

THE. PH. 00/68/19



N° d'ordre :
N° de série :

CENTRE UNIVERSITAIRE DE OUARGLA
Institut des Sciences Exactes
Département de Physique

Thèse

Présentée pour l'obtention du diplôme de :

MAGISTERE

Spécialité : Physique

Option : Physique énergétique

Par : *Saïd DOUIS*

Thème :

**LES PROPRIETES STATIQUES ET
DYNAMIQUES D'UN GAZ D'ELECTRONS
DANS LA THEORIE DU CHAMP MOYEN**

Soutenu publiquement le : 12/Avril/ 2000

Devant le Jury composé de :

Mr : F. Khelfaoui	M. C (C. U. Ouargla)	Président
Mr : M. S. Aïda	M. C (U. Constantine)	Examinateur
Mr : F. Benamira	M. A. C. C (U. Constantine)	„
Mr : H. Bouguettaia	M. A. C. C (C. U. Ouargla)	„
Mr : A. Boukraa	M. A. C. C (C. U. Ouargla)	„
Mr : M. T. Meftah	M. C (C. U. Ouargla)	Rapporteur

*A Ma Mère
A Mon Père*

Remerciements



Je tiens à remercier Monsieur Mohammed Tayeb Meftah d'avoir accepté de rapporter cette thèse, sa constante disponibilité, ses encouragements, son aide, ses conseils et l'intérêt qu'il a manifesté à ce travail, m'ont permis de mener à bien cette étude. Qu'il trouve ici l'expression de ma sincère reconnaissance.

Je remercie Monsieur F. Khelfaoui de m'avoir fait l'honneur de présider le jury.

J'adresse aussi mes remerciements à Monsieur F. Benamira et à Monsieur M. S. Aida de l'université de Constantine, d'avoir bien voulu faire partie du jury malgré leurs nombreuses obligations.

Je remercie également Monsieur A. Boukraa et H. Bouguettaia de l'université de Ouargla, d'accepter de faire partie du jury.

Je tiens à remercier Monsieur B. Talin Directeur de Recherche à (PIIM) Marseille pour la partie de la dynamique moléculaire.

Je ne saurais oublier Monsieur James W. Dufty Professeur à l'université de Florida pour sa lettre et ses précieuses, remarques et suggestions.

Je remercie Monsieur M. Douis pour ses aides.

Je remercie aussi mes frères Mohamed et Abdelkrime pour leurs aides.

Enfin je remercie B. Bekhetti pour ses encouragements et ses aides.

Nomenclature

Symbole	Définition	Equation
Γ	Le nombre du couplage	(I.5)
η	Le degré de quanticité.	(I.6)
λ_D	Longueur de Deby	(I.3)
Z	Le nombre de charge	
l_L	Longueur de Landau	(I.2)
λ_T	Longueur thermique	
$n(r)$	La densité électronique locale	(I.30)
n_0	La densité électronique initiale	
a	La distance moyenne approchée entre les électrons	(I.1)
Λ	La longueur de Louis de Broglie	
p	La quantité du mouvement	
H	Hamiltonien du système	
Z_N	La fonction de partition	(II.46)
S	L'entropie du système	
U	L'énergie interne du système.	(II.44)
$\Phi(r)$	L'énergie potentielle dimensionnée	(I.21)
$Y(x)$	L'énergie potentielle adimensionnée	(I.26)
$f(r, p)$	La fonction de distribution de Maxwelle Boultzmann	(I.16)
$P(\varepsilon)$	La distribution du microchamp électrique	(II.40)
$C(t)$	La fonction d'autocorrélation du microchamp électrique	(IV.27)
C_v	La chaleur spécifique	(II.55)
ω_p	La fréquence de plasma	(I.15)
e	La charge de l'électron	
m_e	La masse de l'électron.	
N	Le nombre d'électrons	
Ω	Le volume total du système	
T	La température	
t	Le temps	
\hbar	La constante de Planck	

ABBREVIATIONS

O.C.P	Plasma à une composante.
D.M	Dynamique Moléculaire
R-K-2	Méthode de Runge Kutta d'ordre deux
R-K-4	Méthode de Runge Kutta d'ordre quatre.
S-S	Méthode des Substitutions Successives.

SOMMAIRE

Liste des Figures	viii
Liste des Tables	x
Introduction générale	1
I- <i>Etablissement de l'équation intégrale pour l'énergie potentielle</i>	5
I.1- Le Plasma Physique :	6
I.2- Modèle du plasma à une composante «OCP» :	7
I.3- Paramètres importants dans le modèle OCP :	8
I.3.1- Le rayon de la sphère ionique a :	8
I.3.2- Longueur de Landau (<i>longueur critique d'interaction binaire</i>) :	9
I.3.3- Longueur de Debye (<i>longueur critique d'interaction collective</i>) et le potentiel de Debye :	9
I.3.4- Le couplage Γ :	10
I.3.5- Le degré de quanticité η :	10
I.4- Classification des plasmas :	11
I.5- La thermodynamique et la cinétique :	12
I.6- Théorie du champ moyen :	15
I.7- L'énergie potentielle d'un gaz d'électrons.....	17
I.7.1- Introduction :	17
I.7.2- Phénomènes caractéristiques :	17
I.7.3- Etablissement de l'équation intégrale pour l'énergie potentielle d'un électron dans un plasma contenant une charge test :	22
I.7.4- Prévion et interprétation physique de $Y(x)$:	27
II- <i>Résolution analytique approximée de l'équation intégrale</i> <i>de l'énergie potentielle</i>	32
II.1- Approximation analytique dans le couplage faible :	33
II.2- Autre forme de la solution $Y(x)$:	37
II.2.1- Autre méthode de résolution :	39
II.3- Détermination de la constante b :	40
II.3.1- Exemple :	41
II.4- Distribution du micro champ :	44

II.5- L'énergie interne du gaz :	50
II.6- La chaleur spécifique :	52
III- Résolution numérique de l'équation intégrale de l'énergie potentielle	53
III.1- Introduction :	54
III.2- Résolution numérique de l'équation intégrale de l'énergie potentielle :	56
III.2.1- La méthode de RUNGE – KUTTA (R.K) :	57
III.2.2- Méthode de Runge – Kutta d'ordre deux (R.K.2) :	57
III.2.3- Méthode de Runge – Kutta d'ordre quatre (R.K.4) :	58
III.2.4- Discussion :	63
III.2.5- Méthode des Substitutions Successives (S.S) :	63
III.2.6- Conclusion :	77
III.3- Estimation du nombre d'électrons dans les états liés :	78
IV- Dynamique des électrons autour de l'impureté	81
IV.1- L'équation du mouvement :	82
IV.1.1- Adimensionnement de l'équation de mouvement :	82
IV.1.2- Résolution numérique de l'équation du mouvement :	84
IV.2- Fonction d'autocorrélation :	90
IV.2.1- Formalisme des fonctions de corrélations temporelles : ...	90
IV.2.2- Fonction d'autocorrélation :	91
IV.2.3- Calcul de la fonction d'autocorrélation :	92
IV.2.4- Fonction d'autocorrélation du microchamp électrique : ...	93
IV.2.5- Fonction d'autocorrélation du microchamp en coordonnées cartésiennes :	95
V- Comparaison avec la dynamique moléculaire	99
V.1- Comparaison de la densité électronique et la distribution du microchamp électrique :	100
V.2- Modèle de Thomas – Fermi pour l'atome :	107
Conclusion générale	109
A- Etablissement de l'équation intégrale pour l'énergie potentielle	113

Liste des Figures

(I.1)-	Classification générale des plasmas.....	12
(I.2)-	L'évolution du système et la cinétique physique.....	14
(I.3)-	Calcul de la force électrique dans un milieu chargé avec la sommation des forces élémentaires	15
(I.4)-	Calcul de la force électrique par l'application de la théorie du champ moyen.....	16
(I.5)-	L'effet de l'impureté dans un gaz d'électrons.....	18
(I.6)-	- La représentation unidimensionnelle de $\rho_e^{ind}(\tau)$ et $\rho_e^{ind}(\tau)$	20
(I.7)-	La couche bidimensionnelle des électrons et la fréquence de plasma.....	22
(I.8)-	Une impureté immergée dans un gaz d'électrons	23
(I.9)-	La forme de la densité $\frac{n(x)}{n_0}$ avant la perturbation.....	27
(I.10)-	La forme de la densité $\frac{n(x)}{n_0}$ après la perturbation.....	30
(I.11)-	La forme de l'énergie potentielle $Y(x)$	31
(II.1)-	Les deux formes de solution Y_1 et Y_2	42
(II.2)-	L'énergie potentielle $Y(x)$ pour $Z = 1, \eta = 0.01$ et différents Γ	43
(II.3)-	L'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp $P(\epsilon)$ calculées par l'approximation analytique pour : $Z = 1, \eta = 0.01$ et $\Gamma = 0.0001$	46
(II.4)-	L'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp $P(\epsilon)$ calculées par l'approximation analytique pour : $Z = 1, \eta = 0.01$ et $\Gamma = 0.001$	47
(II.5)-	L'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp $P(\epsilon)$ calculées par l'approximation analytique pour : $Z = 1, \eta = 0.01$ et $\Gamma = 0.005$	48
(II.6)-	L'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp $P(\epsilon)$ calculées par l'approximation analytique pour : $Z = 1, \eta = 0.6$ et $\Gamma = 0.05$	49
(III.1)-	Comparaison entre les résultats de R-K et et les résultats de l'approximation analytique pour : $Z = 1, \eta = 0.0025, \Gamma = 0.01$	61
(III.2)-	Comparaison entre les résultats de R-K et et les résultats de l'approximation analytique pour : $Z = 5, \eta = 0.0025, \Gamma = 0.01$	62
(III.3)-	Comparaison entre les résultats de R-K-4 et de S-S pour le cas : $Z = 1, \eta = 0.0025$ et $\Gamma = 0.01$	69
(III.4)-	Les résultats obtenus par la méthode de R-K-4, La méthode de S-S et l'approximation analytique pour le cas : $Z = 5, \eta = 0.0025$ et $\Gamma = 0.01$	71

(III.5)- L'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp $P(\epsilon)$ calculées par la méthode des S-S pour : $Z = 1, \eta = 0.005$ et $\Gamma = 0.05$.	72
(III.6)- L'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp $P(\epsilon)$ calculées par la méthode des S-S pour : $Z = 1, \eta = 0.025$ et $\Gamma = 0.1$.	73
(III.7)- L'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp $P(\epsilon)$ calculées par la méthode des S-S pour : $Z = 5, \eta = 0.0025$ et $\Gamma = 0.01$.	74
(III.8)- Quelques courbes maximales de l'énergie potentielle $Y(x)$ obtenues par PENTIUM II.350 Mhs.	76
(IV.1)- Trajectoire d'un électron autour de l'impureté avec les conditions initiales: $\{\bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = 0.1, \bar{z}'(0) = 0.05\}$ et $\{\bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = \bar{z}'(0) = 1\}$.	86
(IV.2)- Trajectoire d'un électron autour de l'impureté avec les conditions initiales: $\{\bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = 1, \bar{z}'(0) = 0.5\}$ et $\{\bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = \bar{z}'(0) = 1.5\}$.	87
(IV.3)- vérification que le moment cinétique est constant avec les conditions initiales: $\{\bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = 1, \bar{z}'(0) = 0.8\}$ et $\{\bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = \bar{z}'(0) = 3\}$.	88
(IV.4)- Trajectoire d'un électron libre au voisinage de l'impureté pour les conditions initiales: $\{\bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = -1.5, \bar{z}'(0) = 1\}$ et $\{\bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = 15, \bar{z}'(0) = 5\}$.	89
(IV.5)- Fonction d'autocorrélation du microchamp électrique pour: $Z = 1, \eta = 0.0025$ et $\Gamma = 0.01$.	98
(V.1)- La densité des électrons calculée par la dynamique moléculaire et la méthode des S-S pour : $Z = 5, \eta = 0.0025, \Gamma = 0.01$.	102
(V.2)- La densité des électrons calculées par la dynamique moléculaire et la méthode des S-S pour : $Z = 1, \eta = 0.005, \Gamma = 0.05$.	103
(V.3)- La densité des électrons calculées par la dynamique moléculaire et la méthode des S-S pour : $Z = 1, \eta = 0.025, \Gamma = 0.1$.	103
(V.4)- La distribution du microchamp électrique calculée par la dynamique moléculaire et la méthode des S-S pour : $Z = 5, \eta = 0.0025, \Gamma = 0.01$.	104
(V.5)- La distribution du microchamp électrique calculée par la dynamique moléculaire et la méthode des S-S pour : $Z = 1, \eta = 0.005, \Gamma = 0.05$.	105
(V.6)- La distribution du microchamp électrique calculée par la dynamique moléculaire et la méthode des S-S pour : $Z = 1, \eta = 0.025, \Gamma = 0.1$.	106
(V.7)- Courbes de Fermi-Thomas, pour l'atome neutre (courbe 1) et pour les ions positifs; X_1, z_1 correspondent à une ionisation faible et X_2, z_2 à une ionisation élevée.	108
(A.1)- Représentation de l'angle ψ .	115

Liste des Tables

(III.1)- Les résultats numériques de l'énergie potentielle trouvés par la méthode de R.K.4 et avec la méthode des S-S (20 itérations) et l'erreur relative.....	70
(III.2)- Estimation des états liés.....	80

Introduction générale

De notre vie quotidienne nous avons appris que la nature évolue toujours vers l'équilibre. Tout système physique perturbé revient après un certain temps à un état d'équilibre.

L'explication du mécanisme de l'équilibre et la diversité du monde matériel qui nous entoure, à l'aide d'une hypothèse réductrice ramenant cette complexité aux différentes combinaisons possibles d'un nombre réduit d'éléments de base, est une démarche de la pensée qui remonte à l'Antiquité. Ainsi les philosophes grecs conçurent-ils deux théories apparemment antagonistes. Pour Aristote, les quatre éléments fondamentaux étaient la terre, l'eau, l'air et le feu, alors que selon Leucippe et Démocrite, le monde matériel se réduisait aux combinaisons d'une infinité d'éléments identiques se mouvant dans le vide et appelés atomes. Ces deux schémas se sont frayés un chemin jusqu'à quand la science moderne leur a fourni la base empirique qui leur manquait et montré que les deux thèses en présence ne sont que deux facettes d'une même réalité physique. Ainsi deux siècles d'expérimentations minutieuses ont permis d'aboutir à une classification des états de la matière proche de celle d'Aristote. Suivant les conditions thermodynamiques caractérisées par la température et la pression, toute substance peut exister dans l'une des trois phases distinctes: solide, liquide et gazeuse correspondant à la terre, à l'eau et à l'air dans la description d'Aristote. D'autre part, l'hypothèse atomique [9], suivant laquelle toute substance matérielle est constituée d'une multitude d'atomes ou d'associations de deux ou plusieurs atomes appelées molécules, a fini par s'imposer définitivement au début de ce siècle. Il existe une centaine d'atomes stables constitués d'un noyau entouré d'un nuage d'électrons. Les atomes et les molécules sont électriquement neutres s'attirant mutuellement lorsqu'ils sont suffisamment rapprochés, mais se repoussent violemment lorsque leurs nuages

sont suffisamment rapprochés, mais se repoussent violemment lorsque leurs nuages électroniques commencent à se chevaucher, c'est-à-dire pour des distances inférieures au diamètre atomique ou moléculaire.

Mais cette vision atomique est trop restrictive. Ainsi, il est apparu clairement dès la fin du siècle dernier que certaines substances ne sont pas constituées d'atomes neutres mais plutôt d'ions positifs (cations) et négatifs (anions), c'est-à-dire par des atomes qui ont perdu, ou au contraire gagné, un ou plusieurs électrons par rapport à leur cortège habituel. Puisqu'ils portent une charge électrique non nulle, les ions se repoussent ou s'attirent suivant la loi de Coulomb. Par conséquent chaque ion interagit simultanément avec un très grand nombre d'autres ions.

D'un point de vue historique, l'étude de certains aspects de la matière ionique remonte à bientôt cent dix ans. En effet, le savant suédois S. Arrhenius (1859-1927) publia sa théorie de la dissociation électrolytique où il émit pour la première fois l'idée que certaines substances, en particulier les sels, dissoutes dans l'eau se dissocient spontanément en anions et en cations, rendant ainsi l'eau conductrice d'électricité.

En 1923 le physicien hollandais P. Debye et son assistant E. Huckel formulèrent la théorie de l'atmosphère. Cette théorie introduit le phénomène spatial d'écrantage électrostatique ou écran de Debye qui se traduit ainsi : si on se place sur un ion donné, les autres ions se redistribuent autour de l'ion central à fin de neutraliser (écranter) au mieux la charge électrique globale et de réduire par conséquent le potentiel Coulombien de cet ion.

Depuis l'article historique de Debye et Huckel, l'étude des milieux ioniques s'est beaucoup développée. En 1928 L. Tonks et I. Langumir dans leur étude utilisèrent le nom plasma pour désigner le gaz ionisé auquel plusieurs savants de cette époque ont accordé une grande importance dans leurs études, pour la simple et bonne raison que

99% de l'univers est sous la forme de plasma.

Mais ces études ne sont que approximatives, parce que dépendant d'une condition posée par Debye et Huckel, qui suppose que: "L'énergie cinétique ou thermique des ions (électrons dans le gaz d'électrons) est plus grande que l'énergie potentielle d'interaction Coulombienne de ces ions". Sans cette condition l'étude serait très compliquée, et la réalité exacte du plasma et tout ce qu'il renferme comme énigme ne serait pas élucidé.

Plusieurs savants ont tenté de dépasser cet obstacle, et c'est ainsi qu'en 1966, les Américains S. Brush, H. Sahlin et E. Teller¹ ont déterminé par la simulation² sur l'ordinateur la fonction densité des ions autour d'un ion central.

En juin 1998 et dans une ébauche entreprise par J. W. Dufty [2], celui ci essaya de décrire la distribution des électrons et le potentielle autour d'un ion (impureté) central dans un gaz d'électrons (faiblement couplé) par l'utilisation de l'approximation du champ moyen. Mais ses résultats restent valable seulement dans le couplage faible et aussi aux grandes distances.

L'objectif visé dans notre travail est le calcul des propriétés statiques et dynamiques d'un gaz d'électrons dans la théorie du champ moyen, en présence d'une charge test positive, dans les deux cas de couplage faible et fort.

Dans le premier chapitre, nous rappellerons le modèle de plasma à une composante (OCP), et les différents paramètres décrivant un plasma. Nous expliquerons ensuite la théorie de champ moyen, et nous établirons l'équation intégrale gouvernant l'énergie potentielle d'un électron du gaz d'électrons perturbé sous l'action d'une impureté positive. Enfin nous construirons de manière intuitive la forme de l'énergie potentielle en utilisant certains astuces mathématiques.

¹ S. Brush, H. Sahlin et E. Teller, journal of chemical physics 45/2102/1966

² Les estimations obtenues par les équipes américaines du Lawrence Livermore Laboratory et une équipe française de l'université Pierre et Marie Curie ont légèrement varié avec la puissance des ordinateurs

Dans le deuxième chapitre, nous résoudrons analytiquement l'équation intégrale pour l'énergie potentielle avec une approximation valable seulement aux grandes distances. Ensuite nous calculerons la densité des électrons autour de l'impureté, la distribution du microchamp, l'énergie interne du gaz et la chaleur spécifique.

Le troisième chapitre concerne l'aspect numérique du problème, dans lequel nous résoudrons l'équation intégrale par deux méthodes différentes, la première est de Runge Kutta d'ordre quatre et la deuxième est celle des substitutions successives. Ensuite nous déterminerons les grandeurs physiques correspondantes. Enfin nous donnons une estimation de la fraction d'électrons liés.

Dans le quatrième chapitre nous déterminerons les trajectoires des électrons autour de l'ion central, et après nous calculerons la distribution du microchamp et la fonction d'autocorrélation de celui ci pour le cas d'une dimension.

Chapitre : I

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

1.1 Le Plasma Physique :

Dans la nature la température joue un rôle majeur dans la détermination des différents états de la matière. Par exemple nous pouvons obtenir l'état liquide lorsque nous augmentons la température d'un solide jusqu'à la température de fusion, et aussi l'état gazeux lorsque la température atteint le degré de sublimation, mais que se passe lorsque la température ait atteint cent fois ou dix mille fois la température de sublimation? La nouvelle préparation et l'élaboration de la haute température au sein de la matière, et la recherche touchant les problèmes rattachés à ces propriétés sont l'objet de la physique du plasma. Rappelons aussi, selon la nomenclature de la classification des états de la matière, que le plasma physique (à l'encontre du plasma sanguin) représente le quatrième état de la matière. Le terme Plasma a été introduit, pour la première fois, en 1928 par le physicien américain I. Langmuir pour désigner , dans les tubes à décharge, certaines régions équipotentiellles 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. Le plus simple des plasmas est celui d'hydrogène, formé d'électrons et de protons libres en concentrations égales.

Donc on appelle 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.

Du point de vue expérimental, des techniques sont apparues (hyperfréquences,

et plus récemment lasers) qui permettent de mesurer avec précision les paramètres fondamentaux des plasmas : densité, température électronique, fréquence de collision des électrons. Grâce au développement de la radioastronomie puis de la recherche spatiale, on a pu explorer les plasmas de l'environnement terrestre: ionosphère, magnétosphère et la cosmologie: on pense que plus de 99% de l'univers est constitué par de la matière à l'état de plasma. Des problèmes de plasmas sont apparus dans de nombreuses techniques nouvelles: explosions nucléaires, conversions magnétohydrodynamiques et thermoioniques de l'énergie, rentrée des objets spatiaux dans l'atmosphère, lasers à gaz, découpage des métaux par chalumeau à plasma, traitement de surface en micro-électronique, etc....

1.2 Modèle du plasma à une composante «OCP» :

Nous savons que le 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 2000 ou plus. Pour cette raison, et pour d'autres raisons que nous citerons par la suite dans le texte, nous pouvons ne pas tenir compte des effets des mouvements des ions devant ceux des électrons. En effet, et à titre d'exemple, pour évaluer la conductivité électrique λ 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 un composant (OCP).

Le modèle de l'OCP 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.

L'engouement des théoriciens pour ce modèle 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 appelée paramètre de couplage Γ que nous définirons plus tard.

Dans cette thèse nous considérerons le modèle où les ions sont considérés comme un fond continu électriquement positif neutralisant la composante des charges rapides des électrons.

1.3 Paramètres importants dans le modèle OCP :

Le modèle OCP est défini par plusieurs paramètres essentiels:

1.3.1 Le rayon de la sphère ionique a :

Le rayon a 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 notre modèle. Il est de l'ordre de la distance moyenne inter-électronique :

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

où n est la densité des électrons qui représente le nombre d'électrons par unité de

volume: $n = N/\Omega$, où N est le nombre d'électrons et Ω est le volume total de plasma.

1.3.2 **Longueur de Landau** (*longueur critique d'interaction binaire*) :

La longueur de Landau l_L est la distance d'approche de deux électrons, pour que leur énergie potentielle d'interaction binaire soit de même ordre de grandeur que leur énergie d'agitation thermique. Ce qui se traduit par: $KT = e^2/l_L$, donc la longueur de Landau vaut :

$$l_L = \frac{e^2}{KT} \quad (2)$$

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

1.3.3 **Longueur de Debye** (*longueur critique d'interaction collective*) et le potentiel de Debye :

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

$$\lambda_D = \left(\frac{KT}{8\pi ne^2} \right)^{1/2} \quad (3)$$

Elle représente en quelque sorte la portée du potentiel: plus explicitement, elle représente la distance entre deux électrons pour laquelle le potentiel d'interaction entre ces deux électrons, devient négligeable par effet d'écrantage par la présence des

ions formant le fond continu. C'est pourquoi elle est appelée aussi longueur critique d'interaction collective.

Et le potentiel électrique associé et donné par la formule suivante :

$$\Phi(r) = \left(\frac{e}{r}\right) \cdot e^{-r/\lambda_D} \quad (4)$$

1.3.4 Le couplage Γ :

Le couplage n'est rien que le rapport de l'énergie d'interaction entre deux électrons séparés par la distance moyenne a , à l'énergie thermique KT , et est égal à la longueur de Landau l_L sur la distance moyenne a .

$$\Gamma = \frac{l_L}{a} = \frac{\beta e^2}{a} \quad (5)$$

où $\beta = 1/KT$.

· Si $\Gamma \ll 1$, le couplage est faible, l'énergie cinétique est supérieure à l'énergie d'interaction coulombienne.

· Si $\Gamma \gg 1$, le couplage est fort, l'énergie d'interaction coulombienne est supérieure à l'énergie cinétique.

1.3.5 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 2000. 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 De broglie Λ sur la distance moyenne a entre deux

électrons. Donc :

$$\eta = \frac{\Lambda}{a} = \frac{h}{a\sqrt{2\pi m_e KT}} \quad (6)$$

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

-Si $\eta = \Lambda/a \ll 1$ c'est à dire à température élevée, nous pouvons traiter le comportement des électrons classiquement.

-Si $\Lambda/l_L \ll 1$ 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.

1.4 Classification des plasmas :

Pour étudier les interactions entre particules dans un plasma complètement ionisé, il faut premièrement connaître le type de ce plasma pour choisir la méthode théorique valable et adéquate pour l'étude du système.

Longueur de Landau l_L , longueur d'écran de Debye λ_D et la distance moyenne a entre les électrons permettent d'introduire une classification générale des plasmas selon les valeurs relatives de la densité et de la température. Les ordres de grandeur variant énormément d'un plasma à un autre. Dans la Figure (I.1) nous représentons en coordonnées logarithmiques, une classification générale des plasmas :

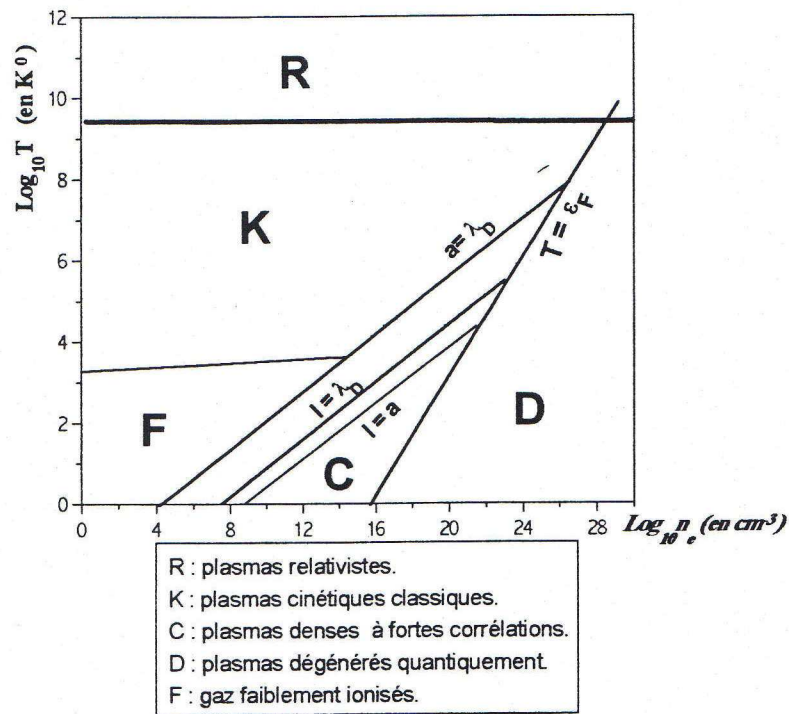


Figure (I.1): Classification générale des plasmas

1.5 La thermodynamique et la cinétique :

A la différence de la thermodynamique statistique qui étudie les états d'équilibre des systèmes macroscopiques, formés d'un grand nombre de particules, la cinétique physique étudie les différents processus physiques se déroulant dans ces systèmes.

Après un intervalle de temps suffisamment long, appelé temps de relaxation, tout système macroscopique soumis à lui-même passe à l'état d'équilibre statistique. C'est pourquoi la cinétique physique doit avoir comme cas limite, la thermodynamique.

Il est cependant évident à partir de considérations générales que l'état d'équilibre limite peut être décrit d'une manière bien plus simple à l'aide par exemple de la distribution universelle de Gibbs:

$$W(r_1, r_2, r_3, \dots, r_n) = e^{\beta(F-H)} \quad (7)$$

où W : Densité de probabilité d'équilibre

F : L'énergie libre du système.

H : Hamiltonien du système

résultant de la distribution de Maxwell-Boltzmann :

$$F_1(r, p) = f(r, p) = c.e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} + U(r))} \quad (8)$$

La distribution de Gibbs est universelle et étudie les états d'équilibre statistique. Lorsque l'on passe des états d'équilibre aux états hors d'équilibre, l'universalité disparaît et la cinétique physique s'impose et donne, pour le déroulement dans le temps de divers processus aux différentes étapes de l'évolution du système, des relations distinctes qu'il est impossible d'englober en une formule universelle unique du type de la distribution de Gibbs.

On peut également étudier le comportement de la fonction de distribution à une particule pour des temps t inférieurs au temps de relaxation t_r et à la limite, le passage à la distribution de Maxwell-Boltzmann.

Ce problème a été résolu par Boltzmann qui a établi une équation pour la fonction de distribution à une particule $f(r, p, t)$ hors-équilibre pour les gaz de densité faible, dite Equation Cinétique de Boltzmann (ECB).

$$\frac{\partial f(r, p, t)}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla}_r f(r, p, t) = \left[\frac{\partial f(r, p, t)}{\partial t} \right]_{coll} \quad (9)$$

où $\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{coll}$ est l'intégrale de collision qui est proportionnelle au nombre de collisions

par unité de temps.

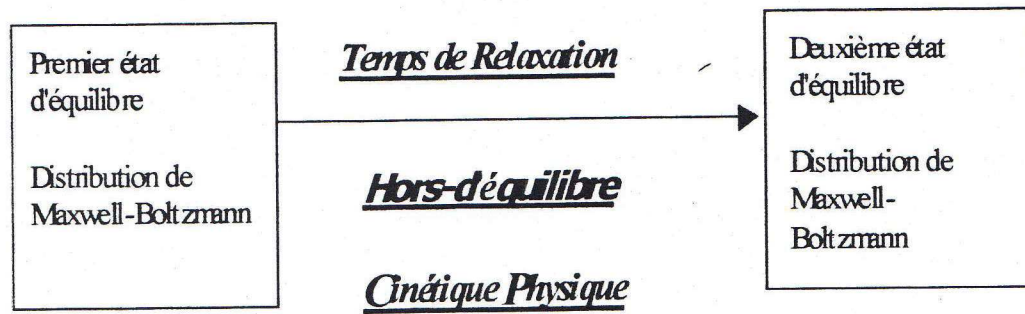


Figure (I.2): L'évolution du système et la cinétique physique

1.6 Théorie du champ moyen :

Soit un milieu électriquement chargé, constitué de $(N + 1)$ particules, la charge de chacune est q à l'exception d'une qui porte une charge q_0 . Ces particules sont distribuées dans l'espace avec une densité volumique $\rho(r)$.

La force électrique \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:

$$\vec{F}_0 = q_0 \sum_{i=1}^N \frac{q_i (\vec{r}_0 - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_i|^3} \quad (10)$$

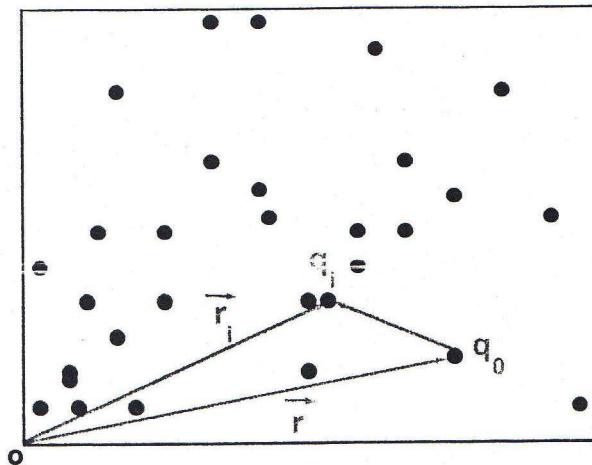


Figure (I.3): Calcul de la force électrique dans un milieu chargé avec la sommation des forces élémentaires.

On peut calculer cette force de la manière approximée suivante: si on néglige les corrélations entre les particules localisées dans l'élément de volume $d\tau$ contenant plusieurs particules de charge q (Figure (I.4)), nous avons le droit, et sans comettre 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 selon cette théorie d'approximation on peut transformer la formule précédente en la suivante :

$$\vec{F}_0 = q_0 \int_{(\Omega)} \frac{\rho(r')(\vec{r}_0 - \vec{r}')}{|\vec{r}_0 - \vec{r}'|^3} d\tau \quad (11)$$

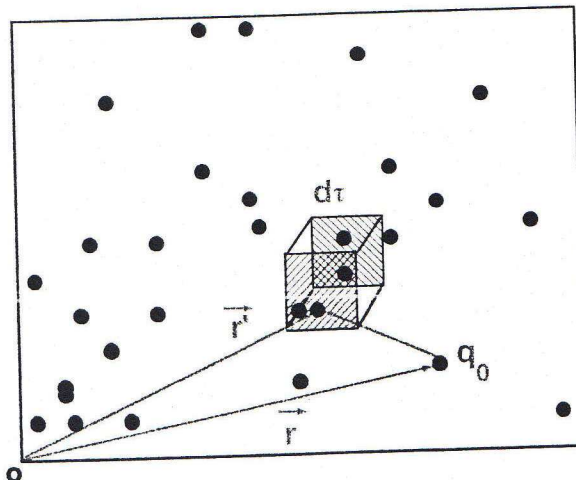


Figure (I.4): Calcul de la force électrique par l'application de la théorie du champ moyen.

1.7 L'énergie potentielle d'un gaz d'électrons

1.7.1 Introduction :

La détermination des propriétés thermodynamiques, notamment l'énergie potentielle d'un gaz d'électrons, est très intéressante dans le domaine de la physique des plasmas. Parce que la plupart des propriétés statistiques sont déterminées à partir de la fonction de partition³ [11][12][18] donnée par l'équation (II.46). Cette dernière est une fonction de l'énergie potentielle $\Phi(r)$ du système.

Il suffit donc d'obtenir la fonction de partition Z_N , pour pouvoir calculer les propriétés thermodynamiques de façon simple, par exemple :

L'entropie du système est donnée par la formule: $S = k \log(Z_N)$.

L'énergie interne est: $\langle E \rangle = -\frac{\partial Z_N}{\partial \beta}$, etc...

1.7.2 Phénomènes caractéristiques :

L'introduction d'une charge positive Ze dans un gaz d'électrons crée de nouveaux phénomènes caractérisant ce gaz. Parmi ces phénomènes nouveaux, citons:

-L'écran parfait :

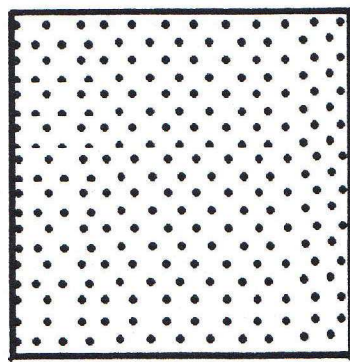
L'effet d'écran et les oscillations de charges sont des phénomènes caractéristiques d'un fluide ionisé comme par exemple un gaz d'électrons. Donnons tout d'abord une description qualitative de l'effet d'écran. La charge statique Ze placée à l'origine $r = 0$ dans une phase homogène du gaz d'électrons à l'équilibre, crée à une distance r dans le vide un potentiel $\Phi(r)$. Dans le gaz, la charge supplémentaire positive Ze attire les

³ La fonction de partition Z_N représente le nombre possible des configurations du système.

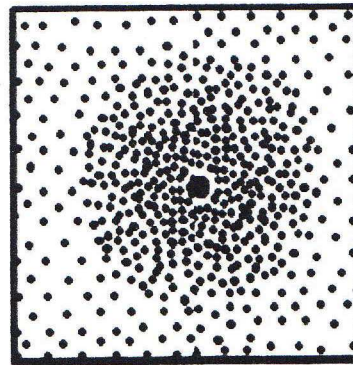
électrons mobiles : la densité électronique se réajuste dans son voisinage. Elle constitue ainsi un excès local de charges électroniques appelé le nuage de polarisation ou la charge induite statique $\rho_e^{ind}(r)$.

$$\rho_e^{ind}(r) = (\rho(r) - \rho) \quad (12)$$

Dans cette expression, $\rho(r)$ est la densité électronique modifiée par la présence de la charge extérieure Ze , et ρ la densité du fond. En absence de charge extérieure, l'état est homogène et $\rho(r) = \rho$ en tout point. La situation est schématiquement représentée dans la Figure (I.5).



Etat homogène



Nuage de polarisation

Figure (I.5): L'effet de l'impureté dans un gaz d'électrons

On dit qu'il y a écran parfait lorsque cette densité induite porte une charge de grandeur égale et opposée en signe à la charge extérieure.

$$\int \rho_e^{ind}(r) dr = -Ze \quad (13)$$

A ce stade, faisons la remarque qui a de l'importance pour la suite de la discussion. "Le système infiniment étendu, constitue un réservoir infini de particules : la formation d'un excès de charge locale n'est donc pas en contradiction avec la conservation du nombre de particules", et n'affecte donc pas les régions lointaines.

En réalité, dans le système fini, la création du nuage de polarisation autour de l'impureté Ze s'accompagne d'une accumulation de charges opposées à la surface du système (polarisation de surface) telle que la charge électrique totale demeure constante. Si l'on désigne la densité de charge induite à volume fini par $\rho_e^{ind}(r)$, cette dernière décrit une modification de densité locale au voisinage de Ze ainsi que la polarisation de surface, de telle façon qu'en tous les cas $\int_{\Omega} \rho_e^{ind}(r) dr = 0$. Dans la Figure (I.6) on a donné une représentation unidimensionnelle de $\rho_e^{ind}(r)$ et $\rho_e^{ind}(r)$. Il faut donc comprendre que dans (I.13) et toutes les formules suivantes, $\rho_e^{ind}(r)$ est la limite thermodynamique de $\rho_e^{ind}(r)$, dans laquelle les effets de polarisation de surface sont renvoyés à l'infini. Ainsi dans $\rho_e^{ind}(r)$ seule subsiste la polarisation locale au voisinage de Ze , pour laquelle est valable la relation d'écran parfait (I.13).

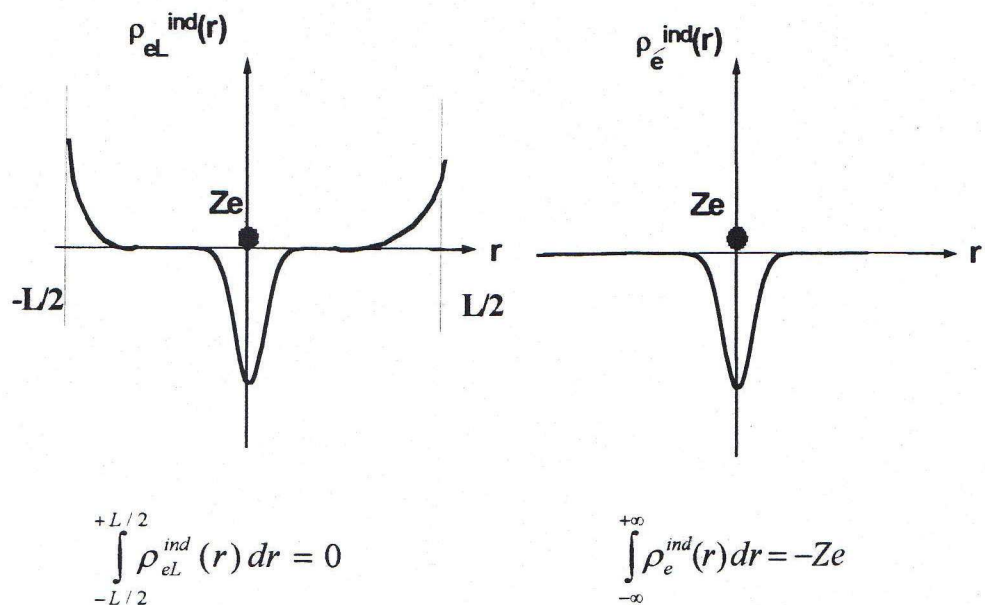


Figure (I.6): - La représentation unidimensionnelle de $\rho_{e\Omega}^{ind}(r)$ et $\rho_e^{ind}(r)$

-Le Plasmon :

Un second phénomène important lié à l'effet d'écran est le mouvement collectif des électrons, l'oscillation du plasma ou plasmon. 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: A 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.7). Ce faisant, 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 $\sigma = \pm e.r.\rho$ et elle donne lieu (comme dans un condensateur) à un champ électrique $E = \sigma/\epsilon_0 = -\rho e r/\epsilon_0$. Ainsi, chaque électron de la couche déplacée obéit à la loi de Newton :

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

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

$$\omega_p = \left(\frac{\rho e^2}{m \epsilon_0} \right)^{1/2} \quad (15)$$

Les électrons de la couche effectuent donc une oscillation collective de fréquence ω_p bien déterminée, appelée plasmon. Dans ce raisonnement, nous avons négligé les chocs entre électrons et leur interaction coulombienne.

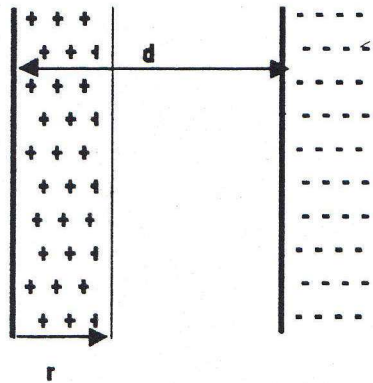


Figure (I.7): La couche bidimensionnelle des électrons et la fréquence de plasma.

1.73 **Etablissement de l'équation intégrale pour l'énergie potentielle d'un électron dans un plasma contenant une charge test :**

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

Initialement la distribution spatio-impulsionnelle des électrons est celle de Maxwell-Boltzmann gouvernant l'état d'équilibre du système d'électrons.

Si on place un ion positif Ze (appelée charge test ou impureté) à l'origine de coordonnées (Figure (I.8)), le système est alors perturbé et au bout d'un certain temps t , il va atteindre un nouveau état d'équilibre.

La question qu'on se pose est quelle est l'énergie potentielle d'un électron situé à la position r de l'ion central de charge électrique Ze situé à l'origine d'espace quand le système a atteint le nouveau état d'équilibre?.

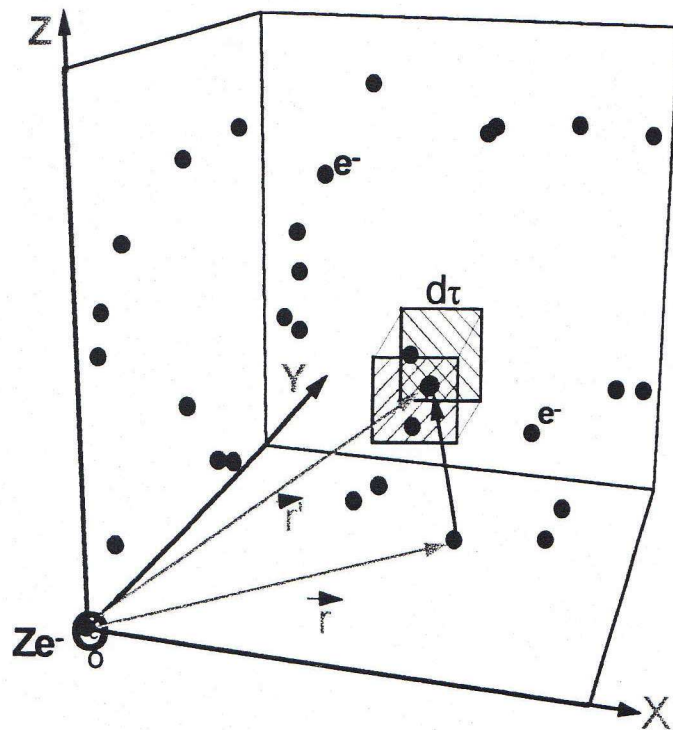


Figure (I.8): Une impureté immergée dans un gaz d'électrons

D'après la distribution de Maxwell-Boltzmann la fonction de distribution est:

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = n \left(\frac{m}{2\pi KT} \right)^{3/2} \cdot \exp\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \Phi(\vec{r}) \right) \quad (16)$$

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

$$\Phi(r) = \Phi(r)_{i-e} + \Phi(r)_{e-e} + \Phi(r)_{e-f} \quad (17)$$

où: - $\Phi(r)_{i-e}$ est l'énergie potentielle d'interaction du couple (ion- électron).

- $\Phi(r)_{e-e}$ est l'énergie potentielle d'interaction du couple (électron- électron).

- $\Phi(r)_{e-f}$ est l'énergie potentielle d'interaction électron avec le fond continu d'ions.

L'interaction électron-électron est prise celle du potentiel de Coulomb, mais l'interaction ion-électron est prise de telle manière de pouvoir tenir compte des effets quantiques à courtes distances: nous la représentons ici par le pseudo-potentiel suivant [2] :

$$\Phi(r)_{i-e} = -\frac{Ze}{r}(1 - e^{-r/\lambda r}) \quad (18)$$

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

$$\Phi(r) = \Phi(r)_{i-e} + \iint \frac{f(\vec{r}, \vec{p}) e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{p}^3 d\vec{r}'^3 - \int \frac{ne^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'^3 \quad (19)$$

où :

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = F_1(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{N}{V} \left(\frac{m\beta}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-\beta \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \Phi(r') \right)} \quad (20)$$

est la fonction de distribution à une particule.

Lorsque nous remplaçons l'équation (I.20) dans (I.19), et nous l'intégrons sur les impulsions, l'équation devient :

$$\Phi(r) = -\frac{Ze^2}{r} (1 - e^{-r/\lambda_T}) + ne^2 \left[\int \frac{e^{-\beta\Phi(r')}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dr'^3 - \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dr'^3 \right] \quad (21)$$

et égale à :

$$\Phi(r) = -\frac{Ze^2}{r} (1 - e^{-r/\lambda_T}) + ne^2 \int \frac{(e^{-\beta\Phi(r')} - 1)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dr'^3 \quad (22)$$

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

$$\Phi(r) = -\frac{Ze^2}{r} (1 - e^{-r/\lambda_T}) + 4\pi ne^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} (e^{-\beta\Phi(r')} - 1) [|r + r'| - |r - r'|] dr' \quad (23)$$

et on a :

$$\begin{cases} |r - r'| = r - r' \text{ si } r \geq r' \\ |r - r'| = -r + r' \text{ si } r \leq r' \end{cases}$$

Et par le développement nous trouvons l'équation intégrale gouvernant l'énergie potentielle d'électron dans le modèle du champ moyen :

$$\Phi(r) = \left\{ -\frac{Ze^2}{r}(1 - e^{-r/\lambda T}) + \frac{4\pi n e^2}{r} \int_0^r r'^2 (e^{-\beta\Phi(r')} - 1) dr' + 4\pi n e^2 \int_r^\infty r' (e^{-\beta\Phi(r')} - 1) dr' \right\} \quad (I.24)$$

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

Pour éviter les problèmes rattachés aux unités des différents paramètres présents dans cette équation intégrale, il est commode d'exprimer (I.24) par une forme adimensionnée et ce, en adoptant les définitions et changements suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi(r) = -\frac{Ze^2}{a} Y(r/a) \\ \Phi(r)_{i-e} = -\frac{Ze^2}{a} Y(r/a)_{i-e} \\ \Phi(r)_{e-e} = -\frac{e^2}{a} Y(r/a)_{e-e} \\ \text{nous posons } x = r/a \end{array} \right. \quad (25)$$

Lorsque nous remplaçons ces changements dans l'équation intégrale (I.24) précédente, nous trouvons :

$$Y(x) = \frac{1}{x}(1 - e^{-x/\eta}) - \frac{3}{Z} \left[\frac{1}{x} \int_0^x t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt + \int_x^\infty t (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right] \quad (26)$$

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

1.7.4 Prévion et interprétation physique de $Y(x)$:

Nous pouvons prévoir la forme de la solution $Y(x)$ de l'équation intégrale (I.26) et la densité d'électrons $n(x)$ autour de l'impureté, à partir de plusieurs considérations physiques et mathématiques.

- Avant de mettre la charge test Ze (charge centrale) dans le gaz d'électrons la densité des électrons $n(x)$ est constante et égale à n_0 (Figure (I.9)).

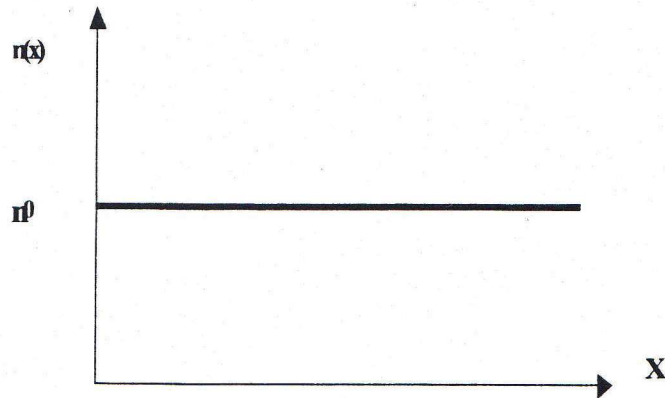


Figure (I.9): La forme de la densité $n(x)$ avant la perturbation.

Premièrement on connaît bien d'après la théorie des équations différentielles non linéaires, qu'une équation intégrale non linéaire comme l'équation (I.26), peut admettre plusieurs branches de solution [11], mais la solution favorable et compatible avec les descriptions physiques de notre cas correspond à la solution qui se confond, aux grandes distances, avec la branche de Debye-Huckel [11], cette dernière s'annule aux grandes distances. Et notre solution $Y(x)$ vérifie cette condition:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} Y(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{x} (1 - e^{-x/\eta}) - \frac{3}{Z} \left[\frac{1}{x} \int_0^x t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt + \int_x^\infty t (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right] \right\} = 0$$

donc la première information sur la solution $Y(x)$ est :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} Y(x) = 0 \tag{27}$$

Deuxièmement, la valeur de l'énergie potentielle au voisinage de l'origine où est située l'impureté est obtainable si nous tendons x vers zéro dans l'équation (I.26) :

$$\lim_{x \rightarrow 0} Y(x) = \lim_{x \rightarrow 0} \left[\frac{1}{x} (1 - e^{-x/\eta}) - \frac{3}{Z} \left[\frac{1}{x} \int_0^x t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt + \int_x^\infty t (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right] \right]$$

et nous pouvons vérifier que :

$$\lim_{x \rightarrow 0} \left(\frac{1}{x} \int_0^x t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right) \approx \lim_{x \rightarrow 0} \left(\int_x^\infty t (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right) = 0 \tag{28}$$

Parce que $Y(x)$ est nulle à l'infini et la décroissance de $(\int_0^x t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt)$ est plus rapide que x , qui montre que $(\int_0^x t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt)$ s'annule plus vite que x .

ce qui implique:

$$\lim_{x \rightarrow 0} Y(x) = \lim_{x \rightarrow 0} \left[\frac{1}{x} (1 - e^{-x/\eta}) \right] = 1/\eta \tag{29}$$

Cette valeur, $1/\eta$, représente la valeur maximale de l'énergie potentielle et elle est atteinte seulement au voisinage infinitésimal de l'impureté fixée à l'origine.

Donc les deux extrémités de l'énergie potentielle $Y(x)$ sont à notre possession: $1/\eta$ à l'origine et zéro à l'infini. Son comportement aux régions intermédiaires est obtenu de la manière suivante:

Après l'insertion de la charge Ze , la distribution des électrons, en l'occurrence la densité $n(x)$ est égale à :

$$n(\vec{r}) = \int f_1(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{p} \quad (30)$$

où f_1 est la fonction de distribution à un particule.

Cette densité est égale aussi, sous une forme adimensionnée, à :

$$n(x) = n_0 e^{Z\Gamma Y(x)} \quad (31)$$

La concentration des électrons augmente et dépassant même n_0 au voisinage de l'origine où est située l'impureté par effet de l'attraction électrique ion-électron. Ceci est une conséquence du principe de conservation de nombre total d'électrons. Or ceci, à première vue, exige l'existence de régions où la densité est inférieure à n_0 , et ce pour compenser l'augmentation de la concentration autour de l'impureté. Mais comme nous avons déjà signalé dans I.7.2 que le système est infiniment étendu et constitue donc un réservoir infini de charges. Par conséquent l'excès local d'électrons à l'origine n'altère pas la concentration d'électrons dans les régions lointaines. Donc la densité des électrons prend la forme de la **Figure(I.10)**.

Et aussi :

$$*Y(0) = 1/\eta \Rightarrow n(0) = n_0 e^{Z\Gamma/\eta}$$

$$*Y(\infty) = 0 \Rightarrow n(\infty) \text{ reste égale à } n_0.$$

Nous avons aussi la dérivé de la densité :

$$n'(x) = n_0 Z\Gamma Y'(x) e^{Z\Gamma Y(x)} \quad (32)$$

C'est-à-dire que les comportements (croissance et décroissance) de la courbe de densité $n'(x)$ et $Y'(x)$, sont égaux. A partir de ces renseignements nous déduisons la forme de $Y(x)$, qui est représentée dans la Figure (I.11).

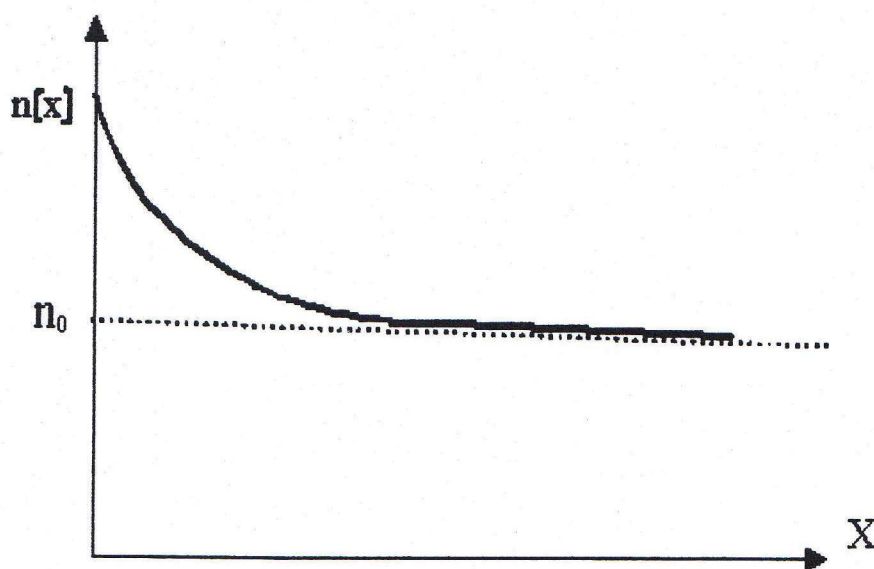


Figure (I.10): La forme de la densité $n(x)$ après la perturbation.

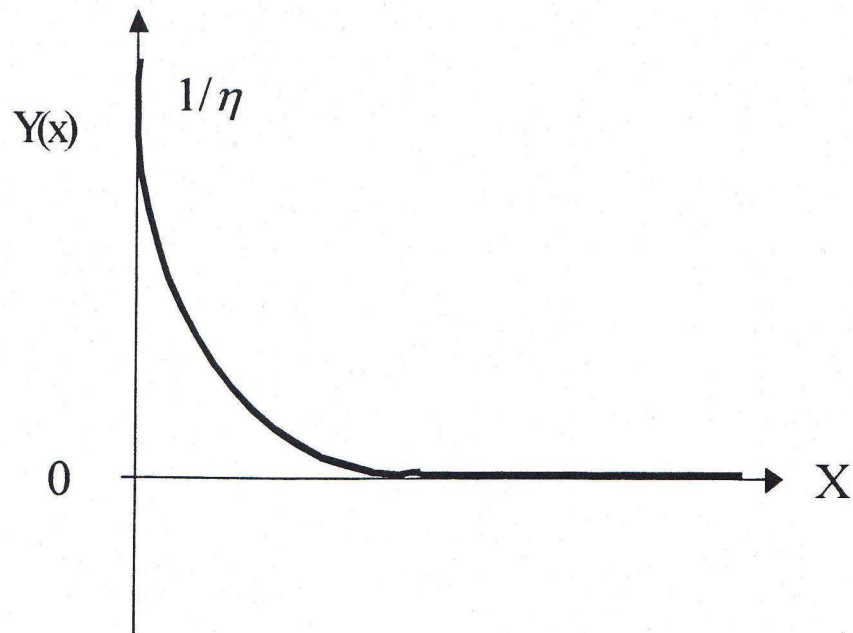


Figure (I.11): La forme de l'énergie potentielle $Y(x)$

Chapitre: II

*Résolution analytique approximée de
l'équation intégrale de l'énergie
potentielle*

II.1 Approximation analytique dans le couplage faible :

Dans le premier chapitre nous avons établi l'équation intégrale générale de l'énergie potentielle d'un électron dans un gaz d'électrons contenant une impureté à l'origine, et été de la forme :

$$Y(x) = \frac{1}{x}(1 - e^{-x/\eta}) - \frac{3}{Z} \left[\frac{1}{x} \int_0^x t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt + \int_x^\infty t (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right] \quad (1)$$

Nous pouvons trouver analytiquement une solution approximée de l'équation intégrale (II.1), qui est valable seulement si l'énergie cinétique des électrons est très grande devant l'énergie d'interaction coulombienne, c'est à dire au cas qui correspond au couplage faible :

$$\Gamma = \frac{\beta e^2}{a} \ll 1$$

Nous transformons dans ce cas l'équation (II.1) en :

$$Y(x) = \frac{1}{x}(1 - e^{-x/\eta}) - \frac{3}{Zx} \left[\int_0^x t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt + \int_x^\infty \frac{xt^2}{t} (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right]$$

aussi:

$$Y(x) = \frac{1}{x}(1 - e^{-x/\eta}) - \frac{3}{Zx} \left[\int_0^x t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt + \int_x^\infty \left(\frac{x}{t} - 1 + 1 \right) t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right]$$

Nous développons :

$$Y(x) = \frac{1}{x}(1 - e^{-x/\eta}) - \frac{3}{Zx} \left(\int_0^x t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt + \int_x^\infty \left(\frac{x}{t} - 1\right) t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt + \int_x^\infty t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right) \quad (2)$$

qui devient :

$$Y(x) = \frac{1}{x}(1 - e^{-x/\eta}) - \frac{3}{Zx} \left[\int_0^\infty t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt + \int_x^\infty (x - t)(e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right] \quad (3)$$

Si nous faisons la limite de l'équation (II.3) lorsque x tend vers l'infinie, le premier terme et le troisième tendent vers zéro. Donc la limite de $Y(x)$ est celle du deuxième terme.

$$\lim_{x \rightarrow \infty} Y(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} \left[-\frac{3}{Zx} \int_0^\infty t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right] \quad (4)$$

et d'après l'équation (I.27) :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} Y(x) = 0$$

Donc pour que cette condition soit vérifiée, il faut que la deuxième intégrale $[\int_0^\infty t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt]$, de l'équation (II.3) soit finie et égale à une constante.

$$\int_0^\infty t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt = C^{te} \quad (5)$$

Nous posons alors $g(x) = e^{Z\Gamma Y(x)}$, et nous remplaçons ce changement dans l'équation (II.3) :

$$\frac{x}{Z\Gamma} \log(g(x)) = (1 - e^{-x/\eta}) - \frac{3}{Z} \left[\int_0^\infty t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt + \int_x^\infty t(x-t)(e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right] \quad (6)$$

Posons ici:

$$b = 1 - \frac{3}{Z} \left[\int_0^\infty t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right] \quad (7)$$

et écrivons donc :

$$\frac{x}{Z\Gamma} \log(g(x) - 1 + 1) = b - e^{-x/\eta} - \frac{3}{Z} \int_x^\infty t(x-t)(g(t) - 1) dt \quad (8)$$

En utilisant le changement: $g(x) - 1 = h(x)$, l'équation (II.8) devient :

$$\frac{x}{Z\Gamma} \log(h(x) + 1) = b - e^{-x/\eta} - \frac{3}{Z} \int_x^\infty t(x-t)h(t) dt \quad (9)$$

et en faisant un développement de premier ordre de $\log(h(x) + 1)$ l'équation précédente devient:

$$\frac{x}{Z\Gamma} h(x) = b - e^{-x/\eta} - \frac{3}{Z} \int_x^\infty t(x-t)h(t) dt \quad (10)$$

que nous pouvons résoudre par la méthode de la transformée de Laplace.

La transformée de Laplace sur les deux membres de l'équation (II.10) donne :

$$\frac{1}{Z\Gamma} \int_0^\infty e^{-px} x h(x) dx = \int_0^\infty e^{-px} b dx - \int_0^\infty e^{-px} e^{-x/\eta} dx - \frac{3}{Z} \int_0^\infty e^{-px} \int_x^\infty t(x-t)h(x) dt dx \quad (II.11)$$

Nous trouvons d'après les propriétés de la transformée de Laplace :

$$H'(p) = \frac{Z\Gamma(-\frac{b}{p} + \frac{1}{p+1/\eta})}{1 + \frac{3\Gamma}{p^2}} \quad (12)$$

que nous pouvons écrire sous la forme :

$$H'(p) = \frac{Z\Gamma}{(p+1/\eta)} - 3\Gamma \frac{(\alpha + \frac{b}{3\Gamma})p + \beta}{(\frac{3}{2} + \frac{p^2}{Z\Gamma})} + 3\Gamma \frac{\gamma}{p+1/\eta} \quad (13)$$

où la dérivé $H'(p)$ est relative au paramètre p . et les coefficients α, β, γ sont :

$$\alpha = -\frac{\eta^2}{1 + 3\Gamma\eta^2}, \quad \beta = \frac{\eta}{1 + 3\Gamma\eta^2}, \quad \gamma = -\frac{Z\Gamma\eta^2}{1 + 3\Gamma\eta^2}$$

L'intégration de l'équation (II.13) donne :

$$H(p) = -\frac{(3\alpha\Gamma + b)Z\Gamma}{2} \log(3\Gamma + p^2) + \Gamma(Z + 3\gamma) \log(p + 1) - \frac{3Z\beta\Gamma^2}{\sqrt{3\Gamma}} \arctan\left(\frac{p}{\sqrt{3\Gamma}}\right) \quad (14)$$

Rappelons maintenant que $H(p)$ est la transformée de Laplace de la fonction :

$h(x) = g(x) - 1$, d'où la transformée de $g(x)$ est :

$$G(p) = \frac{1}{p} - \frac{(3\alpha\Gamma + b)Z\Gamma}{2} \log(3\Gamma + p^2) + \Gamma(Z + 3\gamma) \text{Ln}(p + 1/\eta) - \frac{3Z\beta\Gamma^2}{\sqrt{3\Gamma}} \arctan\left(\frac{p}{\sqrt{3\Gamma}}\right) \quad (15)$$

ou bien :

$$\frac{G(p)}{p} = \frac{1}{p^2} - \frac{(3\alpha\Gamma + b)Z\Gamma}{2p} \log(3\Gamma + p^2) + \Gamma(Z + 3\gamma) \frac{1}{p} \log(p + 1/\eta) - \frac{3Z\beta\Gamma^2}{\sqrt{3\Gamma}} \frac{1}{p} \arctan\left(\frac{p}{\sqrt{3\Gamma}}\right) \quad (16)$$

En utilisant une propriété de la transformée inverse de Laplace :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\int_{che \min} \frac{G(p)}{p} e^{px} dp \right] = g(x)$$

Donc :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left[\int_{che \min} \frac{G(p)}{p} e^{px} dp \right] = x - \frac{(3\alpha\Gamma + b)Z\Gamma}{2} \text{Ci}(x\sqrt{3\Gamma}) - \Gamma(Z + 3\gamma) \text{Li}(e^{-x/\eta}) + \\ \frac{3\beta Z\Gamma^2}{\sqrt{3\Gamma}} (\text{Si}(x\sqrt{3\Gamma}) - \pi/2) \end{aligned} \quad (17)$$

où :

$$g(x) = 1 - \frac{(3\Gamma\alpha + b)Z\Gamma}{2} \frac{\cos(x\sqrt{3\Gamma})}{x} - \Gamma(Z + 3\gamma) \frac{e^{-x/\eta}}{x} + \frac{3\beta Z\Gamma^2}{\sqrt{3\Gamma}} \frac{\sin(x\sqrt{3\Gamma})}{x} \quad (18)$$

et finalement nous trouvons l'expression totale de l'énergie potentielle $Y(x)$:

$$Y(x) = \frac{1}{Z\Gamma} \text{Ln}(g(x))$$

alors :

$$Y(x) = \frac{1}{Z\Gamma} \log \left[1 - \frac{(3\Gamma\alpha + b)Z\Gamma}{2} \frac{\cos(x\sqrt{3\Gamma})}{x} - \Gamma(Z + 3\gamma) \frac{e^{-x/\eta}}{x} + \frac{3\beta Z\Gamma^2}{\sqrt{3\Gamma}} \frac{\sin(x\sqrt{3\Gamma})}{x} \right] \quad (19)$$

Donc l'expression (II.19) représente la solution analytique approximée de l'équation intégrale (II.1) de l'énergie potentielle d'électron du gaz faiblement couplé comprenant la charge test.

1.2 Autre forme de la solution $Y(x)$:

Nous pouvons trouver une autre forme de solution approximée de l'énergie potentielle $Y(x)$, si nous faisons une approximation directe de la fonction $e^{Z\Gamma Y(x)}$.

Nous écrivons l'expression de l'équation intégrale de l'énergie potentielle sous la forme:

$$\Phi(r) = \Phi(r)_{i-e} + n_0 \int (e^{-\beta\Phi(r')} - 1) \Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|)_{e-e} dr' \quad (20)$$

Et si on fait un adimensionnement de cette équation à partir du changement précédant: (I.25) :

$$Y(x) = Y(x)_{i-e} - \frac{3}{4\pi Z} \int (e^{Z\Gamma Y(x')} - 1) Y(|\vec{x} - \vec{x}'|) dx' \quad (21)$$

Pour le couplage faible $\Gamma \ll 1$ et Z pas très grand, nous pouvons faire l'approximation suivante :

$$Y(x) \approx Y(x)_{i-e} - \frac{3\Gamma}{4\pi} \int Y(x') Y(|\vec{x} - \vec{x}'|) dx' \quad (22)$$

Si nous appliquons la transformée de Fourier sur cette équation nous trouvons :

$$\tilde{Y}(k) = \tilde{Y}(k)_{i-e} k^2 (k^2 + 3\Gamma)^{-1} \quad (23)$$

où $\tilde{Y}(k)$ est la transformée de Fourier de $Y(x)$, et $\tilde{Y}(k)_{i-e} = \frac{4\pi}{k^2(k^2\eta^2+1)}$.

Donc (II.23) devient :

$$\tilde{Y}(k) = \frac{4\pi}{(k^2\eta^2 + 1)(k^2 + 3\Gamma)} \quad (24)$$

Et avec les propriétés de la transformée inverse de Fourier nous trouvons l'expression de $Y(x)$ à partir de (II.24) :

$$Y(x) = \frac{1}{(1 - 3\Gamma\eta^2)x} (e^{-x\sqrt{3\Gamma}} - e^{-x/\eta}) \quad (25)$$

II.2.1 Autre méthode de résolution :

Nous pouvons aussi trouver la solution $Y(x)$ ((II.25)) à grande distance par une autre méthode de résolution :

Pour cela nous dérivons l'équation intégrale (II.1) deux fois par rapport à x .

A ce moment là, nous trouvons une équation différentielle non linéaire du deuxième ordre :

$$Y''(x) + \frac{2}{3}Y'(x) - \frac{3}{Z}e^{Z\Gamma Y(x)} = -\frac{3}{Z} - \frac{1}{\eta^2} \frac{e^{-x/\eta}}{x} \quad (26)$$

Nous posons $Y(x) = \frac{1}{Z\Gamma} \frac{g(x)}{x}$: l'équation (II.26) devient :

$$g''(x) = 3\Gamma x(e^{g(x)/x} - 1) - \frac{Z\Gamma}{\eta^2} e^{-x/\eta} \quad (27)$$

La solution de cette équation différentielle est donnée sous la forme suivante :

$$g(x) = C_1 e^{-\sqrt{3\Gamma}x} - \frac{Z\Gamma}{1 - 3\Gamma\eta^2} e^{-x/\eta} \quad (28)$$

Nous savons bien que la solution exacte $Y(x)$ de l'équation (II.1) est finie au voisinage de zéro (égale $\approx 1/\eta$), donc pour que $g(x)$ suive cette branche de solution il faut que C_1 soit égal à :

$$C_1 = \frac{Z\Gamma}{1 - 3\Gamma\eta^2} \quad (29)$$

et $Y(x) = \frac{g(x)}{Z\Gamma x}$, vaut donc :

$$Y(x) = \frac{1}{(1 - 3\Gamma\eta^2)x} (e^{-x\sqrt{3\Gamma}} - e^{-x/\eta})$$

III.3 Détermination de la constante b :

Nous pouvons trouver une valeur approximée de la constante b citée dans l'expression (II.7) de la manière suivante: si nous égalisons les deux formes de solutions approximées que nous avons trouvées précédemment (II.19) et (II.25), on trouve :

$$\frac{1}{(1 - 3\Gamma\eta^2)x} (e^{-x\sqrt{3\Gamma}} - e^{-x/\eta}) = \frac{1}{Z\Gamma} \log\left(1 - \frac{(3\Gamma\alpha + b)Z\Gamma \cos(x\sqrt{3\Gamma})}{2x} - \Gamma(Z + 3\gamma) \frac{e^{-x/\eta}}{x} + \frac{3\beta Z\Gamma^2 \sin(x\sqrt{3\Gamma})}{\sqrt{3\Gamma}x}\right) \quad (30)$$

et si nous faisons un développement du deuxième membre de cette égalité :

$$\log(1 + F(x)) \approx F(x) \quad \text{si } F(x) \ll 1$$

l'égalité précédente devient :

$$\frac{1}{(1 - 3\Gamma\eta^2)x} (e^{-x\sqrt{3\Gamma}} - e^{-x/\eta}) = \frac{1}{Z\Gamma} \left(-\frac{(3\Gamma\alpha + b)Z\Gamma \cos(x\sqrt{3\Gamma})}{2x} - \Gamma(Z + 3\gamma) \frac{e^{-x/\eta}}{x} + \frac{3\beta Z\Gamma^2 \sin(x\sqrt{3\Gamma})}{\sqrt{3\Gamma}x} \right) \quad (31)$$

Nous obtenons b simplement en remplaçant dans cette équation, x , par la valeur zéro :

$$b = -2 + \frac{9}{2}\Gamma\eta^2 = -2 + \frac{9Z\Gamma^2\eta^2}{(1 + 3\Gamma\eta^2)} \quad (32)$$

Nous remplaçons la valeur de b obtenue dans (II.7) et nous trouverons la valeur de l'intégrale suivante :

$$\left[\int_0^\infty t^2 (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt \right] = \frac{Z}{3} - \frac{3}{2} Z\Gamma\gamma \quad (33)$$

II.3.1 Exemple :

Nous prenons par exemple le cas où : $Z = 5, \Gamma = 0.01, \text{ et } \eta = 0.0025$, et on remplace l'expression de b (II.32) dans (II.19) et on obtient :

$$Y_1(x) = \frac{1}{Z\Gamma} \log \left[1 - \frac{(3\Gamma\alpha + b)Z\Gamma \cos(x\sqrt{3\Gamma})}{2x} - \Gamma(Z + 3\gamma) \frac{e^{-x/\eta}}{x} + \frac{3\beta Z\Gamma^2 \sin(x\sqrt{3\Gamma})}{\sqrt{3\Gamma} x} \right]$$

et

$$Y_2(x) = \frac{1}{(1 - 3\Gamma\eta^2)x} (e^{-x\sqrt{3\Gamma}} - e^{-x/\eta})$$

Dans la Figure (II.1) nous traçons les deux courbes Y_1 et Y_2 et nous voyons qu'elles se superposent de façon très satisfaisante.

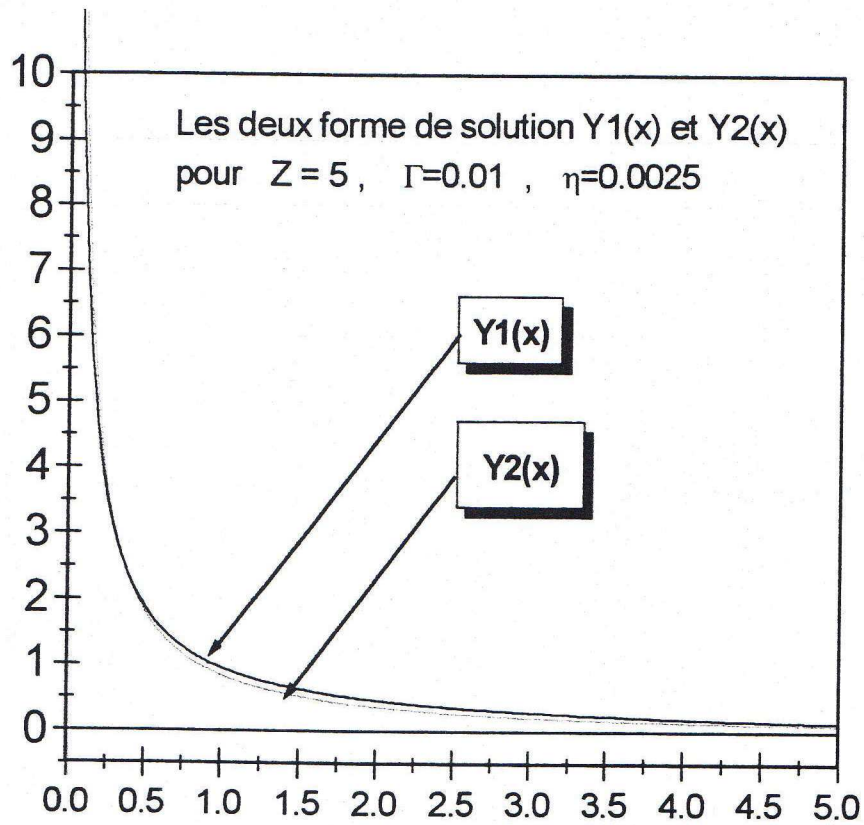


Figure (II.1): Les deux formes de solution Y_1 et Y_2

Dans la Figure (II.2) ci-contre nous traçons les courbes des énergies potentielles obtenues par l'approximation analytique pour un ion de charge $Z = 1$, un nombre de quantité $\eta = 0.01$ et différentes valeurs de couplage Γ .

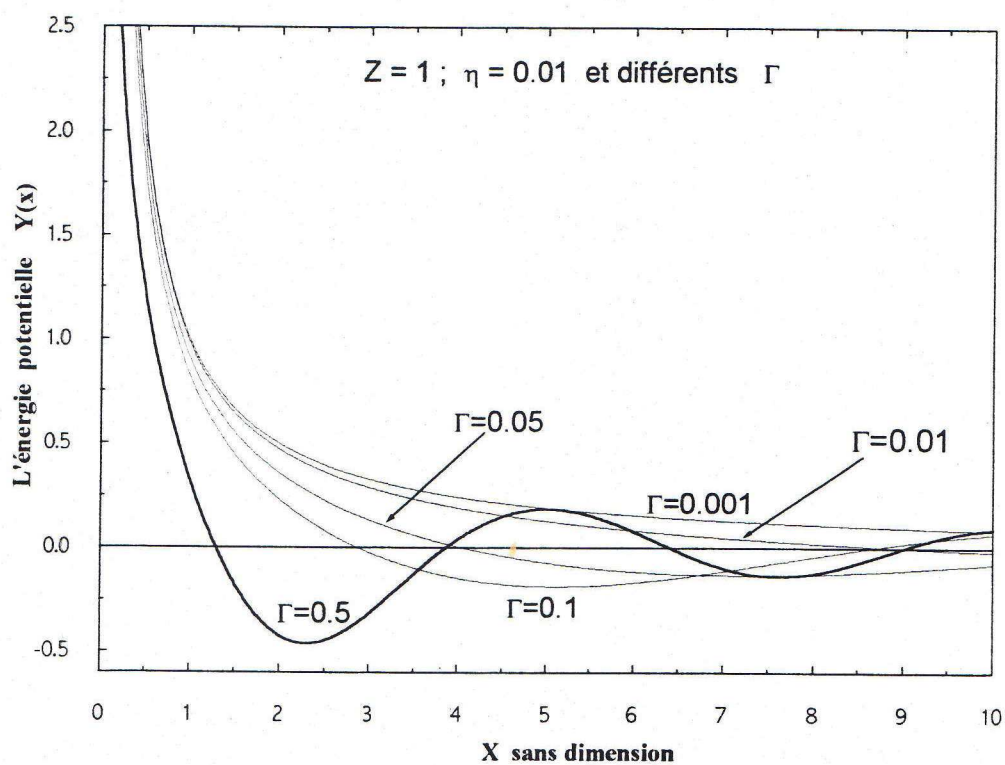


Figure (II.2): L'énergie potentielle $Y(x)$ pour $Z = 1, \eta = 0.01$ et différents Γ .

II.4 Distribution du micro champ :

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

On définit $Q(\vec{\epsilon})d\vec{\epsilon}$ comme la probabilité de trouver le champ électrique $\vec{\epsilon}$ [10] au point chargé localisé à l'origine du système de coordonnées.

$$Q(\vec{\epsilon}) = \frac{1}{Z_N} \int \dots \int e^{-\beta V_N(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)} \delta(\vec{\epsilon} - \sum_i \vec{\epsilon}_i) \prod_{j=1}^N d\vec{r}_j \quad (34)$$

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

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

$$\delta(\vec{x}) = (2\pi)^3 \iiint e^{i\vec{\lambda} \cdot \vec{x}} d\vec{\lambda} \quad (35)$$

En introduisant l'expression (II.35), nous obtenons :

$$Q(\vec{\epsilon}) = (2\pi)^{-3} \iiint T(\vec{\lambda}) e^{i\vec{\lambda} \cdot \vec{\epsilon}} d\vec{\lambda} \quad (36)$$

où :

$$T(\vec{\lambda}) = \langle e^{-i(\vec{\lambda} \cdot \sum_j \vec{\epsilon}_j)} \rangle = \frac{1}{Z_N} \int \dots \int e^{-\beta V_N} e^{-i\vec{\lambda} \cdot \sum_j \vec{\epsilon}_j} \prod_{j=1}^N d\vec{r}_j \quad (37)$$

Qui donne, vue l'isotropie du problème, lorsque nous la transformons en coordonnées sphériques :

$$Q(\bar{\varepsilon}) = \frac{1}{2\pi^2\varepsilon} \int_0^\infty T(\lambda) \sin(\varepsilon\lambda) \lambda d\lambda \quad (38)$$

Si on considère que le système est isotrope, on trouve :

$$4\pi Q(\bar{\varepsilon}) \equiv P(\varepsilon) d\varepsilon \quad (39)$$

$P(\varepsilon)$, est la probabilité de trouver le champ électrique ε à l'origine, que nous pouvons écrire :

$$P(\varepsilon) = \frac{2\varepsilon}{\pi} \int_0^\infty T(\lambda) \sin(\varepsilon\lambda) \lambda d\lambda \quad (40)$$

Et d'après l'approximation de Baranger-Moser [10] :

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

et

$$G(\lambda) = 4\pi n \int_0^\infty r^2 e^{-\beta V(r)} \left[\frac{1}{\lambda \varepsilon(r)} \sin(\lambda \varepsilon(r)) - 1 \right] dr \quad (41)$$

et après l'adimensionnement de (II.40) et (II.41) on trouve :

$$\bar{P}(\bar{\varepsilon}) = \varepsilon_0 P(\varepsilon) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty (\lambda \bar{\varepsilon}) \sin(\lambda \bar{\varepsilon}) e^{G(\lambda/\varepsilon_0)} d\lambda \quad (42)$$

et

$$\bar{G}(\lambda) = G(\lambda/\varepsilon_0) = 3 \int_0^\infty x^2 e^{Z\Gamma Y(x)} \left[\frac{1}{\lambda Y'(x)_{i-e}} \sin(\lambda Y'(x)_{i-e}) - 1 \right] dx \quad (43)$$

tels que :

$$\varepsilon_0 = e/a^2 \text{ et } Y'(x)_{i-e} = \frac{\partial Y(x)_{i-e}}{\partial x}$$

Pour obtenir $\bar{P}(\bar{\varepsilon})$, nous faisons un programme de FORTRAN et nous traçons ses courbes représentatives.

Dans les figures suivantes nous donnons l'énergie potentielle $Y(x)$, la densité d'électrons $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp électrique $\bar{P}(\bar{\varepsilon})$, pour quelques cas :

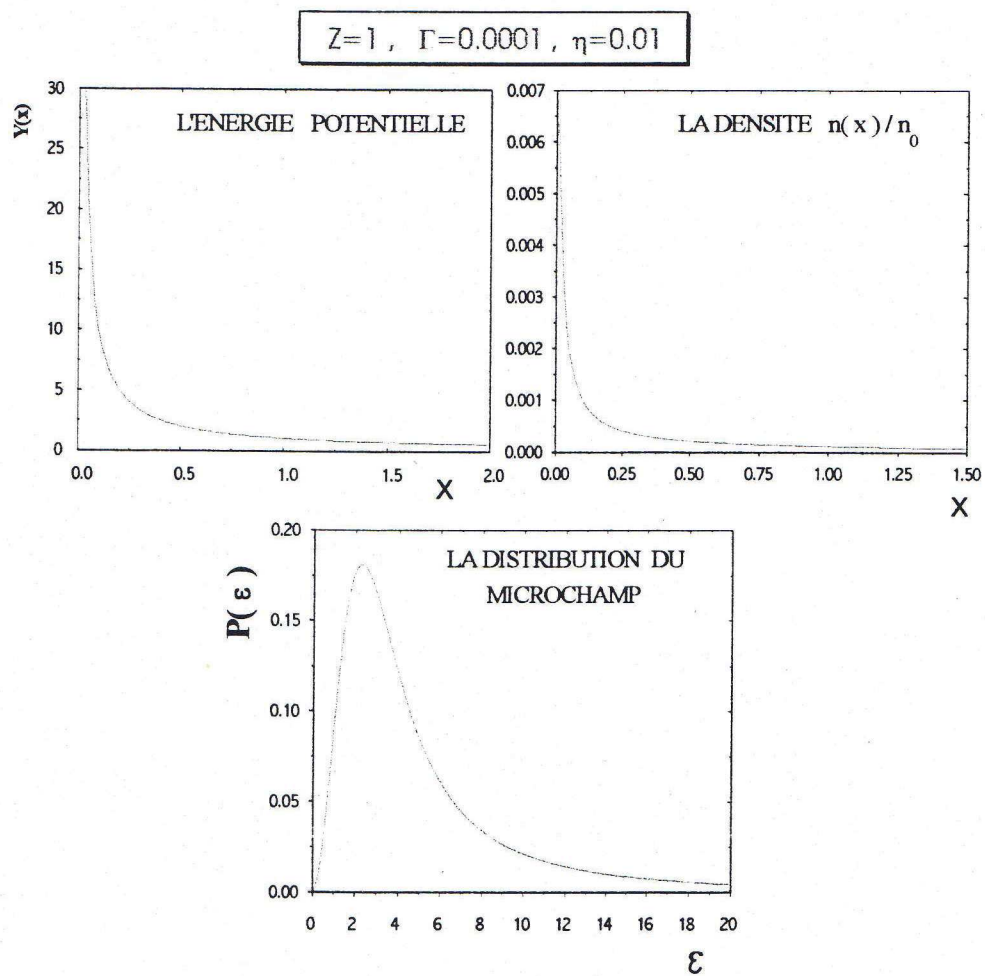


Figure (II.3): L'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp $P(\varepsilon)$ calculées par l'approximation analytique pour: $Z = 1, \eta = 0.01$ et $\Gamma = 0.0001$.

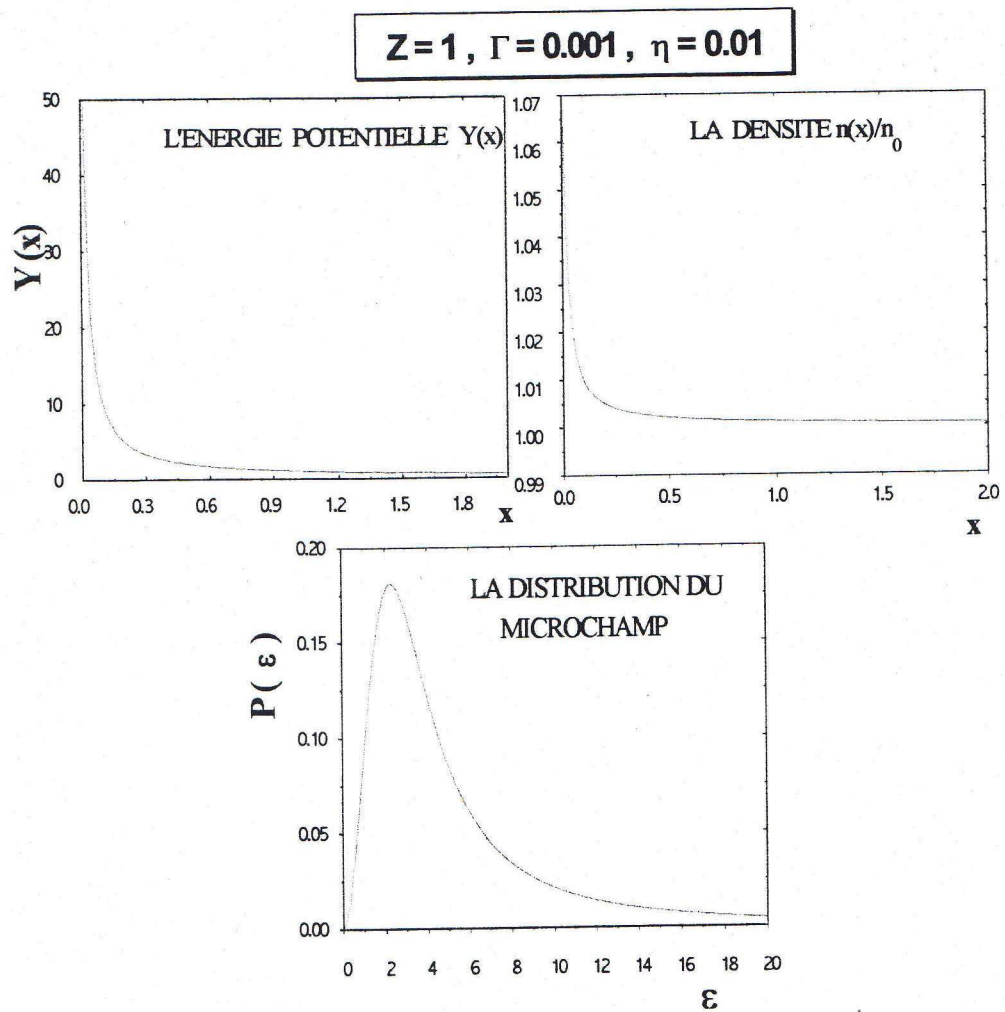


Figure (II.4): L'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp $P(\epsilon)$ calculées par l'approximation analytique pour : $Z = 1, \eta = 0.01$ et $\Gamma = 0.001$.

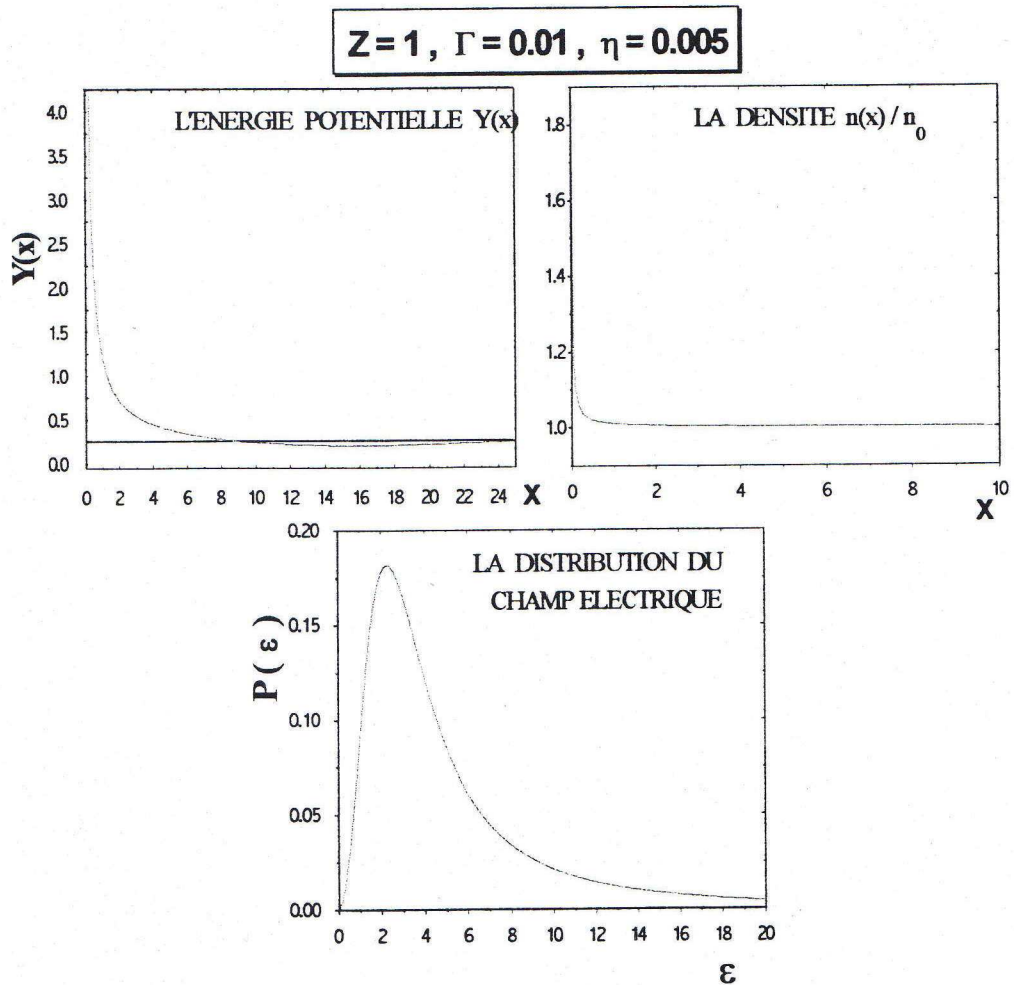


Figure (II.5): L'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp $P(\epsilon)$ calculées par l'approximation analytique pour : $Z = 1, \eta = 0.01$ et $\Gamma = 0.005$.

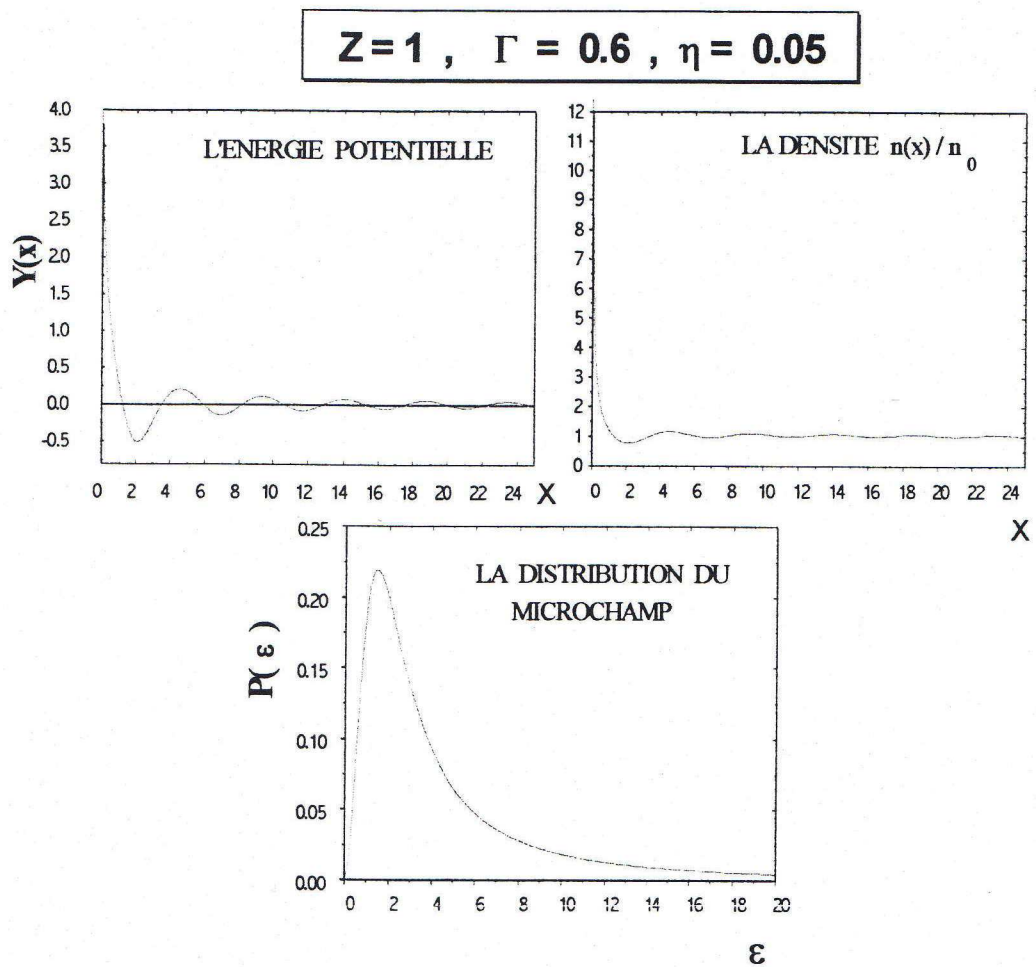


Figure (II.6): L'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp $P(\epsilon)$ calculées par l'approximation analytique pour : $Z = 1, \eta = 0.05$ et $\Gamma = 0.6$.

11.5 L'énergie interne du gaz :

L'énergie interne est donnée dans l'ensemble canonique, par :

$$U_{int} = \langle H \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log(Z_N) \quad (44)$$

H est le Hamiltonien du système, et Z_N est la fonction de partition correspondante et est égale:

$$Z_N = \int e^{-\beta H} d\Gamma^{ph} \quad (45)$$

où $\beta = 1/KT$, Γ^{ph} est l'élément de volume de l'espace de phase.

Le Hamiltonien H du système est égal à la somme des énergies potentielles et cinétiques de tous les électrons, plus l'énergie cinétique et potentielle de l'ion, alors :

$$Z_N = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-\beta \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \Phi(\vec{r}_i)_i \right) - \beta (E_c^{ion} + \Phi^{ion}) \right] \prod_{i=1}^N d\vec{p}_i \prod_{i=1}^N d\vec{r}_i \quad (46)$$

où $p_i^2/2m$ représente l'énergie cinétique de l'électron numéro i , (p_i est l'impulsion de l'électron i).

$\Phi(\vec{r}_i)_i$ représente l'énergie potentielle d'interaction⁴ de l'électron numéro i , à la position \vec{r}_i avec le reste du système.

Φ^{ion} est l'énergie potentielle de l'ion et est égale à :

$$\Phi^{ion} = Z\Phi(0) = Z(\lim_{r \rightarrow 0} \Phi(r)) \quad (47)$$

et d'après les formules (I.25) et (I.29) nous obtenons :

⁴ Cette énergie potentielle est donnée par l'équation intégrale (I.24)

$$\Phi^{ion} = -\frac{(Ze)^2}{a} \frac{1}{\eta} \quad (48)$$

E_c^{ion} est l'énergie cinétique de l'ion, et est nulle parce que nous l'avons supposée immobile, et doit rester fixe à l'origine.

Nous intégrons l'équation (II.46) par rapport à l'impulsion p :

$$Z_N = (4\pi)^N \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3N/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{(-\beta Z\Phi(0) - \beta \sum_{i=1}^N \Phi(\vec{r}_i))} \prod_{i=1}^N d\vec{r}_i \quad (49)$$

Nous transformons cette intégrale en coordonnées sphériques, et nous intégrons sur les angles θ et φ :

$$Z_N = (a\pi)^N \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3N/2} e^{-\beta Z\Phi(0)} \int_0^\infty \dots \int_0^\infty r_i^2 e^{-\beta \sum_{i=1}^N \Phi(r_i)} \prod_{i=1}^N dr_i \quad (50)$$

et nous obtenons :

$$Z_N = (a\pi)^N \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3N/2} e^{-\beta Z\Phi(0)} \left[\int_0^\infty r^2 e^{-\beta\Phi(r)} dr \right]^N \quad (51)$$

L'énergie interne vaut alors :

$$-U = -\frac{3N}{2} \frac{1}{\beta} - (Ze)^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{\beta}{\lambda_T}\right) + N \frac{\partial}{\partial \beta} \log \left[\int_0^\infty r^2 e^{-\beta\Phi(r)} dr \right] \quad (52)$$

A partir du changement (I.25), le dernier terme de cette expression, peut s'écrire sous la forme adimensionnée :

$$D = \frac{\partial}{\partial \beta} \log \left[\int_0^\infty r^2 e^{-\beta\Phi(r)} dr \right] = a^3 \frac{\partial}{\partial \beta} \log \left[\int_0^\infty x^2 e^{Z\Gamma(\beta) Y(x)} dx \right]$$

Et nous l'écrivons sous la forme :

$$D = a^3 \frac{\partial}{\partial \beta} \log \left[\int_0^\infty x^2 (e^{Z \cdot \Gamma(\beta) \cdot Y(x)} - 1) dx + \int_0^\infty x^2 dx \right] \quad (53)$$

Et d'après la formule (II.33) nous connaissons la valeur de la première intégrale de l'équation (II.53), donc :

$$D = \frac{\frac{\partial}{\partial \beta} \left[-\frac{3}{2} Z \cdot \Gamma(\beta) \cdot \gamma(\beta) \right]}{\left[\frac{Z}{3} - \frac{3}{2} Z \cdot \Gamma(\beta) \cdot \gamma(\beta) \right] + \int_0^\infty x^2 dx} \text{ tend vers zéro parce que l'intégrale } \int_0^\infty x^2 dx \text{ diverge.}$$

En définitive, l'énergie interne prend la forme simplifiée suivante :

$$U = \frac{3N}{2} \frac{1}{\beta} + (Ze)^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{\beta}{\lambda_T} \right) = \frac{3N}{2} \frac{1}{\beta} + \frac{(Ze)^2}{2} \frac{1}{\lambda_T} \quad (54)$$

où λ_T est la longueur thermique.

II.6 La chaleur spécifique :

D'après les lois de la physique statistique, la chaleur spécifique est donnée par la formule :

$$C_v = \frac{\partial}{\partial T} \langle H \rangle = \frac{\partial U}{\partial T} \quad (55)$$

Dérivons l'équation de l'énergie interne (II.54) par rapport à la température T et nous trouvons l'expression de la chaleur spécifique :

$$C_v = \frac{3N}{2} K + \frac{(Ze)^2}{4} \frac{1}{T \lambda_T} \quad (56)$$

où K est la constante de Boltzmann.

Chapitre: III

*Résolution numérique de l'équation
intégrale de l'énergie potentielle*

Introduction :

En mécanique statistique seuls quelques problèmes peuvent être résolus exactement de manière analytique. Ainsi la connaissance complète des propriétés microscopiques du système mène directement, et parfois facilement, à une série de résultats sur les propriétés macroscopiques. Malheureusement, dans la plupart des cas les problèmes ne peuvent pas être résolus exactement, et leurs traitements passent par des analyses basées sur différentes approximations. C'est ici que les méthodes numériques doivent jouer leur rôle: elles donnent des résultats exacts à des problèmes de mécanique statistique qui n'ont pas pu être résolus que de façons approchées. En ce sens, la simulation numérique peut être une façon de tester la théorie.

Durant les quarante années passées, la simulation sur les ordinateurs (les expériences de computer) a joué un rôle majeur dans l'explication des phénomènes concernant les différents états de la matière, et plus particulièrement dans son état liquide. Et d'après le point de vue théorique, l'importance de ces expériences simulées réside dans le fait qu'elles donnent des résultats quasiexpérimentaux exacts. A titre d'exemple citons un des succès de la simulation numérique: la forme du potentiel interparticulaire donnée par la simulation numérique théorique est en parfait accord avec les résultats obtenus à partir d'expériences réelles appliquées à un liquide réel [12].

De plus, un autre avantage de la technique de la simulation numérique, est qu'elle peut donner des renseignements sur des quantités physiques inaccessibles à l'expérimentation dans les laboratoires. C'est grâce à elle qu'on est aujourd'hui capable de reproduire correctement les propriétés macroscopiques de fluides réels. Le premier

travail apparu dans ce sens est dû à Wood et Parker (1957), dans lequel, et sur la base de la méthode de Monte Carlo, a montré que les résultats donnés sur les propriétés thermodynamiques sont en bon accord avec les résultats expérimentaux.

Depuis la publication du travail de Wood et Parker (1957), la méthode de la simulation numérique a été appliquée à une large variété de systèmes où les potentiels modérément réalistes sont valables: métaux, liquides, en particulier les alcalis; liquides de petites molécules diatomiques, tels que l'azote et les halogènes; et une variété de systèmes coulombiens. Peut-être les calculs les plus ambitieux sont celles rapportant à l'eau qui sont donnés par Rahman et Stillinger (1971,1974) (voire aussi Stillinger et rahman, 1972, 1974 a, 1974 b). Leur travail, basé sur le modèle à quatre points chargés, veut que plusieurs propriétés particulières de l'eau soient reproduites semi-quantitativement par la dynamique moléculaire qui est une méthode de simulation numérique. Les calculs par cette méthode sur les métaux liquides ont aussi donné d'intéressantes informations sur ce que peut fournir l'expérience. En effet et à titre d'exemple, Schiff (1961) a montré que les effets des oscillations dans la queue de l'interaction effective de l'ion-ion sur la structure, sont probablement trop petits pour être observés dans une expérience de diffusion de la radiation. Plus récemment les calculs de la dynamique moléculaire ont aussi rapporté leur fruit dans l'étude d'un modèle compliqué relatif à un halide alcalin fondu et où la polarisation des ions est explicitement prise en compte (Jacucci 1976). Certes ces résultats sont d'intérêts majeurs et donne à la simulation numérique un fort appui pour l'étude des systèmes de plus en plus compliqués.

III.2 Résolution numérique de l'équation intégrale de l'énergie potentielle :

Comme nous l'avons vu dans le premier chapitre, l'équation générale ((I.24)) gouvernant l'énergie potentielle d'un gaz d'électrons contenant une charge test à son origine, est une équation intégrale non linéaire. La non linéarité de cette équation restait un grand obstacle devant l'obtention d'une solution analytique valable pour toutes les régions, et pour toute la gamme de couplages soient-ils faibles ou forts. Néanmoins nous avons pu trouver une solution analytique approximée valable pour le couplage faible ((II.19)). La résolution de cette équation intégrale ne peut être déduite que par les techniques de l'analyse numérique.

Donc dans ce chapitre nous avons à résoudre l'équation intégrale pour l'énergie potentielle (II.1) avec les méthodes de l'analyse numérique. Et signalons de primo que plusieurs obstacles apparaissent lors de l'utilisation de cette méthode:

(a) - La non linéarité de l'équation (II.1) est représentée dans la fonction exponentielle, qui crée un grand problème de calcul dans les micro-ordinateurs; parce que la fonction exponentielle est très divergente⁵.

(b) - L'équation (II.1) contient une intégrale infinie ($\int_x^\infty t(e^{z\Gamma Y(t)} - 1)dt$), ce qui augmente le nombre d'opérations arithmétiques dans l'ordinateur.

Dans ce chapitre nous allons utiliser deux méthodes d'analyse numérique pour résoudre (II.1): la première est la méthode de Runge-Kutta d'ordre quatre [23], et la deuxième est la méthode des Substitutions Successives [23], [24].

⁵ Par exemple le micro-ordinateur (PENTIUM II.350 Mhs) ne peut pas calculer l'exponentielle d'un nombre supérieur à 709.7.

III.2.1 La méthode de RUNGE – KUTTA (R.K) :

Soit l'équation différentielle de premier ordre munie de la condition initiale Y_0 :

$$\begin{cases} \frac{dY}{dx} = f(Y, x) \\ Y(0) = Y_0 \end{cases} \quad (1)$$

Les formules du Runge-Kutta (R-K) sont parmi les plus utilisées pour résoudre les équations différentielles de premiers ordre comme (III.1).

Avantages :

- 1) Elles sont faciles à programmer.
- 2) Elles sont en général stables.
- 3) La largeur du pas peut être modifiée sans difficulté à notre gré.
- 4) Surtout, elles démarrent toutes seules : la connaissance de $Y(0)$ suffit à intégrer l'équation différentielle.

Inconvénients :

- 1) Elles demandent nettement plus de temps de calcul que les autres méthodes de précision comparable.
- 2) L'erreur locale est difficile à estimer.

III.2.2 Méthode de Runge – Kutta d'ordre deux (R.K.2) :

L'une des relations du type Runge-Kutta les plus simples, est obtenue en prenant les différences centrées au premier ordre, qui donne :

$$Y_{i+1} - Y_i = \Delta x f(Y_{i+1/2}, x_{i+1/2})$$

Mais $Y_{i+1/2} = Y(x_{i+1/2})$ est inconnu, aussi n'utilise-t-on pas la formule ci-dessus, mais la formule suivante, où $Y_{i+1/2}$ exacte est remplacée par sa valeur estimée $\widehat{Y}_{i+1/2}$:

$$\begin{cases} Y_{i+1} = Y_i + \Delta x \cdot f(\widehat{Y}_{i+1/2}, x_{i+1/2}) \\ \widehat{Y}_{i+1/2} = Y_i + \frac{\Delta x}{2} f(Y_i, x_i) \\ x_{i+1/2} = x_i + \frac{\Delta x}{2} \end{cases} \quad (2)$$

C'est une formule d'ordre deux. Notons que pour évaluer Y_{i+1} , f doit être calculée deux fois : une fois pour obtenir $\widehat{Y}_{i+1/2}$, puis une seconde fois pour obtenir Y_{i+1} .

III.2.3 Méthode de Runge – Kutta d'ordre quatre (R.K.4) :

La formule du type Runge-kutta la plus utilisée est celle d'ordre quatre, appelée généralement formule de Runge-Kutta :

$$\begin{cases} Y_{i+1} = Y_i + \frac{\Delta x}{6} \left[f(Y_i, x_i) + 2f(\widehat{Y}_{i+1/2}, x_{i+1/2}) + 2f(\widehat{\widehat{Y}}_{i+1/2}, x_{i+1/2}) + f(\widehat{Y}_{i+1}, x_{i+1}) \right] \\ \widehat{Y}_{i+1/2} = Y_i + \frac{\Delta x}{2} f(Y_i, x_i) \\ \widehat{\widehat{Y}}_{i+1/2} = Y_i + \frac{\Delta x}{2} f(\widehat{Y}_{i+1/2}, x_{i+1/2}) \\ \widehat{Y}_{i+1} = Y_i + \Delta x f(\widehat{\widehat{Y}}_{i+1/2}, x_{i+1/2}) \end{cases} \quad (3)$$

Par suite, 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 \widetilde{Y}_{i+1} après deux pas de valeur $\Delta x/2$

chacun. On a alors :

$$\frac{(\tilde{Y}_{i+1} - Y_{i+1})}{2^{-k} - 1} \quad (4)$$

où k est l'ordre de la méthode de *Runge - Kutta*. $K = 4$ pour la formule (III.3) habituelle.

L'utilisation de R.K.4 :

Pour utiliser la méthode de Runge-Kutta d'ordre quatre dans la résolution de l'équation (II.1), il faut d'abord transformer cette équation vers un système d'équations différentielles du premier ordre.

Nous avons déjà transformé l'équation (II.1) dans le deuxième chapitre vers une équation différentielle de deuxième ordre (II.27) qui est:

$$g''(x) + \frac{Z\Gamma}{\eta^2} e^{-x/\eta} + 3\Gamma x = 3\Gamma x e^{g(x)/x} \quad (5)$$

Nous posons ici :

$$h''(x) = g''(x) + \frac{Z\Gamma}{\eta^2} e^{-x/\eta} + 3\Gamma x \quad (6)$$

ce qui donne après intégration :

$$h(x) = g(x) + \frac{\Gamma}{2} x^3 + Z\Gamma e^{-x/\eta} + ax + b \quad (7)$$

où a et b sont des constantes d'intégration inconnues.

Nous remplaçons l'expression de $h''(x)$ et $h(x)$ dans (III.5), nous trouvons :

$$\left\{ \begin{array}{l} h''(x) = K(x)e^{h(x)/x} \\ \text{où} \\ K(x) = 3\Gamma x \exp\left(-\frac{\Gamma}{2}x^2 - \frac{Z\Gamma}{x}e^{-x/\eta} - \frac{b}{x} - a\right) \end{array} \right. \quad (8)$$

Nous faisons le changement $v(x) = e^{h(x)/x}$ dans (III.8) et nous obtenons :

$$v'' - \frac{v'^2}{v} + 2\frac{v'}{x} - \frac{K(x)}{x}v^2 = 0 \quad (9)$$

Pour obtenir le système d'équations différentielles du premier ordre, nous utilisons le changement suivant :

$$p(x) = \frac{v'(x)}{v(x)} \quad (10)$$

alors l'équation (III.9) se transforme au système d'équations différentielles suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dv(x)}{dx} = v(x).p(x) \\ \frac{dp(x)}{dx} = \frac{K(x)}{x}v(x) - \frac{2}{x}p(x) \end{array} \right. \quad (11)$$

Maintenant appliquons l'algorithme de Runge -Kutta d'ordre quatre (III.3) sur le système (III.11) ainsi formé. Notons que l'application de cette méthode dans notre cas (III.11) est très difficile parce que nous avons besoin de déterminer quatre valeurs initiales nécessaires et vérifiant l'égalité (III.8) ou (III.5), et qui sont:

- Les deux constantes d'intégration a et b de l'équation (III.7).
- Les deux conditions initiales $v(0)$ et $p(0)$.

EXEMPLE 1 :

Par exemple si nous prenons le cas où $Z = 1, \Gamma = 0.01$ et $\eta = 0.0025$, la méthode de R-K d'ordre 4 avec les deux valeurs initiales $a = -8.517$, et $b = -0.01$ donne les résultats suivants (Figure (III.1)) que nous comparons avec les résultats analytiques (II.19) trouvés dans le deuxième chapitre :

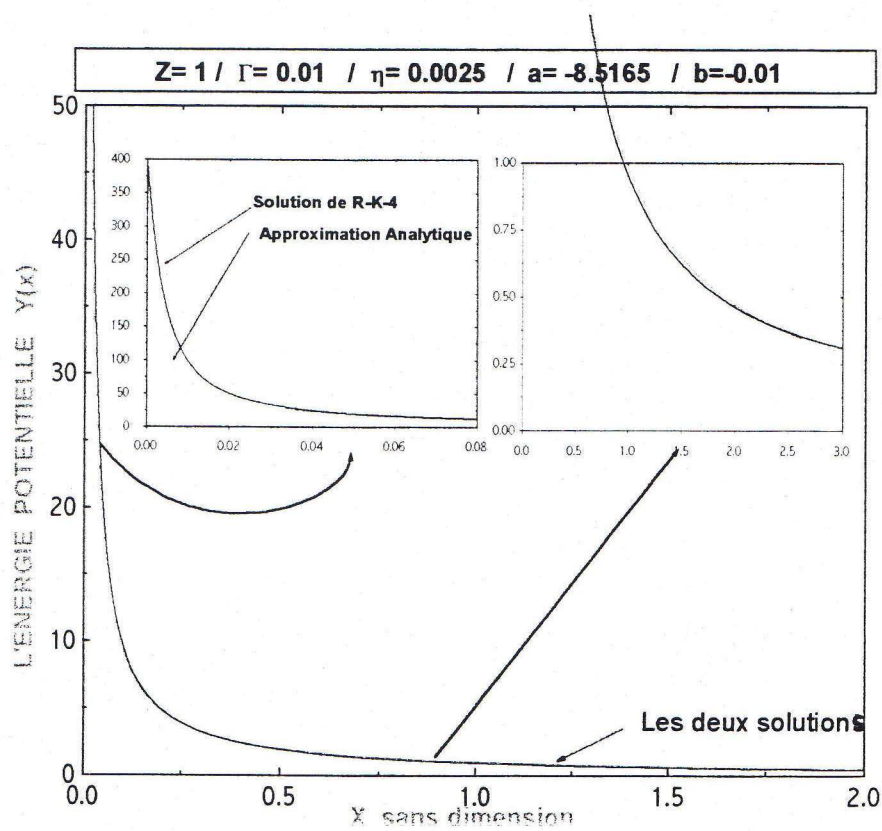


Figure (III.1): Comparaison entre les résultats de R-K et les résultats de l'approximation analytique pour: $Z = 1, \eta = 0.0025, \Gamma = 0.01$.

EXEMPLE 2 :

Prenons aussi le cas : $Z = 5$, $\Gamma = 0.01$, $\eta = 0.0025$, $a = -7.827$ et $b = -0.05$. et

nous donnons les courbes correspondantes (Figure (III.2)):

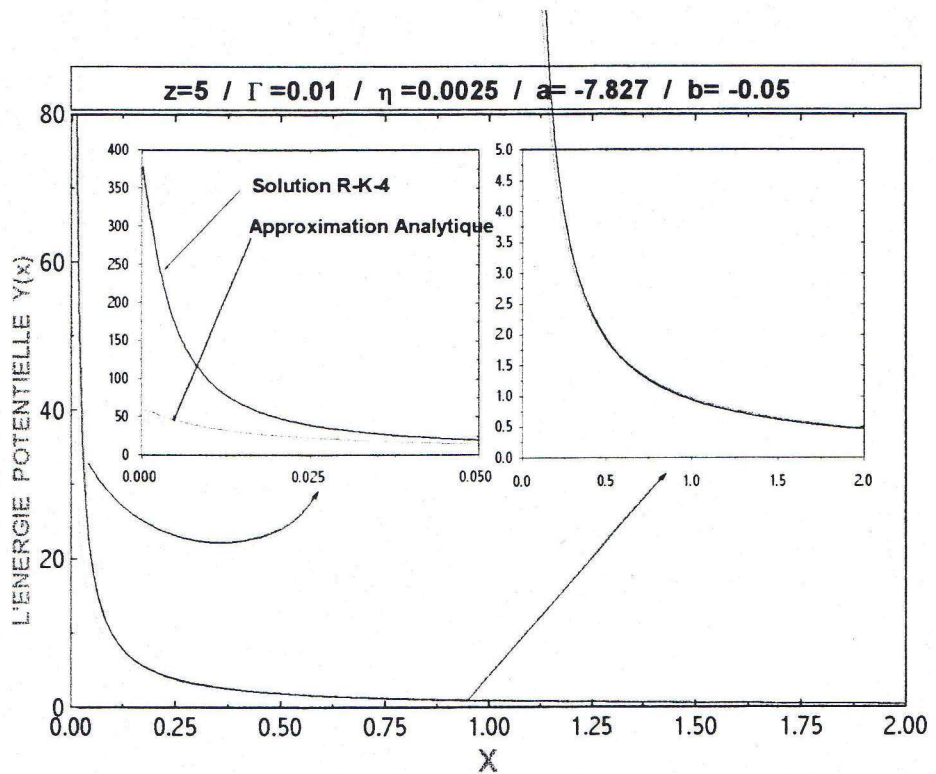


Figure (III.2): Comparaison entre les résultats de R-K et et les résultats de l'approximation analytique pour: $Z = 5, \eta = 0.0025, \Gamma = 0.01$.

III.24 Discussion :

Les résultats obtenus par la méthode de R-K d'ordre quatre sont de bons résultats et répondent à nos prévisions (paragraphe I.7.4), et sont acceptables pour les raisons suivantes:

· Nous savons bien qu'au voisinage de zéro la solution exacte tend vers la valeur $\frac{1}{\eta}$ (I.29). Et les courbes obtenues précédemment (exemple 1 et 2) par la méthode de R-K-4 vérifient cette condition avec une bonne précision :

** Dans l'exemple 1 : $\frac{1}{\eta} = \frac{1}{0.0025} = 400$ et la méthode R-K-4 donne pour $x = 3.10^{-9} \rightarrow Y_{R.K.4}(3.10^{-9}) = 399.930$

** Dans l'exemple 2 : aussi $\frac{1}{\eta} = 400$, et R-K-4 donne $Y_{R.K.4}(3.10^{-9}) = 398.614$.

Dans le domaine de couplage faible (c'est-à-dire aux grandes distances), représenté par la branche de solution analytique (II.19), la solution de R-K-4 est confondue avec cette branche de solution. Par exemple dans le deuxième exemple précédent dans l'intervalle $[0.5, \infty[$ les deux solutions analytiques (II.19) et R-K-4 (III.3) sont exactement confondues (voir la Figure (III.2)).

– Mais aux courtes distances ou dans le cas du couplage fort, la courbe de R-K-4 est la meilleure pour expliquer le comportement d'électrons au voisinage de l'impureté.

III.25 Méthode des Substitutions Successives (S.S) :

La méthode des substitutions successives [23], [24], dite aussi itérative, est une méthode numérique qui est intéressante lorsque l'on dispose d'un ordinateur. Elle, parmi les méthodes 'indirectes', exige théoriquement un nombre infini d'opérations pour obtenir la solution exacte.

Elle est utilisable le plus souvent dans les problèmes où la convergence est sensée être rapide, ou dans les problèmes à nombre élevé d'éléments de matrice nuls; ce qui occupe beaucoup moins de mémoire d'ordinateur.

Théorème du point fixe ([23]) :

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

$$\|G(T_1) - G(T_2)\| \leq \alpha \|T_1 - T_2\| \quad (12)$$

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

$$0 < \alpha < 1$$

alors il existe :

$$G(T^{(*)}) = T^{(*)} \quad (13)$$

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

$$(T_0, T_1, T_2, \dots, T_k, \dots) \quad (14)$$

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

$$T_1 = G(T_0), T_2 = G(T_1), \dots, T_k = G(T_{k-1}), \dots \quad (15)$$

et

$$\|T_k - T^{(*)}\| \leq \frac{\alpha^k}{1-\alpha} \|T_1 - T_2\| \quad (16)$$

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

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

REMARQUE :

i) -L'expression (III.16) fournit une estimation calculable de l'erreur commise dans le processus itératif.

ii)-Si $V = F = \mathfrak{R}^n$ et G est une application contractive, le théorème précédent devient un théorème de convergence globale et :

$\forall T_0 \in \mathfrak{R}^n$, la suite (III.14) converge vers un point fixe unique dans \mathfrak{R}^n .

Principe de S.S :

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

$$x = F(x) \quad (17)$$

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 (III.17). 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 $n - i\text{ème}$ itération :

$$x^{(n)} = F(x^{(n-1)}) \quad (18)$$

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 (III.17).

Convergence du procédé itératif :

Théorème⁶: Si $F(x)$ de l'équation $x = F(x)$ possède une dérivée qui vérifie :

$$|F'(x)| \leq m < 1 \quad \forall x \in \mathfrak{R} \quad (19)$$

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

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

Remarque :

1)- Le théorème fournit une condition suffisante, c'est à dire pour que la méthode des substitutions successives converge, il suffit que :

$$|F'(x)| < 1 \quad \text{sur } \mathfrak{R}$$

2)- Plus $F'(x)$ est petite, plus la convergence est rapide.

Comportement de l'erreur d'estimation :

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

⁶ pour connaître la démonstration de ce théorème voire [24]

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\varepsilon^{(n+1)}}{\varepsilon^{(n)}} = F'(x^*) \quad (20)$$

D'après le théorème des accroissements finis :

$$x^{(n+1)} - x^* = F'(e^{(n)})(x^{(n)} - x^*) \text{ avec } e^{(n)} \in]x^{(n)}, x^*[\quad (21)$$

d'où :

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

Si la méthode converge, alors :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} F'(e^{(n)}) = F'(x^*)$$

d'où :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\varepsilon^{(n+1)}}{\varepsilon^{(n)}} = F'(x^*) = C^{te} \quad (22)$$

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 :

$$|f(x^{(n)})| < \varepsilon_1 \quad (23)$$

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

$$\left| \frac{x^{(n)} - x^{(n-1)}}{x^{(n)}} \right| < \varepsilon_2 \text{ ou } \left| x^{(n)} - x^{(n-1)} \right| < \varepsilon_3 \quad (24)$$

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

$$n > n_{\max} \quad (25)$$

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'estimé initial $x^{(0)}$ donné.

Application de la méthode des S.S :

Nous appliquons la méthode des substitutions successives (S-S) précédente pour résoudre l'équation intégrale de l'énergie potentielle (I.24). Nous choisissons la fonction $\frac{1}{x}(1 - e^{-x/\eta})$ comme une fonction de démarrage⁷.

Exemples :

Nous prenons les mêmes cas traités par la méthode de R.K.4.

- Premier cas: $Z = 1, \eta = 0.0025, \Gamma = 0.01$.

Par l'algorithme des S-S nous obtenons la courbe de l'énergie potentielle adimensionnée $Y(x)$, que nous comparons avec les résultats obtenus avec la méthode de R.K.4.(Figure (III.3))

⁷ Nous avons le choix de choisir d'autres fonctions convergentes mais la fonction $\frac{1}{x}(1 - e^{-x/\eta})$ est plus convergente

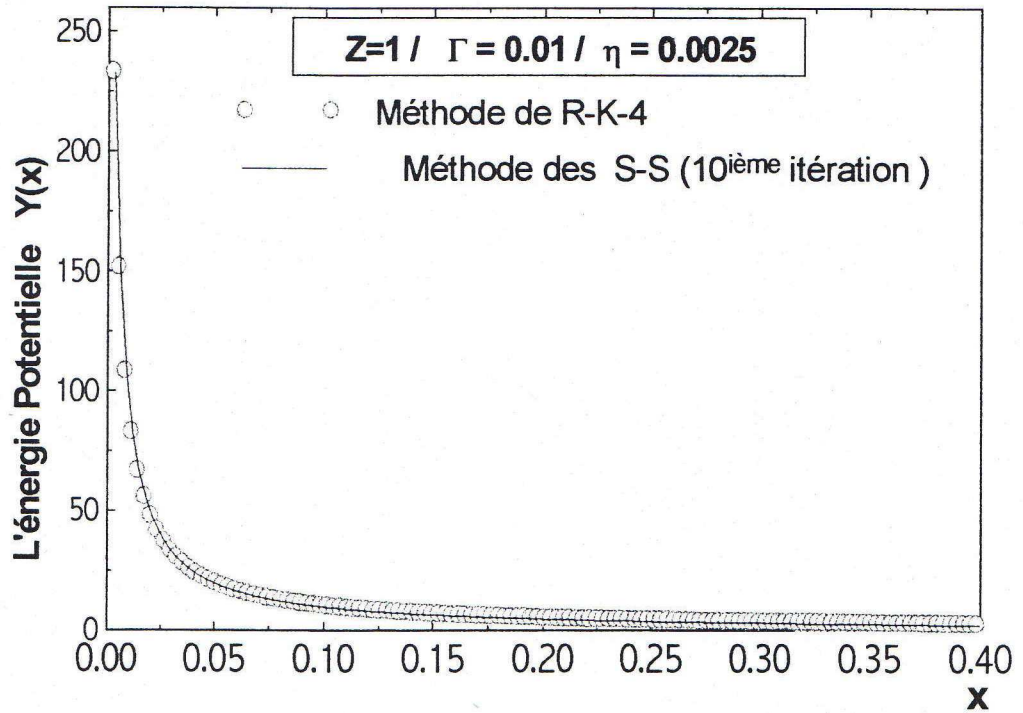


Figure (III.3): Comparaison entre les résultats de R-K-4 et de S-S pour le cas: $Z = 1, \eta = 0.0025$ et $\Gamma = 0.01$.

Pour bien voir la différence entre les deux méthodes nous donnons les résultats numériques de l'énergie potentielle trouvés par la méthode de R.K.4 et avec la méthode des S-S (20-ième itération) (Table (III.1)).

Table (III.1): Les résultats numériques de l'énergie potentielle trouvés par la méthode de R.K.4 et avec la méthode des S-S (20 itérations) et l'erreur relative

X	R-K4	S-S	Err-relati	X	R-K4	S-S	Err- relati
2.00E-04	384.349	384.4115	1.63E-04	0.01	98.09911	98.08969	9.61E-05
4.00E-04	369.5713	369.6337	1.69E-04	0.02	49.914	49.90461	1.88E-04
6.00E-04	355.551	355.6134	1.76E-04	0.03	33.26408	33.25468	2.83E-04
8.00E-04	342.2445	342.3069	1.83E-04	0.04	24.93114	24.92173	3.78E-04
1.00E-03	329.6107	329.6732	1.89E-04	0.05	19.93133	19.9219	4.73E-04
0.0012	317.6113	317.6737	1.97E-04	0.06	16.59818	16.58874	5.69E-04
0.0014	306.21	306.2725	2.04E-04	0.07	14.2174	14.20795	6.65E-04
0.0016	295.373	295.4355	2.11E-04	0.08	12.43186	12.42241	7.61E-04
0.0018	285.0684	285.1309	2.19E-04	0.09	11.04314	11.03368	8.58E-04
0.002	275.2663	275.3288	2.27E-04	0.1	9.9322	9.92273	9.55E-04
0.0022	265.9386	266.001	2.35E-04	0.11	9.02328	9.0138	0.00105
0.0024	257.0588	257.1212	2.43E-04	0.12	8.26587	8.25639	0.00115
0.0026	248.6021	248.6646	2.51E-04	0.13	7.62501	7.61552	0.00125
0.0028	240.5452	240.6076	2.60E-04	0.14	7.07572	7.06623	0.00134
0.003	232.8661	232.9286	2.68E-04	0.15	6.59969	6.5902	0.00144
0.0032	225.5442	225.6066	2.77E-04	0.16	6.18319	6.17369	0.00154
0.0034	218.56	218.6225	2.86E-04	0.17	5.8157	5.8062	0.00164
0.0036	211.8954	211.9578	2.95E-04	0.18	5.48907	5.47956	0.00173
0.0038	205.533	205.5955	3.04E-04	0.19	5.19683	5.18732	0.00183
0.004	199.4567	199.5192	3.13E-04	0.2	4.93383	4.92432	0.00193
0.0042	193.6514	193.7138	3.22E-04	0.21	4.69589	4.68638	0.00203
0.0044	188.1025	188.165	3.32E-04	0.22	4.4796	4.47008	0.00213
0.0046	182.7967	182.8591	3.42E-04	0.23	4.28213	4.27261	0.00223
0.0048	177.7211	177.7836	3.51E-04	0.24	4.10113	4.0916	0.00233
0.005	172.8639	172.9263	3.61E-04	0.25	3.93461	3.92509	0.00243
0.0052	168.2136	168.276	3.71E-04	0.26	3.78093	3.7714	0.00253
0.0054	163.7596	163.8221	3.81E-04	0.27	3.63863	3.6291	0.00263
0.0056	159.4919	159.5544	3.92E-04	0.28	3.50651	3.49698	0.00273
0.0058	155.401	155.4635	4.02E-04	0.29	3.38351	3.37398	0.00283
0.006	151.478	151.5404	4.12E-04	0.3	3.26873	3.25919	0.00293
0.0062	147.7143	147.7768	4.23E-04	0.31	3.16135	3.15181	0.00303
0.0064	144.1021	144.1646	4.33E-04	0.32	3.0607	3.05116	0.00313
0.0066	140.6338	140.6963	4.44E-04	0.33	2.96616	2.95661	0.00323
0.0068	137.3023	137.3648	4.55E-04	0.34	2.87719	2.86764	0.00333
0.007	134.101	134.1634	4.66E-04	0.35	2.79331	2.78376	0.00343
0.0072	131.0234	131.0859	4.77E-04	0.36	2.71409	2.70454	0.00353
0.0074	128.0636	128.126	4.88E-04	0.37	2.63917	2.62962	0.00363
0.0076	125.2159	125.2784	4.99E-04	0.38	2.5682	2.55865	0.00373
0.0078	122.475	122.5374	5.10E-04	0.39	2.50088	2.49132	0.00384
0.008	119.8358	119.8982	5.21E-04	0.4	2.43693	2.42737	0.00394
0.0082	117.2934	117.3559	5.32E-04	0.41	2.3761	2.36654	0.00404
0.0084	114.8435	114.906	5.44E-04	0.42	2.31818	2.30862	0.00414
0.0086	112.4817	112.5441	5.55E-04	0.43	2.26296	2.2534	0.00424
0.0088	110.2038	110.2663	5.66E-04	0.44	2.21026	2.2007	0.00435
0.009	108.0062	108.0687	5.78E-04	0.45	2.15991	2.15034	0.00445
0.0092	105.8851	105.9476	5.90E-04	0.46	2.11175	2.10218	0.00455
0.0094	103.8371	103.8995	6.01E-04	0.47	2.06565	2.05608	0.00465
0.0096	101.8588	101.9213	6.13E-04	0.48	2.02147	2.0119	0.00476
0.0098	99.94729	100.0098	6.25E-04	0.49	1.97911	1.96954	0.00486
				0.5	1.93844	1.92887	0.00496

- Deuxième cas :

$Z = 5, \eta = 0.0025, \Gamma = 0.01$. (Figure (III.4))

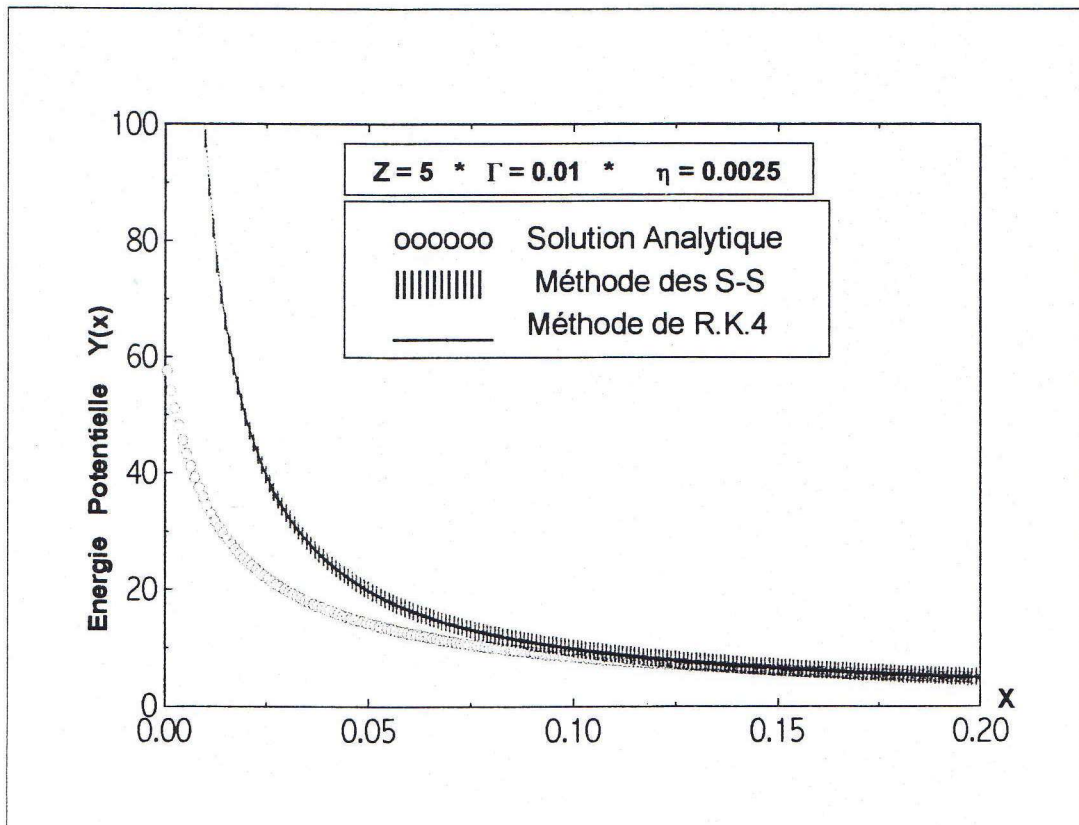


Figure (III.4): Les résultats obtenus par la méthode de R-K-4, La méthode de S-S et l'approximation analytique pour le cas : $Z = 5, \eta = 0.0025$ et $\Gamma = 0.01$

Dans les figures suivantes nous donnons l'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique locale $n(x)/n_0$ et la distribution du microchamp $P(\varepsilon)$.

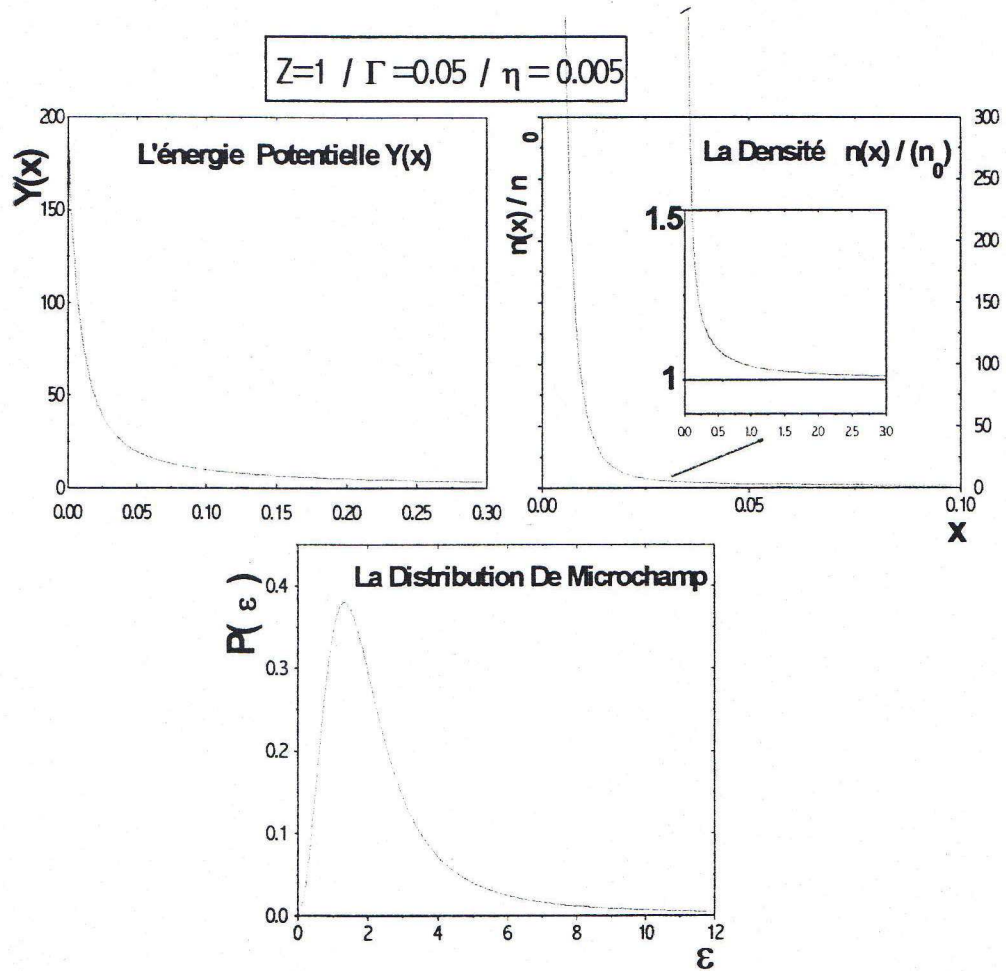


Figure (III.5): L'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp $P(\varepsilon)$ calculées par la méthode des S-S pour : $Z = 1, \eta = 0.005$ et $\Gamma = 0.05$.

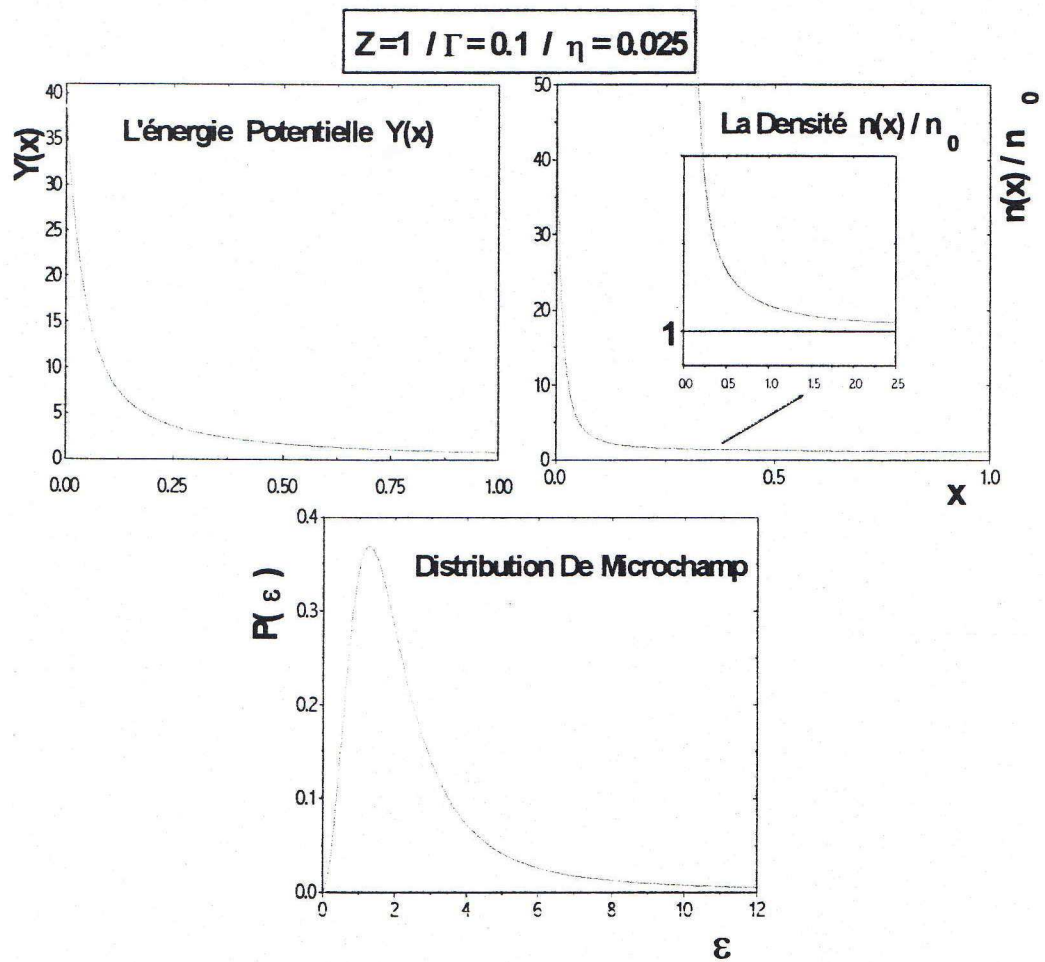


Figure (III.6): L'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp $P(\epsilon)$ calculées par la méthode des S-S pour : $Z = 1$, $\eta = 0.025$ et $\Gamma = 0.1$

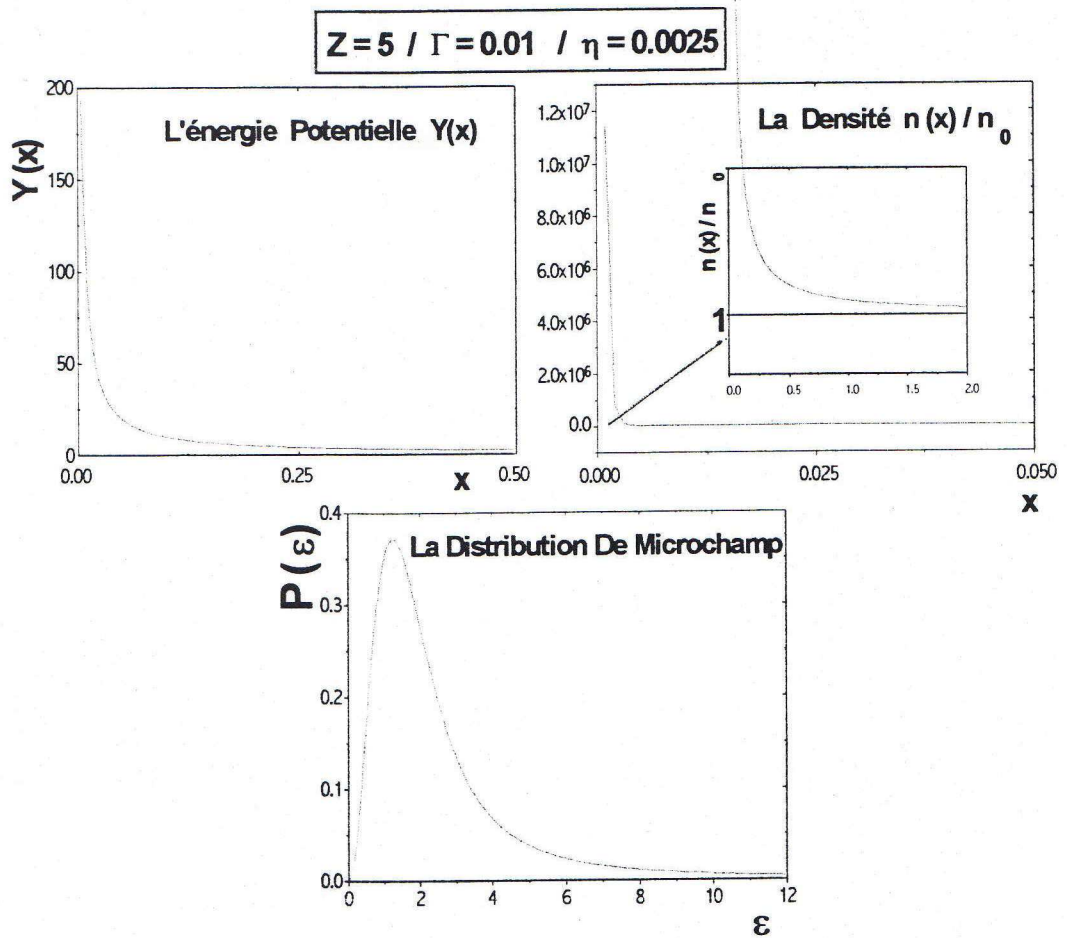


Figure (III.7): L'énergie potentielle $Y(x)$, la densité électronique $\frac{n(x)}{n_0}$ et la distribution du microchamp $P(\epsilon)$ calculées par la méthode des S-S pour : $Z = 5$, $\eta = 0.0025$ et $\Gamma = 0.01$.

Discussion :

Pour obtenir de bons résultats avec la méthode des Substitutions Successives nous sommes obligés d'effectuer :

- Un grand nombre d'itérations pour atteindre la solution exacte.
- Augmenter l'intervalle d'intégration pour atteindre la valeur exacte de l'intégrale

$$\int_0^{\infty} \frac{t}{x} (x + t - |x - t|) (e^{Z\Gamma Y(t)} - 1) dt.$$

- Diminuer le pas d'intégration pour affaiblir l'erreur dans la méthode d'intégration.

Toutes ces exigences nécessitent une machine de grande puissance pour s'approcher plus de la solution exacte. D'ailleurs c'est pour cette raison que nous n'avons pas pu augmenter la valeur de couplage Γ de façon considérable dans nos calculs. Rappelons que le micro-ordinateur disponible est du type (PENTIUM II.350 Mhs) ne pouvant pas calculer l'exponentielle d'un nombre supérieur à $C_{\max}^{mach} = 709.7$.

Comme déjà vu, l'énergie potentielle $Y(x)$ prend la valeur maximale $1/\eta$ au voisinage de zéro, alors avec notre ordinateur⁸ nous pouvons seulement calculer l'énergie potentielle des gaz vérifiant la condition suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} Z\Gamma \frac{1}{\eta} \leq C_{\max}^{mach} \\ \text{où} \\ C_{\max}^{mach} = 709.7 \end{array} \right. \quad (26)$$

C'est à dire que la valeur maximale de couplage Γ que nous pouvons atteindre est :

⁸ C'est le même obstacle trouvé par l'équipe française de l'université de Pierre et Marie Curie, dont les estimations obtenues sur la densité d'ions ont légèrement varié avec la puissance des ordinateurs disponibles, qu'ont donné l'avantage aux équipes américaines de Lawrence Livermore Laboratory.

$$\Gamma = \frac{\eta}{Z} C_{\max}^{mach} \quad (27)$$

Par exemple dans le cas $Z = 5, \eta = 0.0025, \Gamma = 0.01$: nous pouvons augmenter Γ jusqu'à la valeur $\frac{0.0025}{5} \cdot 709.7 = 0.35485$ seulement .

Sur la figure suivante (Figure (III.8)) nous donnons l'énergie potentielle (dans l'intervalle [0.001, 2.5]) trouvée par la méthode des S-S de quelques cas avec les valeurs possibles de Γ .

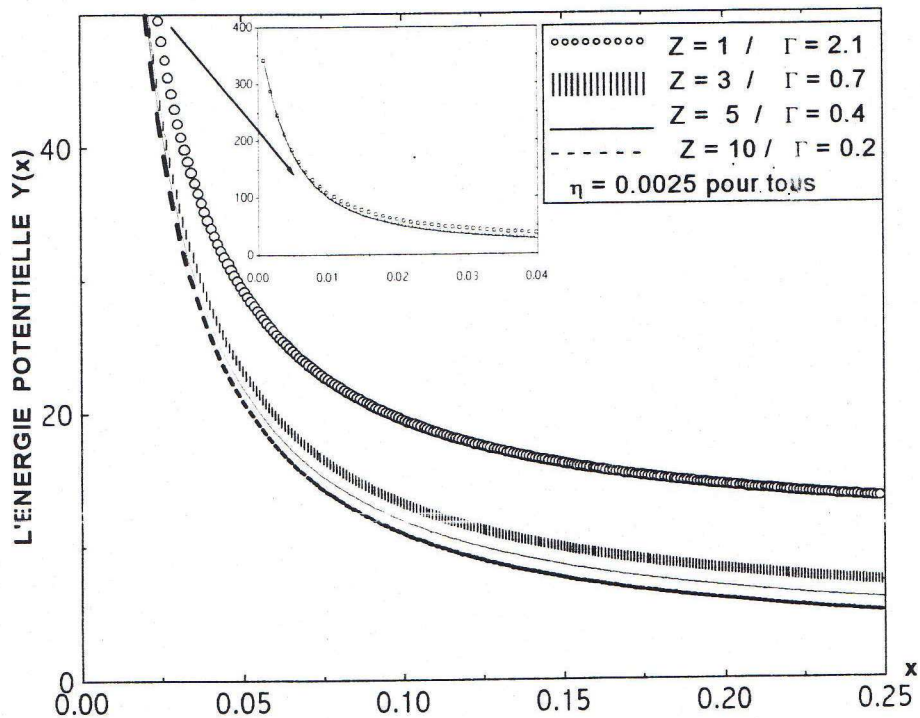


Figure (III.8): Quelques courbes maximales de l'énergie potentielle $Y(x)$ obtenues par PENTIUM II.350 Mhs

III.2.6 Conclusion :

D'après les résultats obtenus par les deux méthodes, de R-K-4 et S-S le comportement de l'énergie potentielle au voisinage de zéro est gouverné en majeure partie par le degré de quantité η , et cela est compatible avec nos prévisions que nous avons signalées dans le premier chapitre. Par exemple dans la figure Figure (III.8) lorsque nous avons fixé la valeur de η et changé Γ et Z la forme de $Y(x)$ resta constante au voisinage de zéro en commençant par la valeur $1/\eta$.

III.3 Estimation du nombre d'électrons dans les états liés :

La densité locale de particules [2] est donnée par la formule (I.30) :

$$n(r) = n_0 \int \left(\frac{m\beta}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-\beta(\frac{1}{2}m\vec{v}^2 + \Phi(r))} d\vec{v}^3 \quad (28)$$

Les électrons liés sont les électrons ayant l'énergie totale (cinétique + potentielle) négative.

Cette condition se traduit en une autre sur la vitesse de l'électron :

$$E_t \leq 0 \Rightarrow \frac{1}{2}v^2 + \Phi(r) \leq 0 \quad (29)$$

Nous utilisons les changements suivants pour adimensionner les expressions précédentes :

$$\left\{ \begin{array}{l} Y(x) = -\frac{a}{Ze^2} \Phi(r) \\ x = \frac{r}{a} \\ u = \frac{v}{v_m} = v \sqrt{\frac{m\beta}{3}} \end{array} \right. \quad (30)$$

Alors (III.29) donne la condition nécessaire sur la vitesse adimensionnée u de l'électron pour qu'il soit dans l'état lié :

$$u \leq \sqrt{\left(\frac{2}{3}\right)Z\Gamma Y(x)} \quad (31)$$

Avec cette condition, l'équation (III.28) devient :

$$\frac{n(r)}{n_0} = 4\pi \left(\frac{3}{2\pi}\right)^{3/2} \int_0^{\sqrt{\left(\frac{2}{3}\right)Z\Gamma Y(x)}} u^2 e^{-\frac{3}{2}u^2 + Z\Gamma Y(x)} du \quad (32)$$

et est égale aussi :

$$\frac{n(r)}{n_0} = 4\pi \left(\frac{3}{2\pi}\right)^{3/2} e^{Z\Gamma Y(x)} \int_0^{\sqrt{\frac{2}{3}Z\Gamma Y(x)}} u^2 e^{-\frac{3}{2}u^2} du \quad (33)$$

Donc la fraction d'électrons se trouvant dans les états liés et situés, à la position x , est :

$$\frac{n(r)}{n_0} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3}{2}\right)^{3/2} e^{Z\Gamma Y(x)} \int_0^{\sqrt{\frac{2}{3}Z\Gamma Y(x)}} u^2 e^{-\frac{3}{2}u^2} du \quad (34)$$

Et nous pouvons aussi trouver la fraction d'électrons liés dans la couronne sphérique $x_1 \leq x \leq x_2$, si nous intégrons l'équation (III.34) par rapport aux coordonnées de position adimensionnées :

$$\left[\frac{n(x)}{n_0} \right]_{x_1 \rightarrow x_2} = 4\pi \int_{x_1}^{x_2} x^2 \left(\frac{n(x)}{n_0} \right) dx \quad (35)$$

et égale :

$$\left[\frac{n(x)}{n_0} \right]_{x_1 \rightarrow x_2} = 24\sqrt{\frac{3\pi}{2}} \int_{x_1}^{x_2} x^2 e^{Z\Gamma Y(x)} dx \int_0^{\sqrt{\frac{2}{3}Z\Gamma Y(x)}} u^2 e^{-\frac{3}{2}u^2} du \quad (36)$$

Nous posons $u' = u\sqrt{\frac{3}{2}}$ l'équation (III.36) devient :

$$\left[\frac{n(x)}{n_0} \right]_{x_1 \rightarrow x_2} = 12\sqrt{\frac{3\pi}{2}} \int_{x_1}^{x_2} x^2 e^{Z\Gamma Y(x)} dx \int_0^{\sqrt{Z\Gamma Y(x)}} u'^2 e^{-u'^2} du' \quad (37)$$

Dans le Table (III.2) nous donnons les résultats obtenus par le calcul numérique de l'équation (III.37) dans la région $x \in [10^{-3}, 3]$:

Z	η	Γ	$(n(x)/n_0) \%$
1	0.0025	0.01	02.60
2	0.0025	0.01	07.37
3	0.0025	0.01	13.62
4	0.0025	0.01	21.38
5	0.0025	0.01	36.67
5	0.025	0.01	35.93
5	0.0025	0.001	01.048

Table (III.2): Estimation des états liés

Chapitre: IV

*Dynamique des électrons autour de
l'impureté*

IV.1 L'équation du mouvement :

L'équation différentielle gouvernant le mouvement d'électrons autour de l'impureté est :

$$m_e \ddot{\vec{r}}' = m_e \frac{\partial^2 \vec{r}'}{\partial t^2} = -\nabla \Phi(r') \quad (1)$$

où : m_e est la masse d'électron ($9.1093897 \times 10^{-31}$ kg), et $\Phi(r')$ son énergie potentielle donnée par la formule (I.24).

Nous développons l'équation (IV.1) :

$$m_e \left[\ddot{x}' \vec{i} + \ddot{y}' \vec{j} + \ddot{z}' \vec{k} \right] = - \left[\frac{\partial \Phi(r')}{\partial x'} \vec{i} + \frac{\partial \Phi(r')}{\partial y'} \vec{j} + \frac{\partial \Phi(r')}{\partial z'} \vec{k} \right] \quad (2)$$

IV.1.1 Adimensionnement de l'équation de mouvement :

D'après les changements (I.25) nous posons :

$$\begin{cases} \Phi(r') = -\frac{Ze^2}{a} Y(\bar{X}') \\ \text{où } r' = a\bar{X}' \end{cases} \quad (3)$$

telle que \bar{X}' est égale x définie dans l'équation (I.25), et $Y(\bar{X}')$ est l'énergie potentielle donnée par la formule (I.26).

c'est-à-dire :

$$\left\{ \begin{array}{l} x' = ax'' \\ y' = ay'' \\ z' = az'' \\ \text{où : } \bar{X}' = \sqrt{x''^2 + y''^2 + z''^2} \end{array} \right. \quad (4)$$

Pour la coordonnée x' nous avons d'après la formule (IV.2) :

$$m_e \ddot{x}' = -\frac{\partial \Phi(r')}{\partial x'} \quad (5)$$

Nous effectuons les changements (IV.3) et (IV.4) dans (IV.5) nous trouvons :

$$m_e \ddot{x}' = m_e \frac{\partial^2 x''}{\partial t^2} = \frac{Ze^2}{a^3} \frac{\partial Y(\bar{X}')}{\partial x''} \quad (6)$$

Adimensionnement de temps:

Nous posons:

$$t = \frac{T}{\omega_p} \quad (7)$$

où T est le temps sans unité et ω_p est la fréquence de plasma donnée par la formule (I.15) et égale aussi: $\sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m_e}}$.

Donc nous écrivons :

$$\frac{\partial x''}{\partial t} = \frac{\partial x''}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = \omega_p \frac{\partial x''}{\partial T} \quad (8)$$

alors l'équation (IV.6) devient :

$$\frac{\partial^2 x''}{\partial T^2} = \ddot{x}'_T = \frac{Ze^2}{m_e a^3 \omega_p^2} \frac{\partial Y(\bar{X}')}{\partial x''} = \frac{Z}{3} \frac{\partial Y(\bar{X}')}{\partial x''} \quad (9)$$

et nous pouvons écrire aussi :

$$\frac{\ddot{x}'_T}{x'_T} = \frac{Z}{3} \frac{\partial Y(\overline{X}')}{\partial \overline{x}'} = \frac{Z}{3} \frac{\partial Y(\overline{X}')}{\partial \overline{X}'} \frac{\partial \overline{X}'}{\partial \overline{x}'} = \frac{Z}{3} \frac{\overline{x}'}{\overline{X}'} \frac{\partial Y(\overline{X}')}{\partial \overline{X}'} \quad (10)$$

La même chose pour les autres coordonnées y' et z' , nous trouvons :

$$\begin{cases} \frac{\ddot{x}'_T}{x'_T} = \frac{Z}{3} \frac{\overline{x}'}{\overline{X}'} \frac{\partial Y(\overline{X}')}{\partial \overline{X}'} \\ \frac{\ddot{y}'_T}{y'_T} = \frac{Z}{3} \frac{\overline{y}'}{\overline{X}'} \frac{\partial Y(\overline{X}')}{\partial \overline{X}'} \\ \frac{\ddot{z}'_T}{z'_T} = \frac{Z}{3} \frac{\overline{z}'}{\overline{X}'} \frac{\partial Y(\overline{X}')}{\partial \overline{X}'} \end{cases} \quad (11)$$

IV.12 Résolution numérique de l'équation du mouvement :

D'après le développement de Taylor nous pouvons écrire pour la coordonnée adimensionnée \overline{x}' :

$$\begin{cases} \overline{x}'(T - \Delta T) = \overline{x}'(T) - \Delta T \dot{\overline{x}}'(T) \\ \ddot{\overline{x}}'(T) = \frac{\overline{x}'(T + \Delta T) + \overline{x}'(T - \Delta T) - 2\overline{x}'(T)}{(\Delta T)^2} \end{cases} \quad (12)$$

A partir du système d'équations (IV.12), le système des équations différentielles (IV.11) devient :

$$\begin{cases} \overline{x}'(T + \Delta T) = \overline{x}'(T) \left[(\Delta T)^2 \frac{Z}{3} \frac{1}{\overline{X}'} \frac{\partial Y(\overline{X}')}{\partial \overline{X}'} + 2 \right] - \overline{x}'(T - \Delta T) \\ \overline{y}'(T + \Delta T) = \overline{y}'(T) \left[(\Delta T)^2 \frac{Z}{3} \frac{1}{\overline{X}'} \frac{\partial Y(\overline{X}')}{\partial \overline{X}'} + 2 \right] - \overline{y}'(T - \Delta T) \\ \overline{z}'(T + \Delta T) = \overline{z}'(T) \left[(\Delta T)^2 \frac{Z}{3} \frac{1}{\overline{X}'} \frac{\partial Y(\overline{X}')}{\partial \overline{X}'} + 2 \right] - \overline{z}'(T - \Delta T) \end{cases} \quad (13)$$

Maintenant nous donnons les trajectoires obtenues par la programmation de

l'algorithme(IV.13), pour le cas $Z = 1, \eta = 0.0025, \Gamma = 0.01$:

Figure (IV.1) un état lié avec les conditions initiales :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = 0.1, \bar{z}'(0) = 0.05 \\ \dot{\bar{x}}'(0) = \dot{\bar{y}}'(0) = \dot{\bar{z}}'(0) = 1 \end{array} \right.$$

Figure (IV.2) un état lié avec les conditions initiales:

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = 1, \bar{z}'(0) = 0.5 \\ \dot{\bar{x}}'(0) = \dot{\bar{y}}'(0) = \dot{\bar{z}}'(0) = 1.5 \end{array} \right.$$

Et nous pouvons vérifier que le moment cinétique au cours du mouvement est

constante, c'est-à dire que le mouvement est seulement dans le plan, voir la Figure (IV.3)

avec les conditions initiales : $\left\{ \begin{array}{l} \bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = 1, \bar{z}'(0) = 0.8 \\ \dot{\bar{x}}'(0) = \dot{\bar{y}}'(0) = \dot{\bar{z}}'(0) = 3 \end{array} \right.$

Et enfin nous donnons le trajectoire d'un cas non lié (Figure (IV.4)).

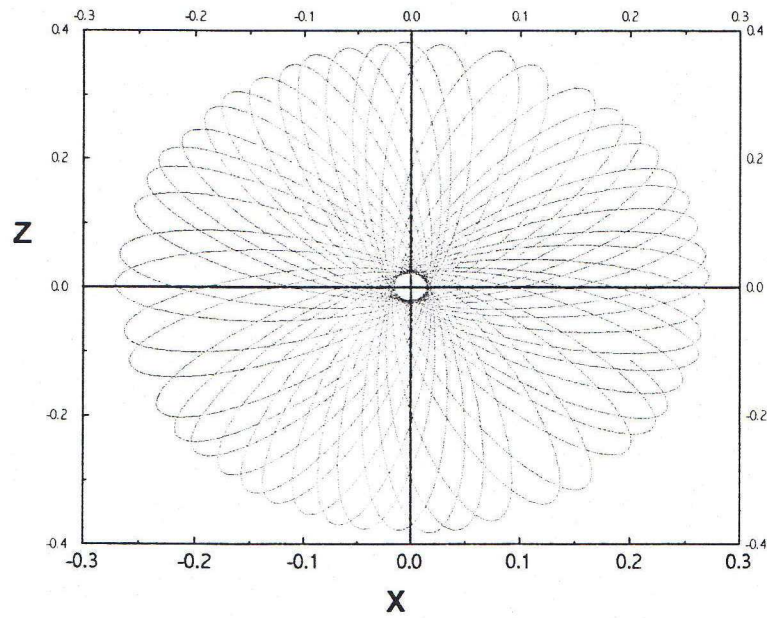


Figure (IV.1): Trajectoire d'un électron autour de l'impureté avec les conditions initiales: $\{\bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = 0.1, \bar{z}'(0) = 0.05\}$ et $\{\bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = \bar{z}'(0) = 1\}$

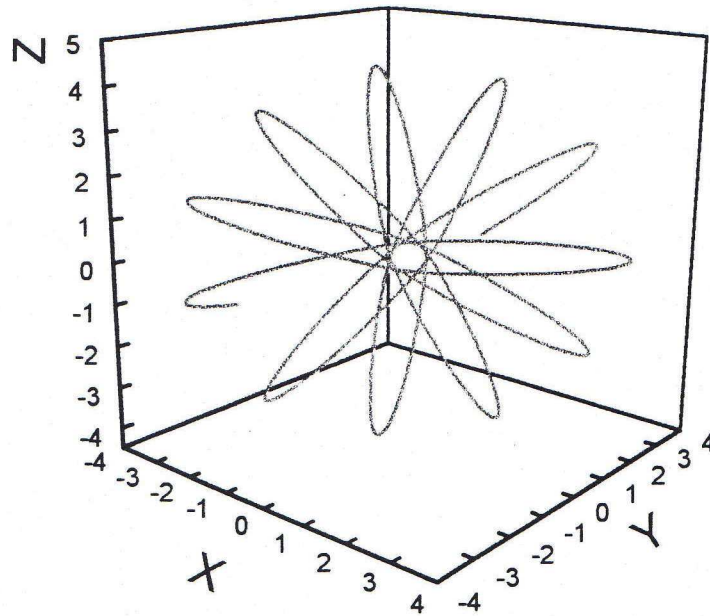


Figure (IV.2): Trajectoire d'un électron autour de l'impureté avec les conditions initiales:
 $\{\bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = 1, \bar{z}'(0) = 0.5\}$ et $\{\bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = \bar{z}'(0) = 1.5\}$

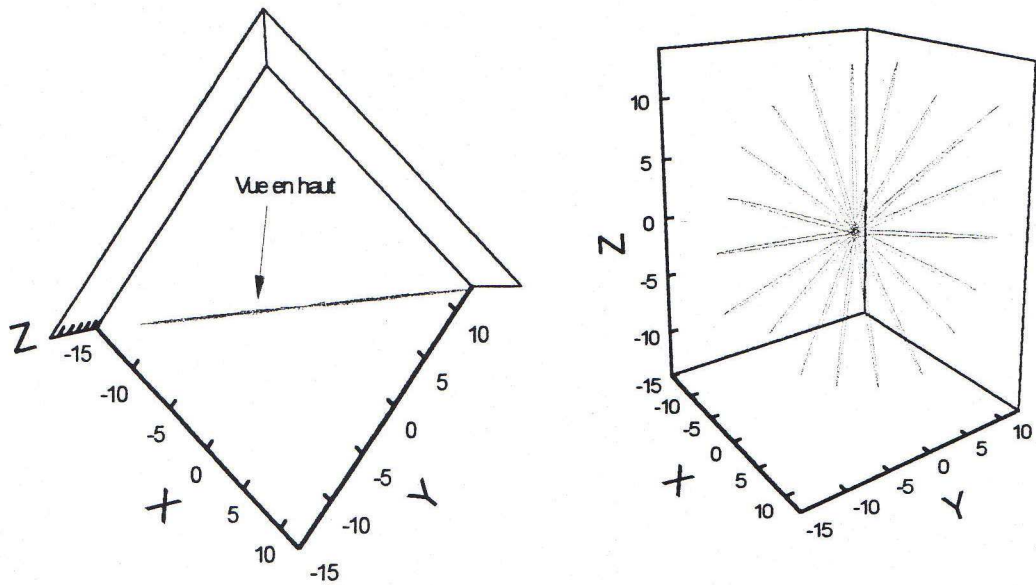


Figure (IV.3): vérification que le moment cinétique est constant avec les conditions initiales: $\{ \bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = 1, \bar{z}'(0) = 0.8 \}$ et $\{ \bar{x}(0) = \bar{y}(0) = \bar{z}(0) = 3 \}$

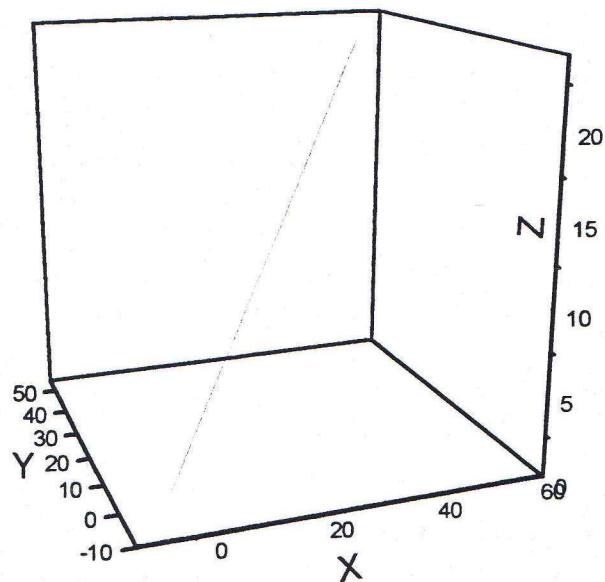


Figure (IV.4): Trajectoire d'un électron libre au voisinage de l'impureté pour les conditions initiales: $\{\bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = -1.5, \bar{z}'(0) = 1\}$ et $\{\bar{x}'(0) = \bar{y}'(0) = 15, \bar{z}'(0) = 5\}$

IV.2 Fonction d'autocorrélation :

IV.2.1 Formalisme des fonctions de corrélations temporelles :

Plusieurs propriétés et phénomènes dynamiques peuvent être obtenus par la connaissance de certaines fonctions appelées les fonctions de corrélations temporelles.

La fonction de corrélation temporelle [29] de deux variables dynamiques $A(t) \equiv A[r^N(t), p^N(t)]$ et $B(t) \equiv B[r^N(t), p^N(t)]$ s'écrit :

$$C_{BA}(t, \tau) = \langle B(t + \tau)A(\tau) \rangle \quad (14)$$

La moyenne sur le produit $B.A$ peut s'écrire comme une moyenne d'ensemble :

$$\langle B(t + \tau)A(\tau) \rangle = \left\{ \int \int B[r^N(t + \tau), p^N(t + \tau)] f_0^{(N)}[r^N(\tau), p^N(\tau)] \cdot A[r^N(\tau), p^N(\tau)] dr^N(\tau) dp^N(\tau) \right\} \quad (IV.15)$$

où $f_0^{(N)}[r^N(\tau), p^N(\tau)]$ représente la densité de probabilité dans l'espace des phases r^N, p^N à l'instant τ . Cette moyenne peut également s'écrire comme une moyenne sur le temps :

$$\langle B(t + \tau)A(\tau) \rangle = \lim_{\tau' \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau'} \int_0^{\tau'} B(t + \tau + t')A(\tau + t') dt' \quad (16)$$

Si le système est isolé, l'hamiltonien est une constante du mouvement et $C_{BA}(t, \tau)$ est indépendante du choix de l'origine des temps τ ; la fonction de corrélation est stationnaire. On choisira alors $\tau = 0$, et on écrira :

$$C_{BA}(t) = \langle B(t)A(0) \rangle \quad (17)$$

Il est clair que :

$$\lim_{t \rightarrow 0} C_{BA}(t) = \langle B(0)A(0) \rangle \quad (18)$$

De façon générale on a comme conséquence de l'inégalité de Schwarz [11] :

$$|C_{BA}(t)| \leq \langle B(0)A(0) \rangle \quad (19)$$

et :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} C_{BA}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle B(t) \rangle \langle A(t) \rangle = \langle B(0) \rangle \langle A(0) \rangle \quad (20)$$

Il est parfois utile d'extraire la partie invariante des variables et calculer la fonction de corrélation des parties fluctuantes, soit :

$$C_{BA}(t) = \langle \delta B(t) \delta A(0) \rangle \quad (21)$$

où: $\delta A = A - \langle A \rangle$ et $\delta B = B - \langle B \rangle$

Ceci assure que $C_{BA}(t)$ tend vers zéro quand t tend vers l'infini, ce qui correspond physiquement à une perte complète de corrélation entre les parties fluctuantes des variables.

IV.2.2 Fonction d'autocorrélation :

Si $B \equiv A$, $C_{AA}(t)$ est appelée fonction d'autocorrélation de la variable A . Des fonctions de ce type sont très utiles dans la simulation numérique car :

a)- elles donnent une image précise de la dynamique dans le fluide, et permettent d'obtenir le temps de corrélation de A .

b)- leurs intégrales sur le temps peuvent être directement reliées aux coefficients de transport, par exemple le coefficient de diffusion D d'un ion de vitesse $V(t)$ est donné par :

$$D = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} \langle V(t)V(0) \rangle dt = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} C_{VV}(t) dt \quad (22)$$

c)- leurs transformées de Fourier $C(\omega)$ sont souvent en relation avec le spectre expérimentale. Par exemple le facteur de structure dynamique est la transformée de Fourier de la fonction de corrélation spatiale et temporelle des fluctuations de densités [19].

IV.2.3 Calcul de la fonction d'autocorrélation :

Pour le calcul on utilise habituellement :

$$C_{BA}(t) = \frac{\langle \delta B(t) \delta A(0) \rangle}{\sigma(B)\sigma(A)} \quad (23)$$

avec $\sigma^2(A) = \langle \delta A^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$

Dans le cas où $B \equiv A$

$$C_{AA}(t) = \frac{\langle \delta A(t) \delta A(0) \rangle}{\sigma^2(A)} = \frac{\langle \delta A(t) \delta A(0) \rangle}{\langle \delta A(0) \delta A(0) \rangle} \quad (24)$$

et sans nuire à la généralité du problème, nous supposons $\langle A \rangle = 0$ et donc $\delta A = A$; en posant $\tau = 0$ et en divisant par $\langle A(0)A(0) \rangle$ dans l'équation (IV.16) nous avons :

$$C_{AA}(t) \frac{\langle \delta A(t) \delta A(0) \rangle}{\langle \delta A(0) \delta A(0) \rangle} = \frac{\lim_{\tau' \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau'} \int_0^{\tau'} A(t+t') A(t') dt'}{\lim_{\tau' \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau'} \int_0^{\tau'} A(t') A(t') dt'} \quad (25)$$

Si on discrétise l'échelle de temps, on obtient en posant $dt' = \Delta t$, $t = n\Delta t$, $\tau' = n_p$ et $n \ll n_p$:

$$C_{AA}(n\Delta t) = \frac{\sum_{i=0}^{n_p} A((n+i)\Delta t) A(i\Delta t)}{\sum_{i=0}^{n_p} A(i\Delta t) A(i\Delta t)}$$

Pour simplifier posons $A(i\Delta t)A(i)$ et $C_{AA}(n\Delta t) = C_{AA}(n)$, alors :

$$C_{AA}(n) = \frac{\sum_{i=0}^{n_p} A(n+i)A(i)}{\sum_{i=0}^{n_p} A^2(i)} \quad (26)$$

Le calcul de $C_{AA}(t)$ revient à moyennner $A(n+i)A(i)$ sur plusieurs choix de l'origine des temps i . Les histoires $A(i)$ d'origine i peuvent se recouvrir d'où un très grand nombre d'échantillons pour moyennner. Cette méthode permet une convergence rapide des calculs.

IV.2.4 Fonction d'autocorrélation du microchamp électrique :

La fonction d'autocorrélation du microchamp permet de donner une image de la dynamique du microchamp suivant les conditions des plasmas (Poolock et Weisheit 1998).

Nous moyennons nos calculs sur tous les électrons.

Donc la fonction d'autocorrélation est:

$$C(t) = \langle \vec{E}(t) \cdot \vec{E} \rangle \quad (27)$$

Et dans la théorie cinétique linéaire $C(t)$ est écrite sous la forme[2] :

$$C(t) = \int f_0(r, v) \vec{e}(r) \cdot \vec{\Psi}(r, v, t) dr dv \quad (28)$$

où $\Psi(r, v, t)$ vérifie la forme linéaire suivante :

$$(\partial_t + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r + m^{-1} \vec{F}_0(r) \cdot \vec{\nabla}_v) \vec{\Psi}(r, v, t) = -\beta \vec{v} \cdot I(r, t) \quad (29)$$

et $I(r, t)$ est un tenseur correspondant à :

$$I(r, t) \equiv \int f_0(r', v') \vec{F}_{ee}(r) \left(\left| \vec{r} - \vec{r}' \right| \right) \cdot \vec{\Psi}(r', v', t) \quad (30)$$

où :

$$\vec{F}_{ee}(r) = -\vec{\nabla}_r \Phi_{ee}(r, t), \quad \vec{F}_0(r) = -\vec{\nabla}_r(r, t), \quad \vec{\Psi}(r, v, t=0) = \vec{e}(r) . \quad (31)$$

L'intégration directe de cette équation donne :

$$\vec{\Psi}(r, v, t) = U(-t) \vec{e}(r) - \int_0^t U(-t + \tau) \beta \vec{v} \cdot I(r, \tau) d\tau \quad (32)$$

où :

$$U(t) = \text{Exp} \left[\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r + m^{-1} \vec{F}_0(r) \cdot \vec{\nabla}_v \right] t \quad (33)$$

Lorsque nous remplaçons (IV.33) et (IV.32) dans (IV.28), nous trouvons la forme suivante de $C(t)$:

$$C(t) = \int f_0(r, v) \vec{e}^{\rightarrow}(r(t)) \cdot \vec{e}^{\rightarrow}(r) dr dv - \int_0^t d\tau \int f_0(r, v) \vec{e}^{\rightarrow}(r(t-\tau)) \cdot \beta \vec{v} \cdot I(r, \tau) dr dv \quad (\text{IV.34})$$

et

$$I(r, t) = I_0(r, t) - \int_0^t d\tau \int f_0(r', v') \vec{F}_{ee}^{\rightarrow} \left(\left| \vec{r}^{\rightarrow} - \vec{r}'^{\rightarrow}(t-\tau) \right| \right) \beta \vec{v}' \cdot I(r', \tau) dr' dv' \quad (35)$$

et

$$I_0(r, t) = \int f_0(r', v') \vec{F}_{ee}^{\rightarrow} \left(\left| \vec{r}^{\rightarrow} - \vec{r}'^{\rightarrow}(t) \right| \right) \vec{e}^{\rightarrow}(r) dr' dv' \quad (36)$$

telque $r(t)$ est la solution de l'équation de trajectoire (IV.1), à l'instant t avec les conditions initiales r et v .

Dans notre étude nous prenons seulement la première approximation de (IV.35) :

$$I(r, t) = I_0(r, t) \quad (37)$$

IV.2.5 Fonction d'autocorrélation du microchamp en coordonnées cartésiennes :

En coordonnées cartésiennes la fonction d'autocorrélation est écrite sous la forme:

Nous utilisons les changements suivantes :

$$\begin{cases} R = \left(\sum_{i=1}^3 x_i^2 \right)^{1/2} , & R(t) = \left(\sum_{i=1}^3 x_i(t)^2 \right)^{1/2} \\ B = \frac{1-(1+R/\lambda)e^{-R/\lambda}}{R^3} , & B(t) = \frac{1-(1+R(t)/\lambda)e^{-R(t)/\lambda}}{R(t)^3} \end{cases}$$

Et nous savons que : $\vec{e}^{\rightarrow}(x, y, z) = \frac{1}{Z_e} \vec{\nabla}(\Phi_{ie}(x, y, z))$

Donc :

$$\begin{aligned}
 C(t) = & \left\{ n_0 e^2 \left(\frac{\beta m}{2\pi} \right)^{3/2} \int \int e^{-\frac{\beta m}{2} \sum_{i=1}^3 v_i^2} \cdot e^{-\beta \Phi(R)} B \cdot B(t) \cdot \left(\sum_{j=1}^3 x_j \cdot x_j(t) \right) \prod_{j=1}^3 dx_j \cdot \prod_{i=1}^3 dv_i \right. \\
 & - n_0 e \beta \left(\frac{\beta m}{2\pi} \right)^{3/2} \int_0^t d\tau \int e^{-\frac{\beta m}{2} \sum_{i=1}^3 v_i^2} \cdot e^{-\beta \Phi(R)} \cdot B(t-\tau) \mathcal{I}_0(R, \tau) \cdot \\
 & \left. \cdot \sum_{j=1}^3 x_j(t-\tau) v_j \prod_{i=1}^3 dx_j \prod_{i=1}^3 dv_i \right\} \quad (38)
 \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
 I_0(x, y, z, t) = & \left\{ n_0 \left(\frac{\beta m}{2\pi} \right)^{3/2} \int \int e^{-\frac{\beta m}{2} \sum_{i=1}^3 v_i'^2} \cdot e^{-\beta \Phi(R')} \cdot B' \cdot \frac{\sum_{j=1}^3 (x'_j (x_j - x'_j(t)))}{\left[\sum_{j=1}^3 (x_j - x'_j(t))^2 \right]^{3/2}} \right. \\
 & \left. \prod_{i=1}^3 dx'_j \prod_{i=1}^3 dv'_i \right\} \quad (IV.39)
 \end{aligned}$$

Adimensionnement de $C(t)$:

Nous utilisons les transformations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} R = a\bar{R} \quad \text{où } \bar{R} = (\sum_{j=1}^3 \bar{x}_j)^{1/2}, \quad x_j = a\bar{x}_j \\ B = \frac{1}{a^3} \bar{B} \\ t = T/\omega_p \quad \text{où } \omega_p = 2e\sqrt{\pi n_0/m} \text{ (fréquence de plasma)} \\ v = u\sqrt{3/\beta m} \\ \Phi(r) = -\frac{Ze^2}{a} Y(\bar{R}) \end{array} \right. \quad (40)$$

Lorsque nous appliquons ces transformations dans (IV.40) et (IV.38) nous trouvons :

$$I_0(x, y, z, t) = \frac{n_0 e^3}{a} \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{3/2} \cdot \bar{I}_0(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, T) \quad (41)$$

où :

$$\bar{I}_0(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, T) = \int \int e^{-\frac{3}{2} \sum_{i=1}^3 u_i^2} \cdot e^{Z \Gamma Y(\bar{R})} \cdot \bar{B} \cdot \frac{\sum_{j=1}^3 (\bar{x}_j' (\bar{x}_j - \bar{x}_j'(T)))}{\left[\sum_{j=1}^3 (\bar{x}_j' - \bar{x}_j'(T))^2 \right]^{3/2}} \prod_{i=1}^3 d\bar{x}_j' \prod_{i=1}^3 d\bar{u}_i' \quad (42)$$

et

$$C(t) = \frac{n_0 e^2}{a} \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{3/2} \bar{C}(T) \quad (43)$$

car :

$$\begin{aligned} \bar{C}(T) = & \left\{ \int \int e^{-\frac{3}{2} \sum_{i=1}^3 u_i^2} \cdot e^{Z \Gamma Y(\bar{R})} \cdot \bar{B} \cdot \bar{B}(T) \cdot \left(\sum_{j=1}^3 \bar{x}_j \cdot \bar{x}_j(T) \right) \prod_{i=1}^3 d\bar{x}_j \prod_{i=1}^3 d\bar{u}_i - \right. \\ & \frac{3\sqrt{\Gamma}}{4\pi} \int_0^T d\bar{\tau} \int \int e^{-\frac{3}{2} \sum_{i=1}^3 u_i^2} \cdot e^{Z \Gamma Y(\bar{R})} \cdot \bar{B}(T - \bar{\tau}) \left(\sum_{j=1}^3 \bar{x}_j(T - \bar{\tau}) u_j \right) \cdot \\ & \left. \bar{I}_0(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, T) \prod_{i=1}^3 d\bar{x}_j \prod_{i=1}^3 d\bar{u}_i \right\} \quad (44) \end{aligned}$$

Et avec la programmation numérique (Fortran 77) de cette équation nous donnons le cas suivant :

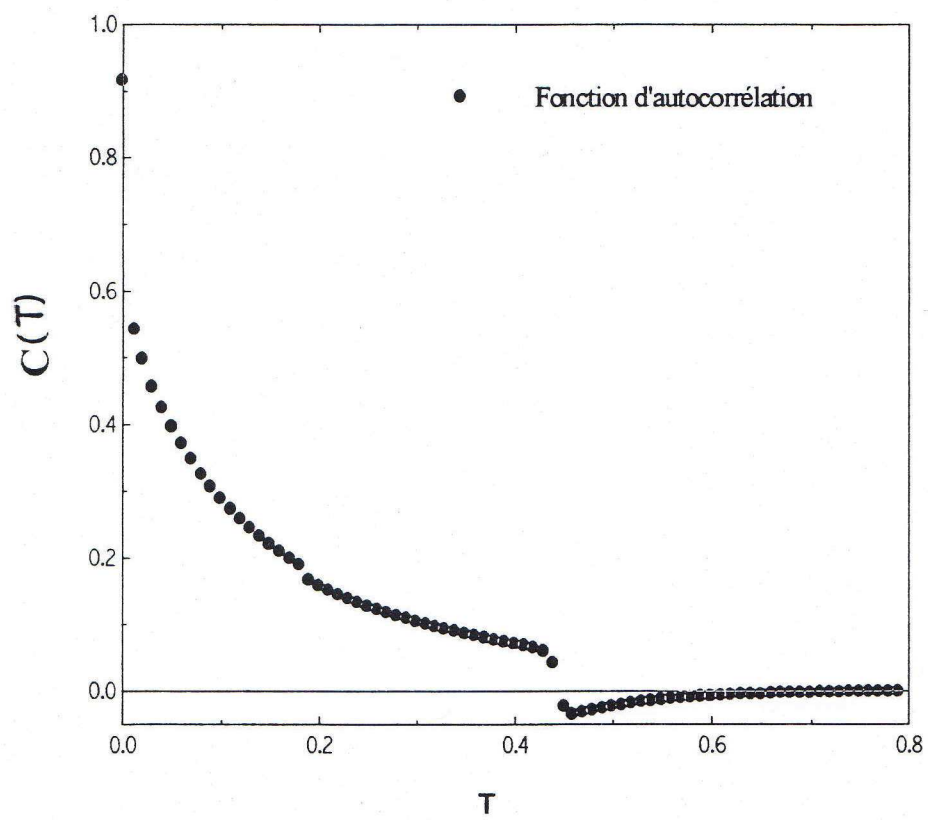


Figure (IV.5): Fonction d'autocorrélation du microchamp électrique pour: $Z = 1, \eta = 0.0025$ et $\Gamma = 0.01$.

Chapitre: V

*Comparaison avec la dynamique
moléculaire*

Dans ce chapitre nous allons comparer nos résultats numériques obtenus par la méthode des substitutions successives avec ceux du Laboratoire de Marseille qui traite le même problème avec la méthode de la dynamique moléculaire.

La dynamique moléculaire a été introduite pour simuler le comportement des fluides et des solides au niveau moléculaire ou atomique. Cette méthode fut appliquée pour la première fois par Alder et Wainwright (1957,1959)[25] et a permis, au départ, de résoudre l'équation du mouvement d'un système de sphères dures.

Cette technique de simulation a été également utilisée pour divers problèmes : Rahman (1964) [26] pour résoudre les équations du mouvement d'un ensemble de particules interagissant avec un potentiel de Lenard-Jones, Hansen (1973 [27],1975) pour étudier les problèmes dynamiques et collectifs des liquides, Nielsen et Lewis (1976 [28]) pour étudier l'interaction laser-plasma etc.

Dans cette méthode, on se donne N particules (atomes, molécules, ions ou électrons) placées dans une cellule de volume fixe, généralement de forme cubique. A un instant initial, on donne aux particules des vitesses telles que la quantité de mouvement totale soit nulle. Les trajectoires de toutes les particules peuvent être suivies aussi longtemps qu'on le souhaite par intégration numérique des équations du mouvement. La force qui s'exerce entre les particules dépend évidemment de la nature des particules.

V.1 **Comparaison de la densité électronique et la distribution du microchamp électrique :**

La densité électronique locale calculée par le modèle du laboratoire de Marseille qui utilise la dynamique moléculaire (D.M) avec l'énergie potentielle $-\frac{Ze^2}{r}(1 - e^{-r/\lambda r})$

se confond aux grandes distances (voire Figure (V.1), Figure (V.2) et Figure (V.3)) avec la densité locale calculée avec une énergie potentielle que nous avons obtenue par la résolution numérique de l'équation intégrale (I.26). Alors le potentiel choisi par le modèle de Marseille peut décrire le comportement de la densité d'électrons locale dans les régions lointaines. Mais au voisinage de l'impureté la situation est totalement différente, la densité de D.M décroît jusqu'à zéro, alors que notre densité croît avec une forme exponentielle (Figure (V.1), Figure (V.2) et Figure (V.3)).

Devons nous maintenant poser la question sur le désaccord de nos résultats avec ceux de la dynamique moléculaire (Laboratoire piim de Marseille) au voisinage immédiat de l'impureté: la réponse à cette question est, pour éviter la lenteur de calcul à courte distance, l'équipe (piim) a pris, dans le voisinage le modèle d'une sphère dure. Ceci se traduit donc par une densité nulle au voisinage immédiat de l'impureté (Figure (V.1), Figure (V.2) et Figure (V.3)). Donc nous jugeons que le potentiel utilisé par le laboratoire de Marseille n'est pas un bon candidat pour décrire le comportement de la densité électronique au voisinage de l'ion (regarder la section V.2). Nous prévoyons que l'ion positif central excite un grand nombre d'électrons et produit un nuage autour de son voisinage avec une densité électronique supérieure à la densité initiale n_0 (avant la perturbation).

Donc d'après notre modèle la densité électronique commence par une valeur supérieure à n_0 ensuite décroît jusqu'à n_0 où elle reste constante, et est inversement proportionnelle avec le degré de quanticité η : lorsque nous augmentons η la densité électronique au voisinage de l'ion décroît.

Dans le cas de faible couplage et degré de quanticité, les deux modèles (théorique et dynamique moléculaire) produisent les mêmes distributions du microchamp électrique

(Figure (V.4)). Mais lorsque nous augmentons le nombre de couplage Γ ou le degré de quanticité η le modèle de la dynamique moléculaire donne une distribution plus grande que celle de notre modèle (Figure (V.5) et Figure (V.6)). Comme nous avons dit dans le troisième chapitre, l'influence sur la détermination du potentiel est dominée par le degré de quanticité η . Donc lorsque nous augmentons η , le potentiel décroît et donne naissance à un nuage électronique faible avec une distribution du microchamp aussi faible (Figure (V.5) et Figure (V.6)).

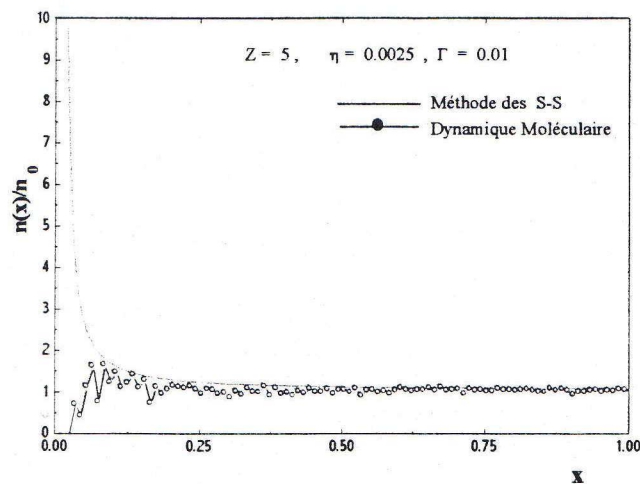


Figure (V.1): La densité des électrons calculée par la dynamique moléculaire et la méthode des S-S pour : $Z = 5, \eta = 0.0025, \Gamma = 0.01$

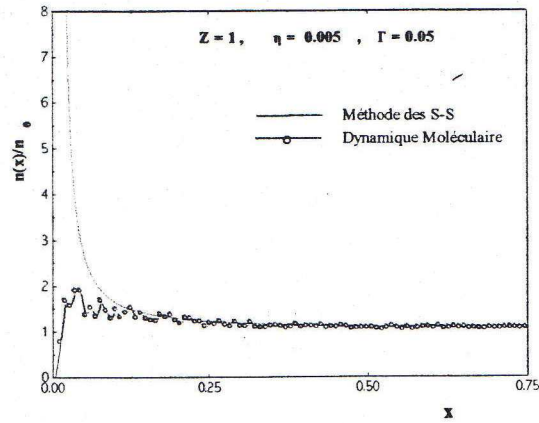


Figure (V.2): La densité des électrons calculée par la dynamique moléculaire et la méthode des S-S pour : $Z = 1, \eta = 0.005, \Gamma = 0.05$

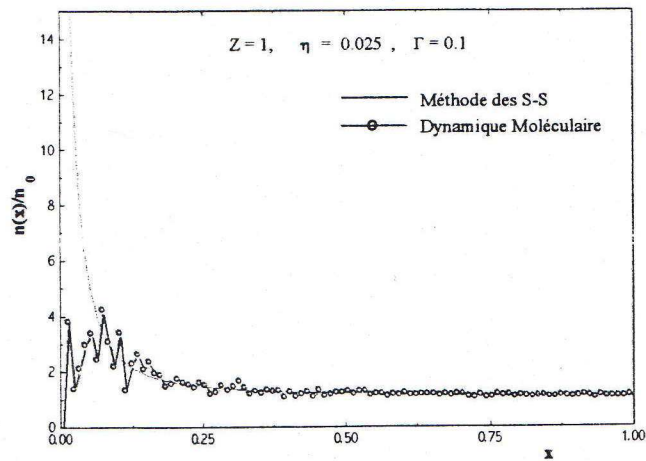


Figure (V.3): La densité des électrons calculée par la dynamique moléculaire et la méthode des S-S pour : $Z = 1, \eta = 0.025, \Gamma = 0.1$

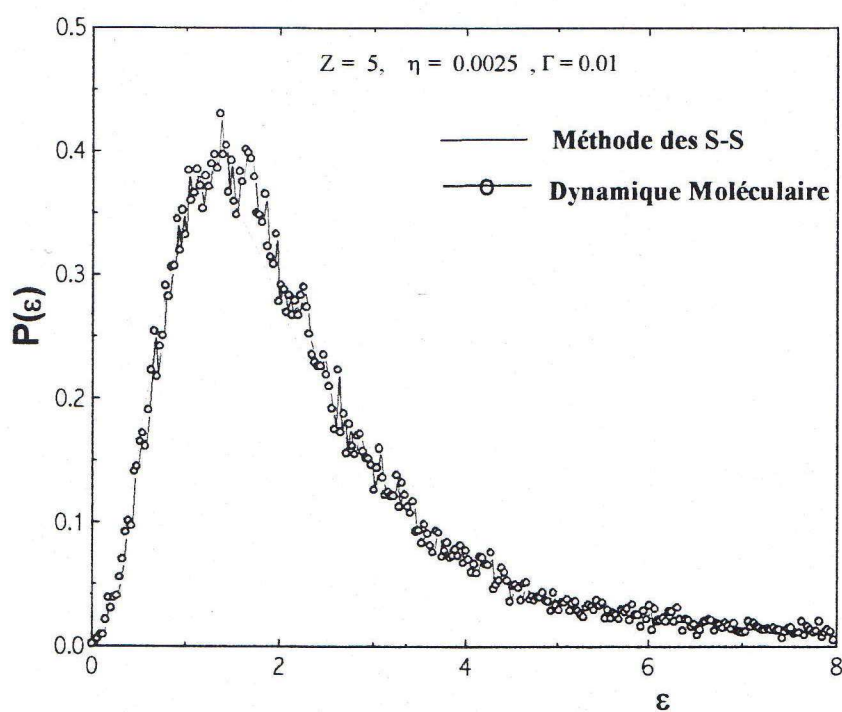


Figure (V.4): La distribution du microchamp électrique calculée par la dynamique moléculaire et la méthode des S-S pour : $Z = 5, \eta = 0.0025, \Gamma = 0.01$

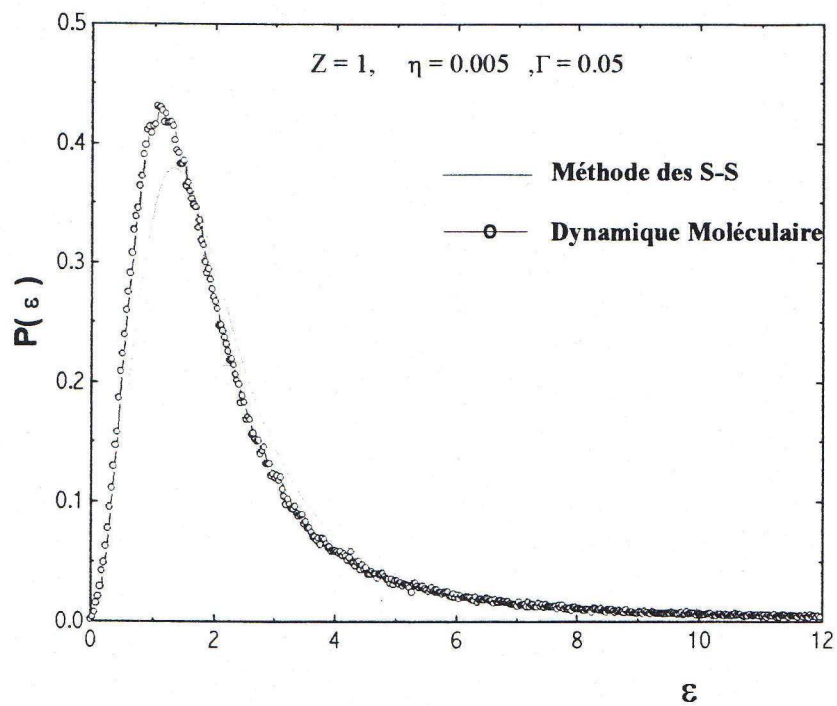


Figure (V.5): La distribution du microchamp électrique calculée par la dynamique moléculaire et la méthode des S-S pour : $Z = 1, \eta = 0.005, \Gamma = 0.05$

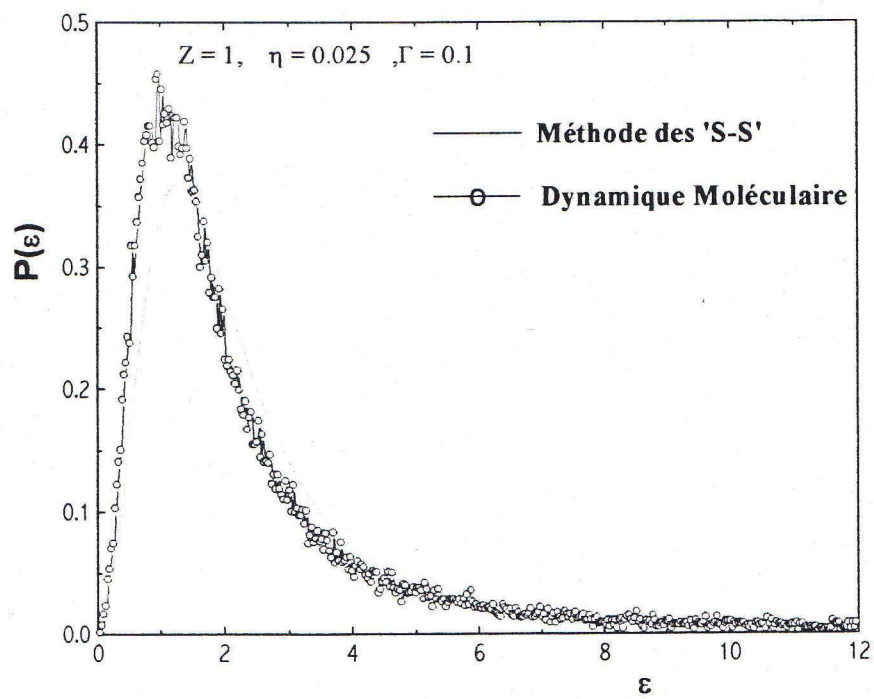


Figure (V.6): La distribution du microchamp électrique calculée par la dynamique moléculaire et la méthode des S-S pour : $Z = 1, \eta = 0.025, \Gamma = 0.1$

V.2 Modèle de Thomas – Fermi pour l'atome :

La méthode la plus simple, pour déterminer la densité électronique autour d'un atome (n_0), suggérée indépendamment par Thomas (1926) et par Fermi (1928), revient à négliger complètement l'individualité des états des différents électrons, et à remplacer les fonctions d'onde correspondantes par une moyenne statistique.

L'approximation de Thomas et Fermi [21] [8] consiste à considérer que tous les électrons d'un atome sont soumis exactement aux mêmes conditions: chaque électron, soumis à la loi de conservation de l'énergie, a une énergie potentielle $\Phi(r)$ moyenne dû au noyau et à l'ensemble des autres électrons.

D'après ce modèle la densité électronique est donnée sous la forme:

$$\rho(r) = -\frac{8\pi}{3} \frac{e}{h^3} [2me\Phi(r)]^{3/2} \quad (1)$$

et l'équation différentielle gouverne l'énergie potentielle adimensionnée est :

$$\frac{d^2Y}{dx^2} = \sqrt{\frac{Y^3}{x}} \quad (2)$$

avec les conditions aux limites :

$$\begin{cases} Y(0) = 1 \\ Y(X) = 0 \\ X \left[\frac{dY}{dx} \right]_X = -\frac{Z}{Z} \end{cases} \quad (3)$$

où :

$$\begin{cases} Y(x) = \frac{1}{Z_e} r \Phi(r) \\ x = r/a \\ X = R/a \\ a = a_1 \left(\frac{9\pi^2}{128Z} \right)^{1/3} \\ a_1 = h^2 / (4\pi^2 m e^2) \text{ Rayon du Bohr d'hydrogène} \end{cases} \quad (4)$$

Par conséquent, la solution ne dépend que de la valeur du quotient z/Z de la charge totale de l'ion à celle du noyau; des ions différents ayant même z/Z auront des distributions de potentiel analogues, ne différant que par l'échelle utilisée pour mesurer le rayon et le potentiel.

Dans la Figure (V.7) nous donnons les courbes de Fermi-Thomas qui sont calculées numériquement par Fermi⁹ pour l'atome neutre (courbe 1) et pour les ions positifs à faible ionisation (courbe 2) et à ionisation élevée (courbe 3).

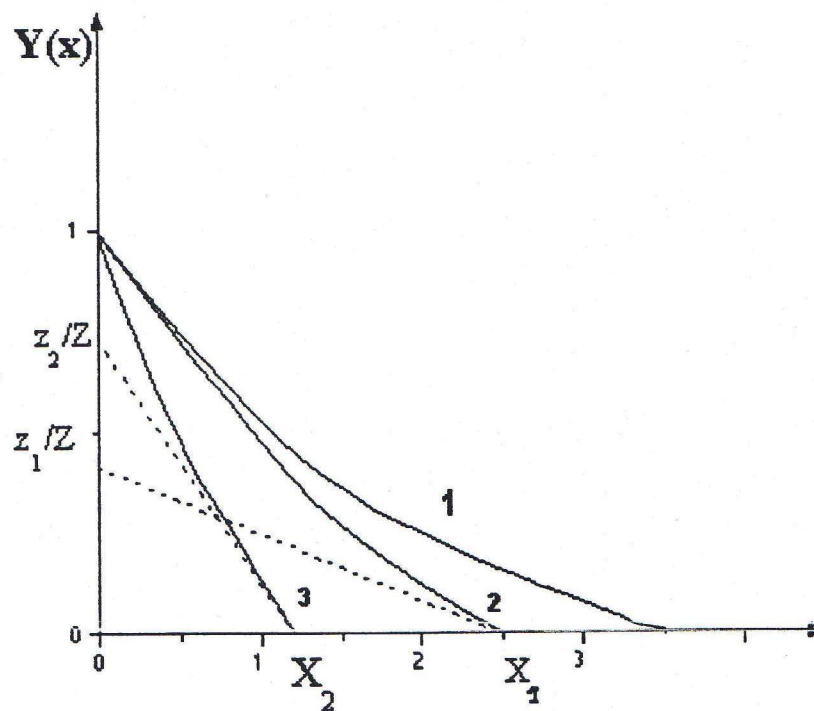


Figure (V.7): Courbes de Fermi-Thomas, pour l'atome neutre (courbe 1) et pour les ions positifs; X_1, z_1 correspondent à une ionisation faible et X_2, z_2 à une ionisation élevée

⁹ Les calculs ont ensuite été refaits à l'aide d'une machine à calculer électronique, l'analyseur différentiel (Bush et Caldwell, 1931)

Conclusion générale

Dans cette thèse nous avons traité le problème du système d'électrons perturbé par une impureté (ion) positive fixée à l'origine au centre du système. En premier lieu nous avons établi l'équation intégrale générale pour l'énergie potentielle ((I.26)).

Ensuite nous avons fait une approximation pour résoudre analytiquement cette équation, sous la condition $Z\Gamma Y(x) \ll 1$. La solution analytique trouvée ((II.19)) décrit bien l'énergie potentielle des électrons faiblement couplés notamment aux grandes distances de l'impureté, mais l'erreur augmente lorsque nous approchons de l'origine (de l'impureté). A partir de cette solution nous avons déterminé la densité des électrons autour de l'impureté, la distribution de microchamp, l'énergie interne du gaz et sa chaleur spécifique.

Ensuite nous avons résolu l'équation intégrale ((I.26)) avec deux méthodes numériques différentes, la première est de Runge Kutta d'ordre quatre et la deuxième est des substitutions successives. Les deux méthodes ont donné les mêmes résultats avec un écart insignifiant. Mais la méthode des substitutions successives était plus facile à utiliser que celle de Runge Kutta d'ordre quatre qui demande quatre valeurs initiales difficiles à déterminer. De plus la puissance de notre micro-ordinateur ne nous permet pas d'augmenter les valeurs du nombre de couplage Γ et la charge Z , et cela est resté un grand obstacle que nous n'avons pas pu surmonter. Les résultats numériques ainsi obtenus étaient conformes à nos prévisions et ont montré que l'énergie potentielle tend vraiment vers la valeur $(1/\eta)$ au voisinage de l'origine et avec une parfaite précision, et nous a permis d'estimer la fraction d'électrons liés.

La comparaison de notre modèle de distribution de microchamp avec celui du

Laboratoire de PIIM , qui utilise la dynamique moléculaire sans introduire les effets des électrons, montre que les électrons ont un effet remarquable au voisinage de l'impureté, et les résultats des deux modèles se confondent aux grandes distances.

Enfin nous avons déterminé numériquement les trajectoires des électrons autour de l'impureté dans les deux cas lié et libre, ainsi que la fonction d'autocorrelation du microchamp électrique subit par l'ion impureté.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] G.Chabrier,Alexander.Y.Potekhin, Equation of State of Fully Ionized Electron-ion Plasmas, (Phys. Rev E, Vol 58, N^o: 4, october 1998).
- [2] J.W.Dufty, Mean Field Approximation for Weak Coupling,(18 Juin1998).
- [3] H.B.Nersisyan, Stopping of Charged Particles in a Magnetized Classical Plasma, (Physics/9807024 16 Jul 1998).
- [4] V.Weiss and W.Schroer, Relevance of the Local-density Approximation to Interfacial Properties of Ionic Fluids Within Gradient Theory, (J.Phys: Condens. Matter 10(1998) L705-L710, Printed in the UK, PII 50953-8984(98)96773-X).
- [5] J.W.Dufty,Mirim Lee, Transport For From Equilibrium-Uniform Shear Flow. (Cond-Mat/9705142, 14 May 1997).
- [6] Young-Dae.Jung, Hwan-Don.Jeong, Bremsstrahlung in Electron-ion Coulomb Scattering in Strongly Coupled Plasma Using the Hyperbolic-Orbit Trajectory Method. (Phys. Rev. E, Vol 54 N^o: 2 august 1996).
- [7] U.Kortshagen, G.J.Parker, and J.E.Lawler, Comparison of Monte Carlo Simulations and Nonlocal Calculations of the Electron Distribution Function in a Positive Column Plasma. (Phys. Rev. E, Vol 54, N^o: 6 december 1996).
- [8] L.N. Epele, H. Fanchiotti, C. A. Garcia Canal and J. A. Ponciano. "Padé approximant approach to the Thomas-Fermi problem". (Phys.Rev. A, Vol 60, N^o:1, July 1999).
- [9] Marc Baus, Jean-Pierre Hansen, La Matière Ionisée (la recherche n:142 Volume14,mars1983)
- [10] C.F.Hooper,Jr, Electric Microfield Distribution Functions:past and present. (Université de Florida, Gainesville, FL USA 32611).
- [11] J.P.Hansen, M.Baus, Statistical Mechanics of Simple Coulomb Systems. (Physics Reports, Volume: 59, Numbre:1, March 1980, North-Holland Publishing Company Amsterdam)

- [12] J.P.Hansen, I.R.McDonald, Theory of Simple Liquids. (Academic Press, USA.1976), P. 45, 49, 61-62
- [13] Richard Dendy, Plasma Physics. (Cambridge University Press,1993)
- [14] Peter.A. Sturrock, Plasma Physics. (Cambridge University Press,1994)
- [15] N.G.Van Kampen, B.U.Felderhof, Theoretical Methods in Plasma Physics, (A.P 1997).
- [16] M.A.Leontovich. (Reviews of Plasma Physics, Volume:3).
- [17] I.P. Grant, B.J.Mckenzie, P.H.Norrington, D.F.Mayers et N.Cpyper, Comput. Phys. Commun. 12, 207
- [18] Ph A.Martin, F.Rothen, Problèmes à N-Corps et Champs Quantiques. (Presses polytechniques et Universitaires Ramandes, 1990), P. 121-124.
- [19] Max Born, Structure Atomique De La Matière. (Librairie Armand Colin, Paris 1971), P.177-181
- [20] Schiff L.I, Quantum Mechanics, (2 edition, Mc Graw-Hill ,New York,1955)
- [21] J.P.Demailly, Analyse Numérique et Equations Différentielles, (OPU 1993).
- [22] A.Gourdn, M.Boumahrat, Méthodes Numériques Appliquées, (OPU 1991). P. 29, 32-36
- [23] B. J. Alder et T. E Wainwright, J. Chem. Phys. 27, 1208 (1957).
- [24] A.Rahman,Phys.Rev. A. 136, 405 (1964).
- [25] P. Hansen, Phys. Rev. A8, 3096 (1976).
- [26] W. C. Nielson et H. R. Lewis, Méthods Comput. Phys. 16, 367 (1976).
- [27] F. Khelfaoui, Thèse de Doctorat, Université de Provence Marseille, Jun 1991.

Appendice A

Etablissement de l'équation intégrale pour l'énergie potentielle

D'après l'équation (I.22) on :

$$\Phi(r) = -\frac{Ze^2}{r}(1 - e^{-r/\lambda_D}) + ne^2 \int \frac{(e^{-\beta\Phi(r')} - 1)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dr'^3 \quad (\text{A.1})$$

Nous écrivons cette équation dans les coordonnées sphériques :

$$\Phi(r) = \left\{ -\frac{Ze^2}{r}(1 - e^{-r/\lambda_D}) + ne^2 \int_0^\infty dr' \int_0^\pi d\varphi' \int_0^{2\pi} (e^{-\beta\Phi(r')} - 1) \cdot \frac{r'^2 \sin(\theta')}{[r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\psi)]^{1/2}} dr' \right\} \quad (\text{A.2})$$

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

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

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

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

Nous intégrons cette équation sur l'angle φ' et θ' , qui devient :

$$\Phi(r) = -\frac{Ze^2}{r}(1 - e^{-r/\lambda_T}) + 4\pi ne^2 \int_0^\infty \frac{r'}{r} (e^{-\beta\Phi(r')} - 1) [|r + r'| - |r - r'|] dr' \quad (\text{A.5})$$

et on :

$$\begin{cases} |r - r'| = r - r' \text{ si } r \geq r' \\ |r - r'| = -r + r' \text{ si } r \leq r' \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

Nous remplaçons (A.6) dans (A.5) et après la simplification nous trouvons l'équation intégrale générale de l'énergie potentielle d'électron ((I.24)) dans le modèle du champ moyen :

$$\Phi(r) = \left\{ -\frac{Ze^2}{r}(1 - e^{-r/\lambda_T}) + \frac{4\pi ne^2}{r} \int_0^r r'^2 (e^{-\beta\Phi(r')} - 1) dr' + 4\pi ne^2 \int_r^\infty r' (e^{-\beta\Phi(r')} - 1) dr' \right\} \quad (\text{A.7})$$

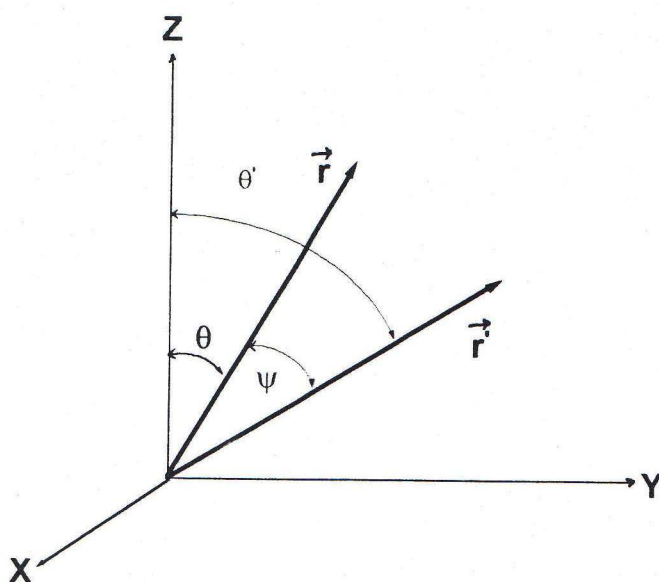


Figure (A.1): Représentation de l'angle ψ

Résumé :

Traditionnellement, dans la théorie de l'élargissement des raies spectrales, les physiciens de la physique des plasmas traitent les électrons comme un fond continu neutralisant la charge des ions qui peuvent, selon le modèle, être traités soit par l'approximation quasi-statique ou dynamique. Les électrons, relativement légers et donc très rapides par rapport au temps caractéristique de l'émission du rayonnement, sont représentés par un opérateur de collision moyen. Ceci implique que les effets qu'apportent le mouvement des électrons sont négligés dans les travaux antérieurs. Dans cette thèse, nous proposons un modèle qui tient compte de ces effets. Nous avons ainsi calculé les propriétés essentielles pour l'étude des raies spectrales sensées être affectées par les effets électroniques. Ces propriétés sont la distribution statique du microchamp électrique et la fonction de corrélation temporelle de celui-ci dans l'état d'équilibre final.

Abstract :

Usually, in the theory of the broadening of spectral lines, physicists of plasma physics have opted for representing electrons by a continuous background, neutralizing the charges of ions that can be, with the model, treated by the quasi-static or dynamic approximation. Electrons, relatively light and therefore very rapid in relation to the characteristic time of the emission of the radiance, are represented by an average collision operator. This implicates that the effects bringing the movement of electrons are neglected in the previous works. In this thesis, we propose a model which takes into account these effects. We have, thus computed the essential properties for the study of the judicious spectral line that are affected by the electronic effects. These properties are the static distribution of the electric microfield and its function of temporal correlation in the course of evolution around the final equilibrium state.