

N° d'ordre : 34/2017-C/PH

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediène

Faculté de Physique



THESE

Présentée pour l'obtention du **diplôme de DOCTORAT 3^e Cycle (LMD)**

En : PHYSIQUE

Spécialité : PHYSIQUE THEORIQUE

Par : BESSAA Assia

SUJET

**Structure, Dynamique et Transitions de Phase des
Systèmes Mésooscopiques Fortement Corrélés**

Soutenue publiquement, le 23 Mai 2017, devant le jury composé de :

M. M. Hachemane	Professeur	à l'USTHB	Président
M. M. Djebli	Professeur	à l'USTHB	Directeur de thèse
Mme. H. Gueddaoui	Maître de Conférences A	à l'USTHB	Examinatrice
M. A. Mezeghrane	Maître de Conférences A	à l'UMMTO	Examineur
M. R. Amour	Maître de Conférences A	à l'USTHB	Examineur
M. N. Oudini	Maître de Recherche A	au CDTA	Examineur

Remerciements

Je tiens à remercier mon directeur de thèse, Prof. Mourad Djebli, pour la confiance qu'il m'a accordée en acceptant l'encadrement de ce travail et pour ses nombreux conseils au cours de l'élaboration de cette thèse.

Je remercie également, l'ensemble des membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail en acceptant de l'examiner.

J'exprime toute ma gratitude à M. Kassa Adel, maître de conférences à l'université de Béjaia, pour sa grande disponibilité et pour ses réponses, très utiles, à toutes mes questions en programmation numérique.

Mes remerciements vont aussi à M. Abdesalem Houari professeur à l'université de Béjaia, et Mme. Sacha Davidson directrice de recherche à l'IPNL de Lyon pour l'aide qu'ils m'ont toujours apportée, ainsi que pour leur encouragement continu.

Au terme de ce parcours, je remercie vivement toute ma famille pour leurs attentions et encouragements qui m'ont toujours accompagnée. Particulièrement, je suis redevable à mes parents pour leur confiance, ainsi que pour leur soutien moral et matériel.

Résumé

Le présent travail porte sur l'étude théorique des propriétés structurales, d'excitation et de fusion des clusters bidimensionnels (2D) finis. Les modèles présentés s'appliquent à des systèmes mésoscopiques tels que les clusters de plasmas poussiéreux et les vortex dans un échantillon supraconducteur.

Contrairement aux systèmes atomiques réels, les atomes artificiels, qui consistent en un nombre restreint de particules chargées, dans un potentiel de confinement externe, permettent de réaliser et de contrôler les effets de corrélations fortes. Les propriétés de l'état fondamental et les transitions de phase structurales sont étudiées au moyen des méthodes basées sur des simulations Monte Carlo. Les configurations résultantes forment des structures en couches concentriques. La distribution des particules sur chaque couche et les transitions structurales de l'ensemble dépendent fortement de l'interaction interparticules ainsi que des paramètres de confinement.

L'étude théorique des propriétés dynamiques des clusters à 2D est réalisée par l'investigation des modes normaux qui permettent l'analyse spectrale de la vibration autour des positions d'équilibre. Les modes normaux les plus importants sont le mode "breathing", le mode du centre de masse et le mode de plus basse fréquence. L'étude de leur occurrence est discutée. En particulier, nous avons prouvé numériquement que le mode du centre de masse existe sous un confinement parabolique et asymétrique pour un cluster logarithmique, et il en est du même pour un cluster de Yukawa mais pour un potentiel de confinement plus raide et isotrope.

La stabilité de ces clusters, par rapport à un changement de température, est considérée. Les températures de fusion de ces systèmes sont déterminées par des paramètres de Lindemann différents, et sont comparées les unes aux autres. Les effets dits de "taille finie" affectent fortement le comportement de la transition de phase solide-liquide. En outre, la fusion dépend essentiellement de la symétrie particulière de la configuration de l'état fondamental correspondant, due aux effets compétitifs entre la symétrie du confinement et le potentiel d'interaction entre les particules.

Abstract

The present work is devoted to the theoretical investigation of essential structural, excitation and melting properties of two-dimensional (2D) finite clusters. The presented models apply to mesoscopic systems such as dusty plasma clusters and vortices in a superconducting island.

Unlike systems of real atoms, artificial atoms, which consist of charged few-particle systems in external trapping potentials, allow one to realize and control strong correlations effects. The ground state properties and structural phase transitions are investigated by means of computational methods based on first principle Monte-Carlo simulations. The resulting configurations are characterized by a particle distribution consisting of concentric ring shell structures. The distribution of the particles on each shell and the structural transitions of the whole system depend strongly on the interparticle interaction as well as on the confinement parameters.

The theoretical study of dynamical properties of 2D clusters is feasible by normal modes analyses, which allow for spectral resolution of the vibration around equilibrium positions. The most important normal modes are breathing, center of mass and lowest non-zero modes. The investigation of their occurrences is discussed. In particular, we proved numerically that the center of mass mode exists also in an asymmetric parabolic confinement for a logarithmic cluster. The same holds for a Yukawa cluster for steeper isotropic confinement potentials.

The stability of these clusters with respect to a temperature change is considered. The corresponding melting temperatures are determined by different Lindemann parameters and compared with each other. Small size effects affect strongly the behavior of the transition from solid to liquid. Additionally, the melting depends crucially on the special symmetry of the corresponding ground state configuration due to the competition between the symmetry of the confinement and the interaction potential between the particles.

Table des matières

Résumé	II
Abstract	III
Table des figures	2
Liste des tableaux	5
1 Introduction	7
2 Systèmes fortement corrélés et formation des clusters	10
2.1 Contexte général	10
2.2 Plasmas complexes	13
2.2.1 Processus de charge et d'écrantage d'une poussière	14
2.2.2 Potentiel d'interaction	15
2.2.3 Formation des clusters dans un plasma complexe	16
2.3 Vortex magnétiques dans les supraconducteurs mésoscopiques	19
2.3.1 Formation des clusters de vortex	19
2.3.2 Interaction entre les vortex	22
3 Modèles théoriques et approches numériques	23
3.1 Modèle théorique des clusters mésoscopiques	23
3.2 Approches numériques	25
3.2.1 Algorithme de Monte Carlo-Metropolis	25
3.2.2 Méthode de minimisation de l'énergie	28
3.3 Matrice dynamique et modes propres	29
3.3.1 Décomposition QR	30
3.3.2 Algorithme QR de base	31
3.3.3 Méthode QR-Hessenberg	31

4	Dynamique et stabilité des clusters de Yukawa à 2D	33
4.1	Modèle numérique	34
4.1.1	Hamiltonien du système	34
4.1.2	Système d'unités	35
4.2	Transitions structurales dans les clusters de Yukawa	36
4.3	Analyse des modes normaux	39
4.3.1	Mode du centre de masse	40
4.3.2	Mode de plus basse fréquence	41
4.4	Transition de phase ordre-désordre	43
4.4.1	Paramètres de fusion	44
4.4.2	Résultats et discussions	45
4.4.3	Comparaison avec les résultats expérimentaux	52
4.5	Conclusion	53
5	Transitions de phases dans le spectre des modes propres d'un cluster logarithmique	55
5.1	Modèle numérique	57
5.2	Propriétés des clusters dans un confinement parabolique et isotrope	58
5.2.1	Structure de l'état fondamental	58
5.2.2	Spectre d'excitation et modes propres	60
5.2.3	Propriétés thermodynamiques : Fonction de distribution de paires	61
5.3	Classification des transitions de phases	64
5.4	Transitions de phases dans un confinement soft et anisotrope	65
5.4.1	Transitions structurales	65
5.4.2	Profil des hautes fréquences propres	71
5.4.3	Mode du centre de masse pour $n = 2$	73
5.5	Couplage des modes dans un confinement dur et anisotrope	75
5.6	Conclusion	79
6	Conclusion	81
A	Propriétés de l'état fondamental d'un cluster logarithmique à 2D	84
	Bibliographie	87

Table des figures

2.1	Diagramme de phase température-densité : des exemples de systèmes fortement corrélés en équilibre thermodynamique comprennent des plasmas complexes, des ions piégés et les plasma de quark-gluon (QGP)[7].	11
2.2	(a) Schéma du dispositif expérimental; (b) images des clusters en équilibre avec $N = 3, 7, 12, 19, 34$ et 145 [38].	18
2.3	Représentation de l'état mixte. Un champ magnétique est appliqué (représenté en noir). Des courants supraconducteurs (en rouge) se développent à la surface afin d'écranter ce champ : ce sont les courants responsables de l'effet Meissner. D'autres courants supraconducteurs se développent (en vert) afin de créer des vortex, sortes de « tunnels » non supraconducteurs, traversés par un quantum de flux magnétique [44].	19
2.4	Diagramme de phase pour la pénétration du champ magnétique dans un supraconducteur type II [45].	20
2.5	Image du réseau de vortex dans un cristal de MgB2 à une température $T = 6K$ sous un champ magnétique de $200 Oe$ ($\sim 16 \times 10^3 A.m^{-1}$)[48].	21
4.1	État fondamental d'un cluster ayant 19 particules, avec différentes combinaisons de n et κ	37
4.2	Configurations de l'état fondamental d'un cluster ayant 20 particules et $\kappa = 1$ dans des confinements différents : (a) pour $n = 2$ et (b) pour $n = 20$	39
4.3	Évolution des fréquences des modes du centre de masse en fonction de κ pour les clusters avec 19 et 100 particules sous différents confinements avec $n = 2$ et $n = 3$	40
4.4	Modes propres (vecteurs propres) du centre de masse pour (a) : $N = 19, n = 2, \kappa = 2$, (b) : $N = 19, n = 3, \kappa = 2$, (c) : $N = 100, n = 3, \kappa = 2$	41
4.5	Plus basses fréquences non-nulles (LNF) en fonction du κ , pour un cluster avec 19 particules piégées par différents confinements avec $n = 2, n = 3, n = 4$ et $n = 20$	42

4.6	Vecteurs propres correspondant aux plus grandes valeurs du LNF pour un système de 19 particules avec différentes combinaisons de n et κ	43
4.7	La dépendance en température de la quantité VIDF pour un ensemble de paramètres d'écrantage, sous un confinement avec (a) : $n = 2$, (b) : $n = 3$	46
4.8	La dépendance en température de la quantité VIDF pour un ensemble de paramètres d'écrantage, sous un confinement avec (c) : $n = 4$, (d) : $n = 20$	47
4.9	Dépendance en température de la position radiale moyenne d'un système avec 19 particules avec (a) : $n = 20, \kappa = 0$ et (b) : $n = 20, \kappa = 1$	48
4.10	Dépendance en température des fluctuations de la distance interparticules pour un système avec $N = 19$ particules pour (a) : $n = 20, \kappa = 0$ et (b) : $n = 20, \kappa = 1$	50
5.1	Images des cristaux ioniques, observées expérimentalement, pour différentes valeurs d'anisotropie[83].	56
5.2	Configurations de l'état fondamental avec $N = 40$ avec différents potentiels : (a) logarithmique, (b) Coulomb, (c) Yukawa ($\kappa = 10$).	59
5.3	Spectre des modes propres en fonction du nombre de particules N allant de 4 à 40.	60
5.4	Vecteurs propres du cluster avec $N=13$: (a) mode de rotation, (b) mode du centre de masse, (c) mode "breathing".	61
5.5	Fonction de distribution radiale pour un cluster contenant 37 particules dans la région fusion.	63
5.6	Fonction de distribution radiale pour un cluster de 37 particules dans la région du couplage fort.	64
5.7	Spectre des fréquences propres, d'un système de 19 particules, en fonction du paramètre d'anisotropie α sous un confinement avec des puissances : (a) $n = 2$, (b) $n = 3$	66
5.8	Spectre des fréquences propres, d'un système de 19 particules, en fonction du paramètre d'anisotropie α sous un confinement avec des puissances : (c) $n = 4$ et (d) $n = 6$	67
5.9	Configurations de l'état fondamental d'un système de 19 particules obtenues pour différentes valeurs de l'anisotropie et pour différentes puissances du confinement : (a-e) pour $n = 2$, (f-j) pour $n = 4$ et (k-o) pour $n = 6$. L'échelle est différente dans chaque figure, mais la distance entre les écarts est toujours une unité de longueur.	68

5.10 Valeurs critiques de l'anisotropie où se produit la forte dégénérescence pour les systèmes avec : $N = 6$, $N = 13$ et $N = 19$ particules sous différents confinements.	69
5.11 Variation de l'énergie d'un système avec $N = 19$ particules en fonction de l'anisotropie, tracée pour différentes puissances du confinement. La sous-figure montre la même chose prenant l'échelle logarithmique pour l'axe d'anisotropie.	70
5.12 Vecteurs propres correspondants aux plus hautes fréquences avec différentes valeurs de l'anisotropie et de puissance du confinement ($a-f$) pour $n = 6$ et ($g-l$) pour $n = 2$	72
5.13 Évolution des fréquences du centre de masse ω_x et ω_y en fonction de l'anisotropie α pour $n = 2$	74
5.14 Modes du centre de masse dans les directions x et y pour un système avec $n = 2$ et $N = 19$: (a) $\omega_x = 0.894$ pour $\alpha = 0.4$ et (b) $\omega_y = \sqrt{2}$	74
5.15 Spectre des fréquences propres en fonction de l'anisotropie, tracé pour un confinement proche du Hard Wall $n = 20$. La sous figure montre la dépendance du spectre en puissance du confinement isotrope	76
5.16 Couplage local entre les vecteurs propres individuels du mode 27 avec ceux des modes 30, 26, 24 (flèches bleus pointillées) et ceux des modes 14, 10 et 1 (flèches noires plaines) pour $\alpha = 0.4$, $N = 19$ et $n = 20$	77

Liste des tableaux

4.1	Unités de longueur et d'énergie d'un système de particules en interaction, piégées par un potentiel de confinement en forme d'une loi de puissance. . .	35
4.2	Quelques configurations de l'état fondamental obtenues pour un cluster ayant 19 particules en faisant varier à la fois la puissance de confinement n et le paramètre d'écrantage κ	38
4.3	Températures de fusion normalisées des clusters de plasmas poussiéreux à 2D, déduites du comportement de la constante de diffusion indiquée dans la Réf. [75] et de la méthode VIDF.	52
A.1	Configurations de l'état fondamental des systèmes avec $N = 3..40$ particules en interaction logarithmique, confinées dans un potentiel de confinement parabolique. Les énergies (E/N), les plus basses fréquences propres non-nulles, le rayon de chaque couche sont calculés.	84

1

Introduction

La formation des structures auto-organisées est l'un des processus les plus fondamentaux dans la nature et parmi les phénomènes les plus excitants des systèmes fortement corrélés contenant plusieurs particules chargées. La compréhension des détails de leurs propriétés fondamentales et leurs transitions de phases se révèle d'une grande importance.

Parmi ces systèmes, ceux avec un nombre fini de particules sont intéressants dans de nombreux domaines de la science, car ils permettent de réaliser et de contrôler les fortes corrélations. Le nombre typique de particules dans ces structures varie d'environ dix à seulement quelques centaines [1, 2], et donc présentent des effets dits : *de taille finie*. En effet, par rapport aux systèmes étendus [3, 4], les propriétés des systèmes finis dépendent fortement du nombre exact de particules. En outre, les particules sont confinées par un potentiel de confinement externe dont la forme affecte également la physique [5, 6].

Des exemples pour ces systèmes comprennent les plasmas poussiéreux [7], les billes métalliques chargées [8], les vortex magnétiques dans les supraconducteurs type II [9] et les ions froids dans les pièges de Paul ou de Penning [10].

La matière en général est soumise à beaucoup de perturbations provenant des autres matières et des champs. S'il n'y a que des processus stationnaires ou si l'excitation externe est suffisamment petite, nous avons un système en équilibre. Par exemple, la théorie cinétique ou la théorie de la réponse linéaire sont applicables pour les systèmes faiblement corrélés [11]. Cependant, dans le cas des systèmes fortement corrélés, ces méthodes échouent ou deviennent inefficaces. Cette phase contient tous les phénomènes collectifs et les effets de corrélations, et dans ce cas, il est souvent avantageux d'utiliser des techniques de simulation numérique. Il faut donc se référer à des méthodes telles que la dynamique

moléculaire [12] ou les méthodes de Monte Carlo [13, 14], qui sont devenues très efficaces avec la disponibilité d'une puissance informatique (machines, méthodes, algorithmes) peu coûteuse au cours des dernières décennies. Ces méthodes ne sont pas limitées aux solutions approximatives car elles sont capables de traiter l'interaction entre toutes les particules.

En général, la dynamique moléculaire [12] est basée sur l'évolution temporelle du système physique, et l'algorithme de Monte Carlo est basé sur le processus de Markov dans l'espace de configuration [13]. Aujourd'hui, ces deux techniques de simulation sont largement utilisées par les chercheurs dans de nombreuses disciplines. Le choix entre les deux variantes dépend des propriétés étudiées. Dans ce travail, la méthode de Monte Carlo a été choisie, car elle est généralement adaptée pour l'étude des propriétés d'équilibre. Ici, elle est également utilisée à des fins de minimisation. En outre, les techniques d'analyse des modes normaux sont utilisées afin de caractériser la dynamique lente du système.

Le rôle régissant les interactions et le potentiel de confinement dans les systèmes fortement corrélés donne lieu à de nombreuses propriétés universelles observées dans chacun d'eux. Cela rend l'analyse d'un système particulier très intéressante, car elle construit un paradigme pour beaucoup d'autres. Le but de cette thèse est de donner quelques résultats théoriques incluant l'effet des interactions et du confinement sur la formation des clusters mésoscopiques, leurs propriétés structurales et spectrales et leurs transitions de phases. Le plan de cette thèse se présente comme suit :

- **Chapitre 2** - Ce chapitre donne un aperçu sur la physique des systèmes mésoscopiques fortement couplés et fournit une brève revue sur la création des cristaux de poussière et de vortex dans des expériences de laboratoire. La charge des particules poussiéreuses et leurs interactions mutuelles dans un plasma sont discutées. En outre, le dispositif expérimental pour la production des cristaux de poussière à deux dimensions (2D) est présenté afin d'établir un lien entre l'expérience et le présent travail théorique. De même, la formation des vortex et leur type d'interaction, dans la région d'intérêt, sont discutés.
- **Chapitre 3** - Dans ce chapitre, nous allons présenter les modèles théoriques décrivant les systèmes expérimentaux du chapitre 2. Les principaux concepts des méthodes numériques, utilisées pour obtenir les propriétés pertinentes de ces systèmes, sont discutés. Les méthodes de Monte Carlo, de Newton et QR sont présentées.

- **Chapitre 4** - Ce chapitre vise les propriétés des cristaux de plasmas poussiéreux, dont l'interaction est modélisée par un potentiel de Yukawa. Les effets de l'écrantage et de la forme fonctionnelle de confinement sur la structure des clusters sont étudiés. Les résultats sont résumés dans un diagramme de phase où les différentes configurations sont identifiées. Une analyse détaillée des propriétés d'excitation basée sur les modes normaux est présentée. Dans le cadre des configurations trouvées, les températures de fusion sont obtenues, et le rôle des fluctuations de la distance interparticules, comme critère universel de fusion, est analysé pour les systèmes finis ayant différentes structures.
- **Chapitre 5** - Ici, nous allons présenter les propriétés structurales et dynamiques d'un système fini (à deux dimensions (2D)) de particules chargées en interaction logarithmique. Ces particules sont confinées par un potentiel de confinement anisotrope ayant une forme d'une loi de puissance. Les transitions structurales sont identifiées lorsque le système passe d'une configuration bidimensionnelle (2D) à une configuration unidimensionnelle (1D). Les transitions sont classées du premier et du second ordre. Les configurations de l'état fondamental sont analysées par rapport à leurs symétries. En fin, une analyse des modes normaux est réalisée et le comportement des modes dans un piège asymétrique et à parois dures est discuté.

2

Systemes fortement corrélés et formation des clusters

2.1 Contexte général

En 1934, Eugene Wigner, physicien théoricien à l'université de Princeton, a fait une prédiction audacieuse ; « les électrons dans un métal subiraient une transition similaire à une phase cristalline ordonnée ». Dans son travail paru dans la Réf. [15], Wigner prédit que les électrons se cristallisent et forment un réseau cristallin si la densité du gaz d'électrons à 3D est abaissée au-delà d'une certaine valeur critique. En effet, l'énergie coulombienne augmente par rapport à l'énergie cinétique et les corrélations commencent à dominer la structure électronique.

La quête pour l'observation d'un tel cristal de Wigner a fait l'objet d'un travail très intense et continu. En raison du caractère non-idéal du système, i.e, structure de bandes compliquée, présence des impuretés et des imperfections, les cristaux de Wigner n'ont jamais été observés dans les métaux réels. Cependant, de nombreux modèles théoriques [16, 17] prédisent leur présence dans les sites exotiques tels qu'à l'intérieur des naines blanches et sur la croûte des étoiles à neutrons.

Pour surmonter les obstacles d'observation des structures de Wigner, les scientifiques, dans les années 1970, ont construit un nouveau système où les électrons ont été recueillis au-dessus de la surface d'Hélium liquide. En utilisant des champs électrostatiques et la petite polarisation de l'Hélium, ces électrons ont été forcés à se mettre dans une couche à 2D. Ceci fût réalisé pour la première fois par Grimes et Adams [18].

Depuis la découverte du phénomène de cristallisation, des études théoriques et expérimentales ont été menées sur les cristaux coulombiens dans plusieurs systèmes physiques

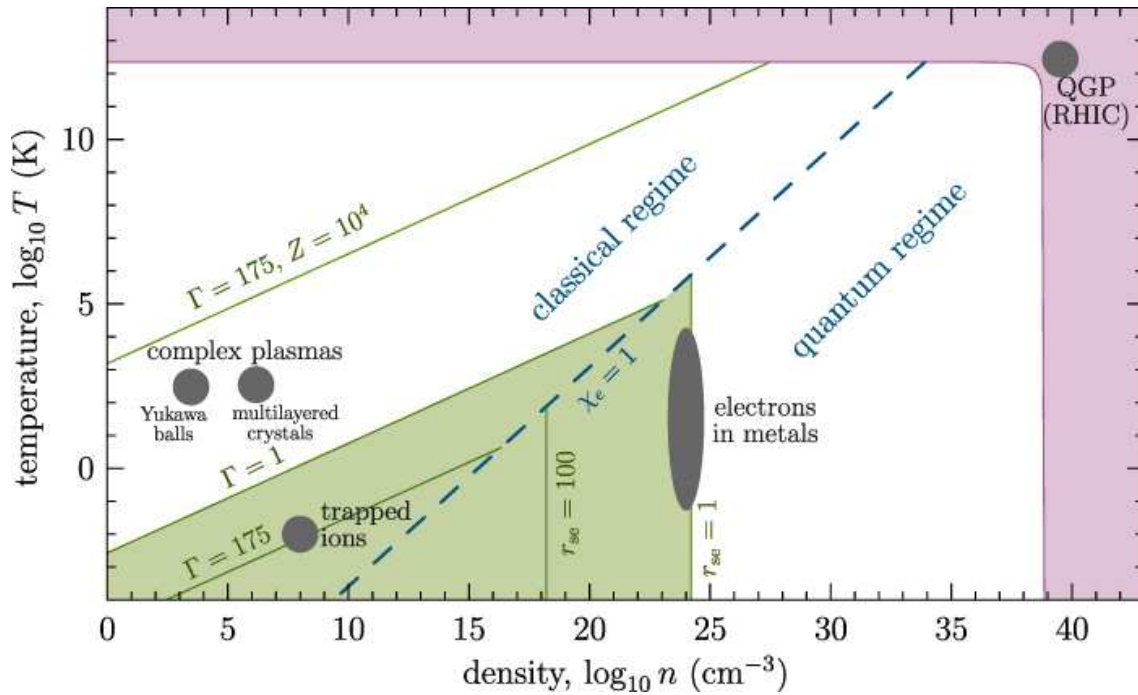


Figure 2.1 – Diagramme de phase température-densité : des exemples de systèmes fortement corrélés en équilibre thermodynamique comprennent des plasmas complexes, des ions piégés et les plasma de quark-gluon (QGP)[7].

tels que les électrons dans une boîte quantique “Quantum dots” [19], les ions dans les pièges de Paul et de Penning [20, 21] et les cristaux de plasmas complexes [22, 23, 24]. D’autres systèmes connexes comme les vortex [25] et les billes métalliques chargées [8] au-dessus d’un conducteur plan peuvent présenter de telles structures semblables à des cristaux de Wigner à 2D.

Dans le régime classique, la phase thermodynamique d’un système donné est complètement déterminée par le paramètre de couplage, qui est défini comme étant le rapport de l’énergie potentielle moyenne $\langle E_p \rangle$ sur l’énergie cinétique moyenne $\langle E_c \rangle$,

$$\Gamma = \frac{\langle E_p \rangle}{\langle E_c \rangle} = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 a k_B T}, \quad (2.1)$$

Q est la charge de la particule, k_B est la constante de Boltzmann, T est la température de la particule et a la distance moyenne interparticules. Pour les systèmes étendus et homogènes, a désigne le rayon de Wigner-Seitz a_{WS} , relié à la densité de particules n [26] par :

$$\pi a_{WS}^2 = n^{-1} \quad (2D) \quad \text{et} \quad \frac{4\pi}{3} a_{WS}^3 = n^{-1} \quad (3D) \quad (2.2)$$

Pour les systèmes quantiques où les longueurs d'ondes associées aux particules sont du même ordre de grandeur que la distance interparticules moyenne, le paramètre de couplage classique doit être remplacé par son expression quantique. Il en résulte un paramètre de couplage quantique (paramètre de Brueckner) r_s [7] :

$$r_s = \frac{a}{a_B}, \quad (2.3)$$

où a_B représente le rayon de Bohr.

Un système classique (ou quantique) ayant un paramètre de couplage faible $\Gamma \ll 1$ ($r_s \ll 1$), se comporte comme un gaz idéal (entièrement désordonné). Ce dernier peut se réaliser dans un système dilué à haute température. Lorsque $1 < \Gamma < 100$ ($1 < r_s < 100$), les particules sont corrélées et le système se comporte comme un liquide. Des états semblables à des cristaux de matière ne peuvent exister que sous la condition où le paramètre de couplage est supérieur à une valeur d'environ 100 ($\Gamma \geq 100$, $r_s \geq 100$), ainsi, le système est considéré comme fortement couplé [26].

Le même paramètre de couplage est capable de décrire des systèmes dans des conditions très différentes. Dans les expériences, le couplage élevé peut être réalisé de différentes manières en contrôlant les trois paramètres : température, densité et charge. L'une des possibilités est d'abaisser la température comme cela se fait dans les expériences avec des ions ultra-froids[20]. La deuxième approche consiste à augmenter l'interaction de la paire en réduisant la distance interparticules (compression du système) comme dans le cas des électrons dans une boîte quantique[19]. Dans d'autres systèmes, cela nécessite une densité très importante qui n'existe que dans certains objets astrophysiques tels que le centre des naines blanches [16] et les plasmas de Quark-Gluon (QGP)[7]. Une autre alternative pour renforcer le couplage, à température et densité fixes, consiste à augmenter la charge des particules. C'est l'idée clé pour former les cristaux dans les plasmas poussiéreux (complexes).

En particulier, les systèmes mésoscopiques¹ présentent de nombreux avantages pour l'étude détaillée des cristaux de Wigner. En effet, leurs tailles et la facilité d'observation de leurs structures permettent de les contrôler sur une large gamme de paramètres. Des

1. les systèmes mésoscopiques sont ceux ayant des dimensions intermédiaires entre celles de la physique quantique et de la physique classique. L'échelle des distances en cause s'étend des dimensions de l'atome jusqu'au micromètre.

exemples, qui seront présentés dans ce chapitre, comprennent les plasmas complexes et les cristaux de vortex.

2.2 Plasmas complexes

Un exemple important des systèmes mésoscopiques fortement corrélés est le plasma complexe (poussiéreux). Contrairement aux plasmas ordinaires constitués des électrons, des ions et des atomes neutres, les plasmas poussiéreux contiennent une quatrième espèce appelée « *particule (grain) poussiéreuse* ». Cette dernière peut être fabriquée par un matériau diélectrique ou conducteur, et peut avoir n'importe quelle forme. La plage des tailles typiques est comprise entre $100nm$ et environ $100\mu m$. Les particules de poussière qui sont dispersées dans des plasmas pour des études expérimentales, ont tendance à être des particules de verre ou de plastique (mélamine formaldéhyde est une particule couramment utilisée) ayant une forme sphérique avec une distribution très étroite de diamètre. Par exemple, les particules typiquement utilisées peuvent avoir un diamètre de $9.55\mu m$ et une masse $m \sim 6.9 \times 10^{-13}$ kg [26]. Ces particules sont appelées « particules monodisperses ». Le rapport charge/masse ($Q_d/m_d \approx 10^{-2}$ C kg⁻¹) des particules de poussière est faible, et par conséquent la réponse dynamique est lente. La fréquence du plasma de poussière ω_{pd} est de l'ordre de plusieurs Hertz, ainsi, le nombre d'images par seconde enregistré par des caméras CCD est largement suffisant pour étudier les processus dynamiques en détail. Contrairement aux plasmas complexes, les nuages des ions, dans les cristaux ioniques [21], sont environ 20 fois plus petits avec le même nombre de particules, par conséquent, la dynamique ionique est trop rapide pour suivre chaque ion individuellement.

En raison de la grande taille et masse des particules de poussière, les effets quantiques ne sont pas pertinents. Ceci est valable non seulement pour les températures actuellement utilisées, mais aussi pour des conditions cryogéniques avec des températures dans la gamme de micro-kelvin, à moins que des particules sous-nanométriques soient utilisées. Mais dans ce cas, l'avantage de réaliser un système de particules fortement chargées sera perdu.

Outre les expériences de laboratoire, les plasmas complexes se rencontrent fréquemment dans la nature, par exemple, dans les systèmes astrophysiques comme les anneaux planétaires [27] ou les queues cométaires [28]. Dans l'industrie, les particules poussiéreuses

sont à l'origine de contamination dans certains dispositifs de traitement par plasma [29].

2.2.1 Processus de charge et d'écrantage d'une poussière

La propriété la plus importante de la poussière dans un plasma, est probablement sa charge électrique. Dans un plasma de laboratoire, le mécanisme de charge dominant est la collecte des électrons et des ions. En raison de la grande mobilité des électrons (vitesse thermique élevée), le grain de poussière atteint une charge négative et, si le grain est assimilé à une capacité sphérique, sa charge Q_d est donnée par :

$$Q_d = 4\pi\epsilon_0 r_d \phi_d, \quad (2.4)$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide, r_d le rayon de la poussière et ϕ_d son potentiel de surface. Selon la théorie OML (Orbital Motion Limited)[30], le potentiel de surface ϕ_d est donné par la balance des courants électroniques et ioniques, et il ne dépend que de la température des ions et des électrons, ainsi que du rapport des masses de ces particules.

Dans un plasma complexe, la charge de la particule subit des fluctuations stochastiques². En général, l'amplitude des fluctuations est de l'ordre de $0.5\sqrt{Z_{eq}}$. Avec des grains de taille nanométrique, ayant des charges d'équilibre de l'ordre de $Z_{eq} = 1$, les fluctuations de charge peuvent amener les particules à se charger même positivement. Ainsi, on pourrait trouver des poussières chargées positivement et négativement dans le même plasma, ce qui peut conduire à une coagulation rapide des particules. Cependant, ces fluctuations sont faibles et très fréquentes de telle sorte qu'une influence sur la dynamique des particules n'est pas prévue pour des particules de taille de l'ordre de micro-mètre. En outre, Baumgartner *et al.* [31] ont montré que les effets des fluctuations des charges sont négligeables par rapport à l'effet de l'écrantage et le nombre de particules sur chaque couche n'est pratiquement pas affecté.

La poussière ainsi chargée, est entourée d'une gaine électrostatique. Au-delà de la gaine, la perturbation induite par la charge de la poussière est écrantée, et celle-ci demeure invisible pour le reste du plasma. Le processus d'écrantage de la poussière est assuré par les électrons et les ions. Il s'effectue sur une distance caractéristique égale à la longueur

2. Dans un plasma complexe, les électrons et les ions arrivent à la surface de la particule à des temps aléatoires, comme le bruit de tir. Par conséquent, la charge sur une particule fluctue en étapes discrètes (et à des moments aléatoires).

de Debye λ_D .

$$\lambda_D = \frac{\lambda_i \lambda_e}{\sqrt{\lambda_i^2 + \lambda_e^2}} \quad (2.5)$$

Les longueurs de Debye ionique et électronique sont données par :

$$\lambda_{i(e)} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T_{i(e)}}{n_{i(e)} e^2}}, \quad (2.6)$$

$n_{i(e)}$ est la densité ionique (électronique). Dans un plasma froid, on a généralement $T_i \ll T_e$, c-à-d, $\lambda_i \ll \lambda_e$, il en résulte que $\lambda_D \approx \lambda_i$, et dans ce cas, l'écrantage de la poussière est essentiellement assuré par les ions [32]. Ce modèle qui permet de déterminer la charge et l'écrantage dans un plasma complexe, suppose que le grain de poussière est isolé dans le sens où il n'affecte pas les orbites des électrons et des ions dans son voisinage, i.e, la densité de la poussière est faible. En général pour que le modèle OML soit valide, plusieurs conditions doivent être vérifiées :

- Les particules poussiéreuses doivent être isolées les unes des autres, ce qui signifie que la distance inter-particules a doit être plus grande devant λ_D : $\lambda_D \ll a$
- Les électrons et les ions sont en interaction coulombienne directe (non-écrantée) avec la poussière : $r_d \ll \lambda_D$
- Les ions et les électrons ne subissent pas de collisions avec les particules neutres durant leur interactions avec la poussière [33], cela implique que le libre parcours moyen des ions et des électrons avec les atomes neutres du plasma doit être grand devant la longueur de Debye : $\lambda_D \ll \lambda_{lpm}$.

2.2.2 Potentiel d'interaction

En général, dans un plasma poussiéreux, le potentiel d'interaction entre les grains de poussière, n'est pas seulement de nature électrostatique. Ceci est dû à la variabilité des charges des grains, leur couplage au plasma environnant,...etc. De plus, les interactions collectives peuvent avoir lieu lorsque la particule poussiéreuse est traitée comme une véritable composante du plasma [34]. Dans ce travail, nous considérons le cas de faible densité de poussière. Par conséquent, l'interaction entre les particules peut être calculée

dans l'approximation des particules isolées. Dans ce cas, la valeur de la force électrostatique exercée sur une particule à charge fixe $Z_d e$, et située à une distance r de la particule d'essai est donnée par :

$$F_{el} = -\frac{d\Phi(r)}{dr}, \quad (2.7)$$

où $\Phi(r) = Z_d e \phi_d(r)$ est le potentiel d'interaction. Pour des petites distances $r \ll \lambda_D$, le potentiel d'une particule isolée n'est pas affecté par l'effet d'écran généré par les ions. Dans ce cas, il peut être considéré comme étant un potentiel de Coulomb pur [35]. À des distances modérées (quelques longueurs de Debye $r \sim \lambda_D$) l'écrantage commence son effet et le potentiel d'interaction est affaibli par un facteur exponentiel supplémentaire,

$$\Phi(r) = \frac{Q_d^2}{4\pi\epsilon_0 r} \exp(-r/\lambda_D), \quad (2.8)$$

avec $Q_d = Z_d e$. Ce type de potentiel est bien connu dans les plasmas et la matière nucléaire comme le potentiel de Debye-Hückel ou de Yukawa, et est une bonne approximation pour tous les cas sans diffusion d'électrons ou des ions. Cependant, dès que la diffusion des ions se produit, le potentiel de Yukawa est démontré comme étant valide uniquement dans la direction perpendiculaire à la dérive ionique [36]. À grandes distances, des déviations par rapport à la forme de Yukawa ont été trouvées [34].

Avec l'interaction décrite par l'Eq. (2.8), un paramètre de couplage modifié pour les systèmes de Yukawa doit être défini. L'approche la plus simple vers un paramètre de couplage de Yukawa modifié Γ_Y est de multiplier Γ de l'Eq. (2.1) par le facteur exponentiel $\exp(-r/\lambda_D)$.

2.2.3 Formation des clusters dans un plasma complexe

Comme nous venons de le voir dans les paragraphes précédents, les particules poussiéreuses dans un plasma, atteignent des charges négatives très élevées en raison de la grande mobilité des électrons. Les charges typiques sont de l'ordre de $10^4 e$ pour une particule de $10\mu m$ de diamètre. Par conséquent, même à température ambiante, les particules poussiéreuses peuvent former des structures ordonnées.

Expérimentalement, les structures (2D) peuvent être observées en injectant artificiellement des particules poussiéreuses dans un plasma basse pression (généralement créé

par une décharge radiofréquence (rf) [37] dans un gaz (Argon)³. Les particules poussièreuses, injectées dans le plasma [24], sont soumises à un certain nombre de forces. Selon leur dépendance en charge électrique, ces forces peuvent être classées en deux groupes : le premier comprend les forces qui ne dépendent pas de la charge de la particule (force de gravité, force thermophorèse), tandis que le second groupe comprend des forces qui dépendent directement de la charge (force électrostatique, forces d'entraînement ionique et neutre).

Pour les particules de taille de l'ordre du micromètre, généralement utilisées dans l'étude des propriétés fondamentales des plasmas complexes, la gravité et les forces électriques sont dominantes. La force de gravité est simplement donnée par :

$$\mathbf{F}_g = m_d \mathbf{g} = \frac{4}{3} \pi r_d^3 \rho_d \mathbf{g}, \quad (2.9)$$

\mathbf{g} est l'accélération gravitationnelle, m_d est la masse de la poussière, ρ_d est la densité de masse. La force due au champ électrique est donnée par :

$$\mathbf{F}_E = Q_d \mathbf{E} \quad (2.10)$$

\mathbf{E} est le champ électrique. La force thermophorèse est appliquée uniquement pour léviter les particules de poussière dans le volume du plasma, permettant ainsi de former des structures 3D. Une autre force importante est la force d'entraînement ionique due au transfert de quantité de mouvement des ions sur la particule de poussière. Cependant, cette force n'est pas exploitée dans la formation des cristaux.

La force d'entraînement neutre est intéressante uniquement pour faire déplacer les particules et non pas pour l'identification des positions d'équilibre stables. Ainsi, cette force n'est pas considérée ici. En adaptant les autres forces, des structures cristallines finies et étendues à 2D peuvent être formées.

Les clusters⁴ de plasmas poussiéreux à 2D sont formés dans la gaine de charge d'espace au-dessus de l'électrode inférieure (figure (2.2)). Dans ces décharges, le champ

3. Le gaz inerte d'Argon est généralement utilisé avec des pressions comprises entre 0.5 à 100 Pa. La fréquence radio $\omega_{rf} = 13,56$ MHz est largement utilisée. Cette dernière est choisie bien au-dessus de la fréquence plasma des ions lourds, mais bien au-dessous de la fréquence plasma des électrons légers, ce qui s'exprime par $\omega_{pi} \ll \omega_{rf} \ll \omega_{pe}$

4. Le terme "cluster" est habituellement réservé aux systèmes avec un nombre de particules $N < 10^2 - 10^3$, tandis que pour des formations plus grandes, le terme "cristal" peut être utilisé.

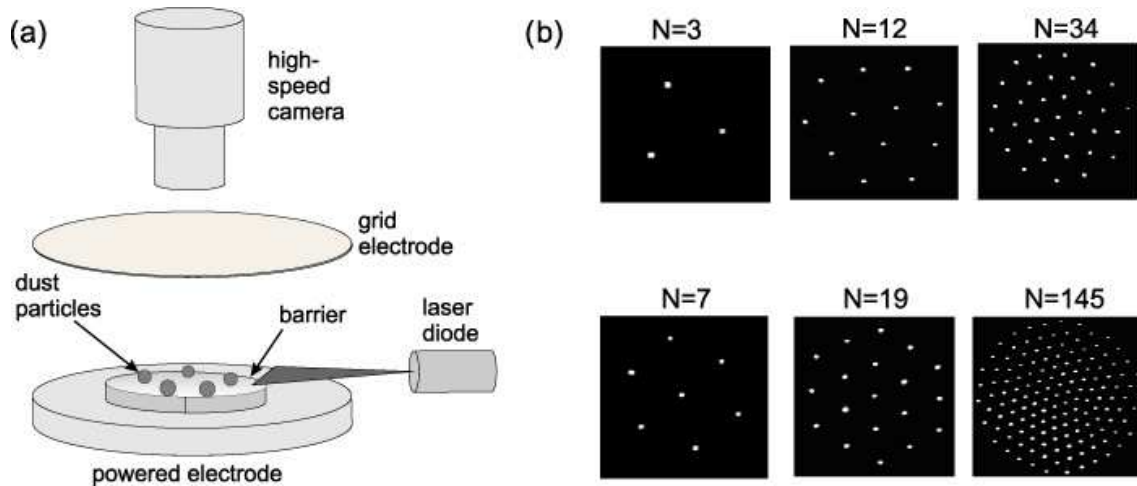


Figure 2.2 – (a) Schéma du dispositif expérimental; (b) images des clusters en équilibre avec $N = 3, 7, 12, 19, 34$ et 145 [38].

électrique de la gaine est généralement assez fort pour équilibrer le poids des particules. Puisque le champ électrique moyen dans la gaine augmente généralement vers l'électrode, les particules, qui ne sont pas trop lourdes, sont confinées à une hauteur bien définie au-dessus de l'électrode inférieure lorsque la force du champ électrique et la force de gravité sont en équilibre ($\mathbf{F}_E = \mathbf{F}_g$).

Le confinement horizontal des particules est réalisé par un anneau métallique à l'intérieur de l'électrode inférieure, ce qui donne au champ électrique une petite composante dans la direction horizontale. Le confinement horizontal des particules de poussière est généralement beaucoup plus faible que le confinement vertical. Par conséquent, l'ensemble des particules identiques, ayant pratiquement la même masse, sont confinées dans une mono-couche au-dessus de l'électrode, formant ainsi des clusters de poussière à deux dimensions.

La caractéristique principale de ces cristaux est leur paramètre de couplage Γ relativement important. En général, comme cela a été révélé par des simulations [39], ces structures ordonnées se produisent à $\Gamma \sim 137$ pour les systèmes à 2D, et à $\Gamma \sim 175$ pour le cas 3D. En effet, la dimensionnalité joue un rôle important dans la fusion; Les cristaux tridimensionnels (3D) fondent directement dans une phase liquide par une transition du premier ordre, mais la nature de la fusion cristalline bidimensionnelle (2D) a été débattue pendant des décennies [40, 41, 42]. Dans la théorie de Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young (KTHNY)[41], les cristaux 2D fondent d'abord dans une phase

hexatique puis passent de la phase hexatique à une phase liquide par l'intermédiaire des transitions de phases continues.

2.3 Vortex magnétiques dans les supraconducteurs mésoscopiques

2.3.1 Formation des clusters de vortex

Lorsqu'un supraconducteur est refroidi en dessous de sa température critique T_c , en présence d'un champ magnétique modéré H , le flux magnétique est expulsé de l'échantillon par effet Meissner [43]. Le champ H est alors annulé au sein du matériau par un courant d'écrantage supraconducteur (non dissipatif) circulant à sa périphérie et sur ses surfaces.

Pour des champs magnétiques appliqués plus élevés, on distingue deux types de supracon-

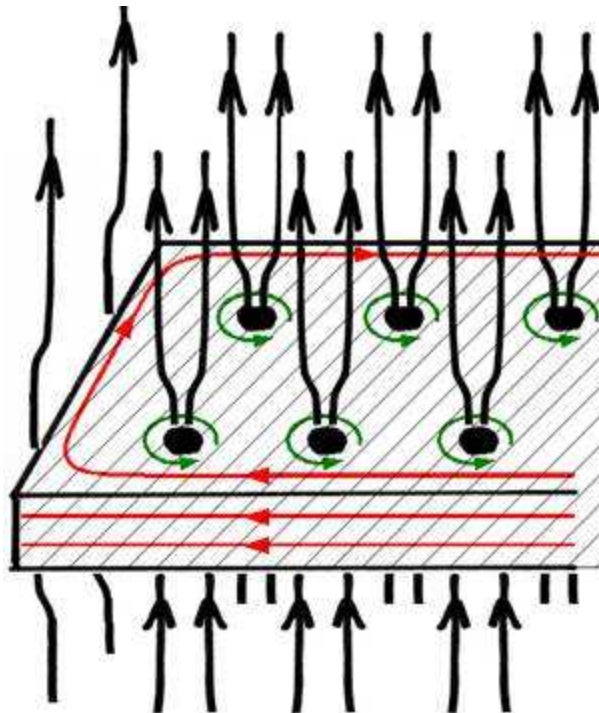


Figure 2.3 – Représentation de l'état mixte. Un champ magnétique est appliqué (représenté en noir). Des courants supraconducteurs (en rouge) se développent à la surface afin d'écranter ce champ : ce sont les courants responsables de l'effet Meissner. D'autres courants supraconducteurs se développent (en vert) afin de créer des vortex, sortes de « tunnels » non supraconducteurs, traversés par un quantum de flux magnétique [44].

ducteurs. La différence provient du rapport κ (Paramètre de Ginsburg) entre la longueur de pénétration magnétique de London λ et la longueur de cohérence ξ [43]. Cette dernière, de l'ordre de quelques nm à quelques dizaines de nm , est l'échelle spatiale sur laquelle peut varier la densité de paires de Cooper n_s . Si $\kappa < 1/\sqrt{2}$, le supraconducteur est dit de type I : la supraconductivité est brutalement détruite au champ critique H_c . Si, au contraire, $\kappa > 1/\sqrt{2}$, le supraconducteur est dit de type II ; dans ce cas, si on expose le matériau à un champ plus intense qu'un champ critique H_{c1} , le flux pénètre partiellement dans le supraconducteur sous forme de vortex comme le montre la figure (2.3). Ces derniers se trouvent dans l'état mixte car ils comprennent des zones normales, les coeurs de tourbillons, entourés par des supercourants, responsables à la fois de la génération du flux magnétique dans les coeurs, et de son écrantage dans le matériau environnant.

Une augmentation supplémentaire du champ magnétique (voir figure(2.4) au-delà d'une autre valeur critique H_{c2} (très supérieur à H_{c1}), conduit à une transition progressive de l'état supraconducteur à l'état normal (suppression de la supraconductivité lorsque les coeurs se chevauchent).

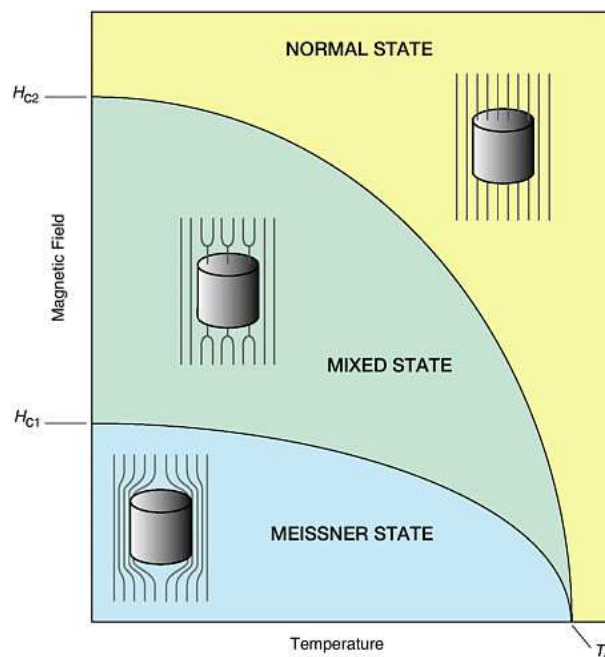


Figure 2.4 – Diagramme de phase pour la pénétration du champ magnétique dans un supraconducteur type II [45].

Les vortex dans les supraconducteurs mésoscopiques à 2D, peuvent être considérés comme un type spécifique de particules qui interagissent magnétiquement entre elles à

travers des courants tournants. En effet, il est intéressant d'étudier la structure des vortex dans un supraconducteur mésoscopique lorsque seulement un nombre restreint de vortex est considéré.

Dans un système infini, les vortex s'organisent dans une structure régulière connue comme le réseau de vortex de Abrikosov [46]. Dans les systèmes finis, le réseau triangulaire de Abrikosov est modifié par la géométrie de l'échantillon qui agit comme un potentiel de confinement. Cela rend les structures de vortex confinées semblables à d'autres systèmes tels que, les électrons dans les atomes artificiels qui présentent des structures auto-organisées. Cabral *et al.* [47] ont constaté que les vortex forment des structures en couches dans les disques supraconducteurs. Un exemple est illustré sur la figure (2.5), montrant le réseau de vortex dans le cristal de diborure de magnésium (MgB2) [48] refroidi sous T_c et soumis à un champ magnétique extérieur. Avec l'augmentation de la température, ces vortex deviennent mobiles à l'intérieur du matériau, conduisant ainsi le système à exhiber une transition de phase ordre-désordre où la formation d'un liquide de vortex peut avoir lieu. Ce phénomène de fusion est observé dans les supraconducteurs à haute température critique [49].

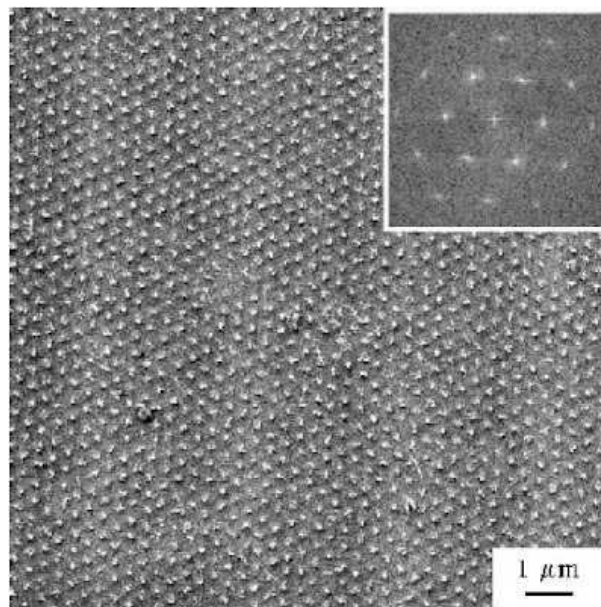


Figure 2.5 – Image du réseau de vortex dans un cristal de MgB2 à une température $T = 6K$ sous un champ magnétique de $200 Oe$ ($\sim 16 \times 10^3 A.m^{-1}$) [48].

2.3.2 Interaction entre les vortex

Comme nous l'avons évoqué précédemment, un supraconducteur de type II présente un état mixte, caractérisé par la pénétration progressive du champ magnétique sous forme de lignes de flux ou vortex, lorsque l'excitation magnétique est comprise entre H_{c1} et H_{c2} . Les lignes de flux sont parallèles à la direction du champ magnétique appliqué, et traversent l'échantillon de part et d'autres de ses extrémités.

À la différence des supraconducteurs infinis, les états de vortex dans les échantillons mésoscopiques finis sont déterminés par l'interaction vortex-vortex et la forme de l'échantillon qui agit comme un confinement.

Dans la limite du paramètre GL (Ginzburg-Landau) $\kappa = \lambda/\xi \gg 1$ (où λ est la longueur de pénétration de London, et ξ est la longueur de cohérence qui caractérise le supraconducteur), le potentiel d'interaction entre les vortex peut être bien approché par l'expression de London [50] :

$$V_s(r) = \beta K_0(r/\lambda), \quad (2.11)$$

avec K_0 est la fonction de Hankel d'ordre zéro et $\beta = \Phi_0/2\pi\lambda^2$. Le champ magnétique pénétré est quantifié en unité de flux quantique $\Phi_0 = hc/2e$.

Dans ce travail, nous considérons un modèle qui peut bien décrire les propriétés des vortex dans un disk supraconducteur de type II. Si l'épaisseur de l'échantillon d est inférieure à la longueur de cohérence ξ du supraconducteur, ce dernier peut être considéré bidimensionnel. Ainsi, le champ magnétique pénètre dans le système sous forme de vortex bidimensionnels (2D)[49]. À courtes distances, i.e, $r \ll \lambda_\perp$ ($\lambda_\perp = \lambda^2/d$ est la longueur de pénétration dans un supraconducteur à 2D), le potentiel d'interaction décrit par l'Eq. (2.11) aura la forme d'un potentiel logarithmique [51] :

$$V_s(r) = -\beta \ln r \quad (2.12)$$

Ce modèle suppose que le rayon R du disk supraconducteur obéit à l'inégalité $\xi \ll R \ll \lambda_\perp$, dans le sens où les vortex sont considérés comme des particules ponctuelles. La stabilisation des vortex dans un supraconducteur est assurée par la forme de l'échantillon. Nous allons voir, dans le modèle numérique (Chapitre 3), que cette stabilisation est prise en compte par un potentiel de confinement externe.

3

Modèles théoriques et approches numériques

3.1 Modèle théorique des clusters mésoscopiques

Le modèle théorique utilisé tout au long de cette thèse vise à décrire les systèmes mésoscopiques bidimensionnels (2D), qui consistent en un nombre fini de particules en interaction mutuelle et piégées par un potentiel de confinement externe. Puisque l'énergie cinétique, dans la limite classique, ne dépend que de la température, cette part d'énergie ne contribue pas aux propriétés de l'état fondamental du système à $T = 0$.

Donc l'Hamiltonien général est décrit par la somme de l'énergie d'interaction entre les particules et le potentiel de confinement où les particules sont piégées ;

$$H = \sum_{i < j}^N V_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) + \sum_{i=1}^N V^{ext}(\mathbf{r}_i), \quad (3.1)$$

avec N le nombre total de particules, $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ désigne les coordonnées de la i^{e} particule à 2D.

Dans les systèmes finis, la combinaison d'un potentiel répulsif et d'un potentiel externe stabilisant, permet aux particules de s'organiser en structures fortement couplées. Cependant, dans les systèmes étendus, le potentiel d'interaction, seul, permet la formation de la structure atomique, la matière dans l'état solide, les corrélations dans les plasmas...etc.

Dans certaines expériences, le confinement externe s'est avéré presque isotrope et harmonique. Ce dernier, fournit une approximation utile pour les types arbitraires de potentiels

isotropes au voisinage du point d'équilibre stable.

$$V^{ext}(\mathbf{r}_i) = \frac{m}{2} \omega_0^2 \mathbf{r}_i^2 \quad (3.2)$$

ω_0 est la fréquence radiale du confinement, m est la masse de la particule.

D'autre part, les forces dans les systèmes mésoscopiques peuvent être adaptées de telle sorte que différentes géométries de confinement puissent être réalisées.

La nature du potentiel d'interaction entre les particules, dépend du système étudié. Par exemple, le potentiel d'interaction dans un système classique des atomes artificiels¹ “*electrons in quantum dots*”, est purement coulombien [14]

$$V_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \frac{q^2}{4\pi\epsilon} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (3.3)$$

où q est la charge de la particule et ϵ est la constante diélectrique du milieu.

Dans d'autres environnements, tels que les plasmas complexes, le potentiel d'interaction entre les particules poussiéreuses est décrit par un potentiel de Coulomb écranté qui, dépend non seulement des paramètres physiques libres mais aussi de l'environnement du plasma. Ce potentiel est approximé par le potentiel de Yukawa [52];

$$V_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\exp(-|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|/\lambda_D)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (3.4)$$

λ_D est le paramètre d'écrantage de Debye et ϵ_0 est la permittivité du vide.

L'interaction qui permet de reproduire les structures observées dans les expériences des billes métallique chargées et les vortex magnétiques dans les supraconducteurs est modélisée par le potentiel logarithmique suivant :

$$V_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = -\beta \ln(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (3.5)$$

Ces modèles, seront discutés en détails dans les chapitres qui suivent.

1. Un terme qui désigne une classe des systèmes avec des états électroniques liés, discrets comme c'est le cas avec des atomes ou des molécules d'origine naturelle.

3.2 Approches numériques

La structure de la matière était (et demeure) l'un des principaux problèmes ouverts de la science depuis longtemps. Le problème est étroitement lié au traitement exact des corrélations entre plusieurs corps. Prendre rigoureusement en compte l'interaction mutuelle entre un grand nombre de particules individuelles nécessite soit la résolution d'intégrales multidimensionnelles, soit la résolution des systèmes d'équations différentielles d'ordre élevé, qui sont couplés par des termes d'interaction.

Dans le cas de fortes corrélations, le problème mathématique ne peut être réduit sans simplifications excessives, car les approches analytiques impliquent souvent des approximations plus ou moins incontrôlables pour réduire les effets rétroactifs non linéaires du problème. Cependant, le développement extrêmement rapide des ordinateurs numériques au cours des dernières décennies, et en particulier la disponibilité croissante d'équipements informatiques tels que les stations de travail et les clusters Linux, permettent aux chercheurs de résoudre aujourd'hui de nombreuses équations fondamentales de la physique sans simplifications mathématiques, i.e, *ab-initio*.

Dans cette thèse, nous nous concentrerons en particulier sur les systèmes confinés de quelques particules. Ces systèmes finis servent de laboratoires très appropriés pour l'étude des phénomènes fondamentaux des interactions à plusieurs corps, car ils n'exigent pas de simplifications indésirables des équations fondamentales. De plus, dans les systèmes piégés, il n'y a pas de conditions aux limites périodiques à considérer.

3.2.1 Algorithme de Monte Carlo-Metropolis

Dans les termes les plus généraux, la méthode de Monte-Carlo est une approche statistique pour calculer des intégrales en utilisant des nombres aléatoires dont la distribution est minutieusement choisie. Cette méthode est extrêmement générale et les recettes de base nous permettent, en principe, de résoudre tout problème en physique statistique. Cependant, dans la pratique, beaucoup d'efforts doivent être dépensés dans la conception des algorithmes spécifiquement adaptés aux problèmes à portée de main.

En thermodynamique, l'état d'un système en contact avec un thermostat est décrit par trois variables; le nombre de particules dans le système N , le volume V et la tempé-

rature T . Pour les clusters confinés harmoniquement, le rôle du volume V est pris par la fréquence de confinement ω_0 . Les micro-états d'un tel système sont représentés par l'ensemble canonique (N, ω_0, Γ) où la température est décrite par le paramètre de couplage Γ ($T = 1/\Gamma$).

L'algorithme de Metropolis [53] génère des échantillons dans l'ensemble canonique, ce qui permet des simulations avec des températures constantes, donnant ainsi des résultats thermodynamiques directs (moyennes statistiques des propriétés d'équilibre). De ce fait, les méthodes de Monte Carlo sont aussi bien adaptées pour l'étude des transitions de phase dans les systèmes classiques et quantiques.

L'élément clé de cet algorithme est le concept de chaîne de Markov. Cela signifie que la génération d'un nouvel état $\mathbf{r}^{(i)}$, dans l'espace de configuration, n'est basée sur aucune autre information que sur la connaissance de l'état précédent $\mathbf{r}^{(i-1)}$. Le processus de Markov génère un chemin d'accès dans l'espace de configuration $(\mathbf{r}^{(0)}, \mathbf{r}^{(1)}, \dots)$, et toutes les quantités (grandeurs physiques) sont moyennées le long de cette trajectoire, qui est l'analogue probabiliste du chemin généré par les équations du mouvement dans la dynamique moléculaire [12].

Suivant l'approche introduite par Metropolis *et al.* [53], l'algorithme fonctionne comme suit :

1. Générer une configuration initiale $\mathbf{r}_N^{(i)}$, et calculer son énergie $E(\mathbf{r}_N^{(i)})$.
2. Proposer un déplacement aléatoire $\delta\mathbf{r}$, tel que, $\mathbf{r}_N^{(j)} = \mathbf{r}_N^{(i)} + \delta\mathbf{r}$, et calculer la nouvelle énergie $E(\mathbf{r}_N^{(j)})$.
3. Accepter le déplacement $\delta\mathbf{r}$ avec une probabilité \mathcal{P}_{ac} , qui décrit la probabilité d'accepter le passage d'un état $\mathbf{r}_N^{(i)}$ vers un état $\mathbf{r}_N^{(j)}$:

$$\mathcal{P}_{ac}(\mathbf{r}_N^{(i)} \rightarrow \mathbf{r}_N^{(j)}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \Delta E \leq 0 \\ \exp(-\frac{\Delta E^{(ij)}}{k_B T}) & \text{si } \Delta E > 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

$$\text{Avec } \Delta E = E(\mathbf{r}_N^{(j)}) - E(\mathbf{r}_N^{(i)})$$

Les déplacements MC qui diminuent l'énergie potentielle sont toujours acceptés. D'autre part, les déplacements qui augmentent l'énergie potentielle ne sont acceptés qu'avec une

probabilité donnée par le facteur de Boltzmann et dépendent donc de la température spécifique du système. Le déplacement $\delta \mathbf{r}$ proposé, ne dépend pas de l'état initial. Par conséquent la distribution correcte des états générés est garantie pour cet algorithme par la probabilité d'acceptation \mathcal{P}_{ac} entre deux états, qui remplit la condition de microréversibilité ou bilan détaillé défini par :

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}_N^{(i)})\mathcal{P}_{ac}(\mathbf{r}_N^{(i)} \rightarrow \mathbf{r}_N^{(j)}) = \mathbf{P}(\mathbf{r}_N^{(j)})\mathcal{P}_{ac}(\mathbf{r}_N^{(j)} \rightarrow \mathbf{r}_N^{(i)}), \quad (3.7)$$

où $\mathbf{P}(\mathbf{r}_N^{(i)})$ est la densité de probabilité de trouver le système dans une configuration $\mathbf{r}_N^{(i)}$.

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}_N^{(i)}) = e^{-\beta E(\mathbf{r}_N^{(i)})}/Z, \quad (3.8)$$

$\beta = 1/k_B T$ ou k_B est la constante de Boltzmann et Z est la fonction de partition de l'ensemble canonique :

$$Z = \sum_{\Omega} e^{-\beta E(\mathbf{r}_N^{(i)})}, \quad (3.9)$$

où Ω est le volume dans l'espace des configurations.

A partir d'une configuration initiale $\mathbf{r}_N^{(0)} \in \Omega$, après un temps de thermalisation initiale de la simulation, la valeur moyenne d'une quantité physique générique $A(\mathbf{r}_N)$, peut être estimée comme une moyenne arithmétique sur la chaîne de Markov, i.e, K étapes consécutives de Monte-Carlo.

$$\langle A \rangle = \sum_{i \in \Omega} \mathbf{P}(\mathbf{r}_N^{(i)}) A(\mathbf{r}_N^{(i)}) \approx \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K A(\mathbf{r}_N^{(k)}) \quad (3.10)$$

En Monte Carlo, la collection des résultats est très similaire à ce qui se fait dans le cas d'une expérience. Donc, Il est nécessaire d'obtenir une estimation de l'erreur statistique commise dans l'évaluation de la valeur moyenne d'une quantité physique. Durant l'échantillonnage des positions aléatoires, l'estimation numérique des valeurs moyennes exhibent des fluctuations statistiques (erreur statistique) autour de la valeur exacte. En effet, pour un intervalle de confiance donné, cette erreur est proportionnelle à la variance (la dispersion statistique de A autour de sa moyenne) et inversement proportionnelle au nombre d'étapes de Monte Carlo. Pour un nombre d'étapes très grand ($\sim 10^5 - 10^6$), l'erreur tend pratiquement vers 0.

La simulation MC est utilisée pour obtenir une configuration proche d'une configuration stable du système. Par configuration stable, nous entendons une configuration avec

un minimum global de l'énergie.

3.2.2 Méthode de minimisation de l'énergie

Le processus de Monte-Carlo utilisé, pour les systèmes avec un nombre relativement important de particules, a montré une convergence très lente dans le calcul des configurations d'énergies minimales. Pour contourner ce problème, nous complétons la technique de simulation MC par la méthode de minimisation de Newton [54]. Pour les clusters 2D, supposons qu'après n pas de MC, les coordonnées des particules dans un cluster sont données par $\{r_{\alpha,i}^n; \alpha = x, y; i = 1, \dots, N\}$, l'énergie potentielle décrite par l'Hamiltonien (3.1), au voisinage de cette configuration, peut être écrite sous la forme quadratique suivante :

$$H = H(r_{\alpha,i}^n) + \sum_i \sum_{\alpha} \partial H / \partial r_{\alpha,i} (r_{\alpha,i} - r_{\alpha,i}^n) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta} \frac{\partial^2 H}{\partial r_{\alpha,i} \partial r_{\beta,j}} (r_{\alpha,i} - r_{\alpha,i}^n) (r_{\beta,j} - r_{\beta,j}^n), \quad (3.11)$$

On définit $H_{\alpha,i} = -\partial H / \partial r_{\alpha,i}$ comme étant une force, et $H_{\alpha\beta,ij}$ la matrice dynamique du système

$$H_{\alpha\beta,ij} = \frac{\partial^2 H}{\partial r_{\alpha,i} \partial r_{\beta,j}} \quad (3.12)$$

On aura alors :

$$H = H(r_{\alpha,i}^n) - \sum_i \sum_{\alpha} H_{\alpha,i} (r_{\alpha,i} - r_{\alpha,i}^n) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta} H_{\alpha\beta,ij} (r_{\alpha,i} - r_{\alpha,i}^n) (r_{\beta,j} - r_{\beta,j}^n) \quad (3.13)$$

En appliquant la condition du minimum d'énergie sur l'Hamiltonien (3.13), i.e, $\partial H / \partial r_{\alpha,i} = 0$, on arrive alors à :

$$\sum_j \sum_{\beta} H_{\alpha\beta,ij} (r_{\beta,j} - r_{\beta,j}^n) = H_{\alpha,i} \quad (3.14)$$

Au lieu de résoudre l'ensemble des équations (3.14), on résout,

$$\sum_j \sum_{\beta} (\eta \delta_{\alpha\beta,ij} + H_{\alpha\beta,ij}) (r_{\beta,j} - r_{\beta,j}^n) = H_{\alpha,i} \quad (3.15)$$

$\delta_{\alpha\beta,ij}$ est la matrice identité, η est un paramètre d'amortissement. Avec le système d'équations (3.14) la méthode fonctionne uniquement au voisinage du minimum. Par conséquent le coefficient d'amortissement η est ajouté empiriquement dans l'équation (3.15) afin d'assurer la stabilité de l'algorithme. Le système d'équations linéaires (3.15) est résolu par la

méthode d'élimination de Gauss [55].

Le processus de convergence fonctionne comme suit : dans les premières itérations, η prend une grande valeur $\eta = 100$. Si à l'étape suivante, l'énergie du système diminue le coefficient d'amortissement est réduit, tandis que dans le cas contraire, la valeur de η est augmentée. Le processus d'itérations est arrêté, après que la valeur de η soit inférieure à une valeur critique et l'énergie n'a plus besoin d'être améliorée au-delà de la précision requise.

Après les différentes configurations initiales, générées aléatoirement pour chaque particule, le processus itératif de Newton permet d'obtenir la configuration de l'état fondamental (état de plus basse énergie), à condition de le répéter suffisamment de fois pour éviter les états métastables (minima locaux).

3.3 Matrice dynamique et modes propres

Afin d'étudier les propriétés d'un système de particules en interaction, il est très utile d'avoir un aperçu de la dynamique linéaire du système. L'analyse des modes normaux est l'une des études les plus efficaces pour caractériser la dynamique propre d'un système physique. Elle fournit des informations sur les modes accessibles par un système, en supposant que ce dernier est stabilisé par des potentiels harmoniques. Cette analyse a été utilisée pendant plusieurs décennies dans l'étude des phénomènes physiques tels que le spectre de vibration atomique et le phénomène de transport dans les solides. Les mouvements des particules, en mode normal, sont approximés par des lignes droites. Partout sur cette ligne, la somme de toutes les forces sur une particule, conduit cette dernière à un autre point sur la même ligne. En d'autres termes, les modes normaux sont le cas particulier où les forces s'alignent avec les déplacements. Comme la force peut être exprimée par l'équation (3.14), on obtient le problème aux valeurs propres suivant :

$$\sum_j \sum_\beta H_{\alpha\beta,ij} r_{\beta,j}^* = \lambda_i r_{\alpha,i}^* \quad (3.16)$$

où λ_i et $r_{\alpha,i}^*$ sont respectivement, les valeurs et les vecteurs propres du système (3.16). Une fois le minimum global de l'Hamiltonien est trouvé par des techniques d'optimisation, le calcul des fréquences normales et des vecteurs normaux peut se faire par diagonalisation

numérique du Hessien (matrice dynamique) donné par l'Eq. (3.12). Cependant, pour les grands systèmes, des techniques spéciales doivent être utilisées pour contourner les limitations de calcul. À cette fin, nous avons fait usage des méthodes itératives pour approcher simultanément toutes les valeurs propres de la matrice dynamique du système. L'algorithme de référence sur ce thème est la "méthode QR" [56] que nous examinerons dans les prochains paragraphes.

3.3.1 Décomposition QR

En Algèbre linéaire, la décomposition QR d'une matrice A est une décomposition de la forme :

$$A = QR, \quad (3.17)$$

où Q est une matrice orthogonale, i.e, $Q^T Q = I$ et R triangulaire supérieure. Si A est inversible, la factorisation correspondante est alors unique. Il existe plusieurs méthodes pour calculer la décomposition QR. L'une des plus stables, est celle basée sur le procédé de Householder [56]. Ce dernier consiste à multiplier la matrice A par une suite de matrices de Householder de la forme :

$$P_k(v) = \begin{cases} I_k - \frac{2vv^T}{\|v\|^2} & \text{si } v \neq 0 \\ I_k & \text{si } v = 0 \end{cases} \quad (3.18)$$

Avec $v = x_k + \|x_k\|e_1$, où $e_1 = (1, 0, 0, \dots, 0)^T$, I_k étant la matrice identité d'ordre k

L'idée est d'appliquer une transformation de Householder successivement à chacun des vecteurs $(x_1, x_2, \dots, x_k, \dots, x_{n-1})$ de la matrice A (ayant pour taille $n, n-1, \dots, n-k+1, \dots$ et 2 respectivement) afin d'annuler tous les termes sous diagonaux. Donc, pour annuler les $n-k$ dernières composantes de x_k , la matrice de transformation U_k est donnée par :

$$U_k = \begin{pmatrix} I_{k-1} & 0 \\ 0 & P_k \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

P_k étant la matrice de Householder d'ordre k définie par l'Eq. (3.18). Au final, après avoir appliqué $n-1$ transformations de Householder, la décomposition QR de A est obtenue

en posant :

$$Q = U_1 U_2 \dots U_{n-1} \text{ et } R = U_{n-1} U_{n-2} \dots U_1 A.$$

3.3.2 Algorithme QR de base

Comme son nom l'indique, l'algorithme QR est étroitement lié à la décomposition QR vue précédemment. Avec $A = QR$, on obtient :

$$RQ = Q^T A Q, \quad (3.20)$$

RQ est semblable à A , donc ces deux matrices ont exactement les mêmes valeurs propres. Les itérations de la méthode QR génèrent, pour une matrice initiale $A^{(0)} = A$, une séquence de matrices similaires via des factorisations QR successives.

Pour $k = 1 \dots$ jusqu'à convergence ;

$$\begin{cases} A^{(k)} = R^{(k)} Q^{(k)} \\ A^{(k-1)} = Q^{(k)} R^{(k)} \end{cases} \quad (3.21)$$

Lorsque la convergence est atteinte, la limite de $A^{(k)}$ est une matrice triangulaire supérieure (avec bien sûr les valeurs propres de A sur la diagonale.)

3.3.3 Méthode QR-Hessenberg

L'implémentation de la méthode QR sur une matrice pleine, représente un calcul dont le coût est de l'ordre de n^3 *flops* par itération [56]. Dans ce travail, nous avons plutôt adopté une variante appelée méthode QR-Hessenberg, qui permet une grande économie de calcul. L'idée consiste à démarrer les itérations avec une matrice $H^{(0)}$ de type Hessenberg supérieure, i.e, $H_{ij}^{(0)} = 0$ pour $i > j + 1$. Avec ce type de transformation en matrice de Hessenberg, le calcul de $H^{(k)}$ ne requiert que n^2 *flops* par itération.

Toute matrice $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, peut être transformée en une matrice semblable de la forme de Hessenberg supérieure. L'algorithme nécessite $n - 2$ étapes et la matrice de transformation peut être calculée comme produit de matrices de Householder $U_1 \dots U_{n-2}$ définies dans les paragraphes précédents. La procédure est alors comme pour la factorisation QR, en traitant toutes les colonnes de A mais en excluant les termes diagonaux, c-à-d, la k -ième

étape consiste à transformer A , à l'aide de la matrice de transformation de Householder U_k (Eq. (3.18)), afin d'annuler les éléments situés sur les lignes $k + 2, \dots, n$ de la k -ième colonne pour $k = 1, \dots, n - 2$. Après $n - 2$ étapes de réduction, on obtient une matrice B sous forme de Hessenberg supérieure tel que : $A = TB$ et $T^T = U_{n-2}U_{n-3}\dots U_1$. L'intérêt est que la matrice $BT = T^TAT$ est semblable à A (partageant les mêmes valeurs propres), tout en conservant la forme d'une matrice de Hessenberg.

L'algorithme QR (Eq. (3.21)) appliqué sur T^TAT , ayant presque tout ses éléments au-dessous de la sous diagonale égaux à zéros, présente une complexité² de $\mathcal{O}(n^2)$ opérations par étape au lieu de $\mathcal{O}(n^3)$ pour la méthode QR appliquée sur une matrice pleine.

2. La complexité d'un algorithme est le nombre d'opérations élémentaires (affectations, comparaisons, opérations arithmétiques) effectuées par un algorithme. Ce nombre s'exprime en fonction de la taille n des données.

4

Dynamique et stabilité des clusters de Yukawa à 2D

Parmi les sujets qui font partie de la recherche des systèmes finis à deux dimensions (2D), la vibration et les propriétés de fusion des clusters de plasmas complexes sont d'une grande importance pour la compréhension des principes fondamentaux de ces systèmes.

Les propriétés spectrales et structurales des systèmes piégés par un potentiel de confinement parabolique ont été l'objet de recherche de plusieurs groupes théoriques [57, 58, 59, 60]. Le processus de fusion a été étudié en détail par Kong *et al.* [59]. Ces derniers ont trouvé que la fusion, dans ces systèmes, est fortement influencée par la longueur d'écrantage. D'autres groupes se sont plutôt intéressés à la fois aux systèmes simples et binaires dans un confinement de la paroi dure "Hard Wall" [61]. En outre, les clusters bidimensionnels sans conditions aux limites ont été aussi considérés par Tsyтович *et al.* [62]. Récemment D'yachkov et ses collègues [23] ont trouvé que l'effet d'écran combiné avec l'anisotropie de confinement permet de réduire considérablement l'extension spatiale du système, ainsi de minimiser son énergie potentielle, ce qui conduit à la modification des structures en couches.

Comme les particules interagissent également avec les parois, i.e, avec le confinement, on peut s'attendre que la forme géométrique de ce dernier joue un rôle crucial dans la modification des propriétés des clusters, si, l'ordre de grandeur associé à l'interaction entre les particules est comparable à l'ordre de grandeur de l'interaction des particules avec le confinement. Ceci nous a incités à considérer un potentiel de confinement plus général en forme d'une loi de puissance.

Dans ce chapitre [63], nous allons particulièrement exposer le diagramme de phase relatif aux différentes configurations résultantes de la compétition entre le paramètre

d'écrantage κ et la puissance du confinement n . Ensuite, nous présentons une analyse détaillée des propriétés spectrales en terme de modes normaux d'oscillations. Une attention particulière est accordée à l'un des modes les plus importants, à savoir, le mode du centre de masse, connu pour son intérêt fondamental dans le calcul des propriétés de transport [64] et pourrait être très utile pour les expériences sur les systèmes fortement couplés. En outre, les résultats sur les modes de plus basses fréquences non-nulles sont illustrés comme première mesure de la stabilité des clusters de Yukawa. L'influence de la forme du confinement sur le processus de fusion est déterminée, où, plusieurs paramètres sont utilisés pour l'identification de la transition de phase ordre-désordre.

4.1 Modèle numérique

4.1.1 Hamiltonien du système

Dans un plasma complexe, l'évolution temporelle des particules poussiéreuses se fait sur une échelle de temps beaucoup plus longue que celle des ions et des électrons du plasma environnant. Ainsi, le système peut être traité classiquement. Le modèle standard pour décrire un tel système à 2D est basé sur l'Hamiltonien H de N particules en interaction mutuelle placées dans un potentiel de confinement,

$$H = \sum_{i=1}^N V_C(r_i) + \sum_{i>j}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (4.1)$$

Conformément aux conditions expérimentales [65], toutes les particules sont considérées comme identiques ayant toutes la même masse, charge et forme.

Pour un plasma non-collisionnel et isotrope, le potentiel d'interaction entre les particules de poussière est approximativement donné par le potentiel de Yukawa.

$$V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\exp(-|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|/\lambda_D)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (4.2)$$

L'effet du plasma environnant sur l'interaction est condensé dans le paramètre d'écrantage statique $\kappa \sim 1/\lambda_D$, qui dépend des densités $n_{e,i}$ et températures $T_{e,i}$ (cf. chapitre 2). Étant donné que l'interaction entre les particules est purement répulsive, un confinement externe est nécessaire pour former des cristaux. Dans notre étude, nous avons considéré

un potentiel de confinement en forme d'une loi de puissance donné par :

$$V_C(r_i) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 R^2 \left(\frac{r_i}{R}\right)^n, \quad n = 2, 3, 4, \dots \quad (4.3)$$

où m est la masse de la particule, r_i est la coordonnée de la i -ème particule, ω_0 étant la fréquence radiale du confinement et R le rayon à la limite de la paroi dure "Hard wall".

4.1.2 Système d'unités

L'Hamiltonien (4.1) implique un grand nombre de paramètres, à savoir la charge q , la masse m , la fréquence de piège ω_0 et le paramètre d'écrantage κ . En fait, le nombre de variables peut être réduit en introduisant des unités sans dimension. Une échelle d'énergie peut facilement être obtenue en égalant l'énergie de confinement externe et l'interaction de Coulomb pure entre deux particules, i.e, $E_0 = \frac{1}{2}m\omega_0^2 R^2 \left(\frac{r_0}{R}\right)^n = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}$. À partir de cette expression, on définit l'unité de longueur r_0 comme étant la distance d'équilibre entre deux particules classiques identiques en l'absence d'écrantage. L'unité de température est étroitement liée à l'unité d'énergie par E_0 . Le système d'unités est résumé dans le tableau (4.1).

Distance r_0	$(q^2/4\pi\epsilon_0\alpha)^{1/(n+1)} R^{(n-2)/(n+1)}$
Energie E_0	$(q^2/4\pi\epsilon_0)^{n/(n+1)} \alpha^{1/(n+1)} R^{(2-n)/(n+1)}$
Température T_0	$E_0 k_B^{-1}$
Paramètre d'écrantage κ_0	r_0^{-1}

Table 4.1 – Unités de longueur et d'énergie d'un système de particules en interaction, piégées par un potentiel de confinement en forme d'une loi de puissance.

Avec $\alpha = \frac{1}{2}m\omega_0^2$. Notons que, dans la limite de la paroi dure, i.e, $n \rightarrow \infty$, on a $r_0 \rightarrow R$ et $E_0 \rightarrow (q^2/4\pi\epsilon_0)/R$. Par exemple, avec les paramètres du plasma définis dans la Réf. [65], i.e, masse du grain poussiéreux $m_d = 1.5 \times 10^{-12}$ Kg, charge acquise sur le grain $Z \sim 21900$ et fréquence du confinement $\omega_0 = 6.4 \text{ s}^{-1}$, les unités de longueur et d'énergie (pour le cas d'un confinement parabolique) prennent respectivement les valeurs : $r_0 \approx 1.6 \text{ mm}$ et $E_0 \approx 431 \text{ eV}$.

En effectuant les transformations, $r \rightarrow r/r_0$, $E \rightarrow H/E_0$, $T \rightarrow T/T_0$ et $\kappa \rightarrow \kappa/\kappa_0$, l'Hamiltonien adimensionnel aura la forme suivante :

$$E = \sum_{i=1}^N r_i^n + \sum_{i>j}^N \frac{\exp(-\kappa|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (4.4)$$

On note que les configurations de l'état fondamental ne dépendent pas de la fréquence du confinement ω_0 . Cette dernière définit l'échelle de longueur et de l'énergie du système. Ainsi, les propriétés de ce dernier dépendent uniquement des paramètres suivants : le nombre de particules N , la puissance du confinement n et le paramètre d'écrantage κ .

Tous les résultats seront donnés en unités de r_0 , E_0 et T_0 .

Les configurations de l'état fondamental sont calculées, à l'aide des simulations Monte-Carlo.

Les $2N$ modes normaux du système sont obtenus avec l'algorithme QR (cf. chapitre 3) en résolvant le problème aux valeurs propres suivant :

$$A\vec{\chi} = \lambda\vec{\chi} = \omega^2\vec{\chi}, \quad (4.5)$$

où A est la matrice dynamique donnée par ;

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial x_i \partial x_j} & \frac{\partial^2 E}{\partial x_i \partial y_j} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial y_i \partial x_j} & \frac{\partial^2 E}{\partial y_i \partial y_j} \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

$\vec{\chi} = (x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N)^T$ et ω^2 sont respectivement, les vecteurs et fréquences propres au carré du système considéré.

4.2 Transitions structurales dans les clusters de Yukawa

Le premier intérêt pour les clusters de Yukawa à 2D se focalise sur leurs propriétés structurales. D'après les expériences et les simulations [59, 66], il est clair que les particules forment des structures en couches concentriques. Ces dernières sont remplies

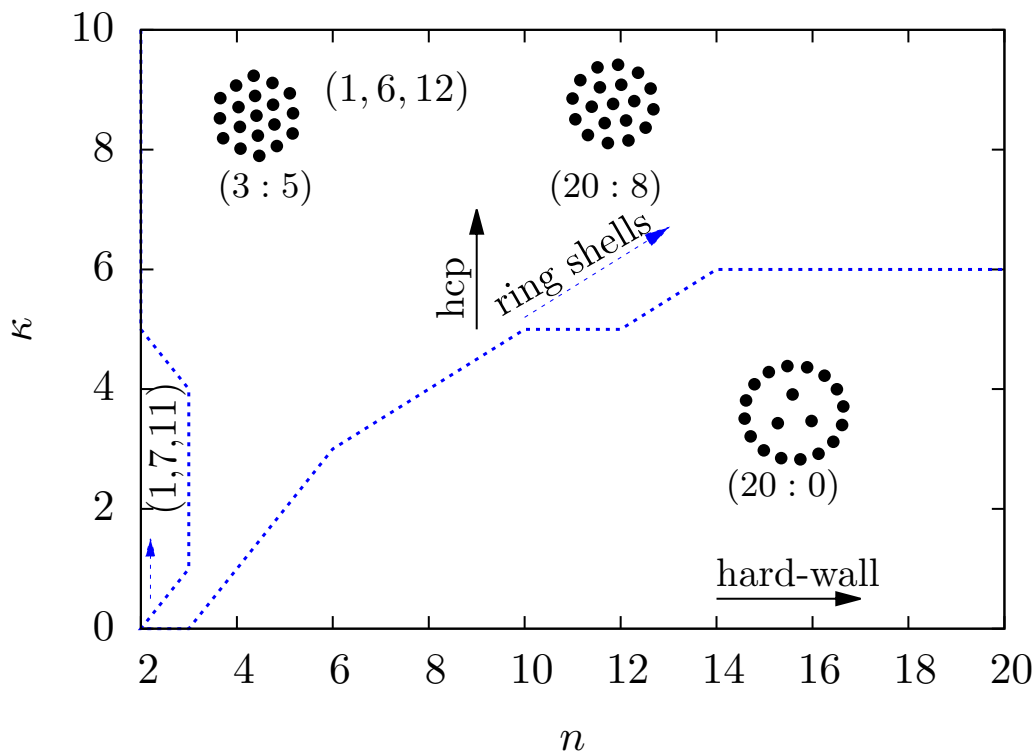


Figure 4.1 – État fondamental d’un cluster ayant 19 particules, avec différentes combinaisons de n et κ

jusqu’à un nombre précis de particules avant qu’une nouvelle couche extérieure ne se forme. Les configurations exactes de ces clusters dépendent du nombre total de particules et de l’écrantage κ de l’interaction. Dans cette section, nous analysons le comportement des configurations de l’état fondamental en présence de l’écrantage et d’un confinement en forme d’une loi de puissance. Dans ce qui suit, nous nous concentrons uniquement sur deux systèmes avec un nombre limité de particules tels que $N = 19, 20$.

La figure (4.1) montre les différentes configurations de l’état fondamental d’un cluster avec 19 particules pour différentes combinaisons de n et κ . Nous avons calculé le nombre de particules sur chaque couche formée par la combinaison des deux paramètres κ (paramètre d’écrantage) et n (puissance du confinement). Dans le plan ($\kappa(0 \rightarrow 10)$, $n(2 \rightarrow 20)$), on peut distinguer trois zones principales : pour $n = 2$ et $1 \leq \kappa \leq 4$, les particules prennent la configuration (1,7,11). Dans la région supérieure, au-dessus de la ligne pointillée, des structures commensurables typiques ayant la configuration (1,6,12) sont identifiées. D’autres configurations incommensurables, ayant deux couches ou trois couches (comptant à partir du centre), sont obtenues dans la zone inférieure au-dessous de la ligne pointillée.

Les configurations résultantes de la compétition directe entre la forme fonctionnelle du confinement et la portée de l'interaction de Yukawa sont regroupées dans le tableau (4.2).

$n \backslash \kappa$	0	1	2	3	4	5	6	10
2	1,6,12	1,7,11	1,7,11	1,7,11	1,7,11	1,6,12	1,6,12	1,6,12
3	1,6,12	1,6,12	1,6,12	1,6,12	1,6,12	1,6,12	1,6,12	1,6,12
4	6,13	1,6,12	1,6,12	1,6,12	1,6,12	1,6,12	1,6,12	1,6,12
5	5,14	6,13	1,6,12	1,6,12	1,6,12	1,6,12	1,6,12	1,6,12
6	5,14	5,14	1,5,13	1,6,12	1,6,12	1,6,12	1,6,12	1,6,12
10	4,15	4,15	5,14	1,5,13	1,5,13	1,6,12	1,6,12	1,6,12
20	3,16	4,15	5,14	5,14	1,5,13	1,5,13	1,6,12	1,6,12

Table 4.2 – Quelques configurations de l'état fondamental obtenues pour un cluster ayant 19 particules en faisant varier à la fois la puissance de confinement n et le paramètre d'écrantage κ

A partir du tableau (4.2) et la figure (4.1), on voit que, pour un confinement doux tel que pour $n = 2, 3$, la configuration (1,6,12) reste inchangée par rapport à la variation de κ à l'exception de $n = 2$ et $1 \leq \kappa \leq 4$ où une transition vers la configuration (1,7,11) a lieu. Cependant, la structure circulaire obtenue pour des petites valeurs de κ se transforme en structure hexagonale (hcp) avec l'augmentation de κ . Ceci peut être interprété à partir du modèle de la sphère dure [67](interaction de très courte portée). En effet, en présence d'un faible potentiel de confinement, les sphères dures ne peuvent être emballées que dans des couches formant une structure hexagonale similaire à un réseau de Wigner infini à 2D. Ceci est dû au fait que, classiquement, les particules peuvent occuper la région $r \approx 0$ en réduisant l'effet du confinement (presque nul au centre de la configuration). Si par contre la répulsion est relâchée ($\kappa < 2$), la couche extérieure peut être réajustée en une forme plus circulaire pour minimiser l'énergie potentielle. Les couches intérieures préservent la forme hexagonale en raison du confinement faible.

En tournant le confinement vers sa forme la plus raide ($n > 3$), ces structures circulaires (ayant une configuration (1,6,12)), peuvent être obtenues même avec une interaction de très courte portée, i.e, $\kappa \gg 1$ (voir la figure (4.1)). Notons que, le potentiel de confinement parabolique à 2D est équivalent à un potentiel généré par un fond uniforme des ions neutralisants, qui gardent les particules chargées en équilibre. Dans le cas d'un potentiel de confinement plus raide (proche de la paroi dure), la physique est plus compliquée. En raison de l'absence d'un fond neutralisant au centre, les particules ont tendance à occuper

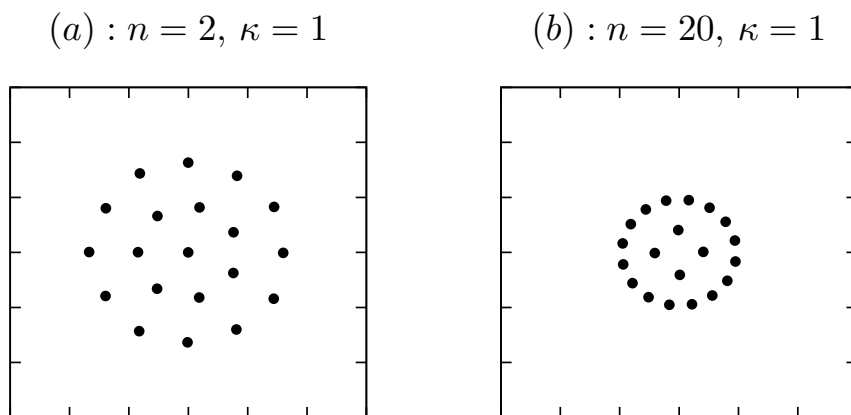


Figure 4.2 – Configurations de l'état fondamental d'un cluster ayant 20 particules et $\kappa = 1$ dans des confinements différents : (a) pour $n = 2$ et (b) pour $n = 20$

d'abord la couche extérieure au niveau de la paroi. Cette tendance se manifeste par une série de configurations, ex., (6,13), (5,14), (3,16), simulées pour $N = 19$ sous différentes formes d'interaction et de confinement. Cet effet est marquant à longue portée de l'interaction de Yukawa, et d'autant plus prononcé dans le cas d'une interaction logarithmique possédant la portée la plus longue¹. Cependant, à très courte portée $\kappa \rightarrow \infty$, la situation est tout à fait différente, en effet, la force vers le centre du cluster est assez grande pour empêcher les particules de se déplacer du centre vers le bord.

Selon le modèle présenté plus haut, on peut générer la même configuration avec différentes structures (voir les sous-figures de (4.1)). D'autre part, ce modèle permet les transitions des configurations commensurables à des configurations incommensurables et vice-versa (voir l'exemple avec $N = 20$ montré sur la figure (4.2)).

Ce mécanisme est particulièrement important dans les cristaux de plasmas poussiéreux, car il peut montrer des comportements intéressants dans les propriétés spectrales et dans le processus de fusion lorsque l'interaction varie de courte à longue portée.

4.3 Analyse des modes normaux

Comme nous l'avons vu dans la section précédente, les configurations de l'état fondamental des clusters de Yukawa dépendent fortement des combinaisons critiques de n et

1. Parmi les trois potentiels, la "décroissance" asymptotique du potentiel logarithmique (force $\sim 1/r$) est la plus lente, suivie par le potentiel de Coulomb (force $\sim 1/r^2$) et Yukawa.

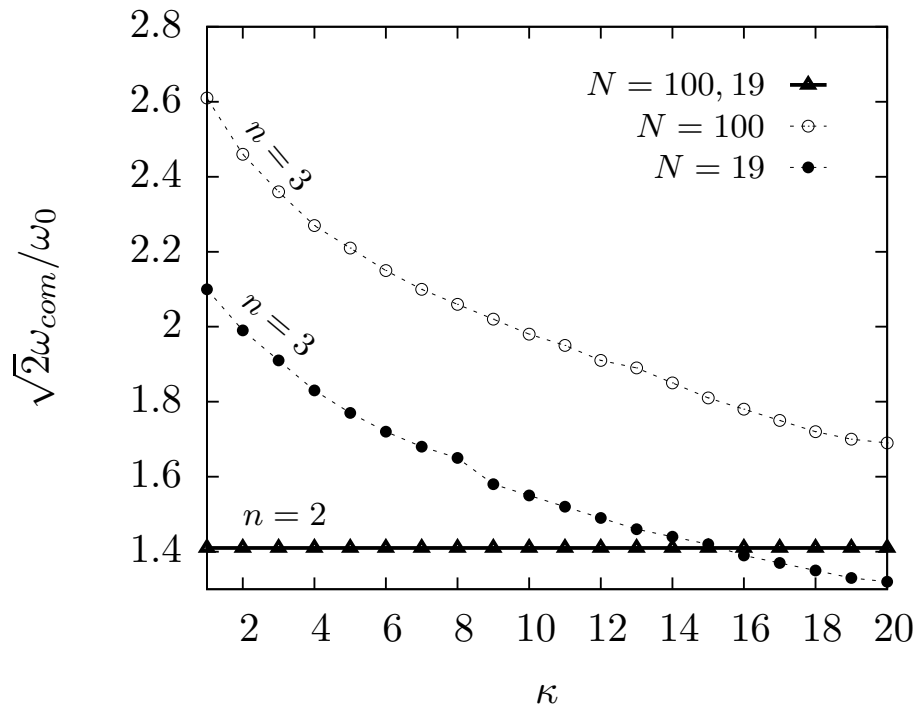


Figure 4.3 – Évolution des fréquences des modes du centre de masse en fonction de κ pour les clusters avec 19 et 100 particules sous différents confinements avec $n = 2$ et $n = 3$.

κ . Ces deux derniers paramètres doivent jouer un rôle éminent dans la modification des modes propres du système.

4.3.1 Mode du centre de masse

Dans le cas d'un confinement parabolique, il est bien connu que le mode ayant la fréquence $\omega/\omega_0 = 1$ ne dépend ni du nombre de particules ni du paramètre d'écrantage κ [59]. Dans cette section, nous cherchons l'existence des modes du centre de masse (COM) pour un cluster de Yukawa piégé par un potentiel de confinement $\propto r^n$. À cette fin, une analyse des modes normaux est utilisée pour un ensemble de puissances de confinement, à savoir, $n = 2, 3, 4$ et 20 . Les résultats numériques pour $n = 3$ sont représentés graphiquement sur la figure (4.3) pour deux systèmes, chacun avec un nombre différent de particules, i.e, $N = 19, 100$. D'après la figure (4.3), le mode COM existe toujours pour un piège non-parabolique avec $n = 3$ et $\kappa \geq 2$. Cependant, sa fréquence propre dépend de la valeur de κ ainsi que du nombre de particules N . Pour un tel confinement, on remarque

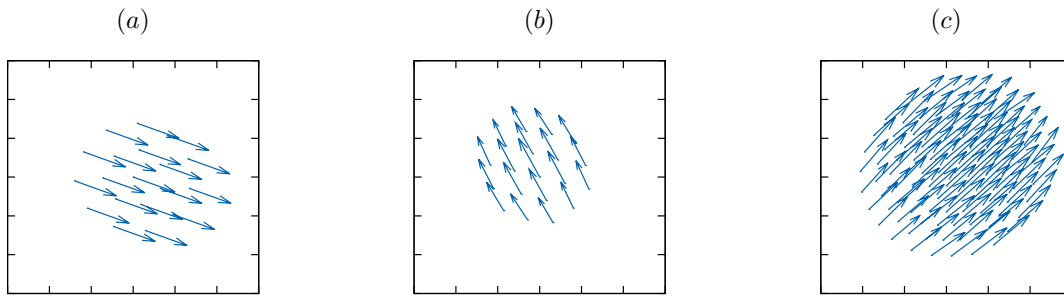


Figure 4.4 – Modes propres (vecteurs propres) du centre de masse pour (a) : $N = 19$, $n = 2$, $\kappa = 2$, (b) : $N = 19$, $n = 3$, $\kappa = 2$, (c) : $N = 100$, $n = 3$, $\kappa = 2$.

que pour chaque nombre de particules N , la fréquence du COM montre le même profil (dépendance) par rapport à la variation du paramètre d'écrantage κ . Quelques modes propres (modes du COM) correspondants sont illustrés sur la figure (4.4). De cette figure, on déduit que, les forces de rappels issues du confinement ne rompent pas le mouvement de translation du cluster dans son ensemble.

Le mode du COM peut également être identifié pour des puissances élevées du confinement, i.e, $n = 4, \dots, 20$ combinées avec des valeurs critiques du paramètre d'écrantage, mais ce mode résulte seulement en Quasi-COM et dans la plus part des cas, il peut être observé seulement pour les particules centrales.

Dans les systèmes coulombiens ($\kappa \rightarrow 0$), il a été déjà montré [68] que Quasi-COM existe lorsque le système est soumis à un confinement proche de la paroi dure "Hard Wall", alors qu'aucun mode COM ou Quasi-COM n'a été identifié pour le cas d'un cluster logarithmique soumis à un potentiel de confinement en forme d'une loi de puissance, i.e, $n \geq 3$. Ceci est dû à la nature de l'interaction entre les particules qui est de très longue portée pour le cas logarithmique.

4.3.2 Mode de plus basse fréquence

Dans l'analyse des propriétés spectrales des clusters de Yukawa, le mode de plus basse fréquence propre non-nulle (LNF) est également pris en considération. Cette fréquence est une mesure de la stabilité de l'état fondamental, elle nous indique à quel point il est facile (ou difficile) de déformer cet état.

Antérieurement, il a été constaté que, pour une même configuration de l'état fondamental, la plus basse fréquence non nulle augmente avec la valeur de κ pour un potentiel de

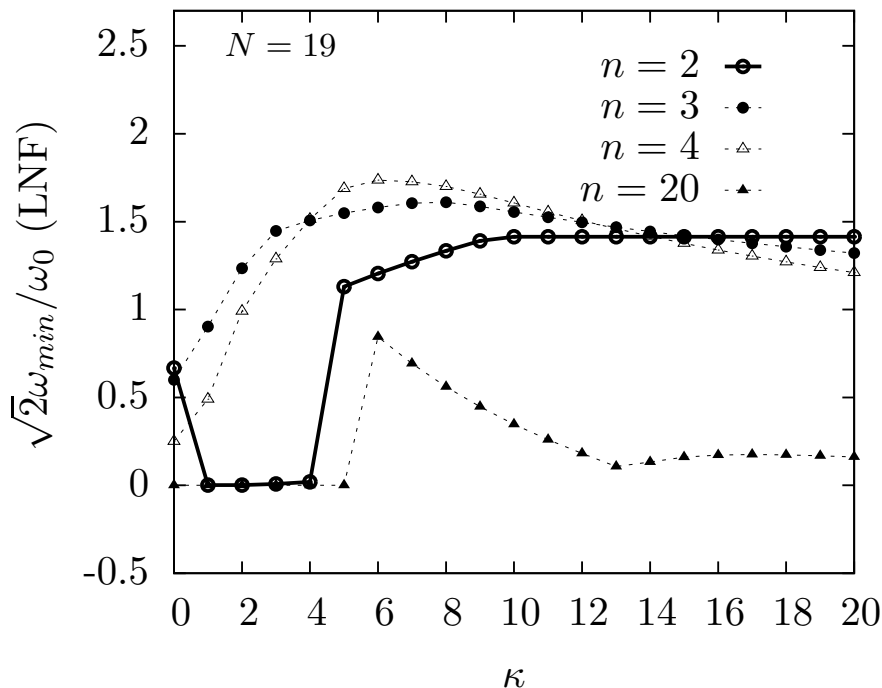


Figure 4.5 – Plus basses fréquences non-nulles (LNF) en fonction du κ , pour un cluster avec 19 particules piégées par différents confinements avec $n = 2$, $n = 3$, $n = 4$ et $n = 20$.

confinement parabolique [59]. Cependant, la valeur de LNF change brusquement lorsque le réarrangement des particules passe de la configuration (1,6,12) à la configuration (1,7,11). Le profil du LNF est montré sur la figure (4.5) pour un système de 19 particules sous différents confinements avec $n = 3, 4$ et 20 . Les résultats sont comparés au cas avec $n = 2$. La courbe des fréquences LNF pour $n > 2$ est à peu près similaire au cas du confinement parabolique avec $n = 2$. En effet, LNF montre une allure croissante avec κ jusqu'à des valeurs critiques où la courbe décroît lentement pour des confinements plus raides, tels que les pièges avec $n = 3, 4$, et décroît rapidement pour des confinements proche du "Hard Wall" (par exemple pour $n = 20$).

Chaque courbe de fréquence (LNF) atteint son maximum respectivement à $(\kappa = 8, n = 3)$ et $(\kappa = 6, n = 4, 20)$. Tous les maxima représentés sur la figure (4.5) correspondent à la configuration (1,6,12). Ceci nous indique que cette configuration est la plus stable dans le diagramme de phase de l'état fondamental d'un système avec 19 particules (cf. figure 4.1). Les modes de vibration (vecteurs propres) associés aux maxima critiques sont illustrés sur la figure (4.6). Pour la configuration avec $(n = 2, \kappa = 10)$, son mode LNF, ayant

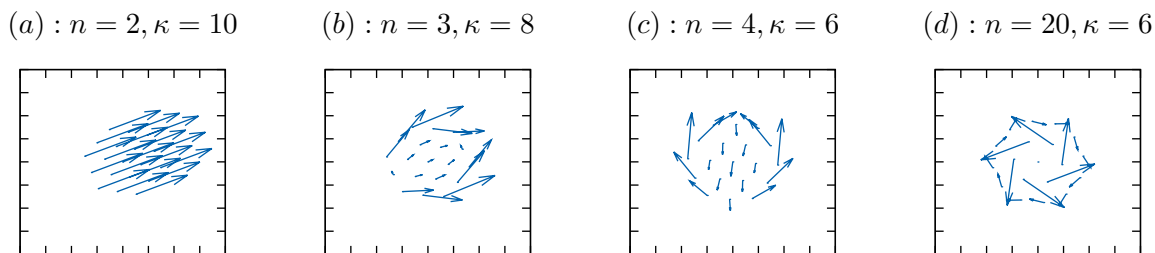


Figure 4.6 – Vecteurs propres correspondant aux plus grandes valeurs du LNF pour un système de 19 particules avec différentes combinaisons de n et κ .

la fréquence propre $\omega_{min}/\omega_0 \approx 1$, est identique au mode du centre de masse, tandis que pour $(n = 3, \kappa = 8)$ et $(n = 4, \kappa = 6)$, les modes LNF correspondants se résument, respectivement, en mouvement de vortex-vortex ($\omega_{min}/\omega_0 \approx 1.139$) et vortex-antivortex ($\omega_{min}/\omega_0 \approx 1.227$) [54]. La rotation du cluster dans son ensemble, *intershell rotation*, est le mode LNF (avec une fréquence $\omega_{min}/\omega_0 \approx 0.596$) associé à la configuration obtenue avec $(n = 20, \kappa = 6)$. Par conséquent, cette dernière configuration est la moins stable parmi les exemples précédents.

4.4 Transition de phase ordre-désordre

Il est bien connu que la matière usuelle peut être dans des états différents tels que le solide, le liquide et le gaz, et il existe des transitions de phase entre ces états. Des transitions analogues sont possibles dans les plasmas complexes mais il est évident que leur physique peut être très différente.

Par exemple, dans une décharge radiofréquence (rf), il existe deux façons pour induire la fusion dans les systèmes poussiéreux; dans les premières expériences, la fusion des clusters est atteinte en altérant les paramètres du plasma, à savoir en augmentant la puissance rf [69] ou en réduisant la pression du gaz [70]. Dans les expériences modernes, le chauffage par laser est utilisé [65]. Cette dernière méthode est préférable car elle permet de modifier la température cinétique des particules poussiéreuses tout en gardant les paramètres du plasma constants.

Dans ce qui suit, nous discuterons les critères mis en jeu pour la description théorique des transitions de phases "ordre-désordre" dans un cluster de Yukawa à 2D, ainsi que la sensibilité du processus de fusion aux différents paramètres du système.

4.4.1 Paramètres de fusion

Pour calculer la température critique (inverse du paramètre de couplage) d'une transition de phase, des paramètres sensibles qui présentent un comportement particulier dans la région de la transition de phase sont nécessaires. Dans les systèmes macroscopiques étendus, il existe plusieurs paramètres de fusion qui correspondent à cette description. Cependant, l'identification de la transition de phase pour les clusters finis a été toujours une question problématique. Ceci est dû à l'absence d'un paramètre universel pour quantifier l'apparition des transitions de fusion et de solidification.

Dans ce travail, les critères de choix pour étudier les changements de phase dans les systèmes finis, sont les critères de Lindemann. Ce dernier [71] a fait valoir l'idée que la structure cristalline d'un solide se décompose si l'amplitude d'oscillation des particules se développe au-dessus d'une certaine valeur critique. Une énergie supplémentaire ainsi ajoutée au système ne peut alors être absorbée en termes d'oscillations accrues, mais elle doit être transférée en mouvement de translation de particules. Parmi les critères de Lindemann, le plus avantageux est celui défini pour toutes les particules du système, i.e, *fluctuations relatives de la distance interparticules* (IDF) [72]

$$\Delta_B = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{1 \leq i < j}^N \sqrt{\frac{\langle r_{ij}^2 \rangle}{\langle r_{ij} \rangle^2} - 1}, \quad (4.7)$$

où $\langle \dots \rangle$ désigne la moyenne statistique et r_{ij} est la distance interparticules pour toutes les paires de particules. L'avantage principal d'utiliser cette quantité est qu'il n'y a pas d'identification des plus proches voisins. En effet, cette tâche peut prendre beaucoup de temps dans la simulation. De plus, ce paramètre est caractérisé par une augmentation rapide au niveau du point de transition de phase, alors qu'il est presque constant dans la phase solide ($\Delta_B \approx 0,05$). Toutefois, une extrême prudence doit être exercée lors de l'interprétation des courbes $\Delta_B(T)$, car elles dépendent des paramètres de simulation tels que la longueur de la simulation, ainsi que de l'ensemble statistique utilisé [73]. Parfois, même si la simulation est suffisamment longue, $\Delta_B(T)$ ne converge pas. Pour contrôler le problème de convergence, il est utile de subdiviser la simulation en intervalles "temps" fixes (dans les simulations MC, ces intervalles sont données en tant que blocs de taille M). Ceci permet une évaluation statistique des événements (fluctuations) rares, dus à une

distance de paire unique, qui convergent parfois contre la distribution totale des paires. Ainsi, pour l'estimation du point de fusion T_m , nous utilisons la *variance moyenne des fluctuations de la distance inter-particules* (VIDF) [73] définie comme :

$$\sigma_{\Delta_B} = \frac{1}{K-1} \sum_{s=1}^K \sqrt{(\Delta_B^2(s) - \langle \Delta_B(s) \rangle^2)}, \quad (4.8)$$

K est le nombre de blocs de longueur égale à $M = 1000$. Dans la formule précédente, nous avons introduit la correction de Bessel² en utilisant $\frac{1}{K-1}$ à la place de $\frac{1}{K}$. La quantité VIDF devrait présenter un maximum au voisinage de la transition de phase de fusion liée à la forte fluctuation de la moyenne des IDF. Les principaux avantages du VIDF peuvent être résumés comme suit :

- Il s'agit d'une variance statistique (comme la capacité calorifique qui est définie comme étant une variance d'énergie), donc directement liée au processus physique (fluctuations), et sensible à la transition de phase de fusion.
- VIDF est une quantité sans dimension, ce qui facilite la comparaison des systèmes physiques sur différentes échelles de longueur.
- Les trajectoires des particules individuelles et les fluctuations des particules sont accessibles directement dans les expériences de plasmas poussiéreux, ce qui permet une comparaison directe avec les simulations.

4.4.2 Résultats et discussions

Dans cette section, nous allons étudier l'effet de la forme fonctionnelle du confinement sur le processus de fusion des clusters de Yukawa à 2D, pour différents paramètres d'écrantage. Afin d'identifier la transition de phase, on a augmenté la température du système dans le code de Monte Carlo et nous avons utilisé la variance des fluctuations de la distance interparticules (VIDF). Tout au long de cette section, nous allons tester ce critère sur un cluster contenant 19 particules piégées par des confinements différents avec $n = 2, 3, 4, 20$. Différentes valeurs de κ sont introduites dans la simulation y compris les valeurs de κ où LNF atteint son maximum pour chaque valeur de n , (cf. figure (4.5)).

2. En statistique, la correction de Bessel devrait être utilisée si on est dans la situation de mesurer la variance d'une distribution dont la moyenne est estimée à partir des données plutôt que connue a priori

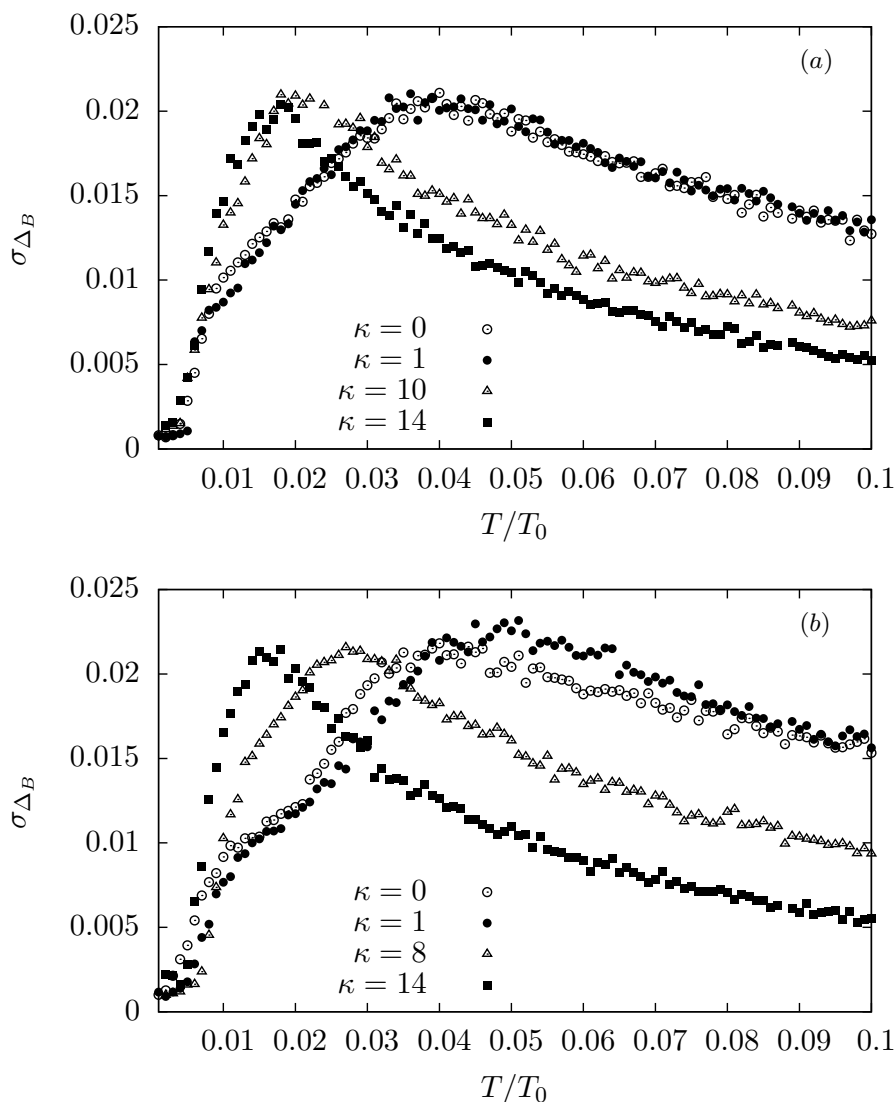


Figure 4.7 – La dépendance en température de la quantité VIDF pour un ensemble de paramètres d'écrantage, sous un confinement avec (a) : $n = 2$, (b) : $n = 3$.

La dépendance en température de la variance σ_{Δ_B} est présentée sur les figures (4.7) et (4.8). Pour $n = 2$ (voir figure 4.7.a), les clusters avec $\kappa = 0, 1, 10, 14$ fondent respectivement à $T_m/T_0 = 0.04, 0.036, 0.022, 0.018$. Nos résultats sont en bon accord avec la règle générale de fusion des clusters de Yukawa [59], qui stipule qu'un cluster avec une interaction de courte portée fond plus rapidement qu'un cluster avec une interaction de longue portée. Toutefois, cette dernière affirmation est brisée pour un confinement avec $n = 3$, où un comportement différent a lieu (voir figure (4.7.b)). En effet, pour ce confinement, on peut voir qu'un cluster coulombien pur, ($\kappa = 0$), possède une température de fusion ($T_m/T_0 = 0.04$) plus basse par rapport à un cluster coulombien écranté avec

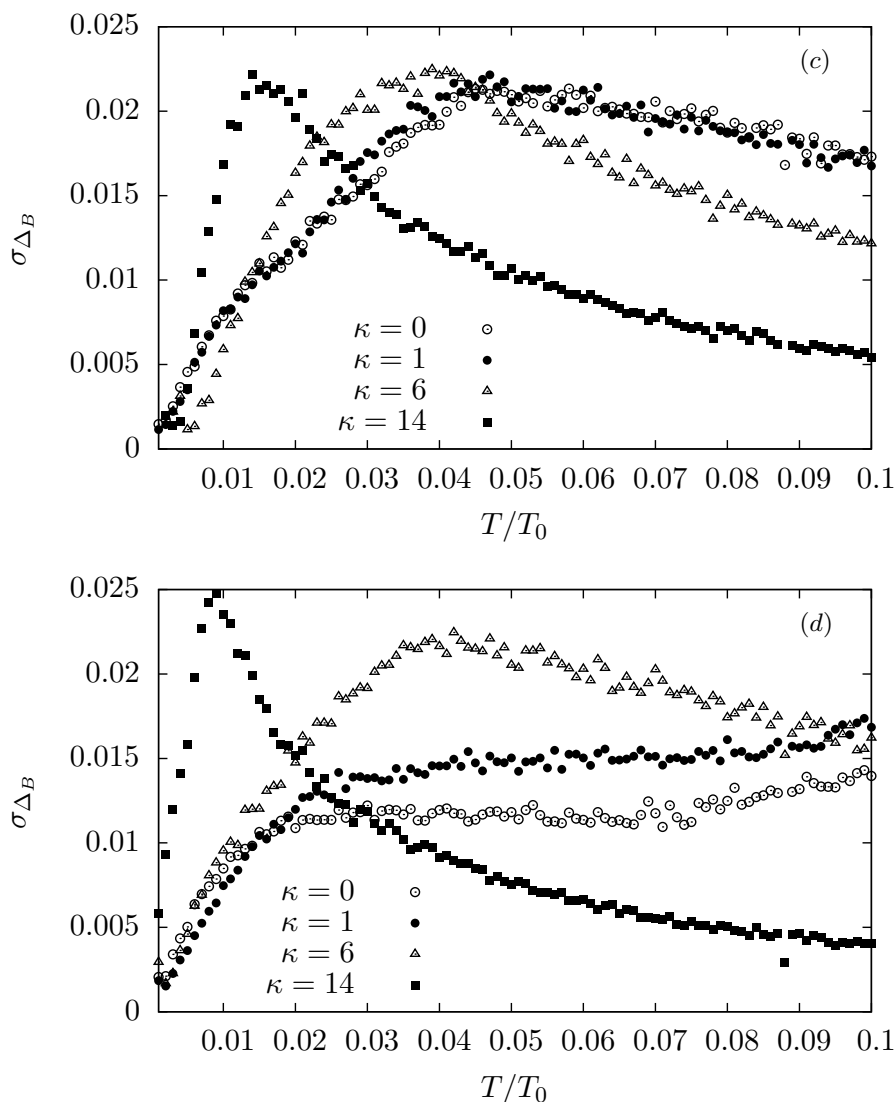


Figure 4.8 – La dépendance en température de la quantité VIDF pour un ensemble de paramètres d'écrantage, sous un confinement avec (c) : $n = 4$, (d) : $n = 20$.

$\kappa = 1$ ($T_m/T_0 = 0.051$), même si dans les deux cas le cluster a la même configuration, i.e, (1,6,12). Ce comportement anormal provient du fait que, pour $\kappa = 1$, le rapport des distances entre les couches voisines est proche de l'unité. Par conséquent, les particules se répartissent uniformément, conduisant alors à un état stable par rapport à un cluster avec $\kappa = 0$, qui montre un comportement opposé.

De même, la règle générale de fusion n'est pas valable pour certains cas particuliers sous un confinement avec $n = 4$ (voir figure (4.8.c)). En effet, la configuration (6,13), issue de la combinaison ($\kappa = 0, n = 4$), fond à une température plus basse que la configuration (1,6,12) avec ($\kappa = 1, n = 4$). Ceci est dû au fait que cette dernière configuration est "ma-

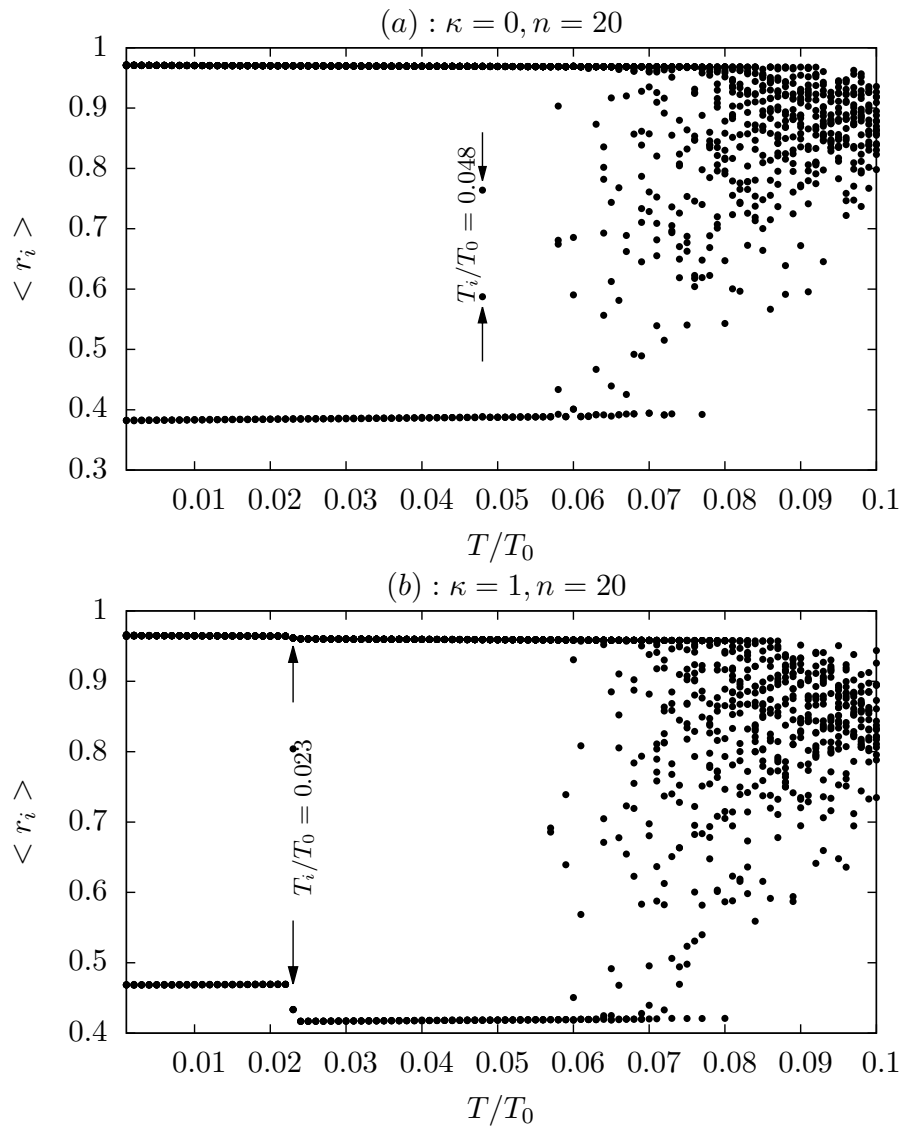


Figure 4.9 – Dépendance en température de la position radiale moyenne d'un système avec 19 particules avec (a) : $n = 20, \kappa = 0$ et (b) : $n = 20, \kappa = 1$.

gique"³, donc, elle est plus stable vis-à-vis de la température qu'un cluster non magique avec une configuration (6,13).

Notons que, quel que soit la puissance de confinement n , la règle générale de fusion des clusters de Yukawa peut être appliquée dans la gamme des interactions de très courte portée.

Les exemples de configurations avec $\kappa = 14, 10, 8, 6$ affirment cette règle (cf. figures (4.7) et (4.8)), où pour chaque valeur de κ , le cluster présente une température de fusion toujours plus faible, sous le même confinement, par rapport aux configurations issues des interactions avec $\kappa = 0, 1$. D'autre part, il convient de noter qu'un confinement avec une puissance d'ordre supérieur conduit à déstabiliser d'avantage les clusters de Yukawa ayant une interaction de courte portée. Par exemple, une configuration avec $n = 20, \kappa = 14$ a une température moyenne de fusion d'environ 50% plus inférieure que celle du même cluster dans un piège parabolique. Ainsi, nous concluons que l'effet du confinement est de briser le caractère équidistant des couches, conduisant à réduire la symétrie du système ainsi qu'à abaisser sa température de fusion.

Les clusters qui présentent des valeurs élevées de LNF, i.e, une forte stabilité contre le premier processus de fusion sont étudiés. La variance σ_{Δ_B} de chaque configuration du cluster est également présentée sur les figures (4.7) et (4.8). Pour chacun de ces cas, i.e, ($n = 2, \kappa = 10$), ($n = 3, \kappa = 8$), ($n = 4, \kappa = 6$), le système subit une transition de phase de fusion respectivement à $T_m/T_0 = 0.022, 0.027, 0.039$. Le cluster avec ($n = 4, \kappa = 6$) se trouve plus stable qu'un cluster avec ($n = 3, \kappa = 8$), qui à son tour est plus stable par rapport à un cluster avec ($n = 2, \kappa = 10$). La situation est différente pour un cluster avec ($n = 20, \kappa = 6$). En fait, l'analyse du LNF indique que cette dernière configuration est la moins stable parmi les configurations correspondant aux maxima représentés sur la figure (4.6). Ceci est dû au fait que son mode propre est le seul montrant une rotation intershell (cf. (4.6.d)) qui caractérise l'état le plus facile à perturber. Cependant le désordre total d'un tel cluster se produit à haute température ($T_m/T_0 = 0.04$) comme nos résultats le prouve. En effet, le désordre complet dépend du nombre de symétries à briser.

Lors de l'analyse de $\sigma_{\Delta_B}(T)$ pour les cas avec ($n = 20, \kappa = 0$) et ($n = 20, \kappa = 1$), ayant respectivement les configurations (3,16) et (4,15) à l'état fondamental, nous nous

3. Les clusters magiques, dans le contexte de ce travail, sont des configurations avec une grande valeur de ω_{min} . Elles sont caractérisées par un diviseur commun entre le nombre de particules dans chaque couche du cluster, c'est-à-dire, les couches sont proportionnelles.

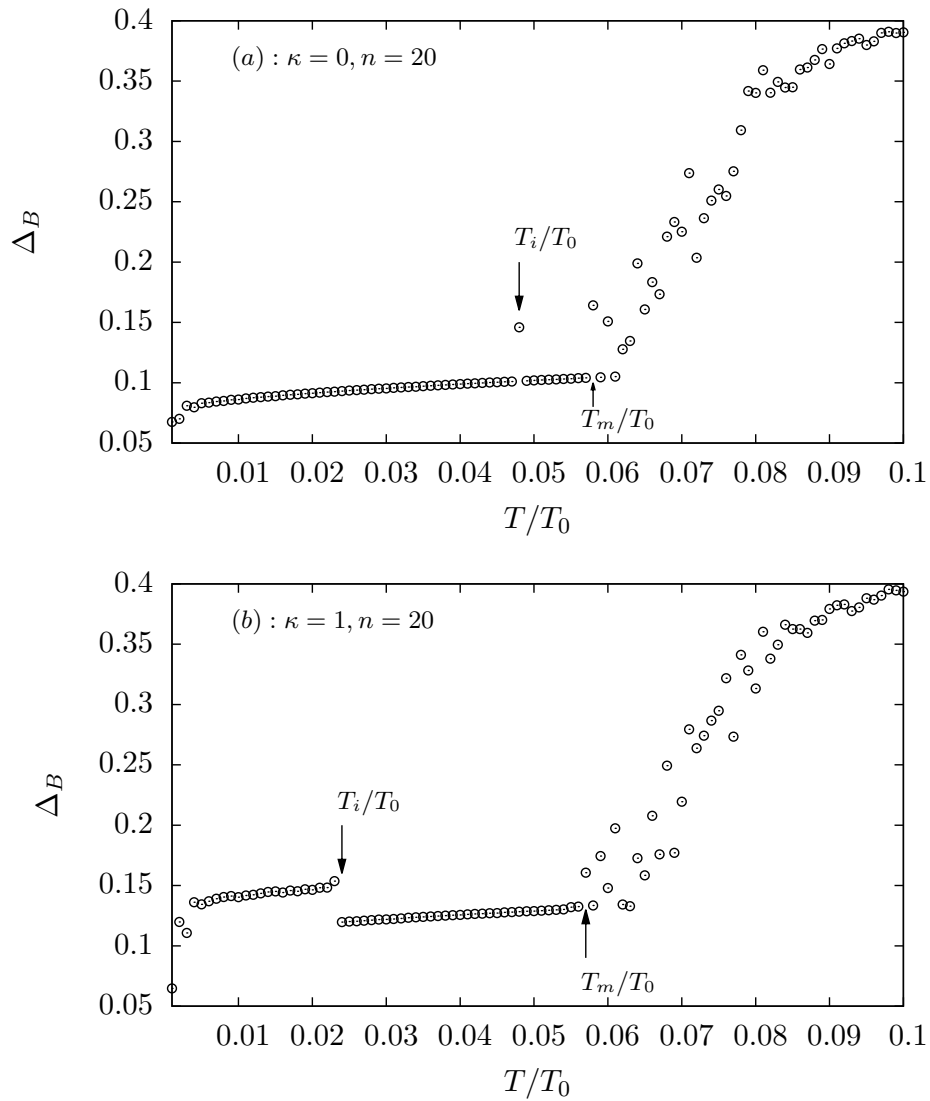


Figure 4.10 – Dépendance en température des fluctuations de la distance interparticules pour un système avec $N = 19$ particules pour (a) : $n = 20, \kappa = 0$ et (b) : $n = 20, \kappa = 1$.

rendons compte que la variance ne montre aucun maximum prononcé à l'endroit où la transition de fusion devrait se produire. En effet, dans les deux cas, σ_{Δ_B} commence à augmenter rapidement, puis lentement sur un grand intervalle de température.

Selon le tracé des basses fréquences (cf. figure (4.5)), il est clair que les clusters avec $\kappa = 0, 1$ et $n = 20$ présentent les valeurs les plus basses du LNF. Ce qui signifie que ces deux systèmes sont très instables, et par la suite subissent plusieurs transitions ou plusieurs processus de fusion avant la fusion complète. D'autre part, Astrakharohic *et al* [74], ont montré que le premier processus de fusion, c-à-d, le désordre orientationnel, peut disparaître si le cluster possède une configuration bien emballée. Dans ce cas, il n'y a que la fusion totale qui peut se produire. Ceci peut être la raison pour laquelle VIDF montre toujours un pic au point de fusion des clusters ayant des configurations bien emballées, ex., (1,6,12), alors qu'elle ne montre aucun maximum pour certaines configurations comme (3,16) et (4,15).

En général, la fusion des clusters 2D est prévue de se produire par le biais de deux processus ; la fusion intercouches (intershell) se produit à basse température, et avec l'augmentation de la température, la diffusion entre les différentes couches commencent à se manifester jusqu'à ce que la fusion totale du cluster aura lieu. Pour comprendre les transitions subies par les clusters avec ($n = 20, \kappa = 0$) et ($n = 20, \kappa = 1$), nous traçons la position radiale moyenne $\langle r_i \rangle$ sur les figures (4.9). Selon nos données représentées sur la figure (4.9.a), on peut voir que la configuration en deux couches reste bien identifiée jusqu'à une température critique où deux particules (une provenant de la couche intérieure et l'autre de la couche extérieure) présentent clairement des sauts à la même température $T_i/T_0 = 0.048$. Juste après ce saut, la structure d'origine apparaît à nouveau jusqu'à une température critique où le système commence à fondre complètement. Notons que ces deux températures critiques sont bien identifiées en utilisant le critère de Lindemann modifié donné par l'Eq. (4.7). Les résultats pour ($n = 20, \kappa = 0$) sont présentés sur la figure (4.10.a) où il est clair que les deux températures critiques se produisent respectivement à $T_i/T_0 = 0.048$ et $T_m/T_0 = 0.058$. Nous trouvons la même situation pour ($n = 20, \kappa = 1$). La quantité VIDF ne montre aucun maximum au point de transition prévu. La position radiale moyenne calculée pour un tel système est illustrée sur la figure (4.9.b) et nous pouvons conclure que la première transition a lieu à $T_i/T_0 = 0.023$. Dans ce cas, la transition n'est pas unique et ne consiste pas en un déplacement d'une seule particule

ou deux, comme c'est le cas pour $\kappa = 0$, mais les excitations thermiques conduisent à un déplacement radial de chaque couche et plus particulièrement la couche interne dans son ensemble. La différence de comportement entre les deux configurations est due au nombre de particules sur chaque couche. La figure (4.10.b) montre la fluctuation de la distance interparticules pour $\kappa = 1$. De même, cette quantité présente une première transition à $T_i/T_0 = 0.023$ et nous donne une bonne estimation pour la température de fusion qui se produit approximativement à $T_m/T_0 = 0.057$.

4.4.3 Comparaison avec les résultats expérimentaux

Il est intéressant de comparer les résultats de notre simulation avec ceux obtenus dans l'expérience. Melzer et ses collègues [75] ont considéré le problème de la fusion des clusters à 2D, en utilisant les méthodes INMA (Analyse Instantanée des Modes Normaux).

Les températures de fusion que nous avons calculé, à l'aide de la méthode VIDF, pour les systèmes ayant 19 et 20 particules, sont résumées dans le tableau (4.3). À titre de comparaison, les températures de fusion (INMA) de la Réf. [75] sont ajoutés pour les mêmes clusters 2D, où les températures de fusion ont été déduites par extrapolation des constantes de diffusion $D \rightarrow 0$.

N	T_m/T_0 (INMA) réf.[75]	T_m/T_0 (VIDF)
19	0.0013	0.036
20	0.00033	0.027

Table 4.3 – Températures de fusion normalisées des clusters de plasmas poussiéreux à 2D, déduites du comportement de la constante de diffusion indiquée dans la Réf. [75] et de la méthode VIDF.

Selon notre simulation (VIDF), la température de fusion la plus élevée est obtenue pour le cluster avec $N = 19$. Le cluster ayant 20 particules a une température de fusion plus faible. Ceci est conforme aux résultats de (INMA) de la Ref. [75], car la différence de température de fusion reflète bien la stabilité géométrique des clusters à 2D. Le cluster de 19 particules a une grande stabilité en raison du nombre commensurable de particules dans les couches intérieures et extérieures (structure "magique"). Le cluster de 20 particules avec des nombres incommensurables a une stabilité plus faible.

Cependant, les valeurs des deux approches sont différentes, puisque la méthode VIDF

est plus sensible à la fusion totale, alors que les températures de fusion de la Réf. [75] semblent indiquer une fusion angulaire.

Récemment [76], il a été montré que le point de fusion ne peut être identifié via le critère de Lindemann, et la transition solide-liquide se fait sur un intervalle de température au lieu d’une certaine température critique. Dans le même contexte, des études antérieures [73, 77] ont montré que la quantité VIDF montre une croissance graduelle sur un intervalle de température. Ceci est dû au fait que ces deux paramètres dépendent fortement de la taille et de la symétrie du système.

En effet, notre simulation indique que IDF peut présenter des sauts au voisinage des températures critiques pour les structures non emballées (cf. figures (4.10)).

Cependant, bien que la variance VIDF nous donne une estimation fiable de la fusion totale des clusters bien emballée, cette dernière ne semble pas fonctionner pour les structures non-emballées (très instables). En effet, comme il s’agit d’une variance statistique, il est alors fréquent de travailler avec des distributions dont le second moment ne converge pas, et dans ce cas la variance n’est pas utile pour mesurer la déviation de IDF de sa moyenne.

4.5 Conclusion

Les propriétés statiques et thermodynamiques d’un cluster de Yukawa à 2D, piégé par un potentiel de confinement en forme d’une loi de puissance ont été étudiées à l’aide des simulations numériques basées sur la méthode de Monte-Carlo.

Nous avons montré que la configuration de l’état fondamental d’un tel système dépend de la puissance de confinement n et de la portée de l’interaction de Yukawa par l’intermédiaire du paramètre d’écrantage κ , où une riche variété de réarrangements structuraux peuvent avoir lieu en faisant varier les deux paramètres n et κ .

Les modes normaux ont été étudiés en fonction de n et κ . En particulier, dans les systèmes de Yukawa, le mode du centre de masse est obtenu pour un confinement plus raide et résulte en mouvement de translation pour un confinement avec une puissance $n = 3$. Cependant, la fréquence correspondante diminue avec le paramètre d’écrantage κ . Nous avons également calculé les modes de plus basses fréquences non nulles (LNF) et nous avons déterminé l’influence de différents confinements sur ces modes. Les confinements proches du “Hard Wall” permettent de diminuer les valeurs des fréquences LNF, tandis que

les confinements “*doux*” (proche du confinement parabolique) tels que $n = 3, 4$, les valeurs du LNF montrent une légère augmentation par rapport aux résultats du confinement parabolique.

La stabilité des clusters de Yukawa par rapport au changement de la température a été considérée. Ces clusters ont montré des comportements différents par rapport à des combinaisons critiques de κ et n . La règle générale de fusion des clusters de Yukawa, connue pour le cas d’un confinement parabolique, peut être non-valide en raison de la compétition entre les forces de rappel entraînées par le confinement et la portée de l’interaction inter-particules.

Nous avons constaté que la variance des fluctuations de la distance inter-particules (VIDF), utilisée pour localiser la transition de phase, nous donne une estimation fiable de la fusion d’un cluster de Yukawa soumis à un potentiel de confinement en forme d’une loi de puissance.

Toutefois, cette quantité diverge pour les clusters avec des configurations non-emballées qui montrent plus d’une transition de phase. Pour ces cas particuliers, nous avons trouvé que les fluctuations de la distance inter-particules (IDF) détecte clairement les sauts induits par l’accroissement de la délocalisation des particules.

5

Transitions de phases dans le spectre des modes propres d'un cluster logarithmique

Le modèle des clusters de Coulomb à 2D, a été l'objet de plusieurs études théoriques et expérimentales. Ces études ont permis de mieux comprendre les propriétés structurales et spectrales de ces systèmes [59, 78, 79, 80, 81]. D'autres systèmes réels intéressants sont les billes métalliques chargées [8] et les vortex dans les supraconducteurs mésoscopiques ou dans les superfluides [9]. Ces clusters avec une interaction logarithmique peuvent être considérés comme des électrons dans les atomes artificiels ayant des structures auto-organisées pour un petit nombre d'électrons.

Des études théoriques réalisées ces dernières années [6, 82], ont montré que réduire continûment le paramètre d'anisotropie de $1 \rightarrow 0$ dans un système fini, conduit à une séquence de transitions de phases du premier et second ordre. Une analyse similaire développée par J. P. Schiffer et ses collègues [10] a montré que les clusters formés par des ions confinés présentent des transitions de *zig-zag*¹ en fonction de l'anisotropie du confinement. Ces transitions ont été observées récemment dans les cristaux des ions par L. L. Yan et ses collègues [83] (voir figure (5.1)), et antérieurement dans les clusters de plasmas poussiéreux [84].

Presque toutes les études antérieures ont été réalisées dans le cadre d'un potentiel de confinement parabolique $\propto r^2$. Cependant, la présence de l'anharmonicité dans les systèmes réels peut conduire à un nouveau comportement dans la structure et le spectre des clusters à 2D. Dans la théorie de Ginzburg-Landau [85], il se trouve que la forme analytique du confinement, en loi de puissance, joue un rôle éminent dans l'apparition

1. La transition de phase de zigzag est une transition du cluster d'une chaîne linéaire en une configuration en zigzag

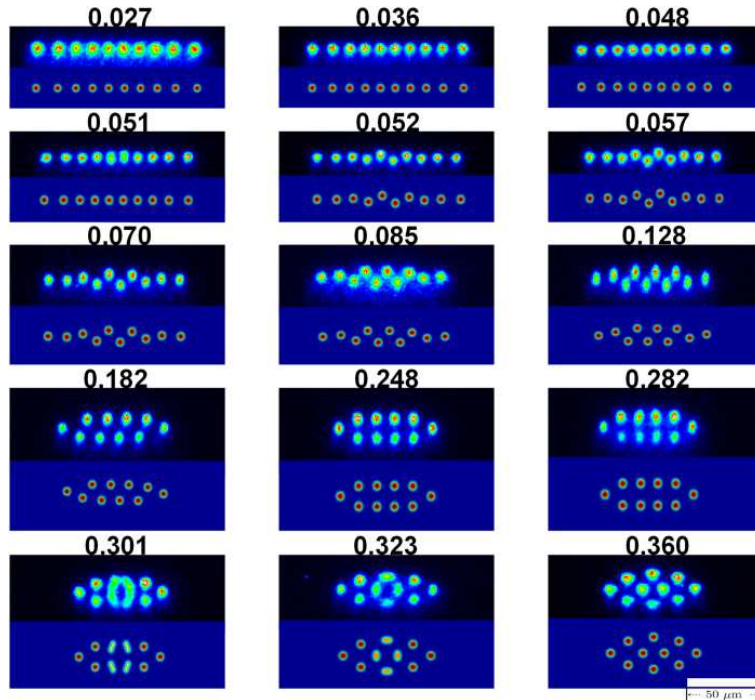


Figure 5.1 – Images des cristaux ioniques, observées expérimentalement, pour différentes valeurs d’anisotropie[83].

des transitions de phases de *zig-zag*. Ceci nous a incités à considérer un modèle de cluster piégé par un confinement anisotrope en forme d’une loi de puissance. Le choix des systèmes bidimensionnels est motivé notamment par le fait qu’un confinement ayant une forme d’une loi de puissance est plus facile à réaliser à 2D où une variété de mécanismes expérimentaux [86] existent pour produire un tel confinement ou même un confinement proche de la paroi dure “Hard Wall”[86, 87, 88].

Après une brève étude sur les propriétés statiques et thermodynamiques d’un cluster logarithmique pour un confinement harmonique et isotrope, nous montrons pour la première fois l’effet de l’anisotropie combiné avec celui de la puissance du confinement sur la structure et le spectre d’un cluster logarithmique à 2D [89]. Les transitions de phases sont classées par rapport aux sauts dans le spectre des modes propres. En outre, une attention particulière a été payée au comportement des modes de plus hautes fréquences et les modes du centre de masse par rapport à la variation du paramètre d’anisotropie dans des confinements de différentes puissances. De plus, on s’est intéressé au profil de certaines fréquences intermédiaires dans un confinement proche de la paroi dure “Hard Wall”.

5.1 Modèle numérique

Nous considérons un système bidimensionnel (2D) de particules mésoscopiques chargées, piégées par un potentiel de confinement anisotrope, ayant une forme d'une loi de puissance. Ces particules interagissent par le biais du potentiel logarithmique. Ainsi, le système est décrit par l'Hamiltonien suivant :

$$H = \frac{1}{2}m\omega_0^2R^2 \sum_{i=1}^N \left(\frac{\alpha x_i^2 + y_i^2}{R^2} \right)^{n/2} - \beta \sum_{i>j}^N \ln \left(\frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{R} \right), \quad (5.1)$$

où m est la masse de la particule, ω_0 est la fréquence radiale du confinement, α est le paramètre d'anisotropie, n est la puissance de confinement et R est la longueur de l'axe majeur dans la limite du "Hard Wall", i.e, $n \rightarrow \infty$.

$\mathbf{r}_i(x_i, y_i)$ sont les coordonnées de la i ème particule et β est la constante du couplage.

Ce modèle avec une interaction logarithmique, peut être utilisé pour décrire l'interaction entre les vortex dans un supraconducteur de type II.

En effet, si un supraconducteur type II de rayon R (avec $\lambda_{\perp} \gg R$ cf. Chapitre 2) est soumis à un champ magnétique critique, des vortex apparaîtront. Chacun de ces vortex portera un courant autour de lui. Le courant dû à deux vortex voisins sera opposé l'un par rapport à l'autre, et donc conduira à une répulsion entre les deux vortex. La stabilisation de la concentration des vortex dans les supraconducteurs, sous un champ magnétique externe, est prise en compte dans ce modèle par un potentiel de confinement externe. L'Hamiltonien donné par l'Eq. (5.1) peut être écrit sous une forme adimensionnelle, si nous exprimons les coordonnées, l'énergie et la température du système avec les unités suivantes. $r_0 = \beta^{1/n} \gamma^{-1/n} R^{(n-2)/n}$, $E_0 = \beta$ et $T_0 = E_0 k_B^{-1}$ avec $\gamma = \frac{1}{2}m\omega_0^2$. Ainsi, la forme adimensionnelle de l'Hamiltonien est donnée par :

$$H = \sum_{i=1}^N (\alpha x_i^2 + y_i^2)^{n/2} - \sum_{i>j}^N \ln |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \quad (5.2)$$

L'énergie totale du système fait intervenir les paramètres suivants : le nombre de particules N , la puissance du confinement n et le paramètre d'anisotropie $\alpha : 1 \rightarrow 0$. Tout les résultats sont exprimés en unités adimensionnelles.

Une fois que l'énergie totale du système (Eq. (5.2)) est calculée à l'aide des simulations

Monte-Carlo (MC) suivies par la méthode d'optimisation de Newton. Les $2N$ modes normaux du système sont obtenus avec l'algorithme QR (cf. chapitre 3) en résolvant le problème aux valeurs propres suivant :

$$A\vec{\chi} = \lambda\vec{\chi} = \omega^2\vec{\chi}, \quad (5.3)$$

où A est la matrice dynamique et $\vec{\chi} = (x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N)^T$ et ω^2 sont respectivement, les vecteurs et fréquences propres au carré du système considéré.

5.2 Propriétés des clusters dans un confinement parabolique et isotrope

5.2.1 Structure de l'état fondamental

Les configurations de l'état fondamental des clusters logarithmiques dans un potentiel de confinement parabolique et isotrope, sont obtenues en minimisant l'énergie de l'Eq. (5.2) en prenant $\alpha = 1$ et $n = 2$.

Pour les clusters de taille finie, les particules sont localisées dans des couches concentriques. Le tableau (A.1) (voir Annexe A) montre l'ordre de remplissage des couches pour des systèmes contenant jusqu'à 40 particules. Dans la limite d'un confinement isotrope et parabolique, nous retrouvons les mêmes résultats obtenus par Lozovik pour les clusters de vortex [90]. La configuration du cluster est donnée par (N_1, N_2, \dots) , où N_i est le nombre de particules sur chaque couche. Notons que, l'introduction d'une nouvelle particule dans le système provoque la variation de N_i . Une nouvelle couche apparaît lorsque les couches existantes sont remplies.

Pour $N = 3$, $N = 4$ et $N = 5$, des polygones sont formés. Pour $N = 6$, une particule apparaît au centre du pentagone pour minimiser l'énergie, conduisant ainsi à la formation d'une structure à deux couches, à savoir, une structure avec une seule couche, i.e., $N_1 = 6$ n'est pas autorisée car elle est coûteuse en terme d'énergie de confinement. Les configurations $(1, 6)$, $(1, 7)$, $(1, 8)$, $(2, 8)$ sont obtenues lorsque N augmente de 7 à 10. Une augmentation supplémentaire de N jusqu'à 16 provoque l'augmentation alternative de N_1 et N_2 jusqu'à ce que les deux couches soient pleines, i.e., $N_1 = 5$ et $N_2 = 11$. Pour

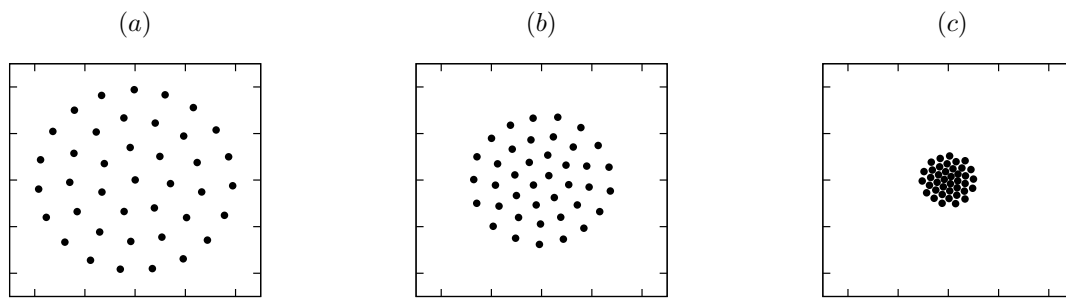


Figure 5.2 – Configurations de l'état fondamental avec $N = 40$ avec différents potentiels : (a) logarithmique, (b) Coulomb, (c) Yukawa ($\kappa = 10$).

$N = 17$, une troisième couche apparaît et le système s'organise en structure (1,5,11). Pour la configuration à trois couches, des processus de remplissage similaires sont observés. En général, d'autant le nombre de particules est grand sur la *ième* couche, d'autant le rayon de celle-ci est large (voir la dernière colonne du tableau (A.1) dans l'annexe).

Un exemple typique de configuration est montré sur la figure (5.2) pour un système de $N = 40$ particules sous différents potentiels d'interactions. Dans le cas d'une interaction logarithmique, on constate que plus N augmente, plus les particules peuvent se mettre sur une couche. Cependant, par rapport aux interactions de Coulomb et de Yukawa, moins de particules puissent être placées au centre dans un cluster logarithmique.

En effet, le potentiel logarithmique seul ne peut pas aboutir à une configuration stable. Cela n'est possible que s'il existe un potentiel de confinement. De ce fait, la combinaison du potentiel logarithmique avec un potentiel de confinement parabolique correspond au cas d'un cluster de Coulomb idéal, à 2D, dans un fond neutralisant uniformément chargé. Il supporte une répartition uniforme de la densité des particules pour compenser les charges et équilibrer la force sur chaque particule.

Le comportement d'un cluster de Yukawa, à très courte portée, est complètement opposé au comportement d'un cluster logarithmique. En effet, la portée de l'interaction de Yukawa devient extrêmement courte pour $\kappa \rightarrow \infty$, c'est-à-dire, elle est assimilée à une fonction "delta de dirac". Dans ce cas, les particules peuvent s'asseoir très près l'une par rapport à l'autre, occupant ainsi la région du centre $r \approx 0$ où le potentiel de confinement est nul. Par conséquent, un tel système est similaire au cas d'un réseau de Wigner infini à 2D où les particules forment un réseau hexagonal, c'est-à-dire, chaque particule a six voisins, et aucune structure en anneau n'est attendue.

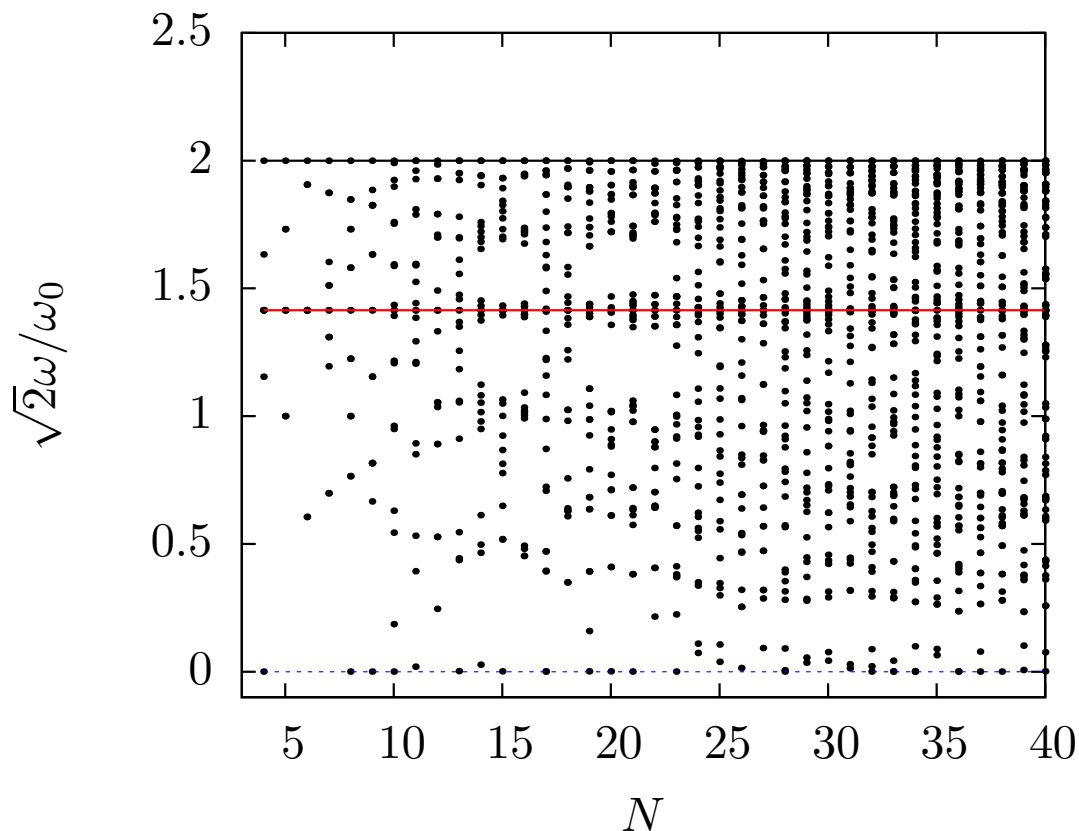


Figure 5.3 – Spectre des modes propres en fonction du nombre de particules N allant de 4 à 40.

5.2.2 Spectre d'excitation et modes propres

Dans le cadre de l'étude des systèmes confinés, nous discutons le spectre d'excitation correspondant à la configuration de l'état fondamental d'un cluster logarithmique à 2D. Pour tester le modèle, nous avons calculé le spectre des modes des clusters contenant jusqu'à $N = 40$ particules. Ce spectre est représenté sur la figure (5.3), en fonction du nombre de particules N . Les fréquences propres dans de cette figure sont exprimées en unités de $\omega_0/\sqrt{2}$. Notons, qu'il existe trois fréquences propres du système qui sont universelles, c-à-d, indépendantes du nombre de particules N et indépendantes de la configuration de l'état fondamental.

- Les modes de rotation ($\omega/\omega_0 = 0$) correspondent à une rotation de l'ensemble du système et reflètent les symétries axiales du potentiel de confinement.
- Les modes du centre de masse ($\omega/\omega_0 = 1$) qui se traduit par un mouvement de

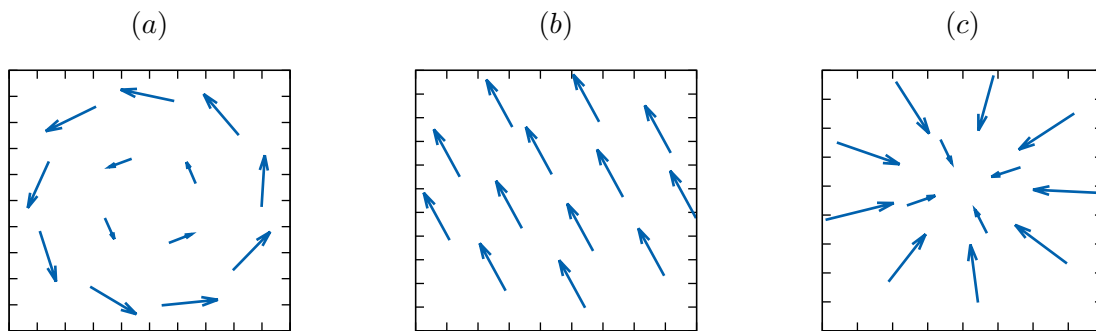


Figure 5.4 – Vecteurs propres du cluster avec $N=13$: (a) mode de rotation, (b) mode du centre de masse, (c) mode "breathing".

translation pure.

- Le mode respiratoire "breathing mode" ($\omega/\omega_0 = \sqrt{2}$) décrit une expansion et une contraction radiale uniforme de toutes les particules.

Les vecteurs propres correspondant aux trois modes universels sont illustrés sur la figure (5.4) pour un système ayant 13 particules.

Ces fréquences propres (associées aux mode "breathing" et mode du centre de masse) ont été obtenues analytiquement par Partoens *et al.* [91] et Apolinario *et al.* [6], respectivement, pour les potentiels $\propto 1/r_{ij}^n$ et logarithmique $-\ln(r_{ij})$.

5.2.3 Propriétés thermodynamiques : Fonction de distribution de paires

La corrélation de paires, qui caractérise la distribution des particules, est l'une des quantités thermodynamiques les plus importantes qui permettent d'établir des critères quantitatifs afin de révéler les différences dans la structure d'un système (qui semble similaire, par exemple, dans les clusters). D'autre part, cette quantité est directement liée par la transformée de Fourier au facteur de structure mesurable expérimentalement [92].

Si le système est isotrope, la fonction de corrélation des paires peut être moyennée sur les variables angulaires et le résultat est la fonction de distribution radiale $g(r)$, qui décrit l'organisation locale moyenne autour des particules [93] :

$$g(r) = \frac{2}{\rho N} \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \delta(r - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \right\rangle \quad (5.4)$$

$g(r)$ est proportionnelle à la probabilité de trouver une paire de particules séparée par une distance r . La quantité $\rho = N/A$ est la densité moyenne, où A est l'aire à 2D et N le nombre total de particules. Une approximation numérique utile pour la fonction de distribution radiale peut être obtenue en utilisant l'histogramme (f_n) de toutes les distances entre chaque paire de particules. Chaque histogramme f_n représente le nombre de paires de particules (i, j) avec une distance interparticules r_{ij} contenue dans le n -ième bin, $(n-1)\Delta r \leq r_{ij} \leq n\Delta r$. Si N_{hist} est le nombre de bin et r_{max} est la limite supérieure pour les distances considérées (\sim rayon de la structure à l'état fondamental). La largeur du bin est $\Delta r = r_{max}/N_{hist}$. Compte tenu de ce qui précède, $g(r)$ peut être approximée en utilisant la formule suivante :

$$\rho g(r) A_n = \frac{2}{N} f_n, \quad (5.5)$$

avec $A_n = \pi[(n\Delta r)^2 - ((n-1)\Delta r)^2]$, est l'aire correspondant au bin n et donc $g(r)$ est donnée par :

$$g(r) = \frac{A}{\pi N^2 (n-1/2) (\Delta r)^2} f_n. \quad (5.6)$$

Le calcul de la valeur moyenne de $g(r)$ a été effectué sur diverses configurations de Monte Carlo. Notons que, ces simulations exigent un certain soin pour s'assurer que le système soit équilibré avant de calculer la fonction de distribution radiale. Le nombre d'étapes de Monte Carlo pour atteindre un bon équilibre dépend de la température et du nombre de particules. Pour $N < 40$, les simulations comprennent $\sim 10^5$ étapes de MC.

Dans cette section nous présentons des résultats sur la fonction de distribution radiale des états de vortex autour des régions de température de fusion obtenues, par Lozovik *et al.* [90], sur un cluster contenant 37 vortex. Les résultats de calcul pour un cluster avec $N = 37$ sont montrés sur les figures (5.5) et (5.6) pour différents paramètres de couplage $50 \leq \Gamma \leq 10000$. Notons que, d'après la Réf. [90], ce cluster présente un premier processus de fusion (désordre orientationnel) autour de $\Gamma \sim 1250$, et une fusion totale (radiale) à $\Gamma \sim 125$. Nous rappelons que, le paramètre de couplage Γ est relié à la température T par la relation : $\Gamma = 1/T$.

En diminuant Γ ($333 \rightarrow 125$), la position du premier pic, dans la figure (5.5), se déplace légèrement vers une petite valeur de r , et la croissance des fluctuations des particules (due au chauffage) conduit à l'élargissement des couches dans la direction radiale.

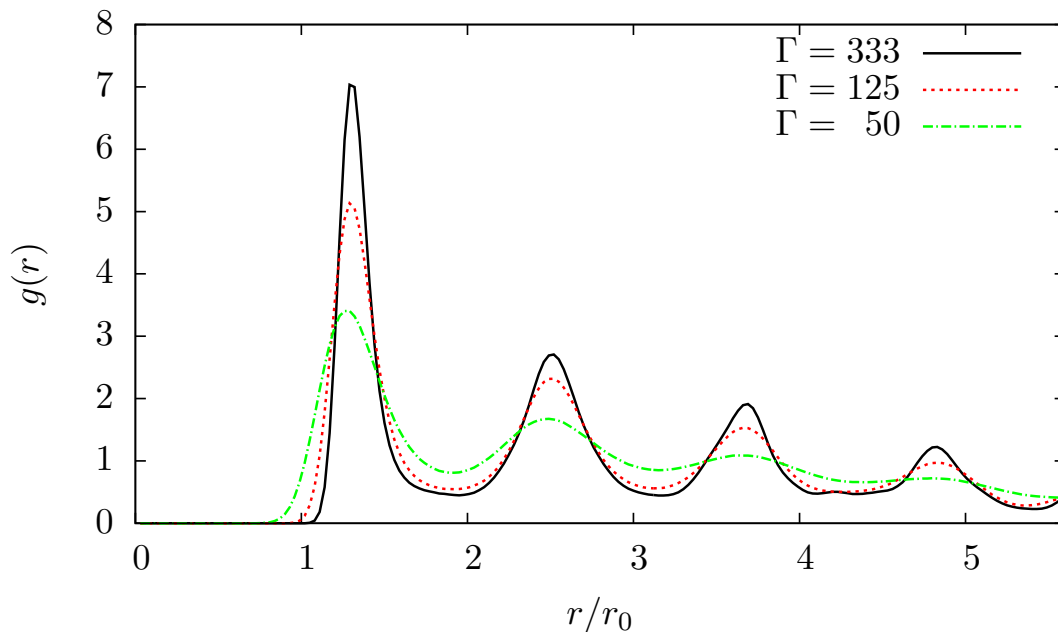


Figure 5.5 – Fonction de distribution radiale pour un cluster contenant 37 particules dans la région fusion.

Au moment où le système est chauffé au-delà de la température de fusion, $\Gamma \ll 125$, $g(r)$ décroît rapidement avec l'augmentation de r (figure (5.5)) et devient plate à très grandes distances, de sorte que les particules peuvent se rapprocher les unes des autres comme dans un liquide.

Lorsque $\Gamma = 10000$ ($T \rightarrow 0$) (voir figure 5.6), l'ordre cristallin se manifeste en pics aigus (étroits) même à grandes distances, Ceci est dû au fait que dans la phase solide, tous les voisins à toutes les longueurs sont bien définis. La diminution du paramètre de couplage $\Gamma : 10000 \rightarrow 2000$ se traduit par une décroissance lente dans la fonction de distribution radiale, cependant, l'ordre cristallin reste apparent.

Au voisinage de la température de fusion orientacionnelle $\Gamma \approx 1250$, $g(r)$ s'élargit à son extrémité (les pics ne sont plus étroits). Ceci est une signature de la transition de l'état solide vers un état liquide semblable. Notons que, même lorsque le premier processus de fusion est atteint, la structure cristalline reste encore bien probable au centre du cluster.

Dans tous les cas, en raison de la rotation, les valeurs de $g(r)$ entre deux pics consécutifs ne sont pas nulles et augmentent avec la diminution du paramètre de couplage.

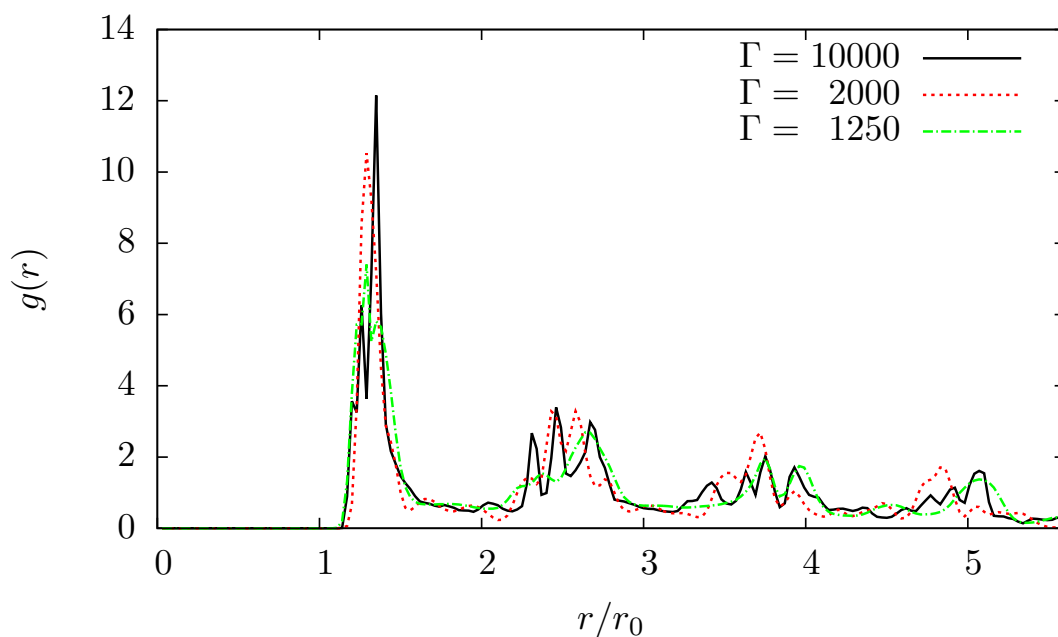


Figure 5.6 – Fonction de distribution radiale pour un cluster de 37 particules dans la région du couplage fort.

5.3 Classification des transitions de phases

les transitions de phases dans un système de particules en interaction, peuvent être entraînées par de nombreux paramètres ; Intrinsèques (densité de particules) ou extrinsèques (température, champ magnétique, potentiel de confinement ...).

Outre les transitions de phase ordre-désordre induites par la température, une autre définition implique que différentes configurations des particules, peuvent être trouvées dans le même état. Cette section est consacrée à l'étude des structures cristallines à basse température, où la contribution de l'énergie cinétique est extrêmement faible pour tous les systèmes étudiés.

Notre analyse donnera les transitions entre différentes structures ou phases dans l'état ordonné. Par conséquent, la stabilité des phases considérées dans ce travail est directement liée à la configuration d'énergie minimale des particules, dite configuration de l'état fondamental. Le processus de transition de phase implique qu'au point de transition γ_c , l'énergie du système est la même pour les deux phases. Cependant, les transitions ont différentes propriétés selon leur ordre.

Ehrenfest propose une classification des transitions de phase [94], basée sur le com-

portement de l'énergie libre et de ses dérivées, par rapport à toutes les variables décrivant le système, au point de transition. Dans cette classification, une transition de phase de n -ième ordre a lieu lorsque toutes les dérivées de l'énergie jusqu'au $(n - 1)$ -ième ordre sont continues, mais les dérivées d'ordre n sont discontinues. En d'autres termes, la transition entre les phases α et β est de n -ième ordre si les deux conditions suivantes sont satisfaites :

$$\left(\frac{\partial^m E_\alpha}{\partial \gamma^m} \right)_{\gamma_c} = \left(\frac{\partial^m E_\beta}{\partial \gamma^m} \right)_{\gamma_c} \quad m = 1, 2, \dots, n - 1 \quad (5.7)$$

$$\left(\frac{\partial^n E_\alpha}{\partial \gamma^n} \right)_{\gamma_c} \neq \left(\frac{\partial^n E_\beta}{\partial \gamma^n} \right)_{\gamma_c} \quad (5.8)$$

En général, la plupart des transitions de phases trouvées dans la nature sont limitées au second ordre, par conséquent, la présente analyse sera focalisée sur les transitions de phase du premier et du second ordre.

Les transitions de phase, induisant des réarrangements structuraux, peuvent être déduites directement du spectre des modes normaux. En effet, une transition de phase du premier ordre est caractérisée par un saut (discontinuité) dans le spectre, tandis que la transition de phase du second ordre a lieu lorsque l'une des fréquences propres chute continûment à zero, i.e, $\omega = 0$. Cette transition implique un changement continu dans l'espace des positions des particules.

5.4 Transitions de phases dans un confinement soft et anisotrope

5.4.1 Transitions structurales

Dans cette section, nous considérons les effets de l'anisotropie et de la puissance du confinement sur la structure d'un cluster logarithmique à 2D contenant 19 particules. Le choix d'un système avec 19 particules n'est pas une restriction, mais il est connu comme un bon exemple grâce à sa configuration bien emballée dans son état fondamental (à la limite d'un piège parabolique et isotrope), ayant au moins deux couches et une particule au centre de la configuration. Cette analyse nous permet de mettre en évidence les différentes

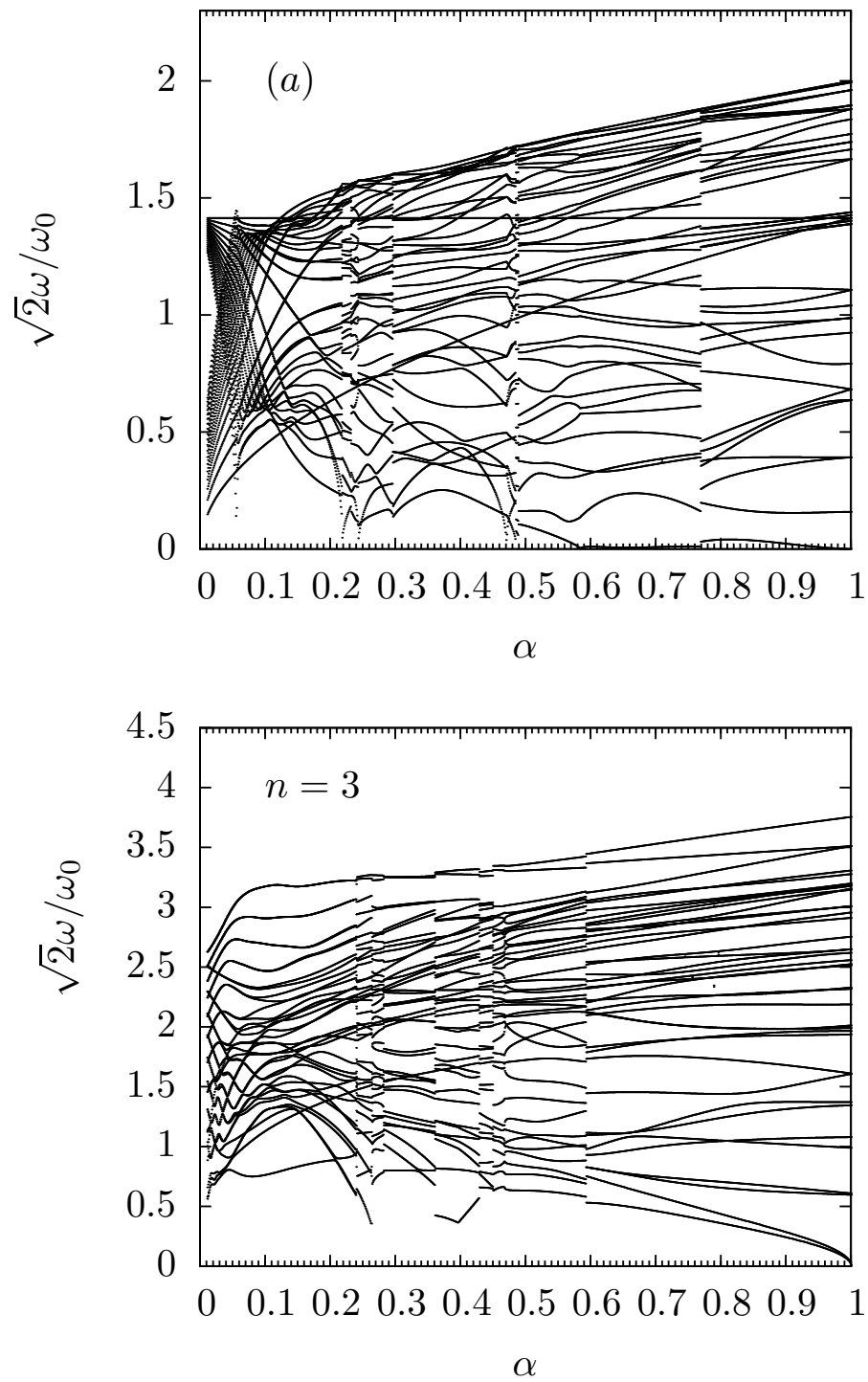


Figure 5.7 – Spectre des fréquences propres, d'un système de 19 particules, en fonction du paramètre d'anisotropie α sous un confinement avec des puissances : (a) $n = 2$, (b) $n = 3$.

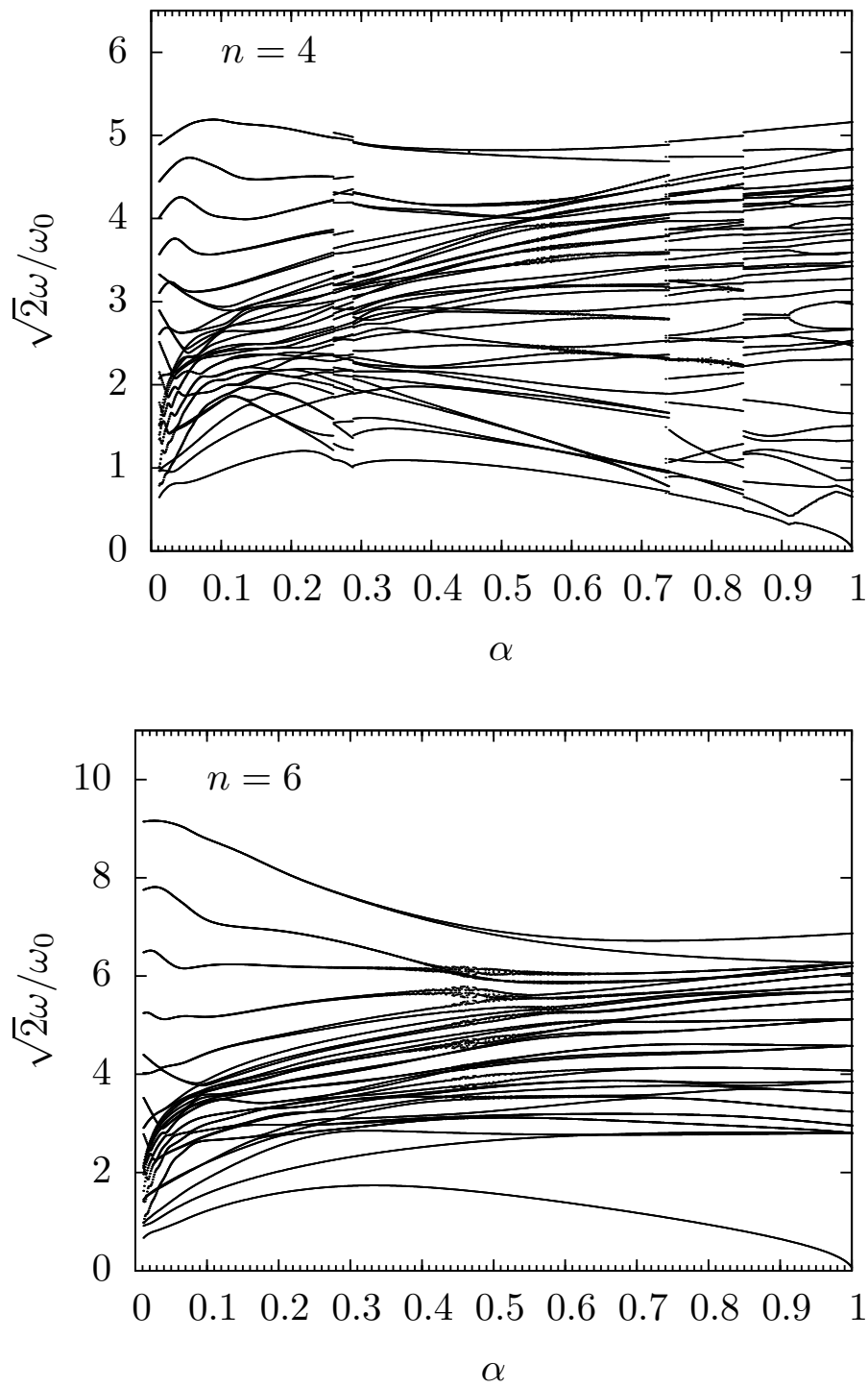


Figure 5.8 – Spectre des fréquences propres, d'un système de 19 particules, en fonction du paramètre d'anisotropie α sous un confinement avec des puissances : (c) $n = 4$ et (d) $n = 6$.

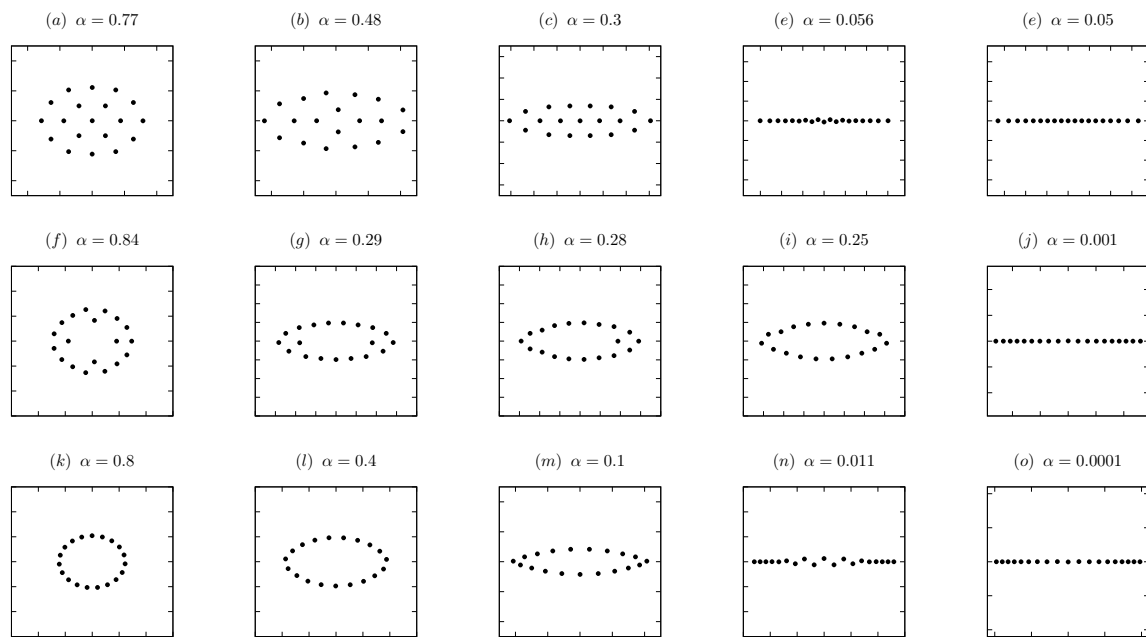


Figure 5.9 – Configurations de l'état fondamental d'un système de 19 particules obtenues pour différentes valeurs de l'anisotropie et pour différentes puissances du confinement : (a-e) pour $n = 2$, (f-j) pour $n = 4$ et (k-o) pour $n = 6$. L'échelle est différente dans chaque figure, mais la distance entre les écarts est toujours une unité de longueur.

transitions de phases, qui se produisent dans les clusters 2D, par rapport aux différents paramètres d'ordre. Dans les figures (5.7) et (5.8), on montre la dépendance du spectre des fréquences propres en fonction du paramètre d'anisotropie $\alpha : 0 \rightarrow 1$ pour différentes puissances de confinement, i.e, $n = 2, 3, 4$ et 6 .

Dans le cas parabolique (voir figure (5.7.a)), le spectre montre une séquence de sauts induite par la variation des fréquences propres en fonction de α . Ce comportement est en bon accord avec celui déterminé dans la Réf. [6]. Les sauts induisent deux types de transitions de phase structurales : transitions de phase de premier ordre caractérisées par des discontinuités dans le spectre des fréquences et transitions de phase du second ordre qui se produisent quand l'une des fréquences propres tend vers zéro.

Ces transitions sont tracées dans l'espace des configurations sur la figure (5.9.a-e). Constatons que, pour $n = 2$, le passage vers une structure unidimensionnelle s'effectue via une transition de zig-zag à une valeur critique de l'anisotropie $\alpha = 0.056$.

Pour des puissances plus élevées du confinement, allant de $3 \rightarrow 6$, les effets de bords deviennent plus importants et devraient affecter de manière significative les configurations de l'état fondamental du système. On peut voir à partir des figures (5.7.b), (5.8.c)

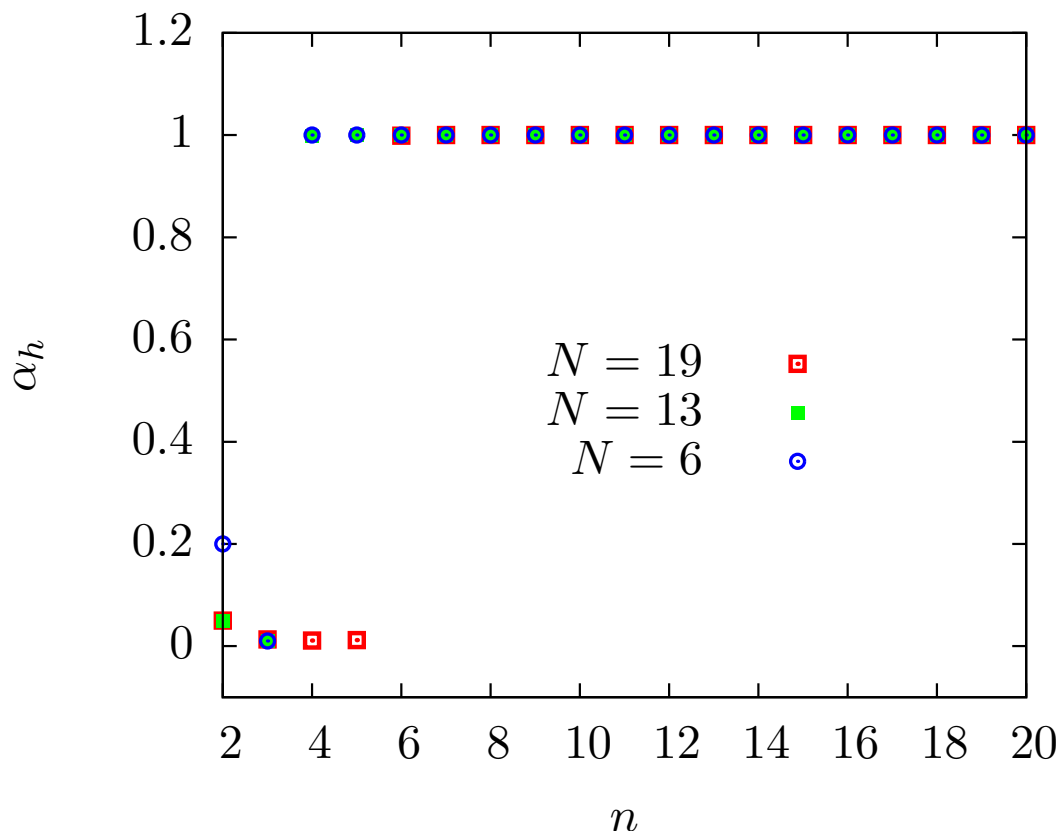


Figure 5.10 – Valeurs critiques de l’anisotropie où se produit la forte dégénérescence pour les systèmes avec : $N = 6$, $N = 13$ et $N = 19$ particules sous différents confinements.

et (5.8.d), que les transitions de phases du second ordre disparaissent complètement des spectres pour $n \geq 3$, quant aux transitions du premier ordre, elles cessent d’être visibles progressivement pour disparaître complètement pour $n = 6$. Une partie de ces transitions est représentée sur la figure (5.9.f-j) et la figure (5.9.k-o) pour $n = 4$ et $n = 6$ respectivement. En fait, pour $n = 4$, la diminution de la valeur de α permet aux particules internes de s’organiser initialement dans une chaîne linéaire, ensuite, les particules quittent progressivement cette chaîne interne pour atteindre une seule couche elliptique au voisinage de $\alpha = 0.25$. Enfin, réduire d’avantage le paramètre d’anisotropie α , conduit le système à exhiber des transitions continues vers une structure de chaîne à 1D. Notons que, pour $n = 6$, aucun échange intershells (inter-couches) de particules ne peut avoir lieu, car toutes les particules sont situées initialement (cas isotrope $\alpha = 1$) sur une seule couche, et donc une transition vers une structure 1D, ne peut être entraînée que d’une façon continue à la limite de forte anisotropie (voir le troisième panneau sur la figure (5.9)). En plus

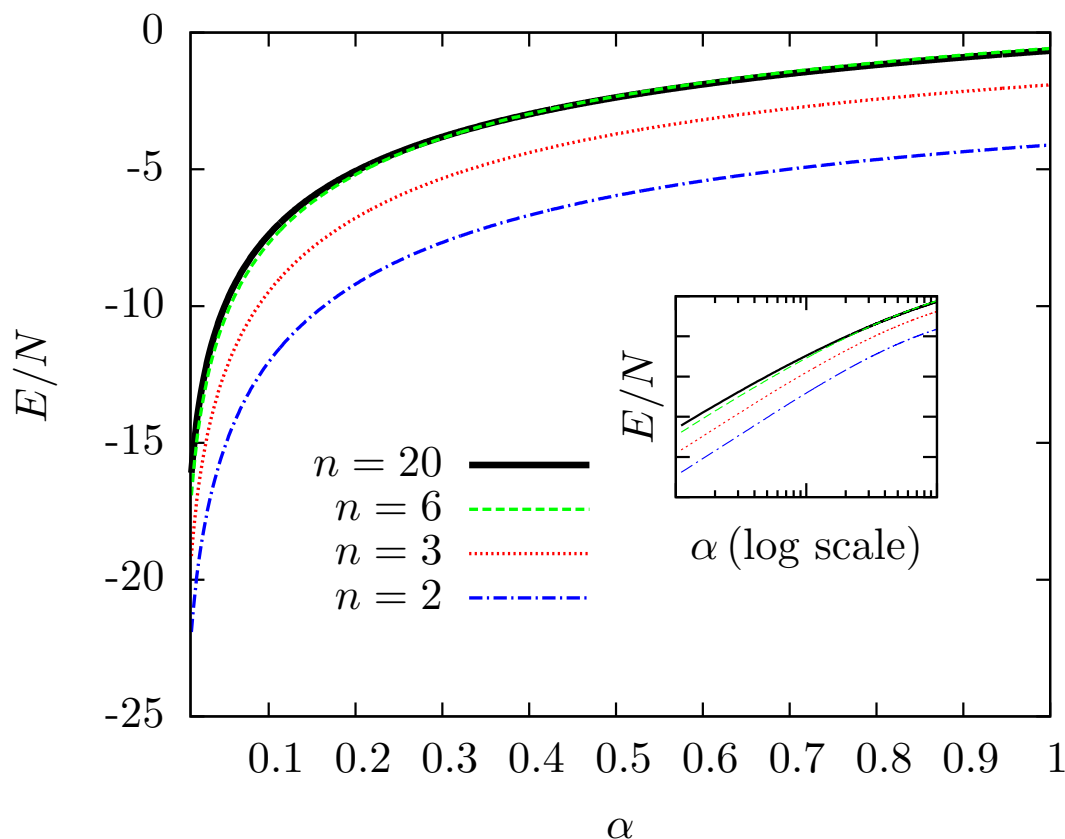


Figure 5.11 – Variation de l'énergie d'un système avec $N = 19$ particules en fonction de l'anisotropie, tracée pour différentes puissances du confinement. La sous-figure montre la même chose prenant l'échelle logarithmique pour l'axe d'anisotropie.

des transitions de phase structurales indiquées dans le spectre représenté sur les figures (5.7) et (5.8), on trouve que les confinements d'ordre supérieur ($n > 3$) conduisent à renforcer sensiblement la dégénérescence² dans le spectre des fréquences en fonction de α . La figure (5.10) montre les valeurs critiques du paramètre d'anisotropie, auxquelles les fréquences fortement dégénérées apparaissent dans le spectre pour différentes puissances de confinement. La première chose que nous remarquons est que, pour les confinements doux "soft", une forte dégénérescence a toujours lieu à faible α , ce comportement est lié à la haute symétrie qui est atteinte à ce stade. Cependant, dans la limite de la paroi dure de chaque cluster ($n \geq 4$ pour $N = 6, 13$ et $n \geq 6$ pour $N = 19$), on constate qu'une forte dégénérescence a lieu à $\alpha = 1$.

2. La dégénérescence est un concept à la fois, classique et quantique. Dans la théorie des petites oscillations d'un système (macroscopique et microscopique ou même entre les deux, i.e, mésoscopique), la dégénérescence désigne des modes normaux ayant la même fréquence.

Le comportement de l'énergie E/N en fonction de l'anisotropie est aussi considéré. La figure (5.11) montre l'évolution de l'énergie d'un cluster de 19 particules en fonction du paramètre d'anisotropie α pour des confinements différents. Nous constatons que le profil énergétique est le même pour les deux confinements, parabolique ($n = 2$) et non-parabolique ($n = 6$), où il est clair que l'énergie augmente avec $\alpha : 0 \rightarrow 1$.

On peut voir aussi, que la courbe d'énergie trouvée pour un confinement avec $n = 6$ s'imbrique à peu près avec un confinement plus raide ($n = 20$). De ce comportement, nous pouvons conclure que pour chaque système de N particules, l'énergie ne change pas avec la puissance de confinement, une fois que toutes les particules du système considéré atteignent la paroi du confinement à une certaine valeur critique de n (ici $n = 6$ pour un cluster ayant 19 particules). Dans le paragraphe suivant, nous verrons que ce comportement n'est plus valable pour les modes normaux.

5.4.2 Profil des hautes fréquences propres

Les modes ayant les fréquences propres les plus élevées présentent une importance particulière puisqu'ils peuvent être facilement excités sélectivement par variation du confinement [95] ou par application d'un champ externe [96]. En particulier, la fréquence du mode respiratoire "breathing mode" dans un piège parabolique et isotrope, peut souvent être mesurée avec précision et peut servir d'indicateur sensible aux propriétés intrinsèques du système [95]. Nous étudions ici la dépendance du mode ayant la fréquence la plus élevée par rapport à l'anisotropie et la puissance du potentiel de confinement. En variant α de 0 à 1, la plus haute fréquence change sa dépendance en excentricité α , passant d'un profil croissant pour $n = 2$ à un profil décroissant pour $n = 6$. Pour comprendre le comportement de ce mode pour les deux cas avec $n = 2$ et $n = 6$, nous traçons les vecteurs propres correspondants sur la figure (5.12).

Pour $n = 6$, la variation du paramètre d'anisotropie α de 1 à 0.0001 (voir figure (5.12.a-f)), conduit à réduire progressivement l'amplitude d'oscillation de chaque particule (commençant par les particules à proximité du centre de la configuration), jusqu'à ce que le cluster dans son ensemble cesse d'osciller lorsque $\alpha \rightarrow 0$. En effet, comme les particules atteignent les parois dans la limite isotrope pour $n = 6$, réduire la valeur de α de 1 à 0 conduit le système à sentir fortement l'effet du confinement dans la direction des x et

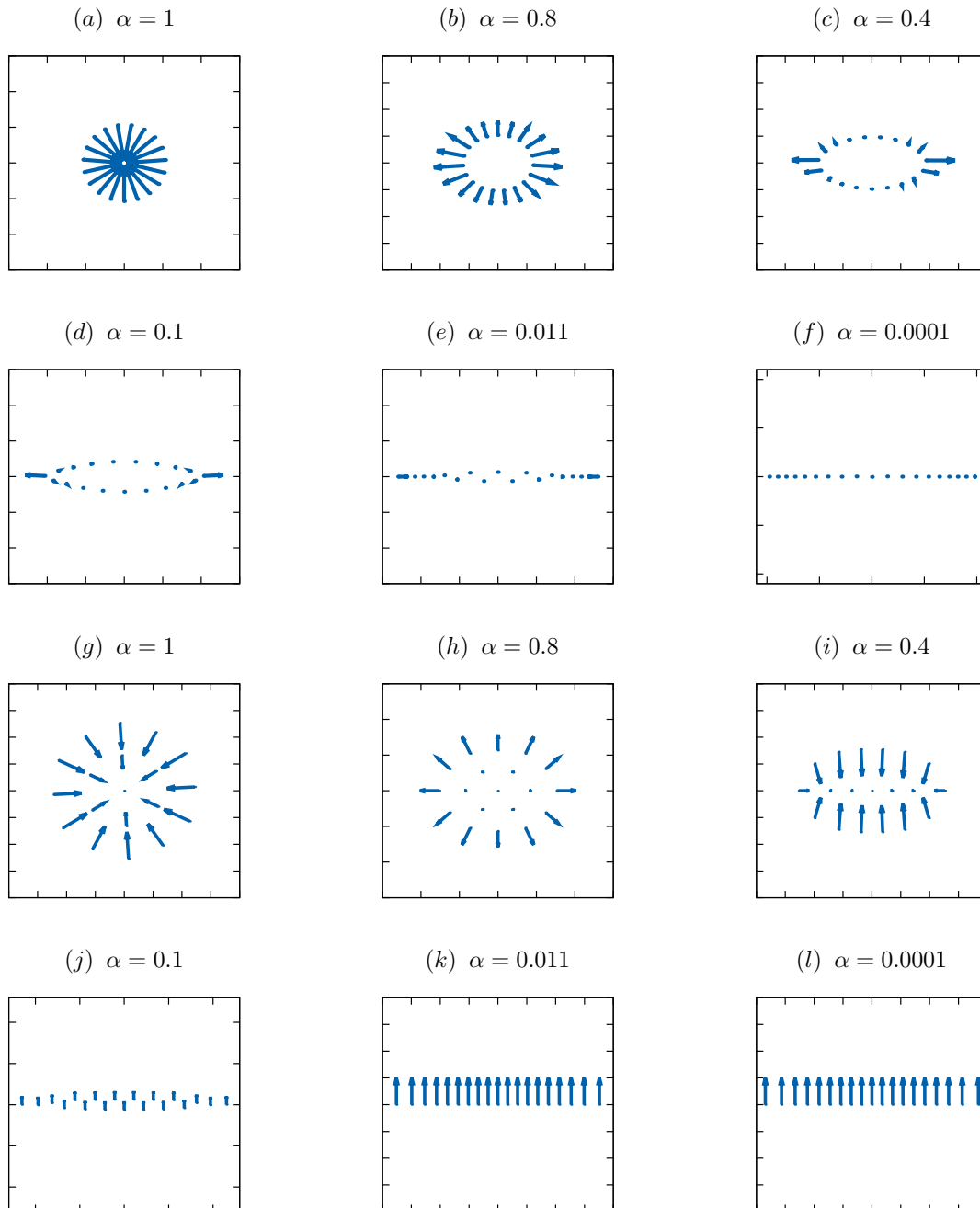


Figure 5.12 – Vecteurs propres correspondants aux plus hautes fréquences avec différentes valeurs de l'anisotropie et de puissance du confinement (a-f) pour $n = 6$ et (g-l) pour $n = 2$.

par conséquent, le mouvement des particules sera empêché rapidement dans la direction des y , et progressivement dans la direction des x comme le montre la figure (5.12.a-f). Cependant, diminuer $\alpha : 1 \rightarrow 0$ pour $n = 2$, semble contraindre la vibration des particules dans la direction des x . Par conséquent, à faible valeur de $\alpha \approx 0.011$, les particules vibrent uniquement dans la direction des y avec la même amplitude d'oscillation.

Il est intéressant de noter que, les modes de plus hautes fréquences propres représentés sur la figure (5.12.j-1), coïncident parfaitement avec les modes de centre de masse dans la direction y . La haute symétrie de ce dernier mode explique la forte dégénérescence constatée à très faible α dans un piège parabolique (cf. figure (5.10)).

En revanche, pour $n = 6$ le cluster montre un modèle d'oscillation très symétrique proche du mode respiratoire "breathing mode" pour $\alpha = 1$ (cf. figure (5.12.a)).

Dans la limite isotrope, nos résultats sur le mode de fréquence la plus élevée tombent en accord avec les résultats rapportés dans la Réf. [5], où il a été constaté que toutes les particules extérieures se déplacent dans la direction radiale avec une grande amplitude d'oscillation. Cependant, pour les interactions de Coulomb et dipolaires [56], le mode de fréquence la plus élevée implique des oscillations de particules le long du périmètre car le mouvement, dans ce cas, est empêché dans la direction radiale.

5.4.3 Mode du centre de masse pour $n = 2$

Un résultat important qui découle directement du spectre des modes (dans un confinement parabolique) de la figure (5.7.a), est l'évolution de deux fréquences particulières en fonction de l'anisotropie. Ces fréquences, montrées sur la figure (5.13), correspondent aux expressions générales suivantes :

$$\begin{aligned}\omega_x &= \sqrt{2\alpha} & \forall N \\ \omega_y &= \sqrt{2} & \forall \alpha, N\end{aligned}\tag{5.9}$$

En effet, ces fréquences propres sont associées à la vibration du centre de masse dans les directions x et y respectivement. Pour être sûr que ces valeurs propres caractérisent les modes du centre de masse, nous avons tracé, sur la figure (5.14), les modes correspondants avec $\alpha = 0.4$.

Il devient clair que les modes associés aux fréquences, $\omega_x = 0.894$ et $\omega_y = \sqrt{2}$,

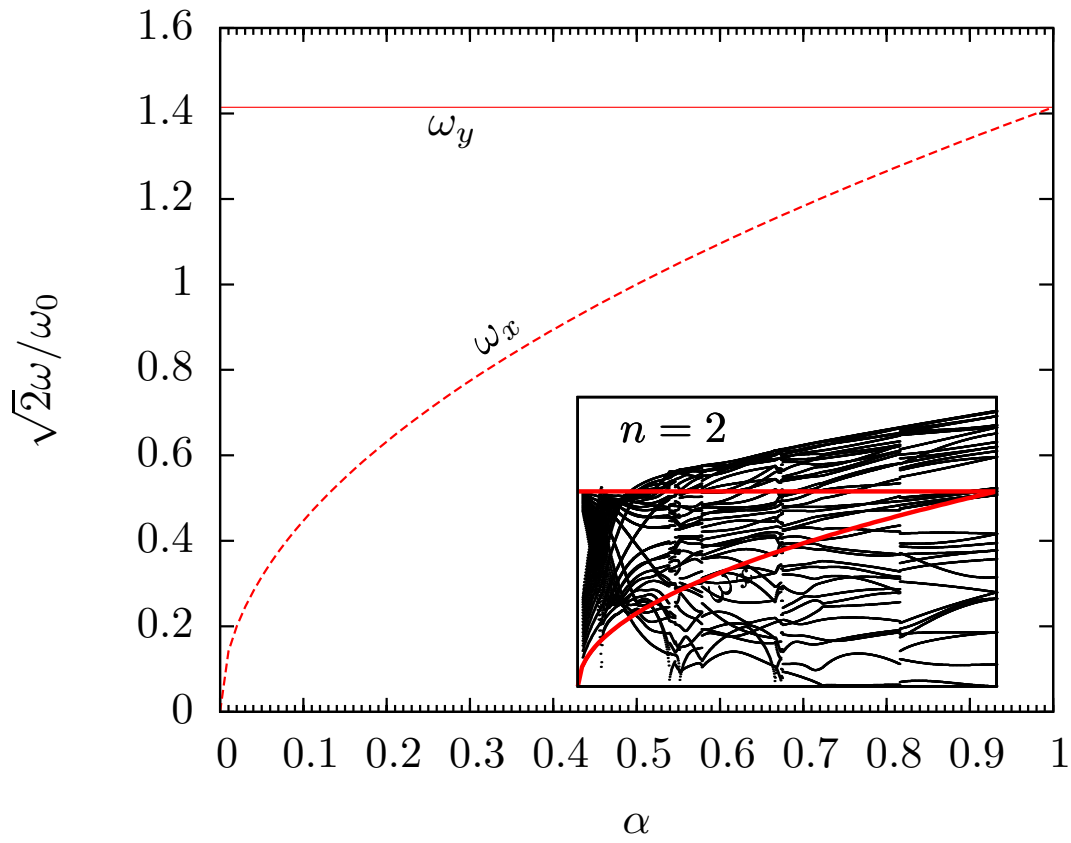


Figure 5.13 – Évolution des fréquences du centre de masse ω_x et ω_y en fonction de l'anisotropie α pour $n = 2$.

(a) $\omega_x = 0.894$

(b) $\omega_y = 1.414$

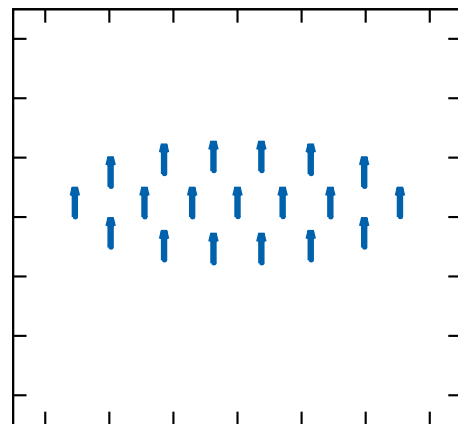
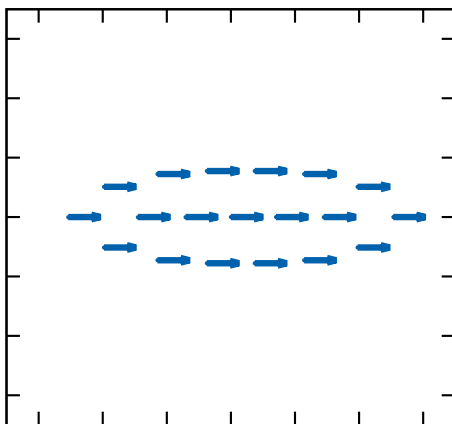


Figure 5.14 – Modes du centre de masse dans les directions x et y pour un système avec $n = 2$ et $N = 19$: (a) $\omega_x = 0.894$ pour $\alpha = 0.4$ et (b) $\omega_y = \sqrt{2}$.

résultent en mouvement de translation dans les directions x et y respectivement.

Ces résultats peuvent être démontrés analytiquement [6] en utilisant les équations du mouvement du centre de masse. L'Hamiltonien H pour un cluster logarithmique dans un potentiel de confinement parabolique et anisotrope s'écrit sous la forme adimensionnelle suivante :

$$H = \sum_{i=1}^N (\alpha x_i^2 + y_i^2) - \sum_{i>j}^N \ln |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \quad (5.10)$$

Les équations d'Hamilton, i.e, $-\frac{\partial H}{\partial r_i} = \dot{v}_i$, dans les directions x et y s'écrivent :

$$\begin{aligned} \dot{v}_{x_i} &= -2\alpha x_i + \sum_{j \neq i}^N \frac{x_i - x_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \\ \dot{v}_{y_i} &= -2y_i + \sum_{j \neq i}^N \frac{y_i - y_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \end{aligned} \quad (5.11)$$

Les déplacements des centres de masses, $R_x = \sum_i x_i$ et $R_y = \sum_i y_i$ dans les directions x et y satisfont aux équations différentielles suivantes :

$$\begin{aligned} \ddot{R}_x &= \sum_i \dot{v}_{x_i} = -2\alpha R_x \\ \ddot{R}_y &= \sum_i \dot{v}_{y_i} = -2R_y \end{aligned} \quad (5.12)$$

Nous concluons que la fréquence du centre de masse $\omega = \sqrt{2}$, doublement dégénérée dans le cas d'un potentiel isotrope, s'éclate en deux fréquences distinctes ω_x et ω_y dans le cas anisotrope. Ceci est dû à la brisure de symétrie dans le système.

5.5 Couplage des modes dans un confinement dur et anisotrope

Dans ce qui suit, nous considérons le cas particulier d'un confinement proche du "Hard Wall". Ceci peut être réalisé avec un confinement proportionnel à r^n avec n très grand. Dans ce travail, nous prenons l'exemple de $n = 20$ qui vérifie bien la condition du "Hard Wall". Nous tentons de comprendre ce que serait l'effet d'un tel confinement dur et anisotrope sur les modes normaux d'un système fini ($N = 19$) de particules à 2D.

La figure (5.15) montre l'évolution des fréquences propres du système considéré en

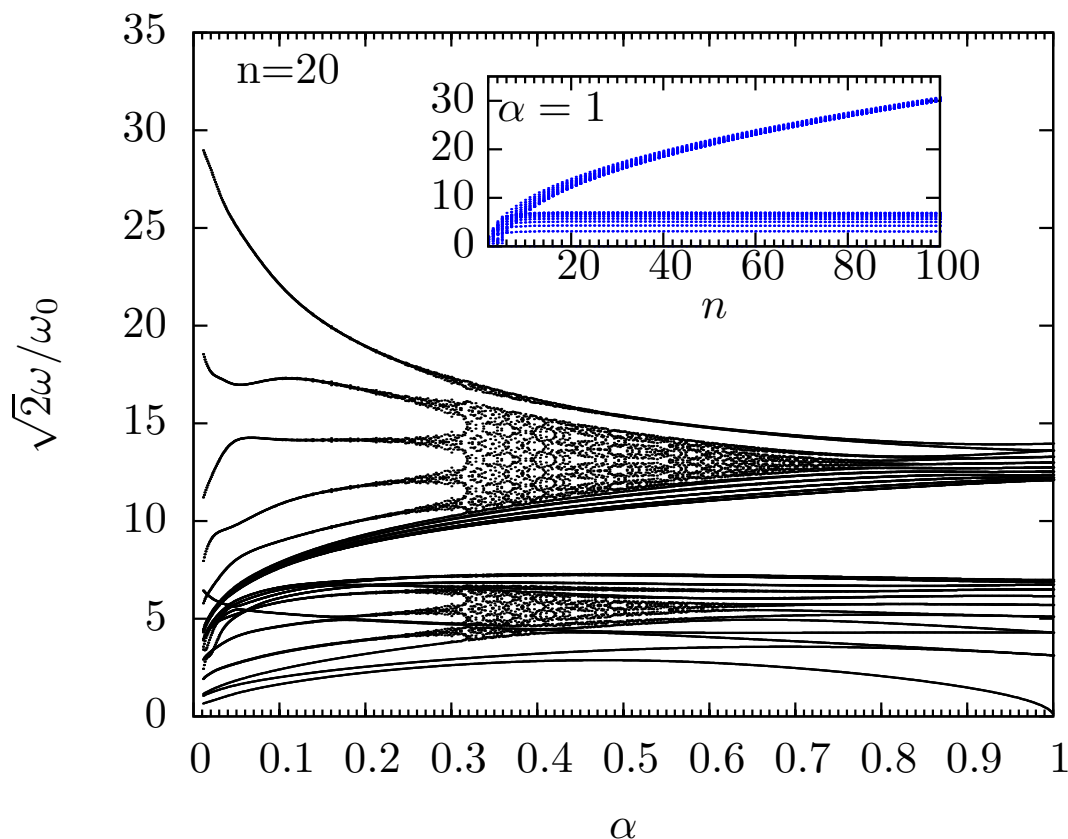


Figure 5.15 – Spectre des fréquences propres en fonction de l’anisotropie, tracé pour un confinement proche du Hard Wall $n = 20$. La sous figure montre la dépendance du spectre en puissance du confinement isotrope

fonction du paramètre d’anisotropie α . Il ressort de cette figure que le spectre des fréquences se divise en deux bandes indépendantes. Ces dernières sont séparées par un gap. En vue de comprendre et distinguer les deux effets provenant de l’anisotropie et de la puissance du confinement, nous traçons la dépendance des fréquences propres en puissance du confinement (cf. sous-figure (5.15)). D’après cette sous-figure, on constate qu’au-delà d’une valeur critique de la puissance de confinement, à peu près à $n > 10$, le spectre se divise en deux bandes indépendantes; une bande des basses fréquences et une autre des hautes fréquences, séparées par un gap. Les basses fréquences de la bande inférieure sont indépendantes de n , tandis que les hautes fréquences de la bande supérieure se trouvent fortement affectées par la puissance du confinement. Nous remarquons aussi que ces dernières se rapprochent de plus en plus que le confinement va plus raide. En général, ces fréquences suivent un profil en forme d’une loi de puissance, i.e. an^γ où γ et a sont des

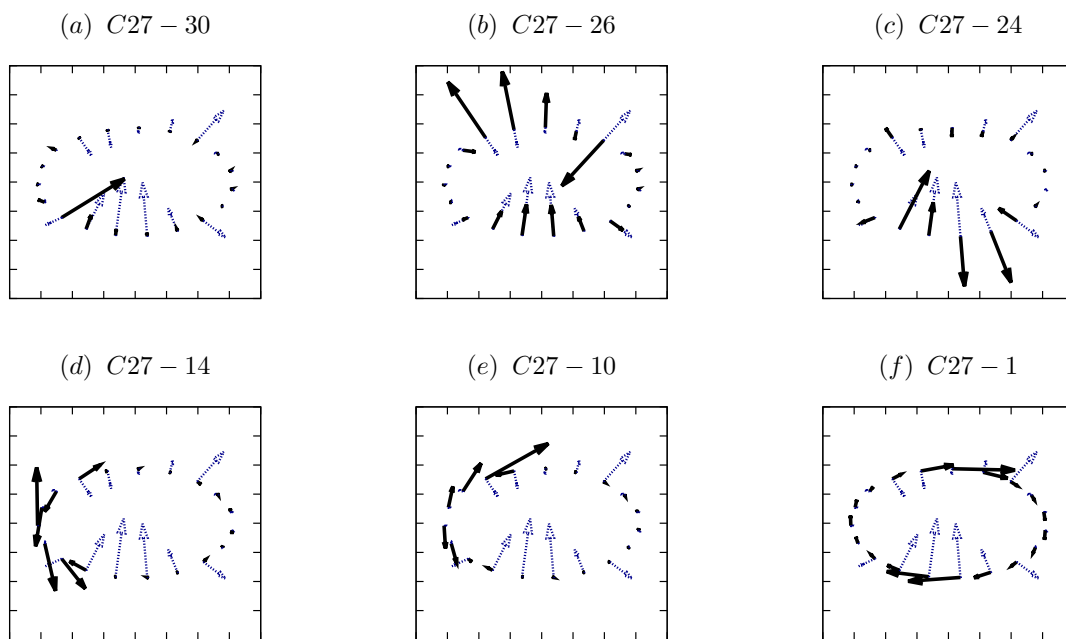


Figure 5.16 – Couplage local entre les vecteurs propres individuels du mode 27 avec ceux des modes 30, 26, 24 (flèches bleus pointillées) et ceux des modes 14, 10 et 1 (flèches noires plaines) pour $\alpha = 0.4$, $N = 19$ et $n = 20$

réels et $0 < \gamma \leq 1$. Par conséquent, nous pouvons dire que les basses fréquences sont plutôt écartées de l'effet de confinement, alors que les hautes fréquences se retrouvent considérablement modifiées par la forme du piège. Ceci peut être expliqué par le fait que les modes propres correspondant aux plus hautes fréquences sont plus proches des vibrations radiales, et donc sont plus susceptibles d'être modifiées vu que les forces provenant du confinement sont dans la direction radiale. Revenons à la figure (5.15), on conclue que l'apparition des deux bandes distinctes est la conséquence de l'application d'un confinement dur.

Nous observons que la largeur du gap diminue progressivement avec α allant de 1 à 0. À très basse valeur de $\alpha \rightarrow 0$, le gap induit disparaît complètement. Une caractéristique intéressante du spectre des modes, représentée sur la figure (5.15), est le comportement de certaines fréquences intermédiaires, appartenant aux deux bandes supérieure et inférieure. Le long de la variation de l'anisotropie du système ($0 \rightarrow 1$), on peut distinguer trois régions où ces fréquences intermédiaires se comportent différemment les unes des autres.

Dans la première région $0 < \alpha \leq 0.25$, on trouve que ces fréquences sont approximative-

ment dégénérées (très proches les unes des autres). D'autres régions sont obtenues avec $0.25 < \alpha \leq 0.8$ pour la bande supérieure et $0.25 < \alpha \leq 0.65$ pour la bande inférieure. L'augmentation de la valeur de α dans ces intervalles, conduit à la levée de dégénérescence de certaines fréquences. Ce phénomène peut être interprété comme étant une brisure de la symétrie circulaire du système³, qui se manifeste à faibles valeurs de α . Lors du phénomène de la levée de dégénérescence, l'éclatement des fréquences propres dans le spectre se déroule avec des motifs géométriques très symétriques.

Enfin, pour $0.8 < \alpha \leq 1$ (bande supérieure) et $0.65 < \alpha \leq 1$ (bande inférieure), les fréquences qui participent à la survenue de la levée de dégénérescence (apparition des motifs complexes), rencontrent les fréquences situées juste au-dessus et au-dessous du gap. Ainsi, nous concluons que l'image idéale des modes normaux "indépendants", observés pour $n = 2$ et même pour des confinements doux tel que pour $n = 2, 3, 4, \dots$, semble être non-effective pour un confinement dur comme $n = 20$.

En effet, dans les systèmes réels, il existe toujours un certain couplage entre différents modes, et quand nous nous efforçons à syntoniser deux modes différents à la même fréquence, ils se séparent en deux modes mixtes avec des fréquences distinctes.

Pour savoir si les modes normaux sont globalement couplés ou pas, nous avons vérifié l'orthogonalité entre les différents modes propres en calculant le produit scalaire des vecteurs propres générés :

$$\sigma_{kl} = \vec{\chi}_k \cdot \vec{\chi}_l, \quad (5.13)$$

où $\vec{\chi}_k$ et $\vec{\chi}_l$ sont deux modes propres différents du système considéré. σ_{kl} mesure le couplage entre deux modes différents.

Dans la région de formation des bandes symétriques (apparition des motifs complexes et symétriques), $\sigma_{kl} = 0$, indiquant que les modes sont globalement indépendants les uns des autres. Afin de vérifier si les modes sont localement indépendants, nous pouvons regarder au vecteur propre au niveau de chaque particule individuelle dans le cluster. La figure (5.16) montre un exemple de l'un des vecteurs propres trouvés pour $\alpha = 0.4$ (mode 27 qui

3. Ce phénomène peut être comparé à la dégénérescence quantique du moment cinétique d'ordre $(2l + 1)$ de l'état d'une particule dans un potentiel central[97], qui résulte de la symétrie sphérique (isotropie de l'espace) du potentiel. Si la symétrie est brisée par une perturbation, les niveaux dégénérés se séparent en une série de niveaux voisins. Une telle perturbation peut être produite par une interaction faible supplémentaire (ex : couplage spin-orbite produit la séparation dite de structure fine) ou par l'application d'un champ extérieur.

participe à la formation des motifs complexes dans la bande supérieure) et sa dépendance avec les autres modes voisins ou non-voisins. Nous constatons, d’après les figures (5.16.a-c) que chacun des vecteurs propres du mode 27 est linéairement dépendant de son analogue dans les modes 30, 26 et 24 (qui se situent dans la même bande où se trouve le mode 27) et orthogonal à son analogue dans les modes 14, 10 et 1 (se situent dans une bande différente que celle du mode 27) (cf. figure (5.16.d-f)). Par conséquent, dans ces bandes, on peut parler de modes normaux globalement indépendants mais localement couplés. Ceci est peut être la raison de la levée de dégénérescence et de la séparation des fréquences observées sur la figure (5.15).

5.6 Conclusion

En résumé, nous avons tiré une analyse numérique des modes normaux, qui nous a permis de simuler les effets d’anisotropie et de la puissance de confinement sur les clusters logarithmique à 2D. Le modèle présenté dans ce chapitre, peut être testé expérimentalement sur des systèmes réels à 2D tels que les clusters de vortex.

Pour un système de particules en interaction logarithmique et maintenu avec un potentiel de confinement parabolique et isotrope, les propriétés structurales, spectrales et thermodynamiques ont été présentées.

Nous avons montré que soumettre ce système à un confinement anisotrope et qui prend une forme d’une loi de puissance, conduit le cluster résultant à subir une séquence de transitions de phases structurales qui se produisent lorsque les fréquences propres présentent des sauts dans le spectre (transition de phase du premier ordre), ou lorsque l’une des fréquences tend vers zéro (transition de phase du second ordre).

Lorsque toutes les particules forment une seule couche à la limite du piège ($n = 6$ pour un cluster avec $N = 19$ particules) la plus haute fréquence montre un profil décroissant en fonction du paramètre d’anisotropie $\alpha : 0 \rightarrow 1$, toutefois, l’inverse se produit pour l’amplitude d’oscillation des particules. Nous avons constaté que le cluster oscille avec une grande amplitude à $\alpha = 1$, mais il lui est complètement interdit de vibrer dans les deux sens lorsque $\alpha \rightarrow 0$.

Pour le cas particulier d’un confinement parabolique, nous avons trouvé numériquement un mode du centre de masse universel dans la direction y et un autre dépendant de

α dans la direction x .

Nous avons vu aussi que soumettre le système à un potentiel de confinement dur et isotrope "Hard Wall", conduit à un gap dans le spectre des fréquences propres. Les hautes fréquences (branche au-dessus du gap) se trouvent très affectées par la forme du confinement, tandis que les basses fréquences (branche au-dessous du gap) restent inchangées à la variation de la puissance du piège. Pour un confinement dur quelconque, l'anisotropie a pour effet de réduire la largeur du gap (lorsque $\alpha : 1 \rightarrow 0$) et de renforcer la dégénérescence des modes propres dans deux régions de très forte anisotropie ($\alpha \rightarrow 0$) et de très faible anisotropie ($\alpha \rightarrow 1$). Entre ces deux limites, le spectre montre une séparation des fréquences propres (levée de dégénérescence), formant ainsi des bandes très symétriques. Dans de telles régions formées, nous avons trouvé que tous les modes propres sont globalement indépendants les uns des autres, mais localement dépendants au niveau de chaque particule individuelle.

6

Conclusion

L'objectif de cette thèse est d'étudier en détail la façon dont la structure, la dynamique propre et les propriétés de fusion des clusters classiques, de taille finie, sont modifiées par rapport aux paramètres régissant le système, i.e, l'interaction (courte et longue portée) et les paramètres de confinement externes (anisotropie et forme du confinement).

Dans la première partie de cette thèse, nous avons étudié les propriétés des clusters interagissant avec un potentiel coulombien écranté, c'est-à-dire un potentiel de Yukawa qui peut décrire, par exemple, l'interaction entre les particules poussiéreuses dans un plasma complexe. Nous avons constaté que l'effet combiné de la courte portée de l'interaction interparticules avec un confinement, ayant une forme plus raide, pourrait être utilisé pour générer la même configuration avec différentes structures, permettant ainsi, des transitions des structures commensurables en d'autres structures incommensurables et vice versa.

Dans la même condition du confinement, l'autre aspect de cette partie est l'étude des modes normaux de ces clusters finis. L'un des modes normaux, à savoir, le mode du centre de masse, qui semble n'exister que dans un piège parabolique, se révèle être également présent dans un confinement non harmonique pour un cluster de Yukawa. Pour la clarification de ces résultats, des exemples représentatifs avec des systèmes petits et relativement grands ont été montrés.

Les propriétés de fusion d'un plasma complexe ont été également étudiées. Dans un piège parabolique, on a constaté que le comportement de fusion est fortement influencé par la longueur d'écrantage : un cluster avec une interaction à courte portée se fond plus tôt que celui avec une interaction à longue portée. Cependant, dans un piège en forme d'une loi de puissance, cette règle générale de fusion pourrait être modifiée, résultat de

la forte compétition entre le comportement intrinsèque de l'interaction et le confinement externe.

Une question clé concernant les systèmes finis est la quantification fiable et cohérente des transitions de phase qui émergent comme un processus graduel dans les clusters finis. Nous avons constaté que la *variance des fluctuations de la distance interparticules* (VIDF), utilisée pour localiser la transition de fusion nous donne une estimation fiable de la fonte des clusters de Yukawa piégés par un potentiel de confinement général. Cependant, la divergence de cette quantité est évidente pour les structures non-emballées. Pour ces cas particuliers, les *fluctuations de la distance interparticules* (IDF) se révèlent plus appropriées pour l'identification de la transition de phase de fusion.

La seconde partie de ce travail a été portée sur les clusters logarithmiques dans un confinement anisotrope ayant une forme d'une loi de puissance. Cette étude peut être appliquée pour décrire des systèmes tels que les vortex dans des supraconducteurs de type 2. Dans la limite d'un piège parabolique isotrope, les configurations de l'état fondamental et les modes normaux universels, à savoir les modes de rotation, modes "breathing" et modes du centre de masse sont dérivés. Le comportement de la fonction de distribution radiale (RDF) pour différentes phases thermodynamiques pour un cluster avec 37 particules, a été identifié. La phase cristalline est caractérisée par des pics pointus tandis que dans une phase liquide, la RDF décroît avec la paire distance.

Dans les pièges paraboliques, nous avons trouvé que le paramètre d'anisotropie peut conduire le système à subir des transitions de phase structurales de premier et de second ordre. Ces transitions affectent la distribution des particules et le spectre des fréquences propres. En outre, nous avons trouvé numériquement un mode du centre de masse universel dans la direction y et un autre dépendant de l'anisotropie dans la direction x .

Pour un confinement relativement doux, ces transitions peuvent disparaître complètement du spectre conduisant à renforcer la dégénérescence des fréquences propres dans la région de très forte et très faible anisotropie. Cependant, au-delà, dans un piège anisotrope à parois dures "Hard Wall", des effets non linéaires, comme le couplage des modes, peuvent apparaître dans ce contexte à la suite d'excitations fortes (anharmoniques), i. e, brisure de la symétrie du système.

Plusieurs aspects de ce travail pourraient être améliorés ou étendus. Une amélioration du modèle des clusters classiques est possible, par exemple, en incluant les effets des

impuretés. En effet, dans les expériences réelles, les clusters ne sont pas toujours propres, les impuretés ou les particules qui présentent un défaut de masse et/ou de charge peuvent être présentes. Il serait alors très intéressant de connaître le rôle général du potentiel d'impureté sur les caractéristiques essentielles du système (dans un piège harmonique ou anharmonique) telles que la structure ordonnée et les modes normaux.

Une autre extension possible du présent travail est de considérer les mêmes modèles théoriques, utilisés dans cette thèse, pour les systèmes quantiques. Les exemples actuels comprennent les cristaux bosoniques, les supersolides et les électrons dans une boîte quantique. Cela peut être réalisé au moyen des simulations PIMC (Path Integral Monte Carlo Simulations).

A

Propriétés de l'état fondamental d'un cluster logarithmique à 2D

Table A.1 – Configurations de l'état fondamental des systèmes avec $N = 3...40$ particules en interaction logarithmique, confinées dans un potentiel de confinement parabolique. Les énergies (E/N), les plus basses fréquences propres non-nulles, le rayon de chaque couche sont calculés.

N	$N_1N_2\dots$	E/N	ω_{min}	r
3	3	0.29726744	1.414214	0.70710
4	4	0.27261437	1.154701	0.86602
5	5	0.19528104	1.000000	1.00000
6	1,5	0.07256948	0.605810	0.00000 1.22474
7	1,6	-0.107320597	0.698672	0.00000 1.32287
8	1,7	-0.31434325	0.765367	0.00000 1.41421
9	1,8	-0.54605667	0.666666	0.00000 1.50000
10	2,8	-0.81004134	0.186038	0.53049 1.65525
11	3,8	-1.09939391	0.019479	0.72419 1.79965
12	3,9	-1.41488153	0.246347	0.72329

				1.86811
13	4,9	-1,74739226	0.001962	0.87359 1.99824
14	4,10	-2.10199534	0.027840	0.87284 2.06004
15	4,11	-2.47074516	0.001037	0.87287 2.11983
16	5,11	-2.85856692	0.453471	1.00303 2.23526
17	1,5,11	-3.25959296	0.001332	0.01169 1.23451 2.34238
18	1,6,11	-3.67816219	0.349075	0.01108 1.32717 2.44804
19	1,6,12	-4.11139737	0.159116	0.00000 1.32760 2.49828
20	1,6,13	-4.55509965	0.001038	0.00188 1.32724 2.54809
21	1,7,13	-5.01283636	0.380788	0.00094 1.41596 2.64513
22	1,7,14	-5.48037744	0.215759	0.00000 1.41725 2.69138
23	1,8,14	-5.95933450	0.224115	0.00000 1.50070 2.78361
24	2,8,14	-6.45084538	0.073620	0.54453

				1.65644
				2.87059
25	3,8,14	-6.95187107	0.038299	0.73236
				1.80287
				2.95581
26	3,9,14	-7.46372580	0.014054	0.73275
				1.86924
				3.03960
27	3,9,15	-7.98569401	0.092241	0.73209
				1.86914
				3.08054
28	4,9,15	-8.51533696	0.005730	0.87728
				2.00061
				3.16072
29	4,10,15	-9.05406024	0.035098	0.87710
				2.06117
				3.23912
30	4,10,16	-9.60342841	0.043108	0.87659
				2.06092
				3.27765
31	4,10,17	-10.15892789	0.013346	0.87635
				2.06097
				3.31568
32	4,11,17	-10.72290404	0.021168	0.87873
				2.11980
				3.39010
33	5,11,17	-11.29537401	0.001513	1.00487
				2.23591
				3.46339
34	1,5,11,17	-11.87443582	0.002431	0.0000
				1.24040

				2.34347 3.53395
35	1,6,11,17	-12.46082139	0.064695	0.00956 1.33101 2.45001 3.60382
36	1,6,12,17	-13.05647512	0.001654	0.01576 1.33244 2.49911 3.67265
37	1,6,12,18	-13.65779874	0.078375	0.00000 1.33246 2.49895 3.70676
38	1,6,12,19	-14.26421854	0.279166	0.00229 1.33189 2.498810 3.74045
39	1,7,13,18	-14.87980285	0.006937	0.00000 1.41773 2.04569 3.83982
40	1,7,13,19	-15.50010763	0.001204	0.00624 1.41759 2.64557 3.87238

Bibliographie

- [1] V. A. Schweigert, F. M. Peeters, and P. Singha Deo, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2783 (1998).
- [2] V. E. Fortov, A. G. Khrapak, S. A. Khrapak, V. I. Molotkov, and O. F. Petrov, *Phys. Usp.* **47**, 447 (2004).
- [3] L. Bonsall, and A. A. Maradudin, *Phys. Rev. B* **15**, 1959 (1977).
- [4] O. Arp, D. Block, and A. Piel, *Phys. Rev. Lett* **93**,165004 (2004).
- [5] B. Partoens and P. S. Deo, *Phys. Rev. B* **69**, 245415 (2004).
- [6] S. W. S. Apolinario, B. Partoens, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. E* **72**, 046122 (2005).
- [7] M. Bonitz, C. Henning, and D. Block, *Rep. Prog. Physics* **73**, 066501 (2010).
- [8] M. Saint Jean and C. Guthmann, *J. Phys. : Condens. Matter* **14**, 13653 (2002).
- [9] G. B. Hess, *Phys. Rev.* **161**, 189 (1967).
- [10] J. P. Schiffer, *Phys. Rev. Lett* **70** , 818 (1993).
- [11] T. E. Sheridan, *Phys. Plasmas* **13**, 022106 (2006).
- [12] D. Frenkel and D. Smit, eds., *Understanding Molecular Simulation*, Academic Press, San Diego (1996).
- [13] F. Bolton and U. Rössler, *Superlatt. Microstruct* **13**, 139 (1993).
- [14] M. A. Reed and W. P. Kirk, eds., *Nanostructure Physics and Fabrication*, Academic Press. (1989).
- [15] E. Wigner, *Phys. Rev.* **46**, 1002 (1934).

-
- [16] T. S. Metcalfe, M. H. Montgomery, and A. Kanaan, *ApJ* **605**, L133 (2004).
- [17] D.A. Baiko, *J. Phys. Conf. Ser* **496**, 012010 (2014).
- [18] C. C. Grimes, and G. Adams, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 795 (1979).
- [19] R. C. Ashoori, *Nature (London)* **379**, 413 (1996).
- [20] F. Diedrich, E. Peik, J. M. Chen, W. Quint, and H. Walther, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2931 (1987).
- [21] J. Beebe-Wang, N. Elander, and R. Schuch, *Phys. Scripta* **46**, 506 (1992).
- [22] J. H. Chu and L. I, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 4009 (1994).
- [23] L. G. D'yachkov, M. I. Myasnikov, O. F. Petrov, T. W. Hyde, J. Kong and L. Matthews, *Phys. Plasmas* **21**, 093702 (2014).
- [24] H. Thomas, G.E Morfill, V. Demmel and J. Goree, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 652 (1994).
- [25] E. J. Yarmachuk and R. E. Packard, *J. Low. Temp. Phys* **46**, 479 (1984).
- [26] M. Bonitz, N. Horing, and P. Ludwig, eds., *Introduction to complex plasmas*, Springer, Heidelberg ; New York, (2010), ISBN 978-3642 1059 13.
- [27] C. K. Goertz, *Reviews of Geophysics* **27**, 271 (1989).
- [28] F. Verheest, *Space Science Reviews* **77**, 267 (1996).
- [29] G. S. Selwyn, J. Singh, R. S. J. Bennett, *Vac. Sci. Technol.* **A 7**, 2758 (1989).
- [30] R. V. Kennedy and J. E. Allen, *Journal of Plasma Physics* **69**, 485 (2003).
- [31] H. Baumgartner, H. Kählert, V. Golobnychiy, C. Henning, S. Käding, A. Melzer, and M. Bonitz, *Contrib. Plasma Phys.* **47** 281 – 290 (2007).
- [32] P. K. Shukla and A. A. Mamun, *Institute of Physics Publishing*, (2002).
- [33] J. Goree, *Plasma Sources Sci. Technol.* **3**, 400-406 (1994).
- [34] G.E. Morfill, V.N. Tsytovich, H. Thomas, *Plasma Phys. Rep.* **29**, 1-30 (2003).

- [35] V. E. Fortov, A. G. Khrapak, S. A. Khrapak, V. I. Molotkov, and O. F. Petrov, *Phys. Usp.* **47**, 447 (2004).
- [36] U. Konopka, G. E. Morfill, and L. Ratke, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 891-894 (2000).
- [37] A. Melzer, T. Trottenberg, A. Piel, *Phys. Lett. A* **191**, 301 (1994).
- [38] A. Melzer, *Phys. Rev. E* **67**, 016411 (2003).
- [39] M. Bonitz, P. Ludwig, H. Baumgartner, *Phys. Plasmas* **15**, 055704 (2008).
- [40] K.J. Strandburg, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 161 (1988).
- [41] P. Keim, G. Maret, U. Hertz, H. von Grunberg, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 215504 (2004).
- [42] X.H. Zheng, R. Grieve, *Phys. Rev. B* **73**, 064205 (2006).
- [43] K. van der Beek, « Supraconducteurs : la mécanique quantique à grande échelle » *Reflète de la physique* **27**, 6-11 (2011).
- [44] <http://www.supraconductivite.fr/fr/index.php?p=supra-levitation-vortex-more> .
- [45] National Research Council, *Opportunities in High Magnetic Field Science* Washington, D.C :, The National Academic Press (2005).
- [46] A. A. Abrikosov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz* **32**, 1442 (1957).
- [47] L. R. E. Cabral and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **70**, 214522 (2004).
- [48] L. Ya. Vinnikov, J. Karpinski, S. M. Kazakov, J. Jun, J. Anderegg, S. L. Bud'ko, and P. C. Canfield, *Phys. Rev. B* **67**, 092512 (2003).
- [49] Yu. E. Lozovik and E. A. Rakoch, *Phys. Rev. B* **57**, 1214 (1998).
- [50] M. Tinkham, *Introduction to superconductivity, 2ed* , (McGraw-Hill, New York, 1996).
- [51] B. Partoens and P. S. Deo, *Phys. Rev. B* **69**, 245415 (2004).
- [52] U. Konopka, G. E. Morfill, and L. Ratke, *Phys. Rev. Lett* **84**, 891 (2000).

-
- [53] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. M. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [54] V. A. Schweigert and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **51**, 7700 (1995).
- [55] K. E. Atkinson, *An Introduction to Numerical Analysis, 2nd edition, John Wiley & Sons, New York*, (1989).
- [56] A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri, *Méthodes Numériques. Algorithmes, analyse et applications, 2ed, Springer, Milan*, (2007).
- [57] M. Djebli, M. Issad, and L. Rouaiguia, *Phys. Plasmas* **17**, 033704 (2010).
- [58] G. E. Astrakharchik, A. I. Belousov and Yu. E. Lozovik, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **89**, 696 (1999).
- [59] M. Kong, B. Partoens and F. M. Peeters, *New J. Phys.* **5**, 23 (2003).
- [60] D. Block, M. Kroll, O. Arp, A. Piel S. Käding, Y. Ivanov, A. Melzer, C. Henning, H. Baumgartner, P. Ludwig and M. Bonitz, *Plasma Phys. Control. Fusion* **49**, B109-B116 (2007).
- [61] W. Yang, M. Kong, M. V. Milosevic, Z. Zeng and F. M. Peeters, *Phys. Rev. E* **76**, 041404 (2007).
- [62] V. N. Tsytovich, N. G. Gousein-zade and G. E. Morfill, *Phys. Plasmas* **13**, 033503 (2006).
- [63] A. Bessaa and M. Djebli, *Phys. Plasmas* **23**, 113703 (2016).
- [64] W. Kohn, *Phys. Rev.* **123**, 1242 (1961).
- [65] A. Melzer and A. Schella, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 225001 (2012).
- [66] W. D. Kraeft and M. Bonitz, *J. Phys. : Conf. Ser.* **35**, 94 (2006).
- [67] J.J. Thomson, *Phil. Mag. S.* **39**, 236 (1904).
- [68] M. Kong, B. Partoens, A. Matulis and F. M. Peeters, *Phys. Rev. E* **69**, 036412 (2004).
- [69] J. H. Chu and L. I. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 4009 (1994).

- [70] H. M. Thomas and G. E. Morfill, *J. Vac. Sci. Technol. A* **14**, 501 (1996).
- [71] F.A. Lindemann, *Phys. Zeitschrift* **11**, 909 (1910).
- [72] R. S. Berry, T. L. Beck, H. L. Davis and J. Jellinek, *Adv. Chem. Phys.*, New York, (1988) Chap. 49, pp. 75–138.
- [73] J. Böning, A. Filinov, P. Ludwig, H. Baumgartner, M. Bonitz and Y. E. Lozovic, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 113401 (2008).
- [74] G.E. Astrakharchik, A.I. Belousov and Yu.E. Lozovik, *Phys. Lett. A* **258**, 123 (1999).
- [75] André Melzer, André Schella, Jan Schablinski, Dietmar Block and Alexander Piel, *Phys. Rev. E* **87**, 033107 (2013).
- [76] K. G. Koss, M. I. Myasnikov, O. F. Petrov and K. B. Statsenko, *JETP Lett.* **102**, pp 655-661 (2015).
- [77] Jan Schablinski, Dietmar Block, Alexander Piel, André Melzer, Hauke Thomsen, Hanno Kahlert and Michael Bonitz, *Phys. Plasmas* **19**, 013705 (2012).
- [78] L. Candilo, J. P. Rino, N. Studart, and F. M. Peeters, *J. Phys. : Condens. Matter* **10**, 11627 (1998).
- [79] Y. J. Lai and Lin. I, *Phys. Rev. E* **60**, 4743 (1999).
- [80] M. Drewsen, *Physica B* **460**, 105-113 (2015).
- [81] S. Barkby, S. V. Vladimirov, A. A. Samarian, *Physics Letter A* **372**, 1501-1507 (2008).
- [82] S. W. S. Apolinario, B. Partoens, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **77**, 035321 (2008).
- [83] L. L. Yan, W. Wan, L. Chen, F. Zhou, S. J. Gong, X. Tong and M. Feng *Sci. Rep.* **6**, 21547 (2016).
- [84] A. Melzer, *Phys. Rev. E* **73**, 056404 (2006).
- [85] J. E. Galván-Moya and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **84**, 134106 (2011).
- [86] E. Lundh, *Eur. Phys. J. D* **46**, 517 (2008).

-
- [87] A. L. Gaunt, T. F. Schmidutz, I. Gotlibovych, R. P. Smith, and Z. Hadzibabic, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 200406 (2013).
- [88] L. Chomaz, L. Corman, T. Bienaimé, R. Desbuquois, C. Weitenberg, S. Nascimbène, J. Beugnon, and J. Dalibard, *Nature Comm.* **6**, 6162 (2015).
- [89] A. Bessaa and M. Djebli, *Physica E* **86**, 117-123 (2016).
- [90] Yu. E. Lozovik and E. A. Rakoch, *Jetp Lett.* **65**, 282-289 (1997).
- [91] B. Partoens, and F. M. Peeters, *J. Phys. : Condens. Matter* **9**, 5383–5393 (1997).
- [92] G. Malescio and G. Pellicane, *Nature Materials* **2**, 97 (2003).
- [93] L. Komendová, M. V. Milosevic, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **88**, 094515 (2013).
- [94] D. I. Uzunov, *Introduction to the Theory of Critical Phenomena. Singapore : World Scientific Publishing* , (1993).
- [95] A. Melzer, M. Klindworth, and A. Piel, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 115002 (2001).
- [96] E. C. Dykeman and O. F. Sankey, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 028101 (2008).
- [97] Walter Greiner, eds., *Quantum Mechanics*, Springer, Heidelberg ; New York, (2001), ISBN 3-540-58079-4.