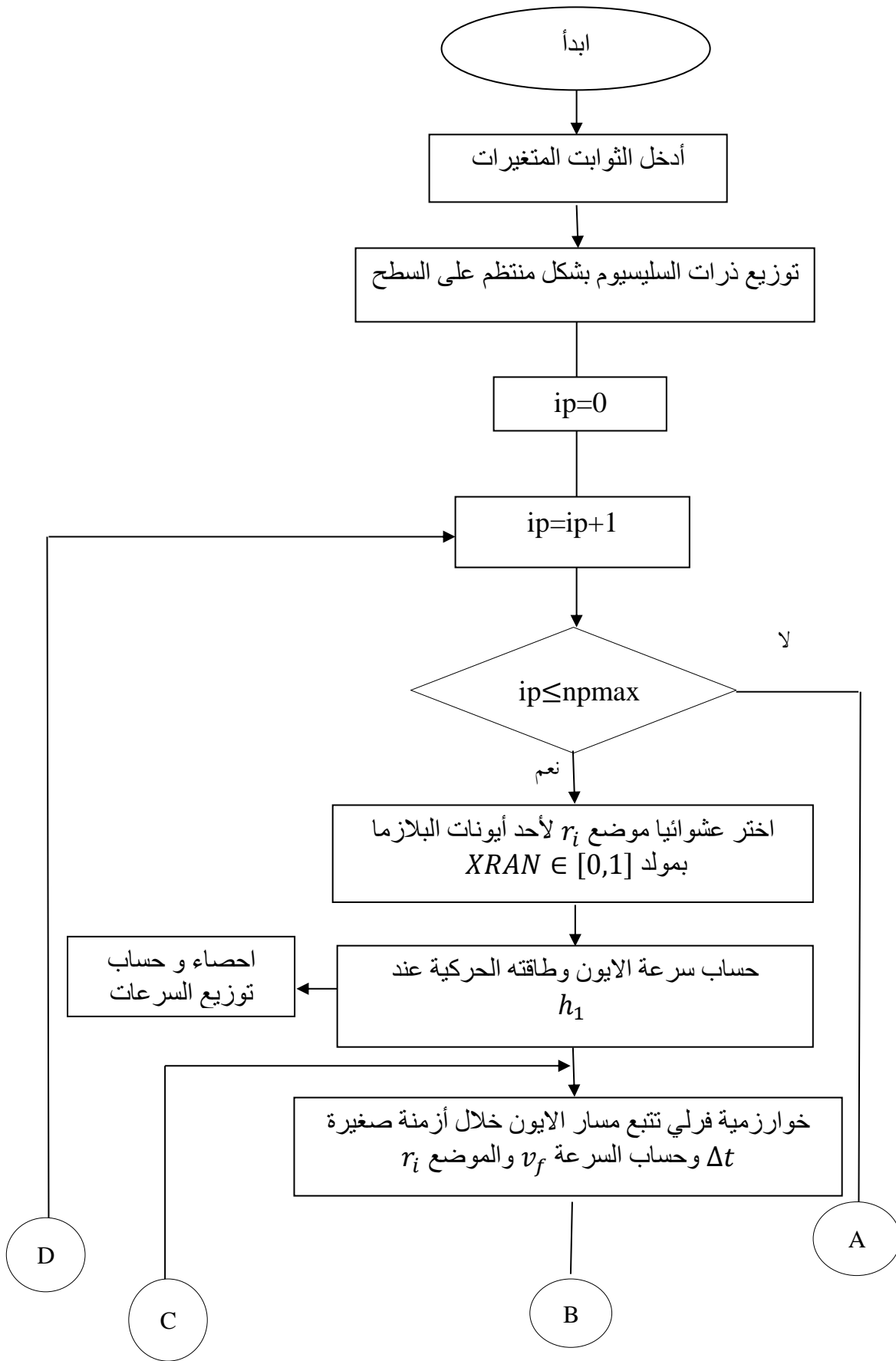
❖ بعد معرفة مصير كل أيون (يتمص أو ينعكس) يمكن أن نقوم بإحصاء الأيونات وحساب توزيع سرعاتها:

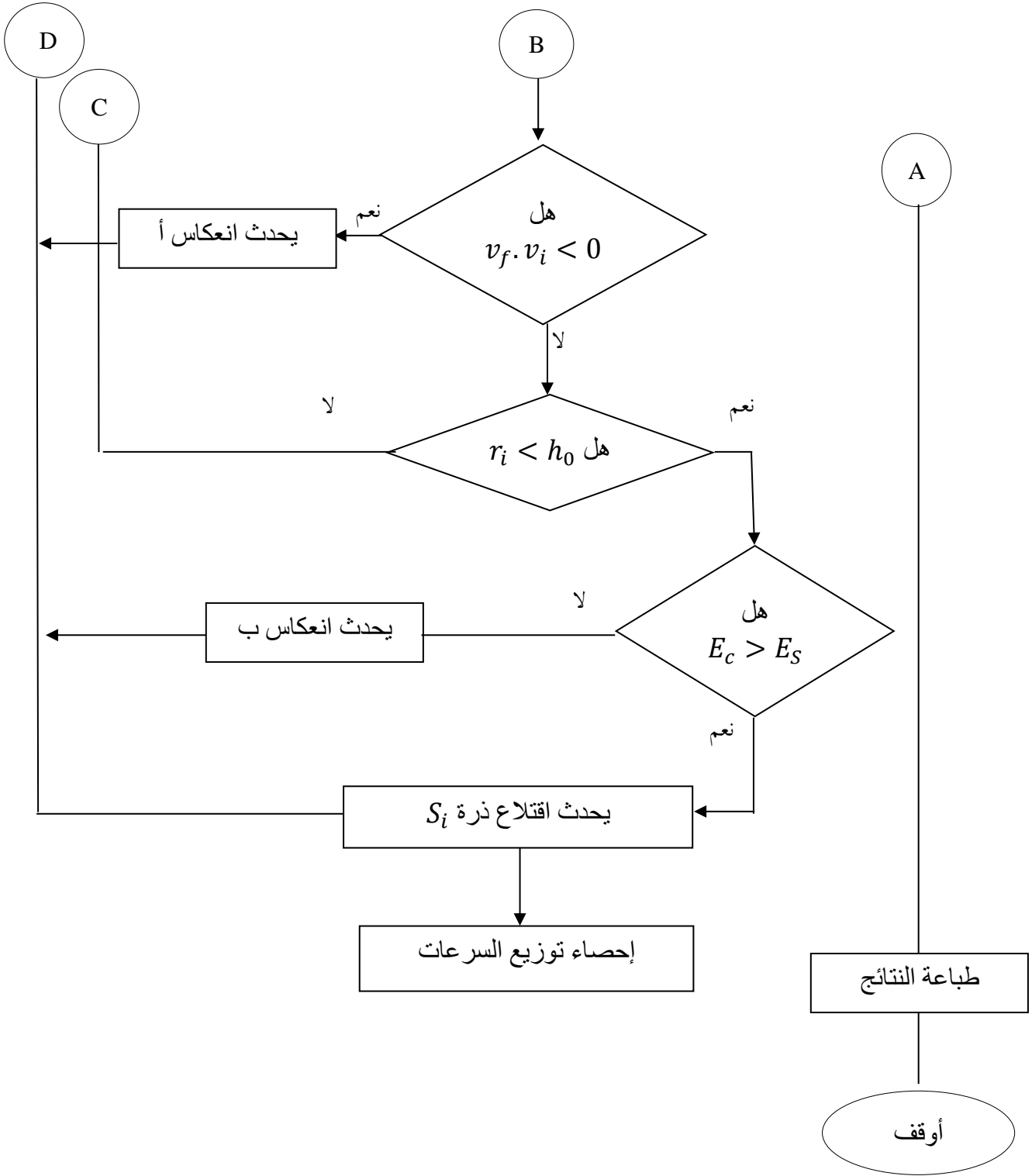
• الإجمالية في المجال بين  $h_1 = 5 \text{ \AA}$  و  $h_2 = 2 \text{ cm}$ .

• الإجمالية في المجال بين  $h_1 = 5 \text{ \AA}$  و  $h_0 = 0.5 \text{ \AA}$ .

• ذرات السليسيوم المقتلعة.

الشكل الموالي يوضح مخطط تصميم البرنامج





الشكل (6 - 2): مخطط تصميم البرنامج.



## الفصل الثالث: النتائج ومناقشتها

## الفصل الثالث: النتائج ومناقشتها

### المقدمة

تبدأ محاكاة الديناميكا الجزيئية بإدخال قيم افتراضية للقوى العاملة بين الجزيئات وكذلك تلك العاملة بين الذرات ينتج عنها قيم حقيقية تصف أهم خصائص النظام المدروس. وتستخدم الطرق العددية للحصول على حلول للمعادلات التقليدية للحركة لنصل إلى معلومات من الصعب الوصول إليها بالطرق التقليدية. في هذه الدراسة قمنا بتحاكي تقنية الرش المهبطي. حيث واخترنا البعد بين لبوسي الغرفة  $h_2 = 2cm$  والمتغيرات التي استعملناها لإجراء هذه العمليات هي الجهد المطبق المقدر بحوالي  $1000V$  وموضع أيون الأرجون وسرعته وتسارعه في لحظة محددة وكذلك توزيع ذرات الهدف (السليسيوم) بشكل منتظم. يمكن من خلال هذه الدراسة تخطي الصعاب التي تواجهها الطرق التقليدية عند محاولة نمذجة أي ظاهرة. ولذلك اشتمل هذا البحث على برنامج مبسط بلغة الفورتران يمكن من خلاله فهم تقنية الرش المهبطي. في هذا الفصل سوف نقوم بعرض هذه النتائج.

### I. توزيع السرعات:

من خلال البرنامج الذي صممناه يمكن حساب توزيع السرعات للأيونات المسرعة نحو الهدف وكذلك توزيع سرعات ذرات الهدف المقتلعة. النتائج المتحصل عليها موضحة فيما يلي:

#### 1. توزيع سرعة الأيونات المسرعة بالقرب من سطح الهدف:

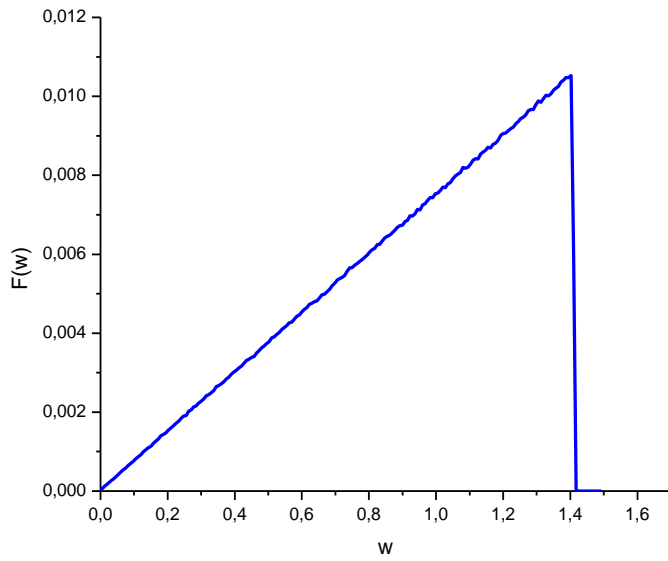
خوارزمية فرلي ومولد رقم عشوائي تستخدم لتتبع حركة أيون الأرجون  $A_r$  خلال انتقاله في المجال من  $h_2$  إلى  $h_0$

داخل الخلية نغير في قيمة الجهد المطبق ونأخذ  $10^7$  عدد أيونات الأرجون  $A_r$ . و  $w = v_i/v_0$

حيث  $v_0 = \sqrt{Ve/m}$ ،  $m$  كتلة الأرجون،  $e$  شحنة أيون الأرجون،  $V$  الجهد المطبق

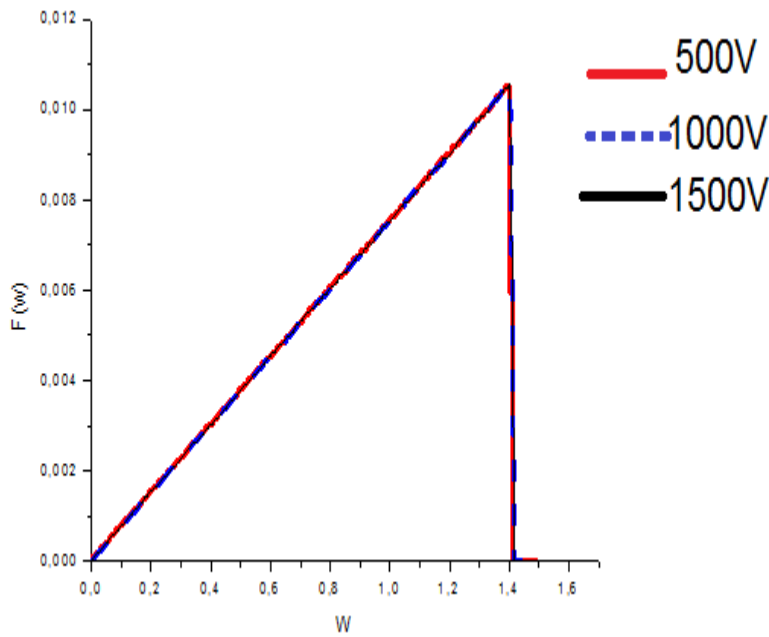
أ- توزيع السرعة الأيونات عند  $h_1 = 5 \text{ \AA}$

النتائج موضحة في الشكل الآتي.



الشكل (3 - 1): توزيع السرعات  $F$  عند  $h_1$  بدلالة  $(w = Vi/V_0)$

الشكل الآتي يوضح توزيع السرعات عند التغيير في الجهد المطبق



الشكل (3 - 2): توزيع السرعات  $F$  عند  $h_1$  بدلالة  $(w)$  عند التغيير في الجهد المطبق

V(KV)	V <sub>Moy</sub> (Km/s)	V <sub>Max</sub> (Km/s)
0.5	32.336	49.079
1	46.698	69.408
1.5	56.196	85.008

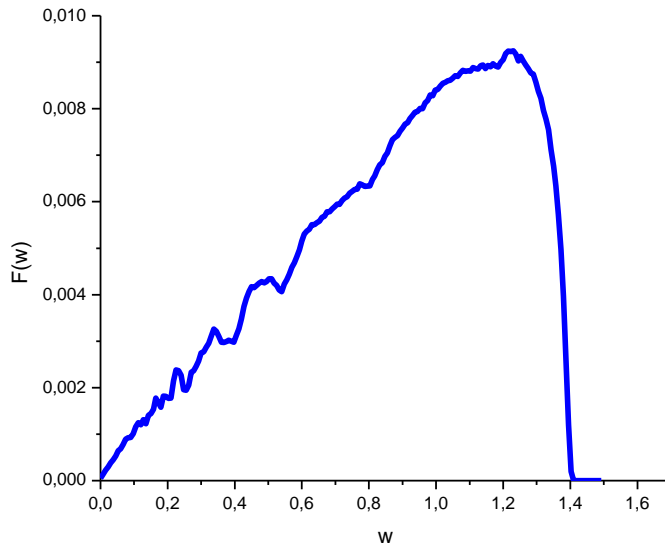
الجدول (1 - 3): يعطي قيم السرعة المتوسطة والسرعة العظمى عند  $h_1$  عند التغيير في قيمة الجهد

✓ الشكل لا ينتمي إلى أي شكل من الأشكال الطبيعية (مثل gaussianne ou maxwellienne). يمكن

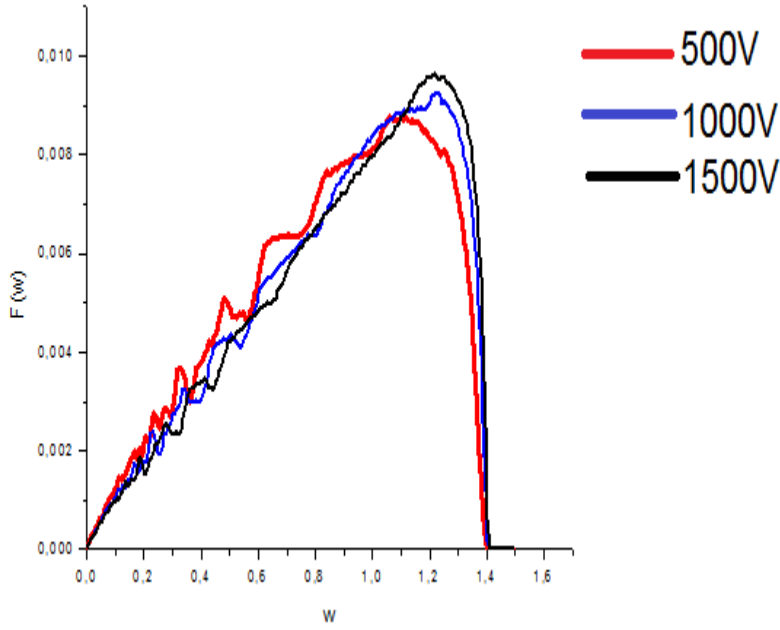
أن نرجح هذا السبب إلى عدم التوازن الحراري لهذا الوسط.

✓ نلاحظ أن تغيير الجهد المطبق لا يؤثر على توزيع السرعات ومنحنيات نسب توزيع السرعات تقريبية  $F(w)$ .

ب- توزيع السرعة الأيونات عند  $h_0 = 0.5 \text{ \AA}$



الشكل (3 - 3): توزيع السرعات  $F$  عند  $h_0$  بدلالة  $V = 1000V (w)$



الشكل (3 - 4): توزيع السرعات  $F$  عند  $h_0$  بدلالة  $w$  عند التغيير في الجهد المطبق

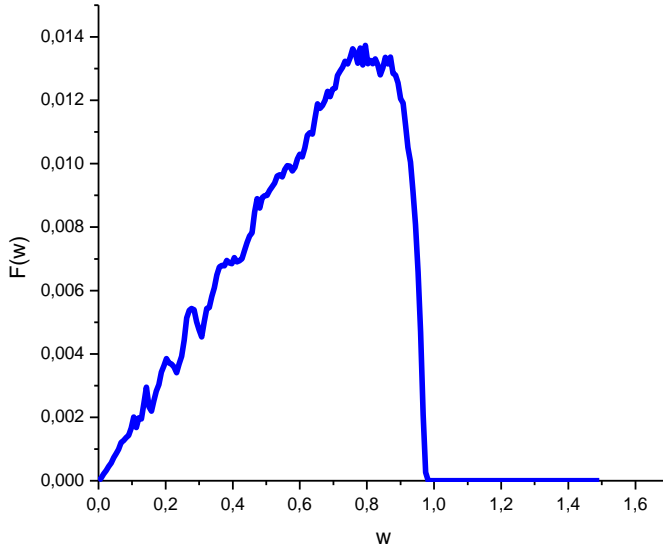
V(KV)	$V_{Moy}$ (Km/s)	$V_{Max}$ (Km/s)
0.5	29.329	49.079
1	44.970	69.408
1.5	55.061	85.008

الجدول (3 - 2): يعطي قيم السرعة المتوسطة والسرعة العظمى عند  $h_0$  عند التغيير في قيمة الجهد

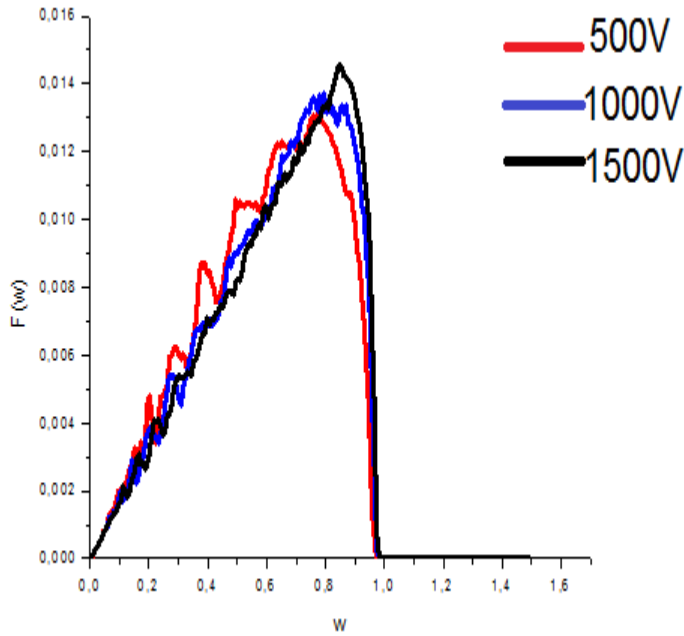
✓ نلاحظ أن المنحنيات تحافظ على شكلها العام عند التغيير في قيمة الجهد فقط تنزاح بمقدار صغير.

2. توزيع سرعات ذرات السليسيوم المقتلعة:

الذرات المقتلعة بسبب قصف أيونات الأرجون لها توزيع سرعات موضح في الشكل الآتي:



الشكل (3 - 5) توزيع السرعات  $F$  لذرات السليسيوم المقتلعة بدلالة  $V = 1000V$  ( $w$ )



الشكل (3 - 6) توزيع السرعات  $F$  لذرات السليسيوم المقتلعة بدلالة ( $w$ ) عند التغيير في قيمة الجهد المطبق

V(KV)	V <sub>Moy</sub> (Km/s)	V <sub>Max</sub> (Km/s)
0.5	21.388	33.891
1	31.104	48.127
1.5	38.270	59.016

الجدول (3 - 3): يعطي قيم السرعة المتوسطة والسرعة العظمى لذرات السليسيوم المتقلعة عند التغيير في قيمة الجهد

- ✓ نلاحظ عند التغيير في قيمة الجهد المطبق التأثير يكون بصفة طفيفة لكن منحى التوزيع يحافظ على شكله.
- ✓ كلما زادت قيمة الجهد المطبق تزداد سرعة أيونات الأروغون ومعدل قصف الهدف، وبالتالي تزداد سرعة وعدد ذرات السليسيوم المتقلعة.

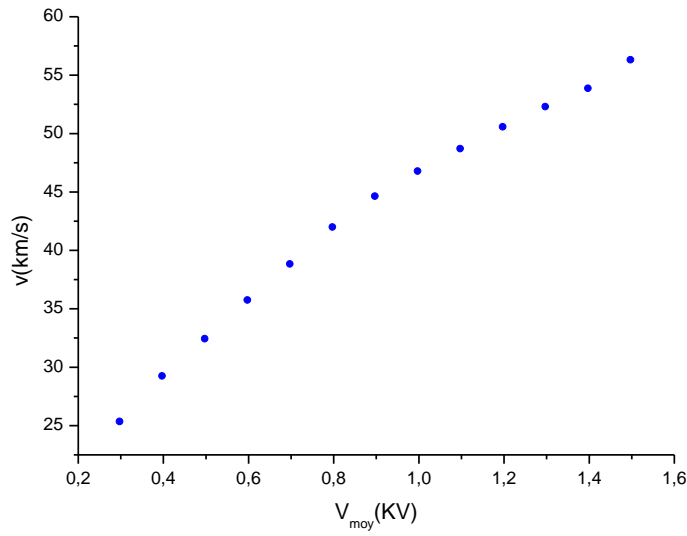
### 3. مردود الرش:

النتائج المتحصل عليها مبيّنة في الجدول (4 - 3).

$V$ (KV)	$V_{moy}$ (km/s)	$V_{max}$ (km/s)	$E_c$ (eV)	مرود الرش المهبطي
0.3	25.24	38.01	148.62	0.72
0.4	29.14	43.89	198.46	0.78
0.5	32.33	49.07	249.67	0.82
0.6	35.64	53.76	297.15	0.84
0.7	38.73	58.07	349.97	0.87
0.8	41.89	62.08	397.16	0.88
0.9	44.53	65.84	445.83	0.89
1.0	46.68	69.40	499.18	0.90
1.1	48.60	72.79	548.92	0.91
1.2	50.47	76.03	594.33	0.92
1.3	52.20	79.13	647.75	0.92
1.4	53.77	82.12	699.58	0.93
1.5	56.21	85.00	747.38	0.94

الجدول (3 - 4): يوضح تغير السرعة والطاقة الحركية والمرود عند التغير في قيمة الجهد المطبق.

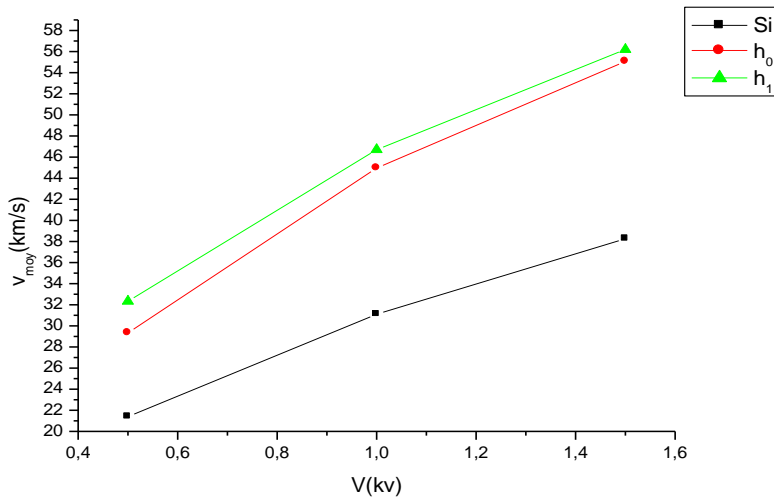




الشكل (3 - 7) منحنى تغير السرعة بدلالة الجهد الكهربائي

تشير هذه النتائج إلى أن:

- ✓ المردود الرش يزداد عند الزيادة في قيمة الجهد المطبق بين لبوسي غرفة الرش لقصف هدف السليسيوم من قبل أيون الأرجون.
- ✓ السرعة المتوسطة تزداد عند زيادة الجهد الكهربائي المطبق ولكن هذه الزيادة تكون بشكل بطيء.



الشكل (3 - 8) منحنى تغير السرعة بدلالة الجهد الكهربائي لكل من ايونات عند  $h_0$  و  $h_1$  وذرات  $S_i$  المقتلعة

✓ نلاحظ ان مختلف السرعات تتغير بنفس الشكل فهي تزداد عند زيادة الجهد الكهربائي المطبق. ولكن بشكل بطيء.

✓ نلاحظ ان الأيون كلما اقترب من سطح الهدف قلت سرعته.

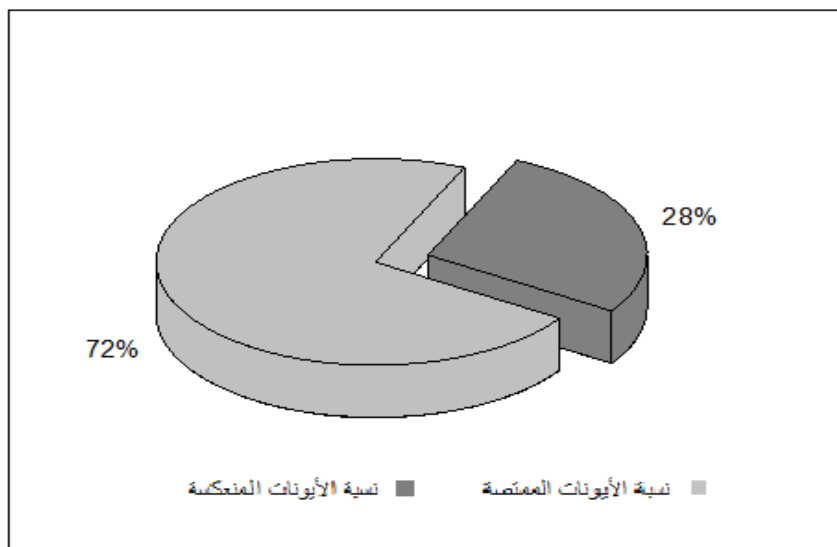
✓ نلاحظ أن ذرات السليسيوم المقتلعة تكون سرعتها اقل من سرعة الأيونات.

#### 4. معدل الأيونات الممتصة والمنعكسة:

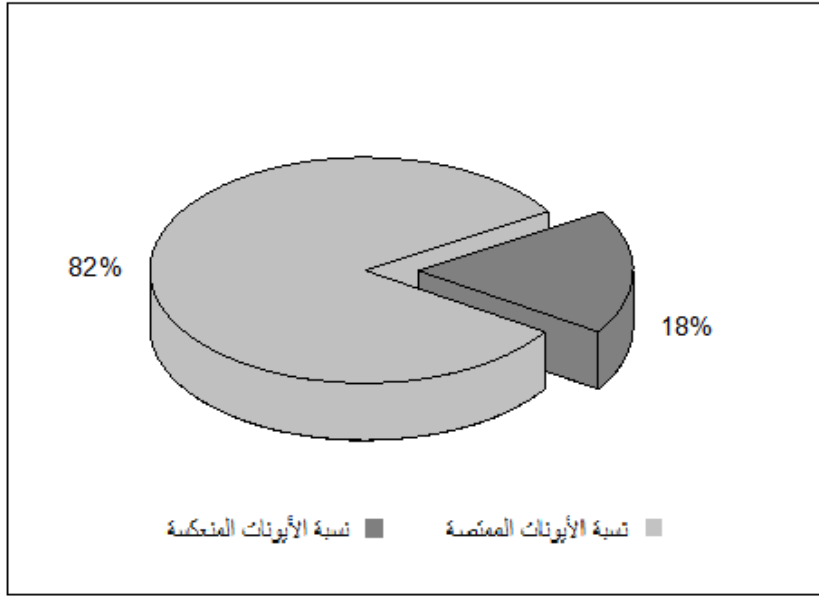
V (kV)	معدل الأيونات (%)	
	المنعكسة	الممتصة
0.3	0.2750972	0.7248812
0.5	0.1790087	0.8209827
1.0	0.0991791599	0.9082043
1.5	0.061795402	0.9381986

الجدول (5 - 3): يعطي نسب امتصاص وانعكاس الأيونات عند التغيير في قيمة الجهد

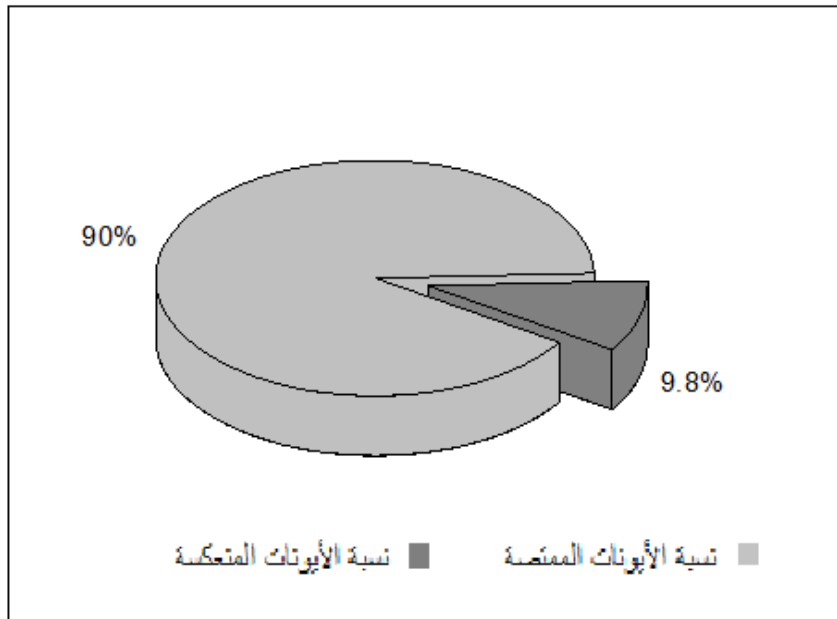
يمكن تمثيل هذه النسب في الأشكال الآتي:



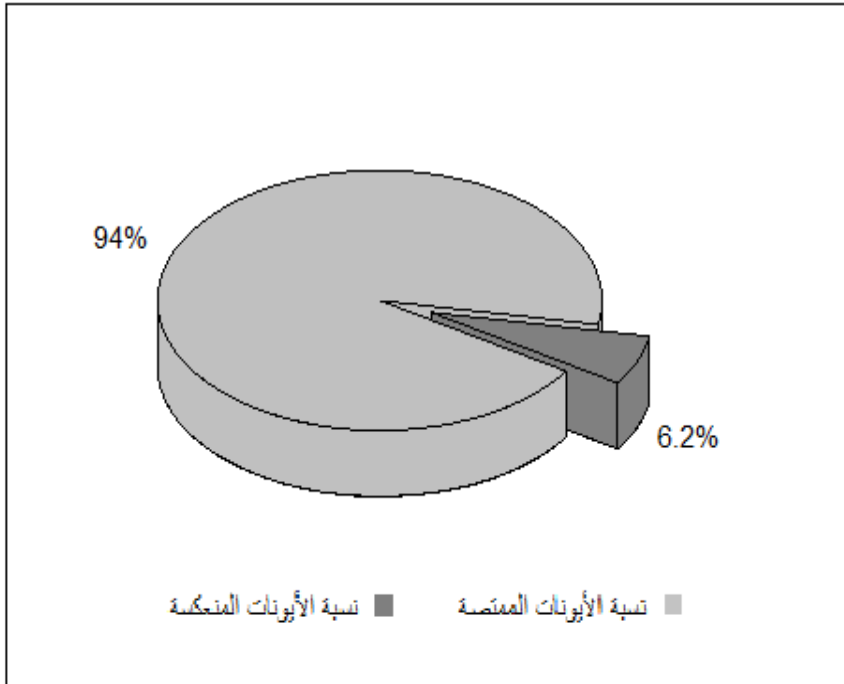
الشكل (9 - 3) يعطي نسب امتصاص وانعكاس الأيونات لما  $V = 0.3KV$



الشكل (10 - 3) يعطي نسب امتصاص وانعكاس الأيونات لما  $V = 0.5KV$



الشكل (11 - 3) يعطي نسب امتصاص وانعكاس الأيونات لما  $V = 1KV$



الشكل (12 - 3) يعطي نسب امتصاص وانعكاس الأيونات لما  $V = 1.5KV$

تشير النتائج المتحصل عليها إلى أن نسبة أيونات الأرجون المنعكسة منخفضة جدا مقارنة بنسبة الأيونات الممتصة التي بدورها تعبر عن نسبة أيونات الأرجون المتوضعة على سطح هدف السليسيوم، وكذلك نسبة ذرات السليسيوم المقتلعة بسبب قصفها بأيونات الأرجون.

الخلاصة العامة والآفاق

## الخلاصة العامة والآفاق

من خلال هذه الدراسة قمنا بحساب توزيع سرعات الأيونات خلال التصادم مع الهدف في غرفة الرش المهبطي بطريقة الديناميكا الجزيئية، التي تعتمد أساسا على خوارزمية فولي. اعتبرنا أن القوة المؤثرة على الأيون البعيد عن سطح الهدف هي الجهد الكهربائي، اما الأيونات القريبة من سطح الهدف فتتأثر بكمون مولير. حيث صممنا برنامج بلغة الفورتان يعكس الخصائص المجهرية لحركة أيونات الأرجون  $A_r$  المسرعة بجهد كهربائي قيمته تتراوح بين  $500V$ ،  $1500V$  في البلازما، و كذلك تصادمها مع السطح ( $100$ ) لبلورة السليسيوم  $S_i$  المشكلة للهدف. وقد اعتبرنا أن البعد بين لبوسي غرفة الرش هو  $h_2 = 2cm$ ، حيث قمنا بحساب توزيع سرعات الأيونات في عند  $h_1 = 5 \text{ \AA}$  أي أن الأيونات بعيدة عن سطح الهدف بتطبيق قيم مختلفة للجهد الكهربائي. كذلك قمنا بتتبع حركة الأيونات خلال أزمنة صغيرة  $\Delta t$  بتطبيق خوارزمية فولي وحساب توزيع سرعاتها في عند  $h_0 = 0.5 \text{ \AA}$  أي القريبة من السطح بتطبيق جهود مختلفة القيمة واخيرا قمنا بحساب توزيع سرعات ذرات السليسيوم المقتلعة، وذلك باعتماد سرعة مرجعية  $V_0$ .

وقد تحصلنا على النتائج الآتية:

- ✓ منحى توزيع سرعات الأيونات في المواضع الأولية أي الأيونات البعيدة عن السطح، والتغير في قيمة الجهد المطبق، وقد وجدنا أن هذه التوزيعات لا تتغير مهما غيرنا في قيمة الجهد الكهربائي.
- ✓ منحى توزيع سرعات الأيونات بالقرب من سطح الهدف، والتغير في قيمة الجهد المطبق، وجدنا أن الشكل العام لهذه التوزيعات لا يتغير عند التغير في قيمة الجهد المطبق الا بانزياح طفيف.
- ✓ منحى توزيع سرعات ذرات السليسيوم المقتلعة بتطبيق عدة قيم للجهد، وجدنا أن لها نفس الشكل العام ولكن توجد أنزيمات طفيفة بينها.

النتائج المتحصل عليها يمكن استغلالها في فهم الظواهر المتعلقة بتقنية الرش المهبطي وهو ما يسعى دائما لتحقيقه.

يمكن أن يتم ذلك من خلال ما يلي:

- ✓ التغيير في قيمة الجهد المطبق خلال العمل.
- ✓ أخذ بعين الاعتبار التصادمات في البلازما ومتوسط مسير الأيونات.
- ✓ الاخذ بعين الاعتبار التصادمات المتسلسلة داخل بلورة الهدف.
- ✓ اعتبار كمونات اخرى اضافة الى كمون موليبير.
- ✓ التغيير في التوجه البلوري للهدف.

## قائمة المراجع



قائمة المراجع

- [1] ز.بلة " الدراسة التشخيصية بالمحاكاة العددية لمسار كهربي ساكن في الرش المهبطي " ماجستير - جامعة قاصدي مرباح - ورقة(2007).
- [2] P. FAUCHAIS;"Gaz ionisé et plasma Technique de l'ingénieur"; AF35.60.
- [3] J. L. DELCROIX et A BERS; " physique des plasmas 1"; Inter Editions Paris (1994).
- [4] إ-شحي; " حساب دوال توزيع الحقل الكهربائي الموضوعي ومشتقاته داخل البلازما باستخدام المحاكاة العددية موني كارلو: تطبيق على طيف الهيليوم " دكتوراه - جامعة منتوري - قسنطينة (2005).
- [5] و. مصطفى صهيوني " مقدمة في فيزياء البلازما" كتاب
- [6] س-عبيد; " دراسة في ثلاث ابعاد للمقادير الكهربائية في جهاز الرش المهبطي المغنروطي باستعمال طريقة الهجوم المنتهية " ماجستير - جامعة قاصدي مرباح - ورقة (2012).
- [7] Y. QUÉRÉ; "Défauts ponctuels dans les métaux ".; Masson et Cie Paris,.-236p(1967)
- [8] D. J. SROLOVITZ, C. A. VOLKERT, M. J. FIUES and R. J. KEE; "Modeling and simulation of thin-film processing"; Materials Research Society Symposium Proceedings Vol 389.(1965)

- [9] Y. BENZAHI, "*Simulation numérique par la dynamique moléculaire de l'interaction de plasma- surface lors de déposition sur couches minces*", Mémoire de magister, Université de Ouargla (2002).
- [10] A. BELLEC;"Transfert de charges à l'échelle atomique sur la surface de silicium (100) hydrogénée"; Thèse de Doctorat Physics. Université Paris Sud - Paris XI,(2008)
- [11] I. M. SOBOL. R. Messer , J. Stone and P.Fortini, Chicago "The Monte Carlo Method, Translated",: University of Chicago Press (1974).
- [12] R. J. SADUS; "Molecular Simulation of Fluids"; Theory, Algorithms and Object–Orientation, 2<sup>nd</sup> Edition, Amsterdam: Elsevier Science. (2002)
- [13] F. KHELFAOUI; "Modèles de profils Stark d'ions multicharges dans les plasmas chauds"; Thèse de Doctorat, Université de Provence ( 1991).
- [14] O. B. FIRSOV ,Sov.. Phys.–JETP, Vol. **6**, 534, (1958)
- [15] A. ABBAD, A. BELAIDI;"Influence of the different ion implantation parameters on the phenomena occurring during ion bombardment in SiO<sub>2</sub>"; Communication Science et Technologie. N° 1, pp20–25. (2002)
- [16] J. LINDHARD, V. NIELSEN, M. SCHARFF , Mat. Phys. Med. K. Dan. **36**, No. 10, p16, (1968)

- [17] M. T. ROBINSON, In Sputtering by Particle Bombardment.- I, ed.  
By R. Behrisch, Topics Appl. Phys, Vol.47, Springer, Berlin,  
Heidelberg. , p.73 (1981)
- [18] W. D. WILSON ,L. G. HAGGMARK, J. P. BIERSAK ; Phys. Rev.  
15, 2458, (1977)
- [19] J.P. BIERSAK, J. F. Ziegler ; Nucl. Instrum. Methods 194, 93, (1982)
- [20] N. Q. LAM , DAGENS, L. DOAN; Phys. F13, 2503,(1983)

[21] أ. القاضي; "محاكاة حركية الجزيئات وحقل القوى الضبابية"; ماجستير-جامعة الملك عبد العزيز- جدة،  
المملكة العربية السعودية (2011).

## الملخص

معرفة حركة ومسار أيونات البلازما والذرات المقتلعة من هدف داخل غرفة الرش المهبطي، له أهمية قصوى في فهم الظواهر المتعلقة بتحضير الطبقات الرقيقة. المحاكاة العددية باستعمال الديناميكا الجزيئية لها إمكانية معتبرة في فهم ظاهرة تفاعل بلازما-سطح. هذه المذكرة تعرض نموذج للمحاكاة العددية بالديناميكا الجزيئية لتفاعل بلازما الأرجون مع سطح الهدف 100 المشكل من ذرات السليسيوم، وذلك أثناء تحضير الطبقات الرقيقة بالرش المهبطي باستعمال تفريغ كهربائي مستمر عالي في حدود 1000V. وقد اعتمدنا كمون موليير لدراسة تفاعل الأيونات مع سطح الهدف. تحصلنا على توزيع سرعات الأيونات البعيدة عن سطح الهدف وتوزيع سرعات الأيونات القريبة من سطح الهدف وكذلك توزيع سرعات ذرات السليسيوم المقتلعة، ونسبة الأيونات المنعكسة والممتصة، وكذلك مردود الرش. الكلمات الدالة : الرش المهبطي، تفاعل بلازما-سطح، ديناميكا الجزيئية، كمون موليير، توزيع السرعات.

## Résumé

La connaissance des trajectoires et des vitesses des ions du plasma et des atomes arrachés de la cible à l'intérieur de la chambre de pulvérisation cathodique présente une importance primordial dans la compréhension des phénomènes liés à la préparation de couches minces. La simulation numérique par la dynamique moléculaire présente des potentiels considérables dans la compréhension du phénomène de l'interaction plasma – surface

Ce mémoire présente un modèle de simulation numérique par la dynamique moléculaire de l'interaction d'un plasma d'argon avec la surface 100 d'une cible composée d'atomes de silicium lors de la préparation de couches minces par pulvérisation cathodique. Nous avons considéré des décharges électriques en régime continu pour des tensions électriques de l'ordre de 1000V. Nous avons adopté le potentiel de Molière pour le traitement de l'interaction des ions avec la surface de la cible.

Nous avons calculé la distribution des vitesses des ions d'argon près de la surface de la cible, la distribution des vitesses des ions d'argon à la surface de la cible, la distribution des vitesses des atomes de silicium arrachés ainsi que le rendement de la pulvérisation.

**Mots clés :** Pulvérisation cathodique, interaction plasma-surface, dynamique moléculaire, potentiel de molière, distribution des vitesses.

## Abstract

Knowledge of trajectories and velocities of ions of the plasma ions and injected atoms from silicon target in sputtering process is of importance to understanding the phenomenon related to the preparation of thin layers. Numerical simulation using the Monte Carlo method has considerable potential in understanding the phenomenon of plasma-surface interaction. It calculates velocity distributions of the incident ions and the injected atoms.

This memory is a molecular dynamics numerical simulation model to study the interaction of argon plasma with surface 100 of Silicon atoms The process is realized during the preparation of thin layers with sputtering on continuous electrical current in the range of 1000V. We have adopted Moliere potential to study the interaction of ions with the silicon target surface. We have acquired the ion velocity distributions far from the target and near the surface of the target surface, as well as the velocity distribution of silicon injected atoms.

**Key words:** sputtering, plasma - surface interaction, molecular dynamics simulation, Moliere potential, velocity distributions.