

UNIVERSITE KASDI MERBAH-OUARGLA

Faculté des Mathématiques et des Sciences de la Matière

Département de Physique

Année : 2020/2021



N° d'enregistrement :

/...../...../...../...../

THÈSE

Pour l'obtention du Diplôme de Doctorat

en « Physique de matériaux »

Étude comparative entre différents modèles de l'opérateur de collision électronique dans un plasma (TCP)

Présentée et soutenue publiquement
par :

BENBELGACEM Khalfallah

Devant le jury composé de :

Benmebrouk Lazhar	MCA	U.K.M. Ouargla	Président
Douis Saïd	Professeur	U.K.M. Ouargla	Promoteur
Mohammed Tayeb Meftah	Professeur	U.K.M. Ouargla	Co-promoteur
Mosbah Difallah	Professeur	U.E.H.L El Oued	Rapporteur
Chenini Keltoum	Professeur	Univ. Ghardaïa	Rapporteur
Kaddour Abedalmadjid	MRA	URAER. Ghardaïa	Rapporteur

REMERCIEMENTS

Le présent travail a été effectué au Laboratoire de **LRPPS** de l'Université KASDI MERBAH -OUARGLA-.

Je remercie vivement Monsieur **Douis Saïd** Professeur à l'université Kasdi Merbah - Ouargla - de m'avoir confié et dirigé ce travail, avec beaucoup d'efficacité. Qu'il soit assuré de mon estime ma reconnaissance.

Les plus respectueux et sincères remerciements à Monsieur **Mohammed Tayeb Meftah** Professeur à l'université Kasdi Merbah - Ouargla - pour sa contribution à diriger ce travail avec beaucoup d'efficacité et grande qualité scientifique.

Il m'est très agréable de remercier vivement Monsieur **Benmbrouk Lazhar** MCA à l'université Kasdi Merbah - Ouargla -, pour l'honneur qu'il ma fait en acceptant la présidence de jury de la thèse.

Je remercie vivement Monsieur **Mosbah Difallah** MCA à l'université Echahid Hamma Lakhdar El Oued, pour avoir accepté de faire partie du jury de ce travail.

J'adresse mes remerciements les plus respectueux à Madame **Chenini Kalthoum** Professeur à l'université de Ghardaïa, pour avoir accepté de juger ce travail.

J'adresse mes remerciements les plus respectueux et sincères à Monsieur **Kaddour Abedalmadjid** MRA à URAER de Ghardaïa, pour avoir accepté de juger ce travail.

Enfin, merci à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Table des matières

	Titre	Page
	Remerciements	i
	Table des matières	ii
	Liste des figures	v
	Liste des symboles	vii
	Liste des abréviations	ix
	Introduction générale	01
Chapitre I : <i>Initiation au plasma physique</i>		
I-1	Introduction	03
I-2	Définition de plasma	03
I-3	Paramètres physique de plasma	03
I-3-1	Le rayon de la sphère ionique et électronique (Rayon de Wigner-Seitz)	03
I-3-2	Longueur de Landau (longueur critique d'interaction binaire)	04
I-3-3	Longueur d'écrantage de Debye	04
I-3-4	Le couplage Γ	06
I-3-5	Sphère de Debye	07
I-3-6	Le degré de quantité η	07
I-3-7	Fréquence de plasma	08
I-4	Types et modèles des plasmas	09
I-4-1	Plasma froid et plasma chaud	09
I-4-2	Modèles de plasma	09
I-4-2-1	<i>Plasma à une composante OCP</i>	09
I-4-2-2	<i>Plasma à deux composantes TCP</i>	10
I-5	Théorie du champ moyen	11
	BIBLIOGRAPHIE	
Chapitre II: <i>Calcul du potentiel effectif dans le plasma TCP</i>		
II-1	Introduction	14
II-2	Établissement de système d'équations intégrales des énergies potentielles effectives	14
II-3	Solution numérique de système d'équations intégrales des énergies potentielles effectives	18
II-3-1	Résolution avec la méthode du point fixe (MPF)	20
II-3-1-1	<i>Théorème du point fixe</i>	20
II-3-1-2	<i>Principes de MPF</i>	20
II-3-1-3	<i>Convergence du procédé itératif</i>	21
II-3-1-4	<i>Comportement de l'erreur d'estimation</i>	21
II-3-1-5	<i>Arrêt des opérations</i>	22

II-3-2	Résolution avec la méthode de Range Kutta (MRK)	23
II-3-2-1	La méthode de Runge-kutta (MRK)	23
II-3-2-2	Principes de MRK	23
II-3-2-3	Domaines de stabilité	24
II-4	Résultats numériques	25
II-4-1	Comparaison entre l'énergie potentielle effective de l'électron dans le plasma (TCP) et le plasma (OCP) :	26
II-4-2	Comparaison entre l'énergie potentielle effective, dans le plasma (TCP) pour différents températures	27
II-4-2-1	Pour les électrons Y_e	27
II-4-2-2	Pour les ions Y_i	28
II-4-3	Comparaison entre l'énergie potentielle effective, dans le plasma (TCP) pour différents densités	28
II-4-3-1	Pour les électrons Y_e	28
II-4-3-2	Pour les ions Y_i	29
II-5	Discussion	29
II-6	Conclusion	30
	BIBLIOGRAPHIE	

Chapitre III: *Distribution du micro champ électrique dans un plasma TCP*

III-1	Introduction	31
III-2	Distribution de micro champ électrique	31
III-2-1	Distribution de Holtsmark	32
III-2-1-1	Cas d'un modèle de plasma OCP	33
III-2-2	Distribution de Baranger et Moser	36
III-2-2-1	Cas d'un modèle de plasma TCP	36
III-2-3	Distribution de Plus Proche Voisin (PPV)	37
III-2-4	Distribution de Mayer	38
III-3	Résultats et Discussion	39
III-4	Conclusion	43
	BIBLIOGRAPHIE	

Chapitre IV: *Étude comparative entre différents modèles de l'opérateur de collision électronique dans un plasma.*

IV-1	Introduction	44
IV-2	Les collisions dans le plasma	44
IV-2-1	Paramètre d'impact	45
IV-2-2	Section efficace	46
IV-2-3	Fréquence de collision	48
IV-3	L'opérateur de collision dans le plasma	48
IV-4	Modèles de calcul de l'opérateur de collision électronique	49

IV-4-1	L'opérateur de collision par la démarche de Nguyen	49
IV-4-2	L'opérateur de collision par la démarche de Griem	56
IV-4-3	L'opérateur de collision par la démarche de Spiros	62
IV-5	Comparaison entre les modèles de l'opérateur de collision	65
IV-5-1	La fonction d'auto-corrélation du micro-champ électrique	65
IV-5-2	Algorithme et programmation numérique	69
IV-5-2-	<i>Algorithme de Verlet</i>	69
IV-5-3	Résultats et discussion	70
IV-6	Conclusion	72
	BIBLIOGRAPHIE	

Conclusion générale	73
----------------------------	----

Appendices

Appendice A	<i>Simplification des équations intégrales (II-6)</i>	75
Appendice B	<i>Transformation de l'équation intégrale vers une équation différentielle</i>	78
Appendice C	<i>Distribution de micro champ Baranger et Moser.</i>	80
Appendice D	<i>Organigramme MPF et calcul de la distribution des micro-champs électriques</i>	82

Publication

Liste des figures

N°=	Titre	Page
(I-1)	Potentiel d'une charge test de 1C, dans le vide et dans un plasma.....	-6-
(I-2)	La couche bidimensionnelle des électrons et la fréquence de plasma.....	-9-
(I-3)	Calcul de la force électrique dans un milieu chargé par la sommation des forces élémentaires.....	-12-
(I-4)	Calcul de la force électrique dans un milieu chargé par l'application de la théorie du champ moyen.....	-13-
(II-1)	Les contributions énergétiques des particules dans le plasma.....	-16-
(II-2)	Énergie potentielle effective des électrons Y_e et des ions Y_i pour $Z = 1$, $T = 502,5K$ et $n_e = 8,12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, calculée avec la méthode de point fixe (lignes continues), méthode de Runge – Kutta (temps) et dynamique moléculaire (cercles).....	-25-
(II-3)	Énergie potentielle effective des électrons Y_e et des ions Y_i pour $Z = 1$, $T = 3141K$ et $n_e = 1,59 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, calculée avec la méthode de point fixe (lignes continues), méthode de Runge – Kutta (temps) et dynamique moléculaire (cercle).....	-26-
(II-4)	Comparaison de l'énergie potentielle effective des électrons Y_e dans le plasma à une composante (OCP) (trait continu) et le modèle de plasma à deux composantes (TCP) (ligne en pointillé), pour $Z = 1$, $T = 502,5 \text{ K}$ et $n_e = 8,12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$	-26-
(II-5)	Comparaison de l'énergie potentielle effective des électrons Y_e dans le plasma à deux composantes (TCP), pour $Z = 1$, $T = [200, 502.5, 800, 1100, 1400, 1700, 2000] \text{ K}$, et $n_e = 8,12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$	-27-
(II-6)	Comparaison de l'énergie potentielle effective des ions Y_i dans le plasma à deux composantes (TCP), pour $Z = 1$, $T = [200, 502.5, 800, 1100, 1400, 1700, 2000] \text{ K}$, et $n_i = 8,12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$	-28-
(II-7)	Comparaison de l'énergie potentielle effective des électrons Y_e dans le plasma à deux composantes (TCP), pour $Z = 1$, $T = 502,5 \text{ K}$, et $n_e = [10^{10}, 10^{11}, 8.12 \times 10^{11}, 10^{13}, 10^{14}, 10^{15}] \text{ cm}^{-3}$	-28-
(II-8)	Comparaison de l'énergie potentielle effective des ions Y_i dans le plasma à deux composantes (TCP), pour $Z = 1$, $T = 502,5 \text{ K}$, et $n_i = [10^{10}, 10^{11}, 8.12 \times 10^{11}, 10^{13}, 10^{14}, 10^{15}] \text{ cm}^{-3}$	-29-
(III-1)	La distribution de micro-champ électrique de Holtsmark pour un plasma de type hydrogène $Z = 1$	-33-
(III-2)	Distribution de micro-champ $P(\epsilon)$ d'un plasma à deux composantes, pour $Z = 1$, $T = 502,5 \text{ K}$ et $n_e = 8,12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, (cercle) simulation de dynamique moléculaire et (ligne continue) Approximation de Baranger – Mozer.....	-39-
(III-3)	Distribution de micro-champ $P(\epsilon)$ d'un plasma à deux composantes, pour $Z=1$, $T = 3141K$ et $n_e = 1,59 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$: (cercle) simulation par dynamique moléculaire et (ligne continue) Approximation de Baranger – Mozer.....	-40-
(III-4)	Distribution de micro-champ $P(\epsilon)$ d'un plasma à deux composantes, pour $Z = 5$, $T = 3150K$ et $n_e = 1,6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, (cercle) simulation par dynamique moléculaire et (ligne continue) Approximation de Baranger – Mozer.....	-40-
(III-5)	La distribution BM de micro-champ $P(\epsilon)$ dans le plasma à deux composantes (TCP), pour $Z = 1$, $T = [200, 502.5, 800, 1100, 1400, 1700, 2000] \text{ K}$, et $n_e = 8,12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$	-41-
(III-6)	La distribution BM de micro-champ $P(\epsilon)$ dans le plasma à deux composantes (TCP), pour $Z = 1$, $T = 502,5 \text{ K}$, et $n_e = [10^{10}, 10^{11}, 8.12 \times 10^{11}, 10^{13}, 10^{14}, 10^{15}] \text{ cm}^{-3}$	-41-

(IV-1)	<i>Trajectoires dans le système du centre de gravité. (a) Trajectoires des deux particules. (b) Trajectoire du mobile fictif représentant le mouvement relatif. ρ paramètre d'impact,, G centre de gravité.....</i>	-46-
(IV-2)	<i>La collision dans le cas où les particules détectées suivant l'angle φ</i>	-47-
(IV-3)	<i>L'interaction atome émetteur-champ intermoléculaire \vec{F} . Le champ magnétique $\vec{\mathcal{H}}$, la direction d'observation \vec{k} et les directions de polarisation e_1, e_2</i>	-53-
(IV-4)	<i>Amplitude de l'opérateur de collision ϕ_d en fonction de l'unité de fréquence dans plasma (a): température $T=20000K$, (b): $T=250000K$), le cas de Hélium He, $N_e = 8.12 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$</i>	-70-
(IV-5)	<i>Amplitude de l'opérateur de collision ϕ_d en fonction de l'unité de fréquence dans plasma (a): densité $N_e=1.59 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, (b): $N_e=8.12 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$), le cas de Hélium He, $T=25000K$.....</i>	-70-

Liste des symboles

Caractéristiques du plasma	
$m_e = 9.1093897 \times 10^{-31} \text{ kg}$masse de l'électronique
$e = 1.60217733 \times 10^{-19} \text{ C}$charge élémentaire de l'électron
Znombre de charge électrique
Nnombre total d'électrons
Ωvolume du système
n_{0i}densité ionique initiale
n_{0e} ou n_0densité électronique initiale
n_edensité électronique
n_idensité ionique
ρparamètre d'impacts
Ttempérature électronique
arayon de la sphère ionique
m_imasse ionique
l_Llongueur de Landau
ω_ppulsation ou fréquence plasma électronique
λ_Dlongueur de Debye
N_Dnombre de Debye
λ_{ie}longueur de Louis De Broglie
λ_Tlongueur thermique de Louis De Broglie
kvecteur d'onde
Γcouplage
ffonction de distribution électronique de Maxwell-Boltzmann
Grandeurs physiques	
x, y, zcoordonnées cartésiennes
ttemps
rposition
r_{ie}distance ion-électron
vvitesse des électrons
γaccélération des électrons
V ou Φ_Vénergie potentielle effective
V_{ie}énergie potentielle d'interaction ion-électron
V_{ee}énergie potentielle d'interaction électron-électron
V_{ii}énergie potentielle d'interaction ion- ion
Fforce électrique
Echamp électrique
εchamp électrique de particule unique

ε_{mf}champ électrique de champ moyen
Bchamp magnétique
pimpulsion
Pdistribution du microchamp électrique
C_{EE}fonction d'autocorrélation temporelle du microchamp
Φ ou ϕopérateur de collision
ϕ_d amplitude de terme direct de l'opérateur de collision
ϕ_{int} amplitude de terme d'interférence de l'opérateur de collision

Grandeurs adimensionnées

xdistance adimensionnée
ηdegré de quantité
η'longueur de Debye adimensionnée
Yénergie potentielle effective adimensionnée

Fonctions mathématiques

δdistribution de Dirac
K_2fonction de Bessel modifiée du deuxième espèce et d'ordre deux

Constantes physiques

$\varepsilon_0 = 8.854187817 \times 10^{-12} Fm^{-1}$permittivité du vide
$c = 2.99792458 \times 10^8 ms^{-1}$vitesse de la lumière
$K_B = 1.3806568 \times 10^{-23} JK^{-1}$constante de Boltzmann
$h = 6.6260755 \times 10^{-34} Js$constante de Planck
$\hbar = 1.05457266 \times 10^{-34} Js$constante de Planck réduite

Abréviations

Plasma à une composante.....	OCP
Plasma à deux composantes.....	TCP
Equation intégrale de l'énergie potentielle.....	EIEP
Méthode du point fixe.....	MPF
Méthode de Runge kutta.....	MRK
Dynamique moléculaire.....	DM
Griem-Baranger-Kolb-Oertel.....	GBKO
Plus Proche Voisin.....	PPV
Distribution de micro champ électrique	EMD

Introduction générale

Introduction générale

Dans toute étude, le plasma considéré comme un gaz ionisé ; par chauffage, photo ionisation; champ électrique..., constitué d'un très grand nombre de particules chargées (atomes, électrons, ions...) macroscopiquement neutres se mouvoir librement dans toutes les directions de l'espace. L'interaction entre ces particules de gaz classique électriquement neutres, peut être dominé par deux types de collisions ; soit, par des collisions avec d'autres particules chargées, si le plasma est dit fortement ionisé, ou par des collisions avec des particules neutres, si c'est le cas de plasma faiblement ionisé.

En général, et grâce à leur forte densité d'électrons libres, les plasmas sont de bons conducteurs, et les propriétés statiques et dynamiques du plasma peuvent être étudiées en utilisant une charge test, pour mesurer le champ électrique total, qui détermine ces propriétés en un point quelconque. Et à cause de l'agitation thermique de chacun de ses constituants de multiples collisions se produisent dans le plasma, qui permettant des échanges d'énergie et des transferts de quantité de mouvement entre les particules. et puisque ces effets permettent au plasma d'atteindre un état d'équilibre, les collisions au sein du plasma peuvent provoquer aussi des échanges entre les degrés de liberté internes et externes de chaque particule, donc, ils ont une importance capitale pour toute étude d'investigation de propriétés plasmatique.

Le but de notre travail est de souligner l'importance du calcul et de l'évaluation de l'opérateur de collision électronique dans le plasma, et de montrer l'influence de ces calculs entre différents modèles de l'opérateur dans un plasma à deux composantes (TCP), en réalisant une étude comparative entre trois modèles différents (Nguyen, Griem, Spiros), au cours de cette étude, nous avons réussi de calculer les potentiels électriques effectifs, par la résolution du système d'équations intégrales non linéaires décrivant ces potentiels, qui a donné des résultats étonnants pour les calculs des propriétés statistiques comme la distribution du micro-champ électrique, fonction de auto-corrélation, et les valeurs propres de l'opérateur de collision électronique.

Alors que le premier chapitre concerne les généralités et les initiations aux problèmes physiques de plasma, avec un rappel sur la théorie du champ moyen. Le deuxième chapitre est réservé au calcul des différents potentiels effectifs électroniques

et ioniques et leurs influence dans le cas de modèle d'un plasma à deux composantes (TCP) et à une composante (OCP), pour des conditions semi-classiques, en utilisant la mécanique statistique classique avec une interaction électron-ion régularisée. Ces potentiels effectifs sont couplés dans un système d'équations intégrales non linéaires (CIES) (ou des équations différentielles couplées), où nous allons les calculer et les comparer avec la simulation de la dynamique moléculaire.

Pour le troisième chapitre, nous donnerons les résultats de calcul de la distribution de Holtsmark dans le cas de l'OCP et la distributions Baranger-Moser des micro-champs électrique et finalement on va les comparées avec les résultats de la simulation de la dynamique moléculaire.

La pratique a montré que les précisions de calcul de l'opérateur de collision électronique influent beaucoup sur l'exactitude des résultats de l'interprétation des profils des raies. Pour examiner un peut plus profondément cette influence, nous avons consacré un quatrième chapitre, où nous allons choisir trois modèles connues ; la démarche de Nguyen; de Griem ; et de Spiros, pour certaines cas, où on va effectuer notre étude comparative entre ces différents modèles en utilisant un algorithme numérique. Finalement, on va faire une comparaison avec la simulation de la dynamique moléculaire, à fin d'avoir des résultats pour discussions.

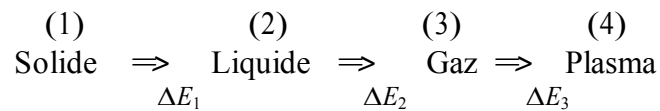
Enfin, nous donnerons une conclusion générale sur les résultats importants obtenus dans ce travail.

Chapitre I:

Initiation au plasma physique

I-1 Introduction

Il est bien connue que ; si en chauffant un solide jusqu'à certaines températures élevées, il va normalement, et par fusion, se transformer en liquide, et si nous continuons à le chauffer, nous obtiendrons un gaz (troisième état de la matière). Mais, si l'énergie fournit soit de telle sorte, que l'énergie d'agitation thermique des électrons est comparable à leur énergie d'ionisation de l'espèce solide considérée ! Nous obtenons dans ce cas, un quatrième état de la matière. C'est notamment, qu'on appelle un plasma, l'état qui composerait 99% de toute la matière de l'univers.



I-2 Définition de plasma

Le mot plasma, fut proposé pour la première fois par les physiciens américains *L.Tonks* et *I. Langmuir* [1] en 1929, pour désigner dans les tubes à décharge, certaines régions équipotentielles contenant un gaz ionisé électriquement neutre. Par suite, ce mot a été utilisé, surtout en astrophysique, pour désigner un état dilué de la matière, analogue à un gaz, mais constitué de particules chargées, électrons et ions positifs, en proportion telle que le milieu soit globalement neutre. On appelle donc plasma électronique un gaz ionisé quasi-neutre (électriquement neutre par la compensation du fond continu des charges positives) occupant un volume si grand que les fluctuations thermiques ne suffisent pas à perturber de façon notable sa quasi-neutralité.

I-3 Paramètres physiques de plasma

I-3-1 Le rayon de la sphère ionique et électronique (Rayon de *Wigner-Seitz*) :

Le rayon a [2,3] est le rayon de la sphère qui contient en moyenne un électron si les ions formant le fond positif est continu comme c'est le cas dans quelque modèles de plasma. Il est de l'ordre de la distance moyenne inter-électronique, ou intr-ionique :

$$a_i = \left(\frac{3}{4\pi n_i} \right)^{1/3}; \quad a_e = \left(\frac{3}{4\pi n_e} \right)^{1/3} \quad (I-1)$$

où: n_i, n_e ;est la densité des ions ou électrons qui représente le nombre des particules par unité de volume.

$n_i = N_i/\Omega, n_e = N_e/\Omega$, où N_i et N_e est le nombre d'ions ou électrons, et Ω est le volume total de plasma.

I-3-2 Longueur de Landau (longueur critique d'interaction binaire)

On appelle longueur de Landau l_L [4,5] la distance entre deux électrons voisins, pour que leur énergie potentielle d'interaction binaire soit de même ordre de grandeur que leur énergie d'agitation thermique. Soit : $K_B T = e^2/l_L$, où T est la température et K_B est la constante de Boltzmann.

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

Dans l'analyse des phénomènes de collisions et des corrélations de position, la longueur de *Landau* intervient dans un plasma.

I-3-3 Longueur d'écrantage de Debye

Toute particule chargée dans un plasma attire d'autres particules avec une charge opposée et repousse ceux qui ont la même charge, créant ainsi un nuage net de charges opposées autour de lui. Vu de l'extérieur, ce nuage fait un bouclier sur la particule, c'est à dire, il provoque un champ coulombien de la particule décroître de façon exponentielle à grands rayons, au lieu de décroître comme $1/r^2$. En physique des plasmas, la longueur de Debye λ_D (appelé aussi le rayon critique d'interaction collective), en référence au physico-chimiste *Peter Debye*, est l'échelle de longueur sur laquelle les charges électriques (par exemple les électrons) écrantés le champ électrostatique dans un plasma. Autrement dit, la longueur de Debye est la distance au delà de laquelle une séparation significative des charges peut avoir lieu. Cette longueur peut être démontrée et quantifiée comme a été faite par *Debye Hückel* en 1923 [6] dans le cadre de la théorie des électrolytes forts :

Considérons un ion de charge $Z_i e$ entouré d'un nuage d'électrons, le potentiel Φ_V obéit à l'équation de Poisson :

$$\nabla^2 \Phi_V = -4\pi\rho \quad (\text{I-3})$$

Où : ρ est la densité de charge au point considéré. On considère les ions comme indépendants et en présence du potentiel dû aux autres ions, la densité des ions n_i et des électrons n_e sont suivant la loi de Boltzmann :

$$\begin{cases} n_i = n_{0i} e^{-Z_i e \frac{\Phi_V}{K_B T}} \\ n_e = n_{0e} e^{+e \frac{\Phi_V}{K_B T}} \end{cases} \quad (\text{I-4})$$

n_{0i} et n_{0e} sont les densités des ions et des électrons en l'absence de perturbation, pour $\Phi_V = 0$. En développant au premier ordre :

La densité de charge est :

$$\rho = \sum_i n_i Z_i e - n_e e = \left(\sum_i n_{0i} Z_i e - n_{0e} e \right) - \left(\sum_i n_{0i} Z_i^2 e^2 \frac{\Phi_V}{K_B T} - n_{0e} e^2 \frac{\Phi_V}{K_B T} \right) \quad (\text{I-5})$$

Qui exprime la neutralité en l'absence de champ perturbateur. En peut écrire cette dernière équation sous la forme :

$$\rho = -\frac{n e^2 \chi}{K_B T} \Phi_V \quad (\text{I-6})$$

Où : $n = \left(\sum_i n_{0i} + n_{0e} \right)$ est le nombre total des particules par unité de volume sans fluctuations, et $\chi = \sum_i \frac{n_{0i}}{n} Z_i (Z_i + 1)$ introduisons l'équation (I-6) dans l'équation de Poisson (I-3), et en supposant la symétrie sphérique on obtient l'équation :

$$\frac{1}{r} \frac{d^2(r\Phi_V)}{dr^2} = \frac{4\pi n \chi e^2}{K_B T} \Phi_V \quad (\text{I-7})$$

Dont la solution avec la condition aux limites $\Phi_V(r) \rightarrow 0$ lorsque $r \rightarrow \infty$ est donnée par :

$$\Phi_V(r) = \frac{Ze}{r} e^{-\frac{r}{\lambda_D}} \quad (I-8)$$

Qui est le potentiel de Debye avec :

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{K_B T}{4\pi n \chi e^2}} \quad (I-9)$$

Si on ne considère que les électrons sur un fond uniforme positif, alors la longueur de Debye aura la forme suivante :

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{K_B T}{4\pi n_e e^2}} \quad (I-10)$$

La figure suivante (I- 1) présente la différence dû au l'effet de l'écrantage entre le potentiel d'une charge électrique de 1 Coulomb dans le vide et dans un plasma de densité $n_0 = 1,6 \times 10^{14} m^{-3}$, et de température $T_e = 30800K$.

Nous remarquons que la décroissance du potentiel créé par une charge est plus rapide dans un plasma que dans le vide, c'est-à-dire qu'il y a écrantage.

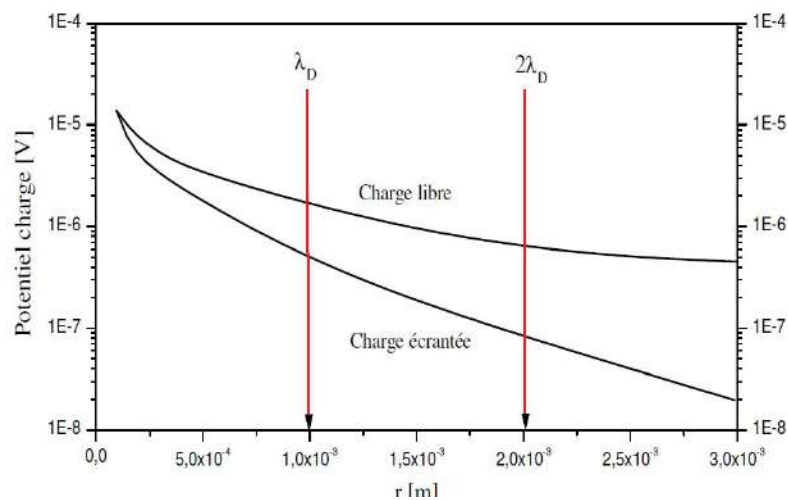


Figure (I- 1) : Potentiel d'une charge test de 1C, dans le vide et dans un plasma.

I-3-4 Le couplage Γ

Le couplage est le rapport de l'énergie d'interaction entre deux électrons séparé par la distance moyenne a , à l'énergie thermique $K_B T$, est égal à la longueur de Landau l_L sur la distance moyenne a [4,7].

$$\Gamma = \frac{l_L}{a} = \frac{\beta e^2}{a} \quad (\text{I-11})$$

Où ; $\beta = 1/K_B T$.

- 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.

I-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 [4].

$$N_D = n_e \frac{4\pi}{3} \lambda_D^3 \quad (\text{I-12})$$

- Si $N_D \ll 1$, la sphère de Debye est faiblement peuplée, ce qui correspond à un plasma fortement couplé (régime de particules indépendantes).

- Si $N_D \gg 1$, la sphère de Debye est très peuplée, ce qui correspond à un plasma faiblement couplé (régime du comportement collectif).

I-3-6 Le degré de quanticité η

Les effets quantiques sont très différents selon qu'il s'agit d'électrons ou d'ions, parce que le rapport de la masse d'ion sur la masse d'électron est d'ordre de 2.10^3 . Si T est la température de plasma, le degré de quanticité d'électrons η est caractérisé par la fraction de l'onde thermique de *Louis Debroglie* λ_T [8,9] sur la distance moyenne a entre deux électrons. Donc

$$\eta = \frac{\lambda_T}{a} = \frac{h}{a\sqrt{2\pi m_e K_B T}} \quad (\text{I-13})$$

Où ; h est la constante de *Planck*, et m_e est la masse de l'électron.

- Si $\eta = \lambda_T/a \ll 1$ c'est-à-dire à température élevée, nous pouvons 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 puisque dans ces conditions les effets quantiques aux courtes distances, sont alors négligeables.

I-3-7 Fréquence de plasma

Un second phénomène important lié à l'effet d'écran est le mouvement collectif des électrons, l'oscillation du plasma ou plasmon [5,10]. Lorsqu'une inhomogénéité de charges est créée dans un gaz d'électrons, ces derniers se mettent en mouvement pour rétablir la neutralité sous l'effet du champ électrostatique ainsi produit. Comme les électrons possèdent une inertie, ils acquièrent un mouvement oscillatoire autour de l'état d'équilibre parfaitement neutre. Ce qui vient d'être dit peut être démontré par l'argument élémentaire suivant : à l'équilibre, la densité électronique neutralise en chaque point le fond chargé. Supposons maintenant que nous déplaçons une couche d'électrons bidimensionnelle d'épaisseur d d'une distance $r > 0, r \ll d$ comme indiqué dans la figure (I-2).

En effet, nous créons un défaut de charge à gauche, et un excès de charge négative à droite. La densité superficielle de charge de ces deux plans chargés est $\sigma = \pm en_e$ et elle donne lieu (comme dans un condensateur) à un champ électrique $E = \sigma/\epsilon_0 = \rho er/\epsilon_0$. Ainsi, chaque électron de la couche déplacée obéit à la loi de Newton.

$$m_e \frac{d^2 r}{dt^2} = -eE = -\frac{1}{\epsilon_0} \rho r e^2 \quad (I-14)$$

C'est l'équation de mouvement d'un oscillateur de fréquence.

$$\omega_p = \left(\frac{\rho e^2}{\epsilon_0 m_e} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (I-15)$$

Les électrons de la couche effectuent donc une oscillation collective de fréquence ω_p bien déterminée. Dans ce raisonnement, nous avons négligé les chocs entre électrons et leur interaction coulombienne. Notez que cette fréquence des oscillations de plasma ne dépend que de la densité du plasma n_e et non de la température ou de la force d'un champ magnétique qui pourrait être présente.

Notons aussi, que si l'on définit la vitesse thermique électronique à ; $v_e \equiv (k_B T / m_e)^{1/2}$. Alors $\omega_p \equiv v_e / \lambda_D$.

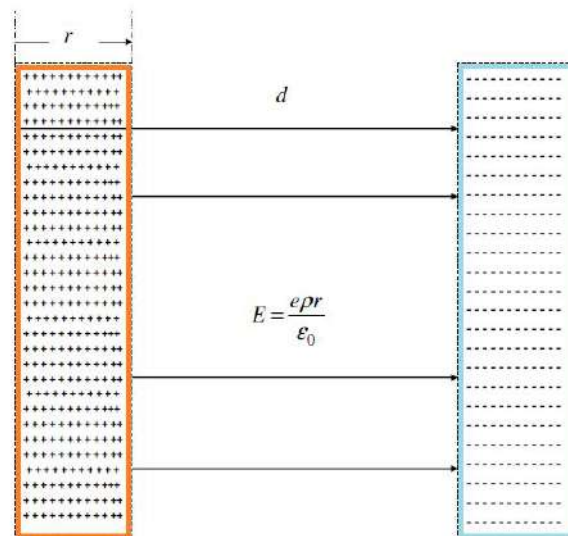


Figure (I- 2) : la couche bidimensionnelle des électrons et la fréquence de plasma.

I-4 Types et modèles des plasmas

I-4-1 Plasma froid et plasma chaud

Le plasma froid est le plasma dont la température est inférieure à quelques eV. Dans ce plasma, la densité de particules neutres est en général très supérieure à la densité de particules chargées (ions et électrons). L'interaction entre les deux espèces précédentes médiatisée par des forces à beaucoup plus courte portée que l'interaction Coulombienne (forces de *Van der Waals*) c'est pour ça le plasma froid est appelé collisionnel.

Lorsque la température d'un plasma est supérieure à plusieurs dizaines d'eV, on dit que ce plasma est chaud, dans ce cas il n'y a quasiment plus de particules neutres, et les particules chargées interagissent via l'interaction électronique Coulombienne et on dit que ce plasma est un milieu non collisionnel.

I-4-2 Modèles de plasma

I-4-2-1 Plasma à une composante OCP

Un plasma totalement ionisé et composé d'électrons et d'ions positifs, la fraction en masse de l'ion à celle de l'électron est de l'ordre de $2 \cdot 10^3$. Alors, pour cette raison, et pour d'autres raisons que nous citerons par la suite dans le texte, nous pouvons ne pas

tenir en 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 électriquement positif.

Ces considérations et hypothèses sont à la base de la construction du modèle de plasma à une composante (OCP).

Le modèle de l'OCP [2,4,11] remonte en fait aux années 1930, lorsque le physicien américain (*E. Wigner*) introduisit son équivalent quantique sous le nom de *Jellium*. Depuis cette période, l'OCP n'a cessé d'être l'un des modèles favoris de la mécanique statistique appliquée à la physique du plasma.

Pour ce modèle les théoriciens provient de sa très grande simplicité qui préserve néanmoins les caractéristiques essentielles de la matière ionique. C'est en quelque sorte un prototype (on parle de système de référence) qui peut servir de point de départ à une description de situations plus réalistes. Parmi les aspects simplificateurs du modèle, deux sont particulièrement importants. D'une part, il s'agit d'un système ne contenant qu'une seule espèce de charges mobiles, l'espèce de charge opposée étant modélisée par le fond continu (la gelée de Wigner) qui assure la neutralité électrique ; les forces coulombiennes entre charges ponctuelles sont dès lors purement répulsives. D'autre part le modèle possède une propriété d'invariance qui permet de ramener le nombre de variables thermodynamiques de deux (température et densité) à une seule sans dimension (le paramètre de couplage Γ).

I-4-2-2 Plasma à deux composantes TCP

Le modèle de plasma à deux composantes (TCP) est un modèle mathématique pour les plasmas qui sont composé par des ions de même type et des électrons, où la charge électrique totale du système (plasma) est globalement neutre.

L'utilisation de ce modèle consiste de ne pas prendre en compte la notion de fond continu, donc ce modèle nous permettra d'étudier les électrons et les ions en même temps, et de déterminer les propriétés électriques de potentiel effectif de l'ensemble.

La représentation de l'énergie potentielle de système, est alors, la sommation de contribution de tous électrons et ions de plasma situé à la distance (r) de l'origine [11,12].

Et l'énergie potentielle de système est exprimé par la somme de trois contributions pour chaque élément (électrons et ions) liées aux interactions suivantes ; électrons-impureté, ions-impureté, électrons-électrons, ions-ions et électrons –ions.

Pour les électrons :

$$V_e(r) = V_{me}(r) + V_{ee}(r) + V_{ei}(r) \quad (\text{I-16})$$

Plus l'énergie potentiel ionique de même forme, une somme de trois contributions liées à ; interaction ion-impureté, ion-électron, et ion-ion.

$$V_i(r) = V_{mi}(r) + V_{ii}(r) + V_{ie}(r) \quad (\text{I-17})$$

Pour les interactions électron-électron et ion-ion, les forces coulombiennes entre les charges ponctuelles sont purement répulsives, et ne s'approchent pas l'unes d'autres. L'interaction ion-électron il est clair qu'elle nécessite une description quantique, dans ce cas le potentiel de coulomb est remplacé par un potentiel fini et régularisé à l'origine [11,13]. Plus de détail voir le deuxième chapitre.

I-5 Théorie du champ moyen

Dans la littérature physique, qu'est apparue dans le travail de *P. Weiss* dans les années 1900 [14] et même plus tôt dans l'ouvrage de *P. Currie* [15]. L'idée de la théorie du champ moyen est de simplifier l'analyse des problèmes à plusieurs corps en général et des transitions de phase [14], en remplaçant la complexité des interactions entre les spins par moyenner les champs effectifs agissant sur les spins individuels.

La théorie annonce que ; soit un milieu électriquement chargé 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 $\rho(r)$, alors, la force électrique \vec{F}_0 agissant sur la charge q_0 , de la part des N autres charges figure (I-3) est donnée par la loi de Coulomb :

$$\vec{F}_0 = q_0 \sum_{i=1}^N \frac{q_i (\vec{r}_0 - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_i|^3} \quad (\text{I-18})$$

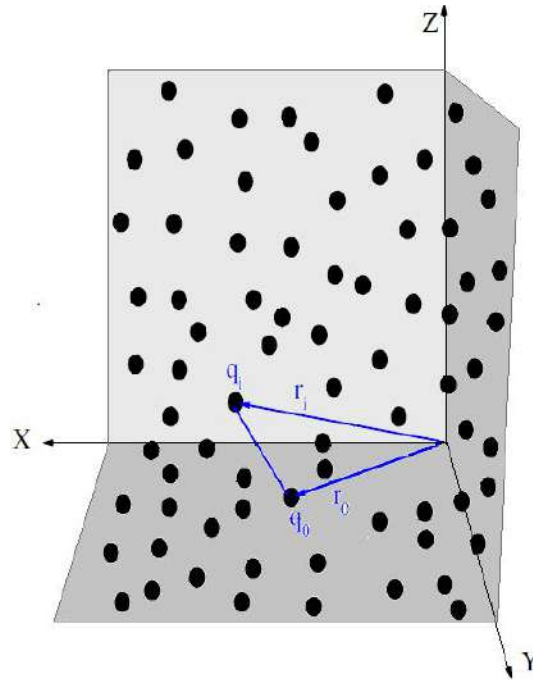


Figure (I- 3) : Calcul de la force électrique dans un milieu chargé par la sommation des forces élémentaires.

Si on néglige les corrélations entre les particules localisées dans l'élément de volume $d\tau$ contenant plusieurs particules de charge q *figure (I- 4)*, 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 champ électrique sur la charge q_0 . Cette démarche est fréquemment utilisée en physique statistique, et réfère à l'approximation de la théorie du champ moyen.

Donc, on peut transformer la formule précédente par la suivante :

$$\vec{F}_0 = q_0 \int_{(\Omega)} \frac{\rho(\vec{r}')(\vec{r}_0 - \vec{r}')}{|\vec{r}_0 - \vec{r}'|^3} d\tau \quad (\text{I-19})$$

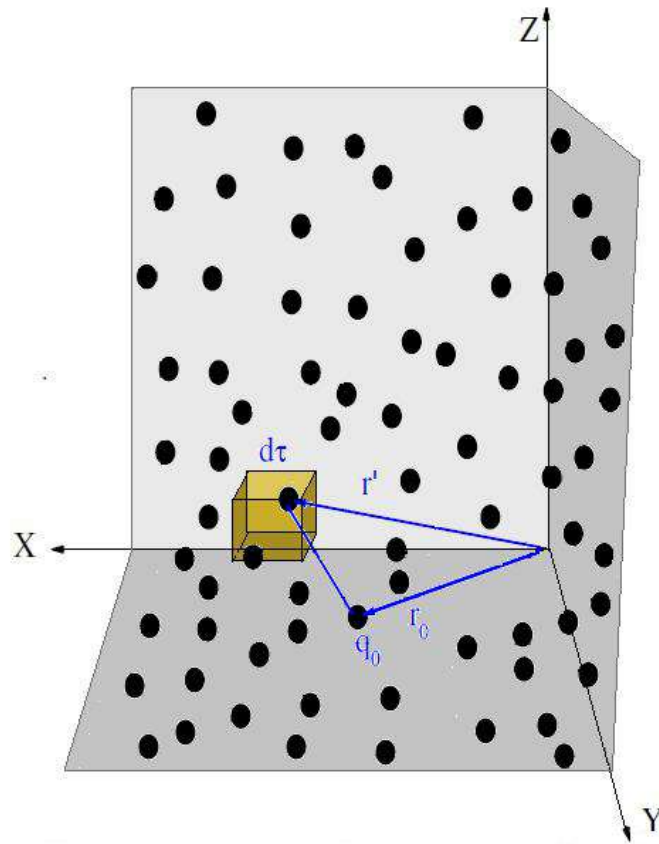


Figure (I- 4) : Calcul de la force électrique dans un milieu chargé par l'application de la théorie du champ moyenne.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] M. Berkovsky, J. W. Dufty, A. Calisti, R. Stamm, B. Talin, Phys. Rev. E 51, 4917–4929. **1995**.
- [2] J. W. Dufty in Strongly Coupled Plasmas, 493, de Witt H et Rogers F editors (NATO ASI Series, Plenum, NY). **1987**.
- [3] J. W. Dufty, L. Zogaib in Strongly Coupled Plasma Physics, 533, S. Ichimaru, ed. (Elsevier Pub. B. V. Yamada Science Foundation). **1990**.
- [4] J. W. Dufty, L. Zogaib, Phys. Rev. A 44 2612. **1991**.
- [5] J. W. Dufty, L. Zogaib, Phys. Rev. E 47 2958. **1993**.
- [6] A. Alastuey, J. L. Lebowitz, D. Levesque, Phys. Rev. A 43 2673. **1991**.
- [7] H. R. Griem, A. C. Kolb, K.Y. Shen, Phys. Rev. 116 4. **1959**.
- [8] H. R. Griem, A. C. Kolb, K.Y. Shen, Astrophys. J. 135 272. **1962**.
- [9] B. Talin, A. Calisti, J. W. Dufty, Phys. Rev. E 65 056406. **2002**.
- [10] B. Talin, A. Calisti, J. W. Dufty, I. V. Pogorelov, Phys. Rev. E. 77 036410. **2008**..
- [11] S. Douis, Thèse de Doctorat, Université de Ouargla, Algérie. **2013**.
- [12] A. Naam, Thèse de Doctorat, Université de Ouargla, Algérie. **2015**.
- [13] I. Chihi, Thèse de Doctorat d'état, Université de Constantine, Algérie. **2005**.
- [14] P. Weiss, L'hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique, J. de Phys. Theor. Appl. 6(1) 661. **1907**.
- [15] Leo P. Kadanoff, arXiv :0906.0653 , physics.hist-ph. **2009**.

Chapitre II:

Calcul du potentiel effectif dans le plasma TCP

II-1 Introduction

Dans ce chapitre, les potentiels effectifs électronique et ionique d'un plasma d'hydrogène totalement ionisé contenant une impureté de charges ($+Z_{me}$) sont calculés et comparés par la simulation de la dynamique moléculaire, dans le cas de modèle d'un plasma à deux composantes (TCP) et à une composante (OCP), pour des conditions semi-classiques, en utilisant la mécanique statistique classique avec une interaction électron-ion régularisée. Ces potentiels effectifs sont couplés dans un système d'équations intégrales non linéaires (CIES) (ou équations différentielles couplées), que nous avons résolu numériquement avec deux méthodes, la méthode du point fixe (MPF) et la méthode de Runge Kutta (MRK).

II-2 Établissement de système d'équations intégrales des potentiels effectifs

Le système des particules chargées ou totalement ionisées présente un intérêt fondamental pour de nombreux domaines en physique et en chimie. Le modèle de plasma le plus simple est le plasma dit à une composante (OCP), qui peut être expliqué avec deux façons. La première est, de considéré le plasma comme un système d'ions identiques, interagissant exclusivement par un potentiel de Coulomb, et qui sont immergés dans un fond uniforme et rigide des charges opposées (électrons) qui assure la neutralité électrique [1,2,3].

La deuxième est, d'ignorer les effets des mouvements des ions par rapport aux électrons car le rapport de masse entre électron et ion est de $m_e/m_i \approx 1/2000$. Donc, le système est composé d'un seul type de charges mobiles (les électrons), tandis que les espèces de charges opposées (ions) sont modélisées comme un fond continu qui assure la neutralité électrique du système globale [2,3]. La première méthode est utile pour la description des ions, et nous permet de calculer le potentiel effectif des ions. La seconde méthode est valable pour décrire le gaz électronique et nous permet de calculer le potentiel effectif électronique[4,5].

Dans ce chapitre, nous allons étudié un exemple d'un plasma d'hydrogène totalement ionisé, dans le cas d'équilibre, après une perturbation crée par une impureté de charge électrique ($+Z_{me}$) placée en milieu de ce plasma. Nous avons utilisé le modèle du plasma à deux composantes (TCP), qui nous permettra d'étudier les électrons et les ions en même temps, et de déterminer les propriétés électroniques et le potentiel effectif

d'ensemble. Dans ce travail, nous avons établi un système de deux équations intégrales non linéaires, sur les quelles sont basés tous les résultats de ce travail. La première équation intégrale représente l'énergie potentielle d'un électron de plasma situé à une distance (r) de l'impureté. Et la seconde représente l'énergie potentielle d'un ion à la même distance de l'impureté. L'énergie potentielle électronique est construite comme une somme des trois contributions liées aux interactions suivantes: *électron-impureté*, *électron-électron* et *électron-ion*. L'énergie potentielle ionique est construite sous la forme d'une somme des trois contributions liées à: l'interaction *ion-impureté*, *ion-électron* et *ion-ion*. Pour l'interaction électron-électron et ion-ion, les forces coulombiennes entre les charges ponctuelles sont purement répulsives et ne s'approchent pas les unes des autres, et, en ce qui concerne l'interaction ion-électron, il est clair qu'elle nécessite une description quantique. Dans ce dernier cas, le potentiel de Coulomb est remplacé par le potentiel connu par le pseudo-potentiel de Deutsch écranté [6,7].

$$V_{me}(r) = -\frac{Z_m e^2}{r} \left/ (1 - e^{-r/\lambda_T}) e^{-r/\lambda_{De}} \right. \quad (\text{II-1})$$

où: λ_{De} est la longueur de Debye, λ_T et la longueur d'onde thermique De Broglie. L'interaction impureté-ion est considérée comme une interaction de Debye.

Soit un milieu de volume Ω électriquement chargé constitué par; N_e électrons de charge ($-e$) et de masse (m_e) et N_i ions avec une charge ($+Ze$) et une masse (m_i), où Z est le nombre de charge. Au départ, la distribution spatiale à l'équilibre des électrons et des ions est de Maxwell-Boltzmann qui régit le système. Si nous plaçons un ion positif de charge ($+Z_m e$) (appelé charge d'essai ou impureté) à l'origine des coordonnées: le système est donc perturbé et après un certain temps, il va atteindre un nouvel état d'équilibre.

L'énergie potentielle $V_e(r)$ d'un électron situé à la distance r de l'impureté située à l'origine de l'espace lorsque le système atteint le nouvel état d'équilibre, s'écrit[8,9]:

$$V_e(r) = V_{me}(r) + V_{ee}(r) + V_{ei}(r) \quad (\text{II-2})$$

où : $V_{me}(r)$ est l'énergie potentielle de l'interaction impureté-électron, $V_{ee}(r)$ est l'énergie d'interaction de l'électron avec tous les autres électrons, $V_{ei}(r)$ est l'énergie d'interaction de l'électron avec tous les autres ions.

De même, l'énergie potentielle $V_i(r)$ d'un ion situé dans la position r de l'impureté s'écrit:

$$V_i(r) = V_{mi}(r) + V_{ii}(r) + V_{ie}(r) \quad (\text{II-3})$$

et : $V_{mi}(r)$ est l'énergie potentielle de l'interaction ion-impureté, $V_{ii}(r)$ est l'énergie d'interaction de l'ion avec tous les autres ions et $V_{ie}(r)$ est l'énergie d'interaction de l'ion avec tous les autres électrons.

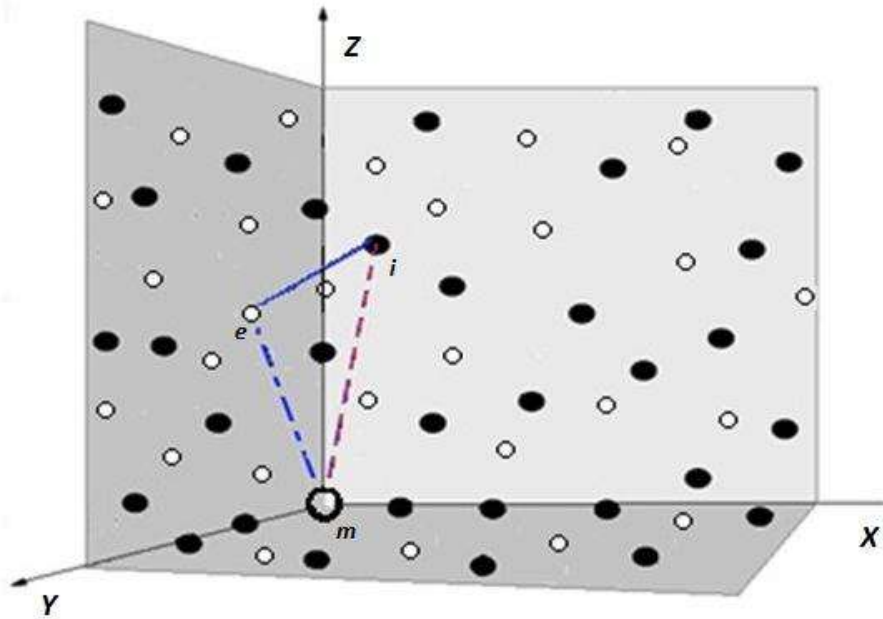


Figure (II- 1) : Les contributions énergétiques des particules dans le plasma
(O électrons, ● ions et ○ impureté)

L'interaction impureté-électron est prise d'une manière qui permet de prendre en compte à la fois l'effet quantique de la diffraction à courte distance, et également du l'effet de l'écrantage des effets de champ à grande distance: nous le représentons ici par le pseudo-potentiel suivant [4,5,9] :

$$V_{me}(r) = -\frac{Z_m e^2}{r} (1 - e^{-r/\lambda_T}) e^{-r/\lambda_{De}} \quad (\text{II-4})$$

où : $\lambda_T = (2\pi\hbar^2/m_e K_B T)^{1/2}$, et $\lambda_{De} = (K_B T / (4\pi n_e (Ze)^2))^{1/2}$ est la longueur électronique de Debye, et $n_e = N_e/\Omega$ est la densité d'électrons. Nous considérons que les électrons et les ions ont la même température $T_e = T_i = T$. L'interaction impureté-ion est considérée comme une interaction de Debye:

$$V_{mi}(r) = \frac{Z_m Z e^2}{r} e^{-r/\lambda_{Di}} \quad (\text{II-5})$$

où : $\lambda_{Di} = (K_B T / (4\pi n_i (Ze)^2))^{1/2}$ est la longueur ionique de Debye, et $n_i = N_i/\Omega$ est la densité d'ions, où $n_e = Zn_i$.

Les interactions électron-électron, électron-ion, ion-ion et ion-électron sont celles de Coulomb. Dans l'approximation du champ moyen, les équations (II-2) et (II-3) sont :

$$\begin{cases} V_e(r) = V_{me}(r) + e^2 \iint \frac{f_e(\vec{r}'_e, \vec{p}_e)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}_e d\vec{r}'^3 - Ze^2 \iint \frac{f_i(\vec{r}'_i, \vec{p}_i)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}_i d\vec{r}'^3 \\ V_i(r) = V_{mi}(r) + (Ze)^2 \iint \frac{f_i(\vec{r}'_i, \vec{p}_i)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}_i d\vec{r}'^3 - Ze^2 \iint \frac{f_e(\vec{r}'_e, \vec{p}_e)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}_e d\vec{r}'^3 \end{cases} \quad (\text{II-6})$$

Où : $f_e(\vec{r}'_e, \vec{p}_e), f_i(\vec{r}'_i, \vec{p}_i)$ sont successivement les distributions de Maxwell-Boltzmann pour les électrons et les ions .

$$\begin{cases} f_e(\vec{r}'_e, \vec{p}_e) = n_e \left(\frac{\beta}{2\pi m_e} \right)^{3/2} e^{-\beta \left(\frac{\vec{p}_e^2}{2m_e} + V_e(r) \right)} \\ f_i(\vec{r}'_i, \vec{p}_i) = n_i \left(\frac{\beta}{2\pi m_i} \right)^{3/2} e^{-\beta \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + V_i(r) \right)} \end{cases} \quad (\text{II-7})$$

et : $\overline{p}_e, \overline{p}_i$ sont les impulsions des électrons et des ions successivement.

Dans le système de coordonnées sphériques l'équation (II-6) nous donne, après des calculs de base le système d'équations suivant (voir l'appendice A) :

$$\begin{cases} V_e(r) = -\frac{Z_m e^2}{r} (1 - e^{-r/\lambda_T}) e^{-r/\lambda_{De}} + 4\pi n_e e^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} (r + r' - |r - r'|) (e^{-\beta V_e(r')} - e^{-\beta V_i(r')}) dr' \\ V_i(r) = -\frac{Z_m Z e^2}{r} e^{-r/\lambda_{Di}} - 4\pi n_i Z e^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} (r + r' - |r - r'|) (e^{-\beta V_e(r')} - e^{-\beta V_i(r')}) dr' \end{cases} \quad (\text{II-8})$$

Donc, et finalement on a le système des équations (II-8) qui présente les contributions énergétique globale du potentiel créé par les particules dans le plasma (électrons, ions et impureté).

La non linéarité de ce système d'équations pose un grand problème pour l'obtention d'une solution analytique valable pour toutes les régions, et pour toute la gamme de couplages soient-ils faibles ou forts. La résolution de ce système d'équations intégrale ne peut être déduite que par des techniques numériques.

II-3 Solution numérique de système d'équations intégrales du potentiel

Pour trouver une solution, il est mieux pratiquement d'exprimer le système (II-8) sous forme adimensionnée. Il faut alors, éviter les problèmes liés aux unités des différents paramètres présents dans le système d'équations (II-8).

Donc, nous écrivons:

L'énergie potentielle électronique adimensionnée $Y_e = -a_e V_e / (Z e^2)$, où $a_e = (3/(4\pi n_e))^{1/3}$ est la distance moyenne inter-électrons.

L'énergie potentielle ionique adimensionnée $Y_i = -a_i V_i / (Z e^2)$, où $a_i = (3/(4\pi n_i))^{1/3}$ est la distance moyenne inter-ions.

La Distance adimensionnée $x = r/a_e$, le degré de quantité $\eta = \lambda_T/a_e$, et des couplages électronique et ionique sous les formes successives suivantes :

$$\Gamma_e = \beta e^2 / a_e, \quad \text{et} \quad \Gamma_i = \beta (Z e)^2 / a_i$$

Et nous mettons aussi $n_e = \lambda_{De}/a_e$ et, $n_i = \lambda_{Di}/a_i$

Après cela, nous obtenons le système d'équations adimensionnelles suivantes:

$$\begin{cases} Y_e(x) = \frac{Z_m}{Zx} (1 - e^{-x/\eta}) e^{-x/\eta_e} - \frac{3}{Z} \int_0^\infty \frac{x'}{x} (x + x' - |x - x'|) (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' \\ Y_i(x) = \frac{Z_m}{x} e^{-x/\eta_i} + 3 \int_0^\infty \frac{x'}{x} (x + x' - |x - x'|) (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' \end{cases} \quad (\text{II-9})$$

Nous pouvons résoudre le système non linéaire d'équations intégrales (CIES) (II-9) par la méthode du point fixe (MPF) avec les conditions initiales égales aux potentiels initiaux Y_{me} pour la première équation et Y_{mi} pour la deuxième.

$$\text{où : } \begin{cases} Y_{me}(x) = \frac{Z_m}{Zx} (1 - e^{-x/\eta}) e^{-x/\eta_e} \\ Y_{mi}(x) = \frac{Z_m}{x} e^{-x/\eta_i} \end{cases}$$

De même aussi, on peut résoudre ce système en le transformant en un système d'équations différentielles non linéaires de deuxième ordre [9], soit (voir l'appendice B):

$$\begin{cases} Y_e'' = \frac{2}{x} (Y_{me}' - Y_e') + Y_{me}'' + \frac{6}{Z} (e^{Z\Gamma Y_e(x)} - e^{Z\Gamma Y_i(x)}) \\ Y_i'' = \frac{2}{x} (Y_{mi}' - Y_i') + Y_{mi}'' + 6 (e^{Z\Gamma Y_e(x)} - e^{Z\Gamma Y_i(x)}) \end{cases} \quad (\text{II-10})$$

où :

$$\begin{cases} Y_{me}' = \frac{Z_m}{Z} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{x} (1 - e^{-x/\eta}) e^{-x/\eta_e} \right], et Y_{me}'' = \frac{\partial Y_{me}'}{\partial x} \\ Y_{mi}' = Z_m \frac{\partial}{\partial x} \frac{e^{-x/\eta_i}}{x}, et Y_{mi}'' = \frac{\partial Y_{mi}'}{\partial x} \end{cases}$$

Avec les conditions initiales pour $Z=1$:

$$\begin{cases} Y_e(0) \approx 1/\eta_e, & Y_e'(0) \approx -(\eta_i/2\eta_e)/\eta_e\eta_i \\ Y_i(0) \approx -Y_e(0), & Y_i'(0) \approx Y_e'(0) \end{cases}$$

Dans ce travail, aussi, nous avons essayé de résoudre le dernier système (II- 10), en utilisant la méthode numérique de Runge-Kutta (MRK).

II-3-1 Résolution avec la méthode du point fixe (MPF)

La méthode point fixe [10,11] est parmi les méthodes indirectes qui exigent théoriquement un nombre infini d'opérations pour obtenir la solution exacte, et qui est en plus utilisable dans les problèmes où la convergence est censée être rapide, ou dans les problèmes à nombre élevé d'éléments de matrice nuls.

Dans la suite, nous commençons par donner un rappel mathématique de cette méthode, qui est connue aussi par la méthode des substitutions successives.

II-3-1-1 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 :

$$\|G(T_1) - G(T_2)\| \leq \alpha \|T_1 - T_2\| \quad (\text{II-11})$$

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

$$0 < \alpha < 1$$

Alors il existe :

$$G(T^{(*)}) = T^{(*)}$$

Le point $T^{(*)}$ est la limite de la suite :

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

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

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

Et

$$\|T_i - T^{(*)}\| \leq \frac{\alpha^j}{1-\alpha} \|T_1 - T_2\| \quad (\text{II-12})$$

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

Rappelons qu'un espace de *Banach* est un espace normé et complet.

II-3-1-2 Principes de MPF :

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

équivalente :

$$x = F(x) \quad (\text{II-13})$$

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 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 itérations [11,12]:

$$x^{(n)} = F(x^{(n-1)}) \quad (\text{II-14})$$

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 (II-13).

II-3-1-3 Convergence du procédé itératif :

Théorème : Si $F(x)$ de l'équation $x = F(x)$ possède une dérivée qui vérifie [11]:

$$|F'(x)| \leq m \leq 1 \quad \forall x \in \mathfrak{R} \quad (\text{II-15})$$

Alors $\forall x^{(0)} \in \mathfrak{R}$ la suite $\{ x^{(0)}, x^{(1)}, \dots, x^{(n)}, \dots \}$: générée par $x^{(i)} = F(x^{(i-1)})$ pour : $i = 1, 2, 3..n$. converge vers $x^{(*)}$ solution de $x = F(x)$ donc de l'équation $f(x) = 0$.

De plus la racine $x^{(*)}$ est unique.

Remarques :

- 1)- Le théorème fournit une condition suffisante, c'est à dire pour que la méthode des substitutions successives converge, il suffit que : $|F'(x)| < 1$ sur \mathfrak{R} .
- 2)- Plus $F'(x)$ est petite, plus la convergence est rapide.

II-3-1-4 Comportement de l'erreur d'estimation :

Si on note $\varepsilon^{(n)} = x^{(n)} - x^{(*)}$ l'erreur d'estimation à la n -ième itération, alors :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\varepsilon^{(n+1)}}{\varepsilon^{(n)}} = F'(x^{(*)}) \quad (\text{II-16})$$

D'après le théorème des accroissements finis :

$$x^{(n+1)} - x^{(*)} = F(e^{(n)})(x^{(n)} - x^{(*)}) \text{ avec } e^{(n)} \in]x^{(n)}, x^{(*)}[$$

d'où :

$$\varepsilon^{(n+1)} = \varepsilon^{(n)} \cdot F'(e^{(n)})$$

Si la méthode converge, alors :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} F'(e^{(n)}) = F'(x^{(*)}) \quad (\text{II-17})$$

d'où :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\varepsilon^{(n+1)}}{\varepsilon^{(n)}} = F'(x^{(*)}) = C^{te} \quad (\text{II-18})$$

II-3-1-5 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 :

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

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

$$\left| \frac{x^{(n)} - x^{(n-1)}}{x^{(n)}} \right| < \varepsilon_2 \quad \text{ou} \quad |x^{(n)} - x^{(n-1)}| < \varepsilon_3$$

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

$$n > n_{\max}$$

Dans ce cas, si le seuil de précision ε_1 (ou ε_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, alors, résoudre le système d'équations intégrales non linéaire (II-9) par la méthode du point fixe MPF, à partir d'une itération approximative initiale égale le pseudo-potentiel de Kelbg écranté $Y_{ie}(x)$.

II-3-2 Résolution avec la méthode de Range Kutta (MRK)

II-3-2-1 La méthode de Runge-kutta (MRK) :

Il est évident, que la formule du type Runge-kutta (MRK) la plus utilisée est celle d'ordre quatre, appelée généralement formule de *Runge-Kutta* :

II-3-2-2 Principes de MRK :

Une méthode de Runge-Kutta d'ordre p à s étapes est une méthode dont l'erreur locale est en $O(h^{p+1})$ définie par les expressions [12,13]:

$$\forall i \in \{1, \dots, s\}, Y_i = y_{t_n} + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_j, t_n + c_j h), y_{t_{n+1}} = y_{t_n} + h \sum_{j=1}^s b_j f(Y_j, t_n + c_j h) \quad (\text{II-19})$$

où les coefficients donnés sous la forme d'un tableau de *Butcher* :

$$\begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{11} & \dots & a_{1s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & \dots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & \dots & b_s \end{array}$$

La méthode est explicite si et seulement si :

$$\exists (i, j) \in \{1, \dots, s\}^2, j \geq i | a_{ij} \neq 0$$

De plus, on parlera de méthode diagonalement implicite pour une méthode implicite où

$$\exists (i, j) \in \{1, \dots, s\}^2, j > i \Rightarrow a_{ij} = 0$$

Alors, pour une méthode de Runge-Kutta (RK4) classique le tableau de *Butcher* est[13] :

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ 1/2 & 1/2 & & \\ 1/2 & 0 & 1/2 & \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ \hline & 1/6 & 2/6 & 2/6 & 1/6 \end{array}$$

Remarque : L'écriture sous la forme d'un tableau de Butcher est relativement récente. On peut, aussi définir RK4 comme une succession de plusieurs calculs.

II-3-2-3 Domaines de stabilité

Pour le choix d'une méthode de Runge-Kutta, l'ordre n'est pas la seule condition importante. La deuxième condition importante est le domaine de stabilité. Qui est défini pour tous les points du plan complexe \mathbb{Z} , pour lesquels la méthode reste stable, alors les résultats restent bornés.

Dans le cas d'une telle méthode, nous aurons affaire à une fraction rationnelle, mais, dans le cas d'une fonction explicite, nous aurons un polynôme, dont on peut se déduire de l'expression sous la forme d'une somme.

Le domaine de stabilité d'une méthode est la partie du plan complexe pour laquelle la fonction de stabilité respecte la condition :

$$|R(z)| \leq 1$$

Cela correspond aux valeurs pour lesquelles la méthode ne diverge pas. Dans le cas qui n'est pas borné, la méthode peut avoir un domaine de stabilité fini [13].

Alors pour notre étude, présenté par le système (II-10) il est évident que la méthode du type Runge-kutta (MRK) utilisée est celle d'ordre quatre, soit :

$$\begin{cases} Y_{i+1} = Y_i + \frac{\Delta x}{6} \left[f(Y_i, x_i) + 2f(\widehat{Y}_{i+1/2}, x_{i+1/2}) + 2f(\widehat{\widehat{Y}}_{i+1/2}, x_{i+1/2}) + f(\widehat{Y}_{i+1}, x_{i+1}) \right] \\ \widehat{Y}_{i+1/2} = Y_i + \frac{\Delta x}{2} f(Y_i, x_i) \\ \widehat{\widehat{Y}}_{i+1/2} = Y_i + \frac{\Delta x}{2} f(\widehat{Y}_{i+1/2}, x_{i+1/2}) \\ \widehat{Y}_{i+1} = Y_i + \Delta x f(\widehat{\widehat{Y}}_{i+1/2}, x_{i+1/2}) \end{cases} \quad (\text{II-20})$$

Cette formule nécessite quatre évaluations de f ce qui prend davantage de temps pour les fonctions compliquées. L'erreur par pas E_{i+1} peut être estimée de la façon suivante : ayant obtenu avec le pas Δx une valeur Y_i à x_i , on calcule

Y_{i+1} à $x_{i+1} = x_i + \Delta x$. Puis, partant de Y_i à x_i , on divise le pas par 2 et on calcule la valeur \widehat{Y}_{i+1} après deux pas de valeur $\Delta x/2$ chacun. On a alors :

$$\frac{(\widehat{Y}_{i+1} - Y_{i+1})}{2^{-k} - 1} \quad (\text{II-21})$$

où $k = 4$, k est l'ordre de la méthode. Alors, pour résoudre le système des équations

intégrales précédentes (II-9) par MRK, il faut dériver deux fois chaque équation par rapport à r pour obtenir le système des équations différentielles :

$$\begin{cases} Y_e'' = \frac{2}{x}(Y_{me}' - Y_e') + Y_{me}'' + \frac{6}{Z}(e^{ZY_e(x)} - e^{ZY_i(x)}) \\ Y_i'' = \frac{2}{x}(Y_{mi}' - Y_i') + Y_{mi}'' + 6(e^{ZY_e(x)} - e^{ZY_i(x)}) \end{cases} \quad (\text{II-22})$$

où; Y_e' , Y_e'' et Y_i' , Y_i'' sont successivement, les dérivées première et deuxième du potentiel électronique et ionique.

II-4 Résultats numériques

La résolution de système d'équations (II-9) avec ces méthodes MPF et MRK4 donne en général une concordance des potentiels effectives électroniques et ioniques avec ceux de la dynamique moléculaire, qu'est bien présenter par les figure (II-2) et figure (II-3).

Dans le troisième chapitre, on va voir aussi, que l'application de ces potentiels effectifs dans les distributions du micro champ par l'approximation des Baranger-Mozer [14,15] donne également des distributions de micro-champs compatibles avec la simulation de la dynamique moléculaire.

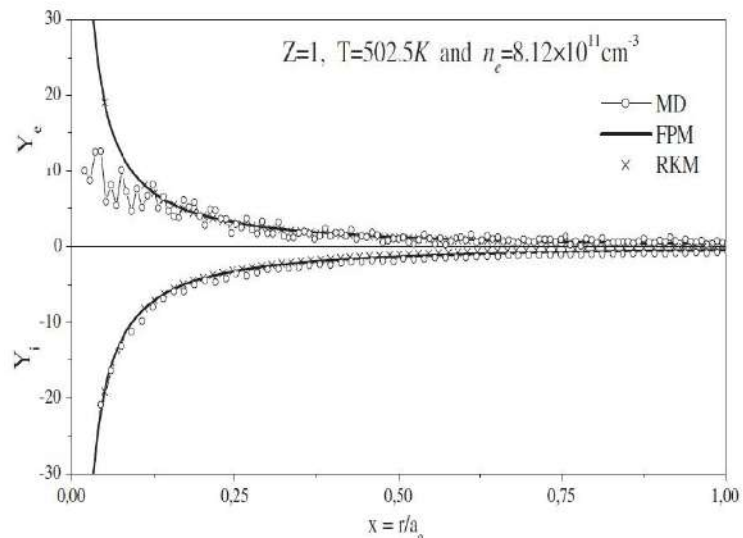


Figure (II-2) : Énergie potentielle effective des électrons Y_e et des ions Y_i pour $Z = 1$, $T = 502,5K$ et $n_e = 8,12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, calculé avec la méthode de point fixe (lignes continues), méthode de Runge – Kutta (tempes) et dynamique moléculaire (cercles).

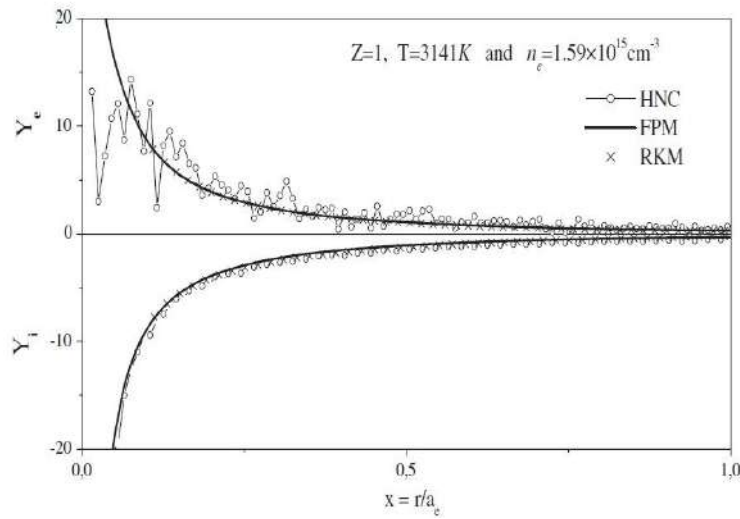


Figure (II-3) : Énergie potentielle effective des électrons Y_e et des ions Y_i pour $Z = 1$, $T = 3141K$ et $n_e = 1,59 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, calculé avec la méthode de point fixe (lignes continues), méthode de Runge – Kutta (temps) et dynamique moléculaire (cercle)

II-4-1 Comparaison entre l'énergie potentielle effective électronique dans le plasma (TCP) et plasma (OCP) :

La comparaison entre l'énergie potentielle effective de l'électron dans le plasma à un composant (OCP) qu'est trait continu, et l'énergie potentielle effective de l'électron dans le modèle de plasma à deux composantes (TCP) présenté dans la figure (II-4) suivante.

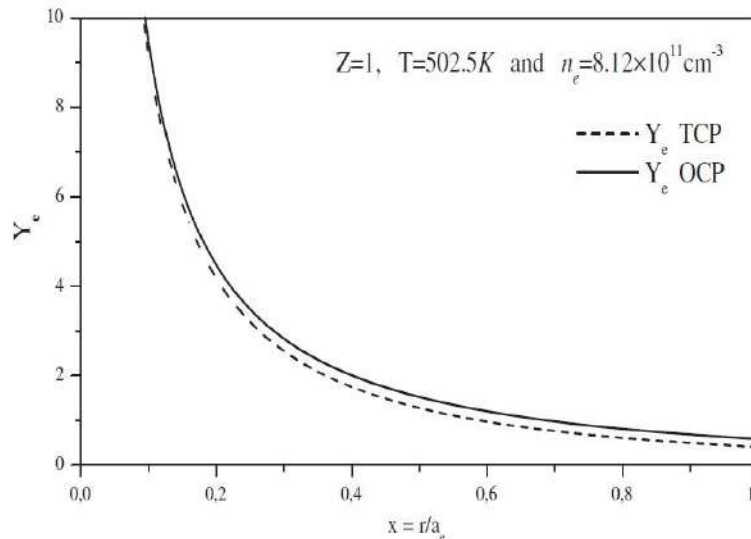


Figure (II-4) : Comparaison de l'énergie potentielle effective des électrons Y_e dans le plasma à une composante (OCP) (trait continu) et le modèle de plasma à deux composantes (TCP) (ligne discontinu), pour $Z = 1$, $T = 502,5 \text{ K}$ et $n_e = 8,12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$.

Nous avons remarqué, également, que le MRK (appliquée à l'équation différentielle) est plus rapide que MPF (appliquée à l'équation intégrale). L'inconvénient de la MRK est sa sensibilité aux conditions initiales. A l'inverse, la MPF, malgré qu'elle nécessite beaucoup de temps de calcul, elle a plus de garanties et ses résultats convergent vers une solution plus proche [16].

Mathématiquement, l'équation intégrale (II-9) admet des solutions finies à courte distance.

Nous notons que le potentiel effectif numérique trouvé, se laisse toujours exprimable sous la forme d'une somme de deux exponentielles.

II-4-2 Comparaison entre l'énergie potentielle effective, dans le plasma (TCP) pour différentes températures :

II-4-2-1 Pour les électrons Y_e :

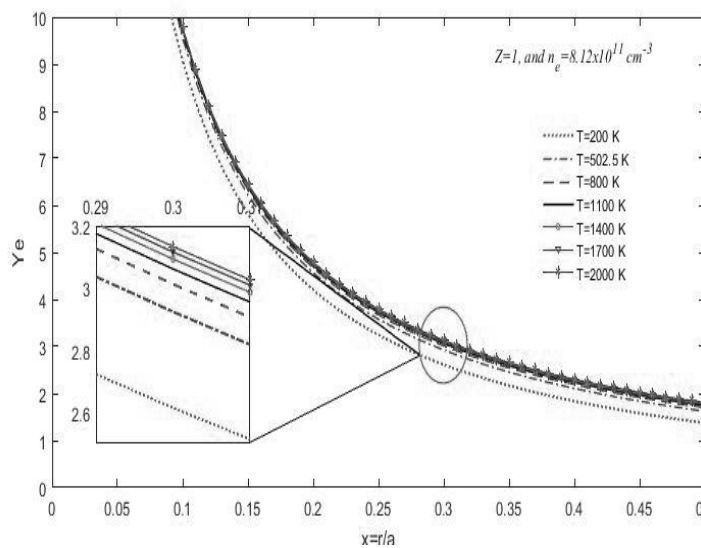


Figure (II-5) : Comparaison de l'énergie potentielle effective des électrons Y_e dans le plasma à deux composantes (TCP), pour $Z = 1$, $T = [200, 502.5, 800, 1100, 1400, 1700, 2000] \text{ K}$, et $n_e = 8,12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$.

II-4-2-2 Pour les ions Y_i :

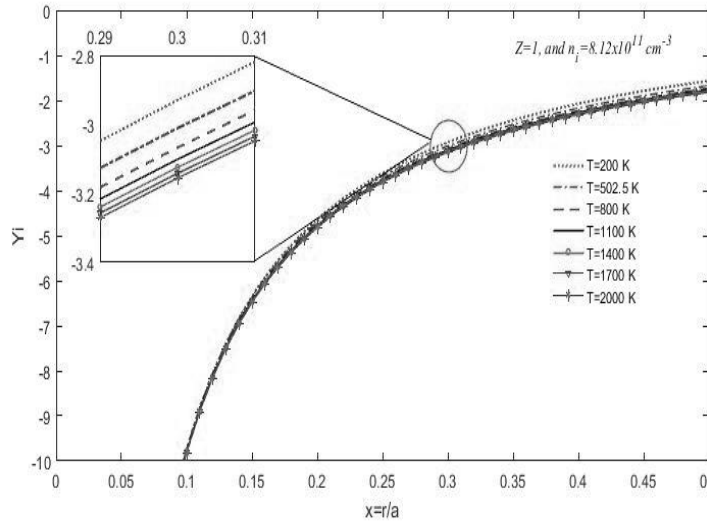


Figure (II-6) : Comparaison de l'énergie potentielle effective des ions Y_i dans le plasma à deux composantes (TCP), pour $Z = 1$, $T = [200, 502.5, 800, 1100, 1400, 1700, 2000] \text{ K}$, et $n_i = 8,12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$.

II-4-3 Comparaison entre l'énergie potentielle effective, dans le plasma (TCP) pour différentes densités :

II-4-3-1 Pour les électrons Y_e :

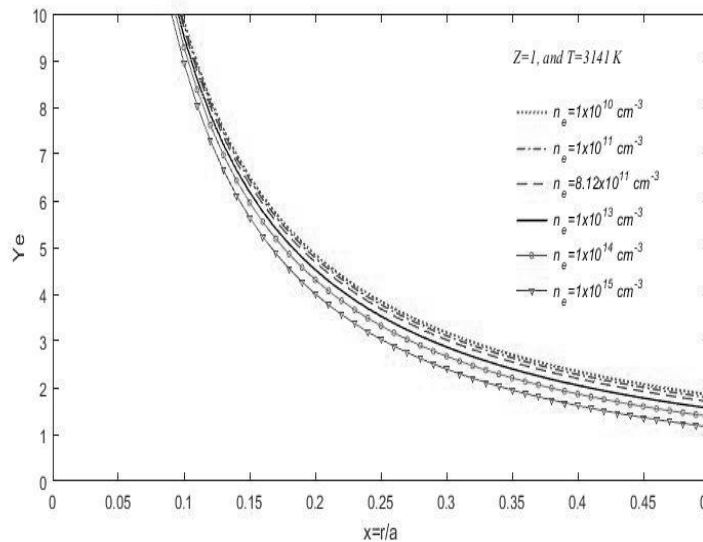


Figure (II-7) : Comparaison de l'énergie potentielle effective des électrons Y_e dans le plasma à deux composantes (TCP), pour $Z = 1$, $T = 502,5 \text{ K}$, et $n_e = [10^{10}, 10^{11}, 8.12 \times 10^{11}, 10^{13}, 10^{14}, 10^{15}] \text{ cm}^{-3}$.

II-4-3-2 Pour les ions Y_i :

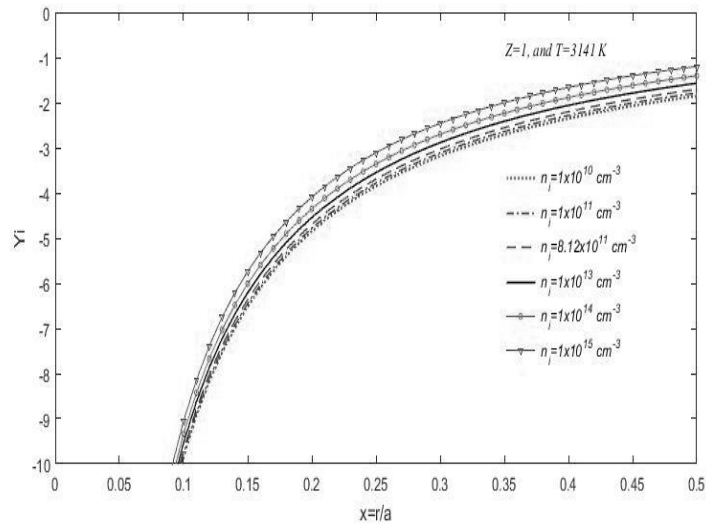


Figure (II-8) : Comparaison de l'énergie potentielle effective des ions Y_i dans le plasma à deux composantes (TCP), pour $Z = 1$, $T = 502,5 \text{ K}$, et $n_i = [10^{10}, 10^{11}, 8.12 \times 10^{11}, 10^{13}, 10^{14}, 10^{15}] \text{ cm}^{-3}$.

II-5 Discussion

Dans le cas où; la densité est constante ($n_e = 8,12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$) et la température variée :

* La différence entre les courbes du potentiel effectif des électrons figure (II- 5) est plus apparente que celles des ions figure (II-6), cette séparation des courbes est physiquement logique, et que nous mettons en mots, par la grande sensibilité par l'agitation thermique des électrons par rapport aux ions.

* Mais, en général, dans les deux cas (électron et ion), plus la température est élevée, plus les courbes présentant les potentiels effectifs s'éloignent des axes (ox,oy), en conservant sa forme générale, cela est illustré par les deux figures (II-5) et (II-6). Nous pouvons expliquer ça par l'énergie cinétique supplémentaire reçu par toutes les particules du système acquise par excitation thermique, due à la conversion de l'énergie thermique en énergie cinétique. Et puisque les électrons ont une masse plus petite que les ions, l'effet sera plus important, comme nous l'avons mentionné précédemment.

Dans le cas où ; la température est constante ($T=502.5\text{K}$) et la densité (n_e) varie:

* Plus la densité (n_e) est élevée, plus les courbes présentent le potentiel effectif des (électron-ion) figures (II-7) et (II-8) dans le modèle de plasma à deux composantes (TCP) se rapprochant des axes (ox,oy) tout en conservant la même forme générale.

* La différence entre les courbes (Y_e) et (Y_i) à chaque valeur de la densité n'est pas observée dans ce cas, cela indique que, les électrons et les ions sont affectés, presque, de la même manière lorsque leur densité change et cela étant donné à $Z = 1$, bien sûr, pour maintenir de naturalisation électrique total du plasma.

II-6 Conclusion

* Les résultats obtenus grâce au programme ont des implications logiques et pratiques, pour exprimer la variation du potentiel effectif pour chaque composant du plasma à deux composantes (TCP).

* La condition de convergence pour la méthode de point fixe et de stabilité pour Runge Kutta, nous oblige à faire quelques changements, dont le plus important est le pas, et l'intervalle de variation pour certaines variables.

* Nous avons adopté une valeur ($Z = 1$) afin d'être en mesure, de faire une comparaison significative entre les potentiels effectifs de chaque composant (électrons / ions) dans le plasma (TCP), et aussi, pour garantir l'exigence de naturalité électrique dans le système de plasma (TCP).

*Lorsque nous augmentons à la fois la température et la densité, nous remarquons que le programme nécessite un temps de traitement plus long, où il est difficile d'atteindre la convergence requise par la méthode numérique choisie.

Afin d'obtenir des solutions numériques plus efficaces, on a obligés d'apporter des changements appropriés dans le choix du pas et le domaine de convergence.

* Le dernier résultat est plus important lors du calcul de la fonction de distribution des micro champs électrique, qui représente le sujet du chapitre suivant, où nous l'aborderons plus en détail, lors de la présentation des résultats obtenus avec le même programme.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] M. Bau, J.P. Hansen, *Phys. Rep.*, 59, 3. **1980**.
- [2] H. Minoo, M. Gombert, C. Deutsch, *Phys. Rev.*, A 23, 924. **1981**.
- [3] M. Romanovsky, W. Ebeling, *Contrib. Plasma Phys*, 46, 195. **2006**.
- [4] C. F. Hooper, *Phys. Rev.* 149, 77. **1966**
- [5] M. Berkovsky, J. Dufty, A. Calisti, R. Stamm, B. Talin, *Phys. Rev. E*, 54, 4087. **1996**.
- [6] C. Deutsch, *Phys. Lett. A* 60, 317. **1977**.
- [7] C. Deutsch, M. Gombert, H. Minoo, *Phys. Lett. A*, 66, 381. **1978**.
- [8] S. Douis, M. T. Meftah, *J. Theor. Appl. Phys*, 7, 2. **2013**.
- [9] S. Douis, Thèse de Doctorat, Université de Ouargla, Algérie. **2013**.
- [10] L.M. Deleves, J. Walsh, *Numerical Solution of Integral Equations*, Clarendon Press, Oxford **1974**.
- [11] S.A.R. Al-Mezel, F.R.M. Al-Solamy, Q.H. Ansari, *Fixed Point Theory, Variational Analysis, and Optimization*, CRC Press, Boca Raton, FL, pp. **2014**.
- [12] J.D. Huffman, ed., *Numerical Methods for Engineers and Scientists*, Marcel Dekker, New York, pp. **2001**.
- [13] J. Cochoy, T. Dumont, F. Chapoton, *Méthodes numériques ROCK4 pour la résolution d'équations différentielles et étude de l'algèbre pré-Lie, Résumé TIPE, 1er février*. **2011**.
- [14] M. Baranger, B. Mozer, *Phys. Rev.* 115, 521. **1959**.
- [15] B. Mozer, M. Baranger, *Phys. Rev.* 118, 626. **1960**.
- [16] K. Benbelgacem S. Douis, M.T. Meftah N. Touahri, *Effect of electron–ion coupling on the electric microfield distribution in plasmas*, *Contrib. Plasma Phys*, 57,176–181. **2017**.

Chapitre III:

*Distribution du micro champ électrique dans
un plasma TCP*

III-1 Introduction

Pour indiquer si, la répartition des particules d'une espèce donnée dans un milieu (système) d'une valeur (propriété) a une forte probabilité ou pas. La notion de la distribution est l'outil statistique par excellence en probabilité [1], qui peut traiter ce problème. À cet effet, et d'un point de vue pratique, les calculs de la distribution de micros-champs représentent des problèmes complexes, statistiques et cinétiques, défini par les propriétés du milieu et des particules séparées, l'action des micro-champs influence à son tour sur les caractéristiques du milieu et les processus physiques entre ces particules. Par conséquent, les traitements de phénomènes physiques qui ont été impliqués d'une manière ou d'une autre et qui sont liés aux micros champ sont très divers, et qui ne sont pas limitée à ce jour [2].

Dans ce chapitre, et pour des conditions semi-classiques, en utilisant la mécanique statistique classique avec une interaction électron-ion régularisée. On va essayé de calculer premièrement, la distribution de Holtsmark dans le cas de l'OCP en suite on va calculer la distribution du Baranger-Moser [3] de micro-champs électriques et finalement on va la comparer par la simulation de la dynamique moléculaire.

III-2 Distribution du micro champ électrique

Par définition; la distribution de micro champ électrique (EMD) est donnée par la sommation de tous les champs de Coulomb (\vec{E}) créés par un très grand nombre de charges élémentaires à un point chargé ou neutre contenu dans un volume fixe [2,4]. Une telle distribution a une grande influence sur les processus élémentaires dans le plasma, comme l'ionisation, la dissociation et recombinaison, aussi sur certain nombre de ses propriétés optiques, magnétiques et électriques. En particulier, au niveau de l'atome rayonnant (radiateur) pour déterminer l'élargissement marqué des raies spectrales [4], un effet largement appliqué dans le diagnostic des plasmas, par exemple ;pour évaluer les densités du plasma dans l'atmosphère stellaire ou dans les laboratoires (Griem, 1974) [4,5].

Le problème de la détermination des distributions de micro-champs électriques (EMD) est classiquement divisé en deux parties, en raison de l'existence de deux échelles de temps différentes dans un plasma [5]. A l'échelle de temps comparable au temps de relaxation électronique, le milieu plasmatique peut être considéré comme un

gaz d'électrons immergé dans un fond d'ions neutralisant chargé positivement, et de ce fait, les forces de Coulomb agissent au point d'observation pour générer la distribution des micro-champs. Cette distribution est appelée la composante de haute fréquence des micro-champs car le temps de relaxation des électrons est considérablement inférieur à celui de l'un des ions [4,5,6].

Par contre, la composante de basse fréquence apparaissant à l'échelle du temps de relaxation des ions, elle est noter qu'elle est régie par la dynamique des ions entourées de nuages d'électrons, et par conséquent, toutes les forces de Coulomb entourées de ce point devoir être considéré. Au cours des dernières travaux, il est souligné que la composante de basse fréquence de micro-champ électrique n'influence sur les taux de fusion [7,8].

III-2-1 Distribution de Holtsmark

En 1919, J. Holtsmark à étudier l'EMD dans un plasma [9]. Il a considéré pour la première fois, un modèle à une composante où les corrélations entre les particules sont négligées [10]. La distribution de Holtsmark est donne par une relation de la forme suivante :

$$p(\beta)_H = \frac{2\beta}{\pi} \int_0^{\infty} x \sin(\beta x) \exp(-x^{3/2}) dx \quad (\text{III-1})$$

Cette équation, présenter la probabilité de trouver une valeur E du micro champ électrique à un endroit bien déterminé dans un plasma idéal [2,11]. Nous allons essayer d'avoir plus en détail dans les prochains paragraphes.

Les caractéristiques principales de la distribution du Holtsmark sont remarquées par la longue queue avec la chute de l'asymptote proportionnelle à $E^{-5/2}$ figure (III-1) [2,4,12], de plus, l'absence du deuxième moment, qui accorde l'importance particulière au rôle des événements extrêmes entre les particules de plasma.

Depuis ce travail de Holtsmark, qui a étudié le modèle (OCP) ou les corrélations entre les particules sont complètement négligées, des grandes efforts ont été concentrés sur la théorie de la distribution des micros champs pour incluant les événements collectifs dans le plasma [2,13].

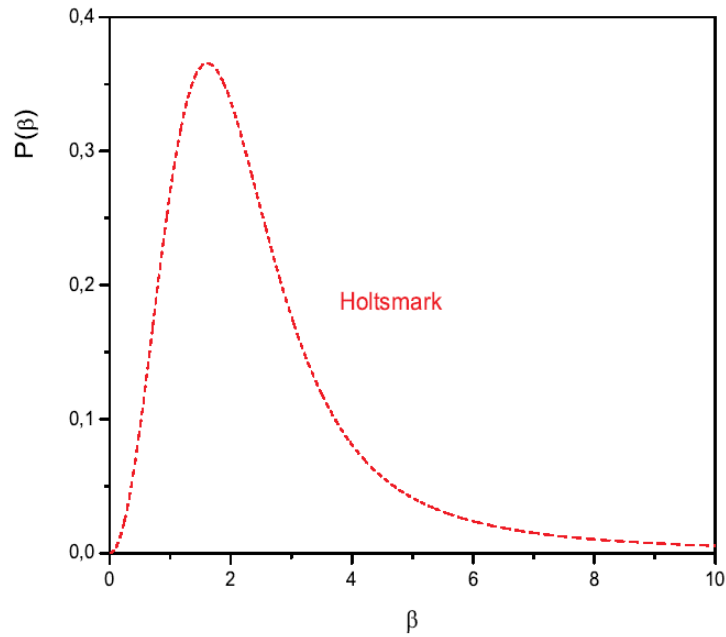


Figure (III-1) : *La distribution de micro-champ électrique de Holtzmark pour un plasma de type hydrogène $Z=1$*

En 1943, S. Chandrasekhar et Von Neumann ont considéré la probabilité d'une force stationnaire dans un système gravitationnel homogène infini, qui est également décrit par la distribution de Holtzmark. En 1943, S. Chandrasekhar a également montré analytiquement que cette distribution a un comportement asymptotique pour E similaire à celui du champ de la plus proche voisine galaxie, qui souligne que la structure non aléatoire possible du système influencerait fortement de l'EMD [12,13].

III-2-1-1 Cas d'un modèle de plasma OCP

Pour un modèle de plasma (OCP) composé de N_i ions, J. Holtzmark a considéré que les corrélations entre les particules sont complètement négligées. Alors, il a proposé, par définition, que $Q(\vec{\varepsilon})$ comme une densité de la probabilité de trouver un champ électrique ($\vec{\varepsilon}$) à un point neutre, situé à \vec{r}_0 , à l'origine. Ce système est décrit par la mécanique statistique classique dans un ensemble canonique de N_i particules et de température T . Notez ici, que si la charge du radiateur n'est pas égale à 0, alors il convient de le prendre en compte, et puisque nous mettons le radiateur (l'émetteur) à l'origine, alors il n'y aura aucune dépendance sur \vec{r}_0 [2,4,14].

Donc la densité de probabilité normalisée du micro champ $\vec{\varepsilon}$ dans la limite thermodynamique donnée par :

$$Q(\vec{\varepsilon}) = \langle \delta(\vec{\varepsilon}) - E \rangle \quad (\text{III-2})$$

$$\text{Et : } \vec{E} = \sum_i \vec{E}_i = \sum_i \frac{e\vec{r}_i}{r^3}, \text{ où } \vec{r}_i : \text{vecteur position.}$$

Soit, χ la fonction de partition canonique de l'énergie potentielle de l'interaction $V_N(r_i)$ entre les particules, donc :

$$\chi = \int_{\Omega} \exp(-\beta V_N(r_i)) dr_i \quad (\text{III-3})$$

Comme il a été mentionné ci-dessus, Holtsmark a considéré aucune interaction entre les particules et puisque l'émetteur est un point neutre, le terme d'interaction en équation (III-3) peut être représenté comme :

$$V_N(r_i) = V_{ii}(r_i) + V_{iR}(R, r_i) = 0 \quad (\text{III-4})$$

ou :

$$V_{ii}(r_i) = \frac{1}{2} \sum_{j \neq k=1}^{N_i} \Phi_V^i(|\vec{r}_j^i - \vec{r}_k^i|) = 0 \quad (\text{III-5})$$

$$V_{iR}(R, r_i) = \sum_{j=1}^{N_i} \Phi_V^{iR}(|\vec{R} - \vec{r}_j^i|) = 0$$

sont les interactions ion-ion et ion-émetteur successivement.

Alors on peut écrire l'équation (III-2) sous la forme d'intégrale comme suit:

$$Q(\varepsilon) = \frac{1}{Z} \int_{\Omega} \exp(-\beta V_N(r_i)) \delta(\vec{\varepsilon} - \vec{E}) dr_i \quad (\text{III-6})$$

D'où Ω est le volume occupé par ces particules. Et d'après la définition de la transformée de Fourier de la fonction de distribution de Delta Kronecker [15].

$$\delta(\vec{x} - \vec{x}_0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(i\vec{k}(\vec{x} - \vec{x}_0)) dk \quad (\text{III-7})$$

En introduisant cette expression dans l'équation (III-6), on a donc :

$$Q(\varepsilon) = \frac{1}{Z} \int_{\Omega} \exp(-\beta V_N(r_i)) \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(i\vec{k}(\vec{\varepsilon} - \vec{E})) dk dr_i \quad (\text{III-8})$$

$$Q(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{Z} \int_{\Omega} \exp(-\beta V_N(r_i)) \int \exp(i\vec{k}\vec{\varepsilon}) \exp(-i\vec{k}\vec{E}) dk dr_i \quad (\text{III-9})$$

Soit : $T(k) = \int Q(\varepsilon) \exp(-i\vec{k}\vec{\varepsilon}) d\varepsilon$ est la transforme de Fourier de $Q(\varepsilon)$

on peut écrire l'équation (III-9) comme suit :

$$Q(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int T(k) \exp(i\vec{k}\vec{\varepsilon}) dk \quad (\text{III-10})$$

Si on considère l'isotropie du système et, on fait l'usage de la symétrie en coordonnées sphériques de la transforme de Fourier de $Q(\varepsilon)$ on trouve :

$$Q(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{\varepsilon} \int_0^{\infty} k T(k) \sin(\vec{k}\vec{\varepsilon}) dk \quad (\text{III-11})$$

$$Q(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{\varepsilon} \int_0^{\infty} k T(k) \sin(\vec{k}\vec{\varepsilon}) dk \quad (\text{III-12})$$

Soit aussi : $P(\varepsilon)$ est la probabilité de trouver le champ électrique $d\varepsilon$ à l'origine, donc :

$$P(\varepsilon) d\varepsilon \equiv 4\pi Q(\varepsilon) \varepsilon^2 d\varepsilon \quad (\text{III-13})$$

Alors ;

$$P(\varepsilon) \equiv 4\pi \left[\frac{1}{2\pi^2 \varepsilon} \int_0^{\infty} k T(k) \sin(\vec{k}\vec{\varepsilon}) dk \right] \varepsilon^2 \quad (\text{III-14})$$

$$P(\varepsilon) = \frac{2\varepsilon}{\pi} \int_0^{\infty} k T(k) \sin(\vec{k}\vec{\varepsilon}) dk \quad (\text{III-15})$$

III-2-2 Distribution de Baranger et Moser

Après le travail de Holtsmark, une avancée remarquable a été faite par M. Baranger et B. Moser, qu'ils ont décrit la distribution de la composante de haute et de basse fréquence dans la distribution de micro champ, par une expansion qui respecte les fonctions de corrélation. Cependant, il a été soutenu qu'une telle approche n'est valable que pour les plasmas à basse densité et à haute température [2,15,16].

III-2-2-1 Cas d'un modèle de plasma OCP

Comme il existe deux échelles de temps différentes dans le plasma TCP, la détermination des distributions de micro-champs électriques est divisée en deux parties. Les premières, appelées composantes haute fréquence du micro-champ, apparaissent lorsque les échelles de temps sont comparables au temps de relaxation des électrons, où le milieu plasmatique peut être considéré comme un gaz d'électrons immergé dans un fond de neutralisation uniforme des charges électriques positives des ions [2,15].

Les secondes, concernant les composantes basses fréquences du micro-champ, apparaissant à l'échelle du temps de relaxation des ions, est ensuite introduite en notant qu'elle est régie par la dynamique des ions [15].

Dans cette section, nous avons déterminé la distribution micro-champ électrique en utilisant l'approximation de Baranger et Moser où l'énergie potentielle effective est déterminée par la résolution numérique du système d'équations (II-4) de chapitre II, par la méthode de point fixe [4,17].

La probabilité de mesurer un micro-champ électrique ε à l'impureté est donnée dans l'approximation de Baranger-Moser comme suit (voir l'appendice C):

$$P(\varepsilon) = \frac{2\varepsilon}{\pi} \int_0^{\infty} T(\lambda) \sin(\varepsilon\lambda) \lambda d\lambda \quad (\text{III-16})$$

où:

$$T(\lambda) = e^{G(\lambda)} \quad (\text{III-17})$$

et,

$$G(\lambda) = 4\pi \int_0^{\infty} r^2 e^{-\beta V(r)} \left[\frac{1}{\lambda \varepsilon(r)} \sin(\lambda \varepsilon(r)) - 1 \right] dr \quad (\text{III-18})$$

Après l'adimensionnement de (III-16) et (III-18) nous trouvons:

$$\bar{P}(\bar{\varepsilon}) = \varepsilon_0 P(\varepsilon) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \lambda \bar{\varepsilon} \sin(\lambda \bar{\varepsilon}) e^{G(\lambda/\varepsilon_0)} d\lambda \quad (\text{III-19})$$

et,

$$\bar{G}(\lambda) = G(\lambda/\varepsilon_0) = 3 \int_0^{\infty} x^2 e^{Z_{\Gamma Y}(x)} \left[\frac{1}{\lambda Y'_{me}(x)} \sin(\lambda Y'_{me}(x)) - 1 \right] dx \quad (\text{III-20})$$

où:
$$Y'_{me} = \frac{\partial Y_{me}}{\partial x}, \text{ et } x = \frac{r}{a}$$

III-2-3 Distribution de Plus Proche Voisin (PPV)

La méthode de plus proche voisin (PPV), est une simplification de celle de Holtsmark, dont, en ne prenant en compte que l'ion le plus proche pour le calcul du microchamp par l'aide d'un potentiel coulombien non écrané, et les positions des ions sont évaluées d'une manière statistique [18]:

$$P_{PPV}(\beta) = \frac{3}{2} \beta^{-5/2} e^{-\beta^{-3/2}} \quad (\text{III-21})$$

où : La valeur du champ la plus probable est : $\beta = \left(\frac{3}{5}\right)^{2/3} = 0.71$, soit ; $\varepsilon = 1.85 \bar{Z}^{-1/3} N_e^{2/3}$

et sa valeur à mi-hauteur $\varepsilon = 3.78 \bar{Z}^{-1/3} N_e^{2/3}$ ($\beta = 1.456$).

Approximativement, deux fois celle du champ le plus probable.

Cette distribution, comme celle de Holtsmark, est appropriée à des plasmas peu corrélés. Elle élimine la participation des ions plus éloignés au microchamp et le sous-évalue, lorsque la densité est faible [18,19].

III-2-4 Distribution de Mayer

En incluant un facteur de Boltzmann dans la distribution de Holtsmark, et qui prend en compte les interactions ion-ion, on trouve le modèle de la distribution de Mayer, qui est donné par [18]:

$$P_M(\beta) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \beta^2 \Gamma_{ii}^{3/2} e^{-\beta^2 \Gamma_{ii}/2} \quad (\text{III-21})$$

Alors, le champ le plus probable vaut $\beta = \sqrt{\frac{2}{\Gamma_{ii}}}$ soit $\varepsilon = 2.89 \left(\frac{T_i N_e}{Z}\right)^{1/2}$ et sa

valeur à mi-hauteur est : $\varepsilon = 4.74 \left(\frac{T_i N_e}{Z}\right)^{1/2} \left(\beta = 1.64 \sqrt{\frac{2}{\Gamma_{ii}}}\right)$.

La distribution de Mayer est une approximation bien adaptée aux plasmas denses et froids, très fortement corrélés, en général pour des matériaux de Z élevé, où l'écrantage électronique est devenu négligeable [18,19].

III-3 Résultats et Discussion

L'application de potentiels effectifs que nous avons calculés dans le deuxième chapitre en prenant en compte le rapprochement de Baranger et Mozer [20], donne également des distributions de micro-champs compatibles avec la simulation de la dynamique moléculaire.

Pour des valeurs différentes de nombre Z , température T , et de la densité n_e ; on trouve dans les figures (III-2), (III-3) et (III-4), les résultats de la distribution de micro-champ $P(\varepsilon)$ d'un plasma a deux composants TCP, pour l'approximation de Baranger – Mozer lignes continues, et des cercles pour la simulations de la dynamique moléculaire..

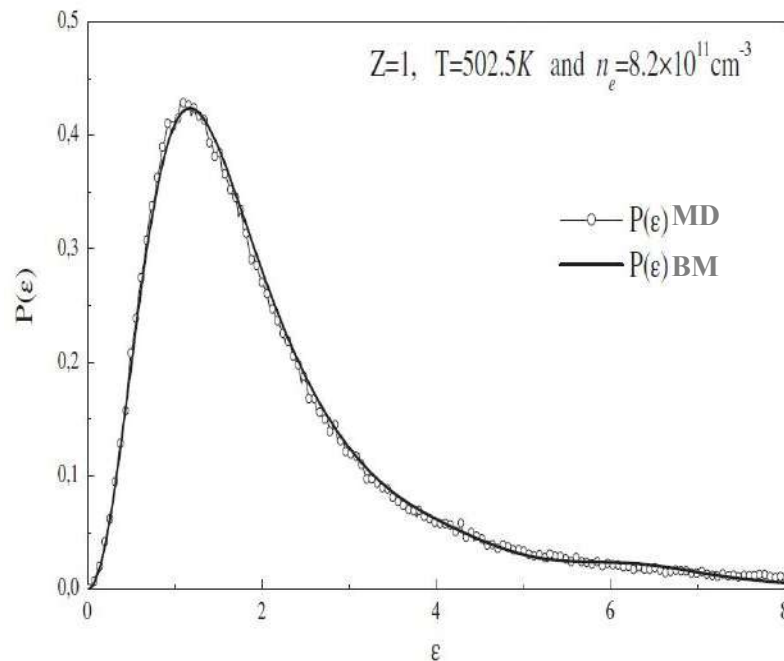


Figure (III-2) : Distribution de micro-champ $P(\varepsilon)$ des électrons d'un plasma à deux composants, pour $Z = 1$, $T = 502,5 \text{ K}$ et $n_e = 8,12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$: (cercle) simulation par dynamique moléculaire et (ligne continue), approximation de Baranger – Mozer.

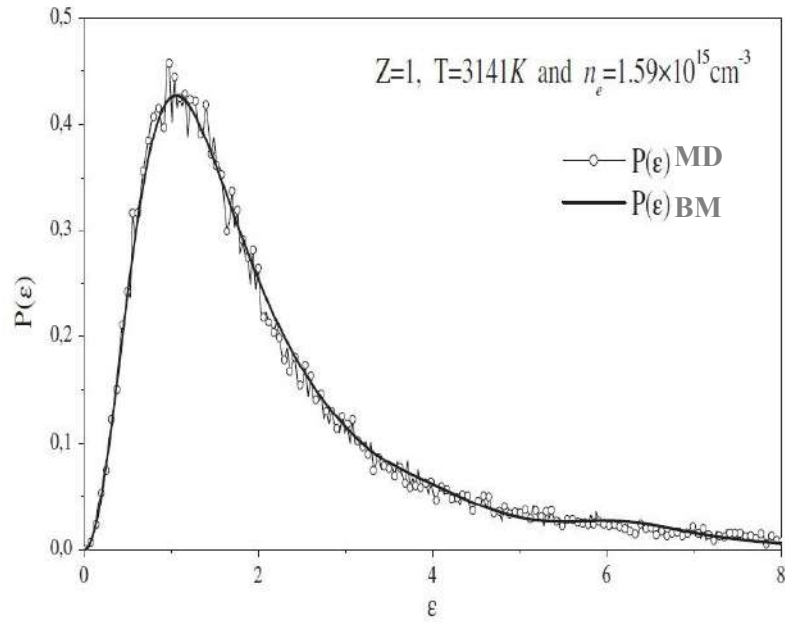


Figure (III-3) : Distribution de micro-champ $P(\epsilon)$ des électrons d'un plasma à deux composantes, pour $Z=1$, $T = 3141K$ et $n_e = 1,59 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$: (cercle) simulation par dynamique moléculaire et (ligne continue), approximation de Baranger – Mozer.

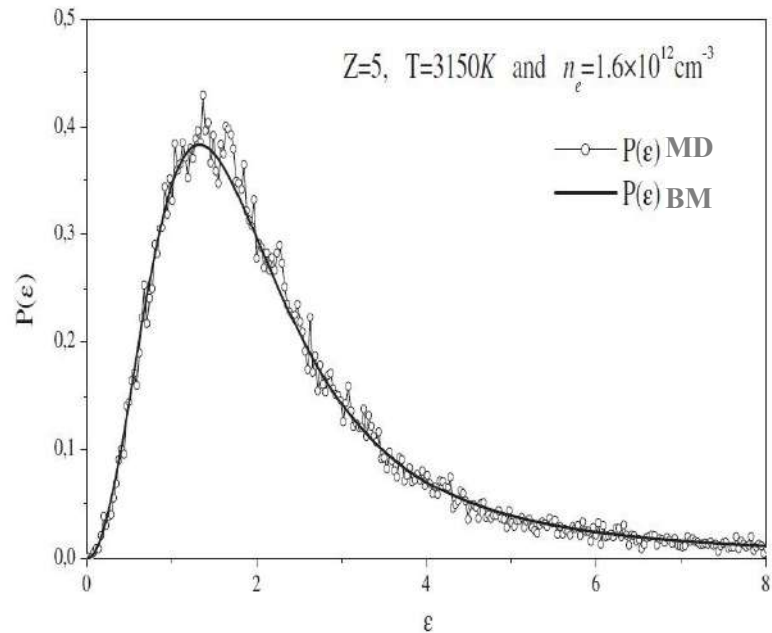


Figure (III-4) : Distribution de micro-champ $P(\epsilon)$ des électrons d'un plasma à deux composantes, pour $Z = 5$, $T = 3150K$ et $n_e = 1,6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$: (cercle) simulation par dynamique moléculaire et (ligne continue), approximation de Baranger – Mozer.

Pour des valeurs différentes de la température T , et de la densité n_e , et même nombre $Z=1$; on trouve les résultats de l'approximation de Baranger – Mozer pour la distribution de micro-champ $P(\varepsilon)$ dans un plasma à deux composants TCP. La figure (III-5) pour différentes températures T , et la figure (III-6) pour différentes densités n_e .

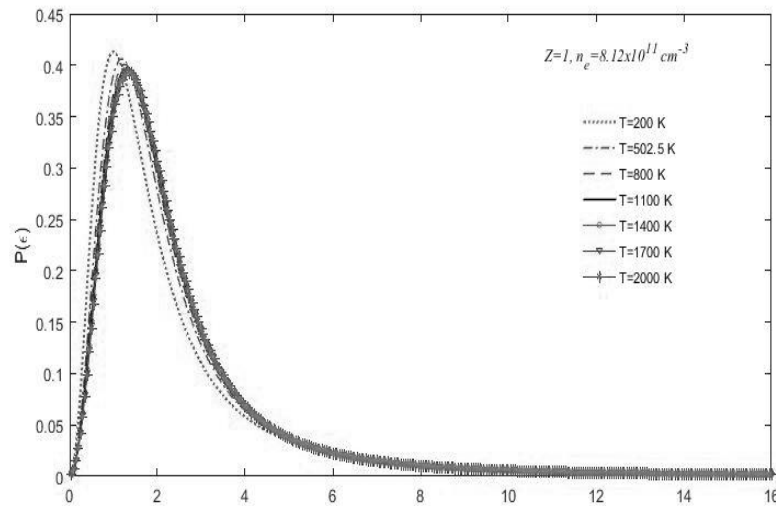


Figure (III-5) : Distribution BM de micro-champ $P(\varepsilon)$ des électrons dans le plasma à deux composants (TCP), pour $Z = 1$, $T = [200, 502.5, 800, 1100, 1400, 1700, 2000]$ K, et $n_e = 8,12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$.

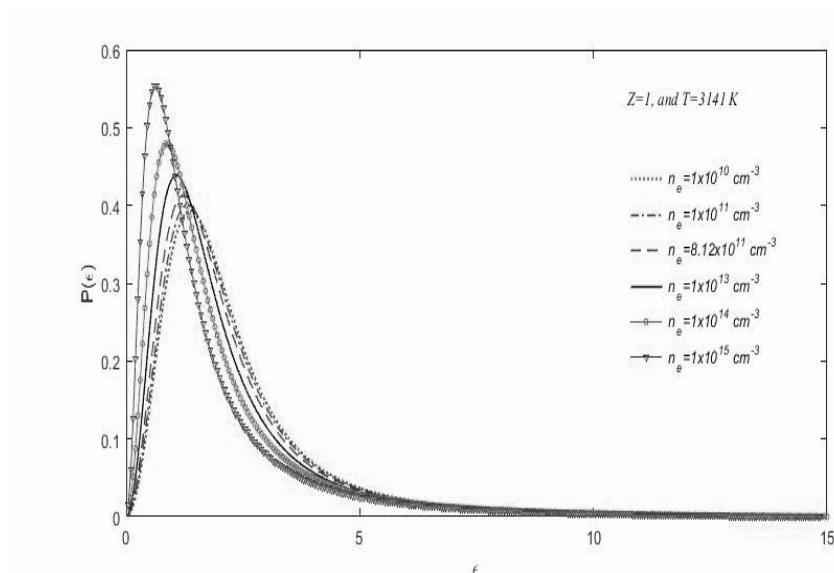


Figure (III-6) : Distribution BM de micro-champ $P(\varepsilon)$ des électrons dans le plasma à deux composants (TCP), pour $Z = 1$, $T = 502,5 \text{ K}$, et $n_e = [10^{10}, 10^{11}, 8.12 \times 10^{11}, 10^{13}, 10^{14}, 10^{15}] \text{ cm}^{-3}$.

Les résultats illustrés par la figure (III-5) montre que ; dans le cas d'une densité constante ($n_e=8,12 \times 10^{11} \text{cm}^{-3}$) ; plus la température est élevée plus la largeur de demi hauteur est légèrement augmentée, avec une diminution du sommet de la courbe. Nous expliquons cela que, l'action de la chaleur est de créer des nouveaux états énergétiques supplémentaires dans le système plasmatique. Sachant que, dans ce cas le nombre total des particules de système reste constant. Alors, la probabilité de trouver certain nombre des particules occupent un même état énergétique moyenne qui présente la distribution des micros champ électrique va diminuer.

Par contre, le résultat de figure (III-6), montre que, pour une température constante ($T=502,5\text{K}$); plus la densité augmentée plus le sommet de la courbe associée augmentée proportionnellement, avec une diminution de la largeur mi-hauteur. Dans ce cas ($T=\text{constante}$, n_e varié), un nombre supplémentaire des particules interagies entre eux va augmenter proportionnellement avec la densité, alors, l'état énergétique moyenne occupant par le grand nombre des particules diminuer progressivement, mais avec une valeur de probabilité plus grande d'occuper ce bas état d'énergie moyenne.

En d'autre terme ; l'énergie cinétique moyenne répartie sur le nombre de particules diminue progressivement, mais avec une plus grande valeur de probabilité qu'un plus grand nombre de particules va occuper cette faible valeur moyenne d'énergie.

III-4 Conclusion

Dans tous les résultats, l'approche des potentiels effectifs que nous avons calculés est valable pour calculer la distribution des micro-champs électriques dans le cas de plasma TCP.

La classification de plasma en types (chapitre I), par sa densité et sa température est bien confirmée dans les résultats, où on a observé des différences significatives entre toutes les courbes présentant la distribution des micro-champs électriques dans chaque cas étudié.

Malgré que le temps d'exécution est important pour notre programme, dans certains cas (une grande valeur de T et n_e), nous avons remarqué des résultats importants décrivant le phénomène étudié, notons ici, qu'il faut vérifier à chaque fois le pas et le domaine d'intégration pour assurer la convergence requise dans la méthode numérique.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] C. F. HOMER, JR. *Electric Microfield Distributions in Plasmas*. Florida. Phy Review. vol.149,n 1. **1966**.
- [2] M. S. P. Sadykova .*Electric Microfield Distributions and Structure Factors in Dense Plasmas*. doctor rerum naturalium .Universität zu Berlin. 30.03. **2011**.
- [3] M. Baranger. B. Mozert. *Electric Field Distributions in an Ionized Gas*. Pennsylvania. Phy Review. vol.115,n 3. **1959**.
- [4] S. Douis, Thèse de Doctorat, Université de Ouargla, Algérie. **2013**.
- [5] A. Naam, Thèse de Doctorat, Université de Ouargla, Algérie. **2015**.
- [6] I. Chihi, Thèse de Doctorat d'état, Université de Constantine, Algérie. **2005**.
- [7] M. Romanovsky, W. Ebeling, *Contrib. Plasma Phys.* 46, 195. **2006**.
- [8] J.Ortner,I.Value. W.Ebeling . *Electric micro field distribution in two-component plasmas. Theory and Simulations* . Plasma Phys. Moscow Institute of Physics and Technology,141700 Dolgoprudny, Russia. and, 110, D-10115 Berlin, Germany
- [9] M. Berkovsky, J. Dufty, A. Calisti, R. Stamm, B. Talin, *Phys. Rev. E*, 54, 4087. **1996**.
- [10] M. Bau, J.P. Hansen, *Phys. Rep*, 59, 3. **1980**.
- [11] M. Berkovsky, J. Dufty, A. Calisti, R. Stamm, B. Talin, *Phys. Rev. E*, 54, 4087. **1996**.
- [12] C. F. HOMER, JR. *Electric Microfield Distributions in Plasmas*. Florida. Phy Review. vol.149,n 1. **1966**.
- [13] C. A. Iglesias. *Electric micro field distributions in strongly coupled plasmas*. Phy Review. vol.28,n 3. New Jersey 08903. **1983**.
- [14] A. V. Demura. *Physical Models of Plasma Micro field*. H. International Journal of Spectroscopy, Article ID 671073, 42 p doi:10.1155/2010/671073, Vol **2010**.
- [15] C. A. Iglesias and C. F. Hooper, Jr, *Cluster expansion for the electric microfield distribution in a plasma*. Phy Review. vol.25,n 2. Florida 32611. **1982**.
- [16] Richard J. Tighe and C. F. Hooper, Jr. *Low-frequency electric microfield distributions in a plasma containing multiply-charged ions*. Phy Review. vol.15,n 4. Florida 32611. **1977**.
- [17] J.D. Huffman, ed., *Numerical Methods for Engineers and Scientists*, Marcel Dekker, New York, pp. **2001**.
- [18] J.D. Huffman, ed., *Numerical Methods for Engineers and Scientists*, Marcel Dekker, New York, pp. **2001**.
- [19] C. A. Iglesias. *Integral-equation method for electric micro field distributions*. Phy Review. vol.27,n 5. Florida 32611. **1983**.
- [20] S. Douis, M. T. Meftah, J. Theor. *Appl. Phys.* 7, 2. **2013**.

Chapitre IV:

*Étude comparative entre différents modèles de
l'opérateur de collision électronique
dans un plasma.*

IV-1 Introduction

L'importance du calcul de l'opérateur de collision dans l'étude de plasma joue un rôle indéniablement lourd, notamment dans l'étude des profils de raies spectrales.

Bien que, la recherche d'une représentation plus fiable de l'opérateur de collision électronique dans le plasma soit nécessaire et sûre, la maîtrise de chaque étape des différents calculs de l'opérateur de collision est également nécessaire et sûre aussi. À ce stade, le quatrième chapitre de notre travail sera présenté.

Donc, dans ce chapitre, et après une brève présentation des paramètres importants dans l'étude des collisions dans le plasma, on va faire un rappel, premièrement, de l'opérateur de collision par les trois modèles très connus par ; la démarche de Nguyen; de Griem ; et Spiros, pour certaines cas. Deuxièmement, on va essayer de calculé numériquement utilisant la méthode de Verlet [1] la fonction d'auto-corrélation du champ électrique, pour faire une étude comparative entre ces différents modèles de l'opérateur de collision électronique dans un plasma.

Finalement, et comme il est connu que chacun des trois procédés précédents est appliqué selon des considérations particulières du système étudié, de sorte que le procédé Nguyen est effectuée dans le cas de ne pas considérer la structure fine dans le système, et pour la méthode Griem est effectuée dans le cas de l'atome neutre, et dans le cas d'ions, nous adoptons la méthode Spiros, afin d'atteindre la description plus précise du système étudié. Cependant, et à partir des résultats des deux chapitres précédents (chapitre II et chapitre III) où nous avons constaté que, à travers les variations de la température et de la densité dans le plasma, nous avons observé des écarts importants dans les calculs de potentielle effectives et du micro électrique distribution de champ, on peut donc s'attendre à des changements significatifs dans le calcul de l'opérateur de collision électronique dans les trois cas, sur cette base nous essaierons de faire une comparaison entre les trois méthodes afin d'atteindre des résultats discutables.

IV-2 Les collisions dans les plasmas

On dit qu'il y a une collision, lorsque deux ou plusieurs particules se rapprochent à des distances assez faibles pour que les énergies d'interaction deviennent comparables aux énergies cinétiques [2], et à cause de l'agitation thermique dans le plasma, des multiples collisions se produisent dans ce milieu plasmatique, qui

permettent des échanges d'énergie et des transferts de quantité de mouvement entre les particules. L'importance capitale ici; est d'assurer un état d'équilibre au plasma [3].

Les collisions au sein du plasma peuvent provoquer des échanges entre les degrés de liberté internes et externes de chaque particule. Subséquemment les particules entrées en collision auront des trajectoires courbes, elles resteront à courte distance les unes des autres. Aussi elles reprendront après la collision des trajectoires quasi rectilignes [3].

Si nous admettons que les collisions à deux corps dominant et que la durée d'une collision est assez petite devant l'intervalle de temps entre deux collisions successives, on peut alors, classer les collisions en deux types:

Premièrement, des collisions élastiques; dans lesquelles les deux particules ne changent pas les états d'énergie interne [2,3].

$$P(i)+Q(i) \rightarrow P(i)+Q(i) + \Delta E_{ij,ij}, \Delta E_{ij,ij} = 0 \quad (\text{IV-1})$$

Deuxièmes, on a des collisions dites inélastiques entre deux particules $P(i), Q(i)$, si les états d'énergie interne de ces particules sont modifiés après cette collision (excitation, désexcitation) [2,3].

$$P(i)+Q(i) \rightarrow P(i)+Q(i) + \Delta E_{ij,kl}, \Delta E_{ij,kl} \neq 0 \quad (\text{IV-2})$$

Ces collisions inélastiques s'accompagnent éventuellement de création ou de destruction de particules (ionisation, recombinaison, excitation, dissociation . . .) [3].

Dans notre étude, nous nous intéressons seulement qu'aux collisions élastiques.

IV-2-1 Paramètre d'impact

Supposons deux particules $P(i)$ et $Q(i)$ soumis à une force centrale, donc le mouvement relatif est plan, et le vecteur du moment cinétique du système \vec{M} est constant :

$$\vec{r} \times \vec{p} = \vec{M} \quad (\text{IV-3})$$

Où, $\vec{p} = \mu\vec{v}$ l'impulsion, et les vecteurs \vec{r} et \vec{p} sont toujours coplanaires [4]. Ainsi, les trajectoires des particules $P(i)$ et $Q(i)$ sont dans un plan perpendiculaire à \vec{M} . Ce plan se déplace dans la direction du vecteur \vec{M} .

La collision peut être décrite dans ce plan en choisissant comme référentiel celui du centre de masse G , (figure IV-1) [3].

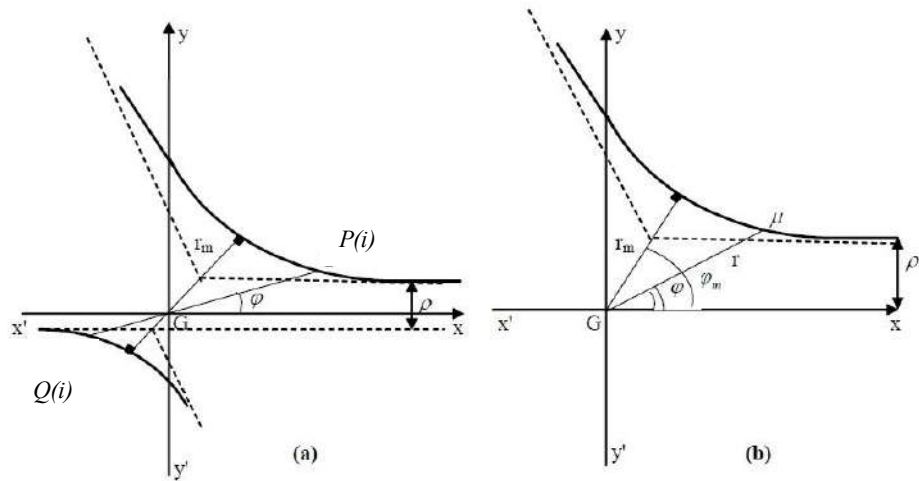


Figure (IV-1): Trajectoires dans le système du centre de gravité. (a) Trajectoires des deux particules. (b) Trajectoire du mobile fictif représentant le mouvement relatif. ρ paramètre d'impact,, G centre de gravité.

Lorsque les particules sont à une distance infinie l'une de l'autre, leurs trajectoires sont rectilignes et parallèles à l'axe xx_0 , dont ρ leur écart suivant yy_0 .

Le distance ρ de plus courte approche des deux particules, est ce qu'on appelle le paramètre d'impact de la collision.

IV-2-2 Section efficace

Considérons les deux jets monocinétiques de particules $P(i)$ et $Q(i)$ se croisant dans l'espace, où i et j sans leurs états internes d'énergie, soit n_1 et n_2 leurs densités, et \vec{v}_1, \vec{v}_2 leurs vitesses. Les deux faisceaux définissent dans l'espace une zone de collision de volume dV . On note que d^3N le nombre de particules détectées est proportionnel à

chacune des variables suivantes: dV , n_1 , n_2 , et dt la durée de l'interaction, aussi la vitesse relative $g = |\vec{v}_1 - \vec{v}_2|$, et l'angle solide d'observation $d\Omega$ qui s'écrit [2,3].

$$d\Omega = \frac{dS_D}{r_D^2} = \sin\theta d\theta d\varphi \quad (\text{IV-4})$$

Où : dS_D la surface d'entrée du détecteur; r_D la distance de la région dV ; θ et φ les angles de détection.

L'introduction d'un facteur de proportionnalité est appelé section efficace différentielle notée $\sigma(g, \theta, \varphi)$ comme suit [2,.3]:

$$\sigma(g, \theta, \varphi) = \frac{d^3N}{n_1 n_2 g dt dV d\Omega} \quad (\text{IV-5})$$

Si on utilise le théorème du mouvement relatif, le système des deux jets monocinétiques croisés par un faisceau de particules $P(i)$, de surface S_1 , densité n_1 , vitesse g , traversant un gaz de particules $Q(i)$ immobiles. L'expression (IV-5) s'écrit :

$$\sigma(g, \theta, \varphi) = \frac{d^3N}{dN_1 dN_2 d\Omega} S_1 \quad (\text{IV-6})$$

avec : $dN_1 dN_2$ représente les particules que se trouvent dans le volume dV pendant dt , Alors, les particules détectées suivant l'angle φ sont celles traversant la couronne de surface $dS = 2\pi\rho d\rho$ où ρ représente le paramètre d'impact [3].

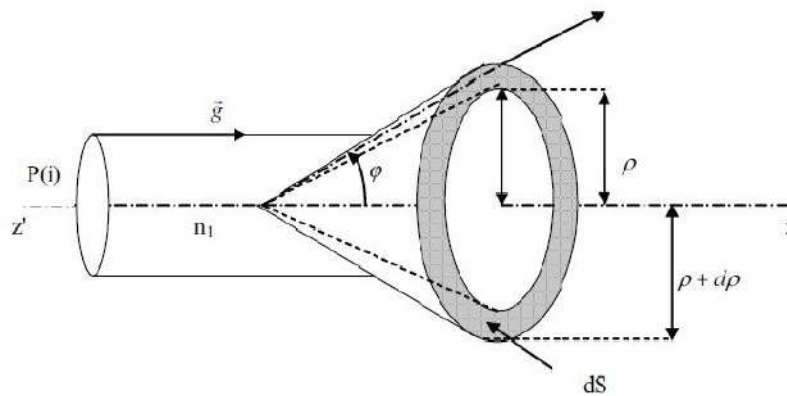


Figure (IV-2): La collision dans le cas où les particules détectées suivant l'angle φ .

Par une représentation de la probabilité de transition entre les états internes i, j et k, l , pour les collisions élastiques on peut écrire une nouvelle approche de la section efficace différentielle:

$$\sigma(g, \theta) = \frac{P_{ij,kl}(g, \rho) \rho d\rho}{\sin \varphi d\varphi} \quad (\text{IV-7})$$

avec: $P_{ij,kl}(g, \rho) = 1$, la probabilité de transition entre les états internes i, j et k, l .

IV-2-3 Fréquence de collision

La fréquence de collision est l'inverse du temps entre deux collisions successives d'une particule H_1 avec d'autres particules H_2 , soit [3,4]:

$$v_{H_1 H_2} = n_{H_2} \bar{g} \sigma_0 \quad (\text{IV-8})$$

avec:

\bar{g} est la vitesse moyenne relative de H_1 , par rapport à H_2 ;

σ_0 la section efficace de collision de H_1 avec H_2 ;

n_{H_2} est la densité des particules H_2 .

Remarque :

La fréquence de collision d'un électron avec une particule neutre est beaucoup plus importante que celle avec un ion [2].

IV-3 L'opérateur de collision dans le plasma

Dans la théorie cinétique, la détermination des diverses fonctions de distribution des vitesses d'un type de particules dans le plasma est un but primordial, lorsque, les forces extérieures sont connues. Ces fonctions de distribution des vitesses f est la solution de l'équation de Boltzmann soit [5]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + w \cdot \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{X}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial w} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{interactions} \quad (\text{IV-9})$$

avec : X , représente les forces extérieures ; $f = f(\omega, r, t)$.

et $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{interactions}$ les divers d'interactions de la particule étudiée avec les autres composantes représenté par une somme des termes agissant sur f .

La résolution de l'équation intégral-différentielle non linéaire de Boltzmann nécessite, d'une part, la connaissance de tous les termes contenus dans $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{interactions}$, et d'autre part, l'utilisation de méthodes mathématiques adaptées au cas envisagé.

Le problème de trouver l'opérateur de collision élastique, et la recherche des fonctions propres et des valeurs propres de l'opérateur de collision sous sa forme la plus générale a déjà fait l'objet d'un grand nombre de travaux.

IV-4 Modèles et démarches du calcul de l'opérateur de collision électronique

Depuis les travaux de Baranger en 1958 [6], qui a développé un formalisme quantique dans le cas des collisions inélastiques, et qui a montré qu'on peut représenter la largeur et le déplacement, entre les niveaux d'énergies α et β des particules collisionnées à partir des éléments diagonaux $S_{\alpha\alpha}$ et $S_{\beta\beta}$ de la matrice de diffusion émetteur-perturbateurs, dans les études des profils des raies. Une grande partie du travail théorique suivant a été basé sur ses articles, et qui sont inspirés de la théorie d'impact d'Anderson [7] en 1949, pour ces types des effets qui se produisant réellement dans les plasmas, en adoptant, l'approximation semi-classique pour calculer l'opérateur de collisions électroniques [7,8].

On va essayer dans les paragraphes suivants de présenter quelques démarches pour les calculs de l'opérateur de collision.

IV-4-1 L'opérateur de collision par la démarche de Nguyen

Dans ce cadre, nous allons présenter, dans la suite, un exemple de calcul des éléments de l'opérateur de collision par la démarche de Nguyen [9]. Ce travail a été fait pour calculer les profils des raies de l'hydrogène, en tenant compte des collisions

électroniques du champ électronique \vec{F} intermoléculaire et d'un champ magnétique extérieur uniforme $\vec{\mathcal{H}}$.

Alors, en tenant compte des collisions électroniques, du champ électrique intermoléculaire et d'un champ magnétique uniforme extérieur, mentionnés précédemment. Nguyen a considéré des densités électroniques comprises entre 10^{15} cm^{-3} et 10^{18} cm^{-3} et des champs magnétiques inférieurs ou égaux à $1,2 \cdot 10^3 \text{ G}$ [9]. Ces valeurs couvrent pratiquement tout le domaine expérimentalement réalisable en ce moment là.

D'abord, la recherche des valeurs de la matrice de l'opérateur de collision commence par, la résolution de l'équation de Schrödinger donnée par.

$$H(\vec{F}, \vec{\mathcal{H}})|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (\text{IV-10})$$

Sachant que, d'après la théorie d'impact, la relation qui décrit l'élargissement des profils des raies dû à la perturbation électronique des états supérieurs est [5, 9]:

$$I_{\vec{e}}(\omega) = \int W(\vec{F}) d\vec{F} I_{\vec{e}}(\omega, \vec{F}, \vec{\mathcal{H}}) \quad (\text{IV-11})$$

Donc, le profil $I_{\vec{e}}(\omega, \vec{F}, \vec{\mathcal{H}})$ élargi par les électrons pour un champ électrique intermoléculaire \vec{F} , un champ magnétique $\vec{\mathcal{H}}$, et une direction de polarisation \vec{e} est donné par [9]:

$$I_{\vec{e}}(\omega, \vec{F}, \vec{\mathcal{H}}) = \frac{1}{\pi} \text{Réal} \sum_{ijkl} \langle \psi_i | \vec{e} \cdot \vec{r} | \varphi_j \rangle \langle \varphi_l | \vec{e} \cdot \vec{r} | \psi_k \rangle \langle \psi_i | \langle \varphi_j | \left\{ i \left[\omega - \frac{H^{(n)}(\vec{F}, \vec{\mathcal{H}}) - H^{(n')}(\vec{F}, \vec{\mathcal{H}})}{\hbar} \right] - \Phi^{(nn')} \right\}^{-1} | \psi_k \rangle | \varphi_l \rangle \quad (\text{IV-12})$$

Avec: ψ_i, φ_j : fonctions d'onde des états supérieurs et des états inférieurs, qui sont aussi, des états propres de l'Hamiltonien $H(\vec{F}, \vec{\mathcal{H}})$ de l'atome soumis au champ \vec{F} et au champ magnétique $\vec{\mathcal{H}}$.

n' et n : des indices indiquent que les opérateurs agissent sur les sous-espaces de nombre quantique principal respectif n' et n ($n' < n$).

$\Phi^{(nn')}$: l'opérateur qui décrit l'effet de collision des électrons.

Dans ce travail, l'effet de collision sur les états inférieurs est négligé. Cette approximation est rigoureuse pour les raies de la serie de Lyman, par le fait que, la perturbation électronique sur un état de nombre quantique principal n est proportionnelle a n^4 . Alors, l'expression (IV-12) se réduit a :

$$I_{\vec{e}}(\Delta\omega, \vec{F}, \vec{\mathcal{H}}) = \frac{1}{\pi} \sum_{ijk} \langle \psi_i | \vec{e} \cdot \vec{r} | \varphi_j \rangle \langle \psi_j | \vec{e} \cdot \vec{r} | \varphi_k \rangle \times \langle \psi_i | [i(\Delta\omega - \Delta\omega_{ij}) - \Phi^{(n)}]^{-1} | \psi_k \rangle \quad (\text{IV-13})$$

Par les propositions suivantes :

$$\begin{aligned} \Delta\omega &= \omega - \omega_0; & \omega_0 &= \frac{E_0^{(n)} - E_0^{(n')}}{\hbar} \\ \Delta\omega_{ij} &= \frac{1}{\hbar} \left[\langle \psi_i | \langle \varphi_j | (H^{(n)} - H^{(n')}) | \psi_i \rangle | \varphi_j \rangle - \hbar\omega_0 \right] \\ \Delta\omega_{ij} &= \frac{1}{\hbar} \left[\langle \psi_i | (H - E_0^{(n)}) | \psi_i \rangle \langle \varphi_j | (H - E_0^{(n')}) | \varphi_j \rangle \right] \end{aligned}$$

On a donc l'opérateur qui décrit l'élargissement dû à la perturbation électronique des états supérieurs, est défini par [9]:

$$\Phi^{(n)} = -\vec{r}^{(n')} \cdot \vec{r}^{(n)} \frac{e}{3\hbar^2} \int_0^\infty [\vec{E}(t) \vec{E}(0)] dt \quad (\text{IV-14})$$

Où: $[\vec{E}(t) \vec{E}(0)]$, est la fonction d'auto-corrélation du champ électrique crée a chaque instant par des électrons, voir plus des détails dans les paragraphe (IV-5-1).

D'après l'équation (IV-10), et si on se limite au domaine des valeurs de \vec{F} et de $\vec{\mathcal{H}}$ où l'interaction Spin-Orbite et le diamagnétisme de l'atome sont négligeables, l'Hamiltonien $H(\vec{F}, \vec{\mathcal{H}})$ s'écrit :

$$H(\vec{F}, \vec{\mathcal{H}}) = H_0 + \frac{e}{2mc} \vec{\mathcal{H}} \cdot (\vec{L} + 2\vec{S}) + e\vec{F} \cdot \vec{r} \quad (\text{IV-15})$$

Avec: \vec{r} , le vecteur position de l'électron optique ;

\vec{L} , le moment orbital ;

\vec{S} , le spin ;

H_0 , l'Hamiltonien de l'atome non perturbé :

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} - \frac{e^2}{r} = - \left[\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{e^2}{r} \right] \quad (\text{IV-16})$$

Par la méthode de perturbation, la solution de l'équation (IV-10) est bien connue dans le cas ou les champs n'est pas trop intenses, et l'élément perturbateur est :

$$\frac{e}{2mc} \vec{\mathcal{H}} \cdot (\vec{L} + 2\vec{S}) + e\vec{F} \cdot \vec{r} \quad (\text{IV-17})$$

Pour simplifier, on a supposé que les probabilités de transition dû à cet élément perturbateur entre deux états à nombres quantiques principaux différents sont négligeables, par rapport aux probabilités de transition entre les sous-états de même nombre quantique principal $E_0^{(n)}$ et $E_0^{(n+1)}$ [9].

C'est-a-dire que :

$$\frac{e\hbar |\vec{\mathcal{H}}|}{2mc} \quad \text{et} \quad n^2 e |\vec{F}| a_0 \ll \frac{e^2}{2a_0} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right) \quad (\text{IV-18})$$

$$n^2 e |\vec{F}| a_0 \ll \frac{e^2}{a_0 n^3} \quad \text{pour } n \text{ grand } (a_0 = \text{rayon de Bohr}).$$

L'orientation de champ magnétique est suivant l'axe \vec{Oz} , et le champ électrique \vec{F} défini par ses composantes:

$$\begin{aligned} F_x &= -F(1-\gamma^2)^{1/2} \\ F_y &= 0 \\ F_z &= F_\gamma \end{aligned}$$

et $\gamma = \cos(\vec{F}, \vec{\mathcal{H}})$, figure (IV-1).

En considérant le spin positif $S_z = +\frac{1}{2}$, l'équation aux valeurs propres s'écrit [9]:

$$\left[\frac{L_z}{\hbar} + A \left(-\frac{x(1-\gamma^2)^{1/2}}{a_0} + \frac{z\gamma}{a_0} \right) \right] |\psi\rangle = \xi |\psi\rangle \quad (\text{IV-19})$$

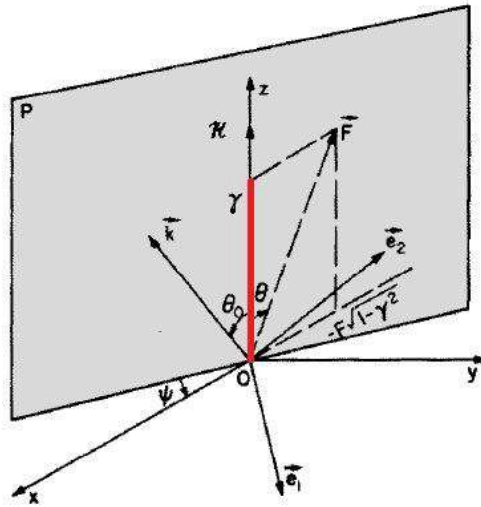


Figure (IV-3): l'interaction atome émetteur-champ intermoléculaire \vec{F} . Le champ magnétique \vec{H} , la direction d'observation \vec{k} et les directions de polarisation e_1, e_2 .

Pour l'atome d'hydrogène libre en coordonnées sphériques on a:

Niveaux d'énergie

$$E_0^{(n)} = -\frac{e^2}{2a_0} \cdot \frac{1}{n^2} \quad ; \quad n^2 \text{ fois dégénéré.}$$

Fonction d'onde

$$\begin{cases} \varphi_{nlm} = R_{nl}(r) y_{lm}(\theta, \varphi) \\ R_{nl}(r) = \frac{1}{(2l+1)!} \left(\frac{(n+l)!}{(n-l-1)! 2n} \right)^{1/2} \left(\frac{2}{n} \right)^{3/2} e^{-r/n} \left(\frac{2r}{n} \right) F \left[-(n-l-1), 2l+2, \frac{2r}{n} \right] \end{cases}$$

Eléments de matrice de dipôle [9];

$$\left. \begin{aligned}
 \left\langle n'l+1m \left| \frac{z}{a_0} \right| nlm \right\rangle &= \left(\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+3)(2l-1)} \right)^{1/2} R_{nl}^{n'l+1} \\
 \left\langle n'l-1m \left| \frac{z}{a_0} \right| nlm \right\rangle &= \left(\frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)} \right)^{1/2} R_{nl}^{n'l-1} \\
 \left\langle n'l+1m+1 \left| \frac{x+iy}{a_0} \right| nlm \right\rangle &= \left(\frac{(l+m+2)(l+m+1)}{(2l+3)(2l+1)} \right)^{1/2} R_{nl}^{n'l+1} \\
 \left\langle n'l+1m-1 \left| \frac{x-iy}{a_0} \right| nlm \right\rangle &= \left(\frac{(l-m+2)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)} \right)^{1/2} R_{nl}^{n'l+1} \\
 \left\langle n'l-1m+1 \left| \frac{x+iy}{a_0} \right| nlm \right\rangle &= \left(\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l+3)(2l-1)} \right)^{1/2} R_{nl}^{n'l-1} \\
 \left\langle n'l-1m-1 \left| \frac{x-iy}{a_0} \right| nlm \right\rangle &= \left(\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)} \right)^{1/2} R_{nl}^{n'l-1}
 \end{aligned} \right\} \quad (IV-20)$$

où :

$$\begin{aligned}
 R_{nl}^{n'l-1} &= R_{n'l-1}^{nl} = \int R_{n'l-1}(r) R_{nl}(r) r^3 dr \\
 &= \frac{(-1)^{n-l}}{4(2l-1)!} \left(\frac{(n+1)!(n'+l+1)!}{(n-l-1)!(n'-l)!} \right)^{1/2} \frac{(4nn')^{l+1} (n-n')^{n+n'-2l-2}}{(n+n')^{n+n'}} \\
 &\cdot \left\{ F_{21} \left[-n_r, -n'_r, 2l, \frac{-4nn'}{(n-n')^2} \right] - \left(\frac{n-n'}{n+n'} \right)^2 F_{21} \left[-n_r, -2, -n', 2l, \frac{-4nn'}{(n-n')^2} \right] \right\}
 \end{aligned} \quad (IV-21)$$

et, $n \neq n'$; $n_r = n - l - 1$; $n'_r = n' - l$; F_{21} , fonction hypergéométrique.

Donc :

$$\left. \begin{aligned}
 R_{nl}^{n^{l-1}} = R_{n^{l-1}}^{nl} &= \frac{3}{2} n(n^2 - l^2)^{1/2} \\
 \text{Pour la série de Lyman :} \\
 R_{n1}^{10} &= \frac{2^4 n^{7/2} (n-1)^{n-5/2}}{(n+1)^{n+5/2}} \\
 \text{Pour la série de Balmer :} \\
 R_{n1}^{20} &= \frac{2^8 n^3 (n-2)^{n-3} [2n(n^2-1)]^{1/2}}{(n+1)^{n+3}} \\
 R_{n2}^{21} &= \frac{2^9 n^4 (n-2)^{n-3} \left[2 \frac{n(n^2-1)}{3(n^2-4)} \right]^{1/2}}{(n+2)^{n+3}} \\
 R_{n0}^{21} &= \frac{2^7 n^4 (n-2)^{n-3} \left[\frac{2n}{3} \right]^{1/2}}{(n+2)^{n+3}}
 \end{aligned} \right\} \quad \text{(IV-22)}$$

En raison des règles de sélection, les éléments de matrice autres que ceux figurant sont nuls.

$$\Delta l = \pm 1 \quad \text{et} \quad \Delta m = \pm 1 \quad \text{pour} \quad (x \pm iy) / a_0.$$

$$\Delta l = \pm 1 \quad \text{et} \quad \Delta m = 0 \quad \text{pour} \quad z / a_0$$

Pour expliciter l'équation aux valeurs propres sous forme matricielle, les indices l m sont doubler en un seul i par :

$$i = l^2 + l + 1 + m \quad \text{donc} \quad ; \quad l = \text{partie entière de } (i-1)^{1/2}; \quad m = i - (l^2 + l + 1).$$

Soit les états non perturbés $|n, i\rangle$, conformément à la méthode générale de diagonalisation des matrices,

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n^2} a^i |n, i\rangle \quad \text{(IV-23)}$$

Alors l'équation (IV-19) s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^{n^2} (K - \xi) a^i |n, i\rangle &= 0 \\
 K &= \frac{L_z}{\hbar} + A \left(-\frac{x}{a_0} (1 - \gamma^2)^{1/2} + \frac{z \gamma}{a_0} \right)
 \end{aligned} \quad \text{(IV-24)}$$

Et les valeurs propres de l'équation caractéristique $\xi_h (h = 1, 2, \dots, n^2)$,

sont données par : $\det(K_{ji} - \xi \delta_{ji}) = 0$.

et le système linéaire :

$$\sum_{i=1}^n (K_{ji} - \xi_h \delta_{ji}) a_h^i = 0 \quad \begin{matrix} j = 1, 2, \dots, n^2 \\ h = 1, 2, \dots, n^2 \end{matrix} \quad (\text{IV-25})$$

D'après, les équations (IV-13) et (IV-14), les éléments de matrice de $(\vec{r}^{(n)}, \vec{r}^{(n)}) / a_0^2$, qui figurent dans l'expression de l'opérateur de collision $\phi^{(n)}$, donc :

$$\left\langle nl'm' \left| \frac{\vec{r}^{(n)} \cdot \vec{r}^{(n)}}{a_0^2} \right| nlm \right\rangle = \sum_{l'm''} \left\langle nl'm' \left| \frac{\vec{r}}{a_0} \right| nl''m'' \right\rangle \left\langle nl''m'' \left| \frac{\vec{r}}{a_0} \right| nlm \right\rangle \quad (\text{IV-25})$$

À l'aide des formules de Gordon [9] on trouve les résultats :

$$\left\langle nl'm' \left| \frac{\vec{r}^{(n)} \cdot \vec{r}^{(n)}}{a_0^2} \right| nlm \right\rangle = \frac{9n^2}{4} \left[n^2 - (l^2 + l + 1) \right] \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (\text{IV-26})$$

Les calculs sont faits à l'aide de la même formule.

IV-4-2 L'opérateur de collision par la démarche de Griem

Il est plus commode de travailler pour ce calcul avec la représentation d'interaction de l'opérateur d'évolution [10], où ; l'approximation d'impact est l'approximation utilisée pour calculer l'effet de la composante électronique ; et la contribution des états initiaux de l'émetteur à une raie spectrale est supposée probable.

Alors, pour une représentation d'interaction de l'opérateur d'évolution donnée par la forme :

$$U(t, 0) = \exp\left(\frac{iH_E t}{\hbar}\right) T(t, 0) \quad (\text{IV-27})$$

et, un potentiel donné par :

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E}(t) \quad (\text{IV-28})$$

où:

H_E : l'Hamiltonien de l'émetteur non perturbé;

\vec{d} : l'opérateur dipolaire;

$\vec{E}(t)$: champ électrique créé par les perturbateurs au centre de l'atome à l'instant t .

$U(t, 0)$ obéit à l'équation de Schrödinger (IV-10), donc:

$$i\hbar \frac{dU(t)}{dt} = \exp\left(\frac{iH_E t}{\hbar}\right) V(t) \exp\left(-\frac{iH_E t}{\hbar}\right) U(t) = V'(t) U(t) \quad (\text{IV-29})$$

Avec:

$$V'(t) = \exp\left(\frac{iH_E t}{\hbar}\right) V(t) \exp\left(-\frac{iH_E t}{\hbar}\right) \quad (\text{IV-30})$$

Par itération on a:

$$U(t, 0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V'(t_1) dt_1 + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t V'(t_1) dt_1 \int_0^{t_1} V'(t_2) dt_2 + \dots \quad (\text{IV-31})$$

On peut avoir une moyenne si on considère un changement d'un intervalle de temps Δt .

$$\begin{aligned} \Delta \{U_g(t, 0) U_e^*(t, 0)\} &= \{U_g(t + \Delta t, 0) U_e^*(t + \Delta t, 0) - U_g(t, 0) U_e^*(t, 0)\} \\ &= \left\{ [U_g(t + \Delta t, t) U_e^*(t + \Delta t, t) - 1] U_g(t, 0) U_e^*(t, 0) \right\} \end{aligned} \quad (\text{IV-32})$$

où:

$$U(t + \Delta t, t) - 1 = -\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} V'(t_1') dt_1' + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} V'(t_1') dt_1' \int_t^{t_1'} V'(t_2') dt_2' + \dots \quad (\text{IV-33})$$

Avec un changement des variables :

$$\begin{cases} t_1 = t'_1 - t \\ t_2 = t'_2 - t \end{cases}$$

on trouve:

$$\begin{aligned} \{U(t + \Delta t, t)\} = & \left\{ 1 - \exp\left(\frac{iH_E t}{\hbar}\right) \right. \\ & \left. \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{\Delta t} V'(t_1) dt_1 - \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^{\Delta t} \int_0^{\Delta t} V'(t_1) dt_1 \int_0^{t_1} V'(t_2) dt_2 + \dots \right] \exp\left(-\frac{iH_E t}{\hbar}\right) \right\} \end{aligned} \quad (\text{IV-34})$$

Donc, l'approximation d'impact est valide si;

- 1- Δt est si grand que le premier facteur du côté droit de (IV-32) est statiquement indépendant du deuxième facteur, et les deux peuvent être ramenés à une moyenne séparément [10].
- 2- Δt est si petits que la moyenne du premier facteur soit très petite comparée à l'unité, dans ce cas on peut remplacer cette équation aux différences par une équation différentielle [10].

Alors le calcul de $\{U_g(t)U_e^*(t)\}$ peut se faire à partir de [10]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \{U_g(t, 0)U_e^*(t, 0)\} = & \exp\left(\frac{i(H_g - H_e)t}{\hbar}\right) \Phi_{eg} \\ & \exp\left(-\frac{i(H_g - H_e)t}{\hbar}\right) \{U_g(t, 0)U_e^*(t, 0)\} \end{aligned} \quad (\text{IV-35})$$

avec:

H_e et H_g , les projections de H_E sur les sous espaces supérieur et inférieur de la transition.

Et : Φ_{eg} , l'opérateur de collision électronique indépendant du temps et du micro champ ionique.

De (IV-32) et (IV-35), et (IV-34) avec son conjugué, il vient alors :

$$\begin{aligned}
 (\Delta t)\Phi_{eg} = & \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\Delta t} [V_g'(t_1) - V_e^{*'}(t_1)] dt \right. \\
 & + \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^{\Delta t} V_g'(t_1) dt_1 \int_0^{t_1} V_g'(t_2) dt_2 \\
 & + \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^{\Delta t} V_e^{*'}(t_1) dt_1 \int_0^{t_1} V_e^{*'}(t_2) dt_2 \\
 & \left. - \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^{\Delta t} V_g'(t_1) dt_1 \int_0^{\Delta t} V_e^{*'}(t_2) dt_2 \right\}
 \end{aligned} \tag{IV-36}$$

Dans cette expression, on peut avoir deux conséquences :

Premièrement, la moyenne dans l'équation. (IV-36) se réduit à un produit par le nombre de collisions se produisant pendant le temps Δt [10], avec paramètre d'impact ρ et vitesse v s'écrit sous la forme :

$$N_e \Delta t v d v f(v) 2\pi \rho d \rho \tag{IV-37}$$

Deuxièmement, conséquence découle du choix d'un temps de collision très court qui permet de placer $t = -\infty$ et $t + \Delta t = +\infty$, sans changer sensiblement l'intégrale dans l'expression (IV-33).

Cette hypothèse permet d'écrire l'opérateur de collision sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
 \Phi_{eg} = & N_e \int_0^{\infty} v f(v) dv \int_0^{\infty} 2\pi \rho d \rho \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} [V_g'(t_1) - V_e^{*'}(t_1)] dt_1 \right. \\
 & + \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} V_g'(t_1) dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} V_g'(t_2) dt_2 \\
 & + \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} V_e^{*'}(t_1) dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} V_e^{*'}(t_2) dt_2 \\
 & \left. - \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} V_g'(t_1) dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} V_e^{*'}(t_2) dt_2 \right]_{ang}
 \end{aligned} \tag{IV-38}$$

La moyenne est portée sur les angles entre ρ et v , et la solution de l'équation intégral-différentielle est :

$$\left\{ U_g(t,0)U_e^{*}(t,0) \right\} = \exp\left(\frac{i(H_g - H_e)t}{\hbar} \right) \exp\left(-\frac{i(H_g - H_e)t}{\hbar} + \Phi_{eg}t \right) \quad (\text{IV-39})$$

donc, la fonction *d'auto-corrélation* du moment dipolaire électrique sera :

$$C(t) = \vec{d}_{\alpha\beta} \left\langle \left\langle \alpha\beta \left| \exp\left(-\frac{i(H_g - H_e)t}{\hbar} + \Phi_{eg}t \right) \right| \alpha'\beta' \right\rangle \right\rangle d_{\alpha'\beta'}^* \quad (\text{IV-40})$$

Pour le profil de raie, la transformée de Fourier est plus utile [10,11] , où nous obtenons l'expression suivante:

$$I(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Re} \left\{ \vec{d}_{\alpha\beta} \left\langle \left\langle \alpha\beta \left| \left(i\omega - \frac{i(H_g - H_e)}{\hbar} + \Phi_{eg} \right)^{-1} \right| \alpha'\beta' \right\rangle \right\rangle d_{\alpha'\beta'}^* \right\} \quad (\text{IV-41})$$

en tenant compte de la propriété suivante :

soit $\hat{R} \equiv \hat{r} \otimes I - I \otimes \hat{r}$ un opérateur dans l'espace de Liouville on a donc:

$$\begin{aligned} \langle \alpha'\beta' | \hat{R} | \alpha\beta \rangle &\equiv \langle \alpha'\beta' | \hat{r} \otimes I - I \otimes \hat{r} | \alpha\beta \rangle \\ &\equiv \langle \alpha'\beta' | \hat{r} \otimes I | \alpha\beta \rangle - \langle \alpha'\beta' | I \otimes \hat{r} | \alpha\beta \rangle \\ &\equiv \langle \alpha' | \hat{r} | \alpha \rangle \otimes \langle \beta' | I | \beta \rangle - \langle \alpha' | I | \alpha \rangle \otimes \langle \beta' | \hat{r} | \beta \rangle \\ &\equiv \langle \alpha' | \hat{r} | \alpha \rangle \otimes \delta_{\beta\beta'} - \delta_{\beta\beta'} \otimes \langle \beta' | \hat{r} | \beta \rangle \end{aligned}$$

donc un operateur soit : $V_e^{*}(t_1)V_e^{*}(t_2)$ (IV-41) prend la forme :

$$\begin{aligned} \left\langle \left\langle \alpha\beta \left| V_e^{*}(t_1)V_e^{*}(t_2) \right| \alpha'\beta' \right\rangle \right\rangle &= \langle \alpha | V_e^{*}(t_1) | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | V_e^{*}(t_2) | \alpha' \rangle \delta_{\beta\beta'} \\ &+ \langle \beta | V_e^{*}(t_2) | \beta'' \rangle \langle \beta'' | V_e^{*}(t_1) | \beta' \rangle \delta_{\alpha\alpha'} \end{aligned} \quad (\text{IV-42})$$

Alors, on peut trouver les éléments de l'opérateur de collision [10] :

$$\begin{aligned}
 \langle\langle \alpha\beta | \Phi_{eg} | \alpha'\beta' \rangle\rangle = & -\frac{N_e}{\hbar^2} \int v f(v) d\vec{v} \int \rho \delta_{0,\vec{\rho},\vec{v}} d\vec{\rho} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \right. \\
 & \langle \alpha' | V'(t_2) | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | V'(t_1) | \alpha \rangle \delta_{\beta\beta'} \\
 & + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \langle \beta | V'(t_1) | \beta'' \rangle \langle \beta'' | V'(t_2) | \beta' \rangle \delta_{\alpha\alpha'} \\
 & \left. - \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \langle \beta | V'(t_1) | \beta' \rangle \langle \alpha' | V'(t_2) | \alpha \rangle \delta_{\beta\beta'} \right]_{ang}
 \end{aligned} \tag{IV-43}$$

Puisque les trois termes de l'équation ont la même forme, on peut écrire une quantité Φ_d telle que:

$$\Phi_d = -\frac{N_e}{\hbar} \int v f(v) d\vec{v} \int \rho \delta_{0,\vec{\rho},\vec{v}} d\vec{\rho} \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{t_1} dt_1 \langle \alpha' | V'(t_2) | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | V'(t_1) | \alpha \rangle \langle \alpha'' | V'(t_1) | \alpha \rangle \delta_{\beta\beta'} \tag{IV-44}$$

Et les éléments de la matrice figurant dans l'équation (IV-43) sont donnés par :

$$\begin{cases} \langle \alpha'' | V'(t_1) | \alpha \rangle = er_{\alpha''\alpha,m} \cdot E_m(t_1) \exp(it_1 \omega_{\alpha\alpha''}) \\ \langle \alpha' | V'(t_2) | \alpha'' \rangle = er_{\alpha'\alpha'',m'} \cdot E_{m'}(t_2) \exp(it_2 \omega_{\alpha''\alpha'}) \end{cases} \tag{IV-45}$$

Où:

er : l'opérateur moment dipolaire de l'émetteur ;

$\omega_{\alpha\alpha'}$: la fréquence de Bohr pour la différence d'énergie des états α , α' ;

m, m' : les produits scalaires entre \vec{r} et le micro-champ électrique \vec{E} .

En utilisant les relations (IV-45) dans l'équation (IV-44), nous obtenons:

$$\phi_d(\omega_{\alpha\alpha'}, \omega_{\alpha''\alpha'}) = -\frac{2\pi N_e e^2}{\hbar^2} \int_0^{\infty} v f(v) dv \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \rho d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 e^{(i\omega_{\alpha\alpha'}t_1 + i\omega_{\alpha''\alpha'}t_2)} [\vec{E}(t_1)\vec{E}(t_2)]_{ang} \tag{IV-46}$$

Et de même, un second terme pour $\phi_d(\omega_{\beta'\beta''}, \omega_{\beta''\beta})$, plus un troisième terme ϕ_{int}

légèrement différent soit :

$$\phi_{\text{int}}(\omega_{\alpha\alpha'}, \omega_{\beta\beta'}) = -\frac{2\pi N_e e^2}{\hbar^2} \int_0^\infty v f(v) dv \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dt_1 \int_{-\infty}^\infty dt_2 e^{(i\omega_{\alpha\alpha'}t_1 + i\omega_{\beta\beta'}t_2)} \left[\vec{E}(t_1) \vec{E}(t_2) \right]_{\text{ang}} \quad (\text{IV-47})$$

En effet, chaque élément de matrice de l'opérateur de collision peut être présenté comme une fonction des termes directs ϕ_d et un terme d'interférence ϕ_{int} , soit :

$$\begin{aligned} \langle\langle \alpha\beta | \Phi_{\text{eg}} | \alpha'\beta' \rangle\rangle &= \sum_{\alpha''} \vec{r}_{\alpha\alpha''} \vec{r}_{\alpha''\alpha'} \phi_d(\omega_{\alpha\alpha''}, \omega_{\alpha''\alpha'}) + \sum_{\beta''} \vec{r}_{\beta'\beta''} \vec{r}_{\beta''\beta} \phi_d(\omega_{\beta'\beta''}, \omega_{\beta''\beta}) \\ &\quad - \vec{r}_{\alpha\alpha'} \vec{r}_{\beta\beta'} \phi_{\text{int}}(\omega_{\alpha\alpha'}, \omega_{\beta\beta'}) \end{aligned} \quad (\text{IV-48})$$

C'est -à- dire, que la contribution de l'opérateur de collision électronique à l'élargissement des profils des raies est due à un terme direct ϕ_d , et un terme d'interférence ϕ_{int} , connu dans la littérature par l'effet d'élargissement Stark [10,11].

En fait, en plus du problème de la détermination de ρ_{\min} , il y a un problème de la validité de la théorie d'impact d'après D. Voslamber [12]. De nombreux travaux dans ce domaine ont été fait.

Notons ici que l'évaluation de ϕ_d et ϕ_{int} a été faite dans le cas des émetteurs ioniques.

IV-4-3 L'opérateur de collision par la démarche de Spiros

Dans cette partie, nous allons essayer de mettre en évidence d'autre modèle de l'opérateur de collision établi par Spiros [13]. En utilisant les considérations ci-dessus, et en ajoutant quelques changements, où nous considérons; l'approximation d'impact pour les électrons et la quasi-statique pour les ions, dans l'approximation d'impact [14], alors, la forme du profil de raie $I(\omega)$ est donnée par [13];

$$I(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int dE \quad W(E) \text{Re} \hat{d}_{\alpha'\beta'} \langle \alpha\beta | \left[i(\omega - \omega_{\alpha\beta})I + \hat{\Phi} \right]^{-1} | \alpha'\beta' \rangle \hat{d}_{\alpha\beta}^* \quad (\text{IV-49})$$

α, α' sont des états du niveau initial et β, β' du niveau final impliqués dans la transition en question (ils sont en principe ensembles d'états complets), Re désigne la partie réelle,

$W(E)$ est la distribution statique du micro-champ électrique ionique [15], I est la matrice unitaire, \hat{d} est l'opérateur dipôle, et $\hat{\Phi}$ est l'opérateur de collision électronique défini par ses éléments de matrice [13];

$$\begin{aligned} \langle \alpha\beta | \Phi | \alpha'\beta' \rangle = & -n\hbar^{-2} \int v f(v) d^3v \int d^3\rho \delta(v \cdot \rho) \rho \left[\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \left[\langle \alpha | V'(t_1) | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | V'(t_2) | \alpha' \rangle \delta_{\beta\beta'} \right. \right. \\ & \left. \left. + \delta_{\alpha\alpha'} \langle \beta' | V'(t_1) | \beta'' \rangle \langle \beta'' | V'(t_2) | \beta \rangle \right] \right. \\ & \left. - \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \langle \alpha | V'(t_1) | \alpha' \rangle \langle \beta' | V'(t_2) | \beta \rangle \right] \quad (\text{IV-50}) \end{aligned}$$

où ;

n , la densité électronique ;

$f(v)$, la distribution Maxwell des vitesses;

$V'(t)$, opérateur d'interaction.

α'', β'' , sont les états supérieurs et inférieurs respectivement (en principe, ce sont des ensembles d'états complets).

δ , assure que la vitesse v et le paramètre d'impact ρ satisfont $v \perp \rho$.

Les limites de l'intégration ρ sont $\rho_{\min} \leq \rho \leq \rho_{\max}$, où les valeurs standards pour les deux paramètres sont $\rho_{\max} = 0.68\lambda_D$, avec λ_D , la longueur de Debye et;

$$\rho_{\min} = \max \left[(n_a^2 - n_b^2) \frac{a_0}{Z_{em} + 1}, \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\hbar(n_a^2 - n_b^2)}{m(Z_{em} + 1)v} \right] \quad (\text{IV-51})$$

Avec a_0 le rayon de Bohr, Z_{em} , la charge de l'émetteur, et n_a, n_b les nombres quantiques principaux des niveaux supérieur et inférieur, respectivement.

Si $n_a = n_b$, la différence de leurs carrés doit être remplacée par n_a^2 .

Nous introduisons maintenant une nouvelle notation. Tout d'abord, nous utilisons une interaction dipolaire avec $E(t)$ le champ électrique créée par l'électron.

$$V(t) = \vec{d} \cdot \vec{E}(t) = e\vec{r} \cdot \vec{E}(t) \quad (\text{IV-52})$$

où \vec{r} est le vecteur de position de l'électron atomique.

Maintenant, nous voulons séparer la partie purement atomique (qui a l'échelle Z) et la partie qui dépend des détails du processus de collision.

À cause des questions de mise à l'échelle Z. Nous définissons donc deux quantités:

$$\phi_d(\omega_1, \omega_2) = -\frac{2\pi ne^2}{3\hbar^2} \int_0^\infty v f(v) dv \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 e^{i\omega_1 t_1} e^{i\omega_2 t_2} E(t_1) \cdot E(t_2) \quad (\text{IV-53})$$

et ;

$$\phi_{\text{int}}(\omega_1, \omega_2) = -\frac{2\pi ne^2}{3\hbar^2} \int_0^\infty v f(v) dv \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dt_1 \int_{-\infty}^\infty dt_2 e^{i\omega_1 t_1} e^{i\omega_2 t_2} E(t_1) \cdot E(t_2) \quad (\text{IV-54})$$

d'après la moyenne angulaire ;

$$\begin{aligned} \langle \alpha\beta | \Phi | \alpha'\beta' \rangle &= \sum_{\alpha''} r_{\alpha\alpha''} \cdot r_{\alpha''\alpha'} \phi_d(\omega_{\alpha\alpha''}, \omega_{\alpha''\alpha'}) \\ &+ \sum_{\beta''} r_{\beta''\beta} \cdot r_{\beta''\beta'} \phi_d(\omega_{\beta''\beta}, \omega_{\beta''\beta'}) \\ &- r_{\alpha\alpha'} \cdot r_{\beta'\beta} \phi_{\text{int}}(\omega_{\alpha\alpha'}, \omega_{\beta'\beta}) \end{aligned} \quad (\text{IV-55})$$

La question maintenant, est l'évaluation de terme direct ϕ_d , et le terme d'interférence ϕ_{int} . Avant de poursuivre notre travail, notons ici que la théorie d'impact n'est généralement pas applicable pour des paires ω_1, ω_2 arbitraires Voslamber's [11,14].

Mais, bien sûr, pour les raies isolées, où $\omega_1 = -\omega_2$ et la critique ci-dessus ne s'applique pas. L'évaluation de ϕ_d a été effectuée dans le cas de raies isolées, en utilisant des chemins hyperbolique pour les électrons perturbateurs [15, 16].

IV-5 Comparaison entre les modèles de l'opérateur de collision électronique

A travers notre présentation des méthodes ci-dessus, et en prenant à la fois quelques considérations dans chaque démarche pour calculer l'opérateur de collision. On trouve après l'annulation de la considération de structure fine dans la relation de Spiros (IV-53) que :

sans structure fine $\Leftrightarrow \omega_1 = \omega_2 = 0$ donc ; $e^{i\omega_1 t_1} e^{i\omega_2 t_2} = 1$

Alors, nous pouvons considérer la relation (IV-14) comme un cas spécial représentatif pour un système sans structure fine de l'opérateur de collision électronique dans le plasma soit :

$$\Phi^{(n)} = -\vec{r}^{(n')} \cdot \vec{r}^{(n)} \frac{e}{3\hbar^2} \int_0^\infty [\vec{E}(t) \vec{E}(0)] dt$$

Avec : $[\vec{E}(t) \vec{E}(0)]$, est la fonction d'auto-corrélation du champ électrique créée à chaque instant t par des électrons, sur l'émetteur.

IV-5-1 La fonction d'auto-corrélation du champ électrique

Le micro champ total dû aux électrons sur l'impureté centrée à l'origine est donné par :

$$\vec{E} = \sum_{k=1}^N \vec{e}_{ie}(r_k) \quad (\text{IV-56})$$

La fonction d'auto-corrélation du micro champ électrique réduit (sans dimension) est donnée par Talin et al en 2008 [17] par la formule:

$$\begin{aligned} C_{EE}(t) &= \frac{a^4}{e^2} \langle \vec{E}(t) \cdot \vec{E} \rangle \\ &= \frac{a^4}{e^2} \int d\vec{r}_1 d\vec{v}_1 d\vec{r}_2 d\vec{v}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{v}_N \vec{E} \cdot \vec{E}(-t) \rho_e \\ &= \frac{a^4}{e^2} \int d\vec{r}_1 d\vec{v}_1 \vec{e}(r_1) N \int d\vec{r}_2 d\vec{v}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{v}_N \vec{E} \cdot \vec{E}(-t) \rho_e \\ &= \frac{a^4}{e^2} \int d\vec{r}_1 d\vec{v}_1 \vec{e}(r_1) \Psi(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) \end{aligned} \quad (\text{IV-57})$$

où: ρ_e ensemble canonique à l'équilibre, et $\vec{e}(r_\alpha)$ le champ électrique d'une particule.

l'intégration sur $2.....N$ degrés de liberté dans la deuxième égalité donne une fonction réduite $\Psi(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t)$, où la première série d'ensemble soit :

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \dots, \vec{r}_s, \vec{v}_s, t) = N^s \int d\vec{r}_{s+1} d\vec{v}_{s+1} \dots d\vec{r}_N d\vec{v}_N \vec{E}(-t) \rho_e \quad (\text{IV-58})$$

l'expression (IV-57) satisfait à l'hierarchie de BBGKY, Van Kampen et al (1967) [17]:

$$\left(\partial_t + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r - \frac{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}}{m_e} \left\{ \vec{\nabla}_r \left[V_{ie}(r) + V_{ef}(r) \right] \right\} \cdot \left\{ \vec{\nabla}_v - \frac{\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_v}{c} \right\} \right) \Psi^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) \\ = \frac{1}{m_e \omega} \int d\vec{r}_2 d\vec{v}_2 \left[\vec{\nabla}_r V_{ee}(\vec{r} - \vec{r}_2) \right] \cdot \left\{ \vec{\nabla}_v - \frac{\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_v}{c} \right\} \Psi^{(2)}(\vec{r}, \vec{v}, \vec{r}_2, \vec{v}_2, t) \quad (\text{IV-59})$$

Alors ; à la différence des fonctions de distribution, et d'une façon équivalente , on peut écrire :

$$\Psi^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t = 0) = f(\vec{r}_1, \vec{v}_1) \vec{e}(\vec{r}_1) + \int d\vec{r}_2 d\vec{v}_2 f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2) \vec{e}(r_2) \quad (\text{IV-60})$$

donc:

$$\vec{e}(\vec{r}_1) = \frac{1}{f(\vec{r}_1, \vec{v}_1)} \Psi^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t = 0) - \int d\vec{r}_2 d\vec{v}_2 f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2) \vec{e}(r_2) \quad (\text{IV-61})$$

Pour l'expression de $\Psi^{(2)}$, et après substitution, on trouve :

$$\begin{aligned}
 \Psi^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, t = 0) &= f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2) [\vec{e}(\vec{r}_2) + \vec{e}(\vec{r}_1)] \\
 &\quad + n \int d\vec{r}_3 d\vec{v}_3 f^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, \vec{r}_3, \vec{v}_3) \vec{e}(\vec{r}_3) \\
 &= f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2) \left(\frac{\Psi^{(1)}(\vec{r}_2, \vec{v}_2, t = 0)}{f^{(2)}(\vec{r}_2, \vec{v}_2)} \right) \\
 &\quad + n \int d\vec{r}_3 d\vec{v}_3 h^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, \vec{r}_3, \vec{v}_3) \vec{e}(\vec{r}_3)
 \end{aligned} \tag{IV-62}$$

Avec :

$f^{(s)}$ sont les fonctions de distributions d'équilibre des s-particules réduites et associées à l'ensemble de Gibbs.

$h^{(3)}$ est la fonction de corrélation d'équilibre pour trois électrons en présence de l'ion.

$$\begin{aligned}
 h^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, \vec{r}_3, \vec{v}_3, t) &= f^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, \vec{r}_3, \vec{v}_3) - \\
 &\quad f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2) \frac{1}{f(\vec{r}_1, \vec{v}_1)} f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_3, \vec{v}_3) - \\
 &\quad f^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2) \frac{1}{f(\vec{r}_2, \vec{v}_2)} f^{(2)}(\vec{r}_2, \vec{v}_2, \vec{r}_3, \vec{v}_3)
 \end{aligned} \tag{IV-63}$$

et la relation fonctionnelle linéaire entre $\Psi^{(2)}(t = 0)$ et $\Psi^{(1)}(t = 0)$ est :

$$\begin{aligned}
 \Psi^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, t = 0) &\rightarrow f(\vec{r}_2, \vec{v}_2) \Psi^{(1)}(\vec{r}_2, \vec{v}_1, t) + \\
 &\quad f(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) \Psi^{(1)}(\vec{r}_2, \vec{v}_2, t)
 \end{aligned} \tag{IV-64}$$

Appliquons ces résultats dans l'équation (IV-59), on trouve immédiatement l'équation cinétique :

$$\begin{aligned}
 (\partial_t + \mathfrak{S}) \Psi^{(1)}(\vec{r}, \vec{v}, t) &= \\
 &\quad - m_e^{-1} f(\vec{r}, \vec{v}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r \int d\vec{r}_2 V_{ee}(\vec{r} - \vec{r}_2) \int d\vec{v}_2 \Psi^{(1)}(\vec{r}_2, \vec{v}_2, t)
 \end{aligned} \tag{IV-65}$$

où; $\mathfrak{S} = \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r - m_e^{-1} (\vec{\nabla}_r V(r)) \cdot \vec{\nabla}_v$

La solution de l'équation homogène (IV-65) est donnée par:

$$\Psi^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) = f(\vec{r}, \vec{v}) \vec{e}_{mf}(\vec{r}(t)) \quad (\text{IV-65})$$

avec;

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

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

$f(\vec{r}, \vec{v})$ est la distribution de Maxwell-Boltzmann [17];

N :est le nombre total d'électrons;

Ω :est le volume du système;

et $\beta = \frac{1}{k_B T}$

Finalement, nous substituons la solution homogène (IV-65) dans l'équation (IV-60), on trouve :

$$C_{EE}(t) = C(t) = \frac{a^4}{e^2} \int f(\vec{r}, \vec{v}) \vec{e}(\vec{r}) \vec{e}_{mf}(\vec{r}(t)) d\vec{r} d\vec{v} \quad (\text{IV-66})$$

Pour trouver les valeurs du vecteur position dépendant du temps $\vec{r}(t)$ à tout instant t , nous avons résolu numériquement l'équation de mouvement de l'électron, en utilisant l'algorithme de Verlet [17].

IV-5-2 Algorithme et programmation numérique

III-5-2-1 Algorithme de Verlet

Pour un système conservatif et réversible; le cas de la majorité des phénomènes physiques, les méthodes classiques (Euler, RK,...) sont inefficaces lorsque le sens du flux temporel t change à $-t$. De là vient l'algorithme de Verlet pour corriger ce problème.

La méthode de Verlet est un des algorithmes les plus simples, et largement utilisé en dynamique moléculaire basée sur la développement de Taylor de troisième ordre du vecteur position aux instants $t+h$ et $t-h$:

$$\begin{cases} \vec{r}(t+h) = \vec{r}(t) + h\vec{v}(t) + \frac{h^2}{2}\vec{a}(\vec{r}(t)) + \frac{h^3}{3!}\frac{d^3\vec{r}(t)}{dt^3} + \mathcal{O}(h^4) \\ \vec{r}(t-h) = \vec{r}(t) - h\vec{v}(t) + \frac{h^2}{2}\vec{a}(\vec{r}(t)) - \frac{h^3}{3!}\frac{d^3\vec{r}(t)}{dt^3} + \mathcal{O}(h^4) \end{cases} \quad (\text{IV-67})$$

Par sommation, la vitesse disparaît et on obtient un schéma itératif réversible en temps, donc il est adapté à l'étude des systèmes conservatifs, dont les forces ne dépendent que de la position.

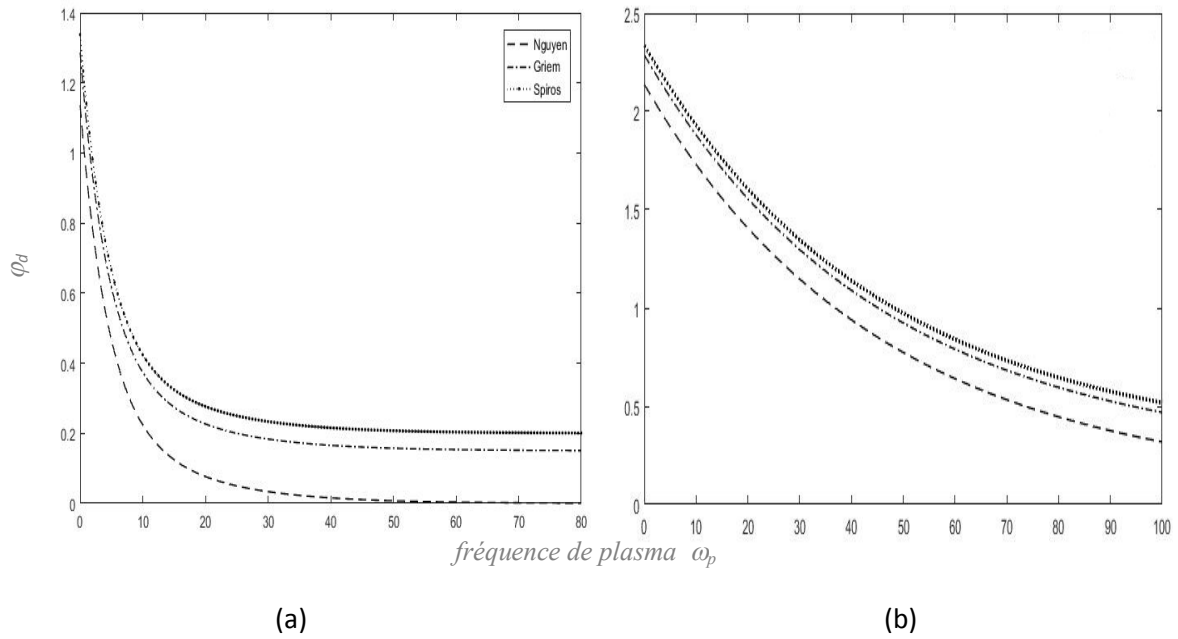
le schéma itératif de la méthode, se traduit par l'équation:

$$\vec{r}_{n+1} = 2\vec{r}_n - \vec{r}_{n-1} + \vec{a}_n h^2$$

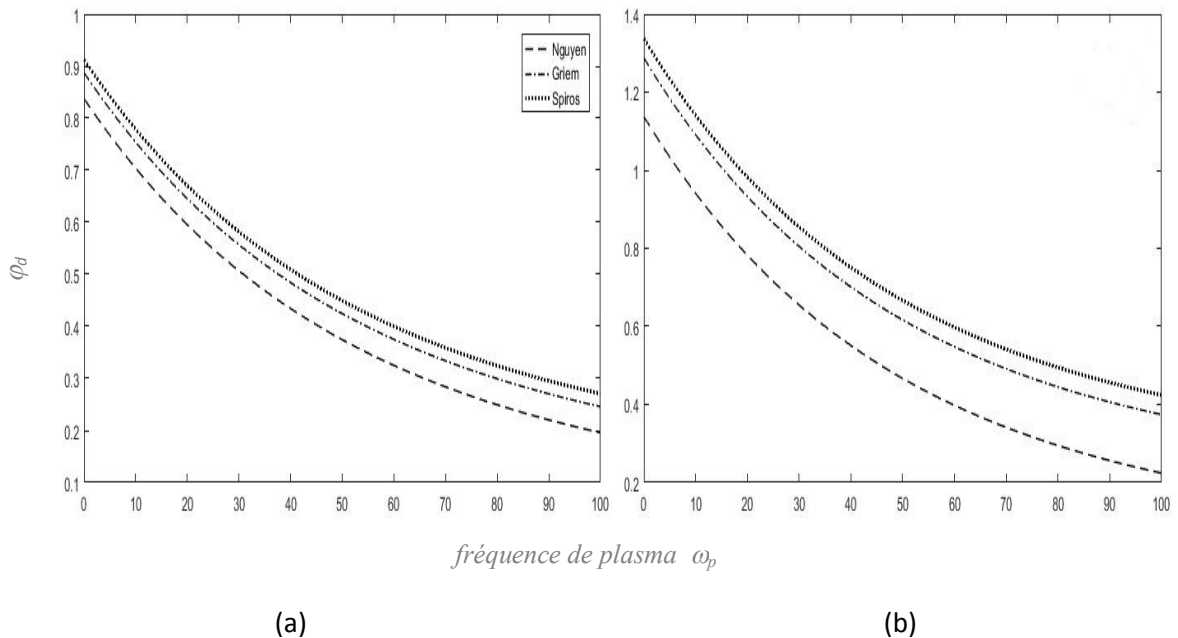
et l'algorithme de Verlet à un pas repose sur le schéma numérique:

$$\begin{cases} \vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + h\vec{v}_n + \frac{h^2}{2}\vec{a}_n \\ \vec{v}_{n+1} = \vec{v}_n + \frac{h}{2}(\vec{a}_n + \vec{a}_{n+1}) \end{cases} \quad (\text{IV-68})$$

IV-5-3 Résultats et discussion



Figure(IV-4): Amplitude de l'operateur de collision ϕ_d en fonction de l'unité de fréquence dans un plasma (a): température $T=20000K$, (b): $T=250000K$, le cas de Hélium He, $N_e=8.12 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$.



Figure(IV-5): Amplitude de l'operateur de collision ϕ_d en fonction de l'unité de fréquence dans un plasma (a): densité $N_e=1.59 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, (b): $N_e=8.12 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, le cas de Hélium He, $T=25000K$.

A travers nos résultats, les calculs de l'amplitude ϕ_d de l'opérateur de collision électronique, prenant à la fois quelques considérations numériques, pour chaque démarche. On trouve les courbes illustrées par la figure (IV-4), où on a effectué des variations de la température, et la figure (IV-5) pour une variation de la densité, dans l'expression de l'opérateur de collisions électroniques pour les trois démarches (démarche de Nguyen, Griem et Spiros), par la méthode de Monte-Carlo pour les calculs de la fonction d'auto-corrélation de champ électrique C_{EE} .

Pour une température T varie, et de densité $N_e = 8.12 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-3}$, la figures (IV-4), l'application des variations significatives de la température donne des amplitudes ϕ_d de l'opérateur de collision en accord pour les trois démarches pour les faibles températures.

Au contraire, pour les résultats illustrés dans la figure (IV-5), où on a effectué des variations de la densité, l'accord est donné pour les plasmas à densité élevée, qui présente un écart plus fiable de l'amplitude de l'opérateur de collision pour les trois démarches.

IV-6 Conclusion

Il est connu, que chacune des trois démarches précédentes est appliquée selon des considérations particulières du système étudié; de sorte que la démarche de Nguyen est effectuée lorsque la structure fine du système n'est pas prise en compte; la démarche de Griem dans le cas de l'atome neutre; et dans le cas d'ions, nous adoptons la méthode Spiros, afin d'atteindre la description plus précise du système étudié.

Cependant, et à partir des résultats des deux chapitres précédents (chapitre II et chapitre III) où nous avons constaté que, à travers les changements de la température et de la densité du plasma, nous avons observé des écarts importants dans les calculs de potentiels effectifs et de la distribution de micro champ électrique, on peut donc s'attendre à des changements significatifs dans le calcul de l'opérateur de collision électronique dans les trois cas.

Les résultats des calculs de l'amplitude de l'opérateur de collision électronique φ_d montre que les considérations physiques de système plasmatique, pour chaque démarche est très important. Malgré ça, on peut trouver des valeurs proches de l'opérateur de collisions électroniques par une des trois démarches (démarche de Nguyen, Griem et Spiros), dans un système à faible densité et à haute température.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] L.M. Deleves, J. Walsh, *Numerical Solution of Integral Equations*, Clarendon Press, Oxford **1974**.
- [2] A. Naam, Thèse de Doctorat, Université de Ouargla, Algérie. **2015**.
- [3] S. Douis, Thèse de Doctorat, Université de Ouargla, Algérie (**2013**).
- [4] C. Deutsch, *Phys. Lett.* **1977**, *A 60*, 317.
- [5] C. Deutsch, M. Gombert, H. Minoo, *Phys. Lett. A* **1978**, *66*, 381.
- [6] A. Naam et M. T. Meftah. *L'OPERATEUR DE COLLISION ELECTRONIQUE DANS LES PLASMAS RELATIVISTES . Lab LENREZA et LRPPS . Univ, UKM Ouargla. SIPP'2011 / Algérie. 13 - 15 . 2011*.
- [7] M. Baranger, B. Mozer, *Phys. Rev.* **1959**, *115*, 521.
- [8] P. Nelly. *Théorie cinétique des plasmas : l'opérateur de collisions inélastiques dans le cas d'excitations et de désexcitations électroniques*. Journal de Physique, 28 (2), pp.147-151. 10.1051. **1967**.
- [9] Nguyen-H, H.-W. Drawin* et L. Herman. *EFFET D'UN CHAMP MAGNETIQUE UNIFORME SUR LES PROFILS DES RAIES DE L'HYDROGENE. J. Quonr. Specfrosc. Radiar. Transfer. Vol. 7, pp. 429474. Pergamon Press Ltd., Great Britain .1967*.
- [10] H. R. Griem. M. Baranger. A. C. Kolb. G. Oriol. *Stark Broadening of Neutral Helium Lines in a Plasma*. PHY REVIEW. VOL125, N1. JANUARY 1. **1962**.
- [11] A. Naam, et al. *Spectral line broadening by relativistic electrons in plasmas: Collision operator*. J. Adv. Space Res. <http://dx.doi.org/10.1016/j.asr.2014.01.010> **2014**.
- [12] H. R. Griem, A. C. Kolb, K.Y. Shen, *Astro phys. J.* 135 272. **1962**.
- [13] A. Spiros. *Physical Review A*, vol 49, N 1, 1050-2947/94/49(1)/106(14)/06.00, **1994**.
- [14] X. Zha et al. *Collision operator including large-angle scattering for moderately coupled plasma . J .High Energy Density Physics 2. 70e76. 2006*.
- [15] M. S. P. Sadykova .*Electric Microfield Distributions and Structure Factors in Dense Plasmas*. doctor rerum naturalium .Universität zu Berlin. 30.03. **2011**.
- [16] J. Rosato et al. *Collision operators for Stark line shapes: When does the unified theory fail?* J .High Energy Density Physics 9 . 484e487 485. **2013**.
- [17] S. Douis et M. T. Meftah. *Correlation fonction and electronic spictral line broadening in relativistic plasma*, Serb. Astron. doi:10.2298/SAJ130218002D J.**2013**.

Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons réussi à calculer le potentiel effectif dans le cas du plasma à deux composants (TCP) perturbé par une impureté positive, en résolvant le système d'équations intégrales non linéaires décrivant les potentiels effectifs électronique et ionique dans le plasma, par la méthode de Point fixe et la méthode Range kutta.

La résolution numérique de ce système d'équations intégrales non linéaires nous a permis de calculer quelques propriétés statiques et dynamiques de plasma à deux composantes comme, la distribution du micro-champ électrique, et la fonction d'auto-corrélation qui a donné des résultats étonnants par rapport à la simulation de la dynamique moléculaire dans des cas similaires.

De même aussi, on a calculé l'opérateur de collision par les trois démarches de : Nguyen, Griem et Spiros et on a fait une étude comparative entre ces différents modèles de l'opérateur de collision électronique.

Dans ce travail, on a souligné l'importance du calcul et l'évaluation de l'opérateur de collision électronique dans le plasma de chaque démarche, en réalisant une étude comparative entre trois modèles différents (Nguyen, Griem, Spiros).

Nous avons mentionné que, chacune des trois démarches de calcul de l'opérateur de collision dans le plasma, est appliquée selon des considérations particulières du système étudié, de sorte que la démarche Nguyen est effectuée dans le cas sans structure fine, et pour la démarche Griem dans le cas de l'atome neutre, et dans le cas d'ions, nous adoptons la méthode Spiros, afin d'atteindre la description plus précise du système étudié.

Dans la première démarche, celle de Nguyen, le calcul de la trajectoire n'est pas indispensable. Cependant la connaissance de l'amplitude de diffusion est indispensable. Celle-ci, se calcule facilement puisqu'elle est égale à la transformée de Fourier du potentiel effectif que nous avons établi dans le deuxième chapitre. Dans cette même équation on peut prendre plusieurs formules pour $V(r)$; Deutsh, Deutsh écranté, Debye etc... et à chaque fois on calcule la transformée de Fourier de l'équation, qu'est directement liée, par une formule, à l'opérateur de collision électronique.

La mise en oeuvre de la structure fine donnée un effort pour la démarche de Spiros que Griem, mais d'une point de vu globale, les deux sont équivalente. Celle-ci, est égale à la transformée de Fourier de l'équation du potentiel effectif. Dans cette même équation on a

prit la formule numérique pour $V_{ie}(r)$, et à chaque fois on calcule l'amplitude de l'opérateur de collision.

Nous avons trouvé que, dans le cas d'un système à haut température et faible densité les trois démarches donnent des résultats plus proches, alors, l'effet des considérations particulières du système étudié est négligeable.

Nous avons également prévenu qu'il y'a des considérations importantes relativement au choix de modèle numérique utilisé pour les calculs à ne pas négliger pour avoir une fiabilité minimale sur les résultats obtenus par chaque méthode.

Comme perspectives de notre étude, nous allons formuler une présentation générale de la matrice de l'opérateur de collision électronique, en rassemblant tous les effets d'interactions et de champs possibles dans l'étude plasma, à partir des calculs numériques.

Appendices

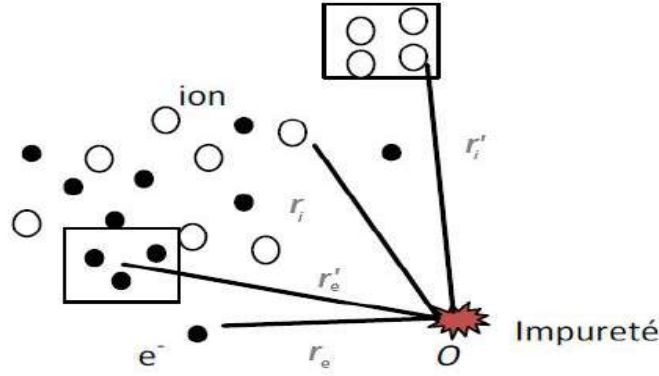
Simplification des équations intégrales (II-6):

$$\begin{cases} V_e(r) = V_{me}(r) + e^2 \iint \frac{f_e(\vec{r}'_e, \vec{p}_e)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}_e d\vec{r}'^3 - Ze^2 \iint \frac{f_i(\vec{r}'_i, \vec{p}_i)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}_i d\vec{r}'^3 \\ V_i(r) = V_{mi}(r) + (Ze)^2 \iint \frac{f_i(\vec{r}'_i, \vec{p}_i)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}_i d\vec{r}'^3 - Ze^2 \iint \frac{f_e(\vec{r}'_e, \vec{p}_e)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}_e d\vec{r}'^3 \end{cases}$$

Où : $f_e(\vec{r}'_e, \vec{p}_e)$, $f_i(\vec{r}'_i, \vec{p}_i)$ sont successivement les distributions de Maxwell-Boltzmann pour les électrons et les ions .

$$\begin{cases} f_e(\vec{r}'_e, \vec{p}_e) = n_e \left(\frac{\beta}{2\pi m_e} \right)^{3/2} e^{-\beta \left(\frac{p_e^2}{2m_e} + V_e(r) \right)} \\ f_i(\vec{r}'_i, \vec{p}_i) = n_i \left(\frac{\beta}{2\pi m_i} \right)^{3/2} e^{-\beta \left(\frac{p_i^2}{2m_i} + V_i(r) \right)} \end{cases}$$

Pour le potentiel des électrons :



Figure(A-1): l'impureté, les électrons et les ions dans le plasma.

$$V_e(r) = V_{me}(r) + e^2 \iint \frac{f_e(\vec{r}'_e, \vec{p}_e)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}_e d\vec{r}'^3 - Ze^2 \iint \frac{f_i(\vec{r}'_i, \vec{p}_i)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}_i d\vec{r}'^3 \quad (\text{A-1})$$

$$V_e(r) = -Z_m e^2 V_{me}(r) + n_e e^2 \int e^{-\beta V_e(r)} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 - Ze^2 n_i \iint e^{-\beta V_e(r)} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 \quad (\text{A-2})$$

$$\begin{aligned} V_e(r) = & -Z_m e^2 V_e(r) + 4\pi n_e e^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} [(r+r') - |r-r'|] e^{-\beta V_e(r')} dr' \\ & - 4\pi n_i Ze^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} [(r+r') - |r-r'|] e^{-\beta V_i(r')} dr' \end{aligned} \quad (\text{A-3})$$

On pose $n_e = Zn_i$

donc on trouve :

$$\begin{aligned} V_e(r) = & -Z_m e^2 V_{me}(r) + 4\pi n_e e^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} [(r+r') - |r-r'|] e^{-\beta V_e(r')} dr' \\ & - 4\pi n_e e^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} [(r+r') - |r-r'|] e^{-\beta V_i(r')} dr' \end{aligned} \quad (\text{A-4})$$

$$V_e(r) = -Z_m e^2 V_{me}(r) + 4\pi n_e e^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} [(r+r') - |r-r'|] [e^{-\beta V_e(r')} - e^{-\beta V_i(r')}] dr' \quad (\text{A-5})$$

Adimensionnement de l'équation :

On pose :

$$Y_e = \frac{-a_e V_e}{Ze^2}, Y_i = \frac{-a_i V_i}{(Ze)^2}, \text{ et } x = \frac{r}{a}$$

$$\Gamma_e = \frac{\beta e^2}{a_e}, \Gamma_i = \frac{\beta (Ze)^2}{a_i}, \text{ donc } -\beta V_i = \frac{\beta (Ze)^2}{a_i} Y_i = \Gamma_i Y_i$$

$$a_e = \left(\frac{3}{4\pi n_e} \right)^{1/3} \rightarrow n_e = \frac{3}{4\pi a_e^3}, a_i = \left(\frac{3}{4\pi n_i} \right)^{1/3}$$

donc l'équation devient :

$$Y_e(x) = \frac{Z_m}{Z} Y_{me}(x) - \frac{3}{Z} \int_0^\infty \frac{x'}{x} [(x+x') - |x-x'|] [e^{Z\Gamma_e Y_e(x')} - e^{-\Gamma_i Y_i(x')}] dx' \quad (\text{A-6})$$

Pour le potentiel des ions :

$$V_i(r) = +V_{mi}(e^2 Z_m Z) - Ze^2 \int f(r_{ion}, r'_e) e^{V_e(r')} dr' + Z^2 e^2 \int f(r_{ion}, r'_{ion}) e^{V_i(r')} dr'$$

$$V_i(r) = +(Z_m Ze^2) V_{mi}(r) - Ze^2 n_e \int e^{-\beta V_e(r')} \frac{1}{|r-r'|} d\vec{r}'^3 - Z^2 e^2 n_i \iint e^{-\beta V_e(r')} \frac{1}{|r-r'|} d\vec{r}'^3$$

puisque $n_e = Zn_i$

$$V_i(r) = +(Z_m Ze^2) V_{mi} - (Ze)^2 n_i \int e^{-\beta V_e(r')} \frac{1}{|r-r'|} d\vec{r}'^3 - (Ze)^2 n_i \iint e^{-\beta V_e(r')} \frac{1}{|r-r'|} d\vec{r}'^3$$

$$V_i(r) = +(Z_m Ze^2) V_{mi} + 4\pi (Ze)^2 n_i \int_0^\infty \frac{r'}{r} [(r+r') - |r-r'|] [e^{-\beta V_i(r')} - e^{-\beta V_e(r')}] dr'$$

adimensionnement de l'équation:

$$Y_i(x) = \frac{-Z_m}{Z} Y_{mi}(x) + 3 \int_0^\infty \frac{x'}{x} [(x+x') - |x-x'|] [e^{Z\Gamma_e Y_e(x')} - e^{-\Gamma_i Y_i(x')}] dx' \quad (\text{A-7})$$

donc les équations doublées sont :

$$Y_e(x) = \frac{Z_m}{Z} Y_{me}(x) - \frac{3}{Z} \int_0^\infty \frac{x'}{x} [(x+x') - |x-x'|] [e^{Z\Gamma_e Y_e(x')} - e^{-\Gamma_i Y_i(x')}] dx'$$

$$Y_i(x) = \frac{-Z_m}{Z} Y_{mi}(x) + 3 \int_0^\infty \frac{x'}{x} [(x+x') - |x-x'|] [e^{Z\Gamma_e Y_e(x')} - e^{-\Gamma_i Y_i(x')}] dx'$$

lorsque nous prenons le même nombre de charge de l'impureté on trouve :

$$Y_e(x) = Y_{me}(x) - \frac{3}{Z} \int_0^\infty \frac{x'}{x} [(x+x') - |x-x'|] [e^{Z\Gamma_e Y_e(x')} - e^{-\Gamma_i Y_i(x')}] dx' \quad (\text{A-8})$$

$$Y_i(x) = Y_{mi}(x) + 3 \int_0^\infty \frac{x'}{x} [(x+x') - |x-x'|] [e^{Z\Gamma_e Y_e(x')} - e^{-\Gamma_i Y_i(x')}] dx' \quad (\text{A-9})$$

pour $Z = 1$, on trouve :

$$Y_i(x) = -Y_e(x)$$

qu'est bien vérifier par les calculs numériques, et pour $Z \neq 1$ on trouve:

$$Y_i(x) + Y_e(x) = Z Y_{me}(x) - Y_{mi}(x) \quad (\text{A-10})$$

L'équation (A-2) s'écrit en coordonnées sphériques:

$$V_e(r) = -Z_m e^2 V_{me}(r) + e^2 \int \left(n_e e^{-\beta V_e(r')} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - Z n_i e^{-\beta V_i(r')} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) d\vec{r}'^3$$

$$V_e(r) = -Z_m e^2 V_{me}(r) + e^2 \int_0^\infty d\vec{r}' \int_0^\pi d\varphi' \int_0^{2\pi} \frac{(n_e e^{-\beta V_e(r')} - Z n_i e^{-\beta V_i(r')}) r' \sin(\theta')}{[r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\psi)]^{1/2}} d\theta' \quad (\text{A-11})$$

où ψ est l'angle entre les deux vecteurs \vec{r} et \vec{r}' , voire la figure(A-2)

$$\cos(\psi) = \sin(\theta) \cdot \sin(\theta') \cdot \cos(\varphi - \varphi') + \cos(\theta) \cdot \cos(\theta') \quad (\text{A-12})$$

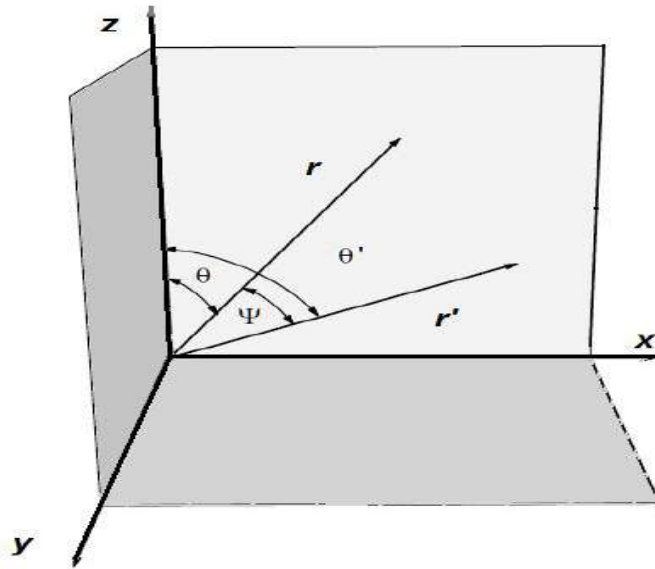
Si on suppose que le vecteur \vec{r} est situé sur l'axe oz ($\theta = 0$), alors l'équation (A-12) devient

$\cos(\psi) = \cos(\theta')$. Nous remplaçons cette expression dans (A-11) nous obtenons :

$$V_e(r) = -Z_m e^2 V_{me}(r) + e^2 \int_0^\infty d\vec{r}' \int_0^\pi d\varphi' \int_0^{2\pi} \frac{(n_e e^{-\beta V_e(r')} - Z n_i e^{-\beta V_i(r')}) r' \sin(\theta')}{[r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\theta')]^{1/2}} d\theta' \quad (\text{A-13})$$

Après l'intégration sur l'angle φ' et θ' , on aura :

$$V_e(r) = -Z_m e^2 V_{me}(r) + e^2 \int_0^\infty (n_e e^{-\beta V_e(r')} - Z n_i e^{-\beta V_i(r')}) \frac{r'}{r} [(r + r') - |r - r'|] d\vec{r}'$$



Figure(A-2): Représentation de l'angle ψ

Transformation de l'équation intégrale vers une équation différentielle:

$$\text{Si : } G(x) = \int_x^a f(x, t) dt \Rightarrow G'(x) = \frac{dG(x)}{dx} = \int_x^a \frac{df(x, t)}{dx} dt - f(x, x)$$

$$f(x) = \int_a^x g(x, t) dt$$

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

donc :

$$\begin{cases} Y_e(x) = \frac{Z_m}{Zx}(1 - e^{-x/\eta_e}) - \frac{3}{Z} \int_0^\infty \frac{x'}{x} (x + x' - |x - x'|) (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' \\ Y_e(x) = -\frac{Z_m}{x} e^{-x/\eta_i} - 3 \int_0^\infty \frac{x'}{x} (x + x' - |x - x'|) (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' \end{cases} \dots\dots\dots(\text{B-1})$$

Pour la première équation :

$$Y_e(x) = Y_{me} - \frac{3}{Z} \int_0^\infty \frac{x'}{x} (x + x' - |x - x'|) (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx'$$

$$Y_e(x) = Y_{me} - \frac{3}{Z} \int_0^x \frac{2x'^2}{x} (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' - \frac{3}{Z} \int_x^\infty 2x' (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx'$$

$$xY_e - xY_{me} = -\frac{3}{Z} \int_0^x 2x'^2 (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' - \frac{3}{Z} \int_x^\infty 2xx' (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx'$$

$$\Rightarrow (xY_e)' - (xY_{me})' = -\frac{3}{Z} 2x^2 (e^{Z\Gamma Y_e(x)} - e^{Z\Gamma Y_i(x)}) - \frac{3}{Z} \int_x^\infty 2x' (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' +$$

$$\frac{3}{Z} 2x^2 (e^{Z\Gamma Y_e(x)} - e^{Z\Gamma Y_i(x)})$$

$$(xY_e)' - (xY_{me})' = -\frac{3}{Z} \int_x^\infty 2x' (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx'$$

$$\Rightarrow (xY_e)'' - (xY_{me})'' = +\frac{3}{Z} 2x (e^{Z\Gamma Y_e(x)} - e^{Z\Gamma Y_i(x)})$$

$$xY_e'' + 2Y_e' = xY_{me}'' + 2Y_{me}' + \frac{3}{Z} 2x (e^{Z\Gamma Y_e(x)} - e^{Z\Gamma Y_i(x)})$$

donc l'équation différentielle équivalant au première équation intégrale est :

$$Y_e'' = \frac{2}{x} (Y_{me}' + Y_e') + Y_{me}'' + \frac{6}{Z} (e^{Z\Gamma Y_e(x)} - e^{Z\Gamma Y_i(x)}) \dots\dots\dots(\text{B-2})$$

Pour la deuxième équation:

$$Y_i(x) = Y_{mi} + 3 \int_0^\infty \frac{x'}{x} (x + x' - |x - x'|) (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' \dots\dots\dots(\text{B-3})$$

$$\begin{aligned}
Y_i(x) &= Y_{mi} + 3 \int_0^x \frac{x'}{x} (x + x' - |x - x'|) (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' + \\
& 3 \int_0^x \frac{x'}{x} (x + x' - |x - x'|) (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' \\
Y_i(x) &= Y_{mi} + 3 \int_0^x \frac{2x'^2}{x} (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' + 3 \int_x^\infty 2x' (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' \\
xY_i(x) &= xY_{mi} + 3 \int_0^x 2x'^2 (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' + 3 \int_x^\infty 2xx' (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' \\
xY_i' + Y_i &= xY_{mi}' + Y_{im} + 3 \times 2x^2 (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) + 3 \int_x^\infty 2x' (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) dx' - \\
& 3 \times 2x^2 (e^{Z\Gamma Y_e(x')} - e^{Z\Gamma Y_i(x')}) \\
\Rightarrow xY_i'' + 2Y_i' &= xY_{mi}'' + 2Y_{mi}' + 6x (e^{Z\Gamma Y_e(x)} - e^{Z\Gamma Y_i(x)})
\end{aligned}$$

Alors l'équation différentielle équivalant au deuxième intégrale est :

$$Y_i'' = \frac{2}{x} (Y_{mi}' - Y_i') + Y_{mi}'' + 6 (e^{Z\Gamma Y_e(x)} - e^{Z\Gamma Y_i(x)}) \dots\dots\dots(B-4)$$

donc le système des équations différentielles est

$$\begin{cases}
Y_e'' = \frac{2}{x} (Y_{me}' + Y_e') + Y_{me}'' + \frac{6}{Z} (e^{Z\Gamma Y_e(x)} - e^{Z\Gamma Y_i(x)}) \\
Y_i'' = \frac{2}{x} (Y_{mi}' - Y_i') + Y_{mi}'' + 6 (e^{Z\Gamma Y_e(x)} - e^{Z\Gamma Y_i(x)})
\end{cases}$$

Distribution de Baranger et Moser :

Considérons une collection de N électrons, immergés dans un fond uniforme d'ions positifs et neutralisant la totalité électrique, occupant le volume à la température T . On considère que l'interaction entre ces électrons est coulombienne.

On définit : $Q(\vec{\varepsilon})d\vec{\varepsilon}$ la probabilité de trouver le champ électrique $\vec{\varepsilon}$ égal $\vec{E} = \sum_{j=1}^N \vec{\varepsilon}_j$ au point chargé localisé à l'origine du système de coordonnées (où $Q(\vec{\varepsilon})$ est la densité de probabilité normalisée):

$$Q(\vec{\varepsilon}) = \langle \delta(\vec{\varepsilon} - \vec{E}) \rangle \equiv \frac{1}{Z_N} \int e^{-\beta\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)} \delta(\vec{\varepsilon} - \vec{E}(\vec{r}^N)) d\vec{r}^N \quad \text{..... (C-1)}$$

où: $Z_N = \int e^{-\beta\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)} \delta(\vec{\varepsilon} - \vec{E}(\vec{r}^N)) d\vec{r}^N$ est la fonction de partition, et $d\vec{r}^N = d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3, \dots, d\vec{r}_N$.

On définit aussi l'intégrale de la distribution tridimensionnelle de Dirac $\delta(\vec{x})$ par:

$$\delta(\vec{x}) = (2\pi)^3 \iiint e^{i\vec{\lambda} \cdot \vec{x}} d\lambda = (2\pi)^3 \int e^{i\vec{\lambda} \cdot \vec{x}} d\lambda \quad \text{..... (C-2)}$$

on note : $\iiint = \int$ et $i^2 = -1$ le nombre imaginaire.

introduisant l'expression (C-2) dans (C-1), nous obtenons :

$$Q(\vec{\varepsilon}) = \frac{(2\pi)^{-3}}{Z_N} \int_{\Omega} e^{-\beta\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)} \left(\int_{\vec{\lambda}} e^{i\vec{\lambda} \cdot (\vec{\varepsilon} - \vec{E}(\vec{r}^N))} d\vec{\lambda} \right) d\vec{r}^N \quad \text{.....(C-3)}$$

on peut écrire :

$$Q(\vec{\varepsilon}) = \frac{(2\pi)^{-3}}{Z_N} \int_{\Omega} e^{-\beta\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)} \left(\int_{\vec{\lambda}} e^{-i\vec{\lambda} \cdot \vec{E}(\vec{r}^N)} e^{i\vec{\lambda} \cdot \vec{\varepsilon}} d\vec{\lambda} \right) d\vec{r}^N \quad \text{.....(C-4)}$$

$$Q(\vec{\varepsilon}) = (2\pi)^{-3} \int_{\vec{\lambda}} \left[\frac{1}{Z_N} \int_{\Omega} e^{-\beta\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)} e^{-i\vec{\lambda} \cdot \vec{E}(\vec{r}^N)} d\vec{r}^N \right] e^{i\vec{\lambda} \cdot \vec{\varepsilon}} d\vec{\lambda} \quad \text{.....(C-5)}$$

on pose :

$$Q(\vec{\varepsilon}) = (2\pi)^{-3} \int_{\vec{\lambda}} T(\vec{\lambda}) e^{i\vec{\lambda} \cdot \vec{\varepsilon}} d\vec{\lambda} \quad \text{.....(C-6)}$$

où :

$$T(\vec{\lambda}) = \frac{1}{Z_N} \int_{\Omega} e^{-\beta\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)} e^{-i\vec{\lambda} \cdot \vec{E}(\vec{r}^N)} d\vec{r}^N \quad \text{..... (C-7)}$$

Vue à l'isotropie du problème, et faisant usage des coordonnées sphérique et on pose que le vecteur $\vec{\varepsilon}$ est sur l'axe Oz et l'angle θ avec $\vec{\lambda}$, l'équation (C-6) devient :

$$Q(\varepsilon) = (2\pi)^{-3} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} T(\lambda) e^{i\lambda\varepsilon \cos(\theta)} \lambda^2 \sin(\theta) d\varphi d\theta d\lambda \quad \text{.....(C-8)}$$

tel que le problème est dépend de module de vecteur.

$$Q(\varepsilon) = (2\pi)^{-2} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} T(\lambda) e^{i\lambda\varepsilon \cos(\theta)} \lambda^2 \sin(\theta) d\theta d\lambda \quad \text{.....(C-9)}$$

$$Q(\varepsilon) = (2\pi)^{-2} \int_0^\infty \lambda^2 T(\lambda) d\lambda \int_0^\pi e^{i\lambda\varepsilon \cos(\theta)} \sin(\theta) d\theta \quad \dots\dots\dots(C-10)$$

pour l'intégrale : $\int_0^\pi e^{i\lambda\varepsilon \cos(\theta)} \sin(\theta) d\theta$

On pose $x = i\lambda\varepsilon \cos(\theta) \Rightarrow dx = -i\lambda\varepsilon \sin(\theta) d\theta$, donc:

$$\begin{aligned} \frac{-1}{i\lambda\varepsilon} \int_{i\lambda\varepsilon}^{-i\lambda\varepsilon} e^x dx &= \frac{-1}{i\lambda\varepsilon} [e^{-i\lambda\varepsilon} - e^{i\lambda\varepsilon}] = \frac{-1}{i\lambda\varepsilon} [(\cos(\lambda\varepsilon) - i \sin(\lambda\varepsilon)) - (\cos(\lambda\varepsilon) + i \sin(\lambda\varepsilon))] \\ &= \frac{2}{\lambda\varepsilon} \sin(\lambda\varepsilon) \end{aligned}$$

Alors, $\int_0^\pi e^{i\lambda\varepsilon \cos(\theta)} \sin(\theta) d\theta = \frac{2}{\lambda\varepsilon} \sin(\lambda\varepsilon)$, et l'équation (C-10) devient :

$$Q(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2\varepsilon} \int_0^\infty \lambda T(\lambda) \sin(\lambda\varepsilon) d\lambda \quad \dots\dots\dots(C-11)$$

Si on considère que le système est isotrope, on a $Q(\varepsilon)$ est la densité de probabilité dans la surface d'un sphère de rayon ε , est égale à $P(\varepsilon) = (4\pi\varepsilon^2)Q(\varepsilon)$, alors on trouve :

$$P(\varepsilon) = \frac{2\varepsilon}{\pi} \int_0^\infty \lambda T(\lambda) \sin(\lambda\varepsilon) d\lambda \quad \dots\dots\dots(C-12)$$

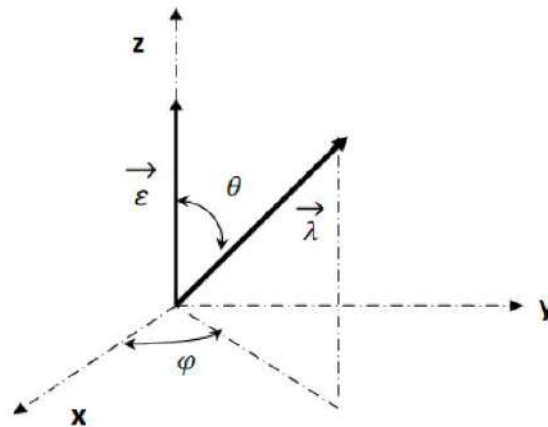
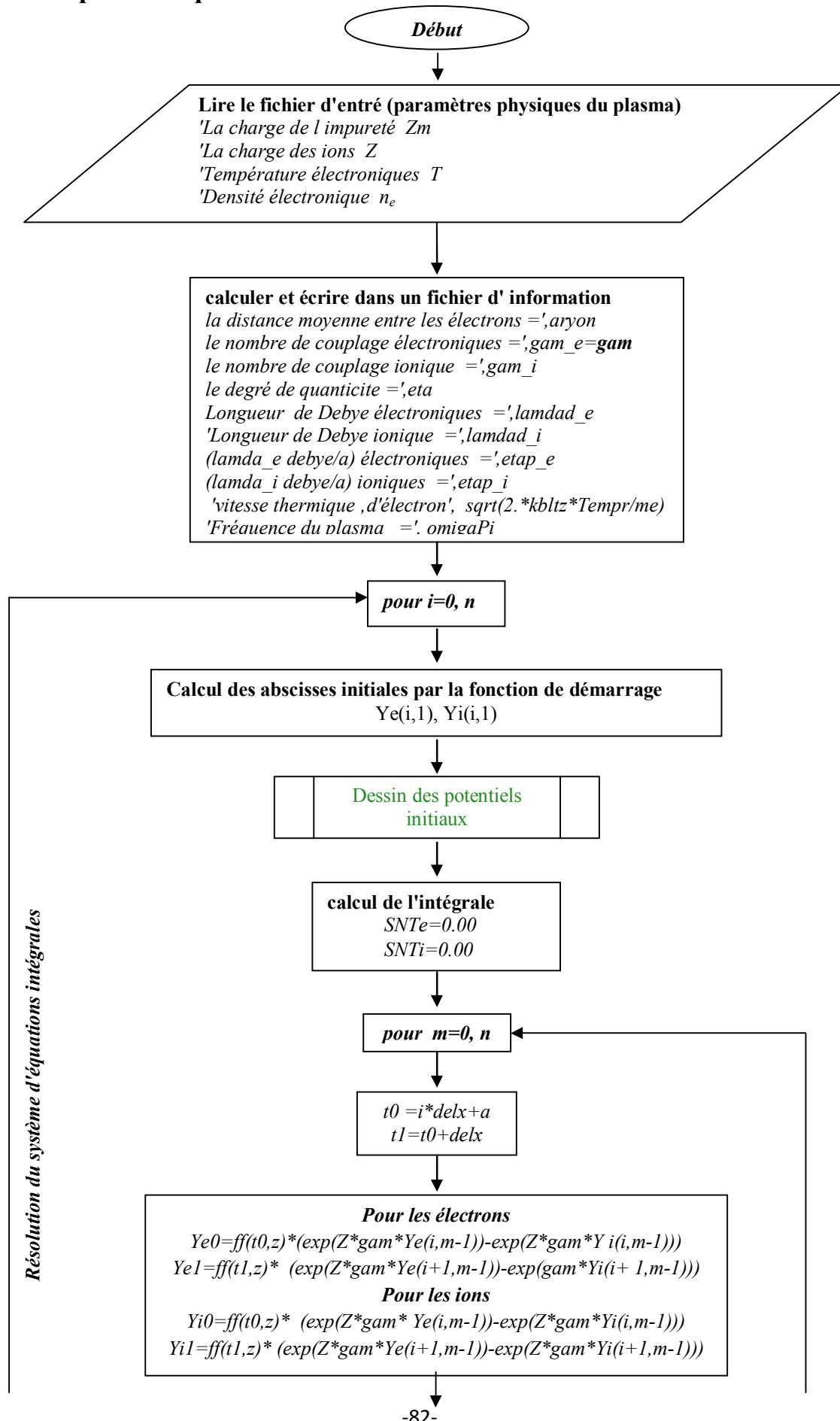
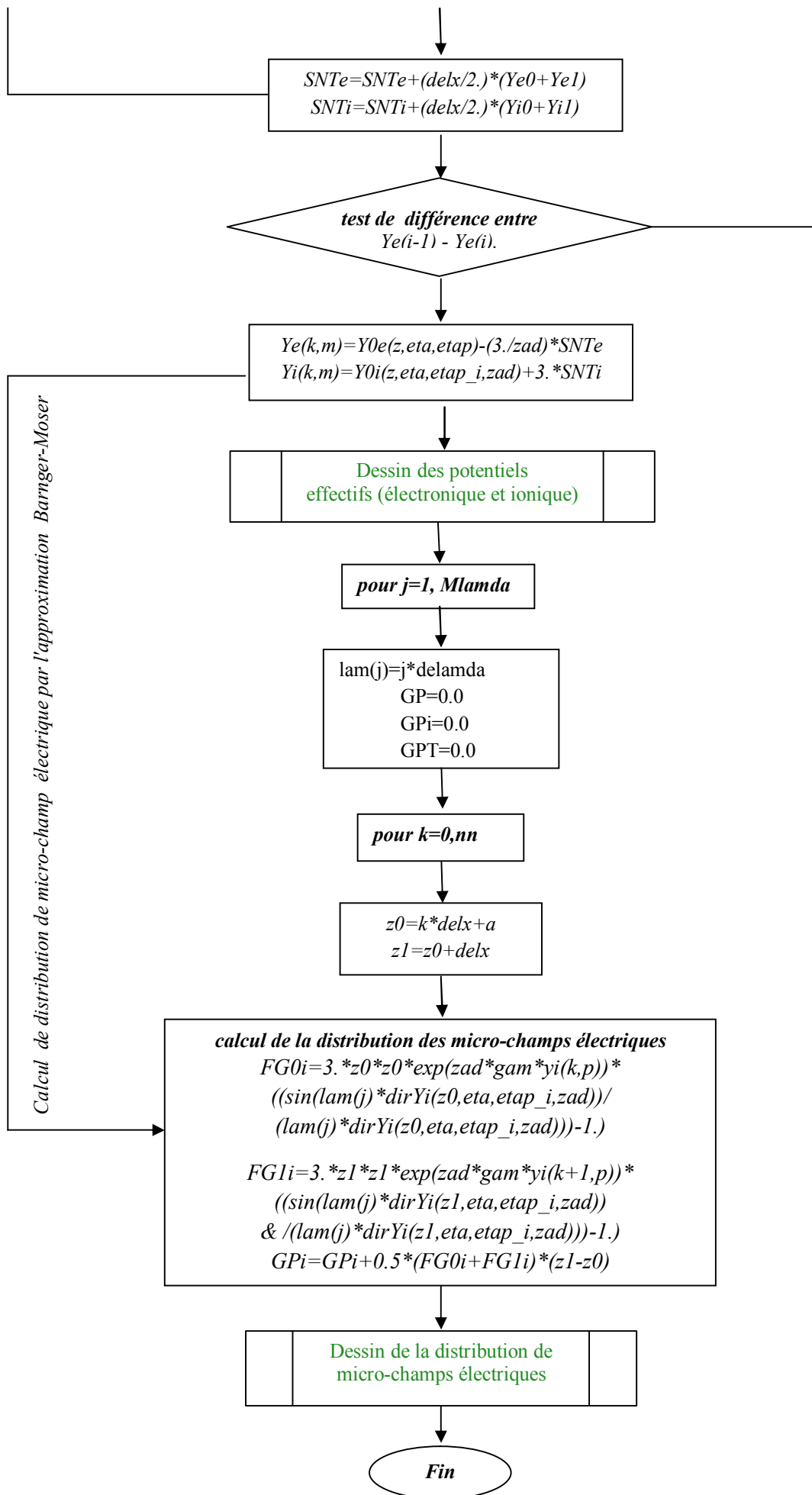


Figure (C-1): En coordonnées sphériques, vue de l'angle θ entre $\vec{\varepsilon}$ et $\vec{\lambda}$ où le vecteur $\vec{\varepsilon}$ est sur l'axe Oz .

2. Organigramme MPF et calcul de la distribution des micro-champs électriques:





Publication

ORIGINAL ARTICLE

Effect of electron–ion coupling on the electric microfield distribution in plasmas

K. Benbelgacem | S. Douis* | M.T. Meftah | N. Touahri

Department of Physics, LRPPS Laboratory, UKM
Ouargla University, Ouargla, Algeria***Correspondence**S. Douis, Department of Physics, LRPPS
Laboratory, UKM Ouargla University, Ouargla
30000, Algeria.
Email: fdouis@gmail.com

The electronic and ionic effective potential of a fully ionized hydrogen plasma containing an impurity of electric charge ($+Z_m e$) are calculated in a two-component plasma model under semiclassical conditions using classical statistical mechanics with a regularized electron–ion interaction. These effective potentials are coupled in a system of nonlinear integral equations (or coupled differential equations), which is solved numerically with two methods, namely the fixed-point method and the Runge–Kutta method. The Baranger–Moser electric microfield distributions are calculated and compared with those from molecular dynamics simulation. Agreement between theory and simulation is satisfactory, in general.

KEYWORDS

effective potential, electric microfield distribution, electron–ion coupling

1 | INTRODUCTION

Fully ionized systems comprised of charged particles are of fundamental interest in many fields of physics and chemistry. The simplest model of plasma is the so-called one-component plasma (OCP), which can be explained in two ways. The first considers the plasma as a system of identical ions, interacting exclusively through the Coulomb potential, and which are immersed in a rigid, uniform background of opposite charge (electrons), thus providing electrical neutrality.^[1] The second ignores the effects of ion movements on those of electrons because the ratio the mass an electron and an ion is about $m_e/m_i \approx 1/2,000$. So the system can be considered to compose of only one kind of mobile charges (electrons), whereas the species of opposite charge (ions) are modeled by a continuous background which provides electrical neutrality.^[2,3] The first method is useful for the description of ions, and enables us to calculate the effective potential of the ions. The second method is valid in describing the electron gas and calculating the electronic effective potential.^[3]

In this paper we study a fully ionized hydrogen plasma composed of electrons and positive ions in the new equilibrium state after a perturbation created by an impurity in the form of an electric charge ($+Z_m e$) embedded in this plasma medium. We use the two-component plasma (TCP) model without using the background concept, which enables us to study the electrons and ions at the same time and determine the electronic and ionic effective potentials together. The method is based on the establishment of a system of two nonlinear integral equations (second section) on which is based all the subsequent results of this paper. The first integral equation represents the potential energy of an electron of the plasma located at a distance (r) from the impurity. And the second represents the potential energy of an ion at the same distance from the impurity. The electronic potential energy is built as a sum of three contributions related to the following interactions: electron–impurity, electron–electron, and electron–ion. The ionic potential energy is built as a sum of three contributions related to ion–impurity, ion–electron, and ion–ion interactions. For electron–electron and ion–ion interaction, the Coulomb forces between point charges, which do not get very close to each other almost always, are purely repulsive. Concerning the ion–electron interaction, it is clear that it requires a quantum mechanical description. In this case, the Coulomb potential is replaced by the finite and regularized potential (screened-Deutsch) at the origin $V_{me}(r) = -\frac{Z_m e^2}{r} / (1 - e^{-r/\lambda_T}) e^{-r/\lambda_{De}}$,^[4–6] where λ_{De} is the Debye length and λ_T is the thermal De Broglie wavelength. The impurity–ion interaction is taken as the Debye interaction.

In the third section we will solve numerically the nonlinear coupled integral equation system (CIES) with two different methods, namely the fixed-point method (FPM)^[7,8] and the Runge–Kutta method (RKM),^[9] for some cases of hydrogen plasma density and temperature (first case: $n_e = 8.12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ and $T = 502.5 \text{ K}$; and second case: $n_e = 1.59 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ and $T = 3141 \text{ K}$). We will also compare the results obtained by the two methods with the molecular dynamics (MD) simulation.

The fourth section is concerned with the calculation of the distribution function of the electric microfield, which we compare with the MD results; we also study the case in which $Z = 5$, $n_e = 1.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, and $T = 3150 \text{ K}$.

2 | ESTABLISHMENT OF THE COUPLED INTEGRAL EQUATIONS OF THE EFFECTIVE POTENTIAL ENERGY

Let an electrically charged medium of volume Ω consist of N_e electrons with charge $(-e)$ and mass m_e and N_i ions with charge $(+Ze)$ and mass m_i , where Z is the atomic number. Initially, the spatial momentum distribution of the electrons and ions follows the Maxwell–Boltzmann equilibrium governing the system.

If we place a positive ion of charge $(+Z_m e)$ (called test charge or impurity) at the coordinate origin, the system is disturbed and then, after a certain time t , it will reach a new equilibrium state.

The potential energy $V_e(r)$ of an electron located at position r of the impurity's original location when the system reaches a new equilibrium state can be written as

$$V_e(r) = V_{me}(r) + V_{ee}(r) + V_{ei}(r). \quad (1)$$

In the same way, the potential energy $V_i(r)$ of an ion located at position r of the impurity can be written as

$$V_i(r) = V_{mi}(r) + V_{ii}(r) + V_{ie}(r), \quad (2)$$

where $V_{me}(r)$ is the potential energy of the impurity–electron interaction, $V_{ee}(r)$ is the interaction energy of the electron with all the other electrons, $V_{ei}(r)$ is the interaction energy of the electron with all the other ions, $V_{mi}(r)$ is the potential energy of impurity–ion interaction, $V_{ii}(r)$ is the interaction energy of the ion with all the other ions, and $V_{ie}(r)$ is the interaction energy of the ion with all the other electrons.

The impurity–electron interaction is taken in such a way that we can take into account both quantum mechanical effects of diffraction at short distances and also screening field effects at large distances; we represent it here by the following pseudo-potential:^[4–6]

$$V_{me}(r) = -\frac{Z_m e^2}{r} (1 - e^{-r/\lambda_T}) e^{-r/\lambda_{De}}, \quad (3)$$

where $\lambda_{De} = (K_B T / (4\pi n_e e^2))^{1/2}$ is the electronic Debye length, and $n_e = N_e / \Omega$ is the electron density. We consider the electrons and ions to have the same temperature $T_e = T_i = T$.

The impurity–ion interaction is taken as the Debye interaction:

$$V_{mi}(r) = \frac{Z_m Z e^2}{r} e^{-r/\lambda_{Di}}, \quad (4)$$

where $\lambda_{Di} = (K_B T / (4\pi n_i (Ze)^2))^{1/2}$ is the ionic Debye length, and $n_i = N_i / \Omega$ is the ion density, where $n_e = Zn_i$. The electron–electron, electron–ion, ion–ion, and ion–electron interactions are of the Coulomb potential energy type.

In the mean field approximation, Equations (1) and (2) are equal to

$$\begin{cases} V_e(r) = V_{me}(r) + e^2 \iint \frac{f_e(\vec{r}_e, \vec{p}_e)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}_e^3 d\vec{r}'^3 - Ze^2 \iint \frac{f_i(\vec{r}_i, \vec{p}_i)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}_i^3 d\vec{r}'^3, \\ V_i(r) = V_{mi}(r) + (Ze)^2 \iint \frac{f_i(\vec{r}_i, \vec{p}_i)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}_i^3 d\vec{r}'^3 - Ze^2 \iint \frac{f_e(\vec{r}_e, \vec{p}_e)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}_e^3 d\vec{r}'^3, \end{cases} \quad (5)$$

where $f_e(\vec{r}_e, \vec{p}_e)$ is the Maxwell–Boltzmann distribution for the electrons and $f_i(\vec{r}_i, \vec{p}_i)$ is that for the ions:

$$\begin{cases} f_e(\vec{r}, \vec{p}) = n_e \left(\frac{\beta}{2\pi m_e} \right)^{3/2} e^{-\beta \left(\frac{\vec{p}_e^2}{2m_e} + V_e(r) \right)}, \\ f_i(\vec{r}, \vec{p}) = n_i \left(\frac{\beta}{2\pi m_i} \right)^{3/2} e^{-\beta \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + V_i(r) \right)}, \end{cases} \quad (6)$$

where \vec{p}_e is the momentum of the electron and \vec{p}_i that of the ion.

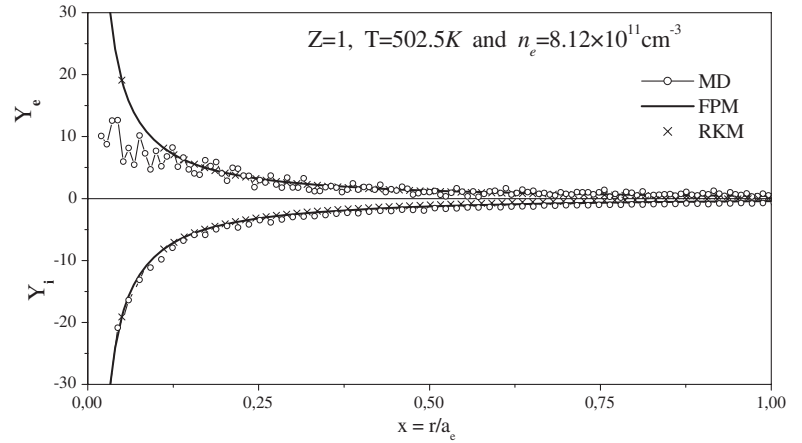


FIGURE 1 Effective potential energy of electron Y_e and ions Y_i for $Z = 1$, $T = 502.5$ K, and $n_e = 8.12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, computed with the fixed-point method (solid line), Runge–Kutta method (times), and molecular dynamics (circles).

Using spherical coordinates and some basic calculations, the last system (5) is transformed into the following:

$$\begin{cases} V_e(r) = -\frac{Z_m e^2}{r} (1 - e^{-r/\lambda_T}) e^{-r/\lambda_{De}} + 4\pi n_e e^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} (r + r' - |r - r'|) (e^{-\beta V_e(r')} - e^{-\beta V_i(r')}) dr', \\ V_i(r) = \frac{Z_m Z e^2}{r} e^{-r/\lambda_{Di}} - 4\pi Z e^2 n_i \int_0^\infty \frac{r'}{r} (r + r' - |r - r'|) (e^{-\beta V_e(r')} - e^{-\beta V_i(r')}) dr'. \end{cases} \quad (7)$$

In order to avoid problems related to the units of the different parameters present in this system, it is convenient to express (7) in a dimensionless form; we put the dimensionless electric potential energy as $Y_e = -a_e V_e / (Ze^2)$, where $a_e = (3/(4\pi n_e))^{1/3}$ is the average distance of the electrons. The dimensionless ionic potential energy is $Y_i = -a_e V_i / (Ze^2)$, where $a_i = (3/(4\pi n_i))^{1/3}$ is the average distance of the ion. The dimensionless distance $x = r/a_e$. The quantity degree $\eta = \lambda_T/a_e$. The electronic coupling number $\Gamma_e = \beta e^2/a_e$, and the ionic coupling number is given by $\Gamma_i = \beta (Ze)^2/a_i$. And we put $\eta_e = \lambda_{De}/a_e$, and $\eta_i = \lambda_{Di}/a_e$.

After that, we obtain the desired dimensionless equation system as

$$\begin{cases} Y_e(x) = \frac{Z_m}{Zx} (1 - e^{-x/\eta}) e^{-x/\eta_e} - \frac{3}{Z} \int_0^\infty \frac{x'}{x} (x + x' - |x - x'|) (e^{Z\Gamma_e Y_e(x')} - e^{Z\Gamma_e Y_i(x')}) dx', \\ Y_i(x) = -\frac{Z_m}{x} e^{-x/\eta_i} + 3 \int_0^\infty \frac{x'}{x} (x + x' - |x - x'|) (e^{Z\Gamma_e Y_e(x')} - e^{Z\Gamma_e Y_i(x')}) dx'. \end{cases} \quad (8)$$

3 | NUMERICAL SOLUTION OF THE SYSTEM OF INTEGRAL EQUATIONS FOR THE POTENTIAL ENERGY

We can solve the nonlinear system of integral equations (CIES) (8) by FPM starting with the initial function equal to the initial potentials V_{me} for the first equation and V_{mi} for the second one. We can also solve this system by transforming it into a system of second-order nonlinear differential equations, which we solve with RKM.

$$\begin{cases} Y_e'' = \frac{2}{x} (Y_{me}' - Y_e') + Y_{me}'' + \frac{6}{Z} (e^{Z\Gamma_e Y_e(x)} - e^{Z\Gamma_e Y_i(x)}), \\ Y_i'' = \frac{2}{x} (Y_{mi}' - Y_i') + Y_{mi}'' + 6 (e^{Z\Gamma_e Y_e(x)} - e^{Z\Gamma_e Y_i(x)}), \end{cases} \quad (9)$$

where

$$\begin{cases} Y_{me}' = \frac{Z_m}{Z} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{x} (1 - e^{-x/\eta}) e^{-x/\eta_e} \quad \text{and} \quad Y_{me}'' = \frac{\partial Y_{me}'}{\partial x}, \\ Y_{mi}' = -Z_m \frac{\partial}{\partial x} \frac{e^{-x/\eta_i}}{x} \quad \text{and} \quad Y_{mi}'' = \frac{\partial Y_{mi}'}{\partial x}, \end{cases}$$

with initial conditions as $Z = 1$:

$$\begin{cases} Y_e(0) \approx 1/\eta_e, & Y_e'(0) \approx -(\eta_i/2\eta_e)/\eta_e\eta_i, \\ Y_i(0) \approx -Y_e(0), & Y_i'(0) \approx -Y_e'(0). \end{cases}$$

The numerical solution of the nonlinear system of integral equations (8) by FPM and the solution of the nonlinear system of differential equations (9) in the some cases give the effective potential energy of electrons Y_e and ions Y_i as shown in Figures 1 and 2.

The comparison between the effective potential found in the OCP and TCP models is shown in Figure 3.

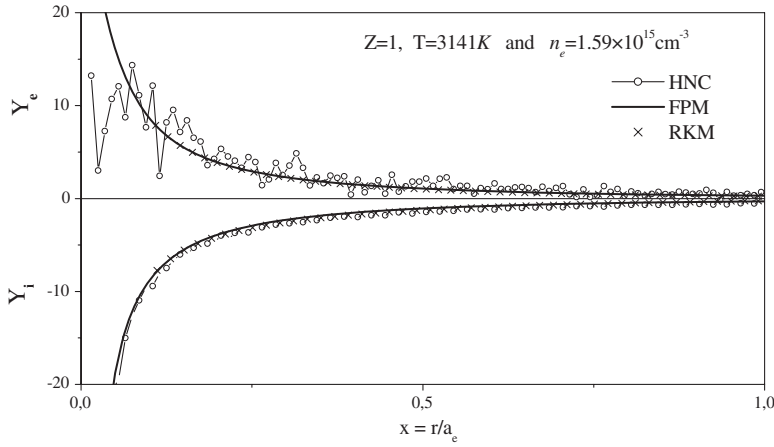


FIGURE 2 Effective potential energy of electron Y_e and ions Y_i for $Z = 1$, $T = 3141\text{ K}$, and $n_e = 1.59 \times 10^{15}\text{ cm}^{-3}$, computed with the fixed-point method (solid line), Runge–Kutta method (times), and molecular dynamics (circle).

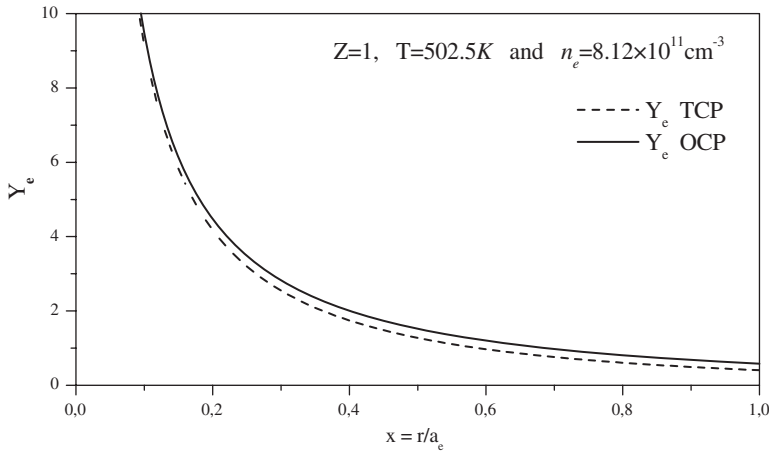


FIGURE 3 Comparison between the effective potential energy of electron Y_e in the one-component plasma (OCP) (solid line) and two-component plasma (TCP) (dashed line) models, for $Z = 1$, $T = 502.5\text{ K}$, and $n_e = 8.12 \times 10^{11}\text{ cm}^{-3}$.

4 | ELECTRICAL MICROFIELD DISTRIBUTION

The electric microfield distribution (EMD) influences many elementary processes in a plasma (ionization, recombination, and dissociation) and governs a number of its optical properties. The EMD is the sum of the elementary fields (E) created by a very large number of elementary charges of the plasma at a fixed charged or neutral point. Because there exist two different timescales in a plasma, the determination of the EMD is divided into two parts. The first, called the high-frequency component of the microfield, appears when the timescales are comparable to the electron relaxation time, where the plasma medium may be considered as a gas of electrons immersed in a uniform neutralizing background of positive electrical charges of ions.^[3] The second, concerning the low-frequency component of the microfield and appearing on the scale of the ion's relaxation time, is then introduced by noting that it is governed by the dynamics of the ions.

In this section we determine the EMD by using the Baranger–Mozer approximation^[10] where the effective potential energy is determined by the numerical solution of the system (8) by FPM.

The probability of existence of an electrical microfield at the impurity ion equal to ε is given, in the Baranger–Mozer approximation^[10–13] by

$$P(\varepsilon) = \frac{2\varepsilon}{\pi} \int_0^\infty T(\lambda) \sin(\varepsilon\lambda) \lambda d\lambda, \quad (10)$$

where

$$T(\lambda) = e^{G(\lambda)} \quad (11)$$

and

$$G(\lambda) = 4\pi \int_0^\infty r^2 e^{-\beta V(r)} \left[\frac{1}{\lambda \varepsilon(r)} \sin(\lambda \varepsilon(r)) - 1 \right] dr \quad (12)$$

or, in the dimensionless form (10) and (12), we find

$$\bar{P}(\bar{\varepsilon}) = \varepsilon_0 P(\varepsilon) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty (\lambda \bar{\varepsilon}) \sin(\lambda \bar{\varepsilon}) e^{G(\lambda/\varepsilon_0)} d\lambda \quad (13)$$

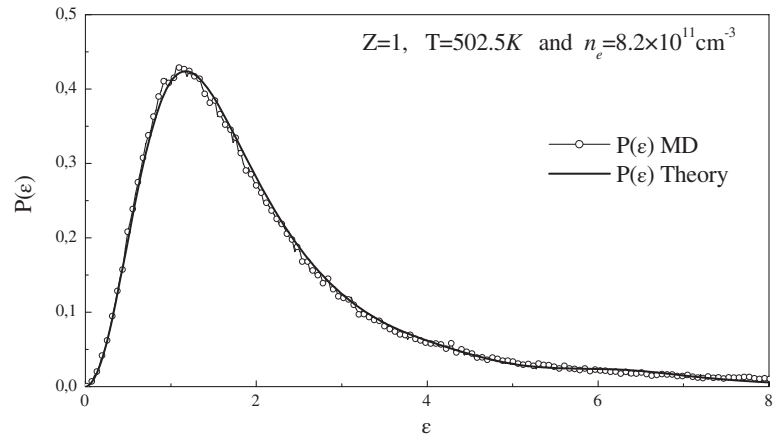


FIGURE 4 Microfield distribution $P(\epsilon)$ in two-component plasmas for $Z = 1$, $T = 502.5$ K, and $n_e = 8.12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$: (circle) molecular dynamics simulation and (solid line) Baranger–Mozer approximation.

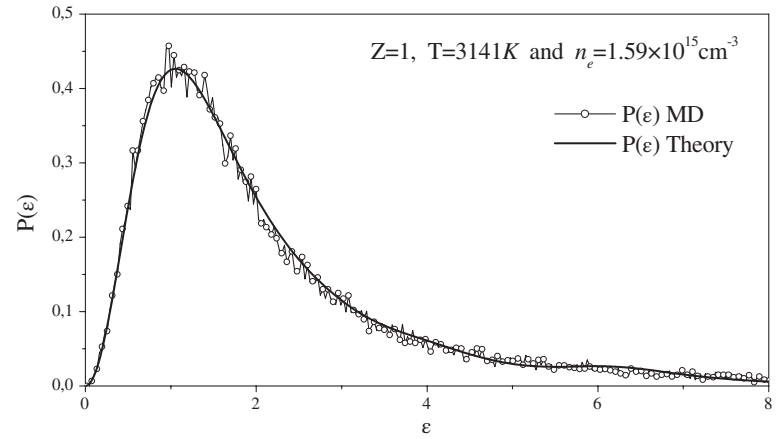


FIGURE 5 Microfield distribution $P(\epsilon)$ in two-component plasmas for $Z = 1$, $T = 3141$ K, and $n_e = 1.59 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$: (circle) molecular dynamics simulation and (solid line) Baranger–Mozer approximation.

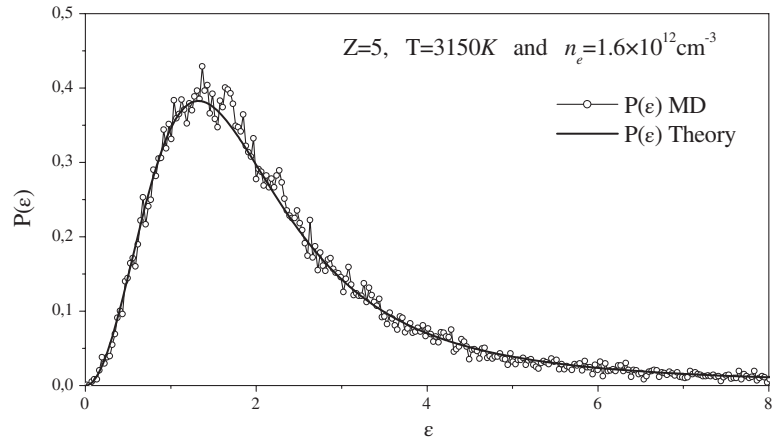


FIGURE 6 Microfield distribution $P(\epsilon)$ in two-component plasmas for $Z = 5$, $T = 3150$ K, and $n_e = 1.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$: (circle) molecular dynamics simulation and (solid line) Baranger–Mozer approximation.

and

$$\bar{G}(\lambda) = G(\lambda/\epsilon_0) = 3 \int_0^\infty x^2 e^{Z\Gamma Y_c(x)} \left[\frac{1}{\lambda Y'_{me}(x)} \sin(\lambda Y'_{me}(x)) - 1 \right] dx \quad (14)$$

such that $\epsilon_0 = e/a_e^2$.

In Figures 4 and 5 we present the comparison of EMD with the Baranger–Mozer approximation (based on the effective potential (1)) and MD, for some cases ($n_e = 8.12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, $T = 502.5$ K, and $n_e = 1.59 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $T = 3141$ K). These figures show the good agreement between the theoretical results and the MD simulation results.

The agreement between theory and simulation is quite good, in general, which confirms the effectiveness of our method.

In Figure 6 we present the same comparison for $Z = 5$, $n_e = 1.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, and $T = 3150$ K.

5 | CONCLUSION

We have demonstrated in this paper that we can solve the integral equation governing the effective potential around an impurity imbedded in a plasma containing two kinds of charges (electrons and ions) by PFM, or we can transform this integral equation to a differential equation of second degree which we then solve by RKM. The solution with these methods gives the electronic and ionic effective potentials, which agree with those obtained using MD. The application of these effective potentials in the Baranger–Mozer approximation also gives the microfield distributions, which are compatible with the simulation results of MD. So we recommend the use of these methods because they are very fast (compared to MD simulation) and very efficient.

REFERENCES

- [1] M. Bau, J. P. Hansen, *Phys. Rep.* **1980**, 59, 3.
- [2] M. Berkovsky, J. Dufty, A. Calisti, R. Stamm, B. Talin, *Phys. Rev. E* **1996**, 54, 4087.
- [3] S. Douis, M. T. Meftah, *J. Theor. Appl. Phys.* **2013**, 7, 2.
- [4] C. Deutsch, *Phys. Lett.* **1977**, A 60, 317.
- [5] C. Deutsch, M. Gombert, H. Minoos, *Phys. Lett. A* **1978**, 66, 381.
- [6] H. Minoos, M. Gombert, C. Deutsch, *Phys. Rev.* **1981**, A 23, 924.
- [7] L. M. Deleves, J. Walsh, *Numerical Solution of Integral Equations*, Clarendon Press, Oxford **1974**.
- [8] S. A. R. Al-Mezel, F. R. M. Al-Solamy, Q. H. Ansari, *Fixed Point Theory, Variational Analysis, and Optimization*, CRC Press, Boca Raton, FL, pp. 2014.
- [9] J. D. Huffman, ed., *Numerical Methods for Engineers and Scientists*, Marcel Dekker, New York, pp. 2001.
- [10] M. Baranger, B. Mozer, *Phys. Rev.* **1959**, 115, 521.
- [11] B. Mozer, M. Baranger, *Phys. Rev.* **1960**, 118, 626.
- [12] C. F. Hooper, *Phys. Rev.* **1966**, 149, 77.
- [13] M. Romanovsky, W. Ebeling, *Contrib. Plasma Phys.* **2006**, 46, 195.

How to cite this article: K. Benbelgacem, S Douis, MT Meftah, and N Touahri. Effect of electron–ion coupling on the electric microfield distribution in plasmas. *Contrib. Plasma Phys.* 2017;57:176–181. <https://doi.org/10.1002/ctpp.201700005>

Résumé:

Dans ce travail, notre objectif a été de souligner l'importance du calcul et de l'évaluation de l'opérateur de collision électronique dans le plasma, en réalisant une étude comparative entre trois modèles différents (Nguyen, Griem, Spiros). Où, au cours de cette étude, nous avons réussi à calculer le potentiel électrique effectif dans le cas du plasma à deux composants (TCP), en résolvant un système d'équations intégrales non linéaires décrivant le potentiel effectif dans le cas du plasma à deux composants, par deux méthodes différentes; la méthode de point fixe MPF et la méthode de Runge Kutta MRK, qui a donné des résultats étonnants par rapport à la simulation de la dynamique moléculaire, pour les propriétés statistiques de la distribution du micro-champ électrique, fonctions de autocorrélation, et les valeurs propres de l'opérateur de collision électronique et son effet dans le plasma,

Mots clés: *Potentiel effectif, Micro-champ électrique, Distribution de micro-champs, Plasma à deux composants, Fonction d'auto-corrélation, Opérateur de collision électronique.*

«Comparative study between different models of the electronic collision operator in plasma TCP »

Abstract:

In this work, our goal was to highlight the importance of calculating and evaluating the electronic collision operator in the plasma, by handling a comparative study between three different models (Nguyen, Griem, Spiros). Where, during this study we have successfully calculated the effective electrical potential in the two-component plasma (TCP) case, which gave a valuable results compared to molecular dynamics simulation in similar cases, for the statistical properties of the electrical micro field distribution, correlation functions, and the eigenvalues of the electronic collision operator and its effect in the plasma, by solving a nonlinear integral equations system describing the effective potential in the two-component plasma case, by two different ways.

Keywords: *Effective potential, Electrical microfield, Microfield distribution, Two-component plasma, Self-correlation functions, Electronic collision operator.*

« دراسة مقارنة بين نماذج مختلفة لمؤثر التصادم الإلكتروني في البلازما الثنائية المكون »

ملخص :

في عملنا هذا، كان هدفنا هو تسليط الضوء على أهمية حساب مؤثر التصادم الإلكتروني في البلازما، من خلال إجراء دراسة مقارنة بين ثلاث نماذج مختلفة في حسابه (نويان، غريم، سبيروس)، حيث خلال هذه الدراسة قمنا و بنجاح بحساب الكمون الكهربائي الفعال في حالة البلازما الثنائية المكون (ب-ث-م)، و التي أعطت نتائج قيمة مقارنة بمحاكاة الديناميكا الجزيئية، في حالات مماثلة، لحساب الخصائص الإحصائية لتوزيع الحقول الكهربائية المجهرية، و دوال الارتباط و القيم الذاتية لمؤثر التصادم الإلكتروني في البلازما، عن طريق حل نظام المعادلات التكاملية الغير خطية الواصفة للكمون الفعال باعتبار البلازما الثنائية المكون، بطريقتين مختلفتين.

الكلمات المفتاحية: *الكمون الفعال، الحقل الكهربائي المجهرية، توزيع الحقول الكهربائية، البلازما ثنائية المكون، مؤثر التصادم الإلكتروني.*