

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE 'HOUARI BOUMEDIENNE'  
FACULTÉ DE PHYSIQUE



THESE

*Présentée pour l'obtention du diplôme de Doctorat d'état*

EN : PHYSIQUE

Spécialité : Physique théorique

Par

ROUAIGUIA Leïla

TRANSITIONS DE PHASE D'UN SYSTEME DE PARTICULES  
CHARGEES CONFINEES ET FORTEMENT COUPLEES

Soutenue publiquement le 14 / 03 / 2010, devant le jury composé de :

Mr A. Bendib	Professeur	U.S.T.H.B	Président
Mr M. Drir	Professeur	U.S.T.H.B	Directeur de thèse
Mr M. Djebli	Professeur	U.S.T.H.B	Codirecteur de thèse
Mr N. Beldjoudi	Professeur	U.S.T.H.B	Examineur
Mr O. Lamrous	Professeur	U.M.M.T.O	Examineur
Mr E. H. Amara	Directeur de Recherche	C.D.T.A	Examineur
Mr F. M. Peeters	Professeur	U.A. Belgique	Invité

**A ma mère.**

**A mon père.**

**A toute ma famille.**

# Remerciements

Je tiens en premier lieu à remercier le Professeur Drir Mahraz, mon directeur de thèse, pour m'avoir accueillie au sein de son équipe de recherche. Sa confiance, sa gentillesse et ses précieux conseils ont été d'un grand apport. Qu'il soit ici rassuré de toute ma gratitude.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance au Professeur Djebli Mourad qui a assuré, avec un grand intérêt, la codirection de ce travail de thèse dans le domaine de la physique des systèmes fortement couplés. Son expérience, son regard éclairé et sa patience m'ont été toujours précieux.

J'ai un très grand plaisir à remercier Monsieur Bendib Abderrezag, Professeur à la Faculté de Physique de l'U.S.T.H.B, pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider le jury de cette thèse.

Mes remerciements vont également à Messieurs : Beldjoudi Nadir, Professeur à la Faculté de Physique de l'U.S.T.H.B, Lamrous Omar, Professeur à l'U.M.M.T.O, et Amara El-Hachimi, Directeur de recherche au C.D.T.A d'Alger, qui ont accepté d'examiner le travail de cette thèse.

Je tiens à remercier le Professeur François M. Peeters à l'Université de Antwerpen de Belgique pour sa collaboration pertinente.

Que tous les membres du laboratoire de physique théorique, soient remerciés pour leur encouragement permanent. Enfin, je remercie tous les collègues des Facultés de Physique et de Chimie pour leur soutien moral.

# Table des matières

<b>Résumé</b>	<b>3</b>
<b>Abstract</b>	<b>5</b>
<b>Introduction</b>	<b>11</b>
<b>1 Plasmas complexes fortement couplés</b>	<b>16</b>
1.1 Introduction . . . . .	16
1.2 Longueur de Debye . . . . .	18
1.3 Courants de charge . . . . .	19
1.3.1 Processus de charge . . . . .	21
1.4 Forces agissant sur un grain de poussière . . . . .	22
1.5 Elaboration d'un plasma complexe fortement couplé . . . . .	24
<b>2 Fluctuation de la charge des grains</b>	<b>28</b>
2.1 Equation de la fluctuation de la charge . . . . .	29
2.2 Fluctuation aléatoire de la charge . . . . .	32

2.2.1	Fonction d'auto-corrélation temporelle . . . . .	32
2.3	Théorie du mouvement orbital restreint . . . . .	35
2.3.1	Potentiel attractif . . . . .	35
2.3.2	Limitation de la théorie OML . . . . .	37
<b>3</b>	<b>Techniques de simulation</b>	<b>39</b>
3.1	Méthode particule-dans-cellule . . . . .	40
3.2	Dynamique Moléculaire . . . . .	41
3.3	Méthode de Monte Carlo . . . . .	43
3.3.1	Principe de la méthode MC . . . . .	44
3.3.2	Algorithme de Metropolis . . . . .	47
3.4	Optimisation de l'énergie . . . . .	49
<b>4</b>	<b>Modélisation d'un plasma cristallin à charge positive variable</b>	<b>51</b>
4.1	Introduction . . . . .	51
4.2	Potentiel de confinement . . . . .	53
4.2.1	Confinement elliptique . . . . .	55
4.3	Hamiltonien du système . . . . .	56
4.3.1	Approche numérique . . . . .	61
4.4	Effet de la fluctuation de la charge sur les configurations d'équilibre . . . . .	63
4.5	Transitions de phase dans les cristaux Coulombiens . . . . .	69
4.5.1	Transition ordre-désordre : la fusion . . . . .	73

<b>5</b>	<b>Anisotropie du confinement électrostatique</b>	<b>77</b>
5.1	Confinement elliptique . . . . .	77
5.2	Hamiltonien du système . . . . .	78
5.3	Etats fondamentaux . . . . .	80
5.4	Effet de l'anisotropie sur les transitions de phase . . . . .	85
<b>6</b>	<b>Effet de l'interaction électrostatique sur les transitions de phase</b>	<b>89</b>
6.1	Potentiel d'interaction inter-grains . . . . .	90
6.2	Effet du potentiel inter-grains et de la fluctuation de la charge . . . . .	93
6.2.1	Effet du potentiel et de la fluctuation sur la fusion . . . . .	97
6.3	Transitions de phase en présence de l'émission thermo-ionique . . . . .	101
	<b>Conclusion</b>	<b>103</b>

# Résumé

Les plasmas complexes formant une phase ordonnée, constituent un système fortement couplé dont les caractéristiques présentent un intérêt croissant dans le domaine de la physique de la matière condensée. Outre les propriétés communes aux milieux ionisés, les plasmas complexes se comportent comme des cristaux, avec un avantage consistant en la possibilité de leur observation à l'oeil nu.

De nombreuses études, tant expérimentales que numériques, ont fait l'objet de l'investigation de l'effet de la fluctuation aléatoire de la charge des grains de poussière et ont mis en évidence son importance sur les propriétés du système qui les forme.

Le présent travail porte sur l'étude théorique et la simulation du comportement d'un système bidimensionnel fini de grains chargés positivement, sous l'effet de la fluctuation de la charge. La fluctuation retenue dans nos calculs, relève du caractère discret de la charge produite lors des collisions des grains avec les ions et les électrons du plasma. Notre système obéit à un modèle physique qui tient compte à la fois, de l'interaction entre les grains chargés et du potentiel de confinement électrostatique appliqué. Notre étude numérique, basée sur la méthode de simulation de Monte Carlo, a permis d'obtenir les configurations d'équilibre du système, aussi bien pour un confinement parabolique qu'elliptique.

Dans le cas d'un confinement parabolique, nous avons montré qu'une charge variable dans le temps et dans l'espace, induit un changement structural de la configuration

d'équilibre. Ce changement se traduit soit par une rotation des couches concentriques internes de la configuration de l'état fondamental, soit par un saut d'un grain de poussière entre deux couches et cela, sous l'influence du nombre total de grains du système. La transition d'une phase à une autre s'obtient sous l'effet de la fluctuation, à une température inférieure à celle de la transition obtenue dans le cas d'une charge constante. Dans le cas d'un confinement elliptique, nous avons remarqué que la transition d'une configuration d'équilibre bidimensionnelle (en zigzag) à une chaîne linéaire, dépend d'une valeur critique du paramètre d'anisotropie du confinement qui diminue quand le nombre total de grains augmente. L'effet de la fluctuation a été trouvé plus significatif pour une charge moyenne d'équilibre, de l'ordre de ( $\sim 10^3 e$ ).

Il est à noter que les principaux résultats obtenus ont de nombreux intérêts : ils permettent de rendre compte à la fois, des propriétés des cristaux à l'échelle macroscopique et de l'effet de la fluctuation aléatoire de la charge, qui est primordial sur les forces de l'interaction inter-grains et sur les propriétés du système. L'étude de cet effet est nécessaire pour comprendre et analyser les différents phénomènes observés dans les plasmas complexes que l'on rencontre dans les laboratoires, notamment en microélectronique (dépôt, gravure par plasma) et en traitement de surfaces.

# Abstract

Complex plasmas in an ordered phase constitute one of the strongly coupled systems, whose characteristics are of a growing interest in the field of the condensed materials physics. In addition to the common properties of the ionized mediums, complex plasmas behave as crystals, with an advantage : the possibility of being observed by the naked eye.

Many studies, both experimental and numerical, were the subject of the investigation of the effect of the random charge fluctuations of dust grains and highlighted (put in evidence) its importance on the properties of the complex plasma.

This work presents a numerical study of the behaviour of a finite bi-dimensional system, of positively charged dust grains, under the effect of random charge fluctuations. The fluctuations retained in our calculations concern the discrete character of the charge brought during the collisions of the dust grains with the ions and the electrons of the plasma. Our system obeys to a physical model which takes into account, both the interaction between the dust grains and the potential of electrostatic confinement. Our numerical study, based on the Monte Carlo simulation method, allowed to obtain the equilibrium configurations of the system for both parabolic and elliptic confinement.

In the case of a parabolic confinement, we showed that a variable charge in time and space, induces either a rotation of the concentric shells of the configuration, or a jump of a dust grain between shells and this, under the influence of the total number of dust grains of the system. The transition from a phase to another is obtained, under the effect

of fluctuations, at a temperature lower than the one of the transition in the case of a constant charge. In the case of an elliptic confinement, we noticed that the transition from a bi-dimensional equilibrium configuration (zigzag) to a linear chain, depends on a critical value of the anisotropy parameter which decreases when the total number of dust grains increases. The effect of fluctuations has been found significant for an average equilibrium charge of the order  $10^3e$  ( $e$  is the electron charge).

It is important to note that the main obtained results have many interests : they allow to account for, at the same time, the properties of crystals on a macroscopic scale, and the effect of random charge fluctuations wich is important on the forces exerted by the intergrain interaction, and then, on the properties of a system. The study of this effect is necessary to understand and analyze the various phenomena observed in complex plasmas, that can be met in laboratories, mainly in micro-electronics (deposit, plasma engraving) and in surface treatments.

# Table des figures

1.1	<i>Ecrantage des grains de poussière chargés négativement dans un plasma complexe de laboratoire.</i> . . . . .	18
1.2	<i>Image des grains de poussière fortement couplés, obtenue par camera CCD dans un réacteur PKE-Nefedov [39].</i> . . . . .	26
1.3	<i>Formation d'un cristal par les grains de poussière dans le plasma [9].</i> . . . .	27
2.1	<i>Fluctuation aléatoire de la charge des grains de poussière <math>\Delta Z_d</math> dans un plasma complexe de laboratoire en fonction du temps stochastique <math>t</math> de la simulation, obtenue par notre code de calcul pour trois pas du temps d'intégration (ce dernier est inférieur au temps de fluctuation de la charge des grains).</i> . . . . .	33
3.1	<i>Méthode MC de type noir ou blanc.</i> . . . . .	45
3.2	<i>Méthode MC élémentaire.</i> . . . . .	46
4.1	<i>Confinement des grains de poussière dans la gaine d'un plasma de décharge radio-fréquence (RF) [85].</i> . . . . .	54
4.2	<i>(a) Schéma du dispositif expérimental. (b) Section transversale de la barrière de confinement anisotropique : Illustration des lignes équipotentiellles [115].</i> . . . . .	56

4.3	<i>Variation de la fréquence de friction <math>\nu_{fr}</math> (.....) et de la fréquence <math>\beta</math> de fluctuation de la charge en fonction du rayon de grain <math>r_d</math>. <math>\beta</math> est représentée pour deux valeurs de <math>Z_o</math> (<math>Z_o = 3000</math> (---) et <math>Z_o = 4000</math> (. - . -)). . .</i>	60
4.4	<i>Energies minimales et globale d'un système physique en fonction du nombre d'itérations de la simulation MC. . . . .</i>	61
4.5	<i>Configurations de l'état fondamental, à <math>T \sim 0</math>, des systèmes 2D de <math>N = 5, 10, 15</math> grains de poussière modélisés par un potentiel de type Yukawa. Les configurations (a), (b) et (c) sont représentées dans le cas d'une charge constante et les configurations (d), (e) et (f) sont représentées dans le cas d'une charge fluctuante. . . . .</i>	65
4.6	<i>Configurations d'équilibre du système (type Yukawa) de <math>N = 80</math> grains obtenues à <math>T \sim 0</math> et dans les deux différents cas : (a) à charge constante et (b) avec fluctuation aléatoire de la charge. . . . .</i>	67
4.7	<i>Configurations d'équilibre des systèmes <math>N = 5, 10, 15</math> grains représentées à <math>T = 0.1\Delta T</math> dans les cas : (a), (b), (c) à charge constante et (d), (e), (f) à charge fluctuante pour l'intervalle de temps <math>\Delta t_1 = 16\Delta t</math> et (g), (h), (i) à charge fluctuante pour l'intervalle de temps <math>\Delta t_2 = 55\Delta t</math>. . . . .</i>	70
4.8	<i>Trajectoires du mouvement de <math>N = 9</math> grains de poussière dans un plasma cristallin, représentées à trois températures : <math>0.15\Delta T, 0.4\Delta T</math> et <math>\Delta T</math> respectivement et obtenues dans les cas : (a), (b), (c) à charge constante et (d),(e),(f) à charge positive fluctuante dans l'intervalle de temps <math>16\Delta t</math> et (g), (h), (i) à charge positive fluctuante dans l'intervalle de temps <math>55\Delta t</math>. . .</i>	72
4.9	<i>Variation de l'énergie par grain en fonction de la température dans un plasma cristallin de <math>N = 10</math> grains de poussière, pour les deux cas de charge : (<math>\blacktriangle</math>) à charge constante et (<math>\triangle</math> moitié plein) à charge fluctuante. . .</i>	73

4.10	<i>Variation de l'écart type du déplacement radial moyen en fonction de la température d'un système de 10 grains, tracée à charge constante (●), à charge fluctuante dans l'intervalle de temps <math>\Delta t_1</math> (○) et à charge fluctuante dans l'intervalle de temps <math>\Delta t_2</math> (○ moitié plein).</i>	75
5.1	<i>Configurations d'équilibre des différents systèmes de <math>N = 4, 5, 6, 9, 10</math> grains obtenues pour différentes valeurs du paramètre d'anisotropie <math>\alpha</math> à charge constante et à basse température (<math>T \sim 0</math>), <math>Z_{do} = 10^4</math>.</i>	82
5.2	<i>Configurations d'équilibre des différents systèmes de <math>N = 4, 5, 6, 9, 10</math> grains obtenues pour différentes valeurs du paramètre d'anisotropie <math>\alpha</math> à charge variable et à basse température (<math>T \sim 0</math>), <math>Z_{do} = 10^4</math>.</i>	83
5.3	<i>Ecart-type de l'amplitude de la fluctuation de la charge en fonction de <math>Z_{do}</math> à deux température d'électrons photoémis différentes. (●) pour <math>T_{pe} = 0.8</math> eV et (★) pour <math>T_{pe} = 0.15</math> eV.</i>	84
5.4	<i>Effet de la charge moyenne <math>Z_{do}</math> du grain sur le paramètre d'anisotropie <math>\alpha_c</math> quand la charge fluctue. Deux systèmes sont étudiés : (●) un petit système (<math>N = 15</math>) et (▲) un système relativement large (<math>N = 45</math>).</i>	85
5.5	<i>Variation du paramètre d'anisotropie critique <math>\alpha_c</math> en fonction du nombre de particules <math>N</math>. Avec charge fluctuante (○) <math>Z_{do} = 10^3</math>; (★) <math>Z_{do} = 10^4</math>; (Δ) <math>Z_{do} = 10^5</math> et sans fluctuation de charge (●).</i>	86
5.6	<i>Variation de <math>\alpha_c</math> avec la température des grains dans le cas du système à <math>N = 15</math> grains. (●) sans fluctuation et (○) : <math>Z_{do} = 10^3</math>; (★) : <math>Z_{do} = 10^4</math> avec fluctuation de la charge.</i>	88
5.7	<i>Variation de l'énergie par grain de la transition (2D)-(1D), <math>E_c</math> en fonction du nombre de grains sous l'effet de la fluctuation de la charge (○) <math>Z_{do} = 10^3</math>; (★) <math>Z_{do} = 10^4</math>; (Δ) <math>Z_{do} = 10^5</math> et sans l'effet de la charge variable (●).</i>	88

6.1	<i>Configurations de l'état d'équilibre à charge constante d'un système de <math>N = 20</math> grains de poussière modélisé par trois potentiels : Yukawa (a), logarithmique (b) et coulombien (c).</i> . . . . .	92
6.2	<i>Configurations de l'état d'équilibre à charge positive variable d'un système de <math>N = 20</math> grains de poussière modélisé par trois potentiels : Yukawa (a), logarithmique (b) et coulombien (c).</i> . . . . .	94
6.3	<i>Configurations de l'état d'équilibre à charge négative variable d'un système de <math>N = 20</math> grains de poussière modélisé par trois potentiels : Yukawa (a), logarithmique (b) et coulombien (c).</i> . . . . .	96
6.4	<i>Variation du déplacement quadratique moyen <math>U_R^2</math> en fonction de la température normalisée <math>T/T_o</math> pour les deux cas la charge : constante (cercle plein) et charge variable (<math>\Delta</math>). Le système est modélisé par les trois potentiels : Yukawa (a), logarithmique (b) et Coulomb (c).</i> . . . . .	99
6.5	<i>Variation de la température de fusion, d'un cristal de 15 grains, en fonction de la température à charge constante (cercle plein) et à charge fluctuante (triangle). L'interaction inter-grains est de type de Yukawa (<math>k = 3</math>).</i> . . . .	100
6.6	<i>Energie du systèmes de <math>N = 15</math> grains, modélisé par le potentiel de Yukawa (<math>k = 3</math>), en fonction de la température à charge constante (cercle plein) et à charge fluctuante (triangle).</i> . . . . .	101
6.7	<i>Variation de la température de fusion d'un cristal de 15 grains en fonction du paramètre de couplage <math>k</math> de l'interaction de type Yukawa, en présence de la fluctuation de la charge positive. Les triangles et les étoiles distinguent entre deux processus de charge considérés : (<math>\Delta</math>) émission photo-ionique et (<math>\star</math>) émission thermo-ionique.</i> . . . . .	103

# Introduction

Les plasmas qui contiennent des particules chargées ayant une taille de l'ordre de quelques micro-mètres (ce qui les rend visibles à l'oeil nu), sont appelés des plasmas complexes ou poussiéreux. En général, l'énergie associée à l'agitation thermique est beaucoup plus importante que celle associée à l'interaction électrostatique due à la charge des grains de poussière. Ainsi, à basse température ( $T < 1eV$ ), l'interaction électrostatique devient dominante dans ces systèmes de particules massives chargées et entraîne un certain ordre structural; tel est le cas d'un système fortement couplé.

Depuis 1934, les structures fortement couplées ont constitué un domaine de la physique à part entière. D'après les fondements théoriques de Wigner [1], il y a possibilité de formation de cristaux par des électrons. Ces cristaux peuvent être aussi constitués par des ions et des particules colloïdales [2]-[5]. Dès lors, la physique des plasmas fortement couplés, se présente comme un domaine intermédiaire entre la physique de la matière condensée et la physique des milieux ionisés. Ces domaines présentent un intérêt croissant, vu leurs applications dans les systèmes thermonucléaires, tels que les générateurs magnétodynamiques et les plasmas-chimiques [6, 7]. En plus des applications précédentes, les plasmas complexes offrent une possibilité directe de l'étude des propriétés dynamiques et optiques des cristaux. Théoriquement, la possibilité de formation des solides et des liquides coulombiens dans le plasma, a été démontrée pour la première fois par Ikezi en 1986 [8]. Depuis le début de l'année 1994, les développements expérimentaux ont dépassé les études et les analyses théoriques [9]-[13]. En effet, c'est à cette époque que l'observation des cristaux de Wigner à l'oeil nu a été rendue possible [14].

Des grains de poussière, formant différentes structures cristallines, ont été observés dans les plasmas de décharge de laboratoire. Par ailleurs, la transition de l'état ordonné à l'état désordonné de ces cristaux, peut être observée en augmentant la température des grains ou en provoquant des fluctuations dans le plasma de base [15, 16]. Il est à noter que ces dernières concernent notamment les propriétés des espèces chargées dans le plasma (température et densité électroniques) et qu'elles affectent l'ordre cristallin dans celui-ci, au même titre que les fluctuations de la charge des grains. D'où, l'intérêt particulier que nous accordons à ce phénomène de fluctuation de charge.

De nombreux travaux ont été consacrés à l'étude des processus de charge des grains, aussi bien dans les plasmas de laboratoire que dans les plasmas astrophysiques [17]-[19]. La nature et l'ordre de grandeur de la charge des grains sont d'un impact important. La charge des grains de poussière provient généralement de la contribution de plusieurs processus physiques, telles que l'absorption des électrons et des ions du plasma, l'émission électronique secondaire et l'émission photo-électronique dans les milieux radiatifs [20, 21]. Cependant, le processus de charge est un processus stochastique qui entraîne constamment une fluctuation de la charge du grain autour d'une valeur d'équilibre. Alors que d'une part, la charge des grains peut être à l'origine de dysfonctionnements des dispositifs électroniques lorsqu'elle est liée aux nanocristaux déposés [22], elle devient, d'autre part, utile dans la décontamination des réacteurs plasmas industriels, grâce à l'utilisation de champs électriques appropriés [23]. Cette propriété peut également être exploitée dans les réacteurs pour la fusion nucléaire, en facilitant l'élimination des grains de poussière créés par l'érosion des parois exposées au plasma. Il est utile d'étudier les propriétés de la cristallisation des grains de poussière, ainsi que leur dépendance de certaines caractéristiques intrinsèques, telle que la fluctuation de la charge des grains [24]. Cette dernière peut particulièrement affecter la portée de l'interaction inter-grains et donc, les propriétés structurales des cristaux formés dans les plasmas complexes [25]. Par ailleurs, la modélisation de l'interaction entre les grains de poussière, dans les plasmas complexes fortement couplés, ainsi que l'étude des effets de taille et de charge sur la portée de cette interaction restent à l'ordre du jour.

Le présent travail porte essentiellement sur l'étude théorique et la simulation, de l'effet de la fluctuation aléatoire de la charge de grains de poussière, sur les configurations d'équilibre des cristaux qu'ils peuvent former, ainsi que les transitions de phases qui leurs sont associées. Il est à noter que nous traitons le cas particulier de grains chargés positivement par un processus de photo-émission. Le système fini étudié est donc un plasma complexe de laboratoire ayant un nombre de grains de poussière  $N$  inférieur à 300, maintenus dans un espace limité à deux dimensions, par un confinement électrostatique. Le processus de charge responsable de cette fluctuation est attribué principalement aux radiations ultraviolettes (UV). En effet, en présence de radiations (UV), la charge présente des fluctuations aléatoires dues à l'aspect discret des porteurs de charge [26].

L'ensemble des propriétés fondamentales des plasmas complexes fortement couplés, sera présenté dans le premier chapitre.

Le deuxième chapitre sera consacré à la description de la fluctuation de la charge des grains de poussière dans les plasmas complexes fortement couplés.

Les méthodes de simulation numérique de Monte Carlo, de dynamique moléculaire et de particule-dans-cellule (particle in cell : PIC) utilisées, en particulier dans les systèmes fortement couplés, seront présentées dans le troisième chapitre.

La présentation du modèle physique tenant en compte la fluctuation de la charge, ainsi que la détermination des configurations d'équilibre stables par la méthode de Monte Carlo, faisant appel à l'algorithme standard de Metropolis et couplée à la méthode de Newton, fera l'objet de la première partie du chapitre quatre. En deuxième partie de ce dernier, nous passerons à la présentation des résultats : Nous montrerons l'effet de la fluctuation de la charge, sur les configurations d'équilibre et les transitions de phase dans un cristal fini bidimensionnel sujet à un confinement électrostatique parabolique. Il est important de noter que le potentiel de l'interaction inter-grains considéré est de type de Debye-Hückel (ou Yukawa), qui prend en compte l'écrantage des grains par les espèces chargées du plasma.

Le cas particulier où le confinement présente une géométrie asymétrique elliptique, sera traité dans le cinquième chapitre.

Dans le sixième chapitre, nous traiterons trois systèmes correspondant chacun à un type

d'interaction inter-grains différent ; à savoir, coulombien, de type Yukawa et logarithmique. Le potentiel de confinement appliqué, dans ce cas, est de type parabolique. Nous étudierons l'effet de la fluctuation de la charge des grains de poussière sur la température de fusion de ces trois types de systèmes de grains. L'effet d'un autre processus de charge, par émission thermo-ionique, sur les transitions ordre-désordre dans le cristal formé, sera considéré dans ce chapitre.

Dans la conclusion, nous rappellerons l'ensemble des résultats obtenus et nous présentons quelques perspectives dans le cadre de la poursuite des travaux entrepris.

# Chapitre 1

## Plasmas complexes fortement couplés

### 1.1 Introduction

Les plasmas complexes sont des gaz ionisés constitués d'électrons, d'ions, d'atomes neutres et de grains de poussière massifs, de forme et de taille différentes où le rayon varie du nanomètre au micromètre.

Les grains de poussière dans un plasma acquièrent une charge négative élevée (de l'ordre de  $10^3e$  à  $10^5e$ ) grâce à la grande mobilité des électrons [20]. En revanche, ils peuvent se charger positivement par le processus d'émission des électrons à partir de la surface des grains, comme la photo-émission par radiation ultraviolette (UV) [27].

La compréhension des propriétés des plasmas complexes est d'une grande importance pour l'étude des phénomènes physiques fondamentaux, comme la cinétique des transitions de phases, les processus d'organisation dans des structures régulières et la décontamination des dispositifs de fabrication des semiconducteurs. La recherche dans les plasmas complexes a connu aussi des efforts considérables dans la physique de surfaces et dans certains domaines de nanotechnologie [7, 28].

Il est important de noter que la charge élevée des grains de poussière dans le plasma conduit à une interaction électrostatique forte. Le couplage entre les grains est caractérisé par un paramètre, nommé  $\Gamma$ , défini comme étant le rapport entre l'énergie potentielle coulombienne de l'interaction inter-grains et l'énergie de l'agitation thermique [29] :

$$\Gamma = \frac{q_d^2}{aT_d}, \quad (1.1)$$

où  $a \sim n_d^{-1/3}$  est la distance moyenne inter-grains.  $q_d$ ,  $T_d$  et  $n_d$  sont respectivement la charge, la température et la densité des grains.  $T_d$ , appelée aussi température cinétique du grain, est en unité énergie, où la constante de Boltzmann est égale à l'unité.

Le paramètre de couplage coulombien définit deux domaines complètement différents de la physique des plasmas complexes. Les plasmas poussiéreux sont dits faiblement couplés si  $\Gamma \ll 1$ , et fortement couplés si  $\Gamma \gg 1$ . Dans un plasma, les grains ne peuvent pas toujours être considérés comme isolés. Lorsque la concentration est élevée, ils peuvent avoir un comportement collectif et sont considérés alors comme un fluide ou un solide coulombien. De nombreuses études sur les fluides et les solides coulombiens ont pu quantifier l'intensité du couplage. En présence d'effet d'écran (screening), l'interaction inter-grains est de type Yukawa et le paramètre de couplage  $\Gamma_s$  s'exprime par [28, 29] :

$$\Gamma_s = \frac{q_d^2}{aT_d} \exp\left(-\frac{a}{\lambda_D}\right), \quad (1.2)$$

où  $\lambda_D$  est la longueur de Debye et  $k = a/\lambda_D$  est le paramètre de la structure (ou du réseau).

Il est à noter que pour  $\Gamma_s > 170$ , selon l'étude théorique de Ikezi, un solide coulombien bidimensionnel infini se forme et on parle d'un liquide coulombien lorsque  $\Gamma_s < 170$  [8].

Le paramètre de couplage dépend de deux paramètres essentiels qui permettent la compréhension du comportement collectif d'un plasma poussiéreux, il s'agit de la longueur de Debye et des courants de charge.

## 1.2 Longueur de Debye

Dans les plasmas complexes de laboratoire à basse température, le grain se charge négativement par la collection des électrons grâce à leur grande mobilité. Un potentiel électrique au niveau de la surface se crée et attire autour du grain les ions positifs qui vont écranter son potentiel. La sphère d'ions qui se forme autour du grain est appelée sphère de Debye et son rayon est appelé longueur de Debye (voir Fig. 1.1). Une telle mixture de plasma et de grains de poussière possède trois échelles de longueur caractéristiques. Ce sont le rayon du grain  $r_d$ , la longueur de Debye  $\lambda_D$ , et la distance moyenne inter-grains  $a$ . Au-delà de la distance  $\lambda_D$ , l'influence du champ électrique exercé par le grain n'est plus ressentie par les autres espèces présentes dans le plasma.

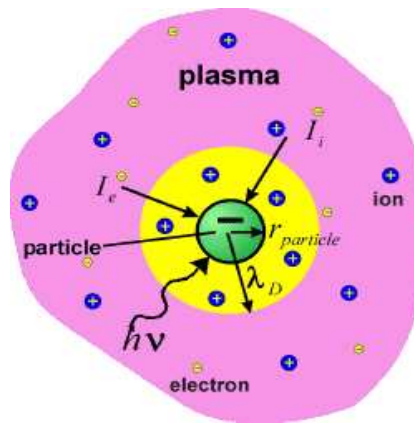


FIG. 1.1: *Ecrantage des grains de poussière chargés négativement dans un plasma complexe de laboratoire.*

A l'état d'équilibre thermodynamique, l'expression de la longueur de Debye déterminée à partir de l'équation de Poisson s'écrit [20] :

$$\lambda_D = \frac{\lambda_{De}\lambda_{Di}}{\sqrt{\lambda_{De}^2 + \lambda_{Di}^2}}, \quad (1.3)$$

où  $\lambda_{De,i} = (T_{e,i}/4\pi n_{e,io}e^2)^{1/2}$  représente le rayon de Debye électronique (ionique),  $T_{e(i)}$  la température électronique (ionique) exprimée en unité d'énergie,  $n_{e(i)o}$  la densité électronique (ionique) à l'équilibre et  $e$  la charge élémentaire. Dans le cas où  $T_e \gg T_i$  et  $n_{io} > n_{eo}$ ,  $\lambda_D$  est de l'ordre de  $\lambda_{Di}$  ( $\lambda_D \sim \lambda_{Di} \gg \lambda_{De}$ ).

Dans un plasma poussiéreux typique, le rayon  $r_d$  est généralement petit devant la longueur  $\lambda_D$ . Lorsque  $r_d \ll \lambda_D \ll a$ , les grains de poussière sont considérés isolés dans le plasma complexe. Par contre, dans le cas où  $r_d \ll a < \lambda_D$ , les effets collectifs entre les grains deviennent importants. Les grains de poussière sont assimilés à des particules ponctuelles massives semblables à des ions à charge multiple. La charge totale portée par les grains peut modifier sensiblement l'équilibre des densités d'ions et d'électrons. En se rappelant qu'en l'absence de perturbations extérieures, un plasma poussiéreux est globalement neutre. Dans le plasma, une grande densité de grains chargés négativement implique une densité d'électrons faible, une température électronique plus élevée et un écrantage est traduit par les ions de plasma.

### 1.3 Courants de charge

Les grains injectés dans le plasma subissent le flux des ions et des électrons au niveau de la surface. L'évolution temporelle de la charge  $q_d$  d'un grain est déterminée par la conservation de la charge électrique [30]-[32] :

$$\frac{dq_d}{dt} = \sum_s I_s, \quad (1.4)$$

où  $I_s$  est le courant associé à l'espèce  $s$  sachant que  $s$  représente les différentes entités du plasma (électrons et ions). Il est à noter que les courants  $I_s$  dépendent des propriétés du plasma dans lequel le grain a été immergé.

La théorie du mouvement orbital restreint (*orbital motion limited* : OML) est souvent utilisée pour décrire la charge acquise par un grain isolé dans un plasma [30]. Le grain est alors supposé satisfaire la condition :  $r_d \ll \lambda_D \ll \lambda_{lpm}$ , où  $\lambda_{lpm}$  est le libre parcours moyen entre les atomes du gaz et les ions. Ceci revient à imposer l'absence de collision à l'intérieur de la sphère définie par le rayon de Debye.

En admettant une distribution d'énergie de type Maxwell pour les ions, il est possible de déterminer le courant ionique par [25] :

$$I_i = n_{i0} e \pi r_d^2 \sqrt{\frac{8k_B T_i}{\pi m_i}} \left( 1 - \frac{eV(r_d)}{k_B T_i} \right), \quad (1.5)$$

où  $T_i$  représente la température des ions,  $m_i$  la masse,  $n_{io}$  la densité moyenne et  $V(r_d)$  le potentiel à la surface du grain. Le courant électronique peut être déterminé de la même manière. Toutefois, les électrons doivent traverser une barrière de potentiel  $eV(r_d)$ , ceci implique que seuls les électrons ayant une énergie supérieure à l'énergie de cette barrière peuvent atteindre la surface du grain. Cependant, les autres électrons seront réfléchis et le courant électronique sera donné par [25] :

$$I_e = -n_{eo}e\pi r_d^2 \sqrt{\frac{8k_B T_e}{\pi m_e}} \exp\left(\frac{eV(r_d)}{k_B T_e}\right), \quad (1.6)$$

où  $T_e$ ,  $m_e$  et  $n_{eo}$  représentent respectivement la température, la masse et la densité moyenne de l'électron.

A l'état d'équilibre, la charge  $q_d$  des grains ne change pas sous l'influence de ces courants, et la somme des courants ionique et électronique est égale à zéro :

$$\frac{dq_d}{dt} = I_i + I_e = 0. \quad (1.7)$$

En résolvant l'équation des courants (Eq. 1.7), on peut déterminer le potentiel  $V(r_d)$  du grain à l'équilibre :

$$1 - \frac{eV(r_d)}{k_B T_e} = \sqrt{\frac{m_i T_e n_{eo}}{m_e T_i n_{io}}} \exp\left(\frac{eV(r_d)}{k_B T_e}\right). \quad (1.8)$$

Il existe plusieurs méthodes d'exprimer le potentiel électrostatique à la surface du grain, entre autres, en fonction de la charge et du paramètre d'écrantage. Le potentiel à la surface, dans le système d'unités (*cgs*), est exprimé comme un potentiel coulombien associé à la charge [20] :

$$V(r_d) = \frac{q_d}{r_d}. \quad (1.9)$$

Comme première approximation, le grain est assimilé à un conducteur sphérique de capacité  $C = r_d$  et ayant une charge électrique  $q_d = CV(r_d)$ . Il est à noter que le potentiel à la surface du grain ne dépend pas du rayon de grain, par contre, sa charge est proportionnelle au rayon. Typiquement, un grain de rayon  $1 \mu m$  peut porter plus d'un millier d'électrons à sa surface. Cette dépendance est d'une grande importance pour comprendre et analyser les différents phénomènes observés dans les plasmas poussiéreux. En effet, cette charge va conditionner le rapport de certaines forces qui s'exercent sur les grains de poussière.

### 1.3.1 Processus de charge

Un grain de poussière immergé dans un plasma va acquérir un potentiel communément appelé potentiel flottant qui correspond au potentiel pour lequel la somme des courants est nulle. Un grain se charge négativement par collection des électrons comme il peut se charger positivement. Citons quelques processus de charge :

#### a) Emission photo-ionique

Lorsqu'un grain chargé négativement est illuminé par un flux de photons avec une énergie ( $h\nu$ ) individuelle supérieure à une énergie de seuil ( $W_{f,\infty}$ ), il peut émettre des électrons. La photo-émission dépend de la longueur d'onde des photons incidents, de la surface et de la nature des grains. Pour des grains de nature métallique, la valeur de l'énergie de seuil est inférieure à  $5 eV$ .

Pour libérer un électron d'un grain qui est devenu positivement chargé, le photon incident doit approximativement avoir une énergie  $h\nu > W_{f,\infty} + eV(r_p)$ . Il est utile de mentionner que le travail d'extraction des électrons de la surface des grains, est inférieur à celui des atomes pris individuellement [33].

#### b) Emission thermo-ionique

Un grain peut émettre des électrons ou des ions lorsqu'il est chauffé à haute température, par irradiation laser par exemple. La valeur du courant d'émission thermo-ionique associé  $I_{th}$  peut être alors estimée par l'équation de Richardson, qui prend en compte l'effet du potentiel électrostatique du grain [34, 35] :

$$I_{th} = 4\pi r_d^2 A_t T_d^2 \exp\left(-\frac{W_{f,\infty}}{k_B T_d}\right), \quad (1.10)$$

où  $A_t = 4\pi e m_e k_B^2 / h^3$  est une constante.

#### c) Emission d'électron secondaire

Lorsqu'une particule (ion ou molécule) du plasma est suffisamment énergétique, elle entre en collision avec un grain. Ce dernier peut céder un électron à l'ion ou à la molécule, comme il peut directement libérer des ions ou des électrons. L'ionisation par impact peut ainsi mener au chargement d'un grain. Cet effet augmente avec la densité ou la vitesse des molécules du gaz.

Les électrons très énergétiques qui entrent en collision avec un grain peuvent causer l'émission des électrons secondaires. En fonction de la distance parcourue sur le grain, l'énergie initiale de l'électron est progressivement perdue au profit de la production d'électrons secondaires. Ceux-ci diffusent vers la surface et s'échappent du grain, s'ils ne sont pas absorbés entre le lieu d'émission et la surface. Le nombre d'électrons secondaires produits par un électron primaire incident s'exprime par un coefficient d'émission secondaire, dépendant de l'énergie de l'électron incident et du rayon du grain [20, 36].

## 1.4 Forces agissant sur un grain de poussière

Il existe différentes forces agissant sur un grain de poussière dans le plasma. Parmi les quelles, nous citons :

### a) Force électrostatique

Il a été montré que même si le plasma écran la charge portée par le grain, il n'annule pas l'effet du champ électrostatique moyen. Par exemple, pour un plasma radio-fréquence (RF), un champ électrique intense existe au voisinage des électrodes, dû à la différence entre la mobilité des électrons et celle des ions. La force, associée au champ électrostatique moyen  $\vec{E}_o$ , exercée sur un grain peut s'exprimer sous la forme [29] :

$$\vec{F}_e = q_d \vec{E}_o. \quad (1.11)$$

### b) Force de friction des ions

Le flux d'ions accélérés au bord de la gaine transfère une partie de sa quantité de mouvement aux grains piégés et crée une force opposée à celle créée par le champ électrostatique moyen. Cette force est appelée force de friction ou d'entraînement.

Vu le caractère coulombien de l'interaction, la section efficace d'interaction entre le grain et les ions est largement supérieure à la surface apparente du grain ( $\pi r_d^2$ ), donc une formulation générale de la force d'entraînement se fait comme suit [29] :

$$\vec{F}_{i-d} = n_{io} m_i \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{v}_i |\vec{v}_i| \sigma_{d,mi}(|\vec{v}_i|) f(\vec{v}_i) d^3 \vec{v}_i, \quad (1.12)$$

où  $\vec{v}_i$  est la vitesse relative des ions par rapport au grain,  $n_{io}$  la densité moyenne et  $m_i$  la masse moyenne des ions.  $\sigma_{d,mi}(|\vec{v}_i|)$  est la section efficace de transfert de la quantité de mouvement des ions et  $f(\vec{v}_i)$  représente une distribution tri-dimensionnelle en vitesse des ions, dans le référentiel du grain.

### c) Force de friction due aux atomes

Les atomes transfèrent une partie de leur quantité de mouvement aux grains piégés dans le plasma lorsqu'ils sont animés d'un mouvement directionnel vers le grain. Selon la valeur du nombre de Knudsen, représentant le libre parcours moyen du gaz par rapport au rayon du grain ( $K_n$ ), nous distinguons le régime hydrodynamique ( $K_n \ll 1$ ) du régime cinétique ( $K_n \gg 1$ ). Lorsque les grains ont des dimensions très inférieures au libre parcours moyen des atomes de gaz, la force s'exprime comme [29] :

$$F_{d,nd}^{\vec{}} = \frac{4}{3} \pi r_d^2 n_n m_n v_{th,n} (\vec{v}_n - \vec{v}_d) \quad (1.13)$$

avec

$$v_{th,n} = \sqrt{\frac{8k_B T_{gaz}}{\pi m_n}}, \quad (1.14)$$

où  $\vec{v}_n$  est la vitesse moyenne des atomes et  $\vec{v}_d$  celle du grain.  $n_n, m_n, v_{th,n}$  et  $T_{gaz}$  représentent respectivement la densité, la masse, la vitesse thermique moyenne et la température des atomes. Dans la limite de très grande taille, une force appelée force visqueuse de Stokes, apparaît proportionnelle à  $r_d$  :

$$F_{d,nd}^{\vec{}} = F_{d,s}^{\vec{}} = 6\pi\eta r_d (\vec{v}_n - \vec{v}_d) \quad (1.15)$$

où  $\eta$  est la viscosité du gaz.

### d) Force thermophorèse

La quantité de mouvement des atomes incidents sur le grain venant du côté chaud est plus grande que celle des atomes venant du côté froid. Il s'en établit un gradient de température de gaz qui crée une force appelée force thermophorèse, celle-ci pousse les grains vers les régions froides. Cette force s'exprime par [29] :

$$F_{d,th}^{\vec{}} = -\frac{32}{15} \left(1 + \frac{5\pi}{32} (1 - \alpha_{th})\right) \frac{r_d^2 k_{trans}}{v_{th,n}} \vec{\nabla} T_{gaz}, \quad (1.16)$$

où  $k_{trans}$  est la part translationnelle de la conductivité thermique du gaz.  $\alpha_{th}$  est un coefficient qui caractérise les atomes. A forte puissance radio-fréquence (RF), un gradient de température peut être induit par le chauffage du gaz par le plasma. Les particules subissent alors une force dirigée du centre vers les électrodes.

### e) Force de gravité

Une particule est soumise à l'influence de la gravité. La dépendance en  $r_d^3$  de la force de gravité la rend essentiellement significative pour les grandes particules qu'elle attire vers l'électrode inférieure dans le réacteur d'un plasma complexe.

$$\vec{F}_g = m_d \vec{g} = \frac{4}{3} \pi e r_d^3 \rho_d \vec{g}, \quad (1.17)$$

où  $r_d$  est le rayon d'un grain sphérique,  $m_d$  la masse,  $\rho_d$  la masse volumique et  $g$  la constante de gravité. Généralement cette force est compensée par une force électrostatique créée par un champ vertical de confinement électrostatique.

## 1.5 Elaboration d'un plasma complexe fortement couplé

Afin d'étudier un plasma poussiéreux en laboratoire [37, 38], il faut de toute évidence commencer par le produire. La procédure est simple et se fait en deux étapes. La première consiste à choisir le plasma de base. Ce choix est relativement libre mais par mesure de commodité, nous utilisons le plus souvent un plasma froid, à basse pression qui peut être créé par une décharge continue ou radio-fréquence dans un gaz. Quant à la deuxième étape, elle consiste à ajouter les grains de poussière au plasma. Pour cela, différentes méthodes existent :

- L'injection artificielle de grains de poussière directement dans le plasma.
- La formation de grains par ajout d'un gaz réactif ( $SiH_4$ ,  $CH_4$ ).
- La formation de grains par pulvérisation d'une cible.

Le procédé le plus couramment admis est le suivant : les précurseurs moléculaires vont, par le biais de différentes réactions chimiques, donner naissance à des macromolécules puis

à des nanoparticules. Ces nanoparticules vont s'accumuler dans le plasma jusqu'à atteindre une densité critique qui déclenchera le processus d'agglomération (ou d'agrégation). Ce processus se poursuivra jusqu'à ce que les grains atteignent une taille de quelques dizaines de nanomètres à partir de laquelle, la croissance est essentiellement assurée par le dépôt des radicaux sur la surface des grains.

Un plasma poussiéreux peut être créé dans deux réacteurs : le réacteur Silane et le réacteur PKE-Nefedov [40, 29]. Le point commun des plasmas complexes obtenus dans ces deux réacteurs est le plasma d'argon basse pression créé par une décharge radio-fréquence (13.56 MHz) à couplage capacitif. La différence entre les plasmas poussiéreux obtenus est principalement due à la géométrie des réacteurs et aux paramètres expérimentaux choisis.

### **Réacteur Silane**

Dans ce réacteur, les grains de poussière sont formés par un ajout d'un faible pourcentage de silane ( $SiH_4$ ) dans l'argon [22]. Le réacteur est surtout utilisé pour la synthèse de nanocristaux (<10 nm) de silicium pour les applications industrielles. La majorité des études menées sur le silane a pour but de comprendre et de maîtriser la croissance de ces nanocristaux.

### **Réacteur PKE-Nefedov**

Dans ce réacteur, les grains de poussière sont formés soit par pulvérisation d'un matériau polymère préalablement déposé sur l'électrode inférieure, soit par injection des grains de mélamine dans le réacteur, grâce à un introducteur inséré dans l'électrode supérieure (Fig.1.2). Le réacteur PKE-Nefedov est principalement dédié à l'étude du comportement et de la cristallisation du nuage des grains de poussière.

Afin de caractériser les plasmas poussiéreux de laboratoire, différents processus sont utilisés. Les processus les plus faciles à mettre en oeuvre et qui nous servent de référence, sont basés sur les caractéristiques électriques de la décharge. Des processus optiques, telle que la spectroscopie d'émission optique, sont également utilisés afin d'identifier les différentes espèces chimiques présentes dans le plasma et de suivre leur évolution au cours de la croissance des grains de poussière. Pour observer l'influence globale des grains de poussière sur le plasma, l'imagerie de celui-ci est réalisée par caméra CCD (*charge-coupled*

*device*) standard ou rapide notamment pour les phénomènes instables. Ces mêmes caméras sont également utilisées pour visualiser le nuage de grains [41, 42]. Pour cela, les grains sont éclairés par un faisceau ou une nappe laser. La diffusion de la lumière laser par ces grains est alors détectée par les caméras. Les informations concernant le plasma et les grains, provenant des caméras, sont corrélées à des résultats obtenus par des fibres optiques couplées à des photomultiplicateurs. Les grains de poussière formés sont également analysés par des techniques de microscopie. La taille et la densité de grains peuvent ainsi être déduites par microscopie électronique à balayage (MEB) et leur structure par microscopie électronique en transmission à haute résolution (HRTEM). Ces processus sont utilisés sur les deux réacteurs.

Un exemple de nuage de grains de poussière obtenu sur le réacteur PKE-Nefedov est présenté sur la figure (1.2).

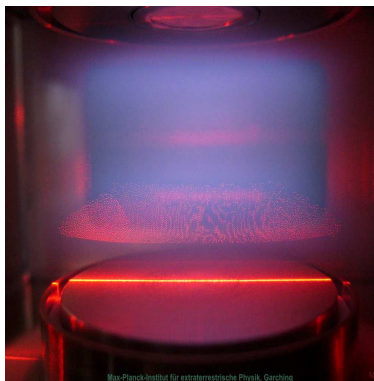


FIG. 1.2: Image des grains de poussière fortement couplés, obtenue par camera CCD dans un réacteur PKE-Nefedov [39].

Un nuage de grains injectés est en suspension au voisinage de la gaine inférieure où réside un champ électrique permettant de compenser la gravité. En effet, cette expérience a été réalisée en laboratoire sous les conditions de microgravité. Nous constatons que le nuage est constitué de quelques couches superposées avec une certaine organisation de ce nuage. En effet, les grains de poussière chargés interagissent fortement et forment alors

une structure appelée cristal coulombien (voir Fig.1.3).

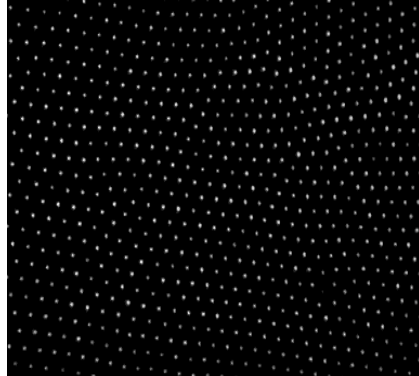


FIG. 1.3: *Formation d'un cristal par les grains de poussière dans le plasma [9].*

En laboratoire, les cristaux coulombiens subissent une forte contrainte gravitationnelle et se limitent le plus souvent à quelques couches de grains de poussière. Les effets tri-dimensionnels ne peuvent être étudiés rigoureusement que dans des conditions de microgravité. Du fait de la gravité, les grains les plus gros occupent logiquement les couches les plus basses. Leur position d'équilibre est atteinte plus près de l'électrode car le champ électrique y est plus fort. Les grains sont hautement chargés et sont par conséquent très sensibles aux champs électriques. De légères perturbations de ce champ peuvent induire des mouvements complexes des grains de poussière qui vont se comporter comme un fluide, puisqu'ils interagissent également entre eux.

# Chapitre 2

## Fluctuation de la charge des grains

Les fluctuations de la charge des grains dans un plasma complexe est l'une des caractéristiques importantes, qui permet de traiter la charge du grain comme une variable dynamique. Les courants de charge représentent en réalité les séquences de l'absorption d'électrons et d'ions ou l'émission d'électrons par la surface du grain [43]-[49]. Ces séquences et les intervalles de temps entre deux événements (absorption ou émission) successifs sont aléatoires. Il en résulte que la charge du grain peut fluctuer autour d'une valeur moyenne d'équilibre. La fluctuation retenue dans nos calculs relève du caractère discret de la charge apportée lors des collisions des grains avec les ions et les électrons du plasma. Depuis les années 80, différentes études ont montré l'influence des fluctuations de la charge sur le comportement des grains dans les plasmas complexes, et ont lié le phénomène de fluctuation de la charge à la nature aléatoire des processus de charge [25, 50, 51]. Les fluctuations dues à la nature discrète de charge peuvent être décrites comme un processus gaussien markovien stationnaire, qui est adopté pour représenter un comportement stochastique de la vitesse d'une particule brownienne.

Le grain dans le plasma complexe peut se caractériser par son rapport entre la masse et la charge. Dans le cas d'une charge fluctuante, ce rapport devient une variable dynamique régie par l'équation des fluctuations de la charge. L'objectif du présent chapitre est de donner le modèle physique et l'approche mathématique pour retrouver l'équation de la

fluctuation de la charge.

Un grain de poussière neutre immergé dans un plasma acquiert une charge électrique, quelque soit le processus de charge, par deux effets [52, 53] :

- Par variation spatio-temporelle des paramètres (température, densité) autour du grain. L'aspect collectif de la fluctuation de la charge induit une réponse instantannée et les courants sont continus.
- Par collection de particules qui arrivent au niveau de la surface du grain de façon aléatoire. La nature discrète des porteurs de charge prédomine dans cet effet.

En réalité, les deux effets sont omniprésents. Cependant, l'un prédomine l'autre selon la situation physique du système. Dans la physique des plasmas poussiéreux fortement couplées, c'est le deuxième effet qui est prépondérant, dont nous nous intéressons à la détermination de l'équation de fluctuation de la charge.

## 2.1 Equation de la fluctuation de la charge

Vu la taille considérable des grains de poussière (du  $nm$  au  $\mu m$ ), leur charge électrique dans un plasma d'ions et d'électrons augmente. Le grain joue le rôle d'une sonde vers laquelle un flux de courants électronique et ionique est dirigé.

Dans la dynamique des particules chargées relativistes, le Lagrangien d'un grain de charge  $q_d = Z_d e$  (supposée négative) et de masse  $m_d$  dans un champ électromagnétique, s'écrit comme suit [54, 55] :

$$L = -m_d c^2 \sqrt{1 - v^2/c^2} + \frac{Z_d}{c} (\vec{A} \cdot \vec{v}) - Z_d \phi, \quad (2.1)$$

où  $\vec{A}$  et  $\phi$  sont respectivement le potentiel vecteur et le potentiel scalaire du champ électromagnétique. Le premier terme de l'Eq. (2.1) représente le Lagrangien d'un grain libre et chargé. Le second et le troisième termes représentent le Lagrangien d'interaction. Le terme  $(v^2/c^2)$  signifie que les effets dus au retard sont éliminés.

En considérant les faibles variations des coordonnées et des vitesses, nous obtenons l'équation d'Euler-Lagrange du mouvement, suivante :

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} \right) = \frac{\partial L}{\partial \vec{r}}. \quad (2.2)$$

Sachant que  $d(\gamma m_d \vec{v})/dt = 0$ , où  $\gamma^{-1} = \sqrt{1 - v^2/c^2}$ , et que  $d/dt = (\partial/\partial t) + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}$ , la dérivée du Lagrangien donne le résultat suivant [55] :

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = Z_d \left( \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \wedge \vec{B} \right) + \vec{F}. \quad (2.3)$$

$\vec{p}$  est la quantité de mouvement du grain de poussière, le nombre de charge  $Z_d$  est supposé variable dans le temps et en fonction de la position (coordonnées de l'espace), l'expression entre parenthèses est la force de Lorentz habituelle, et  $\vec{F}$  est une force additionnelle due à la variation de la charge du grain. Cette force est exprimée par [55] :

$$\vec{F} = \left( \vec{A} \cdot \vec{v} - \phi \right) \nabla Z_d - \frac{\vec{A}}{c} \left( \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \right) Z_d. \quad (2.4)$$

A cause de l'invariance de la transformation de jauge, il est évident que la force  $\vec{F}$  est non-physique et n'est pas définie (artifice de calcul intermédiaire). Donc, les équations précédentes indiquent que le Lagrangien utilisé ne décrit pas exactement l'interaction d'une charge variable avec le champ électromagnétique.

A la surface du grain, le champ électrique a une seule composante normale :  $E_n = \vec{E} \cdot \vec{n}$ ,  $\vec{n}$  est le vecteur unitaire normal. L'expression de la composante normale du champ électrique peut être obtenue par l'intégration de l'équation de Poisson :  $\nabla^2 \phi = -4\pi\rho$ . Le résultat est donné par [56] :

$$E_n = 4\pi \int \rho dn = 4\pi\sigma. \quad (2.5)$$

$\rho$  et  $\sigma$  sont respectivement les densités volumique et surfacique de la charge. Cette dernière équation peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\sigma = -\frac{1}{4\pi} \frac{\partial \phi}{\partial n}. \quad (2.6)$$

Selon le théorème de Gauss, la charge totale à la surface du grain (sonde) est donnée par :

$$Z_d = \frac{1}{4\pi} \oint \vec{E} \cdot d\vec{s} = \int \sigma ds = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\partial \phi}{\partial n} ds, \quad (2.7)$$

où l'intégrale est prise sur toute la surface du grain,  $ds$  est une surface élémentaire.

L'équation de la charge du grain peut s'obtenir aussi à partir de l'équation de Maxwell :

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{j}, \quad (2.8)$$

où  $\vec{j}$  est la densité totale des courants d'espèce  $\alpha$ , définie par l'expression :

$$\vec{j} = \sum_{\alpha} e_{\alpha} n_{\alpha} \vec{v}_{\alpha}. \quad (2.9)$$

Les équations de Maxwell sont des équations aux dérivées partielles appliquées localement en chaque point de l'espace  $(x, t)$ . Par le biais du théorème de la divergence,

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{s} = 0, \quad (2.10)$$

( $d\vec{s}$  est un élément de surface) et le théorème de Stokes, appliqué aux interfaces (entre milieux différents) [56],

$$\oint_c \vec{B} \cdot d\vec{l} = \int_s (\vec{\nabla} \wedge \vec{B}) \cdot d\vec{s}. \quad (2.11)$$

Les équations de Maxwell s'écrivent sous forme d'intégrale comme suit :

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{l} = \frac{1}{c} \frac{d}{dt} \int \vec{E} \cdot d\vec{s} + \frac{4\pi}{c} \int \vec{j} \cdot d\vec{s}. \quad (2.12)$$

En se basant sur la définition de la charge du grain (Eq. (2.7)), la variation partielle de la charge en fonction du temps devient :

$$\frac{dZ_d}{dt} = - \sum_{\alpha} \int \vec{j}_{\alpha} \cdot d\vec{s} = - \sum_{\alpha} \int \vec{j}_{\alpha} \cdot \vec{n} ds = - \sum_{\alpha} I_{\alpha}. \quad (2.13)$$

( $-\sum_{\alpha} I_{\alpha}$ ) est le courant total des électrons et des ions. Cette dernière équation décrit la variation de la fluctuation de la charge lorsque le grain est considéré seul. L'Eq. (2.13) indique que le nombre de charge peut changer seulement si le courant des électrons  $I_e$  est plus ou moins important que le courant des ions  $I_i$ , autrement dit, si la composante normale du vecteur densité totale de courant  $j_n$  est différente de zéro. Une telle situation est valable seulement pour une surface totalement chargée.

L'équation de la fluctuation de la charge du grain  $q_d$  s'écrit [20] :

$$\frac{dq_d}{dt} = - \sum_{\alpha} I_{\alpha}. \quad (2.14)$$

Dans le cas simple, où l'on considère que le grain de poussière se charge négativement par la collection de charges primaires du plasma (électrons et ions), l'évolution temporelle de la charge est décrite par l'équation dynamique (Eq. 2.14). A l'équilibre, la condition de l'équation de la fluctuation est :  $dq_d/dt = 0$ . Par conséquent, tous les courants se

compensent ( $I_e = I_i$ ). Il est à noter qu'un plasma complexe est un système entretenu par une source externe qui assure l'apport des ions et des électrons collectés au niveau de la surface des grains, pour éviter l'annihilation du plasma.

## 2.2 Fluctuation aléatoire de la charge

Les grains de poussière peuvent se charger négativement par une collection des électrons ou positivement par la collection des ions et l'émission des électrons à partir de la surface des grains. Cette situation induit une fluctuation de la charge autour d'une valeur moyenne et par conséquent, les courants établis posséderont une nature discrète (Fig. 2.1). Il est à rappeler que, la fluctuation de la charge peut être induite par des perturbations temporelles et spatiales. Celles-ci sont liées aux propriétés du plasma (variation des températures :  $T_e$  et  $T_i$ , des densités :  $n_e$  et  $n_i, \dots$ ).

En l'absence de frictions et pour un grain ayant un mouvement très lent ou figé, l'aspect discret des porteurs de charge est prédominant. Dans ce qui suit, nous nous intéressons à la détermination d'une expression générale, décrivant l'amplitude en fonction du temps, caractéristique des fluctuations aléatoires de la charge.

### 2.2.1 Fonction d'auto-corrélation temporelle

La dynamique de la charge du grain est décrite par une fonction, dite fonction d'auto-corrélation temporelle (FAT) [25, 55], largement utilisée dans la modélisation numérique d'un plasma complexe à charge fluctuante. Comme il a été mentionné précédemment, l'équation dynamique de la charge du grain est donnée par :

$$\frac{dZ_d}{dt} = I = \sum I^+ - I^- . \quad (2.15)$$

En supposant que la charge négative reçue par le grain,  $I^-$ , est portée par les électrons du plasma et que la charge positive reçue par le grain,  $\sum I^+$ , est emportée par la collection des ions du plasma et par l'émission des électrons à partir des grains. La charge moyenne

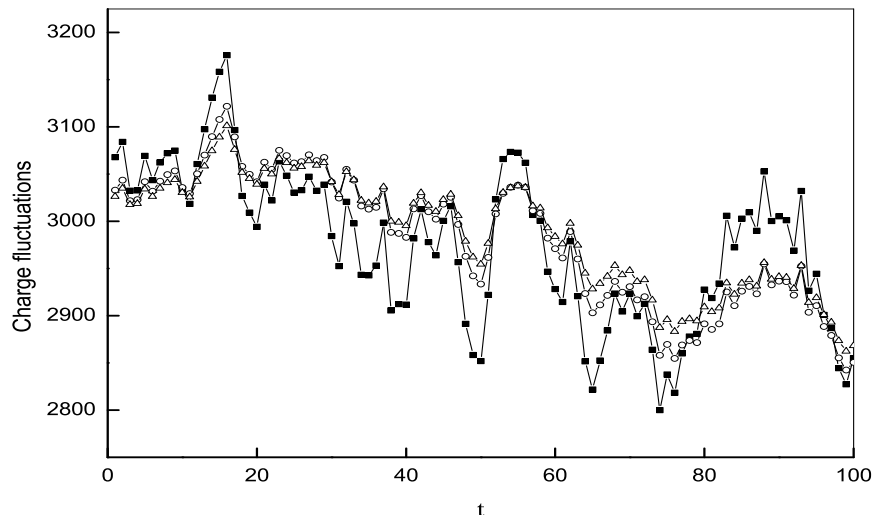


FIG. 2.1: Fluctuation aléatoire de la charge des grains de poussière  $\Delta Z_d$  dans un plasma complexe de laboratoire en fonction du temps stochastique  $t$  de la simulation, obtenue par notre code de calcul pour trois pas du temps d'intégration (ce dernier est inférieur au temps de fluctuation de la charge des grains).

d'équilibre, ( $q_d = eZ_d$ ), est déterminée à partir de la condition de l'état stationnaire ( $\sum I^+ = I^-$ ). Pour les faibles fluctuations, la charge s'écrit :

$$Z_d(t) = \langle Z_d \rangle + \delta Z_d(t), \quad (2.16)$$

où  $\langle Z_d \rangle$  représente la charge moyenne du grain à l'équilibre et  $|\delta Z_d(t)| \ll |\langle Z_d \rangle|$ . Un développement en série au premier ordre de l'Eq. (2.15) donne :

$$\frac{d\delta Z_d}{dt} = \left[ \frac{\partial I}{\partial Z_d} \Big|_{Z_d=\langle Z_d \rangle} \right] \delta Z_d = -\beta \delta Z_d. \quad (2.17)$$

Le terme  $\beta \delta Z_d$  ( $\beta > 0$ ) agit comme une force de rappel qui tend à ramener la charge vers sa valeur d'équilibre déterminée à partir de la condition  $\sum I = 0$ .

Pour tenir compte de l'aspect discret du processus de collection de charges électriques, nous faisons appel à la statistique. En fait, un grain absorbe ou émet une charge électrique dans des séquences aléatoires, pendant un intervalle de temps aléatoire. C'est pour cette raison que la charge fluctue. Afin de décrire cette fluctuation, un nouveau terme est

introduit dans l'équation (2.17) qui devient :

$$\frac{d\delta Z_d}{dt} + \beta\delta Z_d = F(t). \quad (2.18)$$

Avec  $F(t)$  une fonction stochastique responsable des fluctuations ; elle correspond à l'absorption d'un ion ou d'un électron du plasma ou à l'émission d'un électron à un moment aléatoire  $t_j$ .  $F(t)$  est donnée par [25] :

$$F(t) \equiv \sum_j \delta(t - t_j)(\pm 1)_j, \quad (2.19)$$

sachant que (+) correspond au cas où le grain gagne une charge positive et (-) au cas où il absorbe un électron. De cette dernière équation, nous pouvons comprendre la différence entre un processus de charge discret et celui de nature continue. L'échelle de temps dans les deux cas n'est pas la même ;  $F(t)$ , du processus discret, varie très rapidement par rapport à la variation de  $\beta\delta Z_d$  qui caractérise le processus continu.

En réalité, l'Eq. (2.18) est équivalente à l'équation de Langevin d'un mouvement d'une particule brownienne libre.  $\delta Z_d$  joue le rôle de la vitesse de la particule libre et  $F(t)$  la force aléatoire qui vérifie :

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad , \quad \langle F(t)F(t') \rangle = \frac{1}{t_o}\delta(t - t'). \quad (2.20)$$

Le terme  $(1/t_o)$  caractérise la fréquence d'émission et d'absorption des particules du plasma (électrons et ions), sachant que  $1/t_o = \sum I^+ + I^- = 2I^-$ . La solution de l'équation différentielle (2.18) du premier ordre avec second membre, s'écrit sous la forme [25] :

$$\delta Z_d(t) = \delta Z_d(0)e^{-\beta t} + e^{-\beta t} \int_0^t F(\theta)e^{\beta\theta} d\theta. \quad (2.21)$$

$\delta Z_d(0)$  est la déviation initiale de la charge du grain par rapport à la valeur moyenne. Dans le cas où  $\delta Z_d(0) = 0$ , les équations (2.20) et (2.21) permettront de trouver la fonction d'auto-corrélation temporelle des fluctuations de la charge comme suit :

$$\langle \delta Z_d(t)\delta Z_d(t') \rangle = \langle e^{-\beta(t+t')} \int_0^t F(\theta)e^{\beta\theta} d\theta \int_0^{t'} F(\theta')e^{\beta\theta'} d\theta' \rangle. \quad (2.22)$$

D'où,

$$\langle \delta Z_d(t)\delta Z_d(t') \rangle = \frac{1}{t_o}e^{-\beta(t+t')} \int_0^t d\theta \int_0^{t'} \delta(\theta - \theta')e^{\beta(\theta+\theta')} d\theta'. \quad (2.23)$$

Sachant que :

$$\frac{1}{2\beta}e^{2\beta t} \equiv \int_0^t e^{2\beta\theta} d\theta, \quad (2.24)$$

nous trouvons :

$$\langle \delta Z_d(t)\delta Z_d(t') \rangle = \frac{1}{2\beta t_o} e^{-\beta(t-t')}, \quad (2.25)$$

dont le temps de corrélation des fluctuations aléatoires de la charge est  $1/\beta$  et l'amplitude des fluctuations (par substitution  $t = t'$ ) est[25] :

$$\Delta Z_d = \sqrt{\langle \delta Z_d^2 \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2\beta t_o}}. \quad (2.26)$$

## 2.3 Théorie du mouvement orbital restreint

La théorie du mouvement orbital restreint (*orbital motion limited* : OML) proposée par Allen [30], est souvent utilisée pour décrire quantitativement la charge acquise par un grain de poussière isolé dans un plasma. Cette théorie est basée sur trois hypothèses [28, 57] :

- Le grain de poussière est considéré isolé, autrement dit, les autres grains dans le plasma n'affectent pas le mouvement des électrons et des ions dans son voisinage.
- Les électrons et les ions ne subissent pas des collisions durant leur rapprochement du grain.
- Les barrières dans le potentiel effectif autour du grain sont absentes. Les sections efficaces de la collection d'électrons et d'ions sont déterminées à partir des lois de la conservation de l'énergie et du moment angulaire.

### 2.3.1 Potentiel attractif

La théorie OML suit la trajectoire des particules du plasma attirées par le potentiel autour du grain. La section efficace du grain chargé négativement pour la collection d'ions est supérieure à la surface géométrique. Nous considérons qu'un ion attiré par le potentiel du grain, tombe sur la surface sous une incidence rasante. La conservation du moment

angulaire de la particule donne :

$$L_s = m_i v_s^i r_d = L_\infty = m_i v_\infty^i h, \quad (2.27)$$

où  $h$  est le paramètre d'impact de la particule de masse  $m_i$ .  $v_s$  est la vitesse de cette particule à la surface du grain de rayon  $r_d$ , et  $v_\infty$  sa vitesse à une distance loin du grain. De cette dernière équation, nous pouvons déduire la vitesse avec laquelle la particule atteint la surface :

$$v_s^i = \frac{h}{r_d} v_\infty^i. \quad (2.28)$$

A partir de la conservation de l'énergie  $E$  de la particule :

$$E = \frac{m_i (v_s^i)^2}{2} + e\phi_d = \frac{m_i (v_\infty^i)^2}{2}, \quad (2.29)$$

nous pouvons déterminer le paramètre d'impact  $h$  ( $\phi_d$  est le potentiel du grain) :

$$h = r_d \sqrt{1 - \frac{e\phi_d}{E}}. \quad (2.30)$$

Ceci correspond au moment angulaire initial maximal de :

$$L_{max} = m_i v_\infty^i r_d \sqrt{1 - \frac{e\phi_d}{E}}. \quad (2.31)$$

Nous admettons que chaque ion qui s'approche du grain, avec un moment angulaire supérieur à  $L_{max}$ , va rater le grain. Par contre, l'ion qui s'approche avec un moment angulaire inférieur ou égal à  $L_{max}$ , va être absorbé.

Dans le cas d'un grain de poussière sphérique, tous les ions d'énergie  $E$  dont leur paramètre d'impact est inférieur à  $h$  vont être absorbés par le grain. La section efficace de collection  $\sigma_{coll}$  peut être définie par :

$$\sigma_{coll} = \pi h^2 = \pi r_d^2 \left[ 1 - \frac{e\phi_d}{E} \right]. \quad (2.32)$$

Pour des ions mono-énergétiques, le courant ionique collecté par le grain  $I_+$  est donné par [58, 30] :

$$I_+ = n_\infty e v_0 \sigma_{coll} = \pi r_d^2 e n_\infty \left( \frac{2E}{m_i} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ 1 - \frac{e\phi_d(r_d)}{E} \right]. \quad (2.33)$$

Nous supposons que la densité d'électrons autour d'un grain sphérique est donnée par une distribution de Boltzmann :

$$n_e(r) = n_\infty \exp\left(\frac{e\phi_d(r)}{k_B T_e}\right). \quad (2.34)$$

Pour une distribution ionique de Maxwell, nous aurons [30] :

$$I_i = \frac{\pi r_d^2 n_\infty e}{4} \left( \frac{8kT_i}{\pi m_i} \right)^{\frac{1}{2}} \left( 1 - \frac{e\phi_d(r_d)}{k_B T_i} \right). \quad (2.35)$$

Concernant les électrons, nous prenons la distribution de Boltzmann de leur densité, ce qui nous donne un courant électronique d'expression :

$$I_e = -\frac{\pi r_d^2 n_\infty e}{4} \left( \frac{8kT_e}{\pi m_e} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left( \frac{e\phi_d(r_d)}{k_B T_e} \right). \quad (2.36)$$

A l'état stationnaire où le courant total qui atteint le grain, est nul, le grain est équivalent à une capacité sphérique de charge  $q_d$  donnée par [43, 59] :

$$q_d = 4\pi r_d^2 \sigma, \quad (2.37)$$

où  $\sigma$  est la densité surfacique de la charge dépendant du champ électrique normal à la surface du grain. Dans le cas de la collection d'ions positifs, l'expression du courant est :

$$I = 4\pi n_0 r_d^2 e \left( \frac{kT_i}{2\pi m} \right)^{\frac{1}{2}} \left( 1 - \frac{e\phi_d(r_d)}{kT_i} \right). \quad (2.38)$$

Dans le cas où le rayon effectif de la sonde est inférieur à  $r_d$  (impact direct), alors le courant est donné par[30] :

$$I = 4\pi n_0 r_d l e \left( \frac{2kT_e}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{+\infty} x e^{-x^2} (x^2 - a^2)^{\frac{1}{2}} dx, \quad (2.39)$$

d'où :

$$I = 2\pi n_0 r_d l e \left( \frac{kT_e}{2\pi m} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left( \frac{e\phi_d(r_d)}{kT_e} \right). \quad (2.40)$$

### 2.3.2 Limitation de la théorie OML

Récemment, plusieurs travaux expérimentaux et numériques ont montré les limites de la théorie OML [31, 60]-[62]. Cependant, dans certaines situations, l'utilisation de cette approche peut être justifiée. Ainsi, dans une région du plasma où le champ électrique est assez faible, la vitesse de dérive des ions est plus petite par rapport à leur vitesse thermique, la théorie OML donne des résultats acceptables.

Il est utile de noter que les hypothèses de l'approximation OML sont rarement réunies dans la réalité. Nous pouvons citer les raisons qui rendent la théorie OML inapplicable :

- La première raison est associée à la densité finie des grains dans les plasmas complexes de laboratoire, connue comme effet des grains serrés. La composante grains de poussière contribue à la condition de quasi-neutralité, rendant la densité ionique plus grande que la densité électronique [63]. Ceci augmente le rapport des flux ion/électron, et donc réduit l'amplitude absolue de la charge du grain, comparée avec celle du grain dans le cas où il est considéré isolé. Dans le cas des systèmes fortement couplés ( $a_d \ll \lambda_D$ ), les trajectoires des ions sont affectées par la présence des particules voisines, influençant ainsi la charge des grains [47].

- La seconde raison concerne l'absence d'une barrière dans l'énergie potentielle supposée par l'approximation OML. En fait, cette barrière est absente pour une interaction répulsive (avec les électrons si les grains sont négatifs), mais elle peut se présenter lorsque l'interaction est attractive (avec les ions). Le potentiel électrostatique autour du grain absorbant dans le plasma, varie comme  $(1/r)$  près du grain, comme  $(1/r^2)$  loin du grain, et à une distance intermédiaire, le potentiel décroît plus rapidement. Donc, une barrière dans le potentiel effectif peut exister pour les ions au cours du mouvement vers le grain, certains ions (de faible énergie) vont être réfléchis par cette barrière. Cet effet conduit à une diminution dans le courant d'ions et donc à une augmentation dans la valeur absolue de la charge du grain [64] en comparant avec celle de l'approximation OML.

- La troisième raison est due aux collisions ion-atome. Dans la théorie OML, les collisions des électrons et des ions sont négligées sur la base que les libres parcours moyens d'électron,  $\lambda_{l_{pme}}$ , et d'ion,  $\lambda_{l_{pmi}}$ , sont longs par rapport à la longueur d'écrantage du plasma. Cependant, l'étude théorique a montré que l'échange de charge des collisions ion-atome dans le voisinage du grain de poussière, peut conduire à une croissance substantielle dans le courant d'ions au niveau de leurs surfaces, même quand  $\lambda_{l_{pme(i)}}$  est plus grand que la longueur d'écrantage. Une telle augmentation du courant ionique peut considérablement diminuer la charge du grain. Des résultats expérimentaux récents, présentés par S. Ratynskaia et al.[65] montrent que la charge du grain dans un plasma de décharges DC peut être plusieurs fois plus petite que celle prédite par l'approximation OML.

# Chapitre 3

## Techniques de simulation

La simulation représente actuellement une alternative pour l'expérience. Vu le développement rapide des moyens de calcul, le recours à la simulation se fait de plus en plus. Ceci a permis la résolution de beaucoup de problèmes compliqués. Les phénomènes réels sont des problèmes nonlinéaires où un petit changement d'une variable peut produire un grand changement d'une autre variable. En général, les techniques de simulation sont souvent utilisées dans des systèmes complexes dont le calcul de leurs propriétés nécessite un nombre élevé de variables. En physique statistique de la matière condensée, deux méthodes de simulation sont largement utilisées : La méthode de Monte Carlo (MC) et la méthode dynamique moléculaire (DM) [66, 67]. Le but d'application de ces deux méthodes est la détermination des propriétés macroscopiques à partir d'une description microscopique des potentiels d'interaction entre les différentes particules du système physique [68, 69].

La simulation numérique a connu aussi un grand progrès dans les systèmes fortement couplés [70, 71] où les propriétés physiques ont été étudiées. Ces propriétés sont d'un intérêt croissant pour la physique fondamentale et appliquée. Dans un plasma complexe, les grains chargés dans une phase ordonnée constituent l'un des systèmes fortement couplés et les caractéristiques de ces derniers jouent un rôle déterminant dans leur comportement. Parmi ces caractéristiques, il y a la variation aléatoire de la charge au niveau de la surface des grains.

Notre travail s'inscrit dans le cadre de la simulation par la méthode Monte Carlo (MC), de l'effet de la fluctuation aléatoire de la charge des grains sur les propriétés structurales et les transitions de phase du système de grains dans un plasma de laboratoire. Nous présentons dans ce qui suit, les trois techniques de simulation numérique qui sont largement utilisées dans le domaine des plasmas complexes.

### 3.1 Méthode particule-dans-cellule

Le système étudié par la méthode de simulation particule-dans-cellule (*Particle-In-Cell* : PIC) est décrit par un ensemble de particules numériques également appelées *macro-particules* [71]-[75]. Chaque particule numérique représente un grand nombre de particules physiques. Les domaines d'application de cette approche sont l'astrophysique, la physique des lasers et la fusion. Dans le cas des plasmas complexes, nous nous intéressons à trois espèces chargées : les ions, les électrons et les grains de poussière [21]. Nous considérons donc trois types de super-particules représentatives de ces trois espèces. L'espace des phases (position et vitesse) est divisé en cellules où l'on veut calculer le nombre de super-particules pour chaque espèce. La taille des mailles physiques  $\Delta x$  doit permettre de rendre compte des interactions collectives. Nous considérons généralement :  $\Delta x \leq 0.1\lambda_D$  où  $\lambda_D = \sqrt{\varepsilon_0 k_B T_o / n_o e^2}$  est la longueur de Debye du système. L'algorithme de la simulation PIC qui permet de suivre l'évolution dans l'espace des phases du nuage des super-particules pendant un temps d'intégration  $\Delta t$ , comprend les étapes suivantes :

- Initialisation de la distribution spatiale des super-particules ainsi que leur distribution en vitesse.
- Calcul de la densité de charge  $\rho$  résultant des distributions de super-particules aux points de maillage physique. Dans ce cas, nous considérons une distribution linéaire des charges physiques sur les points de maillage.
- Résolution de l'équation de Poisson sur le maillage physique pour trouver le potentiel électrique  $\phi$  :

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\varepsilon}. \quad (3.1)$$

où  $\varepsilon$  représente la permittivité du milieu.

Ceci permet de remonter au champ électrique de charge d'espace :

$$E_x(i) = -\frac{\phi_x(i+1) - \phi_x(i-1)}{2\Delta x}. \quad (3.2)$$

- Résolution de l'équation de mouvement pour déterminer les vitesses de chaque super-particule  $i$  :

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{e_i}{m_i}(\mathbf{E}(x_i)). \quad (3.3)$$

Ces vitesses sont utilisées pour calculer les trajectoires des super-particules et leurs positions au temps  $t + \Delta t$  :

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{v}_i. \quad (3.4)$$

Nous pouvons remonter à la dynamique d'évolution du nuage de super-particules en poursuivant l'intégration en temps. Le pas du temps  $\Delta t$  doit être suffisamment petit pour que l'intégration soit numériquement stable. Ce pas de temps est choisi de sorte que, pendant ce même temps, les particules ne traversent qu'une seule cellule :  $\Delta t \leq \frac{\Delta x}{v_{max}}$  où  $v_{max}$  est la vitesse maximale qu'atteindraient les électrons en l'absence de collisions. Le pas de temps doit rendre compte des oscillations propres de plasma et doit donc rester inférieur à  $2\pi/\omega_e$ , où  $\omega_e = \sqrt{n_o e^2 / m \varepsilon_o}$  est la fréquence d'électron du plasma.

## 3.2 Dynamique Moléculaire

La Dynamique Moléculaire (DM) est une technique de résolution numérique des équations classiques du mouvement de chaque particule  $i$  dans un ensemble de  $N$  particules en interaction [66, 76] :

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} \quad (3.5)$$

et

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \quad (3.6)$$

où  $m_i$  est la masse de la particule  $i$  de position  $r_i$  et de vitesse  $v_i$ .  $F_i$  est la somme de toutes les forces exercées sur celle-ci.

La méthode DM consiste à étudier l'évolution du système au cours du temps. Elle suit

le mouvement des particules et permet ainsi de représenter leurs trajectoires, en vue de déterminer diverses propriétés statiques et dynamiques du système étudié. Il s'agit donc d'un système complexe d'équations différentielles dépendantes du temps, ne pouvant être résolues que numériquement. Plusieurs algorithmes sont utilisés pour résoudre les équations du mouvement. Mais l'algorithme proposé par Verlet [77] est historiquement l'un des premiers introduits et reste l'un des plus utilisés actuellement. Cet algorithme est basé sur l'approche pas-à-pas sans calcul de vitesse au préalable :

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - \Delta t) + \frac{2\Delta t^2}{m_i} \mathbf{F}_i. \quad (3.7)$$

Le choix du pas de temps d'intégration  $\Delta t$  est très important dans une simulation DM. Ce pas doit être choisi suffisamment petit pour prendre en compte tous les événements et phénomènes microscopiques possibles, et le plus grand possible pour réduire le nombre de pas d'intégration nécessaire pour faire évoluer le système (réduire le temps de calcul). Le temps obtenu à partir d'une analyse dimensionnelle des paramètres microscopiques du système est :

$$\tau = \sigma \sqrt{\frac{m}{\epsilon}}, \quad (3.8)$$

où  $m$  est la masse d'une particule,  $\sigma$  son diamètre et  $\epsilon$  l'énergie échelle du potentiel d'interaction.

En général, une simulation DM consiste à intégrer les équations différentielles pour chaque particule  $i$  :

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n). \quad (3.9)$$

Si le système est conservatif, les forces  $\mathbf{F}_i$  sont indépendantes de la vitesse. Elles dérivent d'un potentiel d'interaction et s'obtiennent par la relation :

$$\mathbf{F}_i = \nabla_{\mathbf{r}_i} V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n). \quad (3.10)$$

Si les forces exercées sur les grains ne dérivent pas toutes d'un potentiel électrique, comme dans le cas d'un système de grains à charge fluctuante, l'équation classique du mouvement devra changer. Autrement dit, l'algorithme d'intégration sur le temps doit être légèrement modifié afin de reproduire une dynamique correcte [78, 79]. L'évolution du système est

décrite par une distribution canonique des probabilités, ceci signifie que le mouvement des particules est décrit par les équations de Langevin. Dans ces équations, deux termes de force s'ajoutent à l'équation de Newton : un terme qui représente la force de frottement proportionnelle à la vitesse et un autre terme qui représente une force aléatoire contribuant à l'énergie cinétique du système.

### 3.3 Méthode de Monte Carlo

La méthode de Monte Carlo (MC) est une technique numérique probabiliste, qui utilise des tirages aléatoires pour réaliser le calcul d'une quantité déterministe [66, 69]. Son avantage est qu'elle est insensible à la dimension du problème étudié, contrairement à des méthodes classiques d'analyse numérique qui ne sont performantes qu'en faible dimension. La méthode MC est en général limitée au calcul des grandeurs statiques puisque seule la partie configurationnelle de l'espace des phases est explorée et que le temps n'est pas une variable explicite. Elle traite deux natures différentes de problèmes : les problèmes probabilistes et les problèmes déterministes selon qu'ils concernent directement ou non un comportement aléatoire. Dans le cas d'un problème probabiliste, nous utilisons la simulation MC qui consiste à étudier le comportement d'un processus aléatoire et dans le cas d'un problème déterministe (état et comportement du système défini), nous parlons d'estimation MC dans laquelle nous sommes en principe capables de prédire ce qui va se produire. Cependant, nous pouvons traiter certains paramètres du problème comme s'il s'agissait de variables aléatoires et transformer ainsi le problème déterministe en un problème probabiliste.

L'hamiltonien  $H$  du système de  $N$  particules en interaction est donné par :

$$H(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) = K(\mathbf{p}^N) + U(\mathbf{r}^N). \quad (3.11)$$

Le premier terme  $K(\mathbf{p}^N)$  représente l'énergie cinétique totale du système en fonction des moments  $\mathbf{p}^N$ . Le second terme  $U(\mathbf{r}^N)$  représente l'énergie potentielle de l'interaction de toutes les particules en fonction de leurs positions  $\mathbf{r}^N$ . Dans un ensemble statistique, la

densité de probabilité (non normalisée) dans l'espace des phases vaut :

$$\rho = \exp(-\beta H), \quad (3.12)$$

où  $\beta = 1/k_B T$ .

La valeur moyenne d'une grandeur physique  $A$  est donnée par :

$$\langle A \rangle = \int \frac{A \exp(-\beta H)}{Q} d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N. \quad (3.13)$$

La fonction de partition  $Q$  de l'ensemble statistique est définie par :

$$Q \equiv \int \cdots \int \exp(-\beta H(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N. \quad (3.14)$$

Généralement, les propriétés physiques ne dépendent pas explicitement des quantités de mouvement. La valeur moyenne s'écrit alors :

$$\langle A(\mathbf{r}^N) \rangle = \int \cdots \int A(\mathbf{r}^N) \frac{\exp(-\beta U(\mathbf{r}^N))}{Z} d\mathbf{r}^N, \quad (3.15)$$

où  $Z$  est appelé intégrale de configurations (positions) :

$$Z = \int \cdots \int \exp(-\beta U(\mathbf{r}^N)) d\mathbf{r}^N. \quad (3.16)$$

### 3.3.1 Principe de la méthode MC

Le problème de l'estimation d'une intégrale du type :

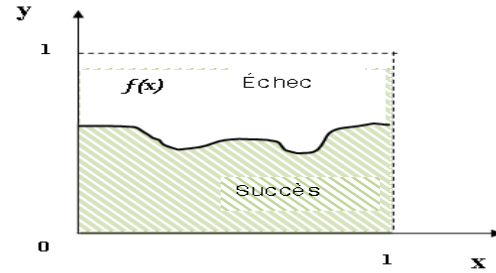
$$I = \int_a^b f(x) dx, \quad (3.17)$$

peut être reformulé en termes de calcul d'une moyenne de la forme suivante :

$$I = (b - a) \langle f(x) \rangle. \quad (3.18)$$

En choisissant aléatoirement, mais selon une distribution uniforme,  $n$  points le long de l'intervalle  $[a, b]$  et en calculant en chaque point  $i$ , la valeur de la fonction  $f(x_i)$ , nous obtenons une estimation de l'intégrale par l'expression suivante :

$$I \simeq \frac{(b - a)}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i). \quad (3.19)$$



$$I = \int_0^1 f(x) dx = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sigma(x_i, y_i) = \frac{ns}{n}$$

$$\begin{cases} \sigma(x, y) \equiv 1 & \text{si } y \leq f(x) & \text{(Succès)} \\ \sigma(x, y) \equiv 0 & \text{si } y > f(x) & \text{(Échec)} \end{cases}$$

FIG. 3.1: Méthode MC de type noir ou blanc.

Le passage amélioré de l'échantillonnage de type noir ou blanc (Fig. 3.1) à l'échantillonnage élémentaire (Fig. 3.2) se traduit par le remplacement de  $\xi(x, y)$  par son espérance mathématique  $f(x)$ . Nous réduisons ainsi l'erreur d'échantillonnage du résultat final. La convergence de cette méthode peut être estimée en calculant la variance,  $\sigma^2$ , de la somme  $I^2$  :

$$\sigma^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\langle f(x_i)^2 \rangle - \langle f(x_i) \rangle^2). \quad (3.20)$$

La dépendance en  $1/n$  donne une convergence a priori assez lente, mais nous pouvons à l'inverse modifier de façon importante l'écart-type pour obtenir une convergence plus rapide. Pour cela, nous favorisons les régions où la fonction  $f$  possède des valeurs élevées par rapport à celles proches de zéro. Cela revient à générer des nombres aléatoires dans une distribution non uniforme qui échantillonne mieux les régions où l'intégrale est importante. Cette méthode est appelée échantillonnage, suivant l'importance.

Considérons une densité de probabilité non uniforme,  $\rho(x)$ , qui imite le comportement de  $f(x)$  et que l'on sait intégrer analytiquement. Elle est choisie normalisée dans l'intervalle  $[a, b]$  :

$$\int_a^b \rho(x) dx = 1. \quad (3.21)$$

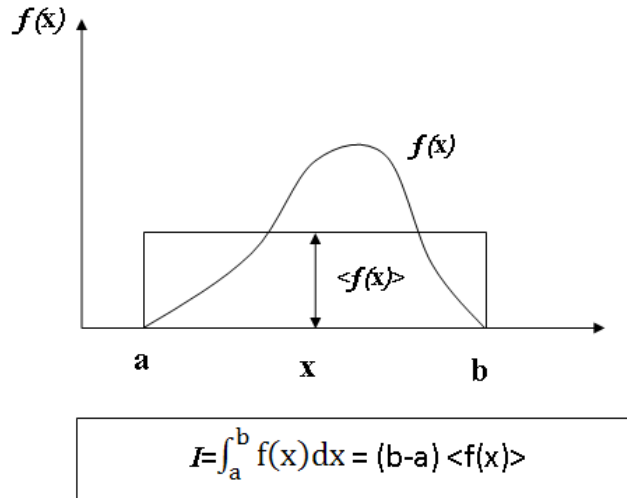


FIG. 3.2: Méthode MC élémentaire.

Réécrivons  $I$  sous la forme suivante :

$$I = \int_a^b \frac{f(x)}{\rho(x)} \rho(x) dx \quad (3.22)$$

Nous pouvons définir une variable aléatoire  $dz = \rho(x)dx$  avec  $z(a) = a$  et  $z(b) = b$ , et

$$I = \int_a^b \frac{f(x(z))}{\rho(x(z))} dz, \quad (3.23)$$

nous avons alors une estimation de l'intégrale qui est donnée par :

$$I \simeq \frac{(b-a)}{n} \sum_{i=1}^n \frac{f(x(z_i))}{\rho(x(z_i))}, \quad (3.24)$$

avec la distribution de poids (densité de probabilité)  $\rho(x)$ . De manière similaire, la variance de l'estimation devient alors :

$$\sigma^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \left\langle \left( \frac{f(x(z_i))}{\rho(x(z_i))} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{f(x(z_i))}{\rho(x(z_i))} \right\rangle^2 \right). \quad (3.25)$$

Si  $f$  est strictement positive, nous pouvons choisir  $\rho$  proportionnelle à  $f$ , c.à.d ( $\rho(x)=cf(x)$ ), et la variance ainsi s'annule. Ce choix est inefficace puisque  $c$  dépend précisément de l'intégrale que l'on cherche à déterminer. Pour que la méthode soit utilisable et que la variance

soit faible,  $\rho$  doit donc être proche de  $f$  (rapport  $f/\rho$  aussi constant que possible) sans lui être proportionnelle. De plus, elle doit également être simple afin que l'on puisse l'intégrer analytiquement.

### 3.3.2 Algorithme de Metropolis

Dans le cas d'un ensemble canonique, l'algorithme de Metropolis [67, 80] a pour objectif de générer des états ( $r_i^n$ ) distribués suivant la densité de probabilité normalisée et non uniforme  $\rho_{NVT}$ ,

$$\rho_i = \rho_{NVT}(\mathbf{r}^N_i) = \frac{\exp(-\beta U(\mathbf{r}^N_i))}{Z}. \quad (3.26)$$

Nous sommes en mesure de calculer la moyenne canonique d'une grandeur physique  $A$  ( $r^N$ ) :

$$\langle A(\mathbf{r}^N) \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \rho(\mathbf{r}^N_i) A(\mathbf{r}^N_i). \quad (3.27)$$

Dans ce cas, les différents états successifs ne suivent pas une évolution temporelle régie par l'équation de Newton. Nous choisissons un processus Markovien stationnaire, où chaque état ne dépend explicitement que de l'état précédent et appartient à un ensemble fini d'états appelé espace des états. L'ordre dans lequel les états se succèdent n'a aucune signification physique. La difficulté est de trouver une méthode afin de générer ces états (aléatoires) de telle manière qu'à la fin de la simulation, à l'équilibre, chaque état est produit avec la bonne probabilité.

Afin d'obtenir la matrice de transition  $W(i \rightarrow j)$ , qui donne les probabilités de transition d'une configuration  $i$  à une configuration  $j$ , il est intéressant, de noter que le processus stochastique élémentaire dans un algorithme Monte Carlo est la succession de deux étapes :

- A partir d'une configuration  $i$ , nous tirons au hasard une configuration  $j$ , avec une probabilité  $\alpha(i \rightarrow j)$ .
- Cette nouvelle configuration est acceptée avec une probabilité  $\Pi(i \rightarrow j)$ .

Ainsi, nous avons

$$W(i \rightarrow j) = \alpha(i \rightarrow j)\Pi(i \rightarrow j). \quad (3.28)$$

Dans l'algorithme de Metropolis (et dans la plupart des algorithmes MC), nous choisissons  $\alpha(i \rightarrow j) = \alpha(j \rightarrow i)$ . A l'équilibre, le nombre moyen de déplacements acceptés à partir d'un état donné  $i$  vers n'importe quel état  $j$ , est exactement égal au nombre moyen de déplacements inverses. Nous l'appelons condition du bilan détaillé ou de microréversibilité

$$\rho_i W(i \rightarrow j) = \rho_j W(j \rightarrow i). \quad (3.29)$$

Dans ce cas, nous pouvons réécrire

$$\frac{\Pi(i \rightarrow j)}{\Pi(j \rightarrow i)} = \frac{\rho_j}{\rho_i} = \exp(-\beta(U_j - U_i)). \quad (3.30)$$

Il y a de nombreux choix possibles pour  $\Pi(i \rightarrow j)$  qui satisfont cette condition et la condition  $\Pi(i \rightarrow j) \in [0, 1]$ . La solution choisie par Metropolis et al. est :

$$\Pi(i \rightarrow j) = \exp(-\beta(U(j) - U(i))) \longrightarrow \text{si } U(j) > U(i) \quad (3.31)$$

$$\Pi(i \rightarrow j) = 1 \longrightarrow \text{si } U(j) \leq U(i) \quad (3.32)$$

Nous pouvons résumer l'algorithme de Metropolis comme suit :

- Choix d'une configuration initiale  $i$  aléatoire et calcul de son énergie  $U_i$ .
- Déplacement aléatoire d'une ou de plusieurs particules du système pour obtenir une nouvelle configuration  $j$ .
- Calcul de l'énergie  $U_j$  de la nouvelle configuration  $j$ .
- Comparaison entre les deux énergies :
  1. Si  $U_j \leq U_i$  ( $\delta U \leq 0$ ), la nouvelle configuration  $j$  est acceptée.
  2. Si  $U_j > U_i$  ( $\delta U > 0$ ), la configuration  $j$  doit être acceptée avec une certaine probabilité  $e^{-\beta\delta U}$  avec  $\beta = 1/k_B T$ .
- Génération d'un nombre aléatoire  $\xi$  compris entre 0 et 1 (distribution uniforme des nombres aléatoires) à comparer avec la probabilité de la configuration  $j$ .
  1. Si  $\xi < e^{-\beta\delta E}$ , la configuration  $j$  est conservée.
  2. Si  $\xi > e^{-\beta\delta E}$ , la configuration est rejetée.
- Retour vers la deuxième étape de l'algorithme pour chercher une autre configuration plus stable.

Il suffit ensuite d'itérer cette démarche plusieurs fois ( $10^4 - 10^5$ ). Le système doit enfin atteindre un état d'équilibre : c'est la thermalisation qui se réalise en pratique, à l'issue de l'exécution du programme, puis seront déterminées les valeurs des observables.

Pour les systèmes macroscopiques, qui sont modélisés par un nombre limité de particules confinées dans une cellule principale avec des conditions aux limites, la précision dans la mesure des forces coulombiennes de longue portée reste toujours l'objectif des simulations numériques. Mais certains phénomènes complexes sont encore mal compris parce qu'ils sont difficilement traduisibles en équations. Il existe donc, une limite d'ordre théorique pour les méthodes de simulation. D'autre part, comme le nombre d'opérations nécessaires à la résolution d'un modèle croît exponentiellement en fonction du degré imposé pour la précision, certains modèles mathématiques ne peuvent pas être résolus numériquement en un temps raisonnable.

Malgré ces limites, les méthodes MC sont largement utilisées dans de nombreux domaines. En médecine nucléaire par exemple, la technique MC est devenue un outil important pour assister l'étude et le développement de systèmes d'imagerie, optimiser leur exploitation et contribuer à l'analyse de leurs données. Les applications de la méthode MC en finance ont des spécificités qui ont conduit au développement de nouvelles méthodes de simulation. En physique des plasmas complexes de laboratoire, la diversité de phénomènes est large. La simulation MC a été utilisée dans l'étude des phénomènes stochastiques des cristaux de grains de poussière à deux-dimensions (2D) [78, 81, 82].

## 3.4 Optimisation de l'énergie

Un des problèmes majeurs liés à la simulation est la durée d'exécution des codes de calcul. L'optimisation du temps de calculs est devenue une nécessité dans la simulation. Généralement, deux approches sont utilisées :

1. La présentation et la façon d'écrire les expressions mathématiques n'est pas généralement conforme à l'analyse mathématique. Certaines fonctions prennent plus de temps de calcul que d'autres. Dans le cas d'existence d'équivalence, nous optons

pour l'écriture la plus simple. Par exemple, choix entre logarithmique et exponentielle.

2. L'utilisation des techniques d'optimisation. Par exemple, lorsque le système prend plus de temps pour se stabiliser, on fait appel à la technique d'ahinilation. Le système est chauffé puis refroidi afin de revenir à la température désirée. Ceci se fait, à travers le programme par une boucle globale qui augmente et diminue la température d'un pas petit [83]. Dans notre cas, nous avons opté pour une autre technique d'optimisation qui se base sur la méthode de Newton [84].

L'algorithme de cette méthode consiste : En première étape, à linéariser le système d'équations par un développement en série de Taylor dans le voisinage d'un estimé proche de la solution exacte. En deuxième étape, à résoudre le système linéaire par une méthode directe comme par exemple, la méthode d'élimination de Gauss.

# Chapitre 4

## Modélisation d'un plasma cristallin à charge positive variable

### 4.1 Introduction

Un plasma complexe contient différentes espèces chargées, des électrons, des ions ainsi que des grains de poussière qui sont chargés positivement ou négativement selon les processus de charge réalisés [43, 85, 86]. Dans un plasma complexe, les grains de poussière peuvent être de nature et de taille différentes. Vu la taille qui est assez grande par rapport aux autres espèces du plasma, les grains sont hautement chargés [43, 87]. En effet, leur taille apparaît comme un paramètre déterminant dans la dynamique des plasmas complexes.

Par effet d'écrantage de l'environnement du plasma, l'interaction entre les grains n'est pas toujours de type coulombien pur. Elle est caractérisée par un paramètre d'écrantage  $k$ . Dans ce cas, le potentiel d'interaction est de type Debye-Hückel ou Yukawa [88]-[90]. Dans les systèmes à faible nombre de grains ( $\leq 50$ ), les configurations d'équilibre des grains et

les transitions de phase sont étroitement liées à l'interaction inter-grains et au potentiel de confinement électrostatique. De cet effet, il est donc nécessaire de déterminer précisément ces interactions et leurs principales caractéristiques.

La recherche d'un modèle physique décrivant les propriétés macroscopiques à l'aide des grandeurs microscopiques reste le but principal. De cet effet, l'étude de l'interaction inter-grains est un objet clé dans cette recherche. De plus, un plasma de décharge de laboratoire a des limites géométriques et les conditions opératoires comme la structure, la composition, la température et la conductivité peuvent influencer la formation et le transport de ces grains de poussière, et par conséquent, leur interaction.

Les propriétés dynamiques d'un système physique complexe sont dictées par le comportement de chaque particule du système et par son interaction avec les autres particules. La relation entre les échelles microscopique et macroscopique semble être l'issue clé pour l'obtention du modèle de description. Dans l'étude expérimentale d'un plasma complexe, le champ électrique de suspension des grains chargés oblige les ions à flotter du côté de l'électrode et donc rend leur distribution anisotrope. Dans beaucoup de cas, la vitesse d'accumulation dans la région de confinement latéral des grains, est supposée être supérieure à la vitesse thermique des particules neutres. L'écrantage classique de Debye-Hückel n'est plus suffisant pour la description de la contribution ionique. La contribution électronique est difficile à déterminer, parce que les électrons obéissent au champ électrique de décharge (RF) plus rapidement. La simulation et les mesures spectroscopiques récentes suggèrent que, dans la région de la gaine, les électrons peuvent avoir des distributions de vitesse différentes de celle de Maxwell.

Beaucoup de travaux expérimentaux, basés sur la suspension des grains dans une gaine au-dessus d'une cathode horizontale, ont été effectués pour étudier les configurations de l'état fondamental ainsi que les transitions de phase d'un cristal coulombien bidimensionnel ( $2D$ ) de grains chargés positivement ou négativement [15, 91]-[95]. Un tel cristal ( $2D$ ) est déterminé par un compromis entre l'interaction inter-grains et le potentiel de confinement. La charge des grains varie en fonction du temps et en fonction de l'emplacement géométrique du grain. Donc, la charge est une variable dynamique décrite par une équation

d'évolution spatio-temporelle dite équation de la fluctuation de la charge [25]. Cet effet a été largement étudié dans différentes situations [96, 97]. Dans les plasmas complexes où la nature discrète de la charge n'est pas négligée, l'aspect aléatoire du processus de charge peut modifier le mouvement du grain par un potentiel inter-grains qui dépend des fluctuations [25]. L'effet de la fluctuation aléatoire de la charge sur les propriétés statique et dynamique des cristaux ( $2D$ ) finis, a été étudié par Vaulina et al. [98], par le biais de la simulation dynamique moléculaire. Il a été montré que cet effet est relié à une source effective de chaleur qui est responsable de la fusion du cristal coulombien, ce qui était en bon accord avec les observations expérimentales. Dans un plasma de décharge (RF), l'énergie peut augmenter de quelques  $eV$ , sous l'effet de la fluctuation de charge et sans oublier l'effet de la taille du grain qui peut être un paramètre effectif dans la détermination de l'énergie du grain [98]. Sous l'effet de la fluctuation de charge, la température du grain devient supérieure à la température thermique. En effet, elle varie de  $0.1 eV$  à  $0.3 eV$  pour un grain de rayon  $5 \mu m$  et de  $1.7 eV$  à  $8.3 eV$  pour un grain de rayon  $25 \mu m$  [99]. En utilisant l'approche de Langevin, Quin et al. [100] ont étudié l'effet des fluctuations en présence d'un gaz neutre. La chaleur induite par la fluctuation de la charge est neutralisée (équilibrée) par un effet de refroidissement causé par le gaz neutre.

L'étude des structures ordonnées ( $2D$ ) finies, formées par les grains de poussière, a fait l'objet de nombreux travaux expérimentaux et théoriques [101]-[107], avec une charge moyenne considérée constante, ainsi que le rôle crucial du paramètre d'écrantage, dans la détermination des propriétés des cristaux coulombiens. Notre contribution, s'inscrit dans le cadre de l'étude par modélisation et par simulation des propriétés statiques et dynamiques d'un cristal coulombien ( $2D$ ) fini dans le cas réaliste d'une charge fluctuante [108]-[110].

## 4.2 Potentiel de confinement

Le confinement dans un plasma astrophysique, est soit gravitationnel (la plupart des étoiles sont des plasmas confinés par la gravité) ou bien magnétique (ceintures de radia-

tions dans la magnétosphère terrestre) [111]. Dans un plasma de laboratoire, différentes configurations électriques et magnétiques sont utilisées. Par exemple, les anneaux de stockage, les pièges de Paul, les potentiels électrostatiques dans les décharges radio-fréquence (RF) et courant-continu (DC), ou simplement un confinement par la paroi.

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 compensent comme l'indique la figure (4.1) [86]. Le champ électrique  $E(z)$  croît linéairement du bord du plasma vers l'électrode, ce qui induit une force électrique croissante  $F_E(z)$  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 du grain de poussière.

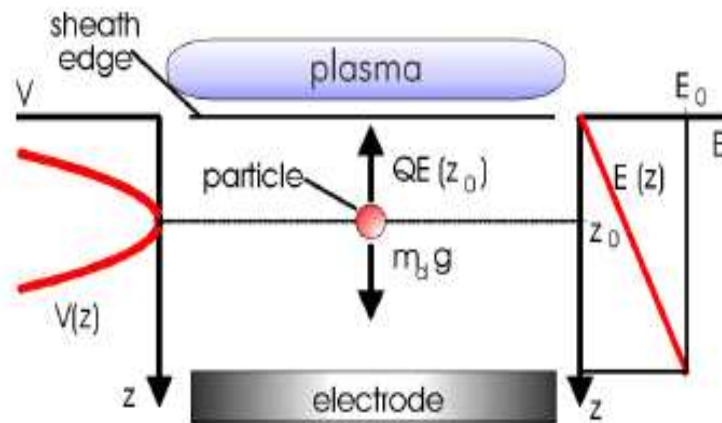


FIG. 4.1: Confinement des grains de poussière dans la gaine d'un plasma de décharge radio-fréquence (RF) [85].

L'interaction entre les grains chargés est répulsive. Pour empêcher l'expansion radiale non-limitée, ces systèmes exigent un confinement électrostatique horizontal pour maintenir les grains suspendus au voisinage de la gaine en formant un nuage horizontal ordonné. L'ordre de la structure est une conséquence de la compétition entre l'interaction coulombienne

répulsive entre les grains et les forces de confinement [112]. Les grains immergés dans un plasma sont en général soumis aux forces suivantes : les forces électrostatiques, la gravité, la force de thermophorèse, la force de friction des ions et la force de friction des atomes neutres [39, 113]. Par exemple, dans un plasma de décharge et lorsque la décharge est atteinte, les forces qui continuent d'agir sur les grains sont : la force de gravité, la force de thermophorèse et la force de friction avec les atomes. Dans ce cas, la gravité est compensée par la force de thermophorèse et les frottements des atomes qui amortissent les oscillations induites par la force électrique [85, 114].

### 4.2.1 Confinement elliptique

Pour obtenir un confinement elliptique horizontal, une plaque métallique est déposée sur l'électrode inférieure. Ceci a pour effet de diminuer la surface de l'électrode selon le petit rayon de l'anisotropie. Par conséquent, les équipotentielles sont élevées aux limites du nuage de grains et un champ électrique radial localisé, équilibrant la pression électrostatique du nuage, est ainsi créé. Selon les conditions du plasma de base, les grains peuvent s'organiser dans un état liquide ou cristallin.

Les figures (4.2.(a) et 4.2.(b)) représentent respectivement le schéma d'un dispositif expérimental (un arrangement horizontal des grains de poussière) et une section transversale de la barrière de confinement anisotropique appliqué. L'expérience est réalisée dans une décharge (RF) à plaques parallèles (13.56 MHz à 5 W) dans un plasma d'argon aux pressions entre 2 et 10 Pa [115]. Des grains microsphériques de diamètre  $10.2 \mu\text{m}$  et de masse  $8.41 \times 10^{-13} \text{ kg}$  sont injectés dans le plasma de décharge. Une plaque rectangulaire d'épaisseur 6 mm et de section  $5 \times 40 \text{ mm}^2$  est placée sur l'électrode inférieure. Les grains sont piégés au-dessus de la plaque par une force électrique et la force de gravité. La barrière provoque un confinement anisotropique sur les grains dans le plan horizontal. Les grains sont éclairés par une diode laser et la lumière diffusée est capturée par une caméra vidéo à une cadence de 50 fps avec une résolution de l'ordre du mégapixel. Le cluster des grains est piégé dans le puits du potentiel induit par la barrière déposée sur l'électrode. La barrière déforme les lignes équipotentielles électrostatiques dans la gaine de plasma

au-dessus de l'électrode et forme ainsi un confinement anisotrope suivant la dimension de la barrière.

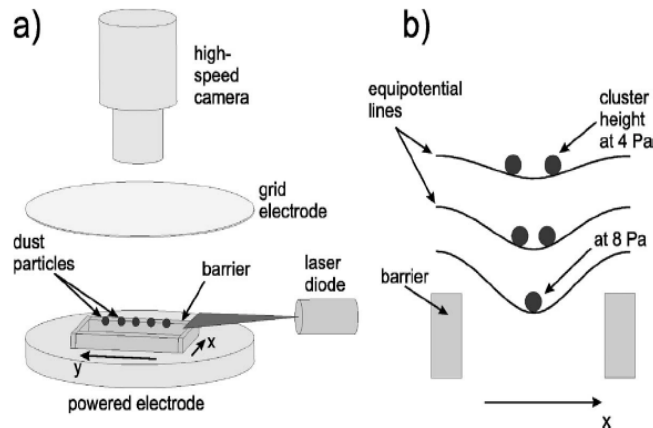


FIG. 4.2: (a) Schéma du dispositif expérimental. (b) Section transversale de la barrière de confinement anisotropique : Illustration des lignes équipotentiels [115].

Le potentiel de confinement elliptique (2D) est défini par l'expression suivante :

$$V(x, y) = \frac{1}{2}m_d(w_x^2x^2 + w_y^2y^2), \quad (4.1)$$

où  $x, y$  sont les coordonnées cartésiennes du grain dans le plan horizontal.  $w_x, w_y$  sont les fréquences de résonance, le rapport entre ces deux fréquences définit le paramètre d'anisotropie  $\alpha$ . Lorsque  $\alpha = 1$ , un confinement isotropique (parabolique) se présente.

### 4.3 Hamiltonien du système

Considérons un système bidimensionnel composé de  $N$  grains de poussière immergés dans un plasma partiellement ionisé, et soumis à un confinement parabolique. Les grains sont supposés sphériques identiques de rayon  $r_d$ , de masse  $m_d$  et portant une charge positive  $Ze$ . Dans les plasmas complexes de laboratoire, il est possible de créer des grains sphériques monodispersifs (même forme et même taille) [116]. L'existence d'un plasma poussiéreux nécessite l'injection permanente d'un faisceau de particules neutres pour

soutenir le système et pour maintenir la quasi-neutralité de la charge. Celle-ci est accomplie par la présence des électrons et des ions. Un choix judicieux des paramètres opératoires permet l'obtention d'une seule couche de grains de poussière dans un plan  $(x, y)$  horizontal. Lorsque l'énergie de l'interaction électrique entre les grains est dominante par rapport à leur énergie cinétique, le système est dit fortement corrélé. Ceci permet de considérer les grains comme des particules figées dans une région de confinement limitée. Ces considérations amènent à une limite classique du système dans laquelle, les grains peuvent être traités comme des particules chargées localisées. D'où, l'énergie cinétique de ces dernières dépend seulement de la température. Dans ce cas, l'Hamiltonien du système s'écrit comme suit :

$$H = \sum_i^N V_c(r_i) + \frac{1}{\epsilon} \sum_{i \neq j}^N \frac{q_i q_j \exp(-|r_i - r_j| / \lambda_D)}{|r_i - r_j|}. \quad (4.2)$$

$V_c$  est le potentiel de confinement électrostatique appliqué dans le plan  $(x, y)$ . Le potentiel de l'interaction inter-grains est de type Yukawa (coulombien écranté) [28].

Pour un confinement électrostatique parabolique, l'expression de l'Hamiltonien devient :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_d \omega_o^2 r_i^2 + \frac{1}{\epsilon} \sum_{i \neq j}^N \frac{q_i q_j \exp(-|r_i - r_j| / \lambda_D)}{|r_i - r_j|}, \quad (4.3)$$

où  $\epsilon$  est la constante diélectrique du milieu dans lequel se trouvent les grains.  $\omega_o$  et  $\lambda_D$  sont respectivement la fréquence du potentiel de confinement et la longueur de Debye.  $q_i$  ( $q_j$ ) est la charge du  $i$ -ème ( $j$ -ème) grain de poussière à la position  $r_i$  ( $r_j$ ) du centre de confinement.

En utilisant les unités appropriées de l'énergie  $E_o$ , de la distance  $r_o$  et de la température  $T_o$  suivantes [117, 118] :

$$E_o = \left( \frac{q_o^2}{\epsilon} \right)^{2/3} \gamma^{1/3}, \quad (4.4)$$

$$r_o = \left( \frac{q_o^2}{\epsilon} \right)^{1/3} \gamma^{-1/3}, \quad (4.5)$$

$$T_o = \frac{E_o}{k_B}, \quad (4.6)$$

l'Hamiltonien de l'Eq. (4.3) sous la forme normalisée, est donné par :

$$H = \sum_{i=1}^N r_i^2 + \sum_{i \neq j}^N \frac{Z_i Z_j \exp(-k|r_i - r_j|)}{Z_o^2 |r_i - r_j|}. \quad (4.7)$$

La constante  $\gamma$  ( $\gamma = m_d \omega_o^2 / 2$ ) représente l'énergie de confinement d'un seul grain. La charge  $q_o$  ( $q_o = eZ_o$ ) représente la charge moyenne du grain à l'équilibre. Le terme  $k$  ( $k = r_o / \lambda_D$ ) définit le paramètre d'écrantage des grains.

Pour des grains de poussière à charge constante, la nature et la taille des grains n'interviennent pas dans l'Hamiltonien normalisé du système. Ce dernier décrit d'une façon remarquable les propriétés statiques et dynamiques d'un système bidimensionnel fini de particules chargées fortement couplées et confinées [101, 117].

La variation stochastique de la charge des grains est l'une des caractéristiques fondamentales des plasmas complexes. Dans ce travail, nous considérons que les grains de poussière se chargent positivement par effet photo-ionique. Une telle situation existe en présence d'une radiation ultraviolette (UV). En pratique, cette radiation est fournie par des mini-arcs ou des lampes deutérium [95, 119]. Le courant d'émission correspondant est donnée par [33] :

$$I_p = \pi r_d^2 e J_p Q_{ab} Y_p e^{(-e\phi_d/T_{pe})}, \quad (4.8)$$

où  $J_p$  est le flux des photons,  $Q_{ab} (\sim 1)$  est l'efficacité de l'absorption de photon,  $\phi_d$  est le potentiel à la surface du grain par rapport au plasma ( $\phi_d = eZ/r_d$ ),  $T_{pe}$  est la température moyenne des électrons émis et  $Y_p$  est le rendement de l'émission photoélectrons, il varie entre 0 et 1 pour les diélectriques et il vaut 1 pour les métaux. On prendra en général, la valeur  $Y_p = 1/2$ .

En tenant compte de l'aspect discret du courant d'émission et de l'aspect aléatoire des fluctuations, la charge instantanée sur les surfaces des grains dépend de la position du grain. Autrement dit,  $q_i \neq q_j$  ( $Z_i \neq Z_j$ ). Sachant que le nombre de charge d'un grain  $i$  à un instant  $l$  de simulation MC, peut s'écrire comme (cf chapitre 2, § 2.2.1) :

$$Z_i^l = \langle Z_o \rangle + \Delta Z_i^l, \quad (4.9)$$

l'expression de l'Hamiltonien du système (Eq. 4.7) devient :

$$H = \sum_{i=1}^N r_i^2 + \sum_{i \neq j}^N \left( 1 + \frac{\Delta Z_i^l}{Z_o} \right) \left( 1 + \frac{\Delta Z_j^l}{Z_o} \right) \frac{\exp(-k|r_i - r_j|)}{|r_i - r_j|}. \quad (4.10)$$

$\Delta Z_i^l$  est la fluctuation de l'amplitude de la charge du  $i$ -ème grain à un temps égal à  $(t_o + l\Delta t)$  et  $(| \langle Z_o \rangle | >> \Delta Z_i)$ . L'expression de cette amplitude a été donnée par la référence [98] :

$$\Delta Z_i^{l+1} = [\Delta Z_i^l + \delta Z \xi] (1 - \beta \Delta t). \quad (4.11)$$

où :

$$\xi = \sin(2\pi\chi_1) \sqrt{2\ln(1/\chi_2)}, \quad (4.12)$$

$\chi_1$  et  $\chi_2$  sont deux nombres aléatoires uniformément distribués dans l'intervalle  $[0, 1]$ .

$$\delta Z = \sqrt{\nu_o \Delta t}, \quad (4.13)$$

$\nu_o$  est défini par

$$\nu_o = 2\pi r_d^2 \left( \frac{8T_e}{\pi m_e} \right)^{1/2} Z_o n_d (1 + \alpha) \quad (4.14)$$

et le paramètre

$$\alpha = \frac{Z_o e^2}{r_d T_e}. \quad (4.15)$$

L'étude de l'effet de la fluctuation de la charge est significative si le pas du temps d'intégration dans la simulation  $\Delta t$  est inférieur à  $\tau_c$ . Avec  $\tau_c = 1/\beta$  représente le temps caractéristique de la fluctuation et  $\beta$  sa fréquence. Pour la photo-émission :

$$\beta = \frac{\nu_o}{2Z_o} \left[ \alpha \frac{\left( 1 + (1 + \alpha) \frac{T_e}{T_{pe}} \right)}{(1 + \alpha)} \right] \quad (4.16)$$

où  $T_e$  est la température de l'électron et  $T_{pe}$  est la température moyenne des électrons émis.

Notons que notre étude numérique est effectuée dans le cas où la fréquence de friction  $\nu_{fr} \ll \beta$ .  $\nu_{fr}$  peut être écrite dans l'approximation moléculaire libre (free-molecular approximation) par [120] :

$$\nu_{fr} = \frac{c_\nu P}{r_d \rho}, \quad (4.17)$$

où  $P$  est la pression du gaz,  $\rho$  est la densité de masse des grains et  $c_\nu$  un terme dépendant des propriétés du gaz et ayant la dimension  $s/m$ . L'équation (4.16) montre que la fréquence des fluctuations  $\beta$  dépend de la charge moyenne à l'équilibre  $Z_o$  et du rayon  $r_d$ .

La figure (4.3) représente la variation de la fréquence de friction et la fréquence des fluctuations de la charge en fonction de  $r_d$  et de  $Z_o$ . Les paramètres du grain chargé

positivement sont pris de la référence [119]. Nous pouvons déduire que la condition de notre étude,  $\nu_{fr} \ll \beta$ , est vérifiée pour des grains de rayon  $r_d \geq 2.5\mu m$  ou bien quand la pression du gaz est assez faible afin de négliger l'effet de friction. L'effet des fluctuations est plus significatif en faisant augmenter le rayon  $r_d$  pour une charge d'équilibre importante ( $Z_o$  de l'ordre de  $10^3$ ). Les paramètres physiques de notre système sont fournis par le processus de photo-émission dans un plasma de laboratoire à faible température ou dans les expériences de microgravité [95, 121].

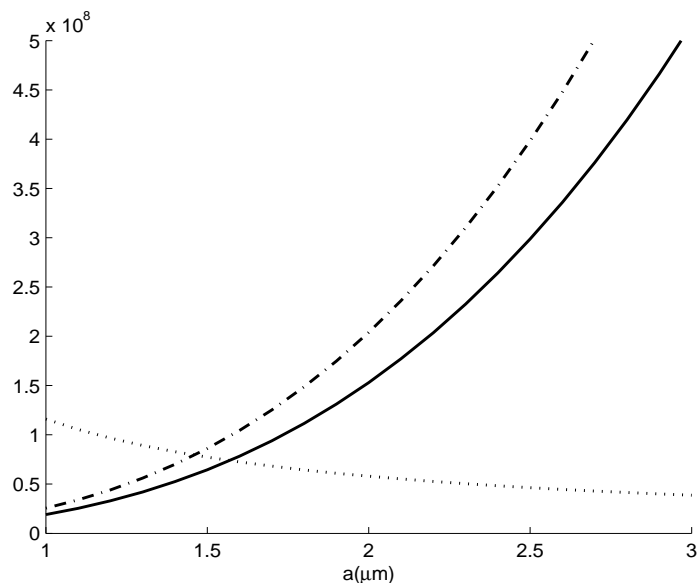


FIG. 4.3: Variation de la fréquence de friction  $\nu_{fr}$  (.....) et de la fréquence  $\beta$  de fluctuation de la charge en fonction du rayon de grain  $r_d$ .  $\beta$  est représentée pour deux valeurs de  $Z_o$  ( $Z_o = 3000$  (---) et  $Z_o = 4000$  (-.-.-)).

Le pas du temps d'intégration des fluctuations de charge, est pris très inférieur à  $(\frac{1}{\nu_0}, \frac{1}{\beta})$  ( $\Delta t \ll (\frac{1}{\nu_0}, \frac{1}{\beta})$ ), ce qui a nécessité un temps de calcul important. Nous avons été amenés à limiter le nombre de grains dans le système soit  $N < 100$ . Le choix du pas de temps ( $\Delta t = 1/\beta s$ ) est basé sur la représentation de la fluctuation  $\Delta Z$  en fonction du temps stochastique  $t$  de la simulation pour différentes valeurs du facteur  $s$  (voir la Fig.3.1). Ce dernier ne doit pas avoir une grande valeur. Nous avons trouvé que le maximum de l'amplitude  $\Delta Z$  correspond à  $s = 20$ . D'autre part, les résultats obtenus avec  $s = 50$  et

$s = 100$  différent peu, ceci justifie le choix de  $s = 20$  qui permet de garder le même temps de calcul quand on introduit la deuxième boucle d'itération associée à la fluctuation dans notre code.

### 4.3.1 Approche numérique

La méthode de Monte Carlo (MC), basée sur l'algorithme de Metropolis, est utilisée pour déterminer les configurations de l'état fondamental du cristal coulombien. Le nombre d'itérations de la simulation MC est de l'ordre de  $10^5 - 10^6$ . L'augmentation du nombre de grains dans le plasma rend le système plus complexe, ceci signifie qu'il n'est pas toujours évident d'obtenir par la méthode MC des énergies minimales globales. Dans ce cas là, la technique MC calcule des énergies locales qui correspondent à des états métastables. L'énergie au minimum local peut être très grande par rapport à celle du minimum global (voir Fig. 4.4). En effet, une méthode d'optimisation de Newton est combinée avec la méthode MC afin d'assurer une convergence rapide et obtenir les états stables à partir des états métastables [122].

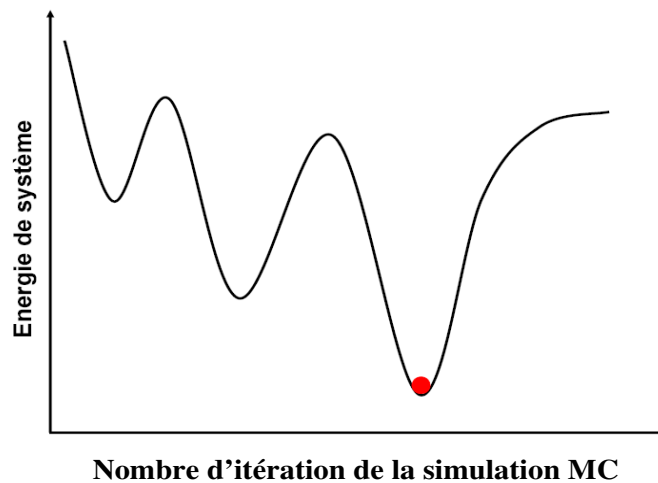


FIG. 4.4: *Energies minimales et globale d'un système physique en fonction du nombre d'itérations de la simulation MC.*

Un développement de Taylor du second ordre de l'Hamiltonien du système, Eq. (4.10), au

voisinage d'une configuration  $(r_{\alpha,i}^n, \alpha = x, y; i = 1, \dots, N)$ , nous permet d'obtenir la forme quadratique suivante :

$$H = H(r_{\alpha,i}^n) - \sum_i \sum_{\alpha} H_{\alpha,i}(r_{\alpha,i} - r_{\alpha,i}^n) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta} H_{\alpha\beta,ij}(r_{\alpha,i} - r_{\alpha,i}^n)(r_{\beta,j} - r_{\beta,j}^n), \quad (4.18)$$

où  $H_{\alpha,i}$  est une force et  $H_{\alpha\beta,ij}$  est la matrice dynamique. Ces grandeurs sont définies par :

$$H_{\alpha,i} = -\partial H / \partial r_{\alpha,i}, \quad (4.19)$$

$$H_{\alpha\beta,ij} = \frac{\partial^2 H}{\partial r_{\alpha,i} \partial r_{\beta,j}}. \quad (4.20)$$

Le terme  $r_{\alpha,i}^n$  représente les positions des grains de poussière dans le cluster à l'itération  $n$  de la simulation. L'étape suivante dans l'algorithme de calcul est de minimiser l'énergie du système (Eq. (4.18)). Cette condition de minimisation donne le système d'équations linéaires suivant :

$$\sum_j \sum_{\beta} (\eta \delta_{\alpha\beta,ij} + H_{\alpha\beta,ij})(r_{\beta,j} - r_{\beta,j}^n) = H_{\alpha,i}, \quad (4.21)$$

où  $\delta_{\alpha\beta,ij}$  est une matrice unité et  $\eta$  est un coefficient empirique introduit pour assurer la stabilité de l'algorithme. La convergence du code est garantie à la fois par le calcul au voisinage du minimum global de l'énergie et par une condition de convergence des itérations ( $\eta > -\lambda_{min}$ ),  $\lambda_{min}$  est la plus petite valeur propre de la matrice dynamique. Le système d'équations linéaires (Eq. 4.21) est résolu par la méthode d'élimination (ou de triangularisation) de Gauss. Cette dernière a pour but de transformer le système  $Ax = b$  en un système équivalent (ayant la même solution) de la forme  $Ux = b'$ .  $U$  est une matrice triangulaire supérieure et  $b'$  est un second membre convenablement modifié. Si dans un système de symétrie axiale par exemple, il existe une valeur propre minimale nulle ( $\lambda_{min1}$ ), la seconde valeur propre minimale  $\lambda_{min2}$  est considérée la plus petite valeur propre. L'hypothèse de  $\lambda_{min}$  positive assure que la configuration obtenue est stable. Afin d'atteindre l'état fondamental du système, nous exécuterons le code plusieurs fois et nous choisirons l'état de la plus faible énergie.

La résolution de ce système d'équations, nous a permis d'obtenir les configurations d'équilibre.

## 4.4 Effet de la fluctuation de la charge sur les configurations d'équilibre

Pour un plasma de décharge dont les paramètres sont :  $T_e = T_{pe} = 1eV$ ,  $Z_0 = 10^3$ ,  $m_d = 10^{-13}g$ ,  $a = 25\mu m$ , l'investigation numérique a été réalisée. Nous supposons que les grains atteignent leur charge d'équilibre après une certaine période de temps caractéristique  $\tau_c$  ( $\tau_c > 100s$ ). Ceci nous permet de choisir deux intervalles de temps appropriés aux fluctuations de la charge ( $\Delta t_1 = 16\Delta t$  et  $\Delta t_2 = 55\Delta t$ ). Le but de ce choix est de connaître s'il existe un effet de la période du temps caractérisant la fluctuation sur la configuration finale du système.

En premier lieu, nous avons appliqué notre code dans le cas où la charge des grains est constante et égale à la charge moyenne d'équilibre ( $q_0 = eZ_0$  et  $\Delta Z_i^l = 0$ ). Les positions initiales des grains sont prises aléatoirement dans la région du confinement horizontal. Il est important de noter du point de vue de la modélisation et de la simulation, qu'un ensemble de grains avec une charge constante est équivalent à n'importe quel autre système cristallin formé de particules chargées [117]. En effet, les équations du mouvement (Hamiltonien) étant normalisées, aucune des caractéristiques spécifiques des grains n'apparaît. Ceci nous a permis de tester notre code en comparant nos résultats avec ceux de la littérature où un bon accord a été trouvé [28, 117]. l'Hamiltonien normalisé du système à charge constante s'écrit comme suit :

$$H = \sum_{i=1}^N r_i^2 + \sum_{i \neq j}^N \frac{\exp(-k|r_i - r_j|)}{|r_i - r_j|}. \quad (4.22)$$

En second lieu, nous avons déterminé l'effet de la fluctuation durant un intervalle de temps approprié. Nous avons choisi deux périodes de temps stochastique dans le but de trouver son effet sur les configurations du système.

Sur la figure (4.5), nous avons représenté une série de configurations de l'état fondamental de trois systèmes différents de :  $N = 5$ ,  $N = 10$  et  $N = 15$  grains de poussière, respectivement. Une configuration d'équilibre (de l'état fondamental) est obtenue en exécutant le code plusieurs fois pour vérifier qu'elle n'a pas changé et qu'elle correspond à

une énergie minimale. Nous rappelons qu'une configuration à l'état final ne dépend pas du chemin suivi et que cette configuration est acceptée avec une certaine probabilité bien évidemment la plus élevée. Les points dans chaque configuration indiquent les grains de poussière du système. La température des grains est supposée très basse ( $\sim 0$ ). Les configurations, données par les figures (4.5 (a), (b) et (c)), indiquent les positions des grains dans le cas où leur charge est considérée constante. Cependant, les figures (4.5 (d), (e) et (f)) concernent les mêmes configurations mais dans le cas d'une charge fluctuante dans l'intervalle de temps caractéristique  $\Delta t_1 = 16\Delta t$ .

Une configuration d'équilibre du système de grains peut être décrite comme une succession de couches concentriques [122], que l'on désigne par  $(n_0, n_1, n_2, \dots)$ , 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 le type d'interaction entre les grains; elle résulte du compromis réalisé entre la symétrie circulaire due au confinement et la tendance naturelle de l'ensemble des grains à s'organiser en un réseau symétrique en l'absence de contraintes. La comparaison entre les configurations montre que l'effet de la fluctuation de la charge des grains se présente soit par une rotation des couches, comme c'est le cas pour  $N = 10$  et  $N = 15$  par exemple, ou bien par un saut d'un grain d'une couche à une autre, comme dans le cas où  $N = 5$  ( $(0, 5) \rightarrow (1, 4)$ ).

Il est important de noter que l'effet du nombre de grains  $N$  est primordial dans la détermination du nombre de couches et du nombre de grains de chaque couche. Dans le tableau 1, nous présentons les structures en couches pour différents nombres de grains  $N$  dans les deux différents cas à savoir : charge constante et charge fluctuante. Les grains sont distribués sur des couches (shells) circulaires  $2D$  où la distance inter-grains moyenne dépend du rayon de la structure particulière et du nombre total des grains. Quand le nombre  $N$  augmente, nous remarquons que la structure des couches internes est similaire à celle d'un réseau triangulaire comme le montre la figure (4.6).

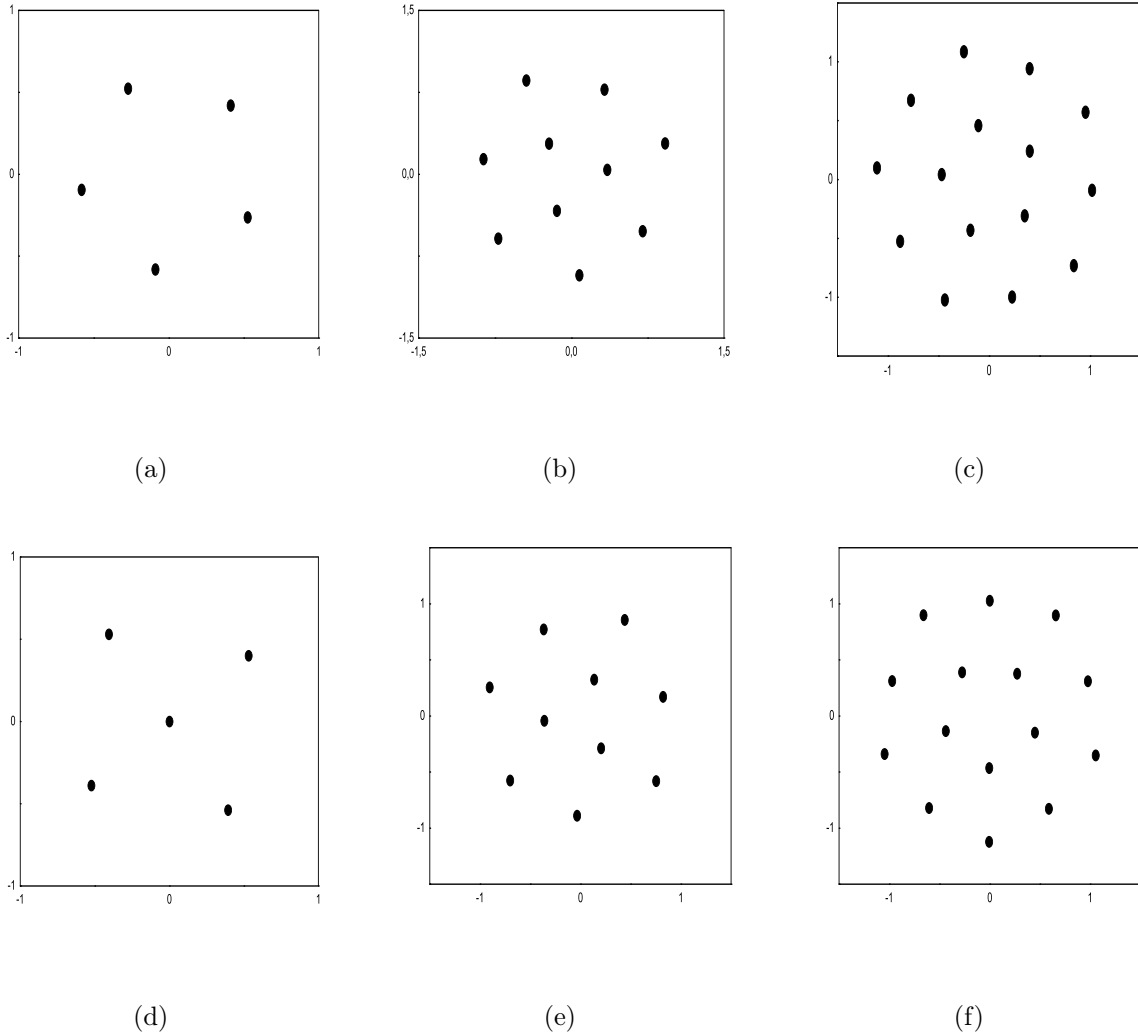


FIG. 4.5: Configurations de l'état fondamental, à  $T \sim 0$ , des systèmes 2D de  $N = 5, 10, 15$  grains de poussière modélisés par un potentiel de type Yukawa. Les configurations (a), (b) et (c) sont représentées dans le cas d'une charge constante et les configurations (d), (e) et (f) sont représentées dans le cas d'une charge fluctuante.

*Tableau 1 : Configurations d'équilibre d'un système de  $N$  grains de poussière, obtenues à basse température ( $\sim 0$ ).*

Nombre de grains	Charge constante	Charge variable
5	(0,5)	(1,4)
6	(1,5)	(1,5)
7	(1,6)	(1,6)
8	(1,7)	(1,7)
9	(2,7)	(2,7)
10	(3,7)	(3,7)
11	(3,8)	(3,8)
12	(4,8)	(3,9)
13	(4,9)	(3,10)
14	(5,9)	(1,4,9)
15	(5,10)	(5,10)
16	(1,6,9)	(1,5,10)
17	(1,6,10)	(1,6,10)
18	(1,6,11)	(1,6,11)
19	(1,7,11)	(1,7,11)
20	(2,7,11)	(1,7,12)
21	(2,7,12)	(2,7,12)
22	(2,8,12)	(2,8,12)
23	(3,8,12)	(3,8,12)
24	(3,9,12)	(3,9,12)
25	(3,9,13)	(3,9,13)
26	(4,9,13)	(4,10,12)
27	(4,10,13)	(4,10,13)
28	(4,10,14)	(4,10,14)
29	(4,11,14)	(4,11,14)
30	(1,6,9,14)	(1,6,11,12)

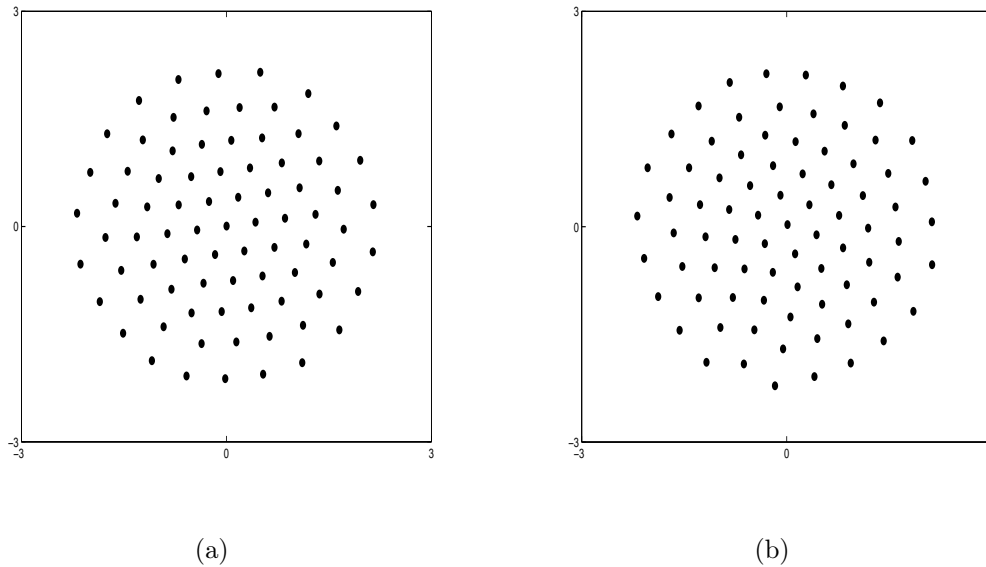


FIG. 4.6: Configurations d'équilibre du système (type Yukawa) de  $N = 80$  grains obtenues à  $T \sim 0$  et dans les deux différents cas : (a) à charge constante et (b) avec fluctuation aléatoire de la charge.

Selon le tableau 1 donné, nous pouvons conclure qu'à basse température, l'effet de la fluctuation de la charge est plus significatif dans le cas des systèmes à faible nombre de grains. Dans ce cas, le nombre de grains sur une couche peut changer. Cependant, quand le nombre total de grains augmente, l'effet de la fluctuation de la charge est traduit par une simple rotation des couches.

Ces configurations sont essentiellement définies, par le rayon et le nombre de grains sur chacune des couches. Par exemple, pour  $N = 5$ , l'état stable se présente en une seule couche (0, 5) (ou (1, 4) sous l'effet de la fluctuation de charge). Jusqu'à  $N = 15$  (ou  $N = 13$  avec fluctuation de charge), les configurations présentent deux couches concentriques bien identifiées, le grain supplémentaire entre la configuration  $N$  et la configuration  $N + 1$  se place dans l'une des deux couches. Au delà de 15 grains (ou 13 avec fluctuation de charge), les configurations présentent trois couches concentriques. Pour un nombre de grains supérieur à 30, la zone centrale du système subit moins les effets des parois et commence à présenter une symétrie triangulaire. Dans ce cas, la notion de couches devient moins nette. Nous signalons que cette symétrie peut être particulièrement bien respectée

pour un certain nombre de particules comme pour  $N = 7$  (configuration  $(1, 6)$ ) ou pour  $N = 19$  (configuration  $(1, 6, 12)$ ). Plusieurs transitions entre différentes positions d'équilibre stables ou métastables sont observées sous l'effet de la charge fluctuante.

Jusqu'à présent, nous avons examiné l'influence du nombre total de grains chargés positivement sur les propriétés statiques d'un système à une basse température ( $T \sim 0$ ). Nous avons constaté que l'effet de la fluctuation aléatoire de la charge joue le rôle d'une source d'énergie additionnelle. Cette dernière peut modifier la distribution des grains en donnant naissance à une transition vers une nouvelle structure.

## 4.5 Transitions de phase dans les cristaux Coulombiens

En faisant augmenter la température d'un pas  $\Delta T = 1.6 \times 10^{-3}$ , nous avons pu suivre l'évolution de l'état solide du système jusqu'à l'apparition de la phase fluide. Nous montrerons alors le rôle spécifique joué par les excitations individuelles (transitions d'un seul grain entre couches) dans la mise en désordre des systèmes dans leur évolution vers la fusion. Dans ce cadre, nous insisterons tout particulièrement sur le rôle joué par les symétries locales et notamment l'ordre du nombre de grains dans chaque couche. L'évolution de ce phénomène est bien illustrée par la figure (4.7).

La figure (4.7) présente une comparaison entre les différentes configurations avec et sans fluctuation de la charge pour les systèmes  $N = 5, 10, 15$ , à une température  $T = 0.1\Delta T$ . En comparant entre les configurations représentées sur les figures (4.7 (a), (b) et (c)) et celles représentées sur les figures (4.5 (a), (b) et (c)), nous constatons que l'augmentation de la température cause une excitation des grains sur le plan de la cristallisation. Les figures (4.7 (d), (e), (f), (g), (h) et (i)) indiquent que l'effet de la fluctuation de la charge entraîne le saut d'un grain de la couche interne vers la couche externe (comme pour  $N = 10$ ) ou bien de la couche externe vers la couche interne (comme pour  $N = 5$ ). D'après les figures (4.7 (g), (h) et (i)), les systèmes trouvent leur structure d'équilibre la plus symétrique dans un intervalle de temps plus large ( $55\Delta t$ ). Sur toutes les configurations, il est clair que les cristaux des grains perdent leur symétrie circulaire et qu'un désordre apparaît dans les structures d'équilibre sous l'effet de la variation des deux paramètres caractéristiques des grains : la température et la charge.

Dans le système d'un plasma poussiéreux fortement couplé, la description de la configuration d'équilibre en terme de distance entre les grains, a prouvé sa pertinence. Dans un réseau ordonné, les plus proches voisins d'un grain sont tous situés à la même distance de ce dernier. Ce n'est plus vrai si le système est désordonné. Dans le cas où le désordre est important, le défaut le plus simple est la modification du nombre de plus proches voisins (par exemple  $n$  augmente à  $n + 1$  ou diminue à  $n - 1$ ). Quand le nombre de grains augmente, le système passe par plusieurs états métastables désordonnés au cours d'une

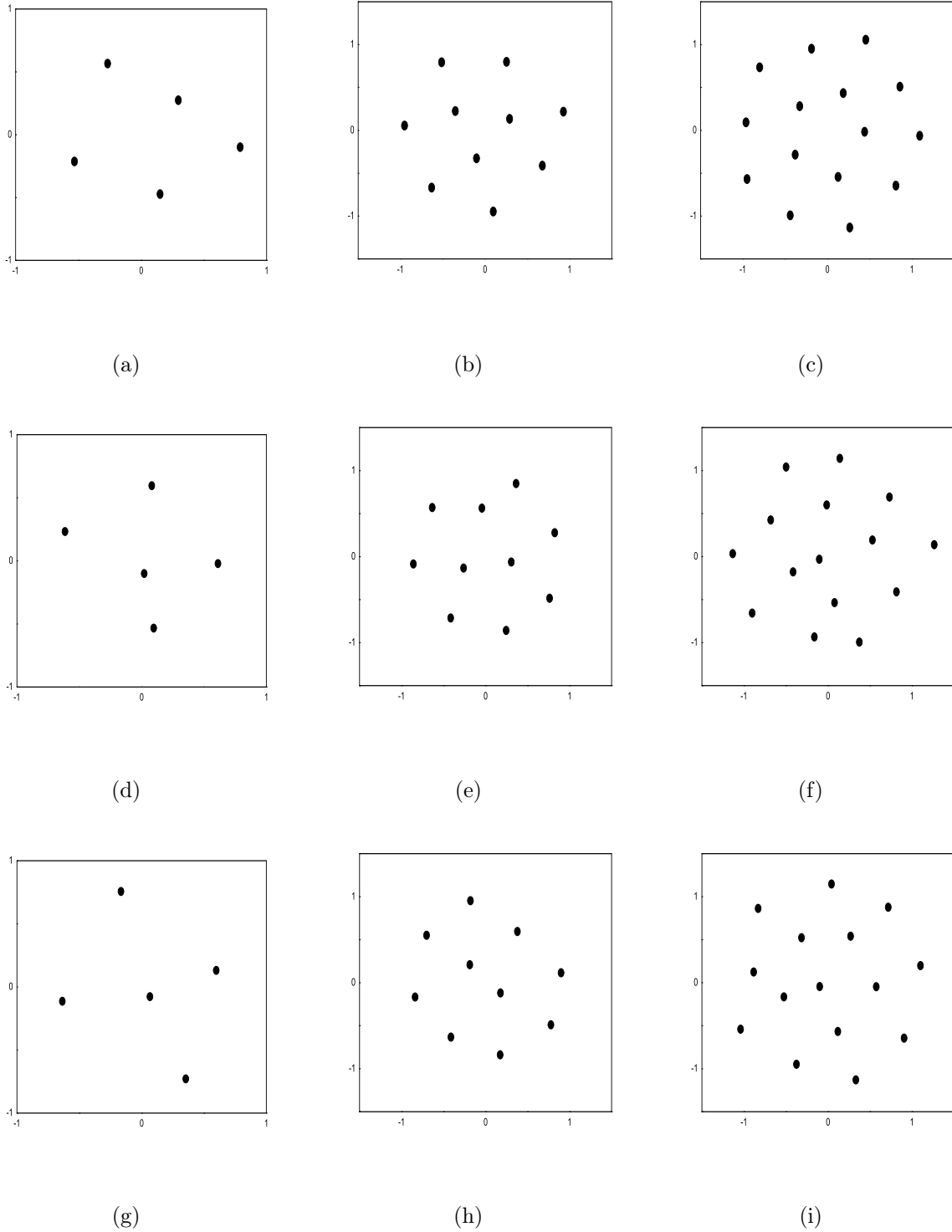


FIG. 4.7: Configurations d'équilibre des systèmes  $N = 5, 10, 15$  grains représentées à  $T = 0.1\Delta T$  dans les cas : (a), (b), (c) à charge constante et (d), (e), (f) à charge fluctuante pour l'intervalle de temps  $\Delta t_1 = 16\Delta t$  et (g), (h), (i) à charge fluctuante pour l'intervalle de temps  $\Delta t_2 = 55\Delta t$ .

transition entre deux structures en couches plus au moins ordonnées pendant un intervalle de temps relativement large ( $55\Delta t$ ). Ce comportement est dû à la fluctuation de la charge. Le système  $N = 15$  passe de la configuration (5, 10) à celle (1, 5, 9) comme l'indiquent les figures 4.7(c), (f) et (i). Le système  $N = 10$  passe d'une configuration (3, 7) à une nouvelle configuration (2, 8).

La figure (4.8) illustre la trajectoire de  $N = 9$  grains de poussière dans un plasma cristallin, sous l'effet de l'agitation thermique et de la fluctuation de la charge. A faible température, le mouvement des grains est bien localisé autour de leurs positions d'équilibre. Avec la prise en compte de la variation de la charge, l'amplitude du mouvement augmente mais la structure reste ordonnée (voir les figures 4.8(a), (d) et (g)). Lorsque la température augmente, l'amplitude du mouvement vibrationnel rotationnel de chaque particule augmente. Quand la température atteint une certaine valeur que nous allons étudier dans ce qui suit, la structure perd son ordre au niveau de la couche externe et les grains perdent la localisation de leur mouvement qui devient de plus en plus aléatoire [123]. Ce résultat est analogue à celui obtenu dans le cas des grains chauffés par un faisceau laser [124]. Les fluctuations fournissent une énergie additionnelle aux grains. Cette énergie provoque un saut de grain entre les couches dans les clusters à faible nombre de grains.

Dans la figure (4.9), nous avons tracé la variation de l'énergie moyenne d'un grain de poussière en fonction de la température normalisée dans les deux cas de charge : constante (triangle plein) et variable (triangle moitié plein). Nous pouvons voir clairement, que l'augmentation de l'énergie du grain est due à deux effets : le premier effet est celui des fluctuations de la charge qui peuvent être considérées comme une source de chaleur qui fait augmenter la température du grain. Quant au second effet c'est celui de l'agitation thermique. Nous remarquons aussi que l'énergie due aux fluctuations croît avec la température. L'énergie ne varie pas linéairement avec la température, par exemple quand  $T = 0.008$  un gain d'énergie due aux fluctuations de la charge vaut  $\Delta E = 3.75$  tandis que quand  $T = 0.008 \times 2$  nous avons  $\Delta E = 12.4$ .

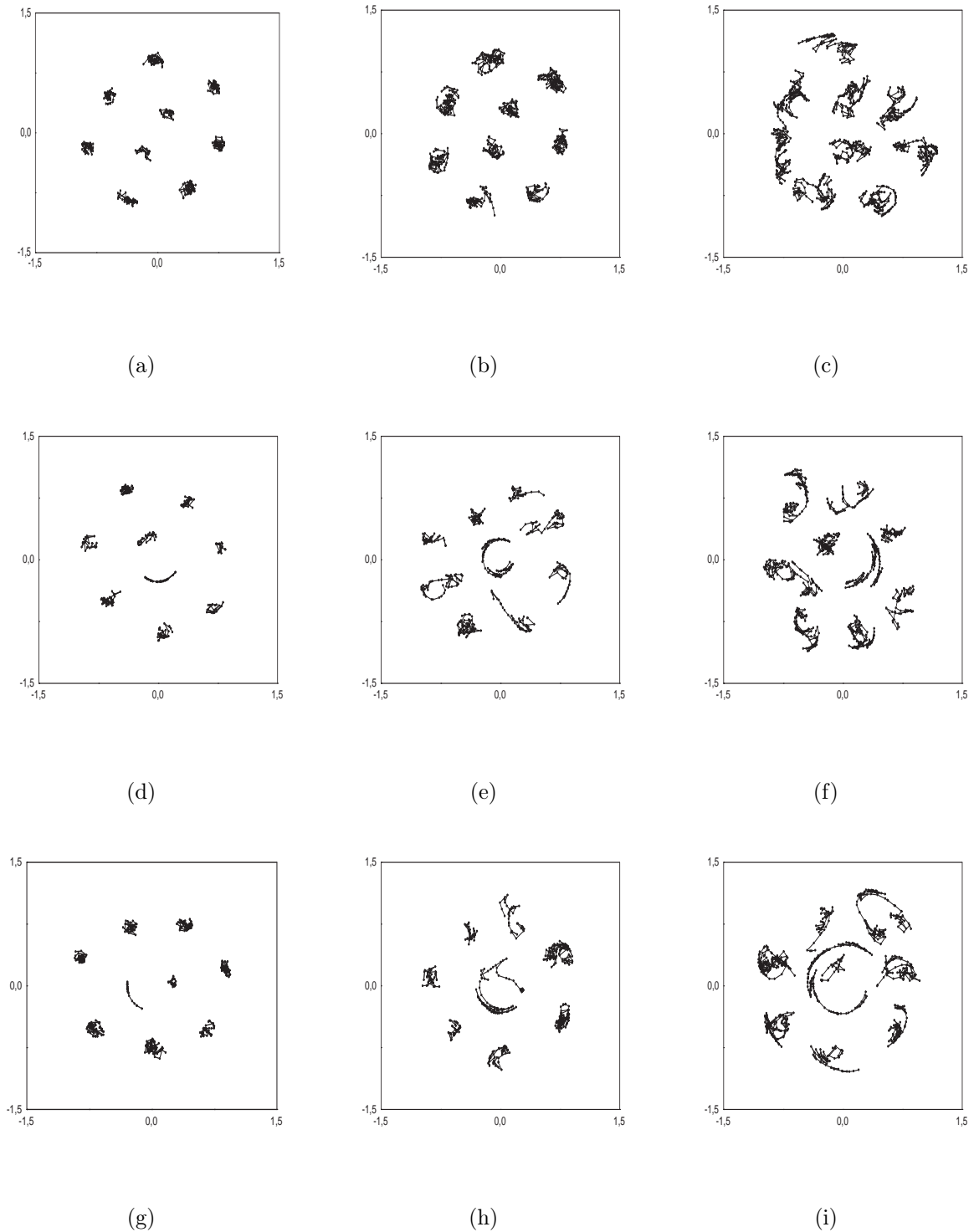


FIG. 4.8: Trajectoires du mouvement de  $N = 9$  grains de poussière dans un plasma cristallin, représentées à trois températures :  $0.15\Delta T$ ,  $0.4\Delta T$  et  $\Delta T$  respectivement et obtenues dans les cas : (a), (b), (c) à charge constante et (d),(e),(f) à charge positive fluctuante dans l'intervalle de temps  $16\Delta t$  et (g), (h), (i) à charge positive fluctuante dans l'intervalle de temps  $55\Delta t$ .

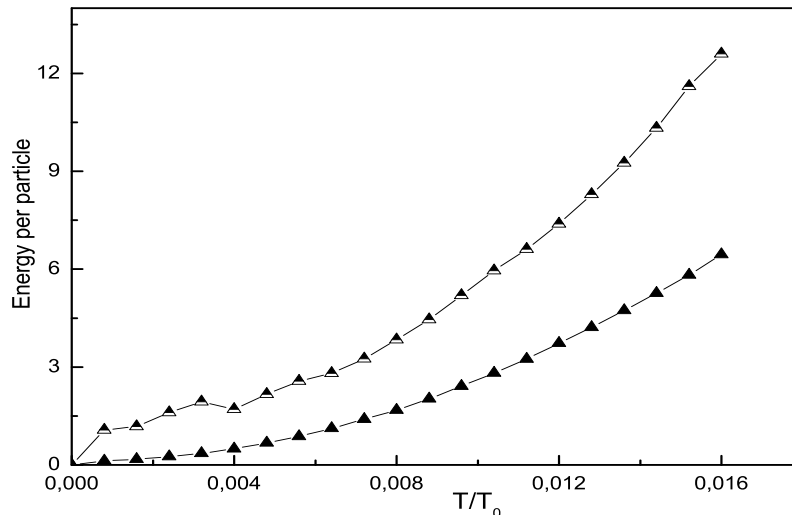


FIG. 4.9: Variation de l'énergie par grain en fonction de la température dans un plasma cristallin de  $N = 10$  grains de poussière, pour les deux cas de charge : (▲) à charge constante et (Δ moitié plein) à charge fluctuante.

### 4.5.1 Transition ordre-désordre : la fusion

La transition ordre-désordre (fusion) d'un cristal coulombien ( $2D$ ) est étudiée pour un système de  $N = 10$  grains en faisant augmenter leur température. Nous avons représenté sur la figure (4.10) la variation de l'écart type du déplacement radial moyen  $U_R^2$ , calculé à partir de l'expression :

$$U_R^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\langle r_i^2 \rangle - \langle r_i \rangle^2) / d^2, \quad (4.23)$$

$\langle \rangle$  est une moyenne sur les itérations de la simulation (MC) et  $d$  est la distance moyenne entre les grains. La quantité  $U_R^2$ , relative au centre du confinement des grains, nous donne une information sur l'amplitude moyenne du mouvement oscillant des grains autour de leurs positions d'équilibre [117, 125].

La fusion de ce genre de cristaux est caractérisée en général par une petite région dans laquelle la valeur de l'écart type du déplacement moyen augmente d'une façon très rapide. En effet, la température de fusion  $T_m$  est localisée dans cette région. Notre calcul mon-

tre que  $T_m$  diminue sous l'effet de la fluctuation de la charge comme l'indique la figure (4.10). La température de fusion du cristal de 10 grains sans l'effet de la variation de la charge vaut  $T_m \approx 0.05 T_o$ . Cependant, sous l'effet de la fluctuation, nous avons trouvé  $T_{m1} = 0.045 T_o$  dans un intervalle de temps caractéristique de fluctuation  $\Delta t_1 = 16\Delta t$ , et  $T_{m2} = 0.035 T_o$  dans un intervalle plus large  $\Delta t_2 = 55\Delta t$ . Nous remarquons que la température de fusion dépend de l'intervalle de temps. Nous pouvons conclure que lorsque le temps croît, le système reçoit une quantité d'énergie additionnelle due au processus de charge.

Notons que dans un confinement circulaire, le système  $N = 10$  sous l'effet de la fluctuation de la charge change de configuration  $(2, 8) \rightarrow (3, 7)$ . Pour une température basse, la variation moyenne du déplacement radial est presque linéaire avec une faible pente positive en fonction de la température. Ceci signifie l'existence des oscillations harmoniques des grains autour de leurs positions d'équilibre tout en gardant l'orientation des grains invariante des uns par rapport aux autres. Nous notons aussi que la croissance brusque de  $U_R^2$  dans la région de fusion, signifie que l'énergie thermique acquise par les grains est suffisante pour que ces derniers puissent se trouver dans un nouvel état désordonné.

Nous pouvons faire un rapprochement de nos résultats avec le modèle KTHNY (Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young) [126]-[129] qui propose un scénario de fusion bidimensionnelle ( $2D$ ) et qui a fait l'objet de nombreuses études, tant expérimentales que numériques. Ce modèle a l'avantage de prédire l'évolution d'un grand nombre de grandeurs (fonctions de corrélation, constantes élastiques, nature des défauts...) et constitue un repère à partir duquel il est possible d'analyser les processus qui amènent vers le désordre dynamique.

Dans les plasmas complexes fortement couplés, la fusion  $2D$  est supposée se dérouler comme suit : lorsque la température augmente, l'ordre orientationnel est perdu, alors que le système garde un quasi-ordre translationnel, jusqu'à une seconde transition après laquelle le système perd aussi son ordre translationnel et se comporte comme un liquide isotrope. La phase intermédiaire entre les deux transitions, dans laquelle le système n'est plus solide mais pas encore liquide, se nomme phase hexatique. La présence de telle ou telle phase est déterminée par le comportement asymptotique des fonctions de corrélations spatiales

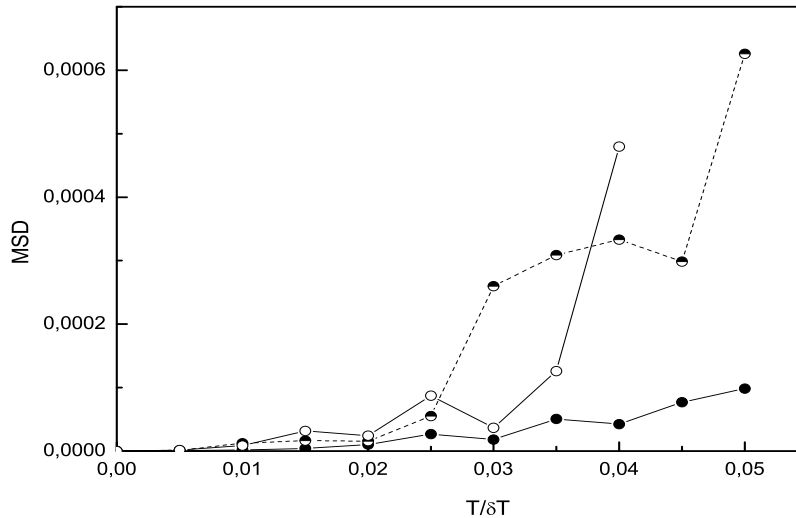


FIG. 4.10: Variation de l'écart type du déplacement radial moyen en fonction de la température d'un système de 10 grains, tracée à charge constante (●), à charge fluctuante dans l'intervalle de temps  $\Delta t_1$  (○) et à charge fluctuante dans l'intervalle de temps  $\Delta t_2$  (○ moitié plein).

translationnelles et orientationnelles. L'autre idée importante du scénario KTHNY est qu'à chacune des trois phases correspond une typologie particulière des défauts présents. En effet, la transition vers la phase hexatique est marquée par la forte augmentation du nombre de dislocations. La séparation de ces dislocations marque l'apparition de la phase liquide.

Dans notre étude et pour des petits systèmes, les déplacements radiaux inter-couches commencent à croître à des températures basses. Les grains de la dernière couche de la structure ressentent des champs aléatoires qui sont créés par les vibrations de leurs proches voisins à partir du centre et un champ parabolique régulier de l'extérieur. Cependant, les grains dans le centre ressentent des champs fluctuants dans toutes les directions. les déplacements radiaux sont relatifs parce qu'ils sont mesurés par rapport au centre du système. Quand la température atteint  $T_m$ , ceci indique une possibilité d'une rotation inter-couches précédant la fusion [130].

Le processus KTHNY n'est pas unique et il dépend du système étudié ainsi que du

type d'interactions inter-particules. Pouligny et al.[131] ont observé que les paramètres d'ordre translationnel et orientationnel chutent à la même température, dans le cas d'un système à faible nombre de particules confinées. Ils ont montré que l'ordre de cette transition est du premier ordre. Comme également évoqué par Bagchi et al.[132], le caractère fini du système couplé à une interaction avec les parois de portée non nulle, pourrait déplacer la température de transition solide-hexatique vers la température de transition hexatique-liquide. Notons toutefois qu'en raison de la petite taille du système, ce sont des paramètres d'ordre intégrés sur le système qui ont été utilisés, et non pas leurs fonctions de corrélations. Zheng et Grieve [133] utilisent en revanche la fonction de corrélation orientationnelle pour mettre en valeur une phase hexatique, ceci étant validé par le calcul de la figure de diffraction de Bragg du réseau, qui présente 3 motifs différents selon la température effective. Notons toutefois que cette fonction de corrélation ne peut être tracée que sur une distance de 15 pas du réseau, ce qui semble faible pour juger le comportement asymptotique. Une alternative pour discriminer les phases pourrait se faire en considérant les corrélations temporelles des mêmes paramètres, plutôt que les corrélations spatiales. Expérimentalement, une telle méthode est intéressante puisque l'obstacle du caractère fini de l'espace occupé (ou du champ de la caméra) est ainsi levé. Il a été montré par Nelson [129] que le comportement est identique à celui des fonctions d'espace, ce qui a été confirmé par l'expérience pour des particules colloïdales par Zahn et al [134].

# Chapitre 5

## Anisotropie du confinement électrostatique

### 5.1 Confinement elliptique

Dans les conditions du couplage fort, le comportement des grains de poussière dans un plasma de laboratoire est décrit essentiellement par deux potentiels électrostatiques : le potentiel d'interaction entre les grains et le potentiel de confinement appliqué [10]-[12]. Dans le cas d'un plasma complexe fortement couplé, les grains interagissent fortement entre eux par le biais du potentiel de Yukawa à cause de la présence d'un plasma de base qui assure la quasi-neutralité. Le couplage entre les grains est quantifié par un paramètre  $\Gamma$ . Lorsque ce dernier dépasse une valeur critique,  $\Gamma_c$ , les grains de poussière s'organisent en formant une phase liquide ou solide dans le plasma. Sachant que  $\Gamma_c$  dépend du potentiel de confinement, ce dernier contribue d'une façon considérable à la détermination des propriétés de ces phases ordonnées. Outre cette distribution, la présence d'un confinement électrostatique est primordiale pour la cohésion d'un système de nombre fini de particules. Dans cette partie, nous nous sommes fixés comme objectif l'effet de la géométrie du con-

finement horizontal des grains, sur les propriétés structurales et thermiques des cristaux  $2D$  finis. Il est utile de noter que, de nombreux travaux théoriques et expérimentaux ont été effectués dans le cas où la charge est constante, pour des systèmes  $2D$  et  $3D$  [135, 136]. Pour un confinement anisotropique, le cristal formé par des particules chargées, montre des transitions de phase qui dépendent de l'anisotropie du confinement [135]. Pour un nombre fini de grains, l'étude expérimentale montre que l'asymétrie du confinement induit différents réarrangements des grains, selon leur nombre  $N$  et le paramètre d'anisotropie  $\alpha$ . Une configuration stable obtenue pour un confinement anisotropique ne correspond pas toujours à la configuration stable de chaque couche (shell). L'étude numérique a montré l'influence du paramètre d'anisotropie sur l'ordre des transitions et sur les régimes de fusion d'un système fini. La fusion inhomogène est le processus d'une fusion typique, pour des petits clusters de particules chargées confinés anisotropiquement [136]-[138]. En présence d'un confinement elliptique, L'étude expérimentale des clusters finis a montré une transition en zigzag. Cette dernière est régie par la variation de l'anisotropie du confinement. Cependant, pour les grains, la présence d'un plasma de base est considérée à travers le paramètre d'écrantage  $k$ . A. Melzer *et al.* [115] ont étudié les transitions de phase en traitant les modes longitudinaux et transversaux.

## 5.2 Hamiltonien du système

Soit un système de  $N$  grains de poussière sphériques monodispersifs (même rayon et même forme), chargés positivement et immergés dans un plasma de laboratoire. Les grains de rayon  $r_d$  sont confinés dans un potentiel électrique anisotropique bidimensionnel ( $2D$ ) où les fréquences du confinement dans les directions  $x$  et  $y$  sont respectivement  $\omega_{ox}$  et  $\omega_{oy}$ . Le paramètre d'anisotropie  $\alpha$  est défini par l'expression :  $\omega_{ox}^2 = \alpha\omega_{oy}^2$ . Selon la forme de la barrière de confinement  $\omega_{ox} < \omega_{oy}$ , on trouve  $\alpha < 1$ . Le confinement isotropique (parabolique) est obtenu quand  $\alpha = 1$ . Pour  $\alpha \ll 1$ , le confinement conduit à un cluster linéaire ( $1D$ ). L'Hamiltonien d'un tel système est donné par l'expression suivante :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_d (\omega_{ox}^2 x_i^2 + \omega_{oy}^2 y_i^2) + \frac{e^2}{\epsilon} \sum_{j>i}^N Z_i Z_j \frac{e^{-|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|/\lambda_D}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (5.1)$$

où  $m_d$ ,  $q = Ze$  et  $\epsilon$  sont respectivement la masse, la charge du grain et la constante diélectrique du milieu.  $\mathbf{r}_i = (\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$  ( $\mathbf{r}_j = (\mathbf{x}_j, \mathbf{y}_j)$ ) est le vecteur position du  $i$ -ème ( $j$ -ème) grain mesuré par rapport au centre du potentiel de confinement.

Dans le cas général, il est toujours possible de normaliser les paramètres du système quelque soit le type de potentiel de confinement. Pour un confinement elliptique, les unités de normalisation de l'énergie, la position, la température et le temps sont, respectivement :

$$E_0 = (q_0^2/\epsilon)^{2/3}\gamma^{1/3}, \quad (5.2)$$

$$r_0 = (q_0^2/\epsilon)^{1/3}\gamma^{-1/3}, \quad (5.3)$$

$$T_0 = \frac{E_0}{k_B}, \quad (5.4)$$

$$t_0 = \frac{\sqrt{2}}{w_{0y}}. \quad (5.5)$$

$\gamma$  représente l'énergie de confinement d'un seul grain, donné par  $\gamma = m_d\omega_{oy}^2/2$  et  $q_0 = Z_oe$  la charge moyenne des grains à l'équilibre.

La forme adimensionnelle de l'Hamiltonien de l'Eq. (5.1) s'écrit comme suit :

$$H = \sum_{i=1}^N (\alpha x_i^2 + y_i^2) + \sum_{j>i}^N \frac{Z_i Z_j}{Z_0^2} \frac{e^{-k|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (5.6)$$

Le terme adimensionnel  $k$ ,  $k = r_0/\lambda_D$ , est une mesure de la portée du potentiel d'interaction entre les grains.

Dans notre système, nous avons considéré des grains chargés positivement par un processus de photo-émission induit par un rayonnement (UV). La variation de la charge des grains est prise en compte par indexation des grains dans nos équations. La fluctuation de la charge du grain de poussière  $i$  est représentée par un écart  $\Delta Z_i$  par rapport à la charge d'équilibre.

Afin de déterminer les configurations de l'état fondamental de notre système avec et sans fluctuation de la charge, nous avons utilisé la technique relativement simple de Monte Carlo (algorithme de Metropolis) combinée avec la méthode d'optimisation de Newton. Les mêmes équations de la variation de la charge du chapitre précédent sont utilisées. Nous avons trouvé que les configurations d'équilibre des cristaux de grains sont déterminées par le paramètre d'anisotropie  $\alpha$ , le nombre total de grains  $N$ , le paramètre d'écrantage  $k$  et la

fluctuation relative de la charge des grains  $\Delta Z/Z_0$ . L'Hamiltonien de notre modèle s'écrit sous la forme suivante :

$$H = \sum_{i=1}^N (\alpha x_i^2 + y_i^2) + \sum_{j>i}^N \left( 1 + \frac{\Delta Z_j^l}{Z_o} \right) \left( 1 + \frac{\Delta Z_i^l}{Z_o} \right) \frac{e^{-k|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (5.7)$$

Les mêmes paramètres définissant le plasma et les grains, décrits dans le chapitre précédent, ont été pris avec un paramètre  $k$  variant de 0 à 4.

### 5.3 Etats fondamentaux

Nous présentons les propriétés structurales des cristaux finis  $2D$  confinés horizontalement par un potentiel elliptique. Vu le temps de calcul coûteux (pour atteindre la charge d'équilibre), notre étude a été limitée à un petit nombre de grains de poussière ( $N \leq 100$ ). Nous avons considéré les deux cas pour la charge des grains. Dans le premier cas, la charge est prise constante, égale à la valeur moyenne à l'équilibre ( $\Delta Z_i = 0, i = 1, \dots, N$ ). Dans le second cas, la charge est variable ( $\Delta Z_i \neq 0, i = 1, \dots, N$ ). Les paramètres définissant le plasma sont pris des références [119, 139]. Dans ce cas, le rayon des grains sphériques  $r_d$  est égal à  $4 \mu m$ , la densité électronique  $n_e = 10^8 cm^{-3}$ , la température électronique  $T_e \sim 3 eV$ , la température d'électrons photoémis  $T_{pe} \sim 1 eV$  et  $k = 3$ .

Les figures (5.1) et (5.2) présentent une série de configurations d'équilibre des mêmes cristaux de ( $N = 4, 5, 6, 9, 10$ ) grains de poussière, obtenues à une basse température ( $T \sim 0$ ) et représentées dans les cas : à charge constante (Fig. 5.1) et à charge variable (Fig. 5.2). Il est à noter que, pour la figure (5.2), l'intervalle de temps caractéristique de la fluctuation aléatoire de la charge est  $\Delta t = \tau_c/20$  et que le nombre de charge moyenne d'équilibre est  $Z_{do} = 10^4$ .

Les changements de structure sont obtenus en faisant varier en même temps, la valeur de  $\alpha$  entre 0 et 1 et le nombre total de grains. Le nombre de couches du même cristal change ainsi que le nombre de grains de chaque couche. La diminution de la valeur de  $\alpha$  signifie que le confinement dans la direction  $y$  est plus fort que celui dans la direction  $x$ . Ceci explique l'apparition de la transition en zigzag entre les deux configuration ( $2D$ ) et

la configuration linéaire (1D) suivant l'axe  $x$ . Nous remarquons aussi que la valeur de  $\alpha$ , correspondant à un saut d'un grain interne vers la couche externe de la structure, diminue avec l'augmentation de  $N$ . A titre d'exemple, pour  $N = 6$ , la transition de la structure circulaire (1, 5) à une structure en zigzag est observée pour  $\alpha = 0.56$ , et quand  $N = 9$ , la transition de la structure (2, 7) vers une autre structure (1, 8) est observée pour  $\alpha = 0.1$ .

Il est connu dans les simulations, qu'une transition d'une structure complètement linéaire (1D) vers une autre (2D) est due à une transition en zigzag pour une valeur critique du paramètre d'anisotropie  $\alpha_c$ . Nous appellerons donc  $\alpha_c$ , la valeur du paramètre d'anisotropie correspondant à l'apparition de la chaîne linéaire et à la disparition de la structure en zigzag des grains. Notons que le système est dit linéaire lorsque le centre de tous les grains se trouve dans l'intervalle de distance  $[-r_d, r_d]$  suivant l'axe perpendiculaire au système.

Un autre effet important joué par l'anisotropie du confinement concerne la distance moyenne entre les grains  $d$ . Quand  $\alpha$  diminue,  $d$  décroît et par conséquent, le couplage entre les grains dans le cristal coulombien (1D) devient plus important.

En comparant les figures (5.1) et (5.2), l'effet de la fluctuation de la charge des grains est notable uniquement pour  $\alpha = 1$  (symétrie circulaire) où il est marqué par une transition structurale dans les systèmes à  $N$  grains représentés (voir les configurations sur la première colonne des Figs. 5.1 et 5.2). Pour  $\alpha < 1$ , l'effet de la variation de la charge est négligeable. Ceci signifie que l'énergie apportée par les fluctuations aux grains est petite par rapport à leur énergie totale de couplage. En effet, la distribution des grains dans le cristal ne change pas. On rappelle que notre calcul a été effectué pour un nombre de charge moyenne  $Z_{do} = 10^4$ .

Pour pouvoir interpréter ce dernier résultat, il est important d'étudier la variation de l'amplitude de la fluctuation de la charge  $\Delta Z$  en fonction de la valeur de  $Z_{do}$  et voir l'intervalle de variation importante du rapport  $\Delta Z/Z_{do}$  sur les propriétés du système.

Nous avons tracé sur la figure (5.3), la variation de l'écart-type de l'amplitude de la fluctuation de la charge ( $\sigma = \sqrt{\langle (\Delta Z_j^l)^2 \rangle - \langle \Delta Z_j^l \rangle^2} / Z_{do}$ ) en fonction de la valeur de la charge moyenne à l'équilibre  $Z_{do}$ . Donc, le changement est plus significatif quand

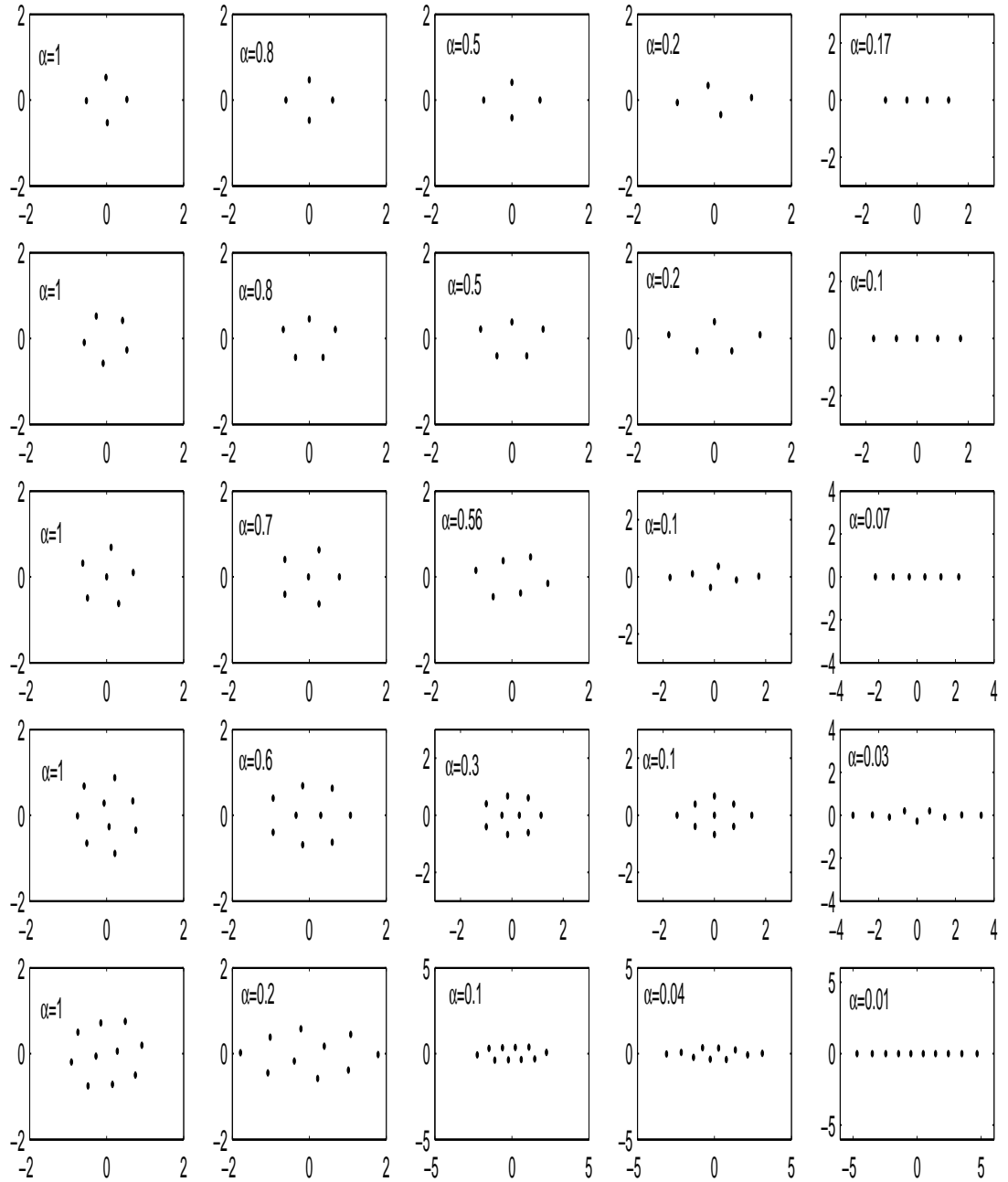


FIG. 5.1: Configurations d'équilibre des différents systèmes de  $N = 4, 5, 6, 9, 10$  grains obtenues pour différentes valeurs du paramètre d'anisotropie  $\alpha$  à charge constante et à basse température ( $T \sim 0$ ),  $Z_{do} = 10^4$ .

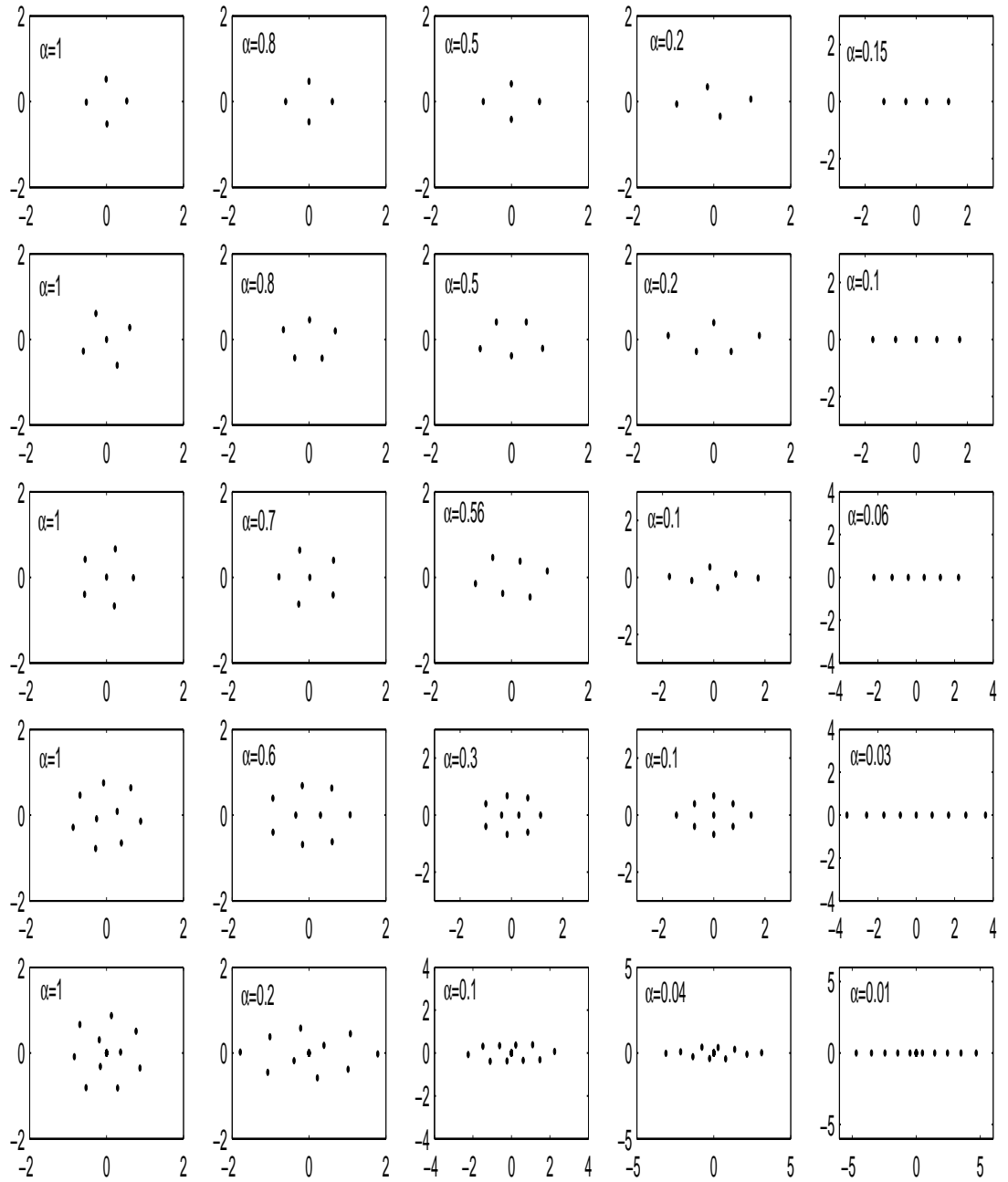


FIG. 5.2: Configurations d'équilibre des différents systèmes de  $N = 4, 5, 6, 9, 10$  grains obtenues pour différentes valeurs du paramètre d'anisotropie  $\alpha$  à charge variable et à basse température ( $T \sim 0$ ),  $Z_{do} = 10^4$ .

$Z_{do} < 10^3$ .  $\sigma$  dépend des paramètres initiaux du plasma de base, quand la température des électrons photoémis décroît,  $\sigma$  décroît aussi.

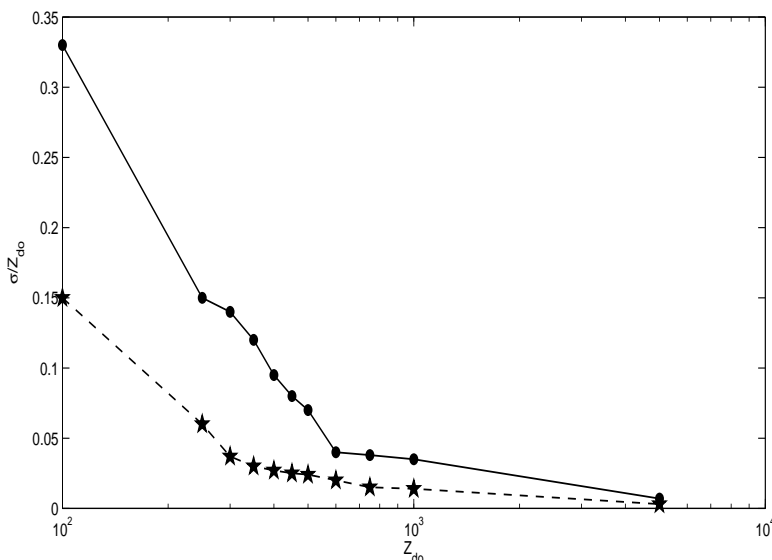


FIG. 5.3: *Ecart-type de l'amplitude de la fluctuation de la charge en fonction de  $Z_{do}$  à deux température d'électrons photoémis différentes. (●) pour  $T_{pe} = 0.8$  eV et (★) pour  $T_{pe} = 0.15$  eV.*

Nous avons comparé nos résultats de la figure (5.1) aux ceux de la référence [137] où un potentiel logarithmique de l'interaction intergrains est utilisé. Une différence entre les structures en couches est notée, elle peut être due au milieu complexe du plasma de base constitué d'ions et d'électrons, ou à l'effet d'écrantage qui est principalement causé par la présence du nuage de particules légères autour de chaque grain de poussière. La différence peut être aussi due à la différence entre les valeurs d'entricité ( $\alpha$ ) considérées. Pour aligner les grains le long de l'axe des  $x$ , la force suivant l'axe des  $y$  doit être plus importante, ce qui conduit à une faible valeur de  $\alpha_c$ . Quand le nombre  $N$  augmente, la cohésion entre les grains est forte et  $\alpha_c$  est donc plus petit (comme l'indique la Fig.5.4).

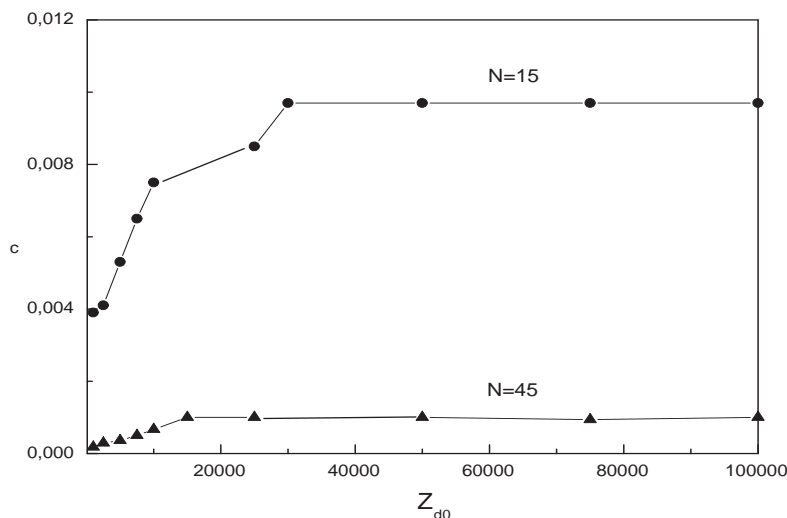


FIG. 5.4: Effet de la charge moyenne  $Z_{do}$  du grain sur le paramètre d'anisotropie  $\alpha_c$  quand la charge fluctue. Deux systèmes sont étudiés : ( $\bullet$ ) un petit système ( $N = 15$ ) et ( $\blacktriangle$ ) un système relativement large ( $N = 45$ ).

## 5.4 Effet de l'anisotropie sur les transitions de phase

Dans le but de suivre l'évolution des propriétés statiques et dynamiques des grains au voisinage de la transition en zigzag, nous avons tracé les courbes, donnant la variation de  $\alpha_c$  en fonction du nombre total des grains  $N$  et en fonction de la température des grains  $T/T_o$ . Nous nous sommes intéressés aussi à la variation de l'énergie par grain de poussière en fonction de  $N$ , sous l'effet de la fluctuation de la charge.

Nous avons représenté sur la figure (5.5) la valeur critique du paramètre d'anisotropie  $\alpha_c$  en fonction du nombre de grains  $N$  pour trois valeurs différentes de la charge moyenne d'équilibre  $Z_{do}$  ( $10^3, 10^4, 10^5$ ). La valeur de  $\alpha_c$  est obtenue à partir de l'étude numérique et elle correspond à la situation où  $y_i \sim 0$  ( $i = 1, \dots, N$ ), c'est à dire, à la configuration linéaire. L'approximation  $y_i \sim 0$  signifie que  $y_i < a$ ,  $a$  est le rayon du grain, car les grains sont considérés comme des particules ponctuelles. L'erreur relative sur la valeur  $\alpha_c$  calculée est de l'ordre de :  $\Delta\alpha_c/\alpha_c \simeq 2 \times 10^{-3}$ . Nous avons vu, d'après les configurations d'équilibre

trouvées précédemment (fig.5.1 et 5.2), qu'un système fini de  $N$  particules présente une transition structurale d'une configuration en zigzag  $2D$  à une chaîne linéaire ( $1D$ ). Ceci se produit à une certaine valeur critique de  $\alpha_c$ . La figure 5.5 révèle d'une part la façon dont  $\alpha_c$  varie en fonction de  $N$  et d'autre part comment cette variation change en fonction de la valeur de la charge d'équilibre  $Z_{do}$ . Nous avons conclu qu'une des caractéristiques des systèmes fortement couplés, avec un nombre fini de particules est la possibilité de passer d'un système unidimensionnel (chaîne linéaire) à un système bidimensionnel ou inversement, dans des conditions spécifiques qui dépendent de la nature de l'interaction et du potentiel de confinement, la chaîne linéaire peut se scinder en trois chaînes parallèles ; nous avons ainsi une structure en zigzag.

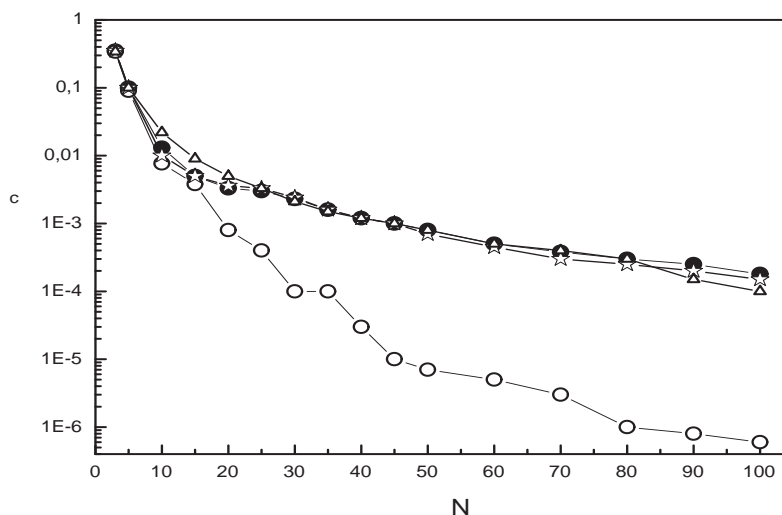


FIG. 5.5: Variation du paramètre d'anisotropie critique  $\alpha_c$  en fonction du nombre de particules  $N$ . Avec charge fluctuante ( $\circ$ )  $Z_{do} = 10^3$  ; ( $\star$ )  $Z_{do} = 10^4$  ; ( $\Delta$ )  $Z_{do} = 10^5$  et sans fluctuation de charge ( $\bullet$ ).

Quand la charge  $Z_{do}$  devient grande ( $= 10^4, 10^5$ ), aucune différence entre les courbes  $(N, \alpha_c)$  n'a été observée pour les deux situations de la charge, constante ou variable. Nous pouvons constater que cette superposition des courbes dans l'intervalle de  $Z_{do}$  est due à la condition  $Z_{do} \gg \Delta Z$  où le terme  $\Delta Z/Z_{do}$  dans l'équation de l'Hamiltonien du système

(Eq. 5.7) devient négligeable. Par conséquent, l'effet de la fluctuation de la charge n'est plus important dans ces conditions.

Quand la charge  $Z_{do}$  est petite ( $\sim 10^3$ ), le terme  $\Delta Z/Z_{do}$  a une contribution significative dans l'équation de l'Hamiltonien du système.

Nous avons remarqué aussi que la valeur de  $\alpha_c$  diminue avec l'augmentation de  $N$ . Ceci est due à la force de cohésion entre les particules qui devient intense. En présence de la fluctuation de charge, chaque grain de poussière gagne une énergie additionnelle transportée par la quantité de mouvement des électrons ou des ions au niveau de la surface du grain. Cette quantité de mouvement transférée au grain induit un mouvement aléatoire tout autour de la position d'équilibre.

Pour étudier l'effet de la température sur la valeur de  $\alpha_c$  (figure 5.6), nous avons pris un système de 15 grains de poussière. Nous avons trouvé que, pour les deux situations de la charge, l'allure des courbes est la même quand la température augmente. Toutes les courbes se divisent en deux parties; une partie de variation de  $\alpha_c$  en fonction de  $T$  ( $T/T_o \leq 0.004$ ) et une autre partie où  $\alpha_c$  reste constante et ne dépend pas de  $T$ .

Ceci signifie que l'énergie thermique nécessaire pour la fusion est déjà atteinte et qu'elle dépasse l'énergie potentielle. Les températures élevées conduisent à un mouvement aléatoire des particules et l'effet de la fluctuation de la charge sur les propriétés du système perd son sens.

A partir de la figure 5.7, nous avons remarqué aussi que la différence entre l'énergie par particule, quand la charge fluctue, est inférieure d'une façon remarquable à celle pour une charge constante si la charge  $Z_{do} = 10^3$ . Au delà de cette valeur de  $Z_{do}$ , l'effet de la charge n'est pas notable. La figure 5.4 est une autre façon de représenter la variation de  $\alpha_c$  en fonction de  $N$  et de  $Z_{do}$ ; nous pouvons faire les mêmes constatations que celles faites de la figure 5.5. Pour arranger les particules le long de l'axe des  $x$ , la force du confinement le long de l'axe des  $y$  doit être importante en conduisant donc à une faible valeur de  $\alpha_c$ . Quand le nombre  $N$  augmente, la valeur de  $\alpha_c$  diminue.

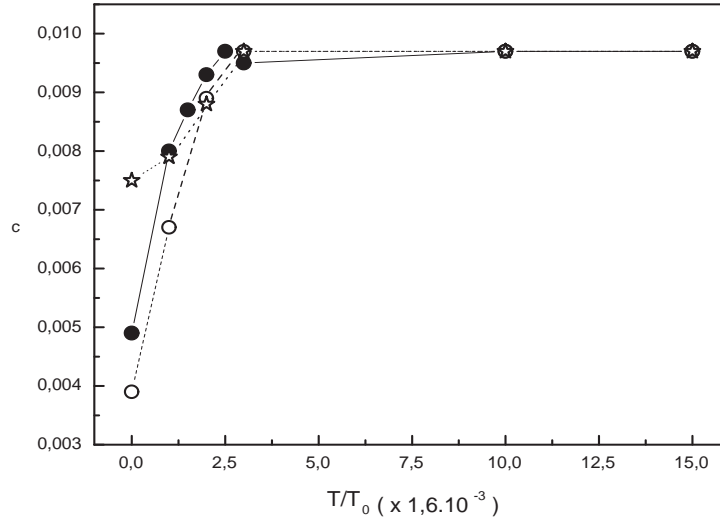


FIG. 5.6: Variation de  $\alpha_c$  avec la température des grains dans le cas du système à  $N = 15$  grains. (●) sans fluctuation et (○) :  $Z_{do} = 10^3$  ; (★) :  $Z_{do} = 10^4$  avec fluctuation de la charge.

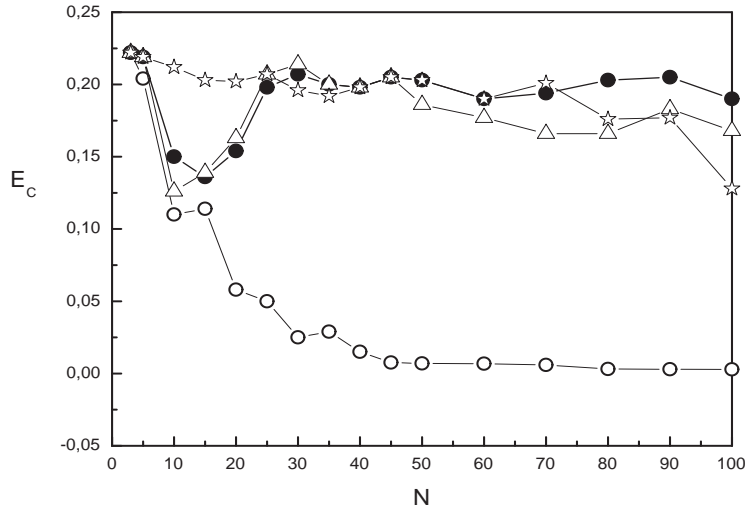


FIG. 5.7: Variation de l'énergie par grain de la transition (2D)-(1D),  $E_c$  en fonction du nombre de grains sous l'effet de la fluctuation de la charge (○)  $Z_{do} = 10^3$  ; (★)  $Z_{do} = 10^4$  ; (△)  $Z_{do} = 10^5$  et sans l'effet de la charge variable (●).

# Chapitre 6

## Effet de l'interaction électrostatique sur les transitions de phase

L'étude d'un système classique bidimensionnel ( $2D$ ) fortement couplé a montré une classification possible des particules chargées dans des structures en couches. La symétrie de la couche dépend de la géométrie du potentiel de confinement. En présence d'un confinement parabolique, il a été montré puis observé l'existence de tels systèmes [140, 141]. Les structures en couches, notées  $(N_1, N_2, \dots)$ , sont caractérisées par le nombre de couches  $i$ , et le nombre de particules dans chaque couche  $N_i$ . Pour un nombre total restreint de particules ( $N < 300$ ), un tableau équivalent au tableau de Mandeleev a été établi [117]. Ce résultat est d'un aspect général dans le sens où la nature des particules, qui doivent être identiques et chargées, n'intervient pas. Ainsi, une telle classification a été observée pour les systèmes formés d'électrons (déposés sur l'hélium) [142, 143] et des grains de poussière dans un plasma [13, 91].

D'autre part, les études expérimentales et numériques ont mis aussi en valeur l'effet important du type de potentiel d'interaction inter-particules sur les caractéristiques de la configuration stable et métastable, et sur les transitions de phase du système [144, 145]. L'observation réelle à l'oeil nu des structures régulières de particules chargées, ayant une taille de l'ordre du micromètre, a offert une meilleure compréhension du comportement du système et de l'apparition de certains phénomènes, comme celui de la cristallisation

des grains dans le plasma complexe [28, 146].

Dans la plupart des cas, l'interaction entre grains de poussière est modélisée par un potentiel écranté de type Debye-Hückel (ou Yukawa). La présence des électrons et des ions du plasma peut engendrer un effet d'écran entre un grain de test et un autre se trouvant à une distance  $r$ . Cependant, la simulation de Monté Carlo a montré, dans le cas de plasma complexe, que l'effet d'écran est principalement causé par la présence des électrons, des ions, ou des deux à la fois [147]. Les grains de poussière sont considérés comme des impuretés pour un plasma de base formé d'ions et d'électrons. Alors, la recherche d'autres types de potentiel qui peuvent modéliser l'interaction entre les grains est un sujet qui reste à l'ordre du jour.

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à l'étude de deux effets importants sur les propriétés structurales, dynamiques et les transitions de phase des systèmes fortement couplés. Le type du potentiel d'interaction inter-particules en présence de la fluctuation de la charge et les processus de charge, qui donnent lieu à des grains de poussière chargés positivement, sont deux facteurs déterminants des propriétés des plasmas complexes cristallins.

## 6.1 Potentiel d'interaction inter-grains

Dans le but de déterminer l'influence de l'interaction entre particules chargées et fortement corrélées, nous avons choisi trois types différents de potentiel électrostatique : le potentiel de Coulomb, le potentiel de Yukawa (ou Debye-Hückel) et le potentiel logarithmique. La force électrostatique de l'interaction,  $\mathbf{F} = -\nabla V(r)$ , peut varier d'une force attractive à une force répulsive et d'une force de courte portée à une force de longue portée. L'interaction coulombienne, d'expression  $V(r) = Z^2 e^2 / r$ , caractérise l'interaction de longue portée ; toutes les particules chargées du système contribuent dans le potentiel d'interaction. Cependant, l'interaction de type Yukawa, de la forme  $V(r) = Z^2 e^2 \exp(-r/\lambda_D) / r$  est de courte portée ( $\lambda_D$  est la longueur de Debye). Le potentiel total de type Yukawa inclut seulement les particules qui se trouvent dans la sphère de Debye de rayon  $\lambda_D$ . Il est possible qu'une situation intermédiaire se présente. Dans ce cas, un potentiel de type

logarithmique de la forme,  $V(r) = -Z^2 e^2 \ln(r)$ , peut apporter des réponses aux écarts par rapport à certaines données expérimentales. En suivant la même procédure que celle du chapitre précédent, l'Hamiltonien du système formé de  $N$  particules est donné par l'expression suivante :

$$H = \sum_i^N V_c(r_i) + \sum_{j>i}^N V(|r_i - r_j|). \quad (6.1)$$

Le premier terme de l'Eq. (6.1) représente le potentiel du confinement parabolique  $V_c(r_i) = m_d \omega^2 r_i^2 / 2$ , où  $\omega$  est la fréquence du contrôle du confinement et  $r_i$  la position de la particule  $i$  mesurée par rapport au centre du confinement. Le second terme de l'Eq. (6.1) décrit le potentiel de l'interaction entre les particules chargées. La forme normalisée de l'Hamiltonien de l'Eq. (6.1) est donnée par :

$$H = \sum_i^N r_i^2 + \sum_{j>i}^N \begin{cases} \frac{1}{|r_i - r_j|} \\ \frac{\exp(-k|r_i - r_j|)}{|r_i - r_j|} \\ -\ln(|r_i - r_j|) \end{cases} \quad (6.2)$$

Les unités de normalisation de la distance et de l'énergie sont respectivement  $r_o = (Z_{do}e)^{2/3} \gamma^{1/3}$  et  $E_o = r_o^2 \gamma$  où  $\gamma = m_d \omega^2 / 2$  est l'énergie de confinement d'une particule. Le terme  $k = r_o / \lambda_D$  est la constante d'écrantage. Grâce à notre code numérique, basé sur la simulation de MC, nous avons pu trouver les configuration d'équilibre du système à des températures différentes et pour deux types de charge : négative et positive.

Pour une charge constante, ni le signe de la charge ni la masse de la particule n'interviennent dans les équations normalisées du modèle. Ceci signifie que le modèle physique est applicable pour tous les systèmes de particules chargées fortement couplés. La figure (6.1) concerne le cas d'un plasma complexe fortement couplé, elle montre l'effet du potentiel d'interaction inter-grains sur les configurations de l'état d'équilibre du système. Nous pouvons conclure de façon claire que le potentiel inter-particules influence le paramètre du réseau (distance inter-particules). Nous remarquons que la distance inter-grains  $a_d$ , dans le cas du potentiel de Yukawa, est la plus petite par rapport à celle du potentiel coulombien et du potentiel logarithmique ( $a_{d(Yuk)} < a_{d(Coul)} < a_{d(log)}$ ).

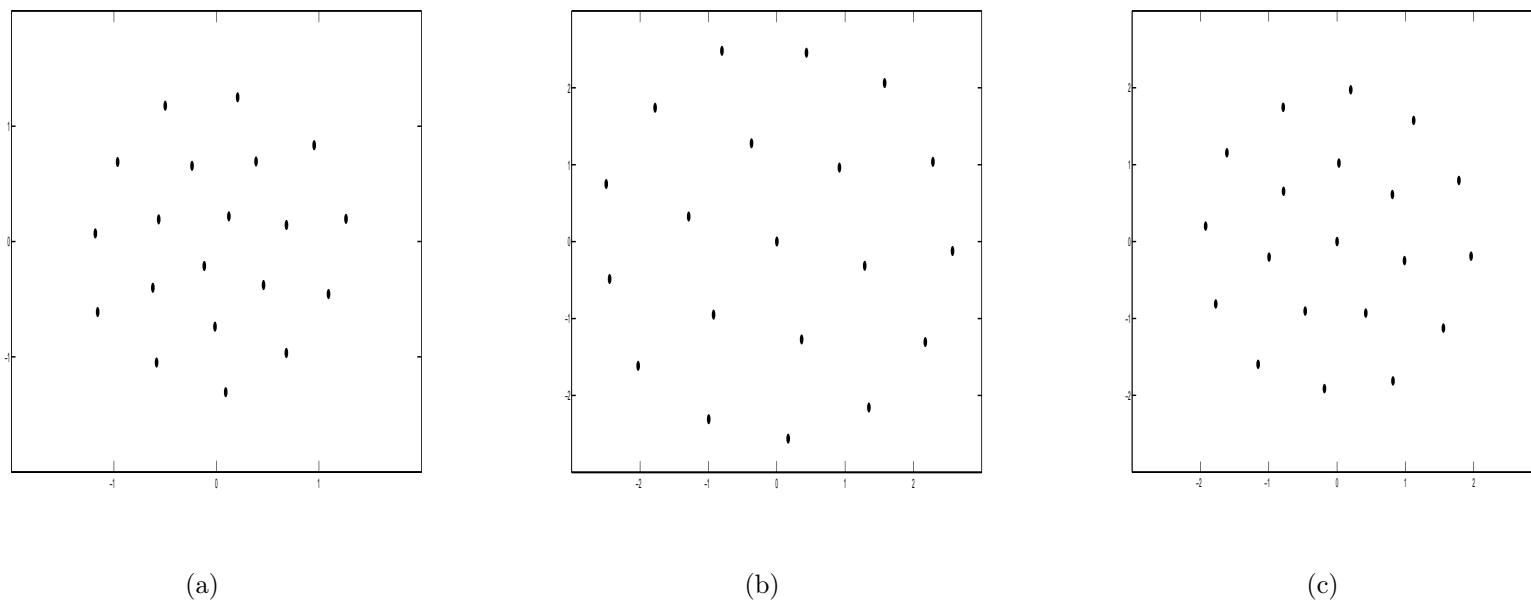


FIG. 6.1: Configurations de l'état d'équilibre à charge constante d'un système de  $N = 20$  grains de poussière modélisé par trois potentiels : Yukawa (a), logarithmique (b) et coulombien (c).

Le second effet du potentiel sur la structure apparaît dans le nombre de particules sur une couche. Dans le cas du potentiel Yukawa, par exemple, la structure est  $(2, 7, 11)$ , dans le cas du potentiel logarithmique, la structure est  $(1, 6, 13)$  et pour un potentiel coulombien, la structure est  $(1, 7, 12)$ . En faisant varier le nombre de particules dans le système de 5 à 30, nous pouvons obtenir le tableau périodique de type-Mendeleev. Nous pouvons déduire que les propriétés structurales et les transitions de phase des particules dépendent fortement du nombre total de particules et du type de potentiel électrique inter-particules. La comparaison de nos résultats avec ceux de la littérature, nous a permis de remarquer un bon accord [117, 144, 101]. Nous avons aussi noté que le rôle de l'interaction inter-particules est notable essentiellement quand le nombre total de particules augmente. La différence observée dans le cas du potentiel de Yukawa est due à la valeur du paramètre d'écrantage  $k$ , qui est pris égal 3 dans notre cas. Un bon accord, entre nos résultats et ceux de la référence [144], est noté si  $k$  varie dans l'intervalle  $[2, 4]$  [148].

## 6.2 Effet du potentiel inter-grains et de la fluctuation de la charge

Pour un plasma complexe qui contient des grains de poussière monodispersifs de rayon  $r_d = 2 \mu m$  et de charge moyenne à l'équilibre  $q_{do} = 10^4 e$ , nous avons pris la température électronique (ionique) égale à  $T_{e(i)} = 3(0.03) eV$ . Nous passons maintenant à l'étude de l'effet de la fluctuation de la charge et l'effet du potentiel inter-grains en même temps. Il est nécessaire de considérer les deux cas de la charge des grains, constante et variable, pour que nous puissions détecter ces deux effets sur les configurations d'équilibre.

La figure (6.2) représente les configurations de l'état fondamental d'un système de  $N = 20$  grains chargés positivement. Ce système est modélisé par trois potentiels différents : Yukawa (a), logarithmique (b) et coulombien (c). En comparant les deux figures (6.1) et (6.2), nous avons observé un seul changement dans la structure de Yukawa. Donc, la fluctuation de la charge des grains a causé un changement structural qui correspond à un saut du grain du centre vers la couche externe,  $(2, 7, 11) \rightarrow (1, 7, 12)$ .

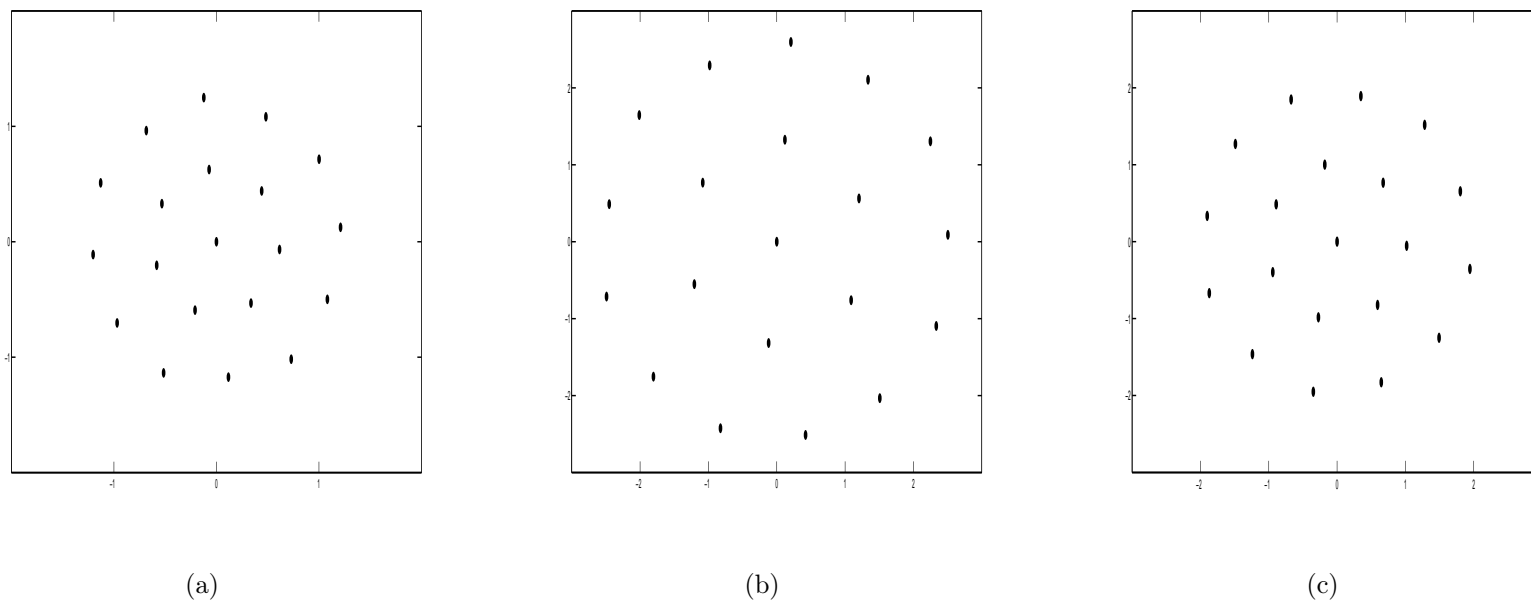


FIG. 6.2: Configurations de l'état d'équilibre à charge positive variable d'un système de  $N = 20$  grains de poussière modélisé par trois potentiels : Yukawa (a), logarithmique (b) et coulombien (c).

Dans le but d'examiner l'effet de la fluctuation sur la portée du potentiel d'interaction entre des grains chargés négativement (par collection des électrons et des ions du plasma), nous avons tracé les configurations d'équilibre représentées sur la figure (6.3). La comparaison avec la figure (6.1), où la charge est constante, a montré aussi que la fluctuation aléatoire d'une charge négative a affecté les systèmes modélisés par le potentiel de Yukawa et le potentiel logarithmique. Un changement de structure traduit par un saut de grain est observé. Dans le cas du potentiel de Yukawa, un grain du centre passe vers la couche externe :  $(2, 7, 11) \rightarrow (1, 7, 12)$ , par contre, dans le cas du potentiel logarithmique, un grain de la couche externe saute vers la couche interne :  $(1, 6, 13) \rightarrow (1, 7, 12)$ .

L'effet de la fluctuation de la charge a permis au système de grains de changer son comportement d'une interaction de courte portée (Yukawa) à une interaction de longue portée (Coulomb). Par ailleurs, le signe de la charge à l'équilibre est marqué par l'effet sur la portée de l'interaction inter-grains. La portée de l'interaction inter-grains pour une charge négative variable, est supérieure à celle de l'interaction pour une charge positive variable. Ceci est une caractéristique importante qui détermine le nombre de plus proches voisins, ayant une contribution significative dans l'énergie totale du système et une influence notable sur la force totale appliquée sur chaque grain [147]. Cet effet est attribué à la nature des particules qui génèrent l'effet d'écran. Pour des grains de poussière de charge négative, l'effet d'écran est causé par la présence des ions et des électrons ; de ce fait, le potentiel électrostatique qui s'oppose au potentiel créé par le grain se trouve réduit. Par contre, pour une charge positive, la présence des ions n'est pas indispensable pour préserver la quasi-neutralité, c'est aux électrons seuls de former le nuage autour du grain. Ainsi, l'intensité du potentiel électrostatique se trouve plus importante par rapport au cas où les ions sont présents de façon significative. Pour cette raison, le potentiel électrostatique d'une charge positive se trouve réduit d'avantage.

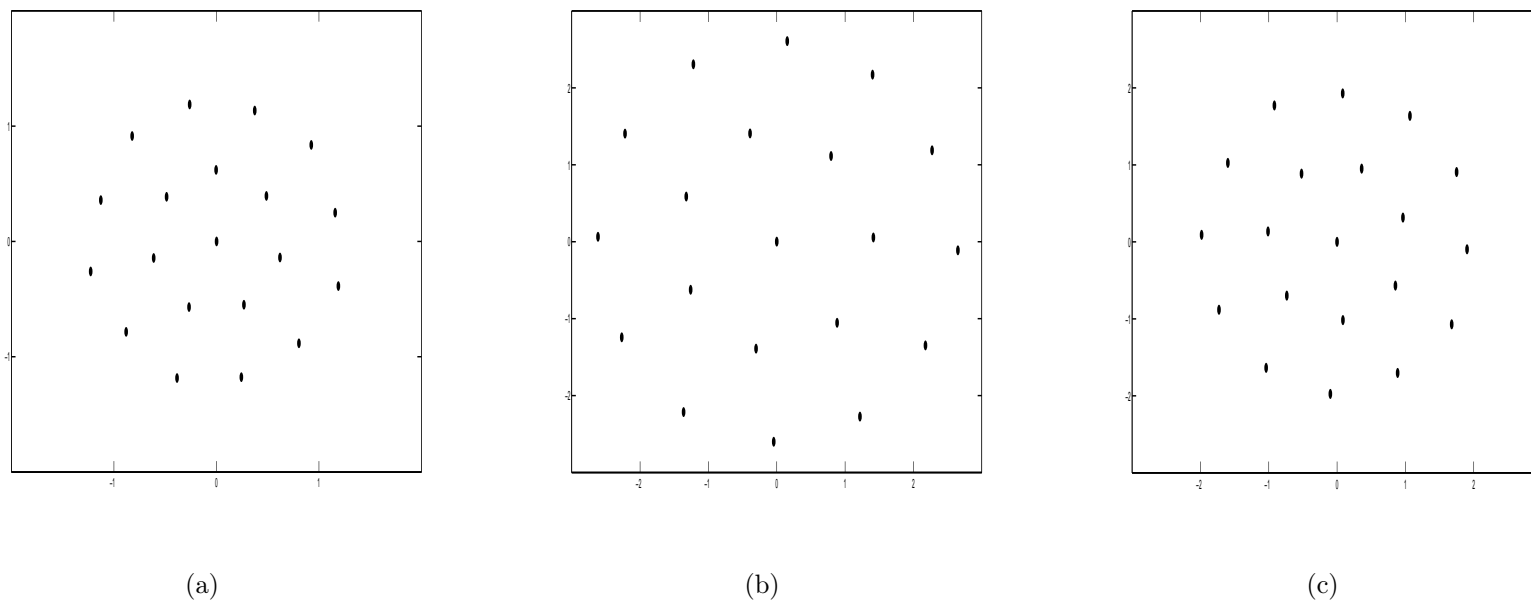


FIG. 6.3: Configurations de l'état d'équilibre à charge négative variable d'un système de  $N = 20$  grains de poussière modélisé par trois potentiels : Yukawa (a), logarithmique (b) et coulombien (c).

Dans une étude expérimentale, Saint et al. [149] ont montré que, pour des billes de rayon  $\sim mm$ , la configuration de l'état fondamental du système dépend, à la fois, de l'interaction inter-billes couplée et du potentiel du confinement électrique. Ils ont conclu que lorsque la distance entre les billes diminue, l'interaction entre elles est différente de celle existante entre des particules chargées ponctuelles et elle est de type logarithmique. Ceci a permis de dire que l'interaction logarithmique est mieux adaptée pour modéliser l'interaction entre particules non ponctuelles. Dans un plasma poussiéreux, vu les caractéristiques particulières des grains, l'interaction logarithmique peut décrire l'interaction inter-grains quand l'effet d'écrantage devient moins important. Cependant, lorsque le phénomène d'écrantage des grains est important (comme pour  $k = 3$ ), c'est le potentiel de Yukawa qui donne des résultats proches des données expérimentales [146].

### 6.2.1 Effet du potentiel et de la fluctuation sur la fusion

Dans le but de suivre l'évolution de la structure ordonnée et de déterminer la température de fusion  $T_m/T_o$  d'un cristal de grains, nous avons fait augmenter la température d'un pas égal à  $\Delta T = 1.6 \times 10^{-3}$  jusqu'à disparition de l'ordre. Différents groupes de recherche ont utilisé la technique de simulation DM [150, 151] pour comprendre la fusion d'un système fini bidimensionnel ( $2D$ ). Dans notre étude, nous avons appliqué la méthode MC et nous avons représenté la fusion d'un point de vue des propriétés dynamiques. Afin de caractériser la fusion à ( $2D$ ), nous avons calculé le déplacement quadratique moyen  $U_R^2$ , qui est défini par [117] :

$$U_R^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\langle r_i^2 \rangle - \langle r_i \rangle^2) / a, \quad (6.3)$$

où  $a$  est la distance moyenne entre les grains.

La figure (6.4) montre la variation de  $U_R^2$  en fonction de la température normalisée  $T/T_o$  des grains pour le système formé de  $N = 15$  grains à charge constante (cercle plein) et à charge variable (triangle). Les trois potentiels d'interaction inter-particules (Yukawa (a), log (b) et Coulomb (c)) sont pris en considération. A basse température, les grains présentent des faibles vibrations autour de leur position d'équilibre (à  $T \sim 0$ ).

L'amplitude des vibrations augmente linéairement mais lentement avec l'augmentation de la température. Ceci signifie que les grains sont encore localisés et la structure a toujours un certain degré d'ordre. Le désordre apparaît quand  $U_R^2$  croit très rapidement avec  $T/T_o$ . A cause du nombre fini des grains, nous avons une région de fusion plutôt qu'une température de fusion bien définie,  $T_m/T_o$ . Au delà de la température de fusion, les grains se comportent comme les particules d'un liquide. La figure (6.4) montre que la température de fusion du cristal des grains à une charge constante est supérieure à celle du cas d'une charge variable. Par exemple, dans le cas du potentiel logarithmique, à charge constante  $T_m/T_o \sim 2.2 \times 10^{-3}$  et à charge variable  $T_m/T_o \sim 5 \times 10^{-3}$ . Dans le cas du potentiel de Yukawa, à charge constante  $T_m/T_o \sim 10^{-4}$  et à charge variable  $T_m/T_o \sim 0.55 \times 10^{-4}$ . Sauf pour le potentiel coulombien, nous remarquons que les deux températures de fusion à charge constante et à charge variable sont presque égales  $T_m/T_o \sim 4 \times 10^{-4}$ . Le critère qui définit la fusion et qui peut être utilisé comme une limite de l'ordre de cristallisation est le critère de Lindemann [152]. Par conséquent, l'ordre est perdu quand l'amplitude du déplacement quadratique moyen dû à l'agitation thermique des grains est supérieur à 10 de la distance moyenne inter-grains.

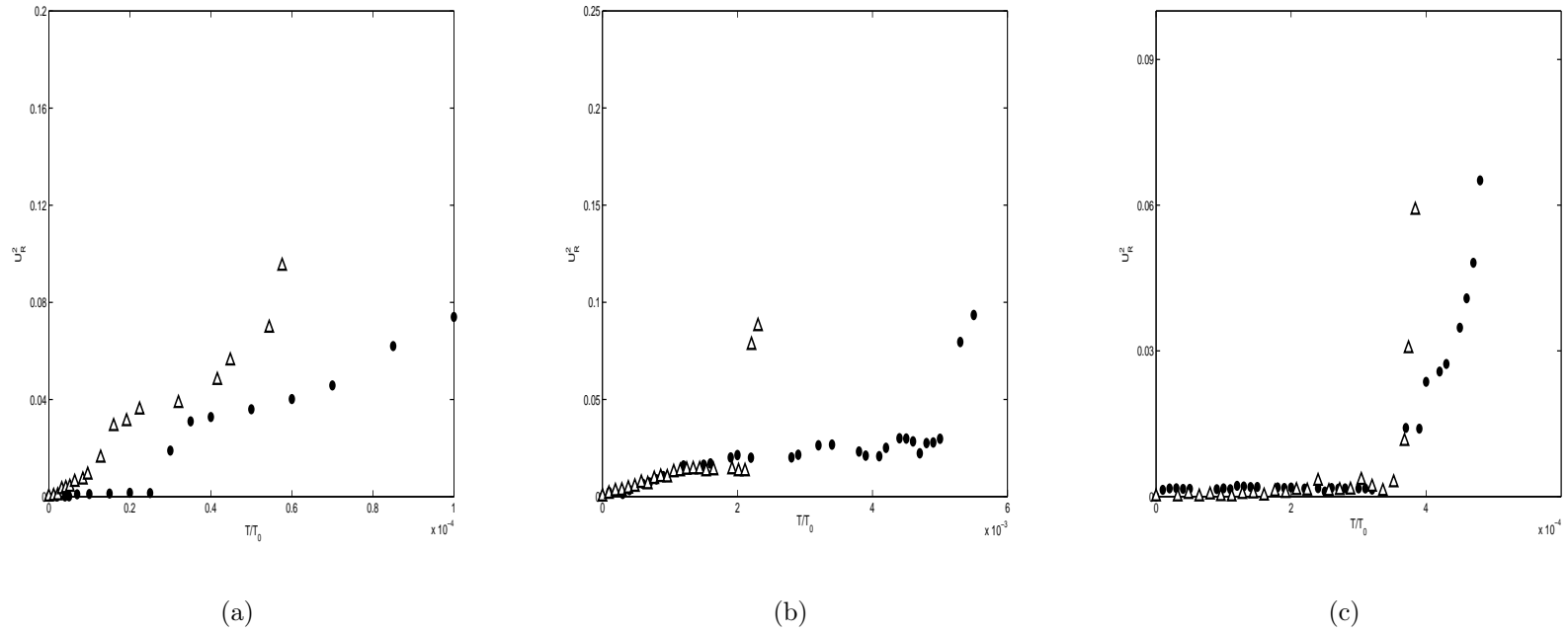


FIG. 6.4: Variation du déplacement quadratique moyen  $U_R^2$  en fonction de la température normalisée  $T/T_0$  pour les deux cas la charge : constante (cercle plein) et charge variable ( $\Delta$ ). Le système est modélisé par les trois potentiels : Yukawa (a), logarithmique (b) et Coulomb (c).

La figure (6.5) montre que la température de fusion d'un cristal coulombien ( $2D$ ) augmente quand le nombre total de grains augmente. Ce résultat indique que la corrélation entre les grains devient plus forte, et que pour détruire l'ordre dans le cristal, il faut augmenter l'apport d'énergie (chauffer le système d'avantage). De plus, nous avons remarqué la diminution de la température de fusion sous l'effet de la fluctuation aléatoire de la charge des grains. Ce résultat confirme ce qui a été dit précédemment, la fluctuation de la charge est une source d'énergie additionnelle pour les cristaux coulombiens complexes.

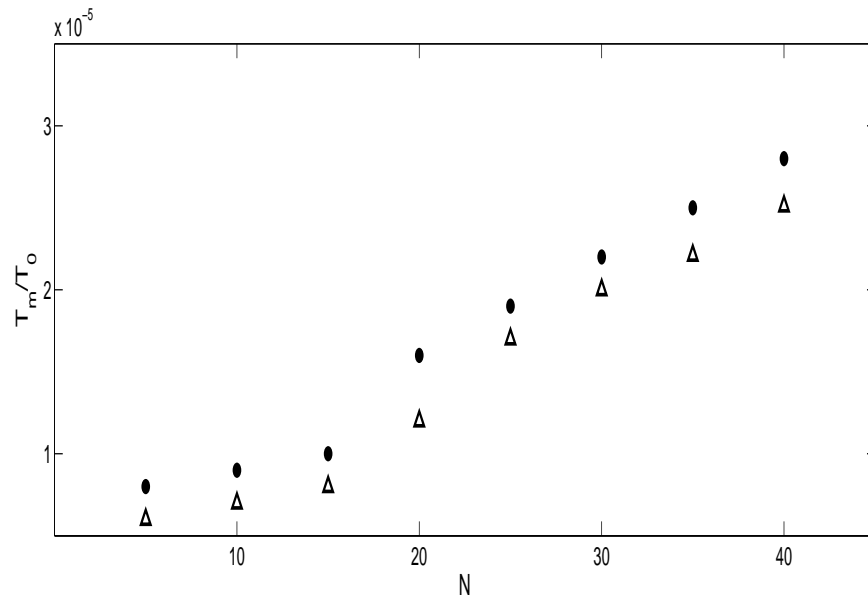


FIG. 6.5: Variation de la température de fusion, d'un cristal de 15 grains, en fonction de la température à charge constante (cercle plein) et à charge fluctuante (triangle). L'interaction inter-grains est de type de Yukawa ( $k = 3$ ).

Les grains de poussière chargés positivement montrent des transitions structurales sous l'effet des fluctuations de la charge [81]. En réalité, ceci est dû au transfert de moment entre les électrons du plasma et le grain de poussière. Ce transfert de moment est responsable de l'augmentation de la chaleur ou de la température du grain. Nous avons représenté la variation de l'énergie du système en fonction de la température du grain pour une charge constante et pour une charge fluctuante (voir la figure 6.6). Nous avons noté une augmentation plus ou moins importante sous l'effet de la fluctuation aléatoire de la charge.

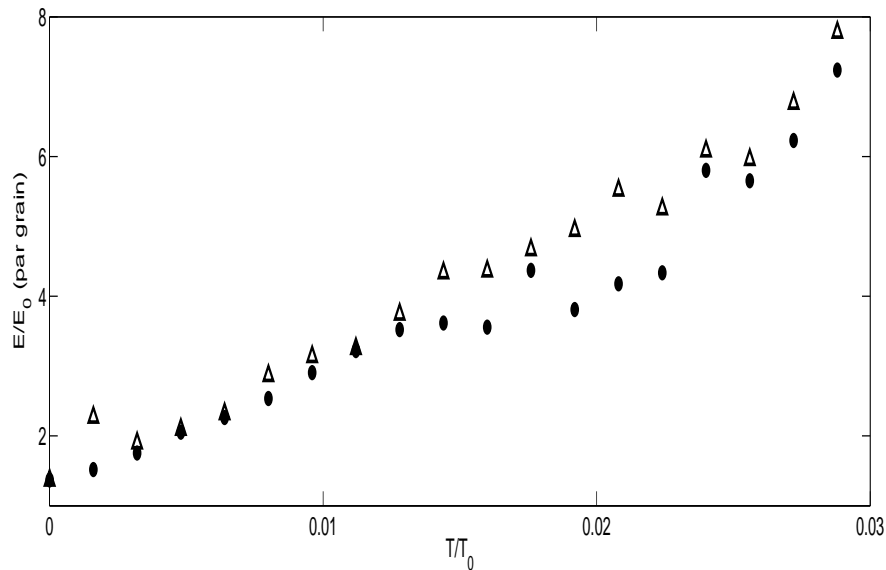


FIG. 6.6: *Energie du systèmes de  $N = 15$  grains, modélisé par le potentiel de Yukawa ( $k = 3$ ), en fonction de la température à charge constante (cercle plein) et à charge fluctuante (triangle).*

### 6.3 Transitions de phase en présence de l'émission thermo-ionique

Dans les plasmas complexes fortement couplés, les espèces chargées du plasma interagissent faiblement entre elles; l'énergie cinétique des électrons, des ions et des atomes est toujours plus grande que leur énergie potentielle électrostatique. Cependant, les grains chargés interagissent fortement entre eux; cette interaction est suffisante pour générer des corrélations macroscopiques à longue portée comme dans les cristaux. Sans une telle description, la compréhension du phénomène de condensation dans le plasma est l'aspect le plus difficile. Il est aussi le plus important dans la physique des états fortement couplés, car les effets liés à la condensation sont de nature collectifs et par voie de conséquence, nous avons besoin de comprendre les processus, ayant lieu en présence des grains.

Parmi ces processus, nous avons le processus de charge des grains. La présence des électrons et des ions dans le plasma joue un rôle fondamental dans la distribution et la détermination du potentiel autour du grain. L'interaction inter-grains dépend essentiellement du phénomène d'écrantage, qui permet au système de changer le comportement des forces coulombiennes pures de longue portée aux forces de courte portée [147]. Notons qu'il est possible d'avoir, dans un plasma complexe fortement couplé, de nouvelles forces attractives. Dans le cas des grains chargés positivement, l'émission des électrons forme un nuage autour du grain et crée un potentiel attractif, la création de ce potentiel est décrite par la température du grain dans le processus thermo-ionique de charge.

L'efficacité du processus de charge dépend des paramètres du plasma, comme la densité et la température électroniques. Nous avons représenté sur la figure (6.7), une étude comparative pour deux situations différentes. La première est celle d'un plasma complexe contenant des grains de poussière chargés par photo-émission en présence de radiation UV. Ce dernier a fait l'objet de notre intense investigation. Il est à noter qu'il est possible d'avoir des grains de poussière chargés positivement par émission thermo-ionique. Dans ce type de processus de charge, un laser est utilisé pour chauffer la surface des grains, générant ainsi la photo-émission des électrons [20].

Sur la figure (6.7), nous avons remarqué que la température de fusion du cristal coulombien augmente lorsque le paramètre d'écrantage augmente. L'effet de couplage est plus important entre les grains les plus proches, l'interaction est de courte portée. Ceci réduit l'effet des forces répulsives mutuelles dans le cristal des grains. Par conséquent, la cohésion du système, induite par le potentiel du confinement, augmente. D'autre part, un effet d'écran important implique une présence plus intense du nuage électronique autour de chaque grain. La charge globale de ce nuage étant négative, la cohésion du cristal coulombien croît grâce aux forces attractives qui se manifestent. Nous notons aussi que l'échelle de croissance de la température de fusion change en fonction de  $k$ . Dans l'intervalle  $[0, 6]$ , la température de fusion augmente linéairement et dans l'intervalle  $[6, 9]$ , la croissance est moins importante. Ceci peut être expliqué par l'existence d'une distance caractéristique, c'est à dire, un rayon de coupure pour le potentiel écranté. Ce dernier dépend de la longueur de Debye qui dépend aussi des paramètres du plasma. La figure (6.7) montre que

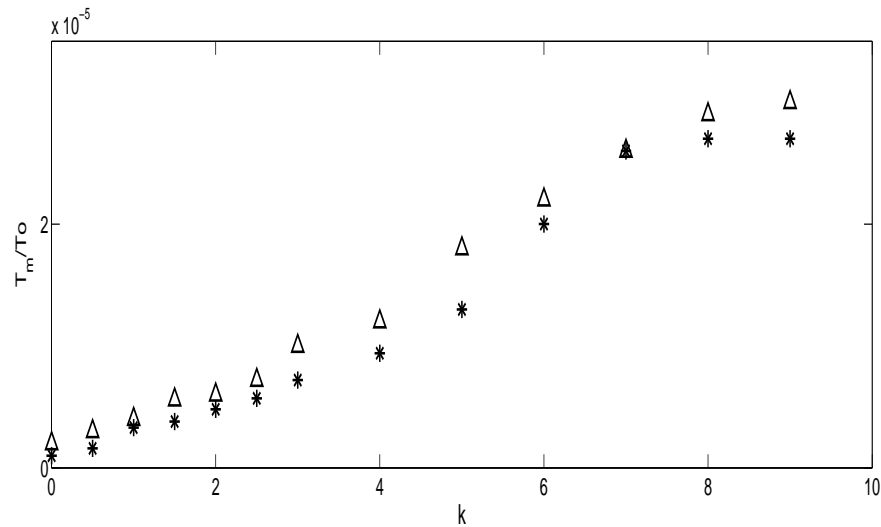


FIG. 6.7: Variation de la température de fusion d'un cristal de 15 grains en fonction du paramètre de couplage  $k$  de l'interaction de type Yukawa, en présence de la fluctuation de la charge positive. Les triangles et les étoiles distinguent entre deux processus de charge considérés : ( $\Delta$ ) émission photo-ionique et ( $\star$ ) émission thermo-ionique.

l'augmentation de la température de fusion est plus importante en présence d'un courant photo-ionique. Dans ce cas, l'énergie fournie est suffisante pour arracher les électrons de la surface par un effet équivalent à l'effet photo-électrique. Un électron absorbe totalement la radiation reçue. L'excédent d'énergie se transforme en énergie cinétique, permettant ainsi à l'électron de rester dans le champ de la force d'attraction des grains positifs. Par contre, en présence d'un chauffage thermo-ionique, en plus des électrons arrachés, les grains acquièrent une énergie par chauffage, ceci explique la diminution relative de la température de fusion.

# Conclusion

L'observation expérimentale de la cristallisation des plasmas complexes, en 1994, a permis l'émergence de la physique des cristaux coulombiens. La présente investigation a porté sur la modélisation et la simulation dans les structures fortement couplées à charges positives. Le système considéré étant constitué d'un nombre fini de grains de poussière monodispersifs chargés positivement dans un plasma faiblement ionisé. L'effet de la fluctuation de la charge a été pris en considération, à travers l'Hamiltonien du système, qui fait appel à la fonction d'auto-correlation. Le système étant à deux dimensions grâce à un potentiel de confinement électrostatique, nous avons tenu compte à la fois, de l'interaction entre les grains de poussière et du potentiel de confinement appliqué. Ce dernier, a été considéré dans le cas des géométries parabolique et elliptique. A partir des configurations d'équilibre obtenues, par la technique de simulation de Monte Carlo combinée à la méthode d'optimisation de Newton, nous avons pu suivre l'évolution du système en fonction de la température des grains. Ainsi, nous avons pu mettre en évidence les transitions de phases structurales et la fusion du cristal coulombien bidimensionnel.

Pour des grains de poussière à charge constante, nous avons retrouvé les résultats rapportés par la littérature. Vu la normalisation de l'Hamiltonien du système, les caractéristiques des grains de poussière n'interviennent pas. Par conséquent, le système exhibe des structures en couches concentriques. La symétrie de ces structures dépend de la géométrie du confinement électrostatique appliqué. Dans ce cas, nous avons confirmé que le nombre de couches et le nombre de grains dans chacune d'elles, permettent de remonter à une

classification équivalente au tableau de Mendeleev. Les configurations obtenues se trouvent affectées par l'anisotropie du potentiel de confinement. En effet, des transitions de phase structurales ont été observées suite à un changement du paramètre d'anisotropie. Nous avons montré que la fluctuation de la charge des grains de poussière, affecte non seulement les configurations d'équilibre, mais aussi les propriétés des transitions de phase. Nous avons constaté que la fluctuation de la charge constitue une source d'énergie additionnelle, qui altère la température de fusion des cristaux formés par les grains. D'une part, la température de fusion diminue en présence de la fluctuation de la charge et l'apport d'énergie correspondant est de l'ordre de quelques  $eV$ . Nous signalons au passage que ce résultat est en bon accord avec les observations expérimentales. D'autre part, la température de fusion est également affectée par la géométrie du potentiel de confinement. Nous avons, en effet, montré que lorsque l'anisotropie augmente, la température de fusion augmente.

L'étude comparative considérant les trois types différents de l'interaction inter-grains : de Yukawa, de Coulomb et logarithmique, nous a permis de montrer que seule l'interaction, par le potentiel de Yukawa, est sensible à la fluctuation de la charge. Nous avons trouvé que les transitions de phase et la température de fusion des cristaux sont influencées par la fluctuation de la charge, par le type du potentiel d'interaction inter-grains et par le processus de charge. Par contre, pour des grains chargés négativement, nous avons trouvé que l'effet de la fluctuation de la charge sur la portée du potentiel d'interaction inter-grains était différent de celui observé pour une charge positive. Dans ce cas, les configurations d'équilibre décrites par les deux potentiels de Yukawa et logarithmique ont été affectées par la fluctuation de la charge.

Concernant les processus de charge, nous en avons considéré deux types : par chauffage thermo-ionique et par effet photo-ionique. Il est à noter que ce dernier implique des températures de fusion plus importantes par rapport à celles du premier. Les résultats obtenus ont permis d'interpréter certaines observations expérimentales. Par conséquent, grâce à la simulation, nous pouvons prédire le comportement des cristaux coulombiens grâce à un choix adéquat des paramètres disponibles dans les investigations expérimentales.

La méthode de Monte Carlo étant stochastique, nous n'avons pas pris en compte la dy-

namique des grains de poussière en temps réel. Nous envisageons dans l'avenir de mener l'investigation par une méthode déterministe, telle que la technique de Dynamique Moléculaire.

# Bibliographie

- [1] E. Wigner, Phys. Rev. 46, 1002 (1934).
- [2] R. W. Hasse and V. V. Avilov, Phys. Rev. A 44, 4506 (1991).
- [3] M. Drewsen, C. Brodersen, L. Hornekaer, J. S. Hangst, and J. P. Schiffer, Phys. Rev. Lett. 81, 2878 (1998).
- [4] N.A. Clark, A. J. Hurd, and B. J. Ackerson, Nature (London) 281, 57 (1979).
- [5] W. B. Russel, D. A. Saville, and W. R. Schowalter, *Colloidal Dispersions*, Cambridge Univ. Press (1989).
- [6] G. J. Kalman, J. M. Rommel, and K. Blagoev, *Strongly Coupled Coulomb Systems*, Plenum Press, New York, 1998.
- [7] V. Fortov, I. Iakubov, A. Khrapak, *Physics of Strongly Coupled Plasma*, Clarendon Press, Oxford 2006.
- [8] H. Ikezi, Phys. Fluids 29, 1764 (1986).
- [9] H. Thomas, G.E. Morfill, V. Demmel, J. Goree, B. Feuerbacher, D. Möhlmann, Phys. Rev. Lett. 73, 652 (1994).
- [10] J. H. Chu and Lin I, Phys. Rev. Lett. 72, 4009 (1994).
- [11] A. Melzer, T. Trottenberg, and A. Piel, Phys. Lett. A 191, 301 (1994).
- [12] Y. Hayashi and K. Tachibana, Jpn. J. Appl. Phys. 33, L804 (1994).
- [13] V. E. Fortov, A. P. Nefedov, O. F. Petrov, et al., Phys. Lett. A 219, 89 (1996).
- [14] S. Chu, Rev. Mod. Phys. 70, 685 (1998).
- [15] A. Melzer, A. Homann, and A. Piel, Phys. Rev. E 53, 2757 (1996).

- [16] F. Melandsø, and J. Goree, *J. Vac. Sci. Technol. A* 14, 511 (1996).
- [17] J. C. Weigartner and B. T. Draine, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 134, 263-81 (2001).
- [18] A. B. Klumov, S. V. Vladimirov and G. E. Morfill, *JETP Lett.* 82, 632-7 (2005).
- [19] A. B. Klumov, S. V. Vladimirov and G. E. Morfill, *JETP Lett.* 85, 478 (2007).
- [20] P. K. Shukla and A. A. Mamun, *Introduction to Dusty Plasma Physics* (IOP Publishing 2002,UK).
- [21] W. J. Miloch, S. V. Vladimirov, H. L. Pécseli, and J. Trulsen, *New Journal of Physics* 11, 043005 (2009).
- [22] A. Bouchoule, A. Plain, L. Boufendi, J. Ph. Blondeau, and C. Laure. *J. Appl. Phys.* 70, 1991 (1991).
- [23] C. Arnas, C. Dominique, P. Roubin, C. Martin, C. Brosset, and B. Pégourié. *J. Nucl. Mater.* 353, 80 (2006).
- [24] C. Cui and J. Goree, *IEEE Transactions on Plasma Science* 22, 151 (1994).
- [25] S. A. Khrapak, A. P. Nefedov, O. F. Petrov, and O. S. Vaulina, *Phys. Rev. E* 59, 6017 (1999).
- [26] V. E. Fortov et al., *J. Exp. Theor. Phys.* 87, 1087-97 (1998).
- [27] A. A. Samarian and S. O. Vaulina, *Phys. Lett. A* 278, 146-51 (2000).
- [28] V. E. Fortov, A.V. Ivlev, S.A. Khrapak, A.G. Khrapak, G.E. Morfill, *Physics Reports* 421, 1-103 (2005).
- [29] V.N. Tsytovich, G.E. Morfill, S.V. Vladimirov, and H.M. Thomas, *Elementary physics of complex plasmas*, *Lect. Notes Phys.* 731 (Springer, Berlin Heidelberg 2008).
- [30] J. E. Allen, *Physica Scripta*. Vol. 45, 497 (1992).
- [31] F. F. Chen, *Plasma Sources Sci. Technol.* 18, 035012 (2009).
- [32] S. H. Kim and R. L. Merlino, *Phys. Plasmas* 13, 052118 (2006).
- [33] M. Rosenberg and D. A. Mendis, in *The Physics of Dusty Plasma*, P. K. Shukla, D. A. Mendis and V. W. Chow, World Scientific (Singapore) 1996 p. 223.
- [34] M. Rosenberg, D. A. Mendis, and D. P. Sheehan, *IEEE Transactions on Plasma Science* 24, 1422 (1996).

- [35] M. Rosenberg, D. A. Mendis, and D. P. Sheehan, *IEEE Transactions on Plasma Science* 27, 239 (1999).
- [36] V. W. Chow, D. A. Mendis, and M. Rosenberg, *IEEE Transactions on Plasma Science* 22, 179 (1994).
- [37] G. Uchida, S. Lizuka, and N. Sato, *Phys. Plasmas* 16, 083707 (2009).
- [38] O. S. Vaulina, X. G. Koss, and S. V. Vladimirov, *Phys. Scr.* 79, 035501 (2009).
- [39] A.P. Nefedov, G.E. Morfill, V.E. Fortov, H.M. Thomas, H. Rothermel, T. Hagl, A.V. Ivlev, M. Zuzic, B.A. Klumov, A.M. Lipaev, V.I. Molotkov, O.F. Petrov, Y.P. Gidzenko, S.K. Krikalev, W. Shepherd, A.I. Ivanov, M. Roth, H. Binnenbruck, J. A. Goree, and Y.P. Semenov, *New Journal of Physics* 5, 33. 127,130 (2003).
- [40] M. Mikikian, L. Boufendi, A. Bouchoule, H.M. Thomas, G.E. Morfill, A.P. Nefedov, V.E. Fortov, and the PKE-Nefedov team, *New J. of Phys.* 5, 19 (2003).
- [41] A. Melzer, *Plasma Sources Sci. Technol.* 10, 303 (2001).
- [42] A. Piel and A. Melzer, *Adv. Space Res.* 29, 1255 (2002).
- [43] J. Goree, *Plasma Sources Sci. Technol.* 3, 400 (1994).
- [44] V. V. Zhakhovskii, V. I. Molotkov, A. P. Nefedov, V. M. Torchinskii, A. G. Khrapak, and V. E. Fortov, *JETP Lett.* 66, 419 (1997).
- [45] A. V. Ivlev, S. K. Zhdanov, B. A. Klumov, V. N. Tsytovich, U. de Angelis, G. E. Morfill, *Phys. Rev. E* 70, 066401/1-5 (2004).
- [46] S. K. Zhdanov, A. V. Ivlev, and G. E. Morfill, *Phys. Plasmas* 12, 072312/1-7 (2005).
- [47] A. Barkan, N. D'Angelo, and R. L. Merlino, *Phys. Rev. Lett.* 73, 3093 (1994).
- [48] E. Thomas, and M. Watson, *Phys. Plasmas* 7, 3194 (2000).
- [49] O.S. Vaulina, S.A. Khrapak, A.P. Nefedov, O.F. Petrov, *Phys. Rev. E* 60, 5959 (1999).
- [50] U. de Angelis, A. V. Ivlev, G. E. Morfill, and V. N. Tsytovich, *Phys. Plasmas* 12, 052301/1-5 (2005).
- [51] A. V. Ivlev, S. K. Zhdanov, B. A. Klumov, and G. E. Morfill, *Phys. Plasmas* 12, 092104/1-8 (2005).

- [52] S. A. Khrapak, G. E. Morfill, A. G. Khrapak, and L. G. D'yachkov, *Phys. Plasmas* 13, 052114 (2006).
- [53] S. A. Khrapak, B. A. Klumov, and G. E. Morfill, *Phys. Rev. Lett.* 100, 225003 (2008).
- [54] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *The Classical Theory of Fields*, Pergamon, Oxford 1987.
- [55] N. L. Tsintsadze and L. N. Tsintsadze, *EPL* 83, 15005 (2008).
- [56] J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (John Wiley and Sons. Inc., New York) 1999.
- [57] V. N. Tsytovich, *Phys. Uspekhi* 40, 53 (1997).
- [58] H. M. Mott-Smith, and I. Langmuir, *Phys. Rev.* 28, 727 (1926).
- [59] E. C. Whipple, *Rep. Prog. Phys.* 44, 1197 (1981).
- [60] D. Trunec, P. Španěl, and D. Smith, *Contrib. Plasma Phys.* 35, 203 (1995).
- [61] G. I. Sukhinin, and A. V. Fedoseev, *Plasma Phys. Rep.* 33, 1023 (2007).
- [62] A. L. Alexandrov, I. V. Schweigert and F. M. Peeters, *New Journal of Physics* 10, 093025 (2008).
- [63] O. Havnes, G. E. Morfill, C. K. Geertz, *J. Geophys. Res.* 89, 999 (1984).
- [64] J. E. Allen, B. M. Annaratone, U. de Angelis, *J. Plasma Phys.* 63, 299 (2000).
- [65] S. Ratynskaia, S. Khrapak, A. Zobnin, M. H. Thoma, M. Kretschmer, A. Usachev, V. Yaroshenko, R. A. Quinn, G. E. Morfill, O. Petrov, V. Fortov, *Phys. Rev. Lett.* 93, 085001 (2004).
- [66] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Clarendon Press, Oxford, 1986).
- [67] M. M. Wolfson and G. J. Pert in *An introduction to computer simulation*, Oxford University Press, New York 1999.
- [68] R. P. Feynman, *International J. of Theoretical Phys.* 21, Nos. 6/7, 467 (1982).
- [69] D. W. Heermann in *Computer simulation methods in theoretical physics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1990).
- [70] S.S. de Moraes, D. Coimbra, J.R. de Sousa, and H.O. daFrota, *Brazilian J. Phys.* 34, 408 (2004).

- [71] C. K. Birdsall and A. B. Langdon in *Plasma Physics via Computer Simulation*, Adam Hilger, Bristol, Philadelphia and New York (1991).
- [72] J. M. Dawson, *Reviews of Modern Phys.* 55, 403 (1983).
- [73] K. Matyash and R. Schneider, 30th EPS Conference on Contr. Fusion and Plasma Phys., St. Petersburg, 7-11 July 2003 ECA Vol. 27A, P-4.115.
- [74] M. M. Turner, *Phys. of Plasmas* 13, 033506 (2006).
- [75] D. Tskhakaya, *The particle-in-cell method*, Lect. Notes phys. 739, 161-189 (2008).
- [76] D. C. Rapaport in *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge Univ. Press, UK 1995.
- [77] L. Verlet, *Phys. Rev.* 165, 201 (1968).
- [78] O. Bystrenko, T. Bystrenko, and A. Zagorodny, *Phys. Lett. A* 329, 83 (2004).
- [79] M. Bixon and R. Zwanzig, *Phys. Rev.* 187, 267 (1969).
- [80] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. M. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys.* 21, 1087 (1953).
- [81] L. Rouaiguia, M. Djebli, and F. M. Peeters, *Phys. Lett. A*, 372, 4487 (2008).
- [82] L. Rouaiguia, M. Djebli, and M. Drir, *Phys. Plasmas* 16, 033705 (2009).
- [83] G. Piacente, I. V. Schweigert, J. J. Betouras and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* 69, 045324 (2004).
- [84] J. Nocedal and S. J. Wright in *Numerical Optimization*, Springer Publisher, New York (USA) 2006.
- [85] A. Homann, A. Melzer, and A. Piel, *Phys. Rev. E* 59, R3835 (1999).
- [86] T. Trottenberg, A. Melzer, and A. Piel, *Plasma Sources Sci. Technol.* 4, 450 (1995).
- [87] M. Shiratani, H. Kawasaki, T. Fukuzawa, H. Tsuruoka, T. Yoshioka, and Y. Watanabe, *Appl. Phys. Lett.* 65, 1900 (1994).
- [88] S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, *J. Chem. Phys.* 105, 7641 (1996).
- [89] S. Hamaguchi and R. T. Farouki, *J. Chem. Phys.* 101, 9876 (1994).
- [90] R. T. Farouki and S. Hamaguchi, *J. Chem. Phys.* 101, 9885 (1994).

- [91] V. E. Fortov, V. S. Filinov, A. P. Nefedov, O. F. Petrov, A. A. Samaryan, and A. M. Lipaev, *JETP* 84, 489 (1997).
- [92] R.A. Quinn, C. Cui, J. Goree, J.B. Pieper, H. Thomas, and G.E. Morfill, *Phys. Rev. E* 53, 2049 (1996).
- [93] H. M. Thomas and G. E. Morfill, *Nature* 379, 806 (1996).
- [94] C. Chiang and I. Li, *Phys. Rev. Lett.* 77, 647 (1996).
- [95] A.P. Nefedov, O.F. Petrov, V.I. Molotkov, V.E. Fortov, *JETP Lett.* 72, 218 (2000).
- [96] A.P. Misra, A.R. Chowdhury, *Phys. Plasmas* 13, 62307 (2006).
- [97] M. Djebli, S. Bahamida, R. Annou, *Phys. Plasmas* 9, 4104 (2002).
- [98] O.S. Vaulina, S.A. Khrapak, A.P. Nefedov, O.F. Petrov, *JETP* 88, 1130 (1999).
- [99] O.S. Vaulina, S.A. Khrapak, A.A. Samarian, O.F. Petrov, *Phys. scripta* T84, 229 (2000).
- [100] R.A. Quinn, J. Goree, *Phys. Rev. E* 61, 229 (2000).
- [101] G.E. Astrakharchik, A.L. Belousov, and Yu.E. Lozovic, *J. of Exper. and Theor. Phys.* 89, 696 (1999).
- [102] H. Thomas and G. E. Morfill, *J. Vac. Sci. Technol. A* 14, 501 (1996).
- [103] S. V. Vladimirov, O. Ishihara, *Phys. Plasmas* 3, 444 (1996).
- [104] H. Totsuji, T. Kishimoto, Y. Inoue, C. Totsuji, and S. Nara, *Phys. Lett. A* 221, 215 (1996).
- [105] J. M. Liu, W. T. Juan, J. W. Hsu, Z. H. Huang and Lin I, *Plasma Phys. Control. Fusion* 41, A47 (1999).
- [106] U. Mohideen, H. U. Rahman, M. A. Smith, M. Rosenberg, and D. A. Mendis, *Phys. Rev. Lett.* 81, 349 (1998).
- [107] V. A. Schweigert and F. M. Peeters, *J. Phys. : Condens. Matter* 10, 2417 (1998).
- [108] L. Rouaiguia, M. Issaad, and M. Djebli, *JSP'12, USTHB, Alger, avril* (2008).
- [109] L. Rouaiguia, M. Djebli, M. Drir, and F. M. Peeters, *CIPA'2007, Oran, Algérie*.
- [110] M. Issaad, L. Rouaiguia, and M. Djebli, *AIP Conf. (ICPDP5), Pro. 1041, 195* (2008).

- [111] V.N. Tsytovich, G.E. Morfill, and H. Thomas, *Plasma Phys. Reports* 28, 623 (2002).
- [112] A. Piel and A. Melzer, *Plasma Phys. Control. Fusion* 44, R1-R26 (2002).
- [113] V. Tsytovich, G. Morfill, U. Konopka, and H. Thomas, *New J. of Phys.* 5, 1. 77,137 (2003).
- [114] O. Arp, D. Block, M. Klindworth, and A. Piel, *Phys. Plasmas* 12, 122102 (2005).
- [115] A. Melzer, *Phys. Rev. E* 73, 056404 (2006).
- [116] U. Konopka, L. Ratke, H. M. Thomas, *Phys. Rev. Lett.* 79, 1269 (1997).
- [117] V. M. Bedanov and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* 49, 2667 (1994).
- [118] I. V. Schweigert, V. A. Schweigert and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* 54, 10827 (1996).
- [119] M. Rosenborg, D.A. Mendis, in *Proceedings of the Sixth Workshop on the Physics of Dusty Plasmas*, La Jolla, California, USA, 22-25 March 1995, p. 223.
- [120] L. Landau and Y. Lifshitz, in *Course of Theoretical Physics*, Pergamon (Oxford) 1970.
- [121] M. Rosenborg and D.A. Mendis, *IEEE Trans. Plasma Sci.* 23, 177 (1995).
- [122] V. A. Schweigert and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* 51, 7700 (1995).
- [123] G. Coupier, C. Guthmann, Y. Noat, and M. Saint Jean, *Phys. Rev. E* 71, 046105 (2005).
- [124] M. Wolter and A. Melzer, *Phys. Rev. E* 71, 36414 (2005).
- [125] W. P. Ferreira, B. Partoens, F. M. Peeters, and G. A. Farias, *Phys. Rev. E* 71, 021501 (2005).
- [126] A. P. Young, *Phys. Rev. B* 19, 1855 (1979).
- [127] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys. C* 6, 1181 (1973).
- [128] B. I. Halperin and D. R. Nelson, *Phys. Rev. Lett.* 41, 121 (1978).
- [129] D. R. Nelson and B. I. Halperin, *Phys. Rev. B* 19, 2457 (1979).
- [130] F. M. Peeters, V. A. Schweigert, and V. M. Bedanov, *Physica B* 212, 237 (1995).
- [131] B. Pouligny, R. Malzbender, P. Ryan, et Noel A. Clark, *Phys. Rev. B*, 42 : 988, 1990.
- [132] K. Bagchi, H. C. Andersen, et W. Swope, *Phys. Rev. Lett.* 76, 255 (1996).

- [133] X. H. Zheng and R. Grieve, Phys. Rev. B 73, 064205 (2006).
- [134] K. Zahn et G. Maret, Phys. Rev. Lett. 85, 3656 (2000).
- [135] J. P. Schiffer, Phys. Rev. Lett. 70, 818 (1993).
- [136] S. W. S. Apolinario, B. Partoens, and F. M. Peeters, Phys. Rev. E 74, 031107 (2006).
- [137] S. W. S. Apolinario, B. Partoens, and F. M. Peeters, Phys. Rev. E 72, 046122 (2005).
- [138] T. E. Sheridan, K. D. Wells, M. J. Garee, and A. C. Herrick, J. Appl. Phys. 101, 113309 (2007).
- [139] A. A. Samarian, O. S. Vaulina, A. P. Nefedov, V. E. Fortov, B. W. James and O. F. Petrov, Phys. Rev. E 64, 056407 (2001).
- [140] B. A. Klumov and G. E. Morfill, JETP Lett. 87, 409 (2008).
- [141] R. Ichiki, Y. Ivanov, M. Wolter, Y. Kawai, and A. Melzer, Phys. Rev. E 70, 066404 (2004).
- [142] C. C. Grimes and G. Adams, Phys. Rev. Lett. 42, 795 (1979).
- [143] P. Leiderer, W. Ebner, and V. B. Shikin, Surf. Sci. 113, 405 (1987).
- [144] Minghui Kong, B. Partoens and F. M. Peeters, New Journal of Physics 5, 23.1-23.17 (2003).
- [145] D. Block, S. Käding, A. Melzer, A. Piel, H. Baumgartner, and M. Bonitz, Phys. of Plasmas 15, 040701 (2008).
- [146] O. Ishihara, J. Phys. D : Appl. Phys. 40, R121 (2007).
- [147] A. Bekda, M. Djebli, and N. Beldjoudi, J. Plasmas Phys. 74, 620 (2008).
- [148] M. Djebli, M. Issaad, and L. Rouaiguia, (*undercorrection*) Phys. of Plasmas, Jan (2010).
- [149] M. Saint Jean and C. Guthmann, J. Phys. :Condens. Matter 14, 13653 (2002).
- [150] I.V. Schweigert, V.A. Schweigert, A. Melzer, and A. Piel, Phys. Rev. E 62, 1238 (2000).
- [151] H. Totsuji, Phys. Plasmas 8, 1856 (2001).
- [152] F. Lindemann, Z. Phys. 11, 609 (1910).