pA1

FONCTIONS DE CORRELATION A DEUX POINTS DANS UN PLASMA

Hakima ABABSA et Mohammed Tayeb MEFTAH
Laboratoires LENREZA et LRPPS et Département Sciences de la Matière, Faculté des Sciences et Technologies et des Sciences de la Matière, Université Kasdi Merbah – Ouargla, 30000 Ouargla, Algérie
E-mail: ab.hakima@gmail.com

RÉSUMÉ : Les fonctions de distribution radiale g(r) (RDF) sont importantes dans l'investigation des propriétés thermodynamiques macroscopiques à partir des interactions intermoléculaires dans les plasmas. Dans l'ensemble canonique de la mécanique statistique, nous étudions les fonctions de distribution des paires $g(r_1,r_2)$ (les fonctions de corrélation partielle) à deux points dans un plasma par la méthode des simulations de Monte Carlo (MC).

MOTS-CLÉS : fonction de distribution radiale, fonction de corrélation partielle, Monte Carlo

Formalisme:

Pour définir les fonctions de distribution radiales g (r) de façon formelle, nous introduisons la probabilité d'une configuration de N particules dans un volume V en équilibre avec un bain thermique à la température T:

$$P_N(r_1, r_2, ...r_N)dr_1 dr_2.....dr_N = \frac{e^{-\beta U} d^3r_1 d^3r_2.....d^3r_N}{\int e^{-\beta U} dr_1 dr_2.....dr_N} = \frac{e^{-\beta U} d^3r_1 d^3r_2.....d^3r_N}{Q_N} \qquad (1)$$

où U est l'énergie potentielle totale de la configuration. La quantité $P_N\ dr_1dr_2. . .\ dr_N$ est la probabilité que la particule 1 soit dans le volume différentiel dr1 situé sur l'extrémité de r1, la particule 2 soit dans le volume différentiel dr2 situé sur l'extrémité de r2 etc... et :

$$Q_N = \int e^{-\beta U} dr_1 dr_2.....dr_N = Z_N \big/ \left(N!\lambda^{3N}\right) \qquad (2)$$

la probabilité que la particule 1 soit dans le volume différentiel dr1 situé sur l'extrémité de r1 et la particule 2 soit dans le volume différentiel dr2 situé sur l'extrémité de r2 est obtenue en intégrant (1) sur les positions des particules 3 à N:

$$P_N(r_1, r_2)dr_1 dr_2 = \frac{\int e^{-\beta U} d^3r_3.....d^3r_N}{Q_N} \qquad (3)$$

La fonction de distribution de paires g (r_1, r_2) est définie comme

$$\rho^2 g(r_1, r_2) = N(N-1)P_2 = N(N-1)\frac{\int e^{-\beta U} d^3 r_3 .....d^3 r_N}{Q_N} \tag{4}$$

et ρ = N / V ce qui permet d'écrire g comme:

$$g(r_1, r_2) = \left(1 - \frac{1}{N}\right)\frac{\int e^{-\beta U} d^3 r_3 .....d^3 r_N}{Q_N} \tag{6}$$

Si l'interaction entre les particules est à symétrie sphérique et le système est un fluide (liquide ou gaz), alors g (r_1, r_2) ne dépend que de la distance r = | r_1 - r_2 | entre les particules 1 et 2. Nous adoptons la notation g (r) = g (r_{12}) et définissons la fonction de distribution radiale g (r)

$$g(r) = \left(1 - \frac{1}{N}\right)\frac{\int e^{-\beta U} d^3 r_3 .....d^3 r_N}{Q_N} \tag{7}$$

Pour le calcul des fonctions de distribution radiale du plasma, nous utilisons la méthode des simulations de Monte Carlo (MC) qui est basée sur l'utilisation des nombres aléatoires. Cette méthode permet l'estimation des moyennes de grandeurs physiques données par la formulation de Gibbs de la mécanique statistique.

RESULTATS

En calculant la fonction de distribution, nous pouvons déduire les fonctions de corrélation h(r) et le facteur de structure S(k) et les propriétés physiques comme la conductivité électrique et l'indice optique.

L'étape actuelle consiste à étudier de la fonction de corrélations à trois points g(r_1,r_2,r_3). Ce projet est en cours de réalisation.

Références

[1] M. Baus et J. P. Hansen; phys. Rep. **59** (1), 1(1980).
[2] J. P. Hansen et I. R. McDonald;"***theory of simple liquids***"; Academic press, 1976.
[3] H. ABABSA, Mémoire de magister, Université de Ouargla, 2006.