

N° d'ordre : 11/2016-D/PH

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique
Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumedienne
Faculté de Physique



Thèse

Présentée pour l'obtention du grade de Docteur en Sciences

En : Physique

Spécialité : Physique Théorique de la Matière et des Hautes Énergies

Par : **M. Ahmed BEKDA**

TITRE

**ETUDE DES PHENOMENES NON LINEAIRES DANS LES
STRUCTURES FORTEMENT COUPLEES**

Soutenue publiquement le 31/05/2016, devant le jury composé de :

M. A. Tahraoui	Professeur	à l'U.S.T.H.B	Président
M. M. Djebli	Professeur	à l'U.S.T.H.B	Directeur de thèse
Mme L. Amirouche	Professeur	à l'U.S.T.H.B	Examinatrice
M. B. Bourahla	Professeur	à l'U.M.M.T.O	Examinateur
M. R. Tigrine	Professeur	à l'U.ADRAR	Examinateur
M. M. Milosevic	Professeur	à l'U.A. Belgique	Examinateur

Dédicace

*Je dédie cette présente thèse à tous mes amis
et en particulier à mes parents et à ma petite
famille.*

Remerciements

Ce travail a été effectué au sein du laboratoire de physique théorique de la faculté de physique de l'Université des Sciences et des Technologies Houari Boumedienne (USTHB) d'Alger.

Ma profonde reconnaissance va au Professeur Mourad Djebli qui m'a honoré par son acceptation d'être mon directeur de thèse. Celui qui a consacré une grande partie de son temps à m'orienter et à m'aider dans la réalisation de ce présent travail. Je le remercie beaucoup pour son amitié et ses conseils pertinents et à qui je dois les principales orientations concernant la simulation numérique. Je le remercie en particulier pour m'avoir introduit dans le domaine de la physique des milieux plasmas. M. Djebli, a été d'un grand soutien moral dans les moments les plus difficiles de mon travail. Je garde le souvenir des nombreuses discussions enrichissantes que nous avons eu. Je le remercie aussi pour le regard critique et constructif qu'il a apporté tout au long de ce travail.

Je tiens à exprimer ma gratitude à monsieur Abdelatif Tahraoui, Professeur à l'USTHB, de m'avoir fait honneur de présider le jury de cette thèse.

Mes remerciements les plus vifs vont également aux messieurs Boualem Bourahla et Rachid Tigrine, professeurs à l'UMMTO et à l'U.ADRAR, ainsi qu'à madame Lynda Amirouche, professeur à l'USTHB, pour l'intérêt qu'ils ont manifesté et porté à ce travail en acceptant de prendre part au jury de la présente thèse.

Je remercie également le Professeur Milorad Milosevic de l'université d'Anvers de Belgique qui a accepté de faire le déplacement et de faire partie de ce jury.

Je n'ometts pas de remercier mes collègues du laboratoire de physique théorique, étudiants et enseignants, ainsi que ma famille pour leur aide et patience ; ils m'ont procuré toutes les conditions favorables pour parfaire ce travail.

Table des matières

1	Les systèmes fortement couplés	7
1.1	Les cristaux Coulombiens	7
1.2	Le plasma	8
1.2.1	Composition et propriétés	9
1.2.2	Plasmas naturels	10
1.2.3	Plasmas de laboratoire	10
1.2.4	Génération d'un plasma par une décharge radio-fréquence .	11
1.2.5	Applications	12
1.3	Les plasmas poussiéreux ou complexes	13
1.3.1	L'interaction entre les grains de poussière	17
1.3.2	Espace inter-grains	20
1.3.3	Les cristaux poussiéreux	20
1.3.4	Formation des grains de poussière	21
1.4	Les phénomènes non-linéaires dans les plasmas poussiéreux	23
1.4.1	Les vibrations dans les plasmas poussiéreux	24
1.4.2	Les modes de vibration dans les plasmas poussiéreux	25
2	Étude de la relation de dispersion	28
2.1	Modèle physique	28
2.2	Équation du mouvement	28
2.3	Équation du champ électrique	29
2.4	Relation de dispersion	30
2.5	Résultats et discussions	34

2.6	Conclusion	39
3	Étude des modes de vibration	40
3.1	Modèle physique	40
3.2	Relation de dispersion	43
3.2.1	Cas limites	44
3.2.2	Effet d'écran	45
3.3	Simulation par la méthode Monte-Carlo	48
3.3.1	Principe de la Méthode Monte-Carlo	49
3.3.2	La méthode de Monte-Carlo avec algorithme de Metropolis	49
3.4	Résultats et discussion	59
3.5	Effet de la présence d'un gaz sur les modes de vibration	64
3.5.1	Système entretenu	64
3.5.2	Effet de la friction sur la dispersion	64
3.5.3	Résultats et discussion	66
3.6	Conclusion	70
4	Étude de l'effet du type d'interaction sur les modes de vibration.	72
4.1	Modélisation	73
4.1.1	Équation de mouvement	76
4.1.2	Résultats et discussion	79
5	Étude de la diffusion par la Dynamique Moléculaire	83
5.1	Le mouvement Brownien	83
5.1.1	Historique	84
5.1.2	Approche de Langevin	86
5.2	Phénomène de diffusion	86
5.3	Les lois de Fick pour la diffusion	87
5.3.1	La première loi de Fick	87
5.3.2	La deuxième loi de Fick	87
5.4	Mécanismes de diffusion dans les cristaux	88

5.5	Diffusion dans les plasmas	89
5.5.1	Diffusion libre des particules chargées	89
5.5.2	Diffusion ambipolaire	90
5.6	Diffusion de particules browniennes	91
5.7	Anomalies de la diffusion	91
5.8	Étude de la diffusion de particules chargées en présence d'un substrat périodique	92
5.8.1	Système physique	92
5.8.2	Simulation par la méthode de la dynamique moléculaire	94
5.8.3	Résultats et discussions	99
5.9	Conclusion	106

Introduction

Au début des années 1930, Wigner a présenté la théorie décrivant le comportement des électrons dans les métaux à basses températures. Il a montré que ces derniers formaient un réseau régulier (cristal) qui est dû seulement à l'interaction Coulombienne [1]. Ces cristaux ont été observés par Grimes et Adams en 1979 dans un système à deux dimensions où les électrons sont localisés sur la surface de l'hélium liquide [2]. L'observation expérimentale d'un tel comportement dans les solides n'a été rendue possible qu'au début des années 1990. Les cristaux de Wigner se forment lorsque l'énergie potentielle d'interaction entre les particules est supérieure à l'énergie cinétique due à l'agitation thermique.

Les premiers travaux sur les cristaux de Wigner ont été réalisés dans les suspensions colloïdales des particules dans une solution électrolytique. Ils peuvent également être formés dans des pièges d'ions quand ces derniers sont refroidis à de très basses températures.

La description théorique de la cristallisation de Wigner a été faite pour des systèmes composés d'une seule espèce de particules chargées et confinées par un champ extérieur. Le comportement de tels systèmes peut être caractérisé par un paramètre de couplage connu sous le nom de Γ (Gamma). Ce dernier est défini comme étant le rapport entre l'énergie potentielle d'interaction et l'énergie cinétique due à l'agitation thermique des particules [3]. Les cristaux de Wigner ont été aussi observés dans les plasmas poussiéreux. De tels plasmas sont composés en plus des ions, des électrons et des particules neutres, de particules massives ayant des charges considérables. Ces dernières sont connues sous le nom de grains de poussière ou *Dust*. Depuis les premières observations expérimentales des grains de poussière, un intérêt particulier a été porté sur la proposition des modèles physiques pour les plasmas poussiéreux (Dusty plasmas) [4].

La présence des grains de poussière dans le milieu plasma modifie considérablement ses caractéristiques et donne lieu à des effets et des phénomènes qui n'existaient pas dans le plasma classique, dans lequel les grains sont totalement absents ou négligeables [5]. Les observations ont révélé l'existence de phénomènes nouveaux qui modifient le comportement du plasma et qui ne peuvent pas être

interprétés par l'interaction gravitationnelle [6]. Ce sont des phénomènes, non linéaires, qui résultent des interactions fortes entre les grains, eux même, d'une part, et entre les grains et les autres espèces présentes dans le plasma d'autre part [7]. Parmi ces phénomènes, citons l'apparition de nouveaux modes de vibration et de la diffusion [8].

Le travail réalisé dans la présente thèse est organisé en cinq chapitres :

Le premier chapitre comporte une synthèse bibliographique sur les systèmes et les structures fortement couplées ainsi que les notions de base sur la physique des plasmas et des plasmas poussiéreux. Les principales caractéristiques des grains de poussière et les différentes méthodes de leur production associées à de différentes applications sont résumées. Dans cette partie, on parle également des phénomènes non-linéaires et de leur présence dans les structures fortement couplées.

Le deuxième chapitre est consacré à l'étude des modes de vibrations et de la relation de dispersion dans les systèmes fortement couplés. Une étude théorique de la relation de dispersion a été menée et les résultats obtenus ont été discutés et résumés.

Dans le troisième chapitre du présent travail, on parlera de l'étude des modes de vibrations dans un système de plasma poussiéreux fortement couplé et unidimensionnel. La simulation par la méthode Monte-Carlo est utilisée pour déterminer les configurations d'équilibre à basses températures. Les résultats obtenus ont été utilisés dans l'étude des modes acoustiques (DAW) et les modes de réseau (DLW). L'étude a été menée en négligeant les forces de frottement, puis en tenant compte de ces dernières, puisque l'injection de particules neutres peut être considérée comme une source de freinage pour le mouvement des particules.

Le quatrième chapitre de ce travail est une synthèse de l'étude de l'effet du type d'interaction entre les grains de poussière sur la propagation des ondes non linéaires, en utilisant la méthode Monte Carlo pour la recherche des états stables. Dans cette étude on a choisi des cristaux hexagonaux à deux dimensions (2D), dont on a considéré un ensemble de particules de poussière identiques, chargées négativement et qui interagissent à travers deux types de potentiels, Coulombien et Yukawa. Les résultats de la relation de dispersion et de la vitesse de groupe sont représentés et commentés.

Dans le cinquième chapitre, en menant des simulations par la méthode de la dynamique moléculaire, on a étudié, dans un système quasi-unidimensionnel, la diffusion des grains de poussière chargés qui interagissent entre eux par le biais d'un potentiel de type Yukawa et confinés par un potentiel parabolique avec

la présence d'un substrat périodique. Le phénomène de la diffusion a été défini d'une manière générale tout en citant les lois qui la régissent, ainsi que le système physique pris en considération. Les résultats obtenus en utilisant la méthode de la dynamique moléculaire ont été discutés et commentés.

Nous terminons, ce travail, par une synthèse de tous les travaux effectués dans le cadre de cette thèse. Nous avons aussi tracé une feuille de route pour la suite des travaux de recherche.

Chapitre 1

Les systèmes fortement couplés

Les systèmes fortement couplés sont des systèmes dont les forces d'interaction sont d'origine gravitationnelle ou électrique ou bien, la combinaison des deux si elles sont de même ordre de grandeur. Parmi les exemples de tels environnements on peut citer les anneaux planétaires, qui contiennent une gamme étendue de particules de différentes dimensions où, les particules les plus petites qui agissent l'une sur l'autre principalement par la force électrique, alors que les particules de taille plus grandes agissent entre elles par la force de gravitation [3].

Dans certains systèmes colloïdaux, l'interaction électrique entre les particules peut être si grande, qu'elle assure des positions bien ordonnées. Cette structure a été décrite comme étant un système cristallin. Ces systèmes sont aussi connus sous le nom de structures fortement couplées. Un exemple de ces structures est les cristaux Coulombiens, formés de grains de poussière [3][9].

Les cristaux Coulombiens, appelés aussi cristaux de Wigner (contrairement aux cristaux ioniques où, les charges positives et les charges négatives occupent en alternance les noeuds d'un réseau périodique), sont des cristaux composés entièrement de particules chargées de mêmes espèces, et l'état d'énergie le plus bas de ces particules est obtenu quand elles se séparent autant que possible entre elles. Dans le cas où il y a présence d'un potentiel de confinement, la structure cristalline représente l'état le plus stable énergétiquement. Parmi ces structures cristallines, on cite les plasmas poussiéreux fortement couplés [3][10].

1.1 Les cristaux Coulombiens

Les cristaux Coulombiens avaient été prévus théoriquement par Wigner en 1934. Expérimentalement ils ont été observés par Grimes et Adams en 1979 dans un système à deux dimensions, où les électrons sont localisés sur la surface de l'hélium liquide [2]. Ces cristaux sont aussi formés dans les systèmes colloïdaux

et dans les plasmas fortement couplés.

Si on considère un plasma idéal contenant des ions à charge multiple, pour que le paramètre de couplage atteigne la valeur critique Γ_c , il faut que la charge de cet ion soit tel que $Z_i > 50$ [11]. Ceci est pratiquement irréalisable pour les atomes du tableau périodique. Les particules hautement chargées se trouvent dans les plasmas poussiéreux (complexes).

1.2 Le plasma

Le plasma généralement est considéré comme étant un ensemble des ions et des électrons. L'état plasma est un état très répandu dans la nature, il a été désigné comme étant le quatrième état de la matière et il représente 99 % de notre univers. On observe souvent le plasma dans les étoiles, dans les atmosphères de planètes, dans le vent solaire et dans l'espace inter-planétaire et interstellaire. Dans notre proche environnement on l'observe dans les flammes, les explosions et dans les arcs électriques [12]

Le plasma est caractérisé par le comportement collectif de ses particules. Ceci est réalisable dans le cas où l'interaction entre les particules est de longue portée, comme l'interaction coulombienne. La présence d'un certain taux de particules chargées assure un comportement collectif [13]. Ce dernier est défini comme une réponse du plasma à une perturbation. Étant donné que le plasma est un milieu quasi-neutre, si un excès de charge se produit en un point donné, les particules de même charge vont être repoussées et de charge opposées vont être attirées. De ce fait, les particules émigrent vers ce point en créant un défaut de charge, qui sera compensé par le même phénomène. Les particules seront en mouvement et observeront des vagues et des vagues régulières (oscillations).

Pour caractériser l'effet collectif, on définit le paramètre de couplage Γ tel que [14] :

$$\Gamma = \frac{\text{l'énergie potentielle d'interaction}}{\text{l'énergie d'agitation thermique}} = \frac{K(Ze)^2}{rK_B T} \quad (1.1)$$

avec r : la distance inter-particules, K_B : la constante de Boltzmann, Ze : la charge de la particule, T : la température du système et K : la constante de Coulomb.

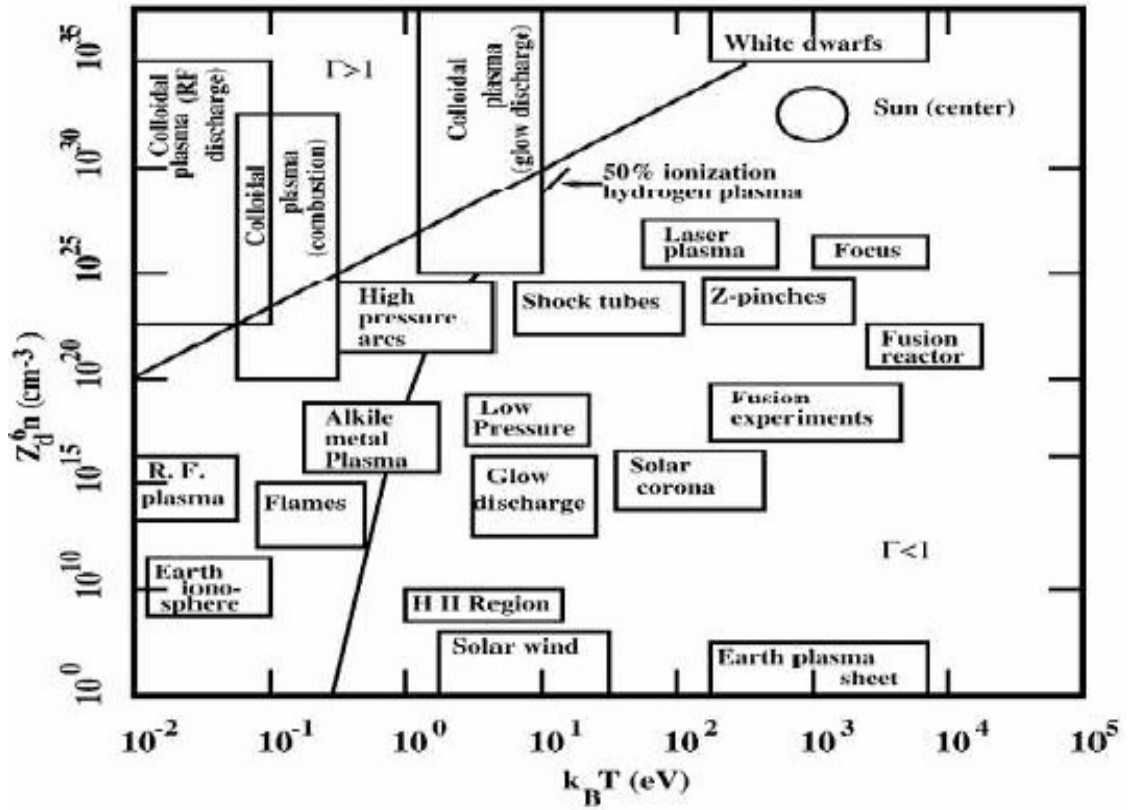


FIGURE 1.1 – Paramètre de couplage pour différents types de plasmas ; astrophysiques et de laboratoires [11].

Selon les valeurs de Γ les systèmes sont classifiés en trois catégories : [15][16].

$\Gamma \ll 1$: Le système est dit faiblement couplé.

$\Gamma \sim 1$: Le système est à l'état liquide.

$\Gamma \gg 1$: Le système est dit fortement couplé .

Le dernier cas est réalisable généralement à de basses températures.

La cristallisation des particules dans une structure ordonnée est observée lorsque le paramètre de couplage Γ est supérieur à une certaine valeur critique Γ_c tel que [17][18][19] :

$$\Gamma_c > 170 \text{ pour un système à 3 dimension.}$$

$$\Gamma_c > 130 \text{ pour un système à 2 dimension.}$$

1.2.1 Composition et propriétés

La présence de particules chargées dans le gaz confère à celui-ci des propriétés collectives. En particulier, lorsque le plasma présente un excès local de charges

positives ou négatives. Ces dernières engendrent un champ électrique local pour annuler ce déséquilibre de charge. Le champ provoque un déplacement rapide des électrons, qui sont très mobiles par rapport aux ions. À cause de leur inertie, la présence de cette réponse caractérise l'effet d'écran qui opère sur une distance dites longueur de Debye. La longueur de Debye dépend de l'énergie moyenne et de la densité des électrons. La réponse à la perturbation électrique locale se manifeste aussi par des oscillations dont la fréquence est appelée fréquence du plasma. Ce phénomène peut être observé aussi dans les métaux [13].

1.2.2 Plasmas naturels

Les plasmas naturels, sont des structures qu'on peut trouver dans les éclairs et les aurores boréales. Dans la haute atmosphère (ionosphère), son plasma est responsable de la réflexion des ondes radio (dont la fréquence est inférieure à la fréquence plasma de l'ionosphère). Ces plasmas naturels sont créés par les hautes températures du milieu (Soleil et étoiles) et par le rayonnement (matière inter-stellaire, enveloppes atmosphériques), constituant ainsi les sources des énergies nécessaires à l'ionisation des particules [20].



FIGURE 1.2 – Exemples de plasmas naturels.

1.2.3 Plasmas de laboratoire

Les propriétés particulières des milieux ionisés ont provoqué la curiosité des chercheurs qui les ont créé artificiellement, soit comme objets d'étude, ou bien en vue d'une application physique. Les températures requises pour l'ionisation sont très élevées (supérieures à 10^4 °C). Divers moyens sont utilisés pour créer l'ionisation. On cite la décharge électrique dans les gaz et les lasers qui entrent en interaction avec la matière (fusion inertielle ou la gravure, par exemple). Dans le premier cas, les électrons libérés du gaz sont accélérés et ionisent les atomes

par collision, créant ainsi d'autres électrons capables à leur tour d'ioniser d'autres atomes et de créer d'autres électrons. Dans le deuxième cas, l'interaction du faisceau laser avec la matière (gaz ou solide) conduit à l'ionisation, donc à la création d'électrons, qui sont accélérés dans le champ électrique du laser et deviennent à leur tour ionisants. Dans les deux modes de production, il existe également des espèces excitées et des radicaux. Compte tenu du changement de leur comportement, les plasmas sont actuellement largement utilisés dans diverses applications industrielles [20].

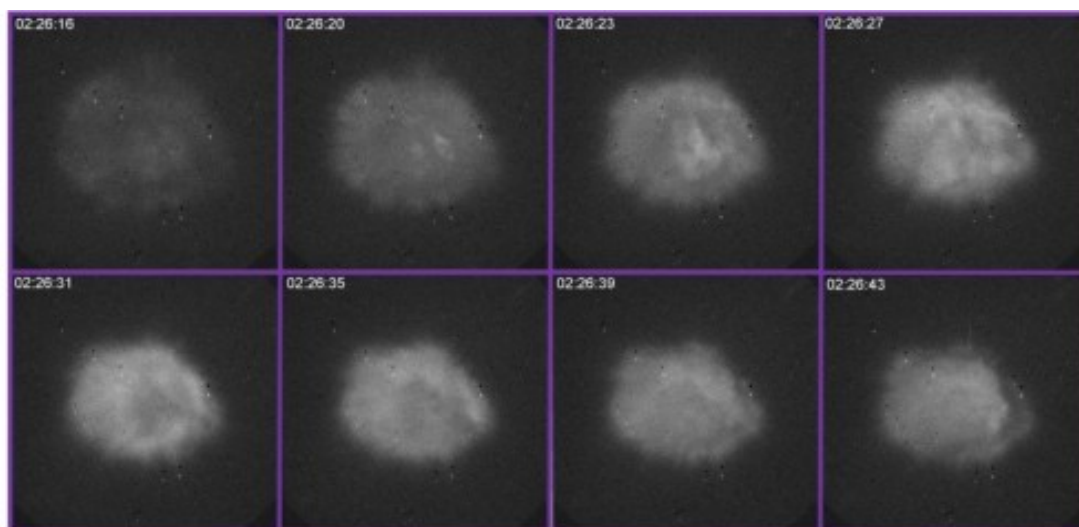


FIGURE 1.3 – Images des nuages artificiels et ionosphériques provoqués par la décharge de plasma luminescent.

1.2.4 Génération d'un plasma par une décharge radio-fréquence

Le plasma est produit en laboratoire par plusieurs techniques, mais la décharge d'un gaz est la plus connue, car elle est simple à réaliser et à contrôler. Il existe plusieurs types de décharges, telle que la décharge par un courant continu ou par un courant alternatif et la décharge radio–fréquence. Dans le cas de cette dernière, le dispositif expérimental correspondant et son fonctionnement sont décrits dans le paragraphe suivant.

1.2.4.1 Dispositif expérimental et fonctionnement

On considère une enceinte composée de deux électrodes en parallèles, l'une des électrodes est reliée à un générateur radio–fréquence mais séparée de lui par une

capacité bloquante. Cette dernière empêche le passage de courant électrique vers le plasma et vice versa. Le passage d'un courant dans un plasma est toujours associé à des instabilités. L'autre électrode est reliée à la masse électrique, entre les deux on injecte un gaz neutre. Le dispositif expérimental est représenté par la figure 1.4 [21] :

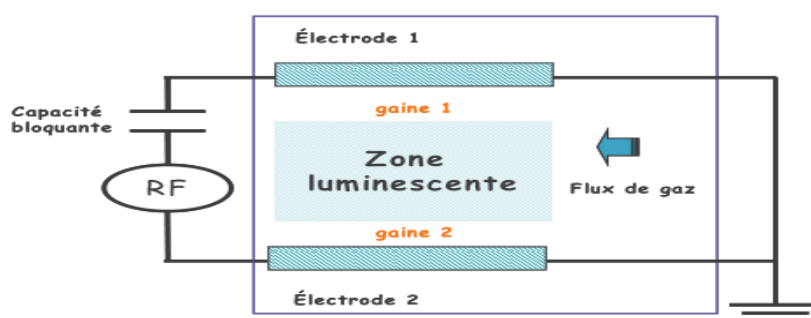


FIGURE 1.4 – Dispositif expérimental d'une décharge radio-fréquence capacitive [21].

Les électrons du gaz ayant une fréquence d'oscillation plus élevée que celle des ions, alors ils vont être chauffés dans le champ électrique créé par la différence de potentiel entre les deux électrodes (le signal délivré par le générateur ayant une fréquence radio qui est inférieure à celle des électrons). L'énergie acquise par les électrons permet d'augmenter leurs collisions avec les atomes neutres puis ils les ionisent en donnant des particules chargées et donc un plasma. Les électrons sont plus mobiles, ils se diffusent en premier vers les parois en créant un potentiel négative. Ce potentiel doit être écranté par les ions. La couche composée des ions ainsi créée et pour laquelle le potentiel s'annule est dite gaine électrostatique.

1.2.5 Applications

Les plasmas produits par laser servent couramment en soudage ou en découpage des matériaux (métal, bois, plastique, etc.). Plus généralement, lors de l'irradiation directe d'un matériau, le plasma formé à sa surface permet de modifier ses propriétés superficielles, telles que la dureté, la résistance à l'usure, etc, en pulvérisant une cible par irradiation laser. On peut également réaliser des dépôts de couches minces ayant des propriétés améliorées : couches supraconductrices, couches ultra-dures (nitrures, carbures, diamant, etc). C'est également l'une des voies pour réaliser la fusion thermonucléaire contrôlée par confinement de la matière sous l'impact des lasers de hautes puissances [20].

Les décharges électriques présentent une grande diversité de conception, les applications vont de l'éclairage (tubes fluorescents), sources de lumière (lampes à mercure, xénon, lasers à gaz, flash UV, etc.), jusqu'à la fusion thermonucléaire contrôlée où, cette fois, le plasma est confiné par des champs magnétiques. Les applications les plus marquantes concernent, la micro-électronique et l'élaboration de couches minces. Les progrès obtenus dans les performances des ordinateurs sont liés à la miniaturisation des circuits intégrés contenus dans les composants. Cette miniaturisation n'a été possible que par l'utilisation de traitements plasma (gravure, dépôt) où, le rôle des ions est primordial. De même, des matériaux appelés méta-stables n'ont pu être obtenus que par l'utilisation de plasmas, il s'agit du silicium amorphe hydrogéné qui est utilisé, en particulier, dans la fabrication des cellules photovoltaïques et du carbone amorphe hydrogéné, qui est un matériau possédant des propriétés mécaniques très intéressantes. Dans le domaine de la métallurgie, l'utilisation des plasmas concerne également les couches dures et l'élaboration d'alliages [20].

Enfin, les techniques plasmas sont aussi employées dans le traitement des pollutions de type industriel (industries chimiques, ...) ou domestique (automobiles, ...), en permettant de dissocier les molécules indésirables.

1.3 Les plasmas poussiéreux ou complexes

Les plasmas poussiéreux ou complexes sont une très bonne alternatif pour l'observation des cristaux coulombiens et pour l'étude des transitions de phases. Outre les ions, les électrons et les atomes neutres, un plasma complexe est constitué de particules massives hautement chargées dites grains de poussière.

Un exemple d'un milieu qui contient des impuretés, i.e. grains de poussière, est celui de l'environnement proche de la terre (Fig. 1.5). La poussière est produite par les débris ou transportée par le vent solaire. La présence de cette espèce dans le plasma modifie ces propriétés et donne lieu à de nouveaux phénomènes physiques dont l'interprétation dépend des caractéristiques des impuretés. Parmi ces caractéristiques le rapport charge-masse qui est une variable dynamique, représente un degré de liberté additionnel [15].

Dans un plasma poussiéreux, les grains de poussière chargés produisent des potentiels assez particuliers qui changent de manière significative les forces de courte et de longue portées. A cause de sa charge considérable, l'énergie potentielle d'un grain de poussière peut excéder son énergie cinétique moyenne, et provoque un composant fortement couplé. Cette particularité, donne naissance à de nouveaux

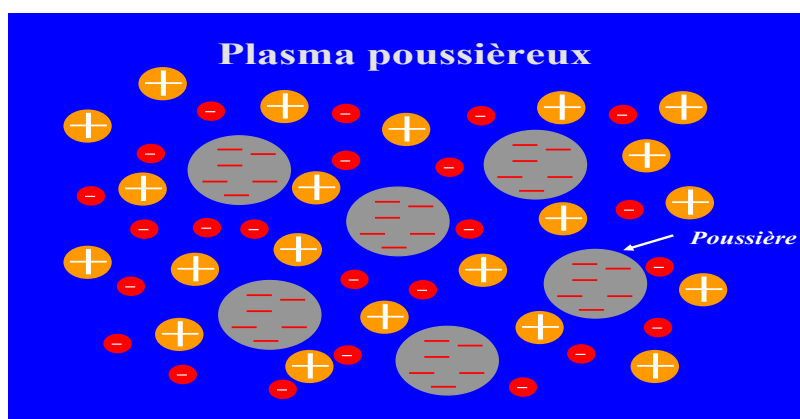


FIGURE 1.5 – Exemple d'un milieu plasma poussiéreux.

types d'oscillations dans le plasma poussiéreux. Des études théoriques et expérimentales se sont basées sur les ondes électrostatiques de basses fréquences dans les plasmas faiblement ou fortement couplés en présence des grains de poussière négativement chargés. Parmi les modes qui ont subit des changements dans leurs propriétés, on trouve les ondes acoustiques ioniques et les ondes d'ion cyclotrons électrostatiques. Tant que les grains de poussière ne participent pas à la dynamique de l'onde, seuls leurs paramètres subissent les changements, par contre lorsque la dynamique des grains de poussière est incluse dans l'analyse, de nouveaux modes de vibration des grains de poussière apparaissent [15].

A basses températures, dans les D-Région de la terre (approximativement 60 à 100 kms) qui sont connues par un peuplement de quantités substantielles de grains de poussière et d'autres débris d'origine météorique, on trouve des particules de 'fumée' provenant des météorites qui peuvent former de plus grandes particules qui sont observées en tant que nuages polaires. En outre, il y a un grand nombre de molécules et d'ions multi-hydratés capables d'attacher les électrons libres. N'importe laquelle de ces espèces peut fournir à l'électron arraché les mécanismes d'attachement au niveau de la surface responsables de l'ordre de grandeur de la charge du grain[15].

Les éléments métalliques typiques d'origine météorique présents dans l'ionosphère sont : Fe, Al et Ni. Les sources solaires présentent les éléments métalliques des poids atomiques plus élevés comme : La, Tu, Os, Yt et le Ta. Ces espèces atomiques surgissent en raison de l'activité à hautes températures à la surface du soleil. La plupart des éléments métalliques présents dans l'ionosphère sont oxydés facilement et forment les oxydes : FeO, AlO, TiO, etc. Ces derniers forment les agrégats

qui deviennent des constituants du grain. Les particules de poussière immergées dans les plasmas et à l'aide du rayonnement UV, tendent à rassembler de grandes quantités de charges électrostatiques et à répondre aux forces électromagnétiques en plus de toutes les autres forces agissant sur les grains neutres. Les particules de poussière chargées participent aux interactions complexes avec le plasma et provoquent un comportement complètement nouveau du plasma. Les grains de poussière dans les plasmas sont les porteurs de charge, ils ont des masses d'un ordre de grandeur très important par rapport à tous les autres composants. A cause de la fluctuation dans le temps, ils peuvent avoir des charges négatives, positives ou les deux en même temps. Ils peuvent aussi communiquer des effets non-électromagnétiques (pesanteur, frottement et pression de rayonnement) au plasma qui peut représenter de nouvelles sources d'énergie libres [15].

Pendant une longue période, l'étude des plasmas poussiéreux était principalement d'intérêt pour l'astrophysique. Certains phénomènes, comme le (Block-out) observé lors du lancement des premiers satellites, ne peuvent pas être expliqués par la dynamique classiques d'un plasma. Ceci a mené au développement et à de nombreuses applications de la théorie dynamique des grains de poussière chargés et qui sont également influencés par la pesanteur planétaire et les forces électromagnétiques dans la magnétosphère planétaire. Les études dynamiques ont été complétées dans les années 90 par l'étude des processus collectifs dans les plasmas poussiéreux. Ces derniers ont conduit à la découverte de nouveaux modes d'oscillations. Ils ont également simulé des études de laboratoire pour l'observation de plusieurs d'entre elles, y compris le mode acoustique des grains de poussière de très basses fréquences qui a été visualisé à l'oeil nu par la dispersion de la lumière laser. Le rôle de la poussière chargée dans la dispersion d'onde électromagnétique a été également étudié ainsi que son application [15].

L'un des nouveaux développements dans les plasmas poussiéreux est le phénomène de cristallisation. Les cristaux de plasma ont une taille de l'ordre de micron et acquièrent de grandes charges. Le plasma fortement couplé peut exister dans des conditions de fortes densités et de températures très basses, tel qu'un environnement stellaire. Ce nouveau matériau, où l'on observe la transition de phase et la structure cristalline à l'oeil nu, devient un outil pour étudier des processus physiques dans la matière condensée, telle que la fonte, le recuit et les défauts de réseau. Il fournit également une grande motivation pour étudier les propriétés collectives dans un plasma fortement couplé, un secteur qui demeure en grande partie encore inconnu jusqu'ici [15].

La recherche dans ce domaine n'a pas passé en revue toutes les ondes possibles

dans un milieu de plasma poussiéreux, mais s'oriente essentiellement pour élucider le mécanisme de la génération et la propagation des ondes dans ce milieu afin de changer les notions classiques.

Dans l'industrie, les grains de poussière peuvent constituer des impuretés piégées lors de la fabrication des semi-conducteurs, générant des répercussions graves sur les propriétés et la qualité des composants.

Parmi les caractéristiques qui permettent de distinguer les grains de poussières des ions on cite[22][23] :

- Les grains de poussière existent en général à de basses températures ($\sim eV$).
- Ils sont différents des ions par leur taille (jusqu'au micron), leur masse (des milliers de fois supérieure à la masse du proton : $10^{-15} - 10^{-2}g$) et leur charge (jusqu'à $(10^3 - 10^6)e$).
- Le rapport charge-masse n'est plus une constante mais une variable dynamique.
- La charge peut être positive ou négative selon les conditions expérimentales qui leur ont donné naissance.
- Ils ont des formes très variées, ils peuvent même être fabriqués par l'homme.

Les plasmas poussiéreux existent naturellement dans :

- Les nuages interstellaires.
- Les anneaux planétaires comme celui entourant saturne.
- Le système solaire.
- Les hautes atmosphères (l'ionosphère).

Dans le laboratoire, on les rencontre dans :

- Les plasmas de gravure.
- Dans les réacteurs de fusion.

Ces derniers sont créés par injection de nanoparticules dans un plasma idéal, composé des ions et des électrons ou par l'utilisation d'un gaz réactif [24].

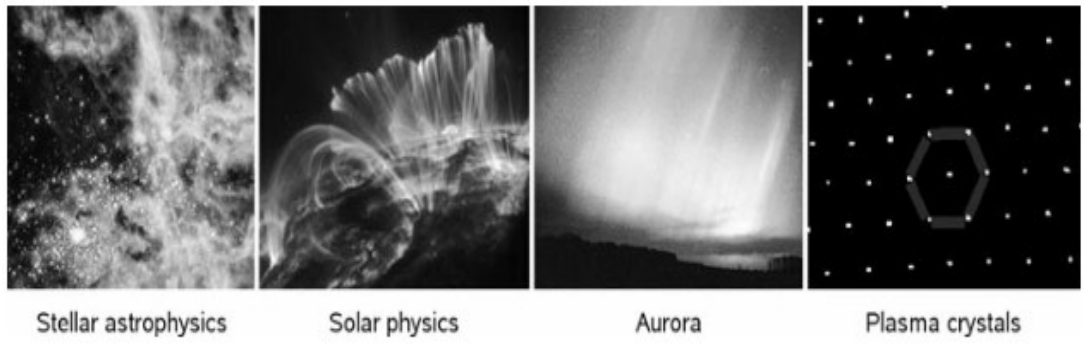


FIGURE 1.6 – Les plasmas de l’astrophysique, de la fusion et de laboratoire [14].

1.3.1 L’interaction entre les grains de poussière

Un plasma est un milieu quasi–neutre, pour maintenir cette quasi neutralité un phénomène connu sous le nom d’écrantage de Debye est produit lors de l’apparition d’un potentiel au sein du plasma (Fig.1.7).

Pour comprendre ce phénomène, on considère un plasma de base et on introduit une charge test. Cette charge va être confinée dans une sphère constituée d’électrons et d’ions dont le rayon est la longueur de Debye. Au delà de cette longueur le potentiel créé par la charge test n’est plus ressenti.

À cause de ce phénomène, l’interaction entre les grains de poussière sera de type Debye-Hückel ou de Yukawa au lieu du type Coulombien [11] :

$$U_d = \frac{Kq_{d_1}q_{d_2}}{r} e^{-r/\lambda_D} \quad (1.2)$$

avec r : la distance inter grain, λ_D : la longueur d’écrantage de Debye et q_{d_1}, q_{d_2} : les charges des grains de poussière.

Pour $r \gg \lambda_D, e^{-r/\lambda_D} \sim 0$. Ce qui veut dire que le potentiel créé par le grain de poussière est totalement écranté pour les particules en dehors de la sphère de Debye, pour une certaine distance de la longueur de Debye.

La détermination de la longueur de Debye d’un plasma poussiéreux se fait en utilisant l’équation de Poisson [11][16] :

$$\nabla^2\phi = 4\pi (en_e - en_i - qn) \quad (1.3)$$

où n_e, n_i, n sont respectivement, la densité des électrons, celle des ions et celle des grains, $q = Ze$,

$Z < 0$ ($Z > 0$) est la charge du grain et ϕ le potentiel électrostatique.
Comme la densité des grains est partout la même dans le milieu plasma, alors,

$$qn = q_0 n_0 = en_{e0} - en_{i0} \quad (1.4)$$

L'indice "0" désigne les paramètres à l'équilibre.

Pour un équilibre thermique local, les densités des électrons et des ions sont données par :

$$n_e = n_{e0} \exp\left(\frac{e\phi}{T_e}\right) \quad (1.5)$$

$$n_i = n_{i0} \exp\left(-\frac{e\phi}{T_i}\right) \quad (1.6)$$

T_e , T_i étant les températures électronique et ionique.

Pour des distances r mesurées par rapport aux positions des grains et lorsque $r \gg \lambda_D$ on a : $\frac{e\phi}{T_e} \ll 1$ et $\frac{e\phi}{T_i} \ll 1$, λ_D étant la longueur de Debye. A partir de l'équation de Poisson on obtient

$$\nabla^2 \phi = 4\pi \left(\frac{1}{\lambda_{De}^2} + \frac{1}{\lambda_{Di}^2} \right) \phi = 4\pi \frac{1}{\lambda_D^2} \phi \quad (1.7)$$

ou $\lambda_{Dj} = \left[\frac{T_j}{4\pi n_{j0} e^2} \right]^{1/2}$ représente la longueur de Debye de l'espèce j ($j = i$ (ion), e (électron)) .

$$\lambda_D = \frac{\lambda_{De} \lambda_{Di}}{\sqrt{\lambda_{De}^2 + \lambda_{Di}^2}} \quad (1.8)$$

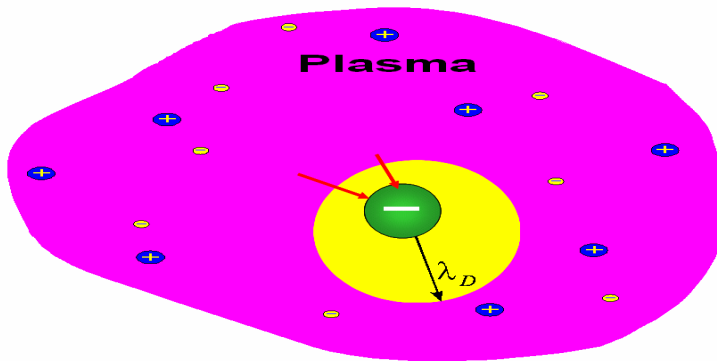


FIGURE 1.7 – Représentation de la longueur de Debye.

La longueur de Debye représente la distance à partir de laquelle le potentiel électrostatique $\phi = \phi_o \exp(-r/\lambda_D)$ décroît très rapidement. L'expression de λ_D a été obtenue en supposant implicitement que la charge des grains de poussière est constante. Dans le cas contraire, la fluctuation de la charge est prise en compte, un terme de correction doit donc être ajouté [11]. La longueur de Debye devient :

$$\lambda_{Dc} = \frac{\lambda_{De}\lambda_{Di}}{\sqrt{\lambda_{De}^2 + \lambda_{Di}^2}} \quad (1.9)$$

où λ_{Dc} est le terme de correction dû à la fluctuation de charge :

$$\lambda_{Dc} = \sqrt{\frac{\nu_1}{\nu_2} 4\pi n_o r_o} \quad (1.10)$$

avec

$$\nu_1 = \frac{r_o}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{\omega_{pe}}{\lambda_{De}} \exp\left(\frac{eq_o}{T_e r_o}\right) + \frac{\omega_{pi}}{\lambda_{Di}} \left(1 - \frac{eq_o}{T_i r_o}\right) \right] \quad (1.11)$$

$$\nu_2 = \frac{r_o}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{\omega_{pe}}{\lambda_{De}} \exp\left(\frac{eq_o}{T_e r_o}\right) + \frac{\omega_{pi}}{\lambda_{Di}} \right] \quad (1.12)$$

où ω_j est la fréquence plasma de l'espèce j et r_o le rayon du grain supposé de forme sphérique.

Cette contribution peut être négligée lorsque le rayon du grain est faible, de l'ordre de ($\sim \mu m$).

Afin de réaliser des expériences avec plus de précision sur la taille, la densité et les structures spatiales des grains de poussière dans les plasmas, les laboratoires des plasmas poussiéreux disposent d'une instrumentation de mesure (Fig.1.8), plus appropriée et efficace.

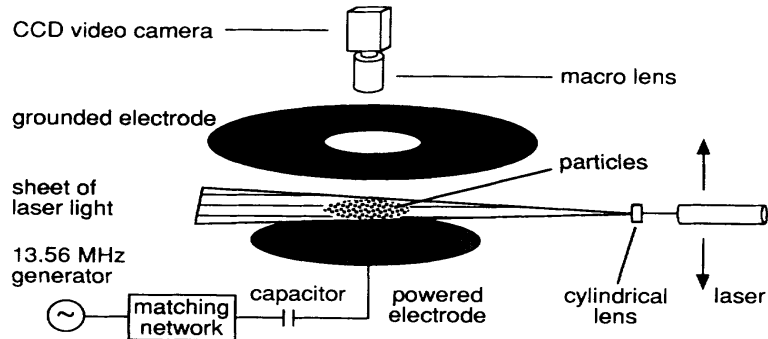


FIGURE 1.8 – Instrumentation de mesure de la taille, de la densité et des structures spatiales des grains de poussière [25].

1.3.2 Espace inter-grains

En considérant un plasma poussiéreux à plusieurs éléments, composé d'électrons, d'ions positifs et des grains de poussière chargés extrêmement massifs dans un fond neutre. Le rayon r du grain de poussière est habituellement beaucoup plus petit que λ_D (longueur de Debye des plasmas poussiéreux). Quand l'espacement inter-grains est beaucoup plus petit que λ_D , les particules de poussière chargées sont traitées en tant que particules massives semblables. Dans le cas où $d \leq \lambda_D$, les particules de poussière sont considérées en tant que particules massives, l'effet des particules voisines étant plus prépondérant. Pour les grains de poussière dans un plasma où $d > \lambda_D$ les particules de poussière sont complètement isolées de leurs voisines [15].

1.3.3 Les cristaux poussiéreux

Les cristaux de plasmas poussiéreux ont été observés expérimentalement dans les décharges radio-fréquences capacitives à basse pression des gaz inertes en 1994 par les trois groupes de Thomas, de Hayashi et de Tachibana et Melzer. Le dispositif expérimental utilisé est le même que celui décrit précédemment. Les grains de poussière peuvent être injectés dans la décharge à travers une grille métallique. Chaque grain de poussière injecté acquiert une charge négative grâce à la grande mobilité des électrons. Les grains sont confinés verticalement sous l'effet de l'électrode inférieure qui par la force électrique compense la force de gravité. Horizontalement ils sont étendus dans une structure ordonnée de plate-forme à quasi-deux dimensions ou plus correctement à trois dimensions. Ces plasmas favorisent la structure hexagonale, on va avoir des couches horizontales dont le nombre peut aller de un à des dizaines. Chaque couche est un réseau hexagonal à deux dimensions. Dans un système infini, la structure cristalline est maintenue sans avoir besoin d'un potentiel de confinement. Pour un système fini, il faut appliquer un potentiel de confinement afin de lutter contre la répulsion Coulombienne entre les grains de poussière de même charge. Dans ce dernier cas, un anneau circulaire est placé sur l'électrode inférieure [2].

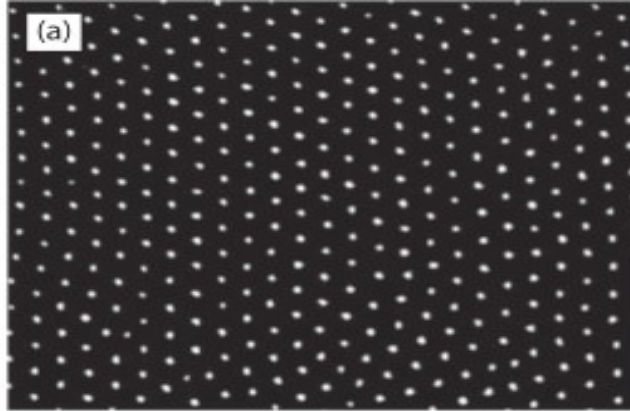


FIGURE 1.9 – Coupe horizontale dans une couche de structure cristalline à deux dimensions [2].

Dans ces conditions expérimentales, l’observation d’une structure ordonnée à trois dimensions est difficile à cause de l’effet de la gravité. Pour lutter contre cette contrainte, on applique des champs électriques extrêmement forts, ou on se met dans des conditions de microgravité.

Durant les dernières années, les clusters de grains de poussière à trois dimensions ou ce qui s’appellent ballons de Yukawa ont été observés dans des conditions expérimentales spécifiques. Un cluster est un ensemble fini de grains, interagissant à travers un potentiel de Yukawa et confinés par un potentiel extérieur. On peut les considérer comme des cristaux à trois dimensions. Cette considération est justifiée par le fait que la différence entre les deux est restreinte juste en termes d’appellation. Le nom de Cluster est attribué au système d’un nombre de particules inférieur ou égal à $[10^2 - 10^3]$, tandis que le cristal est réservé aux grands nombres de particules [2].

1.3.4 Formation des grains de poussière

Les missions spatiales vers les planètes et les comètes n’ont pas montré uniquement l’existence des grains, mais leur indispensable présence dans de tels environnements. Il a été prouvé que les grains portent des charges négatives ou positives comme les ions, mais ils avaient des caractéristiques qui permettent de les différencier de ces derniers. Ainsi, on s’intéressait à l’étude de la formation des grains dans la nature et dans les laboratoires afin de réaliser des expériences et des simulations dans le but de maîtriser la physique des plasmas poussiéreux [22].

1.3.4.1 Formation par les phénomènes de surface

Par traitement de la surface d'un alliage de silicium on peut avoir de petites gravures irrégulières formées sur celle-ci. En présence du champ électrostatique, les parties supérieures des gravures acquièrent une charge négative et sont injectées dans le plasma. Un tel procédé est très utilisé dans l'industrie des semi-conducteurs. Cependant, la présence des grains présente un inconvénient majeur : un seul grain, s'il a la taille d'un réseau, peut détruire totalement le circuit intégré. Comme la tendance est vers la miniaturisation, l'existence de grains de faible taille peut donner les mêmes conséquences désastreuses.

1.3.4.2 Formation par transition de phase dans les gaz

La formation passe par trois étapes :

- 1- Par échange de charges, l'ion négatif présent dans le plasma, acquiert une charge considérable et se recombine avec les impuretés du milieu pour former une sorte d'amas avec une charge fluctuante.
- 2- Les amas se combinent, la fluctuation de charge permet de tels processus.
- 3- Les amas atteignant une charge négative suffisante, la force répulsive empêche de nouvelles combinaisons et l'équilibre est réalisé. Ainsi, on obtient un grain avec une forme, taille et charge bien définies.

1.3.4.3 Grains de poussière naturels

Les grains de poussière sont partout présents dans tous les environnements de plasmas de l'espace, à l'exception de la partie interne du soleil. Ils peuvent être constitués de carbone, de silicate, de fer, etc., ou un mélange de tous les éléments. Ils peuvent aussi être issus des micro météorites ou des substances produites par la pollution due à l'homme.



FIGURE 1.10 – Exemple de nuage de poussière naturel.

1.4 Les phénomènes non-linéaires dans les plasmas poussiéreux

La description mathématique des plasmas poussiéreux est un problème très complexe, en particulier lorsque des effets non-linéaires sont présents. La non-linéarité est liée au fait que le rapport charge-masse est une variable dynamique. Habituellement, on utilise un modèle basé sur un rapport constant. Ceci est correct lorsque l'échelle du temps des phénomènes oscillatoires est beaucoup plus courte que celle du temps caractéristique de la fluctuation. D'autre part, en présence des électrons secondaires dans le plasma, le potentiel extérieur peut avoir différentes valeurs à l'équilibre. Une des conséquences de cet effet, des grains de poussière de différentes charges sont présents dans le milieu plasma. Les grains se heurtent et se condensent pour former des particules de taille plus grande. Outre cet effet, pendant les déplacements sous l'effet des gradients de densité ou de température, un aspect aléatoire de la fluctuation de la charge est constaté. Cet effet est la conséquence directe de la nature discrète des porteurs de charge [26].

1.4.1 Les vibrations dans les plasmas poussiéreux

Les vibrations dans les plasmas poussiéreux fortement couplés sont le résultat de faibles perturbations dans le réseau. Ces dernières engendrent un mouvement des atomes autour de leur positions d'équilibres. Le type et la nature des ondes générées par un tel mouvement, dépendent de la géométrie considérée [27][28][29].

1.4.1.1 La dispersion dans les plasmas poussiéreux

Pour un système unidimensionnel constituée d'une infinité de particules (grains) identiques de masse m séparées à l'équilibre par une distance a . Une perturbation longitudinale dans ce réseau modifie la position de la particule de rang n dans la chaîne. Les interactions entre ces particules sont modélisées par une force de rappel, limitée en premier lieu aux premiers proches voisins [30].

La relation fondamentale de la dynamique appliquée à la particule n donne :

$$m \frac{d^2 U_n}{dt^2} = K(U_{n+1} - U_n) - K(U_n - U_{n-1}) = K(U_{n+1} - 2U_n + U_{n-1}) \quad (1.13)$$

Dans le cas où la chaîne est illimitée, une onde progressive sinusoïdale se propage dans le milieu. Lorsque les forces de frottement sont négligeables, toutes les particules ont la même amplitude de vibration A :

$$U_n = A \cdot \cos(kna - \omega t) \ll a$$

$$\omega = 2H \cdot \left| \sin \left(\frac{ka}{2} \right) \right|$$

avec :

$$H = \sqrt{\frac{K}{m}}$$

On écrit :

$$-m\omega^2 = -2K \cos(1 - \cos(ka))$$

La fonction $\omega(k)$ n'étant pas linéaire, il y a dispersion. La pulsation maximale du mode qui se propage est $\omega_m = 2H$, elle correspond à $k = \frac{\pi}{a}$.

Le terme $\omega/k = (2H \sin(ka/2))/k$ représente la vitesse de phase; elle tend vers aH si k tend vers 0 et tend vers $2aH/\pi$ quand k tend vers $\frac{\pi}{a}$. La vitesse de groupe $\frac{d\omega}{dk} = aH \cos(ka/2)$ tend vers aH si k tend vers 0 et tend vers 0 quand k tend vers π/a .

Dans le cas des grandes longueurs d'onde, il n'y a plus de dispersion, $\omega(k)$ est linéaire, de même pour $k = \pi/a$, la propagation n'a pas eu lieu.

Pour une chaîne limitée, l'équation de propagation est identique à celle du cas précédent, mais les conditions aux limites imposent la présence d'ondes stationnaires. Les atomes N et $-N$, d'une chaîne $2N + 1$ atomes, restent immobiles [30].

1.4.2 Les modes de vibration dans les plasmas poussiéreux

La manifestation physique du couplage fort dans les plasmas poussiéreux est l'apparition d'un ordre dans le système. Cet ordre est le résultat de la forte interaction entre les particules. L'ampleur de cet ordre dans les plasmas poussiéreux est régit par le paramètre de couplage coulombien Γ [15].

Pour $\Gamma \ll 1$, le couplage est faible et les approximations d'un plasma idéal sont maintenues. Dans de tels cas l'onde n'est pas influencée par les corrélations entre les particules, à l'exception du cas de faibles collisions.

Lorsque Γ dépasse Γ_c , valeur critique du paramètre de couplage, l'arrangement des chaînes de particules devient plus grand et le système subit une solidification. On peut dire alors qu'une structure cristalline ordonnée supporte les vibrations du réseau plasma.

En général lorsque le plasma subit une perturbation, les modes électrostatiques non linéaires sont produits. Une des causes de cette perturbation est un déséquilibre dans le plasma initialement neutre, générant un champ électrique local qui tend à restaurer l'équilibre donnant lieu aux oscillations. Ces dernières sont appelées modes électrostatiques [15]. En présence des grains de poussière dont les fréquences caractéristiques sont très petites, les modes des plasmas froids vérifient la relation :

$$\sum_{\alpha} \frac{\omega_{p\alpha}^2}{(\omega - ku_{\alpha})^2} = 1 \quad (1.14)$$

La sommation s'étend sur toutes les espèces présentes dont la vitesse est u_{α} .

Parmi les modes supportés par les structures fortement couplées de grains de poussière, on trouve les modes acoustiques et les modes de réseau.

1.4.2.1 Les modes acoustiques

Les ondes acoustiques des grains de poussière (DAW) ont été mises en évidence par Rao *et al* (1990) dans des plasmas poussiéreux constitués des ions et

des grains de poussière de charges négatives [15][18][31].

Dans le cas correspondant à la situation : $C_{sd} \ll k/\omega \ll C_{si}$, C_{sd} et C_{si} sont les vitesses de phase des grains de poussière et des ions. La relation de dispersion s'écrit :

$$\frac{\omega_{pd}^2}{\omega^2} - \frac{\omega_{pe}^2}{k^2 C_{se}^2} - \frac{\omega_{pi}^2}{k^2 C_{si}^2} = 1 \quad (1.15)$$

la vitesse de phase du mode acoustique des grains de poussière est :

$$C_{da} = \lambda_D \omega_{pd} \quad (1.16)$$

1.4.2.2 Les modes de réseau

De récentes recherches ont montré l'apparition des ondes de réseau longitudinales et transversales dans les systèmes de plasmas poussiéreux fortement couplés analogues à celles des structures solides. En utilisant l'expression appropriée du potentiel d'interaction des particules de poussière, la théorie linéaire et non-linéaire des ondes longitudinales a été développée. En considérant les interactions avec les proches voisins, dans une chaîne linéaire unidimensionnelle équidistante, le potentiel est donné le type Debye HucKel [11][15][32] :

$$U_{ij} = \frac{q_{di}q_{dj}}{|r_i - r_j|} \exp\left(-\frac{|r_i - r_j|}{\lambda_D}\right) \quad (1.17)$$

où q_{di}, q_{dj} et r_{ij} sont les charges et les positions des grains de poussière.

Dans le cas d'un mouvement longitudinal unidimensionnel et dans un arrangement horizontal leurs oscillations sont gouvernées par l'équation du mouvement[15].

$$m_d \left(\frac{\partial^2 X_j}{\partial t^2} + \nu_{dn} \frac{\partial X_j}{\partial t} \right) = - \sum_i \frac{\partial U_{ij}}{\partial X} \quad (1.18)$$

m_d : masse de grain de poussière.

ν_{dn} : coefficient de friction

Dans le cas des interactions avec les premiers proches voisins ; $i = j - 1$ et $i = j + 1$, le second membre de l'équation devient :

$$q_{d0} \left(\frac{\partial E}{\partial X} \right)_{x=a} \times (2\delta X_j - \delta x_{j-1} - \delta x_{j+1}) \quad (1.19)$$

$a = |x_j - x_{j-1}| = |x_{j+1} - x_j|$: la distance entre deux grains de poussière successifs à l'équilibre.

Avec une charge constante q_{d0} , le champ électrique est donné par :

$$E(x) = \frac{q_{d0}}{x^2} \left(1 + \frac{x}{\lambda_D} \right) \exp \left(-\frac{x}{\lambda_D} \right) \quad (1.20)$$

En supposant des solutions de la forme :

$$\delta x_j = \delta x_0 \exp[-i(\omega t - jka)] \quad (1.21)$$

A partir des équations (1.18) et (1.20), la relation de dispersion des ondes de réseau est :

$$\omega^2 + i\omega\nu_{dn} = \frac{2q_{d0}^2}{m_d a^3} \left(1 + \frac{a}{\lambda_D} + \frac{a^2}{2\lambda_D^2} \right) \exp \left(-\frac{a}{\lambda_D} \right) \sin^2 \left(\frac{ka}{2} \right) \quad (1.22)$$

Chapitre 2

Étude de la relation de dispersion

2.1 Modèle physique

Considérant un plasma poussiéreux fortement couplé, constitué de particules équidistantes dans un réseau unidimensionnel infini avec un espacement inter-particules Δ et agissant l'une sur l'autre par l'intermédiaire du potentiel de Yukawa. x_j représente la position d'équilibre de la j^{ieme} particule dans un réseau unidimensionnel, ε_j est son déplacement linéaire et q et m sont la charge et la masse du grain de poussière. Aussi, on a le coefficient de friction ν qui représente les frottements. Comme les grains de poussière sont supposés froids, les x_j sont des positions stationnaires indépendantes du temps.

Afin d'obtenir une relation de dispersion plus générale, dans l'équation linéaire du mouvement du grain de poussière, il a été pris en considération la contribution du champ électrique de tous les autres grains de poussière.

Le paramètre $K = \Delta/\lambda_D$ (λ_D est la longueur de Debye dans le plasma) joue un rôle très important dans la détermination de la nature des ondes dans les expériences des cristaux de plasmas.

2.2 Équation du mouvement

Dans le cas d'une chaîne linéaire de grains de poussière, l'équation linéaire du mouvement est :

$$\sum \vec{F} = m \vec{\gamma}$$
$$q \vec{E} + \nu' \vec{V} = m \vec{\gamma}$$

Avec :

- qE : force électrique
- E : champ électrique

- q : charge de la particule
- $\nu' V$: force de frottement

$$V = \frac{dx_j}{dt} \text{ et } \gamma = \frac{d^2x_j}{dt^2}$$

l'expression des déplacements est :

$$x_j = x_{j_0} + \varepsilon_j(t)$$

$$\frac{d^2x_j}{dt^2} = 0 + \frac{d^2\varepsilon_j}{dt^2} \text{ et } \frac{dx_j}{dt} = 0 + \frac{d\varepsilon_j}{dt}$$

Par conséquent, on obtient :

$$m \frac{d^2\varepsilon_j}{dt^2} = qE - \nu' \frac{d\varepsilon_j}{dt} \implies \frac{\nu'}{m} \frac{d\varepsilon_j}{dt} + \frac{d^2\varepsilon_j}{dt^2} = \frac{q}{m} E(x, t)$$

En posant :

$$\nu = \frac{\nu'}{m}$$

d'où l'équation du mouvement :

$$m \frac{d^2\varepsilon_j}{dt^2} + \nu \frac{d\varepsilon_j}{dt} = \frac{q}{m} E(x) \quad (2.1)$$

2.3 Équation du champ électrique

Dans un système de particules unidimensionnel et infini, le champ électrique lié à une particule simple chargée, située à la position x' est donné par [33] :

$$E(x) = \frac{\sigma}{2\varepsilon_0} \text{sign}(x - x') \exp(-|x - x'|/\lambda_D) \quad (2.2)$$

Où σ est la charge surfacique et $\text{sign}(x) = \pm 1$, si l'argument est positif ou négatif et égale à zéro si l'argument est zéro.

Dans un équilibre stable unidimensionnel, les particules de grains de poussières sont équidistantes avec l'espacement a . La position d'équilibre de la $j^{\text{ième}}$ particule est $x_j = j\Delta$, les valeurs de j varient entre $-\infty$ et $+\infty$ pour éviter les effets de limites. Le champ électrique à la position de la $j^{\text{ième}}$ particule et qui est due uniquement à la $j^{\text{ième}}$ particule est calculé comme suit :

On écrit :

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{\text{Charge totale}}{\text{Surface totale}} \\ \implies \sigma &= \frac{qn}{s} \end{aligned}$$

Avec :

q : charge de la particule

n : nombre de particules

s : surface occupée par toutes les particules

$$\sigma = \frac{qn_0V}{s}$$

On a aussi :

$$\Delta = \frac{V}{s}$$

Avec :

n_0 : densité moyenne du nombre de particules

V : volume occupé

$$\sigma = qn_0\Delta$$

$$x = x_j + \varepsilon_j = j\Delta + \varepsilon_j$$

$$x' = x_{j'} + \varepsilon_{j'} = j'\Delta + \varepsilon_{j'}$$

Le champ électrique dans les plasmas poussiéreux fortement couplés s'écrit alors :

$$E_{jj'} = \frac{qn_0a}{2\varepsilon_0} \text{sign}((j - j')a + \varepsilon_j - \varepsilon_{j'}) \exp\left(-\frac{|(j - j')\Delta| + \varepsilon_j - \varepsilon_{j'}}{\lambda_D}\right) \quad (2.3)$$

2.4 Relation de dispersion

En remplaçant la somme $E_{jj'}$ de toutes les particules représentées par j' dans l'équation de mouvement et en linéarisant, nous obtenons :

$$\frac{d^2\varepsilon_j}{dt^2} + \nu\frac{d\varepsilon_j}{dt} = \frac{\omega_{pd}^2K}{2} \sum_{j'=-\infty}^{+\infty} (\varepsilon_j - \varepsilon_{j'}) \exp(-K|j - j'|) \quad (2.4)$$

Avec :

$$K = \Delta/\lambda_D$$

$\omega_{pd} = (q^2n_0/m\varepsilon_0)^{1/2}$ = fréquence de coupure dans les plasmas poussiéreux.

Nous avons donc un système d'équations différentielles couplées dont on peut écrire la solution sous la forme : $\varepsilon_j = \varepsilon_{j_0} \exp(ikj\Delta - i\omega t)$.

En injectant cette expression dans l'équation différentielle (2.4), on obtient :

$$\omega(\omega + i\nu) = \frac{\omega_{pd}^2K}{2} \sum_{j'=-\infty}^{+\infty} (1 - \exp(ik(j' - j)\Delta) \exp(-K|j - j'|)) \quad (2.5)$$

Soit :

$$\sum_{j=0}^{\infty} S^j = (1 - S)^{-1}. \text{ Si } |S| < 1$$

qui est la somme d'une suite géométrique de raison S

En normalisant comme suit :

$$(\omega, \nu)/\omega_{pd} \rightarrow (\omega, \nu)$$

$$k\Delta \rightarrow k$$

On aura :

$$\omega(\omega + i\nu) = \frac{K}{2} \left[\sum_{j'=-\infty}^{\infty} (1 - \exp(ik(j' - j))) \exp(-K|j - j'|) \right]$$

Nous obtenons la relation de dispersion pour les ondes de compression (DCW)[34] :

$$\omega(\omega + i\nu) = \frac{K}{2} \left[\frac{2}{1 - \exp(-K)} - \left(\frac{1}{1 - \exp(-K + ik)} + \frac{1}{1 - \exp(-K - ik)} \right) \right] \quad (2.6)$$

En utilisant les propriétés des suites géométriques :

$$\frac{1}{1 - \exp(-K)} = \sum_j^{\infty} \exp(-K)^j$$

$$\frac{1}{1 - \exp(-K - ik)} = \sum_j^{\infty} \exp(-K + ik)^j$$

$$\frac{1}{1 - \exp(-K + ik)} = \sum_j^{\infty} \exp(-K - ik)^j$$

On peut écrire :

$$\omega(\omega + i\nu) = \frac{K}{2} \left[\sum_{j=1}^{\infty} (2 - \exp(ikj) - \exp(-ikj)) \exp(-jK) \right]$$

$$\omega(\omega + i\nu) = \frac{K}{2} \left[\sum_{j=1}^{\infty} 4 \left(\sin^2 \left(\frac{kj}{2} \right) \right) \exp(-jK) \right]$$

L'équation (2.6) peut alors s'écrire sous la forme suivante :

$$\omega(\omega + i\nu) = 2K \sum_{j=1}^{\infty} \exp(-jK) \sin^2\left(\frac{jk}{2}\right) \quad (2.7)$$

Aux limites $K \ll 1$ et $k \ll 1$ la relation de dispersion (2.7) peut avoir une écriture sous une autre forme en faisant les développements limités pour des valeurs de K et k infiniment petites :

$$\exp(-K + ik) \approx 1 + (-K + ik) = 1 - K + ik$$

$$\exp(-K - ik) \approx 1 + (-K - ik) = 1 - K - ik$$

$$\exp(-K) \approx 1 + (-K) = 1 - K$$

Il s'ensuit :

$$\omega(\omega + i\nu) = \frac{K}{2} \left[\frac{2}{1 - (1 - K)} - \frac{1}{1 - (1 - K + ik)} - \frac{1}{1 - (1 - K - ik)} \right]$$

$$\omega(\omega + i\nu) = \frac{K}{2} \left[\frac{2}{K} - \frac{1}{(K - ik)} - \frac{1}{(K + ik)} \right]$$

$$\omega(\omega + i\nu) = 1 - \frac{K}{2} \left[\frac{1}{(K - ik)} + \frac{1}{(K + ik)} \right]$$

$$\omega(\omega + i\nu) = 1 - \frac{K}{2} \left[\frac{K + ik + K - ik}{K^2 + k^2} \right]$$

$$\omega(\omega + i\nu) = 1 - \frac{K}{2} \left[\frac{2K}{K^2 + k^2} \right] = 1 - \frac{K^2}{K^2 + k^2}$$

D'où :

$$\omega(\omega + i\nu) = \frac{k^2}{k^2 + K^2} \quad (2.8)$$

Ce qui décrit la relation de dispersion des ondes acoustiques (DAW).

D'autres part, si $K \prec 1$ de sorte que $\exp(-K) \ll 1$ et en considérant uniquement les interactions avec les premiers proches voisins, l'équation (2.7) s'écrit sous la forme de la relation de dispersion des ondes de réseau (DLW)[34].

$$\omega(\omega + i\nu) = 2K \exp(-K) \sin^2\left(\frac{k}{2}\right) \quad (2.9)$$

En négligeant temporairement l'atténuation, c'est-à-dire $\nu = 0$:

$$\omega^2 = \frac{k^2}{K^2 + k^2}$$

On obtient la relation de dispersion des ondes acoustiques (DAW)[34] :

$$\omega_{DAW} = k (K^2 + k^2)^{1/2} \quad (2.10)$$

et celle des ondes du réseau (DLW)[34] :

$$\omega^2 = 2K \exp(-K) \sin^2 \left(\frac{k}{2} \right)$$

$$\omega_{DLW} = \sqrt{2}K^{1/2} \exp \left(\frac{-K}{2} \right) \sin \left(\frac{k}{2} \right) \quad (2.11)$$

Continuellement en l'absence de l'effet des frottements, la relation de dispersion (2.7) peut s'écrire sur une autre forme :

$$\begin{aligned} \omega^2 &= \frac{K}{2} \left[\frac{2}{1 - \exp(-K)} - \left(\frac{1}{1 - \exp(-K + ik)} + \frac{1}{1 - \exp(-K - ik)} \right) \right] \\ \omega^2 &= \frac{K}{2} \left[2 \exp(K) \frac{1}{\exp(K) - 1} - \left(\frac{1}{1 - \exp(-K + ik)} + \frac{1}{1 - \exp(-K - ik)} \right) \right] \\ \omega^2 &= K \exp(K) \left[\frac{1}{\exp(K) - 1} - \frac{K}{2} \left(\frac{1}{1 - \exp(-K + ik)} + \frac{1}{1 - \exp(-K - ik)} \right) \right] \\ \omega^2 &= K \exp(K) \frac{1}{\exp(K) - 1} - \frac{K}{2} \left[\frac{1 - \exp(-K) \exp(ik) + 1 - \exp(-K) \exp(-ik)}{(1 - \exp(-K) \exp(ik))(1 - \exp(-K) \exp(-ik))} \right] \\ \omega^2 &= K \exp(K) \frac{1}{\exp(K) - 1} - \frac{K}{2} \left[\frac{2(1 - \exp(-K) \cos(k))}{1 + \exp(-2K) - \exp(-K) 2 \left(\frac{\exp(ik) + \exp(-ik)}{2} \right)} \right] \\ \omega^2 &= K \exp(K) \frac{1}{\exp(K) - 1} - \frac{K}{2} \left[\frac{2(1 - \exp(-K) \cos(k))}{1 + \exp(-2K) - 2 \cos(k) \exp(-K)} \right] \\ \omega^2 &= K \left[\exp(K) \frac{1}{\exp(K) - 1} - \left(\frac{\exp(2K)(1 - \exp(K) \cos(k))}{\exp(2K) + 1 - 2 \cos(k) \exp(-K)} \right) \right] \\ \omega^2 &= K \left[\exp(K) \frac{1}{\exp(K) - 1} - \left(\frac{\exp(K)(\exp(K) - \cos(k))}{\exp(2K) + 1 - 2 \cos(k) \exp(-K)} \right) \right] \end{aligned}$$

$$\omega^2 = K \exp(K) \left[\frac{1}{\exp(K) - 1} - \frac{\exp(K) - \cos(k)}{\exp(2K) + \sin^2(k) + \cos^2(k) - 2 \cos(k) \exp(-K)} \right]$$

$$\omega^2 = K \exp(K) \left[\frac{1}{\exp(K) - 1} - \frac{(\exp(K) - \cos(k))}{(\exp(K) - \cos(k))^2 + \sin^2(k)} \right]$$

d'où la relation de dispersion des ondes de compression (DCW) :

$$\omega_{DCW} = K^{1/2} \exp(K/2) \left[\frac{1}{\exp(K) - 1} - \frac{(\exp(K) - \cos(k))}{(\exp(K) - \cos(k))^2 + \sin^2(k)} \right]^{1/2} \quad (2.12)$$

2.5 Résultats et discussions

Dans les figures (2.1), (2.2), (2.3) et (2.4), sont interprétées les variations des relations de dispersion (2.10), (2.11) et (2.12) pour $K = (0.2, 1, 2 \text{ et } 3)$ et $\nu = 0$.

Comme il a déjà été discuté ci-dessus, la relation de dispersion pour les (DAW) peut être déduite analytiquement de la relation de dispersion pour les (DCW) dans les limites $K \ll 1$ et $k \ll 1$. Ceci est confirmé par la figure (2.1) où, les deux branches sont indiscernables l'une de l'autre et même pour des valeurs assez élevées de k .

Remarquablement, même à une valeur assez grande de $K (K = 1, 2, 3)$ et $k < 1$, la figure (2.2) prouve que la relation de dispersion des (DCW) suit les mêmes variations que celle des (DAW). Aux limites de la première zone de Brillouin $k = \pi^8$ (vitesse de groupe est nulle), la relation de dispersion des (DCW) s'écarte de celle des (DAW) et se comporte d'avantage comme celles des (DLW).

Quand $K = 2$; figure (2.3), dans le régime des ondes courtes, la relation de dispersion des (DCW) quitte de manière particulière la relation des (DAW) et elle se rapproche beaucoup plus de la relation des (DLW).

Quand $K = 3$; figure (2.4), les relations de dispersion des (DCW) et des (DLW), sont très étroites et sont indiscernables pour des valeurs très élevées de K [34].

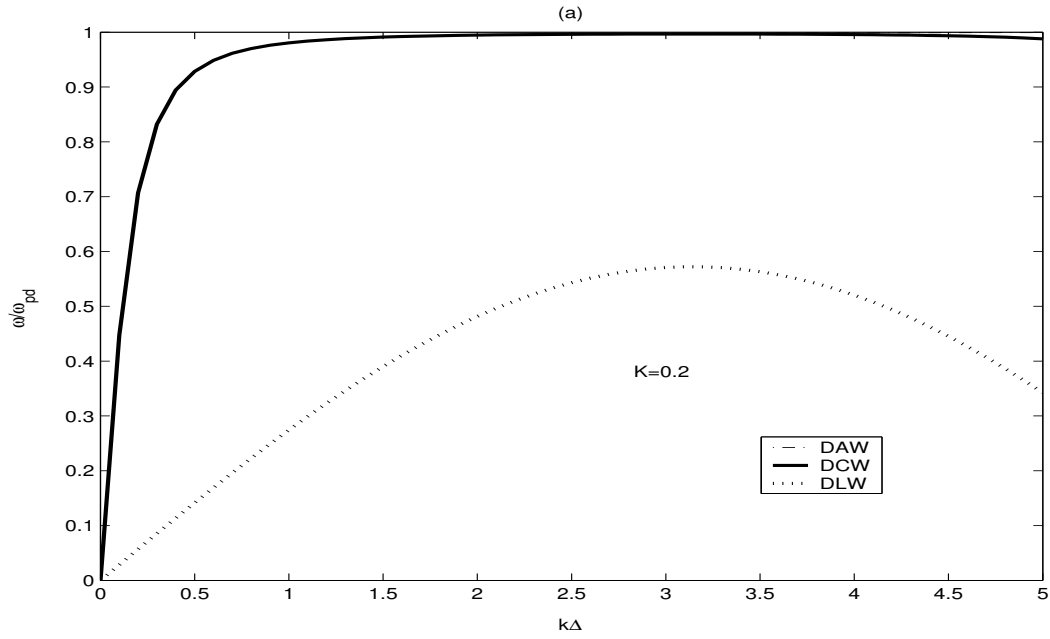


FIGURE 2.1 – Courbe de dispersion pour $\nu = 0$ et $K = 0.2$ [34]

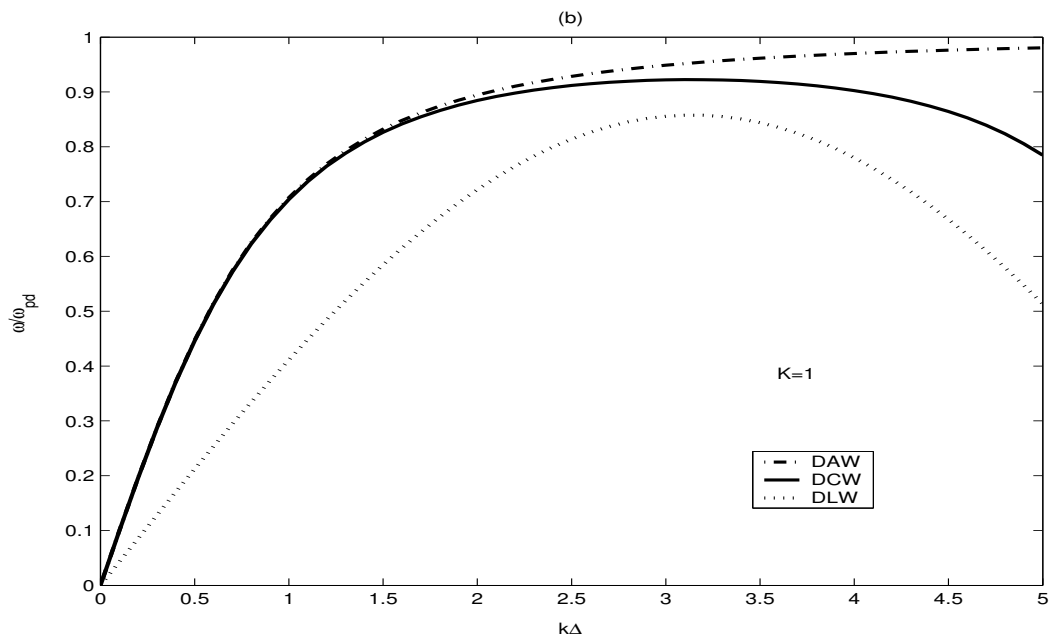


FIGURE 2.2 – Courbe de dispersion pour $\nu = 0$ et $K = 1$ [34]

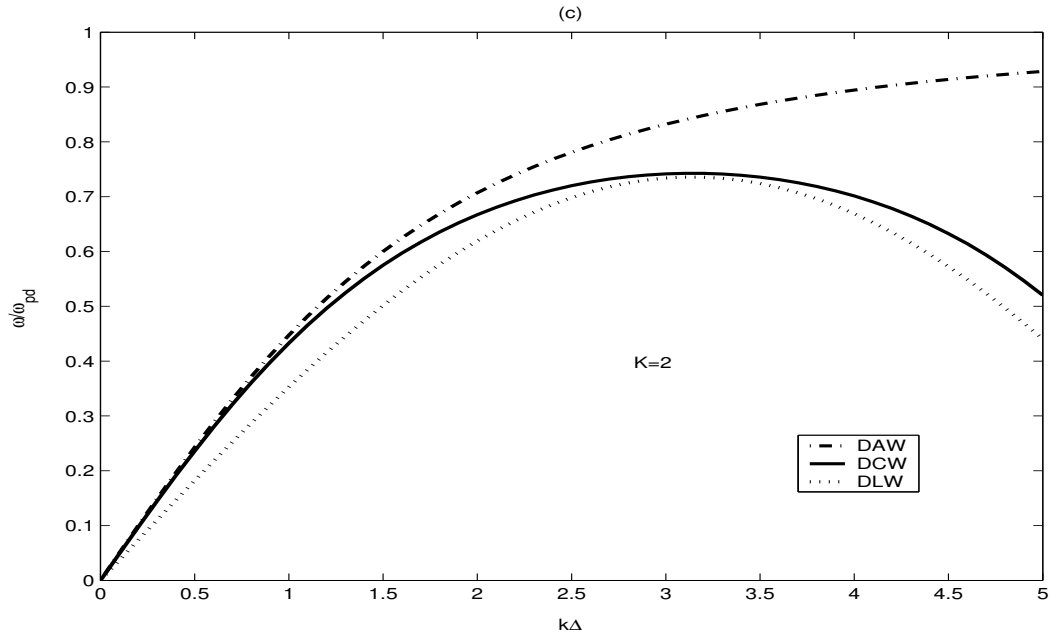


FIGURE 2.3 – Courbe de dispersion pour $\nu = 0$ et $K = 2$ [34]

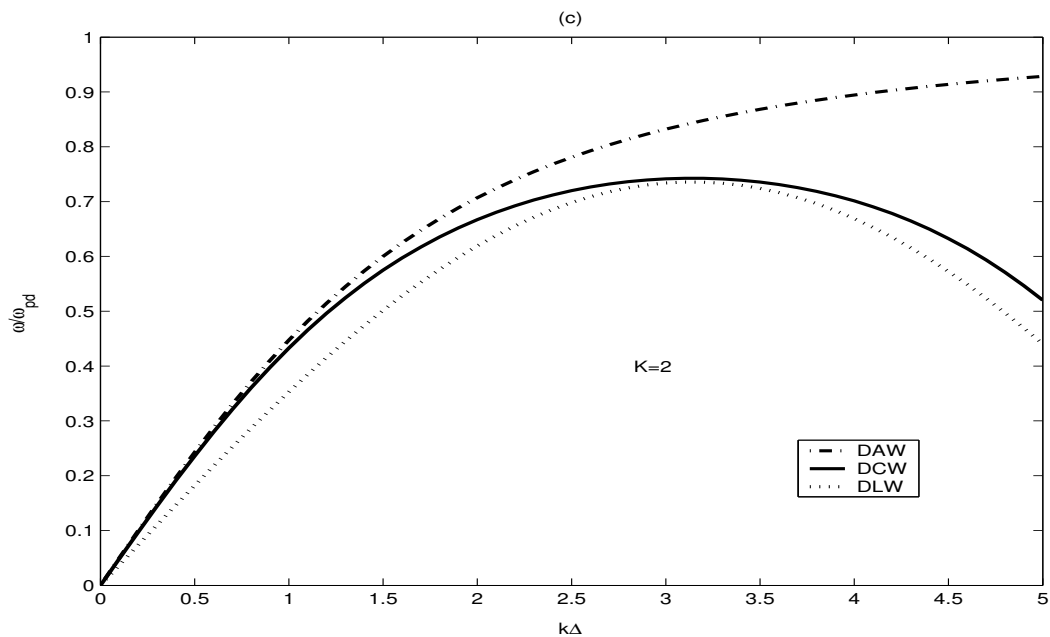


FIGURE 2.4 – Courbe de dispersion pour $\nu = 0$ et $K = 3$ [34]

En reconstituant maintenant l'effet de l'atténuation (frottements). et en supposant que ω est réelle et k , représentant la structure spatiale du mode résultant, est complexe. Les parties réelle et imaginaire de $k = k_r + ik_i$ peuvent être obtenues en écrivant la relation de dispersion (2.7) de la forme $k = f(\omega)$

DAW :

$$\omega(\omega + i\nu) = \frac{k^2}{k^2 + K^2}$$

d'où :

$$k_{DAW} = K \left(\frac{\omega(\omega + i\nu)}{1 - \omega(\omega + i\nu)} \right)^{1/2} \quad (2.13)$$

DLW :

$$\omega(\omega + i\nu) = 2K \exp(-K) \sin^2 \left(\frac{k}{2} \right)$$

d'où :

$$k_{DLW} = 2 \arcsin \left(\frac{\omega(\omega + i\nu)}{2K \exp(-K)} \right)^{1/2} \quad (2.14)$$

DCW :

$$\omega(\omega + i\nu) = \frac{K}{2} \left[\frac{2}{1 - \exp(-K)} - \left(\frac{1}{1 - \exp(-K + ik)} + \frac{1}{1 - \exp(-K - ik)} \right) \right]$$

En posant : $Z = \omega(\omega + i\nu)$, $Y = \exp(-K)$ et $X = \exp(-ik)$

$$2Z = \left[\frac{2}{1 - Y} - \left(\frac{1}{1 - YX} + \frac{1}{1 - \frac{Y}{X}} \right) \right]$$

Avec :

$$A = 2Z - (2/(1 - Z)) - (A + 1)YX^2 + (A + 2 + AY^2)X - (A + 1)Y = 0$$

qui est une équation différentielle du deuxième ordre de variable X . Ses solutions sont de la forme :

$$X_{1,2} = B \pm \sqrt{B^2 - 1}$$

Avec :

$$B = \frac{A(1 + Y^2) + 2}{2(A + 1)Y} = \frac{Y(1 + Y) - (1 + Y^2)(1 - Y)}{Y(1 + Y) - 2Y(1 - Y)Z}$$

D'où [34] :

$$k_{DCW}(\omega) = i \ln(B \pm \sqrt{B^2 - 1}) + 2\pi n \quad (2.15)$$

2π est du à la périodicité et n est un nombre entier

Dans les figures (2.5) et (2.6), sont montrées les variations de k_r et k_i en fonction de ω , pour différentes valeurs de K et ν .

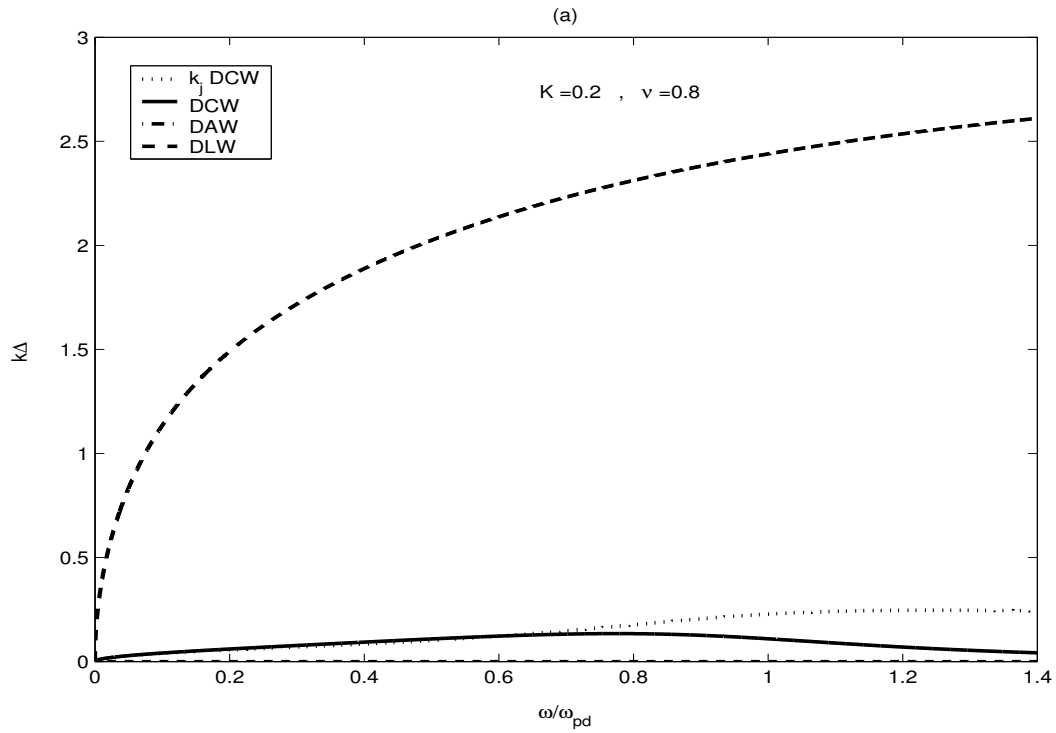


FIGURE 2.5 – $k_r(\omega)$ et $k_j(\omega)$ pour (DCW) et $k_r(\omega)$ pour (DAW, DLW) à $\nu = 0.8$ et $K = 0.2$ [34]

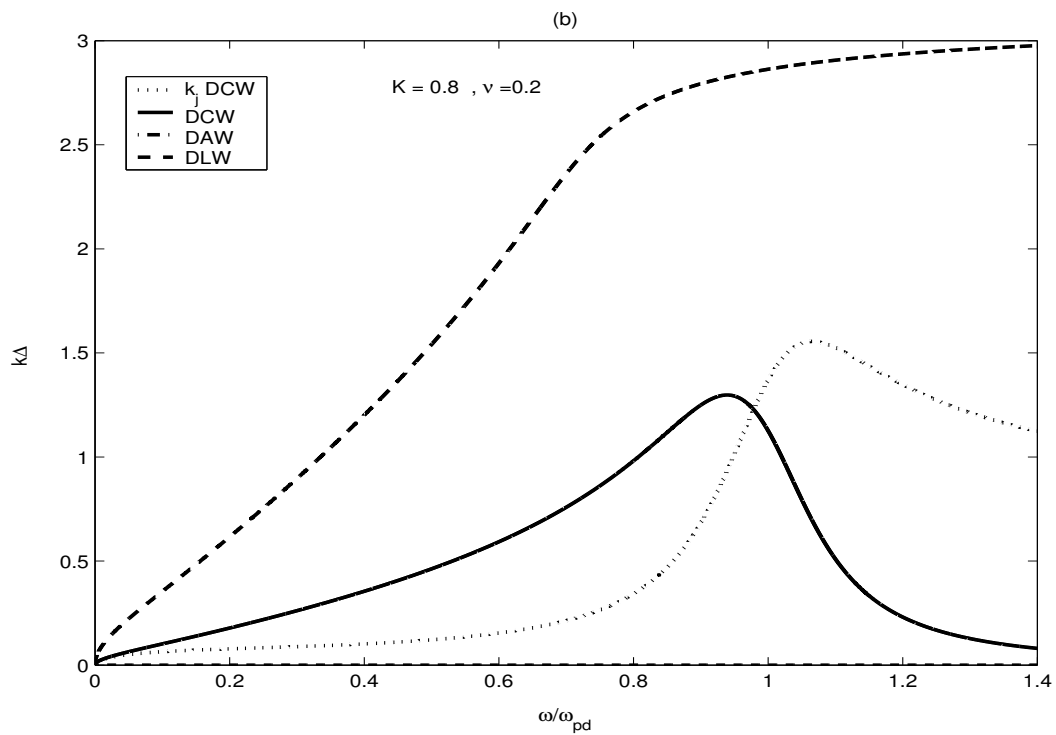


FIGURE 2.6 – $k_r(\omega)$ et $k_j(\omega)$ pour (DCW) et $k_r(\omega)$ pour (DAW, DLW) à $\nu = 0.2$ et $K = 0.8$ [34]

Dans la (Fig.2.5) ν varie de 0.7 à 1.2 et K de 0.15 à 0.61. Avec ces paramètres, les variations de la relation de dispersion des (DCW) sont indiscernables de celles des (DAW).

Dans la (Fig.2.6) où ν varie de 0.1 à 0.3 et $K \approx 0.8$. Les variations de la relation de dispersion des (DCW) est beaucoup plus proche de celles des (DAW).

2.6 Conclusion

Dans cette étude, pour des valeurs arbitraires de K , une nouvelle relation linéaire de dispersion est obtenue, décrivant les ondes de compression longitudinales dans un cristal de plasma poussiéreux unidimensionnel. Dans les limites asymptotiques de cette relation de dispersion, il découle celle des ondes acoustiques et celle des ondes de réseau.

Le paramètre K joue un rôle très important dans le contrôle de la nature des ondes excitées dans une expérience donnée.

Si $K \ll 1$, l'onde de compression (DCW) est indiscernable de l'onde acoustique (DAW)

Quand $K \ll 2$ et une atténuation faible, l'onde de compression se rapproche et devient par la suite de même allure que l'onde de réseau, et cela se confirme quand les valeurs de K augmentent [34].

Chapitre 3

Étude des modes de vibration

L'état d'équilibre et les modes de vibration dans les chaînes linéaires fortement couplées dépendent essentiellement de la nature de l'interaction. Généralement, deux particules chargées interagissent entre elles par le biais de l'interaction Coulombienne ($\sim \frac{1}{r}$). Cependant, en présence de différentes espèces dans le plasma, le potentiel entre les particules se trouve modifié et décroît à cause de l'effet d'écran. Ces systèmes peuvent être modélisés par un potentiel de type Yukawa. Ce dernier n'est pas le seul potentiel possible, la charge et la densité jouent un rôle important dans le choix du potentiel qui permet de reproduire les données expérimentales. Par exemple les systèmes composés de particules mesoscopiques qui interagissent entre elles par le biais d'un potentiel Logarithmique [17]. Pour des densités très élevées ($> 10^{-2}cm^{-3}$) les effets quantiques deviennent significatifs et doivent être pris dans le potentiel d'interaction.

3.1 Modèle physique

Considérons une chaîne linéaire formée de N particules identiques de masse m et de charge positive Ze . Cet ensemble forme un réseau unidimensionnel équidistant infini d'inter-distance Δ . Les particules agissent l'une sur l'autre par l'intermédiaire du potentiel de Yukawa. Le champ électrique \vec{E} qui agit sur une seule particule est dû à un nombre limité de proches voisins. Le modèle théorique utilisé par Otani *et al.*, prend en considération l'effet de toutes les particules et la sommation s'étendant jusqu'à l'infini [34].

Une particule i de position à l'équilibre x_i , a pour équation du mouvement [35] :

$$\frac{d^2x_i}{dt^2} + \nu \frac{dx_i}{dt} = \frac{qE}{m}(x_i, t) \quad (3.1)$$

Le terme d'ordre 1 par rapport à t , représente la force de frottement caractérisée par le coefficient de friction ν .

Une faible perturbation du champ électrostatique \vec{E} engendre un déplacement ε_i le long de l'axe ox , tel que $\varepsilon_i \ll x_i$ [36]. Pour exprimer le champ électrostatique \vec{E} agissant sur la particule i , on considère une forme sphérique des grains de poussière. Le potentiel de Yukawa en un point situé à une distance x par rapport à une position de référence, est donné par [37][38][39] :

$$V(x) = \frac{Q}{4\pi\varepsilon x} \exp\left(-\frac{x}{\lambda_D}\right) \quad (3.2)$$

λ_D : est la longueur de Debye qui prend en compte l'effet d'écran,
 x : étant la position d'un point par rapport à la position de référence,
 Q : étant la charge de toutes les particules.

Le champ électrique déduit de cette expression s'écrit :

$$E(x) = \frac{Q}{4\pi\varepsilon} \left(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{x\lambda_D} \right) \exp\left(-\frac{x}{\lambda_D}\right) \quad (3.3)$$

La résultante des forces appliquées sur une particule i de position x_i sur l'axe X (Fig.3.1) par l'ensemble des autres particules de position x_l est donnée par :

$$F(x) = \sum_{l \neq i} \frac{q^2}{4\pi\varepsilon} \left(\frac{1}{|x_i - x_l|^2} + \frac{1}{|x_i - x_l|\lambda_D} \right) \exp\left(-\frac{|x_i - x_l|}{\lambda_D}\right) \quad (3.4)$$

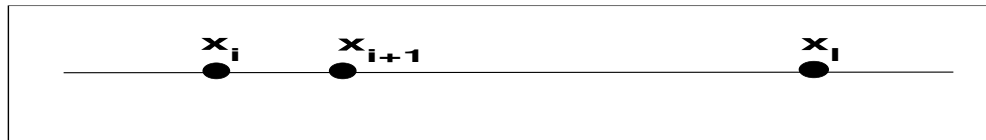


FIGURE 3.1 – Chaîne linéaire à N particules.

En négligeant l'effet des frottements ($\nu = 0$), l'équation du mouvement prend la forme simple suivante :

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \frac{qE}{m}(x_i, t) \quad (3.5)$$

En utilisant l'expression(3.4) de la force, cette équation prendra la forme suivante :

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \frac{q^2}{m4\pi\epsilon} \sum_{l \neq i} \left(\frac{1}{|x_i - x_l|^2} + \frac{1}{|x_i - x_l|\lambda_D} \right) \exp \left(-\frac{|x_i - x_l|}{\lambda_D} \right) \text{sign}(|x_i - x_l|)$$

Avec :

$$\text{sign}(|x_i - x_l|) = +1 \text{ si } (x_i - x_l) > 0$$

$$\text{sign}(|x_i - x_l|) = -1 \text{ si } (x_i - x_l) < 0$$

Dans le but de chercher des solutions générales, on procède aux normalisations suivantes :

$$\tilde{x} = \frac{x}{x_0} \text{ et } \tilde{t} = \omega_0 t$$

$x_0 = \left(\frac{q^2}{\omega_0^2 m 4\pi\epsilon} \right)^{1/3}$ et ω_0 définit la fréquence caractéristique du mode de vibration considéré.

Dans la suite, la notation \sim est abandonnée et l'équation du mouvement s'écrit donc

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \frac{q^2}{\omega_0^2 x_0 m 4\pi\epsilon} \sum_{l \neq i} \left(\frac{1}{x_0^2 |x_i - x_l|^2} + \frac{1}{x_0 |x_i - x_l|\lambda_D} \right) \exp \left(-\frac{x_0 |x_i - x_l|}{\lambda_D} \right) \quad (3.6)$$

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \sum_{l \neq i} \left(\frac{1}{|x_i - x_l|^2} + \frac{x_0}{|x_i - x_l|\lambda_D} \right) \exp \left(-\frac{x_0 |x_i - x_l|}{\lambda_D} \right)$$

En posant $K = \frac{x_0}{\lambda_D} = \frac{\Delta}{\lambda_D}$.

On obtient l'équation différentielle du deuxième ordre

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \sum_{l \neq i} \left(\frac{1 + K|x_i - x_l|}{|x_i - x_l|^2} \right) \exp(-K|x_i - x_l|) \quad (3.7)$$

pour laquelle on cherche des solutions sous forme d'onde progressive, sous forme [34]

$\varepsilon_i = \varepsilon_0 \exp[j(k\Delta - \omega t)]$, avec $x_i = \Delta i + \varepsilon_i$, tel que : $\varepsilon_i \ll \Delta$, $\varepsilon_i, \varepsilon_m \ll 1$.

3.2 Relation de dispersion

Pour trouver la fréquence ω en fonction du nombre d'onde k on procède par récurrence. En premier lieu, la particule de rang i interagissant avec les premiers proches voisins, c-a-d, les particules de rang $i - 1$ et $i + 1$.

On écrit :

$$|x_i - x_{i-1}| = |i + \varepsilon_i - (i - 1) + \varepsilon_{i-1}| \approx 1 + \varepsilon_i - \varepsilon_{i-1}$$

$$|x_{i+1} - x_i| = |(i + 1)\varepsilon_{i+1} - (i) + \varepsilon_i| \approx 1 + \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i$$

L'équation du mouvement est réécrite sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{d^2 x_i}{dt^2} = & \sum_{l \neq i} \frac{1 + K(1 + \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i)}{(1 + \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i)^2} \exp(-K(1 + \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i)) \\ & - \left(\frac{1 + K(1 + \varepsilon_i - \varepsilon_{i-1})}{(1 + \varepsilon_i - \varepsilon_{i-1})^2} \exp(-K(1 + \varepsilon_i - \varepsilon_{i-1})) \right) \end{aligned}$$

Sachant que $\varepsilon \ll 1 \Rightarrow (1 + \varepsilon)^n \approx 1 + n\varepsilon$ et en linéarisant par rapport à ε

$$\begin{aligned} \frac{d^2 x_i}{dt^2} = & \exp(-K) \{ [1 + K(1 + \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i)] [1 + 2(\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i)] [1 - K(\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i)] \\ & - [1 + K(1 + \varepsilon_i - \varepsilon_{i-1})] [1 + 2(\varepsilon_i - \varepsilon_{i-1})] [1 - K(\varepsilon_i - \varepsilon_{i-1})] \} \end{aligned}$$

D'où :

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = 2 \exp(-K)(1 + K) \{ (\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i) - (\varepsilon_i - \varepsilon_{i-1}) \} \quad (3.8)$$

D'autre part :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i &= \varepsilon_0 \exp(j(i + 1)\Delta k) - \exp(jk\Delta i) \exp(-j\omega t) \\ \varepsilon_i - \varepsilon_{i-1} &= \varepsilon_0 \exp(j(i\Delta)k) - \exp(j(i - 1)\Delta k) \exp(-j\omega t) \end{aligned}$$

La relation de dispersion pour les ondes de réseau(DLW) dans le cas des interactions avec les premiers proches voisins est alors obtenue [40] :

$$\omega^2 = 2 \exp(-K)(1 + K)4 \sin^2 \left(\frac{k\Delta}{2} \right) \quad (3.9)$$

En tenant compte des seconds proches voisins, on obtient :

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \exp(-K) [1 + K(1 + \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i)] [1 + 2(\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i)] [1 - K(\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i)]$$

$$\begin{aligned}
& - \exp(-K) [1 + K(1 + \xi_i - \varepsilon_{i-1})] [1 + 2(\varepsilon_i - \varepsilon_{i-1})] [1 - K(\varepsilon_i - \varepsilon_{i-1})] \\
& + \exp(-K) [1 + K(1 + \varepsilon_{i+2} - \varepsilon_{i+1})] [1 + 2(\varepsilon_{i+2} - \varepsilon_{i+1})] [1 - K(\varepsilon_{i+2} - \varepsilon_{i+1})] \\
& - \exp(-K) [1 + K(1 + \varepsilon_{i-1} - \varepsilon_{i-2})] [1 + 2(\varepsilon_{i-1} - \varepsilon_{i-2})] [1 - K(\varepsilon_{i-1} - \varepsilon_{i-2})] \\
& + \exp(-2K) [1 + K(2 + \varepsilon_{i+2} - \varepsilon_i)] [2 + 2(\varepsilon_{i+2} - \varepsilon_i)] [1 - K(\varepsilon_{i+2} - \varepsilon_i)] \\
& - \exp(-2K) [1 + K(2 + \varepsilon_i - \varepsilon_{i-2})] [2 + 2(\varepsilon_i - \varepsilon_{i-2})] [1 - K(\varepsilon_i - \varepsilon_{i-2})] \\
& = \exp(-K)(2 + 2K) [(\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i) - (\varepsilon_i - \varepsilon_{i-1})] \\
& + \exp(-K)(2 + 2K) [(\varepsilon_{i+2} - \varepsilon_{i+1}) - (\varepsilon_{i-1} - \varepsilon_{i-2})] \\
& + \exp(-2K)(2 + 2K) [(\varepsilon_{i+2} - \varepsilon_{i+1}) - (\varepsilon_{i-1} - \varepsilon_{i-2})]
\end{aligned}$$

Finalement la relation de dispersion s'écrit :

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = 2(1 + K)(\exp(-K) + \exp(-2K))[\varepsilon_{i+2} + \varepsilon_{i-2} - \varepsilon_i] \quad (3.10)$$

Cette dernière équation permet d'aboutir à la relation de dispersion des ondes de réseau

$$\begin{aligned}
\omega^2 &= 2(1 + K)(\exp(-K) + \exp(-2K))[2 - (\exp(2jk\Delta) + \exp(-2jk\Delta))] \\
\omega^2 &= 2(1 + K)(\exp(-K) + \exp(-2K))(2 - 2 \cos(2k\Delta)) \\
\omega^2 &= 2(1 + K)(\exp(-K) + \exp(-2K))2(1 - \cos(2k\Delta)) \\
\omega_{DLW}^2 &= 2(1 + K)(\exp(-K) + \exp(-2K))4 \sin^2(k\Delta) \quad (3.11)
\end{aligned}$$

3.2.1 Cas limites

Pour obtenir la relation de dispersion dans le cas d'une chaîne linéaire formée de $N + 1$ particules, on procède par récurrence à partir des résultats obtenus (3.9) et (3.11). La relation de dispersion dans ce cas est alors :

$$\omega^2 = 2(1 + K) \sum_{i=1}^{\infty} \exp(-iK) 4 \sin^2 \left(\frac{ik\Delta}{2} \right) \quad (3.12)$$

$$\omega^2 = 2(1 + K) \sum_{i=1}^{\infty} \{(2 - \exp(ijK) - \exp(-ijK)) \exp(-jK)\}$$

Comme on a :

$$\sum_{j=0}^{\infty} S^j = \frac{1}{1 - S} \cdot \text{si } |S| < 1 \quad (3.13)$$

On peut écrire :

$$\begin{aligned}\sum_j^{\infty} \exp(-K)^j &= \frac{1}{1 - \exp(-K)} \\ \sum_j^{\infty} \exp(-K + jk)^j &= \frac{1}{1 - \exp(-K + jk)} \\ \sum_j^{\infty} \exp(-K - jk)^j &= \frac{1}{1 - \exp(-K - jk)}\end{aligned}$$

d'où :

$$\omega^2 = 2(1 + K) \left[\frac{2}{1 - \exp(-K)} - \frac{1}{1 - \exp(-K + jk)} - \frac{1}{1 - \exp(-K - jk)} \right] \quad (3.14)$$

Pour $K \ll 1$ et $k \ll 1$, les développements limités suivants

$$\begin{aligned}\exp(-K + jk) &\approx 1 - K + ik \\ \exp(-K - jk) &\approx 1 - K - ik \\ \exp(-K) &\approx 1 - K\end{aligned}$$

conduisent à la relation de dispersion :

$$\begin{aligned}\omega^2 &= 2(1 + K) \left[\frac{2}{1 - (1 - K)} - \frac{1}{1 - (1 - K + jk)} - \frac{1}{1 - (1 - K - jk)} \right] \\ \omega^2 &= 2(1 + K) \left[\frac{2}{K} - \frac{1}{(K - jk)} - \frac{1}{(K + jk)} \right] \\ \omega_{DAW}^2 &= 4(1 + K) \left[\frac{k^2}{K(K^2 + k^2)} \right] \quad (3.15)\end{aligned}$$

C'est la relation de dispersion pour les ondes acoustiques (DAW).

3.2.2 Effet d'écran

Nous avons considéré le cas où les particules qui constituent la chaîne linéaire sont des grains de poussière. Cette situation présente un intérêt particulier, les grains étant de taille considérable peuvent être observés directement à l'oeil nu. On peut aussi réaliser des mesures directes par des caméras CCD (Charged Coupled

Devise). Ainsi, on se donne un moyen expérimental pour l'étude directe des chaînes linéaires. D'autre part, les processus de charge jouent un rôle important pour déterminer la charge à l'équilibre, qui peut être positive ou négative. Ce résultat dépend du plasma de base dans lequel sont immergés les grains de poussière.

Une charge positive Ze (ou négative) placée dans un plasma, par interaction Coulombienne, attire les électrons (ions) et repousse les ions positifs (électrons). Le potentiel $Q \approx Ze/r$ se trouve atténué au delà de la longueur λ_D .

A l'équilibre thermodynamique, la fonction de distribution dans l'espace des phases d'une espèce d'un plasma est [11] :

$$f(x, \theta) = n_0 \exp \left(-\frac{mv^2}{2k_B T} + \frac{q_j Q}{k_b T} \right) \quad (3.16)$$

La densité des particules :

$$n = \int f dv = n_j = n_{j0} \exp \left(\frac{q_j Q}{k_B T} \right) \quad (3.17)$$

A partir de l'équation de Poisson :

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{\varepsilon_0} \rho(r) \quad (3.18)$$

Où, la densité de charge $\rho(r) = \sum_j q_j n_j(r)$, et la sommation s'étend à toutes les espèces présentes.

Dans le cas d'une symétrie sphérique :

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\phi}{dr} \right) = \frac{2n_{j0} e^2}{\varepsilon_0 k_B T \phi}$$

On obtient :

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

D'où :

$$\lambda_D = \left(\frac{\varepsilon_0 k_B T}{2n_{j0} Z^2 e^2} \right)^{1/2}$$

Les particules entrent en collisions uniquement avec celles qui sont à l'intérieur de la sphère de Debye. Pour un ordre de grandeur $\Delta \sim n^{-1/3} \sim 3 \cdot 10^{-7} m$, on trouve $\lambda_d \sim 10^{-5} m$ (Environ 10 fois supérieur au rayon moyen des grands poussières).

En présence des grains de poussière, le calcul de λ_D se fait comme suit :

- $\frac{1}{\lambda_D} = \sum_j \frac{1}{\lambda_{dj}^2}$, j représente les espèces légères (ions, électrons).

- $C_s = \lambda_D \cdot \omega_p$, avec $\omega_p^2 = \sum \omega_{ps}^2$ (Fréquence plasma globale).

Pour un milieu plasma constitué uniquement des grains de poussière :

$$\begin{aligned}\lambda_d &= \left(\frac{kT}{4\pi n_0 (Ze)^2} \right)^{1/2} \\ &= 7,43 \cdot 10^2 \left(\frac{T}{n} \right)^{1/2}\end{aligned}$$

T est donnée en (eV), n en (cm^{-3}) et λ_d en (cm)

Dans le cas où l'effet collectif joue un rôle important, r_0 est le rayon du grain

$$r_0 \ll \Delta \ll \lambda_D \quad (3.19)$$

Avec :

$$n_d = \frac{1}{\frac{4\pi}{3} d^3}$$

λ_D prend l'expression :

$$\lambda_D = 7,43 \cdot 10^2 \left(\frac{T d^{-3}}{Z^2} \right)^{1/2}$$

En utilisant les paramètres des travaux expérimentaux de B. Liu et J. Goree [41] :

- $d = 0.72, 0.8, 1.25$ mm,

- $T \sim 0.013$ (0.02 eV),

- $r_0 \sim 0.8 \mu$ m,

- $Z \sim 7000$ (7600 \rightarrow 10^4).

$$\lambda_D \sim 7,43 \cdot 10^2 \left[\frac{0,02 \cdot 10^{-3}}{(7000)^2} \right]^{1/2} \sim 0,8 \cdot 10^{-5} cm$$

Cette dernière valeur de λ_D ne vérifie pas la condition (3.19). Ce résultat montre que l'effet d'écran n'est pas du à la présence des grains mais plutôt aux ions et aux électrons.

Pour corriger cette valeur de λ_D , on utilise la relation :

$$\frac{1}{\lambda_D} = \frac{1}{\lambda_{Di}} + \frac{1}{\lambda_{De}}$$

comme : $\lambda_{Di} \sim \lambda_{De}$, on obtient :

$$\frac{1}{\lambda_{Di}} = 7,43 \cdot 10^2 \left(\frac{Te}{ne} \right)^{1/2}$$

en tenant compte des valeurs expérimentales des paramètres suivants donnés dans les travaux de Khrapak [40] :

- $n_e = 5.10^8 \text{ cm}^{-3}$,
- $T_e = 0.17 \text{ (eV)} \rightarrow 4 \text{ (eV)}$,
- $T_i/T_e = 0.05 \rightarrow 1$.

$$\lambda_{De} = 0,7 \text{ mm}$$

La densité des ions est calculée à partir de la condition de quasi-neutralité, qui s'écrit dans le cas où $Z_d > 0$:

$$n_i + Z_d n_d = n_e$$

A faible pression, la densité des grains de poussière dans les plasmas est toujours très inférieure à celle des électrons et des ions, ce qui se traduit par l'approximation $n_i \sim n_e$ et donc

$$\lambda_D = 7,43.10^2 \left[\frac{4}{5.10^8} \right]^{1/2} = 0,6 \text{ mm}$$

Cette valeur calculée de λ_D est du même ordre de grandeur que celle donnée par les résultats expérimentaux [42] ($\lambda_D = 0.8 \text{ mm}$). L'effet d'écran qui corrobore les données expérimentales est assuré par les particules (ions et électrons) qui entoure chaque grains de poussière de la chaîne linéaire, ce qui confirme la contribution prédominante des particules légères dans cet effet.

Le modèle théorique utilisé ne permet pas le calcul du facteur $K = \Delta/\lambda_D$. L'inter-distance Δ doit être déterminée de façon exacte en précisant les conditions physiques auxquelles correspondent λ_D et ν . On cherche à simuler une chaîne infinie numériquement par la méthode Monte-Carlo.

L'un des problèmes auxquels s'intéressent la simulation par la méthode Monte-Carlo est de chercher le nombre de particules impliquées dans l'interaction. En réalité même avec cette méthode, on ne peut pas prendre un nombre infini de particules, la chaîne infinie est simulée à travers la condition de périodicité du système [43]

3.3 Simulation par la méthode Monte-Carlo

Les derniers développements technologiques réalisés en moyens de calculs électroniques ont permis de faire appel de plus en plus aux simulations numériques. Une simulation a pour but de reproduire une expérience réelle ou bien celle qui

n'a pas eu lieu. La méthode de Monte-Carlo est l'une des méthodes de simulation utilisée dans les structures fortement couplées.

Bedanov *et al.*, ont déterminé la configuration d'équilibre d'un système fortement couplé à deux dimensions en présence d'un potentiel de confinement parabolique. Ils ont montré en 1994 que la structure présente des états d'équilibre sous forme de couches. Le nombre de particules dans chaque couche dépend du nombre total de particules et de la portée du potentiel de confinement [19][44]. Ce résultat a été confirmé expérimentalement en 2005 par Wolter *et al.*, La même méthode a été aussi utilisée pour déterminer la configuration d'équilibre d'un système quasi-unidimensionnel où le rôle de l'interaction a été étudié [45][46][47]. Cette configuration a permis l'étude des modes optiques dans de tels systèmes

3.3.1 Principe de la Méthode Monte-Carlo

La méthode de Monte-Carlo est une méthode statistique qui se base sur le concept d'expériences aléatoires, elle s'applique pour des systèmes en équilibre thermodynamique. L'état d'équilibre est unique quelque soit le nombre de répétitions de l'expérience. Cependant, le choix initial intervient dans la convergence et le temps de calcul. Le principe de la méthode est de résoudre les problèmes par la voie des grandeurs probabilistes, telle que l'espérance mathématique. Cette méthode a une large utilisation dans divers domaines scientifiques, technologiques et économiques ayant un aspect aléatoire [48].

3.3.2 La méthode de Monte-Carlo avec algorithme de Metropolis

La méthode de Monte-Carlo avec algorithme de Metropolis a été introduite en physique par Metropolis et coll en 1953. Elle porte ce nom parce qu'elle est basée sur l'utilisation de nombres aléatoires. Cette méthode permet l'estimation des moyennes de grandeurs physiques données par la formulation de Gibbs de la mécanique statistique sous forme d'intégrales multidimensionnelles. La technique de Monte Carlo est en effet particulièrement adaptée au calcul des intégrales de dimension supérieure à dix. Les premières simulations furent réalisées dans l'ensemble canonique (N, V et T constants), puis la technique fut étendue aux autres ensembles statistiques en générant une séquence aléatoire d'états accessibles (chaîne de Markov) dans l'espace des configurations du système. L'échantillonnage se fait en privilégiant les régions où le facteur de Boltzmann ($\exp(-U/k_B T)$), c'est-à-dire la densité de probabilité de l'ensemble canonique dans cet espace est la plus élevée. La probabilité d'une configuration particulière d'énergie potentielle U_i est

alors proportionnelle à $(\exp(-U_i/k_B T))$, autrement dit l'acceptation d'une configuration de la chaîne de Markov est pondérée par une fréquence proportionnelle au facteur de Boltzmann. Une propriété d'équilibre est alors obtenue comme une moyenne simple sur les configurations acceptées. Cette exploration de l'espace des configurations, en suivant l'algorithme de Metropolis, constitue le premier cas d'échantillonnage selon le poids statistique. La méthode de Monte Carlo avec algorithme de Metropolis est encore largement utilisée de nos jours, parce qu'elle représente un moyen simple et relativement efficace d'obtenir des moyennes de grandeurs physiques dans un ensemble statistique. Il est important de noter que ces moyennes sont obtenues malgré l'incapacité de connaître explicitement la densité de probabilité normalisée de l'ensemble considéré. La méthode de MC est en général limitée au calcul des propriétés statiques puisque seule la partie configurationnelle de l'espace des phases est explorée et que le temps n'est pas une variable explicite. Les propriétés dynamiques sont inaccessibles et devront être obtenues par une autre technique, qui est la Dynamique Moléculaire [49].

3.3.2.1 Historique

La méthode de Monte-Carlo fut développée par Von Neumann, Ulam et Metropolis à la fin de la seconde guerre mondiale, pour l'étude de la diffusion des neutrons dans un matériau fissile. Ils réalisèrent la simulation du mouvement dans un liquide de disques pleins dans un plan par la méthode de MC. Ils proposèrent ce qui porte désormais le nom de MC Metropolis et qui est devenu la base des simulations MC des systèmes de particules en interaction. D'autres pionniers, Alder et Wainwright, posèrent les bases de la Dynamique Moléculaire (DM) actuelle en réalisant une simulation de sphères dures. Le résultat marquant est la convergence rapide vers les valeurs qui caractérisent l'état d'équilibre. Ce qui a surpris les théoriciens de l'époque c'est le fait qu'un aussi petit nombre de degrés de liberté (100 sphères) permet de modéliser les propriétés macroscopiques complexes d'un système. Wood et Jacobson réalisèrent une simulation MC sur le modèle utilisé par Alder et Wainwright, ils ont obtenu les mêmes résultats, montrant ainsi l'équivalence des deux méthodes [48][49].

Ces simulations se basent sur une description moléculaire en termes de positions et quantités de mouvement d'un ensemble de particules qui constituent le système. L'Hamiltonien H du système s'écrit comme la somme de l'énergie cinétique E_c et de l'énergie potentielle U de l'ensemble des coordonnées de position r_i et des

quantités de mouvement p_i de chaque particule i [49]

$$H(r^N, p^N) = E_c(p^N) + U(r^N) \quad (3.20)$$

Si l'énergie cinétique a une expression bien établie, l'énergie potentielle qui décrit les interactions inter-atomiques est en général mal connue et constitue de ce fait l'outil de modélisation pour simuler les propriétés physiques des systèmes en interaction. On peut soit prendre un potentiel simple, afin de réaliser une investigation théorique, soit chercher un potentiel empirique plus réaliste pour modéliser les interactions du système réel. Les calculs sont réalisés sur un nombre fini de molécules et afin d'éviter des effets de surface, on adopte en général des conditions aux limites périodiques (dites de Born-von Kármán) qui permettent de simuler un système infini [49].

Considérons un système composé de N particules classiques occupant un volume V constant et en équilibre avec un thermostat à la température T . Dans cet ensemble canonique, la densité de probabilité dans l'espace des phases est :

$$\rho_{NVT} = \exp(-\beta H) \text{ avec } \beta = 1/K_B T \quad (3.21)$$

La valeur moyenne à l'équilibre d'une grandeur physique A peut s'écrire à l'aide d'une moyenne calculée par la densité de probabilité ρ_{NVT} :

$$\langle A \rangle_{NVT} = \int A \frac{\exp(-\beta H)}{Q} d^N p d^N r \quad (3.22)$$

Le dénominateur Q est la fonction de partition de l'ensemble canonique :

$$Q(NVT) \equiv \int .. \int \exp[-\beta H(r^N, p^N)] dr^N \quad (3.23)$$

Généralement, les propriétés physiques ne dépendent pas explicitement des quantités de mouvement et l'on peut réécrire la valeur moyenne à l'équilibre, en séparant les intégrales sur les positions des intégrales sur les quantités de mouvement et ainsi éliminer les termes cinétiques :

$$\langle A(r^N) \rangle_{NVT} = \int .. \int \exp A(r^N) \frac{(\exp[-\beta U(r^N)])}{Z} dr^N \quad (3.24)$$

où la fonction de partition Z est appelée intégrale de configuration, car elle s'obtient dans l'espace des configurations (positions) de dimension $3N$:

$$Z = \int .. \int \exp[-\beta U(r^N)] dr^N \quad (3.25)$$

La méthode de MC est une technique numérique qui permet notamment d'évaluer des intégrales multidimensionnelles du type (3.25).

3.3.2.2 Méthode de Metropolis

Dans la pratique, il n'est pas possible de déterminer directement la fonction de partition de l'ensemble canonique où l'intégrale de configuration d'un système de N particules, mais on peut calculer la moyenne canonique d'une grandeur physique $A(r^N)$ [49]

$$\langle A(r^N) \rangle_{NVT} = \int \dots \int A(r^N) \frac{\exp(-\beta U(r^N))}{Z} dr^N = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \rho((r^N)_i) A((r^N)_i) \quad (3.26)$$

Avec :

$$\frac{\exp(-\beta U(r^N))}{Z} = \rho_{NVT}(r^N)$$

Chaque configuration i fait référence à un état accessible de l'espace des configurations. C'est une moyenne calculée par la densité de probabilité de l'espace des configurations (à $3N$ degrés de liberté) de l'ensemble canonique. L'utilisation de la méthode MC avec échantillonnage permet l'estimation de cette intégrale :

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

Pour générer les différentes positions relatives à une configuration i du système, on s'intéresse uniquement aux états i distribués suivant la densité de probabilité non uniforme ρ_{NVT} . Les configurations successives ne suivent pas une évolution dans le temps, elles constituent une chaîne de Markov (un nouvel état ne dépend explicitement que de l'état précédent et appartient à un ensemble fini d'états appelé espace d'état : $1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, n$). L'ordre dans lequel ces états se succèdent n'a aucune importance. Cependant, l'objectif est de choisir le chemin de calcul par un nombre minimum d'itérations pour obtenir la convergence (état le plus probable) [49].

Pour un système à N particules, la valeur moyenne $\langle A \rangle$ est calculée en construisant une matrice de transition Π de très grande dimension, stochastique et ergodique. Une chaîne de Markov irréductible ou ergodique est une chaîne dans laquelle chaque état peut éventuellement être atteint à partir d'un autre état quelconque. On ne connaît pas les éléments de la matrice de transition, mais la distribution limite de la chaîne de Markov ρ est connue [49].

$$\rho_i = \rho_{NVT}((r^N)_i) = \frac{\exp[-\beta U((r^N)_i)]}{Z} \quad (3.28)$$

De chaque point i de l'espace des configurations r_i^N , il est possible de déterminer les propriétés de la matrice Π . On génère à l'aide de Π une chaîne de Markov dont les points appartiennent à l'ensemble canonique.

On cherche à présent de déterminer les propriétés de la matrice Π .

1) La matrice de transition Π qui donne les probabilités de transition d'une configuration i vers une configuration j .

$$\Pi_{ij} = r^N i \rightarrow r^N j$$

est une matrice stochastique de probabilité :

$$\sum_j \Pi_{ij} = 1$$

2) La matrice de transition doit préserver l'équilibre lorsqu'il est établi. La chaîne de Markov doit être ergodique.

Le nombre de déplacements acceptés de l'état i vers l'état j , est exactement égal au nombre de déplacements de l'état j vers l'état i . Le choix de Metropolis consiste à prendre un algorithme qui assure l'équiprobabilité des deux transitions ($i \rightarrow j, j \rightarrow i$)

La procédure est la suivante :

- 1^{iere} étape : réaliser un essai de déplacement aléatoire pour passer d'un état i à un état j , noter α_{ij} l'élément de la matrice stochastique correspondante
- 2^{ieme} étape : décider si l'on accepte ou pas le déplacement $i \rightarrow j$. Avec la probabilité P_{ij} ,

tel que :

$$\Pi_{ij} = \alpha_{ij} P_{ij} \tag{3.29}$$

On choisit la matrice α symétrique

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ji} \tag{3.30}$$

On peut réécrire :

$$\rho_i \alpha_{ij} P_{ij} = \rho_j \alpha_{ji} P_{ji}$$

$$\frac{P_{ij}}{P_{ji}} = \frac{\rho_j}{\rho_i} = \frac{\exp(-\beta U_j)/Z}{\exp(-\beta U_i)/Z} = \exp[-\beta(U_j - U_i)] = \exp(-\beta \Delta U_{ij}) \tag{3.31}$$

qui est indépendante de Z .

Il y a plusieurs choix possibles pour les P_{ij} satisfaisant cette condition. Comme la condition $P_{ij} \in [0, 1]$, le choix de Metropolis est le suivant :

Si : $\rho_j < \rho_i$, $P_{ij} = \frac{\rho_j}{\rho_i}$ et $P_{ji} = 1$

$$\Pi_{ij} = \alpha_{ij} \frac{\rho_j}{\rho_i} \text{ et } \Pi_{ji} = \alpha_{ji} = \alpha_{ij} \quad (3.32)$$

Si : $\rho_j \geq \rho_i$, $P_{ij} = 1$ et $P_{ji} = \frac{\rho_i}{\rho_j}$

$$\Pi_{ij} = \alpha_{ij} = \alpha_{ji} \text{ et } \Pi_{ji} = \alpha_{ji} \frac{\rho_i}{\rho_j} \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned} P_{ii} &= 1 \\ \sum_j \Pi_{ij} &= \Pi_{ii} + \sum_{j \neq i} \Pi_{ij} = 1 \\ P_{ii} &= 1 - \sum_{j \neq i} \Pi_{ij} \end{aligned}$$

le système peut rester dans un même état i .

Vérifions que le choix de Metropolis (3.32) et (3.33) vérifie la condition de microréversibilité $\rho_i \pi_{ij} = \rho_j \pi_{ji}$.

1^{ier} cas :

• $\rho_j > \rho_i$

$$\Pi_{ij} = \alpha_{ij}, \quad \rho_i \Pi_{ij} = \rho_i \alpha_{ij}$$

• $\rho_i < \rho_j$

$$\Pi_{ji} = \alpha_{ji} \frac{\rho_i}{\rho_j}, \quad \rho_j \Pi_{ji} = \rho_i \alpha_{ij}$$

et donc :

$$\rho_i \Pi_{ij} = \rho_j \Pi_{ji} \quad (3.34)$$

2^{ime} cas :

• $\rho_i > \rho_j$

$$\Pi_{ji} = \alpha_{ji}, \quad \rho_j \Pi_{ji} = \rho_j \alpha_{ji}$$

• $\rho_j < \rho_i$

$$\Pi_{ij} = \alpha_{ij} \frac{\rho_j}{\rho_i}, \quad \rho_j \Pi_{ij} = \rho_j \alpha_{ji}$$

soit :

$$\rho_i \Pi_{ij} = \rho_j \Pi_{ji} \quad (3.35)$$

3^{ime} cas :

• $\rho_j = \rho_i$

$$\Pi_{ij} = \alpha_{ij}, \quad \rho_i \Pi_{ij} = \rho_i \alpha_{ji}$$

• $\rho_i = \rho_j$

$$\Pi_{ji} = \alpha_{ji}, \quad \rho_j \Pi_{ji} = \rho_i \alpha_{ji}$$

soit :

$$\rho_i \Pi_{ij} = \rho_j \Pi_{ji} \tag{3.36}$$

La symétrie de la matrice α vérifie bien la condition de microréversibilité. Ce qui offre un choix multiple des déplacement de i vers j [49].

b- Algorithme de Metropolis

Pour optimiser le nombre de déplacements de l'état i (ancien) vers l'état j (nouveau), Metropolis a proposé l'algorithme suivant :

Lorsque $U_j(\text{nouveau}) > U_j(\text{ancien})$, pour décider d'accepter ou de refuser la nouvelle configuration on calcule :

$$P_{ij} = \frac{\rho_j}{\rho_i} = \exp[-\beta(U_j - U_i)] \tag{3.37}$$

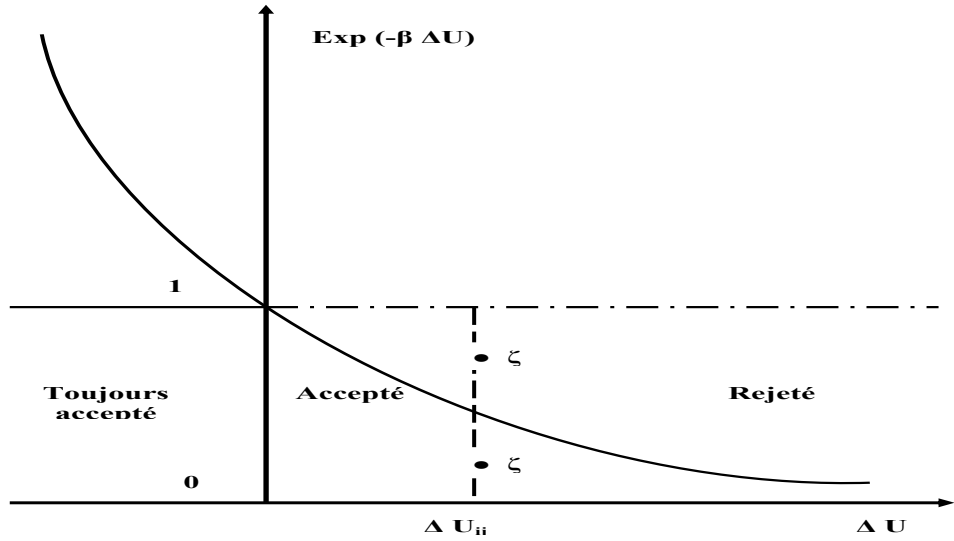


FIGURE 3.2 – Principe de base de la méthode Metropolis [49].

Une configuration donnée (3.2) est définie par un ensemble de coordonnées de position (r^i aléatoire) pour l'ensemble de particules $i = 1, \dots, N$

En se donnant un déplacement aléatoire généré par un nombre aléatoire donné tel que :

$$\delta_{old} = (1 - 2\xi)\delta \quad (3.38)$$

où δ est un déplacement identique pour toutes les particules. ξ est un nombre aléatoire variant de 0 à 1 suivant une distribution uniforme. L'écriture (3.38) assure un déplacement pour chaque particule appartenant au domaine $[-\delta, +\delta]$.

Les nouvelles coordonnées des particules sont donc calculées à partir de la formule :

$$r_{new}^i = r_{old}^i + (1 + 2\xi)\delta \quad (3.39)$$

L'efficacité de la méthode lors de la programmation, dépend essentiellement du choix du générateur des nombres aléatoires.

Une fois la nouvelle configuration calculée, deux possibilités se présentent :

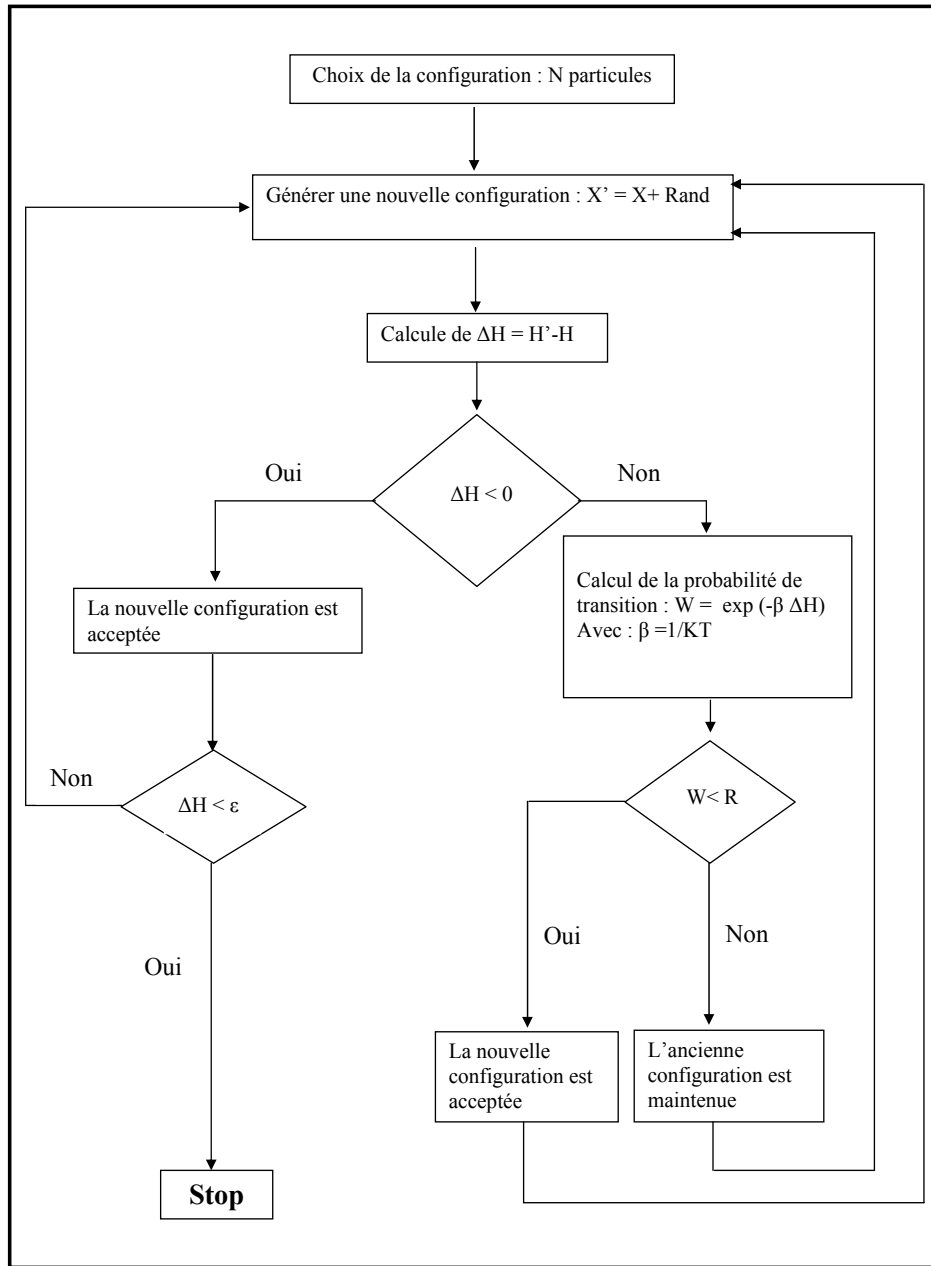
1. $U(r_{new}^i) < U(r_{old}^i)$ le déplacement est accepté et la nouvelle configuration devient l'ancienne

2. $U(r_{new}^i) > U(r_{old}^i)$ on se donne un nombre aléatoire R . Si $\exp(-\beta|\Delta U|) < R$ ($\Delta U = |U_{new} - U_{old}|$), la nouvelle configuration est acceptée, sinon on maintient l'ancienne et on calcule une nouvelle.

Le procédé est réitéré jusqu'à atteindre le minimum d'énergie.

La figure (3.3) illustre l'organigramme de l'algorithme de Metropolis utilisé pour la recherche de la configuration d'équilibre d'un système unidimensionnel à N particules identiques [49].

Dans un solide, les atomes vibrent autour de leurs positions d'équilibre. Les configurations successives décrivent alors les mouvement réels des atomes en fonction du temps. La méthode de MC permet de retrouver les différentes positions des atomes par rapport à leurs positions d'équilibres dans la configurations de la chaîne de Markov, mais générées dans un ordre différent. Les états successifs ne sont pas corrélés temporairement. L'ordre dans lequel on obtient les états de la chaîne de Markov n'a aucune signification physique.



50

FIGURE 3.3 – Organigramme de la méthode de Monte-Carlo.

3.4 Résultats et discussion

Nous avons utilisé la méthode de Monte-Carlo pour déterminer les configurations d'équilibre à basses températures. En utilisant le programme du générateur des nombres aléatoires, des positions aléatoires sont attribuées à un nombre limité de particules dans une partie de la chaîne, qui constituent les configurations de base (Fig.3.4(a)). On se limite à cette partie car ces configurations se répètent de façon périodique. Afin d'éviter les états métastables, la technique d'annihilation est utilisée [45]. Les particules sont chauffées jusqu'à une certaine température puis refroidies jusqu'à la température souhaitée. De cette façon aucun grain supplémentaire d'énergie n'est enregistré. Le choix de la longueur de la cellule dépend directement du nombre de particules. Cette caractéristique a rendu la tâche difficile pour atteindre l'équilibre. Sachant que la longueur de la cellule de base est $L = N\Delta$, notre problème consiste à déterminer Δ . Ce qui constitue une difficulté supplémentaire en terme de programmation. Pour remédier à cette difficulté, une boucle additive faisant varier la longueur est incorporé dans le programme. Cette approche a permis de trouver le résultat recherché au détriment d'un temps de calcul très long. Le critère d'arrêt du code numérique correspond à des configurations d'équilibre pour lesquelles l'énergie totale du système est minimale (Fig.3.4(b)), comme le montre la figure (3.5). En faisant varier le nombre de particules N (de 2 à 30) dans la cellule de simulation, la variation de l'inter distance en fonction de N est alors obtenue (TAB.3.1) et (Fig.3.6) [43].

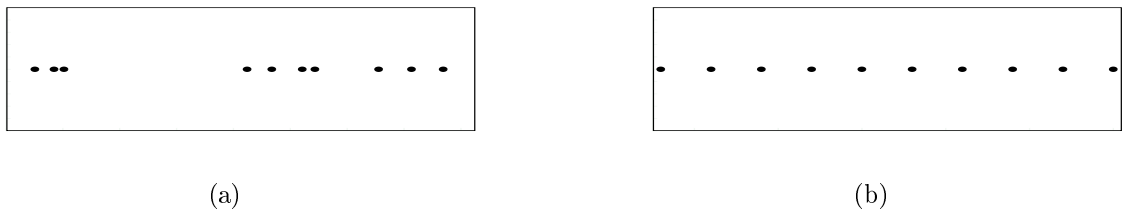


FIGURE 3.4 – Configuration initiale (a) et configuration d'équilibre (b); obtenues après simulation MC.

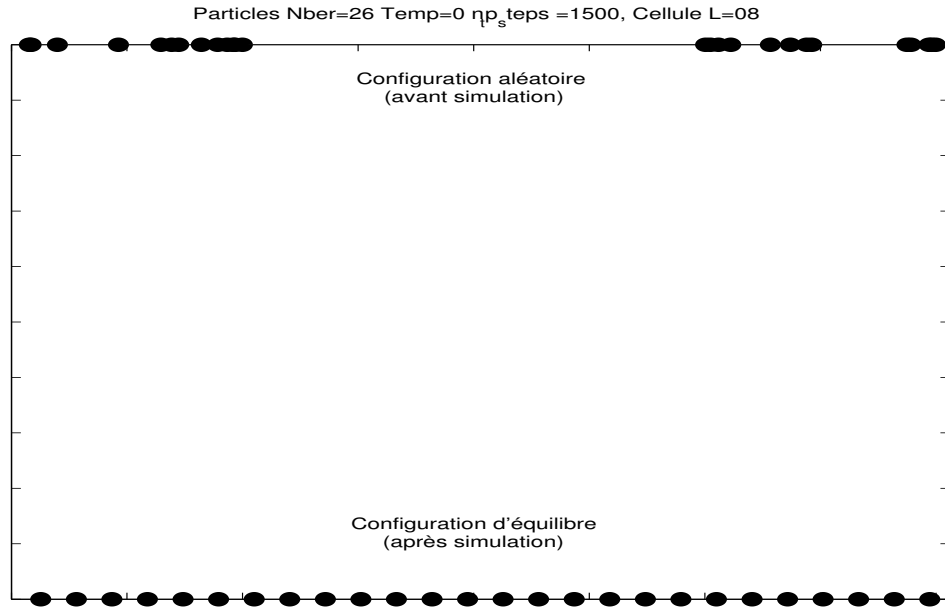


FIGURE 3.5 – Configurations aléatoire et d'équilibre obtenues avec la méthode de Monte-Carlo.

longueur de la cellule(mm)	Itérations	Nombre de particules	Inter distance(mm)
04	500	02	0.675
04	500	04	0.250
04	500	06	0.175
04	500	08	0.125
04	500	10	0.100
04	500	12	0.085
04	500	14	0.070
04	500	16	0.060
06	1000	18	0.053
06	1500	20	0.045
06	1500	22	0.040
06	1500	24	0.035
08	1500	26	0.033
08	1500	28	0.030
08	1500	30	0.030
08	2000	32	0.030

TABLE 3.1 – Valeurs de l'inter-distance normalisée Δ pour un nombre N dans la cellule.

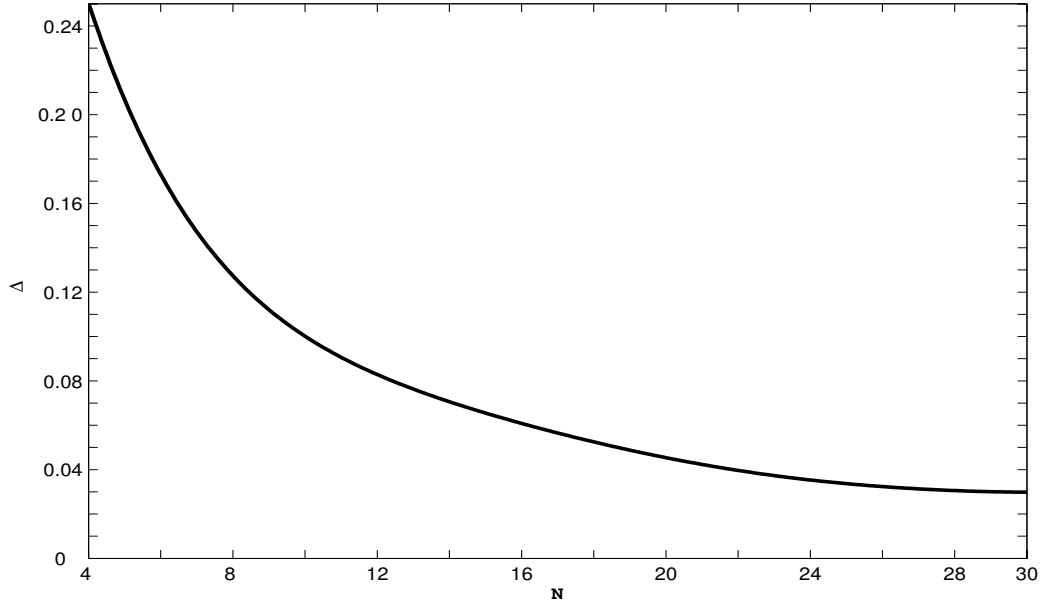


FIGURE 3.6 – Variation de l’inter-distance normalisée Δ en fonction du nombre de particules N .

La figure (3.6) représente la variation de l’inter-distance normalisée Δ en fonction du nombre de particule N dans la cellule de base. Dans l’ensemble, la courbe reproduit un résultat bien connu d’une chaîne linéaire. La variation de Δ suit une loi en $1/N$. Cependant dans ce travail on s’intéresse au nombre de particules ayant une contribution significative pour le type d’interaction choisi. Lorsque le nombre de particules est petit, Δ subit une variation importante, par conséquent le nombre des proches voisins pris en considération doit être plus important. Lorsque N atteint une valeur critique $N_c = 28$, l’inter-distance tend vers une valeur limite. Au delà de N_c , la contribution des autres particules n’a aucun effet. Ce résultat dépend essentiellement de la modélisation de l’interaction entre particules [43]. Le résultat obtenu par simulation Monte-Carlo confirme cette valeur de N_c utilisée dans l’expérience réalisée par Liu *et al* figure (3.7). En étudiant les modes optiques transversaux dans une chaîne linéaire avec un potentiel d’interaction de type Yukawa [42].

Le paramètre $K = \Delta/\lambda_D$ est obtenu à partir de la valeur de λ_D calculée et les valeurs de Δ représentées dans le tableau(3.2)

La connaissance de l’inter-distance et du paramètre de l’effet d’écran, ont permis d’étudier la relation de dispersion.

Les courbes de dispersion des deux modes (DAW) et (DLW) sont tracés pour quatre valeurs de N (Fig.3.8(a))(Fig.3.8(b)). Ces variations montrent que le mode

(DAW) subit des variations plus importantes lorsque N augmente jusqu'à atteindre une valeur limite pour une valeur critique de N . Ce mode résulte d'un gradient de pression du milieu plasma. Lorsque la portée de l'interaction atteint sa limite (distance de coupure), la contribution de toutes les particules n'a aucun effet sur le profil des variations de ω . Quant aux modes (DLW), il est le résultat des effets collectifs des particules en interaction et qui sont le siège de l'effet d'écran.. Le nombre de particules dans la cellule de base n'affecte pas le profil de ω . En effet la figure (3.8(a)) montre que ω atteint une valeur asymptotique au voisinage de $k = 0.5$. Néanmoins la valeur maximale dépend du nombre de particules pour $N < N_c$.

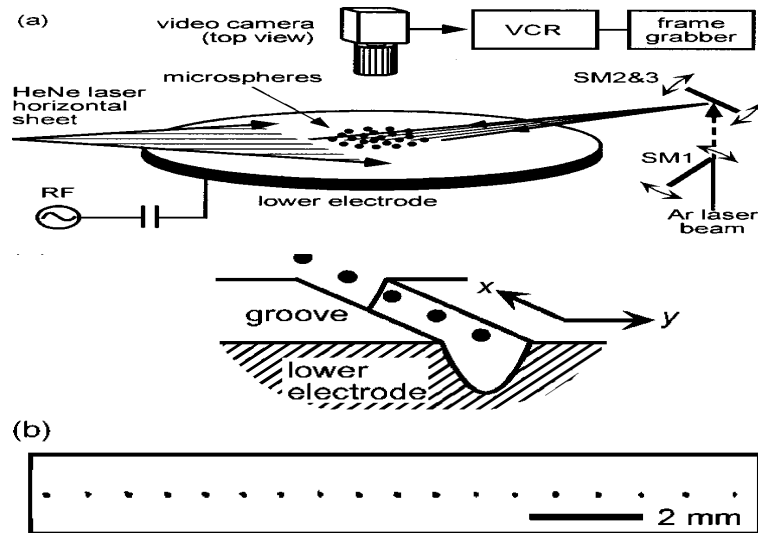
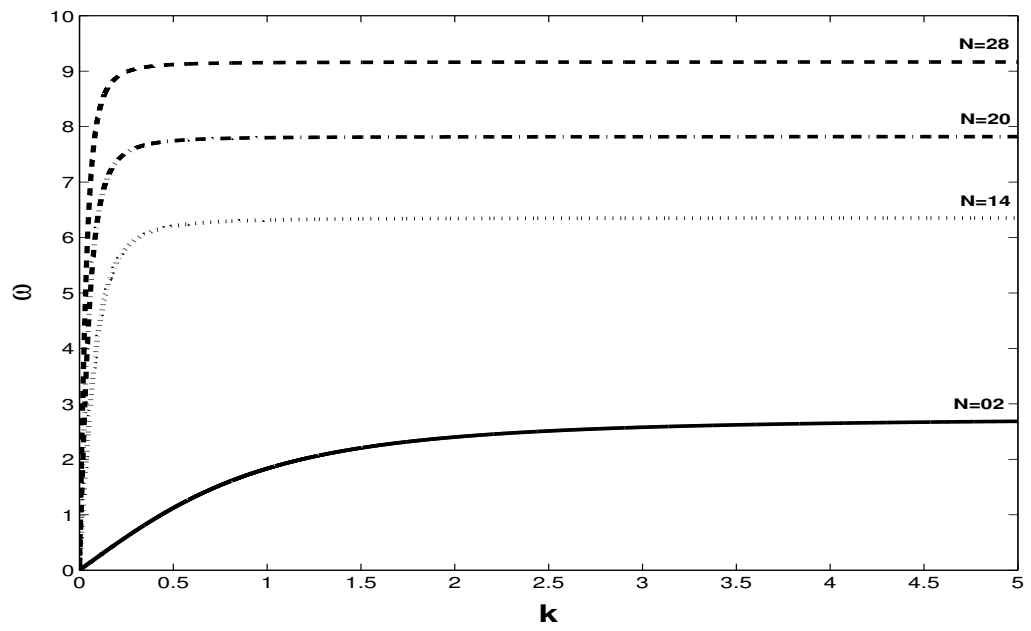
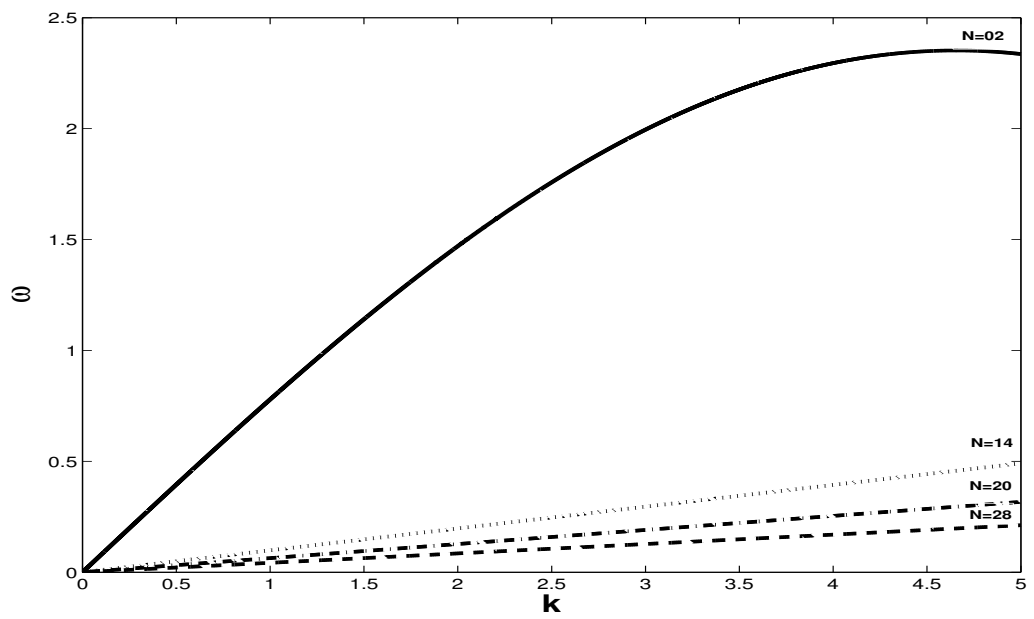


FIGURE 3.7 – Expérience de Liu [42].



(a)



(b)

FIGURE 3.8 – Courbes de dispersions $\omega = f(k)$ des DAW (a) et DLW (b), pour $N=02, 14, 20$ et 28 [43].

Nombre de particules(N)	Inter- distance (Δ mm)	Paramètre $K = \Delta/\lambda_D$
02	0.675	1.120
04	0.250	0.410
06	0.175	0.290
08	0.125	0.200
10	0.100	0.160
12	0.085	0.140
14	0.070	0.110
16	0.060	0.100
18	0.053	0.080
20	0.045	0.070
22	0.040	0.060
24	0.035	0.058
26	0.033	0.055
28	0.030	0.050
30	0.030	0.050
32	0.030	0.050

TABLE 3.2 – Valeurs numériques du paramètre K .

3.5 Effet de la présence d'un gaz sur les modes de vibration

3.5.1 Système entretenu

Un plasma poussiéreux est un système entretenu dont l'existence dépend d'un apport permanent de particules chargées ou neutres. Par leur inertie, les grains de poussière attachent des charges à leurs surfaces. On peut aussi observer des charges libres. Lorsque les courants qui arrivent au niveau de la surface sont égaux à ceux qui quittent cette dernière, on a un équilibre de charge qui s'établit. Cette situation est réalisée, en injectant de façon permanente des particules neutres ou chargées pour compenser les pertes. En présence d'un gaz autour de chaque grain de poussière, les mouvements oscillatoires subissent un freinage qui dépend des caractéristiques du gaz. La longueur caractéristique de cet amortissement est $\sim c/\nu$, où ν est la fréquence de cette force de friction (amortissement) [50].

3.5.2 Effet de la friction sur la dispersion

Pour un système conservatif, les racines de l'équation de dispersion $L(\omega, k)=0$ n'ont pas une partie imaginaire. Par contre, pour les systèmes non conservatifs, lors des oscillations il y a dissipation de l'énergie. Dans le cas d'une chaîne linéaire

formée de grains de poussière, les pertes d'énergie peuvent être causées par un flux de particules, un gradient de température ou un gradient de charge.

Nous avons considéré la situation où le temps caractéristique de la fluctuation de la charge est très petit par rapport au temps caractéristique des modes de vibration. La charge de chaque grain est prise constante, égale à une valeur moyenne. La présence des particules autour de chaque grain affecte son mouvement oscillatoire. En prenant en considération cet effet dans l'équation de mouvement, un terme proportionnel à ν est ajouté.

$$\frac{d^2x_i}{dt^2} + \nu \frac{dx_i}{dt} = \frac{q}{m}(x_i, t) \quad (3.40)$$

L'équation (3.40) s'écrit avec un potentiel de Yukawa :

$$\frac{d^2x_i}{dt^2} + \nu \frac{dx_i}{dt} = \sum_{l \neq i} \left(\frac{1 + K|x_i - x_l|}{|x_i - x_l|^2} \right) \exp(-K|x_i - x_l|) \quad (3.41)$$

En écrivant $\omega = \omega_r + i\omega_i$ et suivant les mêmes étapes de calcul dans le cas $\nu = 0$, l'expression de la relation de dispersion pour les ondes de réseaux (DLW) est alors obtenue :

$$\omega(\omega + j\nu) = 2 \exp(-K)(1 + K)4 \sin^2 \left(\frac{k\Delta}{2} \right) \quad (3.42)$$

Dans ce cas, le vecteur d'onde a une partie réelle et une partie imaginaire $k = k_r + jk_i$

$$k_{DLW} = 2 \arcsin \left(\frac{\omega(\omega + j\nu)}{8 \exp(-K)(1 + K)} \right)^{1/2} \quad (3.43)$$

Pour les ondes acoustiques (DAW), la relation de dispersion en présence du terme de friction, est calculée à partir de l'équation (3.15)

$$\omega(\omega + j\nu) = 4(1 + K) \left[\frac{k^2}{K(K^2 + k^2)} \right] \quad (3.44)$$

$$k^2 4(1 + K) = \omega(\omega + i\nu)(K(K^2 + k^2))$$

$$k^2 = \frac{\omega(\omega + j\nu)K^3}{4(1 + K) - K\omega(\omega + j\nu)}$$

$$k_{DAW} = \left[\frac{\omega(\omega + j\nu)K^3}{4(1 + K) - K\omega(\omega + j\nu)} \right]^{1/2} \quad (3.45)$$

3.5.2.1 Valeur numérique de ν

Dans les chambres à décharge, la fréquence de friction s'exprime en fonction de la pression P du gaz dans lequel les grains sont immergés, elle est donnée par :

$$\nu = \frac{C_v P}{a \rho} \quad (3.46)$$

Où :

- C_v : chaleur spécifique (à la température ambiante 300 K).
- a : rayon du grain en (micro-mètre).
- P : pression du gaz (en Torr).
- ρ : masse volumique des grains (en $g.cm^{-3}$).
- m_d : masse du grain (en g).

En introduisant la masse volumique $\rho = m/V$ et le volume des grains $V = 4\pi a^3/3$ dans (3.46), on obtient :

$$\nu = \frac{4\pi C_v P a^2}{3m}$$

A partir des données expérimentales des travaux de O.S. Vaulina [51][52], on prend :

- $C_v(\text{néon}) = 600 (J.K^{-1})$.
- $C_v(\text{argon}) = 820 (J.K^{-1})$.
- Taille des grains (rayon) : 1 – 30 (micro-mètre).
- Pression du gaz : 1 – 100 Pa, avec ($1Pa = 7,5006.10^{-3}$ Torr).
- Densités n_e, n_i : $10^7 - 10^{10} cm^{-3}$.
- Température électrons : 1 – 5 eV.
- Température ions et atomes neutres : 0.03 eV.
- $m_d = 1.6 \times 10^{-12} g$.

On obtient :

$$\nu = 1,178.10^4 s^{-1}$$

3.5.3 Résultats et discussion

En présence de la friction, il est plus facile d'étudier la relation de dispersion $k = f(\omega)$. Les parties réelle et imaginaire peuvent être obtenues directement à partir des relations (3.43) et (3.45). Les courbes de dispersion sont tracées en remplaçant la valeur de ν déjà calculée ($\nu = 1,178.10^4 s^{-1}$).

Les variations des parties réelles et imaginaires de k sont représentées par les figures (3.9), (3.10), (3.11) et (3.12). Ces variations montrent que le mode (DAW)

disparaît lorsque le nombre de particules est supérieur à 2, à cause d'un amortissement important de ce mode. Pour le mode (DLW), valeur palier de la partie imaginaire de k (facteur d'atténuation) diminue avec le nombre de particules N comme le montre la figure(3.13). Le mode (DLW) ne s'amortie pas totalement, il résiste à la friction grâce à son aspect d'origine collectif.

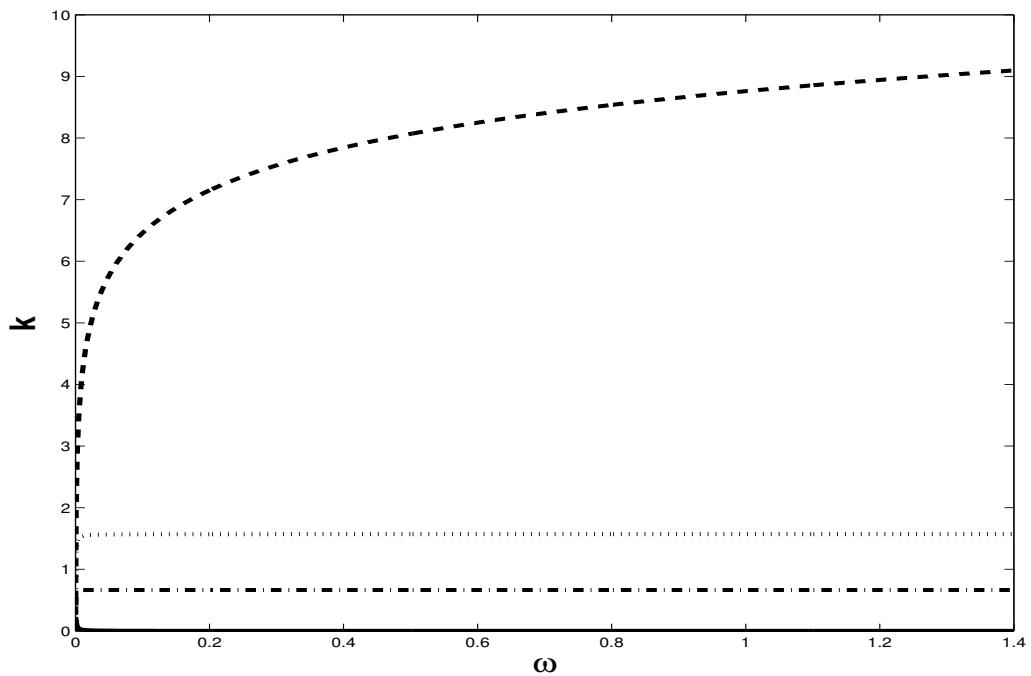


FIGURE 3.9 – Courbes de dispersion, $k=f(\omega)$ (---) k_i (DLW), (....) k_r (DLW), (-.-.-) k_i (DAW) et (—) k_r (DAW) pour $N=02$ [43].

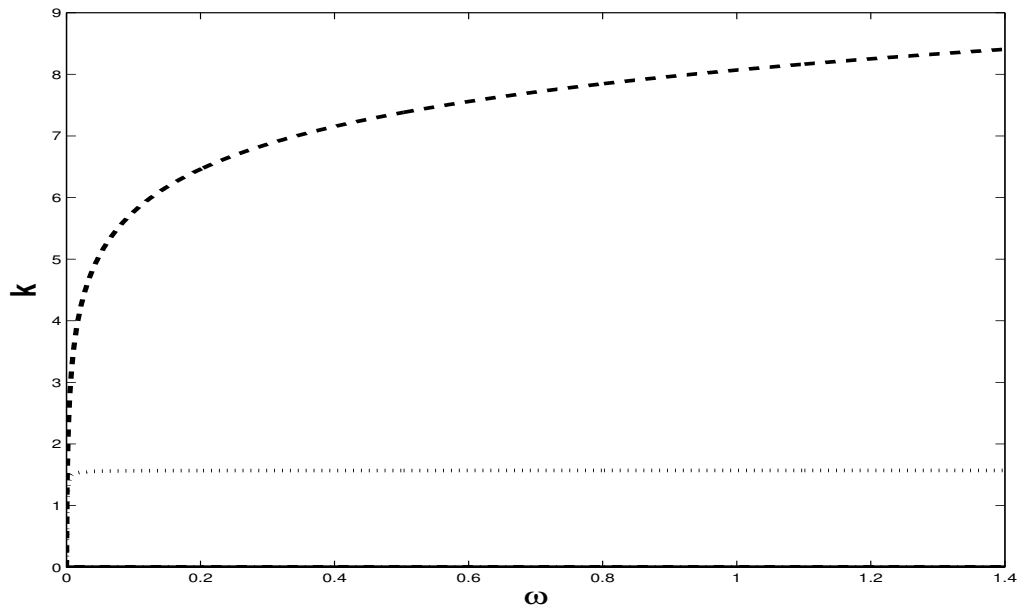


FIGURE 3.10 – Courbes de dispersion, $k=f(\omega)$ (---) k_i (DLW), (. . . .) k_r (DLW), (-. -. -.) k_i (DAW) et (—) k_r (DAW) pour $N=14$ [43].

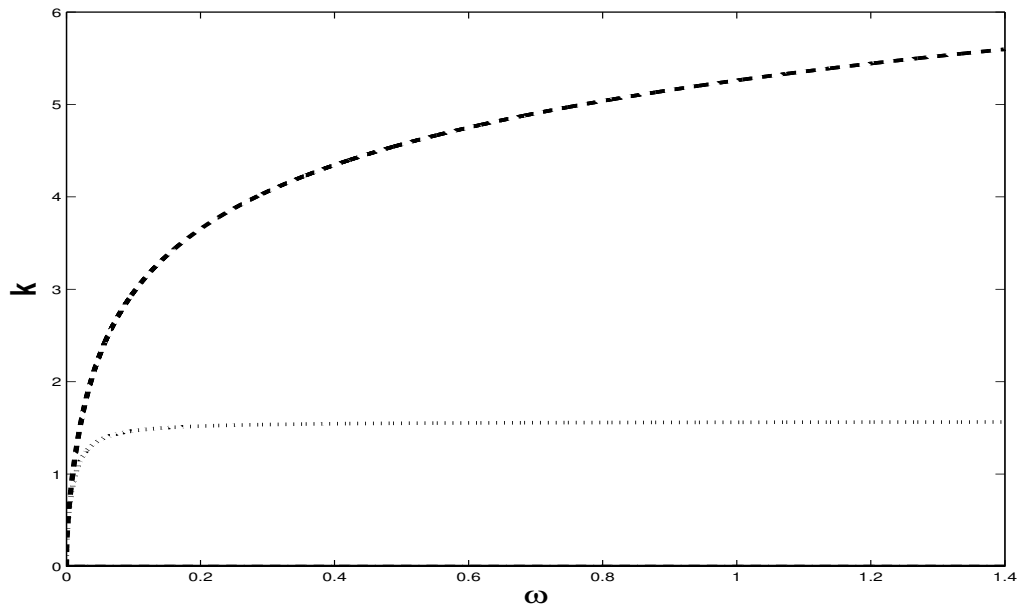


FIGURE 3.11 – Courbes de dispersion, $k=f(\omega)$ (---) k_i (DLW), (. . . .) k_r (DLW), (-. -. -.) k_i (DAW) et (—) k_r (DAW) pour $N=20$ [43].

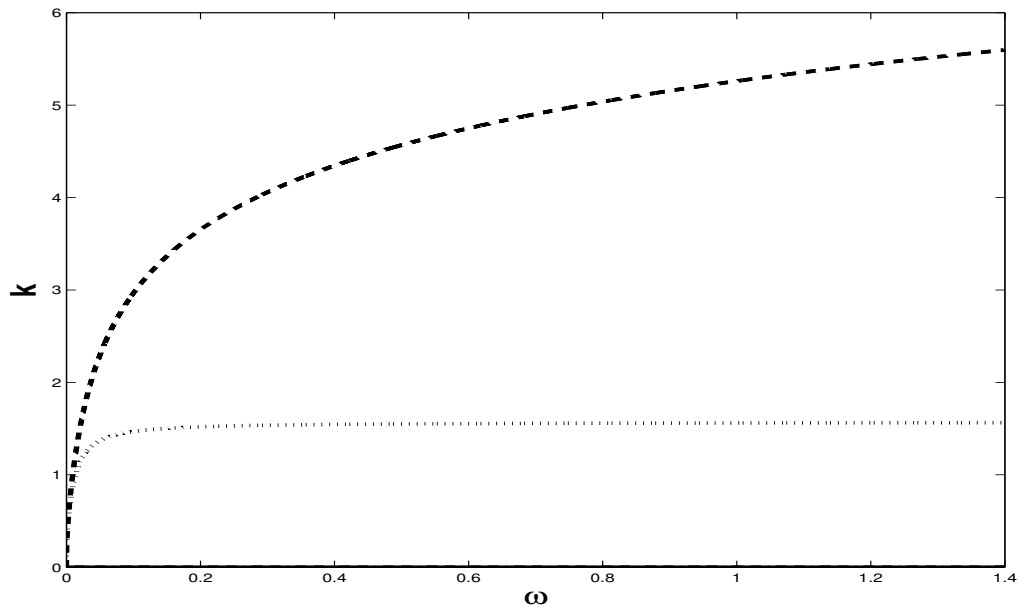


FIGURE 3.12 – Courbes de dispersion, $k=f(\omega)$ (---) k_i (DLW), (. . . .) k_r (DLW), (-. -. -.) k_i (DAW) et (—) k_r (DAW) pour $N=28$ [43].

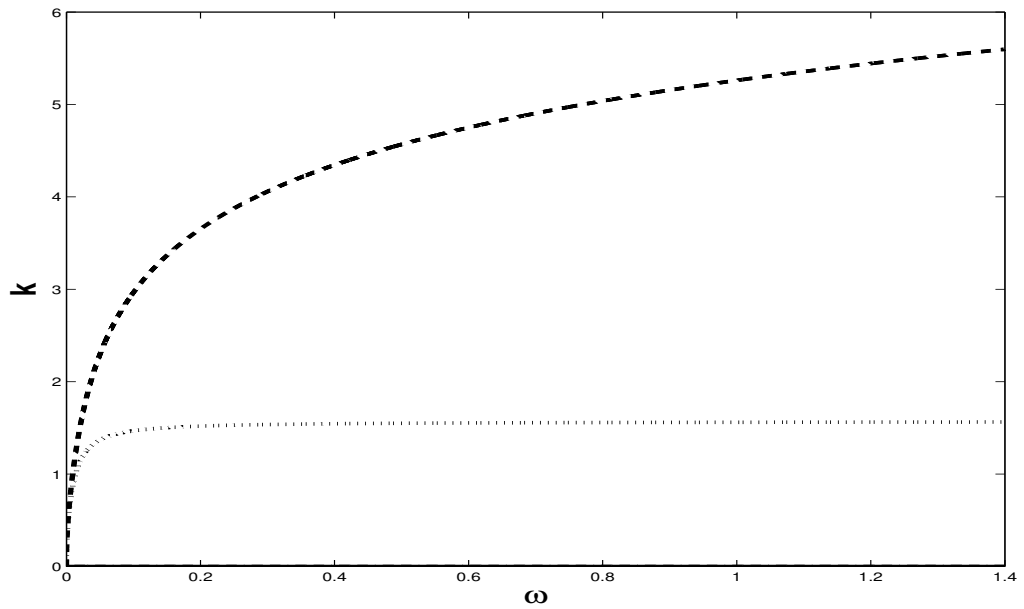


FIGURE 3.13 – Variation de $k_i(DLW)$ en fonction de N [43].

3.6 Conclusion

Dans cette étude, nous nous sommes intéressés à une chaîne linéaire formée de particules chargées et identiques. Ces dernières sont susceptibles de porter des charges considérables, positives ou négatives, qui assurent une forte interaction et donc une structure fortement couplée. En présence de grains de poussière, un gaz de particules chargées est nécessaire pour entretenir le plasma. De ce fait, nous avons modélisé le potentiel d'interaction par un potentiel de type Yukawa. L'effet d'écran est ainsi pris en considération.

La première étape consiste à déterminer les configurations d'équilibres caractérisées par l'inter-distance entre les particules. Pour cela, nous avons fait appel à la méthode de Monte-Carlo, qui se base sur l'algorithme de Metropolis. Comme la chaîne linéaire est considérée infinie, lors de la simulation nous avons fait appel aux conditions aux limites. Une cellule de base est choisie pour être reproduite périodiquement. Ainsi appliquée, la méthode de Monte-Carlo abouti à des états métastables. Les états métastables, qui caractérisent un équilibre local, ont été contournés par la technique d'annihilation. Le système est chauffé progressivement puis refroidi jusqu'à la température requise. Une telle méthode augmente le temps de calcul mais assure, après un certain nombre d'itérations, la convergence vers l'équilibre global. La convergence a lieu lorsque le minimum d'énergie est atteint.

Nous avons montré que l'inter-distance de la configuration d'équilibre dépend essentiellement du nombre de particules dans la cellule de base ainsi que de sa longueur. Le potentiel agissant sur une particule résulte alors de la contribution d'un nombre fini de particules dans la cellule. Ce nombre correspond à $N = 28$. Ce résultat a été déjà utilisée sans justification dans des travaux expérimentaux.

En utilisant les résultats des inter-distances obtenus, nous avons étudié les modes DAW (dust acoustic wave) et de DLW (dust lattice wave) pour une chaîne linéaire de grains de poussière chargés positivement. Nous avons tracés les relations de dispersion, en fonction du nombre d'onde, pour différentes valeurs du nombre de particule dans la cellule de base. On a remarqué que le mode DLW subit les variations les plus importantes dans le profil, lorsque le nombre de particules varie, quant au mode DAW, le profil dans l'ensemble est le même, c'est la valeur limite qui change. Ces résultats s'expliquent par la nature des modes. Le mode acoustique résulte d'un gradient de pression du milieu plasma, par contre le mode de réseau est la conséquence des effets collectifs des particules en interaction. D'ailleurs on a remarqué que l'écart est très grand entre $N = 2$ et $N > 2$. En prenant uniquement les deux premiers proches voisins dans l'interaction, l'erreur commise

dans le calcul du potentiel est très importante. Un autre résultat remarquable, l'existence des modes DLW pour $N > 2$, il n'est possible que si $k > 0.5$.

Compte tenu du fait que le plasma poussiéreux est un système entretenu, l'injection d'autres particules se manifeste par une force de friction sur chaque grain de poussière. Le cas où cet effet est dû à la présence d'un gaz sous pression dans une chambre à décharge a été traité. En prenant en considération cet effet, l'investigation a montré que le mode (DAW) disparaît lorsque le nombre de particules est supérieur à 2. Ceci est dû à l'amortissement important du mouvement de chaque particule autour de sa position d'équilibre. Par contre, l'amplitude du mode DLW diminue lorsque le nombre de particules augmente, le mode (DLW) ne s'amortit pas totalement, il résiste à la friction grâce à son aspect d'origine collectif.

La méthode Monte-Carlo a permis d'étudier des phénomènes physiques qui ne dépendent pas explicitement du temps. Lorsque la fluctuation de la charge est prise en compte, le temps est une variable caractéristique. Le problème peut être résolu par la Dynamique Moléculaire. D'autre part, le potentiel de Yukawa n'est pas le seul potentiel possible pour modéliser les structures fortement couplées. On peut penser à d'autres types de potentiel qui correspondent à certaines situations physiques réelles.

Chapitre 4

Étude de l'effet du type d'interaction sur les modes de vibration.

Les systèmes plasmas fortement couplés sont omniprésents dans la nature comme dans les naines blanches, quark gluon de plasma, matière fortement corrélée et dans l'intérieur des étoiles compactes [53]. Dans les laboratoires, les développements récents donnent lieu à des matières fortement couplées à des densités d'énergies très élevées [54]. A basses températures, ces systèmes sont observés dans les métaux de plasma très denses. Dans les plasmas neutres produits par Laser, les régimes fortement couplés sont observés dans des conditions ultra-froides [55][56][57]. La forte corrélation entre la collections des ions piégés conduit à une phase de transition qui peut être représentée par l'analyse des modes normaux d'oscillations. La petite taille du plasma trouve ses modes d'ordre inférieur excités avec une fréquence dépendante de la forme du plasma. Ainsi, ces modes fournissent un outil de diagnostic efficace par la mesure des décalages et de l'amortissement de la fréquence [58]. Lorsque les modes sont de courte longueur d'onde, le plasma peut être perdu en raison de l'implication des modes de transport dans le processus, tel que l'appauvrissement de la densité qui peut être observée directement. La charge dans le cas d'une densité équilibrée décale la fréquence du mode de vibration [59].

Dans les systèmes de plasmas fortement couplés, les colloïdes comprennent des particules mésoscopiques qui peuvent être très chargées dans un solvant liquide lorsque de nombreux corps plasmas complexes sont caractérisés par une interaction efficace avec le fort couplage entre les particules de grandes tailles [56]. Un état cristallin peut être atteint par trois processus différents, à savoir l'abaissement de la température, l'augmentation de la densité des particules ou en ayant de charge très élevée. Ce dernier est facilement réalisable avec des grains de poussière de taille allant de sous-microns au micromètre. La charge peut être de l'ordre de 10^4

fois la charge élémentaire. Une telle charge très élevée provoque des phénomènes nouveaux dans le plasma et elle a un effet direct sur l'interaction entre grains de poussière [60].

À basses températures, des amas de grains de poussières sont soumis à des excitations qui provoquent des oscillations de particules autour des minimums locaux du potentiel, et qui donnent lieu à des modes normaux. Ces derniers, à faibles excitations, déterminent la dynamique, le transport et les propriétés de fusion des systèmes finis fortement couplés [61]. L'étude des oscillations verticales et horizontales dans la gaine de la décharge a montré que les propriétés des cristaux plasmas tels que la force d'écrantage et de l'interaction entre grains de poussière peuvent être obtenus à partir de la mesure des propriétés de résonance [62]. Pour un système Yukawa, la présence du milieu plasma est responsable du couplage des modes résultants de l'effet de sillage d'ions. Le couplage des modes peut conduire à la résonance provoquant l'instabilité dans les cristal de plasma [63]. Les instabilités de couplage offrent un scénario pour la fusion dans le cristal de plasma [64]. Un cristal de plasma à deux dimensions est également soumis à des ondes harmoniques longitudinales générées lorsque le mode fondamental avait suffisamment des amplitudes grandes. L'interaction entre les modes transversaux et longitudinaux des grains de poussière (DL) peut conduire à des modes d'instabilité dans une chaîne mono-couche horizontale[65]. Les paires, de particules de poussière, verticales ont montré deux types d'instabilités tandis qu'une seule est observée dans la paire horizontale, lorsque les paramètres de confinement ont changé [66][67]. Les simulations numériques sur un réseau hexagonal de grains de poussière à deux dimensions ont montré que l'excitation extérieur des modes est fortement amortie [68].

Cette partie de travail est consacrée à l'analyse théorique de l'effet du type d'interaction entre les grains de poussières sur la propagation des ondes non linéaires dans les cristaux hexagonaux à deux dimensions (2D). Pour ce faire, nous considérons un ensemble de particules de poussière chargées négativement, qui interagissent entre elles à travers deux types de potentiels, Coulombien et Yukawa.

4.1 Modélisation

La situation physique correspond à un cristal hexagonal bidimensionnel (supposée infinie, pour plus de simplicité), composé de grains de poussière de charge négative de masse M constante et de charge constante ($Q = -Ze$), e étant la

charge élémentaire. Les particules mono-disperse, de la cellule élémentaire, sont situées dans des sites équidistants a . L'étude est menée à de très basses températures, où l'énergie potentielle domine l'énergie cinétique, soit $\Gamma \gg 1$, où Γ est le paramètre de couplage,

$$\Gamma = Q^2/4\pi\epsilon_0ak_B T \quad (4.1)$$

Ici ; k_B est la constante de Boltzmann, T la température des grains de poussière (Dust), et $a = (1/\pi n)^{1/2}$ est le rayon de Wigner-Seitz (il caractérise l'espace inter-grains). n est le nombre de densité des grains de poussière.

Communément, pour les systèmes fortement couplés, l'interaction est modélisée par différents types de potentiels : Coulombien, Yukawa et logarithmique [69][70]. Le type d'interaction joue un rôle important sur les systèmes fortement couplés en raison des caractéristiques de la force [71]. Dans le plasma poussiéreux, la force d'interaction peut varier d'attractive à répulsive et de la courte à longue portée. L'interaction Coulombienne caractérise une interaction de longue portée en prenant la contribution de toutes les particules du système fini, par contre, le potentiel de Yukawa a une distance maximale que l'on doit prendre en compte pour le calcul de la force. Ce dernier potentiel est utilisé pour des forces de courte portée, ce qui limite l'interaction entre les particules à un nombre restreint de la sphère de Debye.

Les paramètres du plasma, comme la densité et la température, régissent la longueur de Debye. Par exemple, en présence d'ions, les collisions avec les neutres peuvent se produire ; les variations du potentiel sont plus lentes que celles du potentiel de Yukawa classique. La transition de courte à longue portée est possible [72]. Par conséquent, le potentiel Coulombien est également un cas intéressant pour les systèmes poussiéreux fortement couplés.

Nous avons considéré la dynamique d'un crystal hexagonal bidimensionnel. Pour étudier la relation de dispersion pour les modes longitudinaux et transversaux, l'interaction est modélisée par deux différents types de potentiel ; Coulombien et Yukawa

$$U(r)_{Coulombien} = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0|r_i - r_j|} \quad (4.2)$$

$$U(r)_{Yukawa} = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0|r_i - r_j|} \exp\left(\frac{-|r_i - r_j|}{\lambda_D}\right) \quad (4.3)$$

Où Q est la charge des grains, ($|r_i - r_j|$) est la distance entre deux proches particules, et λ_D est le rayon de Debye pour les plasmas poussiéreux [72][69][73][74].

Pour les réseaux géométriques, nous avons utilisé le modèle dit de particules chaîne, permettant un mouvement en deux dimensions, dans le sens longitudinal (direction horizontale, le long de l'axe des x , un site donné est indiqué par l'indice n) et le sens transversal (direction verticale, le long de l'axe des y l'emplacement des sites est désignés par m).

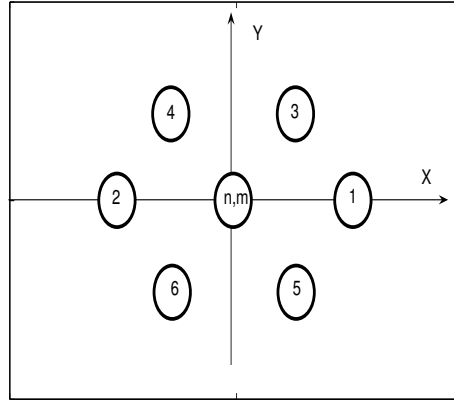


FIGURE 4.1 – Representation des six proches particules autour de la particule du centre $(0, 0)$ dans le réseau hexagonal.

La figure (4.1), nous montre les six particules plus proches du site (n, m) avec repère $(n + 1, m)$, $(n - 1, m)$, $(n + 1/2, m + \sqrt{3}/2)$, $(n - 1/2, m + \sqrt{3}/2)$, $(n + 1/2, m - \sqrt{3}/2)$ et $(n - 1/2, m - \sqrt{3}/2)$. Considérant que la particule sur le site (n, m) soit l'origine du plan, donc les positions des particules (Dust) à l'équilibre sont $(a, 0)$, $(-a, 0)$, $(a/2, \sqrt{3}a/2)$, $(-a/2, \sqrt{3}a/2)$, $(a/2, -\sqrt{3}a/2)$ et $(-a/2, -\sqrt{3}a/2)$ [74]. la figure (4.2) nous montre la cellule élémentaire du système hexagonal en présence du potentiel Coulombien et du potentiel de Yukawa, obtenue en utilisant la simulation numérique basée sur la méthode de Monte-Carlo [43]. Dans ce cas, nous avons deux différentes inter-distance a . On note que $a_{(Yukawa)}/a_{(Coulomb)} < 1$, ceci est un résultat attendu.

En utilisant le même potentiel de confinement, l'interaction Coulombienne qui est répulsive est faible, cela est dû à la présence des ions et des électrons dans le plasma. Ainsi que, les particules de poussière deviennent plus proches et la structure hexagonale est plus compact.

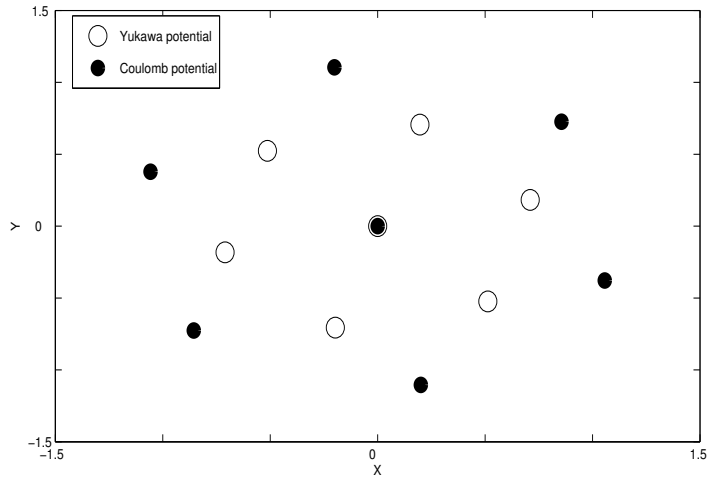


FIGURE 4.2 – La cellule élémentaire du système hexagonal en présence des interactions Coulombienne et Yukawa. Le potentiel de Yukawa montre une structure plus compacte [75].

4.1.1 Équation de mouvement

Rappelons d’abord quelques propriétés de base des modes dans le plasma complexe. Les modes résultants des oscillations du système dans le plan (x, y) produisant deux types de modes : longitudinal acoustique (LA) et transversal acoustique (TA), qui sont la signature de la déformation élastique du réseau [63].

En plus de ces modes, il existe aussi un troisième mode dit mode optique transversal. Pour un système infini toute particule est équivalente à une autre choisie, l’ensemble du système peut être construit en dupliquant la cellule élémentaire. Ce modèle est adapté pour étudier la dynamique des structures des grains de poussière. Dans l’approximation harmonique, les grains de poussière sont bornées par des interactions élastiques entre les plus proches voisins [76]. Chaque particule oscille autour de sa position d’équilibre avec de petits déplacements u_{nm} et v_{nm} suivant les directions x et y , respectivement. On note que la friction est négligée dans cette partie de travail.

Dans le réseau hexagonal il y a beaucoup de particules autour de la particule centrale (n, m) . Les forces entre deux particules dans les directions x et y sont :

$$(F_x)_{nm} = \sum_i -\frac{\partial U}{\partial r_i} \frac{\partial r_i}{\partial u_{nm}} \quad (4.4)$$

$$(F_y)_{nm} = \sum_i -\frac{\partial U}{\partial r_i} \frac{\partial r_i}{\partial v_{nm}} \quad (4.5)$$

Pour les premiers proches voisins l'interaction :

$$r_i = \sqrt{(a_{ix} + u_i - u_{nm})^2 + (a_{iy} + v_i - v_{nm})^2}$$

Où :

(a_{ix}, a_{iy}) est l'emplacement de la i_{eme} particule ;

(u_i, v_i) est le déplacement de i_{eme} particule de l'équilibre ;

(u_{nm}, v_{nm}) est le déplacement de la particule centrale dans le réseau hexagonal.

La force d'interaction électrostatique $F(r)$ exercée entre deux grains de poussières séparés par une distance r est dérivée du potentiel $U(r)$, $F(r) = -\partial U(r)/\partial r$ [77]. Nous élargissons l'énergie potentielle autour de l'équilibre à $r = a$. Pour les interaction de Yukawa et Coulombienne nous avons :

$$U(r) = U(a) + (r - a) \frac{\partial U}{\partial r} \Big|_a + \frac{1}{2} (r - a)^2 \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \Big|_a + \dots \quad (4.6)$$

En définissant la constante de rappel $G = (\partial^2 U(r)/\partial r^2)|_{r=a}$, et en supposant que l'énergie potentielle à l'équilibre est égale à zéro, nous avons

$$U(r) \cong \frac{1}{2} G (r - a)^2 \quad (4.7)$$

Nous avons calculé la constante G , pour les deux types d'interactions ; Coulombienne et de Yukawa ; les expressions correspondantes sont, respectivement ;

$$G1 = \frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} \Big|_{r=a} = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{2}{r^3} \right) \Big|_{r=a} \quad (4.8)$$

$$G2 = \frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} \Big|_{r=a} = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{2}{r^3} + \frac{2}{r^2\lambda_D} + \frac{1}{r\lambda_D^2} \right) \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) \Big|_{r=a} \quad (4.9)$$

À l'état d'équilibre où $r = a$, nous pouvons opérer un changement de variable $\kappa = a/\lambda_D$, que κ apparaît comme paramètre dans les deux équations de la constante de rappel dans l'objectif de donner un sens à la comparaison. Donc les expressions de G pour les potentiels Coulombien et Yukawa correspondent, respectivement, à :

$$G_1 = \frac{2Q^2}{4\pi\epsilon_0\lambda_D^3} \frac{1}{\kappa^3} \quad (4.10)$$

$$G_2 = \frac{2Q^2}{4\pi\epsilon_0\lambda_D^3} \frac{1 + \kappa + \frac{\kappa^2}{2}}{\kappa^3} \exp(-\kappa) \quad (4.11)$$

D'où, les constantes de rappel normalisées sont données par :

$$G'_1 = G_1 / \frac{2Q^2}{4\pi\epsilon_0\lambda_D^3} = \frac{1}{\kappa^3} \quad (4.12)$$

$$G'_2 = G_2 / \frac{2Q^2}{4\pi\epsilon_0\lambda_D^3} = \frac{1 + \kappa + \frac{\kappa^2}{2}}{\kappa^3} \exp(-\kappa) \quad (4.13)$$

Les constantes de rappel normalisées G'_1 and G'_2 sont tracées en fonction de κ dans la figure 4.3. Pour les grandes valeurs du paramètre κ , les deux constantes de rappel tendent vers zéro, tandis que pour les petites valeurs de κ , nous constatons $G'_1 > G'_2$. Nous notons que la deuxième dérivé des deux potentiels ne change pas de signe pour toutes les valeurs de κ . Ainsi, le cristal devient stable. Pour toutes les valeurs de $k \neq 0$, la constante de rappel de l'interaction de type Yukawa est plus petite que l'interaction Coulombienne. Ceci est provoqué par l'effet d'écrantage dû à la présence de milieu plasma autour de chaque grain de poussière [75].

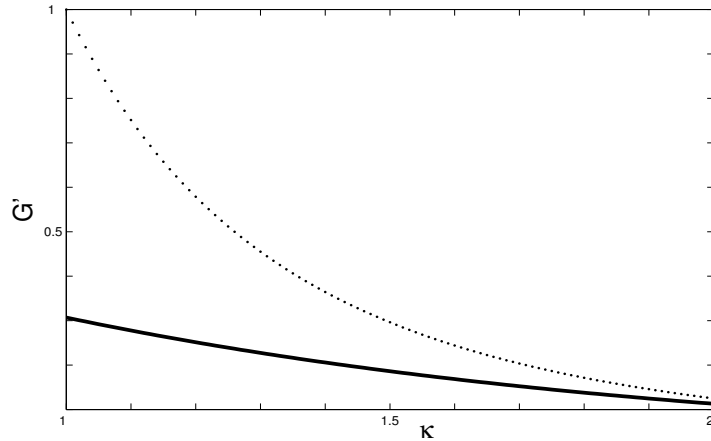


FIGURE 4.3 – Constante de rappel normalisée pour l'interaction Coulombienne (\cdots) et interaction de Yukawa ($—$) comme fonction de κ [75].

Pour des ondes de petites amplitudes ($\Delta u_j, \Delta v_j$) $\ll a$, la dynamique du système dans l'approximation harmonique est décrite par les équations de mouvements dans les directions x et y , respectivement :

$$M \frac{\partial^2 u_{nm}}{\partial t^2} = \sum_{i=-1}^{+1} G \cdot (u_{n+i,m} - u_{n,m}) \quad (4.14)$$

$$M \frac{\partial^2 v_{nm}}{\partial t^2} = \sum_{i=-1}^{+1} G \cdot (v_{n+i,m} - v_{n,m}) \quad (4.15)$$

Donc, la matrice dynamique du système est donnée par :

$$D_{uv}(\varphi, G) = -\frac{1}{M} \sum_i \frac{\partial^2 U(r_i)}{\partial r_{iu} \partial r_{iv}} (e^{ikr_i} - 1) \quad (4.16)$$

Les modes peuvent se propager le long d'une direction arbitraire, caractérisée par l'angle θ entre le vecteur d'onde k et la primitive du vecteur translation (de longueur de l'axe x), c-à-d, $k_x = k \cos \theta$ et $k_y = k \sin \theta$. Ainsi, deux directions indépendantes sont choisies : parallèle ($\theta = 0$) et perpendiculaire ($\theta = \pi/2$) à la primitive du vecteur translation du système hexagonal. La solution de l'équation de mouvement est donnée par la forme ondulatoire : $u_{n,m} = u_0 e^{i(kna - \omega t)}$ pour les ondes longitudinales et $v_{n,m} = v_0 e^{i(kma - \omega t)}$ pour les ondes transversales. Pour trouver les modes propres, on diagonalise la matrice dynamique, on écrit alors :

$$\|\Omega^2 I - D_{uv}(\varphi, G)\| = 0 \quad (4.17)$$

Où, $\Omega = \omega/\omega_0$ est une fréquence sans dimension pour un système hexagonal idéal, ω_0 est la fréquence caractéristique du réseau : $\omega_0 = (Q^2/4\pi\epsilon_0\lambda_D^3 M)^{1/2}$, $\varphi = ka$ et I est la matrice identité.

Les vitesses de groupe V_g correspondent à la première dérivée de la matrice dynamique $D_{uv}(\varphi, G)$ par rapport au vecteur d'onde k .

Les modes propageant des grains de poussière sont déterminés une fois que $\kappa = a/\lambda_D$ et θ est choisis. Les solutions exactes sont obtenues en fonction de Ω .

4.1.2 Résultats et discussion

Les relations de dispersion longitudinales (DLW) obtenues ci-dessus sont illustrées dans les figures (4.4) et (4.5) pour les deux types de potentiels d'interaction ; Coulombien et Yukawa, respectivement. La constante κ est choisie ($\kappa = 2.5$) pour mettre l'accent sur l'effet quantitatif de la polarisation des charges de la poussière [77]. Les ondes existent seulement pour des réseaux plans situés à nka avec $\exp(ika)$ comme une phase entre deux plans. La limite des solutions des ondes progressives sont indépendantes de tout paramètre, sauf "a" qui dépend de l'interaction. Cette limite, pour $n = 1$, correspond à $\exp(ika) = -1$ et $k = \pm\pi a$, dans la figure (4.4) est tracée pour le côté positif seulement. La partie élevée est le paramètre d'écrantage et la partie inférieure est la gamme du vecteur d'onde. Dans tous les cas, le maximum de l'onde est plus faible pour le mode transversal par rapport au mode longitudinal. Cependant, ils sont plus bas dans le cas du potentiel de Yukawa. Si la densité du milieu plasma devienne supérieure, à savoir

k augmente, le maximum de l'onde diminue. Il est clair que le plasma ne peut pas évoluer indéfiniment, autrement la quasi-neutralité du système peut être rompue.

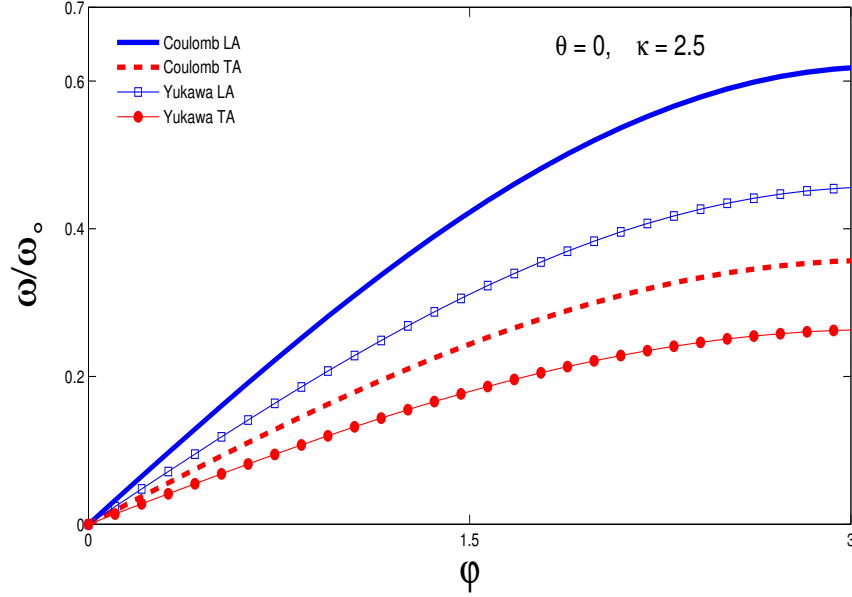


FIGURE 4.4 – Les fréquences longitudinales et transversales normalisées en fonction du nombre d'onde normalisé $\varphi = ka$, pour la propagation des ondes dans la direction x , $\theta = 0$, $\kappa = 2.5$ pour les potentiels d'interaction Coulombien et de Yukawa.

L'angle d'onde (θ) joue un rôle très important ; par exemple dans la figure (4.5), $\theta = \pi/2$ cède à l'évolution du maximum, mais pas linéairement. Pour les modes (LA) et l'interaction Coulombienne nous avons $\Omega_{max}(\theta = \pi/2) / \Omega_{max}(\theta = 0) = 1.24$, et pour les modes (TA) c'est 1.58.

Le mouvement du paquet d'ondes peut être représenté par la vitesse de groupe tracée en fonction de la fréquence d'onde normalisée dans la figure (4.6) et la figure (4.7). Augmenter le paramètre d'écrantage s'avère ralentir les modes. Pour les basses fréquences, tous les modes sont similaires, le temps nécessaire pour équilibrer le système est très petit que chaque particule oscille indépendamment des autres. Mais à la limite de la fréquence, les (LA) avec l'interaction Coulombienne, montre une diminution drastique et (ω/ω_0) tend vers 0. La forte interaction entre les particules préserve la structure du système ordonnée et ne permet pas un régime à hautes fréquences. Autrement, la transition de phase peut se produire.

Pour résumer, nous avons analysé les propriétés de la relation de dispersion pour les ondes de réseau poussiéreuse (DLW) pour un réseau hexagonal à deux dimensions en présence du potentiel Coulombien, et comparer les résultats avec ceux obtenus avec le potentiel de Yukawa. Nous avons constaté que la constante de

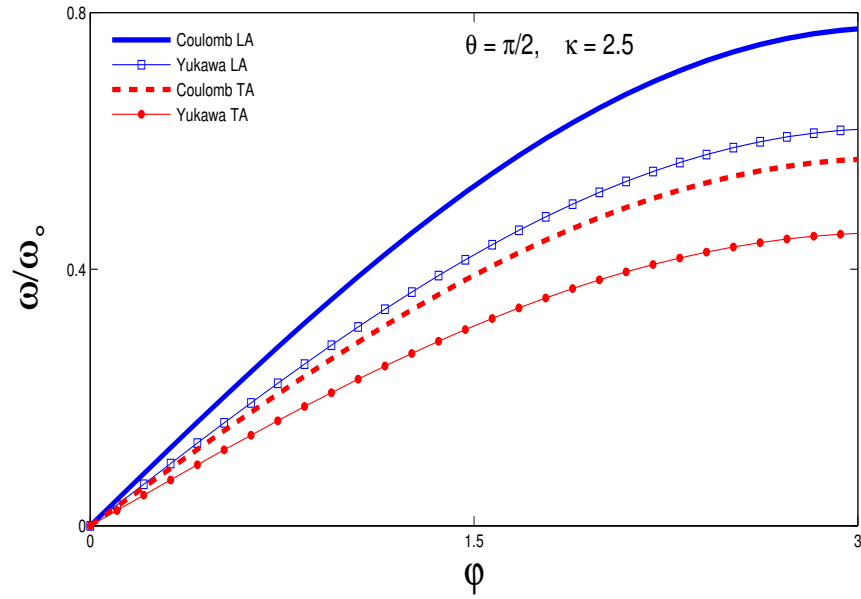


FIGURE 4.5 – Les fréquences longitudinales et transversales normalisées en fonction du nombre d’onde normalisé $\varphi = ka$, pour la propagation des ondes dans la direction x , $\theta = \pi/2$, $\kappa = 2.5$ pour les potentiels d’interaction Coulombien et de Yukawa.

rappel pour le potentiel de Yukawa est inférieure à celle du potentiel Coulombien. La dépendance des fréquences du nombre d’onde pour les deux types d’ondes longitudinales et transversales, se propageant parallèlement ou verticalement par rapport au vecteur de translation primaire du cristal, est indiquée. Les résultats montrent que dans tous les cas une réduction nette de la fréquence est observée. Les vitesses de groupe des ondes longitudinales et transversales avec $\theta = 0$ sont plus petites que celles correspondant à la direction $\theta = \pi/2$.

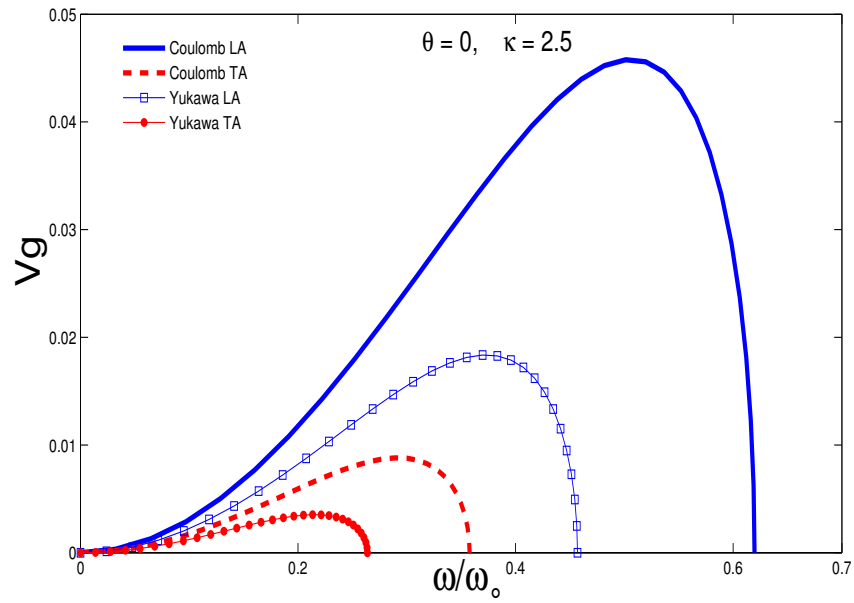


FIGURE 4.6 – Les vitesses de groupe normalisées en fonction de la fréquence (ω/ω_0) , $\theta = 0$. ici $\kappa = 2.5$ pour les potentiels ; Yukawa et Coulombien.

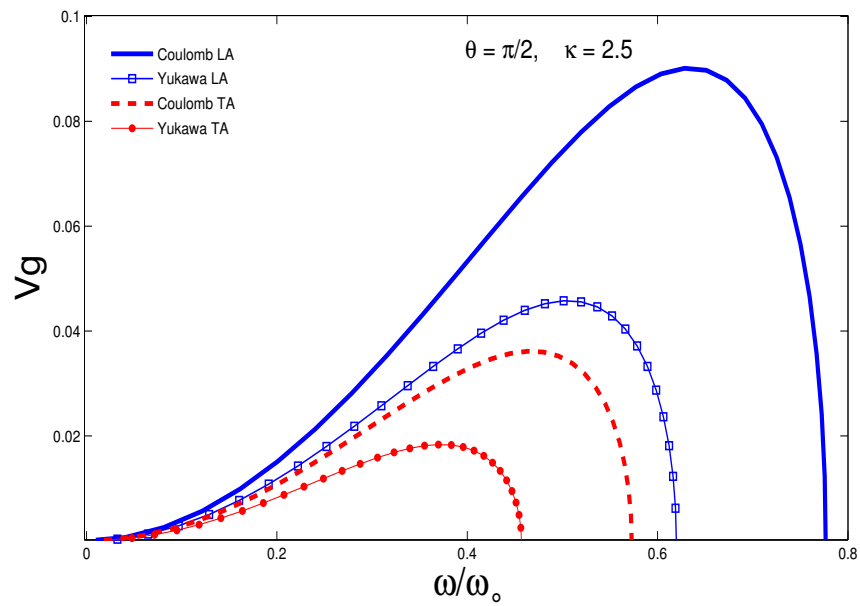


FIGURE 4.7 – Les vitesses de groupe normalisées en fonction de la fréquence (ω/ω_0) , $\theta = \pi/2$. ici $\kappa = 2.5$ pour les potentiels ; Yukawa et Coulombien.

Chapitre 5

Étude de la diffusion par la Dynamique Moléculaire

La diffusion est un phénomène important dans plusieurs domaines. En chimie l'étude de la diffusion permet de contrôler le taux des réactions. En biologie, elle explique le phénomène d'entassement dans les cellules vivantes et spécialement le mouvement des protéines à cause de leur importance dans l'organisme de l'être vivant. Pour les physiciens, la diffusion sert à la détermination de la structure de la matière et à l'étude des transitions de phases. En général, la diffusion est connue comme un déplacement de particules des régions plus denses vers des régions moins denses. Ce phénomène peut avoir lieu même pour un milieu dont la densité est homogène, il s'agit d'une auto-diffusion qui se trouve souvent dans le mouvement Brownien. Lorsque la diffusion sort de la théorie du mouvement Brownien caractérisé par une dépendance linéaire du déplacement quadratique moyen des particules diffusées en temps, on passe du phénomène de diffusion au phénomène de la sous-diffusion où la dépendance devient en t^α avec $0 < \alpha < 1$ ou de la superdiffusion ($\alpha > 1$).

5.1 Le mouvement Brownien

En présence de confinement, et à de basses températures, les systèmes fortement couplés ont une structure bien ordonnée. En augmentant la température les particules se meuvent dans toutes les directions et comme les forces entre ces particules ont un aspect aléatoire on parle d'un mouvement Brownien.

5.1.1 Historique

En 1827, Robert Brown (1773-1858 : botaniste anglais) découvrait un mouvement incessant et aléatoire des grains de pollen en suspension dans l'eau. Les premières explications suggérées étaient basées sur le fait que les particules sont vivantes, Brown avait prouvé expérimentalement que ce mouvement aura lieu dans le cas où les particules sont des objets inorganiques. Le mouvement Brownien est étonnant du fait que dans les systèmes où il y a présence de frottements le mouvement des particules s'amortit jusqu'à ce qu'il s'arrête, ce qui n'est pas le cas pour ce mouvement [78].

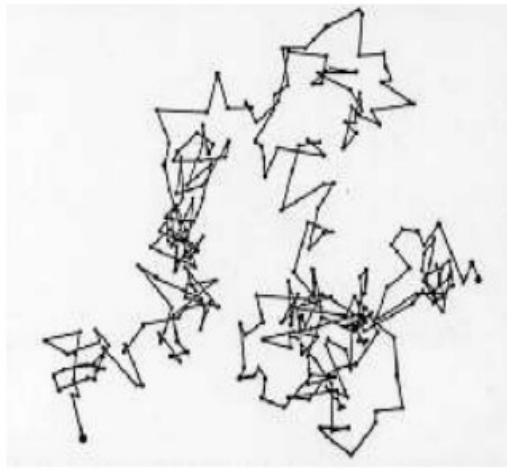


FIGURE 5.1 – La trajectoire d'une particule animée d'un mouvement Brownien [79].

Cette découverte resta inexplicée physiquement jusqu'en 1905, Einstein proposa un modèle basé sur deux idées [79] :

- 1- Le mouvement des particules suspendues dans l'eau est dû aux collisions entre ces dernières et les particules de l'eau.
- 2- Le mouvement des particules est un processus stochastique ce qui veut dire qu'il est décrit en terme de probabilité.

L'idée de base d'Einstein est de supposer que le mouvement Brownien est un processus Markovien. Les mouvements des particules dans des intervalles de temps successifs sont indépendants.

Dans un intervalle de temps τ , la particule d'une position x se déplace d'une distance Δ . Ce mouvement étant aléatoire la notion de densité de probabilité est introduite et définie par $\phi(\Delta)$ tel que :

- La particule peut se déplacer dans une direction comme elle peut se déplacer dans la direction opposée avec la même probabilité :

$$\phi(-\Delta) = \phi(\Delta) \quad (5.1)$$

- La condition de normalisation est donnée par :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\Delta) = 1 \quad (5.2)$$

On calcule la distribution des particules à l'instant $t+\tau$ par la relation suivante :

$$f(x, t + \tau)dx = dx \int_{-\infty}^{+\infty} f(x + \Delta, t)\phi(\Delta)d\Delta \quad (5.3)$$

avec $f(x, t)$ la densité des particules (nombre de particules par unité de volume).

Étant donné que τ est très court, en faisant un développement limité, en tenant compte de la condition sur $\phi(\Delta)$, on aboutira à l'équation de diffusion, tel que [79] :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (5.4)$$

où le coefficient de diffusion est donné par :

$$D = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi(\Delta) d\Delta \quad (5.5)$$

Ce résultat montre que le mouvement aléatoire des particules suspendues donne lieu à un processus de diffusion, c'est une description microscopique du mouvement Brownien.

En même temps, le physicien polonais Smoluchowski donna une explication du mouvement Brownien. Il considéra que le mouvement d'une particule en suspension dans un fluide est la résultante des collisions qu'elle subisse avec les particules du fluide. La particule reste dans sa position de départ car si une collision fasse la mouvoir vers une direction, une autre collision va la rendre à sa position initiale. Mais parfois elle peut se déplacer dans une direction privilégié causée par le déséquilibre entre les collisions [78].

Trois ans plus tard, Langevin proposa un modèle plus répandu à ce mouvement. Il a introduit une force aléatoire $\vec{F}(t)$ fluctuante, due aux collisions des grains avec les particules du fluide. Cette force a les propriétés suivantes [79] :

$$\begin{aligned} \langle \vec{F}(t) \rangle &= 0 \\ \langle F(t_1)F(t_2) \rangle &= 2D\delta(t_1 - t_2) \end{aligned}$$

5.1.2 Approche de Langevin

Les particules browniennes (particules de grande taille par rapport aux molécules du milieu) sont soumises à deux forces, dues à l'effet du fluide. La première c'est la force aléatoire de Langevin $\vec{F}(t)$ qui assure le mouvement incessant des particules. L'origine de cette force est l'agitation thermique. La deuxième représente la friction ou les frottements, elle est donnée par la loi de Stokes. Elle est proportionnelle à la vitesse de la particule pour des petites valeurs de cette dernière.

En tenant compte de ces deux forces dans l'équation de Newton on obtient l'équation de Langevin pour une particule brownienne libre (n'est soumise à aucune force extérieure) sous la forme suivante [80] :

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -\gamma \vec{v} + \vec{F}(t) \quad (5.6)$$

où \vec{r} : représente la position de la particule.

\vec{v} : la vitesse de la particule.

γ : le coefficient de friction.

L'équation de Langevin était la première équation différentielle stochastique dont la position et la vitesse sont deux variables stochastiques.

Une variable stochastique X est une quantité qui a plusieurs valeurs possibles x_n avec une distribution de probabilité $P_X(x)$. La probabilité pour que $X \in (x, x+dx)$ est égale à $P_X(x)dx$, cette distribution est normalisée telle que [79] :

$$\int_0^\infty P_X(x)dx = 1$$

La résolution de l'équation de Langevin se ramène à identifier la fonction de la densité de probabilité pour la position et la vitesse [80].

5.2 Phénomène de diffusion

La diffusion est un phénomène intrinsèque lié à un gradient de densité (la nature n'aime pas le vide). Chaque fois qu'il y a un gradient de densité entre deux milieux en contact, les particules se déplacent du milieu le plus dense vers le milieu le moins dense. C'est le phénomène qui fait qu'une goutte d'encre ou d'un colorant a la tendance de colorer tout le milieu où il se produit. Aussi, qu'une goutte de parfum produit une odeur dans une pièce sans aucun support matériel [81].

A l'échelle microscopique, la diffusion c'est la tendance d'un système à rendre uniforme la distribution de ces composantes. Elle se base sur deux approches ; la première est d'un point de vue ondulatoire, qui a comme exemple la diffusion de chaleur. C'est un transfert d'énergie entre deux milieux, l'un est d'une énergie élevée par rapport à l'autre. Un exemple typique qui montre ce phénomène c'est quand on met la main à l'approche d'une source de chaleur et on ressent l'effet de cette dernière sans aucun transfert de la matière. L'énergie est transmise par le contact entre les particules. Le deuxième point de vue, concerne le transfert de la matière [82].

5.3 Les lois de Fick pour la diffusion

Les travaux de Adolf Fick n'étaient pas sur la diffusion mais plutôt dans le domaine de la physiologie. Il s'est basé sur l'analogie entre la description mathématique de la conduction de la chaleur, de l'électricité et celui de la diffusion pour établir les deux lois fondamentales de la diffusion [83].

5.3.1 La première loi de Fick

Lors d'une diffusion, on définit le flux des particules diffusées où la densité de courant \vec{F} de ces particules comme étant le nombre de particules traversant une surface unitaire normale au mouvement par unité de temps. Ainsi, que leur densité n qui représente le nombre de ces particules par unité de volume. La relation qui relie ces deux grandeurs représente la première loi de Fick, elle est donnée par :

$$\vec{F} = -D\vec{\nabla}n \quad (5.7)$$

avec D : le coefficient de diffusion, il s'exprime en m^2/s .

5.3.2 La deuxième loi de Fick

C'est aussi l'équation de la diffusion, elle décrit la variation de la densité de particules diffusées au cours du temps en fonction de la variation spatiale [82].

$$\frac{dn}{dt} = D\frac{d^2n}{dx^2} \quad (5.8)$$

5.4 Mécanismes de diffusion dans les cristaux

Les cristaux présentent des défauts qui permettent la diffusion des atomes. Deux mécanismes sont présents principalement :

- 1- Le mécanisme lacunaire : dans un cristal il existe des lacunes ou des sites qui ne sont pas occupés. Les atomes voisins de ces lacunes se déplacent pour les occuper sous l'effet de l'agitation thermique.

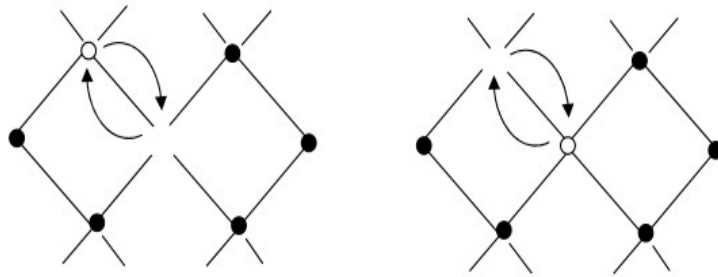


FIGURE 5.2 – Schéma représentant le mécanisme lacunaire de la diffusion [82].

- 2- Le mécanisme interstitiel : si on représente les atomes dans un cristal par des sphères dures, l'empilement compact de ces atomes présente des interstices entre les atomes. Un atome de petite taille peut s'installer sur l'un de ces interstices [82].

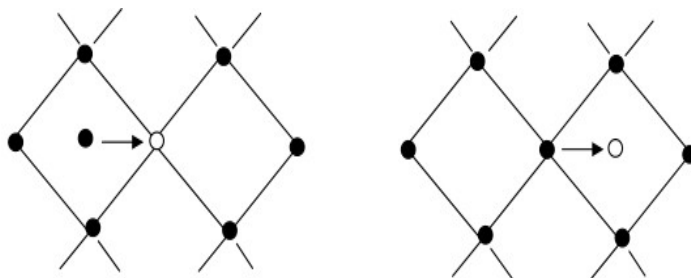


FIGURE 5.3 – Schéma représentant le mécanisme interstitiel de la diffusion [82].

Le déplacement des atomes dans un cristal d'un site vers un autre site se fait d'une manière aléatoire et avec un processus probabiliste. Les modèles qui décrivent ce déplacement sont basés sur le processus Markovien. On s'intéresse uniquement au site vers lequel la particule se déplace et à celui d'où elle vient. Les déplacements intermédiaires ne sont pas considérés. Parmi les modèles utilisés on cite [84] :

- Le déplacement aléatoire discret : dans ce modèle la particule se déplace d'un site n vers un autre site m en faisant un certain nombre de sauts avec une probabilité p_{mn} .
- Le déplacement aléatoire continu dans le temps : le principe est le même que précédemment avec un critère additionnel c'est que la particule se déplace puis elle s'arrête avant qu'elle se déplace à nouveau.

L'étude de la diffusion dans les cristaux permet d'avoir plus d'information sur les défauts et les imperfections.

5.5 Diffusion dans les plasmas

Le plasma réel présente un gradient de densité [85]. Les particules ont la tendance de diffuser vers les parois de l'enceinte où elles se trouvent. L'application d'une force extérieure donne lieu à un mouvement diffusif même si la densité est homogène au sein du plasma. Les électrons, à cause de leur faible masse, répondent en premiers à cette force [86].

5.5.1 Diffusion libre des particules chargées

Dans le cas d'un plasma faiblement ionisé de telle sorte que les collisions des électrons et des ions avec les neutres sont dominantes, en utilisant l'approche fluide qui est applicable lorsque le nombre de particules est élevé, l'équation qui régit le mouvement de chaque espèce est la suivante [85] :

$$mn \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \right] = \pm ne \vec{E} - mn \vec{v} \nu - \vec{\nabla} p \quad (5.9)$$

où : m , n , ν : sont, respectivement, la masse, la densité et la vitesse de l'élément fluide.

ν : la fréquence de collision entre les particules chargées et les neutres, P : la pression et \vec{E} : le champ électrostatique.

Dans le cas stationnaire ($\frac{d}{dt} = 0$) et isotherme ($P = nK_B T$).

$$\vec{v}_\alpha = \frac{\pm e \vec{E}}{m_\alpha \nu} - \frac{K_B T_\alpha}{m_\alpha \nu} \frac{\vec{\nabla} n_\alpha}{n_\alpha} \quad (5.10)$$

le coefficient de diffusion D correspond à :

$$D_\alpha = \frac{K_B T_\alpha}{m_\alpha \nu}$$

Dans cette expression le terme du numérateur représente l'agitation thermique, son augmentation donnera lieu à un comportement plus diffusif aux particules. Quant au dénominateur, on a le terme de collisions qui freinera les particules [85].

On calcule le flux de particules $\vec{\Gamma}$ dans le cas où $E = 0$ comme :

$$\vec{\Gamma} = n\vec{v} = -D\vec{\nabla}n \quad (5.11)$$

On retrouve la première loi de Fick.

Dans ce cas on considère la diffusion des électrons et des ions indépendamment et on ne tient pas compte du champ électrique produit par la diffusion des électrons. La densité des électrons et des ions étant faible, le champ électrique donné par l'équation de Poisson peut être négligé, $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = (Z_i n_i - n_e) e / \epsilon_0$.

5.5.2 Diffusion ambipolaire

Dans le cas où la densité des particules chargées est faible, la diffusion des électrons et des ions se fait d'une manière indépendante. D'après les expressions des coefficients de diffusion ($D_e \propto k_B T_e / m_e$, $D_i \propto K_B T_i / m_i$) on voit que les électrons se diffusent plus rapidement que les ions ($m_e / m_i \ll 1$). Lorsque les électrons se diffusent, un champ électrique est créé. Ce dernier ralentira le mouvement des électrons et accélérera celui des ions mais ce champ est insuffisant pour coupler la diffusion des deux espèces. Pour des densités supérieures à 10^8 , la force de rappel due au champ électrique devient importante et ajustera les électrons et les ions à se diffuser avec la même vitesse et le même coefficient, c'est la diffusion ambipolaire [87].

Le plasma étant un milieu quasi-neutre, si les électrons se diffusent plus que les ions, un excès de charges sera présent dans le plasma. Pour cela le taux de diffusion des deux doit être alors le même [85] :

$$\Gamma_i = \Gamma_e = \Gamma \quad (5.12)$$

$$n\mu_i \vec{E} - D_i \vec{\nabla}n = -n\mu_e \vec{E} - D_e \vec{\nabla}n \quad (5.13)$$

avec $\mu_\alpha = |q|D_\alpha / K_B T_\alpha$ ($\alpha = e, i$) la mobilité, on tire l'expression du champ à partir de cette égalité tel que :

$$\vec{E} = \frac{D_i - D_e}{\mu_i + \mu_e} \frac{\nabla n}{n} \quad (5.14)$$

on remplace \vec{E} dans l'expression de Γ on arrive à :

$$\Gamma = -\frac{\mu_i D_e + \mu_e D_i}{\mu_i + \mu_e} \nabla n \quad (5.15)$$

avec un nouveau coefficient de diffusion correspond à :

$$D = \frac{\mu_i D_e + \mu_e D_i}{\mu_i + \mu_e} \quad (5.16)$$

5.6 Diffusion de particules browniennes

Les particules browniennes subissent deux types de diffusion ; la première dite collective, elle est due au mouvement simultané des particules ou au mouvement de l'ensemble qui est dû à un gradient de densité. La deuxième est liée à la dynamique de la particule toute seule. Cette dernière subit des collisions avec les particules qui l'entourent, ces collisions sont dues à l'agitation thermique et la font entrainer dans un mouvement aléatoire. Une fois que la particule commence à se mouvoir, elle subira une force de frottement. L'équilibre entre ces deux phénomènes donnera naissance à un mouvement diffusif de ladite particule, le coefficient de diffusion est donné par la relation d'Einstein–Stokes [80] :

$$D = k_B T / (6\pi\eta a)$$

Avec

a : le rayon de la particule brownienne.

η : la viscosité du fluide.

5.7 Anomalies de la diffusion

La grandeur caractéristique de la diffusion de particules est leur déplacement quadratique moyen et non pas leur déplacement moyen. La diffusion étant un phénomène aléatoire, la particule se déplace dans toutes les directions. La moyenne algébrique de ces déplacements est nulle, par contre, la moyenne du carré de ces déplacements n'a aucune raison d'être nulle. Si la dépendance en temps du déplacement quadratique moyen est linéaire le comportement des particules est diffusif, on prend le cas à une dimension [88] :

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle = 2 D t \quad (5.17)$$

lorsque la dépendance en temps n'est plus linéaire tel que :

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle \sim t^\alpha \quad (5.18)$$

la diffusion présente des anomalies, selon la valeur de α , on peut avoir [14] :

- Un phénomène de sous-diffusion si $0 < \alpha < 1$.
- Un phénomène de super-diffusion si $\alpha > 1$.

La sous-diffusion est un phénomène intéressant très souvent en biologie. Elle décrit par exemple le comportement des protéines dans le cytoplasme. Dans ce cas la sous-diffusion est due à la présence de plusieurs composantes de différentes tailles, ces dernières se comportent comme des obstacles qui vont freiner le mouvement des protéines.

5.8 Étude de la diffusion de particules chargées en présence d'un substrat périodique

5.8.1 Système physique

Dans cette étude, on s'intéresse au comportement de particules chargées fortement couplées et ordonnées dans une structure quasi-unidimensionnelle. Pour cela on considère un système à deux dimensions contenant N particules identiques interagissant entre elles par le biais du potentiel de type Yukawa. Le potentiel d'interaction entre les particules est tel que :

$$V_{int}(r_{ij}) = \sum_{j=1}^N \frac{q^2 \exp(-|\vec{r}_i - \vec{r}_j|/\lambda)}{\epsilon |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (5.19)$$

Avec : ϵ est la constante diélectrique du milieu, λ la longueur de Debye et r_{ij} la distance entre les particules i et j .

Ces particules sont confinées suivant l'axe des y par un potentiel parabolique V_c donné par :

$$V_c(y_i) = \frac{1}{2} \omega_0^2 y_i^2 \quad (5.20)$$

Avec ω_0 est la pulsation du potentiel, y_i représente la distance à partir de l'axe central du confinement dans la direction des x . Et par un substrat périodique V_{sub} suivant la direction des x tel que :

$$V_{sub}(x_i) = V_0 \sum_i \cos\left(\frac{2\pi x_i}{L}\right) \quad (5.21)$$

L'équation qui régit le mouvement de chaque particule du système est celle de Langevin.

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = -m_i \gamma \frac{d\vec{r}_i}{dt} + \vec{F}_T^i + \vec{F} \quad (5.22)$$

où \vec{F}_T^i la force de Langevin, γ le coefficient de friction et \vec{F} la somme des forces qui agissent sur la particule i . Les forces qui dérivent d'un potentiel sont :

$$\vec{F} = - \left(\sum_{j=1}^N \frac{dV_{int}}{d\vec{r}_i} + \frac{dV_c}{d\vec{r}_i} + \frac{dV_{sub}}{d\vec{r}_i} \right) \quad (5.23)$$

Dans le cas sur-amortie de l'équation de Langevin, le terme d'inertie est négligeable, l'équation (5.23) devient [79] :

$$\gamma \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{F}_T^i - \left(\sum_{j=1}^N \frac{dV_{int}}{d\vec{r}_i} + \frac{dV_c}{d\vec{r}_i} + \frac{dV_{sub}}{d\vec{r}_i} \right) \quad (5.24)$$

c'est l'équation de Smoluchowski.

On introduit la relation d'Einstein–Stokes qui relie le coefficient de friction γ avec le coefficient de diffusion D [80].

$$D = \frac{K_B T}{\gamma}$$

L'équation (5.24) devient :

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = - \frac{D}{k_B T} \left(\sum_{j=1}^N \frac{dV_{int}(\vec{r}_{ij})}{d\vec{r}_i} + \frac{dV_{sub}(\vec{r}_i)}{d\vec{r}_i} + \frac{dV_c(\vec{r}_i)}{d\vec{r}_i} - \vec{F}_T^i \right) \quad (5.25)$$

En utilisant les variables adimensionnelles suivantes :

$$\begin{aligned} V'_{int} &= V_{int}/E_0, V'_{sub} = V_{sub}/E_0, V'_c = V_c/E_0. \\ r' &= r/r_0, t' = t\omega_0. \\ T' &= T/T_0 = Tk_B/E_0. \end{aligned}$$

avec $E_0 = (m\omega_0^2 q^4 / 2\epsilon^2)^{1/3}$, $r_0 = (2q^2 / m\omega_0^2 \epsilon)^{1/3}$: représente la distance pour laquelle l'énergie de confinement est égale à l'énergie Coulombienne. L'équation (5.25) est réécrite sous la forme adimensionnelle suivante :

$$\frac{d\vec{r}'_i}{dt'} = - \left(\Omega \sum_{j=1}^N \frac{dV'_{int}(\vec{r}'_{ij})}{d\vec{r}'_i} + \frac{dV'_{sub}(\vec{r}'_i)}{d\vec{r}'_i} + \frac{dV'_c(\vec{r}'_i)}{d\vec{r}'_i} - \vec{F}'_T^i \right) \quad (5.26)$$

avec $\Omega = q^2 / K_B T \epsilon r_0$

Lorsque les équations sont écrites sous une forme adimensionnelle, on peut les appliquer à n'importe quel système ayant le même type de forces. Une autre raison pour laquelle on fait cette normalisation c'est d'un point de vue numérique. Pour

ne pas avoir des grandeurs trop petites ou trop élevées, le programme peut dans ces conditions se planter.

On s'intéressera au comportement diffusif des particules chargées en se focalisant sur l'effet du substrat. On simule notre système par la méthode de la dynamique moléculaire (DM). Le comportement des particules est déterminé par le déplacement quadratique moyen calculé par la relation suivante [88] :

$$\langle \Delta r^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N [r_i(t_0 + t) - r_i(t_0)]^2 \right\rangle_{\Delta t^*} \quad (5.27)$$

où t_0 l'instant initial de simulation, N le nombre de particules dans la cellule de simulation. On désigne par $\langle \dots \rangle_{\Delta t^*}$ la moyenne prise sur le temps de simulation (Δt).

Les particules sont confinées dans la direction des y , elles s'organisent dans la direction des x dans une structure ordonnée. On s'intéresse au cas d'une structure à une et à deux chaînes linéaires.

Notons par a_0 la distance entre deux particules dans une chaîne. Le paramètre de couplage Γ pour $a_0 \sim 1$ et $\kappa = 1$ est :

$$\begin{aligned} \Gamma &= \Omega \frac{\exp(-\kappa a_0)}{a_0} \\ &\sim 0.4\Omega \end{aligned}$$

avec $\kappa = r_0/\lambda$

Notre étude est faite pour deux valeurs de Ω : $\Omega = 10$ et $\Omega = 100$.

5.8.2 Simulation par la méthode de la dynamique moléculaire

La dynamique Moléculaire est une technique de simulation déterministe, en d'autres termes elle permet le suivi de la trajectoire et la vitesse de chaque particule. Elle se base sur le fait que les particules dans leur mouvement suivent les lois de la mécanique classique.

Pour chaque particule de masse m_i et de position r_i , l'équation de mouvement correspond à [89] :

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i$$

La dynamique moléculaire repose sur l'approximation qui considère la forme des paires du potentiel d'interaction entre la particule i et les autres particules est additive [89] :

$$V_i = \sum_{i \neq j} V_{i,j}$$

Le potentiel V est égal à la somme des interactions de la particule i avec toutes les particules du système comptées indépendamment. L'interaction entre les particules i et j ne dépend que de la distance entre les deux. Cette distance est limitée dans le cas des particules chargées par une distance d'approche minimale et par une autre distance de coupure. Pour des distances supérieures à cette dernière l'interaction entre les particules est négligeable.

La particule i est alors soumise à l'action des forces qui dérivent du potentiel d'interaction :

$$\vec{F}_i = -\vec{\nabla}V$$

5.8.2.1 Les étapes suivies dans une simulation par la dynamique moléculaire

a) Choix de la cellule élémentaire

Pour étudier un système contenant N particules, on le subdivise en une infinité de cellules identiques. L'étude du système revient à étudier le comportement des particules dans l'une de ces cellules. Cette cellule est dite boîte de simulation.

b) Conditions aux limites périodiques

Dans la boîte de simulation, les particules s'accumulent sur les parois lorsqu'elles se déplacent en quittant un petit nombre de particules au centre. Ce qui ne permet pas d'avoir des informations sur l'état de toutes les particules. En plus, la particule qui se trouve au centre est soumise à l'interaction des particules des deux côtés tandis que la particule qui est proche de la paroi est soumise à l'interaction d'un seul côté. Le comportement des particules sera différent. L'élimination des parois permet d'avoir un système plus équilibré dont les particules seront soumises à des forces de la même manière.

Dans une simulation, les conditions aux limites sont choisies de telle sorte à minimiser les effets de bord pour les systèmes finis. Les conditions périodiques sont les plus souvent utilisées. Ces dernières consistent à considérer une cellule de simulation qui a une infinité d'images identiques.

Lorsqu'une particule quitte un box, elle va entrer immédiatement dans le box adjacent, tandis que son image rentre du côté opposé.

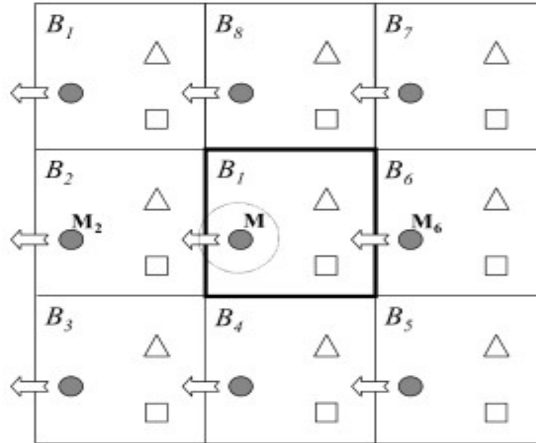


FIGURE 5.4 – Les conditions aux limites périodiques : lorsque la particule M quitte le box central B_1 , elle rentre dans le box voisin B_2 et remplacée par la particule M_6 provenant du box B_6 [90].

Il faut prendre en compte ces conditions dans chaque étape de simulation. Pour une cellule de simulation à deux dimensions d'une longueur L_x dont les particules se déplacent suivant l'axe des x entre $-L_x/2$ et $L_x/2$. Après chaque étape, on vérifie la position de chaque particule :

Si $x < -\frac{L_x}{2}$, on rajoute la quantité L_x à la position ($x = x + L_x$).

Si $x > \frac{L_x}{2}$, on retranche la quantité L_x ($x = x - L_x$).

c) Configuration initiale

On se donne des positions aléatoires initiales pour les particules contenues dans le box de simulation. La génération des valeurs aléatoires attribuées aux positions dépendent de l'outil de programmation utilisé. Par exemple, en langage Fortran on utilise la fonction "Random".

d) Calcul des forces

Dans une simulation, le calcul des forces apporte un grand intérêt à cause du grand nombre de particules. Dans la dynamique moléculaire, on s'intéresse aux forces à deux corps. Pour un système à N particules, chaque particule est soumise aux forces créées par les $N - 1$ particules restantes.

e) Intégration des équations de mouvement

L'intégration des équations de mouvement se fait par des méthodes numériques et dans des intervalles de temps courts. Parmi ces méthodes on cite la méthode des différences finis. L'algorithme de Verlet et l'algorithme prédicteur–correcteur présentent certains avantages.

L'algorithme de Verlet : C'est une méthode d'intégration directe de l'équation de mouvement. Elle se base sur la position de la particule à l'instant t , $r(t)$, l'accélération $a(t)$ et la position à l'instant précédent $r(t - \delta t)$ [91].

$$r(t + \delta t) = 2r(t) - r(t - \delta t) + \delta t^2 a(t)$$

Dans cette expression, la vitesse est éliminée par l'addition des développements de Taylor suivants :

$$\begin{aligned} r(t + \delta t) &= r(t) + \delta t v(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 a(t) \\ r(t - \delta t) &= r(t) - \delta t v(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 a(t) \end{aligned}$$

L'élimination de la vitesse servira à gagner un espace de mémoire dans la machine.

Elle peut être calculée à partir de la formule suivante :

$$v(t) = \frac{r(t+\delta t) - r(t-\delta t)}{2\delta t}$$

L'Algorithme prédicteur-correcteur Dans une étape de simulation le cheminement de cet algorithme est le suivant [91] :

- Prédire les positions, les vitesses et les accélérations dans l'instant $t + \delta t$ en utilisant les valeurs courantes de ces grandeurs tel que,

$$r^p(t + \delta t) = r(t) + \delta t v(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 a(t) + \frac{1}{6} \delta t^3 b(t)$$

$$v^p(t + \delta t) = v(t) + \delta t a(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 b(t)$$

$$a^p(t + \delta t) = a(t) + \delta t b(t)$$

- Calculer les forces et les accélérations à partir des nouvelles positions. L'erreur faite dans l'étape de prédiction est tel que,

$$\Delta a(t + \delta t) = a^c(t + \delta t) - a^p(t + \delta t)$$

- Corriger les positions, les vitesses et les accélérations prévues.

$$r^c(t + \delta t) = r^p(t + \delta t) + c_0 \Delta a(t + \delta t)$$

$$v^c(t + \delta t) = v^p(t + \delta t) + c_1 \Delta a(t + \delta t)$$

$$b^c(t + \delta t) = b^p(t + \delta t) + c_2 \Delta a(t + \delta t)$$

Avec c_0 , c_1 et c_2 sont des constantes.

5.8.2.2 Avantages

- La dynamique moléculaire permet la détermination des propriétés dynamiques et de transport.
- Les détails du mouvement des particules fournis par la dynamique moléculaire conduit à la compréhension des mécanismes de plusieurs phénomènes physiques comme la diffusion.
- La dynamique moléculaire nous donne l'évolution en temps ainsi la moyenne des propriétés qu'on ne peut pas mesurer expérimentalement [89].

5.8.2.3 Inconvénients

- Dans la dynamique moléculaire la distance entre deux particules voisines est limitée par la moitié de la dimension de la cellule de simulation (distance de coupure). Tandis qu'en réalité cette distance est de quelque multiple de diamètre de la particule.
- L'approximation faite pour le potentiel d'interaction ne donne pas toujours de bons résultats. Dans les systèmes où il y a un transfert d'électrons une autre force due à la polarisation intervient. Les métaux sont aussi des systèmes dont le potentiel des paires additives ne décrit pas l'énergie totale des molécules. Dans ce cas, le chemin à parcourir d'une région de l'espace des phases à une autre requiert un réarrangement collectif des coordonnées de nombreuses particules. La méthode de la Dynamique Moléculaire permet alors de trouver des chemins plus directs que ceux générés par des mouvements Monté-Carlo aléatoires non corrélés et de ce fait moins efficaces. Par contre, la méthode de Monté-Carlo est plus facile à appliquer, et surtout plus intéressante, dans le cas d'une énergie potentielle mathématiquement compliquée, puisqu'on peut s'affranchir d'une évaluation explicite des forces alors difficile mais indispensable à la Dynamique Moléculaire. Par ailleurs, une situation où la nature non réelle des mouvements Monté-Carlo peut

être exploitée est celle des mélanges, notamment quand l'inter-diffusion des espèces est trop lente pour être observée à l'échelle de temps de la Dynamique Moléculaire. Enfin, de nombreuses techniques de Monté-Carlo ont été développées spécialement pour le calcul des énergies libres.

En général, la simulation est un moyen pour faire des expériences coûteuses ou impossibles à réaliser. Ainsi, elle nous permet de répéter l'expérience autant de fois en jouant sur les paramètres du système pour savoir parmi lesquels qui ont une influence sur l'état du système. La simulation évolue simultanément avec l'évolution des performances des ordinateurs.

5.8.3 Résultats et discussions

En utilisant la méthode de la Dynamique Moléculaire (DM) pour simuler notre système, nous avons choisi une cellule de forme rectangulaire de dimensions L_x et L_y contenant un nombre de particules égale à 300. Les conditions aux limites périodiques sont adaptées. Dans notre cas, l'utilisation de ces conditions est justifiée par le fait que le confinement dans la direction des x n'est pas fort. L'intervalle du temps de chaque étape de simulation est de $5 \cdot 10^{-4} \omega_0$. L'étude est faite pour deux valeurs du facteur de couplage $\Gamma = 10$ et $\Gamma = 100$ qui représentent tous les deux des états fortement couplés.

La position de la particule i à l'instant $t + dt$ est obtenue en intégrant l'équation du mouvement par la méthode des différences finis au premier ordre, dans chaque étape de simulation.

5.8.3.1 Cas d'une configuration à une chaîne

Les particules du système sont confinées dans la direction des y , elles vont s'organiser dans une chaîne suivant la direction des x figure (5.5) pour une densité égale à 0.5. On fait varier l'amplitude du substrat de 0 à 2 [92].

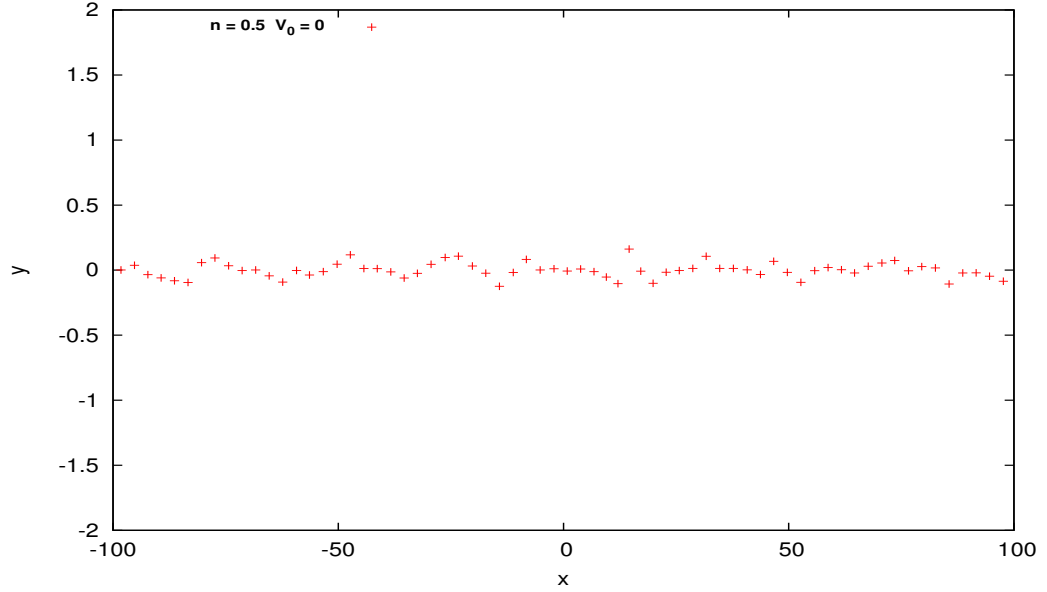


FIGURE 5.5 – Configuration atomique (y en fonction de x) pour $\Omega = 10$ et $n = 0.5$.

Commençons par tracer le déplacement quadratique moyen (MSD) figure (5.6). On note que les courbes que nous avons illustré correspondent à $\langle \Delta r^2(t) \rangle = f(\Delta t)$. Ce paramètre est défini par l'expression (5.27). Il permet de décrire la diffusion. Rappelons que cette dernière se divise en deux catégories :

- Diffusion normale caractérisée par un profil linéaire.
- Diffusion anormale dont le comportement non linéaire.

L'ensemble des particules subit une diffusion normale pour $\Delta t < 900\omega_0$. Tout au début du processus, le système conserve sa structure caractérisée par le couplage fort entre les particules pendant une durée de temps courte. Les particules se déplacent d'une manière linéaire. L'aspect chaotique ne s'est pas encore manifesté. Pour $\Delta t > 900\omega_0$, l'énergie d'agitation thermique des particules augmente et ces dernières commencent à s'éloigner l'une par rapport à l'autre. Qui dit agitation thermique dit mouvement aléatoire, par conséquent les collisions entre les particules seront dominantes. Elles sont décrites par une force aléatoire $\vec{F}(t)$ qui figure dans l'équation du mouvement (5.22). Cette force n'a pas une expression analytique, elle est simulé par une distribution aléatoire des positions des particules. La force aléatoire s'oppose à la diffusion. Dans ce temps intermédiaire, on passe à un comportement sous-diffusif où le $\text{MSD} \propto t^\alpha$. Ce résultat corrobore avec celui donné par la référence [88]. On a utilisé les même paramètres à savoir une densité $n = 0.5$ et un nombre de particules $N = 300$.

Pour le cas où le potentiel périodique s'annule, l'effet de la force aléatoire est

important (la courbe en rouge). Pour les valeurs de $V_0 > 0.5$ en unité de E_0 , la force de confinement domine. Les particules vont être piégées dans les minimums de celui-ci. La diffusion est alors supprimée. Le déplacement quadratique moyen n'évolue plus en fonction du temps et garde une valeur constante.

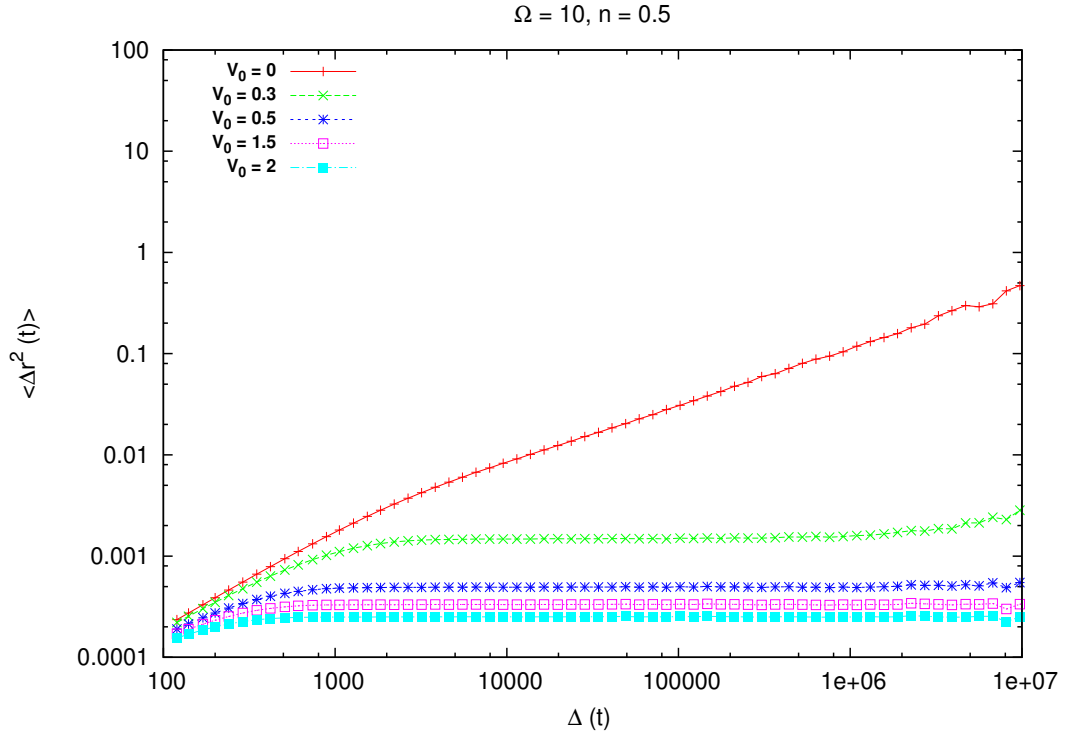


FIGURE 5.6 – Le déplacement quadratique moyen en fonction du temps pour $\Omega = 10, n = 0.5$ avec une échelle logarithmique (log–log), la durée du temps désignée auparavant courte est comprise entre 100 et 900 où le déplacement quadratique moyen varie linéairement en fonction du temps. Pour $\Delta t = 900 - 10^7$ et pour $V_0 = 0.3$ et 0.5 $\langle \Delta r^2(t) \rangle \propto t^\alpha$. Pour $V_0 = 1.5$ et 2 , $\langle \Delta r^2(t) \rangle \simeq 4 \cdot 10^{-4} r_0$.

Pour $\Omega = 100$ et $n = 0.5$ figure (5.7), les particules ayant le même comportement que dans le cas précédent à une seule différence c'est que la diffusion s'atténue pour des valeurs inférieures (pour $V_0 \geq 0.5$), cela est dû au couplage fort entre les particules.

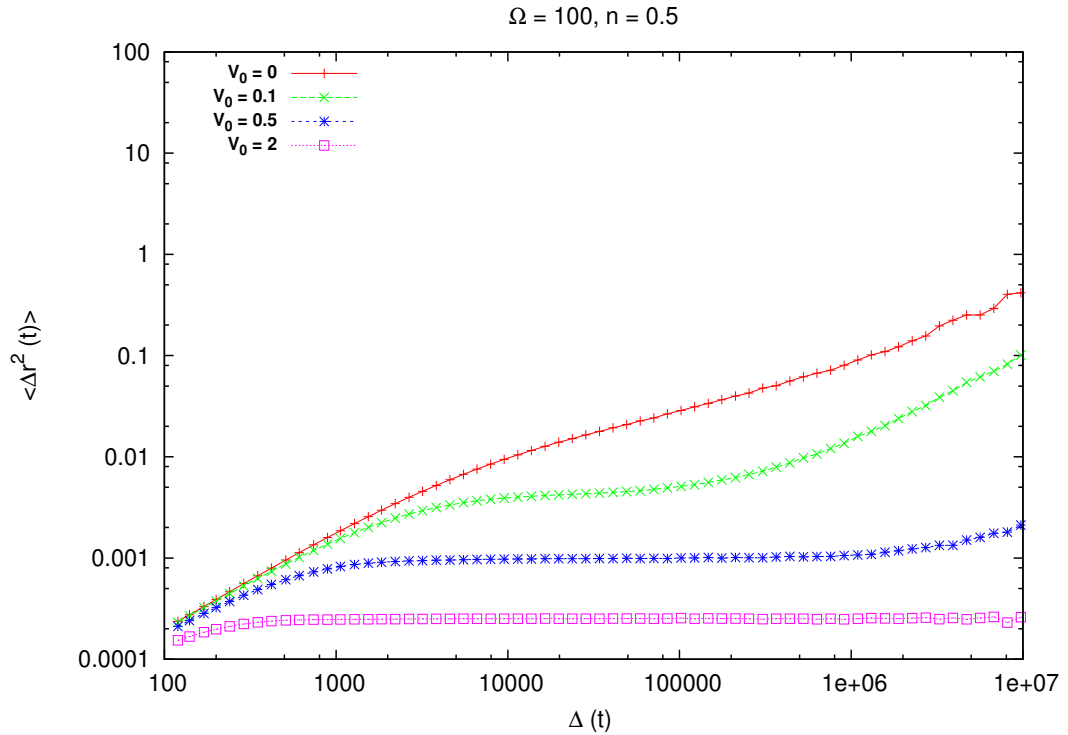


FIGURE 5.7 – Le déplacement quadratique moyen en fonction du temps pour $\Omega = 100, n = 0.5$ avec une échelle logarithmique (log–log). Pour $V_0 = 0.1$, le comportement des particules est diffusif pour $\Delta t < 1000\omega_0$ et sous-diffusif pour $1000 < \Delta t < 6 \cdot 10^5\omega_0$. Au delà, le déplacement quadratique moyen varie à nouveau linéairement avec Δt . Ce comportement est dû probablement au fait qu’une particule revient à sa position initial.

5.8.3.2 Cas d’une configuration à deux chaînes

Nous augmentons la densité à 1, les particules s’organisent en deux chaînes suivant la direction des x ; figure (5.8). Lorsque l’amplitude du substrat périodique augmente, les particules se positionnent dans les minimums de ce potentiel. Chaque deux particules sont piégées dans un même minimum. Alors, l’interaction entre elles deviennent plus importantes et la structure ordonnée est maintenue. Les résultats de ce cas sont représentés par les figures (5.9) et (5.10)

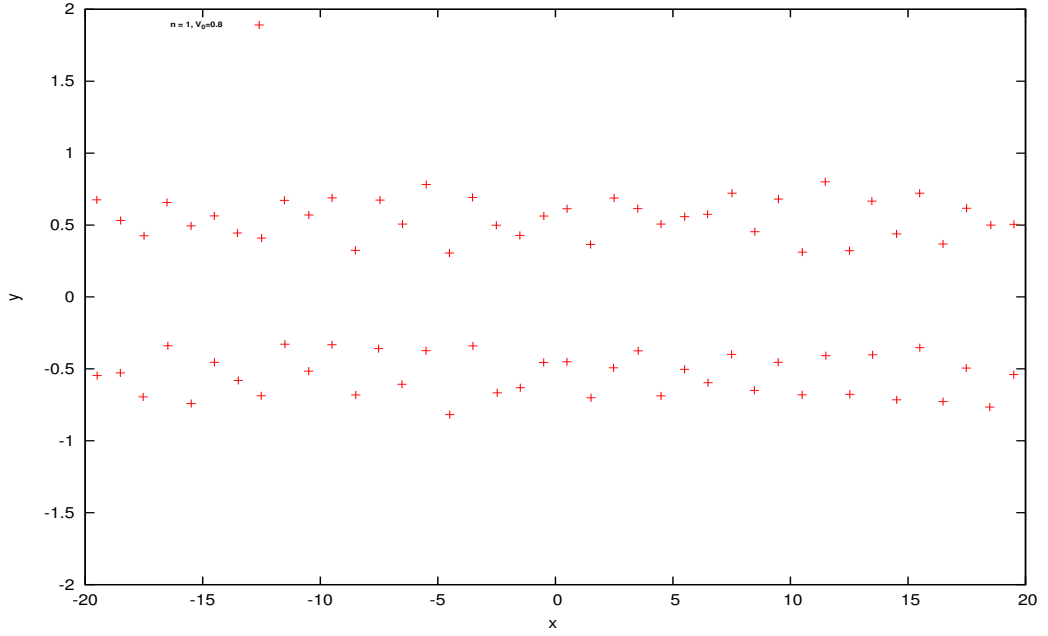


FIGURE 5.8 – Configuration atomique (y en fonction de x) pour $\Omega = 100$ et $n = 1$.

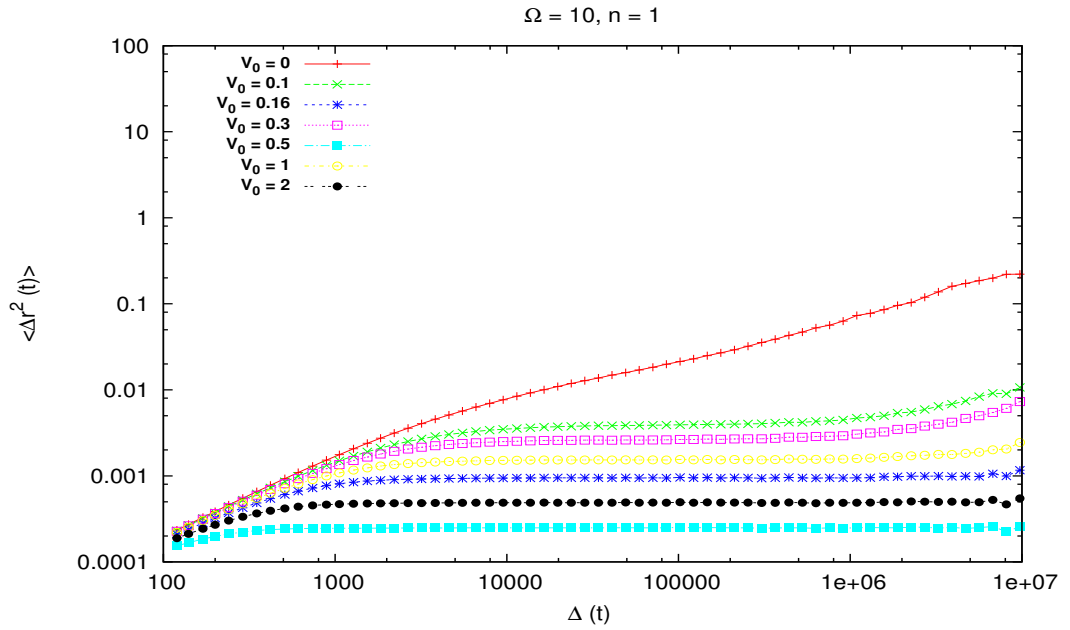


FIGURE 5.9 – Le déplacement quadratique moyen en fonction de Δt pour $\Omega = 10$ et $n = 1$. Pour $V_0 = 0$, $\langle \Delta r^2(t) \rangle \propto t^\alpha$. Pour $V_0 = 0.1 - 0.16 - 0.3$, $\langle \Delta r^2(t) \rangle \propto \Delta t$ pour $\Delta t < 4 \cdot 10^3 \omega_0$. Pour les valeurs supérieures, $\langle \Delta r^2(t) \rangle \propto \Delta t^\alpha$. Pour les valeurs 1 et 2 de V_0 , $\langle \Delta r^2(t) \rangle \simeq 5 \cdot 10^{-5} r_0$.

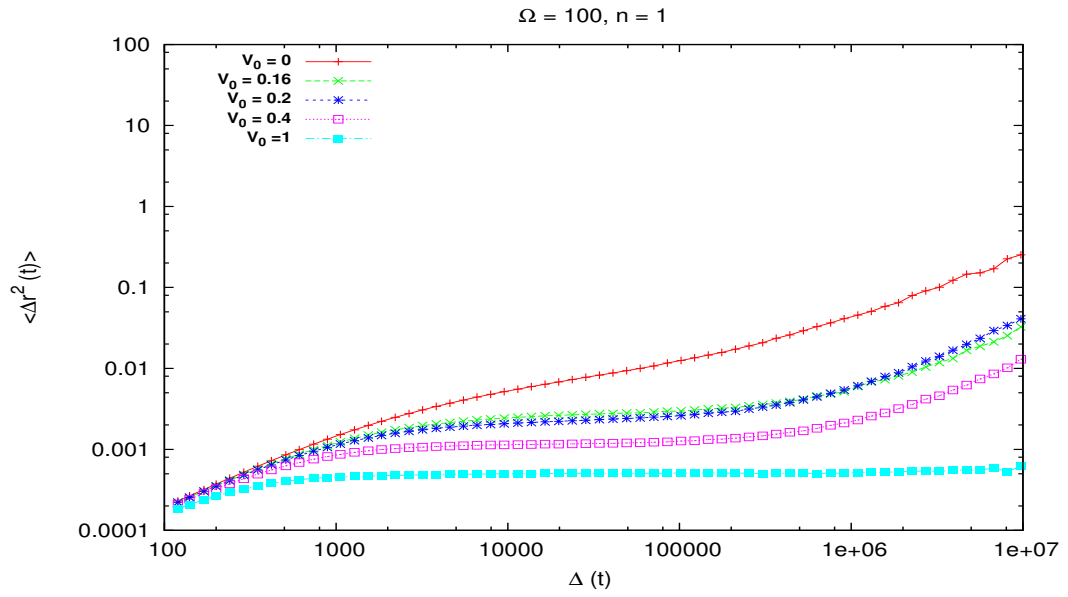


FIGURE 5.10 – Le déplacement quadratique moyen en fonction de Δt pour $\Omega = 100$ et $n = 1$.

Afin de réduire le temps de calcul, nous avons réduit le nombre de particules dans la cellule de simulation à 100, les résultats obtenus sont représentés par les figures (5.11) et (5.12) pour $\Omega = 10$ et les figures (5.13) et (5.14) pour $\Omega = 100$.

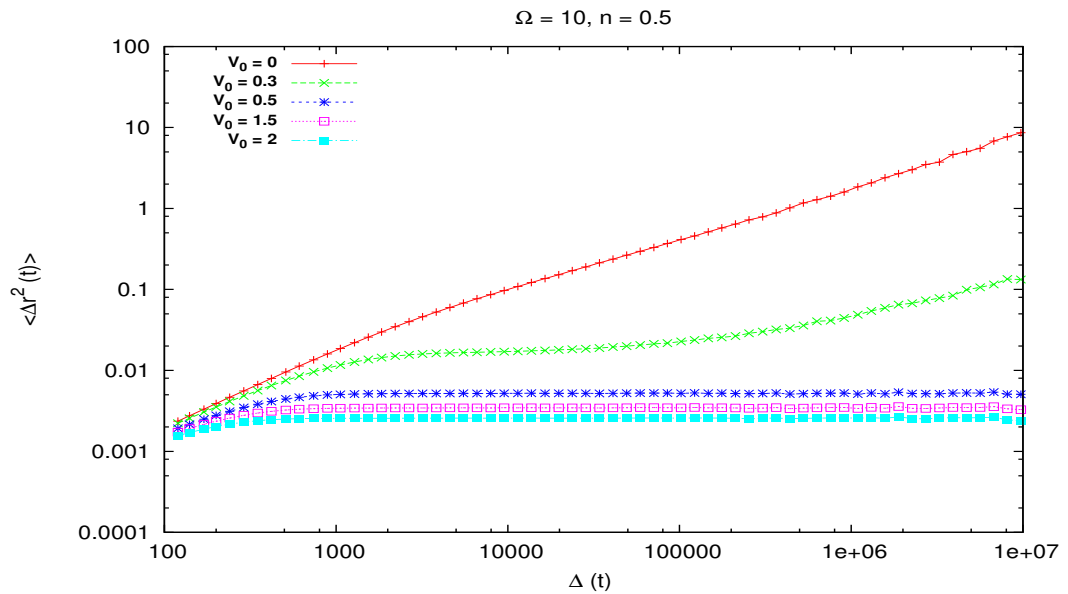


FIGURE 5.11 – Le déplacement quadratique moyen en fonction du temps pour $\Omega = 10, n = 0.5$ et $N = 100$.

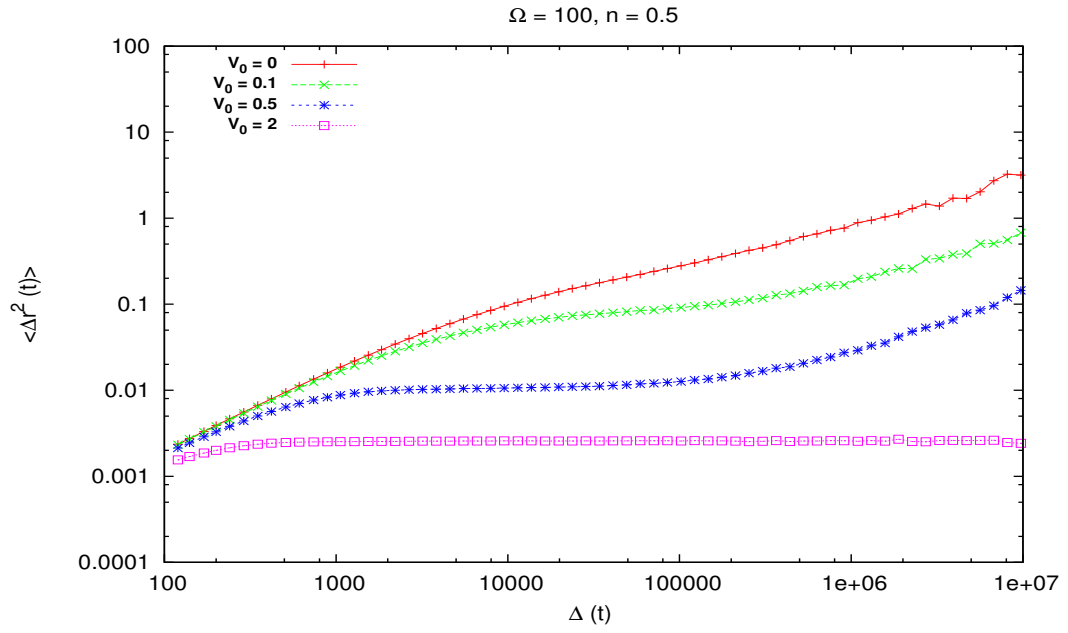


FIGURE 5.12 – Le déplacement quadratique moyen en fonction de Δt pour $\Omega = 100, n = 0.5$ et $N = 100$.

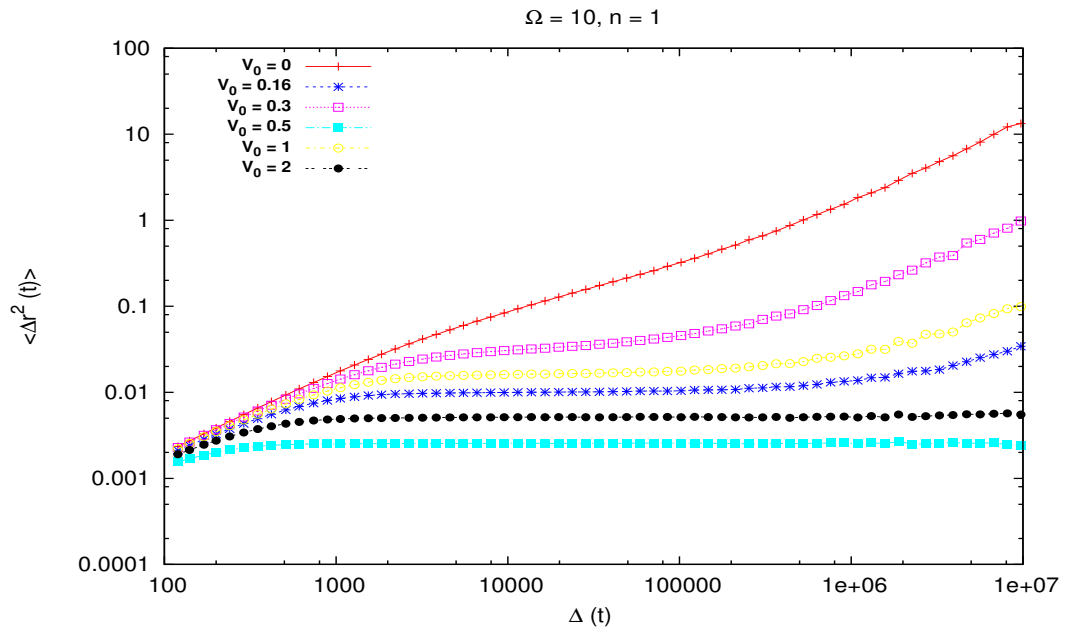


FIGURE 5.13 – Le déplacement quadratique moyen en fonction de Δt pour $\Omega = 10, n = 1$ et $N = 100$.

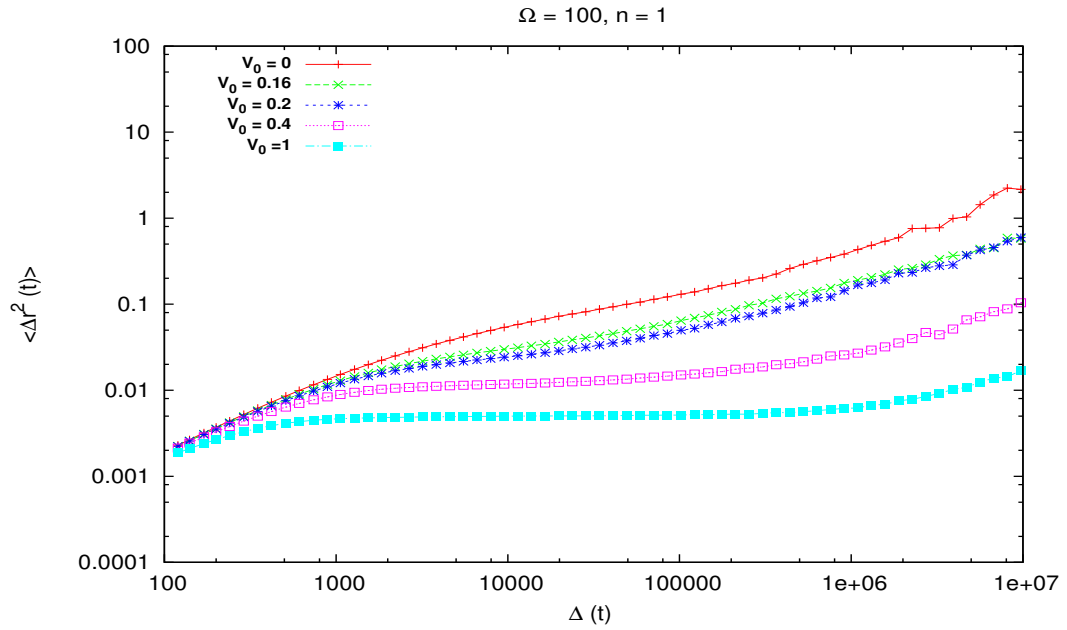


FIGURE 5.14 – Le déplacement quadratique moyen en fonction de Δt pour $\Omega = 100, n = 1$ et $N = 100$.

On remarque que le comportement des particules est le même que précédemment. On conclut que les propriétés de notre système ne sont pas affectées par le changement de sa taille.

5.9 Conclusion

Dans cette partie de, on a utilisé la simulation par la méthode de la dynamique moléculaire pour étudier l'effet d'un substrat périodique sur la diffusion de particules chargées dans un système fortement couplés bidimensionnel. Les particules, considérées, interagissent entre elles par le biais du potentiel de Yukawa et sont confinées dans la direction des "y" par un potentiel parabolique. D'après les résultats obtenus, on conclut que le substrat réduit la mobilité des particules, et à partir de certaines valeurs de son amplitude les particules deviennent piégées dans les minimums du substrat; ce qui traduit la suppression de la diffusion. Cette valeur dépend du facteur de couplage du système, les valeurs minimales de l'amplitude correspond aux grandes valeurs de ce facteur.

Conclusion générale

Dans cette thèse nous avons étudié divers phénomènes non-linéaires dans les structures fortement couplées formées de particules identiques (cristaux de Wigner), à une et à deux dimensions.

L'étude théorique de la relation de dispersion, dans le cas d'une structure linéaire, a montré que pour des valeurs arbitraires du paramètre $K = \Delta/\lambda_D$, une nouvelle relation de dispersion est obtenue, décrivant les ondes de compression longitudinales dans un cristal de plasma poussiéreux unidimensionnel. Dans les limites asymptotiques de cette relation de dispersion, la relation de dispersion des ondes acoustiques et la relation de dispersion des ondes de réseau ont été déterminées. Le paramètre K joue un rôle très important dans le contrôle de la nature des ondes excitées dans une expérience donnée. Si $K \ll 1$, l'onde de compression (DCW) est indiscernable de l'onde acoustique (DAW). Quand $K \ll 2$ et une atténuation faible, l'onde de compression se rapproche et devient par la suite de même allure que l'onde de réseau, et cela se confirme quand les valeurs de K augmentent [34].

Dans l'étude des modes de vibration dans une structure linéaire formée de particules chargées et identiques, on a fait appel à la méthode semi-analytique. Cette méthode se base sur deux parties ; numérique et analytique. La première consiste à déterminer les configurations d'équilibres caractérisées par l'inter-distance entre les particules. Pour cela, la méthode Monte-Carlo est utilisée. Comme la structure linéaire est infinie, cette dernière a été simulée en faisant appel aux conditions aux limites. Une cellule de base est choisie pour être reproduite périodiquement.

La méthode Monte-Carlo a abouti à des états métastables, qui caractérisent un équilibre local et par la suite ont été contournés par la technique d'annihilation. Le système est chauffé progressivement puis refroidi jusqu'à la température requise. Une telle méthode augmente le temps de calcul mais assure, après un certain nombre d'itérations, la convergence vers l'équilibre global. La convergence a lieu lorsque le minimum d'énergie est atteint. Il a été montré que l'inter-distance de la configuration d'équilibre dépend essentiellement du nombre de particules dans la cellule de base ainsi que de sa longueur. Le potentiel agissant sur une particule

résulte alors, de la contribution d'un nombre fini de particules dans la cellule. Il a été montré, aussi, que ce nombre correspond à $N = 28$. Ce résultat a été déjà utilisée, sans justification, dans des travaux expérimentaux.

En se basant sur les résultats de la méthode numérique, l'étude des modes DAW (dust acoustic wave) et de DLW (dust lattice wave) a été réalisée pour une structure linéaire fortement couplée, périodique et formée de grains de poussière de charge positive. Les variations des relations de dispersion en fonction du nombre d'onde pour différentes valeurs du nombre de particule dans la cellule de base ont été réalisées. Les modes DLW ont subit les variations, les plus importantes, dans le profil lorsque le nombre de particules varie, quand au mode DAW, le profil dans l'ensemble est resté le même, c'est la valeur limite qui change. Ces résultats s'expliquent par la nature des modes. Le mode acoustique résulte d'un gradient de pression du milieu plasma, par contre, le mode de réseau est la conséquence des effets collectifs des particules en interaction. D'ailleurs l'écart est très grand entre $N = 2$ et $N > 2$. En prenant uniquement les deux premiers proches voisins dans l'interaction, l'erreur commise dans le calcul du potentiel est très importante. Un autre résultat remarquable, l'existence des modes DLW pour $N > 2$, il n'est possible que si $K > 0.5$.

Compte tenu du fait que le plasma poussiéreux est un système entretenu, l'injection d'autres particules se manifeste par une force de friction sur chaque grain de poussière. Le cas où cet effet est dû à la présence d'un gaz sous pression dans une chambre à décharge a été traité. En prenant en considération cet effet, l'investigation a montré que le mode (DAW) disparaît lorsque le nombre de particules est supérieur à 2. Ceci est dû à l'amortissement important du mouvement de chaque particule autour de sa position d'équilibre. Par contre, l'amplitude du mode DLW diminue lorsque le nombre de particules augmente, le mode (DLW) ne s'amortit pas totalement, il résiste à la friction grâce à son aspect d'origine collectif.

Les propriétés de la relation de dispersion pour les ondes de réseau (DLW), pour un réseau hexagonal à deux dimensions en présence du potentiel Coulombien ont été analysées et comparées avec celles obtenues avec le potentiel de Yukawa. La constante de rappel pour le potentiel de Yukawa est inférieure par rapport à celle du potentiel Cuolombien. La dépendance des fréquences du nombre d'onde pour les deux types d'ondes longitudinales et transversales, se propageant parallèlement ou verticalement par rapport au vecteur de translation primaire du cristal, est indiquée. Les résultats montrent que dans tous les cas une réduction nette de la fréquence est observée. La vitesse de groupe des ondes longitudinales

et transversales avec $\theta = 0$ est plus faible que celle correspondant à la direction $\theta = \pi/2$.

L'application de la méthode de la dynamique moléculaire à l'étude de l'effet d'un substrat périodique sur le phénomène de la diffusion de particules chargées a montré que le substrat réduit nettement la mobilité des particules et à partir d'une certaine valeur de son amplitude les particules deviennent piégées dans les minimums du substrat, ce qui traduit la suppression de la diffusion. Cette valeur dépend du facteur de couplage du système, les valeurs minimales de l'amplitude correspondent aux grandes valeurs de ce facteur.

Bibliographie

- [1] E. Wigner, Phys. Rev. **46**, 1002 (1934).
- [2] V. E. Fortov, I. T. Iakubov, and A. G. Kharapak, *Physics of strongly coupled plasmas*, Oxford university press, 2006.
- [3] J. Vasut, *Numerical Modeling of Strongly-Coupled Dusty Plasmas Systems*, PhD thesis, 2001.
- [4] A. Simon and W. B. Thompson, editors, *Advances in Plasma Physics*, volume 4, 1971, M. S. Sodha and S. Guha P.219.
- [5] P. Pavlov, editor, *25th EPS Conference on contr. Fusion and Plasmas Phys. Praha*, volume 22C, 1998.
- [6] R. Annou and V. Tripathi, Physics Lett. A **5**, 2813 (1997).
- [7] J. R. Bhatt and B. P. Pandey, Phys. Rev. E **50**, 4 (1994).
- [8] R. L. Merlino, A. Barkan, C. Thompson, and N. D'angelo, Phys. Plasmas **5**, 1607 (1998).
- [9] V. E. Fortov, A. V.Ivlev, S. Khrapak, A. G. Khrapak, and G. E. Morfell, Phys. Reports **421**, 1-103 (2005).
- [10] P. Kaw, Phys. Plas. **8**, 1870 (2001).
- [11] P. Shukla and A. A. Mamun, *Introduction to Dusty Plasmas Physics*, IOP Publishing, 2002.
- [12] F. Chen and J. Chang, *Principal of plasma processing*, Plenum/Kluwer Publishers (2002).
- [13] J. L. Delacroix and A. Bers, *Physique des plasmas 1*, Inter Editions - CNRS Edition, 1994.
- [14] M. Bonitz, P. Ludwig, and N. Horing, *Introduction to complex plasmas*, Springer Heidelberg Dordrecht London New York, 2010.
- [15] G. Ganguli, R. Merlino, and A. Sen, (2000), Physics and Astronomy, The University of Iowa, Iowa City, IA 52242, USA.

- [16] A. Wayne, C. Scales, and C. Beattie, *Numerical Simulation of Ion Waves in Dusty Plasmas*, PhD thesis, 2001.
- [17] M. Issaad, Etude des structures fortement couplées dans un confinement électrostatique à deux dimensions., Thèse de Magister 2009.
- [18] A. Piel et al., J. Phys. B **36**, 533 (2003).
- [19] H. Thomson, G. E. Morfil, and V. Demmel, Phys. Rev. Lett **73,5** (1994).
- [20] P. M. Bellan, *Fundamentals of Plasma Physics*, 2004.
- [21] L. Therese, *Plasmas radiofréquences pour l'analyse des matériaux. Etudes expérimentale, analytique et numérique.*, PhD thesis, Université de Toulouse III, 2005.
- [22] M. Djebli, *Expansion des plasmas poussiéreux en géométrie sphérique*, PhD thesis, 2004.
- [23] R. L. Merlino, Plasma Physics Applied , 73 (2006).
- [24] M. Mikikian, *Les plasmas poussiéreux : Synthèse, structure et dynamique d'un nuage de poussières dans un plasma.*, PhD thesis, université d'Orleans, 2008.
- [25] B. Liu, K. Avinash, and J. Goree, Phys. Lett. **91, Num 25** (2003).
- [26] A. J. Turski, B. Atamaniuk, and E. Turska, *Non-Linear Phenomina in Dusty Plasmas*, Institute of Fundamental Technological Research Polish Academy of Sciences, Warsaw, Poland, 1999.
- [27] F. Melando, Phys. Plas **3**, 3890 (1996).
- [28] A. Homann, A. Melzer, S. Peters, and A. Piel, Phys. Rev. **56**, 7138 (1997).
- [29] A. V. Ivlev and G. Morfill, Phys. Rev. E **63**, 016409 (2000).
- [30] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics, 7th ed.*(Wiley, new York), 1996.
- [31] X. Liang et al., Phys. Plas. **8**, 1459 (2001).
- [32] B. Farokhi, P. Shukla, N. Tsintsadze, and D. Tskhakaya, Physics Lett. A **264**, 318 (1999).
- [33] F. S. Kuo, Chinese Journal of Physics **38** (2000).
- [34] N. Otani, A. Bhattacharjee, and X. Wang, Phys. Plasmas **6** (1999).
- [35] R. A. Quinn and J. Goree, Phys. Rev. Lett. **88** (2002).
- [36] H. C. Lee and D. Y. Chen, Phys.Rev.E **56** (1997).
- [37] L. Giovanni, Physics of Plasmas **6** (1999).

- [38] S. Nunomura, J. Goree, S. Hu, X. Wang, and A. Bhattacharjee, Phys.RevE **65**, **066402** (2002).
- [39] Y. K. Khodataev, S. A. Khrapak, A. P. Nefedov, and O. F. Petrov, Phys.Rev.E **57** (1998).
- [40] S. Khrapak et al., Physics of Plasmas **10** (2003).
- [41] B. Liu and J. Goree, Phy.Rev **71**, **46410** (2005).
- [42] B. Liu and J. Goree, Phy. Rev. Lett. **94**,**185002** (2005).
- [43] A. Bekda, M. Djebli, and N. Beldjoudi, J. Plasma Physics **74**, 629 (2008).
- [44] V. Bedanov and F. Peeters, Phys. Rev. B **49** (1994).
- [45] G. Piacente, F. peeters, and J. Betoures, Phys. Rev. E **70**, 045324 (2004).
- [46] G. Piacente, F. Schweigert, J. Betoures, and F. Peeters, Phys. Rev. B **69**, 045324 (2004).
- [47] A. Kiel, editor, *Diagnostics ans Simulation of Dusty Plasmas*, 2006, Kiel 12-15, Germany.
- [48] C. R. A. Catlow, R. A. Van Santen, and B. Smit, *Computer Modelling of Microporous Materials*, 2004.
- [49] M. Hayoun, *La Méthode de Monte Carlo Metroplois*, École Simulation Numérique en Matière Condensée, Jussieu, Paris, 2002.
- [50] C. Ticos, A. Dyson, P. Smith, and P. Shukla, Plas. Phys. Contr. Fusion **46** (2004).
- [51] O. S. Vaulina, A. A. Samarianand, O. F. Petrov, B. W. James, and V. E. Fortov, New Journal of Physics **5**, 2 (2003).
- [52] P. Epstein, Phys. Plas. **23**, 710 (1924).
- [53] R. Redmer, Phys. Rep. **35**, 282 (1997).
- [54] R. Redmer and G. Röpke, Contri. plasma Phys. **50**, 970 (2010).
- [55] J. Stephens and A. Neuber, Phys. Plasmas **19**, 060072 (2012).
- [56] H. Lôwen, E. Allodryarov, A. Ivlev, and G. Morfill, Phys. Condens. Matter **24**, 284125 (2012).
- [57] N. Heilmann, J. Peatross, and S. Bergeson, Phys.Rev. Lett. **109**, 035002 (2012).
- [58] D. Dubin and J. Shiffer, Phys. Rev. E **53**, 5249 (1996).
- [59] D. Dubin, Phys. Rev. E **53**, 5268 (1996).

- [60] V. Tsytovich, G. Morfill, S. Vladimirov, and H. Thomas, *Lec. Notes Phys.*(Springer-Verlag Berlin.) **731**, 1 (2008).
- [61] M. Bonitz, C. Henning, and D. Bloch, *Rep. Prog. Phys.* **73**, 066501 (2010).
- [62] H. Schollmeyer, A. Melzer, A. Homann, and A. Bel, *Phys. Plasmas* **7**, 2693 (1999).
- [63] S. Nunmora, S. Zhdarov, and G. Morfill, *Phys. Rev. E* **68**, 026407 (2003).
- [64] L. Couêdel et al., *Phys. Plasmas* **18**, 083707 (2011).
- [65] V. Yaroshenko, A. Ivlev, and G. Morfill, *Phys. Rev. E* **71**, 046405 (2005).
- [66] K. Qiao, L. Matthews, and T. Hyde, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **38**, 823 (2010).
- [67] S. Zhdanov, A. Ivlev, and G. Morfil, *Phys. Plasmas* **16**, 083706 (2009).
- [68] F. Yang, Y. Liu, J. Cui, and Y. Zhang, *Phys. Plasmas* **19**, 073709 (2012).
- [69] M. Djebli, M. Issaad, and L. Rouaiguia, *Phys. Plasmas* **17**, 033704 (2010).
- [70] F. Peeters and X. Wu, *Phys. Rev. A* **35**, 3109 (1987).
- [71] M. Kong, B. Partoens, and F. Peeters, *Phys. Rev. E* **65**, 046602 (2002).
- [72] S. Khrapak, B. Klumov, and G. Morfill, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 225003 (2008).
- [73] P. Hartmann, Z. Donkó, G. Kalman, and S. Kyrkos, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **35**, 337 (2007).
- [74] B. Farokhi, I. Kourakis, and P. Shukla, *Phys. Plasmas* **13**, 122304 (2006).
- [75] A. Bekda and M. Djebli, *J. Plasma Physics* **80**, 687 (2014).
- [76] B. Bourahla, O. Nafa, A. Khater, and R. Tigrine, *Physica E* **43**, 1213 (2011).
- [77] B. Farokhi, P. Shukla, and I. Kourakis, *Phys. Lett. A* **255**, 122 (2006).
- [78] M. Ancona, *Construction du mouvement brownien.*, TER de mathématiques, Université Paris XI, 2007-2008.
- [79] J. L. Garcia-Palacios, *Université de Zaragoza* **1**, 0701242 (2004).
- [80] J. K. G. Dhont, *An introduction to dynamics of colloids*, Elsevier science B. V., 1996.
- [81] F. Z. Djoudi, *Diffusion de particules chargées par un substrat périodique dans un système quasiunidimensionnel.*, Master's thesis, Université des sciences et de la technologie Houari Boumedienne, 2015.
- [82] F. Okba, *Contribution à l'étude de la croissance des cavités d'hydrogènes dans les semiconducteurs.*, PhD thesis, Université Ferrat Abbas Sétif, 2011.

- [83] E. L. Cussler, *Diffusion Mass transfer in fluid systems*, Cambridge University Press, New York, third edition, 2009.
- [84] J. W. Haus and K. W. Kehr, North-Holland Physics Publishing, Amsterdam **150**, 263 (1987).
- [85] F. F. Chen, *Introduction to plasma physics*, Plenum Press, New York and London, 1974.
- [86] J. A. Bittencourt, *Fundamentals of plasma physics*, Springer New York, 2004.
- [87] M. Moisan and J. Pelletier, *Physique des plasmas collisionnels*, EDP Sciences Les Ulis Cedex A - France, 2006.
- [88] J. C. N. Carvalho, K. Nelissen, W. P. Ferreira, F. N. Farias, and F. M. Peeters, Phys. Rev. E **85**, 021136 (2012).
- [89] P. B. Balbuena and J. M. Seminario, *Molecular dynamics : from classical to quantum methods*, Elsevier science B. V., 1999.
- [90] R. Schurhammer, *Simulations par dynamique moléculaire de la solvation et du comportement interfacial d'espèces hydrophobes. Application à l'hypothèse TATB et à l'extraction liquide/liquide de cations par le CO₂ supercritique.*, PhD thesis, Université Louis Pasteur Strasbourg, 2001.
- [91] M. P. Allen and D. Tildesley, *Computer simulation of liquids*, Clarendon press, Oxford, 1987.
- [92] A. Bekda, M. Sobrino Fernandez, M. Djebli, and F. Peeters, to be submitted