



UNIVERSITE KASDI MERBAH OUARGLA  
Faculté des Mathématiques et des Sciences de la Matière  
Département de Physique

---

## Mémoire

MASTER / ACADEMIQUE

Domaine: Science de la Matière

Filière: Physique

Spécialité: Physique de Rayonnement spectroscopie et optoélectronique

Présenté par: Naima BETTAHAR et Rania RAMDANE

Thème:

# Résolution numérique de l'équation intégrale de l'énergie potentielle d'un plasma par la méthode de Verlet

Thèse soutenue le 04/06/2018 devant le jury composé de:

Mlle: Thoria CHOHRA	MCA, UKM Ouargla	Président
Mr: Lazhar BENMABROUK	MCA, UKM Ouargla	Examineur
Mr: Saïd DOUIS	MCA, UKM Ouargla	Directeur De mémoire

Année Universitaire: 2017/2018



# Résolution numérique de l'équation intégrale de l'énergie potentielle d'un plasma par la méthode de Verlet

Présenté par: Naima BETTAHAR et Rania RAMDANE

Directeur De mémoire: Said DOUIS

2017/2018

## ملخص

الهدف من هذا العمل هو الحل العددي للمعادلة التكاملية الغير خطية للطاقة الكامنة لبلازما تحوي على شائبة موجبة (+Ze) ، بواسطة طريقة فرلسي (Verlet) ذات خطوة واحدة. تفاعل الشائبة مع الإلكترون أخذ كما كيون دوتش ذو الحجب (Deutsch écranté). هذه الدراسة تمت باستعمال نظرية الحقل المتوسط ضمن نموذج البلازما أحادية المركبة (OCP). المقارنة بين طريقة فرلسي (Verlet) وطريقة النقطة الثابتة (MPF) أعطى اتفاقاً جيداً.

## Résumé

*L'objectif visé dans ce sujet est la résolution numérique de l'équation intégrale non linéaire de l'énergie potentielle d'un plasma contenant une impureté positive (+Ze), par la méthode de Verlet (MV) à un pas, dans le cas où l'interaction électron impureté est représenté par le pseudo-potentiel de Deutsch écranté. Cette étude est effectuée dans la théorie du champ moyen et au sein du modèle de plasma à une composante (OCP). Une étude comparative entre la méthode Verlet (MV) et la méthode de point fixe (MPF) donne un bon accord..*

## Abstract:

*The objective in this work is the numerical resolution of the nonlinear integral equation of the potential energy of a plasma containing a positive impurity (+ Ze), by the method of Verlet (VM) at one step, where the electron impurity interaction is represented by the pseudo-potential of shielded screening Deutsch. This study is effected in the mean field theory and within the one-component plasma (OCP) model. A comparative study between Verlet method (VM) and fixed point method (FPM) give a good agreement.*

# Dédicace

A ma mère,  
A mon père.

## Remerciements

*Tout d'abord; je remercie Dieu le tout puissant de m'avoir donnée la patience et l'énergie pour poursuivre ce travail. Je tiens en premier lieu à remercier monsieur: SAID DOUIS de m'avoir fait l'honneur d'examiner ce mémoire et d'en être rapporteur. Je tiens à le remercier aussi pour la pertinence de ses remarques et sa patience pendant ce travail. J'adresse également de vifs remerciements à Mademoiselle Thoria CHOHRA d'avoir présidé le jury de soutenance. J'adresse mes remerciements à monsieur Lazhar BENMABROUK qui m'a fait l'honneur de juger ce travail. Je ne pourrais terminer sans remercier ma mère et mon père mon frère et ma sœur et toute ma famille qui m'ont soutenue et encouragée pour terminer ce travail. Enfin, Je remercie tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à l'élaboration de ce mémoire*

# Table des matières

<b>Liste des Figures</b>	<b>3</b>
<b>1 Introduction générale</b>	<b>4</b>
<b>2 Paramètres importants dans le modèle de plasma à une composante (OCP)</b>	<b>6</b>
2.1 Définition du plasma physique: . . . . .	6
2.2 Modèle de plasma à une composante (OCP) . . . . .	7
2.3 Paramètres importants dans le modèle de plasma à une composante (OCP)	
8	
2.3.1 Le rayon de sphère ionique $a$ (Rayon de Wigner- Seitz): . . . . .	8
2.3.2 Longueur de Landau (Longueur critique d'interaction binaire): . . .	8
2.3.3 Longueur d'écrantage de Debye: . . . . .	9
2.3.4 Le Couplage $\Gamma$ : . . . . .	9
2.3.5 Sphère de Debye: . . . . .	10
2.3.6 Le degré de quantité $\eta$ : . . . . .	10
2.3.7 Théorie de champ moyen: . . . . .	11
<b>3 Etablissement de l'équation intégrale pour l'énergie potentielle</b>	<b>13</b>
3.1 Etablissement de l'équation intégrale pour l'énergie potentielle (EIEP) d'un	
plasma contenant une impureté positive . . . . .	13
3.2 A dimensionnement de l'équation intégrale pour l'énergie potentielle: . . .	17
<b>4 Résolution numérique de l'équation intégrale de l'énergie potentielle par la méthode de Verlet</b>	<b>18</b>
4.1 Définition de la méthode de verlet . . . . .	18
4.1.1 L'algorithme de Verlet à deux pas: . . . . .	19
4.1.2 L'algorithme de verlet à une pas: . . . . .	19

4.2	Résolution de l'équation différentielle de l'énergie potentielle EDEP par la méthode de Verlet . . . . .	20
4.2.1	Transformation de l'équation intégrale de l'énergie potentielle EIEP vers une équation différentielle EDEP: . . . . .	20
4.3	L'application de l'algorithme de Verlet à un pas . . . . .	22
4.3.1	Organigramme de la méthode de Verlet à un pas . . . . .	24
4.3.2	Résultats obtenus: . . . . .	25
<b>5</b>	<b>Conclusion Générale:</b>	<b>29</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>31</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>36</b>
<b>A</b>	<b>Loi de distribution des vitesses de Maxwelle</b>	<b>38</b>
<b>B</b>	<b>Etablissement de l'équation Intégrale pour l'énergie Potentielle</b>	<b>40</b>
<b>C</b>	<b>Transformation de l'équation intégrale de l'énergie potentielle vers une équation différentielle de deuxième ordre</b>	<b>43</b>
C.1	La règle de Leibnitz: . . . . .	43
C.2	L'application de la règle de Leibnitz: . . . . .	44

# Liste des Figures

2.1	Modèle de plasma à une composante(OCP) . . . . .	7
2.2	Calcul de la force électrique dans un milieu chargé avec la sommation des forces élémentaires . . . . .	11
2.3	Calcul de la force électrique dans un milieu chargé par l'application de la théorie du champ moyen . . . . .	12
3.1	Une impureté de charge ( $+Ze$ ) immergée dans une plasma (OCP) . . . . .	14
4.1	Organigramme de la résolution avec la méthode de verlet à un pas . . . . .	24
4.2	Comparaison entre les résultats de MPF et de MV, pour les cas: $Z = 10$ , $T = 10^7 K$ et $n_e = 10^{18} cm^{-3}$ . . . . .	25
4.3	Comparaison entre MV et MPF pour $T = 10^6 K$ . . . . .	26
4.4	Comparaison entre MV et MPF pour $T = 10^8 K$ . . . . .	27
4.5	Comparaison entre MV et MPF pour $n_e = 10^{20} cm^{-3}$ . . . . .	27
4.6	L'énergie potentielle $Y(x)$ trouvée par la méthode de verlet pour différents cas de $T$ et $n_e$ . . . . .	28
B.1	Représentation de l'angle $\psi$ . . . . .	42

# Chapitre 1

## Introduction générale

Le plasma est l'un des sujets les plus importants dans le domaine de la recherche scientifique.

Dans le vieux concept, il est connu que la matière a trois cas, mais avec le premier tiers du vingt et unième siècle [1], Un nouveau terme est introduit qui reflète le quatrième état de la matière appelée plasma.

En 1879, sir William Crookes a identifié pour la première fois le plasma, c'est le gaz ionisé dans lequel se côtoient les molécules neutres, les atomes excités, les ions et les électrons. Mais il n'a été appelé ainsi qu'en 1928 par IRVING LANGMUIR dans son article (Oscillations in ionized gases)[2].

Le terme plasma a été utilisé en astronomie pour exprimer l'état dilué de la substance, qui est similaire au gaz. Le plasma macroscopique ne peut pas être traité comme un phénomène qui se produit à très petite échelle et qui concerne un grand nombre de particules qui doivent être traitées statistiquement. Les chercheurs ont cherché à trouver

les fonctions de la latence électrique et encore à ce jour. Tous les travaux publiés sont basés sur leurs calculs dans l'un des deux axes principaux: calculs analytiques théoriques avec approximations différentes, simulations numériques [1]. Parmi les méthodes de simulation numérique est la méthode de verlet, qui sera étudiée dans notre mémoire à travers trois chapitres.

Dans le premier chapitre, nous rappellerons le modèle de plasma à une composante (OCP), et les différents paramètres nécessaires pour décrire un plasma. Nous expliquerons ensuite la théorie du champ moyen.

Dans le deuxième chapitre, Nous établirons l'équation intégrale gouvernant l'énergie potentielle d'un électron du plasma situé à la distance ( $r$ ) d'un ion de charge positive considéré comme impureté. Dans le troisième chapitre, nous allons résoudre numériquement cette équation intégrale avec deux méthodes différentes, la première est du point fixe (MPF) et la deuxième est celle de Verlet (MV).

Enfin, nous ferons une comparaison entre les résultats trouvées par les deux méthodes précédentes.

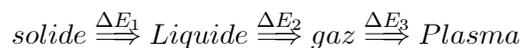
## Chapitre 2

# Paramètres importants dans le modèle de plasma à une composante (OCP)

### 2.1 Définition du plasma physique:

Un plasma est un gaz ionisé. Comme tel, il est donc constitué en général d'électrons, d'ions, d'espèces atomiques ou moléculaires neutres et de photons.

Un gaz ionisé étant obtenu par apport d'énergie à un gaz, les plasma sont souvent présentés comme un 4<sup>ème</sup> état de la matière, faisant suite aux phases solide, liquide et gazeuse [3]:



## 2.2 Modèle de plasma à une composante (OCP)

Nous savons, que le plasma totalement ionisé composé d'électron et d'ions positif. Pour cette raison, nous pouvons ne pas tenir compte des effets des mouvements des ions devant ceux des électrons. En effet, et à titre d'exemple, pour évaluer la conductivité électrique d'un plasma, il est d'usage de considérer que le courant est seulement transporté par les électrons. Donc nous pouvons considérer l'ensemble des ions comme un fond continu électrique positif.

Ces considérations et hypothèses sont au bas de la construction du modèle de plasma à une composante (OCP)[4],[5]:

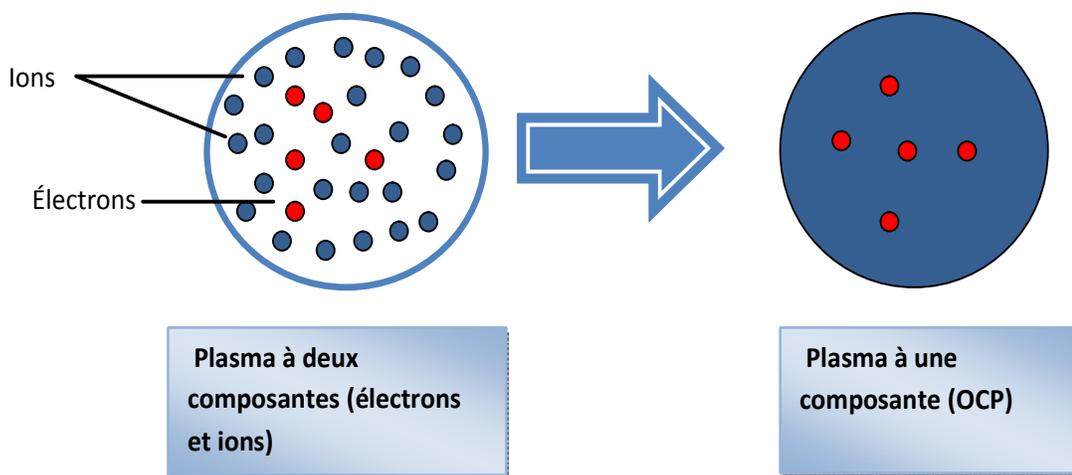


Figure 2.1: Modèle de plasma à une composante(OCP)

## 2.3 Paramètres importants dans le modèle de plasma à une composante (OCP)

### 2.3.1 Le rayon de sphère ionique $a$ (Rayon de Wigner- Seitz):

C'est le rayon moyenne entre deux ions[1]:

$$a = \left( \frac{3}{4\pi n_i} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.1)$$

### 2.3.2 Longueur de Landau (Longueur critique d'interaction binaire):

Longueur de Landau  $L_L$  est la distance d'approche de deux électrons, pour que leur énergie potentielle d'interaction binaire soit de même ordre de grandeur que leur énergie d'agitation thermique. Ce que se traduit par:

$$K_B T = \frac{e^2}{L_L} \quad (2.2)$$

où  $T$  est la température et  $K_B$  est la constante de Boltzmann [6]:

$$L_L = \frac{e^2}{K_B T} \quad (2.3)$$

La longueur de Landau intervient dans l'analyse des phénomènes de collisions et des corrélations de position dans un plasma.

### 2.3.3 Longueur d'écrantage de Debye:

La profondeur de pénétrations du champ électrique dans le plasma totalement ionisée constitué par les électrons et les ions de même charge, est caractérisée par l'ordre de grandeur d'un rayon connu dans le domaine de plasma par le rayon ou longueur de Debye égale [7]:

$$\lambda_D = \left( \frac{KT}{8\pi n_e e^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.4)$$

Elle représente en quelque sorte la portée du potentiel plus explicitement, elle représente la distance entre deux électrons pour laquelle le potentiel d'interaction entre ces deux électrons, devient négligeable par effet d'écrantage par la présence des ions formant le fond continu. C'est pourquoi elle est appelée aussi longueur critique d'interaction collective.

Et le potentiel électrique aussi est donné par la formule suivante [7]:

$$\Phi(r) = \frac{e}{r} \exp\left(\frac{-r}{\lambda_D}\right) \quad (2.5)$$

### 2.3.4 Le Couplage $\Gamma$ :

Le couplage  $\Gamma$  n'est rien que le rapport de l'énergie d'interaction entre deux électrons séparés par la distance moyenne  $a$ , à l'énergie thermique  $kT$ , et est égal à la longueur de Landau  $L_L$  sur la distance moyenne  $a$ :

$$\Gamma = \frac{L_L}{a} = \frac{\beta e^2}{a} \quad (2.6)$$

où  $\beta = 1/kT$

- Si  $\Gamma \ll 1$ , le couplage est faible, l'énergie cinétique est supérieure à l'énergie d'interaction Coulombienne.
- Si  $\Gamma > 1$ , le couplage est fort, l'énergie d'interaction Coulombienne est supérieure à l'énergie cinétique[5].

### 2.3.5 Sphère de Debye:

Le nombre des électrons situés dans une sphère de rayon égale à la longueur de Debye est appelé le nombre de Debye  $N_D$ [1].

$$N_D = n_e 4/3\pi\lambda_D^3 \quad (2.7)$$

- Si  $N_D \ll 1$ , sphère de Debye est faiblement peuplée.
- Si  $N_D > 1$ , la sphère de Debye est très peuplée.

### 2.3.6 Le degré de quantité $\eta$ :

Les effets quantiques sont très différents selon qu'il s'agit d'électrons ou d'ions, parce que le rapport de la masse d'ions sur la masse d'électrons est d'ordre de  $2 \cdot 10^3$ . Si  $T$  est la température de plasma, le degré de quantité d'électrons  $\eta$  est caractérisé par la fraction de l'onde thermique de Louis de Broglie  $\lambda_T$ [8],[9] sur la distance moyenne  $a$  entre deux électrons. Donc:

$$\eta = \frac{\lambda_T}{a} = \frac{h}{\sqrt[3]{2\pi m_e k_B T}} \quad (2.8)$$

où:  $h$  est la constant de Planck et  $m_e$  est la masse de l'électron.

### 2.3.7 Théorie de champ moyen:

Soit un milieu électriquement chargé, constitué de  $(N + 1)$  particules, la charge de chacune est  $q$  à l'exception d'une qui porte une charge  $q_0$ . Ces particules sont distribuées dans l'espace avec une densité volumique  $\rho(r)$ . La force électrique  $f_0$  agissant sur la charge  $q_0$  de la part des  $N$  autres charges (fig(1)) est donnée par la loi de coulomb:

$$\vec{f}_0 = q_0 \sum_{i=1}^N \frac{q_i(r_0-r_i)}{(r_0-r_i)^3} \quad (2.9)$$

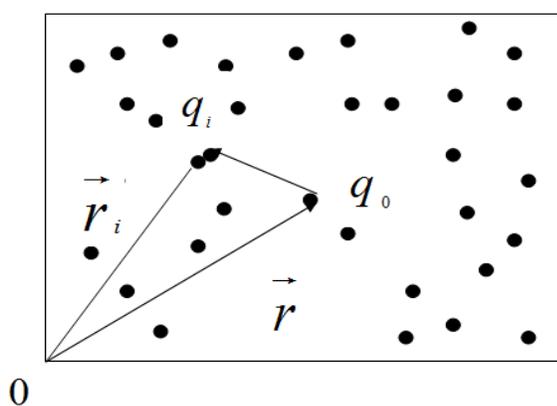


Figure 2.2: Calcul de la force électrique dans un milieu chargé avec la sommation des forces élémentaires

On peut calculer cette force de la manière approximée suivante : Si on néglige les corrélations entre les particules localisées dans l'élément de volume  $d\tau$  contenant plusieurs particules de charge  $q$ , nous avons le droit, et sans commettre d'erreurs appréciables, de considérer que toutes ces particules localisées dans  $d\tau$  agissent individuellement par le même

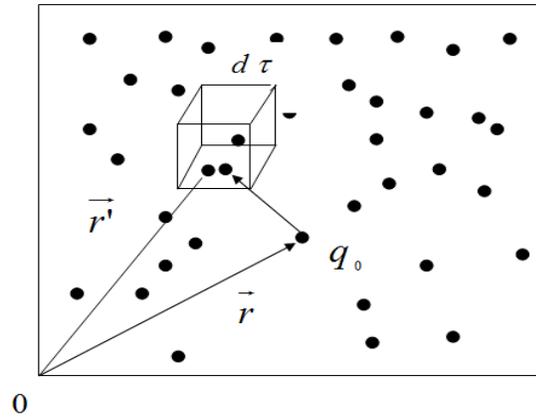


Figure 2.3: Calcul de la force électrique dans un milieu chargé par l'application de la théorie du champ moyen

champ électrique sur la charge  $q_0$ . Donc selon cette théorie d'approximation on peut transformer la formule précédente en la suivante [7],[10]:

$$\vec{f}_0 = q_0 \int_{(\Omega)} \frac{\rho(r') (r_0 - r')}{|r_0 - r'|^3} d\tau \quad (2.10)$$

## Chapitre 3

# Etablissement de l'équation intégrale pour l'énergie potentielle

### 3.1 Etablissement de l'équation intégrale pour l'énergie potentielle (EIEP) d'un plasma contenant une impureté positive

Soit un plasma électriquement chargé constitué par des électrons et un fond continu de charges positives neutralisantes.

L'énergie potentielle  $V$  d'un électron situé à distance  $(r)$  de l'origine de ce plasma contenant une impureté (placée en un point de distance  $(r)$  de l'origine de coordonnées) est constitué à partir de trois contributions: La première contribution  $V_{em}(r)$  du à l'interaction de cet électron avec la impureté de charge  $(+Ze^-)$ , la deuxième  $V_{ee}(r)$  concerne l'interaction de l'électron avec le reste des électrons de plasma et en fin la troisième contribution  $V_{ei}(r)$  concerne l'interaction de l'électron avec le fond continu des charges positives neutralisantes[11][12].

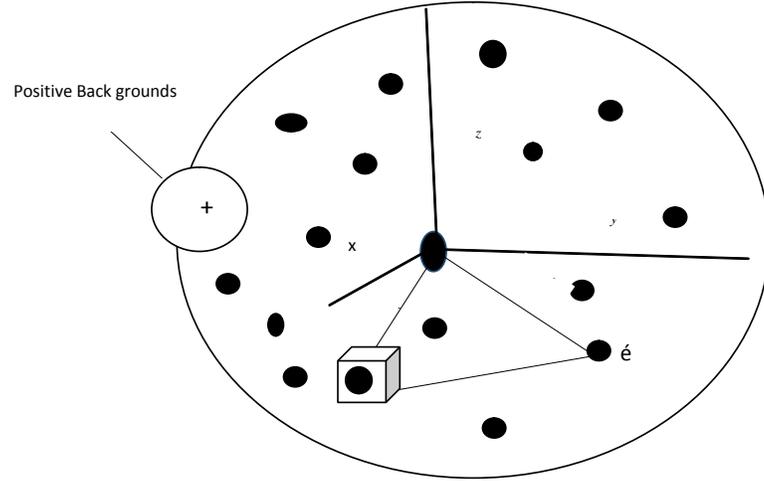


Figure 3.1: Une impureté de charge  $(+Ze)$  immergée dans une plasma (OCP)

Donc on peut écrire:

$$V(r) = V_{em}(r) + V_{ee}(r) + V_{ei}(r) \quad (3.1)$$

L'interaction électron-impureté est prise de telle manière à pouvoir tenir compte des effets quantiques de diffractions à courtes distances. Le potentiel de Coulomb est remplacé par le pseudo-potentiel de Deutsch écranté:

$$V_{em}(r) = -\frac{Ze^2}{r} \left(1 - e^{-\frac{r}{\lambda_T}}\right) e^{-r/\lambda_D} \quad (3.2)$$

où:  $\lambda_T = (2\pi\hbar^2 / (m_e k_B T))^{1/2}$  est la longueur de De Broglie et  $\lambda_D = \sqrt{k_B T / (4\pi n_e e^2)}$

est la longueur de Debye.

Et puisque nous avons supposé que l'impureté de charge  $(+Ze^-)$  est située à la distance  $(r)$  de l'origine des coordonnées.

Donc le potentiel électron avec l'impureté est écrit sous la forme:

$$V_{em}(r) = -\frac{Ze^2}{r} \left(1 - e^{-\frac{r}{\lambda_D}}\right) e^{-r/\lambda_D} \quad (3.3)$$

L'interaction électron-électron  $V_{ee}(r)$  est celui de Coulomb, et s'écrit dans l'approximation du champ moyen comme:

$$V_{ee}(r) = e^2 \iint f(\vec{r}, \vec{p}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}'^3 d\vec{r}'^3 \quad (3.4)$$

telque:

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{N}{\Omega} \left(\frac{m_e \beta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\beta\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r)\right)} \quad (3.5)$$

est la distribution de Maxwell-Boltzmann (voire l'appendice A) [13] (qui est bien normalisée ( $\int_{\mathbb{R}^3} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\pi/a}$  pour  $a > 0$ ), c'est à dire que  $\int_{\mathbb{R}^3} f(v) dv = \left(\frac{m_e \beta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\beta\left(\frac{m_e v^2}{2}\right)} dv = 1$ ),  $N$  est le nombre total d'électron,  $\Omega$  est le volume du système et  $\beta = \frac{1}{K_B T}$ .

Alors l'énergie potentielle de l'électron avec le fond positif neutralisé la charge est donnée par:

$$V_{ei}(r) = -(n_i Z e)(e) \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 = -n_i Z e^2 \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 \quad (3.6)$$

où  $n_i$  est densité ionique (fond continu) et d'après la condition de neutralisante on a:  $n_e = Z \times n_i$ , telque  $Z$  représente le nombre de charge d'un ion du fond continu, donc l'équation 3.6 devient:

$$V_{ei}(r) = -n_e e^2 \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 \quad (3.7)$$

Donc l'expression de l'énergie potentielle d'un électron situé à la position  $r$  de l'origine est:

$$V(r) = V_{em}(r) + e^2 \iint \frac{f(\vec{r}', \vec{p})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}^3 d\vec{r}'^3 - n_e e^2 \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 \quad (3.8)$$

Lorsque nous remplaçons l'équation 3.5 dans 3.8, et nous l'intégrons sur les impulsions, l'équation devient:

$$V(r) = V_{em}(r) + n_e e^2 \int \frac{e^{-\beta V(r')}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 - n_e e^2 \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 \quad (3.9)$$

Et en fin lorsque nous remplaçons les équations 3.6 Dans l'équation précédente 3.9 l'équation intégrale de l'énergie potentielle devient:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \left(1 - e^{-\frac{r}{\lambda_T}}\right) e^{-\frac{r}{\lambda_D}} + n_e e^2 \int \frac{e^{-\beta V(r')}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 - n_e e^2 \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 \quad (3.10)$$

et égale:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \left(1 - e^{-\frac{r}{\lambda_T}}\right) e^{-\frac{r}{\lambda_D}} + n_e e^2 \int \frac{\left(e^{-\beta v(r')} - 1\right)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 \quad (3.11)$$

En utilisant les coordonnées sphériques et après quelques simplifications (voire l'appendice B), nous trouvons l'équation suivante gouvernant ainsi l'énergie potentielle de l'électron à la distance  $r$ :

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \left(1 - e^{-\frac{r}{\lambda_T}}\right) e^{-\frac{r}{\lambda_D}} + 4\pi n_e e^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} [(r+r') - |r-r'|] \left(e^{-\beta V(r')} - 1\right) dr' \quad (3.12)$$

Et puisque nous avons supposé que le vecteur  $r$  est situé sur l'axe  $oz$  donc nous pouvons écrire:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \left(1 - e^{-\frac{r}{\lambda_T}}\right) e^{-\frac{r}{\lambda_D}} + 4\pi n_e e^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} [(r+r') - |r-r'|] \left(e^{-\beta V(r')} - 1\right) dr' \quad (3.13)$$

Donc l'énergie potentielle d'un électron situé à la distance  $r$  de l'origine est gouvernée par l'équation précédente 3.13.

### 3.2 A dimensionnement de l'équation intégrale pour l'énergie potentielle:

pour éviter les problèmes rattachés aux unités des différents paramètres présents dans cette équation intégrale, il est commode d'exprimer l'équation 3.13 par une forme adimensionnée et ce, en adoptant les définitions et changements suivants[14] :  $Y(x) = -\frac{\alpha V(r)}{Ze^2}$ ,  $x = r/\alpha$ ,  $\eta = \lambda_T/\alpha$  et  $\eta' = \lambda_D/\alpha$  telque,  $\alpha = (4\pi n_e/3)^{-1/3}$  et  $\Gamma = \frac{\beta e^2}{\alpha}$ .

Lorsque nous remplaçons ces changements dans l'équation intégrale 3.13 précédente, nous trouvons:

$$Y(x) = \frac{1}{x} \left(1 - e^{-\frac{x}{\eta}}\right) e^{-\frac{x}{\eta'}} - \frac{3}{2Z} \int_0^\infty \frac{t}{x} (x+x' - |x-x'|) \left(e^{Z\Gamma Y^\circ(x')} - 1\right) dx' \quad (3.14)$$

Cette équation 3.14 est représenté l'équation intégrale[15],[16] non linéaire (adimensionnée) d'un plasma contenant une impureté.

## Chapitre 4

# Résolution numérique de l'équation intégrale de l'énergie potentielle par la méthode de Verlet

### 4.1 Définition de la méthode de verlet

Est un schéma d'intégration qui permet de calculer la trajectoire de particules en simulation de dynamique moléculaire. Cette méthode offre une meilleure stabilité que la plus simple méthode d'Euler, de même que d'importantes propriétés dans les systèmes physiques, telles que réversibilité dans le temps et la conservation de propriété. A première vue, il peut sembler naturel de calculer les trajectoires en utilisant la méthode d'Euler. Cependant, ce type d'intégration souffre de nombreux problèmes. La stabilité de cette technique dépend assez lourdement d'une fréquence de mise à jour uniforme, ou de la capacité d'identifier

précisément les positions passées à un très petit pas de temps précédent[17]. La méthode a été développée par le physicien français Loup Verlet en 1967. Elle est basé sur expansion de la série Taylor et l'expansion de la position de la particule.

#### 4.1.1 L'algorithme de Verlet à deux pas:

Un des algorithmes symplectiques les plus simples à mettre en œuvre et largement utilisé en dynamique moléculaire est l'algorithme de Verlet. Il repose sur le développement de Taylor du vecteur position à l'ordre 3 aux instants  $t + h$  et  $t - h$  [17]:

$$\begin{cases} \vec{r}(t+h) = \vec{r}(t) + h\vec{v}(t) + \frac{h^2}{2}\vec{a}(\vec{r}(t)) + \frac{h^3}{3!}\frac{d^3\vec{r}}{dt^3} + O(h^4) \\ \vec{r}(t-h) = \vec{r}(t) - h\vec{v}(t) + \frac{h^2}{2}\vec{a}(\vec{r}(t)) - \frac{h^3}{3!}\frac{d^3\vec{r}}{dt^3} + O(h^4) \end{cases} \quad (4.1)$$

En sommant ces deux équations la vitesse disparaît et l'on obtient, aux erreurs d'ordre 4 près, le schéma itérative suivant:

$$\begin{cases} \vec{r}_{n+1} = 2\vec{r}_n - \vec{r}_{n-1} + h^2\vec{a}_n \\ \vec{v}_n = \frac{\vec{r}_{n+1} - \vec{r}_{n-1}}{2h} \end{cases} \quad (4.2)$$

#### 4.1.2 L'algorithme de verlet à une pas:

L'algorithme de Verlet à un pas repose sur le schéma numérique suivant[18]:

$$\begin{cases} \vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + h\vec{v}_n + \frac{h^2}{2}\vec{a}_n \\ \vec{v}_{n+1} = \vec{v}_n + \frac{h}{2}(\vec{a}_n + \vec{a}_{n+1}) \end{cases} \quad (4.3)$$

On procédera donc ainsi:

Algorithme de Verlet à un pas:

1. Initialisation du pas  $h$ , de la durée  $\tau$ .
2. Initialisation des conditions initiales:  $t = 0$ ,  $\vec{r} = \vec{r}_0$  et  $\vec{a} = \vec{a}_0$ .
3. Définition de la fonction  $\vec{a}(\vec{r})$ .
4. Tant que  $t \leq \tau$  faire:
  1. (a) Calcul de  $\vec{a}_0 = \vec{a}(\vec{r})$ .
  - (b) Nouvelle position:  $\vec{r} = \vec{r} + h\vec{v} + \frac{h^2}{2}\vec{a}_0$
  - (c) Calcul de  $\vec{a}_1 = \vec{a}(\vec{r})$ .
  - (d) Nouvelle vitesse:  $\vec{v} = \vec{v} + \frac{h}{2}(\vec{a}_0 + \vec{a}_1)$ .
  - (e)  $t = t + h$ .
  - (f) Enregistrement des données.

Cette méthode, de part sa qualité et sa facilité de mise en œuvre est l'une des plus utilisée en dynamique moléculaire[17].

## 4.2 Résolution de l'équation différentielle de l'énergie potentielle EDEP par la méthode de Verlet

### 4.2.1 Transformation de l'équation intégrale de l'énergie potentielle EIEP vers une équation différentielle EDEP:

Nous avons démontré que l'équation intégrale de l'énergie potentielle d'un plasma contenant un impureté de charge  $(+Ze)$  est donnée sous la forme suivante:

$$\phi(r) = -\frac{Ze^2}{r} \left(1 - e^{-\frac{r}{\lambda_T}}\right) e^{-\frac{r}{\lambda_D}} + 4\pi n_e e^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} [(r+r') - |r-r'|] (e^{-\beta\phi(r')} - 1) dr' \quad (4.4)$$

où sous la forme adimensionnée suivante:

$$\begin{cases} Y(x) = Y_{eR} - \frac{3}{2Z} \int_0^\infty \frac{t}{x} (x+t - |x-t|) (e^{ZY(t)} - 1) dt \\ \text{où : } Y_{eR} = \frac{1}{x} \left(1 - e^{-\frac{x}{\eta}}\right) e^{-\frac{x}{\eta'}} \end{cases} \quad (4.5)$$

On peut transformer l'équation intégrale non linéaire 4.5 vers une équation différentielle non linéaire, nous dérivons deux fois la formule 4.5 suivant la règle de Leibnitz [19][20] (voire l'appendice C), nous trouvons:

$$Y''(x) + \frac{2}{x}Y'(x) = Y_{eR}''(x) + \frac{2}{x}Y_{eR}'(x) + \frac{3}{Z} \left( e^{ZY(x)} - 1 \right) \quad (4.6)$$

où:  $Y_{eR}(x)$  est le potentiel initial d'interaction électron impureté et  $\eta = \frac{\lambda_T}{a}$ ,  $\eta' = \frac{\lambda_D}{a}$ ,  $Y'(x) = \frac{\partial Y}{\partial x}$ ,  $Y''(x) = \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2}$ ,  $Y_{eR}'(x) = \frac{\partial Y_{eR}}{\partial x}$  et  $Y_{eR}''(x) = \frac{\partial^2 Y_{eR}}{\partial x^2}$ .

Et en coordonnées sphériques en trois dimension  $\Delta Y_{me}(x) = Y_{eR}''(x) + \frac{2}{x}Y_{eR}'(x)$ , et avec Maple 2016 on peut calculer Laplacien de cette expression:

$$Y''(x) + \frac{2}{x}Y'(x) = \Delta Y_{eR}(x) + \frac{3}{Z} \left( e^{ZY(x)} - 1 \right) \quad (4.7)$$

$$\Delta Y_{eR}(x) = -\frac{\left( (\eta + \eta')^2 e^{-\frac{x}{\eta}} - \eta^2 \right) e^{-\frac{x}{\eta'}}}{x\eta^2\eta'^2} \quad (4.8)$$

donc l'équation 4.7 devient:

$$Y''(x) + \frac{2}{x}Y'(x) = -\frac{\left((\eta + \eta')^2 e^{-\frac{x}{\eta}} - \eta^2\right) e^{-\frac{x}{\eta'}}}{x\eta^2\eta'^2} - \frac{3}{Z} + \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x)} \quad (4.9)$$

$$Y''(x) + \frac{2}{x}Y'(x) = \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x)} + f(x) \quad (4.10)$$

alors:

$$Y''(x) = -\frac{2}{x}Y'(x) + \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x)} + f(x) \quad (4.11)$$

où:

$$f(x) = -\frac{\left((\eta + \eta')^2 e^{-\frac{x}{\eta}} - \eta^2\right) e^{-\frac{x}{\eta'}}}{x\eta^2\eta'^2} - \frac{3}{Z} \quad (4.12)$$

### 4.3 L'application de l'algorithme de Verlet à un pas

L'application de cet algorithme sur l'équation 4.10 donne:

$$\begin{cases} Y(x+h) = Y(x) + hY'(x) + \frac{h^2}{2}Y''(x) \\ Y'(x+h) = Y'(x) + \frac{h}{2}\left(Y''(x) + Y''(x+h)\right) \end{cases} \quad (4.13)$$

on remplace l'équation 4.11 dans 4.13 on trouve:

$$\begin{cases} Y(x+h) = Y(x) + hY'(x) + \frac{h^2}{2}\left[-\frac{2}{x}Y'(x) + \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x)} + f(x)\right] \\ Y'(x+h) = Y'(x) + \frac{h}{2}\left[\left(-\frac{2}{x}Y'(x) + \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x)} + f(x)\right) + \left(-\frac{2}{(x+h)}Y'(x+h) + \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x+h)} + f(x+h)\right)\right] \end{cases} \quad (4.14)$$

**Les conditions initiales:**

D'après l'équation intégrale de l'énergie potentielle on peut écrire:

$$\left\{ \begin{array}{l} Y(0) = \lim_{x \rightarrow 0} Y_{em}(x) = \lim_{x \rightarrow 0} \left( \frac{1}{x} \left( 1 - e^{-\frac{x}{\eta}} \right) e^{-\frac{x}{\eta'}} \right) = \frac{1}{\eta} \\ Y'(0) = \lim_{x \rightarrow 0} Y'_{em}(x) = \lim_{x \rightarrow 0} \left[ \frac{1}{x^2} e^{-\frac{x}{\eta'}} \left( e^{-\frac{x}{\eta}} - 1 \right) + \frac{1}{x\eta} e^{-\frac{x}{\eta}} e^{-\frac{x}{\eta'}} + \frac{1}{x\eta'} e^{-\frac{x}{\eta'}} \left( e^{-\frac{x}{\eta}} - 1 \right) \right] = -\frac{2\eta + \eta'}{2\eta'\eta^2} \end{array} \right. \quad (4.15)$$

La réécriture de l'équation 4.14 donne:

$$\left\{ \begin{array}{l} Y(x+h) = Y(x) + hY'(x) + \frac{h^2}{2} \left[ -\frac{2}{x}Y'(x) + \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x)} + f(x) \right] \\ Y'(x+h) + \frac{h}{(x+h)}Y'(x+h) = Y'(x) \\ + \frac{h}{2} \left[ \left( -\frac{2}{x}Y'(x) + \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x)} + f(x) \right) + \left( \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x+h)} + f(x+h) \right) \right] \end{array} \right. \quad (4.16)$$

donc:

$$\left\{ \begin{array}{l} Y(x+h) = Y(x) + hY'(x) + \frac{h^2}{2} \left[ -\frac{2}{x}Y'(x) + \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x)} + f(x) \right] \\ Y'(x+h) \left( 1 + \frac{h}{(x+h)} \right) = Y'(x) + \\ \frac{h}{2} \left[ \left( -\frac{2}{x}Y'(x) + \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x)} + f(x) \right) + \left( \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x+h)} + f(x+h) \right) \right] \end{array} \right. \quad (4.17)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} Y(x+h) = Y(x) + hY'(x) + \frac{h^2}{2} \left[ -\frac{2}{x}Y'(x) + \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x)} + f(x) \right] \\ Y'(x+h) = \frac{x+h}{x+2h} \left[ Y'(x) + \frac{h}{2} \left[ \begin{array}{l} \left( -\frac{2}{x}Y'(x) + \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x)} + f(x) \right) + \\ \left( \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x+h)} + f(x+h) \right) \end{array} \right] \right] \end{array} \right. \quad (4.18)$$

où:  $\frac{x+h}{x+2h} \equiv 1 / \left( 1 + \frac{h}{x(i+1)} \right)$

### 4.3.1 Organigramme de la méthode de Verlet à un pas

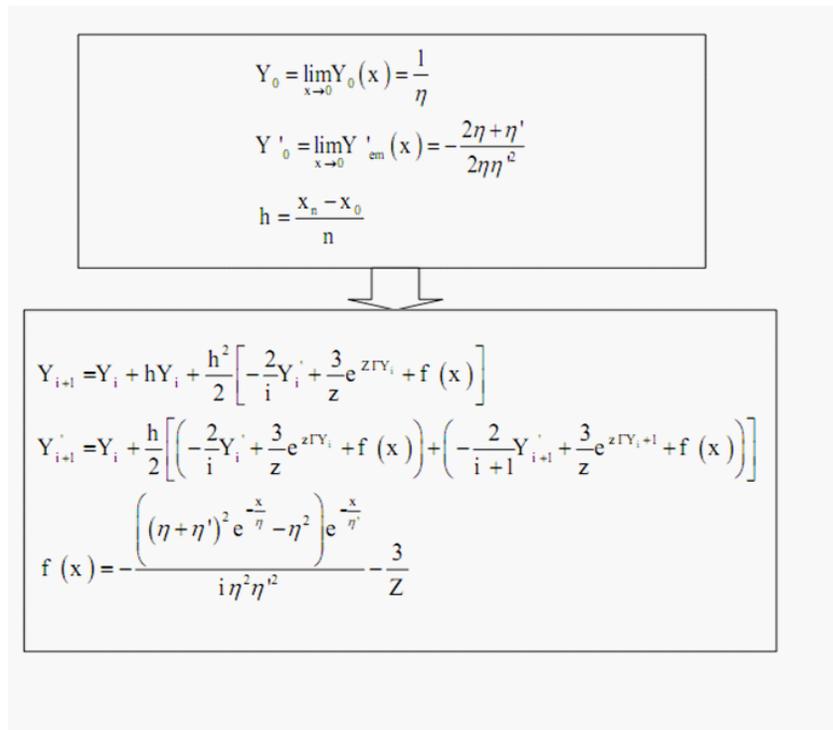


Figure 4.1: Organigramme de la résolution avec la méthode de verlet à un pas

### 4.3.2 Résultats obtenus:

Sur la figure 4.2 nous présentons les deux potentiels effectifs calculés par la méthode de point fixe (MPF) et la méthode de Verlet, pour  $Z = 10$  qui correspondent à la densité électronique  $n_e = 10^{18} \text{cm}^{-3}$  et la température  $T = 10^7 \text{K}$ . Les deux courbes sont confondues.

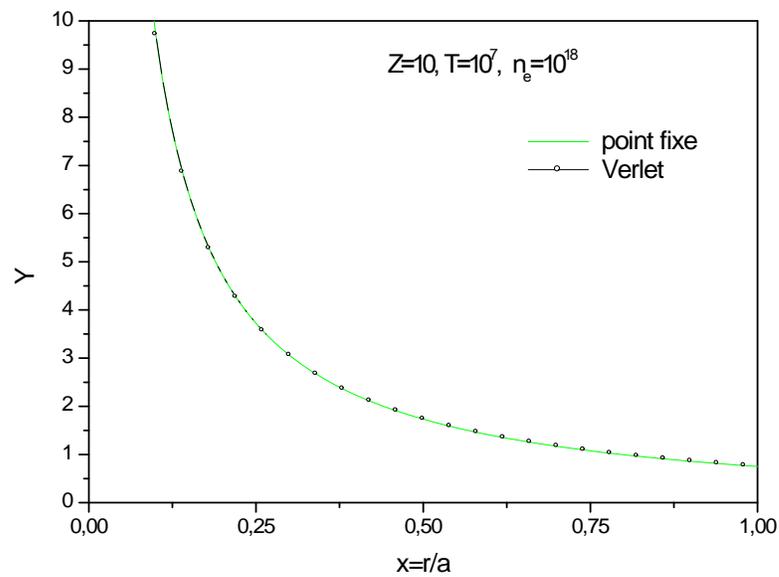


Figure 4.2: Comparaison entre les résultats de MPF et de MV, pour les cas:  $Z = 10$ ,  $T = 10^7 \text{K}$  et  $n_e = 10^{18} \text{cm}^{-3}$ .

Pour montrer la concordance entre les deux méthodes (MV et MPF) nous présentons sur les figures: 4.3, 4.4 et 4.5 les résultats numériques trouvés par les deux méthodes.

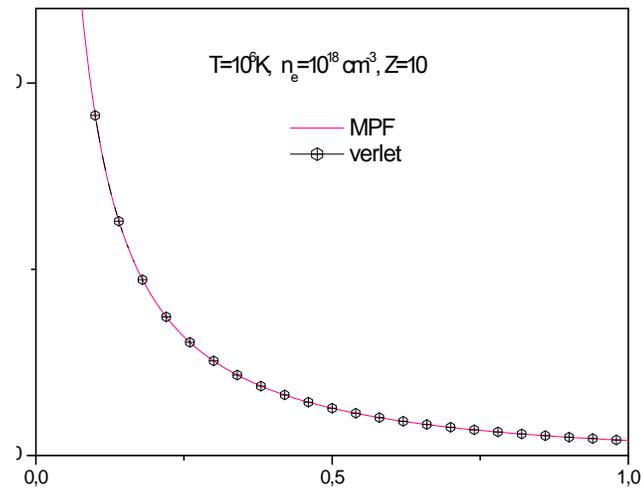


Figure 4.3: Comparaison entre MV et MPF pour  $T = 10^6 K$ .

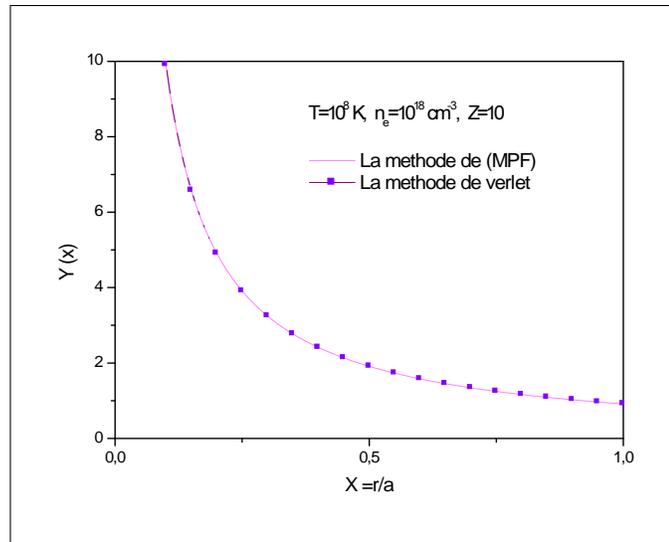


Figure 4.4: Comparaison entre MV et MPF pour  $T = 10^8 K$ .

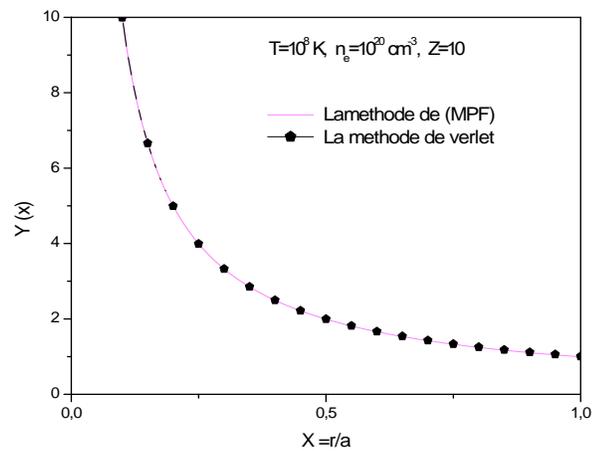


Figure 4.5: Comparaison entre MV et MPF pour  $n_e = 10^{20} cm^{-3}$ .

Sur la figure suivante 4.6 nous présentons l'énergie potentielle trouvée par la méthode de Verlet pour une impureté de charge  $Z = 1$  et plusieurs cas de la température et de la densité. On déduit en général que lorsqu'on augmente la densité l'énergie potentielle devant l'impureté devient faible.

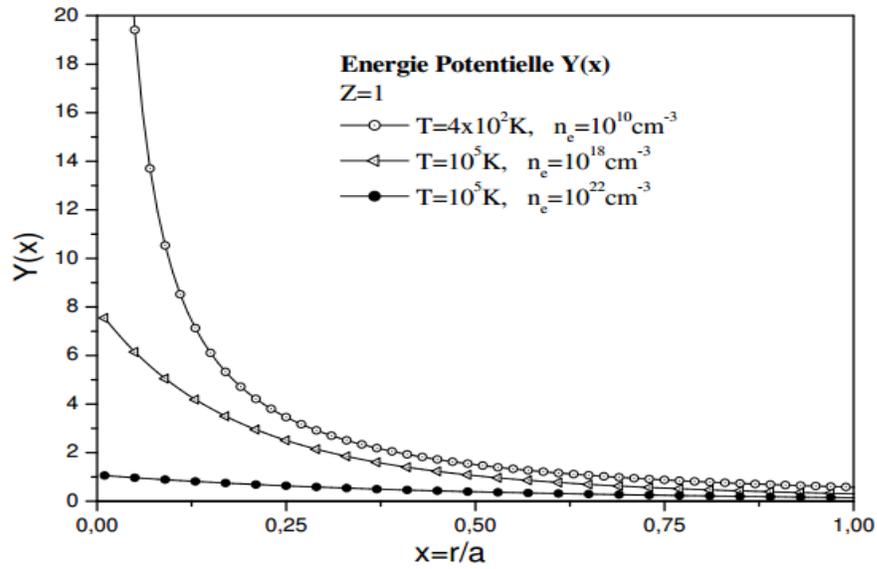


Figure 4.6: L'énergie potentielle  $Y(x)$  trouvée par la méthode de Verlet pour différents cas de  $T$  et  $n_e$

## Chapitre 5

### Conclusion Générale:

Dans ce mémoire, nous avons traité l'énergie potentielle d'un plasma perturbé par une charge test positive considérée comme une impureté fixée à l'origine au centre du système. Ce dernier (système) a été postulé dans le modèle classique basé sur la considération d'un milieu électriquement chargé constitué par des électrons et un fond continu de charges positives neutralisantes, nous avons établi l'équation intégrale générale non-linéaire gouvernant l'énergie potentielle d'un électron situé à la distance ( $r$ ) de l'impureté, qui est une somme de trois contributions : la première est l'énergie d'interaction entre l'électron du plasma et l'impureté. Nous avons pris cette interaction égale à celle de Deutsch écranté. La seconde est l'énergie d'interaction coulombienne entre l'électron en question et les autres électrons du plasma que nous avons calculé en utilisant une distribution de Maxwell-Boltzmann. La troisième est l'énergie d'interaction coulombienne entre l'électron et les ions répartis uniformément dans le plasma.

L'énergie potentielle précédente est gouvernée par une équation intégrale non

linéaire, nous l'avons résolue par deux méthodes différentes: La méthode de point fixe (MPF) et la méthode de Verlet, à l'aide du programmation Matlab.

A la fin de ce mémoire, Nous avons comparé les résultats et trouvés par la méthode de Verlet et la méthode du point fixe(MPF), et nous avons trouvé un bon accord entre les deux méthodes.

# Bibliographie

- [1] L[eslie] A. Aamport. The gnats and gnu document preparation system. *G-Animal's Journal*, 1986.
- [2] L[eslie] A. Aamport. The gnats and gnu document preparation system. *G-Animal's Journal*, 41(7):73+, July 1986. This is a full ARTICLE entry.
- [3] L[eslie] A. Aamport. The gnats and gnu document preparation system. In *G-Animal's Journal* [4], pages 73+. This is a cross-referencing ARTICLE entry.
- [4] *G-Animal's Journal*, 41(7), July 1986. The entire issue is devoted to gnats and gnu (this entry is a cross-referenced ARTICLE (journal)).
- [5] Donald E. Knuth. *The Art of Computer Programming*. Four volumes. Addison-Wesley, 1968–90. Seven volumes planned (this is a cross-referenced set of BOOKs).
- [6] Donald E. Knuth. *Fundamental Algorithms*, chapter 1.2. Addison-Wesley, 1973.
- [7] Donald E. Knuth. *Fundamental Algorithms*, volume 1 of *The Art of Computer Programming*, section 1.2, pages 10–119. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, second edition, 10 January 1973. This is a full INBOOK entry.

- [8] Donald E. Knuth. *Fundamental Algorithms*, section 1.2. Volume 1 of *The Art of Computer Programming* [5], second edition, 1973. This is a cross-referencing INBOOK entry.
- [9] Donald E. Knuth. *Seminumerical Algorithms*. Addison-Wesley, 1981.
- [10] Donald E. Knuth. *Seminumerical Algorithms*, volume 2 of *The Art of Computer Programming*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, second edition, 10 January 1981. This is a full BOOK entry.
- [11] Donald E. Knuth. *Seminumerical Algorithms*. Volume 2 of *The Art of Computer Programming* [5], second edition, 1981. This is a cross-referencing BOOK entry.
- [12] The programming of computer art.
- [13] Jill C. Knuth. The programming of computer art. Vernier Art Center, Stanford, California, February 1988. This is a full BOOKLET entry.
- [14] Daniel D. Lincolll. Semigroups of recurrences. In *High Speed Computer and Algorithm Organization*. Academic Press, 1977.
- [15] Daniel D. Lincolll. Semigroups of recurrences. In David J. Lipcoll, D. H. Lawrie, and A. H. Sameh, editors, *High Speed Computer and Algorithm Organization*, number 23 in *Fast Computers*, part 3, pages 179–183. Academic Press, New York, third edition, September 1977. This is a full INCOLLECTION entry.
- [16] Daniel D. Lincolll. Semigroups of recurrences. In Lipcoll et al. [17], pages 179–183. This is a cross-referencing INCOLLECTION entry.

- [17] David J. Lipcoll, D. H. Lawrie, and A. H. Sameh, editors. *High Speed Computer and Algorithm Organization*. Number 23 in Fast Computers. Academic Press, New York, third edition, September 1977. This is a cross-referenced BOOK (collection) entry.
- [18] *The Definitive Computer Manual*.
- [19] Larry Manmaker. *The Definitive Computer Manual*. Chips-R-Us, Silicon Valley, silver edition, April-May 1986. This is a full MANUAL entry.
- [20] Édouard Masterly. Mastering thesis writing. Master's thesis, Stanford University, 1988.
- [21] Édouard Masterly. Mastering thesis writing. Master's project, Stanford University, English Department, June-August 1988. This is a full MASTERSTHESIS entry.
- [22] This is a minimal MISC entry.
- [23] Joe-Bob Missilany. Handing out random pamphlets in airports. Handed out at O'Hare, October 1984. This is a full MISC entry.
- [24] Alfred V. Oaho, Jeffrey D. Ullman, and Mihalis Yannakakis. On notions of information transfer in VLSI circuits. In *Proc. Fifteenth Annual ACM Symposium on the Theory of Computing*, 1983.
- [25] Alfred V. Oaho, Jeffrey D. Ullman, and Mihalis Yannakakis. On notions of information transfer in VLSI circuits. In Wizard V. Oz and Mihalis Yannakakis, editors, *Proc. Fifteenth Annual ACM Symposium on the Theory of Computing*, number 17 in All ACM Conferences, pages 133–139, Boston, March 1983. The OX Association for Computing Machinery, Academic Press. This is a full INPROCEEDINGS entry.

- [26] Alfred V. Oaho, Jeffrey D. Ullman, and Mihalis Yannakakis. On notions of information transfer in VLSI circuits. In OXstoc [27], pages 133–139. This is a cross-referencing INPROCEEDINGS entry.
- [27] The OX Association for Computing Machinery. *Proc. Fifteenth Annual Symposium on the Theory of Computing*, Boston, 1983. This is a cross-referenced PROCEEDINGS.
- [28] *Proc. Fifteenth Annual Symposium on the Theory of Computing*, 1983.
- [29] Wizard V. Oz and Mihalis Yannakakis, editors. *Proc. Fifteenth Annual Symposium on the Theory of Computing*, number 17 in All ACM Conferences, Boston, March 1983. The OX Association for Computing Machinery, Academic Press. This is a full PROCEEDINGS entry.
- [30] F. Phidias Phony-Baloney. *Fighting Fire with Fire: Festooning French Phrases*. PhD thesis, Fanstord University, 1988.
- [31] F. Phidias Phony-Baloney. *Fighting Fire with Fire: Festooning French Phrases*. PhD dissertation, Fanstord University, Department of French, June-August 1988. This is a full PHDTHESIS entry.
- [32] Tom Terrific. An  $O(n \log n / \log \log n)$  sorting algorithm. Technical report, Fanstord University, 1988.
- [33] Tom T errific. An  $O(n \log n / \log \log n)$  sorting algorithm. Wishful Research Result 7, Fanstord University, Computer Science Department, Fanstord, California, October 1988. This is a full TECHREPORT entry.

- [34] Ulrich Ünderwood, Ned Ñet, and Paul P̄ot. Lower bounds for wishful research results. Talk at Fanstord University (this is a minimal UNPUBLISHED entry).
- [35] Ulrich Ünderwood, Ned Ñet, and Paul P̄ot. Lower bounds for wishful research results. Talk at Fanstord University (this is a full UNPUBLISHED entry), November, December 1988.
- [36] Volume 2 is listed under Knuth [10].

# Bibliographie

- [1] I. Chihi, thèse de Doctorat, Université de Constantine, Algérie, (2005).
- [2] A. M. SALAH, Thèse de Doctorat, Université de Ouargla, Algérie, (2010).
- [3] J. L. Raimbault, Laboratoire de physique des plasmas, Physique des plasmas et applications, Université Paris -Sud 11, (2010-2011). .
- [4] W. L. Slattery, G. D. Doolen, H. E. DeWitt, *phys. Rev. A* 21, 2087 (1980).
- [5] M. Baus, J. P. Hansen, *Phys. Rep* 59, 11-94 (1980).
- [6] J. L. Delcroix, *physique des plasma 1*, Université Paris-Sud, (1994).
- [7] S.Douis, Thèse de Magistere, Université de Ouargla , Algérie,(2000).
- [8] E. Dufour, A. Calisti, B. Talin, M. Gigosos, M. Gonzalez, T. del Ro Gaztelurrutia and J. W. Dufty, *Phys. Rev. E* 71, 066409 (2005).
- [9] B. Talin, A. Calisti, J. W. Dufty and I. V. Pogorelov, *Phys. Rev. E* 77, 036410 (2008).
- [10] S. Douis,Thèse de Doctorat, Université de Ouargla, Algérie, (2013)

- [11] S. Douis and M. T. Meftah, Correlation function and electronic spectral line broadening in relativistic plasmas, *Serb. Astron. J.* Vol. 186, 15-23 (2013) .
- [12] S. Douis and M. T. Meftah, Relativistic dynamics of electrons around impurities in high density plasmas, *J. Theor. Appl. Phys.*, 7:33 (2013).
- [13] Boris V. Alexees, *Generalized Boltzmann Physical Kinetics*, Elsevier B. V. (2004).
- [14] S. Douis and M. T. Meftah; A classical description of the electrons in plasma, *Annales des Sciences et Technologie* Vol. 5, N° 1, 27-33 (2013).
- [15] G. Bratu *Bulletin de la S. M. F.* Tome 42, P 113-142 (1914).
- [16] L. M. Deleves, J. Walsh, *Numerical solution of integral equations*, Clarendon Press OXFORD, (1974).
- [17] Loup Verlet, « Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules », *Physical Review*, vol. 159, N1, 1967, p. 98-103.
- [18] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (University Press, Oxford, 1989).
- [19] A.J. Jerri, *Introduction to Integral Equations with Applications*, Wiley, New York, (1999).
- [20] R. Kress, *Linear Integral Equations*, Springer, Berlin, (1999).

## Appendice A

# Loi de distribution des vitesses de Maxwelle

Pour un gaz en état d'équilibre, posons la question suivante:

Quelle probabilité existe qu'une molécule ait ses composantes de vitesse comprise entre  $v_x$  et  $v_x + dv_x$ ;  $v_y$  et  $v_y + dv_y$ ;  $v_z$  et  $v_z + dv_z$  (repère cartésien habituel) ?

Cette probabilité  $dp^3$  cette probabilité dépend de (c'est-à-dire  $v_x; v_y; v_z$ ) et de  $dv_x; dv_y; dv_z$ .

Elle ne dépend pas de la position de la molécule puisque le gaz est en équilibre.

L'intégrale la densité de distribution des vitesses vectorielles de Maxwell Boltzmann est:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{v}) d\vec{v}^3 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{N}{\Omega} \left(\frac{m_e \beta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\beta \frac{m_e}{2} \vec{v}^2} d\vec{v}^3 \quad (\text{A.1})$$

Où  $\frac{N}{\Omega} + n_e$  la densité électronique

Pour le changement vers la quantité du mouvement on écrit:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{p}) d\vec{p}^3 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{N}{\Omega} \left(\frac{m_e \beta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\beta \frac{\vec{p}^2}{2m}} \left(\frac{1}{m^3} d\vec{p}^3\right) \quad (\text{A.2})$$

En coordonnées sphériques le module:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{p}^3 &= \frac{1}{m^3} \int_0^{+\infty} \frac{N}{\Omega} \left(\frac{m_e \beta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} (4\pi) dp \\ &= \frac{1}{m^3} \frac{N}{\Omega} \left(\frac{m_e \beta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} (4\pi) \int_0^{+\infty} e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} (p^2) dp \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

et puisque on a  $I = \int_0^{+\infty} p^2 e^{-\frac{\beta}{2m} p^2} dp = \frac{m}{2\beta} \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} = \frac{1}{4\pi} (2\pi m k T)^{\frac{3}{2}}$  donc:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{p}^3 &= \frac{1}{m^3} \int_0^{+\infty} \frac{N}{\Omega} \left(\frac{m_e \beta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} (4\pi p^2) dp \\ &= \frac{1}{m^3} \frac{N}{\Omega} \left(\frac{m_e \beta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} (4\pi) \times \left(\frac{m}{2\beta} \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}}\right) = \frac{N}{\Omega} = n_e \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

donc:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{p}^3 = n_e \quad (\text{A.5})$$

## Appendice B

### Etablissement de l'équation

### Intégrale pour l'énergie Potentielle

D'après l'équation 3.11 on a:

$$V(r) = V_{em}(r) + n_e e^2 \int \frac{(e^{-\beta v(r')} - 1)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 \quad (\text{B.1})$$

Cette équation s'écrit en coordonnées sphériques:

$$V(r) = V_{em}(r) + n_e e^2 \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (e^{-\beta v(r')} - 1) \frac{r'^2 \sin \theta' d\varphi' d\theta' dr'}{[r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \psi]^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{B.2})$$

Où  $\psi$  est l'angle entre les deux vecteurs  $\vec{r}$  et  $\vec{r}'$  (Voire la figure B.1) et égale:

$$\cos \psi = \sin \theta \sin \theta' \cos(\psi - \psi') + \cos \theta \cos \theta' \quad (\text{B.3})$$

Nous remplaçons la relation B.3 dans l'équation B.2 nous obtenons:

$$V(r) = V_{em}(r) + n_e e^2 \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\left(e^{-\beta v(r')} - 1\right) r'^2 \sin \theta' d\varphi' d\theta' dr'}{\left[r^2 + r'^2 - 2rr' (\sin \theta \sin \theta' \cos(\psi - \psi') + \cos \theta \cos \theta')\right]^{\frac{1}{2}}}$$

Si on suppose que le vecteur  $\vec{r}$  est situé sur l'axe oz donc ( $\theta = 0$ ), alors l'équation B.3 devient  $\cos(\psi) = \cos(\theta')$ .

$$V(r) = V_{em}(r) + 2\pi n_e e^2 \int_0^\infty \int_0^\pi \frac{\left(e^{-\beta v(r')} - 1\right) r'^2 \sin \theta' d\theta' dr'}{\left[r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta'\right]^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{B.4})$$

Après intégration sur l'angle  $\theta'$ , on aura:

$$\begin{aligned} V(r) &= V_{em}(r) + 2\pi n_e e^2 \int_0^\infty r'^2 \left(e^{-\beta v(r')} - 1\right) dr' \left[ \left(r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta'\right)^{\frac{1}{2}} \right]_0^\pi \times \frac{1}{rr'} \\ &= V_{em}(r) + 4\pi n_e e^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} \left(e^{-\beta v(r')} - 1\right) dr' \left[ \left(r^2 + r'^2 - 2rr'\right)^{\frac{1}{2}} - \left(r^2 + r'^2 - 2rr'\right)^{\frac{1}{2}} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

donc:

$$V(r) = V_{em}(r) + 4\pi n_e e^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} \left(e^{-\beta v(r')} - 1\right) [(r + r') - |r - r'|] dr' \quad (\text{B.6})$$

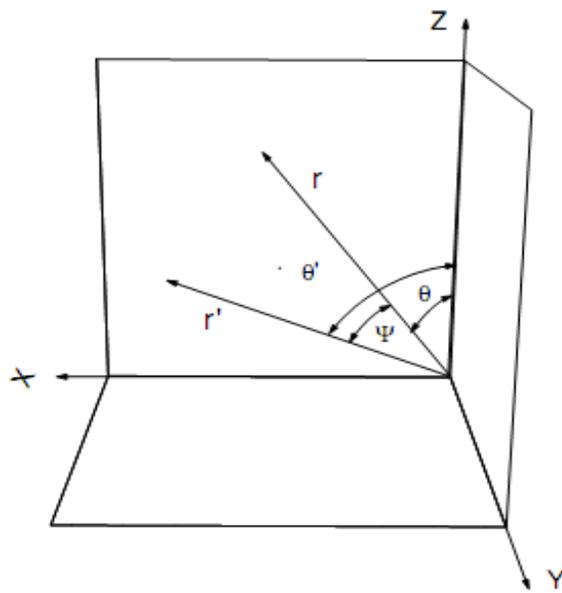


Figure B.1: Représentation de l'angle  $\psi$

## Appendice C

# Transformation de l'équation intégrale de l'énergie potentielle vers une équation différentielle de deuxième ordre

### C.1 La règle de Leibnitz:

Soit l'intégrale suivante:

$$f(x) = \int_a^x g(x, t) dt \quad (\text{C.1})$$

La dérivée de cette intégrale est d'après la règle de Leibnitz est donnée par:

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} = \int_a^x \frac{dg(x, t)}{dx} dt + [g(x, x) - g(x, a)] \quad (\text{C.2})$$

## C.2 L'application de la règle de Leibnitz:

On applique cette méthode sur notre équation intégrale de l'énergie potentielle qu'est sous la forme:

$$Y(x) = Y_{me}(x) - \frac{3}{2z} \int_0^\infty \frac{t}{x} (x+t-|x-t|) \left( e^{Z\Gamma Y(t)} - 1 \right) dt \quad (C.3)$$

où:

$$Y_{me}(x) = \frac{1}{x} \left( 1 - e^{-\frac{x}{\eta}} \right) e^{-\frac{x}{\eta}} \quad (C.4)$$

on écrit cette équation C.3: sous la forme suivante:

$$\begin{aligned} Y(x) &= Y_{me}(x) - \frac{3}{2Z} \int_0^x \frac{t}{x} (x+t-|x-t|) \left( e^{Z\Gamma Y(t)} - 1 \right) dt \\ &\quad - \frac{3}{2Z} \int_x^\infty \frac{t}{x} (x+t-|x-t|) \left( e^{Z\Gamma Y(t)} - 1 \right) dt \end{aligned} \quad (C.5)$$

nous multiplions cette équation dernière par  $x$  on trouve:

$$\begin{aligned} xY(x) &= xY_{me}(x) - \frac{3}{2Z} \int_0^\infty t(x+t-|x-t|) \left( e^{Z\Gamma Y(t)} - 1 \right) dt \\ &\quad - \frac{3}{2Z} \int_x^\infty t(x+t-|x-t|) \left( e^{Z\Gamma Y(t)} - 1 \right) dt \end{aligned} \quad (C.6)$$

$$\text{et on } \left\{ \begin{array}{l} t \in [0, x] \implies t \leq x \implies |x-t| = x-t \\ t \in [x, \infty] \implies t \geq x \implies |x-t| = -(x-t) = t-x \end{array} \right\}$$

donc l'équation C.6 devient:

$$\begin{aligned} xY(x) + xY_{me}(x) &= -\frac{3}{2z} \int_0^x \frac{t}{x} (x+t-(x-t)) \left( e^{Z\Gamma Y(t)} - 1 \right) dt \\ &\quad - \frac{3}{2z} \int_x^\infty \frac{t}{x} (x+t-(x-t)) \left( e^{Z\Gamma Y(t)} - 1 \right) dt \end{aligned} \quad (C.7)$$

et égale:

$$xY(x) - xY_{me}(x) = -\frac{3}{Z} \int_0^X t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt - \frac{3x}{Z_i} \int_x^\infty t (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \quad (\text{C.8})$$

donc on applique la règle 2: sur l'équation C.8:

et on a:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left[ -\frac{3}{Z} \int_0^X t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right] &= -\frac{3}{Z} \int_0^X \frac{d}{dx} (t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1)) dt \\ -\frac{3}{Z} (x^2 (e^{Z\Gamma Y(x)} - 1)) + 0 &= -\frac{3}{Z} (x^2 (e^{Z\Gamma Y(x)} - 1)) \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

$$\text{puisque} \left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dx} g_1(x, t) = \frac{d}{dx} (t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1)) dt = 0 \\ g_1(x, x) = (x^2 (e^{Z\Gamma Y(x)} - 1)) \\ g_1(x, 0) = 0 \end{array} \right\}$$

et on

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left[ -\frac{3x}{Z} \int_x^\infty t (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right] &= -\frac{3}{Z} \int_x^\infty t (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt + x \frac{d}{dx} \left[ -\frac{3}{Z} \int_x^\infty t (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right] \\ &= -\frac{3}{Z} \int_x^\infty t (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt + \frac{3}{Z} x^2 (e^{Z\Gamma Y(x)} - 1) dt \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

$$\text{puisque} \left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dx} g_2(x, t) = \frac{d}{dx} (t (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1)) = 0 \\ g_2(x, x) = (x (e^{Z\Gamma Y(x)} - 1)) \\ g_2(x, 0) = 0 \\ \int_x^\infty = -\int_\infty^x \end{array} \right\}$$

donc d'après C.9 et C.10

$$(xY(x))' - (xY_{me}(x))' = xY'(x) - Y(x) - xY_{em}(x)' - Y_{em}(x)$$

$$\begin{aligned}
(xY(x))' - (xY_{me}(x))' &= -\frac{3}{Z}x^2 \left( e^{Z\Gamma Y(x)} - 1 \right) \\
&\quad - \frac{3}{Z} \int_x^\infty t \left( e^{Z\Gamma Y(t)} - 1 \right) dt + -\frac{3}{Z}x^2 \left( e^{Z\Gamma Y(t)} - 1 \right) dt
\end{aligned} \tag{C.11}$$

en égale:

$$xY'(x) + Y(x) - xY'_{me}(x) - Y_{me}(x) = -\frac{3}{z} \int_x^\infty t \left( e^{Z\Gamma Y(t)} - 1 \right) dt \tag{C.12}$$

la dérivée deuxième de cette fonction est:

$$\begin{aligned}
&Y'(x) + xY''(x) + Y'(x) - Y'_{me}(x) - xY''_{me}(x) - Y'_{me}(x) \\
&= \frac{3}{Z}x \left( e^{Z\Gamma Y(x)} - 1 \right)
\end{aligned} \tag{C.13}$$

$$xY''(x) + 2Y'(x) - xY''_{me}(x) - 2Y'_{me}(x) = \frac{3}{Z}x \left( e^{Z\Gamma Y(x)} - 1 \right)$$

on divise par  $x$  on trouve l'équation différentielle de l'énergie potentielle:

$$Y''(x) + \frac{2}{x}Y'(x) = Y''_{me}(x) + \frac{2}{x}Y'_{me}(x) + \frac{3}{Z} \left( e^{Z\Gamma Y(x)} - 1 \right) \tag{C.14}$$

et puisque en coordonnées sphérique  $\Delta Y(x) = Y''(x) + \frac{2}{x}Y'(x)$

donc l'équation C.14 devient:

$$\Delta Y(x) = \Delta Y_{me}(x) + \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x)} - \frac{3}{Z} \tag{C.15}$$

$$\Delta Y(x) = \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x)} + \Delta Y_{me}(x) - \frac{3}{Z} \tag{C.16}$$