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

.

Université De Kasdi Merbah Ouargla
Faculté Des Mathématiques et Sciences De La Matière
Département de Physique
BETTAHAR Naima et RAMDANE Rania
Dr: SAID Douis

Problématique: L'objectif visé dans ce sujet est la résolution numérique de l'équation intégrale de l'énergie potentielle d'un plasma contenant une (+Ze) par la méthode de Verlet, où l'interaction électron impureté est représenté par le pseudo-potentiel de Deutsch écranté. Et faire impureté une étude comparative avec les autres méthodes de résolution notamment la méthode de Runge-Kutta et la méthode de point fixe. Ensuite nous déterminerons quelques propriétés statiques de ce plasma.

Mots clés: L'équation intégrale de l'énergie potentielle, Pseudo-potentiel de Deutsch écranté, Méthode de Verlet

Introduction: Les algorithmes de Verlet sont largement utilisés pour intégrer les équations du mouvement de Newton et calculer les trajectoires de particules dans la dynamique moléculaire. Cette méthode offre une meilleure stabilité que les méthodes classiques, ainsi que des propriétés importantes dans les systèmes physiques, telles que la réversibilité dans le temps et la conservation de la propriété

Etablissement de l'équation intégrale d'un plasma contenant une impéritie:

l'énergie potentielle V d'une électron situé à distance (r) de l'origine d'un plasma contenant une impéritie (placée à de l'orgine de coordonnées) est construite partir de quatre contribution: La première contribution V_{em}(r) du à l'interaction de cet électron avec la impéritie 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'intraction de l'électron avec le fond continu des charges positives neutralisantes.

Donc on écrire :

$$V(r) = V_{em}(r) + V_{ee}(r) + V_{ei}(r) \qquad (1)$$

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

$$V_{em}(r) = -\frac{Ze^2}{r}\left(1 - e^{-\frac{r}{\lambda_T}}\right)e^{-\frac{r}{\lambda_D}} \qquad (1.1)$$

Où: $\lambda_T = (2\pi\hbar^2/(m_e k_B T))^{1/2}$ est la longure de Broglie, et $\lambda_D = \sqrt{k_B T/(4\pi n_e e^2)}$ est la longure de Debye.

-l'interaction électron-électron est celui de Coulomb, et s'écrite dans l'approximation du champ moyen comme:

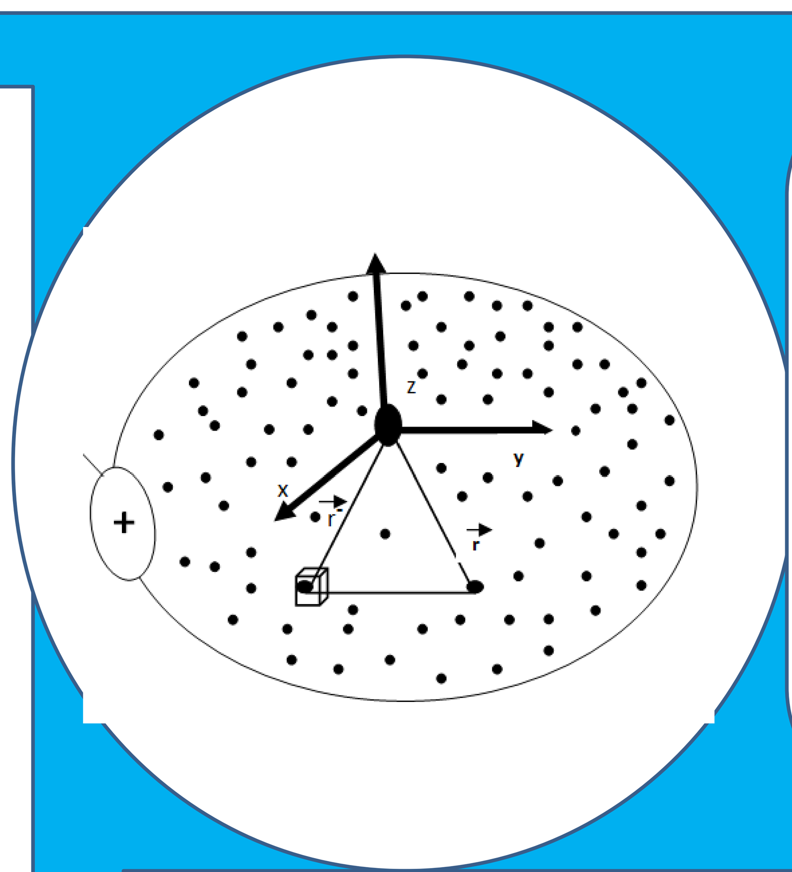
$$V_{ee}(r) = e^2 \iint f(\vec{r},\vec{p}) \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r'}|} d\vec{p}^3 d\vec{r'}^3 \qquad (1.2)$$

talque:

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

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

$$V_{ei}(r) = -n_i e^2 \int \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r'}|} d\vec{r'}^3 \quad (1.3)$$



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

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

Reusultats: donc l'énergie potentielle d' un électron situé à la distance(r) de l'origine est gouvernée par l'équation suivante:

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

ou sous la forme adimensionnée suivante:

$$Y(x) = Y_{eR} - \frac{3}{2Z}\int_0^\infty \frac{t}{x}(x + t - |x-t|)(e^{Z\Gamma Y(t)} - 1)dt$$

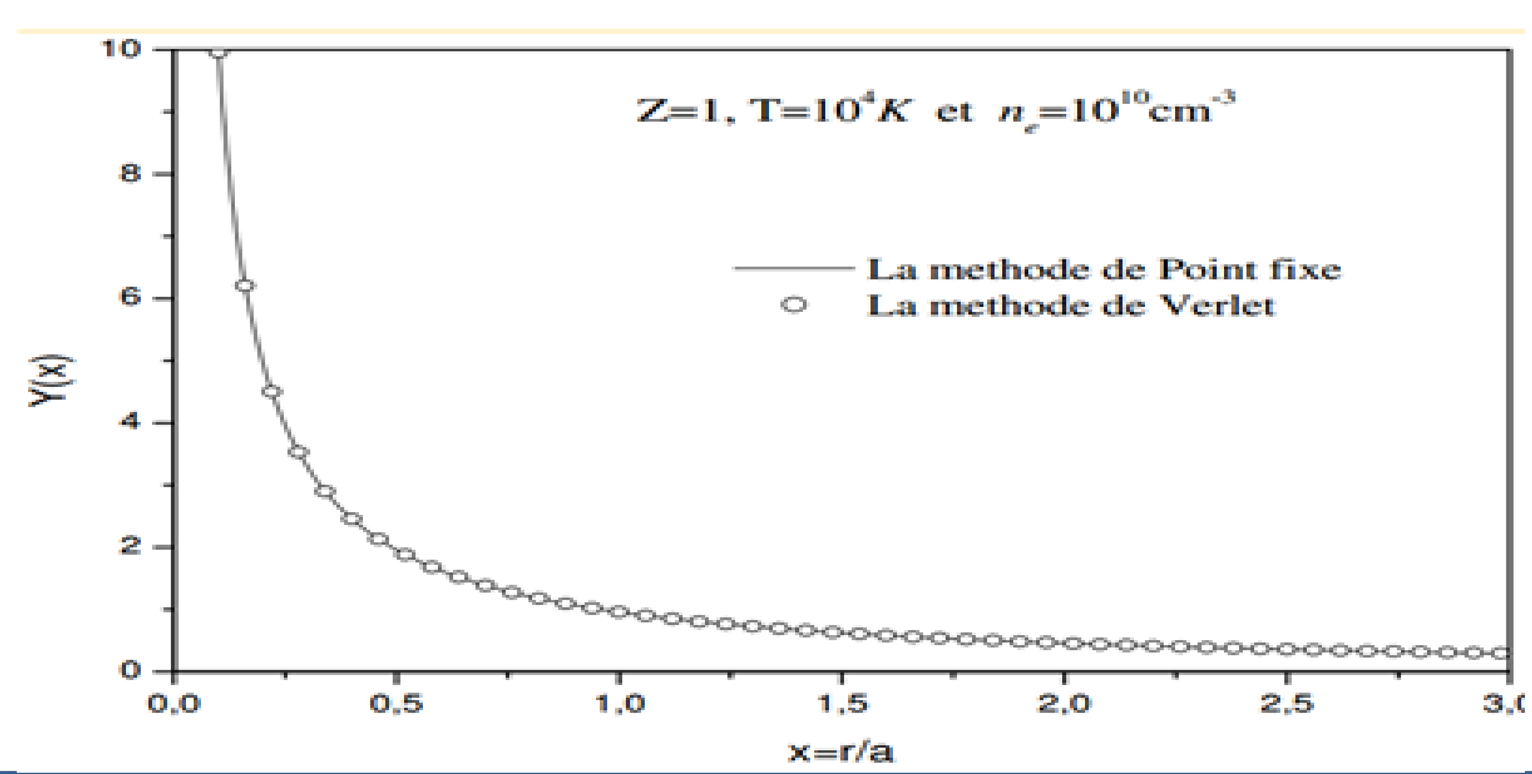
On peut transformer l'équation intégrale non linéaire vers une équation différentielle non linéaire, nous dérivons deux fois la formule suivant la règle de Leibnitz rule nous trouvons:

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

Où: $Y_{eR}(x) = \frac{1}{x}(1 - e^{-\frac{x}{\eta}})e^{-\frac{x}{\eta'}}$ $\qquad Y''_{eR}(x) = \frac{\partial^2 Y_{eR}}{\partial x^2}$,

et $\eta = \frac{\lambda_T}{a}$, $\eta' = \frac{\lambda_D}{a}$, $Y'(x) = \frac{\partial Y}{\partial x}$, $Y''(x) = \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2}$, $Y'_{eR}(x) = \frac{\partial Y_{eR}}{\partial x}$

-Solution numérique de l'énergie intégrale de l'énergie potentielle de plasma par la méthode de point fixe et la méthode de verlet.



CONCLUSION :
Les résultats numériques trouvés par la méthode de Verlet donnent de bon accord avec la méthode du point fixe.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES:
[1]-SAId Douis/MEFTAH M.T/N.TOUAHRI/K.Benbelgacem.Effect of électron-ion coupling on the électric microfield distribution in plasmas -2017-page2
[2]-R. Kress, Linear Intégral Equations, Springer, Berlin, (1999).