

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET

DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMERI DE TIZI OUZOU

FACULTÉ DE GENIE DE LA CONSTRUCTION

DEPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE



MEMOIRE

De fin d'études

En vue de l'obtention du diplôme de Master académique
En Génie Mécanique

Option : énergétique

Thème

**Etude numérique des propriétés thermiques des
cristaux formés par des particules chargées par
la technique de Monte Carlo**

Encadreur : Dr. ROUAIGUIA Leila

Co-encadreur : Dr. MOUKHTARI Faiza

Réalisé par :

M^{elle} LAMRAOUI Nadia

2014

Remerciement

Je tiens tout d'abord à remercier l'encadreur : Dr. ROUAIGUIA Leila et le co-encadreur : Dr. MOUKHTARI Faiza, pour m'avoir fait confiance malgré les connaissances légères que j'ai sur les plasmas poussiéreux, qui m'ont guider avec compréhension et gentillesse, je les remercie pour tout le soutien qu'elles ont eu à m'apporter durant l'étude, pour l'aide scientifique et morale qu'elles ont sus m'apporter tout au long de ce mémoire

Je remercie le responsable du laboratoire de Physique Théorique de l'USTHB, pour m'avoir accueilli.

Je remercie Mr N. Zazi et Mr S. Zouaoui pour m'avoir orienté vers l'encadreur.

Je tiens à remercier toute personne ayant attribué de près ou de loin à l'aboutissement de ce modeste travail.

Enfin mes remerciements vont à messieurs les membres du jury d'avoir accepter d'examiner et de juger mon travail.

Je dédie ce travail

A ma très chère mère : Tu représentes pour moi le symbole de la bonté par excellence, la source de tendresse et l'exemple du dévouement qui n'a pas cessé de m'encourager et de prier pour moi.

Je te dédie ce travail en témoignage de mon profond amour. Puisse Dieu, le tout puissant, te préserver et t'accorder santé, longue vie et bonheur.

A la mémoire de mon Père : Aucune dédicace ne saurait exprimer l'amour, l'estime, le dévouement et le respect que j'ai toujours eu pour vous.

A mes très chers frères et mes très chères sœurs :

En témoignage de l'attachement, de l'amour et de l'affection que je porte pour vous. Je vous dédie ce travail avec tous mes vœux de bonheur, de santé et réussite.

A mes chers ami(e)s : Achour, Zineb, ferhat, Fatma, Abedrahim, Abdnour, Hand, Said, Mehdi, Samira

Je ne peux trouver les mots justes et sincères pour vous exprimer mon affection et mes pensées, vous êtes pour moi des frères, sœurs et des amis sur qui je peux compter.

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE.....	1
ETAT DE L'ART.....	3
CHAPITRE I : GENERALITE.....	7
I.1 INTRODUCTION	7
I.2 PARAMETRE DE COUPLAGE	7
I.3 LONGUEUR DE DEBYE	8
I.4 CHARGE DES GRAINS	9
I.5 FORCES AGISSANT SUR UN GRAIN DE POUSSIERE.....	11
I.5.1 force de gravité	12
I.5.2 force électrostatique	12
I.5.3 force thermophorèse.....	12
I.5.4 force de friction des ions	13
I.5.5 force de friction des atomes.....	13
I.6 ELABORATION D'UN PLASMA POUSSIEREUX	13
CHAPITRE II : MODELISATION D'UN PLASMA CRISTALLIN.....	6
II.1 INTRODUCTION	6
II.2 POTENTIEL DE CONFINEMENT.....	7
II.3 POTENTIEL D'INTERACTION INTER-GRAINS	7
II.4 HAMILTONIEN DU SYSTEME	8
CHAPITRE III : TECHNIQUE DE SIMULATION MONTE CARLO.....	20
III.1 INTRODUCTION.....	20
III.2 PRINCIPE DE LA METHODE MONTE CARLO.....	20
III.3 ALGORITHME DE METROPOLIS	22
III.4 <u>Approche numérique</u>	23

<u>III.5 Code du calcul</u>	25
<u>III.6 Organigramme du code</u>	26
 CHAPITRE IV : RESULTATS ET DISCUSSION	27
IV.1 INTRODUCTION.....	27
IV.2 CONFIGURATION DE L'ETAT FONDAMENTAL	27
IV.3 EFFET DE LA TEMPERATURE SUR LES CONFIGURATIONS D'EQUILIBRE	33
IV.4 TRANSITION DE PHASE.....	36
IV.5 FUSION DES CLUSTERS.....	38
 CONCLUSION	42
 REFERENCES	45

Liste des figures

Figure 1: Evolution du nombre de publications dans le domaine des plasmas

Complexes.....4

Figure I.1 : Ecrantage des grains de poussière chargés négativement dans un

plasma complexe de laboratoire.....9

Figure I.2 : Représentation schématique des forces importantes exercées sur

un grain de poussière dans un environnement plasma.....11

Figure III.1: Energies locales et globale d'un système physique en fonction

du nombre d'itérations de la simulation MC.....24

Figure IV.1: Configurations de l'état fondamental à basse température

($T/T_0 \sim 0$) des structures cristallines 2D formées de N grains chargés: 5, 10, 20, 110, 250 et 400 respectivement.....29

Figure IV.2: Variation de l'énergie moyenne par grain en fonction du

nombre N de grains à l'état fondamental.....33

Figure IV.3. (a) : Effet de la température sur les configurations d'équilibre des

systèmes $N=10$ et $N=20$ respectivement, un saut de grain entre les couches

est observé.....34

Figure IV.3. (b): Effet de la température sur les configurations d'équilibre des

systèmes $N=15$ et $N=25$ respectivement, un déplacement des grains sur leurs

couches est remarqué.....35

Figure IV.3. (c): Effet de la température sur les configurations d'équilibre des

Systèmes $N = 250$ et $N = 400$ respectivement dont une augmentation de la Distance

inter-grains sur toute la structure est illustrée.....36

Figure IV.4: Transition de configurations d'équilibre des systèmes: $N = 30, 200$ et 400

grains respectivement, sous l'effet de l'augmentation de la température37

Figure IV.5 : Trajectoires du mouvement de $N = 10, 30$, et 200 grains autour

de leur positions d'équilibre, représentées à des températures différentes39

Figure IV.6 : Évolution de la température de fusion en fonction de nombre de

particules pour un cristal coulombien fortement couplé dans un plasma poussiéreux41

Liste des Tableaux

Tableau IV.1: Configurations en couches de l'état fondamental

$(n_1, n_2, \dots, n_i)$ des systèmes de N grains obtenues à basse température.

L'indice i représente le numéro de la couche et n_i représente le nombre de grains de la couche i 30

Tableau IV.2: Températures de fusion normalisées T_m de différents

systèmes de N grains40

INTRODUCTION GENERALE

Introduction

Un plasma est un gaz ionisé qui contient des électrons, des ions et des atomes neutres. L'état plasma de la matière est très répandu dans la nature et il est usuel de dire que 99% de la matière de l'univers est à l'état plasma. Un plasma poussiéreux (dusty, complex plasmas) est un gaz de basse température, complètement ou partiellement ionisé, comprenant des électrons, des ions et une composante additionnelle de grains de poussière chargés et extrêmement massifs dont la taille peut varier du nanomètre au micromètre [1,2]. Les plasmas poussiéreux sont présents dans différentes parties de notre système solaire, à savoir, le milieu interplanétaire, les nuages interstellaires, les queues et chevelures des comètes et les anneaux planétaires. Ils sont aussi présents dans les dispositifs de laboratoires et les procédés industriels [3]. Les grains de poussière massifs et hautement chargés peuvent modifier les propriétés intrinsèques du plasma traditionnel et introduire de nouveaux phénomènes et de nouvelles instabilités.

En réalité, la physique des plasmas poussiéreux n'a connu son essor que grâce à la découverte de nouveau mode (l'onde acoustique poussiéreuse) et à la cristallisation coulombienne des grains chargés dans les plasmas fortement couplés (interaction électrostatique entre les grains est dominante par rapport à l'agitation thermique) . De nos jours, la physique des plasmas poussiéreux ou complexes connaît une activité intense et particulière [4]. Cet intérêt toujours croissant a donné lieu depuis le début des années 90 à une littérature considérable, riche et variée. L'importance et l'impact d'une telle discipline en rapide évolution est à rechercher certainement dans les domaines de l'astrophysique et des décharges de basses températures utilisées dans les procédés industriels de traitement et de fabrication. En plus des applications, les plasmas poussiéreux (complexes) offrent une possibilité directe de l'étude des propriétés dynamiques, optiques et électriques des cristaux. Ils présentent un excellent modèle d'étude, pour les systèmes complexes finis, des états stables et métastables et des transitions de phase à l'échelle cinétique grâce à l'avantage consistant de la visualisation individuelle de la particule microscopique chargée [5].

Introduction générale

De nombreux travaux, tant expérimentaux que théoriques, ont été consacrés à l'étude des propriétés de la cristallisation des grains de poussière, ainsi que leur dépendance de certaines caractéristiques intrinsèques, telles que la charge, la masse et la taille [6-9]. Ces dernières peuvent affecter la portée de l'interaction inter-grains et donc, les propriétés structurales des cristaux formés dans les plasmas complexes. Par ailleurs, la modélisation de l'interaction entre les grains ainsi que l'étude des effets de taille et de charge sur la portée de cette interaction reste à l'ordre du jour.

Le travail présenté dans ce mémoire s'inscrit dans le cadre de la modélisation et la simulation numérique du phénomène de cristallisation des particules chargées dans un système complexe fortement couplé. Nous nous intéressons à l'étude de l'effet de l'agitation thermique sur les configurations de l'état fondamental des cristaux coulombiens formés dans les plasmas poussiéreux, ainsi que les transitions de phase. Nous nous basons sur des propriétés microscopiques pour remonter aux propriétés macroscopiques du système.

Le système étudié est donc un plasma complexe de laboratoire ayant un nombre de grains de poussière limité ($N < 500$), maintenus dans un espace limité à deux dimensions, par un confinement parabolique électrostatique. La charge moyenne du grain est considérée négative et constante. Notre système obéit à un modèle physique classique qui tient compte à la fois, de l'interaction entre les grains chargés et du potentiel de confinement appliqué. Notre étude numérique est basée sur la méthode de simulation de Monte Carlo combinée avec la méthode d'optimisation de Newton.

Nous commençons par présenter l'état de l'art. Puis nous présentons dans le premier chapitre, l'ensemble des propriétés fondamentales des plasmas complexes fortement couplés. Le chapitre deux sera consacré au modèle physique utilisé et le chapitre trois à la méthode de simulation de Monte Carlo. Enfin dans le chapitre quatre, nous présentons les résultats obtenus par notre code de calcul. Nous terminons notre manuscrit par une conclusion.

ETAT DE L'ART

En 1929 et lors de la célébration du centenaire de l'Institut Franklin de Philadelphie (USA), Tonks et Langmuir publiaient le premier travail sur le 'plasma' pour décrire un gaz ionisé et produit par une décharge électrique continue dans un tube en Pyrex. Le terme plasma représente un gaz macroscopiquement neutre contenant beaucoup de particules chargées en interaction (électrons et ions) et de particules neutres [10].

En 1950, les chercheurs publiaient les premières études sur les plasmas poussiéreux (complexes). Les microparticules solides (grains) dans les plasmas poussiéreux étaient considérées isolées avec des interactions mutuelles négligeables entre eux. Il est à noter qu'au début, les travaux sur les plasmas poussiéreux n'étaient pas liés directement aux aspects industriels mais beaucoup liés au domaine de l'astrophysique car les grains de poussière déterminent les propriétés des nuages interstellaires et jouent un rôle important dans la formation du système solaire, des étoiles et des planètes. La présence de ces extra-particules, dont la dimension est de l'ordre du micro, rend la nature des systèmes plasmas beaucoup plus complexe et beaucoup plus difficile à cerner; il y a beaucoup des effets collectifs qui doivent être étudiés dans les futures applications astrophysiques des plasmas complexes.

Avant les années 90, le nombre de publications sur les plasmas poussiéreux ne dépassait pas les 20-30 articles par année. Puis, trois grandes découvertes ont changé cette situation d'une façon significative; Ces découvertes sont basées sur la condition de l'importance accordée aux interactions des grains les uns avec les autres d'une part, et d'autre part avec les autres composantes du plasma [2]. Ces interactions rendent le système dans un état complexe où les grains forment un liquide ou un solide cristallin. A la fin des années 90, le nombre de publications dans ce domaine de plasma complexe a augmenté à environ 300-400 articles par année, comme le montre la figure 1. Cet intérêt toujours croissant a donné lieu à une littérature considérable, riche et variée. Beaucoup de livres sont apparus donnant soit une vue d'ensemble soit traitant d'un aspect précis ou particulier. La croissance rapide de ce domaine de recherche indique clairement que la compréhension des processus fondamentaux et élémentaires en même temps, est toujours au début.

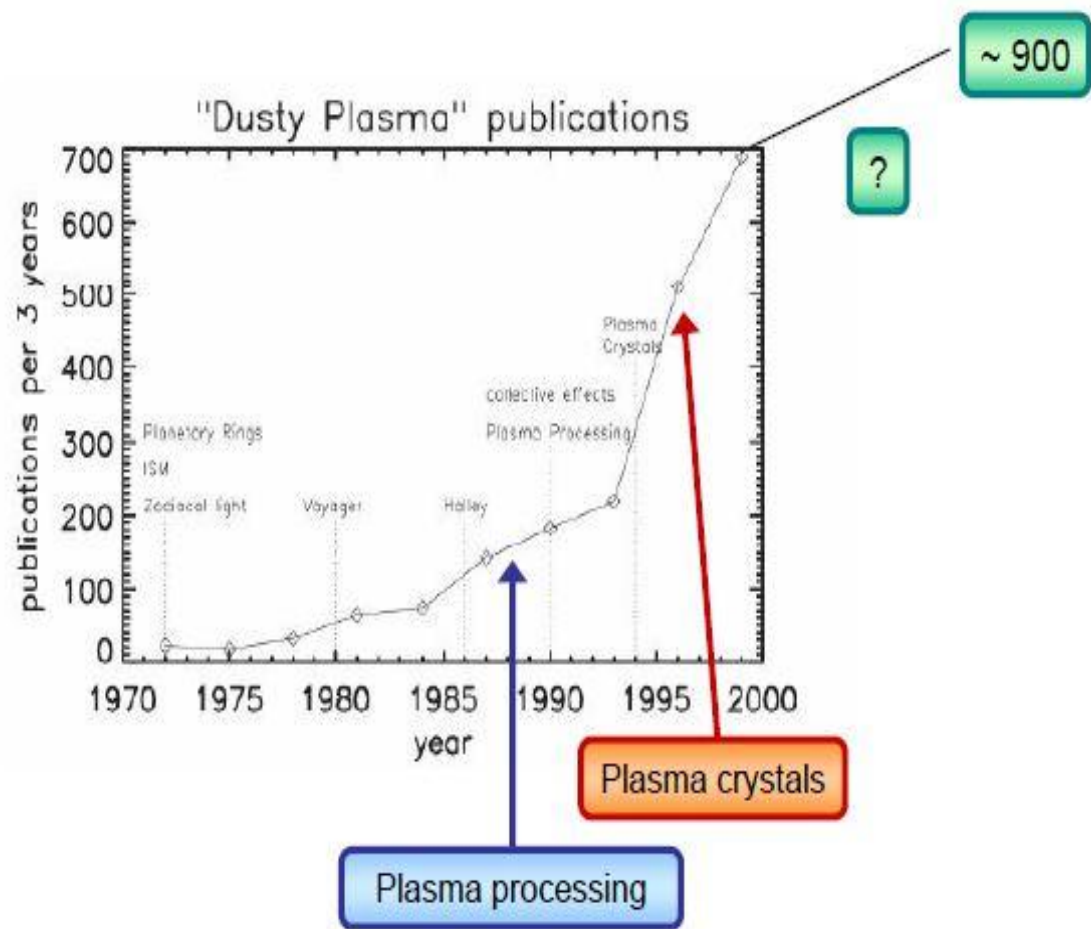


Figure 1: Evolution du nombre de publications dans le domaine des plasmas complexes.

D'après les fondements théoriques de Wigner (1934) [11], il y a possibilité de formation de cristaux par des électrons, des ions et des particules colloïdales. Dès lors, la physique des plasmas fortement couplés se présente comme un domaine intermédiaire entre la physique de la matière condensée et la physique des milieux ionisés. Théoriquement, la possibilité de formation des solides cristallins et des liquides coulombiens dans les plasmas de laboratoire, a été démontrée pour la première fois par Ikezi en 1986 [12]. Depuis l'année 1994, les développements expérimentaux ont dépassé les études et les analyses théoriques. En effet, c'est à cette époque que l'observation des cristaux coulombiens à l'œil nu a été rendue possible.

Nous mentionnons maintenant dans un ordre chronologique, les trois découvertes majeures qui ont pu changer le sens de la recherche dans la physique des plasmas complexes [2]. Au début des années 90, des problèmes sérieux de contamination des substrats ont été rencontrés dans les procédés industriels de traitement et de fabrication (traitement de surface, gravure, fabrication des puces informatiques,...etc.). Ils ont découvert que la présence des nuages de grains suspendus et en fortes interactions peut être à l'origine de dysfonctionnement des dispositifs électroniques. Ensuite au milieu des années 90, quatre groupes d'expérimentateurs, dans différents pays, ont découvert simultanément que l'interaction forte entre les grains dans un plasma peut conduire à la formation des cristaux et des liquides coulombiens (appelés aussi cristaux plasma ou liquides plasma). Enfin, à la fin des années 90, ils se sont rendus compte que, pour les futures programmes de production de l'énergie dans les dispositifs de fusion contrôlée, le flux d'énergie vers les parois des dispositifs crée une grande quantité de grains de poussière radioactifs.

Expérimentalement, les cristaux de plasma ont été observés par les équipes de:

- Chu et al. [13] (la Chine) dans une décharge RF d'Argon faiblement ionisée avec des particules SiO_2 de diamètre 10 μm chargées négativement. Les cristaux et les liquides coulombiens ont été observés pour la première fois par un microscope optique.
- Thomas et al. [14] (l'Allemagne) dans un plasma d'Argon faiblement ionisé et un nuage de particules de poussière de taille 7 μm chargées et suspendues. Le cristal formé est visible à l'œil nu et les particules sont refroidies par un gaz neutre à 310K, et leur charge est $> 9800e$, correspondant à un paramètre de couplage coulombien $\Gamma > 20700$.
- Melzer et al. [15] (l'Allemagne) ont observé des réseaux hexagonaux coulombiens formés par des grains de poussière immergés dans une décharge RF d'Hélium à plaques parallèles. Le cristal est en état solide à une pression de gaz $> 120 \text{ Pa}$ et à une faible puissance de décharge (10 à 20 W).
- Vladimirov et al. [16] (l'Australie) à l'université de Sydney.

Etat de l'art

Depuis la fin des années 90, une forte collaboration entre les chercheurs de ce domaine a été remarquée et le nombre de travaux est toujours croissant jusqu'à nos jours.

CHAPITRE I

GENERALITES

I.1 Introduction

L'état plasma de la matière est très répandu dans la nature et représente plus de 99% de la matière de l'univers. Un plasma est un gaz ionisé constitué d'électrons, d'ions et d'atomes neutres. Un plasma complexe ou poussiéreux est un plasma qui contient des grains de poussière massifs, de forme et de taille différentes où le rayon varie du nanomètre au micromètre. Les grains de poussière dans un plasma acquièrent une charge négative élevée (de l'ordre de 10^3e à 10^4e) grâce à la grande mobilité des électrons. En revanche, ils peuvent se charger positivement par d'autres processus de charge, comme la photoémission et l'émission des électrons à partir de la surface des grains [1-3].

La compréhension des propriétés des plasmas complexes est d'une grande importance pour l'étude des phénomènes physiques fondamentaux, comme la cinétique des transitions de phases, les processus d'organisation dans des structures régulières et la décontamination des dispositifs de fabrication des semi-conducteurs. La recherche dans les plasmas complexes a connu aussi des efforts considérables dans le domaine de la physique des surfaces et dans certains domaines de nanotechnologie; les plasmas complexes permettent également le dépôt de matériaux nanostructures. Il est important de noter que l'ensemble des phénomènes existants dans les plasmas complexes sont décrits par les propriétés fondamentales suivantes:

I.2 Paramètre de couplage

Une considération importante dans l'étude des plasmas poussiéreux est de savoir si les grains sont fortement ou faiblement couplés. Cette distinction fait référence au couplage entre les grains. Ce dernier est caractérisé par un paramètre Γ , défini comme étant le rapport entre l'énergie coulombienne écrantée (de type Yukawa) de l'interaction inter-grains et l'énergie thermique des grains [4]:

$$\Gamma = \frac{Z^2 e^2 \exp(-a/\lambda_D)}{4\pi\epsilon_0 a k_B T}, \quad \text{I.1}$$

où Ze est la charge moyenne d'un grain, a est la distance moyenne entre les grains, λ_D est la longueur d'écrantage de Debye et T est la température correspondante à l'énergie cinétique des grains.

Un plasma poussiéreux peut être considéré faiblement corrélé aussi longtemps que $\Gamma \leq 1$. Toutefois, lorsque $\Gamma \gg 1$ et $(a/\lambda_D) \leq 1$, le plasma poussiéreux est considéré fortement corrélé et les effets collectifs entre grains chargés deviennent importants et significatifs ($r \ll a < \lambda_D$, où r est le rayon moyen des grains). Dans ce cas, les grains de poussière chargés peuvent être assimilés à des particules ponctuelles massives semblables à des ions à charge multiple dans un plasma à plusieurs espèces.

Il est à noter que le phénomène de cristallisation coulombienne aura lieu si le paramètre Γ dépasse une certaine valeur critique. Par exemple, pour un plasma à une seule composante avec une interaction coulombienne sans l'effet d'écran, la valeur critique $\Gamma_c = 172$ a été donnée par la simulation numérique. Pour un plasma complexe, cette valeur critique de Γ est beaucoup plus large à cause de la charge élevée des grains et leur température basse.

Le paramètre de couplage dépend essentiellement de deux propriétés des grains, il s'agit de la longueur de Debye et des courants de charge.

I.3 Longueur de Debye

Les grains de poussière injectés dans le plasma de laboratoire à basse température, se chargent négativement par la collection des électrons grâce à leur grande mobilité. Un potentiel électrique se crée au niveau de la surface et attire les ions positifs. La sphère d'ions qui se forme autour du grain est appelée sphère de Debye et son rayon est appelé longueur de Debye λ_D (voir Fig. I.1). Au delà de cette distance, le champ électrique produit par la charge du grain est écranté de façon significative. L'expression de λ_D peut être déduite de l'équation de Poisson autour d'une charge et en prenant une distribution de Boltzmann pour les électrons et les ions qui entourent la particule test.

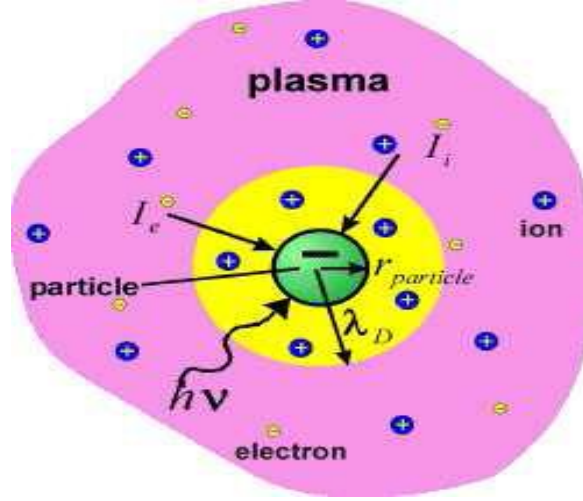


Figure I.1 : Ecrantage des grains de poussière chargés négativement dans un plasma complexe de laboratoire.

La longueur de Debye λ_D d'un plasma poussiéreux est donnée par:

$$\lambda_D = \frac{\lambda_{De} \lambda_{Di}}{\sqrt{\lambda_{De}^2 + \lambda_{Di}^2}}, \quad \text{I.2}$$

où $\lambda_{De,i} = (T_{e,i}/4\pi n_{e,i0} e^2)^{1/2}$ représente la longueur de Debye électronique (ionique), $T_{e,i}$ la température électronique (ionique) exprimée en unité d'énergie, $n_{e,i0}$ la densité électronique (ionique) à l'équilibre et e est la charge élémentaire.

Un plasma poussiéreux possède trois échelles de longueur caractéristiques, à savoir le rayon du grain r , la longueur de Debye λ_D et la distance moyenne inter-grains a . Il est à noter que le rayon r est généralement petit devant la longueur λ_D . Lorsque $r \ll \lambda_D \ll a$, les grains sont considérés isolés. Par contre, dans le cas où $r \ll a < \lambda_D$, les effets collectifs deviennent importants.

I.4 Charge des grains de poussière

Dans les plasmas de laboratoire de basses températures, la charge des grains de poussière est principalement négative lorsque les électrons du plasma sont collectés par la surface du grain et donc perdus par le plasma. L'équation d'évolution temporelle de la charge du grain, Q , est déterminée à partir de la conservation de la charge électrique et alors donnée par:

$$\frac{\partial}{\partial t} Q = I_e + I_i, \quad \text{I.3}$$

où I_e et I_i sont les courants électronique et ionique du plasma. Il est important de noter que l'équation (I.3) traduit la variation de la charge des grains considérés figés dans le plasma (nous nous intéressons à un plasma poussiéreux fortement corrélé). Les expressions des courants I_e et I_i à l'équilibre sont données par:

$$I_{e0} = -n_{e0} e \pi r^2 \sqrt{\frac{8k_B T_e}{\pi m_e}} \exp\left(\frac{eQ}{rk_B T_e}\right) \quad \text{I.4}$$

$$I_{i0} = n_{i0} e \pi r^2 \sqrt{\frac{8k_B T_i}{\pi m_i}} \left(1 - \frac{eQ}{rk_B T_i}\right) \quad \text{I.5}$$

où $T_{e(i)}$, $m_{e(i)}$, $n_{e(i)0}$ représentent respectivement la température, la masse, la densité à l'équilibre des électrons (ions) et $v_{te(i)} = (k_B T_{e(i)} / m_{e(i)})^{1/2}$ représente leur vitesse thermique correspondante.

Dans le cas où la charge moyenne du grain est constante, l'équilibre entre les courants électronique et ionique nous permet d'obtenir la relation:

$$1 - \frac{eV}{k_B T_i} = \sqrt{\frac{m_i T_e}{m_e T_i}} \frac{n_{e0}}{n_{i0}} \exp\left(\frac{eV}{k_B T_e}\right), \quad \text{I.6}$$

à partir de laquelle il est possible de déterminer numériquement le potentiel V de la surface d'un grain de poussière isolé.

Pour un plasma de laboratoire typique avec $T_e \gg T_i$ et $n_i = n_e$, le grain sera porté à un potentiel $V \approx -2k_B T_e / e$. La charge moyenne d'un grain Q est reliée à son potentiel de surface par:

$$Q = CV \quad \text{I.7}$$

où le grain est assimilé à un condensateur sphérique de capacité $C = r$ et donc $Q = r V$.

La charge d'une particule de poussière trouve son origine dans une variété de processus. Citons quelques processus de charge où les grains peuvent acquérir une charge positive:

- Emission photo-électronique induite par des rayons ultraviolets (UV).
- Emission thermo-ionique dans le cas de grains chauffés à l'aide d'un laser par exemple.
- Emission d'électrons secondaires causée par la collision entre le grain et les autres particules du plasma.

I.5 Forces agissant sur un grain de poussière

Afin de comprendre le confinement et la dynamique d'un grain de poussière immergé dans un plasma, différentes forces exercées sur le grain sont importantes (voir Fig. I.2). Nous citons:

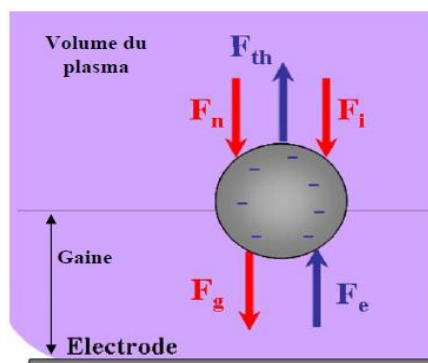


Figure I.2 : Représentation schématique des forces importantes exercées sur un grain de poussière dans un environnement plasma.

I.5.1 Force de gravité

Une particule de poussière est soumise à la force de gravité

$$\vec{F}_g = m_d \vec{g} = \left(\frac{4}{3}\pi r^3 e \rho_d\right) \vec{g} \quad \text{I.8}$$

où m_d (ρ_d) est la masse (masse volumique) du grain et $\vec{g}$ est l'accélération de gravité. Pour les grandes particules, la dépendance entre le volume du grain et la force gravitationnelle rend cette dernière plus significative devant les autres forces.

I.5.2 Force électrostatique

Dans un plasma de laboratoire radiofréquence (RF), un champ électrique intense existe au voisinage des électrodes dû à la différence de mobilité des électrons et celle des ions. L'effet de ce champ électrique moyen $\vec{E}$ sur une particule de poussière est traduit par la relation:

$$\vec{F}_e = Q \vec{E} \quad \text{I.9}$$

A cause de la charge élevée Q , la force coulombienne est importante pour le confinement de la particule ainsi que pour son interaction électrostatique.

I.5.3 Force thermophorèse

Cette force est due au gradient de température dans le gaz des particules neutres [5]. La quantité de mouvement des neutres incidents sur le grain venant du côté chaud est plus grande que celle des neutres venant du côté froid. Il s'en établit un gradient de température de gaz des neutres, $\vec{\nabla}T_n$, qui crée une force qui pousse les grains vers la région froide. L'expression de cette force est:

$$\vec{F}_{th} = -\frac{16}{15} \sqrt{\pi} \frac{r^2 k_n}{v_{th,n}} \vec{\nabla}T_n \quad \text{I.10}$$

où k_n est la part translationnelle de la conductivité thermique des neutres et $v_{th,n}$ leur vitesse thermique.

I.5.4 Force de friction des ions

La force de friction $\overrightarrow{F_{ion}}$ (ou d'entraînement) des ions est engendrée par les collisions entre la population des ions et les grains de poussière chargés. Cette force décrit le transfert de quantité de mouvement des ions vers les grains. Une formulation générale de cette force est donnée par:

$$\overrightarrow{F_{ion}} = n_{i0} m_i \int_{-\infty}^{+\infty} \overrightarrow{v_i} |\overrightarrow{v_i}| \sigma_{d,mi}(|\overrightarrow{v_i}|) f(\overrightarrow{v_i}) d^3 \overrightarrow{v_i} \quad \text{I.11}$$

où $\overrightarrow{v_i}$ est la vitesse relative des ions par rapport au grain, $\sigma_{d,mi}(|\overrightarrow{v_i}|)$ est la section efficace de transfert de la quantité de mouvement des ions et $f(\overrightarrow{v_i})$ est la distribution tridimensionnelle en vitesse des ions, dans le référentiel du grain.

I.5.5 Force de friction des atomes neutres

Cette force qui est due aux collisions entre le grain et les atomes neutres ne peut pas être négligée. Elle reflète le transfert d'une quantité de mouvement des atomes au grain lorsqu'il y a une différence de leurs vitesses.

$$\overrightarrow{F_n} = 6\pi\eta r (\overrightarrow{v_n} - \overrightarrow{v_d}) \quad \text{I.12}$$

où $\overrightarrow{v_n}$ est la vitesse moyenne des atomes, $\overrightarrow{v_d}$ est celle du grain et η est la viscosité du gaz des atomes.

I.6 Elaboration d'un plasma poussiéreux fortement couplé

Afin d'étudier un plasma poussiéreux en laboratoire, il faut de toute évidence commencer par le produire. La procédure de production consiste premièrement à choisir le plasma de base et deuxièmement à ajouter les grains au plasma. Le choix du plasma est relativement libre mais par mesure de simplicité, nous utilisons le plus souvent un plasma froid à basse pression qui peut être créé par une décharge continue ou radiofréquence dans un gaz. Quand à la création des grains dans le plasma, différentes techniques existent :

- Injection artificielle de grains de poussière directement dans le plasma.
- Formation de grains de poussière par ajout d'un gaz réactif (SiH_4 ; CH_4).
- Formation de grains de poussière par pulvérisation d'une cible.

Un plasma poussiéreux (complexe) se crée dans deux réacteurs connus: le réacteur Silane et le réacteur PKE-Nefedov. Le plasma obtenu dans ces deux réacteurs est celui d'argon basse pression créé par une décharge radiofréquence (13.56 MHz) à couplage capacitif. La différence entre les plasmas poussiéreux obtenus est principalement due à la géométrie des réacteurs et aux paramètres expérimentaux choisis.

- Réacteur Silane

Dans ce réacteur, les grains de poussière sont formés par un ajout d'un faible pourcentage de silane (SiH_4) dans l'argon. Le réacteur est surtout utilisé pour la synthèse de nanocristaux de silicium (<10 nm) pour les applications industrielles. La majorité des études menées sur le silane a pour but de comprendre et de maîtriser la croissance de ces nanocristaux [17].

- Réacteur PKE-Nefedov

Dans ce réacteur, les grains de poussière sont formés soit par pulvérisation d'un matériau préalablement déposé sur l'électrode inférieure, soit par injection des grains de mélamine dans le réacteur, grâce à un introducteur inséré dans l'électrode supérieure. Ce réacteur est principalement dédié à l'étude du comportement et de la cristallisation du nuage des grains de poussière [18].

Afin de caractériser les plasmas poussiéreux de laboratoire, différents processus basés sur les caractéristiques électriques de la décharge, sont utilisés. Des processus optiques, telle que la spectroscopie d'émission optique, sont également utilisés afin d'identifier les différentes espèces chimiques présentes dans le plasma et de suivre leur évolution au cours de la croissance des grains. Dans le but de visualiser le nuage de grains, des caméras CCD (*charge-coupled device*) standards ou rapides sont utilisées. Pour cela, les grains sont éclairés par un faisceau ou une nappe laser. La diffusion de la lumière laser par ces grains est alors détectée par les caméras. Les grains formés sont

Chapitre I: Généralités

également analysés par des techniques de microscopie. La taille et la densité de grains peuvent ainsi être déduites par microscopie électronique à balayage (MEB) et leur structure par microscopie électronique en transmission à haute résolution (HRTEM).

CHAPITRE II

MODELISATION D'UN PLASMA CRISTALLIN

II.1 Introduction

De nombreuses études, tant expérimentales que numériques, ont fait l'objet de l'investigation des structures ordonnées (2D) formées par les grains de poussière et ont mis en évidence l'importance de l'interaction inter-grains et du potentiel de confinement appliqué, sur la dynamique des plasmas poussiéreux fortement couplés. Les propriétés dynamiques d'un système physique complexe sont dictées par le comportement de chaque particule du système et par son interaction avec les autres particules. Un tel cristal coulombien (2D) est déterminé par un compromis entre l'interaction inter-grains et le potentiel de confinement. La relation entre les échelles microscopique et macroscopique semble être l'issue clé pour l'obtention des principales caractéristiques de ces interactions et par conséquent, du modèle de description.

La compréhension et description de l'interaction inter-grains requière la connaissance de tous les mécanismes mis en jeu dans le plasma. Plusieurs groupes de recherche ont réalisé des études expérimentales dans le but de produire des poussières dans différents mélanges gazeux. Ils expliquent, grâce à des modèles et des analyses qualitatives, la cinétique de formation des grains de poussière. Dans un plasma de laboratoire, un flux d'ions fort se trouve généralement dans la gaine de plasma. En raison d'équilibre des forces de champ électrique et gravitationnel, les grains de poussière sont généralement confinés dans une région de gaine plasma, cette région est idéale pour étudier l'interaction des grains de poussière dans le flux d'ions, et étudier les configurations de l'état fondamental ainsi que les transitions de phase d'un cristal coulombien bidimensionnel (2D) de grains chargés positivement ou négativement.

Dans cette étude, nous nous intéressons à la modélisation d'un plasma cristallin bidimensionnel (2D) avec un nombre de grains fini. Les grains sont considérés de taille constante et de charge moyenne négative constante. Notre objectif est de déterminer par la simulation numérique les propriétés statique et dynamique des structures cristallines (2D) finies formées par des particules chargées [19-21].

II.2 Potentiel de confinement

Le confinement dans un plasma astrophysique, est soit gravitationnel (la plupart des étoiles sont des plasmas confinés par la gravité) ou bien magnétique (ceintures de radiations dans la magnétosphère terrestre). Dans un plasma de laboratoire, différentes configurations magnétique et électrique sont utilisées. Par exemple, les anneaux de stockage, les pièges de Paul, le potentiel électrostatique dans les décharges radiofréquence (RF) et courant-continu (DC), ou simplement un confinement par la paroi.

Les grains de cristaux coulombiens sont suspendus (confinement latéral) au-dessus de l'électrode inférieure dans une région où les différentes forces exercées sur le grain se compensent (en général, un équilibre entre la force électrique et celle de gravité). La combinaison de ces forces conduit à un potentiel qui permet le confinement vertical des grains, à une hauteur z_0 par rapport à la gaine du plasma. Cette distance z_0 dépend de la masse du grain.

Afin d'empêcher l'expansion radiale et limiter le domaine spatial du plasma cristallin fini, un confinement électrostatique horizontal est appliqué. La symétrie de ce dernier est définie par l'abaissement de la surface de l'électrode ou par la forme d'une plaque métallique posée sur l'électrode. Dans le cas d'un confinement parabolique 2D (isotropique), le potentiel est donné par:

$$V_c(r_i) = \frac{1}{2} m_d w^2 r_i^2 \quad \text{II.1}$$

où $r_i(x_i, y_i)$ est la position du i -ème grain par rapport au centre du confinement et w est la fréquence de résonance du potentiel de confinement appliqué.

II.3 Potentiel d'interaction inter-grains

Dans les plasmas de laboratoire à basse température et par effet d'écrantage de l'environnement du plasma, l'interaction entre les grains n'est pas toujours de type coulombien pur. Elle est caractérisée par un paramètre d'écrantage k qui joue un rôle crucial dans la détermination des propriétés d'un plasma cristallin. Dans ce cas, le potentiel d'interaction inter-grains est de type Debye-Hückel ou Yukawa. Beaucoup de

travaux expérimentaux et théoriques ont été effectués pour étudier l'effet de ces interactions sur l'apparition de nouveaux phénomènes sous les conditions de forte corrélation dans des systèmes 2D et 3D. Nous citons, à titre d'exemple, la formation des structures cristallines de particules chargées, la coexistence des états stables et métastables et les transitions de phase solide-liquide.

Le potentiel de Yukawa caractérise l'interaction de courte portée; dont le nombre de particules prises en compte pour le calcul de la force, est limité par la sphère de Debye. Ce potentiel a la forme suivante:

$$V(r_{ij}) = Z^2 e^2 \frac{\exp(-r_{ij}/\lambda_D)}{r_{ij}} \quad \text{II.2}$$

avec $r_{ij}=|r_i-r_j|$ représente la distance entre les deux grains i et j de l'interaction.

II.4 Hamiltonien du système

Considérons un système classique bidimensionnel (2D) composé de N grains de poussière ($N \leq 500$) immergés dans un plasma partiellement ionisé. Notre système est soumis à un potentiel de confinement parabolique horizontal. Les grains sont supposés sphériques identiques de rayon r_d , de masse m_d et portant une charge négative moyenne constante Ze . Expérimentalement, l'existence d'un plasma poussiéreux nécessite l'injection permanente d'un faisceau de particules neutres pour soutenir le système et pour maintenir la quasi-neutralité de la charge. Le système étudié est un plasma poussiéreux à basse température (plasma complexe fortement corrélé). Ceci permet de considérer les grains comme des particules chargées localisées dans une région de confinement limitée. Dans ce cas, il est possible de décrire le système par son Hamiltonien qui s'écrit comme suit[22]:

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{2} m_d w_i^2 + r_i^2 \right) + \sum_{i \neq j}^N \frac{Z^2 e^2 \exp(-|r_i - r_j|/\lambda_D)}{|r_i - r_j|} \quad \text{II.3}$$

En utilisant les unités appropriées de l'énergie E_0 , de la distance r_0 et de la température T_0 suivantes :

$$E_0 = \left(\frac{Z^2 e^2}{\varepsilon} \right)^{2/3} \gamma^{1/3}, \text{II.4}$$

$$r_0 = \left(\frac{Z^2 e^2}{\varepsilon} \right)^{1/3} \gamma^{-1/3}, \quad \text{II.5}$$

$$T_0 = \frac{E_0}{k_B}, \quad \text{II.6}$$

l'Hamiltonien de l'Eq. (II.3) sous la forme adimensionnelle, devient:

$$H = \sum_{i=1}^N r_i^2 + \sum_{i \neq j}^N \frac{\exp(-k|r_i - r_j|)}{|r_i - r_j|} \text{II.7}$$

où ε est la constante diélectrique du milieu dans lequel se trouvent les grains. La constante γ ($\gamma = m_d w^2 / 2$) représente l'énergie de confinement d'un seul grain. La charge (Ze) est la charge moyenne du grain à l'équilibre. Le terme k ($k = r_0 / \lambda_D$) définit le paramètre d'écrantage des grains.

Il est à noter que pour des grains de poussière à charge constante, la nature et la taille n'interviennent pas dans l'Hamiltonien normalisé du système (Eq. II.7). Ce dernier décrit d'une façon remarquable les propriétés statiques et dynamiques d'un système complexe 2D fini de particules chargées fortement corrélées et confinées. Dans notre étude, une méthode numérique de simulation est nécessaire pour déterminer les configurations de l'état fondamental du système à partir de l'optimisation de son énergie totale.

CHAPITRE III
TECHNIQUE DE SIMULATION
MONTE CARLO

III.1 Introduction

En physique statistique de la matière condensée, deux techniques de simulation numérique sont utilisées: La méthode probabiliste de Monte Carlo (MC) et la méthode déterministe (en temps réel) dynamique moléculaire (MD). Le principe de ces deux méthodes est de déterminer les propriétés macroscopiques du système à partir d'une description microscopique des potentiels d'interaction entre les différentes particules. La simulation numérique a connu un grand progrès pour les systèmes complexes fortement couplés où elle représente actuellement une alternative pour l'expérience. Vu le développement rapide des moyens de calcul, le recours à la simulation se fait de plus en plus.

Un plasma cristallin est un système complexe qui présente des phénomènes réels non-linéaires. Un petit changement d'une variable peut produire un grand changement d'une autre variable. Dans ce travail, nous utilisons la technique de simulation MC [23] basée sur l'algorithme standard de Metropolis [24] et combinée avec la méthode numérique d'optimisation de Newton afin de trouver les configurations d'équilibre stable du système. Nous présentons dans ce qui suit, le principe de la méthode MC, l'algorithme de Metropolis et l'approche numérique appliquée.

III.2 Principe de la méthode Monte Carlo

La méthode MC est une technique stochastique; son principe est basé sur des tirages aléatoires pour calculer une quantité déterministe. Son avantage est qu'elle est insensible à la dimension du problème étudié. Cette méthode est en général limitée au calcul des grandeurs statiques puisque seule la partie configuration de l'espace des phases est explorée et que le temps n'est pas une variable explicite.

Le problème de l'estimation d'une intégrale du type:

$$I = \int_a^b f(x) dx , \quad \text{III.1}$$

peut être reformulé en terme de calcul d'une moyenne. En choisissant aléatoirement, mais selon une distribution uniforme, n points le long de l'intervalle $[a,b]$ et en calculant

Chapitre III : Technique de simulation Monte Carlo

en chaque point i , la valeur de la fonction $f(x_i)$, nous obtenons une estimation de l'intégrale donnée par:

$$I \simeq \frac{(b-a)}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i) \quad \text{III.2}$$

L'échantillonnage utilisé est homogène, c'est-à-dire que tous les points choisis sont compris entre a et b .

La convergence de la méthode MC peut être estimée en calculant la variance, σ^2 , de la somme I^2 :

$$\sigma^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\langle f(x_i)^2 \rangle - \langle f(x_i) \rangle^2) \quad \text{III.3}$$

Pour obtenir une convergence plus rapide, nous utilisons une méthode appelée échantillonnage suivant l'importance. Cette méthode consiste à générer des nombres aléatoires dans une distribution non uniforme qui échantillonne mieux les régions où l'intégrale est importante. Considérons une densité de probabilité (distribution de poids) non uniforme, $\rho(x)$, normalisée dans l'intervalle $[a,b]$ et que l'on sait intégrer analytiquement:

$$\int_a^b \rho(x) dx = 1 \quad \text{III.4}$$

Si nous définissons une variable aléatoire : $dz = \rho(x) dx$ avec $z(a)=a$ et $z(b)=b$, nous pouvons réécrire I sous la forme suivante :

$$I = \int_a^b \frac{f(x(z))}{\rho(x(z))} dz \quad \text{III.5}$$

Nous avons alors une estimation de l'intégrale qui est donnée par:

$$I \simeq \frac{(b-a)}{n} \sum_{i=1}^n \frac{f(x(z_i))}{\rho(x(z_i))} \quad \text{III.6}$$

Pour que la méthode soit utilisable et que la variance soit faible, ρ doit également être simple afin que l'on puisse l'intégrer analytiquement et doit donc être proche de f (rapport f/ρ aussi constant que possible).

III.3 Algorithme de Metropolis

L'algorithme de Metropolis a pour objectif de générer des états (r_i^N) distribués suivant la densité de probabilité normalisée et non-uniforme ρ . Dans un ensemble statistique, cette densité est donnée par :

$$\rho(r_i^N) = \frac{\exp(-\beta H(r_i^N))}{Z} \quad \text{III.7}$$

où $\beta = 1/k_B T$ (k_B est la constante de Boltzmann, T la température du système et H son Hamiltonien). La fonction de partition, Z , de l'ensemble statistique est définie par :

$$Z = \sum_{i=1}^n \exp(-\beta H(r_i^N)) \quad \text{III.8}$$

Nous sommes en mesure de calculer la moyenne statistique d'une grandeur physique $A(r^N)$:

$$\langle A(r^N) \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \rho(r_i^N) A(r_i^N) \quad \text{III.9}$$

Chaque configuration i fait référence à un état accessible de l'espace des phases. Dans cette approche, il est important de noter que:

- Les différents états successifs ne suivent pas une évolution temporelle régie par l'équation de Newton.
- Nous choisissons un processus Markovien stationnaire, où chaque état ne dépend explicitement que de l'état précédent et appartient à un ensemble fini d'états appelé espace des états.
- L'ordre dans lequel les états se succèdent n'a aucune signification physique.

Dans le calcul de la valeur moyenne de A d'un système de N particules, une matrice de transition $W(i \rightarrow j)$ est construite, elle donne les probabilités de transition d'une

configuration i à une configuration j . Le processus stochastique élémentaire de l'algorithme est la succession de deux étapes :

A partir d'une configuration i , nous tirons au hasard une configuration j , avec une probabilité $\alpha(i \rightarrow j)$ et une condition de micro-réversibilité: $\alpha(i \rightarrow j) = \alpha(j \rightarrow i)$.

- Cette nouvelle configuration est acceptée avec une probabilité $\Pi(i \rightarrow j)$.

Ainsi, nous avons

$$w(i \rightarrow j) = \alpha(i \rightarrow j)\Pi(i \rightarrow j) \text{ III.10}$$

Le choix pour $\Pi(i \rightarrow j)$ qui satisfait la condition:

$$\frac{\Pi(i \rightarrow j)}{\Pi(j \rightarrow i)} = \frac{\rho_j}{\rho_i} = \exp(-\beta(H_j - H_i)) \text{ III.11}$$

avec: $\Pi(i \rightarrow j) \in [0,1]$, a été donné par Metropolis et al.

$$\begin{cases} \Pi(i \rightarrow j) = \exp(-\beta(H_j - H_i)) & \text{si } H_j > H_i \\ \Pi(i \rightarrow j) = 1 & \text{si } H_j \leq H_i \end{cases} \text{ III.12}$$

H_i (H_j) est l'énergie du système pour la configuration i (j) à l'état d'équilibre.

- Si $H_j \leq H_i$, la nouvelle configuration j est acceptée.
- Si $H_j > H_i$, la configuration j doit être acceptée avec une certaine probabilité $\exp(-\beta\Delta H_{ij})$. Dans ce cas, un nombre aléatoire ξ compris entre 0 et 1 est introduit et comparé avec la probabilité:
 - Si $\xi < e^{-\beta\Delta H}$, la configuration j est acceptée.
 - Si $\xi > e^{-\beta\Delta H}$, cette configuration est rejetée.

III.4 Approche numérique

Dans ce travail, nous utilisons la méthode MC, basée sur l'algorithme de Metropolis, pour déterminer les configurations de l'état fondamental du plasma cristallin. L'augmentation du nombre de grains de poussière dans le plasma rend le

système plus complexe. Ceci signifie qu'il n'est pas toujours évident d'obtenir par la méthode MC des énergies minimales globales. Dans ce cas là, les énergies calculées sont locales et correspondent aux états métastables du système. L'énergie au minimum local peut être très grande devant celle du minimum global (voir Fig. III.1). En effet, une méthode d'optimisation de Newton est combinée avec la méthode MC afin d'assurer

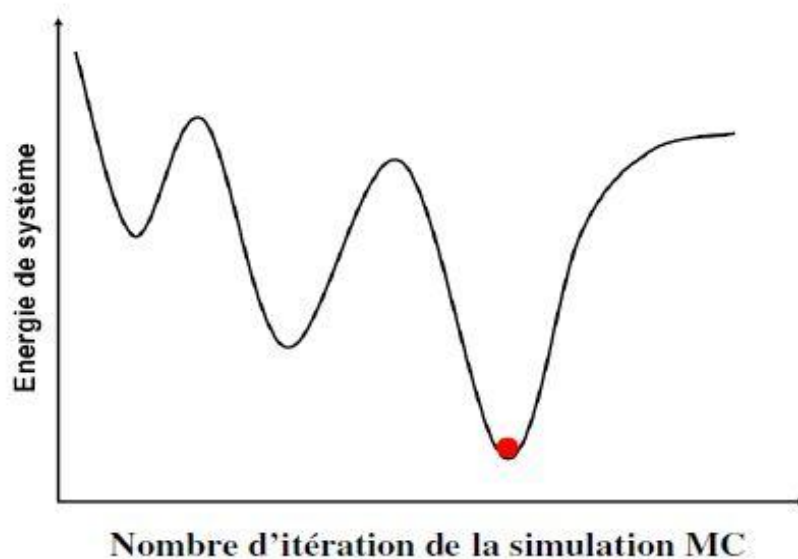


Figure III.1: *Energies locales et globale d'un système physique en fonction du nombre d'itérations de la simulation MC.*

une convergence rapide et obtenir les états stables à partir des états métastables.

L'application de l'algorithme de cette approche numérique se fait en trois étapes principales:

- Un développement de Taylor du second ordre de l'Hamiltonien du système, Eq. (II.7), au voisinage d'une configuration ($r_{\alpha,i}^n$, $\alpha = x, y$; $i = 1, \dots, N$; $n = \text{itération } n \text{ du code}$).
- Minimisation de l'énergie du système: cette condition va permettre la linéarisation du système d'équations obtenu à partir de la première étape.
- Résolution du système d'équations linéaires par la méthode d'élimination de Gauss et par conséquent, l'obtention des configurations d'équilibre.

La convergence du code est garantie à la fois par le calcul au voisinage du minimum global de l'énergie et par un test de convergence des itérations. Le temps d'exécution du

code dépend fortement du nombre de particules et bien sûr de la puissance des outils informatiques.

III.5 Code du calcul

Le code de calcul "ARTIFICIAL_ATOMS_2D" est écrit en langage Fortran 77 et testé. Il donne des résultats qui sont en bon accord avec ceux obtenus expérimentalement ou numériquement. Notre code de calcul contient deux parties principales: première partie est le programme principal et la deuxième partie est l'ensemble des sous programmes (Subroutines) dont le programme a besoin.

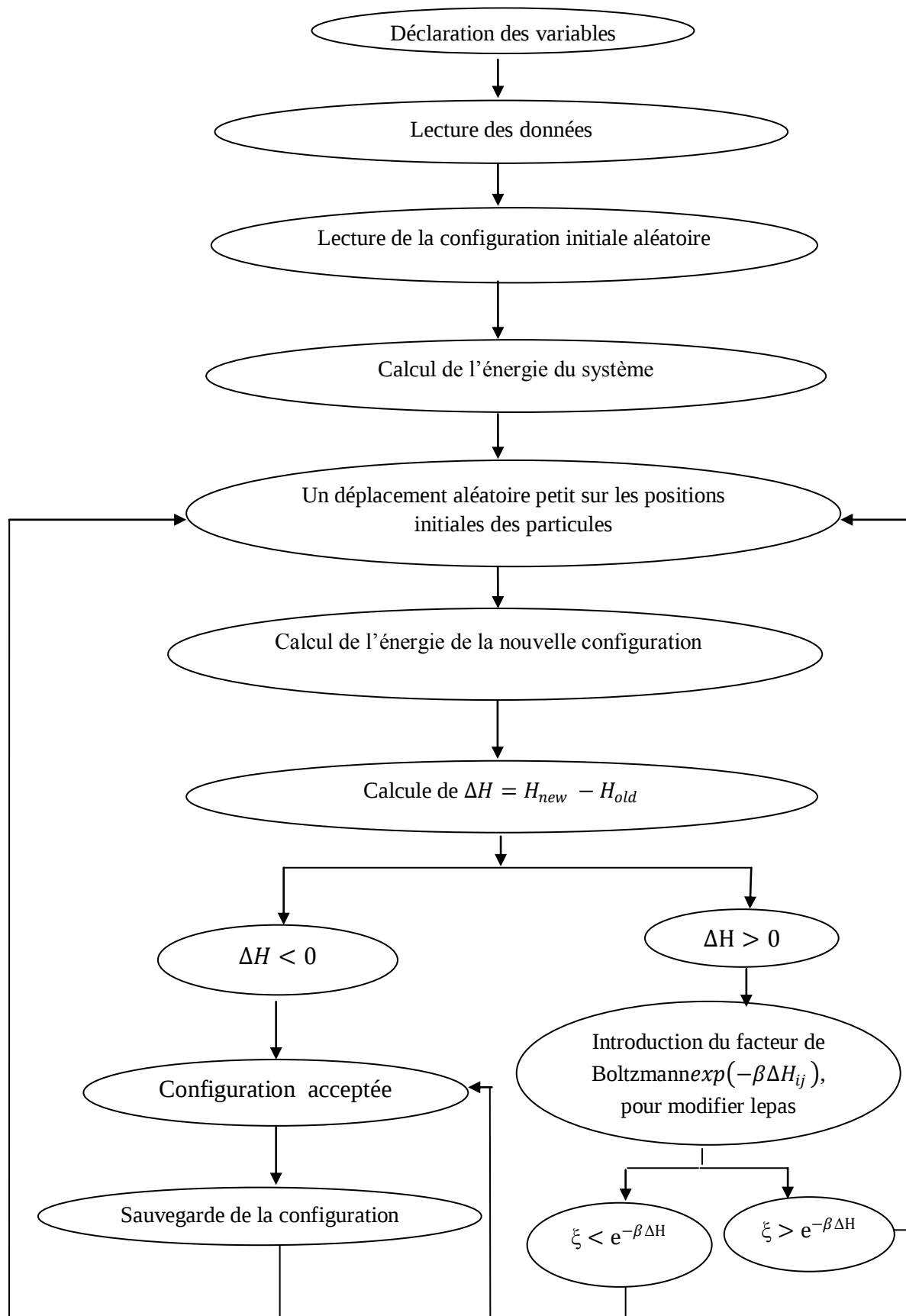
Programme principal: Dans cette partie, nous trouvons:

- déclaration des variables
- lecture des données à partir d'un fichier 'Input'.
- création des fichiers sortie 'output' pour l'écriture des résultats.
- définition de la configuration initiale aléatoirement du système.
- application de la technique de simulation pour trouver la nouvelle configuration stable.

Subroutines: Le code contient plusieurs sous programmes qui sont appelés par le code principal. Les Subroutines sont nommés selon les grandeurs à calculer ou selon la méthode numérique utilisée:

- Subroutine GAUSS: transforme les équations non-linéaires aux équations linéaires.
- Subroutine MATRIX_D: cherche les valeurs propres de la matrice dynamique du système.
- Subroutine HAU_DIAG: diagonalise la matrice dynamique.
- Subroutine ENERGY_Q: calcule l'énergie de la configuration donnée.
- Subroutine DELTA_Q: calcule la différence d'énergie entre deux configurations.
- Subroutine RAND: génère le nombre aléatoire pour la simulation.

III.6 Organigramme du code:



CHAPITRE IV

RESULTATS ET

DESCUSSION

IV.1 Introduction

Nous rappelons qu'en général dans les plasmas poussiéreux, nous avons le régime des paramètres suivants: charge du grain Q ($\sim 10^3 - 10^4 e$) $\gg q_e = -q_i = e$, masse du grain m_d (de l'ordre de quelques μm) $\gg m_e, m_i$, température du grain $T_d \ll T_e$ (quelques eV), T_i ($< T_e$), et densité des grains $n_d \ll n_e, n_i$. Nous avons les considérations suivantes: charge des grains moyenne négative et taille constantes, potentiel d'interaction inter-grains de type Yukawa, potentiel de confinement électrostatique horizontal de symétrie parabolique et nombre de grains N limité jusqu'à 500. Cette limitation du nombre N est due à l'augmentation du temps d'exécution du code de calcul.

Il est important de noter du point de vue de la modélisation et de la simulation, qu'un ensemble de grains avec une charge constante est équivalent à n'importe quel autre système cristallin formé de particules chargées. En effet, les équations du mouvement (Hamiltonien) étant normalisées, aucune des caractéristiques spécifiques des grains n'apparaît. Ceci nous a permis de tester notre code en comparant nos résultats avec ceux de la littérature où un bon accord a été trouvé [25-30].

Nous présentons dans ce qui suit, les résultats principaux obtenus par notre code numérique qui est basé sur l'algorithme de Metropolis pour la simulation de Monte Carlo (MC).

IV.2 Configuration de l'état fondamental

Afin de trouver une configuration de l'état fondamental ou d'équilibre stable du cristal formé par les grains chargés, nous exécutons le code plusieurs fois pour vérifier qu'elle n'a pas changé et qu'elle correspond à une énergie minimale. Le nombre d'itérations de l'algorithme dans le code, en une seule exécution, est de l'ordre de $10^4 - 10^5$ pour atteindre un état d'équilibre. Nous rappelons qu'une configuration à l'état final ne dépend pas du chemin suivi et que cette configuration est acceptée avec une certaine probabilité bien évidemment la plus élevée.

Chapitre IV Résultats et discussion

Sur la figure (IV.1), nous avons représenté une série de configurations de l'état fondamental de six systèmes de $N = 5, 10, 20, 110, 250$ et 400 grains respectivement. Les points dans chaque configuration indiquent les positions des grains de poussière du système par rapport au centre du confinement, le point $(0,0)$. La température normalisée des grains est supposée très basse ($T/T_0 \sim 0$). Nous remarquons qu'une configuration d'équilibre de grains peut être décrite comme une succession de couches (shells) circulaires concentriques, que l'on désigne par $(n_0, n_1, n_2, \dots)$, où n_i est le nombre de grains situés sur la i -ème couche, comptée à partir du centre. La structure en couches résulte du compromis réalisé entre la symétrie circulaire due au confinement et la tendance naturelle de l'ensemble des grains à s'organiser en un réseau symétrique en l'absence de contraintes. Il est à remarquer aussi que l'effet du nombre de grains N est primordial dans la détermination du nombre de couches et du nombre de grains de chaque couche n_i . Par exemple, nous avons pour $N = 5$ (0,5) une seule couche, $N = 10$ (2,8) deux couches et $N = 20$ (2,7,11) trois couches. Quand le nombre N augmente, la structure en couches est difficile à observer à l'intérieur et seulement la dernière ou les deux dernières couches qui sont circulaires. Comme nous l'avons trouvé pour les systèmes $N = 110, 250$ et 400 . Par contre, pour les systèmes de nombre N petit, le nombre des grains sur chaque couche est clair.

Dans le Tableau IV.1, nous présentons les structures en couches à l'état fondamental et à très basse température des différents systèmes, N varie de 5 jusqu'à 200. Quand N augmente, le nombre de couches augmente ainsi que le nombre de grains de chaque couche. Nous avons remarqué que pour $N > 100$, il n'est pas possible de distinguer entre les grains des couches internes. Cependant, le nombre de grains des couches externes (les deux dernières) est possible à compter. Nous avons remarqué aussi que ces couches externes portent exactement, ou presque, le même nombre de grains.

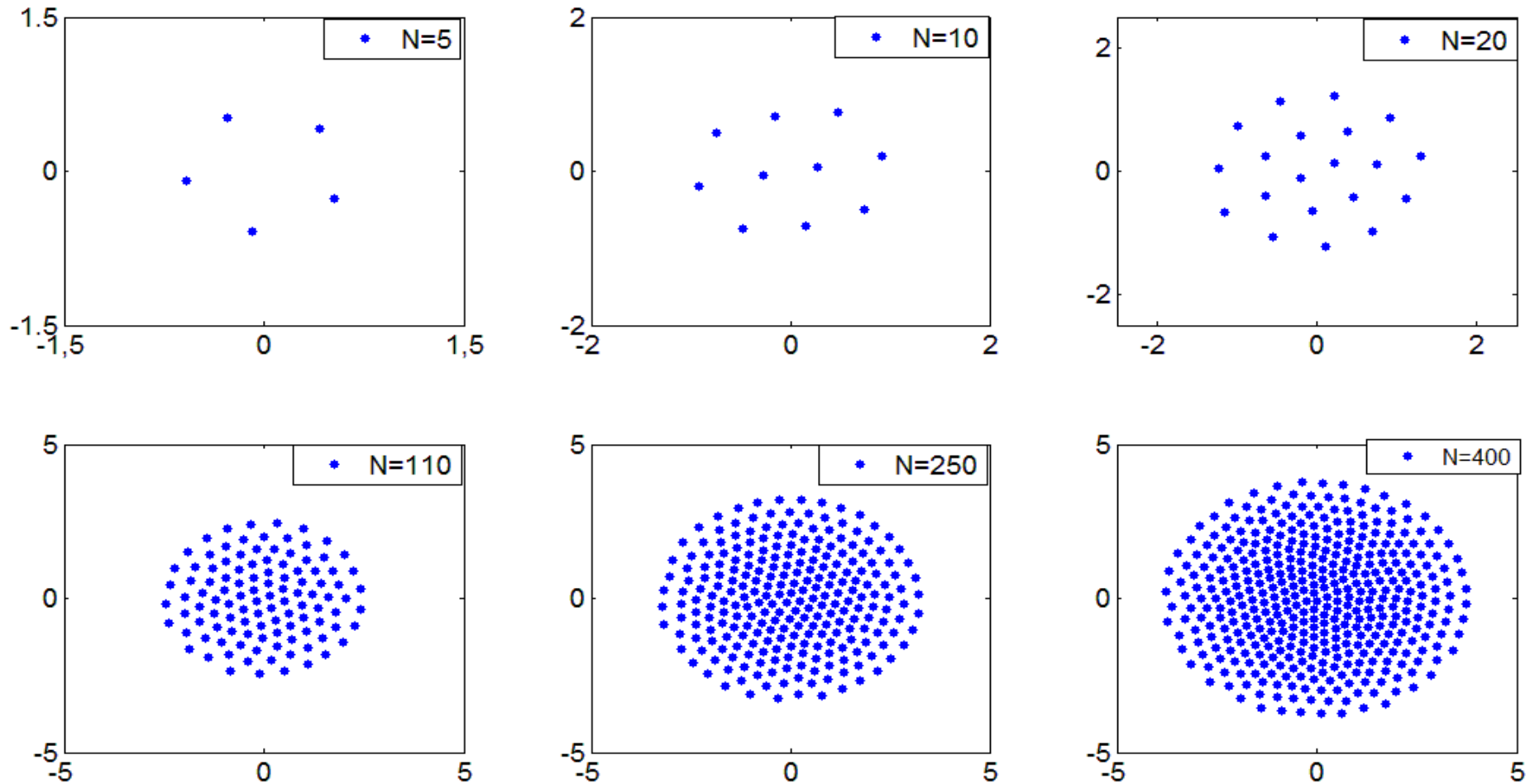


Figure IV.1: Configurations de l'état fondamental à basse température ($T/T_0 \sim 0$) des structures cristallines 2D formées de N grains chargés: 5, 10, 20, 110, 250 et 400 respectivement.

Tableau IV.1: Configurations en couches de l'état fondamental ($n_1, n_2, \dots, n_i$) des systèmes de N grains obtenues à basse température. L'indice i représente le numéro de la couche et n_i représente le nombre de grains de la couche i .

N	Configuration ($n_1, n_2, \dots, n_i$)	Nombre de couches	n_i
5	(0,5)	1	5
10	(2,8)	2	2 8
15	(5,10)	2	5 10
20	(2, 7,11)	3	2 7 11
25	(3, 9,13)	3	3 9 13
30	(1, 6, 11, 12)	4	1 6 11 12
40	(3, 9,13, 15)	4	3 9 13 15
50	(1,6, 10, 16, 17)	5	1 6 10 16 17

Chapitre IV Résultats et discussion

70	(4, 10, 15, 20, 21)	5	4 10 15 20 21
90	(3, 9, 14, 20, 21, 23)	6	3 9 14 20 21 23
110	(n_0 ,24, 24)	Pas clair	Nombre de grains n_i des deux dernières couches 24 24
140	(n_0 , 28, 28)	Pas clair	n_i des deux dernières couches 28 28

Chapitre IV Résultats et discussion

170	$(n_0, \dots, 28, 29)$	Pas clair	n_i des deux dernières couches 28 29
200	$(n_0, \dots, 32, 32)$	Pas clair	n_i des deux dernières couches 32 32
250	$(n_0, \dots, 36, 36)$	Pas clair	n_i des deux dernières couches 36 36
400	$(n_0, \dots, 44, 45)$	Pas clair	n_i des deux dernières couches 44 45

Dans la figure (IV.2), nous avons tracé la variation de l'énergie moyenne (normalisée par E_0) par grain en fonction du nombre des grains N du cristal à l'équilibre et à basse température ($T/T_0 \sim 0$). Nous pouvons voir clairement l'augmentation de cette énergie qui est due principalement à l'augmentation de l'énergie de corrélation du grain avec les autres grains du système, sous l'effet de la diminution de la distance moyenne inter-grains.

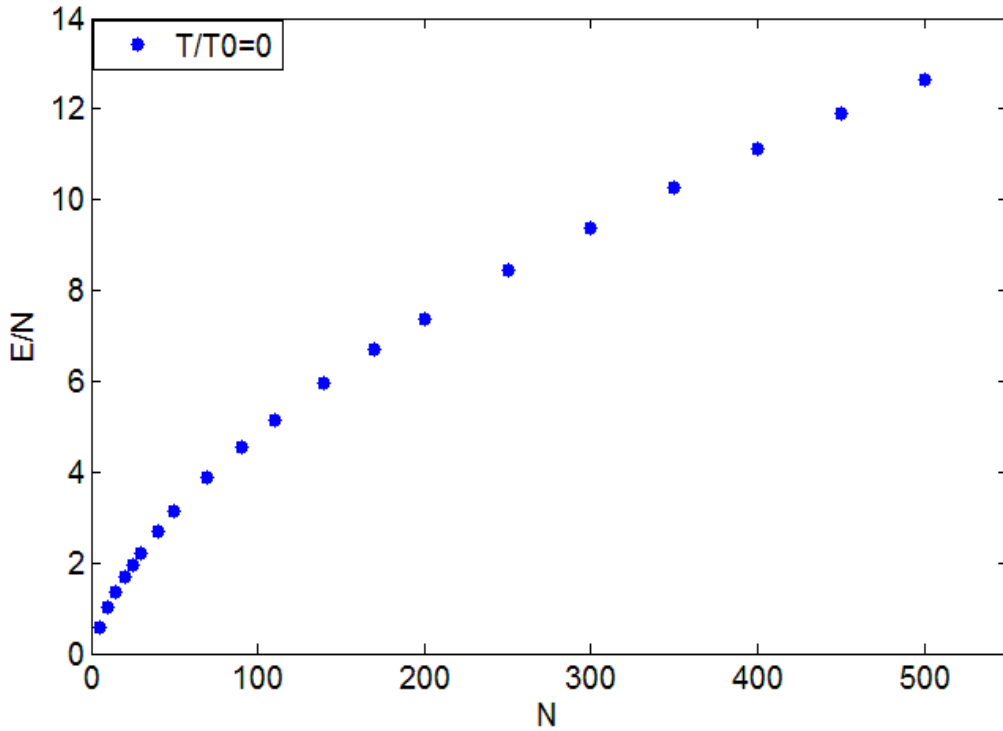


Figure IV.2: Variation de l'énergie moyenne par grain en fonction du nombre N de grains à l'état fondamental

IV.3 Effet de la température sur les configurations d'équilibre

En faisant augmenter la température d'un pas ΔT d'ordre 10^{-4} , nous avons pu suivre l'évolution de l'état structural des différents systèmes de grains chargés sous l'effet de l'agitation thermique. Nous montrerons alors le rôle spécifique joué par les excitations individuelles; comme une transition d'un seul grain entre couches ou une rotation de couches pour la même configuration. La figure (IV.3) présente les configurations d'équilibre des systèmes $N = 10, 15, 20, 25, 250$ et 400 à la température

de l'état fondamental ($T/T_0 \sim 0$) et une température un peu élevée. En comparant entre ces configurations, nous constatons que l'augmentation de la température entraîne le saut d'un grain d'une couche vers une autre ou une rotation des couches autour du centre de confinement. Pour le système $N = 10$ par exemple, la première transition structurale $((2,8) \rightarrow (3,7))$ a été trouvée à $T/T_0 = 10^{-4}$. Pour $N = 20$, la première transition $((2,7,11) \rightarrow (1,7,12))$ a été trouvée à $T/T_0 = 1.3 \times 10^{-4}$, comme l'indique la figure (IV.3. (a)). Cependant, les systèmes $N=15$ et $N = 25$ présentent une rotation des grains sur leurs couches à des températures un peu élevées et conservent leur structure ordonnée: (5,10) pour $N=10$ et (3,9,13) pour $N=25$ (voir figure IV.3. (b)).

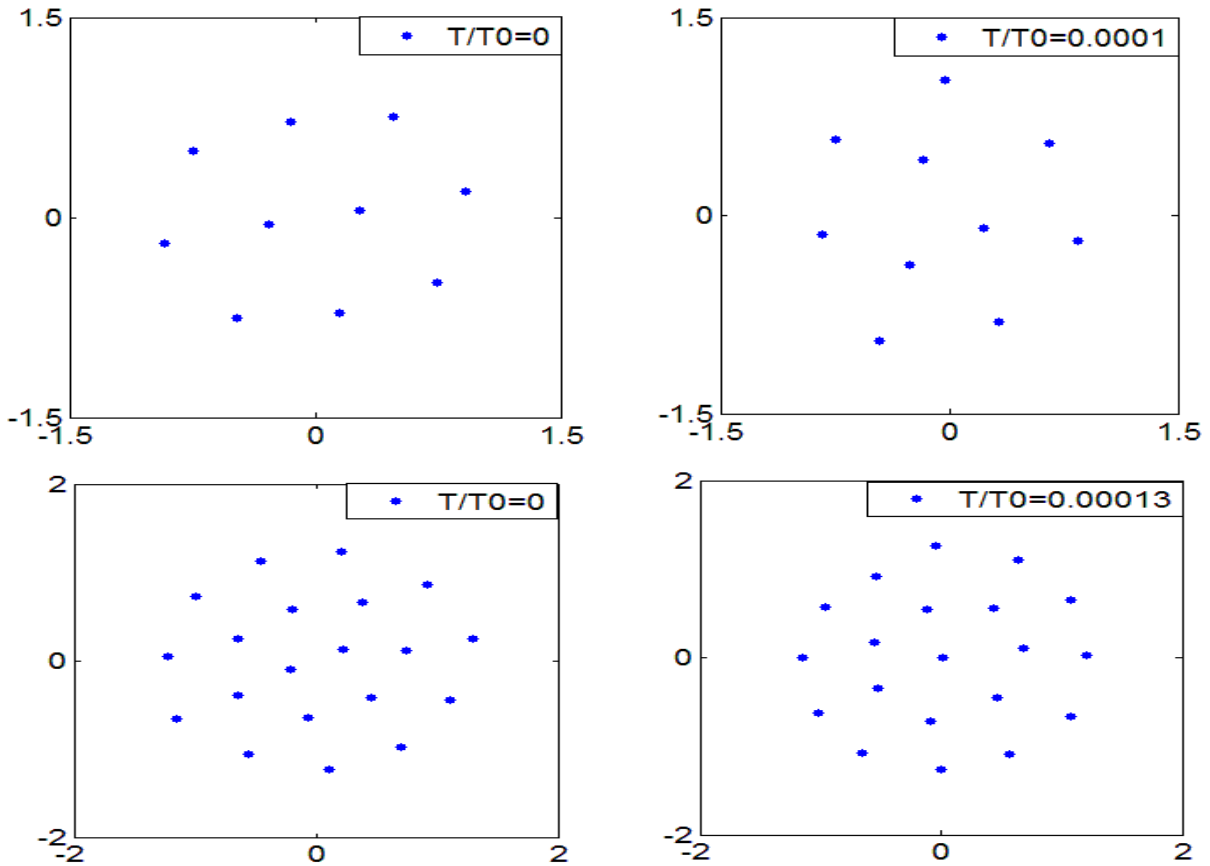


Figure IV.3. (a) : Effet de la température sur les configurations d'équilibre des systèmes $N=10$ et $N=20$ respectivement, un saut de grain entre les couches est observé.

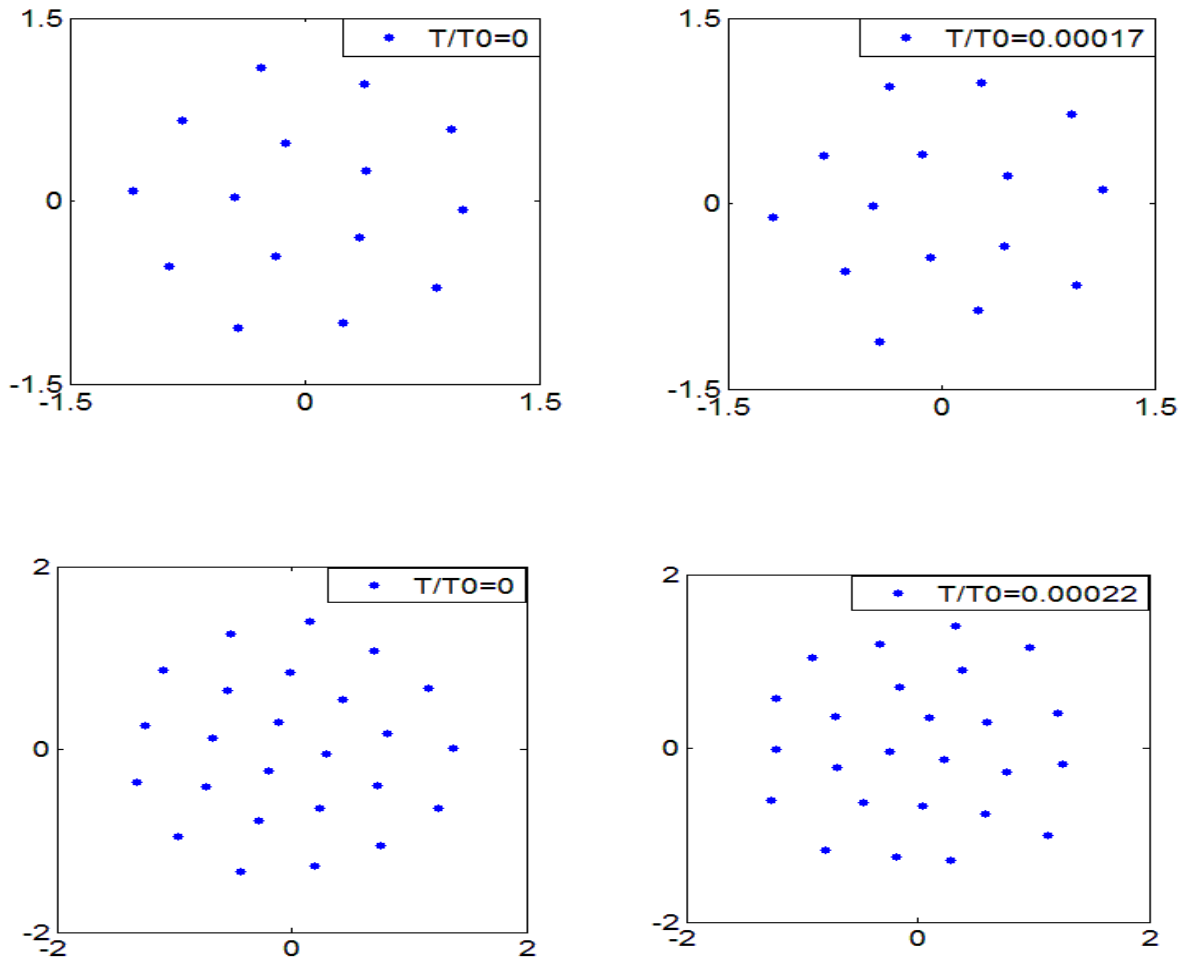


Figure IV.3. (b): Effet de la température sur les configurations d'équilibre des systèmes $N=15$ et $N=25$ respectivement, un déplacement des grains sur leurs couches est remarqué.

Dès que le nombre de grains du système augmente (au delà de 100), la distinction entre les couches devient impossible (sauf pour les deux dernières), condensation élevée des grains à l'intérieur de la structure et l'effet de la température est traduit par une augmentation de la distance inter-grains sur toute la structure, ce qui induit une diminution de la densité des grains à l'intérieur. Nous pouvons observer ce résultat sur la figure (IV.3. (c)) pour deux systèmes différents $N = 250$ et $N = 400$ respectivement.

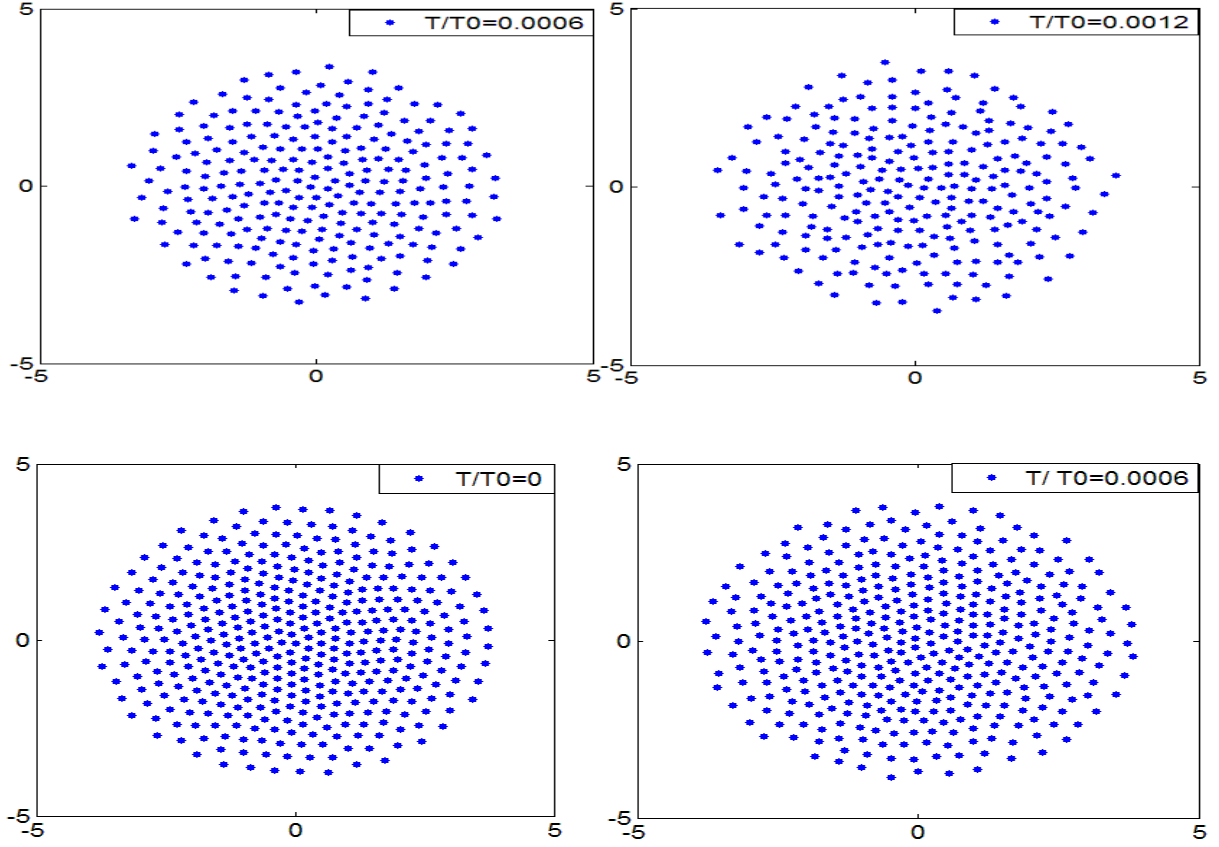


Figure IV.3. (c): *Effet de la température sur les configurations d'équilibre des systèmes $N = 250$ et $N = 400$ respectivement dont une augmentation de la distance inter-grains sur toute la structure est illustrée.*

IV.4 Transitions de phase dans les clusters de grains de poussière

Dans les plasmas poussiéreux fortement couplés, la description de la configuration d'équilibre en terme de distance inter-grains, a prouvé sa pertinence. Dans un réseau coulombien ordonné, les plus proches voisins d'un grain sont tous situés à la même distance de ce dernier. Ce n'est plus le cas si le système est désordonné. Afin de suivre les transitions de phase de l'état solide jusqu'à l'apparition de l'état fluide, nous avons perturbé le système en faisant augmenter sa température. La figure (IV.4) présente des configurations d'équilibre obtenues à des températures différentes pour les trois systèmes: $N = 30$, 200 et 400 grains respectivement. Cette figure illustre la transition d'un état ordonné à un état désordonné ou moins ordonné,

sous l'effet de l'agitation thermique. Dans le cas du désordre, le défaut le plus simple est la modification du nombre de plus proches voisins.

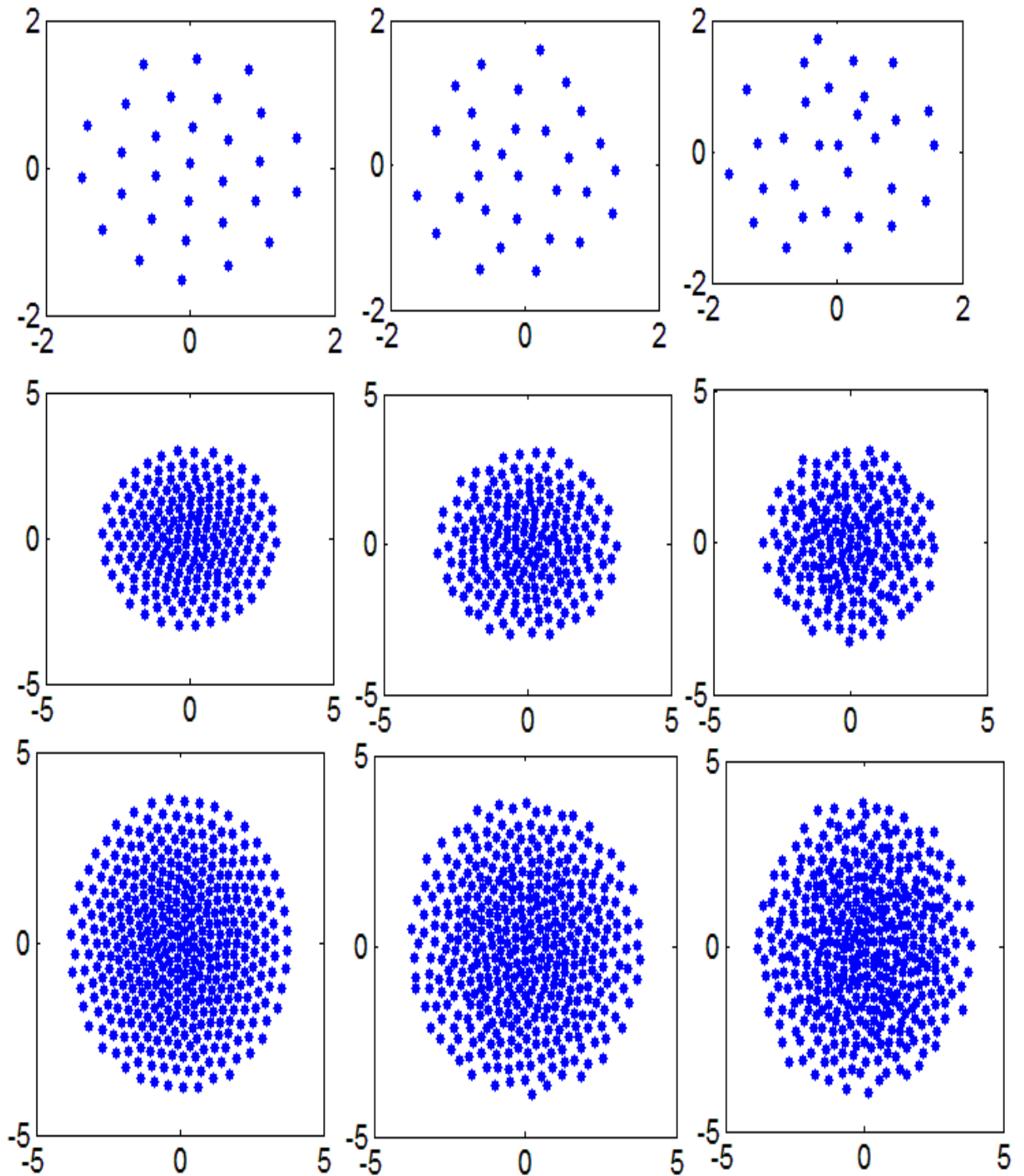


Figure IV.4: Transition de configurations d'équilibre des systèmes: $N = 30, 200$ et 400 grains respectivement, sous l'effet de l'augmentation de la température.

IV.5 Fusion des clusters

La fusion d'un cristal coulombien (2D) est la transition ordre-désordre où le cristal passe d'un état solide structuré en un état liquide non-structuré. La fusion de ce genre de cristaux est caractérisée en général par une région dans laquelle la valeur de l'écart type du déplacement radial moyen du grain augmente d'une façon très rapide; autrement dit, l'amplitude moyenne du mouvement oscillant des grains autour de leurs positions d'équilibre devient importante. Dans ce cas là, le système se trouve dans des états métastables.

La figure (IV.5) montre les trajectoires des grains dans un plasma complexe aux différentes températures. A très basse température (proche de zéro), les grains sont presque figés à leur positions d'équilibre (voir les trois configurations de la première colonne des systèmes: 10, 30 et 200). Quand la température augmente, l'amplitude des vibrations des grains autour de cette position augmente et les grains perdent la localisation de leur mouvement qui devient de plus en plus aléatoire. D'où, la disparition de l'ordre structural de la configuration à une température de fusion T_m .

Sur le tableau IV.2, nous avons donné la valeur de la température de fusion normalisée T_m des différents systèmes de nombre de grains N et sur la figure (IV.6), nous avons représenté la variation de T_m en fonction de N .

Dans les plasmas complexes fortement couplés, la fusion 2D est supposée se dérouler comme suit: lorsque la température augmente, l'ordre orientationnel inter-couches est perdu, alors que le système garde un quasi-ordre translationnel, jusqu'à une seconde transition après laquelle le système perd aussi son ordre translationnel et se comporte comme un liquide isotrope. La phase intermédiaire entre la phase solide (ordonnée) et la phase liquide (désordonnée), se nomme phase hexatique. Pour les système finis de nombre de grains $N > 100$, nous avons observé l'apparition du phénomène de vortex au cours de l'évolution de l'état du système sous l'effet de l'agitation thermique (système $N=200$ de la figure IV.5). Il est à noter que nos résultats se rapprochent avec le modèle KTHNY (Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young). Ce modèle a fait l'objet de nombreuses études, tant expérimentales que théoriques et a l'avantage de construire un repère à partir duquel il est possible d'analyser les processus qui amènent vers le désordre dynamique.

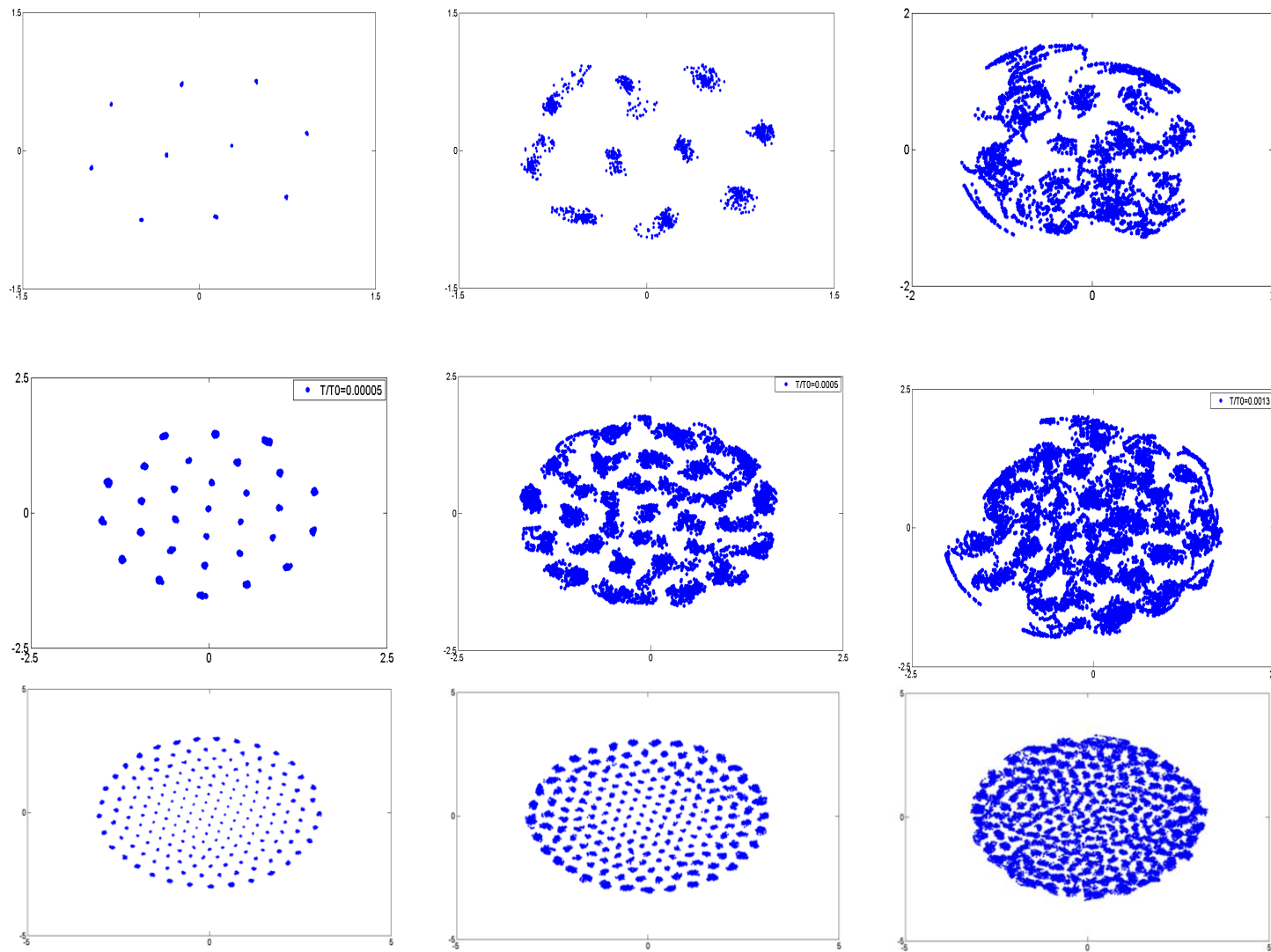


Figure IV.5 : Trajectoires du mouvement de $N = 10, 30$, et 200 grains autour de leur positions d'équilibre, représentées à des températures différentes.

Tableau IV.2: Températures de fusion normalisées T_m des différents systèmes de N grains à charge négative constante.

N	T_m
5	0.00012
15	0.0002
20	0.00025
30	0.0003
40	0.0004
50	0.000525
90	0.0006
110	0.0007
140	0.0008
170	0.0009
250	0.001
350	0.0012
450	0.0014
500	0.0015

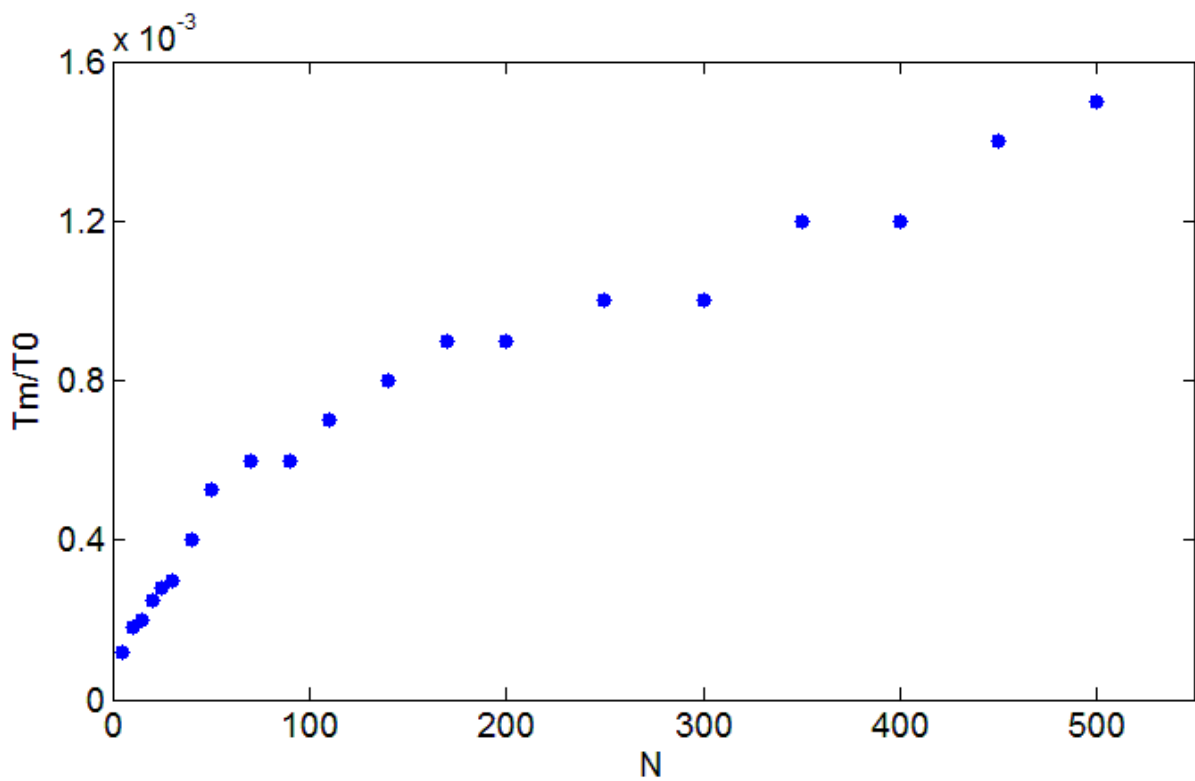


Figure IV.6 : Évolution de la température de fusion en fonction de nombre de particules pour un cristal coulombien fortement couplé dans un plasma poussiéreux

CONCLUSION

Conclusion

Dans le cadre de ce mémoire, nous nous sommes intéressés à la modélisation et la simulation numérique dans les structures fortement couplées.

Dans cet objectif, nous avons considéré un plasma poussiéreux de laboratoire constitué d'un nombre fini ($N \leq 500$) de grains de poussière mono-dispersifs à charge négative constante et émergés dans un plasma traditionnel. Notre modèle physique classique tient compte à la fois, de l'interaction inter-grains (de type Yukawa) et du potentiel électrostatique de confinement parabolique appliqué horizontalement à deux dimension. La méthode de simulation numérique utilisée est celle de Monte Carlo basée sur l'algorithme de Metropolis et combinée à la méthode d'optimisation de Newton.

Aussi, grâce au code de calcul testé, nous avons pu suivre l'évolution du comportement structural du système en fonction de la température des grains. Ainsi, nous avons pu mettre en évidence les transitions de phase et la fusion du cristal bidimensionnel formé par les grains chargés. Il est important de noter que pour des grains à charge constante, nous avons retrouvé les résultats rapportés par la littérature.

Vu la normalisation de l'Hamiltonien du système, les caractéristiques constantes des grains de poussière n'interviennent pas (masse, rayon et charge). Cependant, le système exhibe des structures en couches concentriques. Cette symétrie dépend de la géométrie du confinement électrostatique appliqué sur les grains. Nous avons confirmé que le nombre de couches ainsi que le nombre de grains dans chacune d'elles, permettent de remonter à une classification équivalente au tableau de Mendeleev.

A très basse température, nous avons trouvé que le nombre total de grains, N , détermine le nombre de couches circulaires ainsi que le nombre de grains de chaque couche. Aussi, nous avons distingué entre deux cas de structures selon le nombre N . Pour un nombre $N \leq 100$ grains, nous pouvons compter le nombre de couches de la structure et le nombre de grains de chacune d'elles. Par contre si N est au delà de 100, ce n'est pas possible de connaître le nombre de couches internes constituant la structure cristalline. Sauf les deux dernières couches externes où nous pouvons compter leur nombre de grains.

Conclusion

L'augmentation de N fait augmenter le nombre de couches ainsi que l'énergie par grain dans le système.

En faisant augmenter la température d'un pas petit (de l'ordre de 10^{-4}), nous avons remarqué que la configuration d'équilibre de la structure est affectée soit par un saut d'un grain d'une couche à une autre, soit par une rotation d'un petit d'angle des grains sur leurs couches. Plus la température augmente, plus la structure en couches commence à disparaître pour les systèmes de $N < 100$ et les configurations d'équilibre correspondent aux états métastables. L'effet de la température sur les configurations d'équilibre des systèmes de $N > 100$, est traduit par l'augmentation de la distance inter-grains et l'apparition de vortex dans les structures condensées de N élevé.

Nous avons pu également suivre l'évolution des transitions structurales sous l'effet de l'agitation thermique pour différentes tailles de système (différent nombre de grains N), jusqu'à atteindre la température de fusion de ces structures coulombiennes bidimensionnelles.

Aussi, nous avons trouvé que la transition ordre-désordre (transition solide-liquide ou encore fusion) n'est pas directe; c'est à dire qu'il existe une phase intermédiaire 'hexatique' située entre la phase solide ordonnée à très basse température et la phase liquide désordonnée à la température de fusion. Les grains dans la phase hexatique, perdent l'ordre orientationnel et gardent un ordre quasi-translationnel.

L'observation expérimentale de la cristallisation des particules chargées dans les plasmas poussiéreux (complexes), en 1994, a permis l'émergence de la physique des cristaux coulombiens et de la matière condensée. Outre les propriétés communes aux milieux ionisés, les plasmas complexes se comportent comme des cristaux, avec un avantage consistant en la possibilité de leur observation à l'œil nu. Il est devenu clair que les structures et les propriétés à l'échelle nano peuvent avoir un effet profond sur les propriétés optiques, électriques et mécaniques des matériaux méso- ou macroscopique. D'où, les mesures cinétiques (à l'échelle d'une particule individuelle) du processus de cristallisation et sa dynamique sont une grande importance. Les plasmas complexes sont des systèmes idéals pour telles mesures dont la particule dominante, grain

Conclusion

(microparticule) chargé, peut être visualisée individuellement et à la température ambiante. Dans le travail de ce mémoire, nous avons utilisé la méthode stochastique (probabiliste) de Monte Carlo qui ne tient pas compte du temps réel. Comme perspectives de travail, il serait intéressant de reprendre cette étude en utilisant une autre méthode de simulation déterministe (en fonction du temps réel), telle que la technique de dynamique moléculaire.

References :

- [1] P. K. Shukla and A. A. Mamun, *Introduction to dusty plasma physics* (IOP Publishing 2002, UK).
- [2] V. N. Tsytovich, G. E. Morfill, S. V. Vladimirov and H. M. Thomas, *Elementary physics of complex plasmas*, Lect. Notes Phys. 731 (Springer, Berlin Heidelberg 2008).
- [3] V. Fortov, I. Iakubov and A. Khrapak, *Physics of strongly coupled plasmas* (Clarendon Press 2006, Oxford).
- [4] V. E. Fortov, A. V. Ivlev, S. A. Khrapak, A. G. Khrapak and G. E. Morfill, *Physics Reports* 421, 1-103 (2005).
- [5] S. V. Vladimirov, K. Ostrikov and A. A. Samarian, *Physics and applications of complex plasmas* (Imperial College Press 2005, London).
- [6] A. Piel and A. Melzer, *Adv. Space Res.* 29, 1255 (2002).
- [7] S. K. Zhdanov, M. H. Thoma and G. E. Morfill, *New Journal of Physics* 13, 013039 (2011).
- [8] A. Piel, *Plasma and Fusion Research* 4, 013 (2009).
- [9] F. M. Peeters, V. A. Schweigert, and V. M. Bedanov, *Physica B* 212, 237 (1995).
- [10] Langmuir, C. G. Found, et A. F. Detmer, *Science* (1924)
- [11] E. Wigner, *Phys. Rev.* 46, 1002 (1934).
- [12] H. Ikezi, *Phys. Fluids* 29, 1764 (1986).
- [13] J. H. Chu and Lin I, *Phys. Rev. Lett.* 72, 4009 (1994).
- [14] H. Thomas, G. E. Morfill, V. Demmel, J. Goree, B. Feuerbacher, D. Möhlmann, *Phys. Rev. Lett.* 73, 652 (1994).
- [15] A. Melzer, T. Trottenberg, and A. Piel, *Phys. Lett. A* 191, 301 (1994).

- [16] S. V. Vladimirov, O. Ishihara, Phys. Plasmas 3, 444 (1996).
- [17] P. M. Bellan, Physics of Plasma 11, 3368 (2004).
- [18] Lin I, Y-L.Lai,W. T. Juan, M.H. Chang, H.Y.Chue,Vacuum, 66, 285-291 (2002).
- [19] L. Rouaiguia, M. Djebli, F. M. Peeters, Phys. Lett. A 372, 4487 (2008).
- [20] L. Rouaiguia, M. Djebli, and M. Drir, Phys. Plasmas 16, 033705 (2009).
- [21] L. Rouaiguia, these de Doctorat d'état en physique: *Transitions de phase d'un système de particules chargées confinées et fortement couplées*, USTHB (2010).
- [22] V. A. Schweigert and F. M. Peeters, J. Phys. :Condens. Matter 10, 2417 (1998).
- [23] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer simulation of liquids*, (Claredon Press 1986, Oxford).
- [24] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. M. Teller, and E. Teller, J. Chem. Phys. 21, 1087 (1953).
- [25]Z. Chen, M. Kong, M. v. Milosevec and Y. Wu, PhysicaScripta 19, 1-4 (2003).
- [26] S. Käding, D. Block, A.Melzer, A. Piel, H. Kählert, P. Ludwing and M. Bonitz, Physics of Plasmas 15, 073710 (2008).
- [27]V.Golubnychiy, H. Bonitz, A. Filinov and H.Fehske, Journal of Physics, 39, 4527-4531 (2006)
- [28] A.K. Agarwal, International Journal of Advance Research and Innovation, 3, 133-143 (2013)
- [29]R. Ichiki, Y. Ivanov, M. Wolter, Y. Kawai, and A. Melzer, Physical Review, **70**, 066404 (2004)
- [30]C.R.A. Catlow , V.L. Bulatov , R.W. Grimes, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, B 122, 30 1-3 10 (1997)

