



UNIVERSITE MOULOU D MAMMERRI DE TIZI-OUZOU  
FACULTE DES SCIENCES  
LABORATOIRE DE PHYSIQUE ET CHIMIE QUANTIQUE

## Rapport de Stage

MASTER DE PHYSIQUE

Présenté par

**M. MITICHE Ilyes**

sur le sujet intitulé :

**« Effet du moment dipolaire électrique des poussières  
chargées sur les propriétés du cristal coulombien dans un  
plasma de décharge »**

Travail soutenu le 11 juillet 2016 devant le jury suivant :

Dr. MEZEGHRANE Abdelaziz	Président
Dr. DJOUDER Madjid	Rapporteur
Dr. DEGHICHE Djamel	Examineur

Année universitaire: 2015 / 2016

### **Effet du moment dipolaire électrique des poussières chargées sur les propriétés du cristal coulombien dans un plasma de décharge**

Le plasma poussiéreux (*dusty plasma*), ou plasma complexe, est certainement l'état de la matière le plus abondant dans l'univers. Il s'agit de particules microscopiques chargées, généralement négativement, qui baignent dans un plasma. Dans les réacteurs de laboratoire, ces particules peuvent avoir leur origine dans les réactions chimiques entre les composants du plasma. Dans certains cas ces particules forment une structure cristalline hexagonale à deux dimensions ou trois dimensions que l'on nomme cristaux coulombiens.

L'interaction entre ces particules chargées est généralement modélisée par un potentiel coulombien écranté (potentiel de Yukawa). Cependant, récemment il a été observé expérimentalement une énergie cinétique totale supérieure à celle prédit par ce modèle. L'hypothèse émise est que l'interaction entre dipôle électrique liés aux particules soit à l'origine de cette anomalie et à bien d'autres instabilités. Le travail consiste premièrement à implémenter l'interaction dipolaire dans un programme de dynamique moléculaire. Ensuite une étude comparative entre certaines propriétés structurales et dynamiques du cristal coulombien avec et sans interaction dipolaire.

### **Effect of the electric dipole moment of the charged dust on Coulomb crystal in a plasma discharge**

Dusty plasma, or complex plasma, is certainly the most abundant state of matter in the universe. These microscopic particles charged negatively generally are immersed in plasma. In laboratory reactors, the particles may have their origin in the chemical reactions between the components of the plasma. In some cases these particles form a hexagonal crystal structure in two dimensions or three dimensions which is called Coulomb crystals.

The interaction of these charged particles is generally modeled by a screened Coulomb potential (Yukawa potential). However, recently it has been experimentally observed a total kinetic energy greater than that predicted by the model. The hypothesis is that the interaction between the electric dipole is at the origin of this anomaly and many other instability. Firstly, we implement the dipolar interaction in a molecular dynamics code. A comparative study of some structural and dynamic properties of the Coulomb crystal with and without dipole interaction was made.

# Table des matières

<b>Introduction générale</b>	<b>2</b>
<b>1 Généralités sur les plasmas poussiéreux</b>	<b>4</b>
1.1 Introduction . . . . .	4
1.2 Définition d'un plasma . . . . .	4
1.3 Caractéristiques des plasmas . . . . .	5
1.3.1 Le degré d'ionisation . . . . .	5
1.3.2 Paramètre de couplage . . . . .	6
1.3.3 Longueur de Debye . . . . .	6
1.4 Plasma radio fréquence . . . . .	7
1.5 Plasmas poudreux (Dusty plasma) . . . . .	8
1.5.1 Formation des grains de poussières dans les réacteurs de laboratoire . . . . .	9
1.5.2 Processus de charge du grain de poussière . . . . .	10
1.5.3 Forces agissant sur les grains de poussière . . . . .	10
1.5.4 Cristaux coulombiens . . . . .	12
<b>2 Modélisation</b>	<b>14</b>
2.1 Introduction . . . . .	14
2.2 Dynamique moléculaire . . . . .	14
2.2.1 Introduction . . . . .	14
2.2.2 Modélisation des forces . . . . .	14
2.3 Thermostat Nosé-Hoover . . . . .	15
2.4 Méthode d'intégration leap-frog . . . . .	16
<b>3 Études des effets de l'interaction dipôle-dipôle sur les propriétés des cristaux coulombiens</b>	<b>18</b>
3.1 Introduction . . . . .	18
3.2 Paramètres des simulations . . . . .	18
3.3 Fonction de distribution de paire . . . . .	19
3.4 Densités des grains de poussière . . . . .	22
3.5 Paramètre d'ordre local d'orientation des liaisons . . . . .	24
3.6 Courbes de dispersion . . . . .	25
3.7 Transition de phase solide-liquide . . . . .	29
<b>Conclusion générale</b>	<b>30</b>

# Introduction générale

Un plasma est un gaz ionisé où règne une quasi-neutralité de charge électrique. Bien qu'il soit l'état de la matière de loin le plus abondant dans l'univers, il a été découvert et étudié depuis moins d'un siècle de cela. Ce qui nous intéresse dans le présent travail sont les plasmas dits poussiéreux ou complexes. Ce sont des plasmas qui contiennent des particules de matière condensée chargées électriquement et dont les dimensions vont de quelques nanomètres à quelques centaines de micromètres. Ils peuvent donc parfois être observable à l'œil nu. Ces plasmas sont les plus répandus dans l'univers, on peut citer comme exemple les anneaux de Saturne, les queues des comètes, le vent solaire, etc. où souvent les particules ont pour origine les débris des corps célestes plus grands. Mais ces poussières peuvent apparaître aussi dans les réacteurs à plasmas de laboratoires ou industriels produits par des réactions chimiques entre les gaz réactifs qui constituent le plasma.

Plusieurs processus sont à l'origine de la charge portées par ces particules, le plus important étant le processus de collect des charges (c'est à dire des collisions avec les ions et les électrons) présent dans le plasma. Les grains de poussières acquièrent ainsi une très forte charge électrique, généralement négative, de l'ordre de  $10^4 e$ . A cause de l'effet d'écrantage dû au plasma où baignent ces particules, l'interaction entre elles n'est plus coulombienne mais coulombienne écrantée (ou Yukawa). Ce type d'interaction combiné avec un potentiel de confinement fait que dans le cas de paramètre de couplage élevé, ces particules s'organisent sous forme de structure cristalline CFC, CC ou HC. Ces cristaux sont dits cristaux coulombiens. Souvent, si les particules sont suffisamment massives et mono-disperses, ces cristaux peuvent être bidimensionnels et monocouche auquel cas elles adoptent une structure cristalline hexagonale à deux dimensions.

L'existence d'un moment dipolaire associé à une particule chargée dans un réacteur à décharge a été mise en évidence par *G.Lapenta* en 1995 [1]. Il est dû à un flux d'ions positifs qui se dirige perpendiculairement vers l'électrode inférieure qui entre en collision avec les particules en lévitation. Il induit alors une diminution de la charge sur la partie de la surface des particules qu'il bombarde. Cette distribution non uniforme des charges à la surface de la particule se traduit par un dipôle électrique parallèle au flux et dirigé dans le sens opposé. L'interaction dipôle-dipôle qui en résulte entre particule s'ajoute à l'interaction coulombienne écrantée. Expérimentalement, à notre connaissance, à cause de difficultés techniques, aucune mesure n'a été effectuée de ce moment dipolaire.

Dans un récent article [2], les auteurs proposent l'explication de certaines propriétés inattendues des cristaux coulombiens par l'effet de cette interaction dipôle-dipôle. Il a simulé la structure de cristal coulombien en prenant en compte l'interaction dipôle-dipôle puis la comparer à une simulation sans celle-ci.

On se propose dans ce travail de pousser l'étude de l'influence de l'interaction

dipôle-dipôle entre les grains de poussières sur des propriétés structurales et dynamiques des cristaux Coulombiens dans les plasma de décharge. Pour cela on va utiliser la simulation par la dynamique moléculaire pour modéliser ces cristaux, puis analyser plusieurs propriétés structurales et dynamiques comme la fonction de distribution de paire, les spectre des phonons, etc. pour en tirer l'effet de l'interaction dipôle-dipôle qualitativement et quantitativement.

Dans le premier chapitre on parlera des généralités sur les plasmas et les plasmas poussiéreux. Dans le deuxième chapitre on va décrire la méthode de la dynamique moléculaire et la méthode de contrôle de la température utilisées pour simuler les cristaux coulombiens. Dans le dernier chapitre on parlera des propriétés structurales et dynamiques qu'on a utilisé pour l'analyse des résultats pour en déduire l'influence de l'interaction dipôle-dipôle sur ces cristaux et on présentera les résultats obtenus.

# Chapitre 1

## Généralités sur les plasmas poussiéreux

### 1.1 Introduction

Dans ce chapitre on va donner des définitions générales sur les plasmas et particulièrement sur les plasmas poussiéreux (aussi appelés plasmas poudreux ou plasmas complexes). On va définir certaines des grandeurs qui les caractérisent, ainsi que l'une des techniques les plus utilisées pour créer ces plasmas en laboratoire, à savoir les réacteurs à couplage capacitif. Dans le dernier paragraphe on parlera des plasmas poussiéreux et des cristaux coulombiens.

### 1.2 Définition d'un plasma

Un plasma est un gaz ionisé, qui contient des charges positives (ions), des charges négatives (généralement des électrons) et des atomes ou molécules neutres. Sa principale caractéristique est que la distribution de ces différents composants lui assure une quasi-neutralité de charge électrique. Dans le cas d'un plasma à deux composants, cela se traduit par la formule :

$$n_i q_i + n_e q_e \approx 0, \quad (1.1)$$

où  $n_i$  et  $n_e$  sont respectivement les densités des ions et des électrons,  $q_i$  et  $q_e$  étant leur charges. Cette propriété induit entre autre un champ électrique moyen local nul dans tout le volume du plasma.

Les plasmas sont très répandus dans l'univers, puisque on suppose qu'ils représentent 99% de la matière connue. À coté de ces plasmas dits naturels, il existe des plasmas que l'être humain a réussi à produire et à exploiter : ce sont les plasmas dits de laboratoire ou industriels. Nous donnons ici une liste non exhaustive des plasmas naturels et industriels :

#### Plasmas naturels

- Les étoiles, nébuleuses gazeuses, pulsars,
- les aurores boréales,
- les éclairs,
- les vents solaire...

## Plasmas industriels

- Les plasmas des téléviseurs,
- les arc électriques,
- les lampes à décharge,
- les flammes...

Les figures 1.1 et 1.2 montrent les densités et les températures électroniques typiques d'apparition des différents types de plasma. On peut y constater les très grandes plages de température et de densité que l'on peut rencontrer en physique des plasmas.

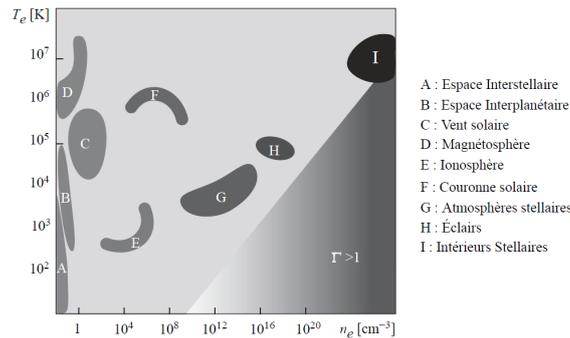


FIGURE 1.1 – Densités et températures électroniques des principaux plasmas naturels[3].

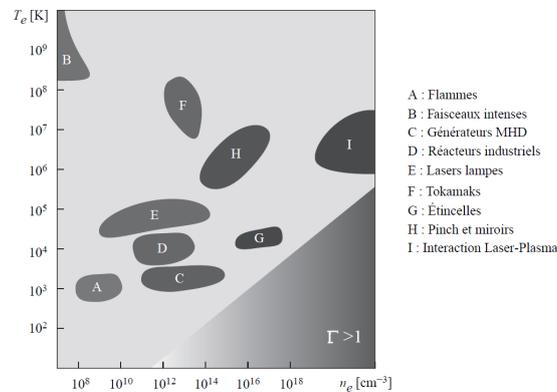


FIGURE 1.2 – Densités et températures électroniques de quelques plasmas industriels[3].

## 1.3 Caractéristiques des plasmas

### 1.3.1 Le degré d'ionisation

Le degré d'ionisation d'un gaz  $\alpha$  est défini comme le rapport de la densité des électrons sur la somme des densités d'électrons et de neutres, il s'écrit [3] :

$$\alpha = \frac{n_e}{n_e + n_n} \quad (1.2)$$

avec  $n_e$  et  $n_n$  les densités respectives des électrons et des particules neutres. Il permet de distinguer si le gaz ionisé a le comportement d'un plasma ( $\alpha \lesssim 1$ ) ou d'un gaz neutre ( $\alpha \ll 1$ ). Généralement, on avance la valeur  $10^{-4}$  comme valeur limite qui sépare les deux type de gaz.

### 1.3.2 Paramètre de couplage

Le paramètre de couplage est défini comme le rapport de l'énergie potentielle moyenne sur l'énergie cinétique moyenne, il s'écrit [3] :

$$\Gamma = \frac{\langle E_p \rangle}{\langle E_c \rangle}. \quad (1.3)$$

Il permet de distinguer les plasmas faiblement couplés (dit aussi cinétiques ou idéaux) lorsque  $\Gamma \ll 1$  où le désordre domine, de ceux fortement couplés (ou fortement corrélés) lorsque  $\Gamma > 1$  dont la structure peut être de nature fluide voire cristalline pour  $\Gamma > 172$  [4], mais il est généralement rare de trouver des plasmas dont le paramètre de couplage est supérieur à 2.

### 1.3.3 Longueur de Debye

Lorsque l'on place une charge test  $q_a$  dans un plasma idéal ( $\Gamma \ll 1$ ), le champ électrique créé par celle-ci produit une perturbation dans le plasma, qui va induire une redistribution des charges de manière à retrouver l'état d'équilibre initial qui est la quasi-neutralité [5]. Les densités des composantes à l'équilibre sont maxwelliennes :

$$n_{e,i}(r) = n_{0e,i} \exp\left(\frac{-q_{e,i}V}{k_b T_{e,i}}\right) \quad (1.4)$$

où  $n_{e0}$  et  $n_{i0}$  sont respectivement les densités des électrons et des ions avant d'introduire la charge  $q_a$ ,  $T_e$  et  $T_i$  leurs températures et  $V$  le potentiel créé par la charge test.

Pour un plasma simple d'électrons de charge  $-e$  et d'ions de charge  $+e$  ( $n_{0e} \approx n_{0i} = n_0$  quasi-neutralité), la densité de charge totale à une distance  $r$  de  $q_a$  est :

$$\rho(r) = n_i q_i + n_e q_e = en_0 \exp\left(\frac{-eV}{k_b T_i}\right) - en_0 \exp\left(\frac{eV}{k_b T_e}\right) = en_0 \left( \exp\left(\frac{-eV}{k_b T_i}\right) - \exp\left(\frac{eV}{k_b T_e}\right) \right) \quad (1.5)$$

Comme  $eV \ll k_b T_{i,e}$ , un développement limité de (1.5) donne :

$$\rho(r) \simeq \frac{-e^2 n_0 V}{k_b} \left( \frac{1}{T_i} + \frac{1}{T_e} \right). \quad (1.6)$$

Considérons l'équation de Poisson :

$$\nabla^2 V = \frac{-\rho}{\varepsilon_0} = \frac{e^2 n_0 V}{k_b \varepsilon} \left( \frac{1}{T_i} + \frac{1}{T_e} \right) \quad (1.7)$$

La solution de cette équation différentielle est :

$$V(r) = \left( \frac{q_a}{4\pi\varepsilon_0} \right) \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) \quad (1.8)$$

Avec :

$$\frac{1}{\lambda_D^2} = \frac{1}{\lambda_{De}^2} + \frac{1}{\lambda_{Di}^2} \quad (1.9)$$

Et :

$$\lambda_{De,i} = \left( \frac{\varepsilon_0 k_b T_{e,i}}{n_0 e^2} \right)^{1/2} \quad (1.10)$$

Le potentiel de la charge  $q_a$  est écranté sur une distance caractéristique  $\lambda_D$  qu'on appelle longueur de Debye. Au delà de cette longueur le plasma retrouve sa quasi-neutralité et l'effet de la charge est complètement effacé (1.3a).

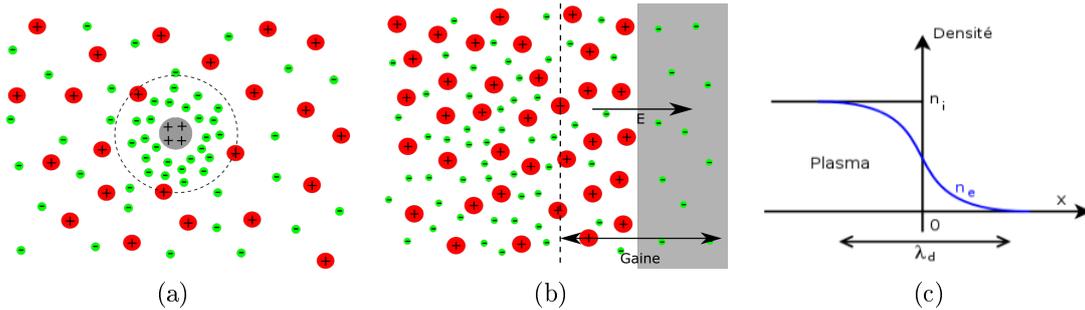


FIGURE 1.3 – La figure (a) représente un schéma de l'écrantage de la charge externe positive, (b) un schéma représentant un plasma au contact d'une interface et (c) la densité des électrons et des ions à cette frontière.

En fait, ce comportement collectif est typique d'un plasma mis en contact avec un corps quelconque. C'est le cas par exemple que l'on constate lorsque un plasma est en contact avec une paroi. Les électrons peuvent s'échapper (à cause de l'agitation thermique) du plasma pour aller intégrer la paroi (figure 1.3b). On aura alors un excès de charges positives d'un côté et un excès de charges négatives de l'autre. Ce déséquilibre de charge va induire un champ électrique  $\vec{E}$  se dirigeant du plasma vers l'interface, qui aura pour conséquence la diminution de la fuite des électrons. A l'équilibre une zone chargée va isoler le plasma de la paroi afin de préserver sa quasi-neutralité. Cette zone est appelée **gaine** et sa largeur est de l'ordre de quelques longueurs de Debye.

## 1.4 Plasma radio fréquence

Les sources de plasma dans les laboratoires se basent sur un apport d'énergie aux électrons d'un gaz neutre à basse pression. L'accélération qui en résulte ionise par collisions les atomes initialement neutres. Cet apport d'énergie se fait généralement suivant deux techniques de couplage : capacitif ou inductif. Le plus ancien et le plus utilisé est le couplage capacitif alimenté par une source de tension continue ou alternative. Dans le cas de tension alternative de fréquence radio, on parle de plasma de décharge radio fréquence (rf) [6]. Il est créé dans une chambre à basse pression (0.01 à 1 Torr), qui contient deux électrodes circulaires superposées, planes et parallèles, séparées par une distance de quelques centimètres. Elles sont alimentées par un tension alternative rf d'une puissance de 5 à 20W à une fréquence conventionnelle de 13.56MHz (figure 1.4). La densité du plasma obtenu peut aller de  $10^8$  à  $10^{10} cm^{-3}$ , la température des électrons varie de 1 à 5eV et celles des ions et des

neutres sont généralement de  $0.025\text{eV}$ . Comme nous l'avons vu précédemment, des gaines de quelques millimètres apparaissent aux voisinages des électrodes pour isoler le plasma.

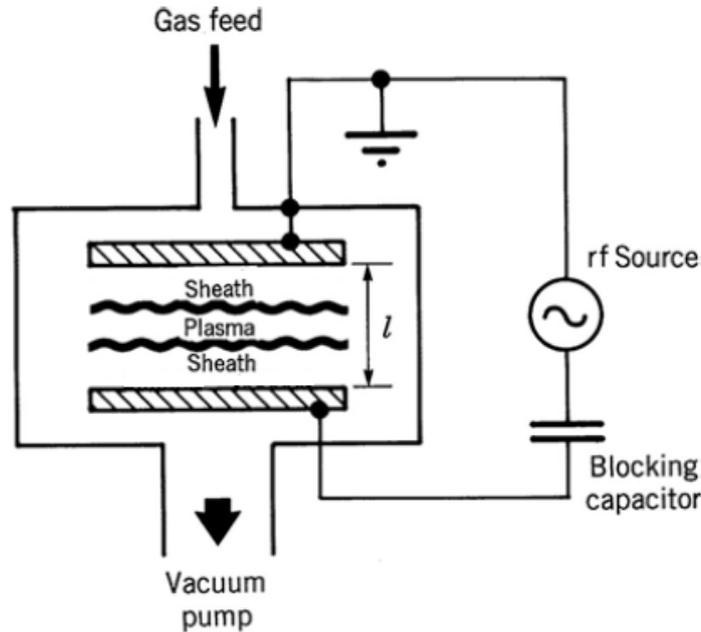


FIGURE 1.4 – Schéma d'un réacteur de plasma à décharge rf [6].

## 1.5 Plasmas poudreux (Dusty plasma)

Le plasma poudreux (*dusty plasma* en anglais), appelé aussi plasma complexe, est certainement l'état de la matière le plus abondant dans l'univers visible. C'est un gaz ionisé qui contient, en plus des électrons et des ions, des particules de matière condensée (diélectrique ou conductrice) de dimension de l'ordre de quelques nanomètres à une centaine de micromètres. Leur particularité principale est qu'elles ont une masse beaucoup plus grande que les autres composants du plasma et qu'elles acquièrent une charge électrique, généralement négative, beaucoup plus grande que celles des autres composants. Dans la nature, ce sont des poussières d'étoiles ou des débris de météorites, de satellites naturels ou de comètes. Dans les réacteurs de laboratoire, ces particules peuvent avoir leur origine dans les réactions chimiques entre les composants du plasma. Leur prolifération constitue en fait un inconvénient majeur pour la fabrication des composants microélectroniques par des procédés plasma. Cependant, ils peuvent aussi être intéressants notamment pour la fabrication de couches minces nanostructurées. D'un point de vue théorique, ces particules peuvent être une occasion d'étude intéressante de systèmes qui présentent une certaine analogie formelle avec les plasmas poudreux mais qui sont difficiles à étudier directement. On peut citer comme exemple le système d'ions refroidis piégés par des faisceaux laser, qui comme les cristaux coulombiens (voir ci-dessous) sont des systèmes à fort couplage. La différence est que le second système est pratiquement visible à l'œil nu contrairement au premier.

### 1.5.1 Formation des grains de poussières dans les réacteurs de laboratoire

Pour étudier les plasmas poudreux dans les laboratoires, les expérimentateurs injectent directement des particules préfabriquées, sphériques et généralement de taille relativement constante dans les réacteurs. Cependant, comme nous l'avons signalé plus haut, les particules de poussière peuvent aussi se former par différents processus physiques ou chimiques au sein même du plasma. Le type de matériau, les dimensions ou encore la vitesse de formation de ces poudres dépendent de la nature des composants du plasma. Comme exemple, nous allons décrire brièvement la formation de ces particules dans un plasma à décharge radio fréquence de silane et d'argon  $SiH_4/Ar$ . Elle passe par plusieurs phases que nous avons schématisées sur la figure (1.5). Dans la première phase, par une série de réactions chimiques les molécules de  $SiH_4$  se combinent en macromolécules qui peuvent atteindre 4 à 6nm de dimension. Ces dernières s'accumulent dans une deuxième phase en nano-cristaux jusqu'à ce que leur densité numérique soit de l'ordre de  $10^{11} - 10^{12} cm^{-3}$ . Suit une phase d'agrégation qui induit une diminution de leur densité et l'augmentation de leur taille. Ces nanoparticules suffisamment grande maintenant, se chargent électriquement et la répulsion qui en résulte diminue fortement le processus d'agrégation. À partir de là elles se comporte comme des substrats où des molécules se déposent sur elles augmentant lentement leurs dimensions [7]. Jusque-là, les nanoparticules (poussières) sont en lévitation dans le plasma, elles descendront vers la gaine au fur et à mesure que leurs masses augmentent. Si cette dernière phase persiste, il arrivera un moment où la particule sera trop lourde pour être maintenue en lévitation, elle se déposera alors sur l'électrode inférieure.

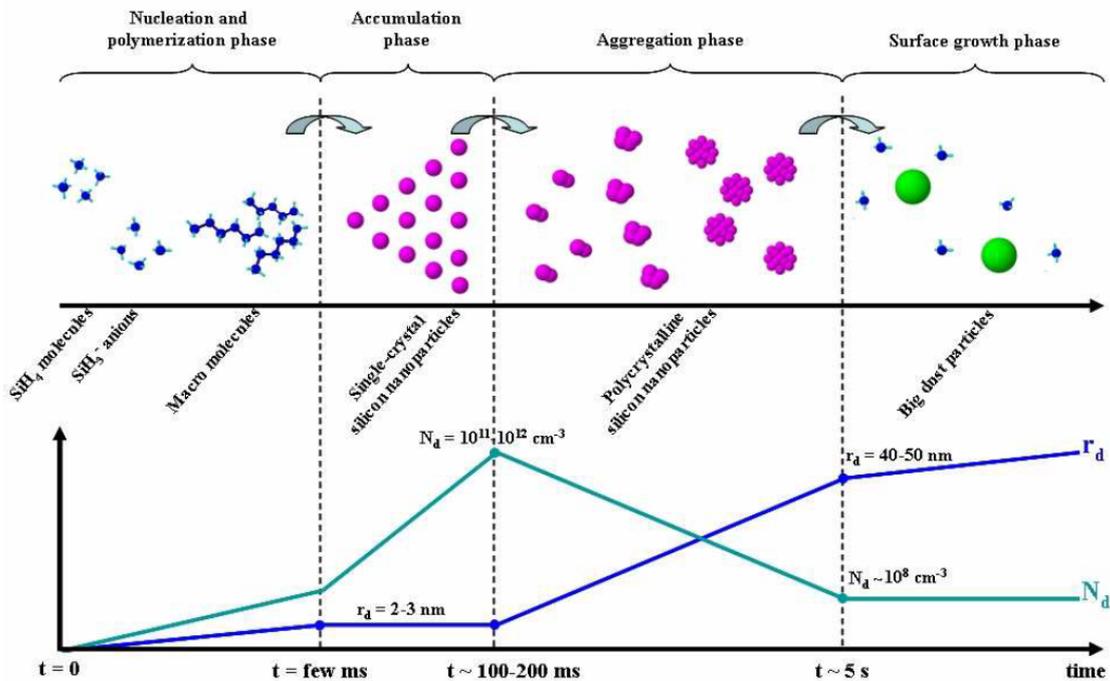


FIGURE 1.5 – Étapes de croissance de la molécule  $SiH_4$  en particule de poussière[7].

## 1.5.2 Processus de charge du grain de poussière

Plusieurs processus sont responsables de la charge électrique que les poussières acquièrent dans le plasma, le plus important étant la collection des électrons et des ions positifs par simple collision sur la surface de la particule. Comme la masse des électrons est très inférieure à celle des ions, leur agitation thermique fait que le grain de poussière a plus de chance d'acquérir initialement une charge négative, c'est à dire que son potentiel électrique est négatif. Cela constitue un point d'attraction des ions positifs. On aura donc deux flux vers la particule qui s'affronteront pour arriver à un certain moment à un état d'équilibre. Plusieurs théories traitent de ce processus. La plus connue est la théorie OML (*Orbital Motion Limited*) que nous allons présenter ici brièvement [8, 9].

Considérons un grain de poussière sphérique de rayon  $a$  dans un plasma, on peut le considérer comme isolé si ses dimensions sont très petites devant la longueur de Debye. Sa charge est exprimée par  $Q_g = CV_s$  avec  $C = 4\pi a\epsilon_0$  sa capacité et  $V_s$  le potentiel à sa surface ( $V_s < 0$ ) [10]. Dans le cas d'une distribution Maxwellienne des charges du plasma et connaissant les sections efficaces de collisions des charges électrique [8, 9], on trouve les expressions des deux flux :

$$I_e = -\pi en_{0e} a^2 \left( \frac{8k_b T_e}{\pi m_e} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left( \frac{eV_s}{k_b T_e} \right) \quad (1.11)$$

$$I_i = \pi en_{0i} a^2 \left( \frac{8k_b T_i}{\pi m_i} \right)^{\frac{1}{2}} \left( 1 - \frac{eV_s}{k_b T_i} \right) \quad (1.12)$$

avec  $m_e$  et  $m_i$  les masses des électrons et des ions.

À l'équilibre :

$$\frac{dQ_g}{dt} = I_i + I_e = 0 \quad (1.13)$$

En remplaçant  $I_e$  et  $I_i$  par leurs expressions 1.11 et 1.12 dans l'équation 1.13, on trouve :

$$\frac{n_{0e}}{n_{0i}} \sqrt{\frac{T_e m_i}{T_i m_e}} \exp\left( \frac{eV_s}{k_b T_e} \right) = \left( 1 - \frac{eV_s}{k_b T_i} \right). \quad (1.14)$$

En résolvant cette dernière on trouve la valeur du potentiel  $V_s$  et la charge du grain de poussière  $Q_g$ . Dans le cas d'un plasma rf la valeur de  $Q_g$  est de quelques milliers à quelques dizaines de milliers de charges élémentaire  $e$ .

Les grains de poussières peuvent aussi acquérir une charge par d'autres processus autres que les collisions avec les électrons et les ions, comme par exemple l'émission d'un photo-électron par une radiation ultraviolet, l'émission thermique des électrons, etc.

## 1.5.3 Forces agissant sur les grains de poussière

Plusieurs forces agissent sur les grains de poussière et contrôlent leur dynamique, cependant on ne citera ici que les plus importantes en terme d'intensité. On peut séparer ces forces en deux groupes : le premier englobe les interactions entre les particules de poussière et le milieu (le plasma), et le second les interactions entre ces grains.

### 1.5.3.1 Les interactions entre les particules de poussière et le milieu

**Force de gravité :** Comme la masse de ces grains est assez importante ( $\sim 10^{-13}kg$ ), son poids n'est pas négligeable devant les autres forces, leur expression est [9] :

$$\vec{F}_g = \frac{4\pi a^3}{3} \rho_g \vec{g} \quad (1.15)$$

avec  $\vec{g}$  l'accélération gravitationnelle,  $a$  le rayon du grain de poussière que l'on considère de forme sphérique et  $\rho_g$  la masse volumique du matériau qui le compose.

**Force électrostatique :** En présence d'un champs électrique  $\vec{E}$  extérieur, la particule de poussière de charge  $Q_g$  est soumise à la force :

$$\vec{F}_e = Q_g \vec{E}_{eff} \quad (1.16)$$

où  $\vec{E}_{eff}$  est le champs électrique effectif dans le plasma, c'est à dire, celui que ressent la particule. Il est donné par l'expression suivante [9] :

$$\vec{E}_{eff} = \vec{E} \left( 1 + \frac{a/\lambda_D}{3(1+a/\lambda_D)} \right). \quad (1.17)$$

**Force d'entraînement des neutres :** Cette force est due aux collisions avec les particules neutres du plasma, qui causent un transfert d'impulsion de ces derniers vers les grains de poussière. Pour une distribution Maxwellienne des vitesses des neutres, cette force s'écrit [11] :

$$\vec{F}_{dn} = \frac{-8}{3} \sqrt{2\pi} a^2 n_n m_n V_{tn} (\vec{v}_g - \vec{v}_n) \quad (1.18)$$

où  $V_{tn} = (3k_B T_n / m_n)^{1/2}$  est la vitesse thermique des particules neutres,  $\vec{v}_g$  et  $\vec{v}_n$  sont respectivement les vitesses des grains de poussière et des particules neutres.

**Force d'entraînement des ions :** La force d'entraînement des ions est due aux collisions avec les ions, elle peut causer un transfert d'impulsion de deux manières : par collisions directes ou à distance (interaction coulombienne). Elle s'écrit [11] :

$$\vec{F}_{di} = \vec{F}_{di}^{coll} + \vec{F}_{di}^{Coul}, \quad (1.19)$$

où les expressions des forces sont données par :

$$\vec{F}_{di}^{coll,Coul} = n_i m_i \sigma^{coll,Coul} V_{it} \vec{v}_i \quad (1.20)$$

avec  $\sigma^{coll}$  et  $\sigma^{Coul}$  sont respectivement les sections efficaces des collisions directs et Coulombiennes, et  $V_{it} = (v_i^2 + 8k_b T_i / \pi m_i)^{1/2}$ .

### 1.5.3.2 Les interactions entre les particules de poussière

**Interaction coulombienne écrantée :** L'interaction Coulombienne écrantée est due aux répulsions entre les grains de poussières qui possèdent des charges de même signe mais écranté par les charges du plasma. L'énergie potentielle d'interaction entre deux grains de même charge  $Q_g$  s'écrit [12] :

$$U_c = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_g^2}{r_{i,j}} \exp\left(\frac{-r_{i,j}}{\lambda_D}\right) \quad (1.21)$$

avec  $r_{i,j} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  la distance entre la particule  $i$  et la particule  $j$ .

**Interaction dipôle-dipôle écrantée :** Lorsque une particule de poussière diélectrique est immergée dans un plasma anisotrope, la répartition des charges à sa surface n'est plus uniforme, cela conduit à l'apparition d'un dipôle électrique associé à celle-ci [1]. Le potentiel d'interaction entre deux moments dipolaires parallèles de même module  $d$ , centrés et perpendiculaires sur un même plan avec une distance  $r$  qui les sépare, est répulsif, il s'écrit [12] :

$$U_d = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{d^2}{r_{i,j}^3} \left( 1 + \frac{r_{i,j}}{\lambda_D} \right) \exp\left(\frac{-r_{i,j}}{\lambda_D}\right) \quad (1.22)$$

On peut voir de la figure 1.6 la force exercée par les lignes de champ créées par un moment dipolaire sur un autre moment dipolaire, celle-ci montre que la force est répulsive.

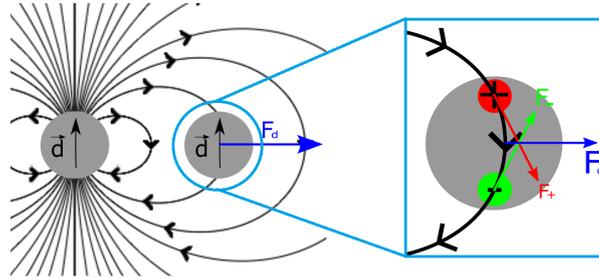


FIGURE 1.6 – Force exercée par les lignes de champ créées par un moment dipolaire sur un autre moment dipolaire.

### 1.5.4 Cristaux coulombiens

Pour des paramètres de couplage assez élevés, les grains de poussière peuvent s'organiser sous forme de structures cristallines. C'est l'équilibre entre les forces de confinement et la répulsion électrostatique écrantée entre les particules qui en est l'origine. Ces structures cristallines à une, deux ou trois dimensions sont appelées "cristaux coulombiens".

À 3D les structures cristallines que l'on observe en fonction de la température sont CFC, CC et HC. À 2D la structure est exclusivement hexagonale (en absence de champ magnétique), mais la transition de phase solide-fluide se fait à travers une phase particulière dite *hexatic* (pour un paramètre de couplage  $\sim 70$ ).

Les particules de poussière peuvent être créées dans le plasma lui-même (paragraphe 1.5.1), ou en injectant directement dans le plasma des particules microscopiques sphériques de mélanine-formaldéhyde, de carbone ou de verre [13]. Pour pouvoir étudier leur comportement dans un plasma rf [4] on utilise le dispositif dont le schéma est représenté sur la figure 1.7. C'est le même dispositif décrit dans le paragraphe 1.5.1 pour créer les plasmas à décharge rf auquel on a ajouté un faisceau laser étalé horizontalement avec une faible épaisseur pour éclairer les grains de poussière et une caméra CCD pour observer leurs mouvements.

Les grains de poussière se positionnent sous certaines conditions sous forme de cristaux coulombiens à deux dimensions (2D) de structure hexagonale (figure 1.8)[4, 14]. Ces grains lévitent dans la gaine inférieure ou à la frontière de celle-ci avec le plasma. Cette position d'équilibre résulte de la compétition de trois forces : la force exercée par le champ électrique qui règne dans cette région, la force de gravité et la force d'entraînement des ions (figure 1.9).

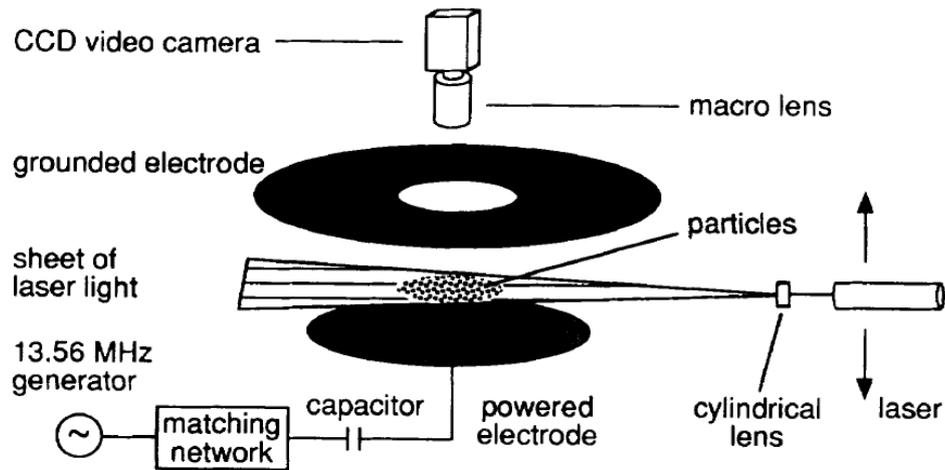


FIGURE 1.7 – Schéma du dispositif pour étudier les comportement des grains de poussière dans un plasma rf [4].

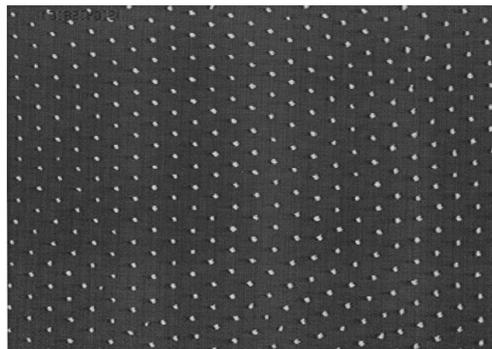


FIGURE 1.8 – Image CCD du plan horizontal d'un cristal coulombien [15].

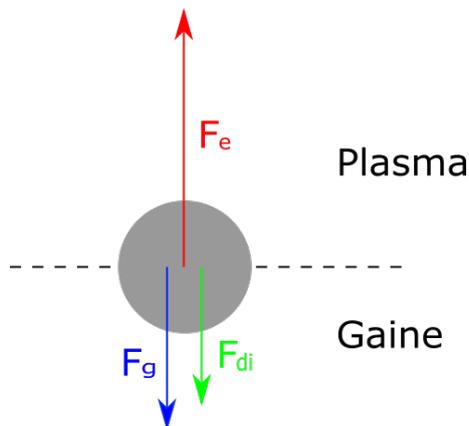


FIGURE 1.9 – Les forces verticales qui s'exercent sur les grains de poussière.

# Chapitre 2

## Modélisation

### 2.1 Introduction

Pour étudier l'influence de l'interaction dipôle-dipôle sur les propriétés du cristal coulombien bidimensionnel, on va utiliser la méthode de simulation de la dynamique moléculaire couplée avec la méthode de Nosé-Hoover pour le contrôle de la température que nous allons détailler dans la section 2.3.

### 2.2 Dynamique moléculaire

#### 2.2.1 Introduction

La dynamique moléculaire [16] est une méthode de simulation numérique qui consiste à étudier la dynamique d'un système de particules avec une évolution discrète du temps. Pour cela on fait le bilan des forces qui s'exercent sur chacune des particules qui constituent le système, ensuite on résout les équations du mouvement de ce dernier par l'une des méthodes d'intégration qui existent (Verlet, leap-frog,...).

#### 2.2.2 Modélisation des forces

Dans le paragraphe 1.5.3 on a cité certaines des forces qui s'exercent sur les grains de poussières. Comme ces derniers lévitent dans un état d'équilibre dans la lisière de gaine, on peut déduire que la force exercée par le champ électrique qui règne dans la gaine, la force de gravité et la force d'entraînement des ions s'équilibrent. Au premier ordre, on peut les modéliser par une seule force qui dérive d'un potentiel harmonique suivant la direction verticale ( $Oz$ ) [17] :

$$\vec{F}_{conf,v} = -m\Omega_v z \vec{k} \quad (2.1)$$

où  $m$ ,  $\Omega_v$  et  $z$  sont respectivement la masse du grain de poussière, le paramètre de confinement vertical et la position suivant l'axe ( $Oz$ ) du grain. Ici, on a considéré l'origine de l'axe ( $Oz$ ) confondue avec la position d'équilibre verticale.

Pour confiner horizontalement les grains de poussières dans le plasma à décharge, expérimentalement l'une des techniques utilisées est d'incurver légèrement les électrodes pour créer des forces horizontales dirigées vers le centre (que l'on prend comme origine du plan  $Oxy$ ). On modélise aussi ces forces de confinement par une force qui

dérive d'un potentiel harmonique suivant les directions  $(ox)$  et  $(oy)$  [17] :

$$\vec{F}_{conf,h} = -m\Omega_h(x\vec{i} + y\vec{j}) \quad (2.2)$$

où  $\Omega_h$  est le paramètre de confinement horizontal,  $x$  et  $y$  sont les positions des grains.

La force d'entraînement des neutres sera modélisée par une force de friction [17] :

$$\vec{F}_{fr} = -m\nu\vec{v} \quad (2.3)$$

$\nu$  étant la fréquence d'amortissement des neutres.

La force exercée par une particule de poussière  $j$  sur une particule  $i$  dérive des potentiels coulombien et dipolaire écrantés, donner par les expressions (1.21) et (1.22), par rapport au vecteur  $\vec{r}_{j,i}$  qui reliant la particule  $j$  à la particule  $i$  :

$$\vec{F}_{int} = -\vec{\nabla}_{\vec{r}_{j,i}}(U_c + U_d). \quad (2.4)$$

On trouve :

$$\vec{F}_{int} = \frac{-1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{Q_g^2}{r_{i,j}^3} \left( 1 + \frac{r_{i,j}}{\lambda_D} \right) + \frac{3d^2}{r_{i,j}^5} \left( 1 + \frac{r_{i,j}}{\lambda_D} + \frac{r_{i,j}^2}{3\lambda_D^2} \right) \right) \exp\left(\frac{-r_{i,j}}{\lambda_D}\right) \vec{r}_{i,j}. \quad (2.5)$$

Ici, on a considéré que les particules de poussières ont toutes la même charge, leurs moments dipolaire ont tous le même module et sont tous parallèles, se qui a pour conséquence d'annuler la contribution des interactions entre les charges (monopoles) et les dipôles.

## 2.3 Thermostat Nosé-Hoover

Pour contrôler la température dans une simulation dynamique moléculaire, il existe plusieurs méthodes mais celle qu'on va utiliser ici est la méthode Nosé-Hoover. La méthode Nosé-Hoover [18, 19] est basée sur l'idée de supposer un thermostat fictif, simulé par un paramètre  $s$ , en contact avec le système à contrôler. Le lagrangien peut s'écrire comme suit :

$$\mathcal{L} = \sum_i \frac{1}{2} m_i s^2 \dot{r}_i^2 - \phi(\vec{r}) + \frac{Q}{2} \dot{s}^2 - (N_{df} + 1) k_B T_0 \ln s \quad (2.6)$$

avec  $N_{df}$  le nombre de degrés de liberté du système,  $T_0$  la température qu'on veut imposer,  $\phi(\vec{r})$  est l'énergie potentielle. Le terme d'énergie cinétique  $\frac{Q}{2} \dot{s}^2$  introduit la dynamique de la grandeur  $s$ ,  $Q$  étant un paramètre ayant la dimension d'une *energie*  $\times$  *temps*<sup>2</sup>, et le dernier terme  $(N_{df} + 1) k_B T_0 \ln s$  correspond à l'énergie potentielle de la grandeur  $s$ , elle est prise sous cette forme car elle représente l'ensemble canonique [18, 19].

A partir des équations d'Euler-Lagrange :

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A} = 0 \quad (2.7)$$

avec  $A$  une coordonnée généralisée quelconque, on trouve les equations du mouvement qui vont décrire le système :

$$\ddot{r}_i = \frac{1}{m_i} \vec{F}_i - \gamma \dot{r}_i \quad (2.8)$$

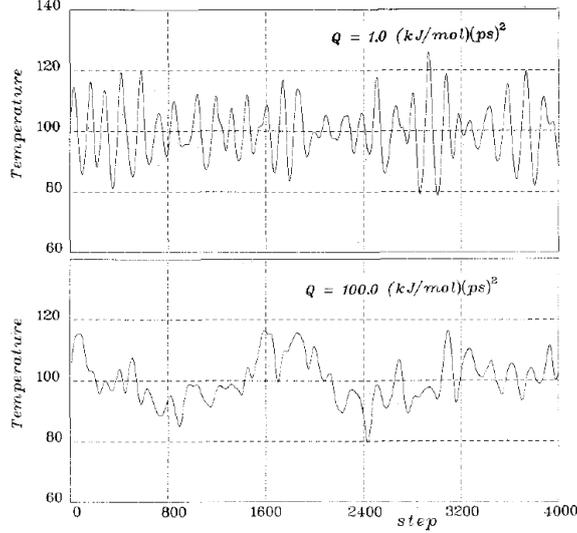


FIGURE 2.1 – Comparaison de la fluctuation de la température pour deux valeur de  $Q$  à une température  $T = 100K$  [18].

$$\dot{\gamma} = \sum_i \frac{m_i \dot{r}_i^2}{Q} - \frac{N_{df} k_B T_0}{Q} \quad (2.9)$$

Avec :

$$\gamma = \frac{\dot{s}}{s} \quad (2.10)$$

On retombe sur des équations qui ressemblent à celle du système à étudier avec cependant un terme supplémentaire qui permet de contrôler la température à travers une force de friction dont le coefficient satisfait une équation différentielle ordinaire du premier ordre relativement simple à intégrer.

Au final, on aura une température qui va fluctuer au tour de la température  $T_0$  (voire figure 2.1), la manière de fluctuer dépend fortement du paramètre  $Q$  qu'on prend généralement [20] :

$$Q = \frac{N_{df} k_B T_0}{\omega_d^2} \quad (2.11)$$

où  $\omega_d$  est la fréquence plasma des grains de poussière.

## 2.4 Méthode d'intégration leap-frog

Nous avons opté pour la méthode leap-frog [21] qui est une méthode d'intégration numérique d'ordre 2. Elle consiste à discrétiser les équations du mouvement suivant un pas de discrétisation  $\Delta t$  et de calculer les positions à un instant  $t$  et les vitesses à un instant décalé  $t + \frac{\Delta t}{2}$ .

En discrétisant les équations 2.8 et 2.9 avec la méthode leap-frog suivant le schéma illustré par la figure 2.2, on trouve :

$$\vec{F}_i(t) = \vec{F}_i(\vec{r}(t)) \quad (2.12)$$

$$\gamma(t) = \Delta t \left[ \sum_i \frac{m_i \dot{r}_i(t - \Delta t/2)^2}{Q} - \frac{N_{df} k_B T_0}{Q} \right] + \gamma(t - \Delta t) \quad (2.13)$$

$$\dot{\vec{r}}_i(t + \Delta t/2) = \frac{1}{\frac{1}{\Delta t} + \frac{\gamma(t) + \nu}{2}} \left[ \frac{\vec{F}_i(t)}{m} + \left( \frac{1}{\Delta t} - \frac{\gamma(t) + \nu}{2} \right) \dot{\vec{r}}_i(t - \Delta t/2) \right] \quad (2.14)$$

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \Delta t \dot{\vec{r}}_i(t + \Delta t/2) \quad (2.15)$$

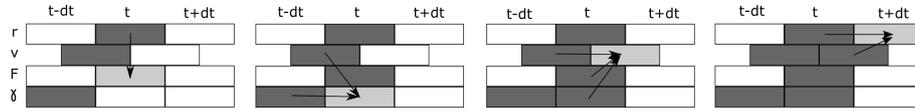


FIGURE 2.2 – Schéma d'intégration utilisé pour le thermostat Nosé-Hoover avec la méthode leap-frog.

# Chapitre 3

## Études des effets de l'interaction dipôle-dipôle sur les propriétés des cristaux coulombiens

### 3.1 Introduction

À notre connaissance, aucune étude sur les cristaux coulombiens bidimensionnels n'a pris en compte la force dipolaire, bien que cette force soit connue depuis deux décennies [1]. Deux raisons à cela : la faiblesse de l'interaction elle-même et la difficulté à mesurer expérimentalement la valeur du moment dipolaire associé aux particules. Un article paru à la fin de 2015 [2] a proposé une méthode basée sur la comparaison d'un paramètre mesuré expérimentalement à sa valeur calculée par simulation. Nous nous inscrivons dans cette démarche en proposant une comparaison plus complète de systèmes avec et sans interaction dipolaire. Après avoir simulé les cristaux coulombiens pour différentes valeurs du moment dipolaire par la méthode de la dynamique moléculaire décrite dans le chapitre 2, nous avons étudiés les effets de l'interaction dipôle-dipôle sur ces cristaux en calculant des grandeurs structurales telles que la fonction de distribution de pair (FDP), la densité des grains de poussière et le paramètre d'ordre local d'orientation des liaisons, mais aussi des grandeurs dynamique comme le spectre des phonons et la transition de phase solide-liquide.

### 3.2 Paramètres des simulations

Pour étudier l'effet de l'interaction dipôle-dipôle sur certaines propriétés d'un cristal coulombien mono couche bidimensionnel, nous avons simulé un système de 3000 particules de même masse  $m_g = 6.1 \times 10^{-13}kg$  et de même charge électrique  $Q_g = -16000e$ . Le paramètre de confinement horizontale  $\Omega_h = 1Hz$ , verticale  $\Omega_v = 100Hz$  et la fréquence d'amortissement des neutres  $\nu = 1s^{-1}$ . Nous avons considéré que chaque particule porte, en plus de la charge électrique, un moment dipolaire perpendiculaire au plan du cristal et pointant dans une même direction. Nous avons simulé plusieurs valeurs du moment dipolaire allant de  $10$  à  $100 \times 10^{-19}C.m$  en plus du cas sans interaction dipolaire qui correspond à  $0C.m$ . Pour chaque valeur du moment dipolaire nous avons simulé trois températures, à savoir 300K, 500K et 1000K. Le pas de temps est choisi tel qu'il soit 80 à 100 fois plus petit que le plus petit temps caractéristique du système. Il est de l'ordre de  $10^{-4}s$  pour un nombre de pas de 50

000 à 100 000.

Pour chaque système, nous avons démarré la simulation par une distribution aléatoire uniforme des positions et maxwellienne pour les vitesses avec une évolution libre de la température jusqu'à atteindre l'équilibre. Puis, dans une seconde phase, la simulation reprend avec un contrôle de la température qui fait évoluer le système vers la température désirée.

### 3.3 Fonction de distribution de paire

La FDP décrit la distribution des distances entre les paires de particules, elle s'interprète aussi comme la probabilité de trouver deux particules séparées par une distance  $r$ . Pour une structure à deux dimensions elle s'écrit [22, 23] :

$$g(r) = \frac{1}{2\pi r dr N n} \left\langle \sum_{i,j}^N \delta(r_{i,j} - r) \right\rangle \quad (3.1)$$

Avec  $N$  le nombre de particules,  $n$  la densité moyenne,  $2\pi r dr$  l'élément de surface situé à une distance  $r$  d'une particule  $i$  (figure 3.1) et  $r_{i,j}$  la distance entre la particule  $i$  et la particule  $j$ , la moyenne est faite sur l'ensemble des particules.

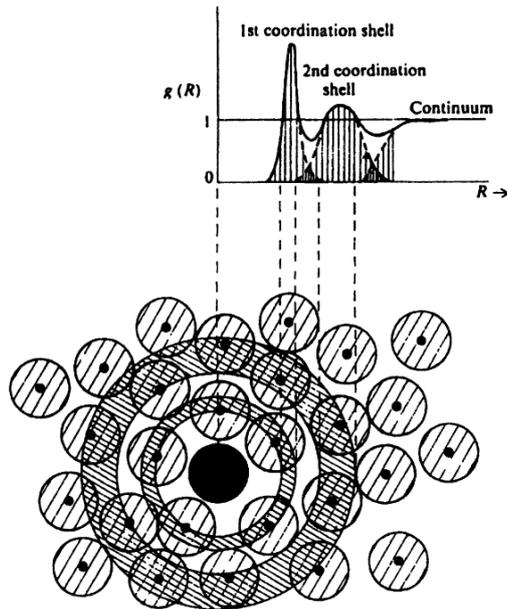


FIGURE 3.1 – Schéma expliquant la fonction de distribution de paire, pour un fluide monoatomique [23].

On peut voir sur la figure (3.2a) la FDP qui correspond à un liquide de Lennard-Jones et sur la figure (3.2b) celle d'un cristal parfait à deux dimensions de structure hexagonale. La première remarque que l'on peut faire est que pour un  $r$  inférieur à une valeur minimale  $r_{min}$  la fonction de distribution de pair est égale à zéro, cette valeur indique la largeur effective moyenne des particules. La différence entre ces deux courbes est que les pics ont une grande largeur pour le liquide, alors que pour la structure cristalline les pics sont très fins. Cette largeur est principalement due au mouvement thermique aléatoire des particules qui est plus important dans les liquides.

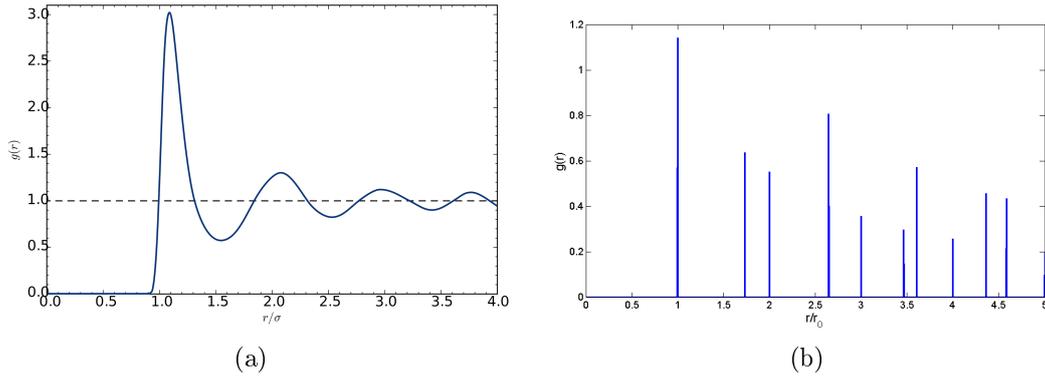


FIGURE 3.2 – La figure (a) représente la fonction de distribution de paire d'un liquide de Lennard-Jones et (b) celle d'un cristal parfait à deux dimensions de structure hexagonale.

À partir des positions des particules obtenues par la simulation, on a calculé la fonction de distribution de paire aux centres des cristaux obtenus (15% du rayon) là où ils sont le plus homogènes. Une partie de ces FDP est représentée sur les figures (3.3a), (3.3b) et (3.3c). On remarque que ces fonctions sont sous forme de pics de largeur relativement faible, ce qui indique une structure cristalline très bien ordonnée à longue distance. Le faible étalement de ces pics s'explique par les faibles déplacements des particules par rapport à leurs positions d'équilibre.

Les trois premiers pics représentent les premiers, deuxièmes et troisièmes plus proche voisins. Les rapports entre les distances du deuxième et du troisième voisin par rapport à celles du première sont représentés sur la figure 3.4, elles correspondent à celles d'un cristal à deux dimensions de structure hexagonale, c'est-à-dire :

$$r_2/r_1 = \sqrt{3}, r_3/r_1 = 2. \quad (3.2)$$

Nous avons représenté leurs distances en fonction du moment dipolaire et de la températures sur les figures (3.5a), (3.5b) et (3.5c). On constat alors une variation linéaire de ces distances en fonction du moment dipolaire. De plus, comme on peut le voir sur la figure 3.6, les pentes de ces droites varient très peu sur la plage de températures que nous avons adoptée. Donc, nous pouvons conclure à une indépendance par rapport à la température dans la plage considérée.

Ce comportement peut servir comme moyen de mesure expérimental indirect du moment dipolaire porté par les particules. En effet, on peut écrire d'après ce que l'on vient de dire :

$$\begin{aligned} \Delta r_1 &= \alpha_1 d \\ \Delta r_2 &= \alpha_2 d \\ \Delta r_3 &= \alpha_3 d \end{aligned} \quad (3.3)$$

où  $\Delta r_i$  est l'écart de la distance du  $i$ ème proche voisin par rapport à la distance calculée sans interaction dipôle-dipôle  $\Delta r_i = r_i - r_{i0}$ . Les pentes que nous avons déduites de nos calculs sont :

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 0.821 \times 10^{14} C^{-1} \\ \alpha_2 &= 1.424 \times 10^{14} C^{-1} \\ \alpha_3 &= 1.658 \times 10^{14} C^{-1}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

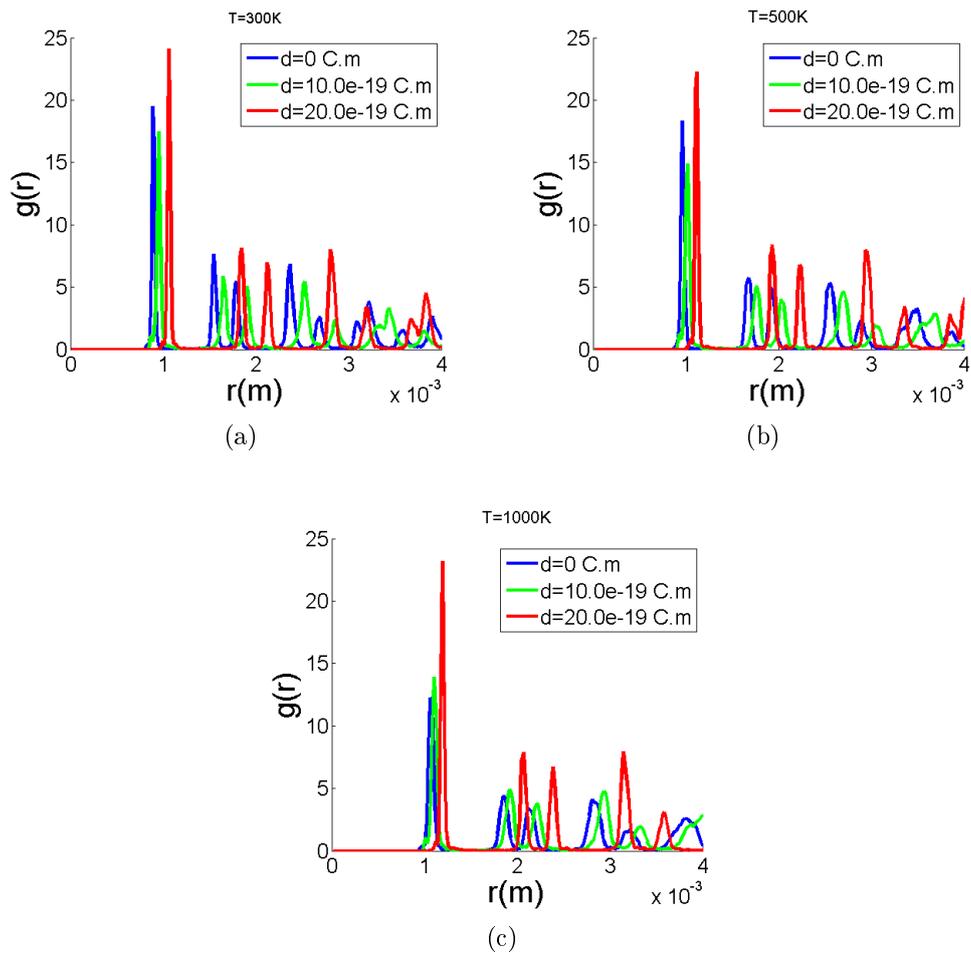


FIGURE 3.3 – Fonctions de distribution de paire obtenues par dynamique moléculaire pour une charge  $Q_d = -16000e$  et des valeurs du moment dipolaire de 0, 10 et  $20 \times 10^{-19} C.m$ , pour des valeurs de la température (a)  $T = 300K$ , (b)  $T = 500K$  et (c)  $T = 1000K$ .

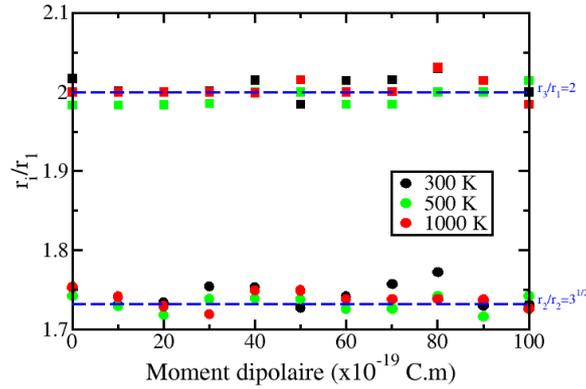


FIGURE 3.4 – Les rapports entre distance du deuxième voisin et celle du troisième voisin sur celle du première, comparé à celle du cristal à deux dimension de structure hexagonale.

En combinant les relations (3.2) et (3.3) on trouve la relation

$$d = \frac{\Delta r_1}{3} \left( \frac{1}{\alpha_1} + \frac{\sqrt{3}}{\alpha_2} + \frac{2}{\alpha_3} \right) \quad (3.5)$$

### 3.4 Densités des grains de poussière

Pour calculer la densité locale nous avons utilisé la décomposition de Voronoï, pour calculé l'aire de chaque cellule et déduit la densité qui est égale à l'inverse de cet aire. Sur les figures 3.7a, 3.7b et 3.7c on a représenté les densités moyennes des cristaux monocouches en fonction de la distance par rapport au centre du système. On remarque que la densité au centre du cristal diminue lorsque le moment dipolaire ou la température augmentent. On constate aussi dans ce même cas de figure, que le profil de la densité diminue plus lentement lorsqu' l'on s'éloigne du centre du cristal. On peut conclure que le moment dipolaire tend à rendre le cristal plus homogène que ne le fait l'interaction coulombienne écrantée. Plus le moment est grand plus le cristal est homogène.

Les figures 3.8 et 3.9 résument ce que l'on vient de dire, on y a représenté la densité au centre du cristal en fonction du moment dipolaire (figure 3.8) calculée pour trois températures 300K, 500K et 1000K. On remarque que celles-ci diminuent lorsque le moment dipolaire augmente.

Pour quantifier l'homogénéité, nous avons choisi de mesurer le rayon de la région du cristal où la variation de la densité ne descend pas au dessous de 15% de sa valeur au centre. Sur la figure 3.9 on a représenté le rayon de la surface homogène en fonction du moment dipolaire pour les trois températures considérées. On observe que le rayon augmente avec le moment dipolaire de manière linéaire.

Ces deux résultats peuvent aussi être utilisés pour estimer expérimentalement le moment dipolaire porté par les particules.

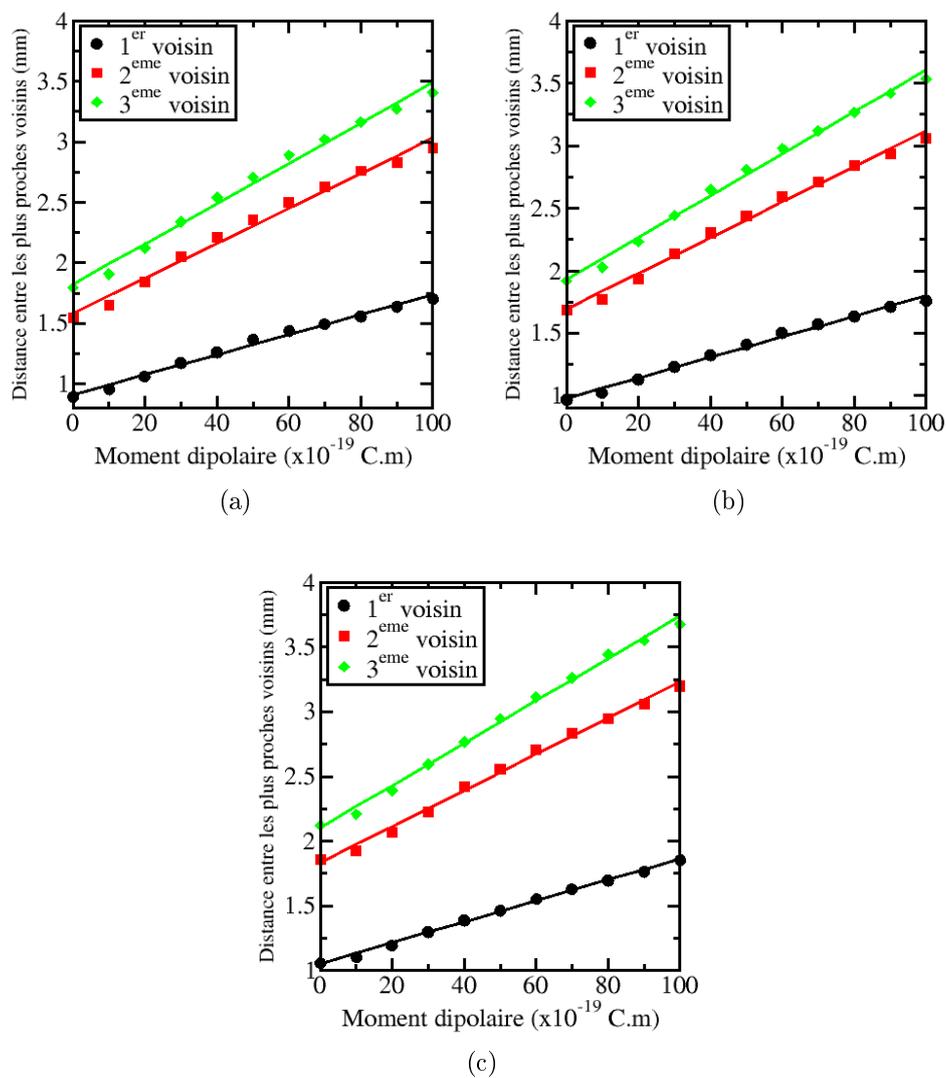


FIGURE 3.5 – Position des trois premiers pics (distance entre une particule et ces 3 plus proches voisins) en fonction du moment dipolaire, pour différentes valeurs de la température  $T = 300K$  (a),  $T = 500K$  (b) et  $T = 1000K$  (c).

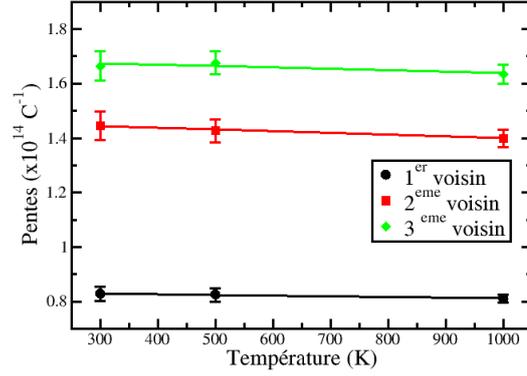


FIGURE 3.6 – Pentés des courbes des distances entre une particule et ces 3 plus proches voisins représenté dans les figures 3.5a, 3.5b et 3.5c, en fonction de la température.

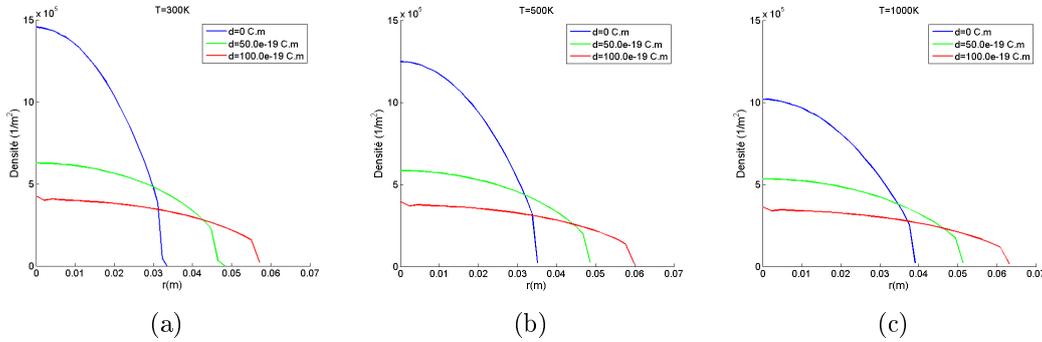


FIGURE 3.7 – Densité des grains de poussière en fonction de la distance par rapport au centre de l'échantillon pour différentes valeurs du moment dipolaire et de la température, (a)  $T = 300K$ , (b)  $T = 500K$  et (c)  $T = 1000K$ .

### 3.5 Paramètre d'ordre local d'orientation des liaisons

Le paramètre d'ordre local d'orientation des liaisons (*The local bond-orientation parameter* en anglais) permet de distinguer les déformations par cisaillement des cellules élémentaires du cristal à deux dimensions. Son expression est [23, 24] :

$$\Psi_6(n) = \frac{1}{N_b} \sum_{j=1}^{N_b} \exp(i6\theta_{nj}) \quad (3.6)$$

où  $\theta_{nj}$  représente l'angle d'orientation de la liaison qui lie la particule  $n$  et la particule  $j$  par rapport à un axe prédéfini et  $N_b$  le nombre de plus proches voisins. Pour une structure hexagonale parfaite  $|\Psi_6| = 1$  et sa valeur décroît en fonction de la déformation.

Sur la figure 3.10 on peut voir le paramètre d'ordre local d'orientation des liaisons codé en couleur de chaque grain de poussière. On constate que la grande majorité des cellules sont parfaitement hexagonales. Mais, on trouve des chaînes de défauts, qui sont des dislocations dues aux changements d'orientation des vecteurs de bases

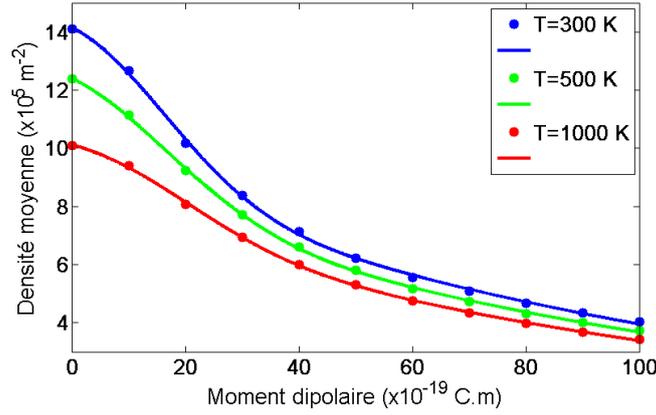


FIGURE 3.8 – Densité moyenne au centre des échantillons (15% du rayon de l'échantillon) en fonction du moment dipolaire pour différentes températures.

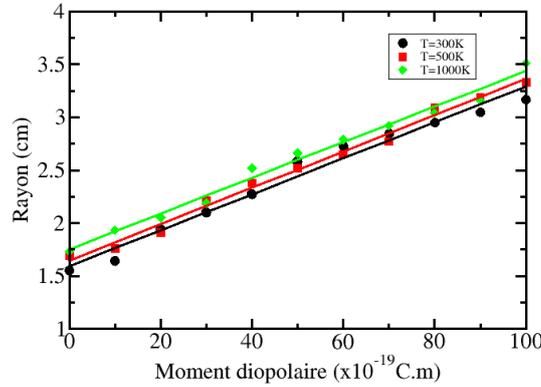


FIGURE 3.9 – Rayon de la surface où la différence densité est de  $\pm 15\%$  de la densité au centre de l'échantillon en fonction du moment dipolaire.

de la maille élémentaire (figure 3.11). Ces changements d'orientation sont dues au potentiel de confinement horizontal qu'on a adopté (équation 2.2) [17].

Nous n'avons constaté aucune différence entre les structures pour les différentes valeurs du moment dipolaire pour chacune des trois températures. C'est à dire que le nombre de défauts et leur répartition de ceux-ci ne sont pas modifiés par l'interaction dipolaire.

### 3.6 Courbes de dispersion

Jusqu'ici nous avons étudié des propriétés structurales du cristal coulombien monocouche. Qu'en est il des propriétés dynamiques? Dans ce qui suit nous allons étudier le spectre des phonons qui est une de ces propriétés. Pour cela nous allons calculer le spectre des vitesses des déplacements aléatoires des grains de poussière qui sont dus à l'agitation thermique [25, 26]. On va utiliser la transformée de Fourier des courants de vitesses qui va nous donner la densité d'énergie des vibrations qui

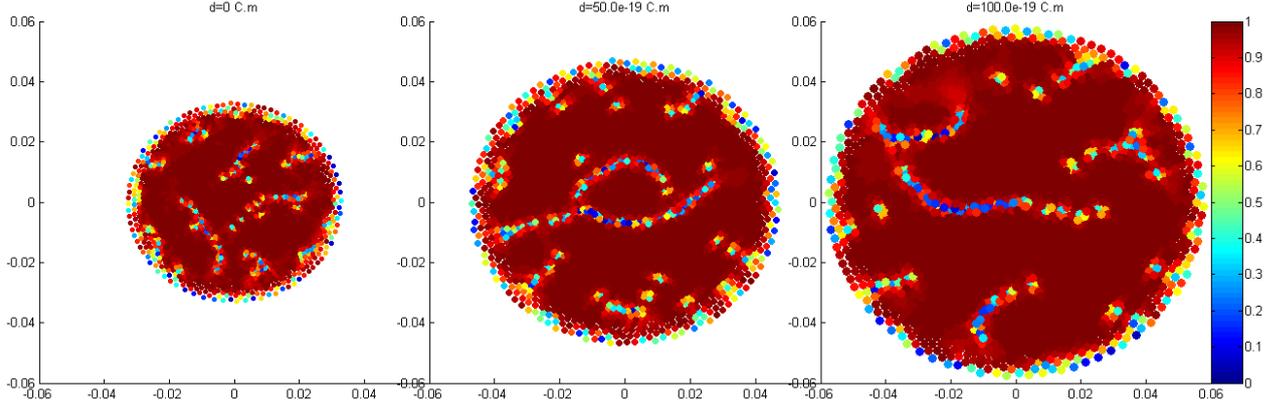


FIGURE 3.10 – Paramètre d'ordre local d'orientation des liaisons des grains de poussière pour différentes valeurs du moment dipolaire à une température  $T = 300K$ .

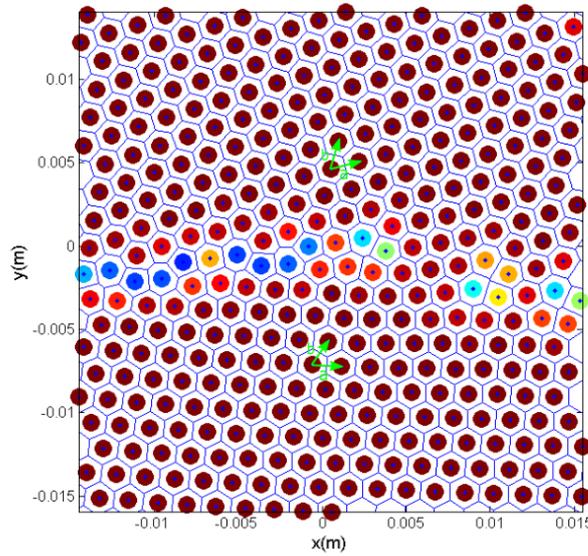


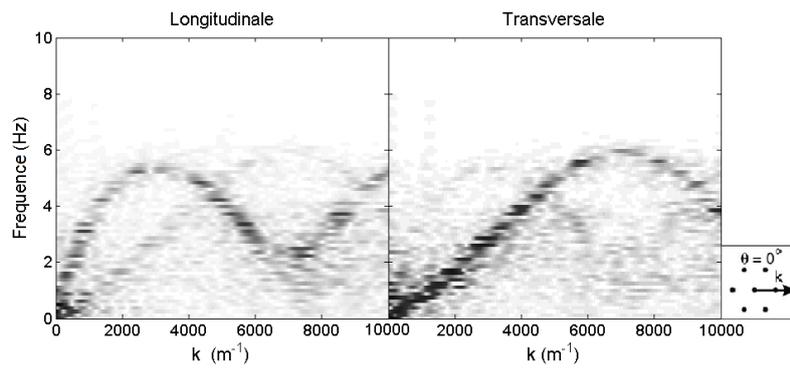
FIGURE 3.11 – Cristal coulombien obtenu par simulation de dynamique moléculaire, pour des charges de grains de poussières  $Q_d = 16000e$  et un moment dipolaire  $d = 100.0 \times 10^{-19}C.m$  à une température  $T = 300K$ .

se propagent dans le cristal. Elle s'écrit [26] :

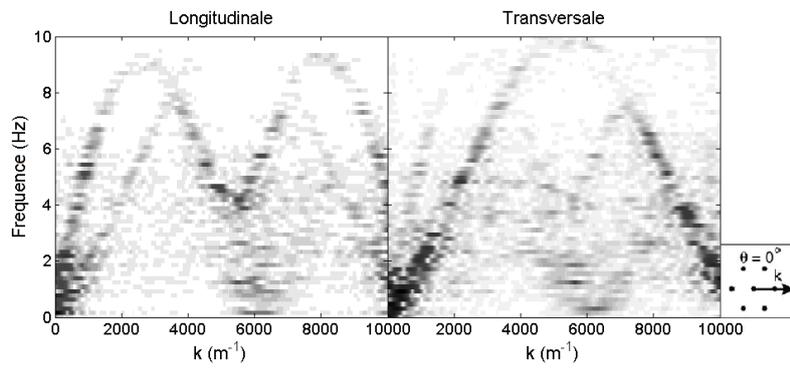
$$\vec{V}(k, \omega) = \frac{2}{\tau S} \int_0^\tau \int_0^S \vec{v}(\vec{r}, t) \exp\left(-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)\right) d\vec{r} dt, \quad (3.7)$$

où  $\tau$  et  $S$  sont respectivement la période et la surface d'intégration (ici  $\tau = 10000\Delta t$  et  $S$  est égale à la zone dont le rayon est égal à 25% du rayon du cristal).

Sur les figures 3.12a et 3.12b on a représenté les résultats obtenus pour des cristaux coulombien avec un moment dipolaire de 0 et de  $30 \times 10^{19}C.m$  à une température  $T = 300K$ . On voit l'apparition de points de forte intensité dans l'espace  $(\omega, k)$  qui correspondent aux densités d'énergie des vibrations les plus intenses. Ces points forment deux courbes de dispersions, l'une correspond aux ondes longitudinale et l'autre aux ondes transversales. On peut apercevoir aussi d'autres taches qui sont moins intenses mais qui ne font pas partie des courbes de dispersion, ces modes de vibration sont dus aux dislocations dont on a parlé dans le paragraphe précédent.



(a)

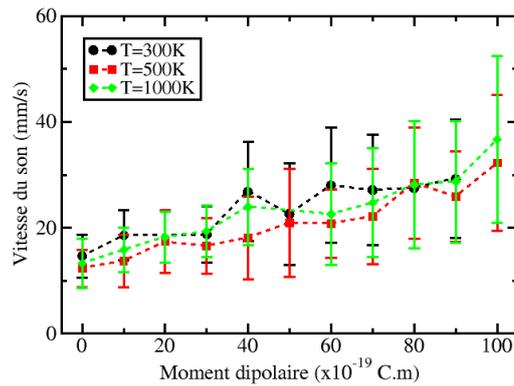


(b)

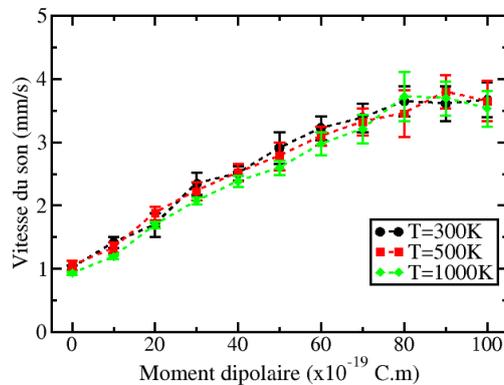
FIGURE 3.12 – Spectre des vitesses des déplacements aléatoires des grains de poussière pour des valeurs du moment dipolaire  $d = 0C.m$  (a) et  $d = 30.0 \times 10^{-19}C.m$  (b) pour une température  $T = 300K$ .

Le comportement global des ces courbes reste inchangé en fonction du moment dipolaire : les courbes des ondes longitudinale présentent toutes un maximum qui se situe a  $k = \pi/a$  et les courbes des ondes transversales restent linéaire, c'est à dire  $\omega$  est proportionnelle à  $k$  et atteint un maximum aux frontières de la zone de Brillouin ( $k = 2\pi/a$ ). Cependant, on remarque que la largeur de la zone de Brillouin diminue en fonction du moment dipolaire, ce qui s'explique par l'augmentation de la distance moyenne entre particules dont on a parlé dans le paragraphe (3.3). Mais la principale variation se trouve dans les vitesses de propagation de ces deux ondes données par les pentes des tangentes aux courbes quant  $k \rightarrow 0$ . Nous les avons représentées en fonction du moment dipolaire sur les figures 3.13a et 3.13b. La première montre que la vitesse de l'onde longitudinale augmente linéairement en fonction du moment dipolaire alors que la seconde montre que la vitesse de l'onde transversale augmente pratiquement linéairement jusqu'à  $60.0 \times 10^{-19} C.m$  puis, au delà le taux d'augmentation diminue légèrement.

Là aussi, on peut utiliser ces deux comportement pour évaluer expérimentalement le moment dipolaire porté par les particules, il suffit pour cela de provoquer une onde de choc, de mesurer sa vitesse de propagation et puis de la comparer avec celle donnée par simulation sans interaction dipolaire.



(a)



(b)

FIGURE 3.13 – Vitesses du son longitudinales (a) et transversales (b) en fonction du moment dipolaire, à des températures  $T = 300K$ ,  $T = 500K$  et  $T = 1000K$ .

### 3.7 Transition de phase solide-liquide

Il a été démontré que la transition de phase solide-liquide d'un cristal coulombien à 2D se fait à travers un nouvel état dit Hexatique qui correspond à un ordre en distance relativement court alors que l'ordre en terme d'orientation reste à longue distance. Pour étudier l'effet du moment dipolaire sur cette transition (température de fusion) il faut pouvoir distinguer entre l'état solide et liquide. Nous avons opté pour le calcul du coefficient de diffusion qui a une valeur qui tend vers zéro dans l'état solide et une valeur finie dans l'état liquide. Pour cela on calcul tout d'abord le carré moyen des déplacements qui s'écrit [27] :

$$\langle R^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N (\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(0))^2 \right\rangle, \quad (3.8)$$

Ensuite, on calcule le coefficient de diffusion, qui s'écrit [27] :

$$D = \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{\langle R^2(t) \rangle}{4t}, \quad (3.9)$$

où  $N$  représente le nombre de particule,  $\vec{r}_i(t)$  le vecteur déplacement de la particule  $i$  à l'instant  $t$ .

Sur la figure 3.14 on a représenté les coefficients de diffusion en fonction de la température dans les cas d'un moment dipolaire nul et égal à  $50.0 \times 10^{-19} C.m$ . On remarque que l'augmentation de ce coefficient, donc la transition de phase, se fait à une température plus faible lorsque le moment dipolaire est nul, c'est à dire que la température de fusion est plus grande lorsque le moment dipolaire est pris en compte.

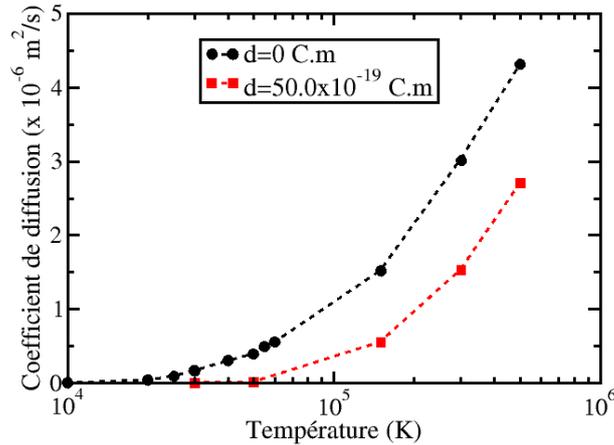


FIGURE 3.14 – Coefficient de diffusion en fonction de la température pour un moment dipolaire nul et un moment dipolaire  $d = 50.0 \times 10^{-19} C.m$ .

# Conclusion générale

Pour étudier l'influence de l'interaction dipôle-dipôle sur les cristaux coulombiens, on a utilisé la simulation par dynamique moléculaire couplée au thermostat de Nosé-Hoover. A partir de ces résultats, on a analysé les propriétés structurales et dynamiques : fonction de distribution de paires, les densités des grains de poussière, le paramètre d'ordre local d'orientation des liaisons et le spectre des phonons.

À partir de la fonction de distribution de paires, on a trouvé que les distances entre particules augmentent de manière linéaire en fonction du moment dipolaire dans le domaine étudié. Pour la densité, celle-ci devient de plus en plus homogène lorsque le moment dipolaire augmente alors que la densité moyenne au centre du cristal diminue. Le paramètre d'ordre local d'orientation des liaisons ne montre aucune variation notable en fonction du moment dipolaire. En calculant le spectre des phonons, on a trouvé que les vitesses de propagation des ondes longitudinales et transversales augmentent de manière pratiquement linéaire en fonction du moment dipolaire toujours dans le domaine étudié. On a constaté aussi que la température de fusion augmente avec le moment dipolaire. Malheureusement, nous n'avons pas eu le temps de la déterminer quantitativement du fait que cela aurait exigé beaucoup plus de simulation pour affiner les courbes des coefficients de diffusion.

Toutes ces variations peuvent être quantifiées pour être utilisées expérimentalement pour l'estimation du moment dipolaire associés aux particules chargées.

Cependant, on doit signaler que le domaine que nous avons adopté notamment pour la température est assez réduit. En effet, nous avons effectué quelques calculs hors du domaine, nous avons constaté de légères différences comme la variation de la pente de la droite qui représente la variation des distances aux proches voisins, en fonction de la température. Nous pouvons constater une tendance vers la diminution (très faible) de la pente quand la température augmente, cela peut se confirmer par d'avantage de simulations pour des températures plus élevées, ce que nous n'avons pas eu le temps de faire durant ce stage.

Comme perspective, on peut continuer ces simulations pour des domaines de températures et de moment dipolaire plus vastes, mais aussi en variant les différents paramètres comme la charge, la masse des grains de poussière, la longueur de Debye, le nombre de particules, etc., pour déduire un comportement plus général de l'influence du moment dipolaire sur les cristaux coulombiens. Comme autre perspective, on peut aussi augmenter le nombre de simulation en fonction de la température, pour déterminer précisément la température de fusion et étudier la phase hexatique qui est une phase intermédiaire entre l'état solide et liquide dans le cas 2D et qui a été observée dans les cristaux coulombiens par *O.F.Petrov et al* [28].

# Bibliographie

- [1] G. Lapenta, “Dipole moments on dust particles immersed in anisotropic plasmas,” *Physical Review Letters*, vol. 75, no. 24, p. 4409, 1995.
- [2] T. S. Ramazanov, A. Z. Gabdulin, and Z. A. Moldabekov, “Md simulation of charged dust particles with dipole moments,” *Plasma Science, IEEE Transactions on*, vol. 43, no. 12, pp. 4187–4189, 2015.
- [3] J.-M. Rax, *Physique des plasmas : cours et applications*. Dunod, 2005.
- [4] H. Thomas, G. Morfill, V. Demmel, J. Goree, B. Feuerbacher, and D. Möhlmann, “Plasma crystal : Coulomb crystallization in a dusty plasma,” *Physical Review Letters*, vol. 73, no. 5, p. 652, 1994.
- [5] M. Moisan and J. Pelletier, *Physique des plasmas collisionnels (Application aux décharges hautes fréquences)*. EDP sciences, 2006.
- [6] M. A. Lieberman and A. J. Lichtenberg, *Principles of plasma discharges and materials processing*. John Wiley & Sons, 2005.
- [7] M. Cavarroc, *Nucleation, growth and behavior of dust particles in reactive low pressure radiofrequency plasmas : From nanocrystals to submicron polycrystalline grains*. Theses, Université d’Orléans, Oct. 2007.
- [8] J. Allen, “Probe theory-the orbital motion approach,” *Physica Scripta*, vol. 45, no. 5, p. 497, 1992.
- [9] P. K. Shukla and B. Eliasson, “Colloquium : Fundamentals of dust-plasma interactions,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 81, no. 1, p. 25, 2009.
- [10] R. L. Merlino, “Dusty plasmas and applications in space and industry,” *Plasma Physics Applied*, vol. 81, pp. 73–110, 2006.
- [11] P. K. Shukla and A. Mamun, *Introduction to dusty plasma physics*. CRC Press, 2001.
- [12] H. Lee, D. Chen, and B. Rosenstein, “Phase diagram of crystals of dusty plasma,” *Physical Review E*, vol. 56, no. 4, p. 4596, 1997.
- [13] A. Samarian and S. Vladimirov, “Charge of a macroscopic particle in a plasma sheath,” *Physical Review E*, vol. 67, no. 6, p. 066404, 2003.
- [14] J. Chu and I. Lin, “Direct observation of coulomb crystals and liquids in strongly coupled rf dusty plasmas,” *Physical review letters*, vol. 72, no. 25, p. 4009, 1994.
- [15] G. Morfill and H. Thomas, “Plasma crystal,” *Journal of Vacuum Science & Technology A*, vol. 14, no. 2, pp. 490–495, 1996.
- [16] D. Frenkel and B. Smit, *Understanding molecular simulation : from algorithms to applications*, vol. 1. Academic press, 2001.
- [17] C. Durniak, D. Samsonov, N. P. Oxtoby, J. F. Ralph, and S. Zhdanov, “Molecular-dynamics simulations of dynamic phenomena in complex plasmas,” *Plasma Science, IEEE Transactions on*, vol. 38, no. 9, pp. 2412–2417, 2010.

- [18] S. Nosé, “A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble,” *Molecular physics*, vol. 52, no. 2, pp. 255–268, 1984.
- [19] S. Nosé, “A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods,” *The Journal of chemical physics*, vol. 81, no. 1, pp. 511–519, 1984.
- [20] G. J. Martyna, M. L. Klein, and M. Tuckerman, “Nosé–hoover chains : the canonical ensemble via continuous dynamics,” *The Journal of chemical physics*, vol. 97, no. 4, pp. 2635–2643, 1992.
- [21] M. Griebel, S. Knapek, and G. Zumbusch, *Numerical simulation in molecular dynamics : numerics, algorithms, parallelization, applications*, vol. 5. Springer Science & Business Media, 2007.
- [22] T. Ott, M. Stanley, and M. Bonitz, “Non-invasive determination of the parameters of strongly coupled 2d yukawa liquids,” *Physics of Plasmas*, vol. 18, no. 6, p. 063701, 2011.
- [23] K. Binder and W. Kob, *Glassy materials and disordered solids : An introduction to their statistical mechanics*. World Scientific, 2011.
- [24] T. Röcker, L. Couëdel, S. Zhdanov, V. Nosenko, A. Ivlev, H. Thomas, and G. Morfill, “Nonlinear regime of the mode-coupling instability in 2d plasma crystals,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 106, no. 4, p. 45001, 2014.
- [25] V. E. Fortov, A. G. Khrapak, S. A. Khrapak, V. I. Molotkov, and O. F. Petrov, “Dusty plasmas,” *Physics-Uspokhi*, vol. 47, no. 5, pp. 447–492, 2004.
- [26] S. Nunomura, J. Goree, S. Hu, X. Wang, A. Bhattacharjee, and K. Avinash, “Phonon spectrum in a plasma crystal,” *Physical review letters*, vol. 89, no. 3, p. 035001, 2002.
- [27] L. Bin, L. Yan-Hong, C. Yan-Ping, Y. Si-Ze, and W. Long, “Structure and phase transition of a two-dimensional dusty plasma,” *Chinese Physics*, vol. 12, no. 7, p. 765, 2003.
- [28] O. Petrov, M. Vasiliev, O. Vaulina, K. Stacenko, E. Vasilieva, E. Lisin, Y. Tun, and V. Fortov, “Solid-hexatic-liquid transition in a two-dimensional system of charged dust particles,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 111, no. 4, p. 45002, 2015.