

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ AMAR TELIDJI – LAGHOUAT

FACULTÉ DE SCIENCE

DÉPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIÈRE



Thèse de doctorat en Sciences

Présenté pour l'obtention du Diplôme de docteur en physique

Spécialité : Physique

Par :

ISSAAD Mohamed

Thème

Simulation des systèmes fortement couplés à deux dimensions par la méthode de Monte Carlo : étude structurale et transitions de phase

Soutenue publiquement le 06 juin 2021, devant le jury composé de :

Mr Iben Khaldoun LEFKAIER	Pr	Université de Laghouat	Président
Mr Bachir BENTRIA	Pr	Université de Laghouat	Examineur
Mr Mostefa MAACHE	Pr	Université de Djelfa	Examineur
Mr Salah KHENCHOUL	MCA	Université de Laghouat	Examineur
Mr Brahim BELADEL	MCA	Université de Djelfa	Examineur
Mr Yazid DEROUICHE	Pr	Université de Djelfa	Promoteur
Mr Bachir HELIFA	MCA	Université de Laghouat	Co-promoteur
Mr Mourad DJEBLI	Pr	USTHB - Alger	Invité

Remerciements

Je tiens à remercier tout particulièrement mes encadreurs de thèse Messieurs **Derouiche Yazid** et **Halifa Bachir**, pour leur soutien, leur compréhension et pour le sentiment d'amitié exprimé en vers ma personne.

Je tiens à exprimer mes sincères remerciements à Monsieur le Professeur **LEF-KAIER Iben Khaldoun**, qui a bien voulu accepter de présider le jury de ma thèse.

J'exprime aussi ma sincère reconnaissance au **Pr. BENTRIA Bachir**, au **Dr KHENCHOUL Salah**, au **Dr BELADEL Brahim** et au **Pr MAACHE Mostefa** pour avoir accepté de faire partie de ma soutenance.

Mes plus profonds remerciements vont à mon **professeur Djebli Mourad** qui ma donné le goût de la recherche scientifique. Il a toujours eu le temps de répondre à mes questions et il a patiemment fourni la bonne vision, les encouragements et les conseils précieux qui ont éclairci mon chemin et m'ont donné la volonté ferme d'acier, procuré et permis d'entamer et de poursuivre ma recherche scientifique avec amour et persévérance.

Mes remerciements les plus vifs vont tout particulièrement à mes parents qui ont joué évidemment un très grand rôle lors de la réalisation de cette thèse. Leur soutien moral et matériel m'a été indispensable tout au long de ces années. J'espère que ce travail leurs témoignent toute ma reconnaissance et mon estime à leurs égards.

Je remercie également tous mes amis pour leurs encouragements.

Je serai sans cesse reconnaissant à ma **FEMME** pour son soutien moral et pour sa présence permanente à mes cotés.

Finalement je remercie toute ma famille et mes amis.

Table des matières

Table des figures	viii
Liste des tableaux	ix
Liste d'abréviations	xi
Introduction générale	1
1 Les systèmes fortement couplés	5
1.1 Présentation du problème	5
1.2 Qu'est-ce qu'un système fortement corrélé (couplé) ?	6
1.3 Pourquoi étudier les systèmes fortement couplés ?	7
1.4 Paramètre de couplage	7
1.5 La Cristallisation dans les systèmes fortement couplés	8
1.5.1 Le Cristal de Wigner	8
1.5.2 Systèmes colloïdaux (cristaux colloïdaux)	10
1.5.3 Cristaux Coulomb	12
2 Généralités sur les plasmas et les plasmas complexes (poussiéreux)	13
2.1 Introduction	14
2.2 Concepts fondamentaux des plasmas	14
2.2.1 Degré d'ionisation	14
2.2.2 Longueur de Debye	15
2.2.3 Fréquence de plasma	15
2.3 Les plasmas poussiéreux	16
2.3.1 Première observation de Langmuir	16
2.3.2 Les plasmas poussiéreux dans l'espace	16
2.3.3 Plasmas poussiéreux en laboratoire	17
2.3.4 Formation des poussières dans les plasmas	18
2.4 Mécanismes de charges d'une particule dans un plasma	19
2.4.1 Collection des particules	20
2.4.2 Emission photo-électrique (photo-émission)	20
2.4.3 Emission secondaire des électrons	20
2.5 Evaluation de la charge portée par une poussière dans un plasma de laboratoire	21
2.6 Modèle du mouvement de l'orbite limitée (OML)	21
2.7 Fluctuation de la charge	24

2.8	Bilan de forces dans les plasmas poussiéreux	25
2.9	Les plasmas poussiéreux en phase organisée (cristaux de plasma)	26
3	Simulation par la méthode de Monte Carlo	33
3.1	simulation numérique	34
3.2	Les différentes méthodes de simulation aux différentes échelles	35
3.3	La méthode de Monte Carlo	37
3.3.1	Historique de la méthode de Monte Carlo	37
3.4	Description de la méthode Monte Carlo	39
3.4.1	Pourquoi le nom : Monte Carlo ?	39
3.4.2	Variantes des méthodes Monte Carlo	39
3.4.3	Méthode Monte Carlo Metropolis	40
3.4.4	Principes de la simulation Monte Carlo	40
3.4.5	Algorithme de Métropolis	42
4	Cristal plasma : Description des états d'équilibre	45
4.1	Description du modèle physique et approche numérique . . .	46
4.2	Forme générale d'hamiltonien et limite classique	46
4.3	Hamiltonien classique du système	48
4.3.1	Potentiel de confinement	48
4.3.2	Forme du potentiel d'interaction	49
4.4	Hamiltonien adimensionné	51
4.5	Approche numérique	53
4.5.1	Méthode de simulation Monte Carlo	54
4.5.2	Algorithme de Metropolis	54
4.5.3	Ensemble canonique	55
4.5.4	Détail d'une simulation	56
4.5.5	Optimisation globale	57
4.5.6	La méthode Newton-Raphson	58
4.6	Résultats et discussions	58
4.6.1	Effet de Potentiel sur les configurations les plus stables	60
4.6.2	Etude comparative	64
5	Fluctuation de la charge et transition de phase	67
5.1	Modèle physique	68
5.1.1	Description du modèle	68
5.2	Effet de l'amplitude de fluctuation de la charge sur la transition de phase	74
5.2.1	Description d'une nouvelle expression de la fluctuation de la charge	74
5.2.2	Etude de la trajectoire des particules	76

Table des matières	v
5.3 Transition ordre-désordre (la fusion)	79
Conclusion générale	83
Annexes	85
A Dispositif expérimental	87
A.1 réacteur PKE-Nefedov (Plasma Kristall Experiment)	87
Bibliographie	91

Table des figures

1.1	Echelle colloïdale [Dirk 2004]	10
1.2	(a) Schéma du principe du dépôt électrophorétique (b) Image de microscopie électronique en transmission d'un assemblage 2D de nanoparticules d'or de 15nm [Trau 1997]	12
2.1	Exemple extrait de la littérature de clichés par microscopie électronique à balayage réalisé sur des poussières issues de plasma contenant (a) du silane [Strahm 2010], (b) du méthane enrichi d'azote [Massereau-Guilbaud 2009] ou (c) de l'acétylène [Makdessi 2017].	18
2.2	Trajectoire d'un ion positif entrant en interaction avec le champ central d'un grain de poussière chargée négativement	22
2.3	Diagramme de transition de phase pour le modèle OCP et Yukawa [Robbins 1988]	28
2.4	Diagramme de phase pour le système Yukawa, paramètre de couplage Γ en fonction de la constante d'écrantage κ_p [Hamaguchi 1997]	29
2.5	Dispositif experimental pour voir les structures organisées [Pieper 1996]	30
2.6	Image CDD de grains de poussières formant un cristal coulombien avec une structure hexagonale à deux dimensions [Pieper 1996]	31
3.1	Principaux modèles de simulation utilisés en science des matériaux.	36
4.1	Comparèsent entre la porté des potentiels du système	51
4.2	Energie du système présentant des minimum locaux et un minimum global	57
4.3	Organigramme de la méthode de Monte Carlo.	59
4.4	Etats fondamentaux de N=5 à 30 particules confinées circulairement avec le potentiel Coulombien	61
4.5	Etats fondamentaux de N=5 à 30 particules confinées circulairement avec le potentiel Yukawa	62
4.6	Etats fondamentaux de N=5 à 30 particules confinées circulairement avec le potentiel Logarithmique	63

5.1	Evolution de la fluctuation de la charge en fonction de nombre d'itérations Monte Carlo (MCS).	76
5.2	Trajectoires d'un système de $N = 20$ pendant 10000 pas de Monte Carlo pour différentes températures, la première colonne (a, c, e) correspond à des particules de poussière à charge constante, la deuxième colonne (b, d, f) à charge variable (modèle khrapak).	78
5.3	Trajectoires d'un système de $N = 20$ pendant 10000 pas de Monte Carlo pour différentes températures et différents amplitudes de fluctuation de charge. Les première, deuxième et troisième colonnes correspondent respectivement à $a = 200, 500$ et 800 (nouvelle expression).	79
5.4	Déplacement quadratique moyen en fonction de la température normalisée pour différentes amplitudes de la fluctuation de charge (cercle plein ($a = 0$), triangle plein ($a = 1$) et cercle vide ($a = 30$)).	81
5.5	La variation de la température de fusion en fonction de l'amplitude de la fluctuation de charge.	82
A.1	Réacteur PKE vue générale [Mikikian]	87
A.2	Confinement des grains de poussière dans la gaine d'un plasma de décharge radiofréquence (RF) [Trottenberg 1995]	88

Liste des tableaux

4.1	Configurations de l'état fondamental pour des systèmes de 5 à 30 particules confinées circulairement. Les trois premières colonnes : résultats de notre simulation, les trois suivantes : résultats d'autres simulations (a) [Bedanov 1994], (b) [Lai 1999] (c) [Lai 1999] et la dernière colonne : observations expérimentales (c) [Galatola 2006]	65
5.1	Effet de fluctuation de la charge sur les configurations de l'état fondamental	72

Liste d'abréviations

x, y, z	Cordonnées spatiales
T	Température
(\vec{r}_i)	Les positions dans l'espace
H_T	Energie cinétique
H_C	L'énergie potentielle de confinement
H_U	L'énergie potentielle d'interaction
N	Nombre des particules
d_i	la distance moyenne entre particules
q	La charge d'une particule
ε	La constante diélectrique
Γ	Paramètre de couplage dans le régime classique
r_s	Paramètre de couplage dans le régime quantique
$(2D)$	Un système bidimensionnel
n	La densité des particule
k_B	la constante de Boltzmann
b	La distance moyenne entre électrons
a_B^*	Rayon de Bohr effectif
n_e	Densité électronique
m^*	La masse effective
n_{ch}	Densité des particules chargées
n_0	Densité des particules neutres
α	Degré d'ionisation
λ_D	Longueur de Debye
ω_{pe}	Fréquence de plasma électronique
ω_{pi}	Fréquence de plasma ionique
n_{e0}	Densité électronique à l'état non perturbé
m_e	Masse d'électron
m_i	Masse d'ion
m_d	Masse de grain de poussière
Q_d	Charge d'un grain de poussière
r_d	Rayon du grain
$l_{ipm,i}$	Libre parcours moyen des ions
$V_{th,i}$	Vitesse thermique moyenne des ions
OML	Mouvement de l'Orbite Limitée
I_e	Courant électronique
I_i	Courant ionique
\vec{F}_g	La force de gravité
\vec{F}_E	La force électrique

\vec{F}_i	La force de frottement ionique
\vec{F}_n	La force de frottement des neutres
\vec{F}_{th}	La force de thermophorèse
$\vec{\nabla}T$	Gradient de température
k_p	Constante d'écrantage
OCP	système à une seule espèce de charge mobile
RF	Plasma décharge
CCD	Charge-coupled device camera
DFT	Théorie de la fonctionnelle de densité
DM	Dynamique Moléculaire
MC	Monte Carlo
$\langle A \rangle$	La moyenne de l'observable A
Z	Fonction de partition
H	Hamiltonien du système
ω_0	Fréquence de potentiel de confinement
ω_{0x}	Fréquences de confinement dans la direction de x
ω_{0y}	Fréquences de confinement dans la direction de y
α	Excentricité de confinement
Z_i^l	La charge de la ième particule à l'instant l
$\langle Z_0 \rangle$	La charge moyenne du grain (charge à l'équilibre)
ΔZ_i^l	L'amplitude de la fluctuation de la charge
τ_c	Periode caractéristique de fluctuation de la charge
$\delta z(0)$	Perturbation initiale de la charge
$g(r)$	Fonction de corrélation
U_r^2	Déplacements quadratique moyenne
T_m	Température de fusion

Introduction générale

Les propriétés exceptionnelles des systèmes à particules chargées ont conduit à un certain nombre de découvertes spectaculaires en physique de la matière condensée au cours du dernier siècle, y compris la supraconductivité et l'effet Hall quantique. Ces deux phénomènes sont essentiellement de nature quantique et se produisent lorsque la longueur d'onde de Broglie d'un électron individuel est comparable à la distance inter-électron. Les interactions électron-électron jouent un rôle clé dans la définition de l'état du système. A l'extrême opposé, c'est-à-dire à la limite de faible densité, on s'attendrait à ce que le système composé d'électron se comporte comme un fluide classique. À basses températures, un tel fluide se solidifierait en ce que l'on appelle un cristal de Wigner. Comme l'avait prédit pour la première fois Eugene Wigner dans son travail en 1934 [Wigner 1934]. Les électrons dans un solide de Wigner forment un arrangement spatial périodique qui minimise les répulsions coulombiennes mutuelles et l'énergie. En abaissant la température, l'énergie potentielle de Coulomb augmente par rapport à l'énergie cinétique et les corrélations commencent à dominer fortement la structure électronique. Dans un système classique de particules chargées, se formera un cristal si l'énergie cinétique moyenne des particules est suffisamment faible par rapport à l'énergie moyenne de potentielle d'interaction. L'état fondamental classique est toujours un cristal (car l'énergie cinétique ne dépend que de la température). Ce cristal fond lorsque la température T augmente, du fait des excitations thermiques des particules. Un tel système de forte interaction entre particules est connu sous le nom d'un système fortement couplé. La compréhension des détails de formation des structures organisées de ces systèmes et leurs transitions de phases se révèle d'une grande importance. Ces derniers peuvent être étudiés d'après le nombre et la nature classique ou quantique de leurs composantes, et selon leur dimensionnalité. Tous, cependant, révèlent un comportement dynamique caractéristique lié à des interactions fortes entre les particules. De nombreux travaux ont été entrepris dans cette perspective tant cette interaction fortes entre les particules est commune à un grand nombre de systèmes très variés, tels les cristaux de Wigner, les réseaux de vortex dans les supraconducteurs, les cristaux atomiques sur un substrat, les réseaux de bulles magnétiques, ou encore les systèmes colloïdaux et les cristaux de plasma poussiéreux [Ashoori 1996] [Melzer 1994] [Neser 1997] [Bessaa 2017]. Dans cette thèse, une analyse détaillée a été effectuée sur la formation de cristaux de Coulomb dans un plasma poussiéreux fortement couplé en présence de différents potentiels d'interaction entre les grains, en utilisant la simulation de Monte Carlo (MC).

Les gaz ionisés contenant de petites particules sont appelés plasmas poussiéreux (plasmas complexes). Ces particules peuvent être des grains de poussière massifs atteignant des masses de l'ordre de $m_d/m_i \simeq 10^{12}$ (ou m_d est la masse des grains de poussière et m_i est la masse des ion) et pouvant acquérir des charges élevées de l'ordre de $Q_d \simeq 10^4$ la charge des électrons. Ces grains de poussière ont suscité dès le début des années 80 l'intérêt de la communauté scientifique, notamment en physique spatiale. Loin d'être limitées aux objets lointains, ces grains de poussières sont aussi rencontrés en laboratoire dans les plasmas utilisés pour les applications en dépôt et gravure de couches minces et dans les plasmas de fusion (Tokamaks). Leur présence fut longtemps considérée comme problématique à cause de leur effet délétère sur les procédés mais au début des années 2000, les plasmas poudreux ont commencé à susciter un nouvel engouement lorsqu'on a réalisé qu'il est possible de bénéficier de la présence de nanoparticules pour élaborer des matériaux nanostructurés destinés à diverses applications [Kortshagen 2009].

La présence de poussières chargées dans un plasma peut modifier les modes de plasma, tandis que la grande masse des particules ralentit leur mouvement et rend ces systèmes très intéressants à étudier. Des expériences récentes ont montré que dans des conditions appropriées, les grains de poussière se cristallisent [Galatola 2006].

La charge très élevée des grains de poussière a pour conséquence, l'apparitions des couplages forts entre les grains de poussière à cause de la très forte interaction entre les grains. L'intensité du couplage entre ces particules chargées est déterminée par le paramètre de couplage Γ défini comme le rapport entre l'énergie d'interaction et l'énergie thermique. Quand Γ est suffisamment grand ($\Gamma \gg 1$) le système est dit fortement couplé. La connaissance de certaines propriétés d'équilibre de ce système se révèle utile à la compréhension de phénomènes liés à d'autres systèmes, cas des réseaux de vortex dans les supraconducteurs, la propagation des ondes etc. Ceci est important pour étudier la dynamique et la structure du réseau cristallin et pour étudier les transitions de phase solide-liquide car il fournit un système facilement à visualiser à l'œil nu [Chu 1998].

La charge d'un grain de poussière immergé dans le plasma, s'établit par le biais de divers processus de charge. Mais, toute perturbation des paramètres du plasma affecte inexorablement les courants de charge qui s'écoulent vers le grain de poussière, en provoquant d'une manière self-consistante, des fluctuations de la charge. Cependant, ces fluctuations modifient non seulement la structure de l'état stable du système, en comparaison au système avec charge constante, mais également, peut accélérer le processus de fusion [Issaad 2019][Djebli 2010].

La complexité de la résolution classique de ces systèmes pour obtenir l'état

stable, nous a conduits à considérer des méthodes statistiques de résolution. Nous nous sommes donc penchés sur les simulations de Monte Carlo dont celle dite de "Metropolis " qui s'avère très intéressante car elle intègre déjà la notion de température (elle utilise la loi de distribution de Boltzmann). La modélisation des plasmas poussiéreux représente un intérêt considérable puisqu'elle permet l'obtention d'informations intéressantes autant sur la structure que sur les transitions de phase. De plus, la modélisation permet d'obtenir la valeur de certaines quantités physiques qui seraient pratiquement impossibles à mesurer expérimentalement. C'est ainsi que Slattery et al. 1980 [Slattery 1980] ont obtenu une valeur critique de la transition de l'état fluide à l'état solide apparaît pour un paramètre de couplage $\Gamma \approx 170$ (cas du cristal tridimensionnel) et $\Gamma \approx 130$ (cas bidimensionnel), à l'aide d'un modèle théorique et de simulations Monte Carlo [Ichimaru 1982][Bedanov 1985]. Le seul problème qui se pose lors de l'utilisation des méthodes statistiques est celui liée au temps de simulation c.à.d. le temps de calcul. Certaines simulations pouvant prendre jusqu'à plusieurs jours d'exécution voir des mois d'exécution. Pour faire face à ce problème, nous avons utilisé des stations de calculs au sein du laboratoire de physique théorique à l'USTHB.

L'objectif de cette thèse est d'apporter une contribution à la compréhension de comportements des grains chargés négativement dans un confinement extérieur. Pour ce faire, nous avons modélisé le comportement collectif des grains de poussières par la méthode Monte Carlo à des très basses températures ($T \sim 0$). Nous avons principalement étudié les configurations d'équilibre du système ainsi que la contribution de l'agitation thermique et l'effet de la fluctuation de la charge des grains sur la transition ordre - désordre.

Ce manuscrit s'articule autour d'une introduction générale (celle-là même que vous êtes en train de lire), cinq chapitres, puis une conclusion générale.

Dans le premier chapitre, nous présentons une étude bibliographique portant sur les systèmes fortement couplés et leur caractéristique. Nous verrons par la suite les différents systèmes fortement couplés montrant le phénomène de cristallisation qui nous intéresse.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons les concepts de base liés aux plasmas et les plasmas poussiéreux. Nous mettrons l'accent sur les plasmas poussiéreux fortement couplés.

Un passage en revue de la mécanique statistique et la simulation numérique constitue l'objet de chapitre trois. Nous présentons la méthode numérique utilisée au cours de la thèse. Nous décrivons les concepts de base de la méthode Monte Carlo tout en mettant l'accent sur l'algorithme de Metropolis.

Le quatrième chapitre est réservé à la présentation du système étudié et aux détails de modèle physique et de la simulation, nous exposons les résultats concernant les configurations les plus stables dans le cas des grains à charge

constante à deux dimensions.

Enfin dans le cinquième chapitre, on s'intéresse à la fluctuation de la charge. Nous décrivons en première lieu le modèle théorique de la fluctuation de la charge proposé par Khrapak que nous avons adapté pour notre simulation pour montrer l'effet de la fluctuation de la charge sur les configurations les plus stables. A cause du temps de calcul de simulation et pour éviter cette problématique. Nous avons employé ensuite une nouvelle expression mise au point dans cette étude pour décrire l'effet de la fluctuation de la charge sur les transitions de phase (ordre-désordre), en introduisant la variation d'amplitude de la fluctuation de la charge.

Nous clôturons ce manuscrit de thèse par une conclusion générale rappelant les principales idées développées tout le long du document.

Les systèmes fortement couplés

Sommaire

1.1	Présentation du problème	5
1.2	Qu'est-ce qu'un système fortement corrélé (couplé) ?	6
1.3	Pourquoi étudier les systèmes fortement couplés ?	7
1.4	Paramètre de couplage	7
1.5	La Cristallisation dans les systèmes fortement couplés	8
1.5.1	Le Cristal de Wigner	8
1.5.2	Systèmes colloïdaux (cristaux colloïdaux)	10
1.5.3	Cristaux Coulomb	12

Les systèmes fortement couplés sont importants dans la nature. On peut les étudier d'après le nombre et la nature classique ou quantique de leurs composantes, et selon leur dimensionnalité. Tous cependant révèlent un comportement dynamique caractéristique lié à la propriété qu'un très grand nombre de particules interagissent entre elles fortement. Il n'est pas possible d'ignorer ces interactions ou de les considérer comme une petite perturbation, comme on pourrait le faire dans les milieux dilués.

Les systèmes physiques fortement couplés issus d'une grande variété de domaines, dont la physique de la matière condensée, la physique des plasmas, l'astrophysique, la physique atomique et moléculaire. Dans tous ces domaines, le comportement de ces systèmes à multi-particules chargés et leurs corrélations jouent un rôle central et de nombreux résultats de ce domaine se sont également révélés utiles dans d'autres. L'un de ces résultats qui intéresse dans notre travail, est que ces systèmes de particules chargées vont s'ordonner dans des réseaux bien définis connus sous le nom Cristal Coulomb et qui existent à basse température [Liu 2004] [Quinn 1996] [Thomas 2003].

1.1 Présentation du problème

On s'intéresse aux propriétés physiques d'un système fortement couplé de particules de basse dimensionnalité, c'est-à-dire dans un espace à deux dimen-

sions, et à température presque nulle ($T \sim 0$). Dans cette limite, connaître les propriétés du système fortement couplé revient à déterminer l'état fondamental du système c'est-à-dire l'état d'équilibre. On s'intéressera à un système comprenant plusieurs particules qui seront indexées par $i = 1, \dots, N$ et dont les positions dans l'espace seront notées (\vec{r}_i) . Dans ce système, on considère trois types d'énergies coexistantes :

- **L'énergie cinétique** décrite par un hamiltonien H_T qui est la somme de l'énergie cinétique de chaque particule.
- **L'énergie potentielle de confinement** Cette énergie donne lieu à localisés les particules, le hamiltonien de confinement est noté H_C .
- La dernière énergie est **L'énergie potentielle d'interaction** entre particules. Cette énergie complique sérieusement le problème puisqu'on ne peut plus considérer que le problème à N particules est une somme de problèmes à une particule. On note H_U le hamiltonien d'interaction.

1.2 Qu'est-ce qu'un système fortement corrélé (couplé) ?

C'est un système composé de particules chargées, agissant les unes sur les autres par des forces électrostatiques. L'une de leurs caractéristiques est que, l'énergie potentielle des particules due à leur interaction électrostatique est supérieure à l'énergie cinétique moyenne de leur mouvement aléatoire thermique.

Des études théorique et expérimentales dans plusieurs systèmes ont, de ce fait, vu le jour. On citera par exemple, dans le cas quantique on a des électrons excités dans des boîtes quantiques (quantum dots en anglais) [Bonitz 2014] ou des ions refroidis par laser en lévitation dans des pièges de type Paul ou Penning [Major 2005] [Knoop 2014] [Haroche 2013] [Davis 2002] [Bollinger 2003]. On peut également citer les atomes fermioniques ou bosoniques ultrafroids enfermés dans des pièges à atomes ou au potentiel périodique d'un réseau optique [Bonitz 2010b]. Dans le cas classique on a les systèmes colloïdaux et les plasmas poussiéreux.

Ces systèmes, montrent un ensemble riche de phénomènes intéressants, tel que la formation de structures cristallines par des particules chargées, qui nous intéresse dans notre travail.

1.3 Pourquoi étudier les systèmes fortement couplés ?

Pour quatre bonnes raisons :

- d’abord parce qu’ils représentent une partie des matériaux naturels ou artificiels sur Terre
- ensuite parce que ces systèmes présentent des propriétés physiques uniques et très utiles, par exemple le ferro ou l’antiferromagnétisme, la supraconductivité à haute température critique.
- ensuite et surtout parce que l’effet des corrélations engendre de nouveaux états fascinants de la matière, très éloignés des métaux ou des isolants standards, où même la notion d’électron isolé n’a peut-être plus de sens. C’est le lien entre ces corrélations et ces nouveaux états que nous aimerions mieux comprendre.
- enfin et le plus important, que certains systèmes sont visibles à l’œil nu.

1.4 Paramètre de couplage

La description de l’état d’un système physique ou le changement de phase est strictement lié à l’intensité du couplage entre des particules chargées séparées par des distances d_i , est déterminée par le paramètre de couplage Γ défini comme le rapport entre l’énergie potentielle moyenne et l’énergie cinétique moyenne (thermique). Il est courant de désigner ce paramètre de couplage par Γ dans le régime classique et r_s dans le régime quantique. Il est possible d’estimer l’énergie potentielle à : $\left\langle \frac{q^2}{\varepsilon d} \right\rangle$, où q est la charge, d la distance moyenne entre particules et ε la constante diélectrique. La distance moyenne d est évaluée à l’aide de la densité des particules n [Bonitz 2010a] par : $d = 1/\sqrt{\pi n}$ dans un système bidimensionnel ($2D$). En considérant que dans le régime classique l’énergie cinétique moyenne est $\langle k_B T \rangle$, avec k_B la constante de Boltzmann, le paramètre de couplage classique est :

$$\Gamma = \frac{q^2 \sqrt{(\pi n)}}{\varepsilon k_B T} \quad (1.1)$$

On définit r_s le paramètre de couplage quantique comme le rapport de la distance moyenne b entre électrons au rayon de Bohr effectif a_B^* du système. la distance moyenne est relié a la densité électronique $b = 1/\sqrt{\pi n_e}$ à 2D. Le rayon de Bohr effectif est calculé en tenant compte de la masse effective m^* des porteurs dans le milieu et de la constante diélectrique ε du milieu dans

lequel est créé le gaz.

$$r_s = \frac{b}{a_B^*} = \frac{m^* e^2}{\hbar^2 \varepsilon} \frac{1}{\sqrt{\pi n_e}} \quad (1.2)$$

Le facteur r_s est donc une mesure de la densité électronique du système, mais le calcul suivant nous montre que c'est aussi une mesure de la force des interactions :

Si on considère une particule libre, son impulsion est quantifiée $K_i = n_i \frac{2\pi}{b}$, $i = x, y$ et $n_i \in \mathbb{Z}$. On peut alors estimer que son énergie cinétique est $E_T \sim \frac{\hbar^2}{m^*} \left(\frac{2\pi}{b}\right)^2$. La distance moyenne entre particules étant b , l'énergie potentielle électrique est $E_V \sim \frac{2Ze^2}{\varepsilon b}$ où Z est le nombre moyen de premiers voisins. On obtient alors la relation entre r_s et le rapport de l'énergie d'interaction sur l'énergie cinétique

$$\frac{E_V}{E_T} \propto \frac{Z}{2\pi^2} \left(b \cdot \frac{m^* e^2}{\hbar^2 \varepsilon} \right) = \frac{Z}{2\pi^2} \left(\frac{b}{a_B^*} \right) \propto r_s \quad (1.3)$$

Dans la limite de basse densité ($b \rightarrow \infty$) l'énergie électrostatique diminue ($E_V \propto b^{-1}$), mais l'énergie cinétique diminue encore plus rapidement ($E_T \propto b^{-2}$) de telle sorte que l'énergie électrostatique domine.

1.5 La Cristallisation dans les systèmes fortement couplés

1.5.1 Le Cristal de Wigner

Wigner est le premier à avoir suggéré en 1934 que des électrons se cristallisent à basse densité lorsque la distance entre eux (mesurée par le facteur r_s) est telle que l'énergie d'interaction coulombienne domine par rapport à l'énergie cinétique [Wigner 1934]. Ce cristal est appelé cristal de Wigner.

Pour les cristaux Wigner classiques, différents régimes peuvent être distingués, selon le paramètre sans dimension Γ . Lorsque $\Gamma < 1$, l'interaction électrostatique est faible et le système se comporte comme un gaz idéal. Pour $1 < \Gamma < 100$, les particules sont corrélées et le système se comporte comme un liquide. Pour $\Gamma > 100$, qui est le régime à haute densité et à basse température. L'énergie potentielle domine par rapport à l'énergie cinétique et il existe de fortes corrélations entre les particules, ce qui devrait entraîner le système à travers une transition de phase vers un cristal de réseau périodique. Ceci a été démontré en utilisant la simulations numériques [Gann 1979] [Morf 1979] et l'expérience [Wineland 1987], que la cristallisation de Wigner dans un système à $2D$, se produite pour $\Gamma \approx 130$.

Dans le cas quantique, à forte densité $r_s \ll 1$, les électrons se comportent

comme un gaz appelé gaz de Fermi, ou comme un liquide appelé liquide de Fermi. Par contre pour de faible densité $r_s \gg 1$, on a une phase solide de Wigner. Des simulations [Tanatar 1989] de type Monte Carlo ont montré que la transition à l'état solide apparaît pour un $r_s \approx 37$.

L'observation d'un tel cristal de Wigner a fait l'objet d'un travail très intense et continu. L'observations expérimentale d'un réseau d'électrons de Wigner à 3D n'ont pas encore été réalisées. Jusqu'à présent, les solides d'électrons n'ont pu être observés que dans deux systèmes expérimentaux : les électrons au-dessus de la surface de l'hélium liquide et les électrons à l'interface des hétérostructures semi-conductrices [Yoon 1999].

Quarante ans après les travaux originaux de Wigner, en 1971 Crandall et William [Crandall 1971], ont proposé l'idée de rechercher un tel réseau de Wigner à deux dimensions (2D) sur un système d'électrons au-dessus d'une surface d'hélium liquide. Après la prédiction théorique de la possibilité de l'existence d'un réseau de Wigner sur l'hélium liquide, il a fallu huit ans pour que la cristallisation de Wigner soit observée expérimentalement et rapportée en 1979 par Grimes et Adams [Grimes 1979].

Depuis le résultat de l'expérience de Grimes et Adams, les recherches expérimentales ont fait des progrès considérables et de nouveaux systèmes ont montré des caractéristiques solides de Wigner. Les techniques de traitement modernes ont permis la création artificielle de tels réseaux Wigner en laboratoire. Les électrons dans les boîtes quantiques (quantum dots) [Ashoori 1996], les particules dans le plasma confiné [Chu 1994] [Thomas 1994] [Hayashi 1994] [Melzer 1994] et dans les suspensions colloïdales [Neser 1997] [Bubeck 1999] peuvent présenter une cristallisation. Divers systèmes similaires, tels que les ions refroidis au laser dans des piègeages électriques ou magnétiques [Wineland 1987], les ions dans un piège à radiofréquence [Levi 1988] [Diedrich 1987] ou dans un piège de Penning [Beebe-Wang 1992] [Dubin 1988] présentent des structures très ordonnées dans certaines conditions de température et de densité également.

Les électrons sur surface de l'hélium liquide sont intéressants non seulement pour la recherche fondamentale, mais pourraient également avoir des applications en informatique quantique, où des réseaux organisés d'électrons pourraient un jour être utilisés pour stocker et traiter des informations. Chaque électron pourrait contenir un bit quantique, ou "qubit" d'informations, et le cristal entier pourrait être utilisé pour stocker des données ou effectuer des opérations dans un futur ordinateur quantique, comme proposé dans les travaux de Dykman et Platzman [Platzman 1999].

Bien que la cristallisation de Wigner soit assez facile à réaliser dans des systèmes classiques, comme les colloïdes ou les plasmas complexes qui nous intéressent dans notre travail, car ce sont des cristaux macroscopiques, avec une

taille de particules allant de μm jusqu'à mm , comparés aux cristaux de Wigner d'électrons ou cristaux d'ions [Elliott 1997], qui sont des cristaux à l'échelle atomique. En effet, des cristaux de Wigner 2D ont été récemment réalisés et étudiés expérimentalement, constitués par des billes métalliques chargées au-dessus d'un conducteur plan [Jean 2001].

1.5.2 Systèmes colloïdaux (cristaux colloïdaux)

Les colloïdes sont des petites particules dispersées dans un fluide : elles peuvent être gazeuses, liquides ou solides. Nous nous intéressons ici aux particules colloïdales dans l'état organisées (solides). Ces particules sont engendrées à partir de nombreux matériaux différents et peuvent être mises en suspension dans une grande variété de solvants. La taille typique des particules colloïdales varie de nanomètres à micromètres, la figure 1.1 montre quelques suspensions colloïdales.

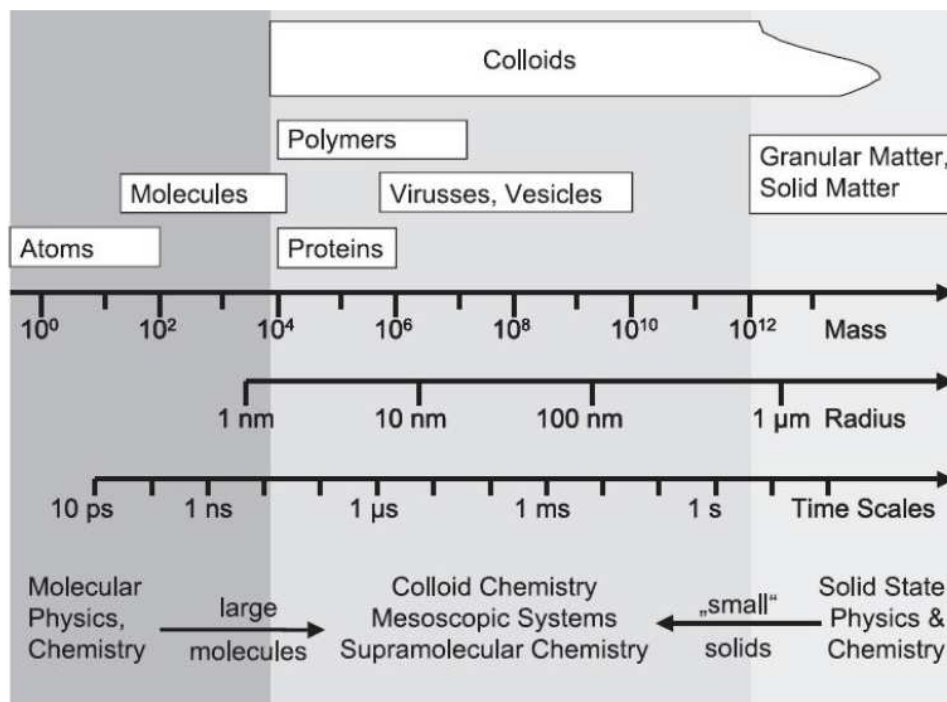


FIGURE 1.1 – Echelle colloïdale [Dirk 2004]

L'étude formelle des colloïdes a commencé dans la dernière partie du XIXe siècle avec les travaux de T. Graham [Graham 1864]. Les premiers colloïdes étudiés étaient les gélatines et les colles, et donc Graham a utilisé le mot grec

"kolla", qui signifie colle, comme terme racine de sa nouvelle découverte. Cependant, comparativement aux systèmes atomiques (cristal de Wigner), les systèmes colloïdaux offrent une visualisation facile de leur structure, Cette analogie entre les colloïdes et les systèmes atomiques s'est révélée particulièrement utile pour l'étude de la cristallisation [Gasser 2009] [Löwen 2012], ou les colloïdes sont également utilisés comme des modèles de choix pour la physique de la matière condensée, dans le domaine de la cristallisation et plus généralement les transitions de phase [Gasser 2009] [Binder 1998].

Un aspect très intéressant des particules colloïdales est leur capacité à former, sous certaines conditions, des empilements réguliers et des structures organisées, apparenté à des structures cristallines, d'où l'appellation cristaux colloïdaux. En raison de leurs propriétés optiques, ces structures ont suscité beaucoup d'intérêt avec des applications potentielles en tant que matériaux photoniques [Fouger 2000] [Honda 2009], commutateurs optiques [Pan 1998] [Kim 2005] et biocapteurs [Holtz 1997] [Liu 2009].

La formation des cristaux colloïdaux dépend généralement des propriétés des particules mais aussi du milieu environnant. Il a été démontré très tôt que les particules colloïdales de polystyrène uniformes et chargées s'organisent spontanément en milieu aqueux déionisé au dessus d'une certaine concentration critique [Hiltner 1969] [Krieger 1968]. L'obtention d'une structure cristalline est ici le résultat direct de la minimisation des répulsions électrostatiques entre particules.

Les forces d'interactions entre ces particules colloïdales sont en premier lieu liées aux forces de van der Waals de nature attractive. Les colloïdes tendent alors à s'attirer entre eux pour former des agrégats. Pour assurer une certaine organisation entre les particules dispersées, on introduit généralement des forces supplémentaires répulsives suffisantes entre les particules. Ainsi, des techniques ont été développées permettant de contrôler les formes géométriques, pour réaliser des réseaux organisés de particules colloïdales en deux ou trois dimensions. Parmi ces techniques, on cite l'électrophorèse. Cette technique consiste à organiser des colloïdes en suspension sur une surface par l'application d'un champ électrique entre deux électrodes, par exemple deux plaques métalliques voir (figure 1.2(a)).

Les flux de fluides électrodynamiques induits par des distorsions du champ électrique sont à l'origine des interactions inter-particules attractives de longue portée qui permettent l'organisation des particules [Trau 1997]. L'état d'ordre des réseaux de colloïdes obtenus par cette technique est contrôlé en ajustant l'amplitude ou la fréquence du champ électrique [Yeh 1997] [Ristenpart 2004]. Dans la littérature, cette technique a été employée pour différents types de colloïdes notamment des colloïdes micrométriques de polystyrène [Yeh 1997] ou des colloïdes nanométriques d'or (figure 1.2(b)).

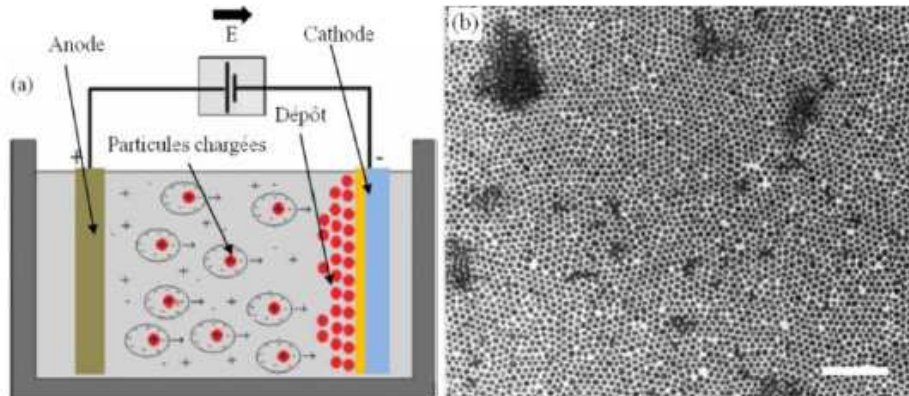


FIGURE 1.2 – (a) Schéma du principe du dépôt électrophorétique (b) Image de microscopie électronique en transmission d'un assemblage 2D de nanoparticules d'or de 15nm [Trau 1997]

1.5.3 Cristaux Coulomb

Cristal Coulomb est la phase solide des plasmas poussiéreux. L'étude de la formation des cristaux de plasma fournit un outil pour comprendre la physique de l'état solide et les propriétés du plasma fortement couplé. Plus de détails sur les principales notions concernant les plasmas et les plasmas poussiéreux ainsi les cristaux de plasma peuvent être trouvés au *chapitre*(2).

Généralités sur les plasmas et les plasmas complexes (poussiéreux)

Sommaire

2.1	Introduction	14
2.2	Concepts fondamentaux des plasmas	14
2.2.1	Degré d'ionisation	14
2.2.2	Longueur de Debye	15
2.2.3	Fréquence de plasma	15
2.3	Les plasmas poussiéreux	16
2.3.1	Première observation de Langmuir	16
2.3.2	Les plasmas poussiéreux dans l'espace	16
2.3.3	Plasmas poussiéreux en laboratoire	17
2.3.4	Formation des poussières dans les plasmas	18
2.4	Mécanismes de charges d'une particule dans un plasma	19
2.4.1	Collection des particules	20
2.4.2	Emission photo-électrique (photo-émission)	20
2.4.3	Emission secondaire des électrons	20
2.5	Evaluation de la charge portée par une poussière dans un plasma de laboratoire	21
2.6	Modèle du mouvement de l'orbite limitée (OML)	21
2.7	Fluctuation de la charge	24
2.8	Bilan de forces dans les plasmas poussiéreux	25
2.9	Les plasmas poussiéreux en phase organisée (cristaux de plasma)	26

Ce chapitre n'a pas pour intention de décrire de façon exhaustive et détaillée la physique des plasmas poussiéreux. L'objectif est tout d'abord de présenter le contexte dans lequel sont réalisés les travaux présentés dans ce manuscrit. Les notions nécessaires à la bonne compréhension des chapitres suivants y sont abordées succinctement.

2.1 Introduction

Le plasma est le quatrième état de la matière après l'état solide, liquide et gazeux. Un plasma est considéré comme un fluide partiellement ou totalement ionisé. Celui-ci est composé d'électrons et d'ions libres de se mouvoir, mais aussi d'atomes ou molécules lorsque l'ionisation n'est que partielle. Les plasmas sont peu présents sur Terre à l'état naturel. Dans le cosmos, la matière visible est à 99% à l'état de plasma. Cela s'explique par les conditions thermodynamiques beaucoup plus extrêmes que celles observées sur Terre. En effet, le passage de l'état solide, liquide, gazeux puis à celui de plasma s'effectue par un apport croissant d'énergie au milieu. Le terme "plasma" fut introduit pour la première fois par Irvin Langmuir en 1928, en référence au plasma sanguin. Bien que le plasma soit considéré comme un fluide, son comportement est différent de celui d'un gaz "classique" à cause de la nature des interactions entre particules. Dans un gaz classique, les atomes (ou molécules) électriquement neutres interagissent entre eux par le biais des forces de Van Der Waals. Ce type d'interaction est de très courte portée ($\propto 1/r^7$). Dans un plasma, les particules sont électriquement chargées et interagissent par le biais de la force coulombienne ; comparativement à la précédente, celle-ci est de longue portée ($\propto 1/r^2$).

On appelle les plasmas qui contiennent des poussières de taille nano ou micrométrique immergées, plasma poussiéreux ou plasma complexe. Celle-ci peuvent se rencontrer dans tous les types de plasmas. Lorsque celles-ci sont présentes en grande quantité, elles peuvent fortement affecter les caractéristiques du plasma. En effet, dans un plasma électropositif (les ions sont chargés positivement), le plus souvent les poussières vont spontanément se charger négativement par attachement électronique. La thématique des plasmas poussiéreux a connu son essor à la fin des années 80 dans le cadre de la fabrication de composants micro-électroniques. Depuis, les plasmas poussiéreux ou complexes sont devenus une branche à part entière de la physique des plasmas.

2.2 Concepts fondamentaux des plasmas

Afin de comprendre les phénomènes physiques qui peuvent avoir lieu dans un plasma, il faut à priori, exposer quelques grandeurs physiques fondamentales qui caractérisent l'état de cette matière.

2.2.1 Degré d'ionisation

Un gaz globalement neutre ne peut être considéré comme un plasma que si les effets collectifs deviennent suffisamment importants. Si on met une particule

chargée dans un gaz neutre, les effets liés à la charge n'ont aucun rôle, elle est toujours vue à travers son interaction, comme un atome. Par contre, lorsque un deuxième ion se présente et si la distance entre les deux ions est relativement faible, on commence à parler d'effets collectifs. Donc, ces effets sont liés à l'inter distance entre les particules liées elles-mêmes à la densité $d \sim n^{-1/3}$.

On appelle plasma, un gaz même partiellement ionisé, mais possédant un taux d'ionisation différent de zéro et qui se présente sous la formule

$$\alpha = \frac{n_{ch}}{n_{ch} + n_0} \quad (2.1)$$

où n_{ch} et n_0 sont respectivement la densité des particules chargées et la densité des particules neutres.

2.2.2 Longueur de Debye

Un des paramètres fondamentaux d'un plasma est l'écrantage de toute particule chargée dans le plasma par un nuage de particules l'entourant et de charge opposée ; c'est l'écrantage de Debye. La longueur de Debye λ_D est une échelle de longueur qui s'interprète comme étant la réponse des particules chargées à réduire les effets des champs électriques locaux. Cet écrantage confère au plasma une caractéristique de quasi-neutralité [Grill 1994].

Pour une particule de l'espèce 's' (s= ion (i), électron (e)), nous la définissons par la relation [Delcroix 1994] :

$$\lambda_{Ds} = \left(\frac{\varepsilon_0 k_B T_s}{n_s q_s^2} \right)^{1/2} \quad (2.2)$$

où ε_0 est la permittivité du vide, k_B est la constante de Boltzmann, T_s , q_s et n_s sont respectivement la température, la charge et la densité de l'espèce s . Dans un plasma contenant des électrons et des ions, nous définissons la longueur de Debye (appelée longueur de Debye généralisée) par [Shukla 2002] :

$$\lambda_D = \frac{\lambda_{De} \lambda_{Di}}{\sqrt{\lambda_{De}^2 + \lambda_{Di}^2}} \quad (2.3)$$

2.2.3 Fréquence de plasma

Les plasmas possèdent un comportement collectif. Idéalement, les plasmas se caractérisent par une répartition uniforme des charges positives (ions positifs) et des charges négatives (électrons et ions négatifs). Lorsqu'une perturbation locale est appliquée au plasma, comme un champ électrique par

exemple, les électrons ont une réponse collective et oscillent autour d'une position d'équilibre avec une fréquence appelée fréquence plasma :

$$\omega_{pe} = \sqrt{\frac{n_{e0}e^2}{m_e\varepsilon_0}} \quad (2.4)$$

où n_{e0} est la densité électronique à l'état non perturbé, m_e la masse d'électron ε_0 est la permittivité du vide.

Les ions ont une fréquence dont l'expression est similaire :

$$\omega_{pi} = \sqrt{\frac{n_{i0}e^2}{m_i\varepsilon_0}} \quad (2.5)$$

avec m_i la masse des ions.

2.3 Les plasmas poussiéreux

2.3.1 Première observation de Langmuir

La première observation de plasma poussiéreux a été rapportée par Langmuir en 1924 [Langmuir 1924] au sein d'une décharge d'un plasma d'argon. il a observé un changement d'apparence lumineuse du plasma. Ce dernier change de couleur : Le centre de la décharge conserve le spectre de l'argon mais il est entouré d'une lumière "jaune fade", séparée par une zone sombre de quelques millimètres. Langmuir mit en évidence la présence de poussière par diffusion d'un faisceau de lumière solaire focalisé dans la zone sombre du plasma. Enthousiasmé par cette observation, Langmuir écrivit dans l'introduction de sa communication la phrase suivante : *"we observed some phenomena or remarkable beauty wich may prove to be of theoretical interest"*. Cependant, le premier engouement pour les plasmas poussiéreux n'apparut qu'au début des années 80 avec le programme spatial Voyager de la NASA.

2.3.2 Les plasmas poussiéreux dans l'espace

Dans l'espace, les poussières sont rencontrées dans un très grand nombre de milieux et font l'objet de nombreuses études en astrophysique. On les retrouve par exemple dans le système solaire, lorsqu'une comète se rapproche du soleil. La queue de la comète va disperser de grandes quantités de poussières dans l'espace [Huebner 2008]. Les poussières composent la majeure partie des disques d'accrétion protoplanétaires [Blum 2000].

La plupart des anneaux des planètes géantes externes (telles que Jupiter,

Saturne, Uranus, Neptune) se composent principalement de glace et de particules poussiéreuses, qui varient d'un micron jusqu'à la taille d'une maison [Taylor 1992]. Pour les grandes particules l'influence primaire sur leur dynamique est la pesanteur, bien que, dans beaucoup de cas les forces électrostatiques peuvent jouer un rôle important [Goertz 1989a] [Goertz 1989b].

Dans les nuages interstellaires, nous savons déjà depuis les années 30 que le milieu interstellaire n'est pas vide. Ceci a été démontré par R. J. Trumpler (1930), qui a conclu qu'il devait y avoir un certain matériel dans le milieu interstellaire qui absorbait la lumière. Dans les années 40, on a constaté que cette absorption est également due aux petites particules de poussière de tailles comparables à la longueur d'onde du faisceau lumineux.

2.3.3 Plasmas poussiéreux en laboratoire

Peu d'expériences ont été menées concernant l'influence des particules de poussière sur le plasma après les premiers travaux de Langmuir. Par la suite et pendant des décennies, la présence des particules a été négligée. Dans les années 70, il a été déduit que l'effet des particules de poussière chargées négativement est similaire à l'effet des ions négatifs dans les décharges électro-négatives [Breslin 1971]. En 1974, T. C. Anestos et C. D. Hendricks [Anestos 1974] ont décrit une méthode de mesure de la température électronique dans un plasma en calculant la charge acquise par les particules de poussière injectées dans le plasma. Par la suite, l'énorme changement dans l'histoire des plasmas poussiéreux s'est produit à la fin des années 80 lorsque des particules de poussière ont été détectées dans les procédés industriels et de la technologie [Selwyn 1990]. En microélectronique, les plasmas sont largement utilisés. Par exemple, le dépôt de films minces ou encore la gravure de motifs sur des substrats, le traitement de surface et la fabrication de puces informatiques. La présence de ces particules poussiéreuses dans le plasma peuvent affecter gravement les performances des dispositifs fabriqués [Selwyn 1989]. A cet effet des études ont été développées afin de comprendre l'origine de ces particules de poussière dans les plasmas décharge [Bouchoule 1991].

À la fin des années 90, la présence des particules poussiéreuses dans les réacteurs de fusion [Narihara 1997], ainsi que pour plusieurs applications comme les cellules solaires [i Cabarrocas 2012] et les mémoires [Dutta 2000], sont considérées comme nuisibles. En raison de ces applications, il était nécessaire d'étudier les plasmas poussiéreux en laboratoire. Les particules de poussière peuvent être facilement produites dans des expériences de laboratoire, en utilisant des gaz réactifs ou par pulvérisation des différents types de matériaux [Michau 2012], ou simplement en injectant des particules dans la décharge à gaz réactifs [Kersten 1998]. Un nuage de poussière peut être observé dans

la décharge. Dans ce nuage, de nombreux phénomènes peuvent être étudiés comme les phénomènes de propagation des ondes [Ali-Fedila 2010] et en raison de la forte interaction entre ces particules de poussière chargées, des structures auto-organisées (cristaux de plasma) sont observées [Djebli 2010]. De nombreux types d'investigations ont été réalisés et sont toujours en cours dans le domaine du plasma poussiéreux, comme sur les interactions inter-particules, les processus de charges des particules poussiéreuses et les forces majeures agissant sur les particules de poussière... etc.

2.3.4 Formation des poussières dans les plasmas

Les grains de poussières dans le plasma peuvent être formés de divers matériaux, e.g., Silicium, glace, etc, tout en étant de formes variées, e.g., sphérique, chou-fleur, structure fractale ... etc (voir figure 2.1). ces poussières peuvent s'y former naturellement e.g. (ces grains de poussières sont omniprésents dans l'espace) ou y être introduit artificiellement, pour cela différentes techniques sont utilisables à savoir :

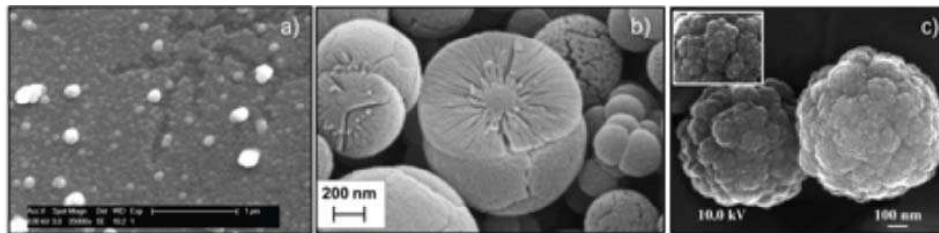


FIGURE 2.1 – Exemple extrait de la littérature de clichés par microscopie électronique à balayage réalisé sur des poussières issues de plasma contenant (a) du silane [Strahm 2010], (b) du méthane enrichi d'azote [Massereau-Guilbaud 2009] ou (c) de l'acétylène [Makdessi 2017].

2.3.4.1 Injections directes de particules

Cette technique consiste à injecter directement dans le plasma des particules micrométriques formées antérieurement. Un exemple d'expérience est proposé par Mikikian et al en 2003, où des particules de $3,4\mu\text{m}$ ou $6,8\mu\text{m}$ de diamètre sont injectés dans une décharge radiofréquence et la croissance de poussières peut être observée selon les conditions expérimentales [Mikikian 2003].

2.3.4.2 Pulvérisation par plasma

La pulvérisation consiste à accélérer les ions du plasma vers la cible pour pulvériser la matière par transfert de l'énergie cinétique. Les techniques de pulvérisation sont en général utilisées pour déposer des couches minces sur un substrat. La formation de poussières se produisant dans ce type de plasma se fait soit dans la phase gaz, suite à l'addition des atomes pulvérisés dans le plasma, soit à la surface de substrat par des processus de croissance. La composition de la cible peut être choisie en fonction des besoins et de la stœchiométrie du matériau finale désirée. En revanche, en cas de processus de formation dans la phase plasma, la composition du plasma pourra influencer la composition finale des nanoparticules [Bouchoule 1999].

2.3.4.3 Plasmas réactifs

Cette méthodes consistent à former des poussières à partir de précurseurs moléculaires qui peuvent provenir d'un gaz réactif (SiH_4) exposées au plasma [Cavarroc 2006]. Le plasma va favoriser les réactions chimiques qui vont permettre la croissance des poussières depuis les précurseurs moléculaires puis les macromolécules, les nanoparticules et enfin les poussières de quelques dizaines à quelques centaines de nanomètres.

2.4 Mécanismes de charges d'une particule dans un plasma

Un grain de poussière immergé dans un plasma va immédiatement être soumis aux flux de différentes espèces chargées du plasma. Généralement des électrons et des ions. Ce grain de poussière va donc se comporter comme une sonde de Langmuir et acquérir un potentiel communément appelé potentiel flottant qui correspond au potentiel pour lequel la somme des courants est nulle. Du fait de la grande mobilité des électrons, ce potentiel est de signe négatif [Melzer 1994] [Couedel 2006]. Le grain de poussière se charge donc négativement et, si on considère qu'il est assimilable à un condensateur sphérique, sa charge Q_d est donnée par :

$$Q_d = 4\pi\epsilon_0 r_d V_d \quad (2.6)$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide, r_d le rayon du grain et V_d son potentiel de surface relativement au potentiel du plasma (et donc négatif). Ainsi, la charge électrique d'un grain est directement proportionnelle au rayon de celui-ci. Typiquement, un grain de rayon de $1\mu m$ peut porter à sa surface plus d'un

millier d'électrons. Généralement, la charge d'un grain de poussière trouve son origine dans une variété de processus. Ces derniers, jouent un rôle très important dans la physique des plasmas. Parmi ces processus, nous citerons la collection des électrons et des ions du plasma de base, l'émission photo-électrique, l'émission thermo-électronique, l'émission électronique secondaire [Sickafoose 2000] [Sickafoose 2001]...etc.

2.4.1 Collection des particules

Dans un plasma en équilibre thermodynamique les électrons et les ions ont presque la même température et des énergies cinétiques semblables. Les ions étant beaucoup plus massifs que les électrons, ces derniers ont généralement des vitesses beaucoup plus élevées.

En conséquence, plus d'électrons heurteront les grains de poussière, les particules tendront à acquérir une charge négative. Les grains de poussière ont une masse beaucoup plus élevée que les ions et les électrons, leur vitesse thermique est négligeable par rapport à la vitesse des particules de plasma. Ainsi, les courants de chargement dépendront des vitesses des électrons et des ions et de la section efficace de diffusion des grains de la poussière. Si les grains de poussière ont une vitesse significative, ceci doit être pris en considération.

2.4.2 Emission photo-électrique (photo-émission)

Quand un flux de photons d'énergie $h\nu$ supérieure au seuil du potentiel à la surface du grain, ce dernier émet des photo-électrons. Ces derniers peuvent alors être capturés par un autre grain et la charge du grain dans ces condition est positive.

La photo-émission dépend de la longueur d'onde des photons incidents, de l'importance de la surface du grain de poussière et de sa nature.

2.4.3 Emission secondaire des électrons

Les flux d'électrons et d'ions arrivant sur la particule peuvent avoir des effets additionnels s'ils sont très énergétiques. Ce bombardement électronique et/ou ionique peut aboutir à l'émission d'électrons secondaires par ionisation de la matière constituant la particule. La probabilité de l'émission d'électrons secondaires dépend de l'énergie des particules (ions ou électrons) incidentes ainsi que du coefficient de l'émission secondaire du matériau composant le grain de poussière.

2.5 Evaluation de la charge portée par une poussière dans un plasma de laboratoire

Dans le cas général, comme nous venons de le voir précédemment, les mécanismes contribuant à la charge du grain de poussière sont très complexes. Cependant, dans un plasma complexe froid de laboratoire, de nombreuses simplifications ont lieu. L'émission thermoinique n'est pas considérée compte tenu du fait que l'énergie du rayonnement laser utilisé pour sonder le plasma n'est guère suffisante pour provoquer un échauffement suffisant des poussières. Il est aussi négligé la photo-émission de même que l'émission d'électrons secondaires dans l'évaluation de la charge portée par une poussière dans un plasma de laboratoire.

Nous postulons donc dans ce qui suit que la charge portée par une particule solide est uniquement déterminée par les flux de courant d'électrons et d'ions collectés qui sont calculer par le modèle du courant limité par le mouvement orbital OML (Orbital-Motion Limited) [Mott-Smith 1926] [Fortov 2005] .

2.6 Modèle du mouvement de l'orbite limitée (OML)

Plusieurs modèles sont utilisés pour décrire quantitativement les courants électroniques et ioniques arrivant sur les particules poudreuses, comme le modèle du courant limité par le mouvement orbital [Fortov 2005] et le modèle de la dérive radiale [Nairn 1998]. En basse pression, on peut considérer le cas comme non-collisionnel. Dans ce cas, on utilise le modèle du courant limité par le mouvement orbital OML (Orbital - Motion Limited). Ce modèle a été développé par Langmuir et Mott-Smith [Mott-Smith 1926] pour évaluer la charge des grains de poussières.

Afin de déterminer la charge portée par la poussière dans un plasma, il est nécessaire de connaître les courants d'électrons et d'ions arrivant à sa surface, qui est portée au potentiel ϕ_d . Ce problème est similaire au courant collecté par une sonde électrostatique. Langmuir et Mott-Smith calculèrent ces courants pour des sondes cylindriques et sphériques. Cette dernière géométrie correspond à la forme idéalisée des grains de poussière en suspension dans un plasma. La théorie OML considèrent des particules de rayon r_d , qui est très inférieur à la longueur de Debye linéarisé λ_D , i.e. que les grains de poussière sont considérés isolés. On considère aussi que la densité électronique autour

de la particule est donnée par la distribution de Boltzmann :

$$n_e = n_{e0} \exp\left(\frac{e\phi}{k_B T_e}\right) \quad (2.7)$$

où n_{e0} est la densité électronique à l'équilibre.

Bernstein et Rabinowitz [Bernstein 1959] ont développé ce modèle dans le cas des ions monoénergétiques. Laframboise [Laframboise] a amélioré cette théorie dans le cas des ions maxwelliens. Nous assumons en ce qui nous concerne que les ions sont monoénergétiques. Comme la poussière est chargée négativement, alors elle attirera les ions. Un ion sera collecté par la surface de la particule poussière uniquement si son paramètre d'impact vérifie $b < b_c$ (voir figure 2.2). On admet aussi que la gaine entourant ce grain est non collisionnelle : $\lambda_D \ll l_{pm,i}$; $l_{pm,i}$ étant le libre parcours moyen des ions. Pour simplifier, on considère le potentiel plasma comme étant le potentiel de référence ($V_{pl} = 0$). Ainsi, la trajectoire d'un ion finit soit sur la particule, soit, après une légère déflexion dans le champ central de la particule chargée, à l'infini. Les ions avec $b = b_c$ vont atteindre la particule chargée en incidence rasante. En admettant que l'énergie totale E_0 d'un ion venant de l'infini avec

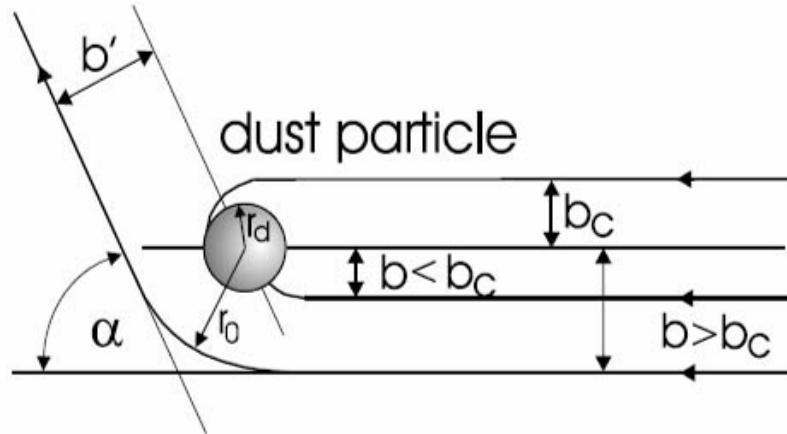


FIGURE 2.2 – Trajectoire d'un ion positif entrant en interaction avec le champ central d'un grain de poussière chargée négativement

la vitesse thermique moyenne :

$$V_{th,i} = \sqrt{\frac{8K_B T}{\pi m_i}} \quad (2.8)$$

est conservée dans le champ électrostatique central de la poussière. Alors l'énergie maximale d'un ion collecté s'écrit en vertu de la conservation de l'énergie totale :

$$E_0 = \frac{1}{2} m_i v_{th,i}^2 = e\phi_d + \frac{1}{2} m_i v_{r_d}^2 \quad (2.9)$$

Sachant que le moment angulaire $\vec{L} = \vec{r} \times m \vec{v}$ est conservé (i.e. la force coulombienne est centrale), on aura :

$$m_i b_c v_{th,i} = m_i r_d v_{r_d} \quad (2.10)$$

On peut ainsi calculer le paramètre critique d'impact :

$$b_c = r_d \sqrt{1 - \frac{e\phi_d}{E_0}} = r_d \sqrt{1 - \frac{e\phi_d}{K_B T}} \quad (2.11)$$

Le paramètre b_c représente le rayon effectif de la particule collectant le courant ionique, qui est plus grand que le rayon réel de la particule sphérique.

La section efficace de collection d'ions par la particule poussière est donnée en fonction du paramètre d'impact comme :

$$\sigma_{coll} = \pi b_c^2 = \pi r_d^2 \sqrt{1 - \frac{e\phi_d}{K_B T}} \quad (2.12)$$

Le courant ionique arrivant sur la particule sphérique est donné par le flux de charge ($e n_{i0} v_{th,i}$) à travers la surface effective ($A_{eff} = 4\pi b_c^2$) (pondéré par le facteur géométrique 1/4 i.e.

$$I_i = \frac{1}{4} A_{eff} e n_{i0} v_{th,i} = \pi r_d^2 e n_{i0} \sqrt{\frac{8K_B T_i}{\pi m_i}} \left(1 - \frac{e\phi_d}{K_B T_i} \right) \quad (2.13)$$

où n_{i0} est la densité ionique à l'équilibre.

Les électrons du plasma sont repoussés par la particule solide chargée à l'exception de ceux dont l'énergie est suffisante pour vaincre la barrière de potentiel entourant cette poussière. Pour ces électrons, leur surface de collection est la surface réelle de la particule sphérique : $A_d = 4\pi r_d^2$. Pour une distribution maxwellienne, la densité électronique est réduite par le facteur de Boltzmann :

$$n_e(\phi_d) = n_{e0} \exp\left(\frac{e\phi_d}{k_B T_e}\right) \quad (2.14)$$

Le courant électronique à la surface de la poussière est par conséquent donné :

$$I_e = -\frac{1}{4}A_d e n_e v_{th,e} = -\pi r_d^2 e n_{e0} \sqrt{\frac{8K_B T_e}{\pi m_e}} \exp\left(\frac{e\phi_d}{K_B T_e}\right) \quad (2.15)$$

A l'état d'équilibre, la charge totale sur la particule n'est pas influencée par les flux d'ions et d'électrons à sa surface. La charge totale se calcule :

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = I_e + I_i = 0 \quad (2.16)$$

Le potentiel de la particule à l'état stationnaire est égal au potentiel flottant ($\phi_d = V_f$) et se calcule par l'égalité des courants électronique et ionique à la surface de grain. La combinaison des équations (2.13) et (2.15) conduit à l'équation :

$$1 - \frac{T_e}{T_i} \frac{eV_f}{(K_B T_e)} = \sqrt{\frac{m_i T_e n_e}{m_e T_i n_i}} \exp\left(\frac{eV_f}{(K_B T_e)}\right) \quad (2.17)$$

A l'équilibre, la charge portée par la particule poussière s'obtient à partir de :

$$Q = 4\pi r_d^2 \sigma \quad (2.18)$$

où σ est la densité de charge, reliée au champ électrique radial par :

$$\sigma = \varepsilon_0 E_r(r_d) = -\varepsilon_0 \nabla V|_{r=r_d} = \varepsilon_0 \left(\frac{1}{r_d} + \frac{1}{\lambda_D}\right) V(r_d) \quad (2.19)$$

On notera que le potentiel $V(r)$ est celui de Debye - Hückel. La charge de la particule devient :

$$Q = 4\pi \varepsilon_0 r_d \phi_d = 4\pi \varepsilon_0 \left(1 + \frac{r_d}{\lambda_D}\right) V_f \quad (2.20)$$

2.7 Fluctuation de la charge

Une des caractéristiques importante d'un plasma poussiéreux est la fluctuation de la charge du grain. Ce phénomène est observé dans les plasmas de laboratoire et dans la nature. Celle-ci devient alors une nouvelle variable dynamique que nous discuterons dans le chapitre (4 et 5) .

La charge et le potentiel d'un corps immergé dans le plasma sont déterminés par un équilibre entre divers courants d'électrons et d'ions dans le corps. En réalité, la charge du grain n'est pas constante, elle fluctue. Cette fluctuation se manifeste dans le temps et dans l'espace. Elle est la conséquence de la variation de taille de poussière dans le nuage, ce qui est presque toujours le cas, conduisant les particules individuelles à avoir des charges d'équilibre différentes. Même dans un plasma spatialement et temporellement uniforme, il y

aura toujours des fluctuations de charge à la fois entre les différentes particules et des variations temporelles à l'intérieur des grains individuels. Cela est dû aux éléments finis des charges et aux fluctuations statistiques aléatoires des courants de charge. La fluctuation de la charge de poussière a été largement étudiée au moyen de divers modèles et sous différentes hypothèses. En 1994, Cui et Gorée ont développé un modèle consacré à la recherche de la variation de charge à l'aide des méthodes de Monte Carlo en utilisant uniquement les courants de charge primaires [Cui 1994]. Ils ont trouvé que la charge varie selon la racine carrée de la charge moyenne; des modèles plus élaborés ont donné des résultats similaires. Matsoukas et coll. a examiné les fluctuations comme un processus de Markov [Matsoukas 1996]. Khrapak et coll. ont développé un modèle dans lequel n'importe quel courant de charge peut être inclus, comme les électrons secondaires et la photoionisation [Khrapak 1999].

2.8 Bilan de forces dans les plasmas poussiéreux

La distribution spatiale, le transport et les cycles de formation des poussières peuvent être évalués par le bilan de forces qui s'appliquent sur une poussière. Ces forces dépendent non seulement du rayon des particules r_p et de leurs charges Q_p mais également de l'environnement, dans lequel elles se trouvent qui dépend de la géométrie du réacteur, du type de plasma, des gradients de températures, de la vitesse du fluide, du type de gaz. . . . Nous allons tous d'abord donner les expressions de ces différentes forces. Le lecteur pourra se référer à cet ouvrage pour plus de détails sur ces forces [Shukla 2002].

- **La force de gravité** \vec{F}_g est une force de sédimentation, elle dépend de la masse de la poussière, elle est donnée par :

$$F_g = \frac{4}{3}\pi r_p^3 \rho_p g \quad (2.21)$$

Où ρ_p est la masse volumique du grain et g est l'accélération gravitationnelle.

- **La force électrique** \vec{F}_E est due aux gradients de potentiel existe dans la décharge. Une poussière électriquement chargée sera donc sensible au champ électrique et la force dépendra de l'intensité de ce champ électrique et de la charge de la poussière, elle est donnée par :

$$F_E = Q_p E \quad (2.22)$$

avec E est le champ électrique local et Q_p est la charge de la particule.

- **La force de frottement ionique** F_i est due au transfert de quantité de mouvement des ions par collision avec les poussières. Elle devient

dominante dans les zones où le flux ionique est important. Cette force est issue de deux contributions : une force de collection $F_{i\text{collection}}$ et une force de collision coulombienne F_{i0} . Elle est donnée par :

$$F_i = \overbrace{n_i m_i v_i \pi r_p^2 \left(\frac{8kT_i}{\pi m_i} + v_i^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{2e\phi_p}{m_i v_i^2} \right)^{\frac{1}{2}}}_{F_{i\text{collection}}} + \overbrace{2n_i m_i v_i \pi b_{\pi/2}^2 \left(\frac{8kT_i}{\pi m_i} + v_i^2 \right)^{\frac{1}{2}} \ln \left(\frac{\lambda_D^2 + b_{\pi/2}^2}{b_c^2 + b_{\pi/2}^2} \right)}_{F_{i0}} \quad (2.23)$$

où n_i et m_i la densité et la masse respective de l'ion ; v_i la vitesse de dérive des ions ; T_i la température de l'ion ; ϕ_p le potentiel de surface de la poussière ; λ_D la longueur de Debye ; $b_{\pi/2}$ est le paramètre d'impact, pour une déflexion de l'ion de 90° ; b_c est le paramètre d'impact, collisionnel de l'ion d'après la théorie OML (Orbital Motion Limited en anglais) ;

- **La force de frottement des neutres** F_n Cette force résulte de la collision des poussières avec : les atomes ou molécules neutres du gaz, elle est proportionnelle à la pression des neutres dans l'enceinte. Elle est donnée par l'expression suivante :

$$\vec{F}_n = \frac{8}{3} \sqrt{2\pi} r_p^2 m_n n_n \left(v_n^2 + \sqrt{\frac{8k_b T_n}{\pi m_n}} \right) \left(1 + \alpha \frac{\pi}{8} \right) (\vec{v}_p - \vec{v}_n) \quad (2.24)$$

où n_n la densité des neutres : v_p la vitesse des poussières et v_n la vitesse du fluide ; α est le coefficient d'accommodation thermique du gaz sur les poussières.

- **La force de thermophorèse** \vec{F}_{th} agit lorsque des gradients de température s'instaurent dans la décharge. Les poussières se dirigent des zones chaudes vers les zones froides.

$$\vec{F}_{th} = -\frac{32}{15} r_p^2 \alpha \vec{\nabla} T \sqrt{\frac{\pi m_n}{8k_b T_n}} \quad (2.25)$$

où r_p est le rayon de la poussière ; α est le coefficient d'accommodation thermique du gaz sur les poussières ; $\vec{\nabla} T$ est le gradient de température ; T_n la température du gaz et m_n la masse du gaz.

2.9 Les plasmas poussiéreux en phase organisée (cristaux de plasma)

Lorsqu'on introduit dans un plasma simple une nouvelle composante additionnelle, des grains de poussière mésoscopiques (plasmas poussiéreux) c'est-

à-dire des grains de faible dimension à l'échelle macroscopique, montrent une variété d'intérêt structural et des phénomènes dynamiques. Des travaux à la fois théoriques et expérimentaux ont, de ce fait, vu le jour.

L'arrangement régulier de grains de poussière dans les cristaux de plasma sont assimilable à un cristal atomique, les "atomes" sont représentés par les grains de poussière hautement chargés, ce dernier a comme conséquence, la très forte interaction entre les grains et des couplages forts apparaissent entre les grains de poussière. L'intensité du couplage entre des particules chargées, est déterminée par le paramètre de couplage Γ défini comme le rapport entre l'énergie d'interaction et l'énergie thermique. Dans le cas d'un potentiel de type Coulombien, Γ s'écrit :

$$\Gamma = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon d^{\frac{1}{2}}mv^2} = \frac{Q^2}{dk_B T} \simeq \frac{Q^2 n^{\frac{1}{3}}}{k_B T} \quad (2.26)$$

Où Q la charge des particules, v la vitesse thermique moyenne ; k_B la constante de Boltzmann, T la température et n la densité initiale des particules et d est l'interdistance moyenne entre les particules, qu'on peut relié à la densité de particules n [Bonitz 2010a] par :

$$\begin{cases} \pi d^2 n = 1, & (2D); \\ \frac{4\pi}{3} d^3 n = 1, & (3D). \end{cases}$$

Quand Γ est suffisamment grand ($\gg 1$) le système est dit fortement couplé (énergie potentielle d'interaction \gg énergie thermique) et les particules chargées forment alors une structure organisée. Dans le cas du modèle OCP (One-Component-Plasma : système idéal où l'on considère que les seules charges mobiles sont les électrons, tandis que les ions, beaucoup plus massifs sont supposés immobiles et sont représentés par un fond uniforme chargé positivement qui assure la neutralité de l'ensemble) des simulations de type Monte Carlo [Slattery 1980] ont montré que la transition de l'état fluide à l'état solide apparaît pour un Γ critique : $\Gamma \approx 170$ (cas du cristal tridimensionnel) et $\Gamma \approx 130$ (cas bidimensionnel). Des simulations plus poussées [Robbins 1988] ont pris en compte les effets d'écrantage dus au fond neutralisant en utilisant un potentiel d'interaction Coulombien écranté (potentiel Yukawa) avec Γ qui devient :

$$\Gamma = \frac{Q_p^2 n_p^{\frac{1}{3}}}{K_B T_p} \exp(-k_p) \quad (2.27)$$

avec k_p la constante d'écrantage qui est définie comme : $k_p = \frac{d}{\lambda_d} \simeq \frac{1}{\lambda_d n_p^{\frac{1}{3}}}$ Ou λ_d la longueur de Debye.

La transition de phase apparaît alors pour un Γ qui croit

[Robbins 1988] [Farouki 1994] avec le rapport d/λ_D . Le diagramme de transition de phase pour le modèle OCP et le modèle Yukawa [Robbins 1988] est représenté sur la Figure 2.3.

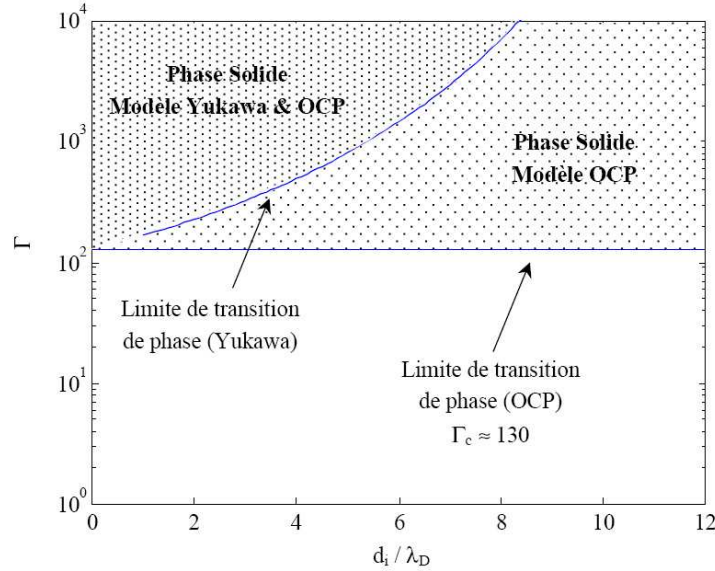


FIGURE 2.3 – Diagramme de transition de phase pour le modèle OCP et Yukawa [Robbins 1988]

La phase ordonnée (solide) des plasmas poussiéreux a été prédite théoriquement par H. Ikezi en 1986 [Ikezi 1986] puis observée expérimentalement sous forme de cristaux de plasma en 1994 [Thomas 1994] [Melzer 1994].

Les cristaux Coulomb dans le plasma poussiéreux existent dans divers systèmes, tels que plasma astrophysique, le traitement industriel du plasma, les plasmas de décharge de laboratoire, etc. L'étude des cristaux de plasma fournit un outil utile pour étudier les défauts de réseau, les dislocations, la thermodynamique des réseaux, propagation des ondes, etc [Morfill 1996].

Dans ce qui suit, nous fournirons un bref aperçu sur la physique de formation d'un cristal de plasma. Un plasma complexe constitué par des électrons, des ions, des atomes neutres et une quatrième espèce appelée " particule ou grain poussiéreuse ". A l'équilibre thermodynamique les électrons et les ions ont presque la même température et des énergies cinétiques semblables. Les ions étant beaucoup plus massifs que les électrons, ces derniers ont généralement des vitesses beaucoup plus élevées. Ce qui explique que plus d'électrons heurteront les grains de poussière, les particules tendront à acquérir une charge négative très élevée (de l'ordre 10^3e à 10^5e), la raison pour laquelle une très forte interaction entre les grains [Chu 1994]. Pour cette raison, les

plasmas poussiéreux ou ces grains de poussières forment des structures cristallines. Les cristaux de plasma peuvent être décrits par leur énergie thermique, la distance inter-particules, l'énergie d'interaction Coulombienne, la charge des particules, la densité des particules [Fortov 1996] et le rayon des particules [Hayashi 1994]. La structure des cristaux de plasma pourrait apparaître comme compacte hexagonale (*hcp*), cubique à face centrée (*fcc*) ou cubique centré (*bcc*), etc., selon la disposition des particules [Hamaguchi 1997].

Un autre paramètre déterminant de la structure des cristaux de plasma est la constante d'écrantage qui est définie comme : $k_p = \frac{d}{\lambda_d} \simeq \frac{1}{\lambda_d n_p^{1/3}}$ Ou λ_d la longueur de Debye. Pour le modèle Yukawa, le diagramme de phase présenté sur la Figure 2.4, montre que la valeur critique Γ_c pour la transition solide-fluide dépend fortement de la constante d'écrantage, ou la ligne de fusion augmente presque exponentiellement avec κ_p .

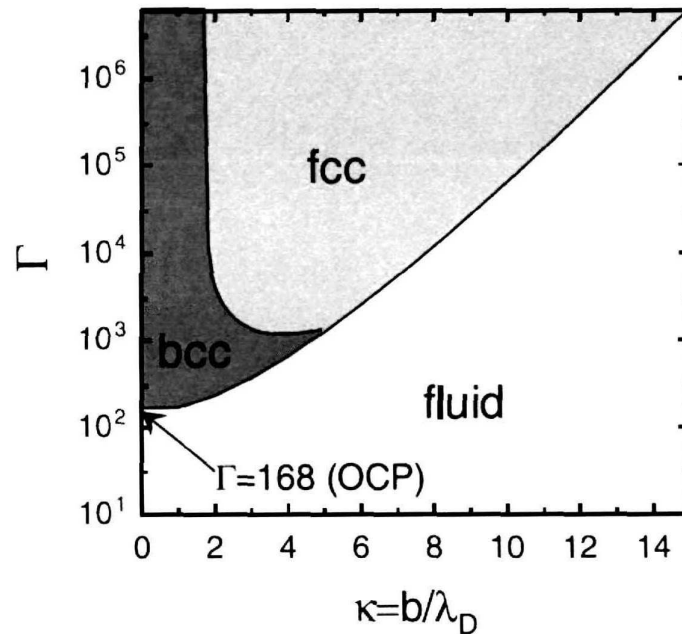


FIGURE 2.4 – Diagramme de phase pour le système Yukawa, paramètre de couplage Γ en fonction de la constante d'écrantage κ_p [Hamaguchi 1997]

La formation de cristaux de poussière a été confirmée dans plusieurs expériences et simulation. Les cristaux de poussière peuvent être facilement générés dans le plasma décharge *RF*. Les cristaux Coulomb dans un plasma poussiéreux ont été observés pour la première fois par deux groupes, l'un par Chu et

al. [Chu 1994] et l'autre par Thomas et al.[Thomas 1994]. Dans l'expérience réalisée par Chu et I, le plasma poussiéreux fortement couplé a été formé en suspendant de micro-particules de SiO_2 chargées négativement avec un diamètre de $10\mu m$ dans une plasma décharge Rf d' Ar faiblement ionisée. Des cristaux de Coulomb ont été observés en utilisant un microscope optique, La (Fig.2.5) montre le dispositif utilisé dans ces expériences.

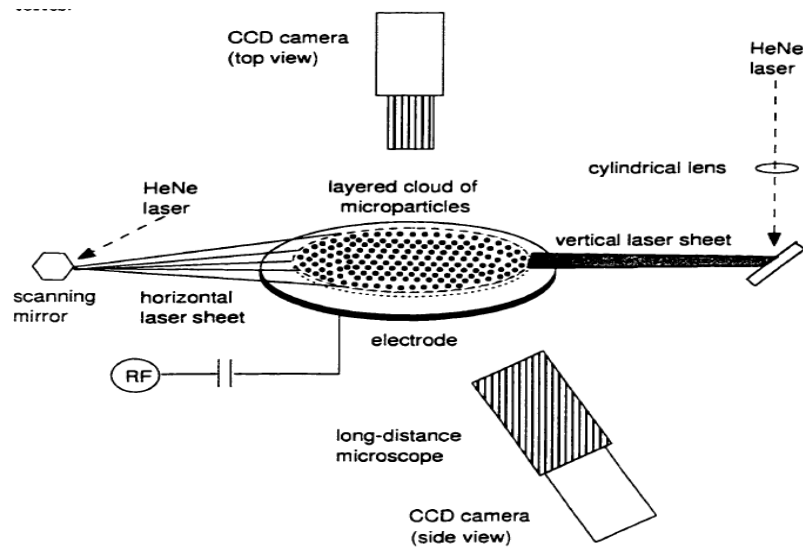


FIGURE 2.5 – Dispositif expérimental pour voir les structures organisées [Pieper 1996]

La structure des cristaux de plasma peut être visualisée avec une caméra CCD (charge-coupled device camera) en éclairant les couches du réseau avec une lumière laser. Les positions des particules peuvent être stockées sur un enregistreur vidéo avec une haute résolution temporelle et spatiale. La (Fig.2.6) présente une image CCD de grains de poussières formant un cristal coulombien avec une structure hexagonale à deux dimensions [Thomas 1994].

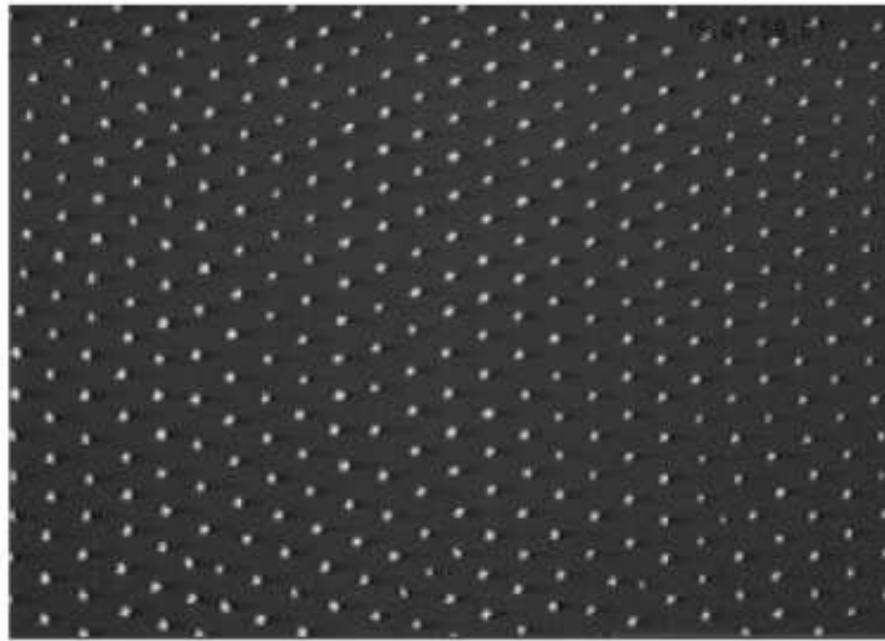


FIGURE 2.6 – Image CDD de grains de poussières formant un cristal coulombien avec une structure hexagonale à deux dimensions [Pieper 1996]

Simulation par la méthode de Monte Carlo

Sommaire

3.1	simulation numérique	34
3.2	Les différentes méthodes de simulation aux différentes échelles	35
3.3	La méthode de Monte Carlo	37
3.3.1	Historique de la méthode de Monte Carlo	37
3.4	Description de la méthode Monte Carlo	39
3.4.1	Pourquoi le nom : Monte Carlo ?	39
3.4.2	Variantes des méthodes Monte Carlo	39
3.4.3	Méthode Monte Carlo Metropolis	40
3.4.4	Principes de la simulation Monte Carlo	40
3.4.5	Algorithme de Métropolis	42

" L'intérêt du numérique est d'ouvrir de nouveaux champs d'expérimentation. Les images obtenues en visualisant les résultats d'expériences numériques vont permettre de présenter les résultats, non plus comme une suite de chiffres, mais de façon globale, sous forme de courbes ou de tâches. L'idée de faire des facultés de reconnaissance de l'oeil le principal outil d'aide à l'analyse des données ou des résultats de calcul semble naturelle. L'esprit humain qui procède par images mentales demande des images "externes" pour être stimulé, confronté à de nouveaux problèmes, mené sur la voie de nouvelles découvertes et solutions.

Ces images numériques sont plus que de simples intermédiaires entre le chercheur et son modèle : en stimulant les fonctions associatives du cerveau, elles peuvent même devenir les vecteurs de découvertes. Ces formes qui naissent sous l'oeil de l'observateur et qui traduisent un ordre sous-jacent contenu de façon implicite dans les équations révèlent parfois un phénomène inattendu ou bien indiquent la direction à suivre pour attaquer un problème ouvert.(...)"

JEAN-FRANCOIS COLONNA dans *"L'expérimentation numérique par ordinateur"* "La Recherche"-avril 1987

3.1 simulation numérique

La simulation sur ordinateur joue aujourd'hui un rôle majeur dans la recherche scientifique.

En simulation, un système est soumis à des mesures et des résultats sous forme numérique. Par contre dans les sciences théoriques, un modèle de système est construit, généralement sous la forme d'un ensemble d'équations mathématiques. Ce modèle est ensuite validé par sa capacité à décrire le comportement d'un système physique pour quelques cas précis suffisamment simples pour pouvoir extraire une solution des équations. Dans la majeure partie des cas, ce qui revient à simplifier considérablement le modèle pour éliminer les complexités invariablement liées au monde physique réel et ainsi avoir la possibilité de résoudre mathématiquement le problème.

Dans le passé, les modèles théoriques ne pouvaient être testés que dans quelques cas simples correspondant à des circonstances spéciales du modèle mathématique (cas limites et stationnaires, système symétrique, nombre de degrés de liberté limités. . .). Par exemple, en sciences de la matière condensée, un modèle pour les forces intermoléculaires dans un matériau spécifique ne peut être vérifié que dans le cas d'une molécule diatomique ou pour un cristal infini parfait. Mais même dans ces cas, des approximations devront être requises pour mener à bien le calcul.

Malheureusement, beaucoup de problèmes physiques d'intérêt majeur n'appartiennent pas à la classe de ces circonstances spéciales mathématiques. En physique des systèmes désordonnés, en général, où la symétrie n'est d'aucun secours pour simplifier le problème.

Dans les années 50, l'émergence d'ordinateurs rapides (pour l'époque) a changé la donne en insérant un nouvel élément entre théorie et expérimentation : simulation numérique ou " expérimentation numérique".

En simulation numérique, le modèle est toujours fourni par les théoriciens mais les calculs sont effectués par la machine en suivant une sorte de « recette » (l'algorithme écrit dans un langage de programmation adéquat). De cette manière, la complexité pourrait être introduite, avec précaution cependant, des systèmes plus réalistes peuvent être étudiés et ouvrant ainsi la voie à une meilleure compréhension des expérimentations réelles.

Sans aucun doute, la simulation sur ordinateur a substantiellement altéré la relation traditionnelle entre la théorie et l'expérimentation.

D'une part, la simulation numérique a augmenté la demande de modèle plus précis. Par exemple, une simulation de Monte Carlo permet de déterminer l'énergie minimal d'un système de N particules (le cas de notre travail), modélisé grâce à une certaine loi d'interaction. C'est un test difficile à passer pour le modèle théorique et non accessible dans le passé. La simulation ap-

porte donc « la vie » aux modèles, dévoilant des zones critiques et apportant des suggestions pour les améliorer.

D'autre part, la simulation se rapproche souvent des conditions expérimentales, dans la mesure où les résultats fournis par l'ordinateur peuvent quelquefois être directement comparés avec les résultats expérimentaux. Dans ce cas, la simulation devient un outil extrêmement puissant non seulement pour comprendre et interpréter les expériences au niveau microscopique mais aussi pour étudier des régions qui ne sont pas accessibles expérimentalement ou qui impliqueraient des expériences trop coûteuses.

Enfin, l'expérimentation numérique permet de simuler des phénomènes impossibles à concevoir dans la réalité mais qui apportent une grande amélioration de la compréhension du phénomène.

Une compétence numérique s'avère ici nécessaire pour un chercheur de nos jours.

3.2 Les différentes méthodes de simulation aux différentes échelles

Pour le chercheur en science des matériaux qui désire modéliser son système d'étude, un large éventail de méthodes s'offre à lui. Mais chaque méthode est cloisonnée à des échelles spatiales et temporelles spécifiques [Horstemeyer 2012].

Nous proposons ci-dessous, à titre indicatif une liste non exhaustive des méthodes de modélisation numérique implémentées en sciences des matériaux :

- Les calculs *ab initio* (dont fait partie la théorie de la fonctionnelle de densité : DFT) sont surtout utilisés en statique pour déterminer des structures de surface, des énergies de liaisons, des structures d'état de transition, des potentiels interatomiques, ...
- Les méthodes de dynamique moléculaire quantique [Ohno 1999], permettent de simuler des phénomènes dynamiques mais impliquant un nombre très restreint d'atomes (une centaine) sur des échelles de temps extrêmement réduites (moins d'une picoseconde).
- Les modèles de *Dynamique Moléculaire Classiques*, qui utilisent des potentiels empiriques pour représenter les interactions électroniques, permettent de simuler des systèmes de plus grande taille (jusqu'à 10000 atomes), sur des durées qui peuvent excéder la nanoseconde.
- Les modèles *Monte-Carlo Classiques* de type Métropolis [Metropolis 1953], permettent de simuler des systèmes de taille

- comparable mais sans contrôle précis de leur dynamique.
- Les modèles Monte-Carlo Cinétiques [James 1980], se situent entre l'échelle atomique et l'échelle des milieux continus, ils sont capables de décrire à la fois des processus assez rapides, qui ne concernent que l'échelle atomique (diffusion de surface, réactions, ...) et des évolutions beaucoup plus lentes, qui touchent la micro ou la méso-échelle (formation de microstructure).
 - Les modèles utilisés pour simuler la microstructure à l'échelle micro ou mésoscopique (grains ou cristaux des films polycristallins, ...) sont des modèles de Potts [Potts 1952], des modèles d'Automates Cellulaires [von Neumann 1966], des modèles géométriques, des modèles aux éléments finis, ...
 - Les modèles macroscopiques (transferts thermiques, évolution des contraintes mécaniques, ...) sont généralement des modèles aux volumes finis ou aux éléments finis qui permettent de simuler la dynamique d'évolution d'un système en résolvant des systèmes d'équations aux dérivées partielles.

La figure 3.1 présente les échelles accessibles pour les principaux modèles de simulation qu'il est possible de mettre en oeuvre en science des matériaux [Dollet 2004] [Horstemeyer 2012].

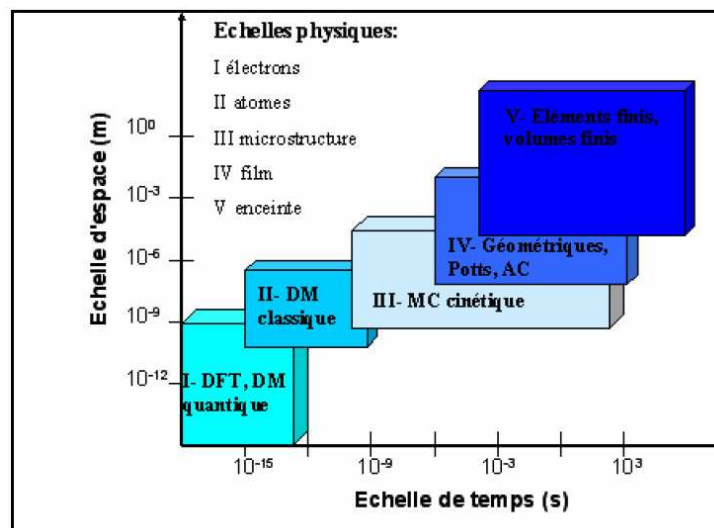


FIGURE 3.1 – Principaux modèles de simulation utilisés en science des matériaux.

Dans le cadre de ce travail, je décrirais essentiellement la méthode de Monte carlo que nous appliquons à la détermination des configurations les

plus stables ainsi à la transition de phase ordre-désordre.

3.3 La méthode de Monte Carlo

La méthode de simulation de Monte Carlo peut être vue comme une méthode d'approximation, même s'il s'agit d'approximations au sens statistique du terme. Il n'y a pas un consensus absolu sur une définition précise de ce qu'est une technique de type Monte Carlo, mais la description la plus habituelle consiste à dire que les méthodes de ce type se caractérisent par l'utilisation du hasard pour résoudre des problèmes centrés sur un calcul. Elles sont en général applicables à des problèmes de type numérique (exemple : calcul d'intégrale, la résolution d'équations aux dérivées partielles, la résolution de système linéaire), ou bien à des problèmes de nature elle-même probabiliste (exemple : étude structurale des matériaux désordonnés).

3.3.1 Historique de la méthode de Monte Carlo

Stanislaw Ulam venait de perdre un bout de cerveau lorsqu'il eut l'idée des méthodes Monte Carlo. Alité depuis plusieurs jours, se remettant d'une encéphalite qu'il avait contractée au début de l'année 1946, il se divertissait en jouant au solitaire lorsqu'il se demanda quelle était la probabilité qu'il complète les séries selon les paquets de cartes à jouer qu'il avait devant lui. Après avoir tenté, sans succès, de répondre à cette question avec les méthodes combinatoires usuelles, il tenta de trouver une solution originale à ce problème qui semblait pourtant bien simple.

Mathématicien d'origine polonaise, Ulam avait émigré aux États-Unis pour poursuivre ses études universitaires à Harvard, peu de temps avant la deuxième Guerre mondiale. En plus de lui sauver la vie, cette migration lui permit de rencontrer et créer des liens d'amitié avec John Von Neumann avant que celui-ci devienne une figure de proue de l'effort de guerre de la communauté scientifique américaine. Lorsque ce dernier devint conseiller scientifique pour la U.S. navy, il invita Ulam à se joindre à l'équipe du projet Manhattan regroupé au laboratoire national de Los Alamos. Là-bas, il contribua à la résolution de problèmes de dynamique des fluides liés à l'implosion de l'uranium des premières bombes atomiques, mais surtout, il fût témoin de la construction d'ENIAC, le premier ordinateur américain [Metropolis 1987].

Ulam remarqua qu'il était possible d'approximer la probabilité de réussite d'une main en observant plusieurs joueurs de solitaires jouer une partie débutant avec cette main, puis en calculant la proportion de joueurs réussissant à terminer leur partie. De plus, il savait que la qualité de cette approximation

était proportionnelle à la quantité de joueurs observés et qu'ultimement, avec une infinité de joueurs, l'approximation serait égale à la vraie probabilité de réussite. Or cette méthodologie est inutilisable. Pour s'en convaincre, il suffit de considérer la quantité de ressources nécessaire à l'organisation d'une petite expérience d'une centaine de joueurs, comme la quantité de personnel à employer à trouver les participants, louer les locaux, acheter les cartes, placer des tables, etc. Ulam le savait. Ayant été impressionné par la puissance de calcul du premier ordinateur, Ulam naturellement considéra son utilisation pour résoudre ce problème probabiliste qu'il s'était posé en jouant aux cartes. L'idée d'utiliser l'échantillonnage statistique pour résoudre des problèmes quantitatifs fût utilisée bien avant Ulam. Par exemple, en 1733, Laplace proposa une expérience inusitée, appelée l'aiguille de Buffon, permettant d'estimer la valeur de π . Sa méthodologie consistait à laisser tomber, une à une, un certain nombre n d'aiguilles de longueurs l entre deux lignes parallèles, séparées par une distance $d > l$, puis à compter le nombre m d'aiguilles ayant traversées une des lignes, dans le but d'estimer la probabilité d'un tel événement selon l'expression $p = \frac{m}{n}$. Georges Louis Leclerc dit comte de Buffon, peu de temps auparavant, avait utilisé le calcul différentiel pour déterminer que cette probabilité était égale à $\frac{2l}{d\pi}$. En conséquence, l'expérience de l'aiguille de Buffon permet d'estimer la valeur de π , en utilisant l'approximation $\pi = \frac{2ln}{dm}$. De même, en 1908, William Sealy Gosset, fit un sondage parmi 3000 prisonniers pour obtenir deux bases de données ; l'une enregistrant leurs tailles, l'autre la longueur de leur majeur. Puisque ces deux données sont proportionnelles au gabarit du prisonnier, Gosset put les utiliser pour simuler deux lois normales corrélées. Ces deux exemples ont en commun d'utiliser des phénomènes physiques pour générer des échantillons de nombres aléatoires et d'utiliser des méthodologies difficilement transférables à d'autres situations que celle pour laquelle elles ont été pensées [Jedrzejewski 2009].

Après sa convalescence, Stanislaw Ulam travaillait, entre autres, à systématiser et à prouver l'efficacité de sa méthode d'échantillonnage lorsqu'il eut l'occasion de la tester. En 1947, les scientifiques de Los Alamos commençaient à se pencher sur le concept de la bombe à neutron. John Von Neumann qui était toujours directeur scientifique du laboratoire à cette époque et était au courant des travaux de Ulam, lui demanda de venir utiliser sa méthode pour résoudre des équations de diffusions des neutrons dans des matériaux en fission. Ulam accepta et c'est grâce au travail collectif de ces mathématiciens de Los Alamos que cette méthode d'utilisation de l'échantillonnage pour résoudre des problèmes quantitatifs fût affinée. D'abord, Von Neumann et Ulam ont défini le cadre théorique rigoureux de cette méthode, facilitant ainsi son utilisation pour la plupart des problèmes à résoudre. Ensuite, Von Neumann eut l'idée d'utiliser des algorithmes pour générer les nombres aléatoires né-

cessaires à ces méthodes. Ces algorithmes, nommés générateurs de nombres aléatoires. Finalement, pour répondre aux différents problèmes théoriques liés à la bombe à neutron, d'autres mathématiciens comme Nicholas Metropolis et Stanley Phillips Frankel, ont développé des versions particulières des méthodes Monte-Carlo démontrant ainsi la versatilité de cette nouvelle approche à la résolution de problème [Metropolis 1987].

3.4 Description de la méthode Monte Carlo

La méthode de Monte-Carlo consiste à échantillonner de manière aléatoire l'espace des configurations d'un système, afin d'en déterminer un ensemble de configurations représentatives. Chaque configuration est alors générée à partir de la précédente par des mouvements stochastiques et arbitrairement choisis. Les mouvements peuvent être des mouvements de translation ou de rotation ou bien consister en de grands déplacements, ce qui permet un échantillonnage efficace de toutes les zones de l'espace des phases.

3.4.1 Pourquoi le nom : Monte Carlo ?

Le nom Monte Carlo a été mis en exergue durant le projet Manhattan durant la 2^{me} guerre mondiale à cause des similitudes entre les simulations statistiques mises au point à cette occasion et les jeux de hasard dont la ville de Monte-Carlo était la capitale à cette époque [Landau 2000].

La méthode de Monte Carlo repose sur la théorie des probabilités dans laquelle, mathématiquement, le hasard est absent. Elle est utilisée dès la fin du dix neuvième siècle pour calculer numériquement des intégrales. Dans le cadre de la physique statistique et plus précisément du calcul de grandeurs thermodynamiques, elle est utilisée pour la première fois en 1953 par Metropolis et Co-auteurs [Metropolis 1953].

3.4.2 Variantes des méthodes Monte Carlo

Il existe plusieurs variantes des méthodes de Monte Carlo, selon le domaine d'application. On peut citer par exemple : Metropolis Monte Carlo, Thermodynamics Monte Carlo, Lattice Monte Carlo, Quantum Monte Carlo, Monte Carlo Cinétique [Landau 2000] [Binder 2001],...

Dans le cadre de cette thèse, j'ai utilisé la méthode Monte Carlo Metropolis, que nous allons élaborer au cours de ce chapitre..

3.4.3 Méthode Monte Carlo Metropolis

La méthode de Monte Carlo est une méthode de simulation qui est considérée comme un outil majeur d'investigation de la physique de la matière condensée depuis les années 50. C'est une méthode stochastique (au hasard) qui consiste à générer un enchaînement (série) de conformations où les propriétés thermodynamiques et structurales sont obtenues par moyennage.

L'idée de base de la méthode de Monte-Carlo est de calculer une grandeur, définie comme l'espérance d'une variable aléatoire elle-même issue d'un processus aléatoire, en simulant n fois ce processus, à l'aide d'un générateur de nombres aléatoires. Un ordinateur opère, numériquement, n fois le processus, les n réalisations du processus doivent être indépendantes, calcule à chaque fois une valeur pour la variable aléatoire. On obtient le résultat final en moyennant l'ensemble des résultats obtenus, avec une précision dépendante du nombre d'itérations. À la différence de nombreuses méthodes, la moyenne effectuée ici n'est pas temporelle, tous les lancers étant indépendants, c'est-à-dire la méthode MC effectue des moyennes non pas sur le temps, mais sur l'espace des phases.

3.4.4 Principes de la simulation Monte Carlo

La méthode MC est basée sur un principe développé par les statisticiens : c'est la technique d'échantillonnage. En effet, qu'il s'agisse d'un système en équilibre ou en évolution, celui-ci admet une multitude d'états microscopiques, liés à sa complexité, de telle sorte qu'il est impossible d'explorer toutes les éventualités. On introduit alors une description probabiliste du système à l'aide d'une fonction coût sur l'espace des configurations qui tend à raréfier les configurations à coût élevé, dans notre simulation, la fonction coût est prise comme étant l'énergie totale du système. Finalement, on se contente souvent des solutions proches de l'optimale.

Cette méthode permet l'estimation des moyennes de grandeurs physiques données par la formulation de Boltzmann de la mécanique statistique. Les premières simulations furent réalisées dans l'ensemble canonique (N , V et T constants), puis la technique fut étendue aux autres ensembles statistiques.

Le calcul de la moyenne statistique d'une observable A en échantillonnent l'espace des phases avec un ensemble de points X_i répartis suivant la distribution $\rho(X)$. On parle alors d'échantillonnage d'importance. Si le nombre de points est suffisant et représentatif de l'ensemble des configurations possibles, alors la moyenne de l'observable A est telle que :

$$\langle A \rangle \simeq \frac{\sum_i A(X_i)\rho(X_i)}{Z} \quad (3.1)$$

où ρ est la distribution de Boltzmann ($\rho(X_i) = \exp[-\beta E(X_i)]$) avec la température inverse $\beta = 1/k_B T$, k_B la constante de Boltzmann, T la température et $E(X_i)$ l'énergie de l'état X_i . La fonction de partition Z à la température T est définie comme :

$$Z = \sum_i e^{-\beta E(X_i)} \quad (3.2)$$

Les états d'échantillonnage sont répartis selon la distribution de Boltzmann. Cette distribution est principalement utilisée pour améliorer l'estimation de la valeur moyenne. Par conséquent, le concept d'échantillon est de créer une chaîne de Markov appropriée dans laquelle les configurations sont choisies en fonction de leur poids, suivant la probabilité de Boltzmann [Hukushima 1996]. Généralement, la simulation MC utilise la chaîne de Markov pour générer au hasard les configurations du système. La transition à une configuration notée b dépend uniquement de la configuration précédente notée a , mais pas de l'ensemble des configurations dans l'espace des états. Cela signifie que la transition, que peut suivre la probabilité $w(a \rightarrow b)$, dans une chaîne de Markov est presque locale dans le temps.

Une chaîne de Markov est construite par une succession d'états qui satisfont la probabilité de Boltzmann. Ce processus connu sous le nom de processus de Markov, menant à la distribution de Boltzmann. L'ergodicité est une idée supplémentaire nécessaire pour réaliser le processus de Markov.

3.4.4.1 Processus de Markov

La partie la plus complexe dans la simulation Monte Carlo est la génération d'un ensemble aléatoire appropriée des états en fonction de la distribution de probabilité de Boltzmann [Kendall 2005]. En d'autres termes, on ne peut pas choisir au hasard certains états puis les accepter ou les rejeter avec une probabilité proportionnelle à $e^{-\beta E_a}$ puisque le résultat n'en sera pas meilleur que celui issu d'un échantillonnage hasardeux. Dans ce cas, nous risquons de répéter virtuellement certains états autant que leurs probabilités sont exponentiellement petites [Dimov 2008]. Pour éviter cette contrainte, presque tous les algorithmes des méthodes Monte Carlo utilisent le processus de Markov pour choisir les états utilisés [Berg 2004].

Le processus de Markov n'est autre que le mécanisme qui génère un état b du système à partir d'un autre a connu [Fishman 2013] [Trigg 2005]. L'état généré n'est pas toujours le même. Ainsi, il parcourt le système à la recherche d'un nouvel état avec une probabilité de transition $w(a \rightarrow b)$ à laquelle il impose deux conditions [Newman 2002] :

- ne varier pas avec le temps,
- dépendre uniquement des propriétés du système sur les états a et b .

Ceci traduit le fait que la probabilité de transition $w(a \rightarrow b)$ d'un état a à un autre b du processus de Markov est toujours constante et devra satisfaire à la relation de fermeture [Newman 2002] :

$$\sum_b w(a \rightarrow b) = 1 \quad (3.3)$$

Dans la simulation Monte Carlo, le processus de Markov est utilisé à plusieurs reprises pour générer une chaîne de Markov des états [Kalos 2008] [Rubinstein 2008]. Cette chaîne est généralement utilisée lorsqu'on veut partir de n'importe quel état du système et générer, par exemple, une suite de configurations de certains états précis (finaux). Pour parachever cet objectif, il est utile d'imposer de nouvelles conditions au processus de Markov, c'est l'ergodicité [Newman 2002].

3.4.4.2 Ergodicité

Une chaîne de Markov est dite ergodique si tout état est atteignable depuis tout autre état, mais le nombre de pas n'est pas nécessairement fixé. Autrement dit, que la condition d'ergodicité stipule qu'il est possible d'atteindre n'importe quel point b à partir de n'importe quel point a en un nombre fini d'étapes [Fishman 2013].

3.4.5 Algorithme de Métropolis

Dans les systèmes physiques, le calcul des valeurs moyennes nécessite souvent de prendre en compte une pondération des différentes configurations possibles. Par définition, le calcul d'une valeur moyenne d'une observable A est l'intégrale de A sur tout l'espace pondéré par la fonction de distribution $\rho(x)$ divisée par le volume de cet espace pondéré et s'écrit :

$$\langle A \rangle = \frac{\int A(x)\rho(x)dx}{\int \rho(x)dx} \quad (3.4)$$

A ce stade, le problème est alors de générer une distribution de configurations suivant la loi $\rho(x)$. La solution utilisée par les méthodes Monte-Carlo est de générer ces points par une chaîne de Markov, c'est-à-dire une suite séquentielle de configurations où chaque configuration appartient à l'espace des états et ne dépend que du point précédent. Les propriétés des processus de Markov ont pour conséquences :

$$\sum_{x_{i+1}} p(x_i \rightarrow x_{i+1}) = 1 \quad (3.5)$$

$$\sum_{x_i} \rho(x_i) p(x_i \rightarrow x_{i+1}) = \rho(x_{i+1}) \quad (3.6)$$

avec la probabilité de transition $p(x_i \rightarrow x_j)$ de la configuration i vers la configuration j .

Afin d'assurer la validité de l'équation 3.5, la condition de réversibilité microscopique, ou microréversibilité, est suffisante (les mouvements dans un sens sont exactement compensés par les mouvements inverses) et pour que le système converge vers son état d'équilibre thermodynamique, il faut imposer que les lois de probabilité $p(x_i \rightarrow x_j)$ vérifient la condition de bilan détaillé :

$$\rho(x_i) p(x_i \rightarrow x_j) = \rho(x_j) p(x_j \rightarrow x_i) \quad (3.7)$$

La probabilité de transition $p(x_i \rightarrow x_j)$ peut être définie comme le produit de la probabilité de tenter une transition $\gamma(x_i \rightarrow x_j)$ avec la probabilité d'accepter cette même transition $\alpha(x_i \rightarrow x_j)$. Dans le cas de mouvements symétriques, on a $\gamma(x_i \rightarrow x_j) = \gamma(x_j \rightarrow x_i)$ et la probabilité d'accepter un déplacement doit donc satisfaire la condition du bilan détaillé :

$$\frac{\alpha(x_i \rightarrow x_{i+1})}{\alpha(x_{i+1} \rightarrow x_i)} = \frac{\rho(x_{i+1})}{\rho(x_i)} \quad (3.8)$$

La solution de cette équation proposée par Metropolis et Co-auteurs [Metropolis 1953] a été longtemps la plus couramment utilisée dans ce type de simulations numériques [Metropolis 1953]. Cependant, il est important de noter qu'il existe un grand nombre d'autres solutions vérifiant cette équation, par exemple, la solution proposée par Barker (1965) :

$$\alpha(x_i \rightarrow x_{i+1}) = \frac{\rho(x_{i+1})}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})} \quad (3.9)$$

La solution de Metropolis consiste à choisir la stratégie suivante dans la définition de la probabilité d'accepter un déplacement :

$$\alpha(x_i \rightarrow x_{i+1}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \rho(x_{i+1}) \geq \rho(x_i) \\ \frac{\rho(x_{i+1})}{\rho(x_i)} & \text{si } \rho(x_{i+1}) < \rho(x_i) \end{cases} \quad (3.10)$$

Ces équations vérifient bien la condition du bilan détaillé (éq. 3.8).

En équilibre thermodynamique, la distribution des états d'un système de particules à température finie T est définie par la distribution de Boltzmann, aussi appelée distribution de Gibbs et s'exprime comme $\rho(x) = \exp(-\beta E(x))$, $\rho(x)$ est appelé facteur de Boltzmann avec $\beta = 1/k_B T$. La probabilité normalisée d'être dans un état donné est $p(x) = \exp[-\beta E(x)]/Z(\beta)$ avec $Z(\beta) = \int \exp(-\beta E(x)) dx$ appelée la fonction de partition qui peut être vue

comme une fonction de normalisation. Cette fonction, très complexe à calculer, est la quantité fondamentale qui permet d'engendrer toutes les propriétés statistiques d'un système. On peut alors réécrire la solution de Metropolis définissant la probabilité d'accepter un déplacement pour cette distribution boltzmannienne ainsi :

$$p(x_i \rightarrow x_{i+1}) = \begin{cases} 1 & \text{si } E(x_{i+1}) \leq E(x_i) \\ \exp[-\beta(E(x_{i+1}) - E(x_i))] & \text{si } E(x_{i+1}) > E(x_i) \end{cases} \quad (3.11)$$

L'utilisation d'une chaîne de Markov dans l'algorithme permet, pour le calcul des moyennes, de s'affranchir du calcul de la fonction de partition. La distribution de Boltzmann est une distribution classique des noyaux. Sa validité dépend donc du système. Généralement, la température doit être suffisamment élevée et la pression assez faible pour que les effets quantiques puissent être négligés.

En résumé, les étapes générales de l'algorithme sont les suivantes :

- On part d'une configuration initiale (x_i) dont on calcule l'énergie potentielle $E(x_i)$.
- On effectue un faible déplacement aléatoire des atomes (ou des molécules) $x_{i+1} = x_i + \delta x$. L'énergie $E(x_{i+1})$ de cette nouvelle géométrie est calculée.
- On calcule une probabilité d'accepter le déplacement (éq. 3.11).
- On tire un nombre aléatoire que l'on compare à la probabilité de déplacement. Si le déplacement est accepté, on prend en compte ce nouvel état dans la statistique. Si le déplacement est refusé, on repart de la géométrie ($x_{i+1} = x_i$) que l'on compte à nouveau dans la statistique.
- On met à jour la géométrie ($x_i = x_{i+1}$) et on réitère les étapes précédentes pendant un nombre prédéfini de pas Monte-Carlo.

Cristal plasma : Description des états d'équilibre

Sommaire

4.1	Description du modèle physique et approche numérique	46
4.2	Forme générale d'hamiltonien et limite classique . . .	46
4.3	Hamiltonien classique du système	48
4.3.1	Potentiel de confinement	48
4.3.2	Forme du potentiel d'interaction	49
4.4	Hamiltonien adimensionné	51
4.5	Approche numérique	53
4.5.1	Méthode de simulation Monte Carlo	54
4.5.2	Algorithme de Metropolis	54
4.5.3	Ensemble canonique	55
4.5.4	Détail d'une simulation	56
4.5.5	Optimisation globale	57
4.5.6	La méthode Newton-Raphson	58
4.6	Résultats et discussions	58
4.6.1	Effet de Potentiel sur les configurations les plus stables	60
4.6.2	Etude comparative	64

Après avoir identifié les mécanismes de base de plasma poussiéreux, nous souhaitons maintenant étudier la cristallisation de l'ensemble de particules poussiéreux en vue de l'interaction entre les particules de la poussière. Pour ce faire, on s'intéresse aux particules de petites tailles, car la distribution spatiale des poussières peut être évalués par le bilan de forces qui s'appliquent sur une poussière. Ces forces dépendent non seulement du rayon des particules r_p et de leurs charges Q_p mais également de l'environnement dans lequel elles se trouvent [Shukla 2002].

Le potentiel d'interaction joue un rôle crucial dans les mécanismes de formation des cristaux Coulomb, ce qui le lie directement par la force via l'équation : $\vec{F} = -\vec{\nabla}U$. En fait, d'après les travaux de Nunomura et al. (1998)

[Nunomura 1998], Knapek et al. (2007) [Knapek 2007], Balabanov et al. (2000) [Balabanov 2000] et surtout (Nitter 1996) [Nitter 1996], on peut donc conclure que plusieurs types de forces extérieures s'appliquent sur les particules poussiéreuses dans un plasma. Les forces appliquées les plus importantes sont la force d'interaction particule-particule et la force électrique qui est une conséquence directe de la charge des particules. En fait, c'est la force électrique qui confine les particules chargées négativement. A cet effet électrique on peut conclure que le potentiel d'interaction entre particule est prédominant comparé à d'autres formes d'interaction entre les particules [Tsytoich 2008].

4.1 Description du modèle physique et approche numérique

Dans la présente thèse, nous nous intéresserons principalement aux systèmes à deux dimensions constitués d'un nombre infini de particules, où l'interaction inter-particules peut être décrite par plusieurs formes et peut décrire une grande variété de types d'interaction, cette interaction notée par $V = U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$. La nature bidimensionnelle est assurée par un potentiel de confinement externe agissant dans deux directions, à savoir la direction x et y , d'un tel potentiel est donnée par : $V_C = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \omega_0^2 \vec{r}_i^2$: Nous avons adapté un modèle classique inspiré du modèle quantique de Wigner pour étudier les propriétés statiques et dynamiques d'un système de particules poussiéreuses chargées. La configuration statique ou d'équilibre d'un tel système est celle qui a une énergie minimale. Dans ce but, nous avons effectué des calculs analytiques et des simulations par la méthode de Monte Carlo. Dans ce qui suit, nous fournirons quelques remarques générales sur l'hamiltonien d'un système fortement couplé confiné à deux dimensions, on montrera en premier lieu le passage de modèle quantique au classique.

4.2 Forme générale d'hamiltonien et limite classique

En mécanique quantique l'hamiltonien complet qui décrit N particules chargées à deux dimensions, interagissant à travers un potentiel électrostatique U et soumis à un confinement parabolique externe, a la forme suivante :

$$H = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{q^2}{\epsilon} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) + \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \omega_0^2 \vec{r}_i^2 \quad (4.1)$$

où m est la masse des particules, ε est la constante diélectrique du milieu dans lequel les particules se déplacent, $r_i = (x_i, y_i)$ la position de la i^{me} particules, ω_0 est la fréquence du potentiel de confinement et $U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ est le potentiel d'interaction inter-particules qu'on peut décrire par plusieurs formes. Dans cette section, et pour des raisons de simplicités, nous considérerons les particules interagissant via l'interaction Coulombienne, c'est-à-dire :

$$U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (4.2)$$

et se référera aux particules comme des électrons.

On fait une normalisation dans l'échelle des longueurs et des énergies, en introduisant la longueur d'un oscillateur harmonique quantique $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$ et son énergie quantique $\hbar\omega_0$ dans l'équation (4.1), il est possible d'exprimer l'hamiltonien (4.1) sous la forme sans dimension :

$$H' = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i'^2 + \sigma^3 \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{|\vec{r}_i' - \vec{r}_j'|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N r_i'^2 \quad (4.3)$$

Où la constante sans dimension $\sigma^3 = \sqrt{(me^4/\varepsilon^2\hbar^2)/\hbar\omega_0} = a_0/a_B$, avec $a_B = \varepsilon\hbar/(me^2)$ le rayon de Bohr des électrons. la constante σ mesure la force de l'interaction électron-électron. Pour les systèmes fortement confinés, la valeur de ω_0 sera très grande, donc la constante de couplage σ sera assez petite. Dans la limite des σ petits, l'hamiltonien (4.3) se réduit à l'hamiltonien d'un potentiel d'oscillateur harmonique et on considère les particules sans interaction ou l'interaction électron-électron peuvent être traitées comme une perturbation. D'un autre côté, pour les systèmes fortement couplés, il est attendu que la valeur de σ est très grande. L'hamiltonien après une renormalisation (redimensionnement) des distances par $r' \rightarrow \sigma r''$, devient :

$$H'' = -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^N \nabla_i''^2 + \sigma^2 \left(\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{|\vec{r}_i'' - \vec{r}_j''|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N r_i''^2 \right) \quad (4.4)$$

Cela montre que pour les systèmes fortement corrélés, l'énergie potentielle augmente avec σ^2 et l'énergie cinétique tend vers Zéro. Ces considérations conduisent à la limite classique dans laquelle les électrons, ou plus généralement les particules en interaction, peuvent être traitées comme localisés et la configuration de l'état fondamental, c'est-à-dire la configuration d'équilibre à température presque nulle, peut être obtenue en minimisant l'énergie potentielle.

Finalement, l'hamiltonien du système dans le cas classique, utilisé tout au

long de cette thèse, vise à décrire les systèmes de particules chargées en interaction mutuelle et piégées par un potentiel de confinement externe à deux dimensions ($2D$) est décrit par :

$$H'' = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N U |\vec{r}_i - \vec{r}_j| + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N r_i^2 \quad (4.5)$$

4.3 Hamiltonien classique du système

Considérons un système bidimensionnel, composé de N particules chargées de positions $\{x_i, y_i\}$ (aléatoire) en interaction mutuelle et piégées par un potentiel de confinement externe de forme parabolique. Nous négligeons ici les variations des deux autres espèces : ions et électrons.

Bien qu'il soit facile d'adapter ce qui va suivre, nous supposons que toutes les particules sont identiques et que leur charge est négative.

Nous nous intéressons à l'état fondamental du système (bien entendu, il est possible d'étudier la dynamique d'un tel système. Dans ce cas, on doit rajouter la vitesse des particules).

Le modèle considéré s'appuie essentiellement sur l'interaction entre les particules, qui régit le comportement des grains. Dans ce qui suit, nous nous concentrerons sur les cas les plus significatifs ou, en d'autres termes, sur différents types d'interactions entre particules ; Donc l'Hamiltonien général classique est décrit par la somme de l'énergie d'interaction entre les particules et le potentiel de confinement où les particules sont piégées :

$$H = \sum_{i < j}^N V_{ij} |\vec{r}_i - \vec{r}_j| + \sum_{i=1}^N V^{Conf}(\vec{r}_i) \quad (4.6)$$

avec N est le nombre total de particules, $r_i = (x_i, y_j)$ désigne les coordonnées de i^{iem} particule à $2D$.

4.3.1 Potentiel de confinement

Les cristaux coulomb sont particulièrement intéressants en raison de l'interaction repulsive entre les particules et le confinement due à un potentiel externe. Ce potentiel de confinement joue à la fois le rôle de barrière de potentiel pouvant repousser les particules et celui de support assurant la forme géométrique de la structure.

D'énormes techniques expérimentales développées, permettent de piéger ou confiner des particules chargées. Plusieurs raisons viennent expliquer cela. Tous d'abord, la possibilité de confiner des particules dans un espace donné

permet des temps d'observation beaucoup plus long. D'autre part, piéger les particules nous permet d'isoler le système et de le rendre moins sensible aux perturbations extérieures. Les pièges les plus communément utilisés sont les piège de Paul [Paul 1990] et de Penning [Dehmelt 1990]. La forme la plus générale du piège de Paul est hyperbolique à trois dimensions [Paul 1990] [Takai 2004]. La géométrie de ce piège de Paul est décrite dans le cas général par une équation quadratique de la forme suivante :

$$\Phi(x, y, z) = A(\alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2) \quad (4.7)$$

Dans le contexte de ce travail, nous avons plutôt adopté à notre modèle un potentiel de confinement parabolique à deux dimensions inspiré de piège de Paul, donné par :

$$V_c = \sum_{i=0}^N \frac{1}{2} m (\omega_{0x}^2 x_i^2 + \omega_{0y}^2 y_i^2) \quad (4.8)$$

où m est la masse de la particule, x_i et y_i sont les coordonnées des particules mesurées à partir du centre de confinement, ω_{0x} et ω_{0y} sont respectivement, les fréquences de confinement dans la direction de x et y , ces fréquences sont reliées par l'expression $\omega_{0x} = \sqrt{\alpha} \omega_{0y}$, où α est l'excentricité de confinement. Lorsque $\alpha = 1$ on a $\omega_{0x} = \omega_{0y}$, le potentiel de confinement résultant est de forme parabolique, et si $\alpha \neq 1$, le potentiel de confinement est de forme elliptique.

Lorsque nous introduisons un potentiel de confinement, il sera nécessaire d'apprécier le poids de ce confinement. Ce dernier, contrôle la géométrie des configurations d'équilibre les plus stables [Bessaa 2017].

4.3.2 Forme du potentiel d'interaction

Nous décrirons trois potentiels qui nous permettront d'approcher de mieux en mieux à la compréhension du phénomène de cristallisation.

4.3.2.1 Potentiel Coulombien

L'interaction de Coulomb est l'interaction typique entre des particules chargées immergées dans un milieu polarisable et qui décrit bien le système qui contient des électrons ou les ions [Reed 1989]. Entre deux particules de charge Z_1 et Z_2 , il existe des forces de répulsion électrostatique dites coulombiennes :

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2}{4\pi\epsilon r} \quad (4.9)$$

où ε est la constante diélectrique et r la distance entre les particules de charge respectivement Z_1 et Z_2 . Cette interaction de longue portée, implique un très grand nombre de particules dans l'interaction. En général, vu la présence d'un plasma de base (ions et électrons) dans les plasmas complexes, elle n'est pas souvent utilisée. On fait appel à l'interaction coulombienne pour pouvoir comparer et voir l'influence des particules légères (ions, électrons).

4.3.2.2 Potentiel Yukawa

Interaction Yukawa (Debye-Hückel) ou interaction Coulomb écranté, est souvent rencontré dans des systèmes comme les plasmas complexes ou les suspensions colloïdales. Ce type d'interaction, en général, liée à la présence d'un fond actif, qui affaiblit les interactions coulombiennes entre les particules, c'est-à-dire, la présence de grain de poussière, va attirer les électrons ou les ions. La concentration de ces particules autour d'un grain agit comme un écran, sa forme est :

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2}{4\pi\varepsilon r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) \quad (4.10)$$

Où λ_D est le paramètre d'écrantage de Debye.

Le terme exponentiel manifeste cet effet d'écran qui réduit fortement la portée qu'aurait eu le potentiel de grain. La portée de l'écrantage dépend de l'énergie d'agitation thermique des particules et de leur densité.

4.3.2.3 Potentiel logarithmique

Permet de reproduire les structures observées dans les expériences des vortex magnétiques dans les supraconducteurs [Hess 1967] et d'hélium superfluide [Greywall 1977] [Balibar 2012], ainsi dans le système des billes métallique chargées [Jean 2002]. Ce potentiel est donnée par :

$$U(r) = -\beta \ln(r) \quad (4.11)$$

où β est la constante de couplage.

les courbes des trois potentiel est présentée dans la figure (4.1), après un re-dimensionnement dans l'échelle de distance. Ce qui permet de ramener les potentiels d'interaction au même repère, sinon la comparaison n'aurait pas de sens. On remarque le même profil pour les trois potentiels (décroissants), tel que la portée de l'interaction logarithmique se situe entre l'interaction Coulombienne et l'interaction de Yukawa. L'interaction Coulombienne est caractérisée par une interaction à longue portée, incluant toutes les particules de systèmes finis, tandis que le potentiel Yukawa, sa porté est limité a une distance maximale que l'on doit prendre en compte (longueur de Debye). Ce

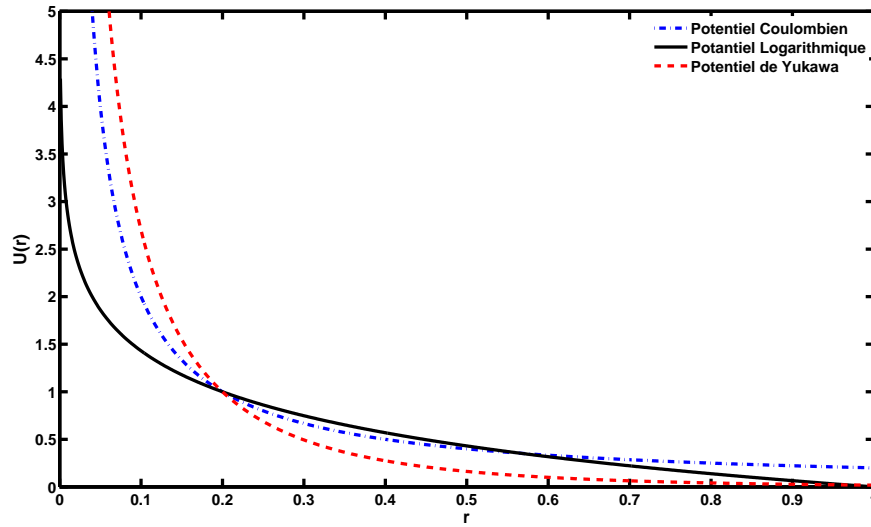


FIGURE 4.1 – Comparésent entre la porté des potentiels du système

dernier potentiel est utilisé pour une force à courte portée, limitant l'interaction entre les particules à un nombre restreint, qui se trouve dans la sphère Debye. Le rôle réel de l'effet d'écran est nettement visible sur le profil du potentiel de Yukawa, la décroissance est plus rapide.

4.4 Hamiltonien adimensionné

Nous avons vu dans les sections précédentes les étapes nécessaires pour l'obtention de la formule classique d'hamiltonien. La forme de l'Hamiltonien dans les trois cas de potentiel, que nous avons utilisés seront représentés par les expressions suivantes :

— Energie du système dans le cas du potentiel de Coulomb :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m (\omega_{0x}^2 x_i^2 + \omega_{0y}^2 y_i^2) + \sum_{i \neq j}^N \frac{(Ze)^2}{4\pi\epsilon \vec{r}_{ij}} \quad (4.12)$$

— Energie du système dans le cas du potentiel de Yukawa :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m (\omega_{0x}^2 x_i^2 + \omega_{0y}^2 y_i^2) + \sum_{i \neq j}^N \frac{(Ze)^2}{4\pi\epsilon \vec{r}_{ij}} \exp\left(-\frac{r_{ij}}{\lambda_D}\right) \quad (4.13)$$

— Energie du système dans le cas du potentiel Logarithmique :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m (\omega_{0x}^2 x_i^2 + \omega_{0y}^2 y_i^2) - \sum_{i \neq j}^N \beta \ln(\vec{r}_{ij}) \quad (4.14)$$

Afin de simplifier les expressions obtenues, on procède à une normalisation "dédimensionnement" des équations ; Pour cela, il est nécessaire de réduire le nombre de paramètres au maximum en utilisant les "bonnes" variables. Pour cela, on pose $H = E_0 \tilde{H}$ et $r = r_0 \tilde{r}$:

— Energie normalisée dans le cas du potentiel de Coulomb : après le changement de variables ci-dessus, l'expression de l'équation (4.12) devient :

$$\tilde{H} = \frac{(Ze)^2}{4\pi\epsilon E_0 r_0} \left[\sum_{i=0}^N \frac{m\omega_{0y}^2 4\pi\epsilon}{2(Ze)^2} (\alpha \tilde{x}_i^2 + \tilde{y}_i^2) r_0^3 + \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{\vec{r}_i - \vec{r}_j} \right] \quad (4.15)$$

avec : $\alpha = \frac{\omega_{0x}^2}{\omega_{0y}^2}$ qui est un paramètre de contrôle.

On pose : $\gamma = \frac{m\omega_{0y}^2}{2}$

On obtient les conditions suivantes : $r_0 = \left(\frac{(Ze)^2}{4\pi\epsilon\gamma} \right)^{\frac{1}{3}}$ et $E_0 = \gamma r_0^2$, représente l'énergie d'une seule particule. Ainsi l'hamiltonien normalisé s'écrit :

$$\tilde{H} = \sum_{i=0}^N (\alpha \tilde{x}_i^2 + \tilde{y}_i^2) + \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{\vec{r}_i - \vec{r}_j} \quad (4.16)$$

— Energie normalisée dans le cas du potentiel de Yukawa : On suivra les mêmes procédures de normalisation, on obtiendra :

$$\tilde{H} = \sum_{i=0}^N (\alpha \tilde{x}_i^2 + \tilde{y}_i^2) + \sum_{i \neq j}^N \frac{\exp(-k|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (4.17)$$

avec : $k = \frac{r_0}{\lambda_D}$, la constante d'écrantage.

La normalisation est particulièrement intéressante car elle donne au modèle une généralité. En effet, les caractéristiques spécifiques du système (c'est-à-dire la masse des particules m , la charge Z , la constante diélectrique ϵ et la fréquence du potentiel de confinement parabolique ω_0 ne sont plus explicitement présentes.

Remarquons que pour l'interaction de Coulomb l'énergie (4.16) dépend uniquement du nombre de particules N , tandis que pour les interactions Yukawa l'énergie (4.17) dépend de N et k , qui est un paramètre externe. Dans la limite $k \rightarrow 0$ le potentiel Yukawa se réduit au potentiel Coulomb pur, tandis que dans la limite opposée $k \rightarrow \infty$ il donne une interaction de particules presque libre.

- Energie normalisée dans le cas du potentiel Logarithmique : Dans ce cas, on a :

$$H = \sum_{i=0}^N (\alpha x_i^2 + y_i^2) - \sum_{i \neq j}^N \ln(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \quad (4.18)$$

les unités de l'énergie E_0 et de la distance r_0 , après le calcul (pour le cas Logarithmique) prennent respectivement les expressions :

$$r_0 = \beta^{1/2} (m\omega_{0y}^2/2)^{-1/2}$$

et

$$E_0 = \beta$$

4.5 Approche numérique

La stabilité de la structure d'un réseau de particules ou une molécule est déterminée par les interactions interparticules et intramoléculaires et les interactions avec le milieu extérieur. Pour faciliter les calculs, on considère généralement que le terme variable de cette énergie potentielle dépend de l'arrangement de ses particules. Cette énergie potentielle représente le lien entre l'énergie du système et sa géométrie. Le principe général d'une minimisation est de modifier la géométrie du système (par déplacement des particules par exemple) afin que ce dernier puisse se retrouver dans un puit de potentiel.

La recherche des structures stables consiste à déterminer les minima de l'énergie globale d'interaction. Cette énergie peut être calculée par des méthodes classiques, quantiques ou semi-empiriques généralement longues et onéreuses. En mécanique statistique il y a deux grandes méthodes de simulation numérique : la dynamique moléculaire [Hansen 1986] et la méthode Metropolis-Monte Carlo [Gould 1988]. Chacune de ces méthodes sert à obtenir des résultats "quasi-expérimentaux" à partir d'un modèle théorique. La dynamique moléculaire consiste à placer un certain nombre de particules dans un volume donné et, par la suite, de suivre l'évolution des particules dans le temps. Les particules peuvent être des molécules, des ions ou des atomes qui interagissent entre elles selon des forces prédéterminées par un modèle théorique, généralement selon les équations de mouvement de Newton. La méthode Metropolis-Monte Carlo consiste aussi à placer des particules dans un volume donné et contrairement à la dynamique moléculaire, à effectuer aléatoirement des changements aux particules. Les changements aléatoires sont retenus ou rejetés selon une probabilité, où les changements d'énergie sont calculés selon un modèle théorique. La méthode Monte Carlo ne comporte aucune échelle de temps et ne fait que générer une série de configurations possibles selon

une chaîne markovienne pour un système étudié. Contrairement à la simulation par dynamique moléculaire pour laquelle des logiciels commerciaux sont disponibles, la personne désirant effectuer des simulations Monte Carlo doit programmer elle-même les programmes nécessaires pour mener à terme les simulations désirées, ce qui a été fait pour les travaux de cette thèse.

Dans notre cas, pour trouver les structures de clusters les plus stables, il est essentiel de minimiser l'énergie normalisée totale du système, calculée dans les équations (4.16, 4.17 et 4.18), en utilisant la méthode de Monte Carlo classique.

4.5.1 Méthode de simulation Monte Carlo

La méthode Monte Carlo est utilisée pour résoudre numériquement des problèmes mathématiques qui sont trop complexes pour être résolus par un traitement analytique. Ces problèmes peuvent être divisés en deux classes : les problèmes probabilistes, qui concernent cette présente thèse et les problèmes déterministes. Dans la première classe, le but est de simuler directement le processus aléatoire au problème, comme les fluctuations de la charge des particules. Pour ce qui est des problèmes déterministes, un exemple simple serait la résolution d'intégrales multidimensionnelles. Dans ce cas, le problème original n'a aucun rapport avec un processus aléatoire mais étant donné l'ampleur du problème à résoudre, les intégrales sont évaluées sur un échantillon aléatoire plutôt que sur tous les points.

Cette méthode de simulation numérique, dont les fondements s'appuient sur la mécanique statistique, permet de relier certains paramètres microscopiques et des grandeurs macroscopiques mesurables par l'expérience.

Il s'agit d'établir une suite de configurations de l'ensemble (appelé chaîne de Markov), et une base statistique sur laquelle on pourra effectuer des moyennes. La réussite dépend de la rigueur employée pour construire un ensemble aussi représentatif que possible de l'espace complet des configurations. L'une des méthodes pour choisir une des configurations dans l'espace des phases, est l'algorithme de Metropolis (1953).

4.5.2 Algorithme de Metropolis

Cet algorithme consiste à générer, à partir d'une configuration de départ, de nouvelles configurations par la modification aléatoire des coordonnées d'une ou plusieurs particules. La nouvelle configuration a_j ainsi formée à partir de l'ancienne a_i est acceptée selon la condition :

$$P_{Boltzmann}(a_i)P_{acc}(a_i \rightarrow a_j) = P_{Boltzmann}(a_j)P_{acc}(a_j \rightarrow a_i) \quad (4.19)$$

où $P_{acc}(a_i \rightarrow a_j)$ est la probabilité d'accepter le passage de a_i à a_j .

La condition (4.19) revient à dire que la réversibilité microscopique du système est respectée. En effet, le système qui passe de l'état i à l'état j peut revenir à tout moment à l'état i , à condition que les lois des probabilités soient respectées. Metropolis donne une méthode pour relier la probabilité de transition d'un état à un autre du système à leur densité de probabilité au sein de l'ensemble [Frenkel 1996] [Allen 1986].

Pour satisfaire à la condition (4.19), l'algorithme de Metropolis propose de prendre

$$P_{acc}(a_i \rightarrow a_j) = \min \left(1, \frac{P_{Boltzmann}(a_i)}{P_{Boltzmann}(a_j)} \right) \quad (4.20)$$

Pratiquement, on compare le rapport des probabilités de Boltzmann ci-dessus à un nombre aléatoire compris entre 0 et 1. Par conséquent, le déplacement de Monte Carlo est accepté uniquement si ce nombre est plus petit que le rapport considéré.

Dans la méthode de Monte Carlo, on explore uniquement l'espace des configurations, donc seulement une partie de l'espace des phases. En effet, l'espace des phases peut être séparé en deux sous-espaces, le premier dont les dimensions représentent les positions (q), et le deuxième dont les dimensions sont les quantités de mouvement (p). Ce deuxième sous-espace qui représente la partie cinétique du système n'intervient pas dans les probabilités d'acceptation. Par conséquent, lorsqu'on utilise la méthode de Monte Carlo, on effectue uniquement le calcul de l'énergie potentielle.

Finalement, il convient de relever que $P_{Boltzmann}$ varie en fonction de l'ensemble dans lequel on étudie le système. Dans notre cas, l'ensemble correspondant est l'ensemble canonique.

4.5.3 Ensemble canonique

La plupart des systèmes physiques ne sont pas isolés et échangent de l'énergie avec leur environnement. De tels systèmes sont généralement petits lorsqu'ils sont comparés à leur environnement, il est donc supposé qu'un changement d'énergie du petit système n'aura pas d'effet significatif sur la température de l'environnement. L'environnement agit dans un tel cas, comme un réservoir thermique ou bain thermique et possède une température absolue fixe égale à T . Si un petit système, ayant toutefois des dimensions macroscopiques, est mis en contact thermique avec un réservoir, le système atteindra un équilibre thermique en échangeant de l'énergie avec le réservoir jusqu'à ce qu'il ait atteint la température du réservoir.

Un ensemble canonique est une collection de systèmes caractérisés par les valeurs de N , V et T , où N est le nombre de particules, V le volume et T la

température.

4.5.4 Détail d'une simulation

Pour ce type de simulation, une séquence de configurations des particules générée par des changements successifs aléatoires de position de particules poussiéreuses. Toutes les configurations ne sont pas acceptées. La décision d'accepter ou de rejeter une configuration est prise de manière à ce que l'espace des configurations soit échantillonné selon la densité de probabilité de Boltzmann définie par :

$$P = \exp\left(-\frac{E_N}{kT}\right) \quad (4.21)$$

où k est la constante de Boltzmann et E l'énergie potentielle du système de N particules.

Partant d'une configuration initiale donnée, la méthode consiste à changer pas à pas les coordonnées des N particules. On procède par essais, en produisant de petits déplacements de particule par particule obtenus en ajoutant à leurs coordonnées des petits incréments choisis au hasard.

Ayant créé un déplacement élémentaire de la configuration 1 vers la configuration 2, on calcule la variation d'énergie $\Delta E_N = E_N(2) - E_N(1)$. La différence d'énergie ΔE_N est ensuite utilisée comme critère d'acceptation ou de rejet de la nouvelle configuration. Si le déplacement ne modifie pas l'énergie ou la diminue, il est accepté et on recommence l'opération à partir de cette nouvelle configuration. Si l'énergie augmente, la nouvelle configuration n'est acceptée que dans une proportion de cas déterminée par le rapport des probabilités P_1 et P_2 , soit :

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{\exp(-\beta E_N^2)}{\exp(-\beta E_N^1)} = \exp(-\beta \Delta E_N) \quad (4.22)$$

Pour obtenir cette proportion dans les déplacements du deuxième type (augmentation d'énergie), on choisit au hasard un nombre R dans une distribution aléatoire de valeurs sur l'intervalle $(0, 1)$ et les nouvelles configurations sont acceptées que si $\exp(E/kT) > R$. Dans le cas contraire, on retourne à la configuration de départ, puis on poursuit l'échantillonnage avec un nouvel essai.

En résumé, on crée ainsi une chaîne de configurations de type Markovien (le résultat de chaque essai ne dépend pas du résultat de l'essai précédent) avec une probabilité de chaque configuration toujours proportionnelle à son facteur de Boltzmann. En effet si $E(1) < E(2)$ le transfert de la configuration 1 vers la configuration 2 se fait toujours avec une probabilité variable, tandis que le transfert de 2 vers 1 se fait toujours avec une probabilité égale à 1.

4.5.5 Optimisation globale

Un des intérêts majeurs de la physique de solide est la recherche de la structure de plus basse énergie afin de déterminer la configuration la plus stable. En effet, les configurations établies avec notre méthode de simulation Monte Carlo peut être correspondent a des minima locaux ou globaux. Autrement dit, la probabilité d'existence des différents configurations d'un même systèmes de nombre de particules est directement reliée à son énergie. Donc toute la difficulté dans une simulation sera alors de trouver le minima globaux. La figure (4.2) illustre ce problème.

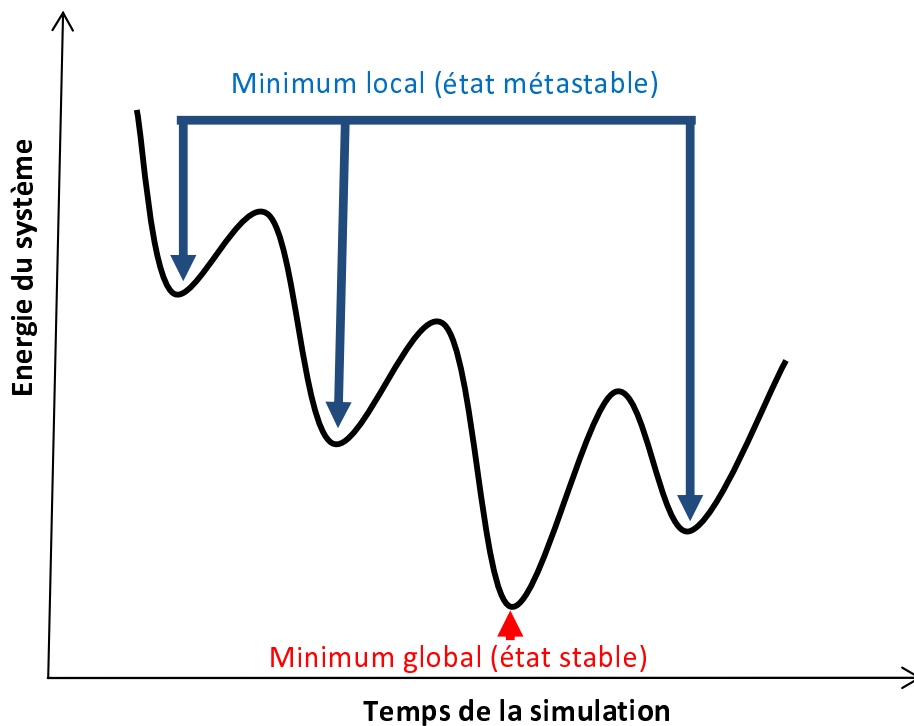


FIGURE 4.2 – Energie du système présentant des minimum locaux et un minimum global

En effet, pour ne pas tombé dans un minimum locale, une méthode d'optimisation d'énergie est combinée avec la méthode de MC afin d'assurer une convergence rapide et obtenir les états stables (minimum global). Malgré les avantages et les inconvénients pour chaque méthode de minimisation, la façon de procéder est en général la même. Lors de mes travaux de thèses, les minimisations d'énergie ont été effectuées en combinant la méthode de Monté Carlo avec l'algorithme d'optimisation Newton Raphson.

4.5.6 La méthode Newton-Raphson

Une amélioration supplémentaire de la convergence peut encore être obtenue en ayant recours à une approximation quadratique de l'Hamiltonien H , obtenue par développement en série de Taylor [Schweigert 1995]. La méthode consiste à chercher à chaque pas le minimum du développement à l'ordre 2 de l'Hamiltonien H . Cette méthode dite de "Newton-Raphson", a recours aux dérivées secondes. Maintenant on fait plutôt appel à cette technique d'optimisation. Elle évalue les dérivées secondes de l'énergie du système par rapport aux paramètres géométriques sous la forme quadratique suivante :

$$H = H(r_{\alpha,i}^n) - \sum_i \sum_{\alpha} H_{\alpha,i}(r_{\alpha,i} - r_{\alpha,i}^n) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta} H_{\alpha\beta,ij}(r_{\alpha,i} - r_{\alpha,i}^n)(r_{\beta,j} - r_{\beta,j}^n) \quad (4.23)$$

Où $\alpha = x, y$ les coordonnées du système, $i = 1 \dots, N$ est le nombre de particules, tel que n est l'étape ou l'incrément de la simulation.

avec $H_{\alpha,i} = -\frac{\partial H}{\partial r_{\alpha,i}}$ qui signifie une force et $H_{\alpha\beta,ij} = \frac{\partial^2 H}{\partial r_{\alpha,i} \partial r_{\beta,j}}$ désigne la matrice dynamique.

En résumé, les étapes du déroulement de notre programme sont présentées dans l'organigramme (voir page 59) :

4.6 Résultats et discussions

En premier lieu, nous avons présenté les résultats de notre simulation pour des systèmes confinés circulairement ($\alpha = 1$), avec des charges constantes et à une température très basse ($T \simeq 0$), interagissant par le biais du potentiel de Yukawa, Coulombien ou Logarithmique, constitués d'un petit nombre de grains ($N \leq 30$). Cette limitation est due au temps de calcul, qui augmente lorsque on augmente le nombre de particule, ainsi une augmentation du nombre de particules poussiéreuses induit une augmentation du nombre de minima locaux [Bedanov 1994] [Kong 2002].

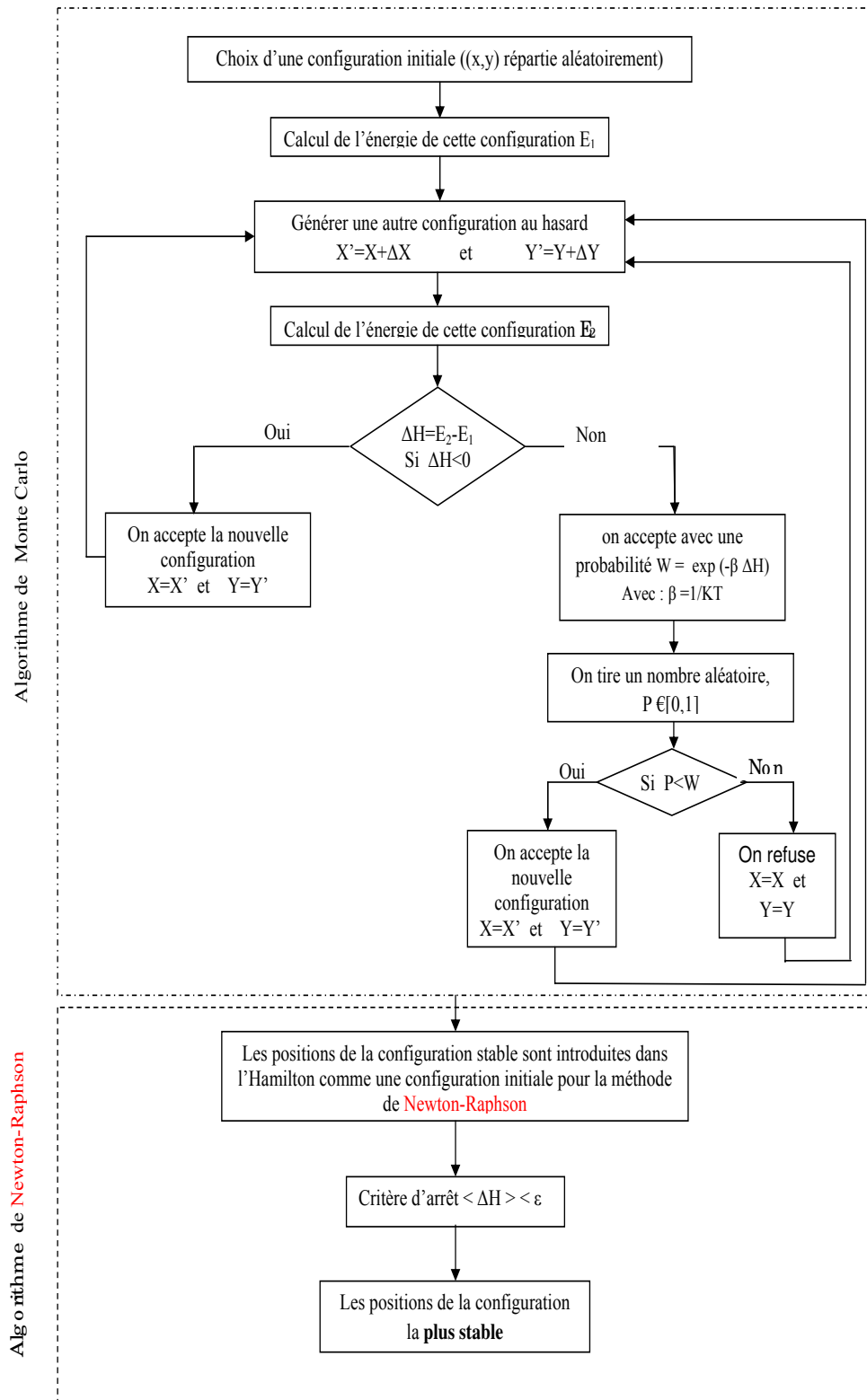


FIGURE 4.3 – Organigramme de la méthode de Monte Carlo.

4.6.1 Effet de Potentiel sur les configurations les plus stables

Le potentiel d'interaction entre les particules de poussière s'est avérée jouer un rôle crucial sur la configuration de l'état fondamental et les caractéristiques de transition de phase. Un problème majeur du cristal de poussière est que le potentiel d'interaction entre particules de poussière n'est pas connu avec précision. Connaissant l'interaction interparticules, il sera alors possible de déterminer les configurations correspondant à un état d'équilibre. Cette opportunité présente un intérêt important, pour la comparaison des états d'équilibre calculés pour de tels systèmes avec les observations expérimentales ainsi de confirmer la validité du calcul de l'interaction entre les grains de poussières. Si l'on considère de grands cristaux, la configuration correspond à l'énergie minimale est, pour la plupart des interactions, un réseau hexagonal [Fisher 1979]. La configuration d'équilibre renseigne donc peu sur la nature de l'interaction. D'autre part Melzer et al ont déduire les caractéristiques de l'interaction entre ces particules ont déterminant expérimentalement les modes de vibrations de petits ensembles de poussières chargées confinées [Melzer 2001] [Melzer 2003]. C'est pour cela, nous faisons intervenir un faible nombre de particules, qui montrent qu'en effet les niveaux d'énergie des configurations d'équilibre sont très sensibles à l'interaction interparticules.

Les configurations obtenues pour un nombre de particules allant de 5 à 30, sont présentées sur les figures (4.4 potentiel Colombien), (4.5 potentiel Yukawa) et (4.6 potentiel Logarithmique).

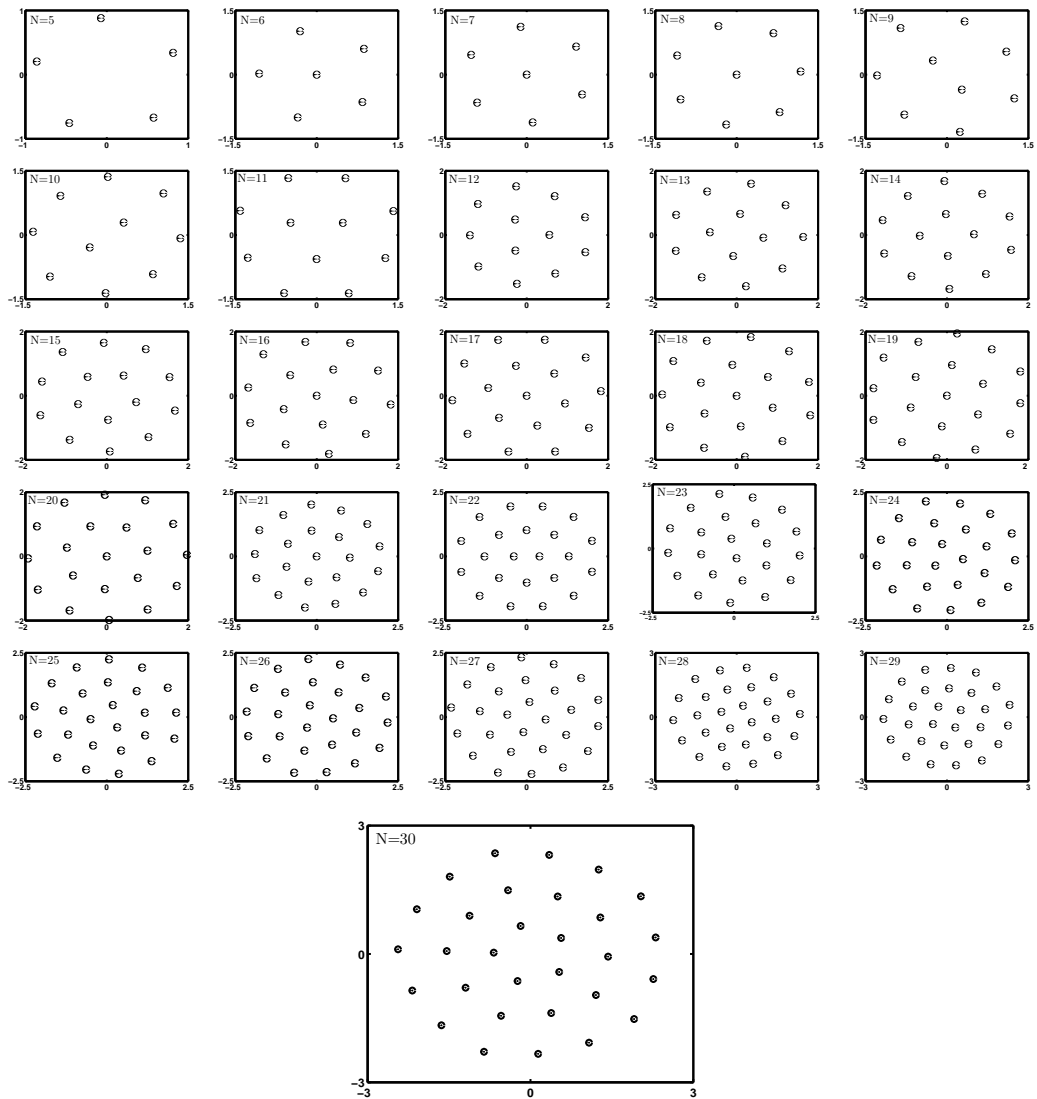


FIGURE 4.4 – Etats fondamentaux de $N=5$ à 30 particules confinées circulairement avec le potentiel Coulombien

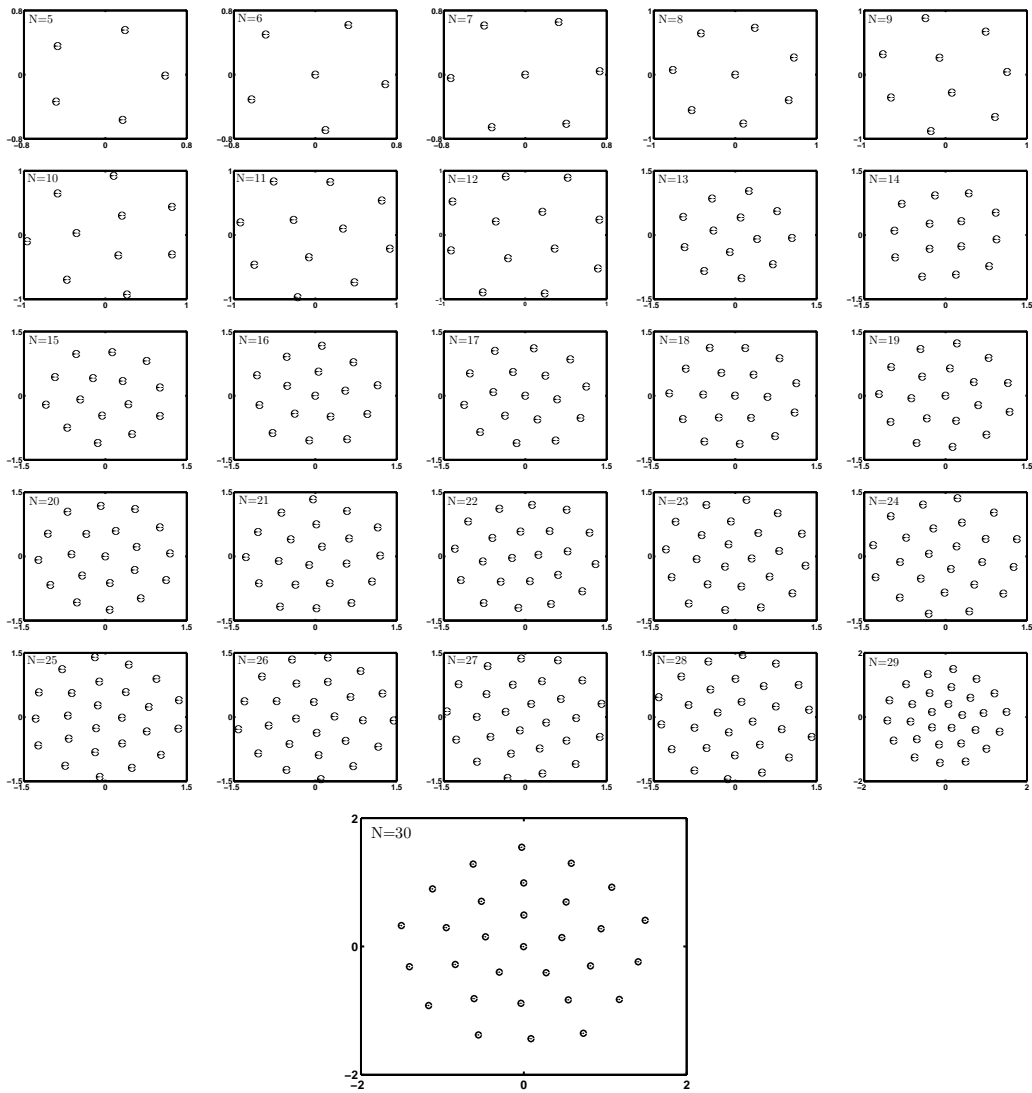


FIGURE 4.5 – Etats fondamentaux de $N=5$ à 30 particules confinées circulairement avec le potentiel Yukawa

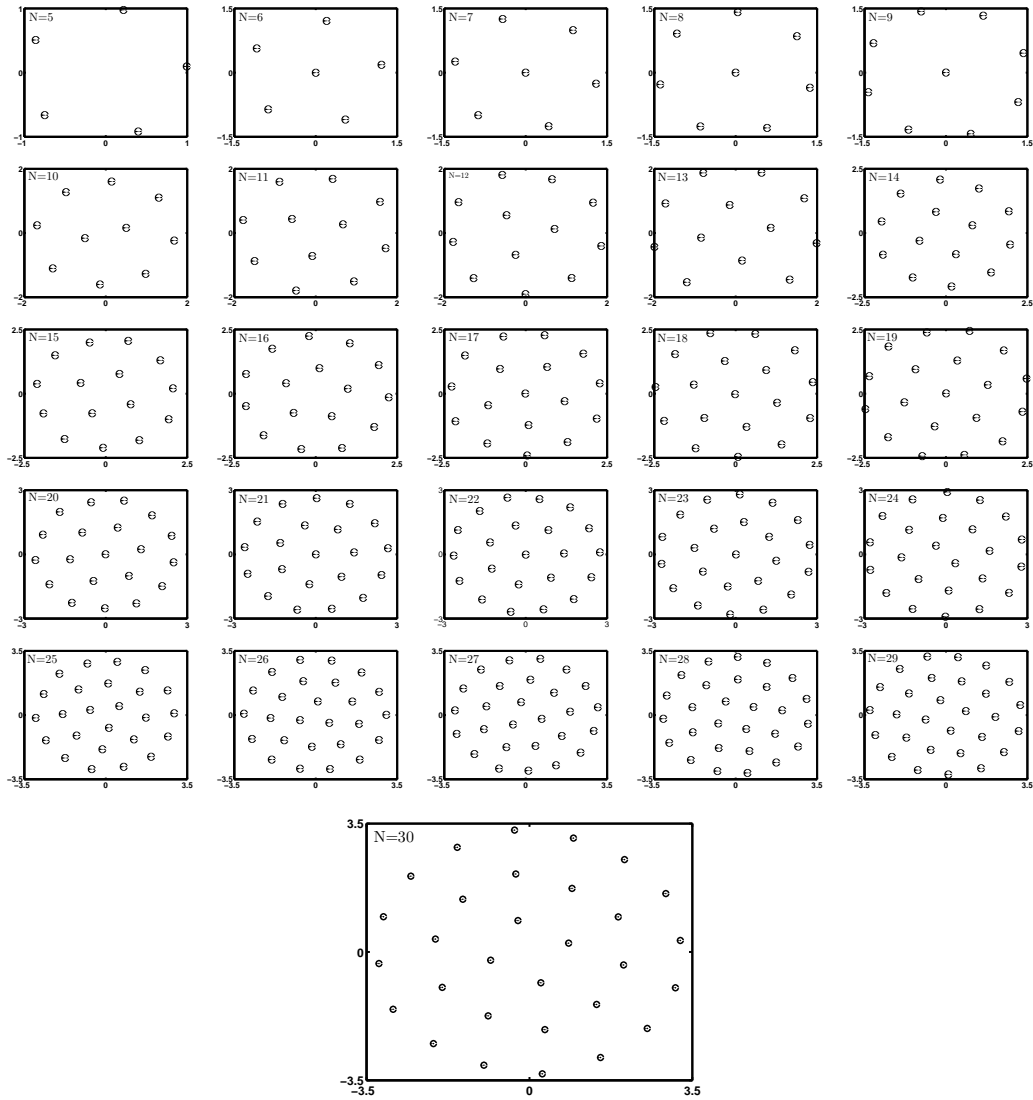


FIGURE 4.6 – Etats fondamentaux de $N=5$ à 30 particules confinées circulairement avec le potentiel Logarithmique

Les configurations d'équilibre peuvent être décrites comme une succession de couches de grains, qui seront désignées par la notation $(N_0, N_1, N_2, \dots, N_i)$, où N_i est le nombre de grains situés sur la i -ème couche, comptée à partir du centre. Cette structure en couches se retrouve quelle que soit l'interaction ; elle résulte du compromis réalisé entre la symétrie circulaire due au confinement et le potentiel d'interaction de l'ensemble des particules qui s'organiseront en un réseau symétrique [Djebli 2010].

Généralement dans les trois cas, les configurations sont définies essentiellement par le nombre de particules sur chacune des couches. Pour $N = 5$ particules,

l'état stable consiste en une seule couronne. Entre $N = 6$ et $N = 15$ les configurations se placent dans deux couches, de $N = 16$ Jusqu'à $N = 29$, les configurations présentent trois couronnes bien identifiées. Pour 30 particules, les configurations présentent 4 couronnes.

À la différence du modèle atomique dans lequel les nouveaux électrons insérés sont présents seulement sur la couche externe, les particules poussiéreuses peuvent occuper n'importe quel couche si elle n'est pas saturée. Par exemple pour $N=18$ (voir tableau 4.1), on a la configuration suivante (1, 6, 11), l'addition d'une nouvelle particule à la configuration précédente c'est-à-dire $N=19$, la configuration devient (1, 7, 11). On remarque bien que la particule est insérée sur la couche du milieu (interne), comme on peut conclure qu'une nouvelle couche peut également être produite malgré que toutes les couches existantes ne soient pas pleines. Les règles de remplissage des couches sont les suivantes : la première couche en comptant du centre ne dépasse pas généralement cinq particules, la deuxième couche ne dépasse jamais douze particules, la troisième couche ne dépasse jamais seize particules.

Ainsi le résultat bien connu a été retrouvé. Les structures fortement couplées s'organisent dans des couches qui dépendent du nombre de particules du système. Les configurations obtenues représentent l'équivalent d'un tableau de Mendeleïev [Bedanov 1994].

4.6.2 Etude comparative

Afin de valider complètement l'ensemble de nos calculs, notamment celui de la nature de l'interaction inter-particules, nous allons comparer les configurations obtenues de l'état fondamental pour les systèmes de 5 à 30 particules avec d'autres configurations obtenues numériquement, basées sur une interaction logarithmique [Lai 1999], une interaction coulombienne écrantée [Lai 1999], une interaction coulombienne [Bedanov 1994] [Kong 2002], avec des résultats expérimentaux [Lai 1999] [Galatola 2006], L'ensemble de ces configurations est reporté dans le tableau 4.1.

Nombre de particules	résultats de notre simulation [Djebli 2010]			résultats des autres simulations			résultat expérimental (c)
	<i>Potentiel Coulombien</i>	<i>Potentiel Yukawa</i>	<i>Potentiel Logarithmique</i>	<i>Potentiel Coulombien (a)</i>	<i>Potentiel Yukawa (b)</i>	<i>Potentiel Logarithmique (c)</i>	
5	5	5	5	5	5	5	5
6	1, 5	1, 5	1, 5	1, 5	1, 5	1, 5	1, 5
7	1, 6	1,6	1, 6	1, 6	1, 6	1, 6	1, 6
8	1, 7	1, 7	1, 7	1, 7	1, 7	1, 7	1, 7
9	2, 7	2, 7	1, 8	2, 7	2, 7	1, 8	1, 8
10	2, 8	3, 7	2, 8	2, 8	2, 8	2, 8	2, 8
11	3, 8	3, 8	3, 8	3, 8	3, 8	3, 8	3, 8
12	3, 9	4, 8	3, 9	3, 9	3, 9	3, 9	3, 9
13	4, 9	4, 9	4, 9	4, 9	4, 9	4, 9	4, 9
14	4, 10	4, 10	4, 10	4, 10	4, 10	4, 10	4, 10
15	5, 10	5, 10	4, 11	5, 10	5, 10	4, 11	4, 11
16	1, 5, 10	1, 5, 10	5, 11	1, 5, 10	1, 5, 10	5, 11	5, 11
17	1, 6, 10	1, 6, 10	1, 5, 11	1, 6, 10	1, 6, 10	1, 5, 11	1, 5, 11
18	1, 6, 11	1, 6, 11	1, 6, 11	1, 6, 11	1, 6, 11	1, 6, 11	1, 6, 11
19	1, 6, 12	1, 7, 11	1, 6, 12	1, 6, 12	1, 6, 12	1, 6, 12	1, 6, 12
20	1, 7, 12	1, 7, 12	1, 6, 13	1, 7, 12	1, 7, 12	1, 7, 12	1, 6, 13
21	1, 7, 13	2, 7, 12	1, 7, 13	1, 7, 13	2, 7, 12	1, 7, 13	1, 7, 13
22	2, 8, 12	2, 8, 12	1, 7, 14	2, 8, 12	2, 8, 12	1, 7, 14	1, 7, 14
23	2, 8, 13	3, 8, 12	1, 8, 14	2, 8, 13	3, 8, 12	1, 8, 14	2, 8, 13
24	3, 8, 13	3, 9, 12	2, 8, 14	3, 8, 13	3, 8, 13	2, 8, 14	2, 8, 14
25	3, 9, 13	3, 9, 13	3, 8, 14	3, 9, 13	3, 9, 13	3, 8, 14	3, 8, 14
26	3, 9, 14	4, 9, 13	3, 9, 14	3, 9, 14	4, 9, 13	3, 9, 14	3, 9, 14
27	4, 9, 14	4, 10, 13	3, 9, 15	4, 9, 14	4, 9, 14	3, 9, 15	3, 9, 15
28	4, 10, 14	4, 10, 14	4, 10, 14	4, 10, 14	4, 10, 14	4, 9, 15	3, 9, 16
29	4, 10, 15	5, 10, 14	4, 9, 16	5, 10, 14	5, 10, 14	5, 10, 14	4, 9, 16
30	5, 10, 15	1, 5, 10, 14	4, 10, 16	5, 10, 15	5, 10, 15	4, 10, 15	4, 9, 17

TABLE 4.1 – Configurations de l'état fondamental pour des systèmes de 5 à 30 particules confinées circulairement. Les trois premières colonnes : résultats de notre simulation, les trois suivantes : résultats d'autres simulations (a) [Bedanov 1994], (b) [Lai 1999] (c) [Lai 1999] et la dernière colonne : observations expérimentales (c) [Galatola 2006]

Avant de détailler cette comparaison, il convient cependant de préciser, que les conditions expérimentales ne sont pas exactement celles des simulations. Notons que tous les résultats obtenus ont été réalisés avec un profil de confinement parabolique. Ce qui nous intéresse dans notre comparaison est la position relative des particules.

Tout d'abord, Nous examinons l'effet éventuel de la forme du potentiel de confinement. En général la forme circulaire enveloppe toutes les configurations et le nombre de particules occupées par chaque couronne étant fixe. Par ailleurs, une analyse plus fine de certaines couches, montre que l'on peut y distinguer en réalité des différences. Par exemple pour la configuration $N = 16$ avec le potentiel Logarithmique, la configuration la plus stable est présentée en deux couches, cinq particules au centre, et onze particules sur la couche externe, contrairement aux configurations avec le potentiel Coulombien et Yukawa qui présentent trois couches. Parfois on trouve que la configuration présente le même nombre de couches, mais la distribution des particules sur ces couches diffère d'un potentiel à un autre par exemple les configurations correspondent aux cas $N = 9, 10, 12, 15, \dots$

Dans l'étude de Lai *et al* sur l'effet du potentiel Coulombien écranté (Yukawa), les auteurs ont fait varier la longueur d'écrantage et ont montré que les configurations ne sont pas modifiées pour une longueur d'écran restant dans les ordres de grandeur de la distance entre particules, de plus, lorsque cette longueur diminue fortement, l'importance de la force de confinement grandit, les particules se rapprochent du centre [Lai 1999].

Fluctuation de la charge et transition de phase

Sommaire

5.1	Modèle physique	68
5.1.1	Description du modèle	68
5.2	Effet de l'amplitude de fluctuation de la charge sur la transition de phase	74
5.2.1	Description d'une nouvelle expression de la fluctuation de la charge	74
5.2.2	Etude de la trajectoire des particules	76
5.3	Transition ordre-désordre (la fusion)	79

La charge d'un grain de poussière immergé dans le plasma, s'établit par le biais de divers processus. L'attachement des ions et des électrons à la surface du grain conduit ce dernier à se charger négativement. Ceci est dû au fait que l'inertie des électrons est très petite devant celle des ions. Ce processus, à savoir la capture de particules, est le plus rencontré dans les plasmas poussiéreux de laboratoire. En outre, le grain peut être chargé positivement par l'émission secondaire et la photoémission qui sont les plus dominants dans les plasmas de l'espace.

Dans les chapitres précédents, la charge des grains de poussières à été prise comme constante. En réalité la charge des grains n'est pas constante. Toute perturbation des paramètres du plasma, affecte inexorablement les courants de charge et donc la charge du grain.

Dans ce chapitre, on donne une description détaillée du modèle employé pour les simulations numériques en ajoutant l'effet de fluctuation de la charge à notre étude. On pose en premier lieu le modèle développé par Khrapkh et al [Djebli 2010] qu'on utilise pour décrire le comportement des configurations les plus stables. On deuxième étape nous proposons une nouvelle expression de la fluctuation de la charge pour étudier les transitions de phase [Issaad 2019].

5.1 Modèle physique

On considère les mêmes conditions que le modèle précédent (*Chapitre 4*§4.1). La charge du grain n'est pas constante, elle fluctue. Cette fluctuation se manifeste dans le temps et dans l'espace. Elle est conséquente à l'instabilité des courants de charge (électrons et ions) ainsi qu'à d'autres facteurs. Cette variation de la charge qui est autour de sa valeur moyenne, est donnée par [Djebli 2010] :

$$Z_i^l = \langle Z_0 \rangle + \Delta Z_i^l \quad (5.1)$$

où Z_i^l est la charge de la i ème particule à l'instant l , $\langle Z_0 \rangle$ est la charge moyenne du grain (charge à l'équilibre), et ΔZ_i^l est l'amplitude de la fluctuation de la charge, tel que $|\langle Z_0 \rangle| \gg \Delta Z_i^l$. L'expression d'Hamiltonien d'équations (4.16, 4.17) et l'Eq (4.18) sont modifiée comme suit :

— Energie normalisée dans le cas du potentiel de Coulomb :

$$H = \sum_{i=0}^N (\alpha x_i^2 + y_i^2) + \sum_{i \neq j}^N \left(1 + \frac{\Delta Z_i^l}{Z_0}\right) \left(1 + \frac{\Delta Z_j^l}{Z_0}\right) \frac{1}{|\tilde{r}_i - \tilde{r}_j|} \quad (5.2)$$

— Energie normalisée dans le cas du potentiel de Yukawa :

$$H = \sum_{i=0}^N (\alpha x_i^2 + y_i^2) + \sum_{i \neq j}^N \left(1 + \frac{\Delta Z_i^l}{Z_0}\right) \left(1 + \frac{\Delta Z_j^l}{Z_0}\right) \frac{\exp(-k|\tilde{r}_i - \tilde{r}_j|)}{|\tilde{r}_i - \tilde{r}_j|} \quad (5.3)$$

— Energie normalisée dans le cas du potentiel Logarithmique :

$$H = \sum_{i=0}^N (\alpha x_i^2 + y_i^2) - \sum_{i \neq j}^N \left(1 + \frac{\Delta Z_i^l}{Z_0}\right) \left(1 + \frac{\Delta Z_j^l}{Z_0}\right) \ln(|\tilde{r}_i - \tilde{r}_j|) \quad (5.4)$$

5.1.1 Description du modèle

Dans cette section on donne une description détaillée du modèle développé par Khrapak et al [Khrapak 1999] [Djebli 2010] qu'on utilise pour décrire le comportement des configurations les plus stables employé dans la simulation numérique de Monte Carlo. En fait, On suppose que les grains poussiéreux chargés, ont un rayon $a \ll \lambda_D \ll \lambda_{mfp}$, ou λ_D est la longueur d'écrantage, et λ_{mfp} est le libre parcours moyen, cette condition nous permet d'employer la théorie d'orbite limite (OML) et d'écrire les courants sous la forme suivante [Shukla 2002] :

$$I^- = I_e = -e\pi a^2 n_e \left(\frac{8T_e}{\pi m_e} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{ze^2}{aT_e}\right) \quad (5.5)$$

$$I^+ = I_i = e\pi a^2 n_i \left(\frac{8T_i}{\pi m_i} \right)^{1/2} \left(1 - \frac{ze^2}{aT_i}\right) \quad (5.6)$$

En réalité les courants de chargement sont de nature discrète, c-à-d que les électrons et les ions qui sont absorbés par la surface d'un grain de poussière arrivent aléatoirement pendant des intervalles de temps discrets. Pour cette raison la charge d'une particule montre des fluctuations stochastiques. L'équation dynamique de la charge est donnée par :

$$\frac{dz}{dt} = I = \sum I^+ + I^- \quad (5.7)$$

En raison de la fluctuation de charge, la charge d'équilibre peut être déterminée en égalisant le membre droit de l'équation (5.7) à zéro. La charge d'un grain de poussière sera une variable dépendant du temps, $z(t) = \langle z_0 \rangle + \delta z(t)$, avec : $|\langle z_0 \rangle| \gg |\delta z(t)|$, le développement limité en premier ordre de l'équation (5.7) donne :

$$\frac{d\delta z}{dt} = \left[\frac{\partial I}{\partial z} \right]_{z=\langle z \rangle} \delta z = -\beta \delta z \quad (5.8)$$

où $\beta = \frac{1}{\tau_c}$, tel que τ_c est la période caractéristique de fluctuation de la charge, qu'on détermine à l'équilibre ($I=0$). On a :

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{\partial I}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} [I^+ - I^-] \\ &= \pi a^2 n_i \left(\frac{8T_i}{\pi m_i} \right)^{1/2} \tau + \pi a^2 n_e \left(\frac{8T_e}{\pi m_e} \right)^{1/2} \exp(Z) \end{aligned} \quad (5.9)$$

avec :

$$\tau = \frac{T_e}{T_i}$$

et

$$Z = -\frac{ze^2}{aT_e}$$

à l'équilibre :

$$I_e = I_i \quad (5.10)$$

$$\beta = \pi a^2 n_i \left(\frac{8T_i}{\pi m_i} \right)^{1/2} \tau + \pi a^2 n_i \left(\frac{8T_i}{\pi m_i} \right)^{1/2} [1 + \tau Z]$$

d'où :

$$\beta = \pi a^2 n_i \left(\frac{8T_i}{\pi m_i} \right)^{1/2} [1 + \tau Z + \tau] \quad (5.11)$$

L'idée de Khrapak *et al* [Khrapak 1999], pour inclure l'effet de la nature discrète de la charge, est d'introduire dans l'équation (5.8), un terme responsable de la fluctuation, l'équation (5.8) devient :

$$\frac{d\delta z}{dt} + \beta\delta z = F(t) \quad (5.12)$$

où $F(t)$ est une force fluctuante stochastique donnée par :

$$F(t) = \sum_j \delta(t - t_j)(\pm 1)_j \quad (5.13)$$

Ce terme correspond à l'absorption des électrons ou des ions ou à l'émission des électrons pour un temps aléatoire t_j . Le signe (+) signifie que le grain se charge positivement, par émission d'un électron ou absorption d'un ion et pour le signe (-) : que le grain se charge négativement par l'absorption d'un électron. Si on considère que les grains n'ont aucune direction privilégiée dans leur déplacement, on a $\forall t, \langle F(t) \rangle = 0$, où $\langle \rangle$ désigne une moyenne d'ensemble. Notons que l'équation (5.12) est équivalente à l'équation du mouvement de Langevin d'une particule Brownienne à une dimension, où δz est équivalent à la vitesse de la particule, et $F(t)$ est équivalent à la force Brownienne (force aléatoire). cette force fluctuante stochastique satisfait la relation suivante :

$$\langle F(t)F(t') \rangle = \frac{1}{t_0} = \sum I^+ + I^- = 2I^+ = 2I^-$$

le terme $\frac{1}{t_0}$ caractérise la fréquence d'émission et d'absorption des particules du plasma. La solution de cette équation peut être écrite sous la forme :

$$\delta z(t) = \delta z(0) \exp(-\beta t) + \exp(-\beta t) \int_0^t F(\theta) \exp(\beta \theta) d\theta \quad (5.14)$$

où $\delta z(0)$ est la perturbation initiale de la charge. Pour des raisons de simplification, Khrapak *et al* ont supposé que $\delta z(0) = 0$, c'est-à-dire que la charge à $t = 0$ est constante.

La valeur moyenne de la fluctuation de la charge entre deux instants différents est appelée la fonction temporelle d'autocorrelation, donnée par :

$$\langle \delta z(t)\delta z(t') \rangle = \frac{1}{2t_0\beta} \exp(-\beta|t - t'|) \quad (5.15)$$

où :

$$\frac{1}{t_0} = \sum I^+ + I^- = 2I^+ = 2I^- \quad (5.16)$$

est la fréquence caractéristique d'une particule à absorber et émettre des électrons ou des ions et $\frac{1}{2t_0\beta}$ est l'amplitude de fluctuation aléatoire d'une charge de grain de poussière d'où :

$$\Delta z^2 = \langle \delta z^2 \rangle = \frac{1}{2t_0\beta}$$

en multipliant et divisant le membre droit de l'équation ci dessus par la charge d'un grain de poussière à l'équilibre z_0 , on obtient :

$$\Delta z = \alpha \sqrt{z_0} \quad (5.17)$$

avec :

$$\alpha = \sqrt{\frac{1}{2t_0\beta z_0}}$$

En injectant l'équation (5.11) et (5.16) dans l'équation (5.17) on trouve :

$$\Delta z = \left[\frac{1 - \tau Z}{(1 - \tau Z + \tau) z_0} \right]^{\frac{1}{2}} \langle z_0 \rangle^{\frac{1}{2}} \quad (5.18)$$

Numériquement, la fluctuation de charge de la particule de poussière (i), est simulée par une valeur aléatoire δz , de sorte qu'à chaque étape (l), la charge est ajustée et donnée dans (Ref [Rouaiguia 2008]) :

$$\Delta z_i^{l+1} = [\Delta z_i^l + \delta z \xi] (1 - \beta \Delta t) \quad (5.19)$$

avec

$$\xi = \sin(2\pi\chi_1) \sqrt{2 \ln(1/\chi_2)} \quad (5.20)$$

où χ_1, χ_2 , sont des nombres aléatoires d'une distribuée uniformément dans l'intervalle $[0, 1]$.

L'hypothèse principale dûe à ce modèle, à savoir l'écart entre le temps ou le pas de la méthode de Monte Carlo et celle de l'effet de fluctuation, conduit à l'hypothèse que $\Delta t < \tau_c$, c-à-d que le temps de relaxation Δt caractérisant la variation de position de la particule est plus faible que le temps caractéristique dû à l'effet de fluctuation de la charge τ_c .

En utilisant les paramètres des travaux expérimentaux de Tsytoich et Morfill, [Tsytoich 2002]

- $T_e \simeq 3eV$
- $T_i \simeq 0.03eV$
- $z_d \simeq 10^4 (10^3 \rightarrow 10^5) e$
- $a = 2\mu m$

L'ensemble des configurations d'équilibre calculées numériquement à partir des énergies potentielles d'interaction que nous avons citées est reportée dans le tableau 5.1.

Nombre de particules	<i>Potentiel Coulombien</i>	<i>Potentiel Yukawa</i>	<i>Potentiel Logarithmique</i>
5	1, 4	1, 4	1, 4
6	1, 5	1, 5	1, 5
7	1, 6	1, 6	1, 6
8	1, 7	1, 7	1, 7
9	1, 8	2, 7	1, 8
10	2, 8	3, 7	1, 9
11	3, 8	3, 8	1, 2, 8
12	3, 9	4, 8	1, 3, 8
13	4, 9	4, 9	1, 3, 9
14	4, 10	4, 10	1, 3, 10
15	5, 10	1, 5, 9	5, 10
16	1, 5, 10	1, 5, 10	1, 5, 10
17	1, 6, 10	1, 6, 10	1, 6, 10
18	1, 6, 11	1, 6, 11	1, 6, 11
19	1, 6, 12	1, 7, 11	1, 7, 11
20	1, 7, 12	1, 7, 12	1, 7, 12
21	1, 7, 13	2, 7, 12	2, 7, 12
22	2, 8, 12	2, 8, 12	2, 8, 12
23	2, 8, 13	3, 8, 12	3, 8, 12
24	3, 8, 13	3, 9, 12	3, 9, 12
25	3, 9, 13	3, 9, 13	3, 9, 13
26	3, 9, 14	4, 9, 13	4, 9, 13
27	4, 9, 14	4, 10, 13	1, 3, 8, 15
28	4, 10, 14	4, 10, 14	1, 4, 8, 15
29	4, 10, 15	5, 10, 14	1, 4, 9, 15
30	4, 11, 15	1, 5, 10, 14	1, 4, 9, 16

TABLE 5.1 – Effet de fluctuation de la charge sur les configurations de l'état fondamental

5.1.1.1 Résultat et discussion

Les configurations d'équilibre obtenues avec l'effet de fluctuation de la charge conservent généralement la notion de succession de couches [Djebli 2010]. Ces résultats sont presque cohérents avec les configurations d'état fondamental sans fluctuation dans le cas des potentiels Coulombien et de Yukawa, à l'exception des configurations correspondant aux cas $N=5, 9, 30$ pour le potentiel Coulombien et $N= 5, 15$ pour le potentiel de Yukawa. Notons que l'interaction logarithmique prédit des configurations semblables à l'expérience pour un nombre de particules très faible ($N < 11$). Pour $N > 11$, les règles générales d'occupation des grains poussiéreux sur les couches sont modifiées, cette modification induit de nouvelles configurations. Dans le cas où il n'y a aucune fluctuation de la charge, l'état stable pour $N= 5$ pour tout les cas d'interactions, consiste en une seule couronne avec cinq particules sur la même couronne, par contre l'état stable pour le même nombre avec l'effet de fluctuation consiste en une seule couronne avec une particule au centre (1,4). La nouvelle distribution est la suivante : pour $N= 5$ jusqu'à $N= 10$, les configurations présentent deux couronnes bien identifiées, entre $N= 11$ et $N= 26$, l'état stable présente trois couronnes. Au-delà de $N= 27$, les configurations présentent quatre couronnes. Les règles de remplissage sont elles aussi affectées par l'effet de la fluctuation de la charge : on a une particule en moins sur chaque couronne saturée comparé au système où il n'y a aucune fluctuation de charge, la première couche en comptant à partir du centre ne dépasse jamais quatre particules, la deuxième couche ne dépasse jamais dix particules et la troisième couche ne dépasse jamais quinze particules. Cette différence peut s'expliquer par le fait que chaque couche est caractérisée par une barrière d'énergie et que la variation de la charge peut également induire une augmentation de la température induisant une augmentation de l'énergie du système [Melandso 1996] [Rouaiguia 2008], qui peut dépasser la barrière d'énergie de la couronne. Une réorganisation de la couche est obtenue le plus souvent par le saut d'une seule particule entre deux couches, rendant l'équilibre à la couche saturée (voir tableau 5.1), par exemple, dans le cas Coulombien pour $N = 5, 9, 30, \dots$, pour le potentiel Yukawa $N = 5, 15, \dots$ et pour le cas Logarithmique $N = 12, 25, \dots$ [Djebli 2010]. Comme, nous avons constaté qu'il y a une différence orientationnelle, pour les configurations qui gardent la même occupation des particules [Djebli 2010].

5.2 Effet de l'amplitude de fluctuation de la charge sur la transition de phase

Une transition de phase est un phénomène spectaculaire, qui correspond à une transformation qualitative et quantitative des propriétés macroscopiques d'un système thermodynamique. Nous appellerons phase tous domaine de matière homogène limitée par une surface et présentant une composition, une organisation atomique et des propriétés bien définies. Une transition de phases correspond au passage d'un système initialement sous forme de phase A, vers une autre phase B. L'exemple standard d'une transition de phase est le passage entre les trois états de la matière : liquide, gaz, solide. Mais, il existe d'autres transitions de phases. Par exemple : les transitions magnétiques, superfluides, supraconductrices, d'ordre-désordre dans les alliages métalliques et les cristaux liquides.

Ce qui caractérise ces transitions, c'est le changement qualitatif ou les grandeurs physiques varient très rapidement et présentent ainsi des discontinuités des propriétés. Une variation d'un paramètre intensif de contrôle de système tel que la température, la pression, le champ électrique ou magnétique... , déclenche une modification qualitative spectaculaire. Pour un système donné, on fait varier un certain nombre de paramètres (température, pression, champs extérieurs, etc. ...) pour mettre en évidence les diverses phases du système.

La plupart des transitions de phase résultent de la divergence de la longueur de corrélation [Greiner 1997]. De nombreuses et nouvelles idées ont été développées afin de mieux comprendre les transitions de phase, à titre d'exemple le point critique est le point d'arrêt à la frontière entre deux phases ou plus de la matière. En tournant autour lui, on peut passer continûment ou discrètement d'une phase à l'autre.

Dans ce chapitre, nous nous intéresserons à la transition ordre-désordre (fusion). Pour cela on reprendra le modèle de la variation de la charge développé par Khrapak utilisé auparavant dans la simulation de Monte Carlo et que nous modifierons en introduisant la variation d'amplitude de la fluctuation de la charge [Issaad 2019]. Nous commencerons dans un premier lieu par décrire la nouvelle expression de la fluctuation de la charge ensuite nous présenterons les différents résultats obtenus.

5.2.1 Description d'une nouvelle expression de la fluctuation de la charge

La formulation d'un modèle théorique pour montrer l'effet de l'amplitude de la fluctuation de la charge doit être un compromis entre le réalisme phy-

sique et les possibilités informatiques. Avec les connaissances actuelles sur les processus de charge dans les plasmas poussiéreux, il est possible de mettre au point un modèle réaliste et de le vérifier avec des simulations, Toutefois, il serait impossible de calculer les propriétés d'un tel modèle aux alentours d'une transition de phase à cause de sa complexité et du temps de calcul que cela prendrait afin d'obtenir un système à l'équilibre. Par contre, il est possible de proposer une nouvelle expression très simple pouvant décrire le comportement de l'amplitude de fluctuation de la charge sans qu'il soit totalement irréaliste du point de vue physique et de le tester avec la simulation Monte Carlo. Cette nouvelle expression de la fluctuation de la charge nous donne la possibilité d'introduire et observer l'effet de la variation de l'amplitude de fluctuation de la charge sur les trajectoires des particules ainsi que sur la transition de phase. La variation de la charge, peut être écrite de cette façon :

$$Z_i^l = \langle Z_0 \rangle + \Delta Z_i^l \quad (5.21)$$

où Z_i^l est la charge de la i ème particule à l'instant l , $\langle Z_0 \rangle$ est la charge moyenne du grain (charge à l'équilibre), et ΔZ_i^l est l'amplitude de la fluctuation de la charge, qui s'écrit sous la forme suivante :

$$\Delta Z_i = a \cos(2\pi\chi) \quad (5.22)$$

où a est l'amplitude maximale de la fluctuation de charge et χ est un nombre aléatoire distribué uniformément dans l'intervalle $[0, 1]$.

Nous admettrons la fonction cosinus qui se situe entre $[-1, +1]$ et qui correspond à l'émission d'un électron ou l'absorption d'un ion lorsque la fonction est de signe (+). Quand la fonction prend des valeurs de signe (-), le grain se charge négativement par l'absorption d'un électron. La figure (5.1) présente l'évolution de la fluctuation aléatoire de la charge sur un grain de poussière au cours d'un pas correspondant au nombre d'itérations MCS (Monte Carlo step). La charge se situe entre $Z_o - \Delta Z$ et $Z_o + \Delta Z$, où la charge moyenne du grain $Z_o = 4000$ et l'amplitude maximale de la fluctuation $\Delta Z = 500$.

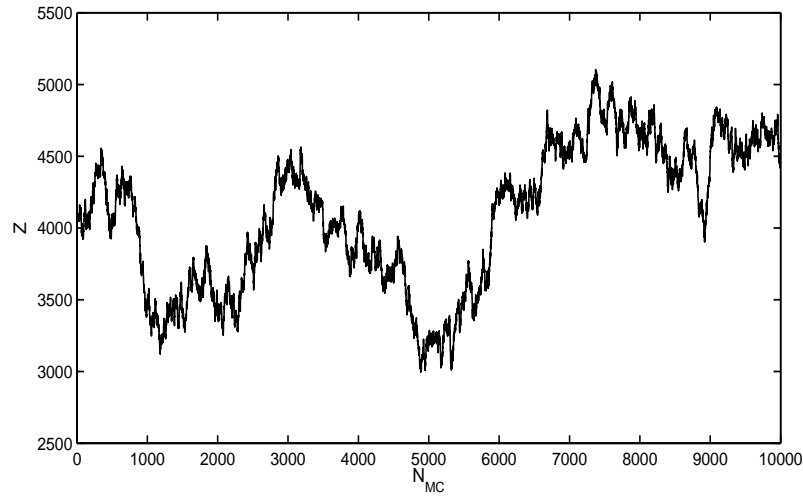


FIGURE 5.1 – Evolution de la fluctuation de la charge en fonction de nombre d'itérations Monte Carlo (MCS).

5.2.2 Etude de la trajectoire des particules

Afin de comprendre la fusion (transition ordre désordre) pour le cristal de plasma, nous nous sommes intéressés à l'analyse des trajectoires des particules, dans un premier temps. Pour cela nous étudions les trajectoires d'un ensemble de $N = 20$ particules chargées négativement, obtenues par simulation de Monte Carlo, dans le cas du potentiel de Coulomb.

La figure (5.2) , montre les trajectoires des particules, sous l'effet de l'agitation thermique. La première colonne (a, c, e) correspond à des particules de poussière à charge constante et la deuxième colonne (b, d, f) avec fluctuation de la charge (modèle khrapak) ou l'amplitude de fluctuation de la charge est très petite. La trajectoire de chaque particule est bien localisée autour de sa position d'équilibre même lorsque la température normalisée augmente jusqu'à $0,1 \times 10^{-3}$ et que les écarts de distance par rapport à ces positions sont faibles par rapport aux distances inter-couche figure (5.2(a-d)) . Au fur et à mesure que la température augmente $T = 0,15 \times 10^{-3}$ dans le cas de la charge constante, les particules gardent la même occupation de la couche, mais l'amplitude du mouvement translationnel et rotationnel de chaque particule augmente voir figure (5.2(e)).

Concernant la fluctuation de la charge, cette dernière conduit à une augmentation de l'amplitude du mouvement de la particule mais conserve sa localisation jusqu'à $T = 0,15 \times 10^{-3}$, où le mouvement aléatoire commence à être dominant, en particulier pour les couche extérieures, comme on peut remarquer une tentative de saut d'une particule entre deux couches, ce qui signifie que

les particules de poussière présentent un comportement de type liquide figure (5.2(f)), c'est-à-dire que les particules peuvent se déplacer librement entre les couche en privilégiant le déplacement vers l'intérieur que l'extérieur de la couche car elles sont plus stable.

De même, la figure (5.3), représente les trajectoires des particules pour le même nombre ($N=20$). Sous l'effet de l'agitation thermique et pour différentes valeurs d'amplitude de fluctuation de charge (cas du nouvelle expression de la fluctuation de la charge). On constate que le mouvement des particules devient de plus en plus aléatoire particulièrement sur les particules qui se trouve sur les couches externes. Ainsi leurs déplacements radiaux augmentent très rapidement lors de l'augmentation de l'amplitude de la charge et de la température. Ceci peut être expliqué par le fait que la fluctuation de la charge peut également induire une augmentation de l'énergie du système [Vaulina 1999]. Il est clair que pour la température $T = 0,1 \times 10^{-3}$ et $a = 800$ les grains commencent à perdent leur symétrie circulaire et on peut assimiler le comportement de ces particules à un comportement de type liquide (les particules commence a ce fusionner).

En analysant les figures (5.2) et (5.3) il apparaît clairement que l'effet de fluctuation de la charge accélère le processus de fusion, ce résultat sera validé dans la section suivante.

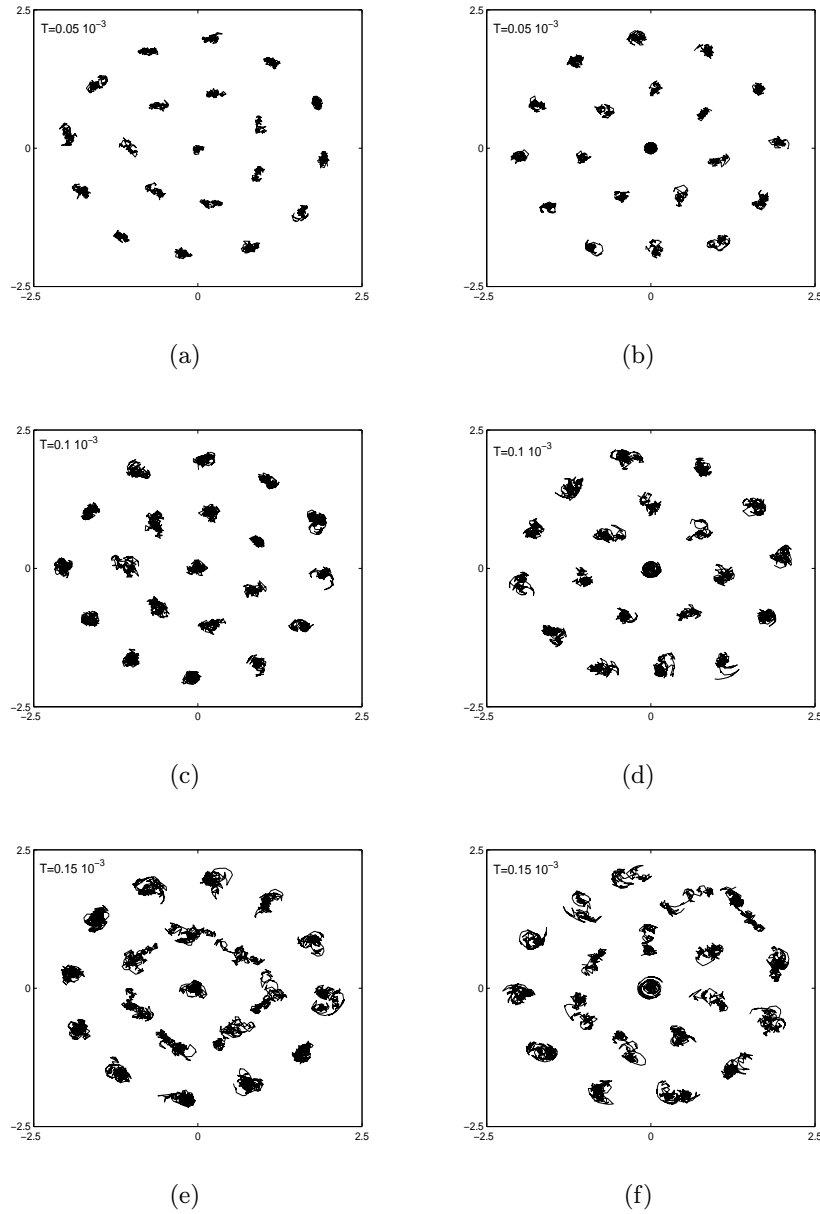


FIGURE 5.2 – Trajectoires d'un système de $N = 20$ pendant 10000 pas de Monte Carlo pour différentes températures, la première colonne (a, c, e) correspond à des particules de poussière à charge constante, la deuxième colonne (b, d, f) à charge variable (modèle khrapak).

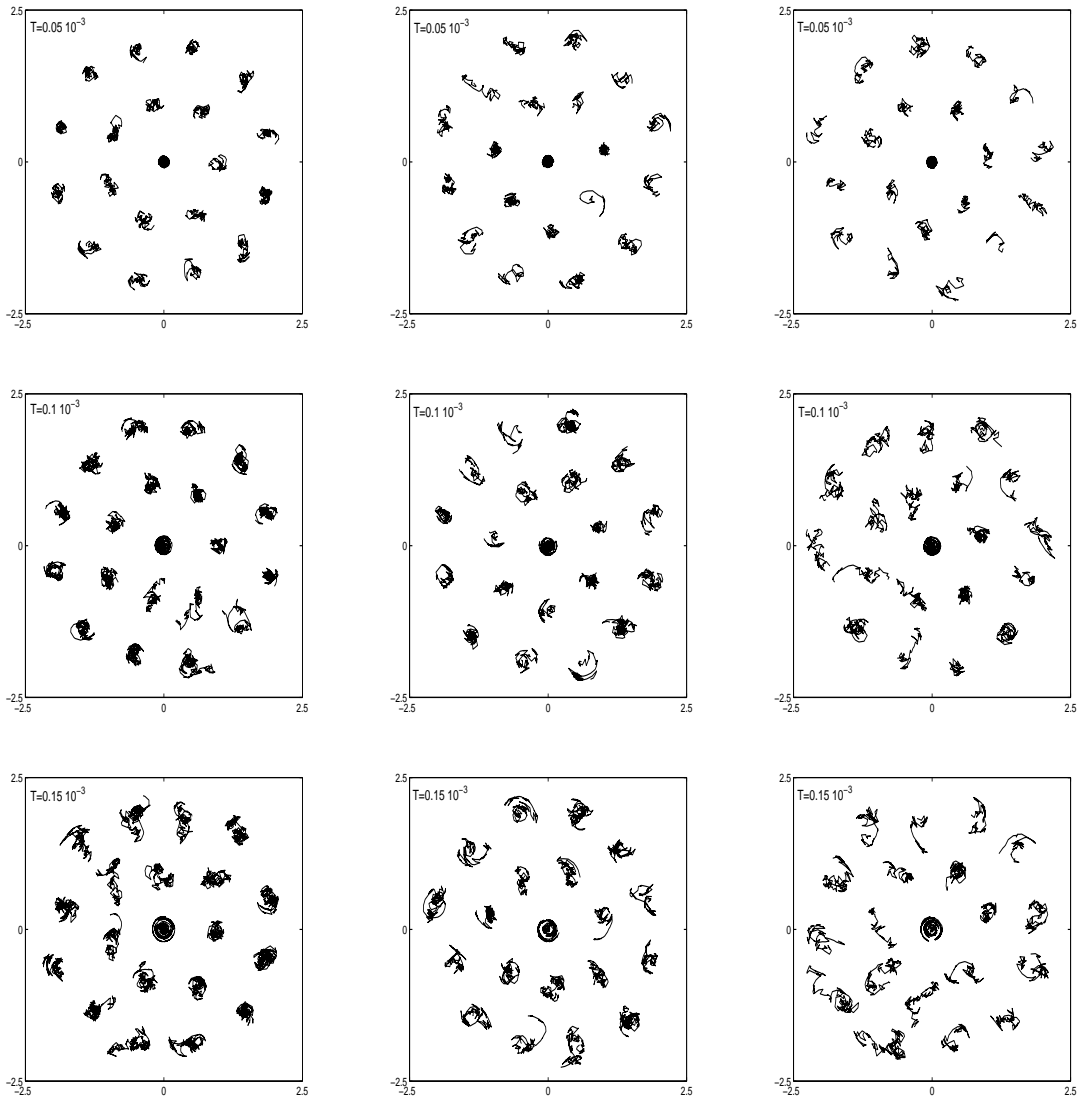


FIGURE 5.3 – Trajectoires d'un système de $N = 20$ pendant 10000 pas de Monte Carlo pour différentes températures et différents amplitudes de fluctuation de charge. Les première, deuxième et troisième colonnes correspondent respectivement à $a = 200$, 500 et 800 (nouvelle expression).

5.3 Transition ordre-désordre (la fusion)

La fusion d'un point de vue microscopique, pourrait être initiée par une rupture locale de la stabilité mécanique dans le cristal surchauffé [Brillouin 1938]. De nombreuses techniques ou méthodes géométriques fournissent des explications sur le mécanisme microscopique de la fusion et cer-

taines prédisent le point de fusion, parmi ces méthodes : Diagramme de Voronoï, Fonction de corrélation $g(r)$, Déplacement quadratique moyen, La théorie de KTHNY. Toutes ces méthodes développées pour étudier la fusion (ordre-désordre), sont liées aux fluctuations des positions des particules, par exemple, la fusion peut être initiée quand le déplacement quadratique moyen des atomes dépasse une valeur seuil (théorie de Lindemann [Dunne 2008] [Lindemann 1910]). Nous adaptions à l'analyse du phénomène d'ordre désordre, la technique de déplacement quadratique moyen (Critère de Lindemann).

5.3.0.1 Déplacement quadratique moyen (Critère de Lindemann)

Le critère de Lindemann est une approche empirique, générale à toute fusion. Cette approche considère les fluctuations spatiales des atomes ou particules d'un réseau. La fusion aura lieu quand la longueur caractéristique de ces fluctuations atteint la distance inter-particules d . Cette méthode ne préjuge en rien de l'ordre de la transition, et n'a pas de justification théorique profonde. Cependant, on conçoit assez facilement qu'un cristal ne soit pas stable si ses éléments voient leurs positions fluctuer sur des distances plus grandes que leurs écarts respectifs. Ce critère fonctionne assez bien sur la fusion des cristaux réels. De par sa simplicité, il est aussi beaucoup utilisé pour traiter la fusion des cristaux de Wigner (cristaux de Coulomb). Dans ce formalisme, les cristaux de Coulomb sont des particules macroscopiques clairement définis ; la fusion de l'état d'équilibre de ces cristaux provient de l'agitation thermique de ces particules.

En effet, la relation la plus générale adaptée pour localiser la température de fusion des cristaux Coulomb à $2D$ à basse Température a été donnée par Bedanov et al [Bedanov 1985] est donnée par :

$$U_r^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\langle r_i^2 \rangle - \langle r_i \rangle^2) / d \quad (5.23)$$

où r_i désigne la position des particules par rapport au centre, $\langle \rangle$ la moyenne, équivalente à une moyenne d'ensemble et $d = 2R/\sqrt{N}$ est la distance moyenne inter-particules ou R le rayon de système.

Nous reportons sur la figure (5.4) l'évolution typiques des déplacements quadratique moyenne pour un système de $N = 20$ particules étudié dans different amplitude de fluctuation de la charge (cercle plein ($a = 0$) sans fluctuation, triangle plein ($a = 1$) et cercle vide ($a = 30$))

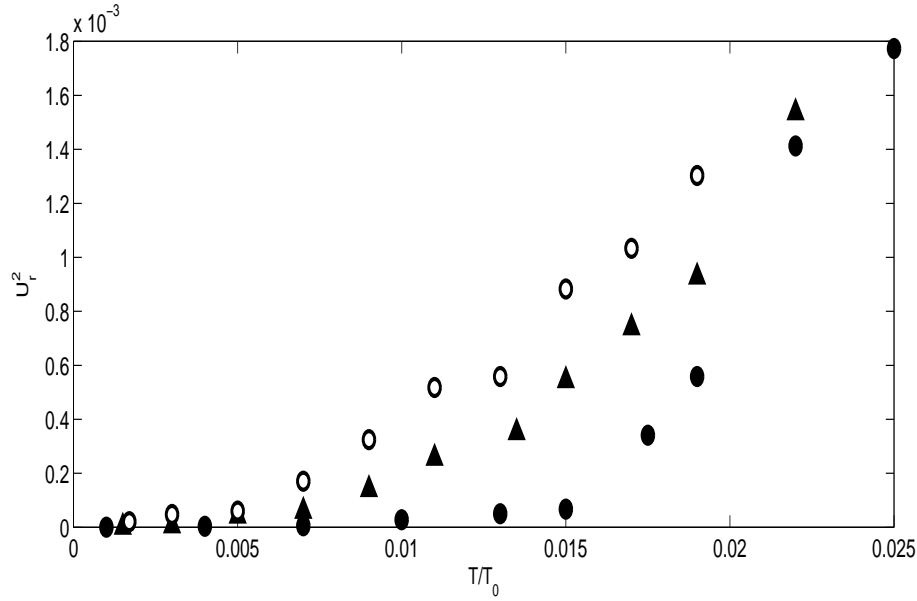


FIGURE 5.4 – Déplacement quadratique moyen en fonction de la température normalisée pour différentes amplitudes de la fluctuation de charge (cercle plein ($a = 0$), triangle plein ($a = 1$) et cercle vide ($a = 30$)).

Pour des faibles températures, nous observons sur la figure 5.4 les mêmes comportements, tous les systèmes commencent par un plateau qui signifie que les particules poussiéreuses sont bien localisées autour de leur position d'équilibre malgré qu'il y ait quelques déviations de positions, qui sont petites comparées aux distances inter-particule. Au fur et à mesure que la température augmente, l'amplitude de déplacement quadratique moyen U_r^2 augmente linéairement mais lentement et le système garde toujours son ordre structural. La température de fusion T_m apparaît lorsque le profil des $\langle U_r^2 \rangle$ augmente rapidement. Cela peut être vu à partir des courbes de $\langle U_r^2 \rangle$ fonction T/T_0 lorsque le déplacement radial moyen change sa dépendance linéaire en fonction de la température. Nous pouvons constater que cette température T_m diminue lorsqu'on augmente l'amplitude de la fluctuation de charge. Pour $a = 0$, qui correspond à une charge constante, la fusion se produit à $T_m = 0,0146$ et $T_m = 0,0054$ pour $a = 30$. On note également que l'écart dans les températures de fusion diminue quand l'amplitude de fluctuation de la charge augmente. Il est de 0,0065 lorsque a passe de 0 à 1, mais de 0,0027 lorsque a augmente de 1 à 30. Pour des valeurs plus élevées de a , on a besoin de changer l'échelle pour qu'on puisse déterminer la température de fusion, cela signifie que le nuage d'électrons et d'ions augmente autour de la poussière, et par conséquent, le potentiel inter-grain sera écranté. A cet effet, nous nous sommes limités à des petites valeurs de a , car on a utilisé un potentiel non

écrané. Comme on peut expliquer la diminution de la température de fusion en fonction de l'augmentation de l'amplitude de la fluctuation de la charge par le fait que les électrons ou les ions attachés sur la surface de poussière transfèrent une partie de leur impulsion à la poussière. Nous rapportons dans la figure (5.5) les températures de fusion en fonction de l'amplitude de fluctuation de la charge. Nous remarquons la diminution rapide des températures de fusion lorsque l'amplitude de fluctuation augmente.

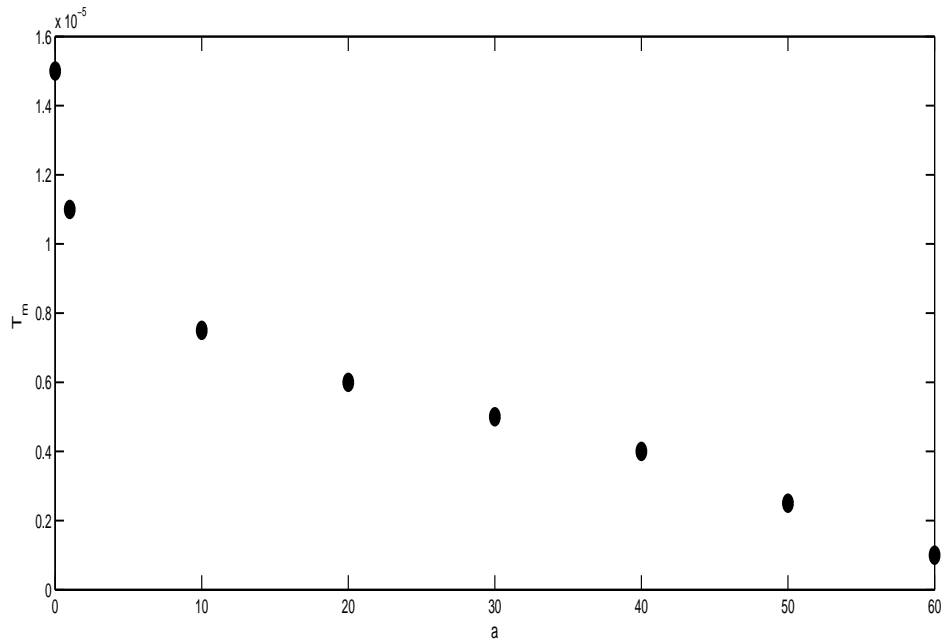


FIGURE 5.5 – La variation de la température de fusion en fonction de l'amplitude de la fluctuation de charge.

Conclusion générale

Cette thèse est motivée par des faits expérimentaux qui sont à l'origine d'un effort théorique visant à comprendre le phénomène d'auto-organisation de particules dans les systèmes fortement couplés. Le présent travail porte sur la simulation d'un plasma poussiéreux fortement couplés à deux dimensions. Nous avons procédé à l'étude du phénomène de cristallisation et de transition de phase dans les plasmas poussiéreux fortement couplés. Nous avons recherché les structures de l'état fondamental et les propriétés dynamiques d'un système classique constitué d'un nombre fini de grains de poussière ($N \leq 30$) chargés négativement. Les particules de poussières interagissant à travers trois potentiels d'interactions de type : Coulombien, Yukawa et Logarithmique. Le système étant confiné dans un potentiel parabolique.

La recherche des configurations les plus stables a nécessité l'implémentation de la méthode de Monte Carlo combinée à l'algorithme d'optimisation Newton Raphson. Nous avons tout d'abord étudié les paramètres contrôlant l'état fondamental, à savoir l'effet de l'interaction entre les particules, ainsi que le potentiel de confinement, pour des grains de poussière de charge constante négative. Cette investigation nous a permis d'obtenir des configurations d'équilibre qui peuvent être décrites comme une succession de couches de grains, présentant les mêmes caractéristiques générales d'anneaux concentriques, pour les trois potentiels d'interactions (Coulombien, Yukawa, Logarithmique). Ces configurations sont définies essentiellement par le nombre de particules sur chacune des couches. Ces premiers résultats sont en très bon accord avec la littérature et les expériences.

L'étude de l'effet de l'agitation thermique et la fluctuation de la charge des particules de poussière fortement couplées chargées négativement a montré que la fluctuation de charge modifie les règles d'occupation des grains de poussières sur les couches, cette modification induit de nouvelles configurations de l'état fondamental, conduisant le système à présenter des transitions structurales qui sont plus efficaces lorsque les particules interagissent par le potentiel logarithmique. Nous avons également analysé la trajectoire de $N = 20$ particules en fonction de la température et l'effet de l'amplitude de la fluctuation de la charge, pour voir les différentes étapes conduisant au désordre. Nous avons constaté que la mise en désordre de ces systèmes est initiée par des excitations individuelles consistant en des sauts de particules entre couches et accentuées par les rotations relatives de ces couches au fur et à mesure que la température augmente, comme nous avons pu constater que l'effet de la fluctuation de la charge accélère le processus de fusion. Cette fluctuation, affecte non seulement les configurations d'équilibre, mais aussi les propriétés de transitions de phase.

Nous avons montré que la température de fusion dépend de l'amplitude de la charge, c'est-à-dire que pour une plus faible amplitude de la charge, le système présente une structure de couche jusqu'à une température critique T_m , où se produit la fusion. Cette température diminue lorsque l'amplitude de la fluctuation de la charge augmente en raison de l'interaction plus forte qui n'est pas compensée par l'accord du potentiel de confinement.

Dans ce travail nous avons fait appel à la simulation par la méthode de Monte Carlo. Cette dernière ne permet pas de suivre l'évolution temporelle, pour la suite du travail on compte faire appel à la Dynamique Moléculaire.

Annexes

Dispositif expérimental

Cette annexe est consacrée à la description du dispositif expérimental et les méthodes de confinement employées sur le réacteur PKE-Nefedov (Plasma Kristall Experiment), qui consiste à étudier les principes de la formation des structures organisées dans les plasmas poussiéreux.

A.1 réacteur PKE-Nefedov (Plasma Kristall Experiment)

Ce réacteur a été conçu à l'origine pour des expériences en microgravité. Il est de forme cubique ($10 \times 10 \times 5\text{cm}$) et ses parois latérales sont entièrement en verre afin de permettre une observation optimale du nuage de poussières (voir figure A.1) [Mikikian].

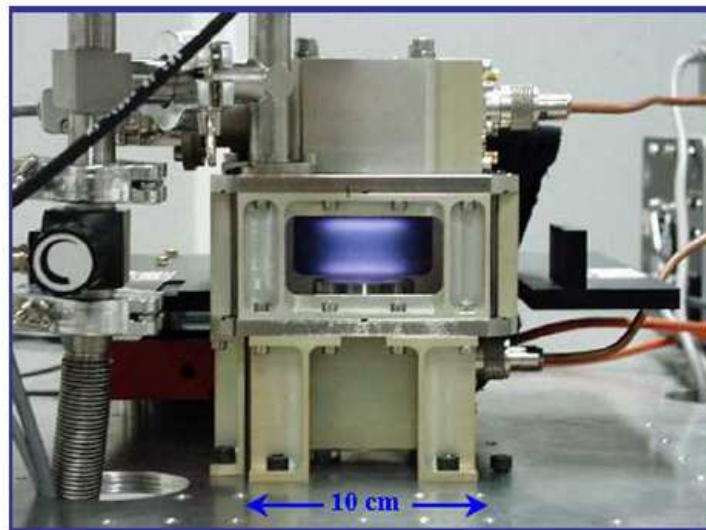


FIGURE A.1 – Réacteur PKE vue générale [Mikikian]

Ce réacteur constitué de deux électrodes parallèles de 4 cm de diamètre séparées de 3 cm. Le plasma d'argon basse pression créé par une décharge

radio-fréquence ($13,56\text{MHz}$) à couplage capacitif et confiné latéralement. Le champ radiofréquence est appliqué aux deux électrodes alternativement (mode "pushpull") afin d'assurer une plus grande homogénéité du plasma. La puissance injectée varie entre 0 W et 4 W . Les poudres sont formées dans un plasma d'argon ($0.2 - 2\text{mbar}$) par pulvérisation d'une couche de polymère déposée sur les électrodes et composée de poussières injectées précédemment ($3,4\mu\text{m}$, mélamine formaldéhyde).

Le confinement dans un plasma de laboratoire, est soit électrique ou bien magnétique. Les grains de cristaux coulombiens sont suspendus (confinés latéralement) au-dessus de l'électrode inférieure dans une région où la somme des différentes forces électrique et gravitationnelle appliquées à chaque grain se compense comme l'indique la figure (A.2) [Trottenberg 1995]. Le champ électrique $E(z)$ croît linéairement du bord du plasma vers l'électrode, ce qui induit une force électrique croissante $QE(z)$ sur le grain chargé et dirigée vers le haut. La combinaison de cette dernière avec la force de gravité F_g conduit à un potentiel parabolique qui permet de confiner le grain verticalement, à une hauteur z_0 qui dépend de la masse de poussière.

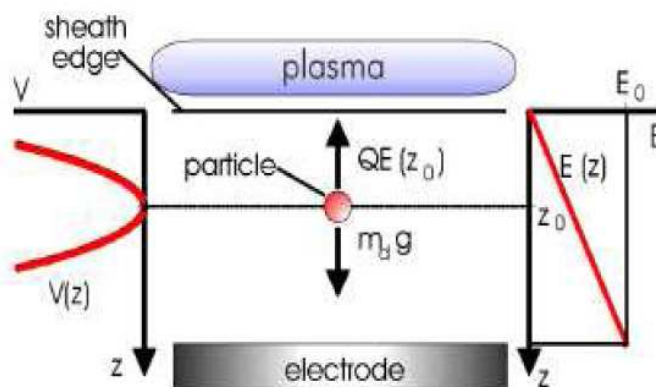


FIGURE A.2 – Confinement des grains de poussière dans la gaine d'un plasma de décharge radiofréquence (RF) [Trottenberg 1995]

Une nappe laser de faible épaisseur éclaire le nuage de poudres et la lumière diffusée est enregistrée à 90° par des caméras CCD à 25 images par seconde. Les signaux vidéo sont transférés sur un ordinateur grâce à une carte d'acquisition sur une échelle de gris de 8 bits de profondeur et une résolution de 560×700 pixels. Afin d'éviter les effets de bord, le domaine analysé pour la mesure des charges est restreint à une région de $8.53 \times 5.50\text{mm}^2$ centrée au milieu de l'espace inter-électrode. Les trajectoires des poudres peuvent être obtenues par superposition des images vidéo. Les coordonnées des grains se

relèvent toutes les 3 images et l'amplitude des oscillations est obtenue grâce à ces mesures.

Bibliographie

- [Ali-Fedila 2010] D. Ali-Fedila et M. Djebli. *Phy. Plasmas*, vol. 17, page 102901, 2010. (Cité en page 18.)
- [Allen 1986] M. P. Allen et D. J. Tildesley. *Computer simulation of liquids*. Oxford Science Publications, 1986. (Cité en page 55.)
- [Anestos 1974] T. C. Anestos et C. D. Hendricks. *J. Appl. Phys.*, vol. 43, page 1176, 1974. (Cité en page 17.)
- [Ashoori 1996] R. C. Ashoori. *Nature (London)*, vol. 379, page 413, 1996. (Cité en pages 1 et 9.)
- [Balabanov 2000] V.V. Balabanov, L.M. Vasilyak, S.P. Vetchinin, A.P. Nefedov, D.N. Polyakov et V.E. Fortov. *JETP*, vol. 92, page 86, 2000. (Cité en page 46.)
- [Balibar 2012] S. Balibar et A.D. Fefferman and A. Haziot and X. Rojas. *J. Low. Temp. Phys*, vol. 168, page 221, 2012. (Cité en page 50.)
- [Bedanov 1985] V. M. Bedanov, G. V. Gadiyak et Yu. E. Lozovik. *Sov. Phys. JETP*, vol. 61, page 967, 1985. (Cité en pages 3 et 80.)
- [Bedanov 1994] V. M. Bedanov et F. M. Peeters. *Phys. Rev. B*, vol. 49, page 2667, 1994. (Cité en pages ix, 58, 64 et 65.)
- [Beebe-Wang 1992] J. Beebe-Wang, N. Elander et R. Schuch. *Phys. Scripta*, vol. 46, page 506, 1992. (Cité en page 9.)
- [Berg 2004] B. A. Berg. *Markov chain monte carlo simulations and their statistical analysis*. World Scientific, 2004. (Cité en page 41.)
- [Bernstein 1959] I.B. Bernstein et I.N. Rabinowitz. *Phys. Fluids*, vol. 2 (2), page 112, 1959. (Cité en page 22.)
- [Bessaa 2017] A. Bessaa et M. Djebli. *Contrib. Plasma. Phys.*, vol. 60(1), pages 1–4, 2017. (Cité en pages 1 et 49.)
- [Binder 1998] K. Binder. *J. Nn-Equilib. Thermodyn*, vol. 23, page 1, 1998. (Cité en page 11.)
- [Binder 2001] K. Binder et D. W. Heermann. *Monte carlo simulation in statistical physics*. Cambridge university press, Cambridge, 2001. (Cité en page 39.)
- [Blum 2000] J. Blum et al. *Phy. Rev. Let*, vol. 85, page 2426, 2000. (Cité en page 16.)
- [Bollinger 2003] J. J. Bollinger, J. M. Kriesel, T. B. Mitchell, L. B. King, M. J. Jensen, W. M. Itano et D. H. E. Dubin. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, vol. 36, page 499, 2003. (Cité en page 6.)

- [Bonitz 2010a] M. Bonitz, N. Horing et P. Ludwig. Introduction to complex plasma. Springer, Heidelberg, New York, 2010. (Cité en pages 7 et 27.)
- [Bonitz 2010b] M. M. Bonitz, C. Henning et D. Block. Rep. Prog. Phys., vol. 73, page 066501, 2010. (Cité en page 6.)
- [Bonitz 2014] M. Bonitz, J. Lopez, K. Becker et H. Thomsen. Complex plasmas : Scientific challenges and technological opportunities. Vol. 82 of Springer Series on Atomic, Optical and Plasma Physics, Springer Intl. Publishing, Cham, Switzerland, 2014. (Cité en page 6.)
- [Bouchoule 1991] A. Bouchoule, A. Plain, L. Boufendi, J. Ph. Blondeau et C. Laure. J. Appl. Phys., vol. 70, page 1991, 1991. (Cité en page 17.)
- [Bouchoule 1999] A. Bouchoule. Dusty plasmas : physics, chemistry, and technological impacts in plasma processing. New York : Wiley, 1999. (Cité en page 19.)
- [Breslin 1971] A. C. Breslin et K. G. Emeleus. Int. J. Electron., vol. 31, page 189, 1971. (Cité en page 17.)
- [Brillouin 1938] L. Brillouin. Phys Rev, vol. 54, page 916, 1938. (Cité en page 79.)
- [Bubeck 1999] R. Bubeck, C. Bechinger, S. Nesper et P. Leiderer. Phys. Rev. Lett., vol. 82, page 3364, 1999. (Cité en page 9.)
- [Cavarroc 2006] M. Cavarroc, M. C. Jouanny, K. Radouane, M. Mikikian et L. Boufendi. J. Appl. Phys., vol. 99, page 064301, 2006. (Cité en page 19.)
- [Chu 1994] J. H. Chu et L. I. Phys. Rev. Lett, vol. 72, page 4009, 1994. (Cité en pages 9, 28 et 30.)
- [Chu 1998] S. Chu. Rev. Mod. Phys., vol. 70, page 685, 1998. (Cité en page 2.)
- [Couedel 2006] L. Couedel, M. Mikikian, L. Boufendi et A. A. Samarian. Phys. Rev. E, vol. 74, page 026403, 2006. (Cité en page 19.)
- [Crandall 1971] R. S. Crandall et R. Williams. Phys. Lett. A, vol. 34, page 404, 1971. (Cité en page 9.)
- [Cui 1994] C. Cui et J. Goree. IEEE Transactions of Plasma Science, vol. 22, page 151, 1994. (Cité en page 25.)
- [Davis 2002] E. J. Davis et G. Schweiger. The airborne microparticle : Its physics, chemistry, optics, and transport phenomena. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2002. (Cité en page 6.)
- [Dehmelt 1990] Hans Dehmelt. Rev. Mod. Phys, vol. 62, page 525, 1990. (Cité en page 49.)

- [Delcroix 1994] J. L. Delcroix et A. Bers. physique des plasmas. Inter Editions et CNRS Editions, 1994. (Cité en page 15.)
- [Diedrich 1987] F. Diedrich, E. Peik, J. M. Chen, W. Quint et H. Walther. Phys. Rev. Lett, vol. 59, page 2931, 1987. (Cité en page 9.)
- [Dimov 2008] I. T. Dimov. Markov chain monte carlo innovations and applications. World Scientific, 2008. (Cité en page 41.)
- [Dirk 2004] L. Dirk et J. Vossen. Optical tweezers in concentrated colloidal dispersions. PhD thesis, Utrecht University, 2004. (Cité en pages vii et 10.)
- [Djebli 2010] M. Djebli, M. Issaad et L. Rouaiguia. Phy. Plasmas, vol. 17, page 033704, 2010. (Cité en pages 2, 18, 63, 65, 67, 68 et 73.)
- [Dollet 2004] A. Dollet. Surf. Coat. Technol., vol. 177, page 254, 2004. (Cité en page 36.)
- [Dubin 1988] D. H. E. Dubin et T. M. O’Neil. Phys. Rev. Lett., vol. 60, page 511, 1988. (Cité en page 9.)
- [Dunne 2008] L. J. Dunne, J. N. Murrel et G. Manos. Chem. Phys. Lett, vol. 456, page 162, 2008. (Cité en page 80.)
- [Dutta 2000] A. Dutta, Y. Hayafune et S. Oda. Jpn. J. Appl. Phys., vol. 39, page L855, 2000. (Cité en page 17.)
- [Elliott 1997] P. L. Elliott, C. I. Pakes S. S. Nazin, W. F. Vinen L. Skrbek et G. F. Cox. Phys. Rev. B, vol. 56, page 3447, 1997. (Cité en page 10.)
- [Farouki 1994] R.T. Farouki et S. Hamaguchi. J. Chem. Phys, vol. 101, page 9885, 1994. (Cité en page 28.)
- [Fisher 1979] D. S. Fisher, B. I. Halperin et R. Morf. Phys. Rev. B, vol. 20, page 4692, 1979. (Cité en page 60.)
- [Fishman 2013] G. S. Fishman. Monte carlo concepts, algorithms, and applications. Springer, 2013. (Cité en pages 41 et 42.)
- [Fortov 1996] V. E. Fortov, A. P. Nefedov, V. M. Torchinski, V. I. Molotkov, A. G. Khrapak, O. F. Petrov et K. F. Volykhin. JETP. Lett, vol. 64, page 92, 1996. (Cité en page 29.)
- [Fortov 2005] V. E. Fortov, A. V. Ivlev, S. A. Khrapak, A. G. Khrapak et G. E. Morfill. J. Phys. Rep, vol. 421, page 1, 2005. (Cité en page 21.)
- [Foulger 2000] S. H. Foulger, S. Kotha, B. Sweryda-Krawiec, T. W. Baughman, J. M. Ballato, P. Jiang et D. W. J. Smith. Opt. Lett., vol. 25, page 1300, 2000. (Cité en page 11.)
- [Frenkel 1996] D. Frenkel et B. Smit. Understanding molecular simulation : from algorithms to applications. Academic Press, 1996. (Cité en page 55.)

- [Galatola 2006] P. Galatola, G. Coupier, M. Saint Jean, J.B. Fournier et C. Guthmann. *Eur. Phys. J. B*, vol. 50, page 549, 2006. (Cit  en pages ix, 2, 64 et 65.)
- [Gann 1979] R. C. Gann, S. Charkravarty et G. V. Chester. *Phy. Rev. B*, vol. 20, page 326, 1979. (Cit  en page 8.)
- [Gasser 2009] U. Gasser. *J. Phys. : Condens. Matter*, vol. 21, page 203101, 2009. (Cit  en page 11.)
- [Goertz 1989a] C. K. Goertz. *Reviews of Geophysics*, vol. 27, page 271, 1989. (Cit  en page 17.)
- [Goertz 1989b] C. K. Goertz. *Reviews of Geophysics*, vol. 27, page 427, 1989. (Cit  en page 17.)
- [Gould 1988] H. Gould et J. Tobochnik. *An introduction to computer simulation methods*. Addison-Wesley, 1988. (Cit  en page 53.)
- [Graham 1864] T. Graham. *Journal of the Chemical Society of London*, vol. 17, page 318, 1864. (Cit  en page 10.)
- [Greiner 1997] W. Greiner, L. Neise et H. Stocker. *Thermodynamics and statistical mechanics*. Springer, 1997. (Cit  en page 74.)
- [Greywall 1977] D. Greywall. *Phys. Rev. B*, vol. 16, page 1291, 1977. (Cit  en page 50.)
- [Grill 1994] A. Grill. *Cold plasma in materials fabrication : from fundamentals to applications*. IEEE computer Society press, 1994. (Cit  en page 15.)
- [Grimes 1979] C. C. Grimes et G. Adams. *Phys. Rev. Lett*, vol. 42, page 795, 1979. (Cit  en page 9.)
- [Hamaguchi 1997] S. Hamaguchi, R. Farouki et D. H. E. Dubin. *Phy. Rev. E*, vol. 56, page 4671, 1997. (Cit  en pages vii et 29.)
- [Hansen 1986] J .P. Hansen et I.R. McDonald. *Theory of simple liquids*. seconde  dition. Academic Press., 1986. (Cit  en page 53.)
- [Haroche 2013] S. Haroche et J.-M. Raimond. *Exploring the quantum : Atoms, cavities and photons*. 2nd Edition, Oxford Graduate Texts, Oxford Univ. Press, Clarendon, Oxford, 2013. (Cit  en page 6.)
- [Hayashi 1994] Y. Hayashi et K. Tachibana. *Japan J. Appl. Phys.*, vol. 33, page L804, 1994. (Cit  en pages 9 et 29.)
- [Hess 1967] G. B. Hess. *Phys. Rev*, vol. 161, page 189, 1967. (Cit  en page 50.)
- [Hiltner 1969] P. A. Hiltner et I. M. Krieger. *J. Phys. Chem.*, vol. 73, page 2386, 1969. (Cit  en page 11.)
- [Holtz 1997] J. H. Holtz et S. A. Asher. *Nature*, vol. 389, page 829, 1997. (Cit  en page 11.)

- [Honda 2009] M. Honda, T. Seki et Y. Takeoka. *Adv. Mater*, vol. 21, page 1801, 2009. (Cité en page 11.)
- [Horstemeyer 2012] Mark F. Horstemeyer. *Integrated computational materials engineering (icme) for metals : using multiscale modeling to invigorate engineering design with science*. John Wiley and Sons, 2012. (Cité en pages 35 et 36.)
- [Huebner 2008] W. F. Huebner. *Space Science Reviews*, vol. 138, page 5, 2008. (Cité en page 16.)
- [Hukushima 1996] K. Hukushima et K. Nemoto. *J. Phy. Soc. Jpn*, vol. 65, page 1604, 1996. (Cité en page 41.)
- [i Cabarrocas 2012] P. Roca i Cabarrocas, R. Cariou et M. Labrune. *J. Non-Cryst. Solids*, vol. 358, page 2000, 2012. (Cité en page 17.)
- [Ichimaru 1982] S. Ichimaru. *Reviews of Modern Physics*, vol. 54, page 1017, 1982. (Cité en page 3.)
- [Ikezi 1986] H. Ikezi. *Phys. Fluids*, vol. 29, page 1764, 1986. (Cité en page 28.)
- [Issaad 2019] M. Issaad, M. Djebli, Y. Derouiche et B. Helifa. *Contrib. Plasma. Phys.*, vol. 60(1), pages 1–9, 2019. (Cité en pages 2, 67 et 74.)
- [James 1980] F. James. *Rep. Prog. Phys.*, vol. 43, page 1145, 1980. (Cité en page 36.)
- [Jean 2001] M. Saint Jean, C. Even et C. Guthmann. *Europhys. Lett.*, vol. 55, page 45, 2001. (Cité en page 10.)
- [Jean 2002] M. Saint Jean et C. Guthmann. *J. Phys : Condens. Matter*, vol. 14, page 13653, 2002. (Cité en page 50.)
- [Jedrzejewski 2009] De Franck Jedrzejewski. *Modèles aléatoires et physique probabiliste*. Springer-Verlag France, 2009. (Cité en page 38.)
- [Kalos 2008] M. H. Kalos et P. A. Whitlock. *Monte carlo methods*. WILEY-VCH Verlag GmbH and Co. KGaA, Weinheim, 2008. (Cité en page 42.)
- [Kendall 2005] W. S. Kendall, F. Liang et J. S. Wang. *Markov chain monte carlo innovations and applications*. World Scientific Publishing, 2005. (Cité en page 41.)
- [Kersten 1998] H. Kersten, P. Schmetz et G. M. W. Kroesen. *Surf. Coat. Tech.*, vol. 108, page 507, 1998. (Cité en page 17.)
- [Khrapak 1999] S. A. Khrapak, A. P. Nefedov, O. F. Petrov et O. S. Vaulina. *Phys Rev E*, vol. 59, page 6017, 1999. (Cité en pages 25, 68 et 70.)
- [Kim 2005] J. Kim, M. J. Serpe et L. A. Lyon. *Angew. Chem., Int. Ed*, vol. 44, page 1333, 2005. (Cité en page 11.)

- [Knapek 2007] C. A. Knapek, D. Samsonov, S. Zhdanov, U. Konopka et G.E. Morfill. Phys. Rev. Lett., vol. 98, page 015004, 2007. (Cité en page 46.)
- [Knoop 2014] M. Knoop, N. Madsen et R. C. Thompson. Physics with trapped charged particles : Lectures from the les houches winter school. Imperial College Press and World Scientific, London, 2014. (Cité en page 6.)
- [Kong 2002] M. Kong, B. Partoens et F. M. Peeters. Phys. Rev. E, vol. 65, page 46602, 2002. (Cité en pages 58 et 64.)
- [Kortshagen 2009] U. Kortshagen. J. Phys. D. Appl. Phys., vol. 42, page 130001, 2009. (Cité en page 2.)
- [Krieger 1968] I. M. Krieger et F. M. O'Neill. J. Am. Chem. Soc., vol. 90, page 3114, 1968. (Cité en page 11.)
- [Laframboise] J.G. Laframboise. *Theory of spherical and cylindrical Langmuir probes in a collisionless, Maxwellian plasma at rest*. PhD thesis. (Cité en page 22.)
- [Lai 1999] Y. J. Lai et L. I. Phys. Rev. E, vol. 60, page 4743, 1999. (Cité en pages ix, 64, 65 et 66.)
- [Landau 2000] D. P. Landau et K. Binder. A guide to monte carlo simulation in statistical physics. Cambridge university press, Cambridge, 2000. (Cité en page 39.)
- [Langmuir 1924] I. Langmuir, C. G. Found et A. F. Dittmer. Icarus, vol. 53, page 219, 1924. (Cité en page 16.)
- [Levi 1988] B. G. Levi. Phys. Today, vol. 41(9), page 17, 1988. (Cité en page 9.)
- [Lindemann 1910] F. A. Lindemann. Phys. Z., vol. 11, page 609, 1910. (Cité en page 80.)
- [Liu 2004] B. Liu, K. Avinash et J. Goree. Phys. Rev. E, vol. 69, page 7249, 2004. (Cité en page 5.)
- [Liu 2009] Y. Liu, Y. Zhang et Y. Guan. Chem. Commun., vol. 14, page 1867, 2009. (Cité en page 11.)
- [Löwen 2012] H. Löwen, E. C. Oguz, L. Assoud et R. Messina. Advances in Chemical Physics, vol. 148, page 225, 2012. (Cité en page 11.)
- [Major 2005] F. G. Major, V. N. Gheorghe et G. Werth. Charged particle traps : Physics and techniques of charged particle field confinement. Vol. 37 of Springer Series on Atomic, Optical and Plasma Physics, Springer Intl. Publishing, Cham, Switzerland, 2005. (Cité en page 6.)

- [Makdessi 2017] G. Al Makdessi, X. Glad, S. Dap, M. Rojo, R. Clergereaux et J. Margot. *J Appl Phys*, vol. 50, page 155203, 2017. (Cité en pages vii et 18.)
- [Massereau-Guilbaud 2009] V. Massereau-Guilbaud, J. Pereira, I. Géraud-Grenier et A. Plain. *J Appl Phys*, vol. 105, page 033302, 2009. (Cité en pages vii et 18.)
- [Matsoukas 1996] T. Matsoukas, M. Russell et M. Smith. *J. Vac. Sci. Technol A*, vol. 14, page 624, 1996. (Cité en page 25.)
- [Melandso 1996] F. Melandso, T. Nitter, T. Aslaksen et O. Havnes. *J. Vac. Sci. Technol*, vol. 16, page 619, 1996. (Cité en page 73.)
- [Melzer 1994] A. Melzer, T. Trottenberg et A. Piel. *Phys. Lett. A*, vol. 191, page 301, 1994. (Cité en pages 1, 9, 19 et 28.)
- [Melzer 2001] A. Melzer, M. Klindworth et A. Piel. *Phys. Rev. Lett*, vol. 87, page 115002, 2001. (Cité en page 60.)
- [Melzer 2003] A. Melzer. *Phys. Rev. E*, vol. 67, page 016411, 2003. (Cité en page 60.)
- [Metropolis 1953] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A.M. Teller et E. Teller. *J. Chem. Phy*, vol. 21, page 1087, 1953. (Cité en pages 35, 39 et 43.)
- [Metropolis 1987] N. Metropolis. The beginning of the monte carlo method. Los Alamos Science Special Issue, 1987. (Cité en pages 37 et 39.)
- [Michau 2012] A. Michau, G. Lombardi, L.C. Delacqua, M. Redolfi, C. Arnas, P. Jestinand X. Bonnin et K. Hassouni. *Plasma Chem. Plasma Process*, vol. 32, page 451, 2012. (Cité en page 17.)
- [Mikikian] M. Mikikian. *LES PLASMAS POUSSIÉREUX : Synthèse, Structure et Dynamique dun Nuage de Poussières dans un Plasma*. PhD thesis. (Cité en pages viii et 87.)
- [Mikikian 2003] M. Mikikian, L. Boufendi, A. Bouchoule et al. *New. J. Phys.*, vol. 5 :19, pages 1–19, 2003. (Cité en page 18.)
- [Morf 1979] R. H. Morf. *Phy. Rev. Lett*, vol. 43, page 931, 1979. (Cité en page 8.)
- [Morfill 1996] G. E. Morfill et H. Thomas. *J. Vac. Sci. Technol. A*, vol. 14, page 490, 1996. (Cité en page 28.)
- [Mott-Smith 1926] H.M. Mott-Smith et I. Langmuir. *Phys. Rev.*, vol. 28, page 727, 1926. (Cité en page 21.)
- [Nairn 1998] C. Nairn, B. Annaratones et J. Allen. *Plasma Sources Sci. Technol.*, vol. 7, page 478, 1998. (Cité en page 21.)

- [Narihara 1997] K. Narihara et al. tokamak. Nucl. Fusion, vol. 73, page 1177, 1997. (Cité en page 17.)
- [Neser 1997] S. Neser, C. Bechinger, P. Leiderer et T. Palberg. Phys. Rev. Lett., vol. 79, page 2348, 1997. (Cité en pages 1 et 9.)
- [Newman 2002] M. E. J. Newman et G. T. Barkema. Monte carlo methods in statical physics. Oxford University press, 2002. (Cité en pages 41 et 42.)
- [Nitter 1996] T. Nitter. Plasma Sources Sci. Technol, vol. 5, page 93, 1996. (Cité en page 46.)
- [Nunomura 1998] S. Nunomura, N. Ohno et S. Takamura. Phys. Plasmas, vol. 5, page 3517, 1998. (Cité en page 46.)
- [Ohno 1999] K. Ohno, K. Esfarjani et Y. Kawazoe. Computational materials science. Springer, Berlin, 1999. (Cité en page 35.)
- [Pan 1998] G. Pan, R. Kesavamoorthy et S. A. Asher. J. Am. Chem. Soc., vol. 120, page 6525, 1998. (Cité en page 11.)
- [Paul 1990] Wolfgang Paul. Rev. Mod. Phys., vol. 62, page 531, 1990. (Cité en page 49.)
- [Pieper 1996] J. B. Pieper, J. Goree et R. A. Quinn. J. Vac. Sci. Technol. A, vol. 14, pages No. 2, Mar/Apr, 1996. (Cité en pages vii, 30 et 31.)
- [Platzman 1999] P. M. Platzman et M. I. Dykman. Science, vol. 284, page 1967, 1999. (Cité en page 9.)
- [Potts 1952] R.B. Potts. Proc. Camb. Phil. Soc., vol. 48, page 106, 1952. (Cité en page 36.)
- [Quinn 1996] R. A. Quinn, C. Cui, J. Goree et J. B. Pierper. Phys. Rev. E, vol. 59, page 36410, 1996. (Cité en page 5.)
- [Reed 1989] M. A. Reed et W. P. Kirk. Nanostmture physics and fabrication. Eds. Academic Press, New York., 1989. (Cité en page 49.)
- [Ristenpart 2004] W. D. Ristenpart, I. A. Aksay et D. A. Saville. phys. Rev. E, vol. 69, page 021405, 2004. (Cité en page 11.)
- [Robbins 1988] M.O. Robbins, K. Kremer et G.S. Grest. J. Chem. Phys, vol. 88, page 3286, 1988. (Cité en pages vii, 27 et 28.)
- [Rouaiguia 2008] L. Rouaiguia, M. Djebli et F. Peeters. Phys. Lett. A, vol. 372, page 4487, 2008. (Cité en pages 71 et 73.)
- [Rubinstein 2008] R. Y. Rubinstein et D. P. Kroese. Simulation and the monte carlo method. Wiley-Interscience, 2008. (Cité en page 42.)
- [Schweigert 1995] A. V. Schweigert et François M. Peeters. Phys. Rev. B, vol. 51, page 7700, 1995. (Cité en page 58.)

- [Selwyn 1989] G. S. Selwyn, J. Singh et R. S. Bennett. *J. Vac. Sci. Technol. A*, vol. 7, page 2758, 1989. (Cité en page 17.)
- [Selwyn 1990] G. S. Selwyn, J. E. Heidenreich et K. L. Haller. *Appl. Phys. Lett.*, vol. 57, page 1876, 1990. (Cité en page 17.)
- [Shukla 2002] P. K. Shukla et A. A. Mamun. *Introduction to dusty plasmas physics*. IOP Publishing, 2002. (Cité en pages 15, 25, 45 et 68.)
- [Sickafoose 2000] A. A. Sickafoose, J. E. Colwell, M. Horanyi et S. Robertson. *Phy. Rev. Lett.*, vol. 84, page 6034, 2000. (Cité en page 20.)
- [Sickafoose 2001] A. A. Sickafoose, J. E. Colwell, M. Horanyi et S. Robertson. *J. Geophys. Res.*, vol. 106, page 8343, 2001. (Cité en page 20.)
- [Slattery 1980] W.L. Slattery, G.D. Doolen et H.E. DeWitt. *phys. Rev. A*, vol. 21, page 2087, 1980. (Cité en pages 3 et 27.)
- [Strahm 2010] B. Strahm et Ch. Hollenstein. *J Appl Phys*, vol. 107, page 023302, 2010. (Cité en pages vii et 18.)
- [Takai 2004] R. Takai, K. Ito, Y. Iwashita, H. Okamoto, S. Taniguchi et Y. Tomita. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, vol. 532, page 508, 2004. (Cité en page 49.)
- [Tanatar 1989] B. Tanatar et D. M. Ceperley. *Phy. Rev. B*, vol. 39, page 5005, 1989. (Cité en page 9.)
- [Taylor 1992] S. R. Taylor. *Solar system evolution*. Cambridge, 1992. (Cité en page 17.)
- [Thomas 1994] H. Thomas, G. E. Morfill, V. Demmel, J. Goree, B. Feuerbacher et D. Möhlmann. *Phys. Rev. Lett.*, vol. 73, page 652, 1994. (Cité en pages 9, 28 et 30.)
- [Thomas 2003] H. Thomas, G. E. Morfill et V. N. Tsytovich. *Plas. Phys. Rep.*, vol. 29, page 11, 2003. (Cité en page 5.)
- [Trau 1997] M. Trau, D. A. Saville et I. A. Aksay. *Langmuir*, vol. 13, page 6375, 1997. (Cité en pages vii, 11 et 12.)
- [Trigg 2005] G. L. Trigg. *Mathematical tools for physicists*. Wiley-VCH, 2005. (Cité en page 41.)
- [Trottenberg 1995] T. Trottenberg, A. Melzer et A. Piel. *Plasma Sources Sci. Technol.*, vol. 4, page 450, 1995. (Cité en pages viii et 88.)
- [Tsytovich 2002] V. N. Tsytovich et G. E. Morfill, editeurs. *Third international conference on the physics of dusty plasma, american institute of physic*, 2002. R. Bharutham and al p110. (Cité en page 71.)
- [Tsytovich 2008] V. N. Tsytovich, G. E. Morfill, S. V. Vladimirov et H. M. Thomas. *Elementary physics in complex plasmas. Lect. Notes Phys.* 731 , Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008. (Cité en page 46.)

-
- [Vaulina 1999] O. S. Vaulina, S. A. Khrapak, A. P. Nefedov et O. F. Petrov. Phys Rev E, vol. 60, page 5959, 1999. (Cité en page 77.)
- [von Neumann 1966] J. von Neumann et A.W. Burks. Theory of self-reproducing automata. University of Illinois Press, 1966. (Cité en page 36.)
- [Wigner 1934] E. Wigner. Phy. Rev, vol. 46, page 433, 1934. (Cité en pages 1 et 8.)
- [Wineland 1987] J. Wineland et W. M. Itano. Phy. Today, vol. 40, page 34, 1987. (Cité en pages 8 et 9.)
- [Yeh 1997] S.-R. Yeh, M. Seul et B. I. Shraiman. Nature, vol. 386, page 57, 1997. (Cité en page 11.)
- [Yoon 1999] J. Yoon, C. C. Li, D. Shahar, D. C. Tsui et M. Shayegan. Phys. Rev. Lett., vol. 82, page 1744, 1999. (Cité en page 9.)

الملخص : يتم إجراء عمليات المحاكاة العددية على أساس طريقة مونت كارلو لدراسة تكوينات الحالة الأساسية وانتقالات الطور لجزيئات الغبار شديدة الاقتران. تم محاكاة الجهد بين جسيمات الغبار سالب الشحنة بواسطة كولوم ، يوكاوا والجهد اللوغاريتمي وفي وجود جهد حيز مكافئ ثنائي الأبعاد لنظام به عدد محدود من الجسيمات $N = 30$ ودرجة حرارة منخفضة ، حيث يوجد هيكل بلوري يتميز ببنية ذات طبقات. يتم أخذ تأثير تذبذب الشحن العشوائي في الاعتبار حيث عملية الشحن السائدة تكون عن طريق جمع الجسيمات. يمكن ملاحظة أن تذبذب الشحن يغير تكوينات الحالة الأساسية، التي تقود النظام لإظهار تحولات في البنية الهيكلية التي تكون أكثر فعالية عندما تتفاعل الجسيمات من خلال الجهد اللوغاريتمي. اقترحنا تعبير بسيط وجديد لتذبذب الشحن العشوائي و الذي يتميز بسعة الشحن، مستوحى من نموذج خرباك (Khrapak). كل من معيار درجة الحرارة وسعة تذبذب الشحن ، تم استخدامهما لاستكشاف السلوكيات المجهرية الغنية للنظام الكلاسيكي اللاخطي في حالة جهد كولوم. يخضع تجمع الجسيمات لتحولات هيكلية، والتي تظهر على أنها انتقالات طور من الدرجة الأولى أو الثانية بالنسبة لتغير في معيار درجة الحرارة وسعة تذبذب الشحن. يتوافق الانتقال الأول مع دوران الطبقات ، بينما يتوافق الانتقال الثاني مع الإنصهار أو الفوضى. بالإضافة إلى ذلك، درجة حرارة الانصهار تتوقف على سعة تذبذب الشحن ، أي في حالة سعة تذبذب شحن منخفضة ، يكون للنظام بنية هيكلية إلى أن تصل درجة حرارة حرجة T_m ، حيث ينتج الانصهار. تنخفض درجة الحرارة هذه عندما تزداد سعة تذبذب الشحن نتيجة للتفاعل القوي بين الجسيمات.

الكلمات المفتاحية : تجمع الجسيمات ثنائية الأبعاد، جزيئات الغبار، تذبذب الشحن العشوائي، طريقة مونت كارلو.

Abstract :

Numerical simulations based on the Monte Carlo method are conducted to investigate ground-state configurations and phase transitions of strongly coupled dust particles. The interparticle potential between negatively charged dust particles is modeled by Coulomb, Yukawa and logarithmic potential and in the presence of two dimensional parabolic confinement potential for a system with a restricted number of particles $N=30$ and low temperature, at which a crystalline structure characterized by shell structure exists. The effect of random charge fluctuation is taken into account for a dominant charging process by particles collection. Charge fluctuation is found to modify the ground-state configurations, leading the system to exhibit structural transitions that are more effective when particles interact through logarithmic potential. The new simple expression of charge fluctuation is considered and characterized by a charge amplitude calculated using the approach of Khrapak et al. Both parameters, temperature and charge fluctuation amplitude, are used to explore the rich microscopic behaviours of the non-linear mesoscopic classical system in the case of coulomb potential. The clusters undergo structural transitions, which manifest as phase transitions of first or second order with respect to the parameter T and charge fluctuation. The first transition corresponds to inter-shell rotations, while the second one corresponds to melting or disorder. Moreover, the melting temperature depends on the charge amplitude, that is, for lower amplitude of the charge, the system exhibits a shell structure until a critical temperature T_m , where the melting occurs. This temperature decreases when the charge amplitude increases as a result of particles' strong repulsive interaction.

Keywords : 2D clusters, dusty plasma, dust particles, phase transitions, random charge fluctuation, Monte Carlo method

Résumé :

Des simulations numériques basées sur la méthode de Monte Carlo sont effectuées pour étudier les configurations de l'état fondamental et les transitions de phase de particules de poussière fortement couplées. Le potentiel interparticulaire entre les poussières chargées négativement est modélisé par Coulomb, Yukawa et le potentiel logarithmique, pour un système avec un nombre restreint de particules $N = 30$ et à basse température, auquel une structure cristalline caractérisée par une structure en couche existe. L'effet de la fluctuation aléatoire de la charge est prise en compte pour un processus de charge dominant par la collection des particules. On constate que la fluctuation de la charge modifie les configurations de l'état fondamental, conduisant le système à présenter des transitions structurelles qui sont plus efficaces lorsque les particules interagissent par potentiel logarithmique. Une nouvelle expression simple de la fluctuation de la charge est considérée, caractérisée par une amplitude de charge calculée selon l'approche de Khrapak et Co-auteurs. Les deux paramètres, la température et l'amplitude de fluctuation de la charge, sont utilisés pour explorer les riches comportements microscopiques du système classique mésoscopique non linéaire dans le cas du potentiel coulomb. Les clusters subissent des transitions structurelles, qui se manifestent par des transitions de phase du premier ou du second ordre par rapport au paramètre T et à la fluctuation de charge. La première transition correspond aux rotations des couches, tandis que la seconde correspond à la fusion ou au désordre. De plus, la température de fusion dépend de l'amplitude de la charge, c'est-à-dire que pour les plus faibles amplitudes de fluctuation la charge, le système présente une structure de couche jusqu'à une température critique T_m , où se produit la fusion. Cette température diminue lorsque l'amplitude de la fluctuation de la charge augmente en raison de la forte interaction répulsive des particules.

Mots clés : Clusters 2D, plasma poussiéreux, particules de poussière, transitions de phase, fluctuation aléatoire de la charge, méthode de Monte Carlo
