

N° d'ordre: 23/2009-M/PH :

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTÈRE D'ENSEIGNEMENT ET
DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE HOUARI BOUMEDIENNE
FACULTÉ DE PHYSIQUE



MEMOIRE

présenté pour l'obtention du diplôme de **MAGISTER**

EN: PHYSIQUE

Spécialité : Physique Théorique de la Matière et des Hautes Energies

par : **ISSAAD Mohamed**

Sujet :

**ETUDE DES STRUCTURES FORTEMENT COUPLEES DANS UN
CONFINEMENT ELECTROSTATIQUE A DEUX DIMENSIONS**

soutenue publiquement le 23/05/2009, devant le jury composé de:

M^r. Abderrezak BENDIB

Professeur (U.S.T.H.B)

Président

M^r. Mourad DJEBLI

Maître de Conférences (U.S.T.H.B)

Directeur de thèse

M^{me}. Djamila DOUMAZ-BENNACEUR

Maître de Recherche (C.D.T.A)

Examinatrice

M^r. Abdelhafid KELLOU

Maître de Conférences (U.S.T.H.B)

Examineur

M^r. Mouloud TRIBECHE

Maître de Conférences (U.S.T.H.B)

Examineur

Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire a été réalisé au laboratoire de la Post-Graduation de Physique Théorique, Faculté de Physique, Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumedienne.

*Je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de thèse **Mourad Djebli**, maître de conférence qui par ses encouragements, son intégrité scientifique, sa franchise, ses conseils éclairés et sa vision objective et rationnelle de la problématique ainsi que sa bienveillante disponibilité a su m'accompagner lors de ces années de Magister.*

*Je prime ma profonde et respectueuse gratitude à Monsieur **A. BENDIB**, Professeur à l'USTHB qui ma fait l'honneur de présider mon jury de thèse.*

*J'adresse mes vifs et sincères remerciements à Madame **D. DOUMAZ-BENNACEUR**, Maître de Recherche au C.D.T.A et à Monsieur **A. KELLOU**, Maître de conférence à l'USTHB pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant d'examiner ce travail et de participer au jury.*

*Je tiens à remercier Monsieur **M. TRIBECH** Maître de conférence à l'USTHB et auprès de qui j'ai pris un grand plaisir lors de mon initiation dans le domaine des plasmas poussiéreux, d'avoir accepté d'être membre du jury de ce mémoire.*

Je profite également pour remercier Mademoiselle L. Rouaiguia, pour sa disponibilité et la fertilité des discussions que nous avons pu avoir.

Je remercie également pour leurs conversations scientifiques souvent utiles et intéressantes, ou encore pour leurs précieuses références, le Pr. N. Beldjoudi, Mme L. Amirouche, K. Aoutou, D. Ali Fadila, S. younsi ainsi que tous ceux et celles que j'ai oubliés et que je prie de me pardonner.

Je n'oublierai pas tous mes amis pour leurs encouragements.

Enfin, je tiens à remercier sincèrement mes parents qui m'ont toujours incité à poursuivre mes études et qui m'ont soutenu moralement et souvent même supporté durant ces dernières années.

Table des matières

Introduction	2
1 Les systèmes fortement couplés	6
1.1 Les plasmas poussiéreux	7
1.1.1 Plasmas poussiéreux astrophysiques	8
1.1.2 Plasmas poussiéreux de laboratoire	10
1.1.3 Processus de charge des grains de poussière	10
1.1.4 Fluctuation de la charge	11
1.1.5 Effet collectifs	12
1.2 Systèmes de plasmas poussiéreux fortement couplés	12
1.2.1 Prévision historique (Cristaux de Coulomb)	13
1.2.2 Cristaux de Wigner	16
1.2.3 Cristal de Plasma	17
2 Techniques de simulation	19
2.1 Limites des méthodes analytiques	20
2.1.1 Avantages et inconvénients de la simulation	21
2.2 Introduction aux méthodes de minimisation de l'énergie	22
2.2.1 Principales méthodes de simulation	22
2.2.2 Autres méthodes de minimisation	25
3 Les grains de poussière en phase organisée	27
3.1 Potentiel de confinement	28

TABLE DES MATIÈRES

3.2	Potentiel d'interaction	29
3.2.1	Potentiel Coulombien	30
3.2.2	Potentiel logarithmique	30
3.2.3	Potentiel de Yukawa	31
3.2.4	Représentation graphique des trois potentiels	33
3.3	Détermination des configurations les plus stables à partir de la simulation de Monte Carlo	34
3.3.1	Principe de la méthode de Monte Carlo	37
3.3.2	Valeurs moyennes et méthode Monte Carlo	37
3.3.3	Chaîne de Markov et probabilité de transition	38
3.3.4	Algorithme de Métropolis	39
3.3.5	Résultats et Discussions	41
3.3.6	Etude comparative	43
3.3.7	Fluctuation de la charge et configurations d'équilibre	47
4	Transition de phase	56
4.1	Modèle Physique	59
	Conclusion	66
	Annexe	68

Introduction

L'état plasma est un état très répandu dans la nature. On le rencontre dans les étoiles, dans certaines atmosphères de planètes où l'ionisation est due à des particules très rapides dont certaines émanent du soleil (vent solaire), dans l'espace interplanétaire et interstellaire. Plus près de nous, on le rencontre dans les flammes, les explosions et dans les arcs électriques et en particulier les éclairs atmosphériques [1].

Une des nouvelles branches de la physique des plasmas est l'étude des plasmas fortement couplés. Ces systèmes composés de particules chargées, agissant les unes sur les autres par des forces électrostatiques, montrent une variété d'intérêt structural et des phénomènes dynamiques. L'une de leurs caractéristiques est que, l'énergie potentielle des particules due à leur interaction électrostatique est supérieure à l'énergie cinétique moyenne de leur mouvement aléatoire thermique.

Ces systèmes, montrent un ensemble riche de phénomènes intéressants, lorsqu' on introduit dans un plasma simple une nouvelle composante additionnelle, des grains de poussière mésoscopiques (plasmas poussiéreux) c'est-à-dire des grains de faible dimension à l'échelle macroscopique. Cette nouvelle composante se trouve dans de nombreuses situations, à l'état naturel ou dans les plasmas industriels. Des travaux à la fois théoriques et expérimentaux ont, de ce fait, vu le jour. On citera par exemple les études concernant les processus de charge [2][3], les phénomènes de transport [4], ainsi que la formation de structures cristallines par les grains qui nous intéresse dans notre travail. Lorsque l'énergie cinétique des grains diminue, des couplages forts apparaissent entre les grains de poussière et nous pouvons observer la formation de structures organisées.

En 1934, Wigner a présenté une théorie décrivant les comportements des électrons dans les métaux à basse température [5]. Il a montré que ces électrons forment dans un régime de très forte interaction coulombienne, un réseau régulier (les électrons se cristallisent).

Ensuite, en 1979 Abrahams et *al* stipulent que le principal facteur pour avoir des structures ordonnées est dû à l'interaction interparticules [6].

Le plasma cristallin a été prédit comme un nouvel état dans les plasmas complexes de laboratoire en 1986 [7] et trouvé expérimentalement à l'institut de Max Planck " Institute for Extraterrestrial Physics " en 1994 [8][9]. L'étude d'un tel système présente de nombreux avantages, surtout expérimentaux. La taille macroscopique des grains de poussière qui portent de grandes charges, a comme conséquence une très forte interaction entre les grains [10]. La grande masse des particules ralentit leur mouvement et rend ces systèmes très intéressants à étudier.

Les particules poussiéreuses sont non seulement présentes dans un plasma, mais peuvent également se former et se développer grâce à différents processus physiques. Cependant, les propriétés des plasmas poussiéreux sont beaucoup plus diverses que celles des plasmas composés d'électrons et d'ions. En outre, la charge des particules de poussière n'est pas fixe. Elle se détermine par les paramètres environnants et peut changer dans l'espace et dans le temps. D'ailleurs, les fluctuations de la charge sont présentes même pour des paramètres constants vu la nature stochastique du processus de charge.

En raison des grandes charges portées par les grains de poussière, l'énergie électrostatique de l'interaction entre elles devient importante. Pour cette raison, les plasmas poussiéreux sont fortement couplés et peuvent être réalisés ou manipulés beaucoup plus facilement que ceux d'ions et d'électron, malgré leur concentration qui est très inférieure à celle des électrons et des ions.

La présence des grains dans un plasma est essentielle et participe aussi aux processus collectifs, qui modifient non seulement le spectre d'onde, en comparaison au plasma non poussiéreux, mais peut également mener à de nouveaux modes et de nouveaux mécanismes d'atténuation et d'instabilité. Elle présente aussi de nouvelles caractéristiques à l'échelle spatiale et temporelle. Par exemple, l'ordre de grandeur de la fréquence de plasma poussiéreux est plus petite que celle d'ion ou d'électron. Ceci mène à l'apparition d'un nouveau mode à très basse fréquence d'onde acoustique poussiéreuse ($10 - 100 s^{-1}$) [11]. Le plus grand nombre de travaux s'intéressant directement au phénomène de cristallisation dans les plasmas complexes sont basés sur des études expérimentales ou de si-

mulation. Toutefois, les études dynamiques restent complexes du fait de la non linéarité du problème et de la nécessité de disposer d'un grand nombre de particules. De plus, au delà des contraintes liées aux techniques elles-mêmes, la simulation peut soulever de nombreuses interrogations, puisque plusieurs paramètres peuvent intervenir (densité, fluctuation de la charge et interaction entre les particules), l'apport d'un certain nombre de paramètres dans les moyens de simulation et les derniers progrès expérimentaux ont permis de réaliser des progrès considérables.

L'objectif de cette thèse est: d'analyser le comportement des grains chargés négativement, dans un confinement extérieur. On modélise le comportement collectif par la méthode Monte Carlo à de très basses températures ($T \simeq 0$). Les transitions entre configurations d'équilibre, lorsqu'on introduit la contribution de l'agitation thermique et la fluctuation de la charge des grains, sont étudiées.

Afin de pouvoir comprendre le phénomène de cristallisation dans les plasmas poussiéreux, il est nécessaire de connaître la physique des systèmes fortement couplés. Le chapitre *I* présente tout d'abord les systèmes fortement couplés, et expose les principales notions concernant les plasmas, les plasma poussiéreux et le phénomène de cristallisation. Dans le deuxième chapitre, nous donnons une introduction sur la simulation et un aperçu sur les méthodes de minimisation de l'énergie. Une description de la méthode Monte-Carlo (MC) ainsi que les différents algorithmes de simulation y sont explicités. Dans le troisième chapitre, on présente le modèle étudié et la méthode numérique utilisée dans la simulation, on expose les résultats concernant les configurations les plus stables dans le cas des grains à charge constante et à deux dimensions. La fluctuation de la charge est ensuite décrite pour montrer son influence sur les configurations. Le chapitre IV est consacré à quelques rappels sur la transition de phase, nous décrivons les techniques traitant l'état de la configuration, et on fait une étude sur le comportement des grains de poussière de la phase organisée jusqu'au désordre, pour $N=15$, dans deux cas avec et sans fluctuation de la charge.

La thèse se termine par une brève conclusion des travaux réalisés.

Chapitre 1

Les systèmes fortement couplés

La physique des plasmas fortement couplés, où les effets de l'interaction interparticulaire sont substantiels, a connu des développements considérables au cours de ces dernières années.

On trouve les systèmes plasmas fortement couplés essentiellement dans les fonctionnements des réacteurs thermonucléaires, le confinement inertiel du plasma chaud, les générateurs magnétohydrodynamiques et les moteurs de fusées à réacteurs nucléaires.

Des résultats expérimentaux impressionnants ont été observés sur ces systèmes. L'un de ces résultats, est que ces systèmes vont s'ordonner dans des réseaux bien définis connus sous le nom "Cristal de plasma" et qui existent à basse température [12][13][14].

Cet effet est observé dans la cristallisation bidimensionnelle des électrons [15], les plasmas colloïdaux [16], ainsi que des expériences de laboratoire en microgravité avec des plasmas complexes [17], sont la consécration expérimentale de ce qui a été prévu bien avant par la théorie. Malgré la grande variété d'objets et de situations expérimentales, ils sont tous unis par le rôle dominant de l'interaction collective forte.

De nombreuses études théoriques et expérimentales récemment publiées sur les systèmes fortement couplés notamment sur le phénomène de cristallisation dans les plasmas, donnent des résultats fiables sur les propriétés thermodynamiques, optiques et le transport dans les plasmas [18][19].

La physique des plasmas fortement couplés présente un domaine très difficile à décrire

théoriquement. L'interaction forte inter-particules et la complexité du problème à N corps, empêche l'utilisation des méthodes conventionnelles de la physique théorique. Par conséquent, le progrès récent dans la compréhension des propriétés des plasmas a été rendu possible grâce à l'experimentation et à l'amélioration des moyens de simulation (ordinateurs).

Ce chapitre présente une variété de systèmes de plasma poussiéreux astrophysiques et de laboratoires. Beaucoup de ces derniers ne sont pas fortement couplés, ainsi ils se trouvent hors sujet par rapport à ce mémoire, mais ils sont présentés ici pour introduire quelques notions de base.

1.1 Les plasmas poussiéreux

On peut parfois lire que 99% de la matière visible qui compose notre Univers est dans l'état de plasma. Bien sûr, c'est une estimation grossière, mais toutefois raisonnable dans la mesure où la majeure partie de l'hydrogène contenue dans notre Univers est sous forme ionisée. D'ailleurs le plus simple des plasmas est celui de l'hydrogène (formé d'électrons et de protons libres en concentration égale). Le terme plasma a été introduit par le physicien Irving Langmuir en 1928. Un plasma constitue essentiellement un mélange de particules libres électriquement chargées, mais dont l'ensemble est électriquement neutre.

Souvent dans les plasmas astrophysiques et de laboratoire, on rencontre une nouvelle composante additionnelle connue sous le nom grain de poussière ou dust et présent dans le plasma . Si la présence des grains de poussière change le comportement collectif du plasma, alors ce dernier est dit "plasma complexe". Ces grains sont souvent considérés comme des particules qui contaminent le plasma.

En plus de l'interaction entre les grains poussiéreux et le plasma, il y a toujours interaction entre les grains eux-mêmes. Selon la masse, la charge des particules et l'environnement local du plasma, cette interaction sera principalement due à la force de gravité ou à la force électrique. Si les deux forces sont de même ordre, on les combine toutes les deux. Mais généralement la pesanteur étant beaucoup plus faible que l'interaction électrique, on peut la négliger. Il y a quelques environnements, comme les anneaux planétaires, qui

contiennent des particules ayant une gamme étendue de dimensions particulières, qui peuvent agir les unes sur les autres gravitationnellement [20].

La composition des grains de poussière, et leur taille changent selon l'environnement. Les grains astrophysiques sont typiquement composés de glace de divers types, d'oxydes, de graphite et d'autres formes de matériaux (carbone riche) [21]. Le grain de laboratoire peut être composé presque de n'importe quel type de matériaux. Le type le plus souvent utilisé pour l'étude des systèmes poussiéreux fortement couplés est: la mélamine/formaldéhyde [8], bien que d'autres matériaux soient également employés tels que la silice et le polystyrène [10][22].

1.1.1 Plasmas poussiéreux astrophysiques

Les plasmas poussiéreux sont importants dans une variété de situations astrophysiques s'étendant des nuages interstellaires aux systèmes d'anneaux planétaires. Actuellement, aucun plasma astrophysique n'est connu pour être fortement couplé, par rapport au critère qu'on définira en paragraphe (1.2).

Plasma interstellaire

Depuis les années 30, on a su que le milieu interstellaire n'est pas vide. Ceci a été démontré définitivement par R. J. Trumpler (1930) pendant ses tentatives de calculer la distance entre les étoiles voisines, en utilisant des faisceaux lumineux par deux méthodes différentes. Il a trouvé qu'il y avait une différence entre les résultats des deux méthodes, Ceci l'a mené à conclure qu'il devait y avoir un certain matériel dans le milieu interstellaire qui absorbait la lumière. Dans les années 40, on a constaté que cette absorption est également due aux petites particules de poussière de tailles comparables à la longueur d'onde du faisceau lumineux.

Bien que les grains de poussière soient une composante importante du milieu interstellaire, on trouve d'autres constituants comme l'hydrogène et l'hélium, le plasma interstellaire est considéré comme neutre ou comme un plasma partiellement ionisé.

Plasmas poussiéreux du système solaire

Les plasmas poussiéreux se retrouvent dans une variété large de notre système solaire. Une partie de cette poussière est d'origine interstellaire, comme montré par des mesures prises récemment par le vaisseau spatial Ulysse et Galilée [23]. Cependant, sa majeure partie provient des comètes [24], parmi ces plasmas :

- **Les Anneaux Planétaires:** La plupart des anneaux des planètes géantes externes (telles que Jupiter, Saturne, Uranus, Neptune) se composent principalement de glace et de particules poussiéreuses, qui varient d'un micron jusqu'à la taille d'une maison [25]. Pour les grandes particules l'influence primaire sur leur dynamique est la pesanteur, bien que, dans beaucoup de cas les forces électrostatiques peuvent jouer un rôle important [26][27].

En général il n'y a aucun système de plasma poussiéreux fortement couplé dans l'univers, certains anneaux planétaires peuvent avoir des régions où le couplage entre les grains de poussière peut être assez fort pour former un état " liquide ", caractérisé par une force de courte portée entre les particules [22].

- **Les Comètes:** Les comètes, sont un autre exemple de plasmas poussiéreux dans le système solaire. Elles contiennent de grandes quantités de poussière, de glace, et de gaz volatils. Lorsque elles s'approchent du soleil, le gaz se vaporise sous l'effet de la chaleur du soleil et s'échappe de la pesanteur de la comète portant avec lui des particules de poussière et formant ainsi la queue de la comète.

Plasma poussiéreux de l'atmosphère terrestre

Plus près de la surface de la terre, la présence de particules de poussière chargées se retrouve sur les couches ionosphériques ionisées par le vent solaire. Les particules chargées de ces couches (couche F, par exemple), sont confinées par le champ magnétique terrestre. Ces couches ionosphériques jouent un rôle essentiel dans la transmission des ondes de basse fréquence ($f \leq 20\ 30 MHz$).

Une des sources les plus significatives de la poussière dans l'atmosphère terrestre est la pollution synthétique (aérosols terrestres).

1.1.2 Plasmas poussiéreux de laboratoire

La littérature étendue sur la poussière dans l'espace et les plasmas astrophysiques est un point de départ pour la compréhension des plasmas poussiéreux de laboratoire.

Les plasmas de laboratoire se trouvent dans beaucoup de domaines, s'étendant de la recherche dans la fusion nucléaire à la fabrication des écrans plasmas. Ils ont été identifiés la première fois en 1924 (Langmuir). Les grains poussiéreux ont généralement un effet négatif, comme par exemple :

- **La contamination:** Dans la plupart des fabrications de semi-conducteur, la contamination est un problème important, les particules poussiéreuses peuvent rendre une puce entièrement inutile. Pendant que les éléments du semi-conducteur deviennent de plus en plus petits, le contrôle de ces éléments devient également plus difficile. Pour tenter de réduire ce problème, il est proposé de construire des salles sous vide "des salles blanches". Bien que ces salles propres aient réduit la quantité globale de contamination, elles n'éliminent pas toute la poussière, puisque la source primaire de contamination est produite actuellement dans le plasma lui-même. La poussière est produite par la pulvérisation des murs par interaction plasma murs [28][29].

1.1.3 Processus de charge des grains de poussière

On sait depuis longtemps que les particules poussiéreuses immergées dans un plasma acquièrent une charge positive ou négative.

D'autres méthodes par lesquelles les grains de poussière acquièrent une charge, selon l'environnement et la taille des grains poussiéreux existent. La plupart des plasmas astrophysiques et de laboratoire comprennent des courants primaires (collection d'électrons et d'ions), la photo-émission ou l'émission secondaire d'électrons.

Collection des particules

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

Pour cette raison, plus d'électrons heurteront les grains de poussière et les particules tendront à acquérir une charge négative. Les grains de poussière ont une masse beaucoup plus élevée que les ions et les électrons, leur vitesse thermique est négligeable par rapport à la vitesse des particules de plasma. Ainsi, les courants de chargement dépendront des vitesses des électrons et des ions et de la section efficace de diffusion des grains de la poussière. Si les grains de poussière ont une vitesse significative, ceci doit être pris en considération. Pour simplifier, ce mémoire étudiera seulement le cas où la vitesse du grain de poussière est négligeable.

Emission secondaire des électrons

La collision des électrons fortement énergétiques avec la surface du grain, permet de transférer une partie de leur énergie à d'autres électrons. Ces électrons absorbent assez d'énergie pour s'échapper de la surface du grain. La charge du grain dans ces conditions est positive.

Photo-émission

Lorsque les grains poussiéreux sont exposés au rayonnement ultraviolet, la surface des grains peut devenir ionisé et extraire des électrons, cette quantité de photo ionisation dépend du flux du rayonnement et du potentiel extérieur de grains, dans ce cas la charge des grains est positive.

1.1.4 Fluctuation de la charge

La charge des grains poussiéreux n'est pas uniforme, à cause de la variation de leurs tailles. Chaque grain possède sa propre charge à l'équilibre. Même la nature des courants de charge n'est pas stable, ce qui mène toujours à des fluctuations de la charge.

Pendant plusieurs années, on supposait que les fluctuations de charge obéissaient à la statistiques de Poisson, la charge varie selon la racine carré de la charge moyenne [30].

En 1994 Cui et Goree ont développé un modèle illustrant la variation de la charge [31], pour des grains chargés par des courants primaires. Puis en 1996 Matsoukas *et al* ont

donné un nouveau modèle où ils ont simulé les fluctuations par un processus Markovien [32].

En 1999 Khrapak *et al*, ont développé un modèle dans lequel n'importe quel courant de charge peut être inclus. Le résultat est donné par l'équation suivante [33] :

$$\Delta z = \alpha \sqrt{\langle |z| \rangle} \quad (1.1)$$

Où α est une constante variant selon l'environnement et les processus de chargement, $|z|$ est la charge à l'équilibre. Cette fluctuation de charge peut induire le chauffage des particules de poussière [34]. Ce chauffage peut changer l'état des cristaux de Coulomb et donne lieu à des transitions de phase.

1.1.5 Effet collectifs

Rappelons que le plasma est formé de charges positives et négatives. Chaque charge va polariser dans une certaine mesure son environnement. Une charge négative va attirer des charges positives et repousser les charges négatives. Il s'en suit alors que la charge négative va être écrantée par les charges positives. C'est l'écrantage de Debye. Cette combinaison entre les charges peut généralement être modélisée en utilisant un potentiel écranté de coulomb dans lequel le potentiel $1/r$ est remplacé par:

$$U_d = \frac{zz'}{r} \exp\left(\frac{-r}{\lambda_d}\right) \quad (1.2)$$

avec z et z' la charge des particules, λ_d la longueur de Debye et r la distance interparticule.

1.2 Systèmes de plasmas poussiéreux fortement couplés

Un des récents domaines de recherche de la physique des plasmas est les systèmes poussiéreux fortement couplés. Ces systèmes peuvent exister en tant que plasmas liquides ou cristaux de plasma, et ont été décrits récemment par Morfill comme " nouveaux états de

la matière " [9]. Ce nouvel état maintient plusieurs propriétés des plasmas traditionnels (plasmas faiblement liés), malgré qu'il se comporte en tant que liquide ou solide. En plus de l'interaction entre le grain et le plasma, il y a souvent une grande interaction entre les grains de poussière eux-mêmes.

Ces systèmes ont été observés expérimentalement pour la première fois en 1994 dans les plasmas produits par chauffage radio-fréquence (RF) [8]. Les cristaux fortement couplés de plasma n'ont pas été encore prouvés comme existant dans des environnements poussiéreux de plasma astrophysique, bien qu'il y ait une évidence pour suggérer que des plasmas liquides puissent exister dans quelques anneaux planétaires [22]. Cependant il est facile de former des cristaux de plasma poussiéreux et des plasmas liquides dans les laboratoires [22], mais il est souvent difficile de mesurer expérimentalement les paramètres de ces systèmes, tels que la longueur de Debye ou la charge des particules.

En étudiant de tels systèmes d'une façon théorique par l'utilisation des simulations sur ordinateur [35][36], on peut être amené à une compréhension plus profonde de ces systèmes. Dans ces simulations, les paramètres des systèmes simulés sont connus exactement. Pour la plupart, les résultats obtenus en utilisant la simulation sont conformes aux expériences. Parfois quelques expériences indiquent que les modèles utilisés dans la simulation ne sont pas parfaitement corrects dans certains cas [37][38].

1.2.1 Préviation historique (Cristaux de Coulomb)

En 1934, Wigner a présenté une théorie du gaz d'électrons dans les métaux qui inclut le comportement des électrons à basses températures et à des densités élevées [5]. Dans de telles circonstances, il a prévu que les électrons formaient un réseau régulier dû seulement à l'interaction Coulombienne entre les électrons.

Il était très difficile d'observer un tel comportement dans les solides. Jusqu' aux années 90 il n'a jamais été évident que de tels systèmes aient été trouvés dans les jonctions de deux types de métaux [39][40]. Les premiers travaux pour former des cristaux de Wigner ont été réalisés dans des systèmes colloïdaux bidimensionnels [41]. Les cristaux de Wigner peuvent également être formés d'ions, quand ceux ci sont refroidis aux températures de

milli-Kelvin et en présence d'un piègeage [42].

Les études théoriques sur la cristallisation de Wigner ont été faites dans le contexte de modèle à un seul composant du plasma (OCP) [15]. De tels modèles utilisent une seule espèce de particules chargées confinées par un champ extérieur.

Le comportement de tels systèmes est strictement lié à un paramètre de couplage Γ , défini comme étant le rapport de l'énergie électrique moyenne inter-particule sur l'énergie thermique moyenne des particules:

$$\Gamma = \frac{Q^2}{d^{\frac{1}{2}}mv^2} = \frac{Q^2}{dk_BT} \simeq \frac{Q^2n^{\frac{1}{3}}}{k_BT} \quad (1.3)$$

avec: $(\frac{4}{3}\pi)nd^3 = 1$.

Où d est l'interdistance moyenne entre les particules, Q la charge des particules, v la vitesse thermique moyenne; k_B la constante de Boltzmann, T la température et n la densité initiale des particules. Si Γ est inférieur à un, le système est décrit comme étant faiblement couplé tandis qu'un système où Γ est supérieur à un est considéré dans un état fortement couplé. Ceci a été démontré en utilisant la simulation par la méthode de Monte Carlo : pour Γ plus grand que 172 pour les systèmes à $3D$, et supérieure à 132 pour les systèmes à $2D$, le système peut se solidifier dans un état cristallin [15][43][44].

La plupart des plasmas, naturels et de laboratoire ont un paramètre de couplage Γ inférieur à un (voir la fig 1.1) et sont faiblement couplés. En 1986 Ikezi a prouvé que la valeur du paramètre de couplage ($\Gamma = 170$) est très élevée pour être atteinte par les plasmas classiques. Mais elle pourrait facilement être atteinte par un système colloïdal de plasma tel qu'un plasma poussiéreux ou plasma complexe. Ceci est principalement dû au fait que les grains de poussière peuvent facilement acquérir des charges de l'ordre de millier de fois la charge des électrons.

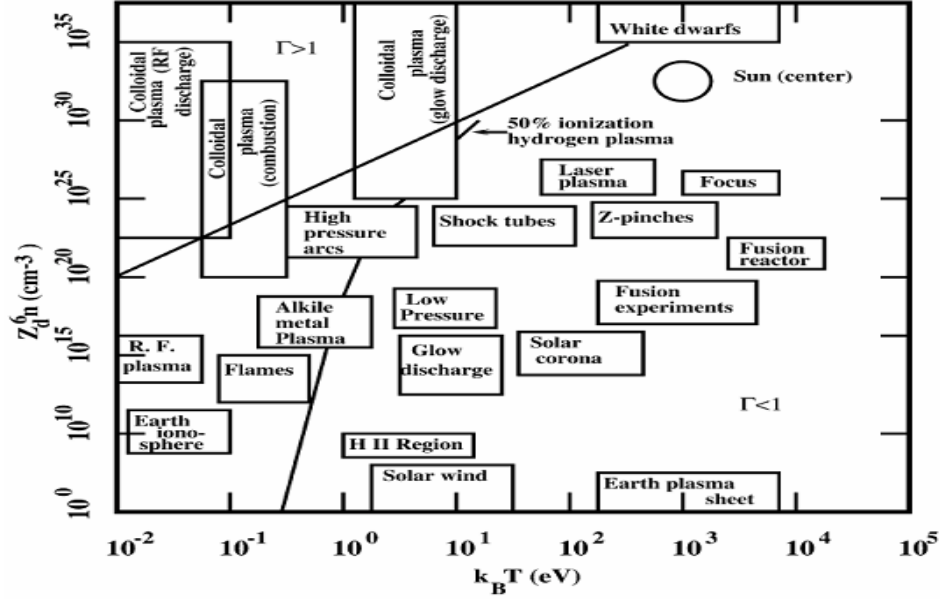


FIG. 1.1 – Paramètres de couplage de différents types de plasmas de laboratoire et de plasmas naturel [9]

En réalité l'interaction inter-particule dans un plasma n'est pas de forme purement Coulombienne, elle est décrite par le modèle de Yukawa, qui tient compte de l'effet d'écran, le paramètre de couplage dans ce modèle est le suivant :

$$\Gamma = \frac{Q_p^2 n_p^{\frac{1}{3}}}{K_B T_p} \exp(-k_p) \quad (1.4)$$

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

En parallèle à des recherches théoriques, des expériences ont été entreprises dans ce nouveau domaine des plasmas poussiéreux fortement couplés. Une équipe travaillant sous la direction de H. Thomas, G. Morfill et J. Goree a observé pour la première fois des cristaux de poussière en 1994 dans les plasmas RF , à l'institut Max Planck. Toutes les expériences qui ont été faites utilisent des microsphères injectées dans un plasma de décharge (RF). Ces grains acquièrent une charge par interaction avec le plasma. Cette

charge est estimée entre 9.000 et 28.000 fois la charge de l'électron. Ces particules sont soumises à un champ électrique qui va les soulever (opposés à la force de pesanteur). Les particules sont piégées dans une région locale contre leur force de répulsion mutuelle. La (fig 1.2) montre le dispositif utilisé dans ces expériences.

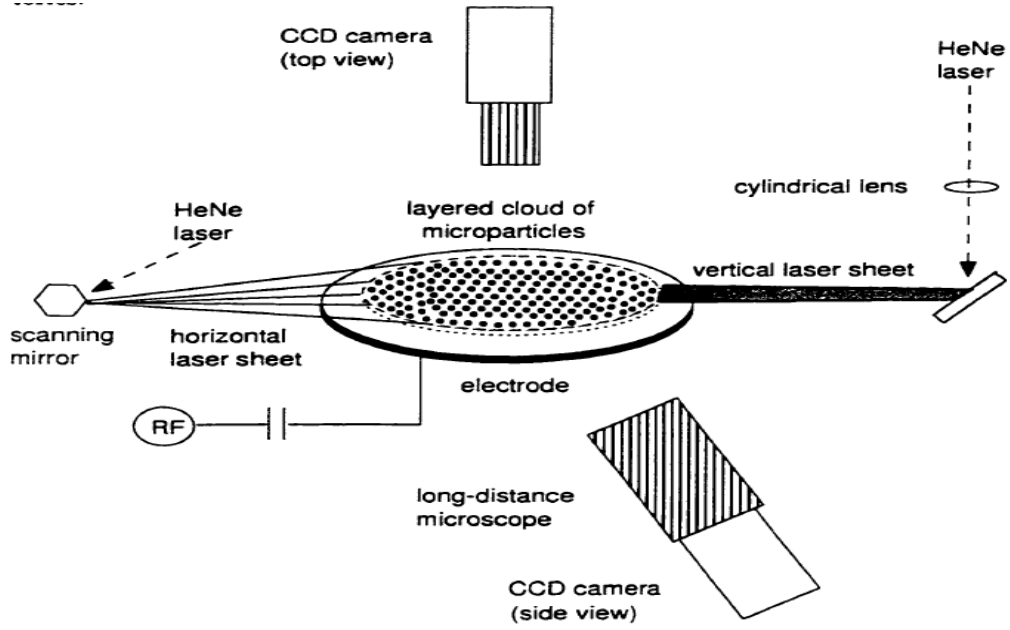


FIG. 1.2 – *Dispositif expérimental pour voir les structures organisées [18]*

1.2.2 Cristaux de Wigner

Dans la limite de hautes densités et de basses températures, les électrons se comportent comme un gaz idéal de Fermi dégénéré, l'énergie moyenne de l'interaction coulombienne $V_c = r^{-1}$, n'augmente pas avec la densité, de même que l'énergie de Fermi $\varepsilon_F \sim r^{-2}$. Selon la prévision faite par Wigner 1934, lorsque la densité diminue l'énergie cinétique moyenne (l'énergie de Fermi) peut devenir beaucoup plus petite que l'énergie potentielle moyenne et par conséquent la localisation des électrons et la formation des réseaux deviennent énergétiquement favorables.

Comme il a démontré qu'à basses concentrations de gaz d'électrons, ce dernier passe à une

phase ordonnée, car le plasma augmente l'énergie coulombienne qui stabilise le réseau, $V_c = e^2 n_e^{\frac{1}{3}}$, et diminue l'énergie cinétique qui détruit le réseau. L'énergie cinétique dans les plasmas d'électrons est assimilable à l'énergie de Fermi, $T \sim \varepsilon_F \sim \hbar^2 n_e^{\frac{2}{3}} / 2m$. Par conséquent, à des densités suffisamment faible l'énergie cinétique $T \sim n_e^{\frac{2}{3}}$, devient plus petite que l'énergie potentielle $V_c \sim n_e^{\frac{1}{3}}$, et incapable de détruire la structure ordonnée formée par les électrons.

1.2.3 Cristal de Plasma

Dans un cristal ionique, les noeuds de réseau sont composés d'alternances de charges positives et négatives arrangées dans un réseau régulier. Par contre, le cristal de coulomb, également connu sous le nom de cristal de plasma, se forme dans un plasma poussiéreux entièrement composé de particules chargées.

En principe, les particules de même charge se repoussent mutuellement. Pour une certaine densité critique une particule "test" se voit soumise à des forces répulsives dans toute les directions. Ainsi la particule soit figé dans une région limite de l'espace, (voir la figure ci-dessous).

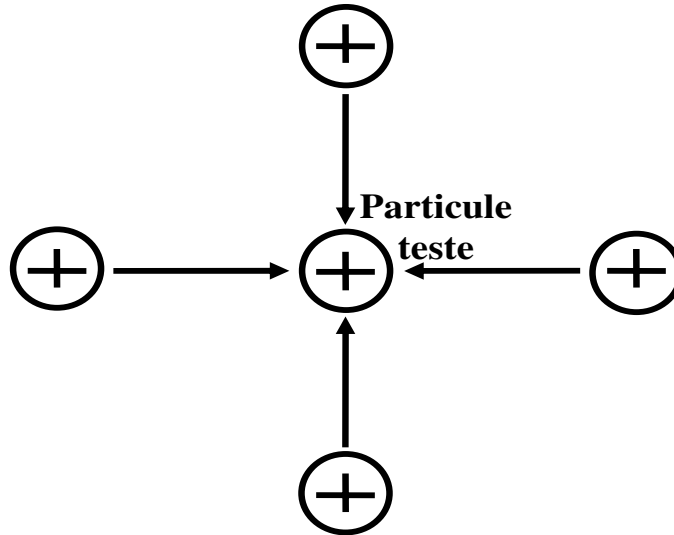


FIG. 1.3 – *Interaction binaire d'une particule test*

Dans le cas des cristaux Coulombien formés des grains de poussière, l'ordre est observé sans avoir besoin d'un champ extérieur. Le rôle de ce dernier consiste à limité la région de confinement.

Le plus bas état d'énergie de ces particules est obtenu quand ils se séparent autant que possible. Cependant, s'il y a un certain potentiel externe de confinement, une structure de réseau devient l'état le plus énergétiquement favorable.

Chapitre 2

Techniques de simulation

Etymologiquement, le terme "simulation" est dérivé du mot latin "SIMULARE" qui veut dire : copier, feindre, faire paraître comme réelle une chose qui ne l'est point. On peut donc très bien dire que simuler le fonctionnement d'un système c'est imiter son fonctionnement au cours du temps en manipulant un modèle.

Dans la littérature technique beaucoup de définitions ont été attribuées au terme "Simulation". Parmi ces définitions, nous préférons celle donnée par A. Pritsker [45], et qui s'énonce comme suit : «La simulation est l'étude du comportement dynamique d'un système, grâce à un modèle que l'on fait évoluer dans le temps en fonction de règles bien définies, à des fins de prédiction».

La simulation est la représentation d'un modèle à travers l'outil informatique. Le modèle se prête à des manipulations qui seraient impossibles, trop coûteuses ou non pratiques à effectuer sur un système réel, alors on peut tirer de la simulation les propriétés physique et prévoir le comportement dynamique du système. De façon très générale, simuler signifie "représenter la réalité par un moyen quelconque". Plus particulière, la simulation utilise souvent les programmes informatiques pour imiter les événements causals et les actions conséquentes dans le système. Les statistiques sont accumulées durant la période de simulation pour évaluer les mesures d'intérêt qui sont résumées et rapportées à la fin de l'exécution du programme de simulation.

La simulation permet d'évaluer et non pas de générer des solutions. Elle ne produit pas

de solutions théoriques optimales, mais elle oriente plutôt la recherche dans la direction de la meilleure solution pratique.

La simulation peut être aussi utilisée pour étudier un système durant le stade de sa conception, avant qu'il ne soit construit. Ainsi, la simulation peut être utilisée comme outil d'analyse pour prédire l'effet des changements sur la performance d'un système existant, mais aussi comme un outil de conception pour prédire la performance d'un nouveau système sous différentes circonstances.

La simulation est un outil qui a rapidement gagné une bonne réputation dans tous les domaines (scientifiques, gestionnaire, etc), elle utilise l'ordinateur pour modéliser un phénomène physique, tester un système avant sa conception, etc. Les résultats qui auparavant prenaient des mois, peuvent être actuellement réalisés en quelques jours et parfois même en quelques heures.

La première simulation, remonte à 1950. Elle s'étend par la suite à tous les champs de recherche. Plusieurs facteurs ont contribué à sa vulgarisation dont on cite :

- Augmentation de la disponibilité, de la capacité et de la facilité d'utilisation des logiciels de simulation.
- Augmentation des capacités en mémoire et en vitesse de traitement des ordinateurs (surtout au niveau des ordinateurs personnels PC).
- Disponibilité de l'animation graphique.

2.1 Limites des méthodes analytiques

Souvent, les modèles analytiques ne représentent pas fidèlement la réalité puisqu'ils en sont une simplification basée sur des hypothèses non réalistes. Généralement les chercheurs, qui développent les modèles analytiques, ajustent souvent la réalité aux outils dont ils disposent. De plus, les modèles analytiques sont difficiles à valider auprès des utilisateurs puisque ce sont des modèles synthétiques qui génèrent parfois des résultats non conformes à la réalité.

2.1.1 Avantages et inconvénients de la simulation

Bien que la simulation soit un outil approprié d'analyse dans plusieurs situations, l'analyste doit prendre en considération ses avantages et ses inconvénients. Parmi les principaux avantages de la simulation:

- La simulation peut être utilisée même si les données considérées sont en quelque sorte superficielles et sommaires.
- L'analyse par simulation est souvent moins coûteuse.
- La simulation est souvent plus facile à appliquer que les modèles et les méthodes analytiques.
- Alors que les modèles analytiques requièrent souvent des hypothèses simplificatrices pour que le problème soit traitable, la simulation n'admet aucune restriction de ce genre.
- La simulation permet d'avoir un aperçu des variables les plus importantes qui influent sur le système.

Les inconvénients de la simulation sont :

- Représentation approximative du système physique (phénomène).
- Plusieurs exécutions sont souvent requises, ce qui implique des coûts assez importants, des moyens informatiques, et beaucoup de temps.

La simulation est utilisée lorsque:

- On n'a pas de solution analytique.
- Les avantages de la simulation dépassent ses inconvénients.
- lorsque l'on a une ou plusieurs variables aléatoires.
- La dynamique du système est très complexe.

2.2 Introduction aux méthodes de minimisation de l'énergie

La stabilité de la structure d'un réseau de particules ou molécules est déterminée par les interactions interparticules et intramoléculaires ainsi que les interactions avec le milieu extérieur. La recherche des structures stables consiste à déterminer les minimas globale de l'énergie du système. Une minimisation de l'énergie implique un calcul successif et interactif des particules à partir d'une configuration initiale, laquelle est soumise à une optimisation géométrique complète. Tous les paramètres définissant la géométrie du système sont systématiquement modifiés par petits "incréments" jusqu'à ce que l'énergie structurale moyenne atteigne un minimum local, mathématiquement un point x sera dit minimum local d'une fonction $F(x)$ s'il existe $d > 0$ tel que pour tout x' dont la distance à x est inférieure à d , $F(x) < F(x')$. En ce point, la dérivée 1ère est nulle et la 2ème est positive. Cependant, aucune méthode ne peut garantir de façon absolue l'obtention de la plus basse énergie, c'est-à-dire le minimum global [46]. Presque toutes les méthodes de minimisation ont un point commun: on commence par une configuration donnée et on accède au minimum local le plus proche. Cette énergie peut être calculée par des méthodes classiques, quantiques ou semi-empiriques généralement longues et onéreuses. Pour faciliter les calculs, on considère généralement que le terme variable de cette énergie dépend de l'arrangement de ses particules.

2.2.1 Principales méthodes de simulation

L'extraordinaire montée en puissance des ordinateurs, a influencé et bouleversé les méthodes d'étude en sciences et techniques, notamment celles nécessitant des calculs très longs irréalisables auparavant. La physique a ainsi vu se développer une activité de simulation numérique que l'on peut situer entre la théorie pure (c'est-à-dire analytique) et l'expérience et qui sert souvent de relais entre les deux.

Dans ce paragraphe, on présente deux principales techniques utilisées dans le domaine de la simulation en physique statistique : la Dynamique Moléculaire (DM) et la méthode

Monte-Carlo (MC), qui peuvent paraître soit comme une expérience, soit comme une approche théorique.

Dynamique Moléculaire

D'après la mécanique classique, la connaissance de la position et de la vitesse d'une particule donnée et des forces qui s'appliquent sur elle, permet de prédire toute sa trajectoire future. La dynamique moléculaire est actuellement la méthode de simulation la plus utilisée en sciences physiques (en matière condensée). Elle consiste à étudier la trajectoire des particules en interaction, et elle est basée sur la résolution numérique des équations de la mécanique classique newtonienne. Elle prend en compte l'interaction de chaque particule avec toutes les particules voisines formant le système pour le calcul des forces. La description newtonienne d'un tel système est donnée par:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \vec{F}_i(\vec{r}_i(t)) \quad (2.1)$$

où m_i la masse de particule i , $\vec{F}_i$ représente l'ensemble des forces agissant sur la particule i et $\vec{r}_i$ les coordonnées cartésiennes de la particule i .

L'expression analytique de la force qui s'applique à chaque atome s'écrit dans le cas de potentiel à deux corps:

$$\vec{F}_i = - \sum_j \vec{\nabla} V(r_{ij}) \quad (2.2)$$

où r_{ij} est la distance entre les particules, l'expression du potentiel $V(r_{ij})$ peut être assez variée suivant le phénomène physique considéré.

Le succès d'une simulation par dynamique moléculaire repose notamment sur la rigueur de la procédure d'intégration de la loi de Newton pour chaque particule i de masse m_i et de position r_i . L'intégration d'un tel système d'équations différentielles se fait en subdivisant la trajectoire en une série d'états discrets, séparés par des intervalles de temps très court, dont la durée définit le pas d'intégration. Cette intégration est réalisée par diverses méthodes mathématiques. On peut citer la méthode de Range-Kutta, la méthode des différences centrales, la méthode d'Euler-Cauchy, la méthode de Verlet.

Méthode de Monte Carlo

La méthode de Monte Carlo offre des solutions approximatives à des problèmes mathématiques divers, la méthode s'applique à des problèmes déterministes ainsi qu'à ceux possédant des structures probabilistes, dans lesquelles des nombres aléatoires sont utilisés pour trouver une solution qui peut ne pas être aléatoire. En physique elle s'applique pour des systèmes en équilibre thermodynamique. Lorsque le système se trouve dans son état d'équilibre thermodynamique, son énergie libre est minimale. L'approche Monte Carlo permet de trouver la ou les configurations des particules, qui correspondent à ce minimum. Cette procédure de Monte Carlo est une méthode stochastique qui consiste à générer un enchaînement des propriétés thermodynamiques et structurales obtenues par moyennage. Une distribution de Boltzmann du type $\exp(-E_i/kT)$ permet ce moyennage.

Comparaison entre la méthode MC et DM

Le choix entre la méthode Monte-Carlo et la Dynamique Moléculaire, se fait en considérant l'efficacité relative de ces deux techniques en fonction du problème à traiter. Pour l'obtention des propriétés statiques d'équilibre des systèmes (quasi-ergodiques), les deux méthodes sont équivalentes, car dans ce cas les moyennes temporelles et les moyennes d'ensemble, fournissent les mêmes résultats.

Il est alors préférable de choisir l'approche DM puisqu'elle fournit le mouvement des particules. En effet, elle permet d'atteindre en outre les propriétés dynamiques et de transport qui sont inaccessibles par la technique MC. Le mouvement détaillé des atomes peut être analysé et conduire notamment à la connaissance des mécanismes précis des phénomènes physiques (diffusions).

Par contre, la méthode MC est plus facile à appliquer et surtout plus intéressante dans le cas d'une énergie potentielle mathématiquement compliquée, puisqu'on peut s'affranchir d'une évaluation explicite des forces, difficile mais indispensable à la DM. Enfin, de nombreuses techniques MC ont été développées spécialement pour le calcul des énergies libres. Ceci s'applique lorsque l'état final est recherché sans avoir besoin de suivre l'évolution du système à tout instant.

2.2.2 Autres méthodes de minimisation

Souvent, on risque d'être piégé dans un minimum local lorsque on utilise la méthode de Monte Carlo. Pour en sortir on peut faire appel à d'autres algorithmes que nous allons citer et qui nous conduisent dans le meilleur des cas dans un minimum relatif de faible énergie et l'on ne peut qu'espérer que ce minimum ne soit pas trop éloigné en énergie du minimum absolu. Il faut donc choisir entre les différentes méthodes qui diffèrent par leur efficacité, leur rayon de convergence, leur convergence vers le minimum et le nombre d'opérations qu'elles demandent. Il existe trois méthodes de minimisation les plus couramment utilisées : Méthode de la plus grande pente, Gradient conjugué et Newton Raphson. Les principes de ces méthodes, sont de prendre la dérivée première de l'énergie par rapport à chacun des degrés de liberté de la particule et de trouver les coordonnées r_i pour chaque particule où $dE/dr_i = 0$. Les procédures pour atteindre ce but sont de deux types: les unes utilisent uniquement la pente (dérivée première), les autres, à la fois les dérivées première et seconde.

La méthode de la plus grande pente

La méthode consiste à chercher la direction de la plus grande pente dE/dr_i au cours de laquelle la fonction d'énergie (l'Hamiltonien) décroît le plus rapidement. Puisque cette méthode permet la décroissance rapide de l'énergie, elle est généralement utilisée pour ajuster les contacts inter-particules d'une structure initiale.

Le gradient est un vecteur qui indique le sens vers où augmente l'énergie. C'est donc une variation d'énergie en fonction des coordonnées ($\delta E/\delta r$). Si le gradient est positif, alors l'énergie augmente avec r . Si le gradient est négatif, l'énergie diminue avec r . Donc une direction opposée au gradient correspond à une diminution d'énergie. On essaie alors d'avoir une descente rapide pour arriver au minimum.

La méthode du gradient conjugué

Cette méthode basée sur le même principe que la précédente, prend également en compte une étape en plus, en ajustant à chaque cycle le pas de déplacement de particules

pour obtenir la meilleure diminution d'énergie. Elle est beaucoup plus efficace mais plus coûteuse en temps de calcul. L'intérêt de cet algorithme est d'éviter un comportement oscillatoire autour du minimum et d'accélérer la convergence.

La méthode Newton Raphson

Une amélioration supplémentaire de la convergence peut encore être obtenue en ayant recours à une approximation quadratique de l'Hamiltonien, obtenue par développement en série de Taylor. La méthode consiste à chercher à chaque pas le minimum du développement à l'ordre 2 de l'Hamiltonien.

On fait alors appel à cette technique d'optimisation, qui évalue les dérivées secondes de l'énergie par rapport aux paramètres géométriques et converge donc plus rapidement. La programmation de cette procédure est nettement plus difficile que celle des méthodes des dérivées premières seules, mais le gain en temps de calcul et en précision est si important que presque tous les programmes de Dynamique Moléculaire et de Monte Carlo l'ont utilisée.

Cette méthode détermine donc non seulement la première dérivée, $(\delta E/\delta r)$, mais aussi la seconde, $(\delta^2 E/\delta^2 r)$. Ces secondes dérivées, ou constantes de force, témoignent de la courbure du potentiel énergétique et peuvent ainsi être utilisées pour estimer la position du minimum.

En résumé, l'optimisation selon la méthode Newton Raphson demande de calculer la matrice complète des dérivées secondes (pour une matrice dynamique, ses éléments sont des forces).

Chapitre 3

Les grains de poussière en phase organisée

La diminution de l'énergie cinétique des grains de poussière au profit d'une énergie potentielle d'interaction, permet aux particules de se stabiliser et forment ainsi des structures organisées. La formation de ces structures a été rencontrée dans d'autres systèmes où des particules chargées se trouvent dans des états fortement couplés: les cristaux ioniques [42] ou électroniques [39], ainsi que les cristaux colloïdaux dans les fluides [41]. Cette première partie est consacrée à l'étude des configurations les plus stables dans un plasma poussiéreux. Ce problème peut être posé de la façon suivante: La configuration la plus stable dépend de nombreux paramètres (température, potentiel d'interaction, la fluctuation de la charge, etc). Le modèle étudié est dans le cas où la température est presque nulle (basse température).

Considérons un système isolé, sans interaction avec le milieu extérieur, composé de N particules chargées de positions $\{x_i, y_i\}$ (aléatoire), nous négligeons ici les variations des deux autres espèces: ions et électrons. Bien qu'il soit facile d'adapter ce qui va suivre, nous supposons que toutes les particules sont identiques et que leur charge est négative.

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

Ainsi, dans une première partie, nous caractérisons les paramètres contrôlant l'état de notre système, à savoir l'interaction entre les particules. L'Hamiltonien du système est alors écrit dans sa forme générale: $H = V_c(r) + V(|r_i - r_j|)$, où le premier terme est le potentiel de confinement, et le deuxième terme le potentiel d'interaction entre les particules.

3.1 Potentiel de confinement

Supposons que les particules ont la même charge, donc l'interaction entre les grains de poussière est répulsive. Un confinement extérieur, qui jouera le rôle de barrière du potentiel, est appliqué pour limiter l'étendue spatiale de la zone étudiée. D'autre part, l'application d'un tel potentiel permet le contrôle de certains paramètres à savoir la température ainsi que les valeurs critiques. Ces dernières sont la signature d'un changement d'état ou de structure.

En réalité les plasmas poussiéreux ont la possibilité de se former sous forme cristalline sans avoir besoin d'un potentiel de confinement. Leur masse considérable et le champ self consistant assurent cette possibilité.

En fonction des problèmes abordés, nous utilisons un confinement de forme parabolique (symétrique). Dans le contexte de ce travail le potentiel de confinement de notre modèle est donné par:

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

où m est la masse de la particule, x_i et y_i sont les coordonnées des particules mesurées à partir du centre de confinement, ω_{0x} et ω_{0y} sont respectivement, les fréquences de confinement dans la direction de x et y , ces fréquences sont reliées par l'expression $\omega_{0x} = \sqrt{\alpha} \omega_{0y}$, où α est l'excentricité de confinement. Lorsque $\alpha = 1$ on a $\omega_{0x} = \omega_{0y}$, le potentiel de confinement résultant est de forme parabolique, et si $\alpha \neq 1$, le potentiel de confinement est de forme elliptique. Dans ce dernier cas, l'étude a été déjà faite par L. Rouagua *et al* mais pour des grains de poussière de charge positive. Le courant mis en jeu est dû à un rayonnement ultraviolet [47].

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

3.2 Potentiel d'interaction

Les propriétés de la configuration la plus stable qui est formée par les particules chargées, sont contrôlées par l'interaction électrostatique.

Dans les cristaux à grand nombre de particules, la donnée de l'interaction détermine l'ensemble des propriétés mécaniques du réseau. A l'échelle macroscopique, la force d'interaction entre les particules est généralement notée F . Celle-ci est directement reliée au potentiel d'interaction U via l'équation: $\vec{F} = -\vec{\nabla}U$. Une force répulsive tend à éloigner les particules et une force attractive tend à les rapprocher. Par ailleurs, on fait souvent référence à la portée d'une force, qui correspond à la distance entre les particules jusqu'à laquelle la force est ressentie de manière significative [48].

Connaitre le nombre de proches voisins impliqués dans le calcul du potentiel est d'une importance cruciale. En effet, une des caractéristiques des systèmes fortement couplés est que l'interaction peut prendre un aspect répulsif ou attractif. Ceci est gouverné par le type de l'interaction et la nature des particules. Pour les plasmas complexes, les particules acquièrent des charges considérables positives ou négatives. La fluctuation de la charge favorise le changement de comportement vis-à-vis de la nature de l'interaction.

Une étude basée sur la simulation de Monte Carlo a permis de montrer, dans le cas d'une chaîne unidimensionnelle infinie, que la portée de l'interaction électrostatique se limite à un nombre fini de proches voisins [49]. Ce résultat permet de réduire le nombre de proches voisins dans l'Hamiltonien de notre système. Le gain en temps machine est nettement apprécié.

Modéliser l'interaction entre particules qui sont d'une part massives et d'autre part porteuses de charge considérable, est un problème qui reste ouvert. Dans ce travail, on étudiera trois potentiels d'interaction, en considérant dans tout ce qui suit, des grandeurs

isotropes, c'est-à-dire dépendant uniquement de la distance r entre deux particules, considérées de forme sphériques.

3.2.1 Potentiel Coulombien

Entre deux particules de charge Z_1 et Z_2 , il existe des forces de répulsion électrostatique dites coulombiennes:

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

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

3.2.2 Potentiel logarithmique

A deux dimensions, le potentiel d'interaction dépend logarithmiquement de la distance entre deux particules, ce potentiel simule idéalement l'interaction Coulombienne à $2D$, sa forme est:

$$U(r) = -\frac{Z_1 Z_2}{4\pi\epsilon} \ln(r)$$

La première utilisation de cette interaction a été motivée par des considérations expérimentales.

Saint Jean *et al* ont constaté que, lorsque des systèmes chargés en interaction ne sont pas assimilés à des charges ponctuelles, alors, l'interaction varie en fonction du logarithme de la distance [50].

Ce potentiel présente un intérêt particulier pour nous, les grains de poussières sont si massifs, caractérisés par un rayon $r \simeq \mu m$, qu'on se pose des questions sur la validité de l'approximation ponctuelle. (on les assimile à des charges ponctuelles).

3.2.3 Potentiel de Yukawa

Une analyse plus fine fait apparaître des corrélations de position entre les grains poussiéreux, les électrons et les ions, proposée par Debye dans la théorie des électrolytes. En effet, la présence de grain de poussière, va attirer les électrons ou les ions. La concentration de ces particules autour d'un grain agit comme un écran, faisant en sorte que le potentiel d'une charge quelconque du plasma n'est plus ressenti au-delà d'une distance de l'ordre de λ_D , longueur de Debye. Il a été montré, par la résolution de l'équation de Poisson que, le potentiel électrostatique d'un grain dans un plasma à une distance r est donné par :

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

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

Calcul du potentiel électrique autour d'une charge dans un plasma poussiéreux

Soit un grain de poussière quelconque de charge q , entouré d'un nuage d'électrons et d'ions. Le potentiel autour de ce grain, dû à toutes les charges, sera un potentiel de Coulomb avec écran. Le potentiel électrique $\phi(r)$ obéit à l'équation de Poisson [51].

$$\nabla^2 \phi = 4\pi(en_e - en_i - qn) \quad (3.1)$$

où n_e , n_i et n sont respectivement, densité des électrons, des ions et des grains, q la charge des grains. On suppose pour cela que l'on a une situation d'équilibre thermodynamique. La densité des ions et des électrons est alors donnée par la distribution de Boltzmann, en admettant que les températures électronique T_e et ionique T_i sont différentes:

$$n_e = n_{e0} \exp\left(\frac{e\phi}{T_e}\right) \quad (3.2)$$

$$n_i = n_{i0} \exp\left(-\frac{e\phi}{T_i}\right) \quad (3.3)$$

où n_{e0} et n_{i0} sont respectivement, densité des électrons et des ions à l'équilibre. On suppose que la densité des grains est partout la même, la densité des grains se déduit de la relation d'équilibre :

$$qn = q_0 n_0 = en_{e0} - en_{i0} \quad (3.4)$$

En insérant les expressions (3.2),et (3.4) dans l'équation de Poisson, on obtient:

$$\nabla^2 \phi = 4\pi en_{e0} \left(\exp\left(\frac{e\phi}{T_e}\right) - 1\right) - en_{i0} \left(\exp\left(-\frac{e\phi}{T_i}\right) - 1\right) \quad (3.5)$$

L'équation (3.5) est une équation non-linéaire . Pour trouver une solution analytique, nous allons supposer que :

$$\frac{e\phi}{T_e} \ll 1 \text{ et } \frac{e\phi}{T_i} \ll 1 \quad (3.6)$$

ce qui nous permet de linéariser (3.5) en développant les exponentielles en série de Taylor, on obtient :

$$\nabla^2 \phi = 4\pi \left\{ \frac{e^2 n_{e0}}{T_e} - \frac{e^2 n_{i0}}{T_i} \right\} \phi \quad (3.7)$$

la quantité $\frac{T_j}{4\pi e^2 n_{j0}}$, a la dimension d'une longueur au carré, c'est la longueur d'onde de Debye de l'espèce j (j = i (ion) ,e(électron)) . D'où la longueur d'onde de Debye pour le grain de poussière est :

$$\lambda_D = \frac{\lambda_{De} \lambda_{Di}}{\sqrt{\lambda_{De}^2 + \lambda_{Di}^2}} \quad (3.8)$$

L'expression de l'équation (3.7) devient

$$\nabla^2 \phi = \lambda_D \phi \quad (3.9)$$

La solution de l'équation (3.9) est:

$$\phi(r) = A \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) + B \exp\left(\frac{r}{\lambda_D}\right) \quad (3.10)$$

Pour $r \rightarrow \infty$, $\phi(r)$ doit rester finie ce qui implique que $B = 0$. Pour $r \rightarrow 0$, $\phi(r) = \frac{Z}{4\pi\epsilon r}$ qui est le potentiel Coulombien d'une charge isolée. Cette dernière condition implique que $A = \frac{Z}{4\pi\epsilon r}$, L'expression du potentiel $\phi(r)$ s'écrit :

$$\phi(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon r} \exp(-kr) \quad (3.11)$$

avec $k = \frac{1}{\lambda_D}$, la constante d'écrantage.

3.2.4 Représentation graphique des trois potentiels

Généralement quand on compare les potentiels d'interaction on les trace en fonction de la distance radiale, fig (3.1).

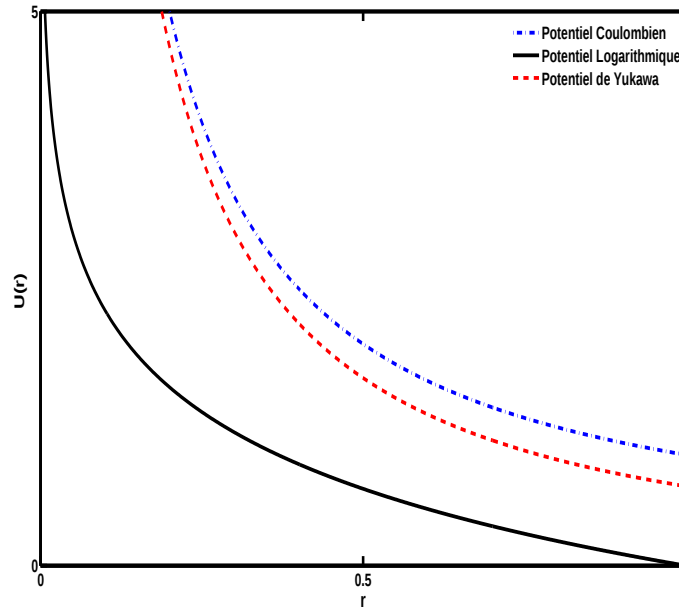


FIG. 3.1 – Évolution de potentiel du système en fonction de la distance radiale

Une comparaison rigoureuse nécessite une renormalisation dans l'échelle des distances. Ce qui permet de ramener les potentiels d'interaction au même repère fig (3.2).

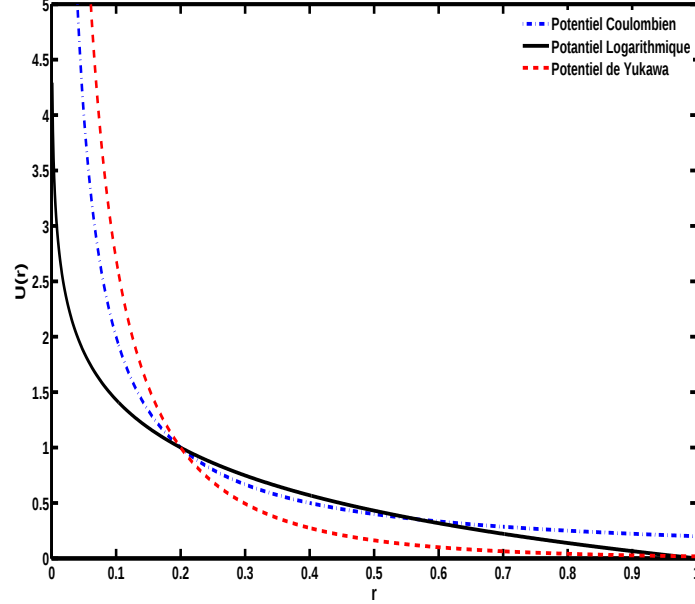


FIG. 3.2 – Évolution de potentiel du système en fonction de la distance radiale normalisée

On remarque le même profil pour les trois potentiels (décroissants), tel que la portée de l'interaction logarithmique se situe entre l'interaction Coulombienne et l'interaction de Yukawa.

Le rôle réel de l'effet d'écran est nettement visible sur le profil du potentiel de Yukawa, la décroissance est plus rapide. On peut s'attendre pour un certain paramètre d'effet d'écran, que le potentiel de Yukawa approche le potentiel logarithmique.

3.3 Détermination des configurations les plus stables à partir de la simulation de Monte Carlo

la difficulté de définir la structure optimale des grains de poussière dans un plasma, réside dans le fait qu'un grand nombre de paramètres sont à prendre en compte. Essayer

toutes les combinaisons ou presque, nécessite de passer par autant de réalisations technologiques et des processus complexes, longs et coûteux. Afin de réduire au minimum les coûts, les différentes configurations sont simulées numériquement par des méthodes appropriées. La méthode de Monte Carlo est l'une des méthodes offrant la possibilité de reproduire quasi fidèlement les divers phénomènes microscopiques.

Avant d'aborder la méthode de simulation elle-même, il est nécessaire de présenter le modèle physique étudié, ainsi que les divers cas applicables par la simulation. Les différents cas possibles qu'on va simuler, peuvent être classés par rapport à leur potentiel d'interaction entre particules et leur potentiel de confinement. Nous nous intéresserons essentiellement aux trois potentiels d'interaction (Coulombien, logarithmique et Yukawa), et un potentiel de confinement parabolique.

Le modèle considéré s'appuie essentiellement sur l'interaction entre les particules, qui régit le comportement des grains. L'énergie du système peut être décrite par l'Hamiltonien:

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

$$H = \sum_{i=0}^N \frac{1}{2} m (\omega_{0x}^2 x_i^2 + \omega_{0y}^2 y_i^2) + \sum_{i \neq j}^N \frac{(Ze)^2}{4\pi\epsilon r_{ij}} \quad (3.12)$$

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

$$H = \sum_{i=0}^N \frac{1}{2} m (\omega_{0x}^2 x_i^2 + \omega_{0y}^2 y_i^2) + \sum_{i \neq j}^N \frac{(Ze)^2}{4\pi\epsilon r_{ij}} \exp\left(-\frac{r_{ij}}{\lambda_D}\right) \quad (3.13)$$

- Energie du système dans le cas du potentiel Logarithmique:

$$H = \sum_{i=0}^N \frac{1}{2} m (\omega_{0x}^2 x_i^2 + \omega_{0y}^2 y_i^2) - \sum_{i \neq j}^N \frac{(Ze)^2}{4\pi\epsilon} \ln(r_{ij}) \quad (3.14)$$

Les configurations d'équilibre des systèmes ont été calculées numériquement à partir des énergies du système que nous avons déterminé. L'énergie normalisée du système est donnée par :

- Energie normalisée dans le cas du potentiel de Coulomb : après le changement de variables suivant : $H = E_0 \tilde{H}$ et $r = r_0 \tilde{r}$ l'expression de l'équation (3.12) devient :

$$\tilde{H} = \frac{(Ze)^2}{4\pi\epsilon E_0 r_0} \left[\sum_{i=0}^N \frac{m\omega_{0y}^2}{2(Ze)^2} (\alpha x_i^2 + y_i^2) r_0^3 + \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{\tilde{r}_i - \tilde{r}_j} \right] \quad (3.15)$$

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

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

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

$$\tilde{H} = \sum_{i=0}^N (\alpha \tilde{x}_i^2 + \tilde{y}_i^2) + \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{\tilde{r}_i - \tilde{r}_j} \quad (3.16)$$

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

$$\tilde{H} = \sum_{i=0}^N (\alpha \tilde{x}_i^2 + \tilde{y}_i^2) + \sum_{i \neq j}^N \frac{\exp(-k|\tilde{r}_i - \tilde{r}_j|)}{|\tilde{r}_i - \tilde{r}_j|} \quad (3.17)$$

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

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

$$H = \sum_{i=0}^N (\alpha x_i^2 + y_i^2) - \sum_{i \neq j}^N \ln(|\tilde{r}_i - \tilde{r}_j|) \quad (3.18)$$

Ces énergies ont été minimisées par la méthode de Monte-Carlo, en partant d'un large ensemble de conditions initiales différentes afin de trouver tous les minima locaux, puis le minimum global.

3.3.1 Principe de la méthode de Monte Carlo

L'algorithme de cette méthode est basé sur le principe de tirage aléatoire de nombres. Ces nombres aléatoires sont appliqués pour vérifier une loi. En répétant l'opération un nombre de fois suffisant, nous obtenons une convergence des propriétés globales.

L'un des plus simples exemples d'utilisation de la méthode de Monte Carlo consiste à générer des points aléatoires sur un plan (soit deux nombres aléatoires pour chaque point). Le plan en question est un cercle de rayon R circonscrit à l'intérieur d'un carré de côté $2R$. Le rapport du nombre de points dans le cercle sur celui du carré donne le nombre $\frac{\pi}{4}$. C'est la méthode la plus simple et la plus efficace pour calculer π .

3.3.2 Valeurs moyennes et méthode Monte Carlo

Dans le cadre de la physique statistique, un état microscopique d'un système macroscopique constitué de N particules est décrit par $6N$ degrés de liberté: $3N$ pour les positions et $3N$ pour les impulsions. Au cours du temps, le système transite d'un micro-état à un autre. Les propriétés macroscopiques à l'équilibre thermodynamique sont le résultat d'une moyenne sur tous les états microscopiques occupés par le système. Ce nombre important rend impossible le calcul direct de ces moyennes. Une solution donnée par l'approche Monte Carlo consiste à évaluer les moyennes statistiques seulement sur les micro-états qui ont une contribution significative dans la moyenne. Elle se calcule à l'aide de la fonction de distribution dans l'espace des phases pour un système classique et à l'aide de l'opérateur densité pour un système quantique.

Pour caractériser l'état macroscopique de notre système classique nous devons calculer des quantités de la forme:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

où la sommation continue a été remplacée par son approximation aux différences finies. Dans l'approche Monte Carlo, les variables x_i sont choisies aléatoirement et indépendamment à partir d'une distribution uniforme dans l'intervalle $[a,b]$: $x_i = a + (b-a)\xi_i$ et

$i = 1, N$ Le résultat noté I_N est une variable aléatoire distribuée autour de I . L'erreur statistique ΔI par rapport à la solution exacte est proportionnelle à $1/\sqrt{N}$.

La valeur moyenne de l'énergie d'un système classique dans l'ensemble canonique s'écrit:

$$\langle E(t) \rangle = \sum_C p(C) E(C) = \frac{\sum_C E(C) e^{E(C)/K_B T}}{Z} \quad (3.19)$$

avec $Z = \sum_C e^{E(C)/K_B T}$ la fonction de partition et C une configuration possible du système.

La solution de l'équation précédente consiste à construire une chaîne dite de Markov de configurations à partir d'une configuration de départ arbitraire $C_0 (C_0 \rightarrow C_1 \cdots C_n \rightarrow C_{n+1})$

3.3.3 Chaîne de Markov et probabilité de transition

Dans une chaîne de Markov, une configuration C_{n+1} à un temps $t + \Delta t$ ne dépend que de la configuration C_n à l'instant t et non de celles aux temps précédents. Soit $P(A, t)$ la probabilité pour que le système soit à l'instant t dans la configuration A . Un processus de Markov est caractérisé par:

$$\frac{dP(A, t)}{dt} = \sum_B [W_{B \rightarrow A} P(B, t) - W_{A \rightarrow B} P(A, t)]$$

où $W_{B \rightarrow A}$ dénote la probabilité de transition par unité de temps de la configuration B vers la configuration A . Après un temps très grand la condition $\lim_{t \rightarrow \infty} P(A, t) = P(A)$ doit être réalisée. Une condition suffisante assurant cet équilibre asymptotique est:

$$W_{B \rightarrow A} P(B) = W_{A \rightarrow B} P(A) \quad (3.20)$$

Plus précisément :

$$\frac{W_{A \rightarrow B}}{W_{B \rightarrow A}} = \frac{P(B)}{P(A)} = e^{-\Delta E / K_B T} \quad (3.21)$$

avec $\Delta E = E(B) - E(A)$. Une indétermination subsiste toutefois dans le choix de la matrice de transition W qui doit satisfaire l'équation précédente. Nous utilisons dans cette étude l'algorithme de Métropolis décrit dans le paragraphe suivant.

3.3.4 Algorithme de Métropolis

Une configuration initiale C_0 est caractérisée par une énergie interne $E(C_0)$. En utilisant un mécanisme de transition (échanges chimiques, déplacements, dilatation, compression) une nouvelle configuration C'_1 d'énergie $E(C'_1)$ est générée. Si la différence d'énergie entre ces deux configurations $\Delta E = E(C'_1) - E(C_0)$ est négative, alors la configuration C'_1 est acceptée et devient la nouvelle configuration du système. Sinon la configuration C'_1 est acceptée avec une probabilité définie par $\frac{P(C'_1)}{P(C_0)} = e^{-\Delta E/K_B T}$. Pour cela, un nombre aléatoire ξ est désigné dans l'intervalle $[0,1]$, Si ξ est inférieur à $e^{-\Delta E/K_B T}$ la configuration est retenue et $C_1 = C'_1$ Sinon, elle est refusée et $C'_1 = C_0$. Chaque test d'acceptation ou de refus décrit un processus Monte Carlo. Si le système est constitué de N particules alors une série de N processus Monte Carlo constitue un pas Monte Carlo, généralement noté **MCS** (Monte Carlo Step).

Pour accélérer la convergence et réduire le temps de calcul à l'algorithme de Monte Carlo, on implémente un autre algorithme dit de Newton-Raphson, qui permet de trouver le minimum de l'Hamiltonien en l'approchant par son développement de Taylor au deuxième degré (approximation quadratique)[52] suivant:

$$H = H(r_{\alpha,i}^n) - \sum_i \sum_{\alpha} H_{\alpha,i}(r_{\alpha,i} - r_{\alpha,i}^n) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta} H_{\alpha\beta,ij}(r_{\alpha,i} - r_{\alpha,i}^n)(r_{\beta,j} - r_{\beta,j}^n) \quad (3.22)$$

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

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

En résumé, le principe de la simulation est le suivant :

1. On donne une configuration aléatoire et on calcule l'énergie E .
2. On fait des déplacements aléatoires pour trouver une nouvelle configuration.
3. On calcule l'énergie associée à la nouvelle configuration E' . Cette configuration est acceptée avec un critère de Métropolis (ΔE), sinon la configuration est rejetée et l'ancienne configuration est gardée.
4. Les positions de la configuration, sont introduites dans l'Hamilton comme une configuration initiale pour la méthode de Newton-Raphson afin d'obtenir le minimum d'énergie.

Ce schéma itératif est reproduit jusqu'à un critère d'arrêt, qui dépend de la précision requise. Nous avons représenté sur la figure (3.3), l'évolution de l'énergie du système au cours d'un pas correspondant à **MCS** (Monte Carlo step) de l'énergie totale d'un système de 15 particules. Nous voyons bien apparaître une décroissance, suivie d'un plateau indiquant que l'énergie est minimale. C'est un état métastable. Puis un autre plateau de saturation indiquant que l'énergie minimale est atteinte. La configuration d'énergie minimale est celle apparue le plus longtemps.

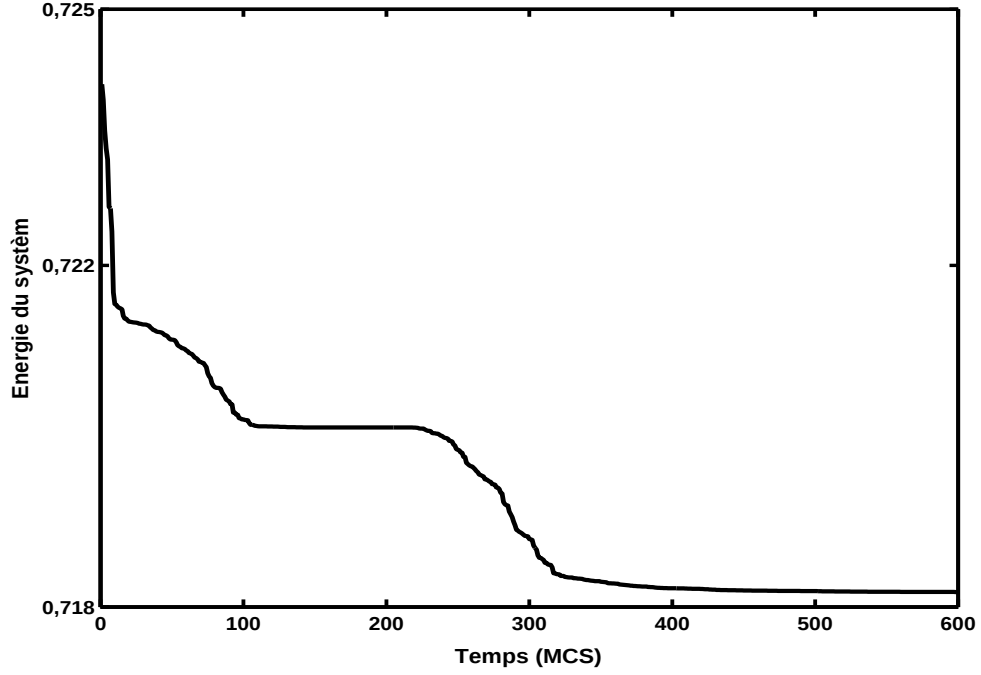


FIG. 3.3 – Évolution de l'énergie du système en fonction du pas MC

3.3.5 Résultats et Discussions

Nous allons présenter quelques résultats des simulations Monte Carlo. On va d'abord s'intéresser au problème le plus simple: celui de l'effet du potentiel d'interaction sur la configuration la plus stable à une température très basse pour des systèmes constitués d'un petit nombre de grains ($N < 30$), confinés circulairement ($\alpha = 1$), interagissant par le biais de potentiel de Yukawa, Coulombien ou Logarithmique.

Les configurations obtenues pour un nombre de particules allant de 10, 20, 30 sont représentées sur la figure (3.4).

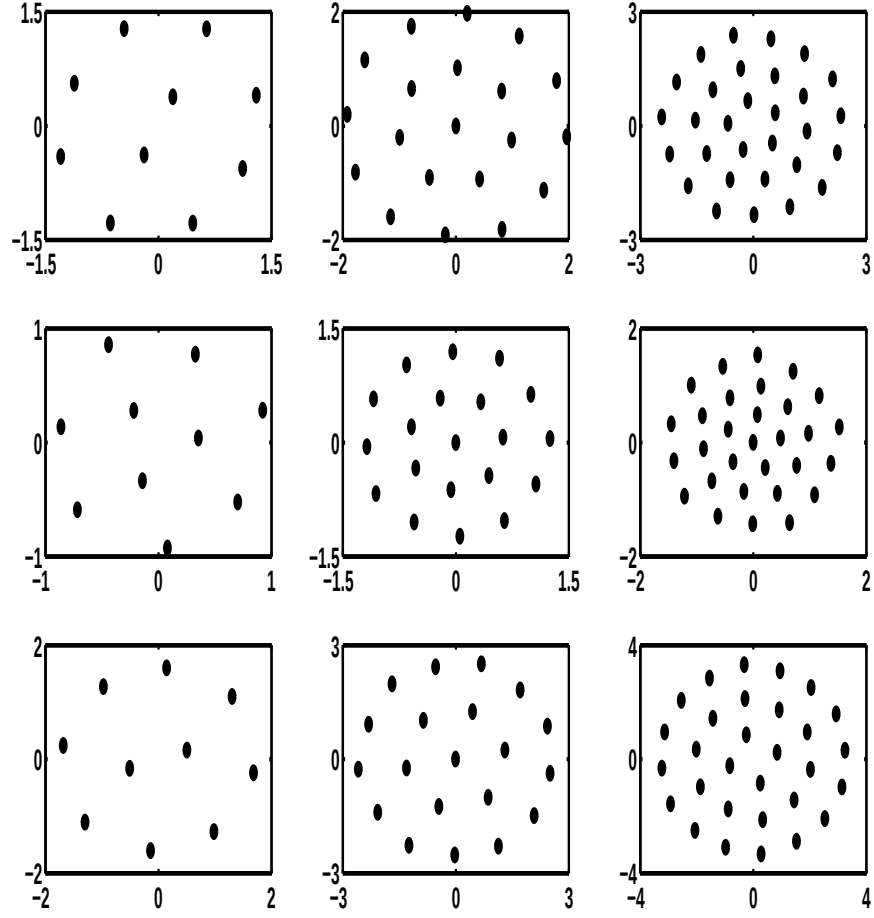


FIG. 3.4 – *Etats fondamentaux des grains de poussière pour $N=10, 20, 30$ (première ligne avec le potentiel Coulombien, deuxième ligne Potentiel de Yukawa et la troisième ligne potentiel Logarithmique)*

Les configurations d'équilibre peuvent être décrites comme une succession de couches de grains, qui seront désignées par la notation $(N_0, N_1, N_2, \dots)$, où N_i est le nombre de grains situés sur la i -ème couche, comptée à partir du centre. Cette structure en couches se retrouve quelle que soit l'interaction ; elle résulte du compromis réalisé entre la symétrie circulaire due au confinement et le potentiel d'interaction de l'ensemble des particules qui s'organiseront en un réseau symétrique [53].

Généralement dans les trois cas, les configurations sont définies essentiellement par le nombre de particules sur chacune des couches. Pour $N = 5$ particules, l'état stable consiste en une seule couronne. Entre $N = 6$ et $N = 15$ les configurations se placent dans deux couches, de $N = 16$ Jusqu'à $N = 29$, les configurations présentent trois couronnes bien identifiées. Au delà de 30 particules, les configurations présentent 4 couronnes.

À la différence du modèle atomique dans lequel les nouveaux électrons insérés sont présents seulement sur la couche externe, les particules poussiéreuses peuvent occuper n'importe quel couche si elle n'est pas saturée. Par exemple pour $N=18$ (voir tableau 3.1), on a la configuration suivante (1, 6, 11), l'addition d'une nouvelle particule à la configuration précédente c'est-à-dire $N=19$, la configuration devient (1, 7, 11). On remarque bien que la particule est insérée sur la couche du milieu (interne), comme on peut conclure qu'une nouvelle couche peut également être produite malgré que toutes les couches existantes ne soient pas pleines. Les règles de remplissage des couches sont les suivantes : la première couche en comptant du centre ne dépasse pas généralement cinq particules, la deuxième couche ne dépasse jamais douze particules, la troisième couche ne dépasse jamais seize particules.

Ainsi le résultat bien connu a été retrouvé. Les structures fortement couplées s'organisent dans des couches qui dépendent du nombre de particules du système. Les configurations obtenues représentent l'équivalent d'un tableau de Mendeleïev [54].

3.3.6 Etude comparative

Afin de valider complètement l'ensemble de nos calculs, notamment celui de la nature de l'interaction inter-particules nous allons comparer les configurations obtenues de l'état fondamental pour les systèmes de 5 à 30 particules avec d'autres configurations obtenues numériquement, basées sur une interaction logarithmique [55], une interaction coulombienne écrantée [55], une interaction coulombienne [54][56], avec des résultats expérimentaux [55][57], L'ensemble de ces configurations est reporté dans le tableau 3.1.

Nombre de particules	résultats de notre simulation			résultats des autres simulations			résultat expérimental [57]
	<i>Potentiel Coulombien</i>	<i>Potentiel Yukawa</i>	<i>Potentiel Logarithmique</i>	<i>Potentiel Coulombien [54]</i>	<i>Potentiel Yukawa [55]</i>	<i>Potentiel Logarithmique [55]</i>	
5	5	5	5	5	5	5	5
6	1, 5	1, 5	1, 5	1, 5	1, 5	1, 5	1, 5
7	1, 6	1, 6	1, 6	1, 6	1, 6	1, 6	1, 6
8	1, 7	1, 7	1, 7	1, 7	1, 7	1, 7	1, 7
9	2, 7	2, 7	1, 8	2, 7	2, 7	1, 8	1, 8
10	2, 8	3, 7	2, 8	2, 8	2, 8	2, 8	2, 8
11	3, 8	3, 8	3, 8	3, 8	3, 8	3, 8	3, 8
12	3, 9	4, 8	3, 9	3, 9	3, 9	3, 9	3, 9
13	4, 9	4, 9	4, 9	4, 9	4, 9	4, 9	4, 9
14	4, 10	4, 10	4, 10	4, 10	4, 10	4, 10	4, 10
15	5, 10	5, 10	4, 11	5, 10	5, 10	4, 11	4, 11
16	1, 5, 10	1, 5, 10	5, 11	1, 5, 10	1, 5, 10	5, 11	5, 11
17	1, 6, 10	1, 6, 10	1, 5, 11	1, 6, 10	1, 6, 10	1, 5, 11	1, 5, 11
18	1, 6, 11	1, 6, 11	1, 6, 11	1, 6, 11	1, 6, 11	1, 6, 11	1, 6, 11
19	1, 6, 12	1, 7, 11	1, 6, 12	1, 6, 12	1, 6, 12	1, 6, 12	1, 6, 12
20	1, 7, 12	1, 7, 12	1, 6, 13	1, 7, 12	1, 7, 12	1, 7, 12	1, 6, 13
21	1, 7, 13	2, 7, 12	1, 7, 13	1, 7, 13	2, 7, 12	1, 7, 13	1, 7, 13
22	2, 8, 12	2, 8, 12	1, 7, 14	2, 8, 12	2, 8, 12	1, 7, 14	1, 7, 14
23	2, 8, 13	3, 8, 12	1, 8, 14	2, 8, 13	3, 8, 12	1, 8, 14	2, 8, 13
24	3, 8, 13	3, 9, 12	2, 8, 14	3, 8, 13	3, 8, 13	2, 8, 14	2, 8, 14
25	3, 9, 13	3, 9, 13	3, 8, 14	3, 9, 13	3, 9, 13	3, 8, 14	3, 8, 14
26	3, 9, 14	4, 9, 13	3, 9, 14	3, 9, 14	4, 9, 13	3, 9, 14	3, 9, 14
27	4, 9, 14	4, 10, 13	3, 9, 15	4, 9, 14	4, 9, 14	3, 9, 15	3, 9, 15
28	4, 10, 14	4, 10, 14	4, 10, 14	4, 10, 14	4, 10, 14	4, 9, 15	3, 9, 16
29	4, 10, 15	5, 10, 14	4, 9, 16	5, 10, 14	5, 10, 14	5, 10, 14	4, 9, 16
30	5, 10, 15	1, 5, 10, 14	4, 10, 16	5, 10, 15	5, 10, 15	4, 10, 15	4, 9, 17

TAB. 3.1 – Configurations de l'état fondamental pour des systèmes de 5 à 30 particules confinées circulairement. Les trois premières colonnes : résultats de notre simulation, les trois suivantes : résultats d'autres simulations, et la dernière colonne : observations expérimentales

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

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

Dans l'étude de Lai *et al* sur l'effet du potentiel Coulombien écranté (Yukawa), les auteurs ont fait varier la longueur d'écrantage et ont montré que les configurations ne sont pas modifiées pour une longueur d'écran restant dans les ordres de grandeur de la distance entre particules, de plus, lorsque cette longueur diminue fortement, l'importance de la force de confinement grandit, les particules se rapprochent du centre [55].

Par ailleurs, une modification dans le paramètre de l'excentricité de la force de confinement peut induire une modification de la configuration d'énergie minimale voir figure (3.5).

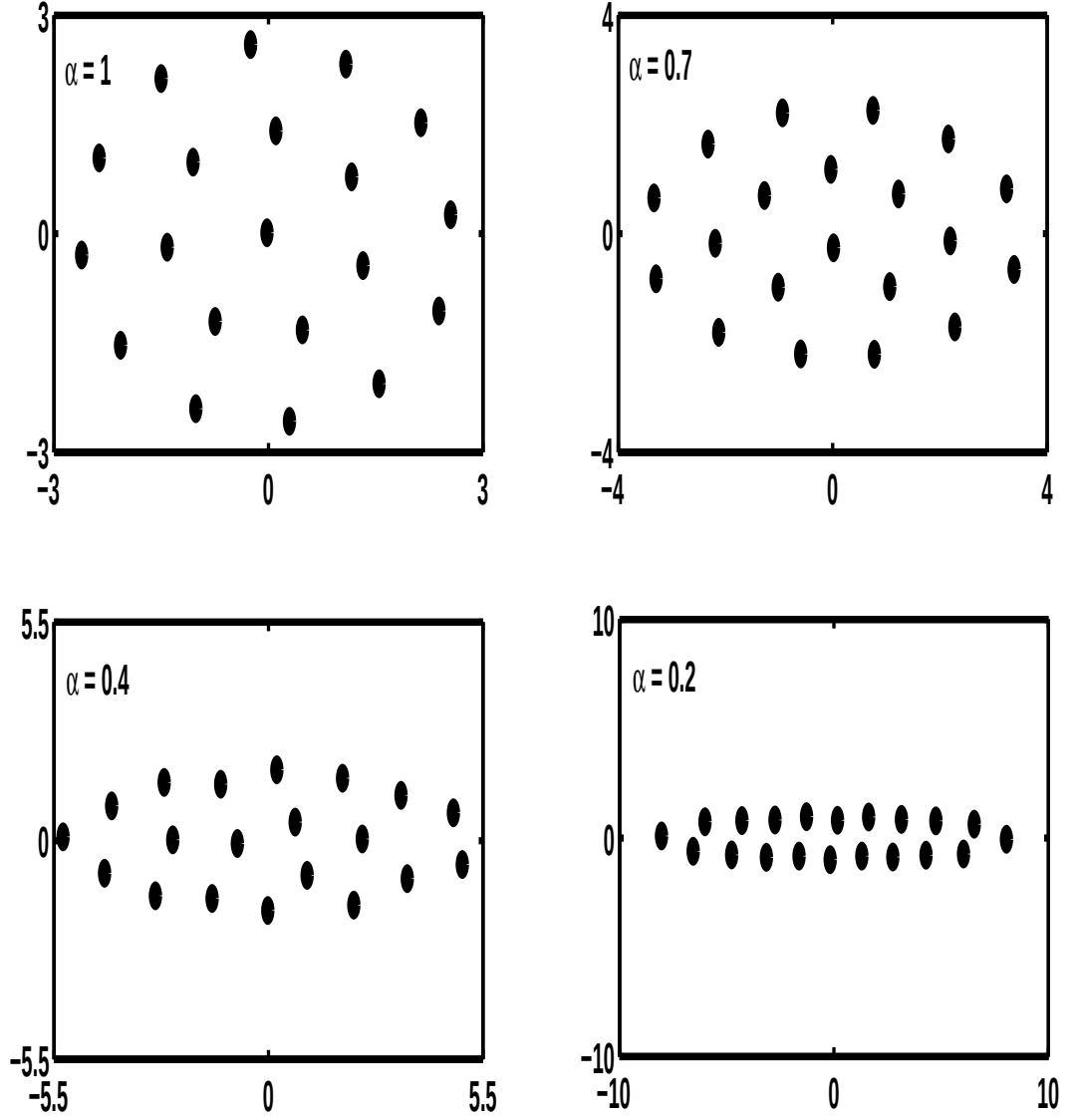


FIG. 3.5 – *Etats fondamentaux des grains poussiéreux pour $N = 20$, dans le cas du potentiel Logarithmique en fonction du paramètre de l'excentricité ($\alpha = 1, 0.7, 0.4, 0.2$)*

En analysant le tableau (3.1), il apparaît clairement que le résultat obtenu par nos simulations, est semblable à celui obtenu par les autres simulations et généralement à celui observé expérimentalement, à l'exception des configuration correspondant aux cas $N = 9$,

15, 16, 20, 22, 24, 27 jusqu'à 30 pour le potentiel Coulombien, et $N = 9, 10, 12, 15, 16, 20, 21, 22$ jusqu'à $N = 30$ pour le potentiel de Yukawa, qui ne sont pas les mêmes concernant la distribution des particules sur les couches. Pour le potentiel Logarithmique ils prédisent des configurations très semblables à celles obtenues par l'expérience sauf pour les cas $N = 23, 28, 30$. On explique cette différence, d'abord expérimentalement, par le fait qu'il est possible que les contraintes ne permettent pas d'explorer parfaitement l'ensemble des différents états. Numériquement, on a supposé que l'interaction entre les grains poussiéreux était une interaction paire, c'est-à-dire que des forces d'autres natures ont été négligées. L'augmentation du nombre de grains induit une augmentation du nombre de minima locaux, et rend la détermination de l'état fondamental plus hasardeuse.

Par conséquent, les différences dans les configurations d'énergie minimale que l'on peut observer à la lecture du tableau 3.1, ne proviennent pas de l'effet du confinement et ont bien pour origine la différence entre la nature des interactions entre particules, en plus, dans les travaux [55][54][57], les configurations d'équilibre ont été déterminées par différentes méthodes, par Monte Carlo dans [54] ou de dynamique moléculaire dans [55]. Bien que l'ensemble des configurations présentent les mêmes caractéristiques générales d'anneaux concentriques, des différences notables selon l'interaction apparaissent quand au remplissage des couches.

3.3.7 Fluctuation de la charge et configurations d'équilibre

Après avoir étudié l'effet des différentes interactions sur les configurations les plus stables, on ajoute l'effet de fluctuation de la charge à notre étude. L'importance des fluctuations de charge a été identifiée dès les années 80: Morfill *et al* [58], ont suggéré que les fluctuations de charge peuvent avoir une influence importante sur le transport de la poussière, notamment dans les plasmas astrophysiques.

Dans les sections précédentes, la charge des particules a été traitée comme constante. Cependant, les fluctuations aléatoires de la charge sont toujours présentes dans les plasmas poussiéreux, dues à la nature discrète des courants chargeant les grains poussiéreux.

En premier lieu nous détaillerons le modèle physique puis on présentera les différents résultats obtenus.

Modele physique

Nous nous sommes placés dans les mêmes conditions que le modèle précédent. Les courants responsables du chargement des grains de poussière sont dus en réalité à des opérations d'absorption d'électrons et d'ions ou d'émission, ce qui implique la variation de la charge autour de sa valeur moyenne, et qui est donnée par [59] :

$$Z_i^l = \langle Z_0 \rangle + \Delta Z_i^l \quad (3.23)$$

où Z_i^l est la charge de la i ème particule à l'instant l , $\langle Z_0 \rangle$ est la charge moyenne du grain (charge à l'équilibre), et ΔZ_i^l est l'amplitude de la fluctuation de la charge, tel que $|\langle Z_0 \rangle| > \Delta Z_i^l$. Afin d'inclure la fluctuation de charge des particules de poussière dans l'Hamiltonien d'équations (3.16, 3.17) et l'Eq (3.18) doit être modifiée comme suit:

- Energie normalisée dans le cas du potentiel de Coulomb :

$$H = \sum_{i=0}^N (\alpha x_i^2 + y_i^2) + \sum_{i \neq j}^N \left(1 + \frac{\Delta Z_i^l}{Z_0}\right) \left(1 + \frac{\Delta Z_j^l}{Z_0}\right) \frac{1}{\tilde{r}_i - \tilde{r}_j} \quad (3.24)$$

- Energie normalisée dans le cas du potentiel de Yukawa :

$$H = \sum_{i=0}^N (\alpha x_i^2 + y_i^2) + \sum_{i \neq j}^N \left(1 + \frac{\Delta Z_i^l}{Z_0}\right) \left(1 + \frac{\Delta Z_j^l}{Z_0}\right) \frac{\exp(-k|\tilde{r}_i - \tilde{r}_j|)}{|\tilde{r}_i - \tilde{r}_j|} \quad (3.25)$$

- Energie normalisée dans le cas du potentiel Logarithmique :

$$H = \sum_{i=0}^N (\alpha x_i^2 + y_i^2) - \sum_{i \neq j}^N \left(1 + \frac{\Delta Z_i^l}{Z_0}\right) \left(1 + \frac{\Delta Z_j^l}{Z_0}\right) \ln(|\tilde{r}_i - \tilde{r}_j|) \quad (3.26)$$

Description du modèle

On suppose que les grains poussiéreux chargés, ont un rayon $a \ll \lambda_D \ll \lambda_{mfp}$, ou λ_D est la longueur d'écrantage, et λ_{mfp} est le libre parcours moyen, cette condition nous

permet d'employer la théorie d'orbite limite (OML), et décrire les courants sous la forme suivante [51] :

$$I^- = I_e = -e\pi a^2 n_e \left(\frac{8T_e}{\pi m_e} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{ze^2}{aT_e}\right) \quad (3.27)$$

$$I^+ = I_i = e\pi a^2 n_i \left(\frac{8T_i}{\pi m_i} \right)^{1/2} \left(1 - \frac{ze^2}{aT_i} \right) \quad (3.28)$$

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

$$\frac{dz}{dt} = I = \sum I^+ + I^- \quad (3.29)$$

En raison de la fluctuation de charge, la charge d'équilibre peut être déterminée en égalisant le membre droit de l'équation (3.29) à zéro. La charge d'un grain de poussière sera une variable dépendant du temps, $z(t) = \langle z_0 \rangle + \delta z(t)$, avec: $|\langle z_0 \rangle| \gg |\delta z(t)|$, le développement limite en premier ordre de l'équation (3.29) donne :

$$\frac{d\delta z}{dt} = \left[\frac{\partial I}{\partial z} \right]_{z=\langle z \rangle} \delta z = -\beta \delta z \quad (3.30)$$

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

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{\partial I}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} [I^+ - I^-] \\ &= \pi a^2 n_i \left(\frac{8T_i}{\pi m_i} \right)^{1/2} \tau + \pi a^2 n_e \left(\frac{8T_e}{\pi m_e} \right)^{1/2} \exp(Z) \end{aligned} \quad (3.31)$$

avec:

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

et

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

à l'équilibre:

$$I_e = I_i \quad (3.32)$$

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

d'où:

$$\beta = \pi a^2 n_i \left(\frac{8T_i}{\pi m_i} \right)^{1/2} [1 + \tau Z + \tau] \quad (3.33)$$

L'idée de Khrapak *et al* [33] , pour inclure l'effet de la nature discrète de la charge, est d'introduire dans l'équation (3.30), un terme responsable de la fluctuation, l'équation (3.30) devient :

$$\frac{d\delta z}{dt} + \beta \delta z = F(t) \quad (3.34)$$

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

$$F(t) = \sum_j \delta(t - t_j)(\pm 1)_j \quad (3.35)$$

Ce terme correspond à l'absorption des électrons ou des ions, ou à l'émission des électrons pour un temps aléatoire t_j . Le signe (+) signifie que le grain se charge positivement, par émission d'un électron ou absorption d'un ion, et pour le signe (−) que le grain se charge négativement par l'absorption d'un électron. Si on considère que les grains n'ont aucune direction privilégiée dans leur déplacement, on a $\forall t, \langle F(t) \rangle = 0$, où $\langle \rangle$ désigne une moyenne d'ensemble. Notons que l'équation (3.34) est équivalente à l'équation du mouvement de Langevin d'une particule Brownienne à une dimension, où δz est équivalent à la vitesse de la particule, et $F(t)$ est équivalent à la force Brownienne (force aléatoire), la solution de cette équation peut être écrite sous la forme :

$$\delta z(t) = \delta z(0) \exp(-\beta t) + \exp(-\beta t) \int_0^t F(\theta) \exp(\beta \theta) d\theta \quad (3.36)$$

où $\delta z(0)$ est la perturbation initiale de la charge. Pour des raisons de simplification, Khrapak *et al* ont supposé que $\delta z(0) = 0$, c'est-à-dire que la charge à $t = 0$ est constante. La valeur moyenne de la fluctuation de la charge entre deux instants différents est appelées la fonction temporelle d'autocorellation, donnée par:

$$\langle \delta z(t) \delta z(t') \rangle = \frac{1}{2t_0\beta} \exp(-\beta|t - t'|) \quad (3.37)$$

où:

$$\frac{1}{t_0} = \sum I^+ + I^- = 2I^+ = 2I^- \quad (3.38)$$

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

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

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

$$\Delta z = \alpha \sqrt{z_0} \quad (3.39)$$

avec:

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

En injectant l'équation (3.32) et (3.38) dans l'équation (3.39) on trouve :

$$\Delta z = \left[\frac{1 - \tau Z}{(1 - \tau Z + \tau) z_0} \right]^{\frac{1}{2}} \langle z_0 \rangle^{\frac{1}{2}} \quad (3.40)$$

Numériquement, la fluctuation de charge de chaque particule de poussière (i), est simulée par une valeur aléatoire δz , de sorte qu'à chaque étape (l), la charge est ajustée et donnée dans (Ref [59]):

$$\Delta z_i^{l+1} = [\Delta z_i^l + \delta z \xi](1 - \beta \Delta t) \quad (3.41)$$

avec

$$\xi = \sin(2\pi\chi_1)\sqrt{2\ln(1/\chi_2)} \quad (3.42)$$

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

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

En utilisant les paramètres des travaux expérimentaux de Tsytovich et Morfill, [60]

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

L'ensemble des configurations d'équilibre calculées numériquement à partir des énergies potentielles d'interaction que nous avons citées est reportée dans le tableau 3.2.

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

TAB. 3.2 – *Configurations de l'état fondamental avec l'effet de fluctuation de la charge*

Résultat et discussion

Les configurations d'équilibre obtenues avec l'effet de fluctuation de la charge conservent généralement la notion de succession de couches [61]. Ces résultats sont presque cohérents avec les configurations d'état fondamental sans fluctuation dans le cas de potentiel Coulombien et de Yukawa, à l'exception des configurations correspondant aux cas N=5, 9, 30 pour le potentiel Coulombien et N= 5, 15 pour le potentiel de Yukawa. Notons que l'interaction logarithmique prédit des configurations semblables à l'expérience pour un

nombre de particules très faible ($N < 11$). Pour $N > 11$, les règles générales d'occupation des grains poussiéreux sur les couches sont modifiées, cette modification induit de nouvelles configurations. Dans le cas où il n'y a aucune fluctuation de la charge, l'état stable pour $N = 5$ pour tout les cas d'interactions, consiste en une seule couronne avec cinq particules sur la même couronne, par contre l'état stable pour le même nombre avec l'effet de fluctuation consiste en une seule couronne avec une particule au centre (1,4). La nouvelle distribution est la suivante : pour $N = 5$ jusqu'à $N = 10$, les configurations présentent deux couronnes bien identifiées, entre $N = 11$ et $N = 26$, l'état stable présente trois couronnes. Au-delà de $N = 27$, les configurations présentent quatre couronnes. Les règles de remplissage sont elles aussi affectées par l'effet de la fluctuation de la charge : on a une particule en moins sur chaque couronne saturée comparé au système où il n'y a aucune fluctuation de charge, la première couche en comptant à partir du centre ne dépasse jamais quatre particules, la deuxième couche ne dépasse jamais dix particules et la troisième couche ne dépasse jamais quinze particules. Cette différence peut s'expliquer par le fait que chaque couche est caractérisée par une barrière d'énergie et que la variation de la charge peut également induire une augmentation de la température induisant une augmentation de l'énergie du système [3][59], qui peut dépasser la barrière d'énergie de la couronne. Une réorganisation de la couche est obtenue le plus souvent par le saut d'une seule particule entre deux couches, rendant l'équilibre à la couche saturée (voir figure 3.6).

Nous avons constaté qu'il y a une différence de rayon des couches entre les systèmes avec fluctuation et les systèmes sans fluctuation de la charge, cette différence est de l'ordre de 10^{-5} . On superpose deux configurations fondamentales, la première sans fluctuation et l'autre avec , nous obtenons la figure 3.7 qui met en évidence la différence orientationnelle, pour les configurations qui gardent la même occupation des particules.

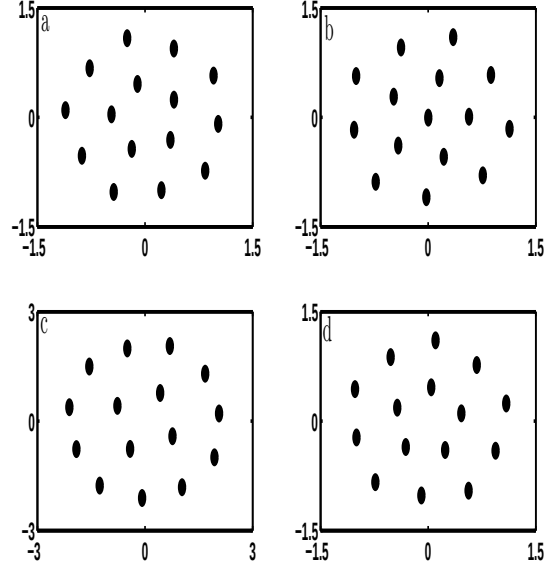


FIG. 3.6 – La configuration la plus stable pour $N = 15$ dans deux cas de potentiel, (a,b) avec potentiel Yukawa, (c,d) avec potentiel Logarithmique, sans fluctuation (a,c), et avec fluctuation (b,d).

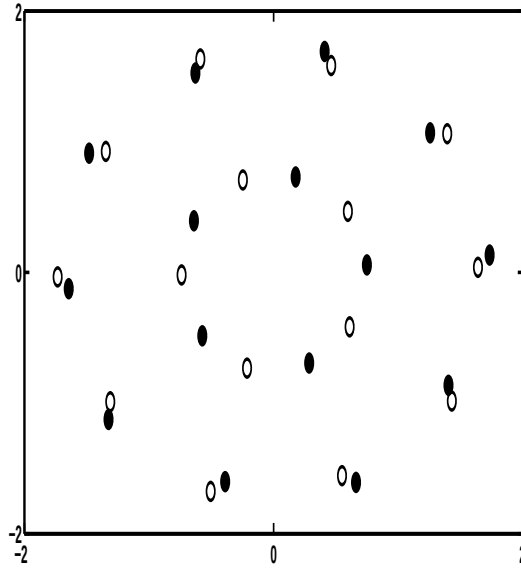


FIG. 3.7 – Effet de la fluctuation de charge sur la configuration la plus stable dans le cas d'interaction Coulombien, • sans fluctuation de la charge, ◦ avec fluctuation (la rotation des particules).

Chapitre 4

Transition de phase

À basse température, les systèmes bidimensionnels fortement couplés, présentent des configurations ordonnées : un cristal souvent hexagonal pour les grands systèmes, et des structures en couches pour les petits systèmes confinés circulairement. Au fur et à mesure que la température augmente, elle cause des remises en ordre de la structure de l'état fondamental. Une telle remise est appelée : transition structurale, et peut être considérée comme une transition de phase de premier ordre. Pour des températures critiques ces systèmes présentent un désordre induit par les fluctuations thermiques des particules, cette phase considérée comme un deuxième ordre, est : la fusion.

Dans cette section, nous nous intéresserons à l'étude du comportement des grains de poussière à partir de la phase organisée jusqu'au désordre, en nous axant plus particulièrement sur le rôle joué par la géométrie de l'environnement de chaque particule dans l'établissement de ce désordre.

Une transition de phase ne peut avoir lieu tant qu'une phase peut rester stable dans des conditions bien définies, de façon générale, une transition se manifeste par une série de phénomènes physiques qui lui sont associés [62]. Par ailleurs, on peut déterminer l'ordre de ces transitions de phase par des singularités dans les grandeurs macroscopiques, par exemple à l'aide de courbes illustrant la variation de l'énergie d'un état fondamental $E(T)$, la discontinuité dans la courbe correspond à la transition de phase de $i^{\text{ème}}$ - ordre.

Une autre manière de déterminer l'ordre de la transition de phase est : les méthodes géométriques. Parmi ces méthodes :

Diagramme de Voronoï

Le diagramme de Voronoï est utilisé depuis très longtemps et dans des domaines très variés comme la cristallographie ou la géographie. Les principales étapes qui mènent à la construction de ce diagramme sont : premièrement, on prend deux points adjacents et on trace la médiatrice de ces deux points. Deuxième étape on prend un troisième point et on répète la première étape. La figure 4.1 montre l'analyse d'une structure organisée par le diagramme de voronoï. D'une manière générale, l'objectif de cette analyse est de caractériser l'organisation spatiale d'un ensemble de points.

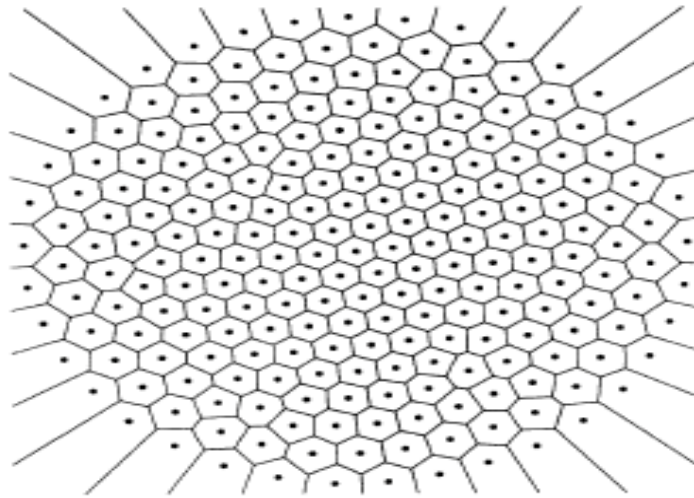


FIG. 4.1 – *Configuration fondamentale analysée par la méthode de Voronoï [54]*

Fonction de corrélation

La fonction de corrélation est une fonction plus précise permettant de mesurer l'ordre de translation de la structure à partir des positions des poussières [13], cette fonction notée $g(r)$ est proportionnelle à la probabilité de trouver deux grains de poussière séparés

d'une distance r à Δr près, cette fonction est donnée par :

$$g(r) = \delta(r)\delta(r + \Delta(r))$$

Une autre fonction mesure aussi l'ordre en orientation, c'est la fonction de corrélation orientationnelle temporelle $g_6(t)$ et définie par :

$$g_6(t) = \left| \left\langle e^{i6(\theta(t+t_0) - \theta(t_0))} \right\rangle \right|$$

où θ , est l'angle du lien entre deux particules. $\langle \rangle$ désigne une moyenne sur tous les liens du système.

Dans les grands systèmes ayant une symétrie hexagonale, $g_6(t)$ tend vers une constante proche de 1 aux basses températures : l'ensemble est alors ordonné. Au delà d'une certaine température T , la fonction décroît exponentiellement avec le temps, indiquant que le système est dans une phase liquide.

Ces fonctions permettent de caractériser l'état de la structure des grains de poussière et de définir si les grains poussiéreux sont en phase gazeuse, liquide ou solide.

La théorie de KTHNY

Dans le cas des cristaux bidimensionnels la théorie qui décrit les transitions de phase entre les états est la théorie KTHNY du nom de ses auteurs, développée dans les années 70 à partir des travaux de Kosterlitz, Thouless, Halperin, Nelson et Young, le modèle KTHNY propose une description de fusion à 2D [63][64][65].

Dans le cadre de la théorie KTHNY, la fusion se démarque d'une transition de premier ordre telle qu'elle est observée à trois dimensions. Elle est supposée se dérouler en deux temps lorsque la température augmente : tout d'abord, l'ordre translationnel est perdu, alors que le système garde un quasi-ordre orientationnel, ce jusqu'à une seconde transition après laquelle le système perd aussi son ordre orientationnel et se comporte comme un liquide isotrope.

Dans notre cas, les calculs de $g(r)$, surtout de $g_6(t)$ et la théorie KTHNY s'avèrent difficiles

et donnent des résultats non fiables, car pour utiliser ces méthode pour décrire les phases qui caractérisent un système, il faut étudier au moins plusieurs centaines de particules pour pouvoir garantir une étude statistique fiable [66].

Déplacement quadratique moyen

Dans les petits systèmes confinés circulairement, les températures de transition sont liées aux fluctuations des positions des particules et sont déterminées par l'équation (4.1), en calculant le déplacement quadratique moyen des particules. Cette méthode permet d'établir que la structure en couches devient de moins en moins marquée lorsque la température augmente. Ce désordre survient en deux temps bien distincts. À faible température, chaque particule est excitée thermiquement; une première transition, apparaît quand l'ordre orientationnel entre les couches disparaît et que celles-ci deviennent plus mobiles les unes par rapport aux autres. Cette première transition, est suivie d'une seconde transition qui correspond à une forte diffusion radiale des particules entre les couches. Les températures de transition sont identifiées par l'augmentation brutale des déplacements quadratiques radiaux.

4.1 Modèle Physique

Nous nous focaliserons pour étudier les transitions de phase, sur un système de quinze particules confinées circulairement, ayant deux couronnes bien identifiées dans les trois cas de potentiel : Coulombien, Yukawa et Logarithmique. Nous présenterons deux études menées sur ce système: avec et sans fluctuation de la charge [67]. Toutes les deux permettent un éclairage sur le phénomène de transition dans les cristaux de Coulomb. Elles permettent notamment de mettre en valeur les effets de la fluctuation de la charge des particules. Pour étudier les transitions de phases nous utiliserons deux méthodes: la première est de mesurer l'énergie moyenne du système pour différentes températures, la seconde est de calculer les déplacements quadratiques moyens des particules par rapport

à leur position moyenne et qui est donnée par la relation suivante :

$$U_r^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle r_i^2 \rangle - \langle r_i \rangle^2 \quad (4.1)$$

où r_i désigne la position des particules par rapport au centre et $\langle \rangle$ la moyenne, équivalente à une moyenne d'ensemble.

Nous reportons sur les figures (4.2, 4.4, 4.6) l'évolution de l'énergie du système en fonction de la température et pour les figures (4.3, 4.5, 4.7) les variations typiques des déplacements radiaux pour un système de 15 particules étudié dans les deux cas, avec et sans fluctuation dans différent potentiels d'interaction (Coulombien, Yukawa et Logarithmique).

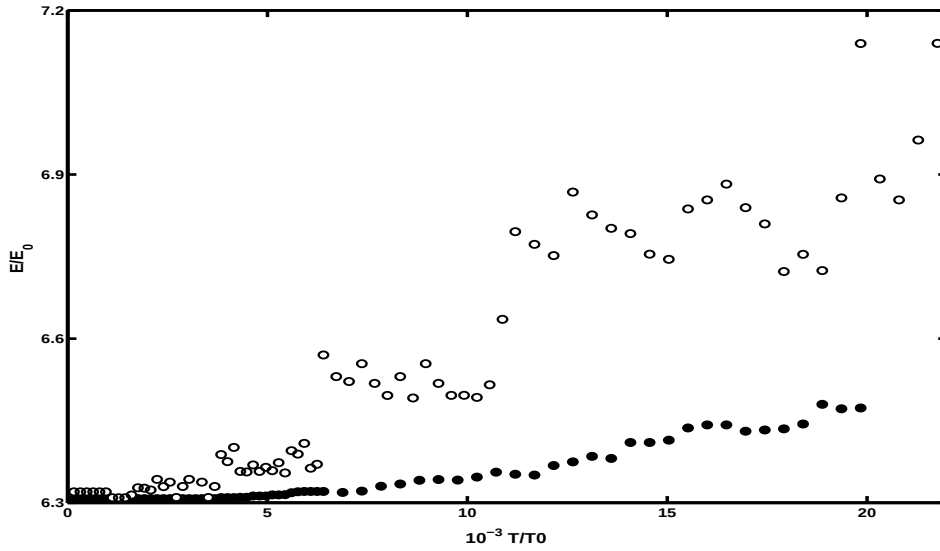


FIG. 4.2 – Énergie du système ($N=15$) dans le cas du potentiel d'interaction Coulombien en fonction de la température, sans fluctuation (●) et avec fluctuation de la charge (○)

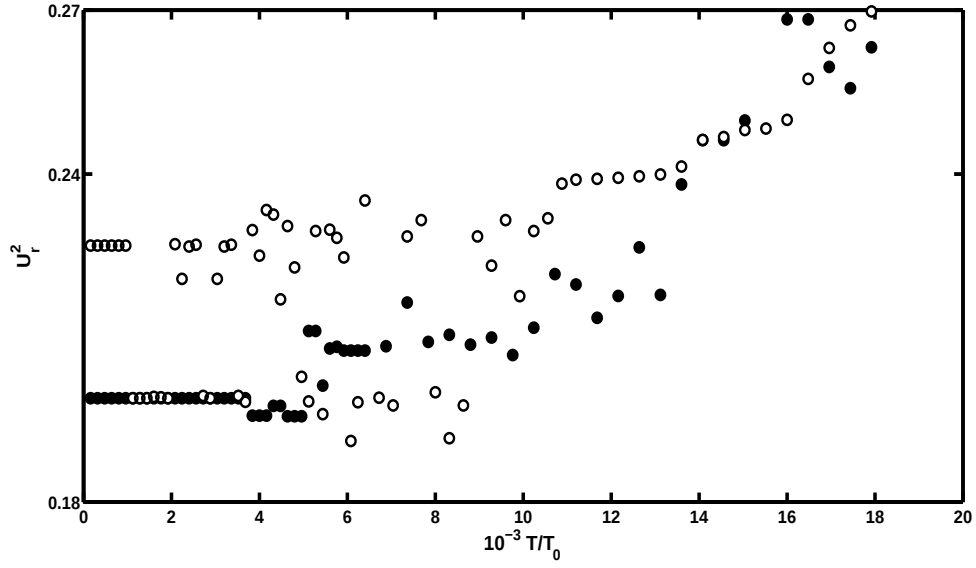


FIG. 4.3 – La variation du carré du déplacement radial moyen des particules ($N=15$) en fonction de la température dans le cas d'un potentiel d'interaction Coulombien, sans fluctuation ($\bullet$) et avec fluctuation de la charge ($\circ$)

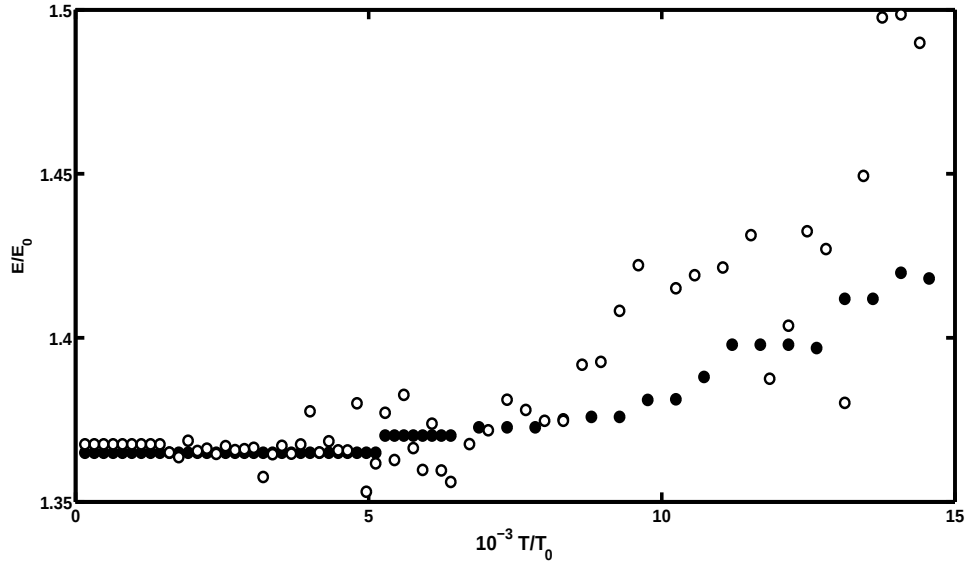


FIG. 4.4 – Énergie du système ($N=15$) dans le cas du potentiel d'interaction Yukawa en fonction de la température, sans fluctuation ($\bullet$) et avec fluctuation de la charge ($\circ$)

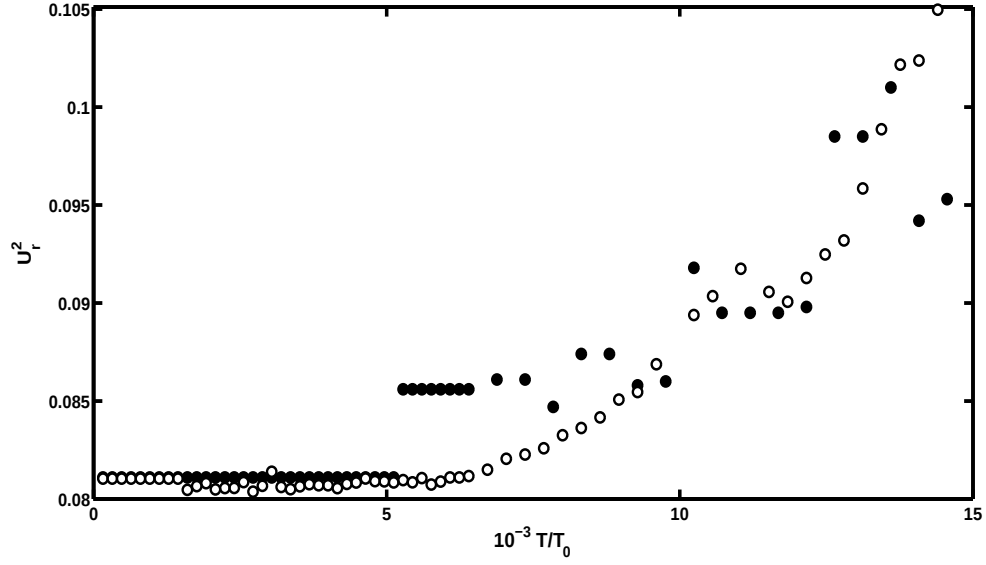


FIG. 4.5 – La variation du carré du déplacement radial moyen des particules ($N=15$) en fonction de la température dans le cas d'un potentiel d'interaction Yukawa, sans fluctuation (●) et avec fluctuation de la charge (○)

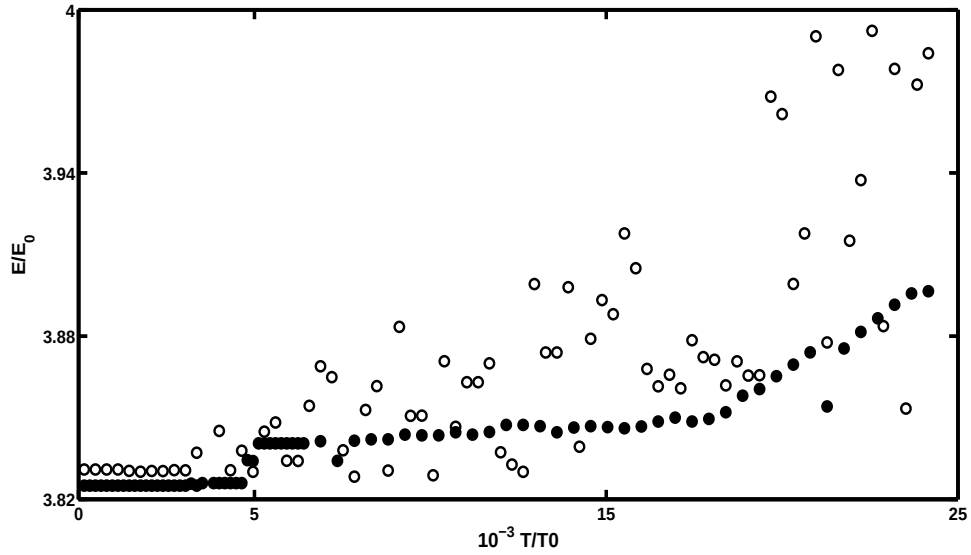


FIG. 4.6 – Énergie du système pour ($N=15$) dans le cas du potentiel d'interaction Logarithmique en fonction de la Température, sans fluctuation (●) et avec la fluctuation de la charge (○)

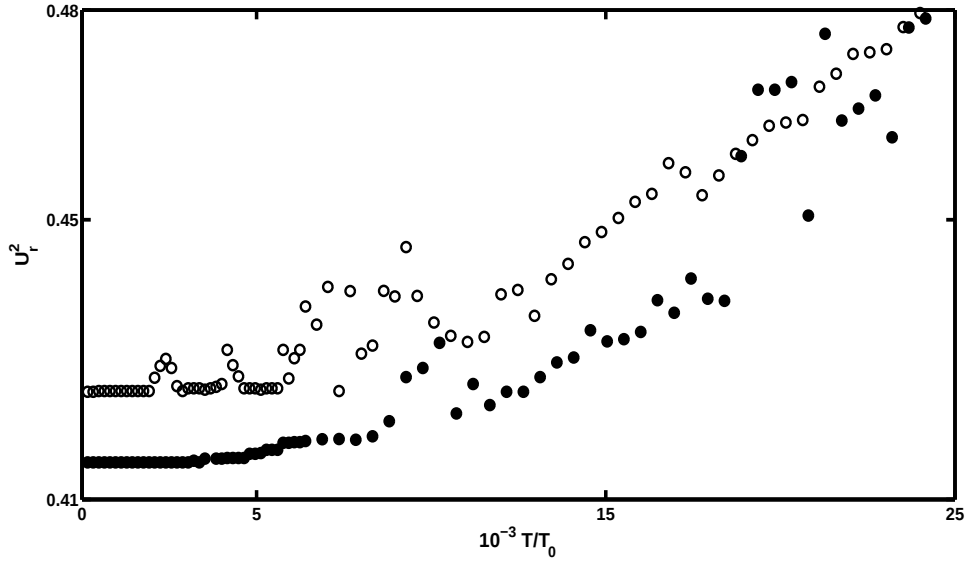


FIG. 4.7 – La variation du carré du déplacement radial moyen des particules ($N=15$) en fonction de la température dans le cas d'un potentiel d'interaction Logarithmique, sans fluctuation (●) et avec fluctuation de la charge (○)

Nous observons sur les figures (4.2, 4.4, 4.6) les mêmes comportements : à faible température, tous les systèmes commencent par un plateau qui signifie que les particules poussiéreuses sont bien localisées autour de leur position d'équilibre malgré qu'il y ait quelques déviations de positions, qui sont petites comparées aux distances inter-particule. Au fur et à mesure que la température augmente, nous pouvons définir la première température de transition T_r équivalente à une transition radiale, définie comme la température à partir de laquelle les grains poussiéreux peuvent glisser d'une couche à une autre. Nous pouvons constater que cette température varie avec le changement de l'interaction inter-grains. Elle est élevée pour les systèmes sans fluctuation, et bien plus élevée dans le cas d'interaction Yukawa : $T_r(Yuk)$ est supérieure à $5.4 \cdot 10^{-3}$ ceci peut être expliqué par le fait que les grains poussiéreux sont soumis à une force d'écrantage dans le cas du potentiel Yukawa, puis dans le cas du potentiel Logarithmique $T_r(Log)$ est à $4 \cdot 10^{-3}$, tandis que dans le cas du potentiel Coulombien $T_r(Coul)$ se situe entre ces deux températures. Nous remarquons que les premières températures de transition pour les systèmes avec fluctuation de la charge sont inférieures comparées aux systèmes sans fluctuation de la

charge. En reprenant l'article de Vaulina *et al* [34], ceci peut être expliqué par le fait que la fluctuation de la charge peut également induire une augmentation de l'énergie du système. Au fur et à mesure que la température augmente, l'énergie des systèmes augmente. Nous pouvons définir une température de "désordre" T_d équivalente à la température de fusion, définie comme la température à partir de laquelle les positions des grains ne sont pas symétriques.

Sur les figures (4.3, 4.5, 4.7), les déplacements quadratiques moyens se comportent de la même manière à basse température pour les trois cas de potentiel sans fluctuation et avec fluctuation de la charge, nous pouvons constater que U_r^2 reste constant avec l'augmentation de la température jusqu'à une valeur limite, qui signifie que les systèmes peuvent être vus comme des ensembles de couches rigides, ceci peut être expliqué par le fait que les couches sont soumises, à une force constante due au confinement [54]. Lorsque la température augmente, l'agitation thermique est alors suffisante pour vaincre les barrières énergétiques empêchant le mouvement d'une couche par rapport à l'autre et permettant leur libre rotation. Cette valeur maximale est atteinte dans les cas du potentiel Yukawa sans fluctuation pour $T = 5.4 \cdot 10^{-3}$, pour des températures très faibles dans le cas du potentiel Logarithmique $T = 4 \cdot 10^{-3}$, et dans le cas du potentiel Coulombien à $T = 3.6 \cdot 10^{-3}$. Alors que dans le cas de fluctuation de la charge les températures des transitions sont beaucoup plus faibles, elles commencent pour les systèmes avec l'interaction Yukawa et Logarithmique à partir de la température $T = 1.7 \cdot 10^{-3}$, et pour des températures très faibles $T = 0,6 \cdot 10^{-3}$ dans le cas du potentiel Coulombien.

Au fur et à mesure que la température augmente, le déplacement moyen dans le cas de la fluctuation de la charge devient beaucoup plus important sur la gamme de température entre $1.8 \cdot 10^{-3}$ et $3.7 \cdot 10^{-3}$ dans le cas du potentiel Yukawa, et d'une température comprise entre $0.7 \cdot 10^{-3}$ et $9.3 \cdot 10^{-3}$ dans le cas du potentiel Coulombien, et sur un intervalle de température entre $1.3 \cdot 10^{-3}$ et $14 \cdot 10^{-3}$ dans le cas du potentiel Logarithmique. Les systèmes sont alors sans cesse en train de chercher à s'adapter, d'où des variations plus importantes dans les déplacements moyens, signifiant que les transitions entre configurations (transition radiale) deviennent plus nombreuses.

L'observation des positions des états d'équilibre permet de constater qu'il n'y a pas de

transition radiale dans le cas sans fluctuation. Ceci peut être interprété ainsi : toutes les particules pour la couche 1 et la moitié des particules pour la couche 2, se retrouvent chacune exactement en face d'une particule de l'autre couche, qui la repousse. En revanche, dans le cas des particules avec fluctuation, une particule peut se déplacer radialement plus facilement, en se "glissant" entre deux particules de l'autre couche. Les différentes températures de "transition" pour le cas du potentiel Coulombien sont données pour : $T = (1.7, 1.8, 1.9, 3.5, 3.6, 3.7, 9) \cdot 10^{-3}$, dans le cas du potentiel de Yukawa elles le sont pour l'intervalle de température $T = [0.6, 13] \cdot 10^{-3}$, et pour le potentiel Logarithmique l'intervalle de température : $T = [1.2, 13.8] \cdot 10^{-3}$.

On remarque qu'au-delà des températures maximums citées ci-dessus, il y a une brusque augmentation des déplacements moyens apparaissant sur les figures. Ce changement de régime intervient lorsque les configurations les plus stables commencent à perdre leur symétrie. Cependant, l'observation des positions des configurations nous permet de considérer que la température de "fusion", ou les structures en couches disparaissent est de l'ordre de $13 \cdot 10^{-3}$ dans le cas des systèmes sans fluctuation, et de $11 \cdot 10^{-3}$ dans le cas des systèmes avec fluctuation de la charge.

En somme, le potentiel de Yukawa est le mieux adapté pour décrire des systèmes fortement couplés lorsque le plasma contient plusieurs espèces chargées.

Les plasmas poussiéreux sont des systèmes complexes qui nécessitent la présence d'une source externe pour compenser les pertes de charge. Un plasma complexe ne peut exister dans les dispositifs de laboratoire sans entretien permanent. En outre la présence de particules chargées autour de chaque grain induit un effet d'écran. Cependant, cet effet dépend essentiellement des paramètres du plasma de base, il peut dans certaines limites, s'avérer faible. D'autre part, les grains de poussière étant massifs, cela suggère la modélisation de l'interaction par potentiel logarithmique en particulier en présence d'un faible effet d'écran.

Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons étudié le comportement des grains de poussière dans un plasma à basse température. Lorsque l'énergie cinétique diminue, des couplages forts apparaissent entre les grains de poussière et nous observons la formation de structures ordonnées. Un calcul de l'état d'énergie minimum du système a été déterminé par la méthode de Monte Carlo basée sur l'algorithme de Metropolis, et pour assurer la convergence vers l'état d'équilibre global, l'algorithme de Newton-Raphson a été utilisé.

Nous avons tout d'abord étudié les paramètres contrôlant l'état fondamental, à savoir l'interaction entre les particules, ainsi que le potentiel de confinement, pour des grains de poussière de charge constante négative, largement étudié dans les dispositifs expérimentaux ces dernières années. Cette investigation nous a permis d'obtenir des configurations d'équilibre qui peuvent être décrites comme une succession de couches de grains, présentant les mêmes caractéristiques générales d'anneaux concentriques, pour les trois potentiels d'interactions (Coulombien, Yukawa, Logarithmique). Ces configurations sont définies essentiellement par le nombre de particules sur chacune des couches, ainsi que la modification dans le paramètre de l'excentricité du potentiel de confinement.

Nous avons retrouvé les résultats déjà établi pour des structures fortement couplées formées de particules autres que les grains de poussière. Ainsi une classification des structures en couches équivalentes au tableau périodique des éléments chimiques de Mendeleïev est possible même pour des systèmes formés de grains de poussière. Ces derniers ont deux caractéristiques importantes, masse (taille) considérable qui peut aller jusqu'à l'ordre de quelques milliers de fois la masse du proton et une très grande charge ($\sim 10^4 e$).

Outre la charge élevée, les grains ont la possibilité d'être chargés négativement ou positivement voire même les deux cas ensemble. Ceci est inhérent à la nature fluctuante de la charge. La fluctuation de la charge est la conséquence directe des courants qui affluent

vers un grain de poussière dont l'inertie est très grande.

Pour cette raison nous avons concentré principalement notre attention sur les énergies et les états fondamentaux en présence de l'effet de fluctuation de la charge sur les configurations les plus stables. Nous avons remarqué que la succession de couches est conservée, les résultats sont presque cohérents avec les configurations de l'état fondamental sans fluctuation, à l'exception de quelques configurations.

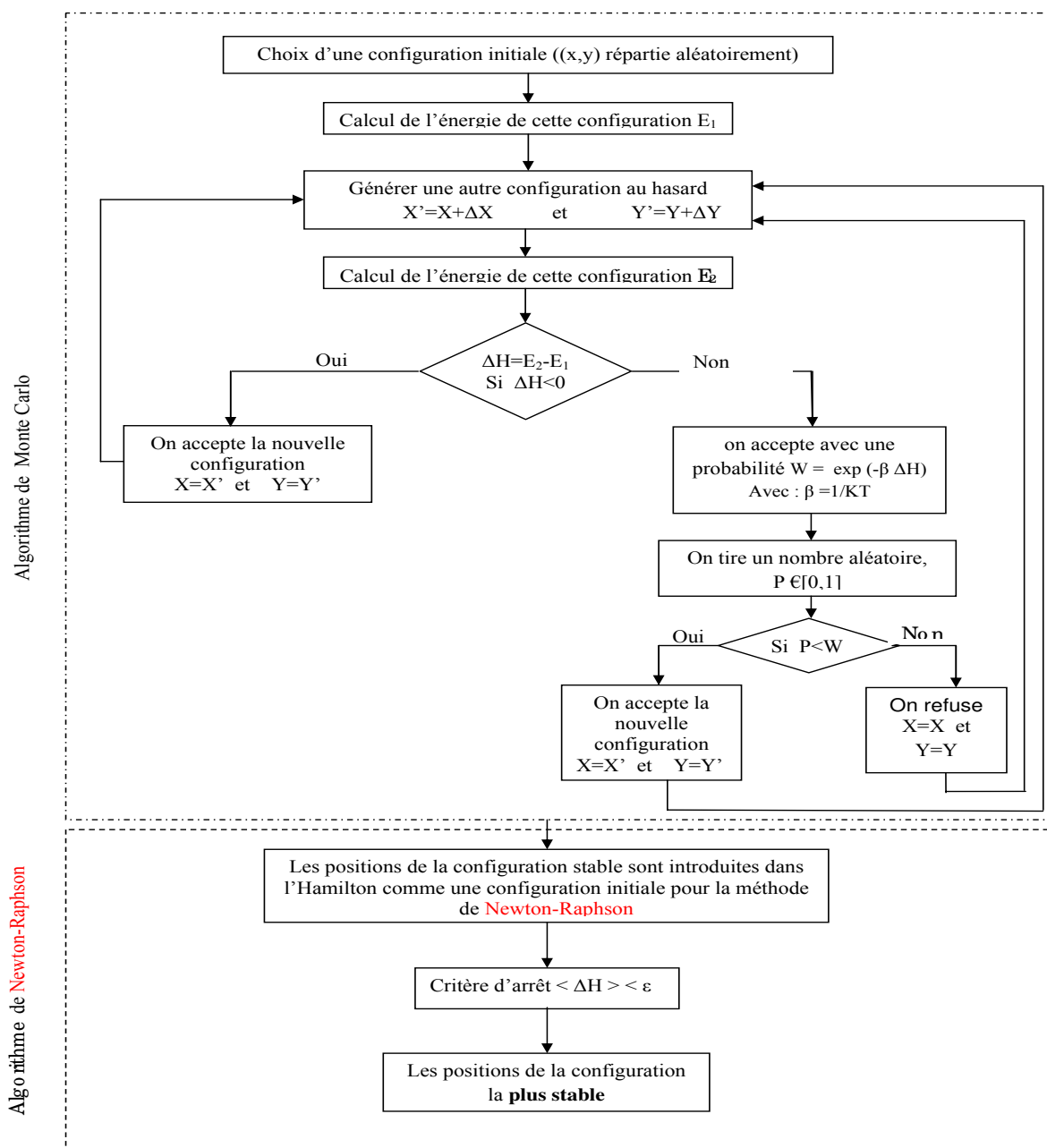
Nous avons ainsi mis en évidence la variation de la température pour certaines configurations ($N=15$), qui peut également induire de nouvelles distributions des grains. A basse température, les particules poussiéreuses sont bien localisées autour de leur position d'équilibre malgré qu'il y ait quelques déviations de positions. Au fur et à mesure que la températures augmente, Ceci conduit à une augmentation de l'énergie du système, et mène à la déformation de la configuration. Une étude de l'évolution de l'énergie fondamental et le comportement du déplacement quadratique moyen, a permis d'obtenir des températures caractéristiques des transitions de phase.

Le rôle du potentiel d'interaction a été mis en évidence. S'il est vrai que le potentiel de Yukawa est systématiquement utilisé pour modéliser l'interaction entre les grains de poussière, il est aussi vrai qu'aucun calcul analytique rigoureux ne justifie cette utilisation. Le potentiel de Yukawa engendre bien les effets dû à l'écrantage d'une charge électrique, l'importance de l'effet d'écran dépend des paramètres du plasma, comme la charge des espèces présentes ou leur densité.

Nous avons montré que l'utilisation d'un potentiel de Coulomb donne dans la majorité des cas des résultats en désaccord avec les données expérimentales. Cependant un potentiel logarithmique peut présenter une alternative au potentiel de Yukawa que ce soit en présence ou en l'absence de la fluctuation de la charge. Le potentiel logarithmique est préconisé lorsque l'extension spatiale des grains de poussière a un effet. Lorsque la température change progressivement chaque grain oscille autour de sa position d'équilibre, à ces oscillations, des modes que nous n'avons pas étudié, sont associés . Dans ce travail nous avons fait appel à la simulation par la méthode de Monte Carlo. Cette dernière ne permet pas de suivre l'évolution temporelle, pour la suite du travail on compte faire appel à la Dynamique Moléculaire.

Annexe

Organigramme de la méthode de Monte Carlo



Bibliographie

- [1] B. Belattar. *Simulation et modélisation, Support de Cours*. Département d'Informatique, faculté des sciences de l'ingénieur, Université de Batna (Algérie), 2000.
- [2] O. Havnes, T. K. Aanesen, and F. Melandso. *J. geophys. Res*, 95:6581, 1990.
- [3] F. Melandso, T. Nitter, T. Aslaksen, and O. Havnes. *J. Vac. SCi. Technol*, 16:619, 1996.
- [4] D. B. Graves, J. E. Daugherty, M. D. Kilgore, and R. K. Porteous. *Plasma. Sources. SCi. Technol*, 3:1002, 1994.
- [5] E. Wigner. *Phy. Rev*, 46:433, 1934.
- [6] V. E. Fortov, I. T. Iakubov, and A. G. Khrapak. *Physics of Strongly Coupled Plasma*. Clarendon Press· Oxford, 2006.
- [7] H. Ikezi. *Phys. Fluids*, 29:1764, 1986.
- [8] H. Thomas, G. E. Morfill, V. Demmel, J. Goree, B. Feuerbacher, and D. Möhlmann. *Phys. Rev. Lett*, 73:652, 1994.
- [9] G. E. Morfill, H. M. Thomas, U. Konopka, and M. Zuzic. *Phys. Plasmas*, 6:1769, 1999.
- [10] J. H. Chu and L. I. *Physica*, 205:183, 1994.
- [11] P. K. Shukla. *Phys. Rev. E*, 61:7249, 2000.
- [12] Bin Liu, K. Avinash, and J. Goree. *Phys. Rev. E*, 69:7249, 2004.
- [13] R. A. Quinn, C. Cui, J. Goree, and J. B. Pierper. *Phys. Rev. E*, 59:36410, 1996.
- [14] H. Thomas, G. E. Morfill, and V. N. Tsytovich. *Plas. Phys. Rep*, 29:11, 2003.
- [15] S. Ichimaru. *Reviews of Modern Physics*, 54:1017, 1982.

- [16] P. K. Shukla and N. N. Rao. *Phys. Plasmas*, 3:1770, 1996.
- [17] G. E. Morfill, H. M. Thomas, U. Konopka, H. Rothermel, M. Zuzic, A. Ivlev, and J. Goree. *Phys. Rev. Lett*, 83:1598, 1999.
- [18] J. B. Pieper, J. Goree, and R. A. Quinn. *J. Vac. Sci. Technol. A*, 14:No. 2, Mar/Apr, 1996.
- [19] G. E. Astrakharchik, A. I. Belousov, and Yu.E. Lozovik. *Phys. Lett. A*, 258:123, 1999.
- [20] P. Bliokh, V. Sinitin, and V. Yaroshenko. *Dusty and self-Gravitational Plasma in space*. Kluwer Academic Publishers, Boston, 1995.
- [21] S. A. Sandford. *Meteoritics and Planetary Science*, 31:449, 1996.
- [22] V. N. Tsytovich. *Physics-Uspekhi*, 40:53, 1997.
- [23] P. C. Frisch, J. M. Dorschner, J. Geiss, J. M. Greenberg, E. Grun, M. Landgraf, P. Hoppe, A. P. Jones, W. Kratschmer, T. J. Linde, G. E. Morfill, W. Reach, J. D. Slavin, and J. Svestka, A. N. Witt, and G. P. Zank. *The Astrophysical Journal*, 525:492, 1999.
- [24] U. de Angelis. *Physica Scripta*, 45:465, 1992.
- [25] S. R. Taylor. *Solar System Evolution*. Cambridge, 1992.
- [26] C. K. Goertz. *Reviews of Geophysics*, 27:271, 1989.
- [27] C. K. Goertz. *Reviews of Geophysics*, 27:427, 1989.
- [28] J. S. Logan and J. J. McGill. *J. Vac. Sci. Technol*, 10:1875, 1992.
- [29] E. Stoffels, W. Stoffels, G. M. W. Kroesen, and F. J. de Hoog. *Electron Technology*, 32:255, 1998.
- [30] G. Morfill, E. Grün, and T. Johnson. *Planet. Space Science*, 28:1087, 1980.
- [31] C. Cui and J. Goree. *IEEE Transactions of Plasma Science*, 22:151, 1994.
- [32] T. Matsoukas, M. Russell, and M. Smith. *J. Vac. Sci. Technol A*, 14:624, 1996.
- [33] S. A. Khrapak, A. P. Nefedov, O. F. Petrov, and O. S. Vaulina. *Phys Rev E*, 59:6017, 1999.
- [34] O. S. Vaulina, S. A. Khrapak, A. P. Nefedov, and O. F. Petrov. *Phys Rev E*, 60:5959, 1999.

- [35] S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin. *Phys. Rev. E*, 56:4671, 1997.
- [36] J. A. Vasut and T. W. Hyde. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 29:231, 2001.
- [37] A. Melzer, A. Homann, and A. Piel. *Phys. Rev. E*, 53:2757, 1996.
- [38] M. Zuzic, A. V. Ivlev, J. Goree, G. E. Morfill, H. M. Thomas, H. Rothermel, U. Konopka, R. Sutterlin, and D. D. Goldbeck. *Phys. Rev. Lett*, 85:4064, 2000.
- [39] H. W. Jiang, R. L. Willett, H. L. Stormer, D. C. Tsui, L. N. Pfeiffer, and K. W. West. *Phys. Rev. Lett*, 65:633, 1990.
- [40] V. J. Goldman, M. Santos, M. Shayegan, and J. E. Cunningham. *Phys. Rev. Lett*, 65:2189, 1990.
- [41] C. A. Murray and D. H. Van Winkle. *Phys. Rev. Lett*, 58:1200, 1987.
- [42] F. Diedrich, E. Peik, J. M. Chen, W. Quint, and H. Walther. *Phys. Rev. Lett*, 59:2931, 1987.
- [43] R. C. Gann, S. Chakravarty, and G. V. Chester. *Phys. Rev. B*, 20:326, 1979.
- [44] V. M. Bedanov, G. V. Gadiyak, and Yu. E. Lozovik. *Sov. Phys. JETP*, 61:967, 1985.
- [45] F. F. Chen and J. P. Chang. *Principal of plasma processing*. Plenum/Kluwer Publishers, Los Angeles, 2002.
- [46] Jorge Nocedal and Stephen J. Wright. *Numerical Optimization*. Second Edition, Springer, 2006.
- [47] L. Rouaiguia, M. Djebli, and M. Drir. *Phys. plasmas*, 16:033705, 2009.
- [48] C. Kittel. *Physique de l'état solide*. 7 Edition, Dunod, Paris, 1998.
- [49] A. Bekda, M. Djebli, and N. Beldjoudi. *J. plasmas. physics*, 74:620, 2008.
- [50] M. Saintjean and C. Guthmann. *J. Phys. Condens. matter*, 14:13653, 2002.
- [51] P. K. Shukla and A. A. Mamun. *Introduction to dusty plasmas Physics*. IOP Publishing, 2002.
- [52] Vitaly A. Schweigert and François M. Peeters. *Phys. Rev. B*, 51:7700, 1995.
- [53] M. Issaad, L. Rouaiguia, and M. Djebli. *JSP12. USTHB. Alger*, 2008.
- [54] V. M. Bedanov and F. M. Peeters. *Phys. Rev. B*, 49:2667, 1994.
- [55] Y. J. Lai and L. I. *Phys. Rev. E*, 60:4743, 1999.

- [56] M. Kong, B. Partoens, and F. R. Peeters. *Phys. Rev. E*, 65:46602, 2002.
- [57] P. Galatola, G. Coupier, M. Saint Jean, J.B. Fournier, and C. Guthmann. *Eur. Phys. J. B*, 50:549, 2006.
- [58] V. E. Fortov, A. V. Ivlev, S. A. Khrapak, A. G. Khrapak, and G. E. Morfill. *J. Phys. Rep*, 421:1, 2005.
- [59] L. Rouaiguia, M. Djebli, and F. Peeters. *Phys. Lett. A*, 372:4487, 2008.
- [60] R. Bharutham and al, editors. *Third International conference on the physics of dusty plasma, American Institute of physic*, 2002. Tsytovich and morfill p110.
- [61] M. Issaad, L. Rouaiguia, and M. Djebli. *submitted to J. Applied. Physics*, March 2009. Ref:D/311654/PAP.
- [62] P. Papon, J. Leblond, and P. H. E. Meijer. *Physique des transition de phase*. Dunod, 1999.
- [63] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless. *J. Phys. C*, 5:124, 1972.
- [64] B. I. Halperin and D. R. Nelson. *Phys. Rev. Lett*, 41:121, 1978.
- [65] A. P. Young. *Phys. Rev. B*, 19:1855, 1979.
- [66] M. Kong, B. Partoens, and F. M. Peeters. *Phys. Rev. E*, 67:021608, 2003.
- [67] M. Issaad, L. Rouaiguia, and M. Djebli. *AIP Conf. Pro*, 1041:159, 2008.