



N° d'ordre :

N° de série :

UNIVERSITÉ DE KASDI MERBAH OUARGLA  
FACULTÉ DES MATHÉMATIQUES ET DES SCIENCES DE LA  
MATIÈRE  
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

---

## MÉMOIRE DE MASTER / ACADÉMIQUE

Spécialité « Physique de Rayonnement »

par

CHAIB Wafa

# LA FONCTION D'AUTO-CORRÉLATION TEMPORELLE DU MICRO-CHAMP ÉLECTRIQUE DE PLASMA AVEC TENIR COMPTE DE LA STRUCTURE IONIQUE

Thèse soutenue le 14/06/2021 devant le jury composé de :

Pr :	T. CHOIRA	Université de Kasdi Merbah Ouargla	Président
Dr :	K. BENBELGACEM	Université de Kasdi Merbah Ouargla	Examineur
Pr :	S. DOUIS	Université de Kasdi Merbah Ouargla	Directeur De mémoire



*Ma chère mère*  
*Mon cher père*  
*Mes sœurs*  
*Mes frères*  
*Toute ma famille*  
*Mes amies*

# REMERCIEMENTS

**J**E remercie Dieu le tout puissant de m'avoir donnée la patience et l'énergie pour poursuivre ce travail.

Je souhaite remercier mon directeur du mémoire, Pr. DOUIS Said. Je le remercie de m'avoir encadrée, orientée, aidée et conseillée.

Je souhaite remercier énormément Pr. CHOIRA Thouria de m'avoir fait l'honneur de présider le jury. Je remercie de même Dr. BENBELGACEM Khalfallah d'avoir accepté de faire partie du jury.

Je remercie mes très chers parents, qui ont toujours été là pour moi. Je remercie mes sœurs et mes frères pour leurs encouragements.

J'exprime également mes sincères remerciements et ma reconnaissance à tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin accomplir et achever ce travail.



## Résumé

L'objectif visé dans ce travail est d'introduire l'effet de la structure ionique dans la fonction du micro-champ électrique des électrons d'un plasma perturbé par une impureté positive. Cette étude est effectuée dans la théorie du champ moyen et au sein du modèle de plasma à une composante (OCP).

Premièrement, Nous avons établi l'équation intégrale non linéaire gouvernant le potentiel électronique effectif, en prenant le Pseudo-potentiel de Hellmann-Gurskii-Krasko (HGK) qui introduit la structure ionique dans l'interaction entre l'électron de valence et le noyau ionique. Deuxièmement, nous avons résolu numériquement cette équation intégrale par la méthode de point fixe pour déterminer ce potentiel effectif qui permettant de calculer les trajectoires des électrons autour de l'impureté et la fonction d'auto-corrélation temporelle des champs électriques de ces électrons à l'aide de la simulation numérique de Monte Carlo.

*mots-clés* : Potentiel de Hellmann-Gurskii-Krasko (HGK), Fonction d'autocorrélation temporelle, Simulation de Monte-Carlo.

## Abstract

The objective of this work is to introduce the effect of the ionic structure in the function of the micro-electric field of the electrons of a plasma disturbed by a positive impurity. This study is carried out in the mean field theory and within the one-component plasma model (OCP).

First, We established the nonlinear integral equation governing the effective electronic potential, taking the Hellmann-Gurskii-Krasko Pseudo-potential (HGK) which introduces the ionic structure into the interaction between the valence electron and the nucleus ionic. Second, we have solved this integral equation numerically by the fixed point method to determine this effective potential which allows to calculate the trajectories of the electrons around the impurity and the time self-correlation function of the electric fields of these electrons to the using the Monte-Carlo numerical simulation.

*Keywords* : Hellmann-Gurskii-Krasko potential (HGK), time self-correlation function, Monte-Carlo Simulation.

## ملخص

الهدف من هذا العمل هو إدخال تأثير البنية الأيونية في دالة الترابط الذاتي الزمنية للحقل الكهربائي المجهرى لإلكترونات بلازما إضطربة بشائبة موجبة. أجريت هذه الدراسة في إطار نظرية الحقل المتوسط، وضمن نموذج البلازما أحادية المركبة (OCP) .

أولاً، أسسنا المعادلة التكاملية الغير خطية، التي تتحكم في الكمون الفعلي لإلكترونات، مع أخذ الشبه كمون "هلمان-غرسكي- كراسكو" (HGK) والذي يدخل مفعول البنية الأيونية في تفاعل إلكترونات التكافؤ وأنوية الأيونات.

ثانياً، قمنا بحل هذه المعادلة التكاملية عددياً، بطريقة النقطة الصامدة لإيجاد الكمون الفعلي، الذي يمكننا من حساب مسارات الإلكترونات حول الشائبة وكذا دالة الارتباط الذاتية الزمنية للحقول الكهربائية الخاصة بهذه الإلكترونات باستعمال المحاكاة العددية لمونتي كارلو.

كلمات دالة: كمون هلمان-غرسكي- كراسكو" (HGK)، دالة الارتباط الذاتية الزمنية، محاكاة مونتي كارلو.

# TABLE DES MATIÈRES

TABLE DES MATIÈRES . . . . .	vii
LISTE DES FIGURES . . . . .	ix
<b>INTRODUCTION GÉNÉRALE</b>	<b>1</b>
<b>1 GÉNÉRALITÉS SUR LE PLASMA PHYSIQUE</b>	<b>4</b>
1.1 DÉFINITION DU PLASMA PHYSIQUE . . . . .	4
1.2 MODÈLE DU PLASMA À UNE COMPOSANTE (OCP) . . . . .	5
1.3 PARAMÈTRES IMPORTANTS DANS LE MODÈLE OCP . . . . .	6
1.3.1 Le rayon de la sphère ionique $a$ (Rayon de Wigner-Seitz) . . . . .	6
1.3.2 Longueur de Landau (longueur critique d'interaction binaire) $l_L$	6
1.3.3 Le couplage $\Gamma$ . . . . .	7
1.3.4 Longueur d'écrantage de Debye (Phénomène d'écrantage) . . . . .	7
1.3.5 Sphère de Debye . . . . .	8
1.3.6 Le degré de quantité $\eta$ . . . . .	8
1.3.7 Fréquence de plasma . . . . .	8
1.4 THÉORIE DU CHAMP MOYEN . . . . .	9
1.5 FONCTION DE CORRÉLATION DE PAIRE . . . . .	10
1.6 LE FACTEUR DE STRUCTURE $S(q)$ . . . . .	11
<b>2 PLASMA AVEC PSEUDO-POTENTIEL DE HELLMANN-GURSKII-KRASKO(HGK)</b>	<b>13</b>
2.1 RÉOLUTION NUMÉRIQUE DE L'ÉQUATION INTÉGRALE DE L'ÉNERGIE POTENTIELLE . . . . .	13
2.1.1 Etablissement de l'équation intégrale de l'énergie potentielle d'un électron dans un plasma OCP contenant une charge test . . . . .	13
2.1.2 Adimensionnement de l'équation intégrale pour l'énergie potentielle : . . . . .	16
2.1.3 Résolution numérique de l'équation intégrale de l'énergie potentielle par la méthode du point fixe (MPF) . . . . .	17
2.2 DISTRIBUTION DU MICRO-CHAMP ÉLECTRIQUE . . . . .	20
2.2.1 Distribution de Holtmark . . . . .	21
2.2.2 Distribution de Barange et Moser . . . . .	21

2.3	TRAJECTOIRE CLASSIQUE D'UN ÉLECTRON DANS LE PLASMA . . . . .	22
3	LA FONCTION D'AUTO-CORRÉLATION TEMPORELLE DU MICRO- CHAMP ÉLECTRIQUE . . . . .	25
3.1	INTRODUCTION . . . . .	25
3.2	LA MÉTHODE DE MONTE CARLO ÉLÉMENTAIRE . . . . .	26
3.3	LA THÉORIE MATHÉMATIQUE DE LA CORRÉLATION . . . . .	26
3.4	LA FORMULE D'AUTO-CORRÉLATION TEMPORELLE DE CHAMP ÉLEC- TRIQUE . . . . .	28
3.4.1	Adimensionnement de l'équation d'auto-corrélation $C_{EE}(t)$ . . .	31
3.4.2	Résolution numérique . . . . .	33
3.4.3	Résultats obtenus et discussions . . . . .	35
	CONCLUSION GÉNÉRALE . . . . .	37
	BIBLIOGRAPHIE . . . . .	38
	APPENDICES . . . . .	40
A	ÉTABLISSEMENT DE L'ÉQUATION INTÉGRALE POUR L'ÉNERGIE POTEN- TIELLE . . . . .	40



# LISTE DES FIGURES

1.1	Modèle de plasma à une composante(OCP) . . . . .	6
1.2	Calcul de la force électrique dans un milieu chargé par l'application de la théorie du champ moyen . . . . .	10
1.3	Fonction de corrélation de paire $g(r)$ , pour un fluide de Lennard-Jones dans l'état $K_B/\epsilon = 1.5$ et $\rho\sigma^3 = 0.8$ . . . . .	11
1.4	facteur de structure, $S(q)$ , pour un fluide de Lennard-Jones dans l'état ( $K_B/\epsilon = 1.5$ et $\rho\sigma^3 = 0.8$ ) . . . . .	12
2.1	impureté de charge $Z_e$ immergée dans un plasma . . . . .	14
2.2	Organigramme de la résolution de l'équation intégrale non linéaire 2.10 par la méthode du point fixe MPF . . . . .	20
2.3	Trajectoires de l'électron dans le plasma . . . . .	24
3.1	Formes de corrélation . . . . .	27
3.2	Organigramme de la résolution de l'équation 3.18 par la méthode de Monte Carlo . . . . .	34
3.3	La fonction d'autocorrélation temporelle du micro-champ électrique $C_{EE}(t)$ , du Lithium ( $Li^+$ ) et de Sodium ( $Na^+$ ) pour $T = 10^7 K$ et $n_e = 10^{22} cm^{-3}$ . . . . .	35
3.4	La fonction d'autocorrélation temporelle du micro-champ électrique $C_{EE}(t)$ , du Lithium ( $Li^+$ ) pour $T = 10^7 K$ et différentes valeurs de densité $n_e$ . . . . .	36
3.5	La fonction d'autocorrélation temporelle du micro-champ électrique du Lithium ( $Li^+$ ) pour la densité $n_e = 10^{22} cm^{-3}$ et différentes valeurs de température $T$ . . . . .	36
A.1	Représentation de l'angle $\psi$ . . . . .	41

# INTRODUCTION GÉNÉRALE

**L**E terme "plasma" a été introduit en physique en 1928 [1] par le physicien américain I. Langmuir pour désigner, dans les tubes à décharge, certaines régions équipotentielles contenant un gaz ionisé électriquement neutre.

Les propriétés statiques et dynamiques du plasma peuvent être étudiées en utilisant une charge test appelée aussi impureté pour mesurer le champ électrique total (qui détermine ces propriétés) en un point quelconque. Deux cas sont intéressants : - le champ sur une charge test finie et - le champ sur une charge test infinitésimale. Dans le premier cas, la charge test influe sur la configuration des charges de plasma autour d'elle de façon importante; dans le second cas, la charge test a un effet négligeable et agit comme une sonde passive du plasma [2] [3].

Le terme «micro-field»(micro-champ) a été introduit pour désigner les champs électriques et magnétiques dont l'action est essentielle sur des micro-échelles intra différents supports. Cela a été fait pour distinguer les micro-champs d'autres origines indispensables, par exemple, pour la description macroscopique d'un milieu. En règle générale, le micro-champ moyen sur le volume macroscopique est égal à zéro. Le plasma sur les micro-échelles est caractérisé par un écart notable par rapport aux conditions de quasi-neutralité et l'apparition de forts champs électriques en raison de la séparation des charges. À savoir, ces champs électriques, essentiels sur les micro-échelles, sont généralement sous-entendus sous le terme «micro-champ». L'amplitude de ce champ et sa direction sont soumises à des variations fortuites d'un point à l'autre dans l'espace et dans le temps [4]. Les méthodes semi-classiques permettent d'inclure les effets de la

mécanique quantique par des pseudo-potentiels appropriés qui résolvent le problème de divergence des champs électriques à petites distances, Cette méthode a été mise au point par Kelly, Dunn, Broyles, Deutsch et d'autres [5].

les propriétés de rayonnement et de transport d'une impureté dans un plasma sont déterminées en grande partie par le champ électrique local, la caractérisation de ce champ en fonction du temps fournit la description primaire de l'environnement du plasma sur l'impureté [6]. La fonction d'auto-corrélation du champ électrique (propriétés dynamiques) est particulièrement instructive car le champ est sensible aux configurations les plus proches de l'ion. De plus, son intégrale de temps détermine la contribution dominante à la demi-largeur des largeurs de lignes spectrales élargies par les électrons dans de nombreux cas pratiques [7].

Ce mémoire est considéré comme un travail théorique et numérique dont l'objectif visé est d'introduire l'effet de la structure ionique dans la fonction d'auto-corrélation temporelle des micro-champs électriques d'un plasma OCP contenant une impureté positive. Pour la partie théorique nous utiliserons le modèle du plasma à une composante (OCP) et la théorie du champ moyen. Et pour la partie numérique nous utiliserons la simulation de Monte-Carlo

Tout d'abord, dans le premier chapitre, nous allons commencé par rappeler des différents paramètres nécessaires pour la description du plasma, ainsi, nous allons définir le modèle de plasma à une composante (OCP) et nous allons expliquer la théorie du champ moyen.

Ensuite, dans le deuxième chapitre, Nous allons établir l'équation intégrale non linéaire gouvernant le potentiel électronique effectif, en prenant le Pseudopotential de Hellmann-Gurskii-Krasko (HGK) qui introduit la structure ionique dans l'interaction entre l'électron de valence et le noyau ionique, nous allons résoudre numériquement cette équation intégrale par la méthode du point fixe, et nous allons déterminer les trajectoires des électrons autour de l'impureté et calculer leur champ électrique total (micro-champ) sur cette impureté.

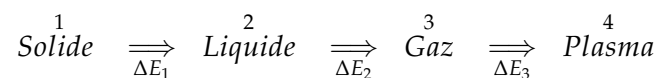
Enfin, dans le troisième chapitre, nous allons établir le calcul théorique de la

fonction d'auto-corrélation temporelle des micro-champs électriques des électrons. Enfin nous allons utiliser la simulation numérique de Monte-Carlo pour déterminer cette fonction temporelle.

# GÉNÉRALITÉS SUR LE PLASMA PHYSIQUE

## 1.1 DÉFINITION DU PLASMA PHYSIQUE

**L**e plasma est un état dilué de la matière, analogue à un gaz, mais constitué des particules chargées, électrons et ions positifs, en proportions telles que le milieu soit globalement neutre qui présente un comportement collectif. Ainsi défini, les plasmas se confondent donc avec le quatrième état de la matière [1], faisant suite, dans l'échelle des températures, aux trois états classiques, solide, liquide et gaz .



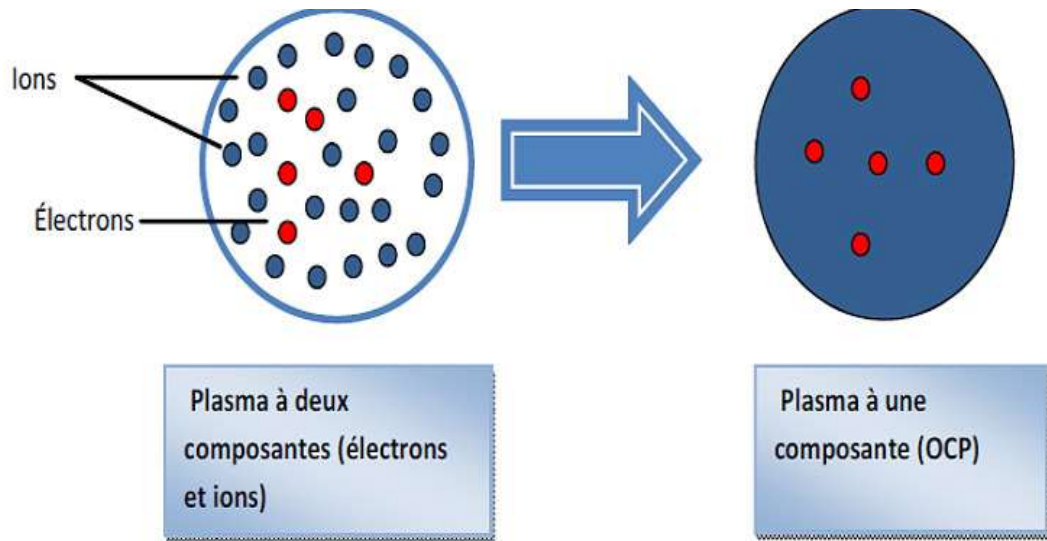
Le passage d'un état à l'autre étant réalisé par un certain apport d'énergie  $\Delta E$  [8].

- Un plasma peut être défini comme tout système statistique contenant des particules chargées mobiles [9] .

## 1.2 MODÈLE DU PLASMA À UNE COMPOSANTE (OCP)

Le modèle plasma à une composante, ou plus simplement «l'OCP», est un modèle de référence dans l'étude des systèmes coulombiens fortement couplés qui joue un rôle conceptuel similaire à celui rempli par le modèle de sphère dure dans la théorie des fluides neutres. L'OCP consiste en un système de particules ponctuelles identiques chargées électriquement interagissant exclusivement à travers le potentiel de Coulomb et immergées dans un fond rigide et uniforme de charge opposée pour assurer la neutralité globale de la charge. La dynamique des particules est régie par les lois de la mécanique non relativiste classique (la contrepartie quantique de l'OCP s'appelle le «modèle de jellium» et est utilisée comme première approximation du fluide électronique de conduction dans les métaux et les plasmas denses, ignorant les détails de sous-système ionique discret sous-jacent) [10].

Dans le plasma totalement ionisé et composé d'électrons et d'ions positifs [11], la fraction en masse de l'ion à celle de l'électron est de l'ordre de  $2.10^3$  ou plus. Pour cette raison, nous pouvons ne pas tenir compte des effets des mouvements des ions devant ceux des électrons. Donc, nous pouvons considérer l'ensemble des ions comme un fond continu électriquement positif. Ces considérations et hypothèses sont à la base de la construction du modèle de plasma à une composante (OCP) .

FIGURE 1.1 – *Modèle de plasma à une composante(OCP)*

### 1.3 PARAMÈTRES IMPORTANTS DANS LE MODÈLE OCP

#### 1.3.1 Le rayon de la sphère ionique $a$ (Rayon de Wigner-Seitz)

Une échelle de longueur pratique pour OCP est le rayon de la «sphère ionique»,  $a$ , défini par :

$$a = \left( \frac{3}{4\pi n_e} \right)^{1/3} \quad (1.1)$$

où  $n_e$  est la densité des électrons qui représente le nombre d'électrons par unité de volume ;  $a$  est le rayon de la sphère qui contient en moyenne un électron, si les ions formant le fond positif est continu il est de l'ordre de la distance moyenne inter-électronique [11].

#### 1.3.2 Longueur de Landau (longueur critique d'interaction binaire) $l_L$

La longueur de Landau  $l_L$  est la distance à laquelle il faut que deux électrons s'approchent pour que leur énergie potentielle d'interaction binaire soit du même ordre de grandeur que leur énergie cinétique d'agitation thermique, définie par la relation :

$$l_L = \frac{e^2}{K_B T} \quad (1.2)$$

où  $T$  est la température et  $K_B$  est la constante de Boltzmann ; La longueur de Landau intervient dans l'analyse des phénomènes de collisions et dans celle des corrélations de position dans un plasma [1,9,11].

### 1.3.3 Le couplage $\Gamma$

Une constante de couplage d'un plasma en tant que rapport d'une énergie moyenne d'interaction de Coulomb à une énergie cinétique moyenne et est égal la longueur Landau,  $l_L = e^2/K_B T$ , à la rayon de la sphère ionique ( Rayon de Wigner-Seitz ),  $a = (3/4\pi n)^{1/3}$ . Ici,  $n$  est la densité et  $T$  est la température.

$$\Gamma = \frac{\langle E_p \rangle}{\langle E_c \rangle} = \frac{e^2}{a K_B T} = \frac{l_L}{a} \quad (1.3)$$

Pour  $\Gamma \ll 1$ , le plasma est faiblement couplé.

Pour  $\Gamma \gg 1$ , le plasma est dit fortement couplé [9] [11].

### 1.3.4 Longueur d'écrantage de Debye (Phénomène d'écrantage)

Le potentiel de la sphère chargée dans le plasma est donné par :

$$V = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-r/\lambda_D} \quad (1.4)$$

Ce potentiel, dit de Debye-Hückel en 1923, a été établi initialement en chimie, dans le cadre de la théorie des électrolytes forts .

Dans un plasma, en relation avec la masse des électrons beaucoup plus petite que celle des ions, on peut considérer que l'écrantage est essentiellement dû aux électrons ; On définit donc la longueur de Debye électronique qui est l'échelle d'écrantage de référence dans le plasma [12].

$$\lambda_{De} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 K_B T}{n_e e^2}} \quad (1.5)$$

où  $n_e$  la densité d'électrons.



### 1.3.5 Sphère de Debye

On définit le nombre Debye,  $N_D$ , le nombre moyen de particules contenues dans une sphère de rayon  $\lambda_D$  [2] :

$$N_D = \left( \frac{4\pi n}{3} \right) \lambda_D^3 \quad (1.6)$$

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

### 1.3.6 Le degré de quanticité $\eta$

On définit la longueur thermique de Louis De Broglie,  $\lambda_T$ , qui est un paramètre décrivant dans quelle mesure les effets de la mécanique quantique sont impliqués dans un plasma [13] et il est calculé comme suit :

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m K_B T}} \quad (1.7)$$

Donc, le degré de quanticité est égal la longueur thermique de Louis De Broglie,  $\lambda_T$ , à la distance moyenne  $a$  entre deux électrons [11] :

$$\eta = \frac{\lambda_T}{a} = \frac{h}{a\sqrt{2\pi m_e K_B T}} \quad (1.8)$$

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

-Si  $\eta \ll 1$ , c'est à dire à température élevée, donc traiter le comportement des électrons classiquement.

-Si  $\lambda_T/l_L \ll 1$ , c'est à dire qu'à basse température, nous pouvons aussi faire un traitement classique.

### 1.3.7 Fréquence de plasma

Si, dans un plasma initialement neutre, on produit une perturbation locale sous la forme d'un excès de charge électrique positive ou négative, celui-ci va tendre à revenir vers l'état d'équilibre de neutralité. Cependant, on peut voir facilement

que la perturbation initiale engendre en général une oscillation pendulaire non amortie du plasma autour de son état d'équilibre [1].

La fréquence caractéristique de ces oscillations est la fréquence plasma  $\omega_p$  :

$$\omega_p = \left( \frac{4\pi n (Ze)^2}{m} \right)^{1/2} \quad (1.9)$$

#### 1.4 THÉORIE DU CHAMP MOYEN

L'idée de la théorie du champ moyen est apparue pour la première fois en physique dans les travaux de Pierre Curie et Pierre Weiss pour décrire les transitions de phase, c'est la méthode la plus simple pour décrire un système en interaction, son objectif est de simplifier l'analyse des problèmes à plusieurs corps à un problème à un seul corps, où chaque spin est soumis à un champ effectif uniforme engendré par les autres spins [11].

On prend un exemple : calcul de la force électrique dans un milieu chargé par l'application de la théorie du champ moyen.

L'élément de volume  $d\tau$  contient plusieurs particules de charge  $q$  sauf une avec une charge  $q_0$ . Ces particules sont distribuées dans l'espace avec une densité volumique  $\rho(r)$ . Si on néglige les corrélations entre les particules, on considèrera que toutes ces particules localisées dans  $d\tau$  agissent individuellement par le même champ électrique sur la charge  $q_0$ . Donc on peut écrire la force électrique selon cette théorie d'approximation de champ moyen comme suit :

$$\vec{F}_0 = q_0 \int_{(\Omega)} \frac{\rho(r') (\vec{r}_0 - \vec{r}')}{|\vec{r}_0 - \vec{r}'|^3} d\tau \quad (1.10)$$

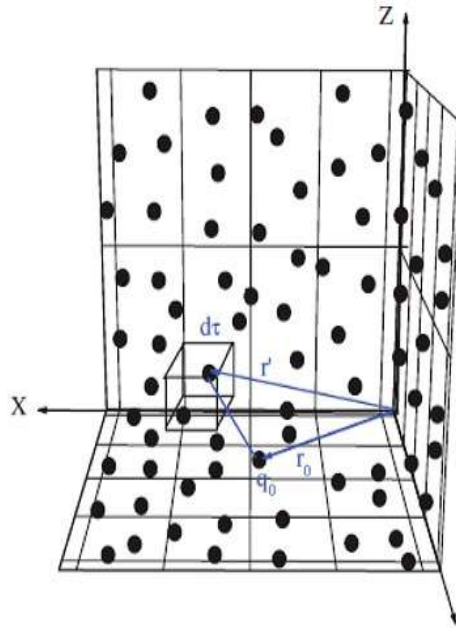


FIGURE 1.2 – Calcul de la force électrique dans un milieu chargé par l'application de la théorie du champ moyen

## 1.5 FONCTION DE CORRÉLATION DE PAIRE

La grandeur centrale en théorie des liquides est la fonction de corrélation de paire  $g(r)$ , [14] [15], encore appelée fonction de distribution radiale, qui ne dépend que de leur distance de séparation ; elle est telle que :

$$\rho^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \rho^2 g^{(2)}(\|\vec{r}_2 - \vec{r}_1\|) = \rho^2 g(r) \quad (1.11)$$

Pour le gaz parfait :

$$\lim_{r_1, r_2 \rightarrow \infty} g_N^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 1 - \frac{1}{N} \quad (1.12)$$

où :  $N$  est le nombre totale de particules de gaz.

Cette grandeur est une mesure de l'ordre dans le liquide (plasma),

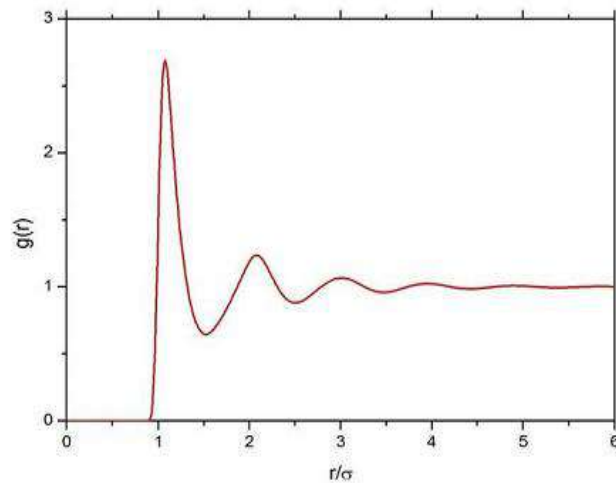


FIGURE 1.3 – Fonction de corrélation de paire  $g(r)$ , pour un fluide de Lennard-Jones dans l'état  $K_B/\epsilon = 1.5$  et  $\rho\sigma^3 = 0.8$

## 1.6 LE FACTEUR DE STRUCTURE $S(q)$

Le facteur de structure  $S(q)$  [14, 15], qui est la transformée de Fourier de la fonction de corrélation de paire, se mesure expérimentalement par diffraction de rayons X ou de neutrons et permet ainsi une comparaison directe entre la théorie et l'expérience. Par ailleurs, la comparaison avec l'expérience des grandeurs thermodynamiques qui s'expriment également en fonction de  $g(r)$  fournit une autre façon de tester la théorie.

$$S(q) = 1 + \rho \int (g(r) - 1) e^{iqr} dr \quad (1.13)$$

Il se mesure expérimentalement, permettant ainsi une comparaison directe de la structure calculée avec l'expérience.

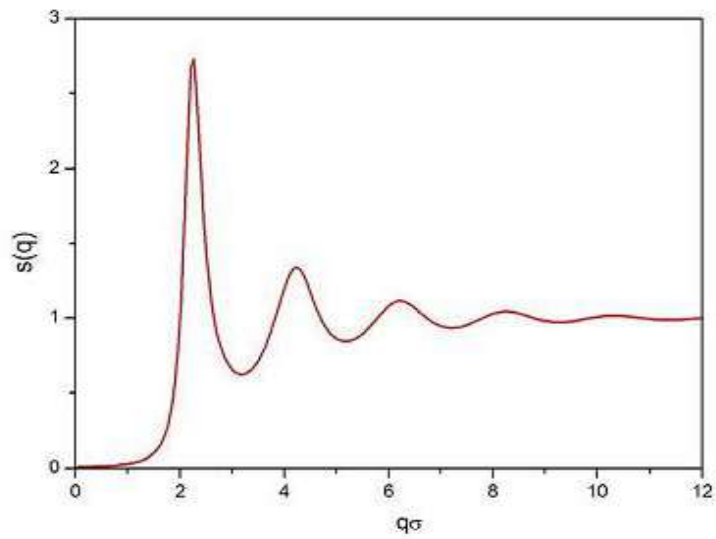


FIGURE 1.4 – facteur de structure,  $S(q)$ , pour un fluide de Lennard-Jones dans l'état ( $K_B/\epsilon = 1.5$  et  $\rho\sigma^3 = 0.8$ )

---

# PLASMA AVEC PSEUDO-POTENTIEL DE HELLMANN-GURSKII-KRASKO(HGK)

## 2.1 RÉSOLUTION NUMÉRIQUE DE L'ÉQUATION INTÉGRALE DE L'ÉNERGIE POTENTIELLE

### 2.1.1 Etablissement de l'équation intégrale de l'énergie potentielle d'un élec- tron dans un plasma OCP contenant une charge test

**S**oit un plasma à une composante (électrons et un fond continu de charges positives neutralisantes), on place une charge test positif  $Ze$  (impureté) à l'origine de coordonnées (figure 2.1), par conséquent, la perturbation du plasma se produira (Autrement dit, chaque charge a une perturbation dans la répartition des charges autour d'elle) et après un certain temps, il atteindra un nouvel état d'équilibre [11].

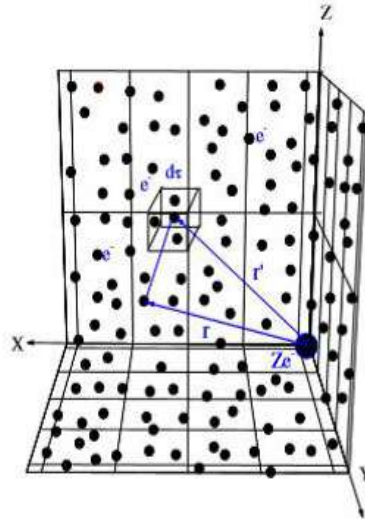


FIGURE 2.1 – impureté de charge  $Ze$  immergée dans un plasma

L'énergie potentielle de l'électron situé à une distance  $r$  de l'origine est donc construite à partir de trois contributions :

$$\Phi(r) = \Phi_{ee}(r) + \Phi_{ef}(r) + \Phi_{ie}(r) \quad (2.1)$$

avec :

-  $\Phi_{ee}(r)$  est l'énergie potentielle d'interaction du couple électron-électron, elle est prise celle du potentiel de Coulomb et elle s'écrit dans l'approximation du champ moyen comme :

$$\Phi_{ee}(r) = e^2 \iint f(\vec{r}, \vec{p}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}^3 d\vec{r}'^3 \quad (2.2)$$

après quelque simplification (voir l'appendice) , on obtient l'équation ci-dessous<sup>1</sup> :

$$\Phi_{ee}(r) = n_e e^2 \int \frac{e^{-\beta\Phi(\vec{r})}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 \quad (2.3)$$

1. Rappelons que :  $f(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{N}{\Omega} \left(\frac{m_e \beta}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-\beta\left(\frac{p^2}{2m} + \Phi(r)\right)}$  est la distribution de Maxwell-Boltzmann (qui est bien normalisée, c'est à dire que  $\int_{R^3} f(v) dv = 1$ ) et  $N$  est le nombre totale d'électrons et  $\Omega$  est le volume du système et  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ .

-  $\Phi_{ef}(r)$  est l'énergie potentielle de l'électron avec le fond positif neutralisant la charge des électrons, cette dernière est donnée par l'équation suivante :

$$\Phi_{ef}(r) = -n_e e^2 \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 \quad (2.4)$$

-  $\Phi_{ie}(r)$  est l'énergie potentielle d'interaction du couple ion-électron, nous utilisons le modèle pseudo-potentiel de Hellmann-Gurskii-Krasko (HGK), qui introduit la structure ionique .

**Le pseudo-potentiel tenant compte de la structure d'ions; ( Potentiel de Hellmann- Gurskii-Krasko HGK) :**

Il est clair que la loi coulombique n'est pas applicable aux forces entre les charges dans les plasmas alcalins car il y a de fortes déviations par rapport à la loi de Coulombs à de petites distances en raison de l'influence des électrons du cœur. L'idée de Hellmann était de remplacer l'exigence d'orthogonalité de valence orbitale par le noyau orbitales par le pseudo-potentiel ce qui rendait les calculs mathématiques respectifs beaucoup plus simples. Pour les besoins réels des calculs atomiques et moléculaires [5], Hellmann a suggéré une formule analytique simple suivante :

$$\Phi_{ei}^H(r) = -\frac{ze^2}{r} + \frac{e^2}{r} A e^{-\alpha r} \quad (2.5)$$

→  $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} A e^{-\alpha r}$  est le potentiel supplémentaire résultant du principe d'exclusion de Pauli pour les électrons de valence.

Gurskii et Krasko ont proposé le pseudo-potentiel du modèle électron-ion suivant :

$$\Phi_{ei}^{HGK}(r) = -\frac{ze^2}{r} \left(1 - e^{-\frac{r}{R_{Cei}}}\right) + \frac{ze^2 A}{R_{Cei}} e^{-\frac{r}{R_{Cei}}} \quad (2.6)$$

où  $z$ - valence,  $R_{Cei} = r_{Cei} \times r_B$  ( $r_B$  est le rayon de Bohr) et  $A$  sont déterminés expérimentalement,  $r_{Cei}$  est défini comme un certain rayon caractérisant la taille de la région des couches électroniques internes.



	<i>Li</i>	<i>Na</i>	<i>K</i>	<i>Rb</i>	<i>Cs</i>	<i>Be</i>	<i>Mg</i>	<i>Ca</i>	<i>Sr</i>	<i>Ba</i>
<i>z</i>	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2
<i>A</i>	5.954	3.362	2.671	2.293	2.214	3.72	2.588	2.745	2.575	2.871
<i>r<sub>Cei</sub></i>	0.365	0.487	0.689	0.779	0.871	0.22	0.427	0.571	0.644	0.698

TABLE 2.1 – Les paramètres du potentiel de Hellmann-Gurskii-Krasko donnés dans a.u. Pour le cas  $z = 2$ , les paramètres donnés correspondent à l'interaction de l'ion chargé double avec l'électron

Dans le tableau ci-dessus on présente les paramètres du potentiel Hellmann-Gurskii-Krasko donnés dans a.u. Ici, dans le cas  $z = 2$  les paramètres donnés correspondent à l'interaction de l'ion chargé double avec l'électron.

nous remplaçons l'éq 2.3, 2.4 et 2.6 dans l'éq 2.1 :

$$\Phi(r) = -\frac{ze^2}{r} \left(1 - e^{-\frac{r}{R_{Cei}}}\right) + \frac{ze^2 A}{R_{Cei}} e^{-\frac{r}{R_{Cei}}} + n_e e^2 \int \frac{e^{-\beta\Phi(\vec{r}')}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 - n_e e^2 \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 \quad (2.7)$$

cela égale :

$$\Phi(r) = -\frac{ze^2}{r} \left(1 - e^{-\frac{r}{R_{Cei}}}\right) + \frac{ze^2 A}{R_{Cei}} e^{-\frac{r}{R_{Cei}}} + n_e e^2 \int \frac{(e^{-\beta\Phi(\vec{r}')} - 1)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 \quad (2.8)$$

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

$$\Phi(r) = -\frac{ze^2}{r} \left(1 - e^{-\frac{r}{R_{Cei}}}\right) + \frac{ze^2 A}{R_{Cei}} e^{-\frac{r}{R_{Cei}}} + 2\pi n_e e^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} [(r + r') - |r - r'|] (e^{-\beta\Phi(\vec{r}')} - 1) d\vec{r}'^3 \quad (2.9)$$

### 2.1.2 Adimensionnement de l'équation intégrale pour l'énergie potentielle :

Pour éviter les problèmes rattachés aux unités des différents paramètres présents dans cette équation intégrale [8], il est commode d'exprimer 2.9 sous une forme adimensionnée et ce en adoptant les définitions et les changements suivants [2] :

$$Y_{ei}^{HGK}(x) = -\frac{a\Phi_{ei}^{HGK}(r)}{Ze^2}; x = \frac{r}{a} \text{ telque } a = \left(\frac{4\pi n_e}{3}\right)^{-\frac{1}{3}}; \zeta = \frac{R_{Cei}}{a} = \frac{r_{Cei} \times r_B}{a} \text{ ou } r_B = 0.529177249 \times 10^{-10} m \text{ et } \Gamma = \frac{\beta e^2}{a}.$$

Lorsque nous remplaçons ces changements dans l'équation intégrale 2.9 précédente, nous trouverons :

$$Y(x) = \frac{1}{x} \left(1 - e^{-\frac{x}{\zeta}}\right) - \frac{A}{\zeta} e^{-\frac{x}{\zeta}} - \frac{3}{2Z} \int_0^{\infty} \frac{x'}{x} (x + x' - |x - x'|) (e^{ZY(x')} - 1) dx' \quad (2.10)$$

où le Pseudo-potiel adimensionné de Hellmann-Gurski-Krasko (HGK) 2.6 est :

$$Y_{ei}^{HGK}(x) = \frac{1}{x} \left(1 - e^{-\frac{x}{\zeta}}\right) - \frac{A}{\zeta} e^{-\frac{x}{\zeta}} \quad (2.11)$$

L'équation 2.10 est une équation intégrale exponentielle non linéaire représentant l'équation de l'énergie potentielle adimensionnée  $Y(x)$  d'un électron situé à la distance adimensionnée  $x$  de l'impureté localisée à l'origine des coordonnées.

### 2.1.3 Résolution numérique de l'équation intégrale de l'énergie potentielle par la méthode du point fixe (MPF)

L'équation 2.9 gouvernant l'énergie potentielle d'un plasma OCP contenant une charge test à son origine est une équation intégrale non linéaire, où la résolution de cette équation intégrale ne peut être déduite que par les techniques de l'analyse numérique [11].

Lors de la résolution de l'équation intégrale de l'énergie potentielle avec la méthode de point fixe. Signalons de primo que plusieurs obstacles apparaissent lors de l'utilisation de cette méthode :

- La non linéarité de l'équation 2.9 est représentée dans la fonction exponentielle, cette dernière pose un grand problème de calcul dans les micro-ordinateurs parce que la fonction exponentielle est très divergente.
- L'équation 2.9 contient une intégrale infinie, ce qui augmente le nombre d'opérations arithmétiques dans l'ordinateur.

#### **Théorème du point fixe :**

Soit  $F$  un espace de Banach,  $V$  une boule fermée dans  $F$ . Soit  $G$  une application de  $V$  dans  $V$ , telle que :

$$\|G(T_1) - G(T_2)\| \leq \alpha \|T_1 - T_2\| \quad (2.12)$$

Pour tout couple de points  $T_1, T_2$  de  $V$ ; où  $\alpha$  est une constante telle que :

$$0 < \alpha < 1 \quad (2.13)$$

alors il existe :

$$G(T^*) = T^* \quad (2.14)$$

Le point  $T^*$  est la limite de la suite :

$$(T_0, T_1, T_2, \dots, T_i, \dots) \quad (2.15)$$

et les termes qui vont suivre  $T_0$  sont définis par le processus itératif suivant :

$$T_1 = G(T_0), T_2 = G(T_1), \dots, T_i = G(T_{i-1}), \dots \quad (2.16)$$

et

$$\|T_i - T^*\| \leq \frac{\alpha^i}{1 - \alpha} \|T_1 - T_2\| \quad (2.17)$$

$i = 1, 2, 3, \dots$  où  $i$  est le nombre d'itérations.

Nous rappelons qu'un espace de Banach est un espace normé et complet.

### Principe de MPF :

Une équation du type  $f(x) = 0$  peut toujours s'écrire sous la forme équivalente :

$$x = F(x) \quad (2.18)$$

où  $F$  est une nouvelle fonction de  $x$ . La méthode consiste à utiliser un estimé  $x^0$ , de la solution exacte  $x^*$  qui vérifie  $f(x^*) = 0$  et donc  $x^* = F(x^*)$ , cette valeur estimée étant alors substituée à  $x$  dans le terme de droite de l'équation 2.18. On obtient ainsi une nouvelle approximation  $x^1$  de  $x^*$  :  $x^1 = F(x^0)$  de même on obtient :  $x^2 = F(x^1)$   $x^3 = F(x^2)$  et de façon générale à la  $n$ -ième itération :

$$x^n = F(x^{n-1}) \quad (2.19)$$

Le problème principal est de savoir si la suite générée  $\{x^0, x^1, \dots, x^n, \dots\}$  converge vers la solution  $x^*$  de l'équation 2.18.

**Convergence du procédé itératif :**

Si  $F(x)$  de l'équation  $x = F(x)$  possède une dérivée qui vérifie :

$$|F'(x)| < m < 1 \forall x \in \mathbb{R} \tag{2.20}$$

alors  $\forall x^0 \in \mathbb{R}$  la suite  $\{x^0, x^1, x^2, \dots, x^n, \dots\}$  générée par  $x^i = F(x^i)$  pour  $i = 1, 2, 3, \dots, n$ . converge vers  $x^*$  solution de  $x = F(x)$  donc de l'équation  $f(x) = 0$ . De plus la racine  $x^*$  est unique.

**Arrêt des opérations :**

Théoriquement la solution n'est atteinte qu'après une infinité d'itérations (et si le processus converge). En pratique, on arrête les opérations par l'un des tests suivants :

1)–Si  $f(x^n)$  est quasiment nulle :

$$|f(x^n)| < \varepsilon_1 \tag{2.21}$$

2)–Si l'amélioration de  $x^n$  d'une itération à la suivante ne justifie pas l'effort de calcul supplémentaire, soit si :

$$\left| \frac{x^n - x^{n-1}}{x^n} \right| < \varepsilon_2 \text{ ou } |x^n - x^{n-1}| < \varepsilon_3 \tag{2.22}$$

3)– Si la convergence n'est pas obtenue avant un nombre d'itérations, soit si :

$$n > n_{\max} \tag{2.23}$$

Dans ce cas, si le seuil de précision  $\varepsilon_1$  (ou  $\varepsilon_2$ ) ne peut être atteint en un nombre raisonnable d'itérations  $n_{\max}$  fixé à l'avance, le processus est considéré comme non convergent pour l'estimation initiale  $x^0$  donnée.

Nous pouvons résoudre l'équation intégrale non linéaire 2.10 par la méthode du point fixe MPF à partir d'une itération approximative initiale égale le Pseudo-potential de Hellmann-Gurskii-krastor (HGK).

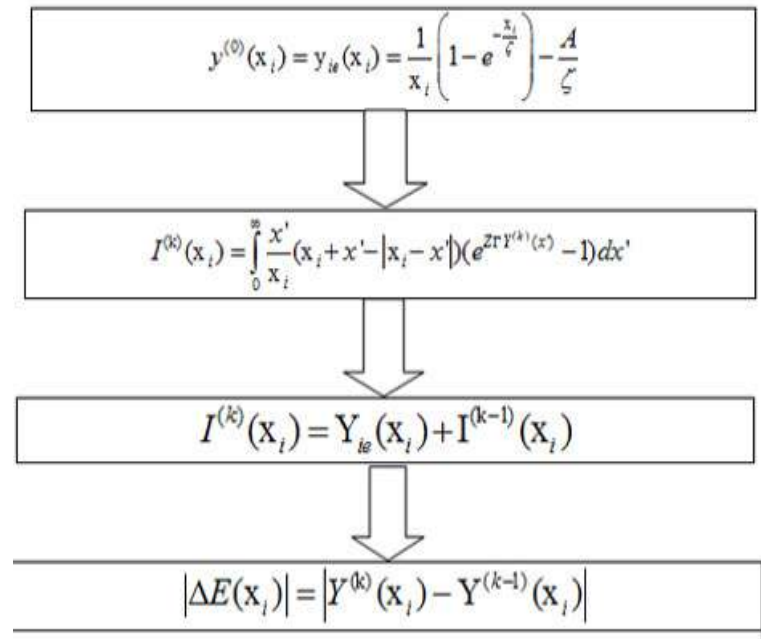


FIGURE 2.2 – Organigramme de la résolution de l'équation intégrale non linéaire 2.10 par la méthode du point fixe MPF

## 2.2 DISTRIBUTION DU MICRO-CHAMP ÉLECTRIQUE

Le système que nous traitons est constitué de  $N$  électrons immergés dans un fond uniforme d'ions positifs et neutralisant la totalité électrique, occupant le volume  $\Omega$  à la température  $T$ . On considère que l'interaction entre ces électrons est coulombienne [9] [11]. Lorsque l'on traite le problème de la distribution du champ électrique en un point chargé, une particule «zéro» doit être incluse.

On définit  $Q(\vec{\epsilon}) d\vec{\epsilon}$  comme la probabilité de trouver le champ électrique  $\vec{\epsilon}$  au point chargé localisé à l'origine du système de coordonnées [16] :

$$Q(\vec{\epsilon}) = \frac{1}{Z_N} \int \dots \int e^{-\beta \Phi_N(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)} \delta\left(\vec{\epsilon} - \sum_{i=1}^N \vec{\epsilon}_i\right) \prod_{j=1}^N d\vec{r}_j \quad (2.24)$$

où  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $\Phi_N$  est le potentiel de N-particule,  $Z_N$  est la fonction de partition et  $\vec{r}_j$  est la coordonnée de la j-ième particule.

En supposant que notre système est isotrope [16], nous pouvons écrire 2.24

comme :

$$P(\epsilon) = 4\pi\epsilon^2 Q(\vec{\epsilon}) = \frac{2\epsilon}{\pi} \int_0^\infty T(\lambda) \sin(\epsilon\lambda) \lambda d\lambda \quad (2.25)$$

où la relation  $4\pi\epsilon^2 Q(\vec{\epsilon}) d\epsilon = P(\epsilon) d\epsilon$  a été utilisée.

### 2.2.1 Distribution de Holtmark

Le micro-champ électrique est déterminé par la somme des champs élémentaires créés par un très grand nombre de charges ponctuelles. La distribution Holtmark  $W_H$  fournit la probabilité. Pour que la somme des champs électriques élémentaires  $\vec{E}_i$  générés par toutes les  $N$  particules dans le plasma à l'origine des coordonnées du système (ce qui est considéré comme un point neutre) :

$$\vec{E} = \sum_{i=1}^N \vec{E}_i = \sum_{i=1}^N \frac{e \vec{r}_i}{r_i^3} \quad (2.26)$$

La distribution de Holtmark exprimée par les variables adimensionnelles est donnée par :

$$W_H(\beta) = \frac{2\beta}{\pi} \int_0^\infty x \sin(x\beta) e^{-x^3/2} dx \quad (2.27)$$

où :  $\beta = \frac{E}{E_H}$ ,  $E_H = 2\pi(4/15)^{2/3} en^{2/3}$  et  $e = e_i$  est la charge de la particule du plasma et  $n$  est sa densité.

### 2.2.2 Distribution de Barange et Moser

M. Baranger et B. Moser ont écrit les distributions des composantes haute et basse fréquence de la distribution du micro-champ comme des expansions par rapport aux fonctions de corrélation qui s'étaient alors terminées à la corrélation de paires. Cependant, on a fait valoir qu'une telle approche n'était valable que pour les plasmas à basse densité et à haute température où les écarts par rapport à la distribution originale de Holtmark ne sont pas importants ; [2]. Et d'après l'approximation de Baranger-Moser :

$$T(\lambda) = e^{G(\lambda)} \quad (2.28)$$

et

$$G(\lambda) = 4\pi n \int_0^\infty r^2 e^{-\beta\Phi(r)} \left[ \frac{1}{\lambda E(r)} \sin(\lambda \epsilon(r)) - 1 \right] dr \quad (2.29)$$

nous remplaçons l'éq 2.28 dans l'éq ?? :

$$P(\epsilon) = \frac{2\epsilon}{\pi} \int_0^\infty e^{G(\lambda)} \sin(\epsilon\lambda) \lambda d\lambda \quad (2.30)$$

et après l'adimensionnement de 2.29 et 2.30, on trouve :

$$\bar{P}(\bar{\epsilon}) = \epsilon_0 P(\epsilon) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty (\lambda \bar{\epsilon}) \sin(\lambda \bar{\epsilon}) e^{G(\lambda/\epsilon_0)} d\lambda \quad (2.31)$$

où :

$$\bar{G}(\lambda) = G(\lambda/\epsilon_0) = 3 \int_0^\infty x^2 e^{Z\Gamma Y(x)} \left[ \frac{1}{\lambda Y'_{ie}(x)} \sin(\lambda Y'_{ie}(x)) - 1 \right] dx \quad (2.32)$$

tels que :  $\epsilon_0 = \frac{e}{a^2}$  et  $Y'_{ie}(x) = \frac{\partial Y_{ie}(x)}{\partial x}$

## 2.3 TRAJECTOIRE CLASSIQUE D'UN ÉLECTRON DANS LE PLASMA

Soit un plasma à une composante constitué par des électrons et un fond continu de charges positives neutralisantes. Chaque électron à la distance  $r$  de l'impureté, est soumis à une énergie potentielle effective  $\Phi(r)$  trouvé par la résolution de l'équation intégrale :

D'après la deuxième loi de Newton on a :

$$m_e \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -\vec{\nabla} \Phi(r) \quad (2.33)$$

où :  $m_e$  la masse de l'électron et  $\Phi(r)$  l'énergie potentielle à la distance  $r$ .

– Adimensionnement de l'équation différentielle 2.33

En utilisant les changements suivants :  $Y(\bar{r}) = -\frac{a\Phi(r)}{Ze^2}$ ,  $\bar{r} = \frac{r}{a}$  telque  $a = \left(\frac{3}{4\pi n_e}\right)^{1/3}$ , fréquence de plasma  $\bar{t} = \frac{t}{f_p}$  où le temps caractéristique du plasma  $f_p = \frac{1}{\omega_p}$  et  $\omega_p = \left(\frac{4\pi n_e e^2}{m_e}\right)^{1/2}$ .

Et de lui nous obtenons l'équation différentielle adimensionnée :

$$\frac{d^2 \vec{r}}{d\bar{t}^2} = \frac{Z}{3} \vec{\nabla} Y(\bar{r}) \quad (2.34)$$

en coordonnées cartésiennes (pour simplification on pose  $t = \bar{t}$  et  $r = \bar{r}$ ) :

$$\begin{cases} \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{Z}{3} \frac{x}{r} \frac{\partial Y(r)}{\partial r} \\ \frac{d^2y}{dt^2} = \frac{Z}{3} \frac{y}{r} \frac{\partial Y(r)}{\partial r} \\ \frac{d^2z}{dt^2} = \frac{Z}{3} \frac{z}{r} \frac{\partial Y(r)}{\partial r} \end{cases} \quad (2.35)$$

où  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$

– Pour résoudre ce système 2.35 (équations différentielles de deuxième ordre ), on peut utiliser la méthode de Verlet à un pas [17] [18].

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

$$\begin{cases} \vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + h \vec{v}_n + \frac{h^2}{2} \vec{\gamma}_n \\ \vec{v}_{n+1} = \vec{v}_n + \frac{h}{2} (\vec{\gamma}_n + \vec{\gamma}_{n+1}) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x(i+1) = x(i) + hv_x(i) + \frac{h^2}{2} \gamma_x(i) \\ v_x(i+1) = v_x(i) + \frac{h}{2} (\gamma_x(i) + \gamma_x(i+1)) \\ y(i+1) = y(i) + hv_y(i) + \frac{h^2}{2} \gamma_y(i) \\ v_y(i+1) = v_y(i) + \frac{h}{2} (\gamma_y(i) + \gamma_y(i+1)) \\ z(i+1) = z(i) + hv_z(i) + \frac{h^2}{2} \gamma_z(i) \\ v_z(i+1) = v_z(i) + \frac{h}{2} (\gamma_z(i) + \gamma_z(i+1)) \end{cases} \quad (2.36)$$

et d'après l'équation 2.35 le système 2.36 devient :

$$\begin{cases} x(i+1) = x(i) + hv_x(i) + \frac{Zh^2}{6} \frac{x(i)}{r(i)} \frac{\partial Y(r(i))}{\partial r} \\ v_x(i+1) = v_x(i) + \frac{Zh}{6} \left( \frac{x(i)}{r(i)} \frac{\partial Y(r(i))}{\partial r} + \frac{x(i+1)}{r(i+1)} \frac{\partial Y(r(i+1))}{\partial r} \right) \\ y(i+1) = y(i) + hv_y(i) + \frac{Zh^2}{6} \frac{y(i)}{r(i)} \frac{\partial Y(r(i))}{\partial r} \\ v_y(i+1) = v_y(i) + \frac{Zh}{6} \left( \frac{y(i)}{r(i)} \frac{\partial Y(r(i))}{\partial r} + \frac{y(i+1)}{r(i+1)} \frac{\partial Y(r(i+1))}{\partial r} \right) \\ z(i+1) = z(i) + hv_z(i) + \frac{Zh^2}{6} \frac{z(i)}{r(i)} \frac{\partial Y(r(i))}{\partial r} \\ v_z(i+1) = v_z(i) + \frac{Zh}{6} \left( \frac{z(i)}{r(i)} \frac{\partial Y(r(i))}{\partial r} + \frac{z(i+1)}{r(i+1)} \frac{\partial Y(r(i+1))}{\partial r} \right) \end{cases} \quad (2.37)$$

où :  $r(i) = \sqrt{x(i)^2 + y(i)^2 + z(i)^2}$

On présente dans la figure suivante trajectoires de l'électron dans le plasma pour les conditions initiales de la position  $[x = 0.01; y = 0.5; z = 0.01]$  et de la vitesses  $[v_x = 0.3; v_y = 0.3; v_z = 0.3]$  de l'électron.



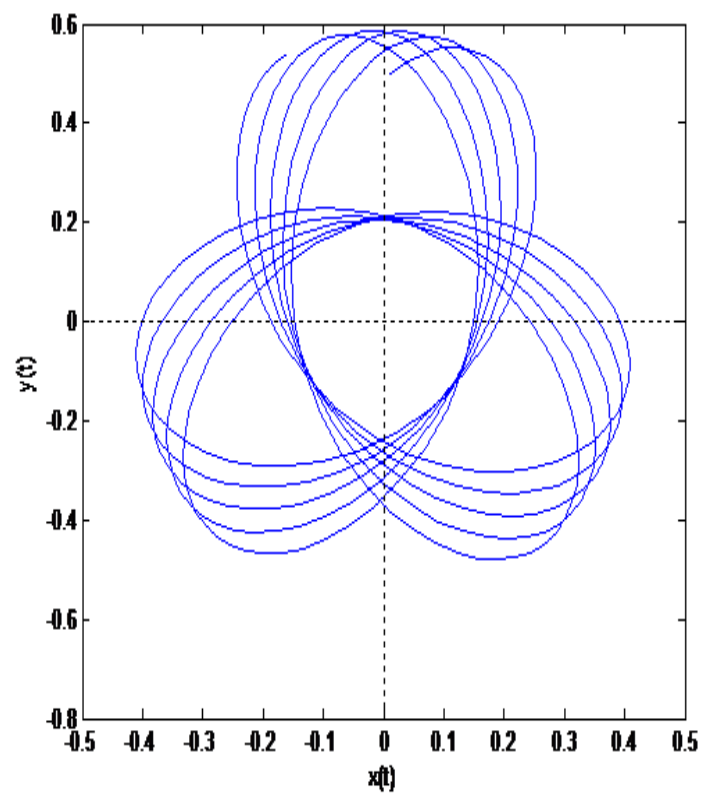


FIGURE 2.3 – Trajectoires de l'électron dans le plasma

---

# LA FONCTION D'AUTO-CORRÉLATION TEMPORELLE DU MICRO-CHAMP ÉLECTRIQUE

## 3.1 INTRODUCTION

**P**lusieurs propriétés et phénomènes dynamiques peuvent être obtenus par la connaissance de certaines fonctions appelées les fonctions de corrélation temporelle. Ces dernières permettent de donner une image de la dynamique du micro-champ suivant les conditions des plasmas [11]. Les fonctions d'autocorrélation d'un système à l'équilibre thermodynamique ont de grande importance pour évaluer le temps de relaxation dans de nombreux problèmes de la physique [19].

### 3.2 LA MÉTHODE DE MONTE CARLO ÉLÉMENTAIRE

#### La notion des nombres aléatoires

La simulation informatique des variables aléatoires [20], aussi complexes soient elles, repose sur la simulation de variables aléatoires indépendantes très simples, auxquelles sont appliquées des transformations adéquates. La variable aléatoire de base est celle de loi uniforme sur  $[0, 1]$  ; dans un code de calcul, un générateur de nombre aléatoire est une suite de réels  $(u_1, \dots, u_m, \dots)$  déterministes en double précision, compris entre 0 et 1. Selon le langage de programmation et les bibliothèques utilisées, l'appel au générateur passe par la commande `drand48` en C, `random` en C++ et Java, `rand` en Matlab, `grand` en Scilab avec différents paramètres d'appel. L'estimation d'une intégrale du type  $A = \int_a^b f(x) dx$ , peut être reformulée en termes de calcul d'une moyenne [21] :

$$S = (b - a) \langle f(x) \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b - a}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i) \equiv \frac{b - a}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i) \quad (3.1)$$

Dans la pratique, on génère  $(n)$  nombres aléatoires,  $(x_i)$ , compris entre  $a$  et  $b$  et distribués suivant une densité de probabilité uniforme (L'échantillonnage homogène). Cette densité de probabilité est constante dans  $[a, b]$ , c'est-à-dire que toutes les valeurs comprises entre  $a$  et  $b$  sont équiprobables. On utilise ces nombres aléatoires pour le calcul de la valeur moyenne de  $f$  qui conduit à l'estimation de surface  $A = \int_a^b f(x) dx$ .

### 3.3 LA THÉORIE MATHÉMATIQUE DE LA CORRÉLATION

La corrélation est un type de statistique bivariée [22]. La corrélation est la relation entre deux variables dans laquelle les modifications des valeurs d'une variable sont suivies de modifications des valeurs de l'autre variable ; deux variables quantitatives sont corrélées si elles tendent à varier l'une en fonction de l'autre.

**Analyse descriptive des données** Comment détecter une corrélation ? Quelle en est la forme, le sens (les variables varient-elles dans le même sens ou bien en sens contraire) et l'intensité ?

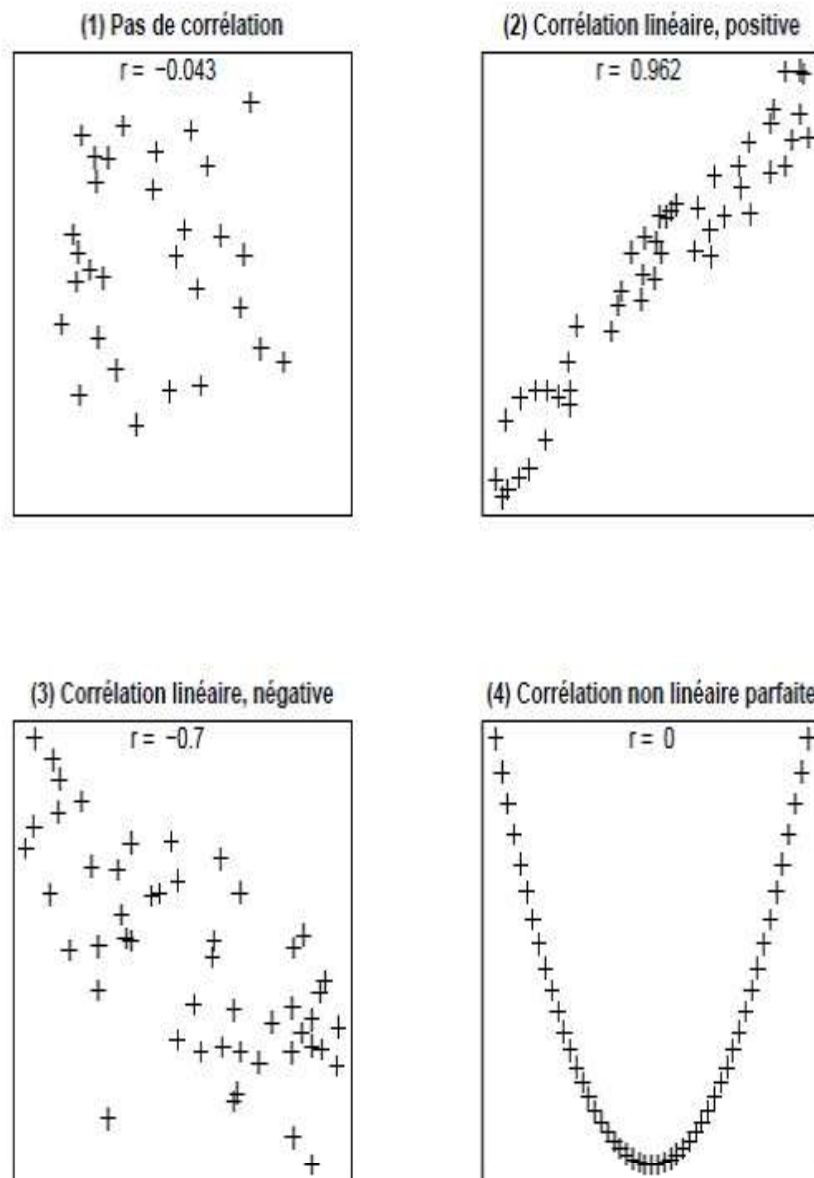


FIGURE 3.1 – Formes de corrélation

**Outil graphique : le nuage de points** (1) nuage très arrondi ; pas de relation apparente.

(2) nuage très étiré : le nuage a une forme linéaire très marquée. On observe sur

l'échantillon une tendance de X et Y à varier dans le même sens. La corrélation observée est positive.

(3) nuage modérément étiré (forme linéaire moins marquée) , du haut à gauche vers le bas à droite : on observe sur l'échantillon une tendance de X et Y à varier dans des sens opposés ; la corrélation observée est négative.

(4) les points sont sur une courbe (parabole) non linéaire. La corrélation observée est parfaite, de type non linéaire. Il n'y a pas monotonie : la courbe est d'abord décroissante puis croissante.

**Indicateur numérique de sens et d'intensité : coefficient de corrélation :** Ils sont utilisés pour mesurer la force d'une relation entre deux variables. Il existe plusieurs types de coefficient de corrélation : coefficient de corrélation de Pearson, coefficient de corrélation de Spearman's rank...etc. L'utilisation correcte du type de coefficient de corrélation dépend des types de variables étudiées.

### 3.4 LA FORMULE D'AUTO-CORRÉLATION TEMPORELLE DE CHAMP ÉLECTRIQUE

Dans un plasma à une composante, on considère un ion impureté placé à l'origine de coordonnées, en équilibre thermodynamique. Le micro-champ électrique total dû aux électrons sur l'impureté, est donné par :

$$\vec{E} = \sum_{k=1}^N \vec{e}_{ie}(r_k) \quad (3.2)$$

où  $\vec{e}_{ie}$  est le champ électrique individuel dû aux électrons de plasma sur l'impureté.

Donc la fonction d'autocorrélation du champ électrique est [23] :

$$C(t) = \langle \vec{E}(t) \cdot \vec{E} \rangle \quad (3.3)$$

Les parenthèses indiquent une moyenne d'ensemble de Gibbs à l'équilibre, Donc l'éq 3.3 est égale :

$$\begin{aligned}
 C(t) &= \frac{a^4}{e^2} \int d\vec{r}_1 d\vec{v}_1 \dots d\vec{r}_N d\vec{v}_N \vec{E} \cdot \vec{E}(-t) \rho_e \\
 &= \int d\vec{r}_1 d\vec{v}_1 \vec{e}(r_1) N \cdot \int d\vec{r}_2 d\vec{v}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{v}_N \vec{E}(-t) \rho_e \\
 &= \int d\vec{r}_1 d\vec{v}_1 \vec{e}(r_1) \cdot \Psi^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t)
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

où  $\rho_e$  est la distribution canonique de l'équilibre et  $\vec{e}(r_k)$  est le champ de particule unique. Les intégrations sur les degrés de liberté 2...N dans la deuxième égalité définit une fonction réduite  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t)$ , qui est le premier élément d'un ensemble de telles fonctions :

$$\Psi^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \dots, \vec{r}_s, \vec{v}_s, t) = N^s \cdot \int d\vec{r}_{s+1} d\vec{v}_{s+1} \dots d\vec{r}_N d\vec{v}_N \vec{E}(-t) \rho_e \tag{3.5}$$

Il est facile de vérifier que ces fonctions satisfont la hiérarchie du BBGKY :

$$\begin{aligned}
 &(\partial_t + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r - m_e^{-1} \{ \vec{\nabla}_r [V_{ie}(r) + V_{ef}(r)] \} \cdot \vec{\nabla}_v) \Psi^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) \\
 &= m_e^{-1} \int d\vec{r}_2 d\vec{v}_2 [ \vec{\nabla}_r V_{ee}(\vec{r} - \vec{r}_2) ] \cdot \vec{\nabla}_v \Psi^{(2)}(\vec{r}, \vec{v}, \vec{r}_2, \vec{v}_2, t)
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

Néanmoins, à la différence des fonctions de distribution :

$$\begin{aligned}
 \Psi^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t = 0) &= f(\vec{r}_1, \vec{v}_1) \vec{e}(r_1) + \\
 &\int d\vec{r}_2 d\vec{v}_2 f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2) \vec{e}(r_2)
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

Ou de façon équivalente :

$$\begin{aligned}
 \vec{e}(r_1) &= \frac{1}{f(\vec{r}_1, \vec{v}_1)} [ \Psi^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t = 0) \\
 &\quad - \int d\vec{r}_2 d\vec{v}_2 f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2) \vec{e}(r_2) ]
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

Ensuite, elle est substituée à l'expression de  $\Psi^{(2)}(\vec{r}, \vec{v}, \vec{r}_2, \vec{v}_2, t = 0)$  :

$$\begin{aligned}
 \Psi^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, t=0) &= f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2) [\vec{e}(r_1) + \vec{e}(r_2)] \\
 &+ n \int d\vec{r}_3 d\vec{v}_3 f^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, \vec{r}_3, \vec{v}_3) \vec{e}(r_3) \\
 &= f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2) \left( \frac{\Psi^{(1)}(\vec{r}_2, \vec{v}_2, t=0)}{f(\vec{r}_2, \vec{v}_2)} \right) \\
 &+ n \int d\vec{r}_3 d\vec{v}_3 h^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, \vec{r}_3, \vec{v}_3) \vec{e}(r_3)
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

Ici,  $f^{(s)}$  sont les fonctions de distributions d'équilibre des  $s$ - particules réduites associées avec l'ensemble de Gibbs et  $h^{(3)}$  est la fonction de corrélation d'équilibre pour trois électrons en présence de l'ion :

$$\begin{aligned}
 h^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, \vec{r}_3, \vec{v}_3, t) &= f^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, \vec{r}_3, \vec{v}_3) - \\
 &f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2) \frac{1}{f(\vec{r}_1, \vec{v}_1)} f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_3, \vec{v}_3) - \\
 &f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2) \frac{1}{f(\vec{r}_2, \vec{v}_2)} f^{(2)}(\vec{r}_2, \vec{v}_2, \vec{r}_3, \vec{v}_3)
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

La relation fonctionnelle linéaire entre  $\Psi^{(2)}$  à  $\Psi^{(1)}$  en  $t = 0$  est maintenant évidente :

$$\Psi^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, 0) = f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, t) \left( \frac{\Psi^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, 0)}{f(\vec{r}_1, \vec{v}_1)} + \frac{\Psi^{(1)}(\vec{r}_2, \vec{v}_2, 0)}{f(\vec{r}_2, \vec{v}_2)} \right) \tag{3.11}$$

+3corrélations électroniques

Reconnaissant cette relation linéaire, l'approche de base pour un couplage faible entre les électrons est de négliger toutes leurs corrélations, à tout moment :

$$\Psi^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, t) \rightarrow f(\vec{r}_2, \vec{v}_2, t) \Psi^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) + f(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) \Psi^{(1)}(\vec{r}_2, \vec{v}_2, t) \tag{3.12}$$

L'utilisation de cette équation dans la première hiérarchie 3.6 donne directement l'équation cinétique :

$$(\partial_t + \mathcal{L}) \Psi^{(1)}(\vec{r}, \vec{v}, t) = -m_e^{-1} f(\vec{r}, \vec{v}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r \int d\vec{r}'_2 V_{ee}(\vec{r} - \vec{r}'_2) \int d\vec{v}'_2 \Psi^{(1)}(\vec{r}'_2, \vec{v}'_2, t) \quad (3.13)$$

$$\mathcal{L} = \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r - m_e^{-1} (\vec{\nabla}_r V(r)) \cdot \vec{\nabla}_v$$

On va se limiter à la solution de l'équation homogène de 3.13, qui est donnée par :

$$\Psi^{(1)}(\vec{r}, \vec{v}, t) = f(\vec{r}, \vec{v}) \vec{e}_{mf}(\vec{r}(t)) \quad (3.14)$$

où  $\vec{e}_{mf}$  est le champ de force moyen :

$$\vec{e}_{mf}(\vec{r}) = \frac{1}{Ze} \vec{\nabla} \Phi(r) \quad (3.15)$$

et

$$f(\vec{r}, \vec{v}) = \frac{N}{\Omega} \left( \frac{m_e \beta}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-\beta \left( \frac{1}{2} m_e \vec{v}^2 + \Phi(r) \right)} \quad (3.16)$$

$f(\vec{r}, \vec{v})$  est la distribution de Maxwell-Boltzmann,  $N$  est le nombre total d'électrons et  $\Omega$  est le volume du système  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ .

Finalement on remplace 3.14 dans 3.4 on trouve la fonction d'autocorrélation du champ électrique  $C_{EE}(t)$ ,

$$C_{EE}(t) = C(t) = \int f(\vec{r}, \vec{v}) \vec{e}(\vec{r}) \vec{e}_{mf}(\vec{r}(t)) d\vec{r} d\vec{v} \quad (3.17)$$

où  $\vec{r}(t)$  est le vecteur de position dépendant du temps.

### 3.4.1 Adimensionnement de l'équation d'auto-corrélation $C_{EE}(t)$

Pour résoudre l'équation 3.17 numériquement, il est commode d'exprimer sous une forme adimensionnée :

$$C(t) = cte \bar{C}(T) = cte \int e^{Z\Gamma Y(X)} \left( \frac{1}{X} \frac{\partial Y_{ei}^{HGK}(X)}{\partial X} \right) \left( \frac{1}{X(T)} \frac{\partial Y_{ei}^{HGK}(X(T))}{\partial X(T)} \right) \prod_{i=1}^3 x_i x_i(T) dx_i \quad (3.18)$$



où

$$\vec{E}_e(x_i) = \vec{\nabla} Y_{ei}^{HGK}(X) = \sum_{i=1}^3 \frac{x_i}{X} \frac{\partial Y_{ei}^{HGK}(X)}{\partial X} \vec{u} \quad (3.19)$$

et

$$\vec{E}_{mf}(x_i(T)) = \vec{\nabla} Y_{ei}^{HGK}(X(T)) = \sum_{i=1}^3 \frac{x_i(T)}{X(T)} \frac{\partial Y_{ei}^{HGK}(X(T))}{\partial X(T)} \vec{u} \quad (3.20)$$

$i = 1, 2, 3$  ;  $x_i \equiv (x, y, z)$  et  $\vec{u} \equiv \vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$

### 3.4.2 Résolution numérique

Nous avons établi un programme Matlab calculant la fonction d'auto-corrélation temporelle des micro-champs électriques suivant les étapes suivantes :

- Lire les données physiques tel-que la densité électronique, la température de plasma et le nombre de charge de l'imperuté.
- Calcule les valeurs numériques des paramètres physiques décrivant ce plasma (nombre de couplage, degré de quinticité, longueur de Debye...).
- Détermine le potentiel effectif des électrons par la résolution de l'équation intégrale de l'énergie potentielle.
- Calcule la distribution des micro-champs électrique sur l'impureté.
- Calcule les trajectoires des électrons autour de l'impureté par la méthode de Verlet.
- Calcule la fonction d'autocorrélation temporelle de micro-champs par la simulation numérique de Monte-Carlo.

L'organigramme suivant illustre les étapes suivi du processus du programme de calcul de la fonction d'auto-corrélation temporelle :

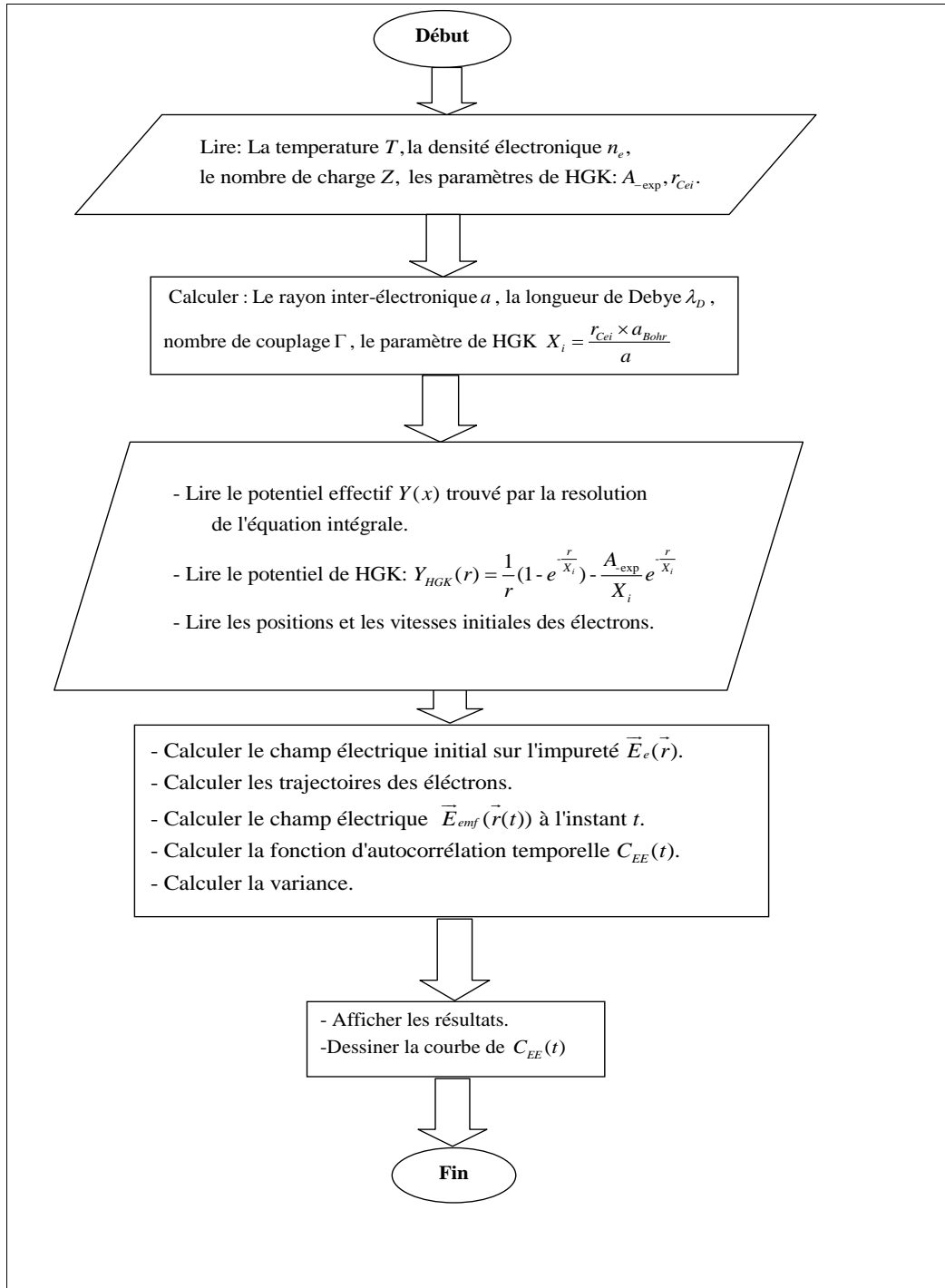


FIGURE 3.2 – Organigramme de la résolution de l'équation 3.18 par la méthode de Monte Carlo

### 3.4.3 Résultats obtenus et discussions

Nous présentons dans les figures ci-dessous la forme de la fonction d'autocorrélation temporelle du micro-champ électrique  $C_{EE}(t)$ , concernant certains alcalins (mentionnés dans le tableau (1) du chapitre 2), pour différentes valeurs de température  $T$  et de densité  $n_e$ .

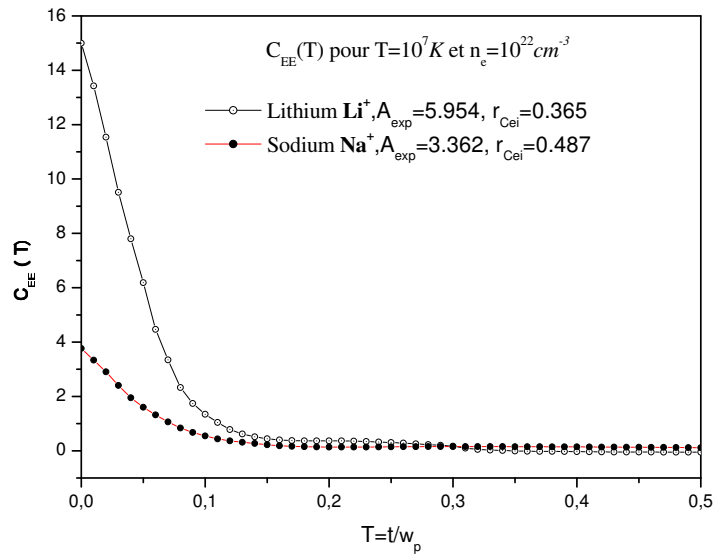


FIGURE 3.3 – La fonction d'autocorrélation temporelle du micro-champ électrique  $C_{EE}(t)$ , du Lithium ( $Li^+$ ) et de Sodium ( $Na^+$ ) pour  $T = 10^7 K$  et  $n_e = 10^{22} cm^{-3}$

La caractéristique qualitative à noter d'après la figure précédente est le temps caractéristique de relaxation. Nous remarquons que le temps caractéristique de relaxation Lithium ( $Li^+$ ) est plus grand que celui de Sodium ( $Na^+$ ).

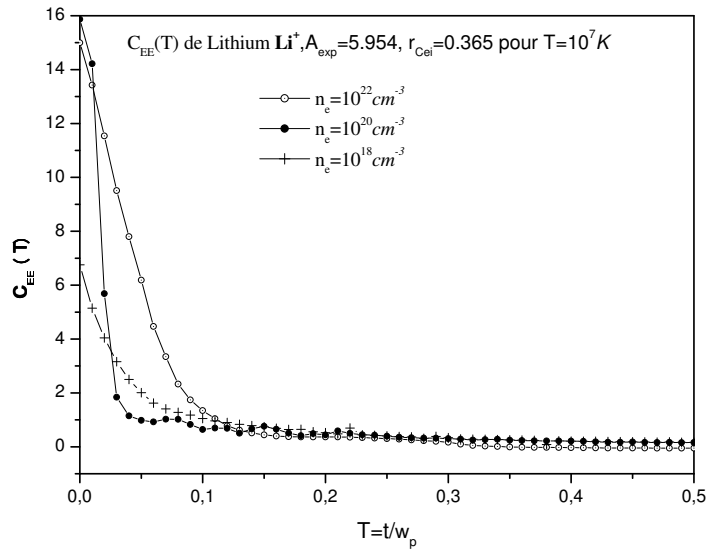


FIGURE 3.4 – La fonction d'autocorrélation temporelle du micro-champ électrique  $C_{EE}(t)$ , du Lithium ( $Li^+$ ) pour  $T = 10^7 K$  et différentes valeurs de densité  $n_e$ .

Nous remarquons que le temps caractéristique de relaxation augmente lorsque la densité augmente, et la corrélation initiale proportionnelle à la densité.

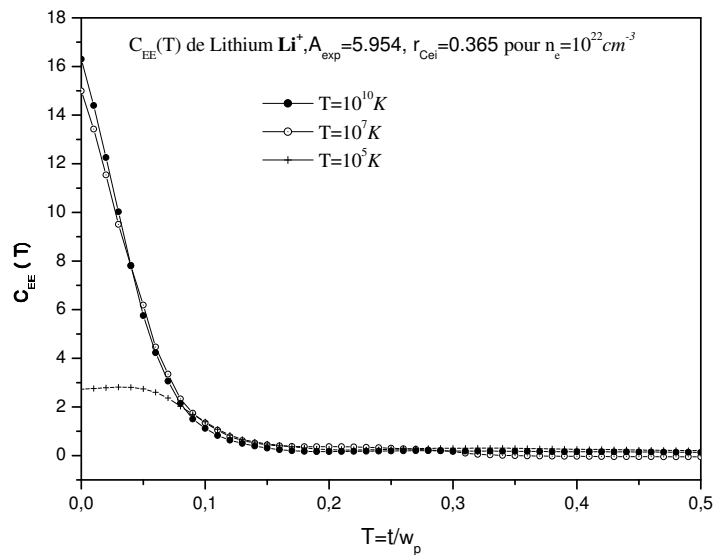


FIGURE 3.5 – La fonction d'autocorrélation temporelle du micro-champ électrique du Lithium ( $Li^+$ ) pour la densité  $n_e = 10^{22} cm^{-3}$  et différentes valeurs de température  $T$ .

On remarque que l'effet de la température est plus faible sur le temps de relaxation, mais la corrélation initiale diminue lorsque la température diminue.

# CONCLUSION GÉNÉRALE

**N**ous avons traité dans ce mémoire l'effet de la structure ionique dans la fonction d'auto-corrélation temporelle des micro-champs électriques. par la résolution numérique (par la méthode de Monte-Carlo) de l'intégrale de la fonction des micro-champs électriques des électrons d'un plasma OCP, cette fonction a de grande importance pour évaluer plusieurs grandeurs physique, notamment l'opérateur de collision. Cette étude a été effectuée dans l'approximation de théorie du champ moyen.

Le premier chapitre a été consacré à quelques généralités sur le plasma OCP et ses paramètres principaux.

Au deuxième chapitre, nous avons établi l'équation intégrale non linéaire gouvernant le potentiel électronique effectif à la distance ( $r$ ) de l'impureté. Nous avons pris le Pseudo-potentiel de Hellmann-Gurskii-Krasko (HGK) qui introduit la structure ionique dans l'interaction entre l'électron de valence et le noyau ionique. Nous avons résolu cette équation intégrale numériquement par la méthode de point fixe et nous avons déterminé les trajectoires des électrons autour de l'impureté.

Le troisième chapitre a été consacré au calcul théorique de la fonction d'auto-corrélation temporelle, et nous avons la résolu numériquement par la simulation de monte-Carlo à l'aide de l'environnement Matlab.

# BIBLIOGRAPHIE

- [1] J. L. Delcroix, A. Bers, *Physique des plasmas 1*, InterEditions / CNRS Editions, Paris, (1994). (Cité pages 1, 4, 7 et 9.)
- [2] S. Douis, Thèse de Doctorat, Université de Ouargla, Algérie, (2013). (Cité pages 1, 8, 16 et 21.)
- [3] M. Berkovsky, J. W. Dufty, A. Calisti, R. Stamm, B. Talin, *Phys. Rev. E* 51,4917-4929, (1995). (Cité page 1.)
- [4] A.V.Demura, *Physical Models of Plasma Microfield*, *International Journal of Spectroscopy*, Article ID 671073, (2010). (Cité page 1.)
- [5] S. P. Sadykova, W. Ebeling, I. M. Tkachenko, *Static and dynamic structure factors with account of the ion structure for high-temperature alkali and alkaline earth plasmas*. *European Physical Journal*,(2011). (Cité pages 2 et 15.)
- [6] J.W.Dufty, L.Zogaib, *Phys. Rev. E* 47,2958-2961, (1993). (Cité page 2.)
- [7] J.M.Wrighton and J.W. Dufty, *Kinetic Theory for Electron Dynamics Near a Positive Ion*, *J. Stat. Mech*, P10021, (2008). (Cité page 2.)
- [8] M. Benamor, K. Ghetas. *Distribution des microchamps électriques de Li+ Plasma avec tenir compte de la structure ionique*. Mémoire Master, Université Kasdi Merbah Ouargla, (2018). (Cité pages 4 et 16.)
- [9] I. Chihi, thèse de Doctorat, Université de Constantine, Algérie, (2005). (Cité pages 4, 7 et 20.)
- [10] M.N. Tamashiro, Y.Levin , M.C. Barbosa ; *The one-component plasma : a conceptual approach*, *Physica A* 268, 24â49, (1999). (Cité page 5.)
- [11] S. Douis, Thèse de Magistère, Université de Ouargla, Algérie, (2000). (Cité pages 5, 6, 7, 8, 9, 13, 17, 20 et 25.)

- [12] G.Belmont, L.Rezeau, C.Riconda, A.Zaslavsky, Introduction à la physique des plasmas, ISTE editions, [hal-02613497](https://doi.org/10.1016/j.iste.2018.02.001), 2018. (Cité page 7.)
- [13] S. P. Sadykova, Electric Microfield Distributions and Structure Factors in Dense Plasmas, Thèse Doctorat, 2011. (Cité page 8.)
- [14] J.P Hansen and McDonald. Theory of Simple Liquids. 32-33. Academic Press, 2nd edition, (1986). (Cité pages 10 et 11.)
- [15] E. B. Mendoub, Etude théorique du diagramme de phases liquide-vapeur par les équations intégrales : Application aux fluides modèles, Thèse de Doctorat, Université Paul Verlaine-Metz, (2008). (Cité pages 10 et 11.)
- [16] S. Sadykova, W. Ebeling, Contrib. Plasma Phys.47,No.10,659-669, (2007). (Cité page 20.)
- [17] J. M. Standard.The Verlet Algorithm for Molecular Dynamics Simulations : Chemistry 380.37, (2015). (Cité page 23.)
- [18] J.Roussel, Cours de physique, outils&methodes pour la physique, (2020). (Cité page 23.)
- [19] M.T. Meftah, T. Chohra, H. Bouguettaia, F. Khelfaoui, B. Talin, A. Calisti, and J.W. Dufty, Eur-Phys. J. B 37, 39-46, (2004). (Cité page 25.)
- [20] E.Gobet, Méthodes de Monte-Carlo et processus stochastiques : du linéaire au nonlinéaire. Editions de l'Ecole Polytechnique, (2013). (Cité page 26.)
- [21] S. Douis, Chapitre 2 : La méthode de Monte Carlo Metropolis, Université de Ouargla, Algérie, (2020). (Cité page 26.)
- [22] U.F.R. SPSE Master 1. PMP STA 21 Méthodes statistiques pour l'analyse des données en psychologie. Chapitre 3. (Cité page 26.)
- [23] B. Talin, A. Calisti, J. W. Dufty and I. V. Pogorelov, Phys. Rev. E 77,036410, (2008). (Cité page 28.)





## ÉTABLISSEMENT DE L'ÉQUATION INTÉGRALE POUR L'ÉNERGIE POTENTIELLE

L'équation intégrale de l'énergie potentielle d'un électron dans un plasma OCP contenant une charge test est :

$$\Phi(r) = \Phi_{ie} + n_e e^2 \int \frac{(e^{-\beta\Phi(\vec{r}')} - 1)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 \quad (\text{A.1})$$

Vous écrivez Cette équation en coordonnées sphériques Comme suit :

$$\Phi(r) = \Phi_{ie} + n_e e^2 \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{(e^{-\beta\Phi(\vec{r}')} - 1)}{[r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\psi)]^{1/2}} r'^2 \sin(\theta') dr' d\theta' d\varphi' \quad (\text{A.2})$$

où  $\psi$  est l'angle entre les deux vecteurs  $\vec{r}$  et  $\vec{r}'$  (figure A.1) et égale :

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

Si on suppose que le vecteur  $\vec{r}$  est situé sur l'axe  $oz(\theta = 0)$ , alors l'équation A.3 devient  $\cos(\psi) = \cos(\theta')$ . Nous remplaçons cette expression dans A.2, nous

obtenons :

$$\Phi(r) = \Phi_{ie} + n_e e^2 \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{(e^{-\beta\Phi(\vec{r}')} - 1)}{[r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\theta')]^{1/2}} r'^2 \sin(\theta') dr' d\theta' d\varphi' \quad (\text{A.4})$$

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

$$\Phi(r) = \Phi_{ie} + 2\pi n_e e^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} (e^{-\beta\Phi(\vec{r}')} - 1) [(r + r') - |r - r'|] dr' \quad (\text{A.5})$$

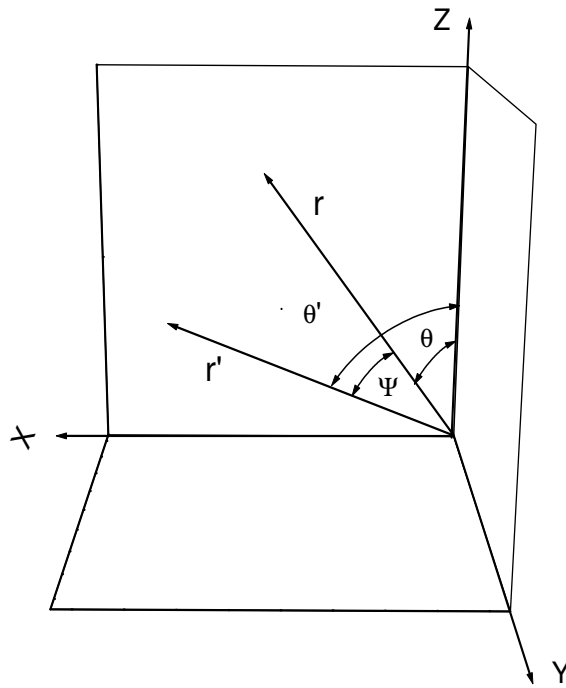


FIGURE A.1 – Représentation de l'angle  $\psi$ .