

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMERRI DE TIZI-OUZOU

FACULTÉ DES SCIENCES
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

THÈSE DE DOCTORAT

Spécialité : Physique
Option : Physique des Matériaux

Présentée par

KERMOUN Fatma

**Simulation de la dynamique des poudres chargées
couplées et confinées dans un réacteur à plasma.**

Soutenue le 03/10/2018 devant le jury d'examen composé de :

M. Mourad	ZEMIRLI	Professeur	U.M.M.T.O.	Président
M. Moh Djerdjjer	MITICHE	Professeur	U.M.M.T.O.	Rapporteur
M. Omar	LAMROUS	Professeur	U.M.M.T.O.	Co-rapporteur
M. Mourad	DJEBLI	Professeur	U.S.T.H.B.	Examineur
M. Abdellatif	TAHRAOUI	Professeur	U.S.T.H.B.	Examineur
M. El Hachemi	AMARA	Directeur de recherche	C.D.T.A.	Examineur

A la mémoire de mes grands parents

A mes parents

Remerciements

Je remercie la direction du laboratoire de Physique et Chimie Quantique (L.P.C.Q) qui m'a accueilli au sein du laboratoire. Je tiens à exprimer mes vifs remerciements à monsieur Moh Djerdjer MITICHE, Professeur à l'Université Mouloud Mammeri de Tizi Ouzou qui a dirigé mon travail avec beaucoup de compétence et de patience. Ses qualités humaines et ses remarques m'ont été précieuses. Qu'il trouve ici ma profonde reconnaissance.

J'exprime ma vive gratitude à monsieur Omar LAMROUS, Professeur à l'Université Mouloud Mammeri de Tizi Ouzou (U.M.M.T.O), qui a co-encadré ce travail de thèse. Ses compétences scientifiques, sa rigueur et son dynamisme en font de lui un directeur exemplaire. Je tiens aussi à le remercier de m'avoir intégré dans son équipe.

Je suis également très sensible à l'honneur que me fait monsieur Mourad ZEMIRLI, Professeur à l'Université Mouloud Mammeri de Tizi Ouzou (U.M.M.T.O) de présider le jury de ma thèse.

J'adresse également tous mes remerciements à monsieur Mourad DJEBLI, Professeur à l'Université des Sciences et technologies de Houari Boumediene (U.S.T.H.B) pour avoir accepté de faire partie du jury et pour l'attention qu'il a portée à ce travail.

Mes remerciements vont également à monsieur Abdellatif TAHRAOUI Professeur à l'Université des Sciences et technologies de Houari Boumediene (U.S.T.H.B), d'avoir accepté de juger cette thèse.

Je tiens également à remercier monsieur El Hachemi AMARA Directeur de recherche au Centre de Développement des Technologies Avancées (C.D.T.A.), d'avoir accepté de juger et d'examiner ce travail.

Je tiens à exprimer ma gratitude à monsieur Madjid DJOUDER pour toutes les aides, les conseils qu'il m'a accordé. Qu'il trouve ici ma profonde reconnaissance.

Le chemin parcouru durant ces dernières années est passé par des hauts et des bas, et s'il est facile d'accepter les premiers, il est difficile de surmonter les derniers. Cela m'a été possible que grâce à la présence de ma famille. Je remercie toutes les personnes qui me sont chères, en particulier mes parents et tous les membres de ma famille pour l'aide, la confiance et le soutien dont ils ont fait preuve tout au long de mes années universitaires.

Finalement, je remercie tous mes amis (es) qui ont contribué à travers leurs encouragements, à la réalisation de ce travail.

Encore une fois Merci à vous tous.

Résumé

Les plasmas complexes ou poussiéreux de phase ordonnée, constituent un système fortement couplé dont les caractéristiques présentent un grand intérêt en physique de la matière condensée. Outre les propriétés communes aux milieux ionisés, les plasmas complexes se comportent comme des cristaux avec l'avantage de pouvoir les observer à l'œil nu. Ces grains de poussières présents dans l'univers ou en laboratoire, dans les réacteurs à plasmas font toujours l'objet de travaux de recherche. A basse température, ces grains fortement chargés peuvent former un cristal coulombien. L'objectif de cette thèse est d'étudier via la simulation les propriétés thermodynamiques d'un cristal coulombien bidimensionnel. La dynamique moléculaire a été utilisée pour déterminer l'équation d'état effective des grains de poussières. Le calcul était fait pour différentes valeurs du nombre de particules et du paramètre de confinement. Les résultats obtenus indiquent plutôt un comportement d'un gaz réel. La vitesse du son calculée est en bon accord avec l'expérience ce qui confirme la validité de notre modèle.

***Mot-clés :** Plasma poussiéreux, cristal coulombien, équation d'état, dynamique moléculaire.*

Abstract

The complex or dusty plasmas of ordered phase constitute a strongly coupled system whose characteristics are of great interest in condensed matter physics. In addition to the properties common to ionized media, complex plasmas behave like crystals with the advantage of being able to observe them with the naked eye. These dust particles present in the universe or in the laboratory, in plasma reactors are still the subject of research. At low temperatures, these highly charged grains can form a Coulomb crystal. The objective of this thesis is to study via simulation the thermodynamic properties of a two-dimensional Coulomb crystal. Molecular dynamics was used to determine the effective state equation of dust grains. The calculation was done for different values of the number of particles and the confinement parameter. The results obtained indicate rather a behavior of a real gas. The speed of the calculated sound is in good agreement with the experience, which confirms the validity of our model.

***Keywords :** Dusty plasma, coulomb crystal, equation of state, ideal gas, molecular dynamic.*

Table des matières

INTRODUCTION GÉNÉRALE	1
1 Généralités sur les plasmas poussiéreux	5
1.1 Introduction aux plasmas	6
1.2 Émergence de thématique des plasmas poussiéreux	8
1.2.1 La découverte par Irving Langmuir	9
1.2.2 Les poussières en astrophysique	9
1.2.3 Les poussières dans l'industrie micro-électronique	10
1.2.4 Les plasmas poussiéreux et leurs applications	11
1.3 Caractéristiques de base des plasmas poussiéreux	12
1.3.1 La longueur de Debye	12
1.3.2 Fréquence plasma	13
1.3.3 Neutralité macroscopique	14
1.3.4 Paramètre de couplage coulombien	15
1.4 Cristaux coulombiens	15
1.5 Mécanismes et comportements d'une particule immergée dans le plasma	17
1.5.1 Les gaines électrostatiques	17
1.5.2 Longueur de Debye électronique et ionique	17
1.5.3 Le potentiel plasma	18
1.5.4 Le potentiel flottant	18
1.5.5 Le critère de Bohm	19
1.6 Création d'un plasma poussiéreux	20
1.7 Processus de charge du grain de poussière	21
1.8 Mécanismes de piégeage des poussières dans un plasma	22
1.8.1 Forces s'exerçant sur une poussière	22
1.8.1.1 La force de gravité	23
1.8.1.2 La force de friction des neutres	23
1.8.1.3 La force de friction ionique	24
1.8.1.4 La force thermophorèse	25

1.8.1.5	La force électrique	26
1.8.1.6	La force d'interaction particule-particule	27
1.8.2	Comparaison des forces appliquées sur une poussière	27
2	Simulation par dynamique moléculaire d'un plasma poussiéreux	31
2.1	Introduction	32
2.2	Éléments sur la simulation par dynamique moléculaire	33
2.2.1	Aspects généraux concernant la simulation par dynamique moléculaire	33
2.2.2	Détails sur l'équation de base de la dynamique moléculaire	34
2.2.3	Algorithmes	35
2.2.3.1	Algorithme de Verlet	36
2.2.3.2	Algorithme Leap-frog	37
2.2.4	Valeur du pas du temps	39
2.2.5	Conditions initiales	39
2.3	Contrôle de la température	39
2.3.1	Généralités sur les ensembles thermodynamiques	39
2.3.1.1	Ensemble microcanonique (NVE)	40
2.3.1.2	Ensemble canonique (NVT)	40
2.3.1.3	Ensemble isobare-isotherme (NPT)	41
2.3.2	Thermostat de Nosé-Hoover	41
2.4	Calcul des propriétés thermodynamiques	43
2.5	Simulation dans les plasmas	43
3	Équation d'état d'un cristal coulombien bidimensionnel	45
3.1	Introduction	46
3.2	Équations et paramètres de simulation	46
3.2.1	Équation de base	46
3.2.2	Calcul de la pression scalaire locale	48
3.2.3	Paramètres de simulation	49
3.2.4	Formation du cristal	49
3.3	Équations d'état d'un cristal coulombien à deux dimensions	54
3.3.1	Calcul de l'indice adiabatique	54
3.3.2	Équation d'état du cristal coulombien	56
3.3.3	Validation de l'équation d'état proposée	58
3.4	Conclusion	60
4	Ondes acoustiques dans un cristal coulombien bidimensionnel	61
4.1	Introduction	62
4.2	Spectre de dispersion des ondes	63
4.3	Influence de la température	64
4.4	Influence de la longueur de Debye	68
4.5	Influence de la masse des grains	70

4.6	Influence de la charge des grains	71
4.7	Conclusion	72
	CONCLUSION GÉNÉRALE	75
	Table des figures	78
	Liste des tableaux	80
	Bibliographie	81

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Le plasma poussiéreux, ou plasma complexe, est certainement l'état de la matière le plus abondant dans l'univers. Il s'agit généralement, de particules microscopiques chargées négativement, qui baignent dans un plasma. Ils constituent l'essentiel de l'environnement terrestre au-delà de la haute atmosphère [1]. On les trouve dans les étoiles, dans certaines atmosphères de planètes où l'ionisation est due à des particules très rapides dont certaines émanent du soleil (vent solaire), dans l'espace interplanétaire et interstellaire. Dans les réacteurs de laboratoire, ces particules peuvent avoir leur origine dans les réactions chimiques entre les composants du plasma [2, 3]. Leur prolifération constitue en fait un grand inconvénient 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. On peut citer par exemple la formation de fluides et de cristaux dits coulombiens qui présentent l'avantage d'être pratiquement visibles à l'œil nu, pour l'étude de systèmes à fort coefficient de couplage, qui sont difficiles, voire impossibles, à créer en laboratoire [2].

En fait, le plasma poussiéreux est un exemple de systèmes à fort couplage, gouverné par un potentiel d'interaction coulombien écranté (le potentiel de Yukawa, ou de Debye-Hückel, en est une première approximation qui n'est pas satisfaisante pour tous ces systèmes) semblable dans ce cas aux naines blanches ou encore au système formé par piégeage d'ions refroidis par des faisceaux laser [4].

De nombreux travaux ont été effectués pour comprendre la formation et la croissance de ces poussières [5, 6, 7], leur dynamique au sein du plasma ainsi que les modifications qu'elles entraînent sur ce dernier [8, 9]. Aussi, en astrophysique, la présence de poussières dans les queues des comètes, les atmosphères planétaires et dans les nuages interstellaires est un phénomène étudié depuis longtemps [10, 11, 12] et qui reste d'actualité [13].

Des travaux de physique fondamentale à la fois théoriques et expérimentaux ont, de ce fait, vu le jour. On peut citer par exemples les études concernant les processus de charge [14, 15, 16, 17, 18, 19], le lieu de piégeage des nuages de poussières [20, 21], les phénomènes de transport [22] etc. L'une des propriétés intéressantes des plasmas poussiéreux est la formation de structures auto-organisées, appelées cristaux coulombiens. Elles sont dues aux fortes interactions entre les poussières et leur confinement dans un espace réduit [23, 24, 25]. Il existe plusieurs formes stables de ces structures : des cristaux à trois dimensions, à deux dimensions, en boules, ..etc. La structure la plus étudiée est la structure bidimensionnelle (2D), c'est cette dernière qui fera l'objet de notre travail.

La connaissance de l'équation d'état d'un système simplifie énormément son étude et sa compréhension. Concernant les systèmes où les interactions sont de type Yukawa (Debye-Hückel),

Murillo et al. [4] donnent un développement théorique qui n'est malheureusement valable qu'en volume, donc non applicable au cas de cristaux coulombiens (2D) qui nous intéressent ici.

Récemment, les travaux expérimentaux effectués par Oxtoby et al. [26] ont rapporté des expériences d'ondes de choc sur un cristal de plasma poussiéreux 2D. Dans ce système à fort paramètre de couplage, en se basant sur les relations de conservation de Rankine-Hugoniot, Oxtoby [26] rapporte un comportement en gaz idéal avec un indice adiabatique estimé à 1.67, remarquablement proche de l'indice d'un gaz monoatomique qui est de $5/3$. Ce qui a révélé une importante découverte dans ces cristaux fortement couplés. Dans ce contexte et en guise de la première partie de cette thèse, nous avons tenté de confirmer ces résultats par une simulation directe avec la dynamique moléculaire (DM).

La seconde partie de la thèse concerne l'étude de la propagation des ondes acoustiques dans un cristal coulombien bidimensionnel fortement couplé en fonction des propriétés physiques du système. Nous avons pu ainsi montrer une similitude entre le comportement des ondes acoustiques de poussière (DAW) dans ces cristaux et le comportement des ondes sonores dans les solides. L'étude de ces ondes est intéressante notamment en astrophysique, où les ondes de chocs acoustiques peuvent déclencher la condensation des grains dans les nuages moléculaires de poussières.

La mesure de ces grandeurs dynamiques nécessite des expériences très longues à mettre en œuvre et onéreuses. Il devient donc utile d'envisager des méthodes numériques pour simuler le comportement de ces grains de poussière pour différents paramètres physiques et différentes conditions expérimentales.

Dans cette démarche de modélisation, nous avons développé un modèle théorique basé sur la méthode de dynamique moléculaire (DM) qui permet de suivre l'évolution temporelle du système formé par les grains du plasma poussiéreux en appliquant le principe fondamental de la dynamique à chaque grain. C'est à partir de ces équations que l'on déterminera les propriétés thermodynamiques (pression, densité, ...) des cristaux coulombiens et ce dans les différents cas de figure.

Ceci est réalisé à partir d'un code développé auparavant au sein du groupe que nous avons adapté à la problématique étudiée. Ce type de simulation a donné de bons résultats pour décrire plusieurs phénomènes dans les cristaux coulombiens tels que les transitions de phase, les solitons, les ondes de chocs, etc. [27, 28, 29].

Cette thèse est organisée en quatre chapitres. L'ensemble des propriétés fondamentales des plasmas poussiéreux fortement couplés, ainsi que les différentes forces agissant sur les grains de poussières dans un réacteur plasma seront présentés dans le premier chapitre.

Le deuxième chapitre sera consacré à la méthode de simulation numérique de dynamique moléculaire utilisée dans ce présent travail, en particulier dans les systèmes fortement couplés. Dans la suite de ce chapitre, la méthode de dynamique moléculaire est rappelée dans ses grandes lignes puis nous verrons son adaptation à la simulation des plasmas qui réside essentiellement dans le choix des potentiels d'interaction. En plus, dans ce chapitre, on présentera l'algorithme

Leap-frog utilisé pour calculer les différentes positions et vitesses des grains de poussières d'une mono-couche d'un cristal coulombien bidimensionnel.

Dans le troisième chapitre, nous passerons à la présentation des résultats et leurs interprétations. Nous allons présenter l'algorithme pour le calcul de la pression locale. Ensuite nous proposerons une équation d'état, pour un cristal fini bidimensionnel sujet à un confinement électrostatique parabolique. Le potentiel de l'interaction inter-grains considéré est de type Debye-Huckel (ou Yukawa), qui prend en compte l'écrantage des grains par les espèces chargées du plasma. Cette équation d'état sera validée en calculant la vitesse des ondes acoustiques et en la comparant avec des données expérimentales.

Dans le quatrième et dernier chapitre, la propagation des ondes acoustiques sera abordée, en étudiant l'effet de différents paramètres physiques, tels que la masse, la charge, la longueur de Debye et la température sur la vitesse de propagation de ses ondes. Dans la conclusion, nous rappellerons les principaux résultats obtenus et présenterons quelques perspectives dans le cadre de la poursuite des travaux présentés dans cette thèse.

Généralités sur les plasmas poussiéreux

1.1 Introduction aux plasmas

La physique des plasmas est une discipline assez récente qui trouve ses origines autour des années vingt. Elle s'intéresse aux gaz constitués d'ensembles macroscopiquement neutres de particules chargées et de particules non chargées appelés plasma. Les plasmas représentent, la presque totalité (99%) de la matière de notre univers [30]. Ils existent soit à l'état naturel (couronne solaire, soleil, étoiles, ionosphère, naines blanches...), soit en laboratoire ou ils sont généralement produits par des décharges électriques. Notre planète est, elle-même, entourée d'une couronne de plasma à une distance comprise entre 90 et 500 km de sa surface. Cette couche rend possible les communications radio au-delà de l'horizon et est responsable des aurores boréales.

Les plasmas sont désignés comme étant le quatrième état de la matière faisant suite dans l'échelle des températures aux trois états classiques : solides, liquide et gaz [31], et avant le cinquième état de la matière : le condensât de Bose-Einstein [32]. A l'état solide, les molécules sont rapprochées les unes des autres ce qui donne au solide son caractère indéformable. Si on fournit de l'énergie, sous forme de chaleur par exemple, les molécules tentent de s'éloigner les unes des autres sans adopter de forme propre ; c'est l'état liquide. Si la chaleur augmente encore, le liquide se transforme en gaz et un gaz surchauffé forme un plasma, où les atomes sont dans des états excités et ionisés [33]. L'ensemble des états cités est illustré sur la figure 1.1.

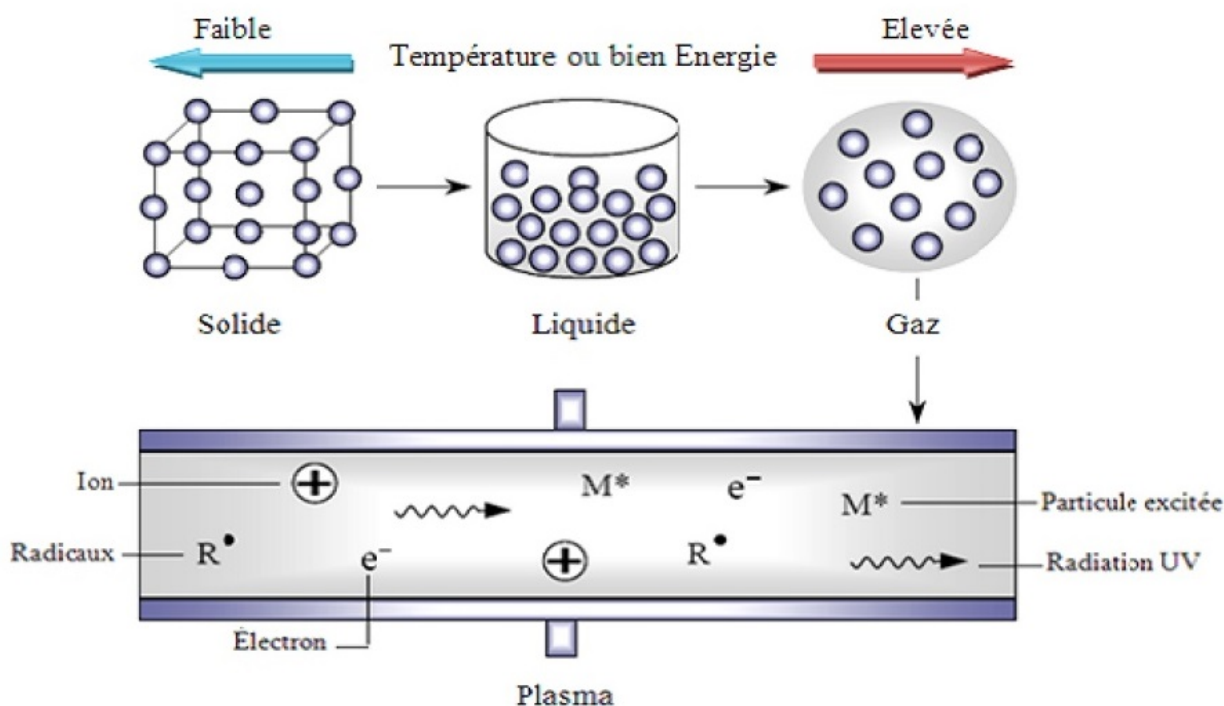


Figure 1.1 – Représentation schématique des quatre états de la matière [34]

Plus généralement, un plasma est une collection d'électrons, de radicaux libres, d'ions des deux charges, de photons de diverses énergies allant de l'UV (ultra violet) à l'infrarouge lointain, d'atomes libres et de molécules dans des états fondamentaux et excités (Voir Figure 1.2).

Chaque particule chargée dans un plasma interagit simultanément avec les autres grâce au long rayon d'action de la force électrique entre particules chargées (force coulombienne).

Ces interactions créent un comportement collectif qui n'existe pas dans les gaz neutres. Dans le cas de plasmas faiblement ionisés et étant donné leur faible densité, leurs propriétés physiques (grande compressibilité, énergie interne et pression, écoulements, etc.) sont analogues à celles des gaz neutres, tandis que leurs propriétés électromagnétiques (conductivité électrique, indice de réfraction, nouveaux modes de propagation des ondes, etc.) sont différentes dues essentiellement, à la présence d'électrons libres.

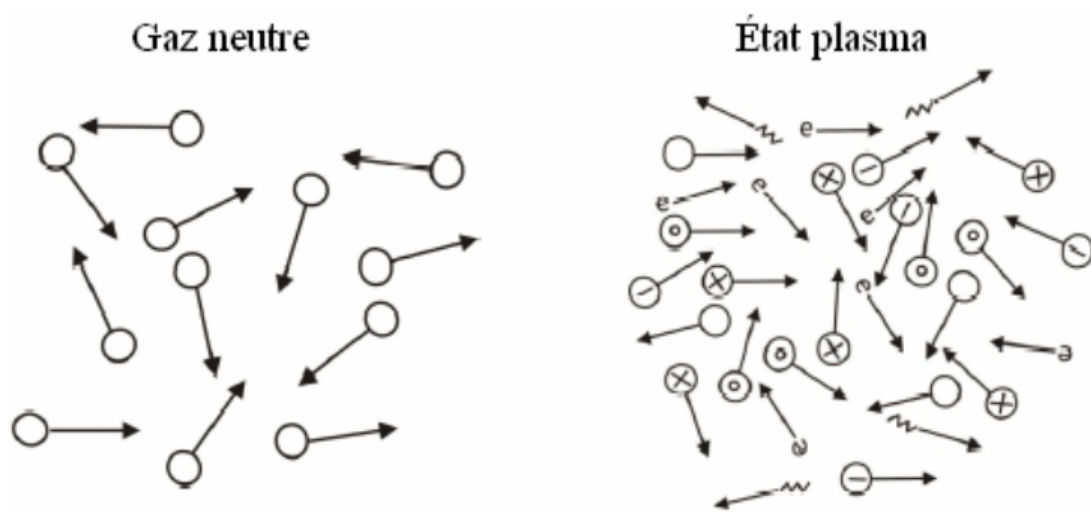


Figure 1.2 – Illustrations d'un gaz neutre et d'un plasma

En 1923, les physiciens I.Langmuir et L Tonks [31, 35] furent les premiers à employer en physique le terme " plasma " (du grec " matière informe") par analogie au plasma sanguin auquel le phénomène ressemblait visuellement. Il a été introduit pour désigner, dans les tubes à décharge, certaines régions équipotentielles contenant un gaz ionisé électriquement neutre. Pendant certaines années, un plasma désignait un gaz entièrement ionisé et globalement neutre [36].

Généralement, un plasma peut être caractérisé par sa température électronique et sa densité notée respectivement T_e et n_e . Ces deux quantités peuvent varier respectivement de 0.1 à $10^6 eV$ et de 1 à $10^{18} cm^{-3}$ selon la nature (astrophysique ou de laboratoire) et les différentes applications du plasma. L'état plasma regroupe donc des milieux très différents (voir figure 1.3).

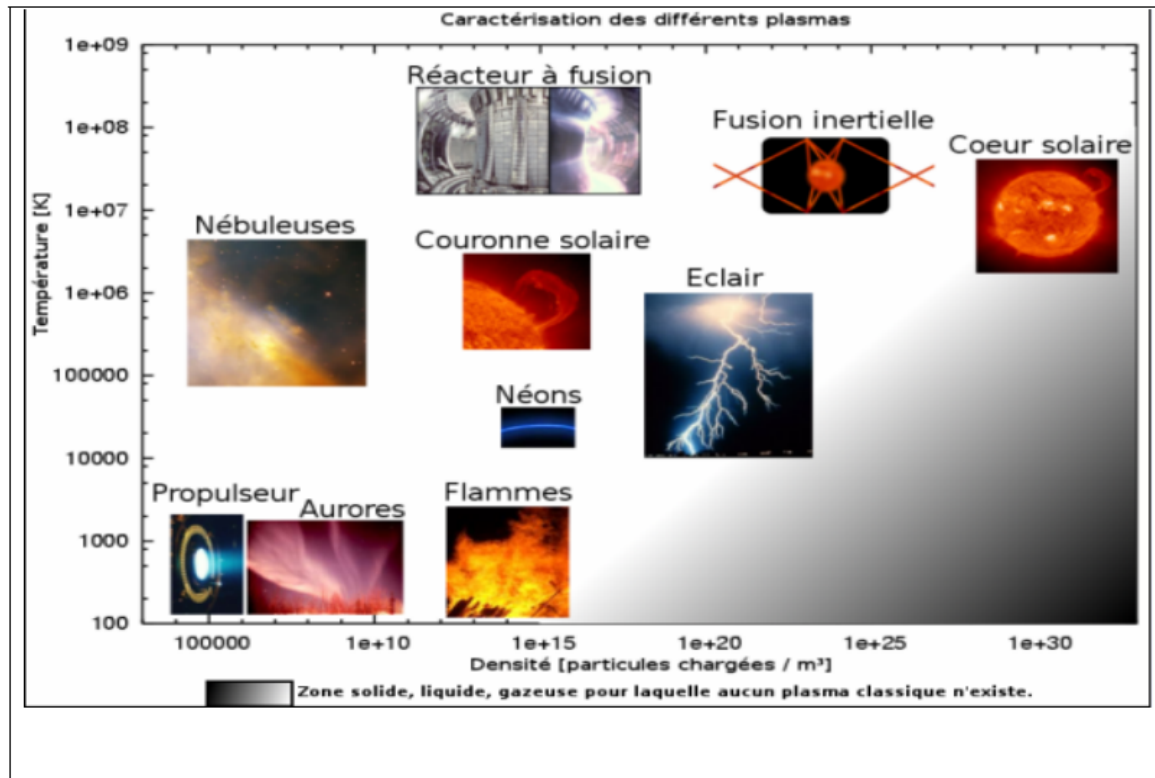


Figure 1.3 – Les différents plasmas en fonction de la température et de la densité [37]

1.2 Émergence de thématique des plasmas poussiéreux

La définition d'un plasma telle que énoncée ci-dessus peut s'avérer, à bien des égards, incomplète et restrictive. En effet, un plasma réel contient toujours des impuretés chargées communément appelées poussières(ou poudres). La présence de ces extra particules, dont les dimensions peuvent varier du micromètre jusqu'au nanomètre, rend la nature du système plasma plus complexe et difficile à cerner.

Les plasmas poussiéreux appelés aussi plasmas complexes, ou encore dusty plasma en anglais, sont des gaz partiellement ionisés composés d'espèces neutres, d'ions, d'électrons et de grains de poussière électriquement chargés et extrêmement massifs. Ces grains acquièrent une charge grâce aux interactions avec les ions et les électrons du plasma environnant où avec les rayonnements UV [38, 39, 40], en laboratoire cette charge est négative à cause de la plus grande mobilité des électrons.

Les plasmas poussiéreux ont fait l'objet de nombreuses études depuis le début des années 80 et constituent aujourd'hui une branche à part entière de la physique des plasmas. La présente section s'attache à décrire l'émergence de cette thématique.

1.2.1 La découverte par Irving Langmuir

Dans une communication de 1924 [41], Irving Langmuir rapporta la première observation de la présence de poussières au sein d'un plasma. La décharge utilisée par Langmuir était produite entre un disque métallique (anode) et un filament de tungstène (cathode), l'enceinte en pyrex contenant de l'argon à une pression de quelques torr. Le filament était initialement chauffé par circulation d'un courant, permettant ainsi l'émission d'électrons par effet thermique. En diminuant le courant dans le filament, cette émission d'électrons s'atténua. Pour compenser ce manque d'électrons, la différence de potentiel entre l'anode et la cathode fut augmentée pour fournir aux ions l'accélération nécessaire à l'émission d'électrons γ par impact ionique sur le filament. La forte énergie cinétique acquise par les ions lors de leur impact sur le filament, eu également pour conséquence de le pulvériser conduisant à la formation de particules de tungstène. Ces particules furent observées par Irving Langmuir par diffusion de la lumière solaire focalisée. Dès cette époque, il émit l'hypothèse que ces particules devaient être chargées négativement par collections d'électrons et entourées d'une région à charge d'espace positive appelée gaine ionique [42].

1.2.2 Les poussières en astrophysique

Malgré la découverte précoce de Langmuir, le domaine des plasmas poussiéreux ne fit l'objet d'un réel intérêt qu'à partir du début des années 1980. Le programme Voyager de la NASA ayant pour but d'explorer les planètes lointaines du système solaire débuta en 1977. Les sondes Voyager 1 et 2 fournirent des images des anneaux de Saturne qui révélèrent un phénomène particulier. Lors de la phase d'approche de Saturne par la sonde, des bandes sombres appelées spokes (Figure 1.4) se propageant radialement au sein de l'anneau B de Saturne furent observées.

En s'éloignant de la planète, ces bandes apparurent comme plus lumineuses que leur environnement. Ce comportement révèle la véritable nature du phénomène observé : les spokes sont composés de poussières qui diffusent la lumière solaire préférentiellement vers l'avant. On comprendra par la suite (voir par exemple [43, 44]) que l'origine du mouvement de ces poussières se trouve dans le fait que les poussières sont chargées et ainsi sensibles à la magnétosphère de Saturne.

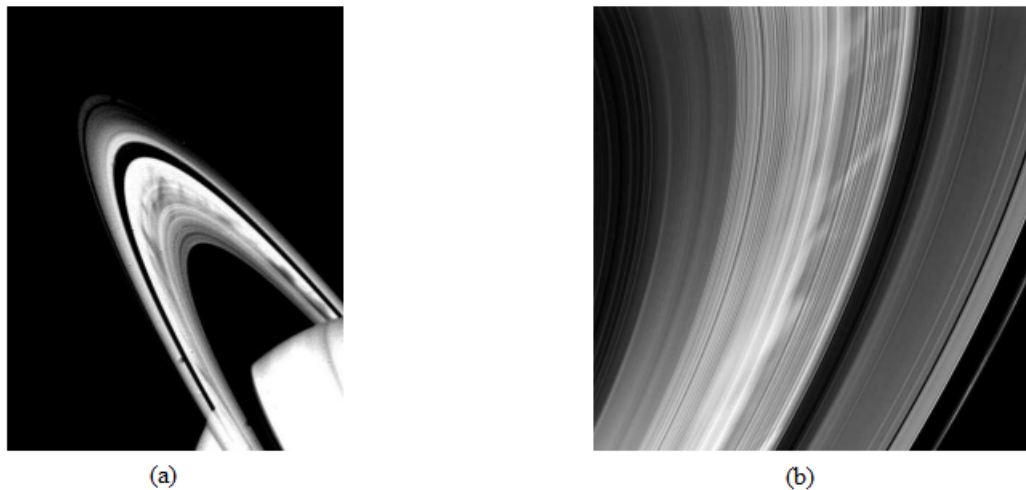


Figure 1.4 – Spokes dans l’anneau B de Saturne : (a) Phase d’approche, bandes sombres. (b) Phase d’éloignement, bandes blanches.

Le domaine de l’astrophysique au sens large est confronté à la présence de poussières. Celles-ci sont présentées et étudiées dans de multiples circonstances et environnements. On les rencontre par exemple dans les queues des comètes qui dispersent de grandes quantités de poussières dans l’espace interstellaire [45].

Elles composent également la majeure partie des disques protoplanétaires [46, 47] formés autour des jeunes étoiles et constituent ainsi les précurseurs à la formation des planètes du futur système. De nombreuses études sont également menées sur l’atmosphère de Titan, satellite le plus imposant de Saturne et qui pourrait ressembler à la Terre primitive. Elle est composée principalement d’azote mais également de méthane. Des aérosols y sont formés à partir des tholins, substance organique produite grâce à l’action du rayonnement solaire UV sur les molécules de l’atmosphère de Titan.

En tentant de reproduire ces tholins en laboratoire dans des décharges plasma [48, 49], les scientifiques espèrent faire avancer nos connaissances sur l’origine de la vie sur Terre.

1.2.3 Les poussières dans l’industrie micro-électronique

Vers la fin des années 1980, une nouvelle découverte a été à l’origine de l’extension de la thématique des plasmas poussiéreux à une autre communauté scientifique. La technologie plasma est largement utilisée dans l’industrie de la micro-électronique. Elle permet le dépôt de films minces ou encore la gravure de motifs sur des substrats. Cette technique permet d’atteindre de remarquables finesses de gravure des semi-conducteurs en augmentant le rapport d’aspect.

Elle est notamment à l’origine de l’amélioration continue des performances des microprocesseurs [50] grâce à l’augmentation du nombre de transistors par unité de surface. La fabrication de tels objets nécessite des précautions drastiques de manière à limiter au maximum la pollution des substrats.

Cependant, malgré l'amélioration croissante de la propreté des environnements de production (salles blanches), une pollution de leur surface par de petites particules était régulièrement constatée. L'origine de cette pollution, jusque là attribuée à la phase de manipulation des substrats à l'air, fut découverte par Gary Selwyn (IBM) en 1989 [51]. Alors qu'il effectuait des mesures de fluorescence induite par laser (FIL), il observa une diffusion du faisceau laser.

Des particules de poussière en suspension dans le plasma au-dessus du substrat en étaient les responsables (voir figure 1.5). Dès lors, cette découverte stimula de nombreuses recherches dans le domaine des plasmas poussiéreux de laboratoire [6, 52, 53, 54]. Comprendre les mécanismes de formation de ces particules ainsi que les forces agissant sur celles-ci et déterminant leur piégeage furent au cœur des études menées par la suite.

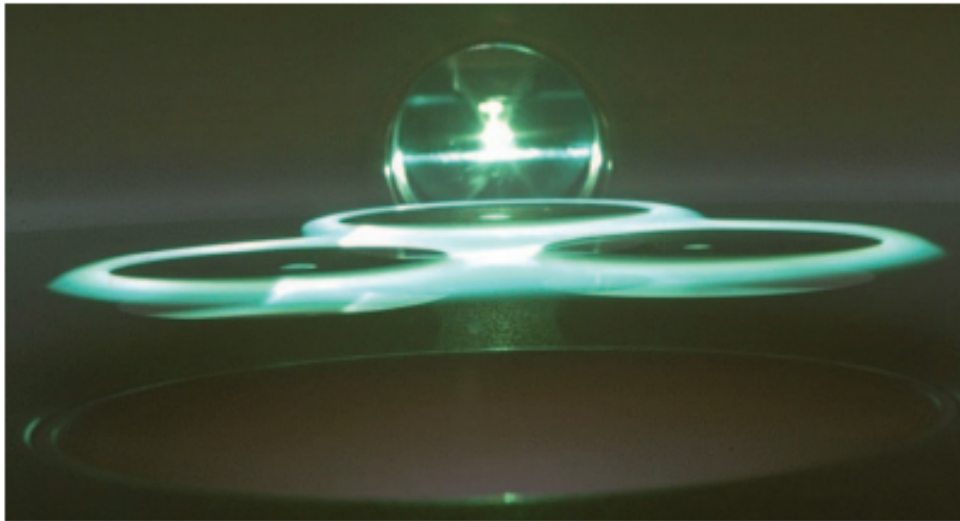


Figure 1.5 – Poussières en suspension illuminées par un faisceau laser [55].

1.2.4 Les plasmas poussiéreux et leurs applications

Les poussières ne sont pas systématiquement nuisibles et leur présence est parfois recherchée pour diverses applications. Les procédés plasma permettent la synthèse de particules dont les tailles peuvent être contrôlées jusqu'à des échelles de quelques nanomètres et dont la composition chimique peut être maîtrisée [56, 57]. Avec le développement des nanotechnologies et des matériaux composites, les applications potentielles sont de plus en plus nombreuses : fonctionnalisation de surface, amélioration des propriétés mécaniques des matériaux, fonctionnalisation de microparticules pour des applications pharmaceutiques et médicales, fabrication de pigments, lubrifiants, etc...

Par ailleurs, les procédés plasmas permettent de fabriquer aisément des nano-cristaux semi-conducteurs [3, 58] . Ceci s'explique principalement par deux effets :

– les particules produites sont chargées négativement ce qui réduit leur tendance à agglomérer,

– les particules sont portées à des hautes températures lorsqu'elles sont présentes en volume dans le plasma [59, 60], ce qui permet leur cristallisation.

Ces nano-cristaux trouvent de nombreuses applications potentielles notamment pour les cellules photovoltaïques ou encore les éléments de circuits électroniques.

Enfin, les poussières peuvent être utilisées comme diagnostics dans les plasmas. Il est par exemple possible de sonder les champs électriques locaux en étudiant leur position d'équilibre au sein du plasma [61] ou encore de déterminer les flux d'énergie en utilisant ces particules comme des calorimètres [62].

1.3 Caractéristiques de base des plasmas poussiéreux

Afin de comprendre et de cerner la formation et l'évolution du plasma poussiéreux, il est utile de définir ses caractéristiques de base, la longueur de Debye, la neutralité macroscopique, l'espace inter-grains, le paramètre de couplage coulombien, ainsi que les fréquences caractéristiques.

1.3.1 La longueur de Debye

Un des paramètres fondamentaux d'un plasma est l'écrantage de toute particule chargée dans le plasma par un nuage de particules l'entourant et de charge opposée; c'est l'écrantage de Debye. La longueur de Debye λ_D est une échelle de longueur propre à chaque décharge et qui s'interprète comme étant la réponse des particules chargées à réduire les effets des champs électrique locaux. Cet écrantage confère au plasma la caractéristique de quasi-neutralité [40].

Considérons une charge électrique positive q immergée dans un plasma quasi-neutre. Cette charge créera un potentiel électrique dont l'expression dans le vide s'écrit :

$$V_0 = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1.1)$$

Ce potentiel est affecté par les électrons et les ions du plasma et son expression est solution de l'équation de Poisson :

$$\Delta V = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (1.2)$$

où

ϵ_0 la permittivité du vide.

ρ est la densité de charge du plasma donnée par :

$$\rho = e(n_i - n_e) + q\delta(r) \quad (1.3)$$

$\delta(r)$ est la fonction de Dirac indiquant que la charge q est ponctuelle.

Pour résoudre cette équation, on suppose l'équilibre thermodynamique pour la distribution des charges, soit une distribution maxwellienne pour chaque composants du plasma α (électrons ou ions)

En supposant que les électrons sont en équilibre thermodynamique à la température T_e , leur densité est donnée par :

$$n_\alpha = n_{\alpha 0} \exp\left(\frac{q_\alpha V}{k_B T_\alpha}\right) \quad (1.4)$$

où $n_{\alpha 0}$ est la densité électronique ou ionique dans le volume du plasma (loin de la perturbation).

Dans l'approximation des petites perturbations ($eV \ll k_B T_e$), la solution de l'équation de Poisson prend la forme :

$$V(r) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) = V_0 \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) \quad (1.5)$$

dit potentiel coulombien écranté, potentiel de Yukawa ou encore potentiel de Debye-Huckel.

Le paramètre λ_D est la longueur de Debye. Dans le cas où on ne considère que l'écrantage due aux électrons, on a :

$$\lambda_D = \left(\frac{\epsilon_0 k_B T}{n_{e0} e^2}\right)^{1/2} \quad (1.6)$$

L'équation 1.5 montre que le plasma modifie le potentiel (V_0) d'une charge libre en provoquant son atténuation sur une distance caractéristique λ_D .

1.3.2 Fréquence plasma

Nous avons montré dans ce qui précède comment les effets d'une perturbation de charge dans un plasma sont contenus ou écrantés par le mouvement des électrons. Il est évident que cette réponse du plasma n'est pas instantanée. Une estimation raisonnable du temps de "mise en place de l'écrantage" est la durée nécessaire à un électron de parcourir la longueur de Debye. Ce temps t_p est donné par [63].

$$t_p = \frac{\lambda_D}{\langle v_{e_{th}} \rangle} = \frac{\left(\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{n_e e^2}\right)^{1/2}}{\left(\frac{k_B T_e}{m_e}\right)^{1/2}} = \left(\frac{\varepsilon_0 m_e}{n_e e^2}\right)^{1/2} \quad (1.7)$$

Avec $v_{e_{th}}$ vitesse thermique des électrons.

Un raisonnement rigoureux [63, 64] montre que la réponse d'un plasma à la force électrique générée par la perturbation se fait par voie d'oscillation. La fréquence de ces oscillations, appelée fréquence plasma ou fréquence de Langmuir, est l'inverse du temps t_p :

$$\omega_p = \left(\frac{n_e e^2}{\varepsilon_0 m_e}\right)^{1/2} \quad (1.8)$$

Dans la littérature, on se refait souvent à l'équation 1.8 par fréquence plasma alors qu'en toute rigueur la fréquence plasma est $f_{P_e} = \frac{\omega_p}{2\pi}$.

L'équation 1.8 montre que si une perturbation externe (onde électromagnétique) de fréquence ($\omega < \omega_p$) est envoyée sur un plasma, les électrons peuvent répondre suffisamment vite pour maintenir la neutralité du plasma ; l'onde sera réfléchi. Par contre si ($\omega > \omega_p$), les électrons n'auront pas le temps de réagir et l'onde traversera le plasma.

1.3.3 Neutralité macroscopique

La présence de ces particules de poussière (grains), modifie les paramètres du plasma et affecte les processus collectifs dans ce dernier. En particulier, les grains de poussière, peuvent collecter efficacement des électrons et des ions du plasma et se chargent alors par le biais de la collection de particules. A l'équilibre, les densités électroniques et ioniques sont déterminées par la condition de neutralité :

$$en_{i0} - en_{e0} + q_{d0}n_{d0} = 0 \quad (1.9)$$

où n_e , n_i , n_d représentent, la densité électronique, la densité ionique et la densité des grains de poussière respectivement, e étant la charge du proton et $q_d = Z_d e$ ($-Z_d e$) est la charge répartie sur la surface du grain, suivant qu'elle soit positive ou négative. La présence des grains de poussière ainsi que leur dynamique, altèrent le transport des particules, modifient certains types d'ondes ioniques et surtout, introduit de nouveaux modes d'ondes dans le plasma (dust acoustic wave).

1.3.4 Paramètre de couplage coulombien

Le couplage entre les grains de poussières est caractérisé par un paramètre, nommé Γ_s , défini comme étant le rapport entre l'énergie potentielle coulombienne de l'interaction inter-grains et l'énergie de l'agitation thermique [65].

Les grains de poussière chargés, peuvent être faiblement ou fortement corrélés selon la valeur du paramètre de couplage coulombien Γ_s . En présence d'effet d'écran (screening), l'interaction inter-grains est de type de Yukawa et le paramètre de couplage Γ_s s'exprime par [66, 65] :

$$\Gamma_s = \frac{\langle E_p \rangle}{\langle E_c \rangle} = \frac{q_d^2}{4\pi\epsilon_0 d (k_B T_d)} \exp\left(-\frac{d}{\lambda_D}\right) \quad (1.10)$$

où, $d = (3n_{d0}/4\pi)^{\frac{1}{3}}$ est la distance inter-grain, n_{d0} la densité initiale des grains de poussière, q_d la charge d'un grain, et $k_B T_d$ représente l'énergie thermique du grain.

Quand, $\Gamma_s \gg 1$ les grains de poussière sont fortement couplés et cette condition est réalisée dans plusieurs plasmas poussiéreux de laboratoire, tels que les cristaux coulombiens (voir paragraphe suivant).

D'autre part si $\Gamma_s \ll 1$ le plasma est dit faiblement couplé ; dans ce cas, la relation de dispersion des ondes n'est pas affectée par la corrélation spatiale des grains [67, 68, 69, 70].

La nature de l'interaction entre les grains de poussière dépend de trois paramètres essentiels [68] :

1. Le rayon du grain r_0 .
2. La distance entre les grains, liée à leur densité : $d \sim n^{-1/3}$.
3. La longueur de Debye λ_D .

1.4 Cristaux coulombiens

Pour des paramètres de couplage assez élevés, les grains de poussières 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". Les structures 3D apparaissent dans certaine configuration de réacteur où dans un environnement de micro gravité. En fonction de la température, elles adoptent des structures cristallines CFC, CC et HC. Les structures 2D, les plus courantes, apparaissent dans les réacteurs à électrodes plates (1.6). A 2D la structure est exclusivement hexagonale (en l'absence de champ magnétique). Il est intéressant de noter que dans ce dernier cas, la transition de phase solide-fluide se fait à travers une phase particulière dite hexatic (pour un paramètre de couplage égale à 70). Les particules de poussières peuvent être créés dans le plasma lui même ou en injectant directement dans le plasma des particules microscopiques sphériques de mélamine-formaldéhyde, de carbone ou de

verre [71]. Pour pouvoir étudier leur comportement dans un plasma RF on utilise le dispositif dont le schéma est représenté sur la figure (1.6). Ce dispositif contient un faisceau laser étalé horizontalement avec une faible épaisseur pour éclairer les grains de poussières et une camera

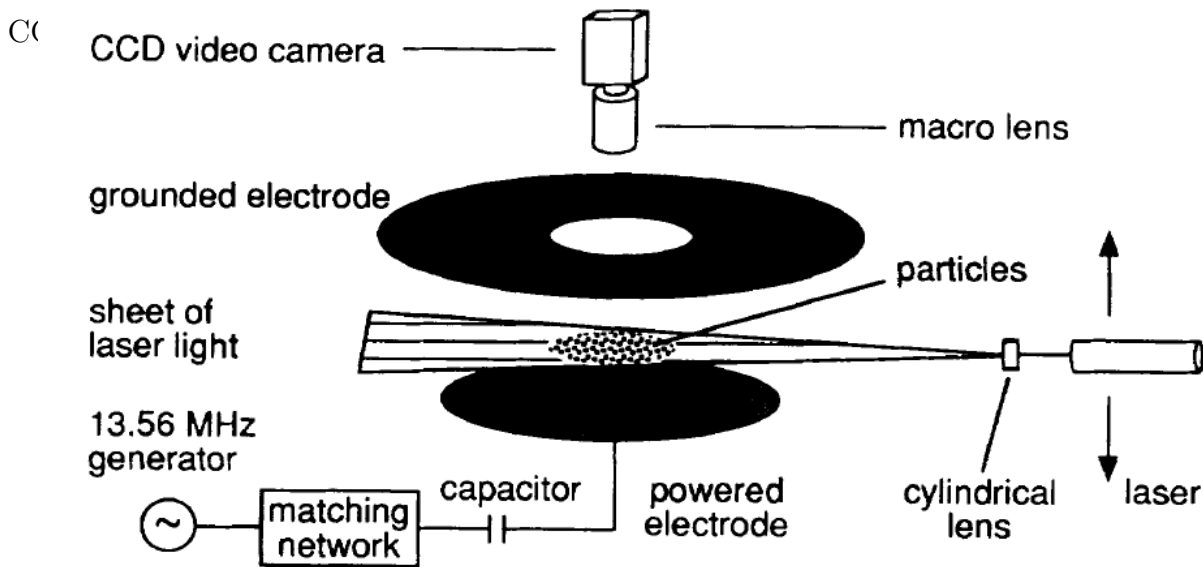


Figure 1.6 – Schéma du dispositif pour étudier le comportement des grains de poussière dans un plasma RF [70].

Sur la figure (1.7) est présentée une image CCD de grains de poussières formant un cristal coulombien à deux dimensions de structure hexagonale [70]. Ces grains lévitent dans la gaine inférieure ou à la frontière de celle-ci avec le plasma. Cette position d'équilibre résulte principalement 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 1.14).

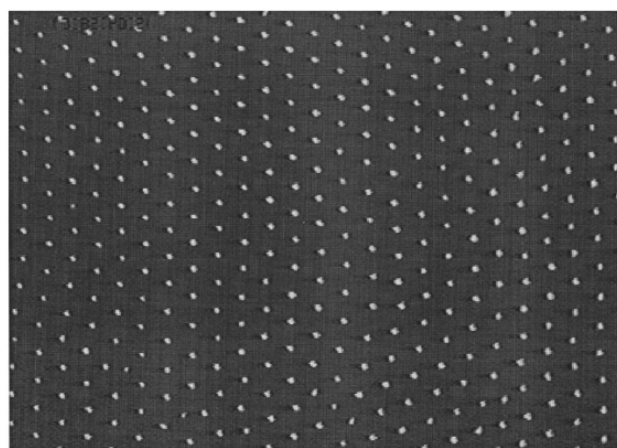


Figure 1.7 – Image CCD du plan horizontal d'un cristal coulombien .

1.5 Mécanismes et comportements d'une particule immergée dans le plasma

1.5.1 Les gaines électrostatiques

Lorsque l'on introduit un objet quelconque dans un plasma (par exemple un grain de poussière), il y a une perturbation du potentiel de celui-ci. C'est à dire une rupture locale de neutralité qui se répercute spatialement sur une distance de l'ordre de la longueur de Debye. C'est la formation d'une zone de charge d'espace positive, nommée "gaine électrostatique", car cet objet se charge négativement par collecte d'électrons.

Cette gaine est une interface abrupte entre le volume du plasma et les murs du réacteur, les électrodes, ou toute autre surface présente dans le réacteur. Les gaines sont généralement des zones de charge d'espace positive parce que initialement, les électrons ont une vitesse thermique $\left(\left(\frac{k_B T_e}{m_e}\right)^{1/2}\right)$ au moins 100 fois plus grande que celle des ions $\left(\left(\frac{k_B T_i}{m_i}\right)^{1/2}\right)$ à cause de leur masse qui est plus faible et leur température qui est plus grande ($T_e > T_i$) [72, 73]. Ainsi, les électrons vont bombarder plus souvent les murs de la chambre ou les électrodes et en conséquence seront retirés du plasma. Les ions laissés derrière vont donc créer une accumulation de charges positives autour du plasma qui va résister à la perte de plus d'électrons.

1.5.2 Longueur de Debye électronique et ionique

La zone de charge d'espace positive autour de la poussière ou tout autre objet plongé dans le plasma va atténuer le champs électrique que crée la particule autour d'elle. La distance, au-delà de laquelle l'influence de la particule devient négligeable, c'est à dire l'épaisseur de gaine est égale à la longueur de Debye linéarisée, définie par [74, 75] :

$$\lambda_D = \frac{\lambda_{D_e} \lambda_{D_i}}{\sqrt{\lambda_{D_e}^2 + \lambda_{D_i}^2}} \quad (1.11)$$

où λ_{D_e} et λ_{D_i} sont respectivement la longueur de Debye électronique et ionique avec :

$$\lambda_{D_e} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{n_e q^2}} \quad \lambda_{D_i} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T_i}{n_i q^2}} \quad (1.12)$$

où T_e et n_e sont respectivement la température et la densité des électrons, T_i et n_i celles des ions.

ε_0 la permittivité du vide.

k_B la constante de Boltzmann et q la charge électrique.

Il est considéré, en général dans les plasmas froids basse pression, que $T_e \gg T_i$ et $n_e \approx n_i$, soit une épaisseur de gaine équivalente à la longueur de Debye ionique. Dans le cas d'une décharge

capacitive radiofréquence à basse pression, la densité des ions est comprise entre $10^{15} - 10^{16} m^{-3}$ et leurs températures sont proches de la température ambiante. Soit, la gaine électrostatique entourant la poussière est d'une épaisseur de l'ordre de quelques centaines de micromètres.

1.5.3 Le potentiel plasma

Le plasma est un gaz macroscopiquement neutre où règne un champ électrique nul et un potentiel constant. C'est un potentiel plasma noté V_p . Il est positif par rapport au parois et sert souvent de référence.

1.5.4 Le potentiel flottant

Dans cette partie, nous considérons le problème à une dimension (pour une particule isolée). Nous posons S , la surface de la particule portée au potentiel V_S plongée dans un plasma voir figure 1.8.

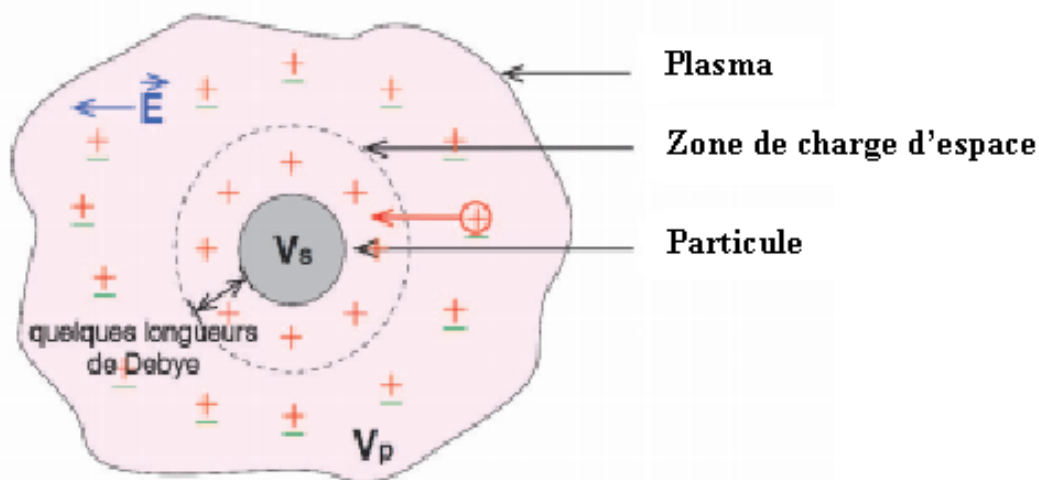


Figure 1.8 – Problème à une dimension d'une poussière plongée dans un plasma

La surface S reçoit alors un flux d'ions et d'électrons qui est en relation avec : $V = V_S - V_P$.

En général, $V_S < V_P$ d'où $V < 0$, les ions vont être alors accélérés vers la surface tandis que les électrons vont être freinés. C'est ce phénomène qui est à l'origine de la formation de la zone de charge d'espace positive autour de la poussière.

En l'absence de collisions dans la gaine, la concentration en électrons au voisinage de S peut être définie par $n'_{eS} = n_e \times \exp\left(\frac{qV}{k_B T_e}\right)$, d'après la distribution des vitesses des électrons de Maxwell-Boltzmann et pour une vitesse comprise entre v_e et $v_e + d_e$.

par conséquent, la vitesse thermique moyenne des électrons dans la gaine et dans le plasma sont égales : $\bar{v}'_{eS} = \bar{v}_e$.

Analysons le flux d'ions et d'électrons collectés par la surface S :

- Le flux d'électrons :

$$\frac{1}{4}n'_{eS}\bar{v}'_{eS} \quad \text{soit} \quad \frac{1}{4}n_e\bar{v}_e \exp\left(\frac{qV}{k_B T_e}\right) \quad (1.13)$$

- Le flux d'ions sera :

$$\frac{1}{4}n_i\bar{v}_i \quad (1.14)$$

Le courant arrivant à la surface du corps étant, alors, défini par :

$$I_S = \frac{qA}{4}n \left[\sqrt{\frac{8k_B T_i}{\pi m_i} - \frac{8k_B T_e}{\pi m_e} \exp\left(\frac{qV}{k_B T_e}\right)} \right] \quad (1.15)$$

avec :

A l'aire du corps plongé dans le plasma.

n la densité électronique et ionique dans le plasma.

Le potentiel flottant (V_f) correspondra alors à $I_S = 0$ soit alors :

$$V_f = -\frac{k_B T_e}{2q} \ln\left(\frac{m_i T_e}{m_e T_i}\right) \quad (1.16)$$

Le potentiel flottant V_f est un potentiel auquel se fixe le corps plongé dans le plasma. Son existence est due au fait que ce corps se charge d'abord négativement à cause de la grande mobilité des électrons. Puis, les électrons sont repoussés et les ions attirés par le corps chargé négativement jusqu'à ce que l'équilibre entre le flux électronique et le flux ionique soit atteint, le corps se porte alors au potentiel flottant. Il est alors entouré d'une zone de charge d'espace qui est en général positive, appelée gaine plasma.

1.5.5 Le critère de Bohm

Bohm a avancé l'hypothèse de l'existence d'une zone de transition entre une gaine d'épaisseur L_g et le plasma, appelée "pré gaine". C'est une zone de quasi-neutralité électrique dans laquelle le potentiel passe lentement de V_f à V_p .

D'après le critère de Bohm, la vitesse des ions à la lisière de la gaine doit être supérieure ou égale à leur vitesse thermique $\left(\frac{k_B T_e}{m_i}\right)^{1/2}$ afin qu'ils puissent sortir du plasma. Le potentiel en lisière de gaine noté V_l est donné par [76, 77] :

$$V_l = V_p - V_f = \frac{k_B T_e}{2e} \quad (1.17)$$

Les différentes zones citées ci dessus sont représentées sur la figure 1.9 ci-dessous.

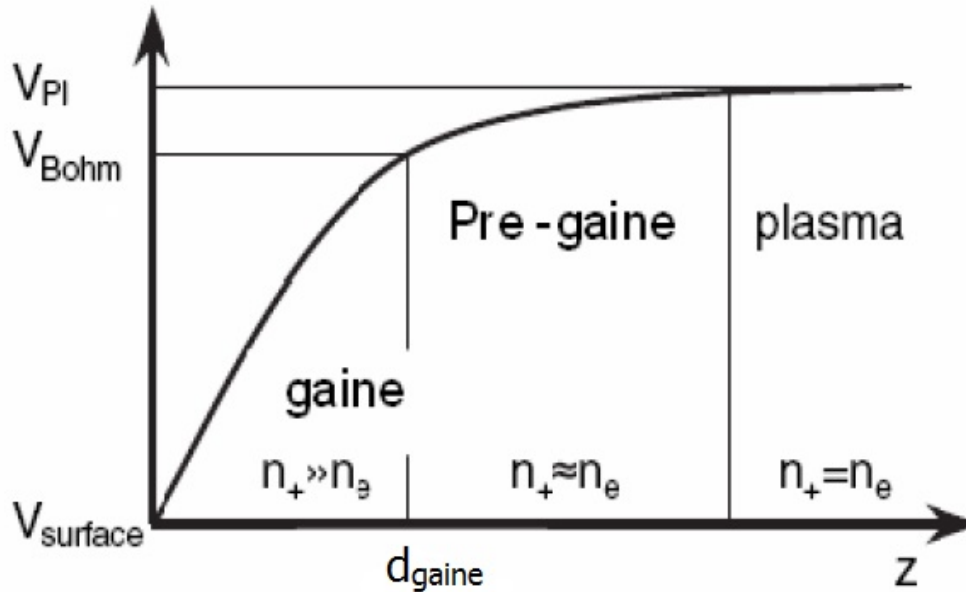


Figure 1.9 – Répartition du potentiel électrique dans un plasma au voisinage d'une paroi[78].

1.6 Création d'un plasma poussiéreux

Afin d'étudier un plasma poussiéreux en laboratoire [79, 80], il faut de toute évidence commencer par le créer. La procédure est simple et se fait en deux étapes. La première consiste à choisir le plasma de base. Le choix du plasma est libre mais par mesure de simplicité on utilise le plus souvent un plasma froid basse pression qui peut être créé par une décharge continue ou radiofréquence dans un gaz. Quant à la deuxième étape, elle consiste à ajouter les grains de poussière au plasma. Pour cela différentes méthodes existent :

- l'injection artificielle de poussières directement dans le plasma [70, 81, 2, 82].
- La formation de poussières par ajout d'un gaz réactif (SiH_4 [83, 54, 84, 85], CH_4 [86, 87, 88], C_2H_2 [86, 87, 89, 90]).
- La formation de poussières par pulvérisation d'une cible [91, 92, 93, 94, 95].

Dans les expériences de laboratoire, les poudres peuvent être injectées directement dans le plasma ou bien formées à l'intérieur de celui-ci. Les poudres injectées sont généralement de taille micrométrique et, à cause de leur masse, sont confinées près de l'électrode inférieure à la lisière des gaines où la force électrique est suffisante pour compenser la gravité. Des conditions de micro gravité sont donc nécessaires pour piéger les poussières dans tout l'espace inter-électrode [96]. On peut cependant obtenir en laboratoire des nuages denses de poudres submicrométriques

dans tout le volume du plasma en utilisant un gaz réactifs tels que le silane [97, 85], le méthane ou l'acétylène [87], ou encore par pulvérisation d'une cible qui se fait par bombardement ionique [98, 95].

1.7 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 (figure 1.10). Plusieurs théories traitent de ce processus. La plus connue est la théorie OML (Orbital Motion Limited) que nous allons présenter ici brièvement [99, 100]. 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 ($V_s < 0$) [101]. Dans le cas d'une distribution Maxwellienne des charges du plasma et connaissant les sections efficaces de collision des charges électriques [99, 100], on trouve les expressions des deux flux :

$$I_e = -\pi en_{0e}a^2 \left(\frac{8k_B T_e}{\pi m_e} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{eV_s}{k_B T_e} \right) \quad (1.18)$$

$$I_i = \pi en_{0i}a^2 \left(\frac{8k_B T_i}{\pi m_i} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(1 - \frac{eV_s}{k_B T_i} \right) \quad (1.19)$$

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

A l'équilibre :

$$\frac{dQ_g}{dt} = I_i + I_e = 0 \quad (1.20)$$

En remplaçant I_e et I_i par leurs expressions 1.18 et 1.19 dans l'équation 1.20 , on trouve :

$$\frac{n_{0e}}{n_{0i}} \sqrt{\frac{T_e m_i}{T_i m_e}} \exp\left(\frac{eV_s}{k_B T_e} \right) = \left(1 - \frac{eV_s}{k_B T_i} \right) \quad (1.21)$$

En résolvant cette dernière équation 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 des processus autres que les collisions avec les électrons et les ions, comme par exemple l'émission d'un photo-électron par une radiation ultraviolette, l'émission thermique des électrons, etc.

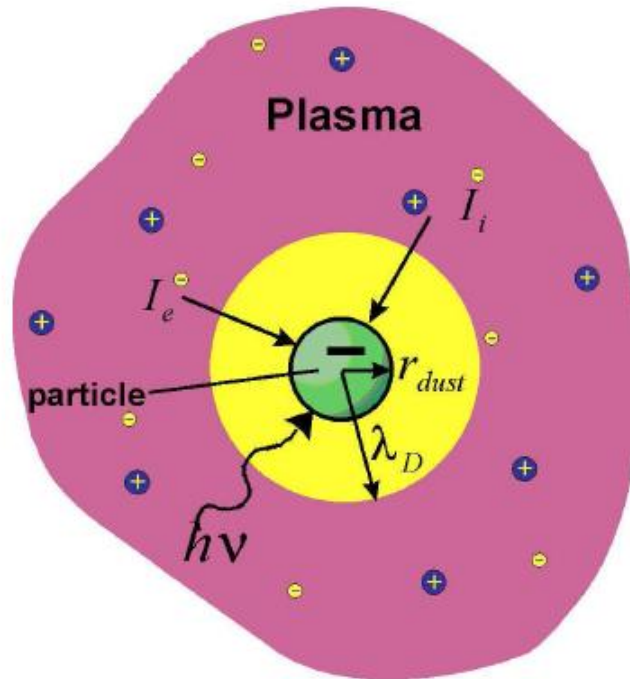


Figure 1.10 – Représentation de l'écrantage de Debye

1.8 Mécanismes de piégeage des poussières dans un plasma

1.8.1 Forces s'exerçant sur une poussière

Les forces qui s'exercent sur une poussière dépendent toutes du rayon de celle-ci, soit directement par l'intermédiaire de la charge électrique. Nous pouvons ainsi classer ces forces en deux catégories, celles indépendantes de la charge et celles déterminées par celle-ci. Ces forces peuvent être décrites de la façon suivante :

Dans la catégorie des forces indépendantes de la charge, nous citons :

- La force de gravité
- La force de friction ou d'entraînement (en cas de flux de gaz) des neutres
- La force thermophorèse due au gradient de température, entraînant les poussières vers les zones froides

Dans la catégorie des forces dépendantes de la charge ; il y a

- La force électrique
- La force d'entraînement ionique
- La force d'interaction entre les poussières

Ainsi, que ce soit via la charge ou directement par le rayon, la taille des poussières va être déterminante pour leur dynamique. Les poussières seront donc confinées dans le plasma si les forces piégeantes l'emportent. Dans les expériences classiques de laboratoire, la principale force piégeante est la force électrique induite par le fort champ électrique présent dans les régions de gaine, et susceptible de compenser la gravité. A l'échelle submicrométrique, les forces ioniques et thermophorèses auront un rôle de plus en plus déterminant dans le comportement des poussières.

1.8.1.1 La force de gravité

Comme tout corps présents sur terre, une particule de poussière immergée dans le plasma subit l'attraction terrestre. Cette force qui attire la particule vers le bas tend à l'expulser du plasma. Elle est définie pour une particule sphérique par[100] :

$$\vec{F}_g = m_d \vec{g} = \frac{4}{3} \pi r_d^3 \rho_d \vec{g} \quad (1.22)$$

avec m_d la masse de la particule, r_d son rayon, ρ_d sa masse volumique (de l'ordre de quelques $g.m^{-3}$) et \vec{g} l'accélération gravitationnelle.

1.8.1.2 La force de friction des neutres

La force due aux transferts de quantité de mouvement entre les poudres et les neutres dans un plasma est appelée force de trainée ou friction des neutres. Dans les procédés plasma on est en général en présence permanente de flux de gaz. Ces flux transfèrent de la quantité de mouvement aux poudres. D'un autre coté, les poudres en mouvement échangent aussi de la quantité de mouvement avec le gaz plasmagène.

Pour l'évaluation de la force de friction des neutres, deux régimes d'évolution de la poudre sont à prendre en compte. Ces régimes sont, le régime hydrodynamique où le nombre de Knudsen est très inférieur devant l'unité, i.e. $K_n = \frac{l_{pm}}{r_d} \ll 1$, et le régime cinétique où le nombre de Knudsen est très supérieur devant l'unité, i.e. $K_n \gg 1$. Dans le régime hydrodynamique (haute pression), la force de friction peut être estimée à partir de la loi de Stokes et elle a été trouvée proportionnelle à la vitesse (v_d) et au rayon (r_d) de la poussière [102].

Dans les procédés plasmas ($P \leq 1 \text{ torr}$), le libre parcours moyen de neutres (l_{pm}) est supérieur à quelques $100 \mu m$ alors que le rayon de la poudre est inférieur à quelque μm . Donc, pour estimer la force de friction des neutres \vec{F}_n dans les procédés plasmas, nous devons considérer le régime cinétique. Dans le cas des collisions spéculaires entre les atomes neutres et les poudres (i.e. les vitesses des atomes neutres après collision sont perpendiculaires à la surface de la poudre), la force de friction des neutres est donnée par[103] :

$$\vec{F}_n = -\frac{8}{3} \sqrt{2\pi} r_d^2 n_n m_n v_{th,n} (\vec{v}_d - \vec{v}_n) \quad (1.23)$$

avec n_n la densité d'atomes neutres, m_n et \vec{v}_n respectivement leur masse et leur vitesse.

$v_{th,n} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m_n}}$ la vitesse d'agitation thermique des molécules de gaz.

1.8.1.3 La force de friction ionique

La force due aux transferts de quantité de mouvement entre les ions positifs et les poudres dans le plasma est appelée force de trainée ou friction ionique. Deux composants contribuent à cette force à savoir : la force de collection et la force orbitale. La force de collection traduit le transfert de la quantité de mouvement de tous les ions collectés par la surface de la poudre. Chaque ion incident transfère à la poudre sa quantité de mouvement initiale, $(m_i \vec{v}_i)$, et la contribution de tous les ions conduit à la force de collection :

$$\vec{F}_i^C = \pi \cdot b_c^2 n_i \cdot v_{moy} \cdot m_i \cdot \vec{v}_i \quad (1.24)$$

où v_{moy} est la vitesse moyenne des ions.

n_i est la concentration ionique, m_i et \vec{v}_i , la masse des ions positifs et leur vitesse.

$b_c^2 = r_d^2 \left(1 - 2q \frac{V_d - V_p}{m_i v_i^2}\right)$ étant la paramètre de collection de la particule.

La deuxième composante, la force orbitale, est donnée par [93] :

$$\vec{F}_i^O = 4 \cdot \pi \cdot b_{\frac{\pi}{2}}^2 \cdot \Gamma \cdot n_i \cdot v_{moy} \cdot m_i \cdot \vec{v}_i \quad (1.25)$$

Cette équation exprime la contribution des ions subissant une déflexion de leur trajectoire dans le champ central de la poudre sans atteindre sa surface mais qui lui transfère leur quantité de mouvement par interactions coulombiennes.

avec $b_{\frac{\pi}{2}}^2 = \frac{eQ_d}{4\pi\epsilon_0 m_i v_i^2}$ représentant le paramètre d'impact, correspondant à une déviation de 90° d'ion incident, alors que le coefficient Γ est le logarithme coulombien donné par :

$$\Gamma = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\lambda_D^2 + b_{\frac{\pi}{2}}^2}{b_c^2 + b_{\frac{\pi}{2}}^2} \right) \quad (1.26)$$

Finalement l'expression de la force de friction des ions qui est la somme des deux contributions s'écrit comme suit [103] :

$$\vec{F}_i = \vec{F}_i^C + \vec{F}_i^O \quad (1.27)$$

La force de trainée des ions positifs favorise l'expulsion des poudres de la décharge. De plus, lorsque la concentration particulière des poussières est importante dans la décharge, l'apparition

du phénomène "void" (voir figure 1.11) serait initiée par cette force. Le void correspondant dans le plasma à une région où il n'y a pas de particule.

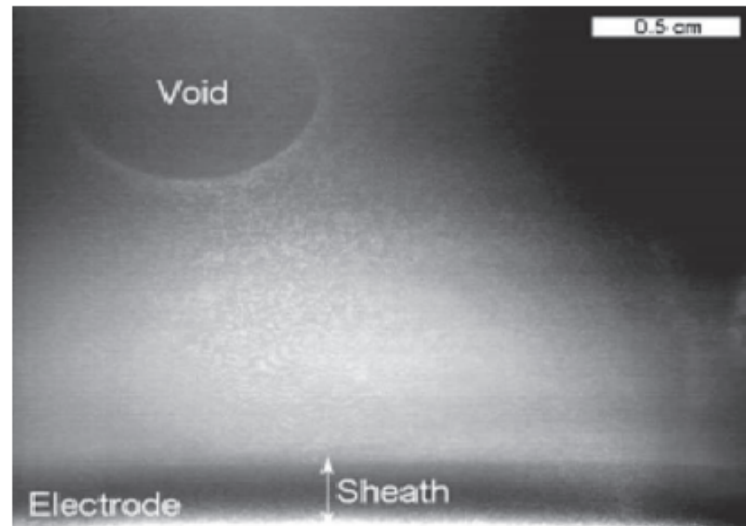


Figure 1.11 – Photos d'un "void" dans un plasma poussiéreux capacitif radiofréquence [95].

1.8.1.4 La force thermophorèse

La force thermophorèse consiste en la dérive des poudres en présence d'un gradient de température du gaz neutre. Cette force peut être induite en refroidissant ou en réchauffant une des électrodes qui va générer un mouvement des poudres des régions chaudes vers les régions froides du plasma. Les molécules du gaz neutres ont une plus grande vitesse thermique dans la région chauffée, ce qui se traduit par un plus grand transfert de leur quantité de mouvement vers la poudre dans cette région que dans la région froide. Ce fait génère sur la poudre une force dans le sens opposé du gradient de température (voir figure 1.12) [104] .

$$\vec{F}_{th} = -\frac{32}{15} \frac{r_d^2}{v_{th,n}} \left(1 + \frac{5\pi}{32} (1 - \alpha_T) \right) \kappa_T \vec{\nabla} T_{gaz} \quad (1.28)$$

où $\vec{\nabla} T_{gaz}$ représente le gradient de température alors que κ_T est la partie translationnelle de la conductivité thermique. Le coefficient d'accommodation thermique du gaz sur la surface de la poudre, α_T , dépend principalement du rapport de masse des molécules incidentes et la surface des atomes du gaz et de la nature des surfaces chauffées et de l'énergie d'absorption. Une approximation raisonnable de la valeur de ce coefficient pour des températures allant de $300K$ à $500K$, est $\alpha_T \approx 1$.

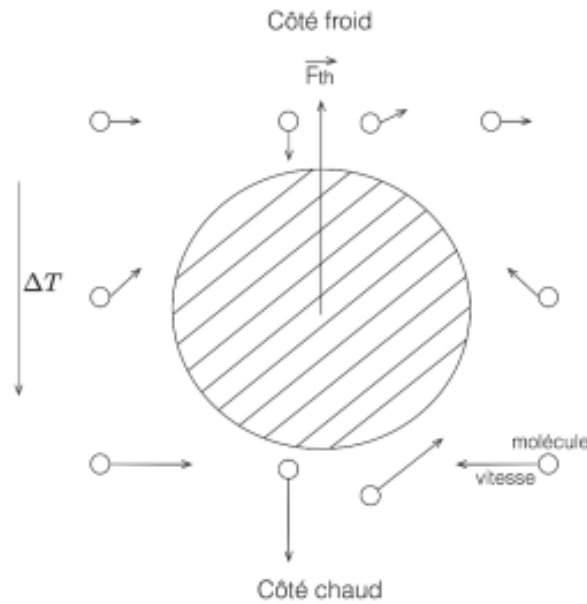


Figure 1.12 – Particule de poussière immergée dans un gaz et soumise à un gradient de température.

1.8.1.5 La force électrique

Les poudres présentes dans le plasma sont chargées. Dans une décharge radiofréquence, cette charge est négative. La particule subit, en présence d'un champ électrique extérieur une force de coulomb donnée par :

$$\vec{F}_e = Q_d \vec{E} \quad (1.29)$$

L'équation 1.29 ne tient pas compte que la particule n'est pas dans le vide mais dans un plasma, où il y a présence d'effet d'écran entourant cette particule (condition de maintien de la quasi-neutralité). En présence d'un champ électrique extérieur, la charge sur la poudre et les charges d'écran à l'intérieur de la sphère de Debye entourant cette poudre sont polarisées et forme un dipôle. Daugherty et al. [105] ont inclus cette force sur le dipole comme second terme dans l'expression de la force électrique, et ont obtenu :

$$\vec{F}_e = Q_d \vec{E} \times \left[1 + \frac{\left(\frac{r_d}{\lambda_D}\right)^2}{3 \left(1 + \frac{r_d}{\lambda_D}\right)} \right] \quad (1.30)$$

Tenant compte de la condition $r_d \ll \lambda_D$, l'équation 1.30 approche bien l'équation 1.29. La remarque que nous pouvons tirer est : l'écrantage par le plasma de la charge de la poudre pour maintenir sa quasi-neutralité, ne génère pas d'effet secondaire d'écrantage du champ extérieur.

1.8.1.6 La force d'interaction particule-particule

Comme 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 (figure 1.10). 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 appelé longueur de Debye λ_D .

Au delà de cette longueur le potentiel créé par la charge test n'est plus ressenti. A cause de ce phénomène, l'interaction entre les grains de poussière sera de type Debye-Hückel ou de Yukawa au lieu du type Coulombien [103] :

$$U_d = \frac{k q_{d_1} q_{d_2}}{r} e^{-r/\lambda_D} \quad (1.31)$$

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. k : constante de coulomb.

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 par les particules en dehors de la sphère de Debye, pour une certaine distance de la longueur de Debye λ_D .

1.8.2 Comparaison des forces appliquées sur une poussière

Nous venons de présenter les principales forces agissant sur les particules et conditionnant leur piégeage dans le plasma. Nous allons les comparer, sachant que selon la taille des particules, les forces prédominantes ne sont pas les mêmes et que les forces de confinement des particules dans un plasma sont les plus intenses lorsque les particules sont en-dessous d'une certaine taille.

Les forces agissant sur une particule ne sont pas toutes de même intensité. De plus, certaines auront tendance à confiner la poussière dans le plasma tandis que d'autres auront tendance à l'expulser de celui-ci. Les forces dépendent toutes du rayon de la particule sur lesquelles elles agissent :

- La force électrostatique varie linéairement avec la rayon de la particule (r_d) car la charge de la particule Q_d est proportionnelle au rayon de celle-ci.
- La force de trainée des ions, du gaz et la force thermophorèse varient, quant à elles, linéairement avec la surface de la particule (r_d^2).
- La force gravitationnelle est proportionnelle au volume de la particule r_d^3 .

Par conséquent, les particules de petites tailles seront soumises majoritairement à la force électrostatique alors que les particules de grosses tailles seront dominées par la force gravitationnelle (voir figure 1.13). Il sera, alors, plus difficile de piéger des particules de poussière dans une décharge capacitive quand celles-ci auront une taille supérieure à quelques dizaines de micromètres.

Pour une particule de Silicium ($\rho = 2.3g.cm^{-3}$) se trouvant à un emplacement proche d'une des gaines d'une décharge capacitive, où le champ électrique local est égale à $E \approx 10^4 V/m$. Si

la différence de vitesse entre le flux de gaz et la particule est évaluée à $0.1m/s$. La vitesse des ions positifs à cet endroit à $10^4m/s$ (soit vingt fois leur vitesse d'agitation thermique dans le plasma).

Le gradient de température locale est estimé à $10^3K/m$, avec une température électronique qui est de l'ordre de $3eV$, la température ionique cent fois moins importante que cette dernière et la température du gaz étant de $400K$.

Les travaux effectués par K. De Bleecker [11] dans ces conditions, pour une pression de quelques dizaines de Pascal, sont illustrés sur la figure 1.13.

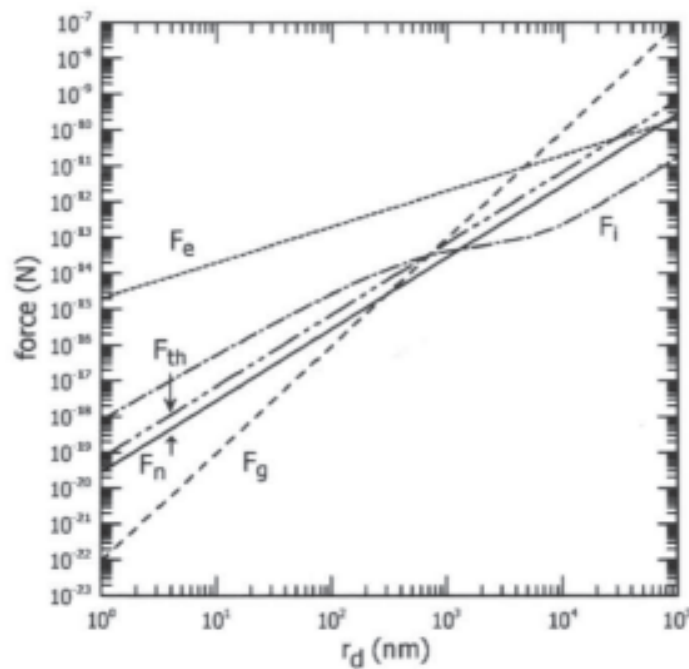


Figure 1.13 – Comparaison des différentes forces agissant sur une particule sphérique en fonction de son rayon [106]

L'importance ou la prédominance de certaines de ces forces détermine grandement les régions du plasma où les poudres peuvent être piégées ou maintenues en suspension. D'après les formulations données des différentes forces agissant sur les poudres, on constate qu'elles dépendent différemment du rayon de la poudre. Pour les particules de taille nanométrique, la force électrique domine le transport de poudres et maintient les nanoparticules chargées loin des parois du réacteur. Notons aussi que l'amplitude de la force électrostatique dépend de la localisation dans les différentes régions du plasma. En ce sens, qu'un champ électrique large n'est présent que dans les gaines et la force électrostatique dans ces régions excède toutes les autres forces. Dans le volume du plasma, où le champ électrique est plus faible, les forces de friction ionique et de thermophorèse contrebalancent dans certaines situations la force électrostatique et accélèrent les poudres vers les limites du plasma où le champ électrique est plus intense et par

la suite capable de compenser ces forces de répulsion. La force gravitationnelle dépend de r_d^3 , et de ce fait n'est importante que pour des particules de taille macrométrique et devient vite négligeable pour des tailles nanométriques.

Une représentation schématique de l'ensemble des forces agissant sur une poudre est donnée par la figure 1.14.

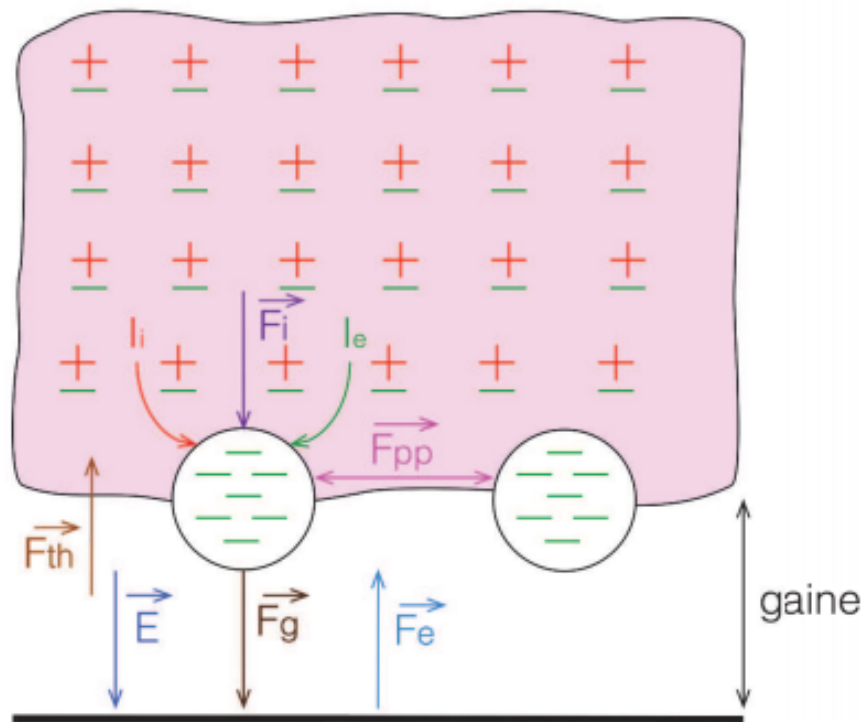


Figure 1.14 – Récapitulatif des différentes forces agissant sur des particules dans une décharge capacitive

Simulation par dynamique moléculaire d'un plasma poussiéreux

2.1 Introduction

Les sciences des matériaux ont connu, avec l'introduction des modélisations moléculaires, une nouvelle évolution depuis le début des années 60. Ces modélisations ne remplacent pas les méthodes expérimentales ou théoriques, précédemment développées, mais donnent un outil supplémentaire pour comprendre le comportement des matériaux.

Les modélisations moléculaires décrivent les matériaux à l'échelle atomique en appliquant les équations de la mécanique newtonienne pour prédire le comportement macroscopique des matériaux à partir des interactions interatomiques. Elle joue un rôle grandissant autant en physique, qu'en chimie et en biologie, dans la compréhension des mécanismes physiques impliqués dans les systèmes étudiés [107, 108, 109] .

Les simulations numériques constituent maintenant une troisième voie dans la méthodologie scientifique, complémentaire de l'expérimentation et de la théorie, notamment du fait que, d'une part, sur le plan expérimental, il n'est pas toujours possible de cerner l'ensemble des variables à l'origine des phénomènes étudiés et que, d'autre part, sur le plan théorique, les approximations rendent les systèmes étudiés parfois peu représentatifs et éloignés des systèmes réels. La force et l'intérêt de la modélisation moléculaire reposent par ailleurs sur la possibilité d'accéder, dans des temps raisonnables, aux grandeurs microscopiques qui gouvernent les phénomènes étudiés.

La dynamique moléculaire (DM) est une technique de simulation fondée uniquement sur la mise en œuvre des forces interatomiques. Elle permet de suivre l'évolution temporelle d'un ensemble de N atomes par intégration numérique pas à pas des équations du mouvement classique, en utilisant les lois newtoniennes de la mécanique classique.

Soit un système de N particules considérées comme des masses ponctuelles soumises à une interaction mutuelle. En mécanique classique, chaque particule étant définie par trois degrés de libertés relatives aux positions et trois autres relatives aux impulsions, ce système est donc déterminé par $6N$ degrés de liberté constituant un point dans l'espace des phases. L'intégration des équations newtoniennes permet de construire la trajectoire du système. Toute propriété physique A du système est obtenue par une moyenne temporelle sur une portion suffisante $[t_0, t]$ de la trajectoire de phase [110, 111] à l'équilibre thermodynamique

$$\langle A \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_{t_0}^{t_0+t} A(\tau) d\tau \quad (2.1)$$

L'hypothèse ergodique assure que cette moyenne est équivalente à la moyenne d'ensemble. Il est important de préciser que cette approche donne accès non seulement aux propriétés statiques, comme la structure et la thermodynamique, mais aussi aux propriétés dynamiques et notamment aux coefficients de transport puisque les positions et les vitesses sont connues à chaque instant.

C'est cette dernière méthode qui a été utilisée dans les travaux présentés dans ce mémoire. Elle a été utilisée dans la simulation de plusieurs phénomènes dans les plasmas poussiéreux avec un grand succès. Notamment pour simuler les phénomènes très rapides tel que les ondes de chocs.

2.2 Éléments sur la simulation par dynamique moléculaire

Dès l'apparition des premiers ordinateurs dans les années 1950 [112], la dynamique moléculaire a posé ses premiers jalons. Le premier article reportant une simulation de dynamique moléculaire a été écrit par Alder et Wainwright en 1957 [113]. L'objectif de cet article était de retrouver le diagramme de phase d'un système de sphères dures, particulièrement celles des phases liquides et solides.

L'article [114] de J. B. Gibson, A. N. Goland, M. Milgram et G. H. Vineyard du Brookhaven National Laboratory apparu en 1960, est probablement le premier exemple d'un calcul de dynamique moléculaire avec un potentiel continu basé sur une méthode d'intégration en temps aux différences finies. Anessur Rahman de Argonne National Laboratory a été l'un des plus célèbres pionniers en dynamique moléculaire. Dans son article de 1964 [115], il étudie les propriétés de l'argon liquide en utilisant un potentiel de Lennard-Jones sur un système contenant 864 atomes. Loup Verlet retrouva en 1967 [116] le diagramme de phase de l'argon à l'aide du potentiel de Lennard-Jones et calcula des fonctions de corrélations pour tester les théories de l'état liquide.

Le célèbre procédé de comptage connu sous le nom de liste de voisins de Verlet fut introduit dans ses articles ainsi que « l'algorithme d'intégration en temps de Verlet ». Les transitions de phases dans le même système furent recherchées par Hansen et Verlet quelques années plus tard [117].

Depuis les années 70, la méthode de dynamique moléculaire n'a cessé de connaître de rapides développements, tant du point de vue des développements algorithmiques que du point de vue des applications aux systèmes complexes les plus divers (fluide moléculaire, systèmes polyatomiques "géant", solides, interfaces ...). Des études très variées de simulation par dynamique moléculaire ont été menées sur l'eau [118] et sur des systèmes biologiques (protéines chargées, membranes, ect.) dans lesquels figurent des ions [119], ainsi que dans les plasmas poussiéreux.

2.2.1 Aspects généraux concernant la simulation par dynamique moléculaire

La dynamique moléculaire est une méthode de simulation moléculaire qui permet de calculer les trajectoires atomiques en intégrant les lois de la mécanique classique [120, 121]. Les forces d'interactions entre les atomes dérivent d'un potentiel analytique contenant des paramètres ajustés sur les résultats expérimentaux. Le calcul direct des forces, permet de simuler des systèmes de grandes tailles avec des pas de calculs très court allant de pico à la femto-seconde. Le principe de cette méthode, particulièrement simple, consiste à générer les trajectoires d'un ensemble

fini de particules en intégrant de façon numérique les équations de mouvements classiques de Newton.

Les deux caractéristiques essentielles de la simulation par dynamique moléculaire sont l'algorithme et le champ de force.

- L'algorithme : est la procédure mathématique et informatique qui sera suivie, au cours de la simulation, pour résoudre les équations de la mécanique.
- Le champ de force est un ensemble conventionnel d'équations et de paramètres utilisé pour décrire les interactions entre les différents atomes.

2.2.2 Détails sur l'équation de base de la dynamique moléculaire

En dynamique moléculaire classique, chaque atome de la molécule est considéré comme une masse ponctuelle, dont le mouvement est déterminé par l'ensemble des forces exercées sur lui par les autres atomes.

Comme on l'a vu précédemment, la dynamique moléculaire repose sur l'intégration des équations du mouvement relatives aux atomes i :

$$\vec{F}_i(t) = m_i \vec{\gamma}_i(t) \quad (2.2)$$

où m_i est la masse de l'atome i , \vec{F}_i est le vecteur force agissant sur l'atome i et $\vec{\gamma}_i$ le vecteur accélération de l'atome i .

Les accélérations sont issues par dérivation des positions des coordonnées $\vec{r}_i(t)$ des atomes i à l'instant t ; on a

$$\vec{F}_i(t) = m_i \frac{d\vec{v}_i(t)}{dt} = m_i \frac{d^2\vec{r}_i(t)}{dt^2} \quad (2.3)$$

où \vec{v}_i est le vecteur vitesse de l'atome i .

Si $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n$ sont les coordonnées des n atomes du système étudié à l'instant t , on peut déterminer la force \vec{F}_i qui s'exerce à cet instant sur l'atome i , par dérivation de la fonction énergie potentielle $V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$, par rapport à ses propres coordonnées spatiales :

$$\vec{F}_i(t) = -\overrightarrow{\text{grad}}V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) \quad (2.4)$$

La figure 2.1 présente, les étapes du déroulement d'un programme de dynamique moléculaire.

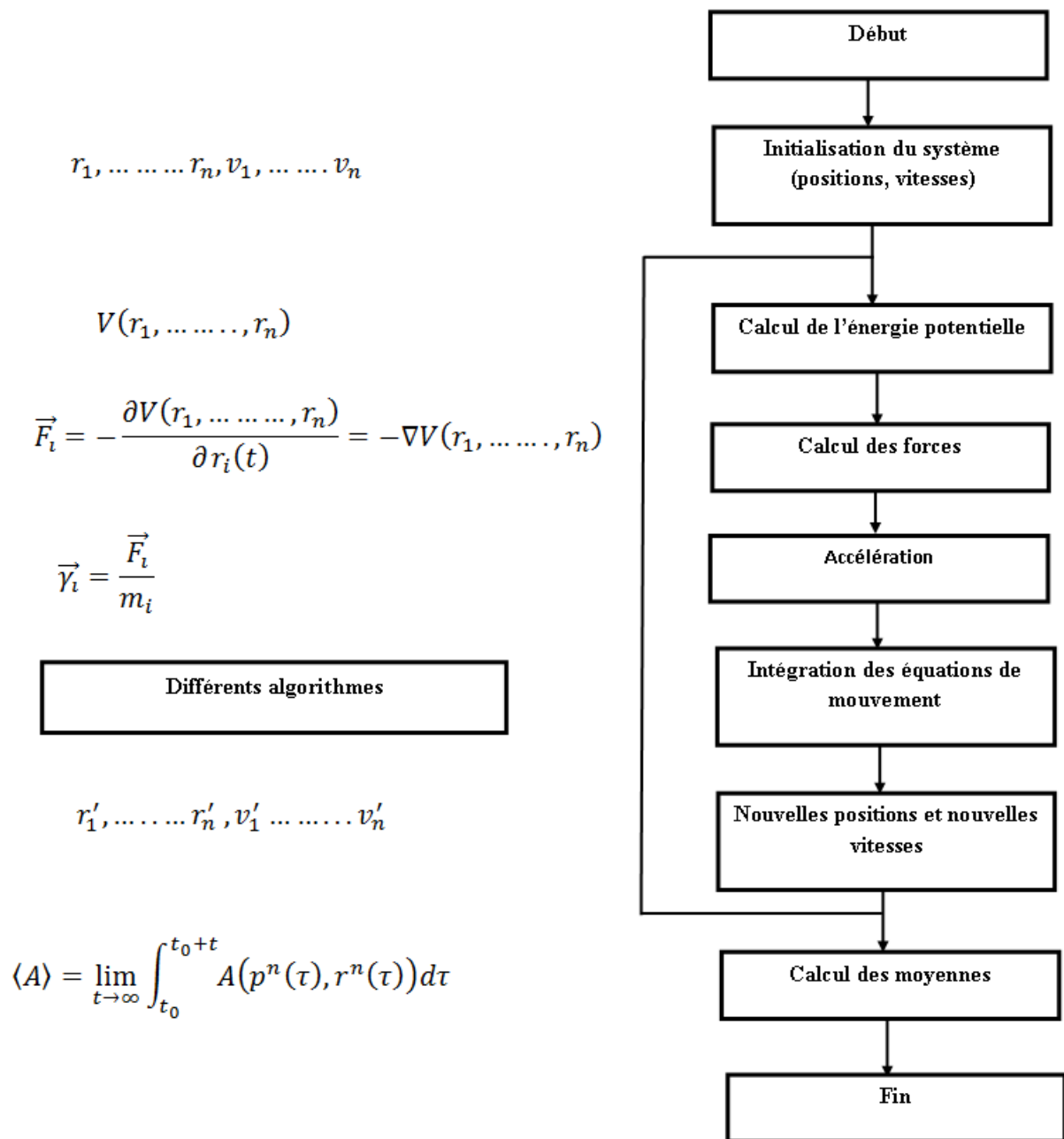


Figure 2.1 – Schéma d'un programme de dynamique moléculaire. $\vec{r}^n(t)$ et $\vec{p}^n(t)$ représentent l'ensemble des positions et des moments associés des particules du système, dans le temps

2.2.3 Algorithmes

Dans la méthode de la dynamique moléculaire, la résolution des équations du mouvement se fait de manière discrète, en utilisant une méthode de différences finies. Si, à un instant donné t , la position \vec{r} , la vitesse \vec{v} et l'accélération $\vec{\gamma}$ d'une particule sont connues, on peut calculer ces grandeurs à l'instant $t + \delta t$ à l'aide d'un développement en série de Taylor :

$$\vec{r}(t + \delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t) \delta t + \vec{\gamma}(t) \frac{\delta t^2}{2} + \dots \quad (2.5)$$

où δt est le pas d'intégration.

Le choix d'un algorithme est souvent déterminé sur la base de la précision des solutions, des coûts induits par l'ordinateur (temps et mémoire), et du degré de simplicité de programmation. Il existe divers algorithmes d'intégrations (Verlet simple [115], Verlet Leap-frog [122], Verlet vitesse [123], etc. ..). Ils diffèrent par la manière dont le développement de Taylor est implémenté.

2.2.3.1 Algorithme de Verlet

L'algorithme le plus répandu en dynamique moléculaire, pour l'intégration des équations de Newton, est sans doute l'algorithme de Verlet [115]. Cet algorithme utilise les positions et les accélérations à l'instant t , ainsi que les positions à l'instant $t - \delta t$, pour calculer les nouvelles positions à l'instant $t + \delta t$.

L'idée de base est d'écrire deux développements en série de Taylor au troisième ordre, de la position \vec{r}_i aux instants $(-\delta t)$ et $(+\delta t)$ soit :

$$\vec{r}_i(t + \delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t) \delta t + \frac{\vec{F}_i(t)}{2m_i} (\delta t^2) + \frac{1}{6} \frac{d^3 \vec{r}}{dt^3} (\delta t^3) + o(\delta t^4) \quad (2.6)$$

$$\vec{r}_i(t - \delta t) = \vec{r}_i(t) - \vec{v}_i(t) \delta t + \frac{\vec{F}_i(t)}{2m_i} (\delta t^2) - \frac{1}{6} \frac{d^3 \vec{r}}{dt^3} (\delta t^3) + o(\delta t^4) \quad (2.7)$$

La somme de ces deux relations mène à l'expression suivante :

$$\vec{r}_i(t + \delta t) = 2\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t - \delta t) + \frac{\vec{F}_i(t)}{m_i} (\delta t^2) + o(\delta t^4) \quad (2.8)$$

L'équation 2.8 constitue la forme de base de l'algorithme de Verlet.

La nouvelle position d'une particule i est donc calculée avec une précision de l'ordre de $o(\delta t^4)$. Cet algorithme est à la fois simple à mettre en œuvre et stable. Ce qui explique son succès dans les codes de simulation de dynamique moléculaire [124, 125, 126]

L'algorithme de Verlet présente cependant plusieurs inconvénients [127] :

- Il introduit des imprécisions dans le calcul numérique, puisque le terme $\vec{r}_i(t + \delta t)$ est obtenu en ajoutant un terme d'ordre 2 à une différence de terme d'ordre Θ . On ajoute donc un terme petit à une différence de deux termes importants d'où un problème de troncature important.

- Ce n'est pas un algorithme auto-initialisé, les nouvelles positions sont obtenues à partir des positions courantes $\vec{r}_i(t)$ et de celles du pas de temps précédent, $\vec{r}_i(t - \delta t)$.

A $t = 0$, on a recours à une autre méthode pour obtenir les positions à l'instant $(t - \delta t)$, qui est la possibilité d'utiliser le développement en série de Taylor (voir équation 2.5) à l'instant initial :

$$\vec{r}(t - \delta t) = \vec{r}(0) + \vec{v}(0) \delta t \quad (2.9)$$

- Un autre problème est que les vitesses ne découlent pas directement de l'algorithme, et leur connaissance est nécessaire pour le calcul de la température par exemple. Néanmoins, il est possible de calculer les vitesses à partir des positions via l'expression :

$$\vec{v}(t) = \frac{\vec{r}(t + \delta t) - \vec{r}(t - \delta t)}{2\delta t} + o(\delta t^2) \quad (2.10)$$

Il n'est donc pas possible de les calculer à l'instant t , sauf si les positions à l'instant $(t + \delta t)$ sont connues.

2.2.3.2 Algorithme Leap-frog

Afin de s'affranchir de ces difficultés, de nombreuses variantes de l'algorithme de Verlet ont été développées, dont l'algorithme dit Leap-frog [122] .

Dans cet algorithme, les vitesses et les positions des atomes sont calculées à des instants alternés, et les vitesses font explicitement partie de l'algorithme qui calcule les nouvelles positions (voir figure 2.2).

On a :

$$\vec{v}_i\left(t + \frac{\delta t}{2}\right) = \frac{\vec{r}_i(t + \delta t) - \vec{r}_i(t)}{\delta t} + o(\delta t^2) \quad (2.11)$$

et

$$\vec{v}_i\left(t - \frac{\delta t}{2}\right) = \frac{\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t - \delta t)}{\delta t} + o(\delta t^2) \quad (2.12)$$

Ce qui donne :

$$\vec{r}_i(t + \delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i\left(t + \frac{\delta t}{2}\right) \delta t \quad (2.13)$$

$$\vec{r}_i(t - \delta t) = \vec{r}_i(t) - \vec{v}_i\left(t - \frac{\delta t}{2}\right) \delta t \quad (2.14)$$

En remplaçant les expressions 2.12 et 2.13 dans la relation 2.9, on obtient alors :

$$\vec{v}_i \left(t + \frac{\delta t}{2} \right) = \vec{v}_i \left(t - \frac{\delta t}{2} \right) + \frac{\vec{F}_i(t)}{m_i} \delta t + o(\delta t^3) \quad (2.15)$$

On calcule ainsi la vitesse de chaque atome i à l'instant demi-entier $\left(t + \frac{\delta t}{2} \right)$ à partir de la force totale $\vec{F}_i(t)$ qui s'applique sur l'atome à l'instant t et de la vitesse à l'instant demi-entier précédent $\left(t - \frac{\delta t}{2} \right)$. La nouvelle position de l'atome est obtenue par la relation :

$$\vec{r}_i(t + \delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i \left(t + \frac{\delta t}{2} \right) \delta t \quad (2.16)$$

dans laquelle la vitesse à l'instant demi-entier $\left(t + \frac{\delta t}{2} \right)$ est directement insérée. Le schéma de principe de l'algorithme de Leap-frog est donné sur la figure 2.2 ci-dessous.

La méthode de Leap-frog présente deux avantages par rapport à l'algorithme de Verlet :

- Elle inclut explicitement les vitesses, mais pas celles à l'instant t .
- Ceci permet d'éviter d'avoir à calculer une différence de deux termes importants, d'où le gain de précision.

Cependant, les vitesses et les positions ne sont pas synchrones. Ceci implique qu'il n'est pas possible d'obtenir la contribution de l'énergie cinétique à l'énergie totale au même temps que les positions. Les vitesses ne sont donc pas obtenues de façon satisfaisante dans cet algorithme [122] .

D'autres algorithmes impliquent des développements de Taylor à des ordres supérieurs existents [128, 129]. Ils peuvent être plus précis, mais sont plus coûteux en temps de calcul, car on garde en mémoire beaucoup plus de données. Ils ne sont pas forcément meilleurs pour permettre de conserver les grandeurs qui doivent être constantes le long des trajectoires, comme l'énergie totale E .

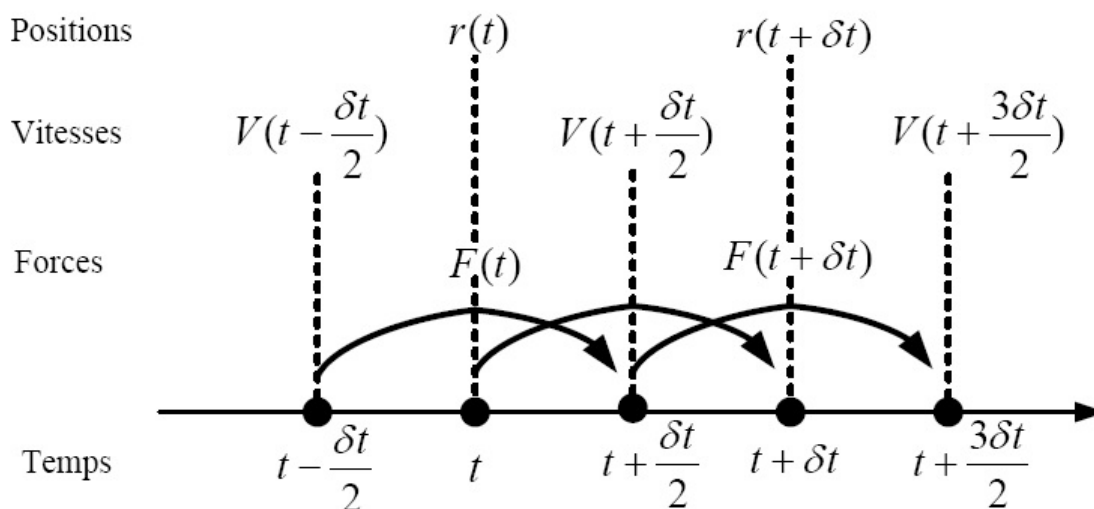


Figure 2.2 – Le Schéma de l'algorithme de Leap-frog

2.2.4 Valeur du pas du temps

Les équations du mouvement sont résolues numériquement grâce à des algorithmes relativement rapides à mettre en œuvre. Néanmoins, ces derniers imposent des restrictions sévères sur la valeur du pas d'intégration δt .

Un pas de temps δt trop grand introduit des erreurs significatives dans le développement de Taylor et peut faire diverger l'énergie du système en simulation. Il faut par ailleurs tenir compte des fréquences de vibrations les plus rapides, de telle sorte que δt soit 10 à 20 fois plus petit que la période de l'oscillation la plus rapide des molécules simulées.

Ce critère amène de grandes restrictions, car en dynamique moléculaire, on peut s'intéresser aussi aux échelles de temps supérieures à celle de vibrations intramoléculaire.

2.2.5 Conditions initiales

Pour initier la simulation d'un système, l'algorithme d'intégration nécessite les coordonnées (x, y, z) et les vitesses (v_x, v_y, v_z) de tous les atomes au temps initial $t = t_0$. Les positions atomiques initiales $\{\vec{r}_i(t = t_0)\}$ sont généralement issues de l'expérience (partir d'une structure RMN ou de cristallographie de rayon X) [130, 131]. La seule information concernant les vitesses initiales est la température T de la simulation, si on ne dispose pas de vitesses initiales, on attribue aléatoirement les vitesses $\vec{v}_i(t = t_0)$ à tous les atomes du système selon une distribution de Maxwell-Boltzmann [121] centrée sur la température T , ce qui permet le calcul des densités de probabilité $p(\vec{v}_i)$:

$$p(\vec{v}_i) = \sqrt{\frac{m_i}{2\pi k_B T}} \exp\left(-\frac{m_i \vec{v}_i^2}{2k_B T}\right) \quad (2.17)$$

et pour chaque composante des \vec{v}_i :

$$p(v_{ix}) = \sqrt{\frac{m_i}{2\pi k_B T}} \exp\left(-\frac{m_i v_{ix}^2}{2k_B T}\right) \quad (2.18)$$

où m_i est la masse de l'atome i , k_B la constante de Boltzmann, et T la température absolue.

Le choix des positions et vitesses initiales ne correspond pas forcément à un état proche de l'équilibre. Une période dite "d'équilibration" est donc nécessaire pour stabiliser le système. Elle permet d'éliminer les zones trop denses et les contacts trop rapprochés entre les atomes.

2.3 Contrôle de la température

2.3.1 Généralités sur les ensembles thermodynamiques

Différentes conditions macroscopiques environnementales, qui sont des contraintes imposées par le milieu extérieur sur le système, conduisent à des ensembles d'états microscopiques différents,

appelés états accessibles, dont les caractéristiques sont particulières. En physique statistique, on introduit couramment trois grands types d'ensembles thermodynamiques, qui permettent de remonter aux propriétés macroscopiques des systèmes en réalisant des moyennes sur ces états microscopiques accessibles; il s'agit de l'ensemble microcanonique, de l'ensemble canonique et de l'ensemble isobare-isotherme. En dynamique moléculaire classique, la simulation d'un système moléculaire nécessite de lui affecter une de ces trois descriptions statistiques.

2.3.1.1 Ensemble microcanonique (NVE)

Cet ensemble est utilisé dans le cas des système isolés. C'est une description statistique fictive d'un système réel, où le nombre d'atomes N , le volume V et l'énergie E restent constants. Le système n'échange ni énergie, ni matière, avec le milieu extérieur. Selon le postulat fondamental de la physique statistique [132], tous les micro-états accessibles d'un système isolé à l'équilibre sont équiprobables. La quantité conservée est l'énergie interne notée E_{NVE} , somme de l'énergie potentielle E_{pot} et de l'énergie cinétique E_{cin} :

$$E_{NVE} = E_{pot} + E_{cin} \quad (2.19)$$

avec $E_{cin} = \sum_i^N \frac{1}{2} m_i v_i^2$, où m_i est la masse de l'atome i et v_i^2 est le carré de la vitesse moyenne de l'atome i .

2.3.1.2 Ensemble canonique (NVT)

Le nombre d'atomes N , le volume V et la température T restent constants. Le système est en équilibre thermique, il échange de l'énergie avec un réservoir externe appelé thermostat. Le thermostat sert de bain thermique, assurant la stabilisation de la température moyenne interne du système autour de la température requise(externe) T_{ext} . La modification de l'équation du mouvement de Newton peut être nécessaire, notamment dans le cas où les échanges avec le thermostat sont modélisés par une friction. Ainsi, différents types de thermostats peuvent être utilisés pour contrôler la température du système; nous pouvons citer notamment les thermostats d'Andersen [133, 134], de Berendsen [135], de Langevin [136] et de Nosé- Hoover [137, 138].

Le thermostat de Nosé-Hoover est celui qui génère avec plus de précision, les trajectoires des atomes du système moléculaire dans l'ensemble (NVT). L'énergie interne du système fluctue, tandis que la quantité conservée au cours du temps est l'énergie libre de Helmholtz F , à savoir, la somme de l'énergie interne (microscopique) et de l'énergie apportée par le thermostat .

$$F_{NVT} = E_{pot} + E_{cin} - T \times S \quad (2.20)$$

où S est l'entropie du système.

Le choix de l'ensemble statistique est crucial pour reproduire les propriétés mesurées expérimentalement. L'ensemble (NVT) a été employé dans ce présent travail.

2.3.1.3 Ensemble isobare-isotherme (NPT)

Le nombre d'atomes N , la pression P et la température T sont conservés. C'est un ensemble thermodynamique qui simule les conditions expérimentales réelles en laboratoire. L'ensemble canonique est couplé à un deuxième réservoir appelé barostat, qui maintient la pression externe requise P_{ext} . Le volume V du système varie de façon isotrope, en fonction de la pression imposée.

Les barostats tels que celui d'Anderson [133, 134], de Berendsen [135], de Langevin [136] et de Nosé-Hoover [137, 138] sont souvent utilisés. L'énergie interne du système varie, tandis que la quantité conservée, est l'énergie libre de Gibbs G :

$$G = E_{pot} + E_{cin} - T \times S + P \times V \quad (2.21)$$

2.3.2 Thermostat de 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 [138, 139] est basée sur l'idée de supposer un thermostat fictif, simulé par une variable $s(t)$, en contact avec le système à contrôler. Le lagrangien peut s'écrire comme suit :

$$\mathcal{L} = \sum \frac{1}{2} m_i s^2 \dot{r}_i^2 - \phi(\vec{r}) + \frac{Q}{2} \dot{s}^2 - (N_{df} + 1) k_B T_0 \ln s \quad (2.22)$$

- Le premier terme du lagrangien correspond à l'énergie cinétique.
- Le deuxième terme est l'énergie potentielle du système
- Le troisième terme correspond à l'énergie cinétique du thermostat représenté par la variable dynamique fictive s . Q étant un paramètre jouant le rôle de la masse des particules fictives.
- Le dernier terme détermine l'énergie potentiel du thermostat, où N_{df} désigne le nombre de degrés de liberté et T_0 est la température requise.

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*², 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 [138, 139].

A partir des équations d'Euler-Lagrange :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A} = 0 \quad (2.23)$$

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

$$\vec{r}_i = \frac{1}{m_i} \vec{F}_i - \gamma \vec{r}_i \quad (2.24)$$

$$\dot{\gamma} = \sum_i \frac{m_i \dot{r}_i^2}{Q} - \frac{N_{df} k_B T_0}{Q} \quad (2.25)$$

Avec :

$$\gamma = \frac{\dot{s}}{s}$$

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 première ordre relativement simple à intégrer. Au final, on aura une température qui va fluctuer autour de la température T_0 (voir figure 2.3), la manière de fluctuer dépend fortement du paramètre Q qu'on prend généralement [140] égal à :

$$Q = \frac{N_{df} k_B T_0}{\omega_d^2}$$

où ω_d est la fréquence plasma des grains de poussière.

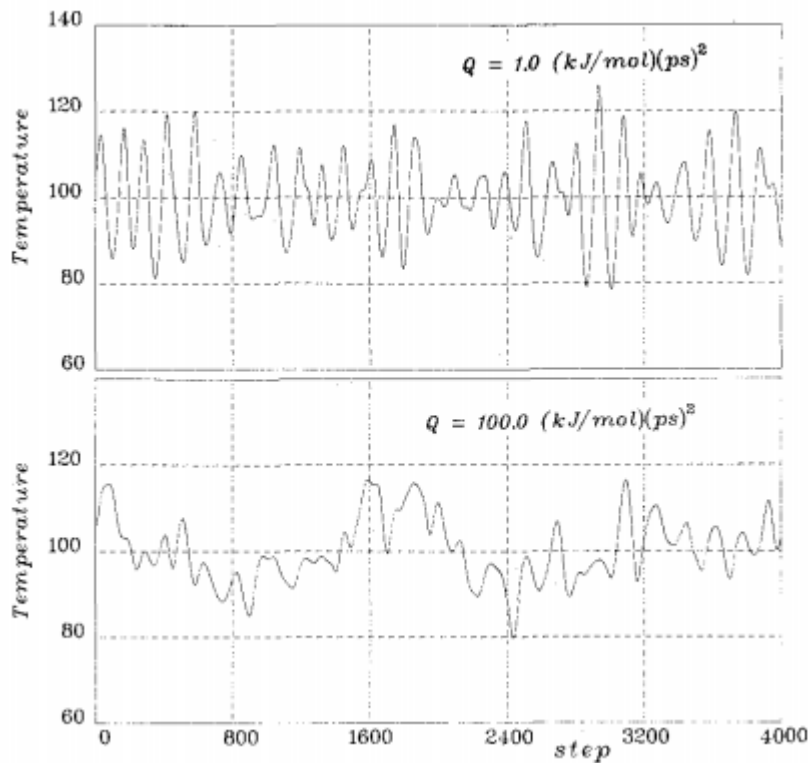


Figure 2.3 – Comparaison de la fluctuation de la température pour deux valeur de Q à une température $T = 100K$ [138].

2.4 Calcul des propriétés thermodynamiques

Dans la section précédente, nous avons exposé les concepts de la dynamique moléculaire ainsi toutes les étapes nécessaires à sa réalisation. Le but de cette partie est de présenter le calcul des principales propriétés physiques utiles à partir des données produites par la simulation elle-même, à savoir une portion de la trajectoire de phase de N atomes.

Nous considérons M configurations espacées par l'intervalle de temps $\Delta t^* = k\Delta t$, où k est un nombre de pas de temps entre deux configurations et représente l'échantillonnage.

A partir de l'échantillon, considérons les propriétés thermodynamiques suivantes [121, 141] :

- L'énergie cinétique :

$$\langle K \rangle = \frac{1}{2M} \sum_{l=1}^M \sum_{i=1}^N m_i v_i^2 (l\Delta t^*) \quad (2.26)$$

- L'énergie potentielle :

$$\langle U \rangle = \frac{1}{M} \sum_{l=1}^M \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \left[u(r_{ij}(l\Delta t^*)) + \sum_{k>i>j}^N u(r_{ij}(l\Delta t^*), r_{jk}(l\Delta t^*), r_{ik}(l\Delta t^*)) \right] + \dots, \quad (2.27)$$

- La température :

$$\langle T \rangle = \frac{2}{3} \frac{\langle K \rangle}{Nk_B} \quad (2.28)$$

- La pression :

$$\langle P \rangle = \frac{2}{3} \frac{\langle K \rangle}{V} + \frac{1}{3MV} \sum_{l=1}^M \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N r_{ij}(l\Delta t^*) \cdot F_{ij}(l\Delta t^*) \quad (2.29)$$

Concernant la pression, nous allons présenter le détail de son calcul dans le chapitre 3.

Nous pouvons déduire l'énergie totale $E = K + U$ et l'enthalpie $H = E + PV$, avec V le volume de la boîte de simulation.

2.5 Simulation dans les plasmas

Pour les plasmas, c'est à dire un milieu neutre constitué d'atomes et de particules chargées (ions et électrons) présentant un comportement collectif, le problème initial est de déterminer l'interaction effective entre différentes particules. Ce problème sera résolu différemment selon la nature du plasma étudié. Le paramètre de couplage coulombien qui caractérise la force d'interaction entre les particules du système, définit deux domaines complètement différents de la physique des plasmas complexes :

Les plasmas poussiéreux sont dits faiblement couplés si le paramètre de couplage $\Gamma_s \ll 1$.

Pour un paramètre de couplage $\Gamma_s \gg 1$, ces plasmas sont dit fortement couplés.

Dans un plasma, les grains ne peuvent pas toujours être considérés comme isolés. Lorsque la concentration est élevée, ils peuvent avoir un comportement collectif et sont considérés alors comme un fluide ou un solide coulombien. De nombreuses études sur les fluides et les solides coulombiens ont pu quantifier l'intensité du couplage.

En présence d'effet d'écran (screening), l'interaction inter-grains est de type Yukawa et le paramètre de couplage est donné par (voir chapitre 1) $\Gamma_s = \frac{q_d^2}{d(k_B T_d)} \exp\left(-\frac{d}{\lambda_D}\right)$.

Il est à noter que pour $\Gamma_s > 170$, selon l'étude théorique de Ikezi, le plasma poussiéreux prend la forme d'un cristal coulombien bidimensionnel. Dans le cas où $\Gamma_s < 170$, le plasma se comporte comme un fluide coulombien [142].

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

Une classification des plasmas astrophysiques et de laboratoire selon le paramètre de couplage est donnée sur la figure 2.4 .

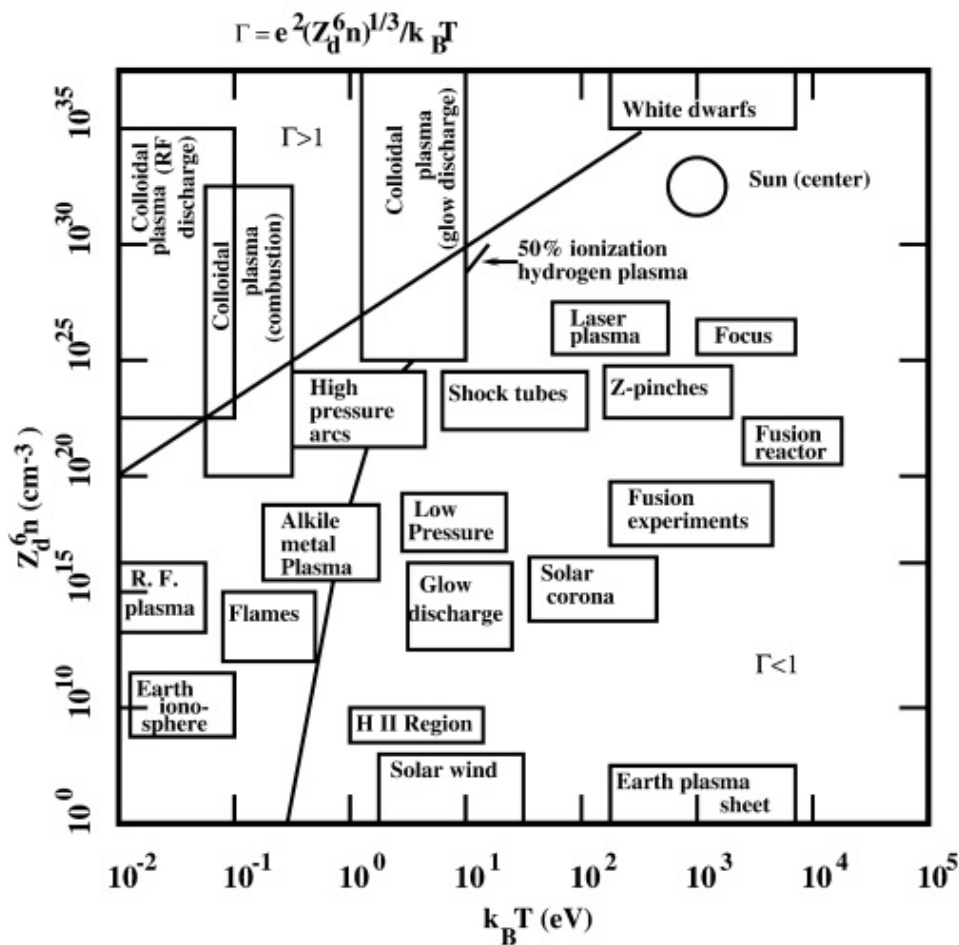


Figure 2.4 – Paramètre de couplage pour différents types de plasmas ; astrophysiques et de laboratoire [103].

Équation d'état d'un cristal coulombien bidimensionnel

3.1 Introduction

L'intérêt dans le plasma poussiéreux a considérablement augmenté au cours des deux dernières décennies qui se sont écoulées depuis l'observation des cristaux coulombiens formés par les particules de poussière piégées dans le plasma réalisée, de façon très indépendante, par le Professeur G. Morfill et son équipe au Max Planck Institute de Garching en Allemagne [70] et par le Professeur J. Lin je Chu de l'université de Chungli à Taiwan [143]

D'un point de vue pratique, les études les plus importantes sont celles liées à des décharges RF. Cela est dû à l'utilisation généralisée de ce type de décharge dans de nombreuses applications technologiques telles que le traitement des matériaux, la microélectronique etc. [103, 82, 3] .

Ces dernières années, le nombre d'études sur la propagation de divers types d'ondes dans ces systèmes a augmenté. En fait, la connaissance de l'équation d'état est très utile car elle simplifie l'étude et la compréhension de ces systèmes. Récemment, en générant une onde de choc dans ce cristal coulombien et en utilisant les conditions de conservation de Rankine-Hugoniot, Oxtoby et al. [26] rapporte un comportement en gaz parfait des grains de poussières avec un indice adiabatique égal à 1,67. Cette valeur est remarquablement proche de la valeur de l'indice d'un gaz parfait monoatomique qui est 5/3.

Initialement pour confirmer ce résultat remarquable, nous avons décidé d'effectuer des expérimentations numériques. Les résultats que nous avons obtenus nous ont poussé à étaler notre travail à la proposition d'une équation d'état satisfaisante dans un large domaine de densité. Pour ce faire, nous avons calculé la pression locale en fonction de la densité des grains de poussières.

Comme nous l'avons signalé précédemment nous utilisons la DM qui simule correctement plusieurs phénomènes dans les cristaux coulombiens, tels que les transitions de phase, les solitons et les ondes de choc [27, 28, 29] .

Dans la suite de ce présent chapitre nous allons donner un complément sur la méthode numérique, les principales grandeurs thermodynamiques ainsi que les principaux résultats obtenus suivie de discussions.

3.2 Équations et paramètres de simulation

3.2.1 Équation de base

Le système examiné comprend des grains de poussière chargés négativement disposés en une seule couche bidimensionnelle de cristal immergé dans un plasma quasi-neutre. Les particules sont supposées de même masse (m) et portent la même charge électrique (Q). Chaque grain de poussière obéit à la deuxième loi de Newton

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}_i^{fric} + \vec{F}_i^{int} + \vec{F}_i^{conf} \quad (3.1)$$

$\vec{F}_i^{fric} = -m\nu\vec{v}_i$ est la force de frottement due aux collisions avec des atomes neutres, caractérisée par une fréquence de collision ν que l'on suppose constante dans notre cas. m et \vec{v}_i sont respectivement la masse du grain de poussière et la vitesse de la particule de poussière i .

\vec{F}_i^{int} est la force d'interaction entre les grains de poussières. Pour un mono-cristal, cette force est symétrique, elle dérive du potentiel coulombien écranté (Yukawa) [29, 144, 145]. Elle est donnée sous la forme suivante :

$$\vec{F}_i^{int} = \sum_{j \neq i}^N f_{ij} \vec{e}_{ij} \quad \text{avec} \quad \vec{f}_{ij} = -\frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{v}}{r_{ij}} \frac{e^{-r_{ij}/\lambda_D}}{r_{ij}} \quad (3.2)$$

\vec{f}_{ij} représente la force qu'exerce la particule j sur la particule i , λ_D représente la longueur d'écrantage de Debye, $r_{ij} = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$ est la distance entre les particules i et j .

\vec{F}_i^{conf} est la force de confinement qui dérive d'un potentiel harmonique, de forme parabolique s'écrivant comme suit :

$$U^{conf}(x, y, z) = \frac{1}{2}m [\omega_h^2 (x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2] \quad (3.3)$$

Les fréquences de confinement le long des directions x et y sont égales, on note cette fréquence ω_h tel que $\omega_h = \omega_x = \omega_y$. La fréquence de confinement le long de la direction z est ω_z , elle est choisit de telle manière à avoir une structure à deux dimensions (bidimensionnelle). Pour satisfaire cette dernière condition, ω_z doit tendre vers l'infini. en pratique une valeur plus grande que $100Hz$ est largement suffisante ($\omega_h > 100Hz$).

On trouve dans la littérature d'autres modèles du potentiel de confinement, notamment le potentiel de confinement du 10^{ième} ordre qui donne un cristal plus homogène ; cependant il représente un échec quant à la simulation de certains phénomènes tels que les collisions frontales des solitons , les ondes de chocs et les tsunامي [29, 144].

Plusieurs études numériques des phénomènes dynamiques utilisant le potentiel Yukawa associé à un potentiel confinement parabolique ont montré un bon accord avec les résultats expérimentaux. De plus, cette méthode a montré sa performance en particulier dans la simulation du phénomène d'ondes de chocs [4, 28, 29, 145, 146, 147]

Toutes les simulations ont été effectuées avec un code de calcul élaboré au sein de notre équipe. La procédure de la simulation suivie est basée sur la dynamique moléculaire en utilisant l'algorithme de Leap-Frog décrit au chapitre 2.

Les étapes suivantes ont été suivies dans la procédure de calcul :

1. initialiser les positions et les vitesses des particules du système étudié au temps $t = 0$
2. calculer les vitesses à $t = \frac{\Delta t}{2}$ à partir de $\vec{v}_i(0)$ et de la fonction d'énergie potentielle à $\vec{r}_i(0)$

3. définir les positions au temps $t + \Delta t$ à partir des positions au temps t et des vitesses au temps $t + \frac{\Delta t}{2}$
4. déterminer l'accélération au temps t par la fonction d'énergie potentielle.
5. calculer les nouvelles vitesses pour des temps demi entiers à partir de l'accélération et des vitesses précédentes
6. repartir au point (3) en incrémentant t pour obtenir une trajectoire.
7. calculer la pression locale

3.2.2 Calcul de la pression scalaire locale

La décomposition de Voronoï est une technique de maillage du domaine qui consiste à créer une maille autour de chaque particule de sorte que les frontières de la cellule soient l'ensemble des points équidistants de la particule centrale et de ses voisines. La cellule se présente donc comme un assemblage de médiatrices formant ainsi un polygone non régulier. L'intérêt de cette méthode est d'obtenir un maillage du domaine dont chaque cellule ne comporte qu'une seule particule et dont l'aire est d'autant plus importante que la particule est éloignée. On peut alors calculer l'aire de chaque cellule et de par sa définition en déduire la concentration préférentielle qui lui est inversement proportionnelle.

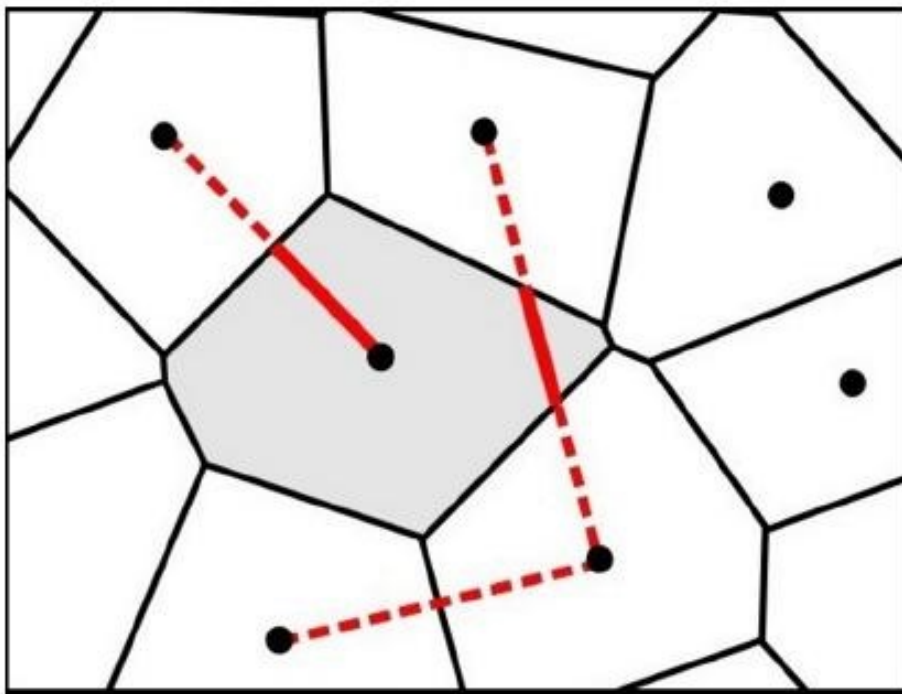


Figure 3.1 – Exemple de cellule de Voronoi (grisée) centrée sur une particule

Dans le cas d'un cristal bidimensionnel, la cellule élémentaire de Voronoï ou de Wigner-Seitz centrée sur une particule quelconque est définie par le volume dont la section transversale est

parallèle au plan du cristal et la troisième dimension est égale à l'unité. Le calcul de l'aire de chaque cellule permet de déduire la densité qui est égale à l'inverse de cette aire. Pour le calcul de la pression scalaire locale, nous utilisons l'expression suivante [148, 149, 150, 151] :

$$P(\vec{r}) = \frac{1}{3\Omega} \left\langle \sum_{i=1}^N m\vec{v}_i \cdot \vec{v}_i \delta_i + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>1} (\vec{f}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}) l_{ij} \right\rangle \quad (3.4)$$

Avec N et Ω sont, respectivement, le nombre de particules et le volume centré sur le point \vec{r} .

\vec{f}_{ij} représente la force qu'exerce la particule j sur la particule i .

Le facteur δ_i est égal à l'unité si la particule i est à l'intérieur du volume Ω et nul à l'extérieur. Le facteur $l_{ij} \in [0, 1]$ est la fraction de la distance contenue dans Ω sur la distance r_{ij} , même si les deux particules i et j sont à l'extérieur de ce volume (voir figure 3.1).

Dans un premier temps, nous avons calculé la densité locale à l'aide de l'algorithme de Voronoï, puis nous avons déterminé la pression locale en utilisant l'expression 3.4. Pour chaque calcul, nous avons démarré la simulation par une distribution linéaire des positions et une distribution maxwellienne des vitesses avec une évolution libre de la température jusqu'à atteindre l'équilibre.

3.2.3 Paramètres de simulation

Plusieurs simulations ont été effectuées, pour des valeurs de densités n et de pression P différentes, avec un nombre de grains de poussières N variant de 500 à 6500 particules. On a considéré des particules (grains) de poussière de masse $m_d = 6.1 \times 10^{-13} Kg$, de charge $Q_d = -16000e$. Quant à la longueur de Debye λ_D et le rayon de coupure r_c sont pris respectivement comme suit : $\lambda_D = 0.9mm$ et $r_c = 7\lambda_D$.

Nous avons fait varier le paramètre de confinement horizontal ω_h de 0.5, 1 et $2Hz$, quant au paramètre de confinement vertical, nous avons utilisé une valeur suffisante pour obtenir un système à deux dimensions. La valeur choisie est de $\omega_v = 100Hz$.

La fréquence d'amortissement des neutres est égale à $\nu = 1s^{-1}$. 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 50000 à 100000.

3.2.4 Formation du cristal

La température influence la valeur du paramètre de couplage Γ , pour une température $T = 300K$ le paramètre $\Gamma = 2 \cdot 10^4$, par contre si la température $T = 10^6K$ le paramètre $\Gamma = 6$. Sur la figure 3.2 sont représentées les distributions spatiales des grains de poussières correspondant à ces deux valeurs de Γ . Cette distribution montre que pour des paramètres de couplage assez

élevés, les grains poussières tendent à s'organiser de manière régulière sous forme de structures cristallines. Ce dernier phénomène est engendré par l'équilibre entre la force de confinement et la force d'interaction inter grains s'exprimant sous forme de répulsion électrostatique écrantée entre les particules.

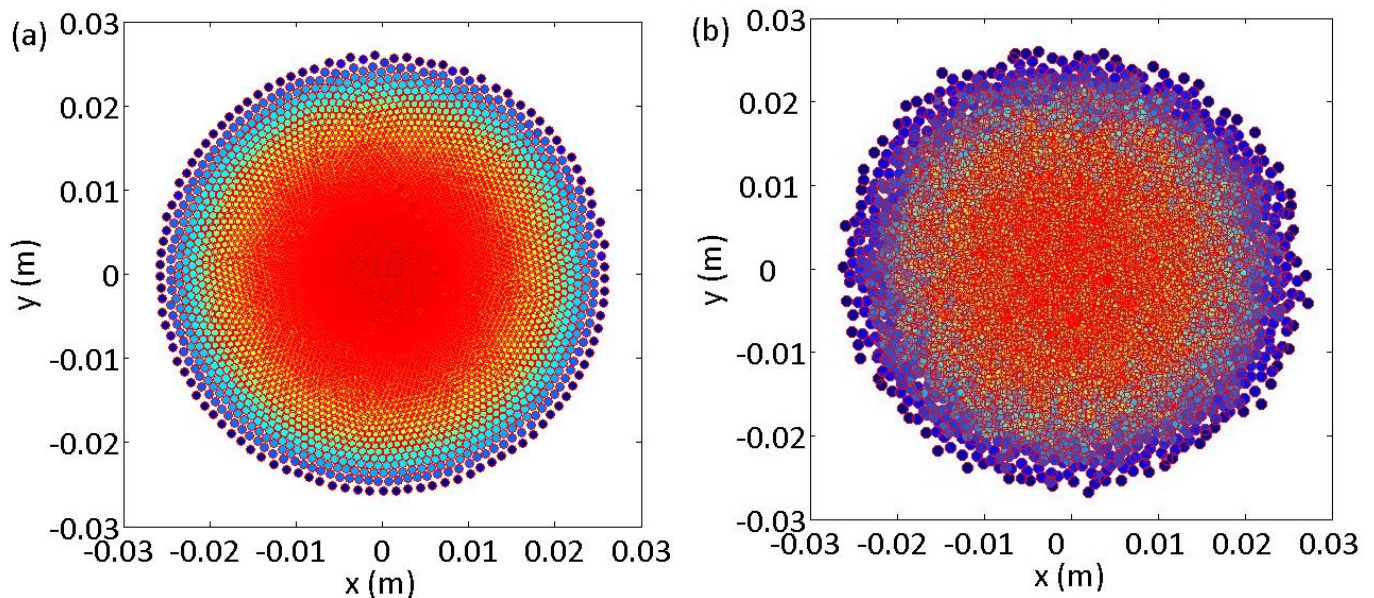


Figure 3.2 – Distribution spatiale des grains de poussières en fonction du paramètre de couplage : (a)- $\Gamma = 2 \cdot 10^4$, (b)- $\Gamma = 6$.

Ceci est en concordance avec les prédictions théoriques [152] qui affirment que pour un paramètre de couplage $\Gamma \gg 1$, les grains de poussières s'organisent en formant des structures cristallines CFC, CC ou HC. Souvent, si les particules sont suffisamment massives et de masse monodispersée, ces cristaux peuvent être bidimensionnels et mono-couche, dans ce cas elles s'organisent en formant des structures cristallines hexagonales à deux dimensions. Dans le cas étudié ici tel que montré dans la figure 3.3, les grains de poussières se positionnent sous forme de cristaux Coulombiens à deux dimensions (2D) en formant des structures hexagonales.

Sur la figure 3.4, nous montrons les distributions spatiales des grains des poussières à deux dimensions pour différentes valeurs de confinement ω_h : $0.5Hz$, $1.0Hz$ et $2.0Hz$. Dans ces simulations, le nombre de particules considéré est $N = 4000$.

Nous constatons que lorsque la fréquence de confinement augmente, les dimensions du cristal diminuent. En effet, le confinement affecte les dimensions du cristal formé, par conséquent la densité est plus élevée, ce qui a un effet direct sur la pression qui augmente avec la densité.

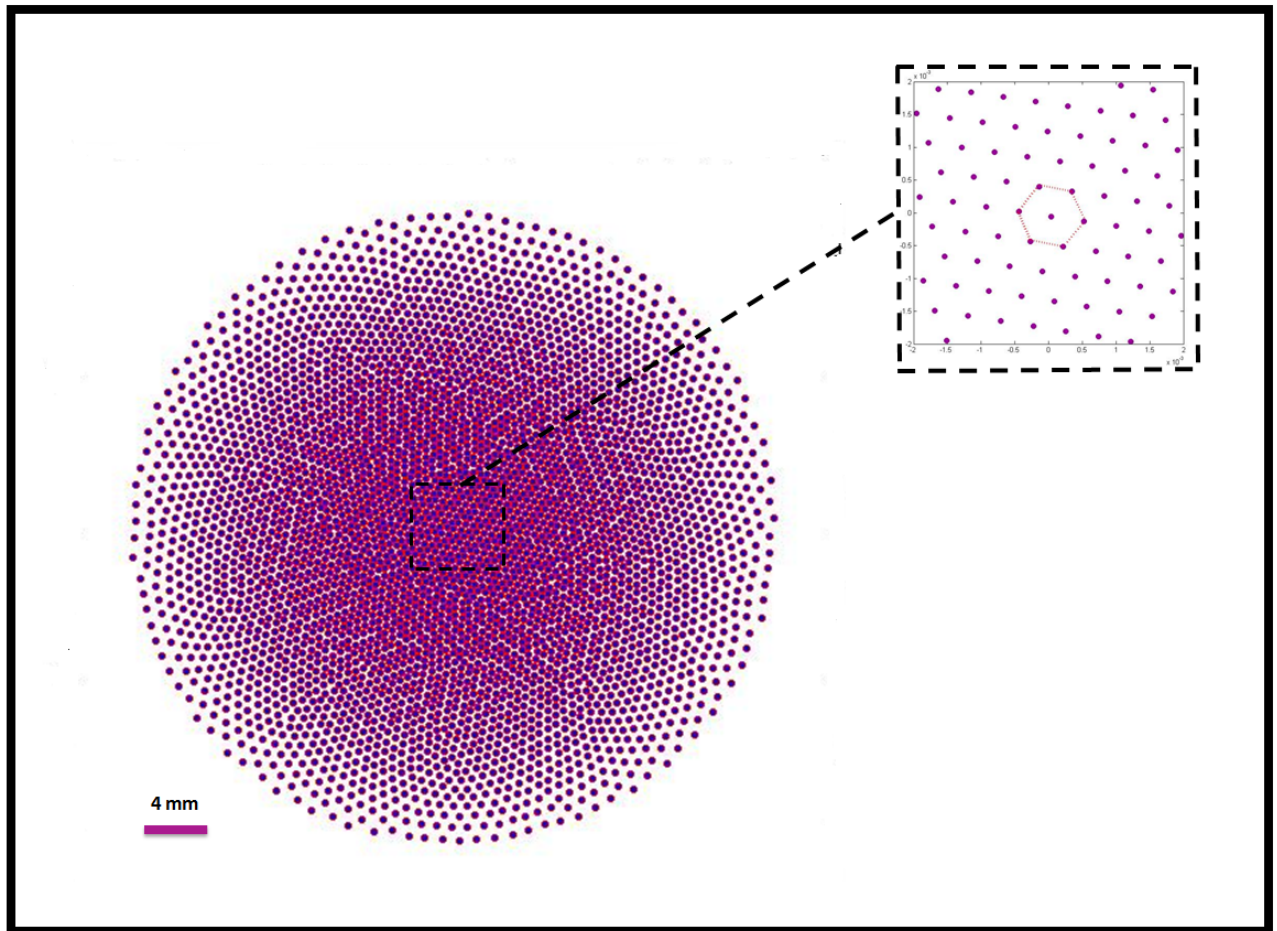


Figure 3.3 – Formation de structure hexagonale de grains de poussières à deux dimensions (2D)

Ces grains lévitent près de la gaine inférieure ou à la frontière de celle-ci avec le plasma. Cette position d'équilibre résulte de la compétition entre trois forces : la force exercée par le champ électrique qui règne dans cette région, la force de gravité des grains massifs et la force d'entraînement des ions.

Le diamètre du cristal formé varie de 50mm à 100mm selon la valeur de la fréquence de confinement, ce qui est en accord avec les résultats expérimentaux. La distance moyenne inter grains correspondante varie de (0.60mm à 0.32mm), ces valeurs sont du même ordre de grandeurs que la longueur de Debye λ_D . Ceci est aussi en accord avec les prédictions expérimentales [153, 154].

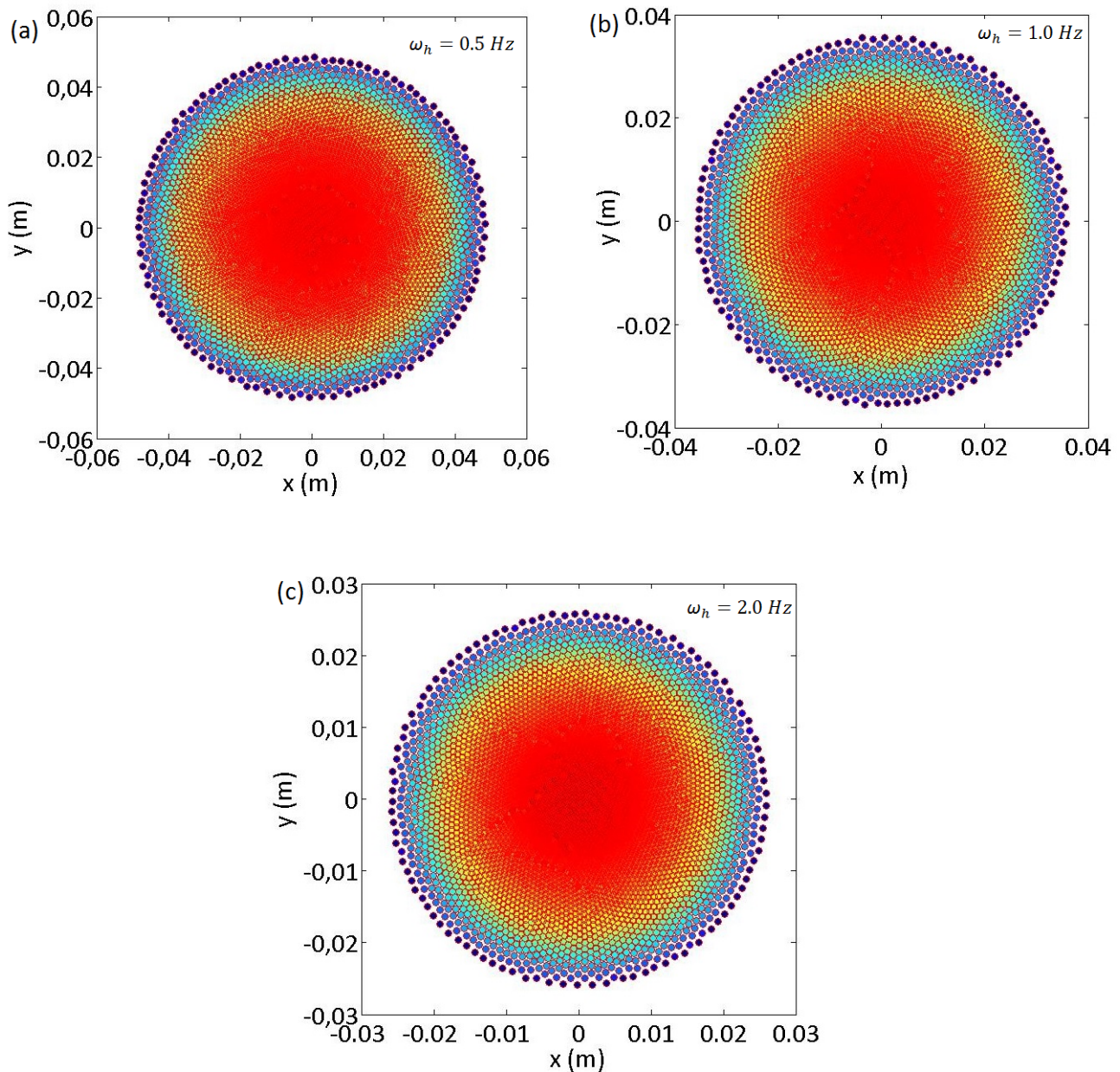


Figure 3.4 – Effet du paramètre de confinement ω_h sur la distribution spatiale des grains de poussière : (a)- $\omega_h = 0.5 Hz$, (b)- $\omega_h = 1.0 Hz$ et (c)- $\omega_h = 2.0 Hz$.

Concernant la pression, sur la figure 3.5 est portée la distribution spatiale bidimensionnelle des grains de poussière. Chaque grain est repéré par sa distance r au centre du cristal. Sur la barre des couleurs est indiquée la pression, le rouge indique les pressions les plus élevées tandis que le bleu les basses pressions. On peut constater que, la pression est plus importante au centre du cristal où la distribution des grains de poussières est dense. La valeur de la pression diminue progressivement en s'éloignant du centre du cristal correspondant à une augmentation progressive de la distance inter grains. Ceci est confirmé par les courbes (voir figure 3.6) représentant la variation radiale de la pression ainsi que de la distance inter grains.

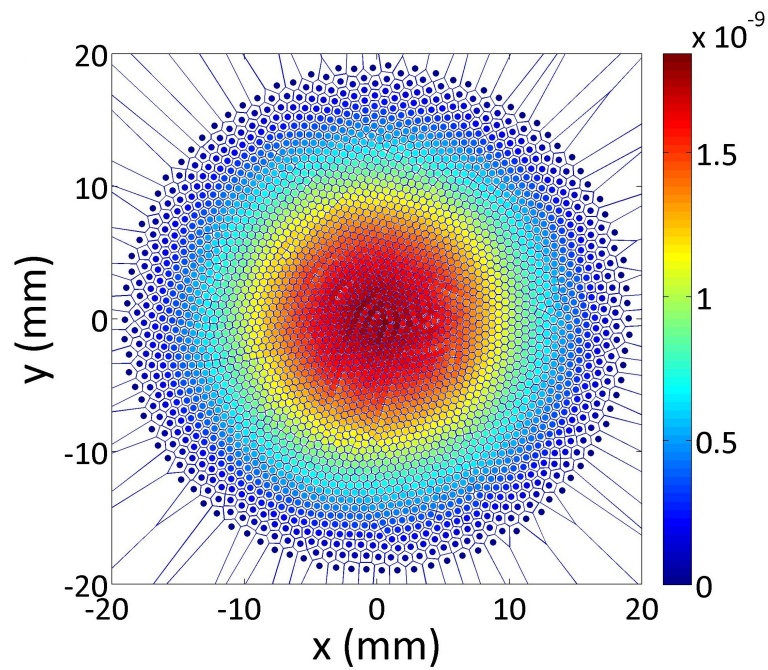


Figure 3.5 – Diagramme de Voronoi du cristal coulombien bidimensionnel mono-couche. La barre de couleur indique la pression en Pa.

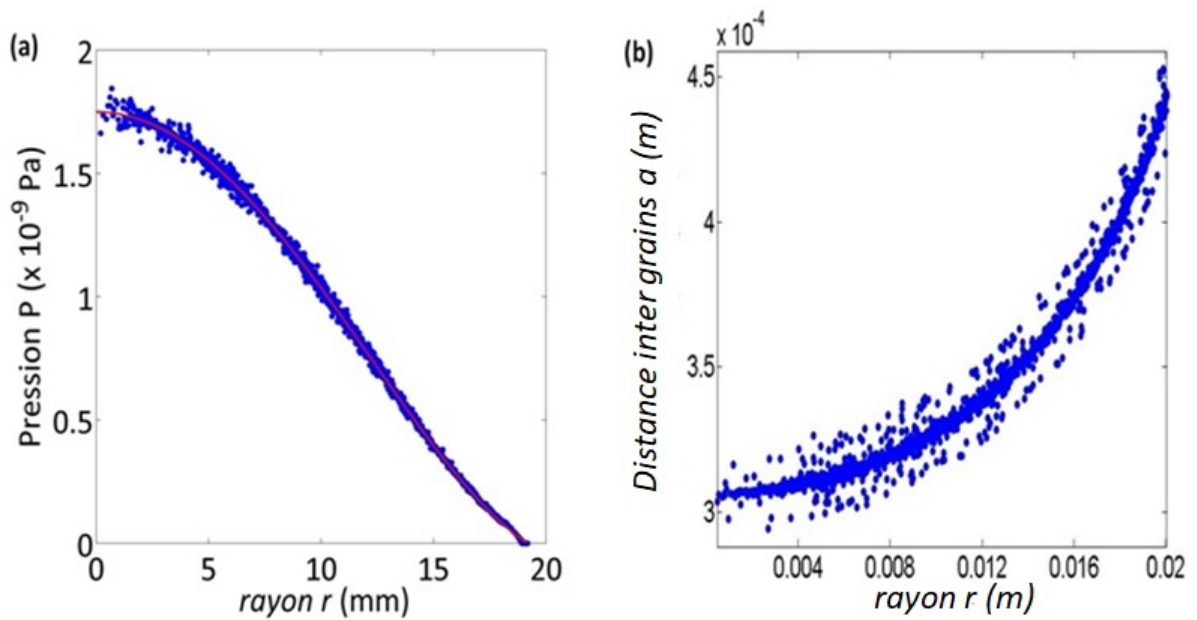


Figure 3.6 – (a)- Variation radiale de la pression locale P , (b)- Variation radiale de la distance inter grains.

3.3 Équations d'état d'un cristal coulombien à deux dimensions

A l'équilibre thermodynamique, la température, la densité, la pression et l'énergie interne déterminent l'état d'un système. Ces grandeurs physiques sont appelées variables d'état. Une équation d'état d'un système est une relation entre ces différentes variables d'état. Dans les systèmes fortement couplés, tels que l'ionosphère et les systèmes astrophysiques, contenant un grand nombre de particules, l'équation d'état est utilisée comme relation de fermeture dans les modèles fluides. Il est possible ainsi de déterminer la totalité des grandeurs thermodynamiques décrivant ce système et de ce fait prédire ses propriétés.

3.3.1 Calcul de l'indice adiabatique

Selon les observations d'Oxtoby et al. [26], le cristal coulombien bidimensionnel formé se comporte comme un gaz parfait. En effet, les résultats de cette étude donnent un indice adiabatique $\gamma = 1.67$, cette valeur correspond bien à celle d'un gaz parfait monoatomique ($\gamma = 5/3$).

Dans ce contexte, et afin de vérifier ces observations, nous avons calculé la densité et la pression moyenne dans la zone centrale du cristal. Toutes les simulations sont effectuées à une température proche de zéro.

L'équation d'état des gaz parfaits $P = (\gamma - 1) \varepsilon n$ nous permet d'extraire l'indice adiabatique γ :

$$\gamma = \frac{PV}{\varepsilon N_V} + 1 \quad (3.5)$$

Où n est la densité, V désigne le volume, N_V est le nombre de particules contenues à l'intérieur du volume V , et ε est l'énergie interne du système.

Les courbes de variation de l'indice adiabatique en fonction du nombre de particules (figure 3.7) présentent la même allure. On remarque que plus le confinement est élevé plus la courbe est décalée au dessous de la valeur particulière de $\gamma = 1.67$.

Pour des valeurs plus basses du coefficient de confinement, la courbe est décalée au dessus de cette même valeur. Dans le cas de la variation de l'indice adiabatique en fonction de la densité (figure 3.8), les trois courbes coïncident pour les différentes valeurs de confinement.

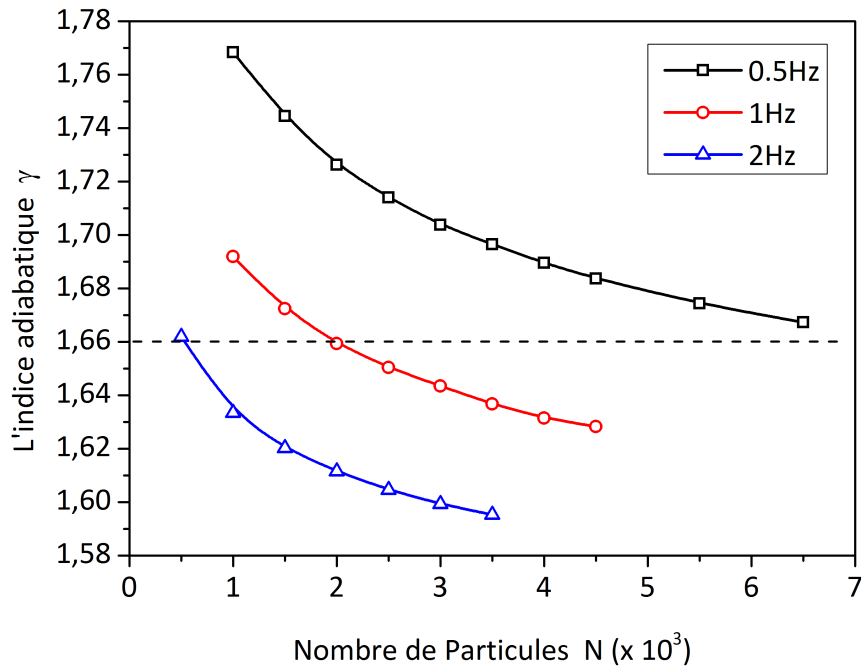


Figure 3.7 – Variation de l'indice adiabatique γ en fonction du nombre de particules pour différents paramètres de confinement

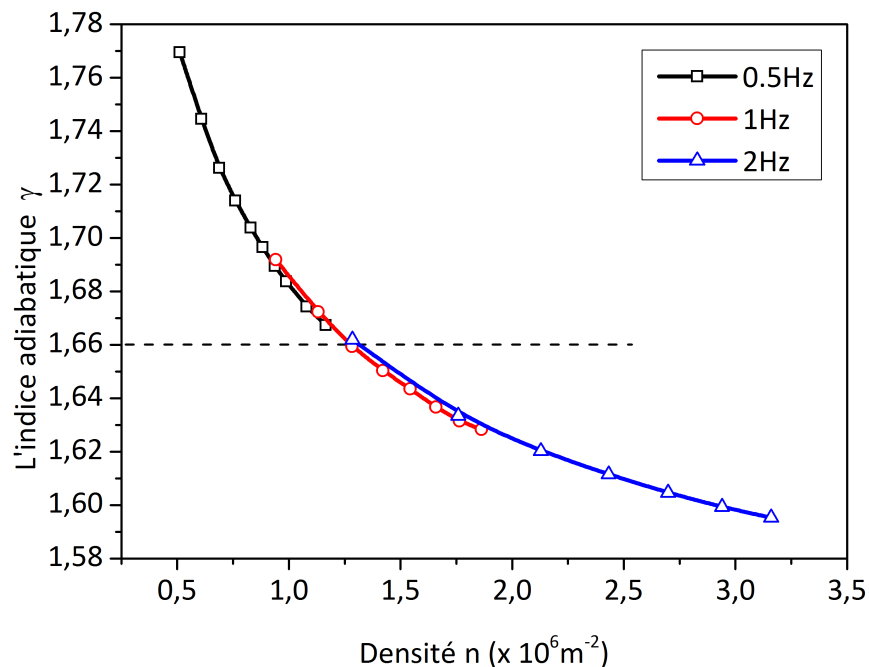


Figure 3.8 – Variation de l'indice adiabatique γ en fonction de la densité pour différents paramètres de confinement

On peut conclure que la variation de l'indice adiabatique en fonction de la densité est indépendante du paramètre de confinement ω_h . La valeur particulière de cet l'indice qui est de $\gamma = 5/3$

n'est obtenue que dans une étroite gamme de densité qui est comprise entre $1.1 \times 10^6 m^{-2}$ et $1.4 \times 10^6 m^{-2}$ comme c'est indiqué sur la figure 3.8. Aussi, dans les travaux effectués par Oxtoby et al. [26], les mesures ont été réalisées dans une petite région allant de $5 \times 10^6 m^{-2}$ à $6 \times 10^6 m^{-2}$. Ces observations, nous permettent d'affirmer que le comportement gaz parfait de ces cristaux coulombiens observé par Oxtoby et al. [26] n'est pas un résultat général, mais plutôt valable que pour une certaine plage de densité.

3.3.2 Équation d'état du cristal coulombien

Dans ce qui va suivre, nous présenterons les différentes étapes qui nous ont permis d'établir une équation d'état effective du système étudié. Sur les figures 3.9 et 3.10, nous avons représentés les résultats de simulation de la variation de la pression locale P et de PV pour différentes valeurs du paramètres de confinement.

Ces courbes amènent quelques commentaires : quelque soit la valeur du paramètre de confinement, l'allure générale et la valeur de la pression en fonction de la densité sont les mêmes (voir figure 3.9). Nous pouvons alors confirmer que la variation de la pression en fonction de la densité est indépendante du paramètre de confinement.

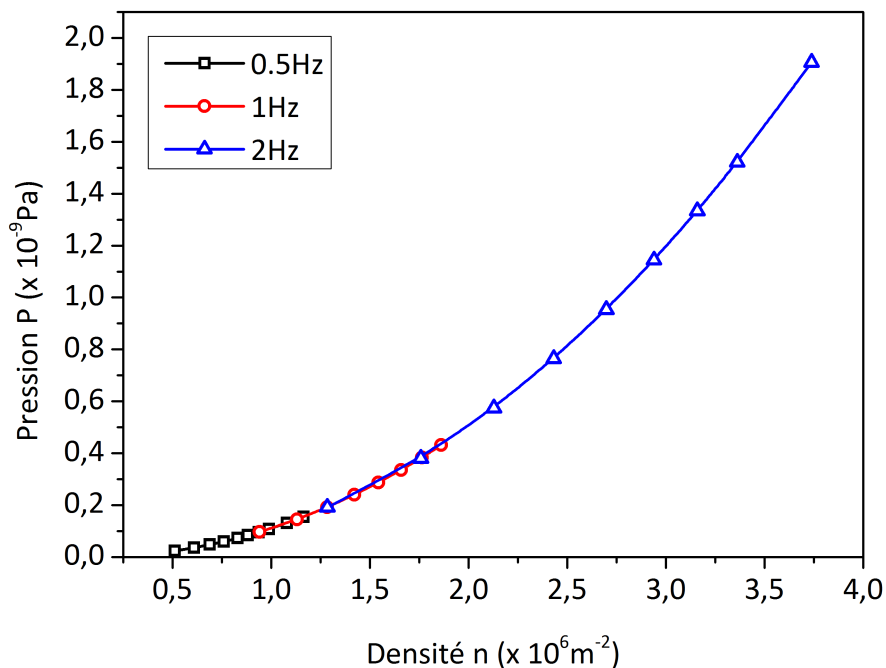


Figure 3.9 – Variation de la pression au centre du cristal en fonction de la densité pour différents paramètres de confinement

Il est de même pour les variations de PV en fonction de la pression P et en fonction de la densité n . En effet, les courbes (voir figure 3.10) se superposent pour les différentes valeurs du paramètre de confinement pris en considération.

Les variations de PV en fonction de la pression P est assez complexe figure 3.10-(a) comparativement à la linéarité de la variation de PV en fonction de la densité n figure 3.10-(b). Cette dernière est de ce fait plus commode pour déterminer l'équation d'état du système.

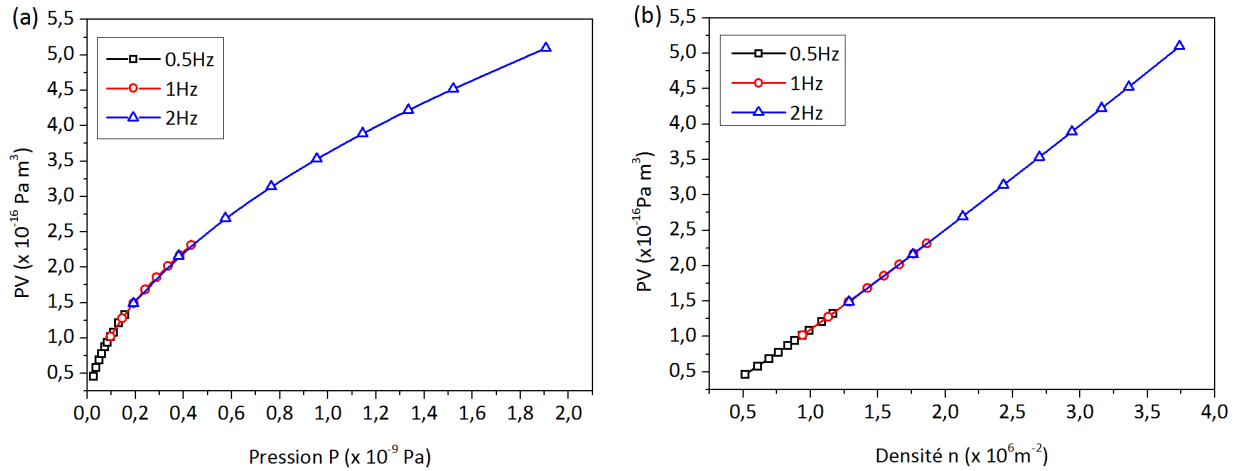


Figure 3.10 – Variation de PV en fonction de (a) la pression. (b) densité

Pour la gamme d'intervalle de densité allant de $0,5 \times 10^6 m^{-2}$ à $3,5 \times 10^6 m^{-2}$, PV varie linéairement en fonction de la densité n (voir figure 3.10-(b)). Ainsi, l'équation d'état peut être exprimée de la façon suivante :

$$PV = a_0 + a_1 n \quad (3.6)$$

avec $a_0 = -3,15 \times 10^{-17}$ et $a_1 = 1,42 \times 10^{-22}$.

Pour avoir des points supplémentaires, correspondant aux faibles valeurs de densités ($n < 0,5 \times 10^6 m^{-2}$), des calculs supplémentaires ont été effectués en fixant le nombre de particules total à $N = 2500$ et en abaissant la fréquence de confinement jusqu'à $10^{-4} Hz$ (figure 3.11). Pour ces faibles valeurs de densité, la variation de PV en fonction de la densité n n'est plus linéaire. Cette variation peut être exprimée par un polynôme d'ordre neuf. Cependant, il est plus commode de l'exprimer sous forme d'une fonction puissance. Ainsi, l'équation d'état valable aussi bien pour les faibles que pour les grandes densités peut s'écrire de la façon suivante :

$$PV = A + B \times (n - n_l)^\alpha \quad (3.7)$$

où $A = 2,03 \times 10^{-18}$, $B = 1,20 \times 10^{-23}$, $n_l = 8,37 \times 10^4$ et $\alpha = 1,165$

n_l est la valeur limite inférieure de la densité. Autrement dit, la densité n ne peut pas dépasser une valeur critique n_l .

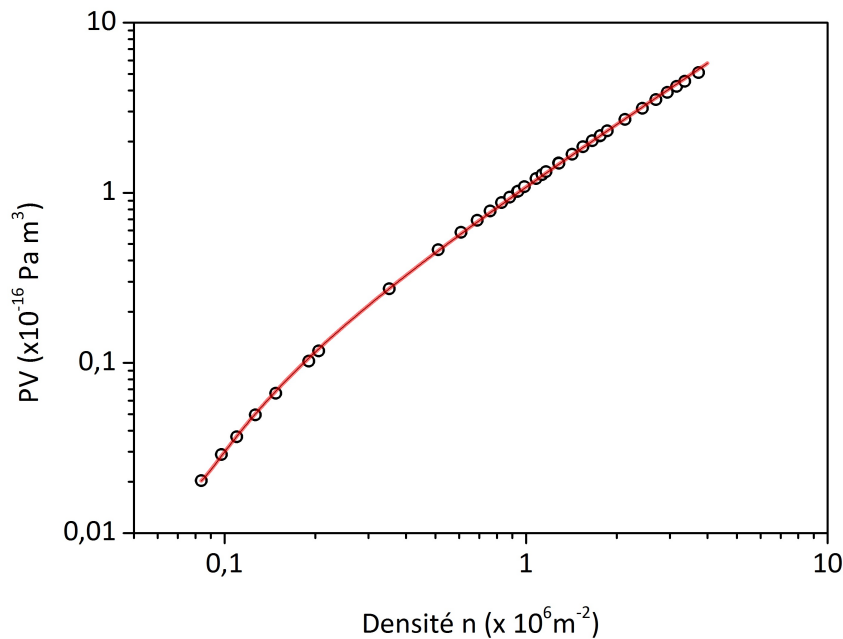


Figure 3.11 – Variation de PV en fonction de la densité

3.3.3 Validation de l'équation d'état proposée

Plusieurs groupes ont mesuré la vitesse du son dans un cristal bidimensionnel dans un plasma poussiéreux. La comparaison de la valeur de la vitesse du son calculée avec celles mesurées par Feng et al. [155], Samsonov et al. [28] et Oxtoby et al. [26], est très utile pour la validation de l'équation d'état proposée. Dans notre étude l'expression de la vitesse du son c s'écrit :

$$c = \sqrt{c_1 + c_2 n} \quad (3.8)$$

avec $c_1 = -5.77 \times 10^{-5}$ et $c_2 = 3.25 \times 10^{-10}$.

Cette équation est déduite à partir de l'équation d'état 3.6, en utilisant l'expression générale suivante :

$$c = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_S} \quad (3.9)$$

Avec ρ c'est la densité de masse volumique.

La courbe de la propagation de la vitesse du son c en fonction de la densité n est donnée sur la figure 3.12.

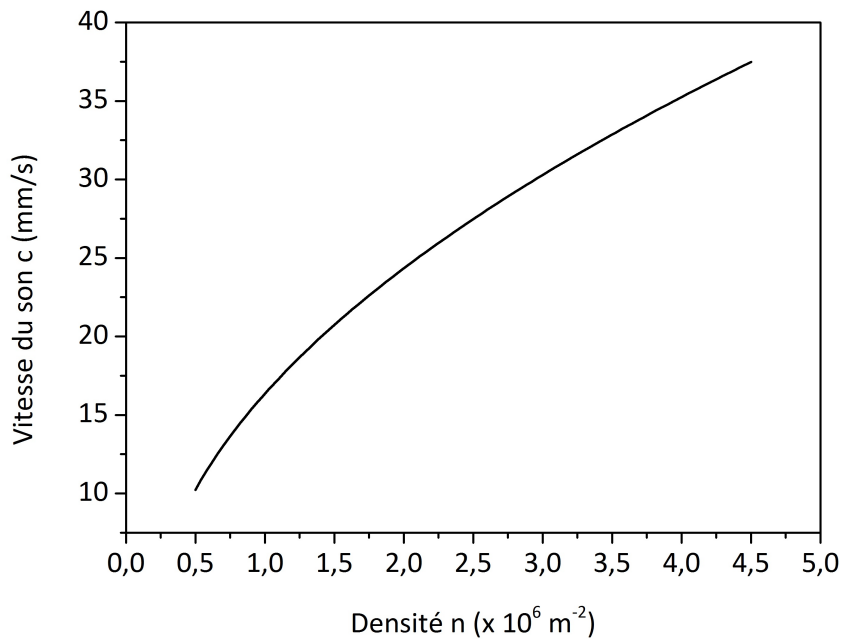


Figure 3.12 – Variation de la vitesse du son c en fonction de la densité n

Dans les travaux de Feng et al. [155], la valeur de la vitesse du son déduite expérimentalement est de 25 mm/s correspondant à une densité de $4,5 \times 10^6 \text{ m}^{-2}$. Pour cette même densité nos calculs prédisent une vitesse égale de 37 mm/s . Ceci présente un écart de 48% par rapport à la valeur expérimentale.

Cet écart est assez prévisible car hormis la valeur de la densité, nos paramètres de simulations sont assez différents. En effet, les conditions expérimentales sont assez différentes : la charge électrique des grains $Q_d = -9700e$, la masse des grains $m_d = 4,18 \times 10^{-13} \text{ Kg}$ et la longueur de Debye $\lambda_D = 0,26 \text{ mm}$.

Pour les travaux effectués par Samsonov et al. [28], pour une densité d'environ $3 \times 10^6 \text{ m}^{-2}$, la vitesse du son est de 23 mm/s . Pour cette même densité, nos calculs prédisent une vitesse de son de 30 mm/s . L'écart entre les valeurs expérimentale et calculée est réduit à 30%. Ceci est dû au fait, que comparativement aux travaux de Feng et al. [26] nos paramètres de simulations sont plus proches des conditions expérimentales de Samsonov et al. [28].

Quant aux travaux d'Oxtoby et al. [26], nos paramètres de simulations sont encore plus proches des conditions expérimentales. L'écart entre les valeurs expérimentale et calculée de la vitesse du son est réduit à 12%. En effet, la valeur expérimentale de la vitesse du son est de $35,1 \text{ mm/s}$ pour une densité de $5 \times 10^6 \text{ m}^{-2}$. Pour la même densité, nos calculs prédisent une vitesse de $39,6 \text{ mm/s}$.

Sur le tableau (3.1) nous résumons ces différentes comparaisons.

	$n (\times 10^6 \text{mm}^{-2})$	$c (\text{mm/s})$	Nos résultats $c (\text{mm/s})$	écart (%)
Feng et al. [155]	4.5	25.0	37.0	48
Samsonos et al. [28]	3.5	23.0	30.0	30
Oxtoby et al. [26]	5.0	35.1	39.6	12

Table 3.1 – Résumé de l'étude comparative de nos résultats avec des travaux expérimentaux.

A la lumière de cette étude comparative avec les travaux expérimentaux, les valeurs calculées de la vitesse du son sont satisfaisantes. Ainsi, nous pouvons confirmer la validité de l'équation d'état proposée.

3.4 Conclusion

L'objectif fondamental de ce chapitre est de déterminer l'équation d'état d'une monocouche d'un cristal coulombien et vise aussi à une meilleure compréhension de la physique des plasmas complexes. Dans ce contexte, nous avons utilisé des simulations de dynamique moléculaire en mettant en œuvre un code informatique adaptée à la situation physique étudiée. L'objectif étant d'analyser l'impact des différents paramètres physiques nécessaire à la prédiction et à l'interprétation des mesures expérimentales.

Nous avons calculé dans un cadre totalement bidimensionnel les variables d'états telles que la pression et la densité pour différents valeurs du nombre de particules et du paramètre de confinement. Plus précisément, nous avons montré que l'équation d'état donnerait un indice adiabatique d'un gaz parfait monoatomique égal à $5/3$ que pour une région très petite de la densité des grains. Comme nous l'avons mentionné, ce résultat suggère que le comportement d'un gaz idéal observé expérimentalement dans la littérature n'est valide que dans un cas particulier correspondant à un domaine réduit de la densité des grains. Aussi, nous avons poussé l'étude pour établir une équation d'état effective du cristal coulombien bidimensionnel à température suffisamment faible (proche de zéro), qui nous a permis d'évaluer la vitesse du son dans le système étudié.

La prédiction obtenue par cette équation d'état concernant la vitesse de propagation des ondes dans le cristal présente un bon accord avec celle de l'expérience issus de la littérature et ainsi démontre la validité de notre modèle. Comme amélioration à ce dernier, il serait intéressant à l'avenir de tenter d'estimer la forme de l'équation d'état à température finie. Il s'agira alors de considérer principalement les effets de la température sur l'évolution de la distribution de vitesses puisque les modifications de la partie potentielle de l'interaction restent faibles. Enfin, nous espérons que cette étude ouvrira la voie à de nouveaux travaux expérimentaux d'analyse de ces plasmas poussiéreux qui nous permettront de tester la validité de notre modèle pour d'autres situations expérimentales.

Ondes acoustiques dans un cristal coulombien bidimensionnel

CONCLUSION GÉNÉRALE

L'étude des plasmas poussiéreux est actuellement un domaine scientifique en plein développement qui attire l'attention d'une large communauté scientifique. Les plasmas poussiéreux font l'objet d'intenses recherches depuis le début des années 1980. C'est un gaz ionisé qui contient, en plus des électrons et des ions, des particules de matière condensée (diélectrique ou conductrice) de masse beaucoup plus grande que les autres composants du plasma. Elles acquièrent généralement une charge électrique de quelques dizaines de milliers de charges élémentaires.

Dans certaines conditions, les forces agissant sur ces particules créent des systèmes auto-ordonnés fortement corrélés. Le cristal coulombien bidimensionnel monocouche en est un exemple important. En effet, il permet l'étude de nouveaux phénomènes (phase hexatique) où l'étude, par analogie, de systèmes fortement corrélés difficiles à étudier tels que les cristaux ioniques dans un piège magnéto-optique.

Cette thèse est constituée de deux parties :

Le premier objectif est la détermination de l'équation d'état d'une monocouche d'un cristal coulombien à deux dimensions. Pour ce faire nous avons adopté la méthode de la dynamique moléculaire adaptée à la situation physique étudiée. Cette méthode nous a permis de calculer les variables d'états telles que la pression et la densité pour différents valeurs du nombre de particules et du paramètre de confinement afin de déterminer une équation d'état capable de décrire les propriétés dynamiques du cristal. Nos résultats ont montré que l'indice adiabatique est égal à la valeur d'un gaz monoatomique idéal et ce uniquement pour des valeurs de la densité situées dans une zone très réduite. Ce qui signifie que le comportement de gaz idéal issu des travaux expérimentaux publiés dans la littérature n'est qu'un cas particulier. En parallèle, dans le cas où la température des grains de poussière est proche de zéro, nous avons établi une équation d'état effective du cristal coulombien bidimensionnel.

Cette équation d'état nous a permis de calculer la vitesse de propagation des ondes dans le cristal en fonction de la densité des grains de poussières. Les résultats obtenus présentent un bon accord avec les vitesses mesurées expérimentalement. Ceci conforte la validité de notre modèle.

Par conséquent, cette étude pourrait ouvrir la voie à de nouveaux travaux expérimentaux d'analyse de ces plasmas poussiéreux qui nous permettront de tester la validité de notre modèle pour d'autres situations expérimentales.

Outre l'intérêt premier de simulation des phénomènes d'interaction collective entre grains de poussières chargés, travailler sur de tels systèmes qu'on peut élaborer en laboratoire, présenterait l'avantage supplémentaire de rendre possibles des descriptions plus précises des plasmas poussiéreux à grande échelle tels que les plasmas interstellaires, le vent solaire, les plasmas astrophysiques qui nous font encore défaut à ce jour.

La seconde partie de notre travail concerne l'étude de la propagation de l'onde acoustique de poussière dans un cristal bidimensionnel. Là aussi, nous avons utilisé la dynamique moléculaire afin de déterminer les spectres de dispersion de ces ondes obtenus par transformée de Fourier des courants des vitesses aléatoires des particules. Les profils de dispersion des deux modes transversal et longitudinal dépendent des divers paramètres, à savoir la température, la charge, la masse et la longueur de Debye du plasma. Les vitesses des ondes longitudinales et transversales dépendent aussi des propriétés physiques du milieu de propagation. Plus la masse des grains de poussières est grande moindre est la vitesse. Inversement, plus la densité est grande, plus les ondes se propagent plus rapidement.

Nous pouvons conclure que le comportement de ces ondes de poussières est analogue aux ondes sonores se propageant dans un solide réel. Cette concordance tend à justifier l'analogie faite en donnant le nom de cristal au système ordonné formé par les grains de poussières. Dans le présent travail nous avons utilisé la dynamique moléculaire se basant sur l'algorithme de Leap-frog pour intégrer les équations du mouvement et le thermostat de Nosé-Hoover pour le contrôle de la température. Pour le calcul de la pression nous avons utilisé un algorithme récemment publié adapté aux systèmes à nombre de particules réduit. Le temps de calcul de la pression représente la plus grande part du temps de calcul totale d'une seule simulation. Dans notre modèle, les interactions entre les grains de poussières sont modélisées par le potentiel de Yukawa et nous avons adopté un confinement parabolique.

Cette étude nous a permis de mettre en évidence des analogies entre des systèmes facilement observables et mesurables, avec d'autres systèmes plus complexes à observer et à quantifier.

En perspective de ce travail, nous pouvons citer celle d'inclure dans l'équation d'état proposée l'influence de la température des grains de poussières pour construire une équation complète. Une autre perspective intéressante est l'étude de la propagation des ondes de poussières dans les phases liquides et hexatiques. Cette dernière, n'existant que pour des systèmes bidimensionnels, le cristal coulombien présente un système idéal pour son étude.

Table des figures

1.1	Représentation schématique des quatre états de la matière [34]	6
1.2	Illustrations d'un gaz neutre et d'un plasma	7
1.3	Les différents plasmas en fonction de la température et de la densité [37]	8
1.4	Spokes dans l'anneau B de Saturne : (a) Phase d'approche, bandes sombres. (b) Phase d'éloignement, bandes blanches.	10
1.5	Poussières en suspension illuminées par un faisceau laser [55].	11
1.6	Schéma du dispositif pour étudier les comportement des grains de poussière dans un plasma RF [70].	16
1.7	Image CCD du plan horizontal d'un cristal coulombien	16
1.8	Problème à une dimension d'une poussière plongée dans un plasma	18
1.9	Répartition du potentiel électrique dans un plasma au voisinage d'une paroi[78].	20
1.10	Représentation de l'écrantage de Debye	22
1.11	Photos d'un "void" dans un plasma poudreux capacitif radiofréquence [95].	25
1.12	Particule de poussière immergée dans un gaz et soumise à un gradient de température.	26
1.13	Comparaison des différentes forces agissant sur une particule sphérique en fonction de son rayon [106]	28
1.14	Récapitulatif des différentes forces agissants sur des particules dans une décharge capacitive	29
2.1	Schéma d'un programme de dynamique moléculaire. $\vec{r}^n(t)$ et $\vec{p}^n(t)$ représentent l'ensemble des positions et des moments associés des particules du système, dans le temps	35
2.2	Le Schéma de l'algorithme de Leap-frog	38
2.3	Comparaison de la fluctuation de la température pour deux valeur de Q à une température $T = 100K$ [138].	42
2.4	Paramètre de couplage pour différents types de plasmas ; astrophysiques et de laboratoire [103].	44
3.1	Exemple de cellule de Voronoi (grisée) centrée sur une particule	48

3.2	Distribution spatiale des grains de poussières en fonction du paramètre de couplage : (a)- $\Gamma = 2 \cdot 10^4$, (b)- $\Gamma = 6$	50
3.3	Formation de structure hexagonale de grains de poussières à deux dimensions (2D)	51
3.4	Effet du paramètre de confinement ω_h sur la distribution spatiale des grains de poussière : (a)- $\omega_h = 0.5Hz$, (b)- $\omega_h = 1.0Hz$ et (c)- $\omega_h = 2.0Hz$	52
3.5	Diagramme de Voronoi du cristal coulombien bidimensionnel mono-couche. La barre de couleur indique la pression en Pa.	53
3.6	(a)- Variation radiale de la pression locale P, (b)- Variation radiale de la distance inter grains.	53
3.7	Variation de l'indice adiabatique γ en fonction du nombre de particules pour différents paramètres de confinement	55
3.8	Variation de l'indice adiabatique γ en fonction du nombre de particules pour différents paramètres de confinement	55
3.9	Variation de la pression au centre du cristal en fonction de la densité pour différents paramètres de confinement	56
3.10	Variation de PV en fonction de ,(a) la pression. (b) densité	57
3.11	Variation de PV en fonction de la densité	58
3.12	Variation de la vitesse du son c en fonction de la densité n	59
4.1	Spectre de dispersion de l'onde acoustique poussiéreuse pour une température $T=1000K^\circ$, (a)- Longitudinale, (b)- Transversale. La barre de couleur est en unités arbitraire(a. u.)	65
4.2	Effet de la température sur la courbe de dispersion de l'onde longitudinale	66
4.3	Effet de la température sur la courbe de dispersion de l'onde transversale	66
4.4	Variation de la vitesse de l'onde longitudinale en fonction de la température	67
4.5	Disparition de l'onde transversale pour des températures très élevées	67
4.6	Variation des vitesses des ondes longitudinale et transversale en fonction de la longueur de Debye λ_D	68
4.7	Variation de la vitesse longitudinale en fonction de la densité	69
4.8	Variation de la vitesse du son en fonction du paramètre de couplage Γ	70
4.9	Variation des vitesses des ondes longitudinale et transversale en fonction de la masse des grains de poussière m_d	71
4.10	Variation des vitesses des ondes longitudinale et transversale en fonction de la charge des grains de poussière Q_d	72

Liste des tableaux

3.1	Résumé de l'étude comparative de nos résultats avec des travaux expérimentaux. . .	60
-----	--	----

Bibliographie

- [1] G. Schmidt, *Physics of High Temperature Plasmas*, Academic Press, 2 edition, 1979.
- [2] J. Chu and I. Lin, *Physical review letters* **72**, 4009 (1994).
- [3] L. Boufendi and A. Bouchoule, *Plasma Sources Science and Technology* **3**, 262 (1994).
- [4] M. S. Murillo, *Physics of Plasmas (1994-present)* **11**, 2964 (2004).
- [5] H. M. Anderson, R. Jairath, and J. L. Mock, *Journal of applied physics* **67**, 3999 (1990).
- [6] A. Bouchoule, A. Plain, L. Boufendi, J. P. Blondeau, and C. Laure, *Journal of applied physics* **70**, 1991 (1991).
- [7] J.-L. Dorier, C. Hollenstein, and A. A. Howling, *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films* **13**, 918 (1995).
- [8] A. Bouchoule and L. Boufendi, *Plasma Sources Science and Technology* **3**, 292 (1994).
- [9] J. Boeuf, P. Belenguer, and T. Hbid, *Plasma Sources Science and Technology* **3**, 407 (1994).
- [10] T. Gold, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **115**, 585 (1955).
- [11] E. C. Whipple, *Reports on Progress in Physics* **44**, 1197 (1981).
- [12] N. Meyer-Vernet, *Astronomy and Astrophysics* **105**, 98 (1982).
- [13] C. Goertz, *Reviews of Geophysics* **27**, 271 (1989).
- [14] O. Havnes, T. K. Aanesen, and F. Melandsø, *Journal of Geophysical Research : Space Physics* **95**, 6581 (1990).
- [15] A. Barkan, N. D'angelo, and R. L. Merlino, *Physical review letters* **73**, 3093 (1994).
- [16] C. Cui and J. Goree, *IEEE Transactions on plasma science* **22**, 151 (1994).
- [17] B. Walch, M. Horányi, and S. Robertson, *Physical review letters* **75**, 838 (1995).

- [18] F. Melandsø and J. Goree, *Physical Review E* **52**, 5312 (1995).
- [19] F. Melandso/, T. Nitter, T. Aslaksen, and O. Havnes, *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films* **14**, 619 (1996).
- [20] R. N. Carlile, S. Geha, J. F. O'Hanlon, and J. C. Stewart, *Applied physics letters* **59**, 1167 (1991).
- [21] S. J. Choi, P. L. Ventzek, R. J. Hoekstra, and M. J. Kushner, *Plasma Sources Science and Technology* **3**, 418 (1994).
- [22] D. Graves, J. Daugherty, M. Kilgore, and R. Porteous, *Plasma Sources Science and Technology* **3**, 433 (1994).
- [23] S. J. Choi and M. J. Kushner, *Journal of applied physics* **75**, 3351 (1994).
- [24] S. Peters, A. Homann, A. Melzer, and A. Piel, *Physics Letters A* **223**, 389 (1996).
- [25] U. Konopka, L. Ratke, and H. Thomas, *Physical review letters* **79**, 1269 (1997).
- [26] N. P. Oxtoby, E. J. Griffith, C. Durniak, J. F. Ralph, and D. Samsonov, *Physical review letters* **111**, 015002 (2013).
- [27] S. Hamaguchi, R. Farouki, and D. Dubin, *The Journal of chemical physics* **105**, 7641 (1996).
- [28] D. Samsonov, S. Zhdanov, R. Quinn, S. Popel, and G. Morfill, *Physical review letters* **92**, 255004 (2004).
- [29] C. Durniak, D. Samsonov, N. P. Oxtoby, J. F. Ralph, and S. Zhdanov, *Plasma Science, IEEE Transactions on* **38**, 2412 (2010).
- [30] P. Fauchais, *Techniques de l'ingénieur. Génie électrique* **4**, 1 (1990).
- [31] B. Held, *Physique des plasmas froids*, Number 180, Masson, 1994.
- [32] S. Stock, *Quantized vortices in a Bose-Einstein condensate : thermal activation and dynamic nucleation*, PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, 2006.
- [33] A.-M. Pointu, J. Perrin, and J. Jolly, *Techniques de l'ingénieur. Génie électrique* **4**, 1 (1998).
- [34] R. Abd Jelil, *Modélisation de la relation entre les paramètres du procédé plasma et les caractéristiques de la qualité du matériau textile par apprentissage de données physiques*, PhD thesis, Lille 1, 2010.
- [35] A. Labergue, *Etude de décharges électriques dans l'air pour le développement d'actionneurs plasmas—Application au contrôle de décollements d'écoulements*, PhD thesis, Université de Poitiers, 2005.

- [36] X. Mellhaoui, *Mécanismes physico-chimiques dans le procédé de gravure plasma du Silicium*, PhD thesis, Université d'Orléans, 2006.
- [37] M. I. Boulos, P. Fauchais, and E. Pfender, *Thermal plasmas : fundamentals and applications*, Springer Science & Business Media, 2013.
- [38] T. Makabe and Z. Petroviac, *Plasma electronics*, 2006.
- [39] M. Lieberman and A. Lichtenberg, New York **450** (1994).
- [40] A. Grill, *Cold plasma in materials fabrication*, volume 151, IEEE Press, New York, 1994.
- [41] I. Langmuir, C. Found, and A. Dittmer, *Science* **60**, 392 (1924).
- [42] H. M. Mott-Smith and I. Langmuir, *Physical review* **28**, 727 (1926).
- [43] J. R. Hill and D. Mendis, *Earth, Moon, and Planets* **24**, 431 (1981).
- [44] C. Goertz and G. Morfill, *Icarus* **53**, 219 (1983).
- [45] W. Huebner, Origins of cometary materials, in *Origin and Early Evolution of Comet Nuclei*, pages 5–25, Springer, 2008.
- [46] J. Blum et al., *Physical Review Letters* **85**, 2426 (2000).
- [47] J. Blum, *Research in Astronomy and Astrophysics* **10**, 1199 (2010).
- [48] N. Carrasco et al., *The Journal of Physical Chemistry A* **113**, 11195 (2009).
- [49] E. Sciamma OBrien, N. Carrasco, C. Szopa, A. Buch, and G. Cernogora, *Icarus* **209**, 704 (2010).
- [50] G. E. Moore, Cramming more components onto integrated circuits, *electronics*,(38) 8, 1965.
- [51] G. S. Selwyn, J. Singh, and R. Bennett, *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films* **7**, 2758 (1989).
- [52] G. Jellum, J. Daugherty, and D. Graves, *Journal of applied physics* **69**, 6923 (1991).
- [53] W. Stoffels et al., *Plasma Sources Science and Technology* **3**, 320 (1994).
- [54] A. Bouchoule et al., *Pure and applied chemistry* **68**, 1121 (1996).
- [55] G. S. Selwyn, J. E. Heidenreich, and K. L. Haller, *Applied physics letters* **57**, 1876 (1990).
- [56] H. Kersten et al., *Contributions to Plasma Physics* **41**, 598 (2001).
- [57] H. Kersten, H. Deutsch, E. Stoffels, W. Stoffels, and G. Kroesen, *International Journal of Mass Spectrometry* **223**, 313 (2003).

- [58] U. Kortshagen, *Journal of Physics D : Applied Physics* **42**, 113001 (2009).
- [59] C. Arnas and A. Mouberri, *Journal of Applied Physics* **105**, 063301 (2009).
- [60] H. Maurer and H. Kersten, *Journal of Physics D : Applied Physics* **44**, 174029 (2011).
- [61] H. Kersten, H. Deutsch, M. Otte, G. Swinkels, and G. Kroesen, *Thin Solid Films* **377**, 530 (2000).
- [62] G. Swinkels, H. Kersten, H. Deutsch, and G. Kroesen, *Journal of Applied Physics* **88**, 1747 (2000).
- [63] S. C. Brown, (1966).
- [64] S. Rossnagel, J. Cuomo, and W. Westwood, *Fundamentals, etching, deposition and surface interaction, handbook of plasma processing technology*, 1990.
- [65] V. N. Tsytovich, G. Morfill, S. V. Vladimirov, and H. M. Thomas, *Elementary physics of complex plasmas*, volume 731, Springer Science & Business Media, 2007.
- [66] V. Fortov, A. Ivlev, S. Khrapak, A. Khrapak, and G. Morfill, *Physics reports* **421**, 1 (2005).
- [67] G. Ganguli, R. Merlino, and A. Sen, *Physics and Astronomy*, The University of Iowa, Iowa City, IA 52242, USA. (2000).
- [68] M. Djebli, *Expansions des Plasmas poussiéreux en géométrie sphérique*, PhD thesis, Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene, 2004.
- [69] G.-S. Chae, *Numerical Simulation of Ion Waves in Dusty Plasmas*, PhD thesis, 2000.
- [70] H. Thomas et al., *Physical Review Letters* **73**, 652 (1994).
- [71] A. Samarian and S. Vladimirov, *Physical Review E* **67**, 066404 (2003).
- [72] J. L. Delcroix, *Physique des plasmas (Vol. I, Vol. II)*, Savoirs actuels, 1994.
- [73] R. Franklin, *Journal of Physics D : Applied Physics* **36**, 828 (2003).
- [74] P. K. Shukla and A. A. Mamun, *Introduction to Dusty Plasma Physics*, 2002.
- [75] A. Bouchoule, *Dusty plasmas : physics, chemistry, and technological impacts in plasma processing*, John Wiley & Sons Inc, 1999.
- [76] L. Tonks and I. Langmuir, *Physical Review* **33**, 195 (1929).
- [77] G. Severn, *American Journal of Physics* **75**, 92 (2007).
- [78] F. F. Chen and J. P. Chang, Univ. of California, book (2002).
- [79] G. Uchida, S. Iizuka, and N. Sato, *Physics of Plasmas* **16**, 083707 (2009).

- [80] O. Vaulina, X. Koss, and S. Vladimirov, *Physica Scripta* **79**, 035501 (2009).
- [81] A. Melzer, T. Trottenberg, and A. Piel, *Physics Letters A* **191**, 301 (1994).
- [82] Y. Hayashi and K. Tachibana, *Japanese journal of applied physics* **33**, L804 (1994).
- [83] R. Roth, K. Spears, G. Stein, and G. Wong, *Applied Physics Letters* **46**, 253 (1985).
- [84] L. Boufendi, J. Gaudin, S. Huet, G. Viera, and M. Dudemaine, *Applied Physics Letters* **79**, 4301 (2001).
- [85] M. Cavarroc, M. C. Jouanny, K. Radouane, M. Mikikian, and L. Boufendi, *Journal of applied physics* **99**, 064301 (2006).
- [86] C. Deschenaux, A. Affolter, D. Magni, C. Hollenstein, and P. Fayet, *Journal of Physics D : Applied Physics* **32**, 1876 (1999).
- [87] S. Hong, J. Berndt, and J. Winter, *Plasma Sources Science and Technology* **12**, 46 (2002).
- [88] J. Pereira, I. Géraud-Grenier, V. Massereau-Guilbaud, and A. Plain, *Thin Solid Films* **482**, 226 (2005).
- [89] I. Stefanovic, E. Kovacevic, J. Berndt, and J. Winter, *New Journal of Physics* **5**, 39 (2003).
- [90] K. De Bleecker, A. Bogaerts, and W. Goedheer, *Physical Review E* **73**, 026405 (2006).
- [91] G. S. Selwyn, J. McKillop, K. L. Haller, and J. Wu, *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films* **8**, 1726 (1990).
- [92] G. Jellum and D. Graves, *Journal of Applied Physics* **67**, 6490 (1990).
- [93] B. Ganguly, A. Garscadden, J. Williams, and P. Haaland, *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films* **11**, 1119 (1993).
- [94] G. Praburam and J. Goree, *Physics of Plasmas* **3**, 1212 (1996).
- [95] M. Mikikian et al., *New Journal of Physics* **5**, 19 (2003).
- [96] A. P. Nefedov et al., *New Journal of Physics* **5**, 33 (2003).
- [97] A. Bouchoule and L. Boufendi, *Plasma Sources Science and Technology* **2**, 204 (1993).
- [98] D. Samsonov and J. Goree, *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films* **17**, 2835 (1999).
- [99] J. Allen, *Physica Scripta* **45**, 497 (1992).
- [100] P. K. Shukla and B. Eliasson, *Reviews of Modern Physics* **81**, 25 (2009).
- [101] R. L. Merlino, *Plasma Physics Applied* **81**, 73 (2006).

- [102] G. Morfill et al., Physical review letters **83**, 1598 (1999).
- [103] P. K. Shukla and A. Mamun, *Introduction to dusty plasma physics*, CRC Press, 2015.
- [104] C. Zafiu, A. Melzer, and A. Piel, Physics of Plasmas **10**, 1278 (2003).
- [105] M. Kilgore, J. Daugherty, R. Porteous, and D. Graves, Journal of applied physics **73**, 7195 (1993).
- [106] J. Boeuf and P. Belenguer, Journal of applied physics **71**, 4751 (1992).
- [107] J. Zuegg and J. Gready, Biochemistry **38**, 13862 (1999).
- [108] J. Norberg and L. Nilsson, Biophysical journal **79**, 1537 (2000).
- [109] L. Perera, U. Essmann, and M. L. Berkowitz, The Journal of chemical physics **102**, 450 (1995).
- [110] S. G. Brush, *The Kind of Motion We Call Heat. Book 2 : Statistical Physics and Irreversible Processes*, North Holland, 1999.
- [111] W. G. Hoover, *Molecular Dynamics*, LNP0258, Springer, 1 edition, 1986.
- [112] B. Alder and T. Wainwright, The Journal of chemical physics **27**, 1208 (1957).
- [113] J. Gibson, A. N. Goland, M. Milgram, and G. Vineyard, Physical Review **120**, 1229 (1960).
- [114] A. Rahman, Physical Review **136**, A405 (1964).
- [115] L. Verlet, Physical review **159**, 98 (1967).
- [116] L. Verlet, Physical Review **165**, 201 (1968).
- [117] J.-P. Hansen and L. Verlet, physical Review **184**, 151 (1969).
- [118] P. Bordat, A. Lerbret, J.-P. Demaret, F. Affouard, and M. Descamps, EPL (Europhysics Letters) **65**, 41 (2004).
- [119] A. Lerbret, P. Bordat, F. Affouard, M. Descamps, and F. Migliardo, The Journal of Physical Chemistry B **109**, 11046 (2005).
- [120] D. Heermann, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*, Springer Science & Business Media, 2012.
- [121] J. M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation : Elementary Methods*, John Wiley & Sons, Inc., New York, NY, USA, 1st edition, 1992.
- [122] R. HOCKNEY, Methods Comput. Phys. **9**, 136 (1970).

- [123] W. C. Swope, H. C. Andersen, P. H. Berens, and K. R. Wilson, *The Journal of Chemical Physics* **76**, 637 (1982).
- [124] S. Plimpton, *Journal of computational physics* **117**, 1 (1995).
- [125] W. Smith, There is no corresponding record for this reference .
- [126] K. Refson, *Computer Physics Communications* **126**, 310 (2000).
- [127] C. Chipot, Nancy : UMR **7565** (2003).
- [128] D. Beeman, *Journal of computational Physics* **20**, 130 (1976).
- [129] K. Refson, *Physica B+ C* **131**, 256 (1985).
- [130] A. Hédoux, Y. Guinet, L. Paccou, P. Derollez, and F. Danède, *The Journal of chemical physics* **138**, 214506 (2013).
- [131] P. Derollez et al., *Acta Crystallographica Section B : Structural Science* **68**, 407 (2012).
- [132] C. Ngô and H. Ngô, *Physique statistique-3ème édition*, Dunod, 2008.
- [133] O. Andersson, G. Johari, and R. Shanker, *Journal of pharmaceutical sciences* **95**, 2406 (2006).
- [134] J. Anderson and R. Ullman, *The Journal of Chemical Physics* **47**, 2178 (1967).
- [135] H. J. Berendsen, J. v. Postma, W. F. van Gunsteren, A. DiNola, and J. Haak, *The Journal of chemical physics* **81**, 3684 (1984).
- [136] P. Langevin, *CR Acad. Sci. Paris* **146**, 530 (1908).
- [137] W. G. Hoover, *Physical review A* **31**, 1695 (1985).
- [138] S. Nosé, *Molecular physics* **52**, 255 (1984).
- [139] S. Nosé, *The Journal of chemical physics* **81**, 511 (1984).
- [140] G. J. Martyna, M. L. Klein, and M. Tuckerman, *The Journal of chemical physics* **97**, 2635 (1992).
- [141] Y. Kadiri, *Contribution à l'étude des effets à trois corps sur la structure et la thermodynamique des liquides surfondus et amorphes*, PhD thesis, Metz, 2001.
- [142] H. Ikezi, *The Physics of fluids* **29**, 1764 (1986).
- [143] J. Chu and I. Lin, *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications* **205**, 183 (1994).
- [144] U. Konopka, G. Morfill, and L. Ratke, *Physical review letters* **84**, 891 (2000).
- [145] A. Melzer, *Physica Scripta* **2001**, 33 (2001).

- [146] F. Melandsø and J. Goree, *Physical Review E* **52**, 5312 (1995).
- [147] D. Samsonov and G. E. Morfill, *IEEE transactions on plasma science* **36**, 1020 (2008).
- [148] J. Lutsko, *Journal of Applied Physics* **64**, 1152 (1988).
- [149] J. Cormier, J. Rickman, and T. Delph, *Journal of Applied Physics* **89**, 99 (2001).
- [150] E. de Miguel and G. Jackson, *The Journal of chemical physics* **125**, 164109 (2006).
- [151] T. W. Lion and R. J. Allen, *Journal of Physics : Condensed Matter* **24**, 284133 (2012).
- [152] C. Durniak and D. Samsonov, *Molecular dynamics simulations of complex (dusty) plasmas*, in *Molecular Dynamics-Studies of Synthetic and Biological Macromolecules*, InTech, 2012.
- [153] C. Knapek, D. Samsonov, S. Zhdanov, U. Konopka, and G. Morfill, *Physical review letters* **98**, 015004 (2007).
- [154] C. Durniak, D. Samsonov, S. Zhdanov, and G. Morfill, *EPL (Europhysics Letters)* **88**, 45001 (2009).
- [155] Y. Feng, J. Goree, and B. Liu, *Physical review letters* **109**, 185002 (2012).
- [156] N. Rao, P. Shukla, and M. Y. Yu, *Planetary and space science* **38**, 543 (1990).
- [157] P. Shukla and V. Silin, *Physica Scripta* **45**, 508 (1992).
- [158] F. Verheest, *Waves in dusty space plasmas*, volume 245, Springer Science & Business Media, 2001.
- [159] P. Shukla, *Physics of Plasmas* **8**, 1791 (2001).
- [160] A. Barkan, R. L. Merlino, and N. Dangelo, *Physics of Plasmas* **2**, 3563 (1995).
- [161] V. E. Fortov, A. G. Khrapak, S. A. Khrapak, V. I. Molotkov, and O. F. Petrov, *Physics-Uspekhi* **47**, 447 (2004).
- [162] P. Shukla, page 38 (1989).
- [163] H. Prabhakara and V. Tanna, *Physics of Plasmas* **3**, 3176 (1996).
- [164] R. L. Merlino, *Journal of Plasma Physics* **80**, 773 (2014).
- [165] S. Ratynskaia et al., *Physical review letters* **99**, 075002 (2007).
- [166] O. Havnes, *Astronomy and Astrophysics* **193**, 309 (1988).
- [167] J. Pramanik, G. Prasad, A. Sen, and P. Kaw, *Physical review letters* **88**, 175001 (2002).
- [168] S. Nunomura, D. Samsonov, and J. Goree, *Physical review letters* **84**, 5141 (2000).

- [169] S. Nunomura et al., Physical review letters **89**, 035001 (2002).
- [170] S. Nunomura, S. Zhdanov, D. Samsonov, and G. Morfill, Physical review letters **94**, 045001 (2005).
- [171] S. A. Khrapak, B. Klumov, L. Couedel, and H. M. Thomas, Physics of Plasmas **23**, 023702 (2016).
- [172] K. Nowacki and W. Kasprzyk, International Journal of Thermophysics **31**, 103 (2010).
- [173] J. Lemaitre and J.-L. Chaboche, *Mechanics of solid materials*, Cambridge university press, 1994.
- [174] R. L. Merlino, Dust-acoustic waves : Visible sound waves, in *AIP Conference Proceedings*, volume 1188, pages 141–152, AIP, 2009.

Résumé

Les plasmas complexes formant une phase ordonnée, constituent un système fortement couplé dont les caractéristiques présentent un intérêt croissant dans le domaine de la physique de la matière condensée. Outre les propriétés communes aux milieux ionisés, les plasmas complexes se comportent comme des cristaux, avec l'avantage de pouvoir les observer à l'œil nu. Les grains de poussière observés dans l'univers, ainsi que dans les laboratoires et dans les dispositifs à plasmas sont toujours sous investigation. A basse température, ces particules sont fortement chargées, leur charge est négative, elles peuvent former un cristal coulombien à deux dimensions (2D) ou à trois dimensions (3D). Dans ce travail, notre objectif premier était de vérifier la loi des gaz parfait validée pour une mono-couche de cristal coulombien à deux dimensions (2D) rapporté dans la littérature. A cet effet, nous avons simulé, en utilisant la méthode de la dynamique moléculaire, ses propriétés thermodynamiques pour différentes valeurs du nombre de particules et du paramètre de confinement. Les résultats obtenus nous ont permis d'invalider le comportement des gaz parfaits et de proposer une équation d'état effective des grains de poussières à une température proche du zéro. De plus, la vitesse du son calculée est en bon accord avec les données expérimentales dans la littérature .

***Mot-clés :** Plasma poussiéreux, cristal coulombien, équation d'état, pression , dynamique moléculaire.*

Abstract

Complex plasmas in an ordered phase constitute one of the strongly coupled systems, whose characteristics are of a growing interest in the field of the condensed materials physics. In addition to the common properties of the ionized mediums, complex plasmas behave as crystals, with an advantage : the possibility of being observed by the naked eye. Dust particles observed in universe as well as in laboratory and technological plasma devices are still under investigation. At low temperature, these particles are strongly negatively charged and are able to form a 2D or 3D coulomb crystal. In this work, our aim was to check the ideal gas law validity for a 2D single-layer dust crystal recently reported in the literature. For this purpose, we have simulated, using the molecular dynamics method, its thermodynamic properties for different values of dust particles number and confinement parameters. The obtained results have allowed us to invalidate the ideal gas behaviour and to propose an effective equation of state which assumes a near zero dust temperature. Furthermore, the value of the calculated sound velocity was found to be in a good agreement with experimental data published elsewhere.

***Keywords :** Dusty plasma, coulomb crystal, equation of state, ideal gas, pressure, molecular dynamic.*