



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 : *Thouria CHOHRA*

Thème :

**TRANSPORT ET RADIATION DANS UN
MILIEU DI-IONIQUE**

Soutenue publiquement le : 11 Avril 2000

Devant le Jury composé de :

Mr : M. K. Tidjani	M. C (C. U. Ouargla)	Président
Mr : F. Khelfaoui	M. C (C. U. Ouargla)	Examineur
Mr : F. Benamira	M. C. C. C (U. Constantine)	"
Mr : H. Bouguettaia	M.A.C.C (C. U. Ouargla)	"
Mr : N. Bouzid	M.C (C. U. Ouargla)	"
Mr : M. T. Meftah	M. C (C. U. Ouargla)	Rapporteur



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 : *Thouria CHOHRA*

Thème :

**TRANSPORT ET RADIATION DANS UN
MILIEU DI-IONIQUE**

Soutenue publiquement le : 11 Avril 2000

Devant le Jury composé de :

Mr : M. K. Tidjani

Mr : F. Khelfaoui

Mr : F. Benamira

Mr : H. Bouguettaia

Mr : N. Bouzid

Mr : M. T. Meftah

M. C(C. U. Ouargla)

M. C(C. U. Ouargla)

M. C. C. C(U. Constantine)

M.A.C.C (C. U. Ouargla)

M.C (C. U. Ouargla)

M. C (C. U. Ouargla)

Président

Examineur

”

”

”

Rapporteur

SOMMAIRE

Liste Des Figures

vi

Liste Des Tables

vii

Introduction Générale	5
1 Les propriétés statiques et dynamiques du plasma	10
1.1 Introduction	10
1.2 Fluctuation	11
1.3 La fluctuation de la densité en équilibre	13
1.4 Equation d'évolution de BBGKY (équation de transport)	14
1.5 Les propriétés générales de la fonction de corrélation	18
1.5.1 Les fonctions de corrélation spatiale (distribution radiale)	18
1.5.2 Les grandeurs thermodynamiques et la fonction $g(r)$	23
1.5.3 La fonction de corrélation temporelle	26
1.5.4 Le facteur de structure dynamique	30
1.5.5 Les coefficients de transport et les fonctions d'autocorrélation	34
2 Le modèle de calcul du coefficient de diffusion dans le cas d'un plasma à une composante	43
2.1 Introduction	43
2.2 Paramètres utiles	44
2.2.1 Longueur d'écran de Debye	45
2.2.2 Fréquence plasma	46
2.2.3 Rayon de la sphère ionique	47
2.2.4 Paramètre de couplage	47
2.3 Le modèle de calcul du coefficient de transport	48
2.3.1 Formulation du coefficient self-diffusion dans un plasma	50
2.3.2 Les approximations utilisées dans le modèle de calcul	56
2.3.3 Le coefficient de diffusion dans l'approximation disconnected	58
2.3.4 Le calcul du facteur de structure	64
2.3.5 Discussion et résultats numériques	73

3	Le modèle de calcul du coefficient de diffusion dans le cas d'un plasma à deux composantes	75
3.1	Introduction	75
3.2	Le modèle	76
3.2.1	Calcul des facteurs de structure dans un plasma à deux composantes	79
3.2.2	Discussion et résultats numériques	87
3.3	Les grandeurs thermodynamiques d'un milieu chargé à deux composantes .	90
3.4	Conclusion	93
4	Le calcul de la fonction de corrélation de la vitesse et du champ	94
4.1	Introduction	94
4.2	Développement du modèle théorique	95
4.2.1	Discussion et résultats numériques	103
4.3	Application au calcul des profils de raies spectrales dans les plasmas: cas de la Lyman α	106
4.3.1	Introduction	106
4.3.2	Formule de profil de raies de la série de Lyman α sans structure fine:	107
4.4	Conclusion	109
	Conclusion et Perspectives	111
	Bibliographie	114
A	Fonction de distribution de paires semi-empirique	118
B	Relation entre $C(t)$ et $D(t)$	122
C	Etablissement de l'équation de $D(t)$	124
D	Forme de λ	130
E	Calcul de ω_0 et ω_1	132
F	Méthodes de calcul du coefficient de diffusion	138
F.1	La dynamique moléculaire:	138
F.2	La réponse linéaire:	139
G	Calcul de l'intégrale $I=I' + iI''$	142
H	Relation entre la fonction $K_{33}(t)$ et la fonction $\varphi_s(k, pp', t)$	146

Liste Des Figures

0.1	Les conditions d'existence des plasmas usuels.	6
1.1	Dans un gaz en équilibre macroscopique, on mesure les nombres $n(t)$ qui se trouvent à l'instant t dans une région fixée (a). L'allure des variations de $n(t)$ (b).	14
1.2	Fonction radiale de paires pour un plasma à une composante, en abscisse $x = r/a$ (à partir d'un calcul de simulation par la méthode de Monte carlo)	21
1.3	Fonction de distribution $g(y)$ pour un plasma à une composante ($Z=1$) par la méthode semi-empirique (Held) [4], où $y=r/a$	22
1.4	Fonction de paire à une espèce (semi empirique)	22
1.5	Fonction de paire pour deux espèces	23
2.1	Diffusion d'une particule impureté dans un plasma à une composante. . . .	49
2.2	Facteur de structure trouvé par l'approximation du champ moyen pour un plasma à une composante ($Z=1$) dans le cas de $\Gamma = 0.9$	74
3.1	Diffusion d'une particule impureté dans un plasma à deux composantes . .	77
3.2	$\omega_p S_{11}(k, \omega)$ trouvé par l'approximation du champ moyen (3.25) en fonction de ω/ω_p pour $k=0.618$, $k=0.875$, $k=1.383$ et $k=1.856$	89
4.1	Fonction d'autocorrélation du champ électrique pour un plasma à une composante ($Z=1$) et $\Gamma = 0.5$	104
4.2	Fonction d'autocorrélation de la vitesse pour un plasma à une composante ($Z=1$) dans le cas de $\Gamma = 0.5$	105
4.3	Fonction d'autocorrélation du champ pour un plasma à deux composantes ($H^{+1}50\%, He^{+2}50\%$) dans le cas de $\Gamma = 0.02$	105
4.4	Fonction d'autocorrélation des vitesses pour un plasma à deux composantes ($H^{+1}50\%, He^{+2}50\%$) dans le cas de $\Gamma = 0.02$	106

Liste Des Tables

2.1	Coefficient de diffusion trouvé par l'approximation disconnected D^* et la dynamique moléculaire pour un plasma à une composante ($Z=1$) en fonction de Γ	74
3.1	Comparaison entre les D^* de notre modèle et D_{dy} obtenus par la dynamique moléculaire pour un plasma à deux composantes ($H^{+1}50\%$, $He^{+2}50\%$) pour différentes valeurs de Γ	89
3.2	Coefficient de diffusion pour un mélange (Ar^{+17} , He^{+1}) avec $n = 8.10^{16}$	89
4.1	Valeurs des paramètres ω_0 et ω_1 dans notre modèle obtenues avec un $g(r)$ semi- empirique dans le cas (<i>OCP</i>) et le cas (<i>TCP</i>) pour différents paramètres du couplage Γ	104

Dédicace

A ma mère, pour tout ce que elle fait pour moi, pour son suivi et son soutien moral. A mon père, qui est toujours l'homme parfait. A mes soeurs: soulaf, samira, wafa, sabah et farida. A mes frères: Djabre, Farsse et Alaa El Dine. A mon amie qui m'a encouragé Louiza Mouni et son mari et sa petite fille Kinza.

Merci

Remerciements

J'exprime ma gratitude à Mr M^{ed}.T.Meftah, maitre de conférence au centre universitaire de Ouargla (CUO) pour avoir accepté diriger cette thèse et pour ses conseils, ses orientations, ses encouragements et sa bienveillance, je tiens à le remercier pour toutes les discussions menées tout au long de ce travail.

J'adresse également de vifs remerciements à Monsieur Dr.F. Khelfaoui, maitre de conférence au CUO, pour les précieux conseils dans la rédaction de cette thèse et d'accepter d'être membre du jury.

Je remercie Monsieur M^{ed}. K.Tidjani maitre de conférence et Directeur du CUO, pour m'avoir honoré d'accepter de présider le jury, Monsieur H.Bouguettaia du CUO, Monsieur N.Bouزيد du CUO et Monsieur F.Benamira de l'université de Constantine, qui ont bien voulu consacrer une partie de leur précieux temps à l'examen de cette thèse.

Enfin mes remerciements les plus chaleureux vont à mes enseignants de classes: primaire, moyenne, secondaire, graduation et post-graduation. Ainsi qu'à Mesdemoiselles M. Samira et C.Keltoum.

Abstract

In this thesis, we compute the self diffusion coefficient using the "disconnected approximation", which gives an expression for this coefficient as a function of the dynamics and static structure factors. These latter are also determined using the mean field approximation in the one ionic component plasma and the two-ionic component plasma.

The thermodynamic quantities and the relative properties which refer to these quantities are very important parameters in the plasma diagnosis. The calculation of all these quantities is based on the knowledge of the pair distribution function, which plays a fundamental role. Our results seem to be close to those from the molecular dynamics model.

Computing of autocorrelation function of the electric field seen by an impurity ion and of the velocity of the same impurity ion has been developed using a theoretical model. This model makes use of the diffusion coefficient in the disconnected approximation and the pair distribution function, which was taken in a semi-empirical form. We find a good agreement between our theoretical result and those from molecular dynamics. These results stimulate us to improve the line profile analytic computation models which are nothing but the Fourier transform of certain autocorrelation function.

Résumé

Dans cette thèse, nous calculons le coefficient de transport self-diffusion dans le cadre de l'approximation "disconnected", qui donne une expression à ce coefficient en fonction des facteurs de structure dynamique et statique. Ces derniers sont à leur tour déterminés par l'utilisation de l'approximation du champ moyen aussi bien pour un plasma à une composante que pour un plasma à deux composantes.

Les grandeurs thermodynamiques ainsi que les propriétés relatives à ces grandeurs sont des paramètres très importants dans le diagnostic du plasma. Les calculs de toutes ces grandeurs sont basés sur la connaissance de la fonction de distribution radiale de paire qui joue un rôle principal. Nos résultats de calcul théorique ne diffèrent pas trop des résultats émanant de la dynamique moléculaire.

Un calcul des fonctions d'autocorrélation du champ électrique subit par un ion impureté et de la vitesse du même ion impureté a été développé à partir d'un modèle théorique. Ce modèle fait appel au coefficient de diffusion de l'ion impureté calculé par l'approximation "disconnected" et à la fonction de distribution radiale que nous avons prise sous une forme semi-empirique. Diverses comparaisons entre les résultats théoriques de notre modèle et ceux de la dynamique moléculaire, ont montré un bon accord. Ceci encourage les chercheurs à améliorer les modèles analytiques relatifs au calcul des profils de raies spectrales qui ne sont rien d'autre que les transformées de Fourier de certaines fonctions d'autocorrélation.

Introduction générale

La physique des plasmas science datant du XX^e siècle [1], est née de l'étude des décharges dans les gaz. Depuis 1920 (c'est en 1923 que les physiciens Langmuir et Tonks ont introduit pour la première fois le terme plasma pour désigner le gaz ionisé contenu dans un tube à décharges), cette discipline s'est considérablement développée en raison de son intérêt industriel et académique (milieux naturels, applications industrielles, etc ...). Intégrant l'essentiel des connaissances de la physique moderne, dans la nature, le plasma constitue le quatrième état de la matière et fait suite dans l'ordre croissant des températures aux états solide, liquide et gazeux. On pense actuellement que le plasma constitue 99% de l'univers.

La physique de plasma tient donc une place importante dans l'étude des milieux naturels, surtout astrophysiques et des gaz ionisés produits en laboratoire. Sans doute, la complexité de cette matière, quatrième état de la matière, exige pour l'étude, l'introduction de tous les domaines de la physique (mécanique statistique, théorie de collision, théorie cinétique, équation de transport etc...)

Les plasmas sont caractérisés par leur densité, leur température ionique et leur paramètre de couplage.... La physique de plasma couvre un large domaine de densité électronique allant de 10 particules par cm^3 dans les espaces interstellaires par exemple, à 10^{24} particules par cm^3 dans les métaux et les étoiles et pour des températures comprises entre 10^2°K (espace interstellaire) et 10^8°K (intérieur des étoiles, plasma de fusion). La figure (0.1) représente les conditions d'existence de milieu chargé et donc de plasma [1] en fonction de la densité et de la température.

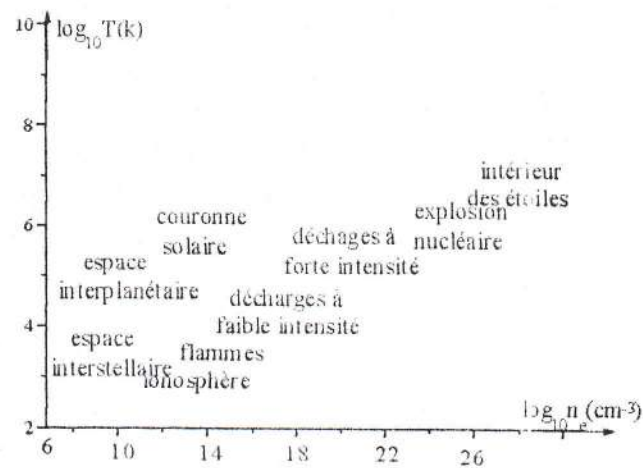


Figure 0.1: Les conditions d'existence des plasmas usuels.

A l'équilibre thermodynamique, le gaz ionisé est constitué d'ions, d'électrons et de neutres (atomes ou molécules): les particules chargées (ions, électrons) interagissent par un potentiel coulombien. Le milieu est alors caractérisé par les densités de chaque espèce et une température unique d'ensemble. On peut distinguer alors trois familles de plasma :

- **Les plasmas froids:** les ions et les neutres restent à des températures inférieures à $100\ K^{\circ}$ et les électrons sont à des températures élevées (application au traitement des surfaces, à l'élaboration de nouveaux matériaux, à la dépollution, à la génération d'ozone, à la chimie assistée par plasma, etc...).

- **Les plasmas thermiques:** caractérisés par des températures de fonctionnement supérieures à $300\ K^{\circ}$ (utilisation des charges d'arc pour la soudure, la découpe, la projection de matière, la dépollution, etc...).

- **Les plasmas chauds:** correspondants à des températures supérieures à $10^6\ K^{\circ}$

. Ils sont utilisés pour produire de l'énergie électrique à partir de la fusion contrôlée.

Nous traitons dans notre thèse un grand nombre de problèmes de transport, principalement le coefficient de diffusion dans un plasma. Le calcul de ce coefficient dans un milieu chargé a été largement étudié dans de nombreux laboratoires dans le monde utilisant différents modèles et approches, en particulier celles de la théorie de la réponse linéaire [2] et de la dynamique moléculaire [3] (appendice *F*). Dans notre travail, nous utilisons un modèle basé sur deux principales approximations en l'occurrence l'approximation " disconnected " [4][5][6] et l'approximation du champ moyen [4][7] pour un plasma à une composante ionique (OCP) et un plasma à deux composantes (TCP). La connaissance de ce coefficient sert dans la physique des plasmas à étudier par exemple la relaxation des ions rayonnants au sein du plasma. L'étude des propriétés des ions impureté est exploitée dans les techniques spectroscopiques dans le développement des lasers *X* et dans la fusion par confinement inertiel (FCI) [8]. Un modèle traitant ces propriétés a un été présenté [4] pour un plasma à une composante ionique.

Nous présentons aussi un modèle de calcul de la fonction d'autocorrélation de la vitesse et du champ électrique à l'aide de la technique de l'opérateur de projection [9] et de la fonction de Green-Kubo qui relie le coefficient de transport de diffusion avec la fonction d'autocorrélation de vitesse [10]. Pour les deux types de plasma (OCP et TCP), la fonction d'autocorrélation du microchamp ionique dépend indirectement du coefficient de diffusion et aussi de la fonction de distribution de paire qui joue un rôle important dans l'élaboration du modèle et dans tous les calculs des propriétés statiques et dynamiques dans le plasma. En effet, la fonction d'autocorrélation du microchamp est la quantité statistique, qui intéresse

particulièrement les spectroscopistes dans le calcul des profils de raies [12]. Cette fonction est étroitement liée à la notion de dynamique dans le plasma et permet de connaître le temps de corrélation du champ correspondant. Les profils de raies des constituants de l'univers et des étoiles ont une très grande importance dans l'analyse des astrophysiciens.

La thèse se compose essentiellement de deux parties, l'une comporte le calcul du coefficient de transport de diffusion pour un plasma à une composante ioniques puis à deux composantes ioniques et ce, dans le cadre des approximations "disconnected" et champ moyen, l'autre comporte le calcul des fonctions d'autocorrélation des vitesses et des champs par notre modèle théorique. Ce modèle est basé sur la connaissance des valeurs du coefficient de diffusion que nous avons calculé par les approximations précédentes citées dans la première partie.

Dans le premier chapitre, nous rappelons les différentes propriétés dynamiques, comme la fonction de corrélation temporelle, les facteurs de structures dynamiques [16], et les propriétés statiques, comme la fonction de distribution de paire et le facteur de structure statique, qui sont d'utilité dans tous les développements ultérieurs. Nous rappelons aussi les équations de base utiles (l'équation de Louville, l'équation cinétique, les équations de transports, les formules de Green- Kubo etc. ...) et aussi les propriétés thermodynamiques (l'énergie interne, la pression,...) en fonction de la fonction de distribution de paire dans le cas d'un plasma à une composante.

Dans le deuxième chapitre, nous utilisons la technique des opérateurs de projection [9] et l'équation cinétique [2] pour la formulation du coefficient de diffusion, puis nous traitons les approximations fondamentales pour le calcul de ce coefficient dans notre modèle:

l'approximation "disconnected" [10], qui est utilisée pour approximer la fonction de mémoire associée à la fonction d'autocorrélation de vitesse par un terme de l'opérateur de collision, et l'approximation du champ moyen [4], qui est utilisée dans le calcul des facteurs de structures. Nous nous limitons dans ce deuxième chapitre au cas d'un plasma à une seule composante.

Dans le troisième chapitre, nous utilisons les mêmes approximations dans le chapitre précédent, mais dans ce cas le plasma est à deux composantes ioniques, et nous comparons les résultats de notre modèle avec ceux donnés par la dynamique moléculaire. Nous rappelons au passage les propriétés thermodynamique (l'énergie interne, la pression,...) en fonction de la fonction de distribution de paire [30].

Dans le quatrième chapitre, nous présentons un modèle théorique pour les calculs de la fonction d'autocorrélation de la vitesse et du champ et ce en utilisant le coefficient de diffusion calculé dans les chapitres 2 et 3 pour un plasma à une composante et à deux composantes, et la fonction de distribution paire semi-empirique [11], et nous faisons ensuite une comparaison du modèle avec les résultats que nous avons obtenu par la dynamique moléculaire.

Chapitre 1

Les propriétés statiques et dynamiques du plasma

1.1 Introduction

L'état macroscopique d'un système en équilibre thermodynamique ou en équilibre thermodynamique local peut être paramétrisé par un certain nombre de variables extensives ou par leurs densités locales. En revanche, à l'échelle microscopique, l'état d'un système n'est pas connu exactement, le nombre de degrés de liberté d'un système macroscopique est en effet si grand qu'il est impossible d'y avoir une description microscopique complète.

Comme les grandeurs physiques mesurables expérimentalement sont dans la plupart du temps des grandeurs macroscopiques, il est nécessaire pour les déduire des propriétés microscopiques, de les traiter comme des moyennes statistiques sur toutes les particules du système. C'est ainsi que les variables physiques, appelées aussi variables dynamiques, ou

observables dépendent des coordonnées et des impulsions de toutes les particules du système et leurs moyennes statistiques se calculent pour un système classique à l'aide de la fonction de distribution dans l'espace des phases.

Nous présentons dans ce chapitre les propriétés statiques et dynamiques des plasmas, et on considère tout d'abord un système classique composé de N particules.

1.2 Fluctuation

En réalité la plupart des variables définissant l'état macroscopique d'un système en équilibre thermodynamique (pression, masse, température...), sont des variables aléatoires définies par des lois de probabilité. En effet, les appareils de mesure ne donnent qu'une valeur moyenne. Si nous répétons la mesure plusieurs fois dans des conditions identiques, les valeurs trouvées seront différentes et l'écart de la valeur réelle de sa valeur moyenne de l'état d'équilibre thermodynamique est appelé la fluctuation. Elle est aussi définie comme une déviation aléatoire des grandeurs physiques de leurs moyennes statistiques de l'état d'équilibre. C'est ainsi que la diffusion de la lumière par des milieux transparents est la conséquence de la fluctuation de l'indice de réfraction. La fluctuation de l'intensité de courant dans les circuits électriques est la cause du bruit de fond, qu'il est impossible d'éliminer dans les dispositifs radioélectriques.

La fluctuation d'une grandeur x est définie par la formule suivante [13]:

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(x - \bar{x})^2} \quad (1.1)$$

La fluctuation des grandeurs physiques de leurs moyennes statistiques de l'état d'équilibre est généralement petite, mais son étude a une grande importance pour plusieurs raisons [11]:

· premièrement:

L'étude des fluctuations nous permet de développer un cadre mathématique, qui, dans des situations physiques les plus variées permet d'estimer l'amplitude de fluctuation des grandeurs physiques.

· Deuxièmement:

Cette étude définit le cadre naturel permettant la compréhension du phénomène physique, celui ci est fondé sur le concept du " mouvement brownien "¹ qui décrit bien les différentes relations entre les propriétés de ces phénomènes physiques, tels que les coefficients de transport avec la température. Le mécanisme du mouvement brownien est vital non seulement dans le formalisme mais aussi bien pour répondre aux questions "comment étant donné un système hors d'équilibre, puisse t-il atteindre l'état d'équilibre final?, (où bien étant donné un système en équilibre thermodynamique peut-il persister dans cet état ? ").

· troisièmement:

L'étude des fluctuations qui dépendent du temps introduit le concept de la fonction de corrélation temporelle qui joue un rôle important dans l'établissement des relations entre

¹En 1827, le botaniste R. Brown a découvert au microscope le mouvement irrégulier de petites particules de pollen en suspension dans l'eau. Ce mouvement incessant et désordonné. Le paramètre important pour l'existence de ce mouvement est le rapport entre la masse de la particule brownienne et la masse des molécules de fluide environnant.

les propriétés de dissipation (macroscopiques) du système telles que; la viscosité de fluide, la résistance électrique, avec les propriétés microscopiques de ce système à l'état d'équilibre

Ces relations entre les processus irréversibles (macroscopiques) d'une part, et les propriétés d'équilibre (microscopique) d'autre part, sont exprimées par le théorème de fluctuation- dissipation².

1.3 La fluctuation de la densité en équilibre

Supposons en premier lieu que le gaz considéré soit à l'état d'équilibre thermodynamique du point de vue macroscopique c'est à dire que les conditions extérieures qui lui sont imposées (V , T ..) ne varient pas en temps et en espace. Cet état est obtenu si l'on a attendu suffisamment longtemps après le remplissage du récipient contenant le gaz.

Nous savons que, en réalité, cet équilibre macroscopique cache une agitation éternelle au niveau microscopique: les molécules sont en mouvement incessant à des vitesses assez considérables.

L'agitation thermique s'accompagne de fluctuation, par exemple, le nombre de molécules qui se trouvent dans la moitié du récipient n'est pas exactement et constamment égal à $N/2$. Ce nombre fluctue au cours de temps autour de cette valeur moyenne et l'amplitude de ces fluctuations est petite mais n'est jamais nulle.

Pour concrétiser les arguments qui vont suivre imaginons que nous puissions compter, à chaque instant t les molécules qui se trouvent dans une région déterminée et fixée du récipient.

²C'est le coeur de la théorie de la réponse linéaire, il fournit une relation très générale entre, d'une part, la réponse et la relaxation, et d'autre part, les fluctuations relie la dissipation d'énergie au cours des processus irréversibles et les fluctuations thermiques à l'équilibre.

ient contenant le gaz. Les nombres $n(t)$ obtenus portés en fonction du temps t ont l'allure représentée sur la figure (1.1)[13]

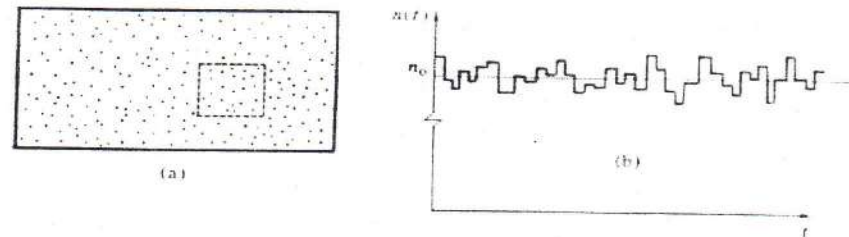


Figure 1.1: Dans un gaz en équilibre macroscopique, on mesure les nombres $n(t)$ qui se trouvent à l'instant t dans une région fixée (a). L'allure des variations de $n(t)$ (b).

1.4 Equation d'évolution de BBGKY (équation de transport)

Considérons un fluide constitué d'un grand nombre de N particules identiques sans structure interne et en mouvement à l'intérieur d'un récipient de volume V . Ce système peut être décrit microscopiquement par la mécanique classique. L'état macroscopique de ce système est caractérisé par une fonction appelée densité de probabilité: $f^N(\vec{r}^N, \vec{p}^N)$ dans l'espace de phase à $6N$ dimensions ($3N$ variables de positions et $3N$ d'impulsions). On peut dire que: $f^N(\vec{r}^N, \vec{p}^N)d\vec{r}^N d\vec{p}^N$ est la probabilité pour que, à l'instant t , l'une quelconque des particules se trouve au point $\vec{r}_1$ avec l'impulsion $\vec{p}_1$, une autre au point $\vec{r}_2$ avec l'impulsion $\vec{p}_2$, etc....

Bien entendu, cette probabilité est normalisée à chaque instant t , c'est à dire que[16]:

$$\int f^N(\vec{r}^N, \vec{p}^N) d\vec{r}^N d\vec{p}^N = 1 \quad (1.2)$$

L'évolution de la densité f_N par rapport le temps est donné par l'équation de Liouville classique:

$$\frac{\partial}{\partial t} f^N = \{H, f^N\} \quad (1.3)$$

où le symbole $\{.. \}$ désigne le crochet de poisson ainsi défini:

$$\{A, B\} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{dA}{dr_i} \frac{dB}{dp_i} - \frac{dB}{dr_i} \frac{dA}{dp_i} \right) \quad (1.4)$$

L'équation de Liouville (1.3) exprime l'invariance de la fonction de distribution à particules multiples sous la translation du temps c'est que sa dérivée totale par rapport au temps est identiquement nulle:

$$\frac{d}{dt} f^N = 0 \quad (1.5)$$

ou plus explicitement, en utilisant les dérivées de f^N à l'instant t :

$$\frac{\partial f^N}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3N} \frac{dr_i}{dt} \cdot \frac{df^N}{dr_i} + \sum_{i=1}^{3N} \frac{dp_i}{dt} \cdot \frac{df^N}{dp_i} = 0 \quad (1.6)$$

qui peut s'écrire sous forme opératorielle comme:

$$\frac{\partial}{\partial t} f^N = -iL f^N \quad (1.7)$$

Bien entendu, cette probabilité est normalisée à chaque instant t , c'est à dire que[16]:

$$\int f^N(\vec{r}^N, \vec{p}^N) d\vec{r}^N d\vec{p}^N = 1 \quad (1.2)$$

L'évolution de la densité f_N par rapport le temps est donné par l'équation de Liouville classique:

$$\frac{\partial}{\partial t} f^N = \{H, f^N\} \quad (1.3)$$

où le symbole $\{.. \}$ désigne le crochet de poisson ainsi défini:

$$\{A, B\} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{dA}{dr_i} \frac{dB}{dp_i} - \frac{dB}{dr_i} \frac{dA}{dp_i} \right) \quad (1.4)$$

L'équation de Liouville (1.3) exprime l'invariance de la fonction de distribution à particules multiples sous la translation du temps c'est que sa dérivée totale par rapport au temps est identiquement nulle:

$$\frac{d}{dt} f^N = 0 \quad (1.5)$$

ou plus explicitement, en utilisant les dérivées de f^N à l'instant t :

$$\frac{\partial f^N}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3N} \frac{dr_i}{dt} \cdot \frac{df^N}{dr_i} + \sum_{i=1}^{3N} \frac{dp_i}{dt} \cdot \frac{df^N}{dp_i} = 0 \quad (1.6)$$

qui peut s'écrire sous forme opératorielle comme:

$$\frac{\partial}{\partial t} f^N = -iL f^N \quad (1.7)$$

La solution formelle de cette dernière équation prend la forme suivante:

$$f^N(r^N, p^N, t) = \exp(-iLt) f^N(r^N, p^N, 0) \quad (1.8)$$

où $f^N(r^N, p^N, 0)$ est la densité de la probabilité à l'instant $t = 0$ c'est à dire la densité de probabilité à l'équilibre thermodynamique.

A partir de la densité de probabilité f^N , on définit une suite de fonctions de distributions réduites à n particules ($n \leq N$), qui expriment la densité de probabilité de trouver, à l'instant t , n particules (indépendamment des $N-n$ particules restantes) sur les positions $\vec{r}_i, i=1,2,\dots,n$ avec les impulsions $\vec{p}_{i=1,2,\dots,n}$, [16]:

$$\begin{aligned} f^n(r^n, p^n, t) &= f^n(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_n, \vec{p}_1, \vec{p}_2 \dots \vec{p}_n) \\ &= \frac{N!}{(n-n)!} \int \dots \int f^N(r^N, p^N) dr^{(N-n)} dp^{(N-n)} \\ &= \frac{N!}{(n-n)!} \int \dots \int f^N(r^N, p^N) d\vec{r}_{n+1} \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_{n+1} \dots d\vec{p}_N \end{aligned} \quad (1.9)$$

La normalisation de cette fonction f^n est exprimée comme suit:

$$\frac{1}{n!} \int \dots \int f^n(r^n, p^n) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_n d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_n = \frac{N!}{n!(N-n)!} \quad (1.10)$$

$N!/(N-n)!$ est le nombre de façons distinctes de choisir n particules parmi l'ensemble des N particules, et l'on a aussi:

$$\int f^{n+1} d\vec{r}_{n+1} d\vec{p}_{n+1} = (N-n) f^n \quad (1.11)$$

qui est un ensemble d'équations couplées. La connaissance de $f^1(r_{n+1}, p_{n+1})$ est conditionnée par la connaissance de $f^2(r_{n+1}, p_{n+1})$, celle de $f^2(r_{n+1}, p_{n+1})$ par $f^3(r_{n+1}, p_{n+1})$, etc...: c'est la hiérarchie BBGKY (Bougoliubov, Born, Green, Kirkwood et Yvon). Dans le cas le plus important où $n = 1$, c'est l'équation d'évolution pour $f^1(\vec{r}_1, \vec{p}_1, t)$ qui fait intervenir la fonction à deux particules $f^2(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2, t)$ [13], donc:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{d}{dt} + \frac{\vec{p}_1}{m} \frac{d}{d\vec{r}_1} + F_1(r) \frac{d}{d\vec{p}_1} \right] f^1(\vec{r}_1, \vec{p}_1, t) \\ &= \int \frac{d\vec{r}_2}{d\vec{p}_2} U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \frac{d}{d\vec{p}_1} f^2(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2, t) d\vec{r}_2 d\vec{p}_2 \quad (1.12) \end{aligned}$$

Remarque: à l'équilibre thermodynamique la densité de probabilité ne doit pas dépendre explicitement du temps, elle est simplement notée $f_0^N(r^N, p^N)$: la densité de probabilité d'équilibre pour N particules classiquement identiques est donnée par :

$$f_0^N(r^N, p^N) = \frac{1}{N!} \cdot \frac{1}{Z_N(V, t)} \exp \{ -\beta H_N(r^N, p^N, V) \} \quad (1.13)$$

où

$$Z_N(V, t) = \frac{1}{N!} \cdot \int \int \exp \{ -\beta H_N(r^N, p^N, V) \} dr^N dp^N.$$

On peut généraliser les équations données dans le cas d'un plasma à une espèce, de façon à les appliquer à un milieu constitué de plusieurs espèces de particules chargées.

Supposons, que le gaz soit constitué de N_1 particules de type α et N_2 particules de type β , et désignons par $d\Omega_\alpha$ et $d\Omega_\beta$ les éléments de volume des espaces de phase à $6N_1$ et à $6N_2$ dimensions respectivement.

Donc les fonctions de distribution des particules de type i (α ou β) sont définies par la formule[44]:

$$f_i(\vec{r}_1^i, \vec{p}_1^i) = N_i \int f^N \frac{d\Omega_\alpha d\Omega_\beta}{d\vec{r}_1^i d\vec{p}_1^i} \quad (1.14)$$

où N_i est le nombre total de particules de type i et $N = N_1 + N_2$

Les fonctions de distribution doubles et relatives aux particules de type i et j (i et $j = \alpha$ où β) sont définies par les formules:

$$f_{ii}(\vec{r}_1^i, \vec{p}_1^i, \vec{r}_2^i, \vec{p}_2^i) = N_i(N_i - 1) \int f^N \frac{d\Omega_\alpha d\Omega_\beta}{d\vec{r}_1^i d\vec{p}_1^i d\vec{r}_2^i d\vec{p}_2^i} \quad (1.15)$$

$$f_{ij}(\vec{r}_1^i, \vec{p}_1^i, \vec{r}_2^j, \vec{p}_2^j) = N_i(N_i - 1) \int f^N \frac{d\Omega_\alpha d\Omega_\beta}{d\vec{r}_1^i d\vec{p}_1^i d\vec{r}_2^j d\vec{p}_2^j} \quad (1.16)$$

1.5 Les propriétés générales de la fonction de corrélation

1.5.1 Les fonctions de corrélation spatiale (distribution radiale)

Les propriétés de transport et d'autres propriétés dans les fluides chargés sont reliées par une relation étroite avec leur structure et la répartition des distances entre les atomes dans le liquide. Les informations essentielles sur cette répartition sont fournies par la fonction de distribution radiale des paires $g(r)$ définie de la façon suivante [15]:

Si nous considérons un atome centré en "O", le nombre $n(r)$ d'atomes dont les centres se trouvent à une distance de "O" variant entre r et $r + dr$ est donné par :

$$n(r)dr = 4\pi r^2 g(r)dr \quad (1.17)$$

Si $dV = 4\pi r^2 dr$ est un élément de volume centré en un point "M" situé à une distance r de l'origine "O", $g(r)dr$ est le nombre d'atomes situés dans l'élément de volume

dV moyenné sur toutes les orientations possibles du vecteur $\overrightarrow{OM}$. La quantité $g(r)dr$ est pratiquement nulle à l'intérieur d'une sphère de rayon $r = 2r^o$ (où r^o est le rayon atomique) à cause de l'impénétrabilité des sphères. Elle présente un premier pic arrondi autour de $2r^o$ correspondant à la présence des premiers atomes voisins. Lorsque r augmente, $g(r)$ présente plusieurs oscillations amorties qui traduisent l'effet des secondes, troisièmes voisins, etc....

En générale, la fonction de distribution de n particules est définie par la probabilité de cette façon [16]:

$$g_N^n(r^n) = V^n P_N^n(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) \quad (1.18)$$

$$P_N^n(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 1/Z_N \int \dots \int \exp[-\beta v_N(r^N)] d\vec{r}_3 \dots d\vec{r}_N \quad (1.19)$$

où $v_N(r^N)$ désigne l'énergie potentielle d'interaction.

Les fonctions de distribution les plus utilisées sont les fonctions de corrélation radiales de paires, qui sont définies de la manière suivante:

$$g_N^2(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = g_N^2(r) = V^2 P_N^2(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (1.20)$$

$g(r)$ est une distribution statique extrêmement importante. Elle caractérise complètement le comportement d'un fluide classique (à symétrie sphérique). Cette distribution peut être calculée directement par l'expérience de R-X ou par la méthode de la dynamique moléculaire. Cette fonction a été tabulée pour plusieurs valeurs du paramètre de couplage Γ dans le cas d'un plasma à une composante par Hansen (1973) [2]. Un exemple est montré

sur la figure (1.2) à partir duquel nous pouvons calculer les propriétés thermodynamiques (l'énergie interne, l'équation d'état..) [17], les facteurs de structures (Hansen et al 1975) [7], les fonctions d'autocorrélation du microchamp électrique du système [13] [19].

A cause de $g(r) \rightarrow 1$ quand $r \rightarrow 1$, il est important de définir une autre fonction $h(r)$ qui est reliée à $g(r)$ par la relation [20]:

$$h(r) = g(r) - 1 \quad (1.21)$$

la fonction de corrélation $h(r)$ mesure le degré de corrélation spatiale dans le système. Elle décrit la corrélation entre deux particules: en absence de corrélation spatiale $h(r)$ est égale à zéro c'est à dire que $h(r) \rightarrow 0$ quand $|r| \rightarrow \infty$.

On introduit une autre fonction dite de corrélation directe, qui est reliée avec $h(r)$ et $g(r)$ par la formule d'Orstein-Zernicke (1914) [16]:

$$h(r) = c(r) + \rho \int c(|\vec{r} - \vec{r}'|) h(r') dr' \quad (1.22)$$

La fonction de corrélation de paire classique $g(r)$ pour une espèce, peut être exprimée simplement à partir de l'énergie d'interaction entre deux particules de la façon suivante [1]:

$$g(r) = e^{-\beta v(r)} \quad (1.23)$$

Ce résultat peut être généralisé en écrivant:

$$g_{ij}(r) = e^{-\frac{v_{ij}(r)}{kT}} \quad (1.24)$$

La fonction de distribution des paires est obtenue à la limite de faible couplage par deux théories: Debye Huckel [21][22] et "Abe-Mayer Cluster Expansion" [23][24]; tandis que pour le couplage fort, on peut utiliser les méthodes de Monte Carlo (1.2) [25] [26] ou bien celle de "Hypernetted Chain Equation" [27].

Il existe d'autres méthodes de calcul des fonctions de distribution des paires utilisant différents modèles et théories. Nous utilisons dans notre travail la méthode semi-empirique proposée par B.Held et al [11] (voir les figures ...)(1.3) (1.4) (1.5).

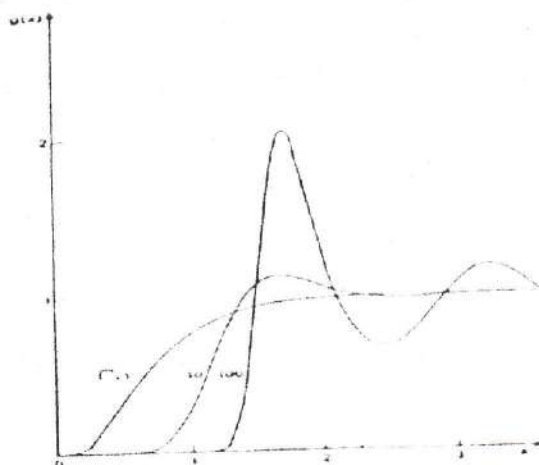


Figure 1.2: Fonction radiale de paires pour un plasma à une composante, en abscisse $x = r/a$ (à partir d'un calcul de simulation par la méthode de Monte carlo)

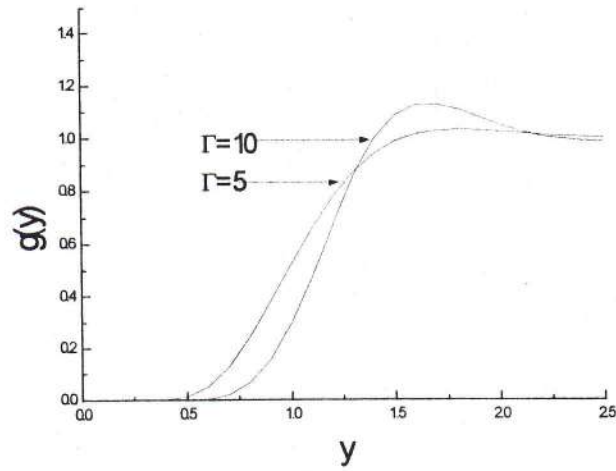


Figure 1.3: Fonction de distribution $g(y)$ pour un plasma à une composante ($Z=1$) par la méthode semi-empirique (Held) [4], où $y=r/a$

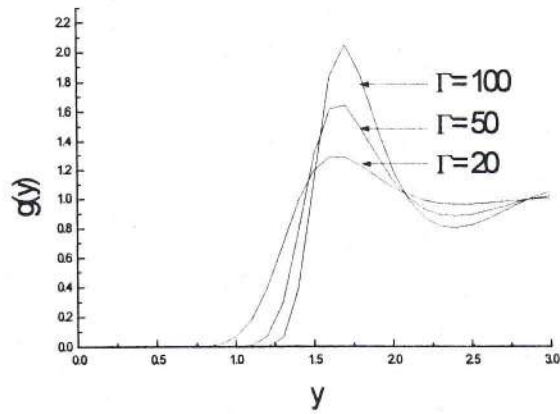


Figure 1.4: Fonction de paire à une espèce (semi empirique)

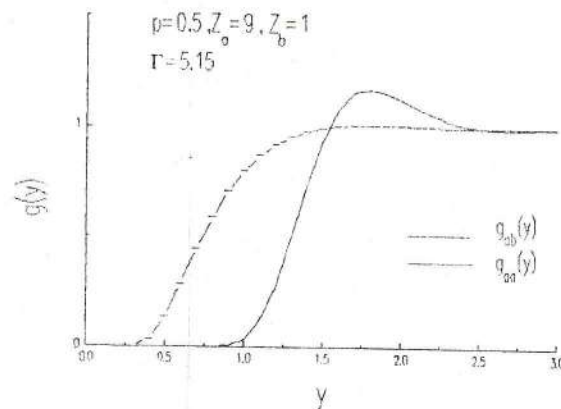


Figure 1.5: Fonction de paire pour deux espèces

1.5.2 Les grandeurs thermodynamiques et la fonction $g(r)$

Comme nous l'avons déjà dit dans le paragraphe précédent, nous pouvons calculer à partir de la fonction de distribution radiale $g(r)$ toutes les grandeurs thermodynamiques nécessaires pour définir le comportement macroscopique de notre système.

La fonction de partition est reliée à l'énergie libre par la relation suivante [16]:

$$Z_N(V, T) = \exp(-\beta F_N) \quad (1.25)$$

C'est une relation fondamentale, qui relie la mécanique statistique à la thermodynamique. Nous savons qu'à partir de cette fonction, on peut calculer toutes les grandeurs thermodynamiques, qui sont définies en fonction de la distribution radiale $g(r)$.

L'énergie interne est la valeur moyenne de l'énergie totale Hamiltonienne $H_N(p^N, r^N)$ dans l'ensemble canonique classique:

$$\begin{aligned}
U &= \frac{1}{Z_N(V, T)} \int dp^N dr^N H_N(p^N, r^N) e^{-\beta H^N} \\
U &= \frac{3}{2} N K_B T + \frac{1}{Z_N} \int \exp(-\beta v_N(r^N)) v_N(r^N) dr^N
\end{aligned} \tag{1.26}$$

où $V_N(r^N)$ est l'énergie potentielle d'interaction entre les diverses particules constituant le système. Les deux termes de cette dernière expression sont respectivement l'énergie cinétique moyenne et l'énergie potentielle moyenne. L'énergie d'interaction entre les diverses particules est donnée par [28] (nous supposons que le potentiel d'interaction entre deux particules est à symétrie sphérique et donc ne dépendant que de la distance séparant ces deux mêmes particules):

$$v_N(r^N) = \sum_{i < j}^N v(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = \sum_{i < j}^N v(r_{ij}) \tag{1.27}$$

donc l'énergie potentielle moyenne peut être écrite comme:

$$\begin{aligned}
\langle v_N(r^N) \rangle &= \frac{N(N-1)}{2} \cdot \frac{1}{Z_N} \int e^{-\beta V_N} v(r_{12}) d\vec{r}_N \dots d\vec{r}_1 \\
&= \frac{N(N-1)}{2} \cdot \int e^{-\beta v_N} \frac{\int v(r_{12}) d\vec{r}_3 \dots d\vec{r}_N}{Z_N} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \\
&= \frac{1}{2} \int v(r_{12}) \rho^2 g(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2
\end{aligned} \tag{1.28}$$

et finalement l'énergie totale par unité de nombre de particules est donnée par [28]:

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{2} K_B T + \frac{\rho}{2} \int_0^\infty u(r) g(r) 4\pi r^2 dr \tag{1.29}$$

Le second terme de l'équation (1.29) porte une interprétation physique claire: En effet l'énergie potentielle d'interaction entre une particule et les particules situées dans la

couronne sphérique entre r et $r + dr$ est représentée par le terme $\rho u(r)g(r)4\pi r^2 dr$, où $\rho g(r)$ est considérée comme une densité locale. L'énergie potentielle totale est trouvée par intégration sur toutes les valeurs de r multipliée par $N/2$. Le facteur N a été introduit parce que n'importe quelle particule de l'ensemble des N particules peut être choisie comme un particule centrée à l'origine.

On peut dériver une autre relation semblable entre la pression moyenne et l'intégrale sur le produit de $g(r)$ et la force $(-dv(r)/dr)$. La pression est reliée à la fonction de partition par:

$$P = -\frac{dF_N}{dV} = K_B T \frac{d \ln Z_N}{dV} \quad (1.30)$$

Dans la limite thermodynamique, la pression est indépendante de la forme du récipient; en effet si on suppose que le récipient est un cube de dimension linéaire L , et on écrit l'intégrale de configuration (la fonction de partition) comme:

$$Z_N = \int_0^L \dots \int_0^L e^{-Bv_N} dx_1 dy_1 dz_1 \dots dx_N dy_N dz_N \quad (1.31)$$

et en changeant les variables de sorte que les limites des intégrales sont indépendantes de L , par $\bar{x}_i = x_i/L$ alors:

$$Z_N = V^N \int_0^1 \dots \int_0^1 e^{-Bv_N} d\bar{x}_1 d\bar{y}_1 d\bar{z}_1 \dots d\bar{x}_N d\bar{y}_N d\bar{z}_N \quad (1.32)$$

$$\frac{dZ_N}{dV} = N V^{N-1} \int e^{-Bv_N} d\bar{x}_1 \dots d\bar{z}_N - \frac{V}{K_B} \int_0^1 \dots \int_0^1 e^{-Bv_N} \frac{dv_N}{dV} d\bar{x}_1 \dots d\bar{z}_N \quad (1.33)$$

En revenant aux variables de départ, on obtient l'équation donnant la pression qui n'est rien d'autre que l'équation d'état:

$$P = K_B T \frac{d \ln Z_N}{dV} = \frac{K_B T}{Z_N} \cdot \frac{dZ_N}{dV} = \frac{N K_B T}{V} - \frac{\rho^2}{6V} \int r_{12} \frac{dv(r_{12})}{dr_{12}} g(r_{12}) dr_1 dr_2 \quad (1.34)$$

d'où:

$$\frac{pV}{N K_B T} = 1 - \frac{\rho}{6 K_B T} \int r \frac{dv(r)}{dr} g(r) 4\pi r^2 dr \quad (1.35)$$

1.5.3 La fonction de corrélation temporelle

Plusieurs problèmes et propriétés dynamiques peuvent être éclaircis et déterminés par la connaissance de l'intégrale sur certaines fonctions appelées les fonctions de corrélation temporelles. Ces fonctions jouent un rôle important dans la mécanique statistique hors équilibre semblable au rôle que joue la fonction de partition dans la mécanique statistique en équilibre.

On définit alors la fonction de corrélation temporelle dans le cas général d'une fonction de n variables comme:

$$C_{A_1 A_2 \dots A_n} = \langle A_1 A_2 \dots A_n \rangle \quad (1.36)$$

où

$$A_{i=1,2,\dots,n}(t) = A_i [r^N(t), P^N(t)] \quad (1.37)$$

avec:

et n est la dimension de l'espace et N est le nombre de particules. Dans le cas particulier d'une fonction de deux variables dynamiques³:

$$A(t) = [r^N(t), p^N(t)] \text{ et } B(t) = [r^N(t), p^N(t)]$$

$$C_{BA} = \langle A(t+s)B(s) \rangle \quad (1.39)$$

La moyenne sur les deux fonctions A et B peut être effectuée de deux façons. La première consiste à faire une moyenne d'ensemble (moyenne statistique sur l'espace de phase) [16]:

$$\begin{aligned} & \langle B(t+s)A(s) \rangle \\ &= \int B[r^N(t+s), p^N(t+s)] f_0^N[r^N(s), p^N(s)] A[r^N(s), p^N(s)] dr^N(s) dP^N(s) \\ &= \int \exp(iLt) \cdot B(s) f_0^N(s) A(s) d\Gamma_N(s) \end{aligned} \quad (1.40)$$

où L est l'opérateur Louivillien de la mécanique classique, tandis que la seconde consiste à faire une moyenne sur le temps :

$$\langle B(t+s)A(s) \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau B(t+s+t') A(s+t') dt' \quad (1.41)$$

où $f_0^N[r^N(s), p^N(s)]$ est la densité de probabilité dans l'espace des phases $[r^N, p^N]$ à l'instant s . Elle s'appelle aussi fonction de distribution à particules multiples [A.Akhiezer, S. Peletminski]. Si le système est isolé, l'hamiltonien est une constante de mouvement (

³Les variables dynamiques sont des grandeurs physiques fonctions des coordonnées et des impulsions. et ne dépendent pas explicitement du temps

conservation d'énergie) et $C_{BA}(t)$ est indépendante du choix de l'origine des temps, donc la fonction de corrélation est dite stationnaire. Il est habituel de mettre $s = 0$ et on écrira $C_{BA}(t)$ de la façon suivante:

$$C_{BA}(t) = \langle B(t)A(0) \rangle = \langle B(t)A \rangle \text{ où } A = A(0) \quad (1.42)$$

Si les variables sont des fonctions complexes, la fonction de corrélation qui est souvent utilisée et portant de l'intérêt en physique est $\langle B(t)A^* \rangle$.

Les propriétés de stationnarité des fonctions de corrélation temporelles sont les suivantes [16]:

$$\frac{d}{ds} \langle B(t+s)A(s) \rangle = \langle \dot{B}(t+s)A(s) \rangle + \langle B(t+s) \dot{A}(s) \rangle \quad (1.43)$$

ainsi $\langle \dot{B}(t)A \rangle = - \langle B(t) \dot{A} \rangle$, donc

$$\frac{d}{dt} \langle B(t+s)A(s) \rangle = 0 \quad (1.44)$$

En particulier

$$\langle \dot{A} A \rangle = 0 \quad (1.45)$$

la répétition de la dérivé relativement à la variable s conduit à un nombre de résultats utiles, et qui peuvent être aussi déduits de la définition (1.39), par exemple:

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle B(t)A \rangle = \langle \ddot{B}(t)A \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \ddot{B}(t+t')A(t')dt'$$

$$\begin{aligned}
&= - \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} \dot{B}(t+t') \dot{A}(t') dt' + \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \left[\dot{B}(t+t') A(t) \right]_0^{\tau} \\
&= - \langle \dot{B}(t) \dot{A} \rangle
\end{aligned} \tag{1.46}$$

L'extension de la dérivation à des ordres supérieurs de la fonction $C_{BA}(t)$ est insignifiant dans notre approche. Il est clair que $\lim_{t \rightarrow 0} C_{BA}(t) = \langle BA \rangle$, et qu'à partir de l'inégalité de Schwartz [16] on peut écrire:

$$|C_{BA}(t)| \leq \langle |BA| \rangle \tag{1.47}$$

$$\text{et } \lim_{t \rightarrow \infty} C_{BA}(t) = \lim_{t \rightarrow 0} \langle B(t)A(t) \rangle = \langle BA \rangle.$$

Il est souvent commode d'extraire la partie invariante des variables et de calculer la fonction de corrélation des parties fluctuantes.

$$C_{BA}(t) = \langle [B(t) - \langle B \rangle] [A(0) - \langle A \rangle] \rangle = \langle \delta B(t) \delta A(0) \rangle \tag{1.48}$$

Ceci assure que $C_{BA}(t)$ tend vers zéro à la limite infini en temps ce qui correspond physiquement à une perte de corrélation entre les parties fluctuantes des variables en question.

Si $B=A$: $C_{BA}(t)$ est appelée fonction d'autocorrélation de la variable A, les fonctions de ce type sont très utiles car:

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

ii) leurs intégrales sur le temps peuvent être directement reliées aux coefficients de transport [29],

ii) leurs intégrales sur le temps peuvent être directement reliées aux coefficients de transport [29],

iii) leurs transformations de Fourier sont en relation avec le spectre expérimentale (facteur de structure dynamique) [7].

On utilise habituellement dans le calcul de $C_{AA}(t)$ cette forme:

$$C_{BA}(t) = \frac{\langle \delta B(t) \delta A(0) \rangle}{\langle \delta B(0) \delta A(0) \rangle} \quad (1.49)$$

1.5.4 Le facteur de structure dynamique

Le développement d'une formule décrivant la dynamique du comportement microscopique d'un liquide exige l'introduction d'une nouvelle fonction de distribution généralisée dépendant du temps. Dans la plupart des situations, on utilise la fonction de corrélation spatio-temporelle généralisée proposé pour la première fois par Van Hove (1954)[16].

On définit premièrement la densité locale[16]:

$$n(\vec{r}, t) = \sum_{i=1}^N \delta[\vec{r} - \vec{r}_i(t)] \quad (1.50)$$

où les $\vec{r}_i(t)$ sont les opérateurs positions des différentes particules du système. Puis nous construisons une fonction d'autocorrélation temporelle de la densité $C(r, t)$ donnée par :

$$C(\vec{r}, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \delta[\vec{r} - \vec{r}_i(0) - \vec{r}_j(t)] \right\rangle \quad (1.51)$$

Cette fonction se laisse scinder en deux termes C_s self et C_d distincts tels que:

$$C(\vec{r}, t) = C_s(\vec{r}, t) + C_d(\vec{r}, t)$$

$$C_s(\vec{r}, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \delta[\vec{r} - \vec{r}_i(0) - \vec{r}_i(t)] \right\rangle \quad (1.52)$$

$$C_d(\vec{r}, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i \neq j}^N \delta[\vec{r} - \vec{r}_i(0) - \vec{r}_j(t)] \right\rangle \quad (1.53)$$

Dans le cas classique $C(r, t)dr$ est la probabilité de trouver une particule i dans une région dr autour d'un point r à l'instant t donné, si une particule j est placée à l'origine au même instant t . La séparation de $C(\vec{r}, t)$ en deux termes, un self et un distinct, correspond respectivement aux cas $(i = j)$ et $(i \neq j)$.

La normalisation de la fonction de Van Hove est déterminée par la normalisation de la fonction delta (δ)

$$\int C_s(\vec{r}, t) d\vec{r} = 1 \text{ et } \int C_d(\vec{r}, t) d\vec{r} = N \quad (1.54)$$

La fonction C_s décrit la corrélation dans le mouvement d'une seule particule, c'est à dire que $C_s dr$ est la probabilité de trouver une particule i dans la région dr à l'instant t sachant qu'à l'instant $t = 0$ cette même particule i était à l'origine. A l'instant $t = 0$ la densité de particules à un point r vaut:

$$n(\vec{r}, t = 0) = \sum_{i=1}^N \delta[\vec{r} - \vec{r}_i(0)] \quad (1.55)$$

avec $C_s(\vec{r}, 0) = \delta(r)$ et $C_d(\vec{r}, 0) = \rho g(r)$.

On introduit alors un facteur $S(\vec{k}, \omega)$, appelé facteur de structure dynamique, de la manière suivante [7]:

$$C_s(\vec{r}, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \delta[\vec{r} - \vec{r}_i(0) - \vec{r}_i(t)] \right\rangle \quad (1.52)$$

$$C_d(\vec{r}, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i \neq j}^N \delta[\vec{r} - \vec{r}_i(0) - \vec{r}_j(t)] \right\rangle \quad (1.53)$$

Dans le cas classique $C(r, t)dr$ est la probabilité de trouver une particule i dans une région dr autour d'un point r à l'instant t donné, si une particule j est placée à l'origine au même instant t . La séparation de $C(\vec{r}, t)$ en deux termes, un self et un distinct, correspond respectivement aux cas $(i = j)$ et $(i \neq j)$.

La normalisation de la fonction de Van Hove est déterminée par la normalisation de la fonction delta (δ)

$$\int C_s(\vec{r}, t) d\vec{r} = 1 \text{ et } \int C(\vec{r}, t) d\vec{r} = N \quad (1.54)$$

La fonction C_s décrit la corrélation dans le mouvement d'une seule particule, c'est à dire que $C_s dr$ est la probabilité de trouver une particule i dans la région dr à l'instant t sachant qu'à l'instant $t = 0$ cette même particule i était à l'origine. A l'instant $t = 0$ la densité de particules à un point r vaut:

$$n(\vec{r}, t = 0) = \sum_{i=1}^N \delta[\vec{r} - \vec{r}_i(0)] \quad (1.55)$$

avec $C_s(\vec{r}, 0) = \delta(r)$ et $C_d(\vec{r}, 0) = \rho g(r)$.

On introduit alors un facteur $S(\vec{k}, \omega)$, appelé facteur de structure dynamique, de la manière suivante [7]:

$$\begin{aligned}
S(\vec{k}, \omega) &= \frac{1}{2\pi N} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega t) \langle n(\vec{k}, t) n(\vec{k}, 0) \rangle dt \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega t) F(\vec{k}, t) dt
\end{aligned} \tag{1.56}$$

où

$$F(\vec{k}, t) = \frac{1}{N} \langle n(\vec{k}, t) n(\vec{k}, 0) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{ij} \langle e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i(t) - \vec{r}_j(0))} \rangle \tag{1.57}$$

est une fonction d'autocorrélation de la densité.

Ces deux dernières expressions montrent que la fonction de diffusion $S(\vec{k}, \omega)$ est la transformation de Fourier de la fonction d'autocorrélation de la densité, c'est pourquoi on peut considérer qu'à un vecteur d'onde donné la fonction $S(\vec{k}, \omega)$ est le spectre des fluctuations spontanées de la densité.

Dans le cas classique, ce facteur est une fonction réelle, puisqu'à un vecteur d'onde donné, il représente la distribution spectrale d'un processus de diffusion. Donc le facteur de self structure dynamique est (dans le cas où $i = j$ pour la fonction de Van Hove) :

$$S_S(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega t) F_S(\vec{k}, t) dt \tag{1.58}$$

Notons qu'il y'a une relation simple entre $S(\vec{k}, \omega)$ et $C(r, t)$ à savoir:

$$S(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi N} \int \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) d\vec{r} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega t) C(\vec{r}, t) dt \tag{1.59}$$

et à partir de la séparation de $C(r, t)$ on trouve:

$$S_S(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int \exp(-i \vec{k} \cdot \vec{r}) d\vec{r} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega t) C_s(\vec{r}, t) dt \quad (1.60)$$

Le facteur de structure dynamique donne aussi une idée sur la structure de la matière où bien de la distribution des positions relatives des molécules.

Nous pouvons voir ceci de la façon suivante:

En intégrant $S(\vec{k}, \omega)$ sur toutes les valeurs de l'énergie transférée nous obtenons le facteur de structure statique utile pour la discription de la distribution spatiale de la matière dans les fluides et les solides [7]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} S(\vec{k}, \omega) d\omega = S(\vec{k}) \quad (1.61)$$

où les fonctions $S(k)$ et $g(r)$ sont reliées par la transformé de Fourier [20]:

$$S(\vec{k}) = 1 + n \int [g(r) - 1] e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{r} \quad (1.62)$$

Nous remarquons que $F_s(k, 0) = S(k)$ où $S(k)$ est le facteur de structure statique, représente la structure microscopique du fluide, et mesurant donc la corrélation entre les positions des atomes.

Il y' a d'autres relations algébriques entre $\hat{h}(k)$ et $\hat{c}(k)$ ($\hat{c}(k)$ c'est la transformation de Fourier de la fonction de corrélation directe $c(r)$) comme:

$$\hat{h}(k) = \frac{\hat{c}(k)}{1 - n\hat{c}(k)} \quad (1.63)$$

Dans le cas plus général, où le plasma est constitué de plusieurs espèces, les facteurs de structure partiels sont définis de la même façon, tels que[16]

$$S_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi N} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega t) \langle n_{\alpha}(\vec{k}, t) \cdot n_{\beta}(\vec{k}, 0) \rangle dt \quad (1.64)$$

avec $S_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) \neq S_{\beta\alpha}(\vec{k}, \omega)$.

Expérimentalement, les facteurs de structure statiques et dynamiques sont mesurés par des expériences R-X⁴ [20], aussi théoriquement par la dynamique moléculaire [7] et la théorie de la réponse linéaire [31].

1.5.5 Les coefficients de transport et les fonctions d'autocorrélation

Dans cette discussion nous nous intéressons à une classe de phénomènes physiques possédant certaines caractéristiques communes. On regroupe ces phénomènes sous le titre général de phénomènes de transport, qui sont caractérisés par des paramètres importants et dont le calcul, par des méthodes théoriques, est le but de notre exposé.

Ces paramètres sont des propriétés macroscopiques comme le coefficient de self diffusion, la viscosité de fluide, la conductivité électrique et la conductivité thermique. Nous savons bien que ces phénomènes de transport sont les processus dans lesquels existe un transfert global de matière, d'énergie ou de quantité de mouvement à l'échelle macroscopique. Le calcul des ces coefficients est déterminé à l'aide de l'équation de Boltzmann dans le cas hors l'équilibre (on applique un champ extérieur, réponse linéaire de notre système).

Pendant les dernières années, une nouvelle méthode pour obtenir ces coefficients fut développée par Green et Kubo (1950, 1960)[46]. A partir de ces travaux il est possible d'écrire les expressions des coefficients de transport sous formes d'intégrales de certaines

⁴Dans l'expérience R-X nous avons obtenu le facteur de structure $S(k)$ et après on peut calculer la fonction $g(r)$ à partir de la transformation de fourier inverse.

fonctions de corrélation temporelles (les formules de Green -Kubo) calculées pour des systèmes en équilibre thermodynamique.

Les informations qu'on a besoin pour décrire le mouvement des particules sont contenues dans l'expression $C_s(r, t)$ [16]. Si on considère un groupe des particules, situées à l'instant $t=0$ dans un petit volume élémentaire autour de $r = 0$, à l'instant t la fraction de ces particules qui sont trouvées dans l'unité de volume autour du point r est $C_s(r, t)$ obéissant à l'équation de diffusion suivante:

$$\frac{d}{dt}C_s(r, t) = D\nabla^2 C_s(r, t) \quad (1.65)$$

où D est le coefficient de self-diffusion, et $C_s(r, t)$ est la densité de la probabilité pour trouver la particule au point r à l'instant t . La solution de l'équation (1.65) est:

$$C_s(r, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{4Dt}\right)$$

donc sa transformée de Fourier est:

$$F_s(k, t) = \int e^{ikr} C_s(r, t) dr \quad (1.66)$$

si nous injectons $F_s(k, t)$ dans l'équation de diffusion, on trouve:

$$\frac{dF_s(k, t)}{dt} = -Dk^2 F_s(k, t) \quad (1.67)$$

dont la solution est

$$F_s(k, t) = C \exp(-Dk^2 t) \quad (1.68)$$

où

$$Fs(k, 0) = C = 1$$

donc:

$$Fs(k, t) = \exp(-Dk^2t) \quad (1.69)$$

Selon cette équation et à partir de l'équation (1.66) on trouve que:

$$\frac{d^2Fs}{dk^2} = -2Dt \quad (1.70)$$

$$\frac{d^2Fs}{dk^2} = -\frac{1}{3} \langle r^2(t) \rangle \quad (1.71)$$

donc, si nous comparons entre les deux équations (1.70) et (1.71) on trouve la relation d'Einstein¹:

$$\langle r^2(t) \rangle = 6Dt \quad (1.72)$$

valable pour $r(0) = 0$, mais pour le cas général où $r(0) = r_0$ ($Gs(r, t) = \delta(r - r_0)$), donc:

$$\langle |\vec{r}(t) - \vec{r}(0)|^2 \rangle = 6Dt \Rightarrow D = \frac{1}{6t} \langle |\vec{r}(t) - \vec{r}(0)|^2 \rangle \quad (1.73)$$

et sachant que:

¹C'est A. Einstein, qui, en 1905, a donné la première explication théorique claire du phénomène de transport (mouvement brownien) et a vérifié directement expérimentalement, ce qui a permis d'établir les fondements de la théorie cinétique de la matière.

$$\vec{r}(t) - \vec{r}(0) = \int_0^t dt' \vec{V}(t') \quad \text{et} \quad [\vec{r}(t) - \vec{r}(0)]^2 = \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \vec{V}(t') \cdot \vec{V}(t'') \quad (1.74)$$

où $\vec{V}(t)$ est la vitesse de la particule. Si nous effectuons la moyenne thermique de cette équation, on trouve[16]:

$$\langle [\vec{r}(t) - \vec{r}(0)]^2 \rangle = \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \langle \vec{V}(t') \cdot \vec{V}(t'') \rangle \quad (1.75)$$

A cause de la stationnarité de la valeur moyenne d'ensemble en équilibre et de l'inversion du temps (t en $-t$) de l'équation de mouvement en mécanique classique (translation du temps), on obtient :

$$\langle \vec{V}(t') \cdot \vec{V}(t'') \rangle = \langle \vec{V}(t' - t'') \cdot \vec{V}(0) \rangle = \langle \vec{V}(t'' - t') \cdot \vec{V}(0) \rangle \quad (1.76)$$

En posant $\tau = t'' - t'$, et $ds = dt''$ on obtient:

$$\langle [\vec{r}(t) - \vec{r}(0)]^2 \rangle = \int_0^t dt' \int_{-t'}^{t-t'} d\tau \langle \vec{V}(t') \cdot \vec{V}(t' + \tau) \rangle \quad (1.77)$$

Par changement de l'ordre d'intégration, l'intégrale peut être écrite comme une somme de deux termes:

$$\int_0^t dt' \int_{-t'}^{t-t'} d\tau = \int_{-t}^0 d\tau \int_{\tau}^t dt' + \int_0^t d\tau \int_{\tau}^{t-\tau} dt' \quad (1.78)$$

Si nous faisons le changement de variable τ par $-\tau$, on obtient:

$$\int_0^t dt' \int_{-t'}^{t-t'} d\tau = \int_0^t d\tau \left(\int_{\tau}^t dt' + \int_0^{t-\tau} dt' \right) \quad (1.79)$$

les deux intégrales entre parenthèses qui sont les deux égales à $\int_{\tau}^t dt'$, donc:

$$\langle [\vec{r}(t) - \vec{r}(0)]^2 \rangle = 6Dt = 2t \int_0^t (1 - \frac{\tau}{t}) \langle \vec{V}(0) \vec{V}(\tau) \rangle d\tau \quad (1.80)$$

et finalement on trouve que

$$\begin{aligned} D &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{3} \int_0^t (1 - \frac{\tau}{t}) \langle \vec{V}(0) \vec{V}(\tau) \rangle d\tau \\ &= \frac{1}{3} \int_0^{\infty} \langle \vec{V}(0) \cdot \vec{V}(\tau) \rangle d\tau \end{aligned} \quad (1.81)$$

l'équation (1.81) est aussi écrite sous forme normalisée comme:

$$D(t) = \frac{\langle \vec{V}(0) \cdot \vec{V}(t) \rangle}{\langle \vec{V}(0) \cdot \vec{V}(0) \rangle} \quad (1.82)$$

Donc le coefficient de diffusion est donné comme une intégrale de la fonction de corrélation des vitesses de la façon suivante:

$$D = \frac{k_B T}{m} \int_0^{\infty} D(t) dt \quad (1.83)$$

Clairement le calcul de $D(t)$ n'est pas simple, mais il y a plusieurs calculs de la fonction d'autocorrélation qui sont faits (simulation numérique). Le calcul des autres coefficients de transport se fait d'une manière semblable. La formule (1.83) est la formule de Green-Kubo.

Pour le cas de la viscosité η , on peut écrire l'équation de Navier-Stokes locale comme [29]:

$$m\rho \frac{\partial u(r,t)}{\partial t} = -\nabla p(r,t) + \eta \nabla^2 u(r,t) + \left(\frac{1}{3}\eta + k\right) \nabla(\nabla u(r,t)) \quad (1.84)$$

Cette équation joue le même rôle que l'équation de diffusion de Fick (1.65) pour le calcul du coefficient de self - diffusion. Dans ce cas la vitesse locale est définie comme une fluctuation de la densité :

$$\vec{u}(r,t) = \sum_{i=1}^N \vec{u}_i(t) \delta[r - r_i(t)] \quad (1.85)$$

où u_i et r_i sont la vitesse et la position de la particule i . On associe à la vitesse la transformation de Fourier suivante:

$$J(\vec{k}, t) = \sum_{i=1}^N u_i(t) \exp[-i \vec{k} \cdot \vec{r}_i(t)] \quad (1.86)$$

Si nous injectons la transformation de Fourier de la vitesse et la pression dans l'équation (1.84), et séparons $\vec{J}(\vec{k}, t)$ en trois parties correspondantes aux directions, en choisissant la direction de k celle de z , cette équation devient:

$$m\rho \frac{\partial J_{||}(\vec{k}, t)}{\partial t} = -i \vec{k} \cdot p(\vec{k}, t) + \eta \nabla^2 u(r,t) - \left(\frac{1}{3}\eta + k\right) k^2 J_{||}(\vec{k}, t) \quad (1.87)$$

$$m\rho \frac{\partial J_{\perp\alpha}(\vec{k}, t)}{\partial t} = \eta \nabla^2 u(r,t), \quad \alpha = x, y \quad (1.88)$$

où:

$$J_{||}(\vec{k}, t) = \sum_{j=1}^N \dot{Z}_j(t) e^{-ikZ_j(t)} \quad (1.89)$$

$$J_{\perp\alpha}(\vec{k}, t) = \sum_{j=1}^N \dot{\alpha}_j(t) e^{-ik\alpha_j(t)} \quad \alpha = x, y \quad (1.90)$$

La solution de l'équation (1.88) est trouvée immédiatement comme:

$$J_{\perp\alpha}(\vec{k}, t) = J_{\perp\alpha}(\vec{k}, 0) \exp(-k^2 \eta t / m\rho) \quad (1.91)$$

Cette équation est semblable à (1.68), et on peut poser:

$$C_{\perp\alpha}(\vec{k}, t) = \frac{\langle J_{\perp\alpha}(\vec{k}, 0) J_{\perp\alpha}(\vec{k}, t) \rangle}{\langle J_{\perp\alpha}(\vec{k}, 0) J_{\perp\alpha}(\vec{k}, 0) \rangle} = \exp\left(\frac{-k^2 \eta t}{m\rho}\right) \quad (1.92)$$

où $C_{\perp x}(\vec{k}, t) = C_{\perp y}(\vec{k}, t)$. Par le même procédé de calcul que précédemment, on trouve:

$$\left(\frac{\partial^2 C_{\perp\alpha}(\vec{k}, t)}{\partial k^2} \right)_{k=0} = -\frac{2\eta t}{m\rho} \quad (1.93)$$

$$\left(\frac{\partial^2 C_{\perp\alpha}(\vec{k}, t)}{\partial k^2} \right)_{k=0} = -\frac{\beta m}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \dot{x}_i(t) \dot{x}_j(0) [z_i(t) - z_j(t)]^2 \right\rangle \quad (1.94)$$

et à partir des deux équations précédentes, on peut écrire:

$$\eta = \frac{\beta}{2Vt} \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N p_{xi}(t) p_{xj}(0) [z_i(t) - z_j(t)]^2 \right\rangle \quad (1.95)$$

où:

$$p_{xi}(t) z_i(t) - p_{xj}(0) z_j(0) = \int_0^t dt' \left[\frac{p_{xi}(t') p_{xj}(t')}{m} + z_j(t') F_{jx}(t') \right] \quad (1.96)$$

et où $F_{jx}(t)$ est la force intermoléculaire exercée sur une particule j (direction x). En effectuant la moyenne sur l'équation (1.96), et en calculant l'intégrale étendue à l'infini, on trouve:

$$\eta = \frac{\beta}{V} \int_0^{\infty} dt \langle J(0)J(t) \rangle \quad (1.97)$$

où:

$$J = \sum_{j=1}^N \left(\frac{p_{xi} p_{xj}}{m} + z_j F_{jx} \right) \quad (1.98)$$

on peut aussi par la même manière trouver la formule du coefficient $(\frac{4}{3}\eta + k)$.

Pour le coefficient de conductivité thermique, on va utiliser l'équation de la conduction de la chaleur locale de la façon suivante [29]:

$$\rho c_v \frac{\partial E(r, t)}{\partial t} = -\lambda \nabla^2 E(r, t) \quad (1.99)$$

où c_v est la chaleur représentée microscopiquement par:

$$E(r, t) = \sum_{j=1}^N E_j \delta(r - r_j) \quad (1.100)$$

et la transformé de $E(r, t)$ donne:

$$E(\vec{k}, t) = E(0, t) e^{-\lambda k^2 / \rho c_v} \quad (1.101)$$

de la même manière, on trouve que

$$\lambda = \frac{1}{V k_B T^2} \int_0^{\infty} \langle S_\lambda(t) S_\lambda(0) \rangle dt \quad (1.102)$$

où :

$$S_{\lambda}(t) = \frac{d}{dt} \sum_{j=1}^N r_j L_j \quad (1.103)$$

ces relations sont compliquées et ne peuvent être détaillées que dans le cas le plus simple où nous négligeons quelques facteurs comme les effets de la corrélation entre les différentes molécules (les effets des forces intermoléculaires); ces relations deviennent par ces diverses approximations sous la forme[29]:

$$D = \frac{1}{4\pi^{1/2}} \left(\frac{\beta}{m} \right)^{1/2} \frac{1}{\sigma^2 \rho} \quad (1.104)$$

$$\eta = \frac{1}{4\pi^{1/2}} \left(\frac{\beta}{m} \right)^{1/2} \quad (1.105)$$

$$\Lambda = \frac{5}{6} \left(\frac{\beta}{\pi m} \right)^{1/2} \frac{c_v}{N \sigma^2} \quad (1.106)$$

donc:

$$\eta = m \rho D \quad (1.107)$$

$$\Lambda = D \left(\frac{8 c_v}{3 N} \right) \rho \quad (1.108)$$

Ces expressions montrent la relation étroite qui existe entre les trois phénomènes de transports. Si l'on tient compte des effets des forces intermoléculaires, les valeurs mesurées de D , permettent d'obtenir les paramètres qui définissent le potentiel intermoléculaire, nous pouvons aussi calculer le libre parcours moyen et la section efficace et le rayon moléculaire.

Chapitre 2

Le modèle de calcul du coefficient de diffusion dans le cas d'un plasma à une composante

2.1 Introduction

Nous limitons notre étude dans ce chapitre au cas d'un milieu chargé formé d'une seule composante, qui est un système électriquement neutre formé de particules classiques chargées positivement d'une même espèce plongées dans un fond continue uniforme de charge opposée (le fond continue ne contribue pas à la dynamique) neutralisant [4] et qui est en équilibre thermodynamique. L'étude des coefficients de transport sont extensivement étudiés dans de nombreux travaux dans lesquels plusieurs méthodes ont été utilisées et sans les retenir citons la méthode de simulation [7] et la méthode de la réponse linéaire. Nous

utilisons ici dans cette thèse la technique ou le formalisme de l'opérateur de projection pour exprimer le coefficient de transport en fonction de l'opérateur de mémoire $\hat{K}$ associé à la fonction d'autocorrélation des vitesses. On utilise dans notre modèle le potentiel d'interaction effectif de Debye-Huckel [21]. Le comportement du plasma est ainsi caractérisé par le paramètre de couplage, la fréquence du milieu chargé qui est la fréquence plasma, et d'autres paramètres utiles que nous allons définir par la suite.

Aussi, pour calculer les facteurs de structures nécessaires à la formulation du coefficient de transport, nous avons eu recours à l'utilisation de l'équation cinétique dérivée de celle de Boltzmann. Cette procédure a été adoptée car la dérivation du coefficient de transport à partir de sa définition c'est à dire à partir de la fonction de corrélation des vitesses [4] conduit à une identité. Le traitement du système est fait dans le cadre de mécanique classique.

2.2 Paramètres utiles

Les paramètres caractéristiques, la longueur de Debye, la fréquence plasma, le rayon de la sphère ionique et le paramètre de couplage jouent un rôle important en physique des milieux chargés, ils peuvent être utilisés comme une unité d'échelle pour représenter toutes les grandeurs sans unité. Ils permettent aussi de donner un ordre de grandeurs sur le comportement du système physique. Ces paramètres sont énumérés comme suit.

2.2.1 Longueur d'écran de Debye

Une charge q_0 placée à l'origine des coordonnées produit, dans le vide, un champ électrique dérivant du potentiel électrique:

$$v(r) = q_0/r \quad (2.1)$$

Le champ créé par les charges spatiales situées autour de la charge central q_0 induit un champ qui va être ajouté au premier champ pour donner naissance à un nouveau champ dérivant d'un potentiel effectif $v(r)$ connu sous le potentiel de Debye-Huckel utilisé la première fois en 1923 en chimie analytique.

Ce potentiel effectif vérifie l'équation suivante [41]:

$$-\Delta v(\vec{r}) + (4\pi N_i e^2 / T) v(\vec{r}) = 4\pi q_0 \delta(\vec{r}) \quad (2.2)$$

et sa solution, avec la condition aux limites que $\varphi(\vec{r})$ s'annule à l'infini est de la forme:

$$v(\vec{r}) = (q_0/r) \exp(-r/\lambda_D) \quad (2.3)$$

où

$$\lambda_D^{-2} = K_D^2 = (4\pi n z^2 \beta e^2) \quad (2.4)$$

On appelle λ_D "longueur de Debye" [2].

Le sens physique de l'équation (2.3) est clair: pour des distances plus petites devant la longueur de Debye, le potentiel effectif est équivalent au potentiel de coulomb, mais pour

des distances plus grandes le champ du potentiel décroît exponentiellement et présente une courte portée. La longueur de Debye donne donc une idée sur la portée des champs et des forces entre les particules.

Pour un plasma constitué par plusieurs types d'ions, on a [16].

$$\lambda_D^{-2} = \overline{K}_D^2 = \left(\sum_i 4\pi n_i z_i^2 \beta e^2 \right) \quad (2.5)$$

où la somme porte sur les différentes espèces de particules.

2.2.2 Fréquence plasma

Quant les ions subissent un petit déplacement (devant la longueur de Debye), relativement aux ions voisins, ils sont repoussés par la force de Coulomb. Ceci provoque donc un mouvement d'oscillation. La fréquence associée à ce mouvement collectif est connue sous le nom de la fréquence plasma du système. Elle est donc liée au comportement collectif du plasma, et a été interprétée par Tonks et Langmuir en 1929.

La fréquence plasma est définie par [41]:

$$\omega_p = (4\pi n (Ze)^2 / m)^{1/2} \quad (2.6)$$

et pour un plasma à multicomposantes comme:

$$\omega_p = \left(\sum_i 4\pi n_i (Z_i e)^2 / m_i \right)^{1/2} \quad (2.7)$$

avec:

$Z_i e$ = charge de l'ion de type i

n_i = densité ionique et m_i = la masse de l'ion de type i .

Lorsque le milieu est à deux types d'ions, attribuons respectivement aux espèces d'ions les charges et les masses q_1, q_2 et m_1, m_2 . L'inverse de la fréquence plasma qui est l'unité de temps caractéristique est dans ce cas défini par [8]:

$$\omega_p^{-1} = (\omega_{p1}^2 + \omega_{p2}^2)^{-1/2} \quad (2.8)$$

2.2.3 Rayon de la sphère ionique

Pour un plasma à une seule composante avec une densité ionique n , le rayon de la sphère ionique a est défini par:

$$\frac{4}{3}\pi a^3 n = 1 \quad (2.9)$$

Le rayon de la sphère donne une idée sur la distance moyenne entre les ions. Si on a un mélange d'ions, a est défini par la même forme d'équation précédente, mais dans ce cas la densité n est la somme des densités partielles pour chaque type d'ions.

2.2.4 Paramètre de couplage

Le paramètre de couplage est défini par:

$$\Gamma = \frac{\text{énergie potentielle moyenne}}{\text{énergie cinétique moyenne}} \quad (2.10)$$

Il mesure le rapport de l'énergie potentielle moyenne à l'énergie cinétique moyenne.

Suivant ce paramètre on peut distinguer deux types de plasmas:

Si $\Gamma \geq 1$: le plasma est fortement couplé.

Si $\Gamma \ll 1$: le plasma est faiblement couplé.

Pour le cas d'un plasma à une espèce, le paramètre de couplage est donné par la forme suivante:

$$\Gamma = \frac{\beta(Ze)^2}{a} \quad (2.11)$$

$\beta = \frac{1}{k_B T}$, où k_B est la constante de Boltzmann.

Mais pour un plasma à deux espèces d'ions, on prend la charge moyenne des ions.

$$Z^* = \frac{n_1 Z_1 + n_2 Z_2}{n} \quad (2.12)$$

2.3 Le modèle de calcul du coefficient de transport

On travaille sur le modèle où la dynamique du milieu chargé est exprimée par la fonction de mémoire $M(t)$, qui est approximée par une relation exponentielle relaxante [10]. On considère un ion impureté de masse m_0 et de charge q_0 placé dans un plasma à une composante en équilibre thermodynamique (2.1), à la position $r(0)$. On s'intéresse à la composante ionique, dont les composantes qui sont les ions, interagissent selon la loi de Coulomb avec un potentiel écranté (potentiel de Debye-Huckel). De plus dans ce travail on considère que l'impureté est un ion du même type que les autres particules (ions) du système.

Donc la fonction de corrélation de la vitesse, est [4].

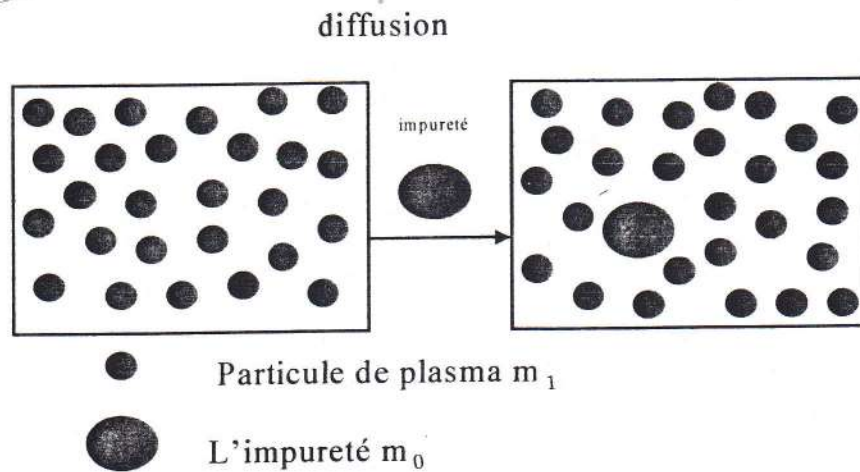


Figure 2.1: Diffusion d'une particule impureté dans un plasma à une composante.

$$D(t) = \frac{\langle \vec{V}_0(t) \cdot \vec{V}_0 \rangle}{\langle V_0^2 \rangle} \quad (2.13)$$

où $\vec{V}_0$ la vitesse de l'ion impureté.

D est le coefficient de self diffusion donné par la relation de Green- Kubo:

$$\beta m_0 D = \int_0^\infty dt D(t) \quad (2.14)$$

Le potentiel coulombien écranté crée par la particule de charge $Z_j e$ à une distance r est:

$$v(r) = \left(\frac{Z_j e}{r} \right) \exp(-K_D r) \quad (2.15)$$

où $\lambda_D = K_D^{-1}$ est la longueur de Debye (2.4). L'énergie d'interaction entre les particules (les ions) i et j distantes de $|\vec{r}| = |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \equiv r$ est:

$$v_{ij} = \frac{Z_i Z_j e^2}{r} \exp(-K_D r) \quad (2.16)$$

2.3.1 Formulation du coefficient self-diffusion dans un plasma

Le coefficient self-diffusion est donné par un terme de la fonction de corrélation (1.81). Mais dans notre thèse, le calcul est déterminé par une méthode différente de celle-ci. Dans cette partie nous allons montrer comment on peut introduire une formule donnant D à partir de la technique de l'opérateur de projection.

D'après [10] nous avons:

$$\beta m_0 D = \int_0^\infty D(t) dt = \int_0^\infty \frac{\langle \vec{V}_0(t) \cdot \vec{V}_0(0) \rangle}{\langle \vec{V}_0(0) \cdot \vec{V}_0(0) \rangle} dt = \frac{\beta m_0}{3} \int_0^\infty \langle \vec{V}_0(t) \cdot \vec{V}_0(0) \rangle dt \quad (2.17)$$

où $\vec{V}_0$ est la vitesse à l'instant $t = 0$ de la particule test et $\langle \dots \rangle$ désigne la moyenne statistique telle que $\rho_{eq} = f^N(\vec{r}^N, \vec{p}^N)$:

$$D = \frac{1}{3} \int_0^\infty dt \int d\vec{r}_0 \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \int d\vec{V}_0 \int d\vec{V}_1 \dots d\vec{V}_N (\vec{V}_0(t) \cdot \vec{V}_0(0)) \rho_{eq} \quad (2.18)$$

ou bien après avoir posé :

$$G(t) = \int d\vec{r}_0 \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \int d\vec{V}_0 \int d\vec{V}_1 \dots d\vec{V}_N (\vec{V}_0(t) \cdot \vec{V}_0(0)) \rho_{eq} \quad (2.19)$$

La formule (2.18) devient :

$$D = \frac{1}{3} \int_0^\infty dt G(t) \quad (2.20)$$

Cette façon nous permet de calculer D en utilisant la transformé de Laplace de la fonction G(t) c'est à dire :

$$g(Z) = \int_0^{\infty} e^{-Zt} G(t) dt \quad (2.21)$$

Donc le coefficient D sera tout simplement égal à:

$$D = \frac{g(0)}{3} \quad (2.22)$$

Pour le faire, nous réécrivons G(t) sous cette forme :

$$\begin{aligned} G(t) &= \int (d\vec{V}_0) \vec{V}_0 \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \int d\vec{V}_1 \dots d\vec{V}_N \vec{V}_0(t) \rho_{eq} \\ &= \int (d\vec{V}_0) \varphi(\vec{V}_0) \cdot \vec{V}_0 \vec{\phi}(t) \end{aligned} \quad (2.23)$$

où

$$\vec{\phi}(\vec{V}_0, t) = \varphi(\vec{V}_0)^{-1} \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \int d\vec{V}_1 \dots d\vec{V}_N \vec{V}_0(t) \rho_{eq} \quad (2.24)$$

En utilisant l'opérateur de Liouville L, l'évolution de la vitesse s'écrit comme [16]:

$$\vec{V}_0(t) = e^{Lt} \vec{V}_0 \quad (2.25)$$

où l'action du Liouvillien sur toute observable x s'écrit comme:

$$Lx = \{x, H\} \quad (2.26)$$

Ceci nous conduit à réécrire $\vec{\phi}(\vec{V}_0, t)$ comme:

$$\begin{aligned}\vec{\phi}(\vec{V}_0, t) &= \int \varphi(\vec{V}_0)^{-1} \vec{V}_0 d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \int d\vec{V}_1 \dots d\vec{V}_N (e^{-Lt} \rho_{eq}) \\ &= \varphi(\vec{V}_0)^{-1} \vec{V}_0 \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \int d\vec{V}_1 \dots d\vec{V}_N \rho(t)\end{aligned}\quad (2.27)$$

Introduisons l'opérateur de projection de la manière suivante:

$$\vec{\phi}(\vec{V}_0, t) = \varphi(\vec{V}_0)^{-1} \vec{V}_0 P \rho(t) \quad (2.28)$$

l'opérateur P est défini par

$$P\rho = \frac{1}{V^{N+1}\Omega^N} \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \int d\vec{V}_1 \dots d\vec{V}_N \rho(t) \quad (2.29)$$

et Ω est le volume dans l'espace des vitesses.

On peut vérifier d'après la définition (2.29) qu'on a: $(P^2 = P)$. Pour calculer $\vec{\phi}(\vec{V}_0, t)$ on passe par l'équation de Liouville qui gouverne l'évolution de la matrice densité $\rho(\vec{r}_0 \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N \vec{V}_1 \dots \vec{V}_N, t)$.

L'équation de Liouville pour l'opérateur densité est:

$$i \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = L \rho(t) \quad (2.30)$$

Appliquons l'opérateur de projection (2.29) à l'équation (2.30):

$$\begin{aligned}i \frac{\partial P\rho(t)}{\partial t} &= PL\rho(t) = PL(P + Q)\rho(t) \\ &= PLP\rho(t) + PLQ\rho(t)\end{aligned}\quad (2.31)$$

En appliquant l'opérateur de projection $Q(Q = 1 - P)$ à l'équation (2.30):

$$\begin{aligned} i \frac{\partial Q\rho(t)}{\partial t} &= QL\rho(t) = QL(P + Q)\rho(t) \\ &= QLPQ\rho(t) + QLQ\rho(t) \end{aligned} \quad (2.32)$$

Cette dernière équation formelle est du premier ordre dont l'inconnu est $Q\rho(t)$ et qui est une équation non homogène. Trouvons d'abord la solution de l'équation homogène c'est à dire de:

$$\frac{\partial Q\rho(t)}{\partial t} = -iQL(Q\rho(t)) \quad (2.33)$$

La solution formelle de (2.33) est visiblement de la forme:

$$Q\rho(t) = e^{-iQLt} A \quad (2.34)$$

Pour trouver la solution de (2.32), c'est à dire de l'équation entière (avec second membre) on utilise la méthode formelle de la variation de constante A :

$$\frac{\partial Q\rho(t)}{\partial t} = -iQL(Q\rho(t)) + e^{-iQLt} \frac{\partial A}{\partial t} \quad (2.35)$$

qu'on réinjecte dans (2.32). Ceci donne une équation en $A(t)$:

$$-iQL(Q\rho(t)) + e^{-iQLt} \frac{\partial A}{\partial t} = -iQL(Q\rho(t)) - iQLP\rho(t) \quad (2.36)$$

soit encore:

$$e^{-iQLt} \frac{\partial A}{\partial t} = -iQLP\rho(t)$$

Cette dernière équation permet de calculer $A(t)$ à une constante près:

$$A(t) = A_0 - i \int_0^t d\tau e^{iQL\tau} QLP\rho(\tau) \quad (2.37)$$

Remettons cette forme de $A(t)$ dans (2.34), nous obtenons:

$$Q\rho(t) = e^{-iQLt} \left\{ A_0 - i \int_0^t d\tau e^{iQL\tau} QLP\rho(\tau) \right\} \quad (2.38)$$

Nous pouvons tout de suite affirmer que $A(0)$ n'est autre que $Q\rho(0)$ ($\rho_{eq} = \rho(0)$), donc la solution de l'équation (2.32) est:

$$Q\rho(t) = e^{-iQLt} \left\{ Q\rho_{eq} - i \int_0^t d\tau e^{iQL\tau} QLP\rho(\tau) \right\} \quad (2.39)$$

On injecte (2.39) dans (2.31) et on trouve:

$$i \frac{\partial P\rho(t)}{\partial t} = PLP\rho(t) + PL e^{-iQLt} Q\rho_{eq} \quad (2.40)$$

$$- iPL \int_0^t d\tau e^{iQL(\tau-t)} QLP\rho(\tau) \quad (2.41)$$

Si nous multiplions l'équation (2.40) par $\varphi^{-1}(\vec{V}_0) \vec{V}_0$ et nous utilisons la relation de l'opérateur de projection $PLP = 0$, on trouve que:

$$i \frac{\partial \vec{\phi}(\vec{V}_0, t)}{\partial t} = \varphi^{-1}(\vec{V}_0) \vec{V}_0 PL e^{-iQLt} Q\rho_{eq} - iPL \int_0^t d\tau e^{iQL(\tau-t)} QLP \vec{\phi}(\vec{V}_0, \tau) \quad (2.42)$$

En notant par:

$$K(x) = PL e^{iQLx} QL \quad (2.43)$$

(2.42) se réarrange comme:

$$i \frac{\partial \vec{\phi}(\vec{V}_0, t)}{\partial t} = \varphi^{-1}(\vec{V}_0) \vec{V}_0 P L e^{-iQLt} Q \rho_{eq} - i \int_0^t d\tau K(\tau - t) \vec{\phi}(\vec{V}_0, \tau) \quad (2.44)$$

Le premier terme du second membre de (2.44) est nul, car ρ_{eq} est diagonal, et celle ci prend la forme:

$$\frac{\partial \vec{\phi}(\vec{V}_0, t)}{\partial t} = - \int_0^t d\tau K(\tau - t) \vec{\phi}(\vec{V}_0, \tau) \quad (2.45)$$

comme $D = (g(0)/3)$ donc:

$$\begin{aligned} D &= \frac{1}{3} \int_0^\infty dt \int (d\vec{V}_0) \vec{V}_0 \varphi(\vec{V}_0) \phi(\vec{V}_0, t) \\ &= \frac{1}{3} \int (d\vec{V}_0) \vec{V}_0 \varphi(\vec{V}_0) \left[\int_0^\infty dt e^{-Zt} \vec{\phi}(\vec{V}_0, t) \right]_{Z=0} \end{aligned} \quad (2.46)$$

la transformé de laplace de $\vec{\phi}(\vec{V}_0, t)$ se calcule à partir de (2.45):

$$\int_0^\infty dt e^{-Zt} \frac{\partial \vec{\phi}(\vec{V}_0, t)}{\partial t} = - \int_0^\infty dt e^{-Zt} \int_0^t d\tau K(\tau - t) \vec{\phi}(\vec{V}_0, \tau) \quad (2.47)$$

soit :

$$\begin{aligned} \left[e^{-Zt} \frac{\partial \vec{\phi}(\vec{V}_0, t)}{\partial t} \right]_0^\infty + Z \int_0^\infty dt e^{-Zt} \widehat{\vec{\phi}}(\vec{V}_0, t) &= -\widehat{K}(Z) \widehat{\vec{\phi}}(\vec{V}_0, Z) \\ -\vec{\phi}(\vec{V}_0, 0) + Z \widehat{\vec{\phi}}(\vec{V}_0, Z) &= -\widehat{K}(Z) \widehat{\vec{\phi}}(\vec{V}_0, Z) \\ \widehat{\vec{\phi}}(\vec{V}_0, Z) &= \frac{\vec{\phi}(\vec{V}_0, 0)}{[Z + \widehat{K}(Z)]} \end{aligned} \quad (2.48)$$

avec $\vec{\phi}(\vec{V}_0, 0) = \vec{V}_0$. Donc on déduit (pour $z=0$) [10]:

ou encore en inversant:

$$\hat{K}^{-1}(0) \vec{\phi}(\vec{V}_0, 0) = \widehat{\vec{\phi}}(\vec{V}_0, 0) \quad (2.49)$$

En insérant (2.49) dans (2.46), on trouve l'expression du coefficient de transport:

$$D = \frac{1}{3} \int (d\vec{V}_0) \varphi(\vec{V}_0) \left[\vec{V}_0 \hat{K}^{-1}(0) \vec{V}_0 \right] \quad (2.50)$$

qui est très importante dans le développement de notre calcul moyennant d'autres simples approximations.

2.3.2 Les approximations utilisées dans le modèle de calcul

Les formules précédentes étant toujours exactes, introduisons maintenant deux types d'approximations importantes dans le calcul du coefficient self diffusion à partir d'une formule indépendante de la fonction de corrélation de la vitesse.

La première: est l'approximation d'évaluation du coefficient de transport D en terme des éléments de la matrice $\hat{K}(0)$ ($[10]$) (l'approximation sonine-polynomial), qui doit être plus explicitée en considérant le développement de la vitesse en termes de l'ensemble des fonctions $\{\Psi_i(\vec{V}_0)\}$. Cet ensemble de fonctions forment une base orthonormée, et nous pouvons donc développer $\vec{V}_0$ sur cette base :

$$\vec{V}_0 = \sum_i^{\infty} \Psi_i(\vec{V}_0) (\Psi_i, \vec{V}_0) \quad (2.51)$$

où $(\Psi_i, \vec{V}_0)$ est le produit scalaire:

$$(a, b) = \int d\vec{V}_0 \varphi(\vec{V}_0) a^*(\vec{V}_0) \cdot b(\vec{V}_0)$$

où $(\Psi_i, \vec{V}_0)$ est le produit scalaire:

$$(a, b) = \int d\vec{V}_0 \varphi(\vec{V}_0) a^*(\vec{V}_0) b(\vec{V}_0)$$

On peut utiliser dans l'ensemble de Gramm-Schmidt que les premiers termes qui sont donnés par:

$$\Psi_1(\vec{V}_0) = 1, \quad \Psi_2(\vec{V}_0) = 6^{1/2} [\beta m_0 V_0^2 - 3]$$

$$\Psi_i(\vec{V}_0) = [\beta m_0]^{1/2} V_{0i} \quad i = 3, 4, 5$$

$$\Psi_{i+1}(\vec{V}_0) = [\beta m_0]^{1/2} V_{0i} \quad i = 3, 4, 5$$

Si nous utilisons seulement les cinq premiers termes de cet ensemble, la formule (2.50), qui donne le coefficient de transport D s'écrit alors sous la forme :

$$\begin{aligned} D &= \frac{1}{3} \int (d\vec{V}_0) \varphi(\vec{V}_0) \vec{V}_0 \hat{K}^{-1}(0) \vec{V}_0 \\ &= \frac{1}{3} \int (d\vec{V}_0) \varphi(\vec{V}_0) \sum_i \sum_j \vec{a}_i \vec{a}_j \Psi_i \hat{K}^{-1}(0) \Psi_j \end{aligned} \quad (2.52)$$

Nous pouvons montrer que

$$\vec{a}_1 = (\Psi_1, \vec{V}_0) = \vec{0}, \quad \vec{a}_2 = (\Psi_2, \vec{V}_0) = \vec{0}$$

$$\vec{a}_3 = (\Psi_3, \vec{V}_0) = \frac{1}{\sqrt{\beta m_0}} (1, 0, 0)$$

$$\vec{a}_4 = (\Psi_4, \vec{V}_0) = \frac{1}{\sqrt{\beta m_0}} (0, 1, 0)$$

$$\vec{a}_5 = (\Psi_5, \vec{V}_0) = \frac{1}{\sqrt{\beta m_0}} (0, 0, 1)$$

$$\frac{1}{\beta m_0} (\Psi_3 \widehat{K}^{-1}(0) \Psi_3) = \frac{1}{\beta m_0} [\widehat{K}^{-1}(0)]_{33}$$

ou bien

$$D^{-1} \simeq \beta m_0 K_{33} \quad \text{où} \quad K_{33}^{-1} = (\Psi_3 \widehat{K}^{-1}(0) \Psi_3) \quad (2.54)$$

l'opérateur $\widehat{K}$ est l'opérateur de collision ou bien la fonction de mémoire. Dans d'autres utilisations nous avons besoin des approximations d'ordre deux et trois, comme dans le cas du coefficient de conductivité électrique, où nous utilisons les autres termes comme K_{36} , K_{63} et le coefficient de transport est

$$D^{-1} = \beta m_0 (K_{33} - K_{36} K_{63} / K_{66}) \quad (2.55)$$

Mais dans notre calcul le premier terme est suffisant pour donner un résultat acceptable.

La deuxième: est l'approximation se rapportant à l'opérateur de collision qui est appelée l'approximation disconnected.

2.3.3 Le coefficient de diffusion dans l'approximation disconnected

Il a été mentionné plus haut que le coefficient de self diffusion est donné par l'approximation *sonine-polynomial* par la relation:

$$D^{-1} = \beta m_0 \int K_{33}(t) dt \quad (2.56)$$

$$D^{-1} = \beta m_0 \int K_{33}(t) dt \quad (2.56)$$

comme on peut aussi écrire la fonction de corrélation de vitesse de cette façon[4]:

$$\frac{dD(t)}{dt} = - \int_0^t K_{33}(t') D(t-t') dt' \quad (2.57)$$

la fonction de corrélation de la fluctuation de la densité de l'espace des phases est:

$$C(\vec{r} - \vec{r}', t - t', \vec{p} \vec{p}') = \langle \delta n(\vec{r}, \vec{p}, t) \delta n(\vec{r}', \vec{p}', t') \rangle \quad (2.58)$$

où $\delta n = n - \langle n \rangle$, et

$$n(\vec{r}, \vec{p}, t) = \sum_{j=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_j(t)) \delta(\vec{p} - \vec{p}_j(t)) \quad (2.59)$$

Pour une seule particule (impureté), on peut écrire la self-fluctuation par:

$$n_S(\vec{r}, \vec{p}, t) = N^{1/2} \delta(\vec{r} - \vec{r}_j(t)) \delta(\vec{p} - \vec{p}_j(t)) \quad (2.60)$$

et la fonction de self corrélation comme:

$$C_S(\vec{r} - \vec{r}', t - t', \vec{p} \vec{p}') = \langle \delta n_S(\vec{r}, \vec{p}, t) \delta n_S(\vec{r}', \vec{p}', t') \rangle \quad (2.61)$$

qui est associée à l'équation cinétique suivante:

$$\begin{aligned} \left(Z + i \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}}{m} \right) C_S(\vec{k}, Z, pp') + i \int dp'' \varphi_S(\vec{k}, Z, pp'') C_S(\vec{k}, Z, p'p'') \\ = n \varphi(p) \delta(p - p') \end{aligned} \quad (2.62)$$

mouvement d'une particule libre (impureté). On peut dire aussi que φ_S est la fonction de mémoire associée à la fonction de corrélation du self-diffusion [4]. On définit le facteur de structure dynamique $S(\vec{k}, \omega)$ comme étant la transformation de Fourier spatio-temporelle de la corrélation de la densité locale (2.59), relié à $C(\vec{k}, \omega, pp')$ comme:

$$nS(\vec{k}, \omega) = \int d\vec{p}' d\vec{p} C(\vec{k}, \omega, pp') \quad (2.63)$$

et $S_s(\vec{k}, \omega)$ la fonction de structure de self diffusion de la même façon:

$$nS_s(\vec{k}, \omega) = \int d\vec{p}' d\vec{p} C_s(\vec{k}, \omega, pp') \quad (2.64)$$

la fonction d'autocorrélation de la vitesse, qui est définie par l'équation (2.17), est donnée aussi par une relation semblable à (2.64):

$$D(t) = \frac{1}{nm^2V_0^2} \int d\vec{p}' d\vec{p} \vec{p}' \cdot \vec{p} C_s(k=0, pp', t) \quad (2.65)$$

Il y'a d'autres fonctions de corrélation intéressantes comme la fonction de corrélation de self diffusion à quatre et trois points:

$$C_S(1, 23) = \langle \delta n_S(1, t) \delta (n_S(2, 0) n(3, 0)) \rangle \quad (2.66)$$

$$C_S(12, 34) = \langle \delta (n_S(1, t) n(2, t)) \delta (n_S(3, 0) n(4, 0)) \rangle \quad (2.67)$$

L'évaluation de la fonction mémoire φ_S est le problème principal pour développer une théorie microscopique, car φ_S représente les effets collectifs dus à l'interaction du milieu avec la particule impureté. Il est donc clair que l'obtention de φ_S de façon exacte est une

tâche hardue. Nous pouvons seulement faire du progrès dans l'évaluation de φ_S en faisant appel à la théorie à deux corps [2]:

$$\varphi_S(12, t) n \varphi(p_2) = - \int d\bar{1} d\bar{2} L_I(1, \bar{1}) L_I(2, \bar{2}) C_s(1\bar{1}, 2\bar{2}, t) \quad (2.68)$$

où $L_I(12) = -\nabla_1 v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \cdot (\partial_1 - \partial_2)$, $\nabla_1 = \partial/\partial r_1$, $\partial_1 = \partial/\partial p_1$ est l'opérateur d'interaction de deux particules et $C_s(12, 34, t)$ représente la fonction de corrélation de quatre-points. Nous pouvons séparer la fonction de corrélation $C(12, 34, t)$ en deux parties [4], une disconnected C_d et l'autre connected C_c comme:

$$\begin{aligned} C(12, 34, t) &= C(13, t)C(24, t) + C(14, t)C(23, t) + C_c(12, 34, t) \\ C_d(12, 34, t) &= C(13, t)C(24, t) + C(14, t)C(23, t) \end{aligned} \quad (2.69)$$

pour le mouvement collectif, et comme:

$$\begin{aligned} C_s(12, 34, t) &= C_s(13, t)C(24, t) + C_{sc}(12, 34, t) \\ C_{sd}(12, 34, t) &= C_s(13, t)C(24, t) \end{aligned} \quad (2.70)$$

pour le self-mouvement (le mouvement de la particule test).

Nous allons maintenant discuter une approximation simple pour $C_s(12, t)$ qui est utile pour nos développements théoriques ultérieurs. Cette approximation concerne les propriétés collectives caractéristiques du plasma et conduit en premier lieu à ne tenir compte que du premier terme de l'expression (2.70) c'est à dire:

$$C_s(12, 34, t) \simeq C_{sd}(12, 34, t) = C_s(13, t)C(24, t) \quad (2.71)$$

Cette équation est à la base de l'approximation disconnected. Nous rappelons que $C_s(12, 34, t)$ représente la corrélation dynamique de deux particules dont une est l'impureté (test), et on considère le processus dans lequel deux particules initialement interagissantes bien séparées en espace, se propagent indépendamment l'une de l'autre, et enfin interagissent de nouveau. C'est à dire que durant l'état intermédiaire nous ignorons l'interaction mutuelle entre ces deux particules et on tient compte que de leur interaction avec les $(N-2)$ particules restantes du système. Ces considérations conduisent à approcher $C_s(12, 34, t)$ par sa partie disconnected [4].

On peut aussi multiplier la partie disconnected (2.71) par des parties statiques pour séparer les opérateurs, ou on peut écrire (2.71) comme:

$$\begin{aligned} C_s(12, 34, t) &\simeq C_{sd}(12, 34, t) \\ &= C_s^{-1}(1\bar{1})C_s^{-1}(3\bar{2})C^{-1}(2\bar{4})C^{-1}(2\bar{3})C_s(\bar{1}\bar{3}, t)C(\bar{2}\bar{4}, t) \end{aligned} \quad (2.72)$$

Donc si nous substituons l'équation (2.72) dans l'équation (2.68), on trouve l'expression suivante:

$$\varphi_S(12, t)n\varphi(p_2) = -\bar{V}_s(1, \bar{1}\bar{2})C_s(\bar{1}, \bar{3}, t)C(\bar{2}, \bar{4}, t)\bar{V}_s(2, \bar{3}\bar{4}) \quad (2.73)$$

tel que:

$$\bar{V}_s(1, 1'2')n\varphi(p_{1'}) = V_s(1, 1'\bar{2})C^{-1}(\bar{2}, 2')$$

où les vertex 'end-point' sont

$$\begin{aligned} V_s(1, 23) &= \int d\bar{2} L_I(\bar{1}\bar{2}) C(\bar{1}\bar{2}, 23) \\ &= -n^2 \varphi(p_2) \varphi(p_3) g(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \bar{L}_I(23) \delta(12) \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned} \bar{L}_I(23) &= i\beta^{-1} [\nabla_{r_2} \log(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)] \cdot \nabla_{p_2} - \nabla_{p_3} \\ C_s(12) &= \delta(1-2) [n\varphi(p_1)]^{-1} \\ C_s^{-1}(1\bar{1}) &= \delta(12) C_s^{-1}(\bar{1}2) \end{aligned}$$

si on prend la transformé de Fourier spatiale de l'équation (2.73), on trouve cette relation :

$$\begin{aligned} \varphi_S(k, p_1 p_2, t) n \varphi(p_2) &= -n^2 \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} [\beta^{-1} c(q)]^2 \vec{q} \cdot \vec{\nabla}_{p_1} \vec{q} \cdot \vec{\nabla}_{p_1} \\ &\quad C_s(\vec{k} - \vec{q}, \vec{p}_1 \vec{p}_2) S(\vec{q}, t) \end{aligned} \quad (2.74)$$

la forme (2.74) pour φ_S est une conséquence directe de (2.72).

La quantité principale qui nous intéresse n'est pas la fonction de mémoire φ_s mais la fonction $K_{33}(t)$ associée à la fonction d'autocorrélation de la vitesse, qui est reliée à φ_s par la relation suivante (appendice H):

$$K_{33}(t) = \frac{1}{n(mV_0)^2} \int d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 \vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2 \varphi_s(k=0, \vec{p}_1 \vec{p}_2, t) \varphi(\vec{p}_2) \quad (2.75)$$

avec $m\vec{V}_0^2 = 3K_B T$. Si nous injectons (2.74) pour φ_s dans l'équation (2.75) nous obtenons $K_{33}(t)$ en terme des facteurs de structure $S(k, \omega)$ et $S_s(k, \omega)$ [16]:

$$K_{33}(t) = \left(\frac{1}{6\pi^2 m_0} \right) \int dk k^4 \left[\frac{\widehat{c}(k)}{\beta} \right]^2 S(k, t) S_S(k, t) \quad (2.76)$$

et si nous faisons la transformé de Fourier de $S(k, t)$ et on remplace la forme de $K_{33}(t)$ (2.76) dans l'équation (2.56) on trouve:

$$D^{-1} = \left(\frac{\beta}{12\pi^3} \right) \int_0^\infty dk k^4 \widehat{v}(k) \widehat{c}(k) \int_0^\infty d\omega S(k, \omega) S_s(k, \omega) \quad (2.77)$$

2.3.4 Le calcul du facteur de structure

Pour déterminer le coefficient de diffusion, dans l'approximation disconnected par la formule (2.77), nous avons besoin de connaître les facteurs dynamiques et aussi statiques. Dans notre modèle ces facteurs sont déterminés par l'approximation de champ moyen qui consiste à considérer que la particule test est dans un champ moyen dû aux autres particules du milieu:

$$S(\vec{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} C(\vec{k}, t) = \left[2 \operatorname{Re} \int_0^{+\infty} dt e^{-Zt} C(\vec{k}, t) \right]_{Z=-i\omega} \quad (2.78)$$

où

$$n(\vec{k}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\alpha=1}^N e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_\alpha} \quad (2.79)$$

c'est à dire:

$$C(\vec{k}, t) = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{V}_1 d\vec{V}_2 \dots d\vec{V}_N \rho_{eq} n(\vec{k}, t) \left[n(-\vec{k}, 0) - \langle n(-\vec{k}, 0) \rangle \right] \quad (2.80)$$

L'invariance par translation du temps permet de réécrire cette définition comme:

$$C(\vec{k}, t) = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{V}_1 d\vec{V}_2 \dots d\vec{V}_N \rho_{eq} n(\vec{k}, 0) \left[n(-\vec{k}, -t) - \langle n(-\vec{k}, -t) \rangle \right] \quad (2.81)$$

et par le biais de (2.79) celle ci (2.81) devient comme:

$$C(\vec{k}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\alpha=1}^1 \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{V}_1 d\vec{V}_2 \dots d\vec{V}_N e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \rho_{eq} * \left[n(-\vec{k}, -t) - \langle n(-\vec{k}, -t) \rangle \right] \quad (2.82)$$

Nous avons ici une somme de N intégrales qui sont toutes égales, donc:

$$C(\vec{k}, t) = \frac{N}{\sqrt{V}} \int d\vec{r}_1 d\vec{V}_1 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \int d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{V}_2 \dots d\vec{V}_N \rho_{eq} \left[n(-\vec{k}, -t) - \langle n(-\vec{k}, -t) \rangle \right] \quad (2.83)$$

ou bien en utilisant de nouveau (2.79);

$$C(\vec{k}, t) = n \int d\vec{r}_1 d\vec{V}_1 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \int d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{V}_2 \dots d\vec{V}_N \rho_{eq} * \sum_{\alpha=1}^N \left[e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_\alpha(-t)} - \langle e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_\alpha(-t)} \rangle \right] \quad (2.84)$$

soit sous une écriture abrégée:

$$C(\vec{k}, t) = n \int d\vec{r}_1 d\vec{V}_1 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \Psi(\vec{r}_1, \vec{V}_1, t) \quad (2.85)$$

où:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{V}_1, t) = \int d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{V}_2 \dots d\vec{V}_N \rho_{eq} \sum_{\alpha=1}^N \left[e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_\alpha(-t)} - \langle e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_\alpha(-t)} \rangle \right] \quad (2.86)$$

et par invariance de translation de temps:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{V}_1, t) = \int d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{V}_2 \dots d\vec{V}_N \rho(t) \sum_{\alpha=1}^N \left[e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_\alpha} - \langle e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_\alpha} \rangle \right] \quad (2.87)$$

$\rho(t)$ est la matrice densité qui obéit à l'équation de Liouville:

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} + \{\rho(t), H\} = 0 \quad (2.88)$$

$\{., H\}$ ici les crochets sont ceux de Poisson. On peut montrer que $\Psi(r, v, t)$ obéit à la première équation de la hiérarchie B.B.G.K.Y:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \Psi(\vec{r}_1, \vec{V}_1, t)}{\partial t} + \vec{V}_1 \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_1} \Psi(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) \\ &= -\frac{1}{m} \vec{\nabla}_{\vec{V}_1} \int d\vec{r}_2 d\vec{v}_2 \vec{F}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \Psi^2(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, t) \end{aligned} \quad (2.89)$$

où :

$$\Psi^2(\vec{r}_1, \vec{V}_1, \vec{r}_2, \vec{V}_2, t) = \int d\vec{r}_3 d\vec{V}_3 \dots d\vec{r}_N d\vec{V}_N \rho_{eq} \left[n(-\vec{k}, -t) - \langle n(-\vec{k}, -t) \rangle \right] \quad (2.90)$$

Supposons que dans l'équation (2.89) on remplace la fonction de distribution par l'expression approchée:

$$\Psi^2(\vec{r}_1, \vec{V}_1, \vec{r}_2, \vec{V}_2, t) = \Psi^2(\vec{r}_1, \vec{V}_1, t) \varphi(\vec{V}_2) + \Psi(\vec{r}_2, \vec{V}_2, t) \varphi(\vec{V}_1) \quad (2.91)$$

L'approximation faite en négligeant les corrélations dans l'espace des phases est une approximation de champ moyen: le champ moyen dépend cependant lui-même de la fonction de distribution à une particule et l'approximation consiste à remplacer la fonction de distribution à deux particules par le produit de deux fonctions de distribution à une particule, ce qui va simplifier la tâche du calcul avec l'utilisation de l'approximation de la fonction de corrélation directe $\hat{c}(k) = -\beta\hat{v}(k)$.

Le premier terme de (2.91) ne contribue pas dans (2.89), seul le second en contribue:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \Psi(\vec{r}_1, \vec{V}_1, t)}{\partial t} + \vec{V}_1 \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_1} \Psi(\vec{r}_1, \vec{V}_1, t) \\ &= -\frac{1}{m\beta} \vec{\nabla}_{\vec{V}_1} \varphi(\vec{V}_1) \int d\vec{r}_2 d\vec{V}_2 \vec{\nabla}_{\vec{r}_1} c(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \Psi(\vec{r}_2, \vec{V}_2, t) \end{aligned} \quad (2.92)$$

où $\varphi(\vec{v}_1)$ est la distribution de Maxwell-Boltzmann normalisée:

$$\varphi(\vec{v}_1) = \left(\frac{m\beta}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-\frac{m\beta v_1^2}{2}} \quad (2.93)$$

et $c(r)$ est la fonction de corrélation directe (de Percus-Yevick) qui est en première approximation égale à l'énergie potentielle d'interaction.

L'équation (2.92) se résout aisément puisqu'il s'agit d'une équation intégrale à noyau symétrique. En effet en appliquant la transformée de Fourier spatiale de part et d'autre à cette équation, nous obtenons (après avoir utilisé la définition (2.85) qui fait intervenir $C(\vec{k}, t)$):

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + i \vec{k} \cdot \vec{V}_1 \right) \hat{\Psi}(\vec{k}, \vec{V}_1, t) - i \vec{k} \cdot \vec{v}_1 \varphi(\vec{V}_1) \hat{c}(\vec{k}) C(\vec{k}, t) = 0 \quad (2.94)$$

Maintenant pour finir l'intégration de l'équation (2.92), appliquons la transformé de Laplace à cette equation:

$$\int_0^{\infty} e^{-Zt} dt \left(\frac{\partial}{\partial t} + i \vec{k} \cdot \vec{V}_1 \right) \hat{\Psi}(\vec{k}, \vec{V}_1, t) = i \vec{k} \cdot \vec{V}_1 \varphi(\vec{V}_1) \hat{c}(\vec{k}) \int_0^{\infty} e^{-Zt} dt C(\vec{k}, t) \quad (2.95)$$

on intègre par partie et on trouve:

$$\begin{aligned} & i \vec{k} \cdot \vec{V}_1 \int_0^{\infty} e^{-Zt} dt \hat{\Psi}(\vec{k}, \vec{V}_1, t) + \int_0^{\infty} e^{-Zt} dt \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\vec{k}, \vec{V}_1, t) \\ &= i \vec{k} \cdot \vec{V}_1 \varphi(\vec{V}_1) \hat{c}(\vec{k}) \int_0^{\infty} e^{-Zt} dt C(\vec{k}, t) \\ & i \vec{k} \cdot \vec{V}_1 \hat{\Psi}(\vec{k}, \vec{V}_1, t) + \left[e^{-Zt} \hat{\Psi}(\vec{k}, \vec{V}_1, t) \right]_0^{\infty} + Z \int_0^{\infty} e^{-Zt} dt \hat{\Psi}(\vec{k}, \vec{V}_1, t) \\ &= i \vec{k} \cdot \vec{V}_1 \varphi(\vec{V}_1) \hat{c}(\vec{k}) \tilde{C}(\vec{k}, Z) \end{aligned}$$

soit en définitive:

$$i \vec{k} \cdot \vec{V}_1 \tilde{\Psi}(\vec{k}, \vec{V}_1, Z) - \hat{\Psi}(\vec{k}, \vec{V}_1, 0) + Z \tilde{\Psi}(\vec{k}, \vec{V}_1, Z) = i \vec{k} \cdot \vec{V}_1 \varphi(\vec{V}_1) \hat{c}(\vec{k}) \tilde{C}(\vec{k}, Z) \quad (2.96)$$

la fonction $\hat{\Psi}(\vec{k}, \vec{V}_1, 0)$ est la facteur de structure statique: $\hat{\Psi}(\vec{k}, \vec{V}_1, 0) = S(\vec{k}) \varphi(\vec{V}_1)$.

ce qui permet d'écrire (2.96) comme:

$$\tilde{\Psi}(\vec{k}, \vec{V}_1, Z) = \frac{\left[i \vec{k} \cdot \vec{V}_1 \varphi(\vec{V}_1) \hat{c}(\vec{k}) \tilde{C}(\vec{k}, Z) + S(\vec{k}) \right] \varphi(\vec{V}_1)}{i \vec{k} \cdot \vec{V}_1 + Z} \quad (2.97)$$

d'après (2.78) et (2.80):

$$\begin{aligned}\tilde{C}(\vec{k}, z) &= n \int \tilde{\Psi}(\vec{k}, \vec{V}_1, Z) d\vec{V}_1 \\ &= n \int \frac{[i \vec{k} \vec{V}_1 \varphi(\vec{V}_1) \tilde{c}(\vec{k}) \tilde{C}(\vec{k}, Z) + S(\vec{k})] \varphi(\vec{V}_1)}{i \vec{k} \vec{V}_1 + z} d\vec{V}_1\end{aligned}\quad (2.98)$$

et:

$$\tilde{C}(\vec{k}, z) = n \tilde{c}(\vec{k}) \tilde{C}(\vec{k}, Z) \int \frac{i \vec{k} \vec{V}_1 \varphi(\vec{V}_1)}{i \vec{k} \vec{V}_1 + z} d\vec{V}_1 + n S(\vec{k}) \int \frac{\varphi(\vec{V}_1)}{i \vec{k} \vec{V}_1 + z} d\vec{V}_1 \quad (2.99)$$

soit encore:

$$\tilde{C}(\vec{k}, z) = I_1 \tilde{C}(\vec{k}, z) + I_2 \implies \tilde{C}(\vec{k}, z) = \frac{I_2(\vec{k}, z)}{1 - I_1(\vec{k}, z)} \quad (2.100)$$

où

$$I_1 = n \tilde{c}(\vec{k}) \tilde{C}(\vec{k}, Z) \int \frac{i \vec{k} \vec{V}_1 \varphi(\vec{V}_1)}{i \vec{k} \vec{V}_1 + z} d\vec{V}_1 \text{ et } I_2 = n S(\vec{k}) \int \frac{\varphi(\vec{V}_1)}{i \vec{k} \vec{V}_1 + z} d\vec{V}_1 \quad (2.101)$$

et finalement le facteur de structure dynamique est :

$$S(\vec{k}, \omega) = 2 \operatorname{Re} \tilde{C}(\vec{k}, z) \quad (2.102)$$

Le calcul des intégrales (2.101) est en appendice G.

$$I_2 = n S(\vec{k}) I \text{ et } I_1 = n \tilde{c}(\vec{k}) (1 - z I) \text{ et } I = I' + i I'' \quad (2.103)$$

$$I' = e^{-m\beta\omega^2/2k^2} \sqrt{\frac{\pi\beta m}{2k^2}} \quad \text{et} \quad I'' = e^{-m\beta\omega^2/2k^2} \int_0^{\omega\beta m/k^2} dy e^{y^2 k^2/2m\beta} \quad (2.104)$$

Et en utilisant: $S(\vec{k}) = \frac{1}{1 - n\hat{c}(\vec{k})}$, on aboutit à écrire l'expression (2.102) sous la forme:

$$\begin{aligned} S(k, \omega) &= 2 \operatorname{Re} \frac{I_2(\vec{k}, z)}{1 - I_1(\vec{k}, z)} \\ &= 2 \operatorname{Re} \frac{nS(k)(I'(k, -i\omega) + iI''(k, -i\omega))}{1 - n\hat{c}(k) + n\hat{c}(k)\omega I''(k, -i\omega) - i\omega n\hat{c}(k)I'(k, -i\omega)} \\ &= 2 \frac{n}{1 - n\hat{c}(k)} \frac{I'(k, -i\omega) \{1 - n\hat{c}(k)\}}{\{1 - n\hat{c}(k) + n\hat{c}(k)\omega I''(k, -i\omega)\}^2 + \{\omega n\hat{c}(k)I'(k, -i\omega)\}^2} \\ &= \frac{2n}{\omega} \frac{I'(k, -i\omega)}{\{1 - n\hat{c}(k)(1 - \omega I''(k, -i\omega))\}^2 + \{\omega n\hat{c}(k)I'(k, -i\omega)\}^2} \end{aligned} \quad (2.105)$$

en posant d'autre variable pour simplifier les calcul : $x = \frac{\omega}{k} \sqrt{\frac{\beta m}{2}}$. L'expression de $S(k, \omega)$ (2.105) prend la forme:

$$\begin{aligned} S(k, \omega) &= \frac{2n}{\omega} \frac{x\sqrt{\pi}e^{-x^2}}{[1 - n\hat{c}(k)(1 - 2xD(x))]^2 + [n\hat{c}(k)x\sqrt{\pi}I'(x)]^2} \\ &= \frac{2}{\omega n\beta^2 \hat{v}^2(k)} \frac{x\sqrt{\pi}e^{-x^2}}{[(n\beta v(k))^{-1} + (1 - 2xD(x))]^2 + [x\sqrt{\pi}I'(x)]^2} \end{aligned} \quad (2.106)$$

où $I'(x) = e^{-x^2}$ et $D(x) = e^{-x^2} \cdot \int_0^x e^{y^2} dy$. La fonction $D(x)$ est celle de Dawson [30].

La formule précédente est à la base de notre travail pour un plasma à une composante ionique. Le facteur de self-structure $S_s(k, \omega)$ est donné par l'approximation Gaussienne comme [2] :

$$S_S(k, t) = \exp \left\{ -k^2 m\beta \int_0^t dt' (t - t') K_{33}(t) \right\} \quad (2.107)$$

Nous considérons que l'impureté est comme une particule libre donc par approximation, $S_S(k, t)$ devient

$$S_S(k, t) = \exp \left\{ -k^2 D [t + m\beta D (\exp(-t/m\beta D) - 1)] \right\} \quad (2.108)$$

$$S_S(k, \omega) = 2 \operatorname{Re} \left[\int_0^\infty e^{-Zt} \exp \left\{ -k^2 D [t + m\beta D (\exp(-t/m\beta D) - 1)] \right\} dt \right]_{z=-i\omega} \quad (2.109)$$

donc le facteur de self structure est

$$S_s(k, \omega) = \frac{1}{k} \sqrt{\frac{\beta m \pi}{2}} e^{-x^2} \quad (2.110)$$

Ayant les expressions des deux facteurs de structures $S(k, \omega)$ et $S_s(k, \omega)$, nous allons calculer le coefficient de diffusion selon la formule[10]:

$$\begin{aligned} D^{-1} &= \left(\frac{\beta}{12\pi^3} \right) \int_0^\infty dk \cdot k^4 \hat{v}(k) \hat{c}(k) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega S(k, \omega) S_s(k, \omega) \\ &= \left(\frac{2\beta}{12\pi^3 n \beta} \right) \int_0^\infty dk \cdot k^4 \hat{v}(k) \hat{c}(k) \times \\ &\quad \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\frac{2}{m\beta}} dx \frac{x \sqrt{\pi} e^{-x^2} \frac{1}{k} \sqrt{\frac{\beta m \pi}{2}} e^{-x^2}}{[(n\beta \hat{v}(k))^{-1} + (1 - 2xD(x))]^2 + [x\sqrt{\pi} I'(x)]^2} \end{aligned} \quad (2.111)$$

et en remplaçant $I'(x)$ par son expression, on transforme cette formule comme:

$$\begin{aligned} D^{-1} &= \frac{1}{12n\pi^2} \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \int_0^\infty dk \cdot k^3 \frac{\hat{c}(k)}{\hat{v}(k)} \times \\ &\quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{e^{-x^2}}{[(n\beta \hat{v}(k))^{-1} + (1 - 2xD(x))]^2 + [x\sqrt{\pi} I'(x)]^2} \end{aligned} \quad (2.112)$$

cette forme du coefficient de transport est prête pour l'intégration numérique, toutefois il est commode primo de faire quelques modifications préafables:

La fraction se trouvant dans l'intégrale sur k :

$$\frac{\widehat{c}(k)}{\widehat{v}(k)} = \frac{\widehat{c}(k)(1 + n\beta\widehat{v}(k))}{\widehat{v}(k)(1 + n\beta\widehat{v}(k))} = n\beta\widehat{h}(k) \frac{(1 + n\beta\widehat{v}(k))}{n\beta\widehat{v}(k)} = n\beta\widehat{h}(k) \left[1 + (n\beta\widehat{v}(k))^{-1} \right]$$

aussi l'intégrant sur x est une fonction paire en x donc l'expression (2.112):

$$D^{-1} = \frac{\pi}{6} \sqrt{2m\beta} \int_0^{\infty} dk k^3 \widehat{h}(k) \left[1 + (n\beta\widehat{v}(k))^{-1} \right] \times \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{e^{-x^2}}{[(n\beta\widehat{v}(k))^{-1} + (1 - 2xD(x))]^2 + [x\sqrt{\pi}I'(x)]^2} \quad (2.113)$$

Il faut donc calculer $\widehat{h}(k)$, $\widehat{v}(k)$ et $D(x)$. Une fois ces quantités réunies, il ne reste que l'exploitation numérique de l'intégrale donnant l'inverse du coefficient D . Dans le calcul il faut utiliser les variables d'intégration k et r rapportées à l'unité. Donc il suffit de remplacer r/a par r' dans les termes de l'intégrale et posons alors $ka = k'$, et on trouve:

$$\begin{aligned} \widehat{h}(k) &= \int d\vec{r} (g(r') - 1) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \frac{4\pi}{k} \int_0^{\infty} r dr (g(r') - 1) \sin(kr) \\ &= \frac{a^3 4\pi}{k'} \int_0^{\infty} r' dr' (g(r') - 1) \sin(k'r') = a^3 g(k') \end{aligned} \quad (2.114)$$

de même pour le calcul de la transformé de Fourier de l'énergie potentielle (2.15), on trouve (on prend le nombre de charge $Z = 1$):

$$(n\beta\widehat{v}(k))^{-1} = \frac{k^2 + K_D^2}{4\pi e^2 n\beta} = \left(\frac{k^2}{n\beta e^2} \left(\frac{4\pi n}{3} \right)^{2/3} + 4\pi \right) \quad (2.115)$$

Revenons maintenant à l'expression finale de $1/D$ donnée plus haut:

$$D^{-1} = \frac{\pi}{6} \sqrt{2\beta m} \int_0^{\infty} d(k'/a) \cdot (k'/a) a^3 \hat{h}(k') (1 + n\beta \hat{v}(k')) \times \int_0^{\infty} dx \frac{e^{-2x^2}}{[(n\beta \hat{v}(k'))^{-1} + (1 - 2xD(x))]^2 + [x^2 \pi e^{-2x^2}]} \quad (2.116)$$

le coefficient de transport self diffusion est donné en unité $\omega_p a^2$:

$$D^* = [D^{-1} \omega_p a^2]^{-1} \quad (2.117)$$

2.3.5 Discussion et résultats numériques

Dans notre modèle nous avons utilisé la forme du coefficient de self-diffusion (2.77), qui est calculé à partir de l'approximation "disconnected", en termes des facteurs de structure donnés dans l'approximation du champ moyen. La figure (2.2) représente le facteur de structure calculé par l'approximation du champ moyen pour un couplage $\Gamma = 0.9$ pour différentes valeurs de k .

Les résultats de D^* que nous avons trouvés sont donnés sur la table (2.1), qui sont ensuite comparés aux valeurs du coefficient self diffusion obtenues par la dynamique moléculaire D_{dy}^1 .

Nous remarquons que l'accord entre les deux méthodes (notre modèle et la dynamique moléculaire) tend à disparaître dès que le couplage Γ augmente.

Ce désaccord s'interprète facilement vu que notre modèle nous avons utilisé $\hat{\alpha}(k) = -\beta \hat{v}(k)$ qui est une approximation grossière valable que pour les faibles couplages

¹Les résultats de la dynamique moléculaire sont obtenu à l'aide d'un code numérique.

Γ	D^* (modèle théorique)	D (dynamique moléculaire)
0.2	37.11	..
0.5	7.64	7.46
1.	2.94	2.01
2.	0.76	.034.
5.	0.61	0.13

Table 2.1: Coefficient de diffusion trouvé par l'approximation disconnected D^* et par la dynamique moléculaire D pour un plasma à une composante ($Z=1$) en fonction de Γ

et aussi sur l'approximation du terme de collision.

Nous estimons que l'utilisation des approximations du champ moyen et "disconnected" aux ordres supérieurs peut remédier à ce désaccord au couplage fort. Par contre nous observons que D^* croît en sens inverse du couplage Γ qui est tout à fait naturel car en augmentant Γ notre système tend vers un état solide [4].

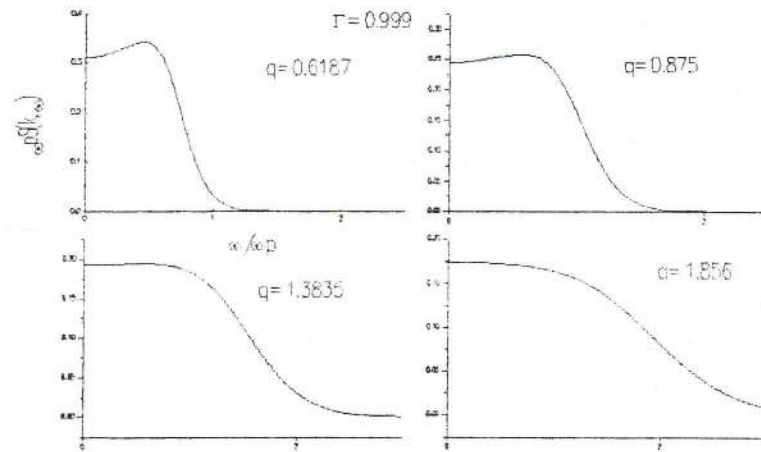


Figure 2.2: Facteur de structure trouvé par l'approximation du champ moyen pour un plasma à une composante ($Z=1$) dans le cas de $\Gamma = 0.9$

Chapitre 3

Le modèle de calcul du coefficient de diffusion dans le cas d'un plasma à deux composantes

3.1 Introduction

Le coefficient de diffusion, comme les autres coefficients, est l'intégrale d'une fonction d'autocorrelation. La diffusion ionique dans un mélange de plasma a eu récemment de l'intérêt pour plusieurs raisons. En astrophysique, la diffusion joue un rôle central dans la compréhension de la distribution des éléments lourds dans l'atmosphère et white dwarf stars (naine blanche). La représentation de la R.X dans la multicouche miroir devrait être affectée par la diffusion. Le taux d'évaporation du métal "chunks injectés" dans la capsule de combustible de fusion (ICF) par instabilité hydrodynamique est contrôlé par le

Chapitre 3

Le modèle de calcul du coefficient de diffusion dans le cas d'un plasma à deux composantes

3.1 Introduction

Le coefficient de diffusion, comme les autres coefficients, est l'intégrale d'une fonction d'autocorrelation. La diffusion ionique dans un mélange de plasma a eu récemment de l'intérêt pour plusieurs raisons. En astrophysique, la diffusion joue un rôle central dans la compréhension de la distribution des éléments lourds dans l'atmosphère et white dwarf stars (naine blanche). La représentation de la R.X dans la multicouche miroir devrait être affectée par la diffusion. Le taux d'évaporation du métal "chunks injectés" dans la capsule de combustible de fusion (ICF) par instabilité hydrodynamique est contrôlé par le

coefficient de diffusion. Il est intéressant aussi dans le calcul du spectre des raies.

En pratique, nous n'utilisons pas la formule de Kubo pour l'obtention des coefficients de transport car celle-ci s'avère inextricable et suppose la connaissance de la fonction de corrélation correspondante au coefficient de transport choisi. Nous proposons la méthode inverse, c'est à dire celle qui consiste à calculer la fonction de corrélation d'une variable dynamique ou d'une fonction de variables dynamiques à partir de la connaissance du coefficient de transport associé à cette variable. Celui-ci est dérivé et obtenu en utilisant la méthode de la dynamique moléculaire (simulation numérique) soit en moyennant certaines approximations telles que la "disconnected", le champ moyen" etc...

Dans ce chapitre on se propose de calculer le coefficient de self-diffusion D d'une impureté test plongée dans un plasma à deux espèces. Ceci est fait par l'utilisation de quelques approximations appliquées à la fonction de mémoire (le terme de collision) associées aux fonctions de corrélation. Nous avons aussi besoin de connaître les facteurs de structures, qui sont calculés à partir de l'équation cinétique générale sous certaines approximations.

3.2 Le modèle

Notre modèle est une extension du modèle de Berkovsky et al, qui considère un ion impureté de masse m_0 et de charge q_0 placé en $r(0)$ dans un plasma à une seule composante en équilibre thermodynamique au cas d'un plasma à deux composantes d'ions: N_1 de charge $Z_1 e$ avec le nombre de la densité $n_1 = N_1/V$ et N_2 de charge $Z_2 e$ avec le nombre de la densité $n_2 = N_2/V$, le nombre total de densité est $n = n_1 + n_2$.

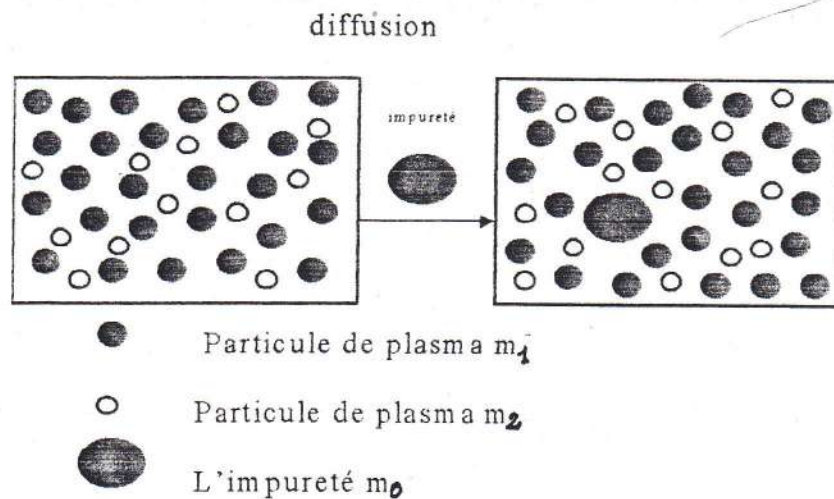


Figure 3.1: Diffusion d'une particule impureté dans un plasma à deux composantes

Le coefficient de self diffusion D est donné par le relation de Green- Kubo

$$\beta m_0 D = \int D(t) dt \quad (3.1)$$

De la même manière de calcul dans le cas d'un plasma à une espèce, le coefficient de transport D déterminé dans l'approximation "disconnected" est donné par le relation suivante (chapitre 2) [4]

$$D^{-2} = \beta m K_{33} \quad (3.2)$$

l'opérateur K_{33} est donné dans l'approximation disconnected comme une fonction du terme de la fonction de la mémoire, de même manière que dans le cas à une composante (chapitre 2).

$$\frac{1}{\beta m_0 D} = K_{33} = \left(\frac{1}{12\pi^3 m_0} \right) \sum_{\alpha, \beta} \int dk k^4 \hat{c}_{0\alpha}(k) \hat{v}_{0\beta}(k) \int d\omega S_{\alpha\beta}(k, \omega) S_s(k, \omega) \quad (3.3)$$

où $S_{\alpha\beta}(k, \omega)$ est le facteur de structure partiel de la densité de l'espèce α et β , $S_s(k, \omega)$ est le facteur self-structure pour l'ion impureté, $\hat{v}_{0\beta}(k)$ est la transformé de Fourier de l'énergie potentielle d'interaction (impureté - ion de l'espèce α), et $\hat{c}_{0\alpha}(k)$ est la transformé de Fourier de la fonction de corrélation directe pour le couple (impureté - ion d'espèce β).

Le calcul de D dépend seulement du calcul des facteurs de structure dynamique $S_{\alpha\beta}(k, \omega)$ et les facteurs statiques $\hat{c}_{0\alpha}(k)$, $\hat{h}_{0\beta}(k)$, qui sont reliés par la relation générale d'Ornstein-Zernicke (1.22)[16]

$$\hat{h}_{\sigma\tau}(k) = \hat{c}_{\sigma\tau}(k) + \sum_{\sigma_1}^2 n_{\sigma_1} \hat{c}_{\sigma\sigma_1}(k) \hat{h}_{\sigma_1\tau}(k) \quad (3.4)$$

et à partir de cette équation, on trouve que:

$$\hat{h}_{\sigma\tau}(k) = \frac{\hat{c}_{\sigma\tau}(k)}{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k) - n_2 \hat{c}_{22}(k)} \text{ avec } \hat{h}_{\sigma\tau}(k) = \hat{h}_{\tau\sigma}(k) \quad (3.5)$$

où

$$\hat{h}_{\sigma\tau}(k) = \int dr [g(r)_{\sigma\tau} - 1]$$

Cette formule est valable pour toutes les valeurs de k pour le cas d'un couplage faible mais pour le couplage fort sa validité est vérifiée que pour les petites valeurs de k . Les facteurs de structure dynamiques $S_{\alpha\beta}(k, \omega)$ sont déterminés à partir de l'approximation de champ moyen. On utilise toujours le potentiel de Debye:

$$v(r) = \left(\frac{Z_j e}{r} \right) \exp(-\bar{K}_D r) \quad (3.6)$$

où $\lambda_D = \bar{K}_D^{-1}$ est la longueur de Debye moyenne (2.5). L'énergie d'interaction entre les particules (les ions) i et j distantes $|\vec{r}| = |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \equiv r$ est:

$$V_{ij} = \frac{Z_i Z_j e^2}{r} \exp(-\bar{K}_D r) \quad i = \alpha \text{ ou } \beta \quad (3.7)$$

donc:

$$\hat{h}_{\alpha\beta}(k) = \int_0^\infty [g_{\alpha\beta}(r) - 1] e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{r} \quad (3.8)$$

la transformé de Fourier de l'énergie potentielle est donnée par:

$$\begin{aligned} \hat{v}_{\alpha\beta}(k) &= \int_0^\infty V_{\alpha\beta}(r) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{r} \\ &= \frac{q_\alpha q_\beta}{\bar{K}_D^2 + k^2} (3/4\pi n) \end{aligned} \quad (3.9)$$

et

$$\hat{c}_{\alpha\beta}(k) = -\beta \hat{v}_{\alpha\beta}(k) = -\frac{\beta q_\alpha q_\beta}{\bar{K}_D^2 + k^2} (3/4\pi n) \quad (3.10)$$

les quantités k et $\bar{K}_D$ sont rapportées dans l'unité a^{-1} , et nous remarquons à partir de (3.10)

que:

$$\hat{c}_{12}(k) \cdot \hat{c}_{21}(k) = \hat{c}_{11}(k) \cdot \hat{c}_{22}(k) \quad (3.11)$$

3.2.1 Calcul des facteurs de structure dans un plasma à deux composantes

Le facteur de structure partiel est défini comme une transformée de Fourier de façon générale (chapitre 2) :

$$S_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} C_{\alpha\beta}(\vec{k}, t) = \left[2 \operatorname{Re} \int_0^{+\infty} dt e^{-Zt} C_{\alpha\beta}(\vec{k}, t) \right]_{z=-i\omega} \quad (3.12)$$

Dans le cas de notre système qui à deux composantes, l'équation cinétique devient [2]:

$$\begin{aligned} & \left(Z + i \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}}{m_\alpha} \right) C_{\alpha\beta}(\vec{k}, Z, pp') + i \sum_{\sigma} \int dp'' \phi_{\alpha\sigma}(\vec{k}, Z, pp'') C_{\sigma\beta}(\vec{k}, Z, p'p'') \\ &= n_\alpha \varphi_\alpha(p) \left[\delta_{\alpha\beta} \delta(p - p') + n_\beta \hat{h}(k) \varphi_\beta(p') \right] \end{aligned} \quad (3.13)$$

où $\varphi_\alpha(p)$ est la distribution de Maxwell-Boltzmann normalisée pour l'espèce α :

$$\varphi_\alpha(p) = \left(\frac{\beta}{2\pi m_\alpha} \right) \exp[-\beta p^2/2m_\alpha] \quad (3.14)$$

n_α est la densité ionique de l'espèce α . L'opérateur $\phi_{\alpha\beta}(\vec{k}, Z, pp')$ est séparé en deux parties la première est le terme self-consistent et l'autre $M(\vec{k}, Z, pp')$ définie comme un opérateur de collision non local [8]:

$$\phi_{\alpha\beta}(\vec{k}, Z, pp'') = -n_\alpha \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}}{m_\alpha} \varphi_\alpha(p) \hat{c}_{\alpha\beta}(k) + M(\vec{k}, Z, pp') \quad (3.15)$$

Comme nous l'avons dit dans le calcul des facteurs de structure, on utilise la résolution de l'équation cinétique (3.13) avec l'utilisation de l'approximation de champ moyen, qui est l'approximation fondamentale dans la théorie des plasmas. Physiquement elle consiste à ne tenir compte, dans les interactions qui déterminent les trajectoires des particules, que des interactions collectives, c'est-à-dire de l'action sur chaque particule (l'impureté) chargée du champ "moyen" de charge d'espace créée par les autres particules. Cette approximation a

été proposée par A.A. Vlasov [4] pour l'étude de l'évolution d'un plasma. Donc les facteurs sont déterminés par la négligence du terme $M(\vec{k}, Z, pp')$. Si nous substituons l'équation (3.15) dans l'équation (3.13) on obtient:

$$\begin{aligned} & \left(Z + i \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}}{m_\alpha} \right) C_{\alpha\beta}(\vec{k}, Z, \vec{p} \vec{p}') - i \sum_{\sigma} n_{\alpha} \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}}{m_{\alpha}} \varphi_{\alpha}(p) \hat{c}_{\alpha\sigma}(k) \int dp'' C_{\sigma\beta}(\vec{k}, Z, \vec{p}' \vec{p}'') \\ &= n_{\alpha} \varphi_{\alpha}(p) \left[\delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{p} - \vec{p}') + n_{\beta} \hat{h}_{\alpha\beta}(k) \varphi_{\beta}(p') \right] \end{aligned} \quad (3.16)$$

et en intégrant cette équation par rapport à p et p' on obtient:

$$\begin{aligned} & S_{\alpha\beta}(\vec{k}, Z) - n_{\alpha} \int d\vec{p} \frac{i \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}}{m_{\alpha}} \varphi_{\alpha}(p)}{\left(Z + i \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}}{m_{\alpha}} \right)} \sum_{\sigma} \hat{c}_{\alpha\sigma}(k) S_{\sigma\beta}(\vec{k}, Z) \\ &= n_{\alpha} \delta_{\alpha\beta} \int d\vec{p} \frac{\varphi_{\alpha}(p)}{\left(Z + i \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}}{m_{\alpha}} \right)} + n_{\alpha} n_{\beta} \hat{h}_{\alpha\beta}(k) \int d\vec{p} \frac{\varphi_{\alpha}(p)}{\left(Z + i \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}}{m_{\alpha}} \right)} \end{aligned} \quad (3.17)$$

telle que:

$$S_{\alpha\beta}(\vec{k}, Z) = n \int d\vec{p} d\vec{p}' C_{\sigma\beta}(\vec{k}, Z, \vec{p} \vec{p}') \quad (3.18)$$

et en posant :

$$I_{\alpha}(\vec{k}, Z) = \int d\vec{p} \frac{\varphi_{\alpha}(p)}{\left(Z + i \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}}{m_{\alpha}} \right)} \quad \text{et} \quad I_{\alpha} = I'_{\alpha} + i I''_{\alpha} \quad (3.19)$$

avec

$$I'_{\alpha} = \sqrt{\frac{\pi \beta m_{\alpha}}{2k^2}} e^{-m_{\alpha} \beta \omega^2 / 2k^2} \quad \text{et} \quad I''_{\alpha} = e^{-m_{\alpha} \beta \omega^2 / 2k^2} \int_0^{\omega \beta m_{\alpha} / k^2} dy e^{y^2 k^2 / 2m_{\alpha} \beta} \quad (3.20)$$

on obtient finalement les facteurs de structure donnés par les quatres équations autonomes et formelles:

$$S_{\alpha\beta}(\vec{k}, Z) = n_{\alpha} (1 - ZI_{\alpha}) \sum_{\sigma} \hat{c}_{\alpha\sigma}(k) S_{\sigma\beta}(\vec{k}, Z) + n_{\alpha} [\delta_{\alpha\beta} + n_{\beta} \hat{h}_{\alpha\beta}(k)] I_{\alpha} \quad (3.21)$$

Dans le calcul, nous avons besoin de connaître les expressions de $\hat{c}_{11}(k)$, $\hat{c}_{12}(k) = \hat{c}_{21}(k)$, et $\hat{c}_{22}(k)$, qui sont déterminées par l'approximation [6]:

$$\hat{c}_{\sigma\tau}(k) = -\beta \hat{v}_{0\beta}(k) \quad (3.22)$$

et

$$S_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = 2 \operatorname{Re} S_{\alpha\beta}(\vec{k}, -i\omega) \quad (3.23)$$

Rappelons que les facteurs de structure sont donnés à partir de la solution de (3.21), qui est un système de quatre équations à quatre inconnus dont la solution est:

$$\begin{aligned} S_{11}(\vec{k}, Z) &= \frac{n_1 [1 + n_1 \hat{h}_{11}(k)] I_1 [1 - n_2 \hat{c}_{22}(k)(1 - ZI_2)] + n_2 n_1^2 \hat{c}_{12}(k) \hat{h}_{12}(k) (1 - ZI_1) I_2}{[1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - ZI_1)][1 - n_2 \hat{c}_{22}(k)(1 - ZI_2)] - n_1 n_2 \hat{c}_{12}^2(k) (1 - ZI_2)(1 - ZI_1)} \\ S_{22}(\vec{k}, Z) &= \frac{n_2 [1 + n_2 \hat{h}_{22}(k)] I_2 [1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - ZI_1)] + n_1 n_2^2 \hat{c}_{12}(k) \hat{h}_{12}(k) (1 - ZI_2) I_1}{[1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - ZI_1)][1 - n_2 \hat{c}_{22}(k)(1 - ZI_2)] - n_1 n_2 \hat{c}_{12}^2(k) (1 - ZI_2)(1 - ZI_1)} \\ S_{21}(\vec{k}, Z) &= \frac{n_1 n_2 \hat{h}_{12}(k) I_2 [1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - ZI_1)] + n_2 n_1 \hat{c}_{12}(k) (1 - ZI_2) I_1 [1 + n_1 \hat{h}_{11}(k)]}{[1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - ZI_1)][1 - n_2 \hat{c}_{22}(k)(1 - ZI_2)] - n_1 n_2 \hat{c}_{12}^2(k) (1 - ZI_2)(1 - ZI_1)} \\ S_{12}(\vec{k}, Z) &= \frac{n_1 n_2 \hat{h}_{12}(k) I_1 [1 - n_2 \hat{c}_{22}(k)(1 - ZI_2)] + n_2 n_1 \hat{c}_{12}(k) (1 - ZI_1) I_2 [1 + n_2 \hat{h}_{22}(k)]}{[1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - ZI_1)][1 - n_2 \hat{c}_{22}(k)(1 - ZI_2)] - n_1 n_2 \hat{c}_{12}^2(k) (1 - ZI_2)(1 - ZI_1)} \end{aligned} \quad (3.24)$$

De même manière de calcul pour le cas d'un plasma à une composante les facteurs de structure vérifient l'expression suivante:

$$S_{\alpha\beta}(k, \omega) = 2 \operatorname{Re} S_{\alpha\beta}(k, -i\omega)$$

$$S_{11}(k, \omega) = \frac{2n_1}{\omega} \frac{a(k, \omega) \{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - \omega I_1'') - n_2 \hat{c}_{22}(k)(1 - \omega I_2'')\} + b(k, \omega) \{\omega n_1 I_1' \hat{c}_{11}(k) + \omega n_2 I_2' \hat{c}_{22}(k)\}}{\{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - \omega I_1'') - n_2 \hat{c}_{22}(k)(1 - \omega I_2'')\}^2 + \{\omega n_1 I_1' \hat{c}_{11}(k) + \omega n_2 I_2' \hat{c}_{22}(k)\}^2} \quad (3.25)$$

avec:

$$\begin{aligned} a(k, \omega) &= (1 + n_1 \hat{h}_{11})(1 - n_2 \hat{c}_{22}) \omega I_1' + n_1 n_2 \hat{h}_{12} \hat{c}_{12} \omega I_2' + \\ &\quad \omega^2 \left(n_2 (1 + n_1 \hat{h}_{11}) \hat{c}_{22} - n_1 n_2 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12} \right) \left(I_1'' I_2' + I_2'' I_1' \right) \\ b(k, \omega) &= (1 + n_1 \hat{h}_{11})(1 - n_2 \hat{c}_{22}) \omega I_1'' + n_1 n_2 \hat{h}_{12} \hat{c}_{12} \omega I_2'' + \\ &\quad \omega^2 \left(n_2 (1 + n_1 \hat{h}_{11}) \hat{c}_{22} - n_1 n_2 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12} \right) \left(I_1'' I_2'' - I_2' I_1' \right) \end{aligned}$$

et on calcule les autres facteurs (S_{12}, S_{21}, S_{22}) par la même façon, et on trouve que:

$$S_{22}(k, \omega) = \frac{2n_2}{\omega} \frac{a'(k, \omega) \{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - \omega I_1'') - n_2 \hat{c}_{22}(k)(1 - \omega I_2'')\} + b'(k, \omega) \{\omega n_1 I_1' \hat{c}_{11}(k) + \omega n_2 I_2' \hat{c}_{22}(k)\}}{\{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - \omega I_1'') - n_2 \hat{c}_{22}(k)(1 - \omega I_2'')\}^2 + \{\omega n_1 I_1' \hat{c}_{11}(k) + \omega n_2 I_2' \hat{c}_{22}(k)\}^2} \quad (3.26)$$

avec:

$$\begin{aligned} a'(k, \omega) &= (1 + n_2 \hat{h}_{22})(1 - n_1 \hat{c}_{11}) \omega I_2' + n_1 n_2 \hat{h}_{12} \hat{c}_{12} \omega I_1' + \\ &\quad \omega^2 \left(n_1 (1 + n_2 \hat{h}_{22}) \hat{c}_{11} - n_1 n_2 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12} \right) \left(I_2'' I_1' + I_1'' I_2' \right) \\ b(k, \omega) &= (1 + n_2 \hat{h}_{22})(1 - n_1 \hat{c}_{11}) \omega I_2'' + n_1 n_2 \hat{h}_{12} \hat{c}_{12} \omega I_1'' + \\ &\quad \omega^2 \left(n_1 (1 + n_2 \hat{h}_{22}) \hat{c}_{11} - n_1 n_2 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12} \right) \left(I_1'' I_2'' - I_2' I_1' \right) \end{aligned}$$

on trouve aussi que:

$$S_{21}(k, \omega) = \frac{2\sqrt{n_2 n_1}}{\omega} \frac{L(k, \omega) \{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - \omega I''_1) - n_2 \hat{c}_{22}(k)(1 - \omega I''_2)\} + M(k, \omega) \{\omega n_1 I'_1 \hat{c}_{11}(k) + \omega n_2 I'_2 \hat{c}_{22}(k)\}}{\{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - \omega I''_1) - n_2 \hat{c}_{22}(k)(1 - \omega I''_2)\}^2 + \{\omega n_1 I'_1 \hat{c}_{11}(k) + \omega n_2 I'_2 \hat{c}_{22}(k)\}^2} \quad (3.27)$$

avec

$$\begin{aligned} L(k, \omega) &= \sqrt{n_1 n_2} (1 + n_1 \hat{h}_{11}) \hat{c}_{12} \omega I'_1 + (1 - n_1 \hat{c}_{11}) \hat{h}_{12} \omega I'_2 + \\ &\quad \omega^2 \left(n_1 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12} - (1 + n_1 \hat{h}_{11}) \hat{c}_{12} \right) \left(I''_2 I'_1 + I''_1 I'_2 \right) \\ M(k, \omega) &= \sqrt{n_1 n_2} (1 + n_1 \hat{h}_{11}) \hat{c}_{12} I'_1 + (1 - n_1 \hat{c}_{11}) \hat{h}_{12} \omega I'_2 + \\ &\quad \omega^2 \left(n_1 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12} - (1 + n_1 \hat{h}_{11}) \hat{c}_{12} \right) \left(I''_1 I'_2 - I'_2 I'_1 \right) \end{aligned}$$

et pour le dernier facteur:

$$S_{12}(k, \omega) = \frac{2\sqrt{n_2 n_1}}{\omega} \frac{L'(k, \omega) \{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - \omega I''_1) - n_2 \hat{c}_{11}(k)(1 - \omega I''_2)\} + M'(k, \omega) \{\omega n_1 I'_1 \hat{c}_{11}(k) + \omega n_1 I'_1 \hat{c}_{11}(k)\}}{\{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - \omega I''_1) - n_2 \hat{c}_{11}(k)(1 - \omega I''_2)\}^2 + \{\omega n_1 I'_1 \hat{c}_{11}(k) + \omega n_1 I'_1 \hat{c}_{11}(k)\}^2} \quad (3.28)$$

avec

$$\begin{aligned} L'(k, \omega) &= \sqrt{n_1 n_2} (1 + n_2 \hat{h}_{22}) \hat{c}_{12} \omega I'_2 + (1 - n_2 \hat{c}_{22}) \hat{h}_{12} \omega I'_1 + \\ &\quad \omega^2 \left(n_2 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12} - (1 + n_2 \hat{h}_{22}) \hat{c}_{12} \right) \left(I''_2 I'_1 + I''_1 I'_2 \right) \\ M'(k, \omega) &= \sqrt{n_1 n_2} (1 + n_2 \hat{h}_{22}) \hat{c}_{12} I'_2 + (1 - n_2 \hat{c}_{22}) \hat{h}_{12} \omega I'_1 + \\ &\quad \omega^2 \left(n_2 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12} - (1 + n_2 \hat{h}_{22}) \hat{c}_{12} \right) \left(I''_1 I'_2 - I'_2 I'_1 \right) \end{aligned}$$

le facteur de self - structure.

$$S_S(k, \omega) = \frac{1}{k} \left(\frac{\beta m_0 \pi}{2} \right)^{1/2} e^{-\left(\frac{\omega \beta m_0}{k} \right)^2} \quad (3.29)$$

En posant un autre changement de variable $x = \frac{\omega}{k} \sqrt{\frac{\beta \mu}{2}}$ et $dx = \frac{d\omega}{k} \sqrt{\frac{\beta \mu}{2}}$, où $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ est la masse réduite, donc les formules donnant les facteurs de structure prennent la forme:

$$S_{11}(k, \omega) = \frac{2n_1}{\omega} \frac{a(x) \{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - I_1''(x)) - n_2 \hat{c}_{11}(k)(1 - I_2''(x))\} + b(x) \{n_1 I_1'(x) \hat{c}_{11}(k) + n_1 I_1'(x) \hat{c}_{11}(k)\}}{\{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - I_1''(x)) - n_2 \hat{c}_{11}(k)(1 - I_2''(x))\}^2 + \{n_1 I_1'(x) \hat{c}_{11}(k) + n_1 I_1'(x) \hat{c}_{11}(k)\}^2} \quad (3.30)$$

avec:

$$\begin{aligned} a(x) &= (1 + n_1 \hat{h}_{11})(1 - n_2 \hat{c}_{22}) I_1'(x) + n_1 n_2 \hat{h}_{12} \hat{c}_{12} I_2'(x) + \\ &\quad (n_2(1 + n_1 \hat{h}_{11}) \hat{c}_{22} - n_1 n_2 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12}) (I_1''(x) I_2'(x) + I_2''(x) I_1'(x)) \\ b(x) &= (1 + n_1 \hat{h}_{11})(1 - n_2 \hat{c}_{22}) I_1''(x) + n_1 n_2 \hat{h}_{12} \hat{c}_{12} I_2''(x) + \\ &\quad (n_2(1 + n_1 \hat{h}_{11}) \hat{c}_{22} - n_1 n_2 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12}) (I_1''(x) I_2''(x) - I_2'(x) I_1'(x)) \end{aligned}$$

l'utilisation de la variable x et sachant que $\alpha_i \equiv \frac{m_1 + m_2}{m_i}$ conduit à:

$$I_1'(x) = \omega I_1'(k, \omega) = x \sqrt{\alpha_2 \pi} e^{-\alpha_2 x^2} \quad (3.31)$$

$$I_2'(x) = \omega I_2'(k, \omega) = x \sqrt{\alpha_1 \pi} e^{-\alpha_1 x^2} \quad (3.32)$$

$$I_1''(x) = \omega I_1''(k, \omega) = 2x \alpha_2 D_1(x) \quad (3.33)$$

$$I_2''(x) = \omega I_2''(k, \omega) = 2x \alpha_1 D_2(x) \quad (3.34)$$

où les fonctions $D_1(x)$ et $D_2(x)$ sont les fonctions de Dawson, qui sont calculées numériquement [22]. Les autres facteurs sont écrits de la même façon:

$$S_{22}(k, x) = \frac{2n_2}{\omega} \frac{a'(x) \{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - I_1''(x)) - n_2 \hat{c}_{11}(k)(1 - I_2''(x))\} + b'(x) \{n_1 I_1'(x) \hat{c}_{11}(k) + n_1 I_1'(x) \hat{c}_{11}(k)\}}{\{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - I_1''(x)) - n_2 \hat{c}_{11}(k)(1 - I_2''(x))\}^2 + \{n_1 I_1'(x) \hat{c}_{11}(k) + n_1 I_1'(x) \hat{c}_{11}(k)\}^2} \quad (3.35)$$

avec

$$\begin{aligned} a'(x) &= (1 + n_2 \hat{h}_{22})(1 - n_1 \hat{c}_{11}) I_2'(x) + n_1 n_2 \hat{h}_{12} \hat{c}_{12} I_1'(x) + \\ &\quad \left(n_1 (1 + n_2 \hat{h}_{22}) \hat{c}_{11} - n_1 n_2 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12} \right) \left(I_2''(x) I_1'(x) + I_1''(x) I_2'(x) \right) \\ b(x) &= (1 + n_2 \hat{h}_{22})(1 - n_1 \hat{c}_{11}) I_2''(x) + n_1 n_2 \hat{h}_{12} \hat{c}_{12} I_1''(x) + \\ &\quad \left(n_1 (1 + n_2 \hat{h}_{22}) \hat{c}_{11} - n_1 n_2 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12} \right) \left(I_1''(x) I_2''(x) - I_2'(x) I_1'(x) \right) \end{aligned}$$

$$S_{21}(k, \omega) = \frac{2\sqrt{n_2 n_1}}{\omega} \frac{L(x) \{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - I_1''(x)) - n_2 \hat{c}_{11}(k)(1 - I_2''(x))\} + M(x) \{n_1 I_1'(x) \hat{c}_{11}(k) + n_1 I_1'(x) \hat{c}_{11}(k)\}}{\{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - I_1''(x)) - n_2 \hat{c}_{11}(k)(1 - I_2''(x))\}^2 + \{n_1 I_1'(x) \hat{c}_{11}(k) + n_1 I_1'(x) \hat{c}_{11}(k)\}^2} \quad (3.36)$$

avec

$$\begin{aligned} L(k, \omega) &= \sqrt{n_1 n_2} (1 + n_1 \hat{h}_{11}) \hat{c}_{12} I_1'(x) + (1 - n_1 \hat{c}_{11}) \hat{h}_{12} I_2'(x) + \\ &\quad \left(n_1 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12} - (1 + n_1 \hat{h}_{11}) \hat{c}_{12} \right) \left(I_2''(x) I_1'(x) + I_1''(x) I_2'(x) \right) \\ M(k, \omega) &= \sqrt{n_1 n_2} (1 + n_1 \hat{h}_{11}) \hat{c}_{12} I_1'(x) + (1 - n_1 \hat{c}_{11}) \hat{h}_{12} I_2'(x) + \\ &\quad \left(n_1 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12} - (1 + n_1 \hat{h}_{11}) \hat{c}_{12} \right) \left(I_1''(x) I_2''(x) - I_2'(x) I_1'(x) \right) \end{aligned}$$

$$S_{12}(k, \omega) = \frac{2\sqrt{n_2 n_1}}{\omega} \frac{L'(x) \{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - I_1''(x)) - n_2 \hat{c}_{11}(k)(1 - I_2''(x))\} + M'(x) \{n_1 I_1'(x) \hat{c}_{11}(k) + n_1 I_1'(x) \hat{c}_{11}(k)\}}{\{1 - n_1 \hat{c}_{11}(k)(1 - \omega I_1'') - n_2 \hat{c}_{11}(k)(1 - \omega I_2'')\}^2 + \{n_1 \omega I_1' \hat{c}_{11}(k) + n_1 \omega I_1' \hat{c}_{11}(k)\}^2} \quad (3.37)$$

avec

$$\begin{aligned} L'(k, \omega) &= \sqrt{n_1 n_2} (1 + n_2 \hat{h}_{22}) \hat{c}_{12} I_2'(x) + (1 - n_2 \hat{c}_{22}) \hat{h}_{12} I_1'(x) + \\ &\quad \left(n_2 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12} - (1 + n_2 \hat{h}_{22}) \hat{c}_{12} \right) \left(I_2''(x) I_1'(x) + I_1''(x) I_2'(x) \right) \\ M'(k, \omega) &= \sqrt{n_1 n_2} (1 + n_2 \hat{h}_{22}) \hat{c}_{12} I_2'(x) + (1 - n_2 \hat{c}_{22}) \hat{h}_{12} \omega I_1'(x) + \\ &\quad \left(n_2 \hat{c}_{12} \hat{h}_{12} - (1 + n_2 \hat{h}_{22}) \hat{c}_{12} \right) \left(I_1''(x) I_2''(x) - I_2''(x) I_1''(x) \right) \end{aligned}$$

et la formule de self structure devient dans le cas où l'impureté est de même type de l'un des deux types constituant notre plasma:

$$S_S(k, \omega) = \frac{1}{k} \left(\frac{\beta m_0 \pi}{2} \right)^{1/2} e^{-\alpha_i x^2} \quad \text{avec } \alpha_i = \alpha_1 \text{ où } \alpha_2 \quad (3.38)$$

$S_S(k, \omega)$ est le facteur de self structure dynamique associé à l'impureté.

Si nous calculons les facteurs de structure de manière analytique ou numérique, on peut en principe calculer le coefficient de self - diffusion selon la formule (3.3)

3.2.2 Discussion et résultats numériques

Si nous utilisons l'approximation de champ moyen pour résoudre l'équation cinétique, on trouve les formules des $S_{11}(k, \omega)$, $S_{22}(k, \omega)$, $S_{21}(k, \omega)$ et $S_{12}(k, \omega)$. Nous représentons dans la figure (3.2) les valeurs du facteur de structure $S_{11}(k, \omega)$ en fonction de ω/ω_P dans le cas de $\Gamma = 0.999$ pour différentes valeurs de $ka = q$.

Nous avons porté les résultats obtenus sur le tableau (3.1). Dans ce tableau nous faisons la comparaison entre les valeurs du coefficient de transport D^* de He^{+2} dans le mélange (He^{+2} 50% et H^{+1} 50%) trouvées par notre modèle, et les valeurs obtenues par la dynamique moléculaire D_{dy} . On trouve un bon accord entre les deux calculs pour différentes valeurs de Γ . Le coefficient de diffusion décroît avec l'augmentation de Γ et les différences entre D^* et D_{dy} sont dues, comme nous l'avons déjà signalé, au fait que nous avons utilisé la première approximation de la fonction de corrélation directe $\hat{c}(k) = -\beta\hat{v}(k)$ qui est valable seulement pour le couplage faible et pour k petite.

Dans le tableau (3.2), nous avons calculé le coefficient de diffusion de l' Ar^{+17} dans un plasma à deux composantes (Ar^{+17} , He^{+1}) à $\Gamma = 0.003$, avec la concentration de Ar^{+17} 25%, 50%, 75% et 90%. On remarque que le coefficient D dépend de la concentration des composantes. Le coefficient de diffusion croît avec l'augmentation de la concentration de Ar^{+17} dans le mélange.

En général, les résultats présentés ici indiquent que la théorie de l'approximation disconnected (Wallenborn et Baus[5] et Gould et Mazenko[4]) donne un bon accord avec la dynamique moléculaire pour un mélange[8].

Pour finir cette conclusion, et pour valider notre modèle à deux espèces, nous avons pris le cas où les deux types d'ions sont identiques en masse et en charge. Nous avons, comme on doit le prévoir, trouvé les résultats du modèle à une seule espèce. Ceci est un point fort qui consolide et soutient notre modèle à deux espèces.

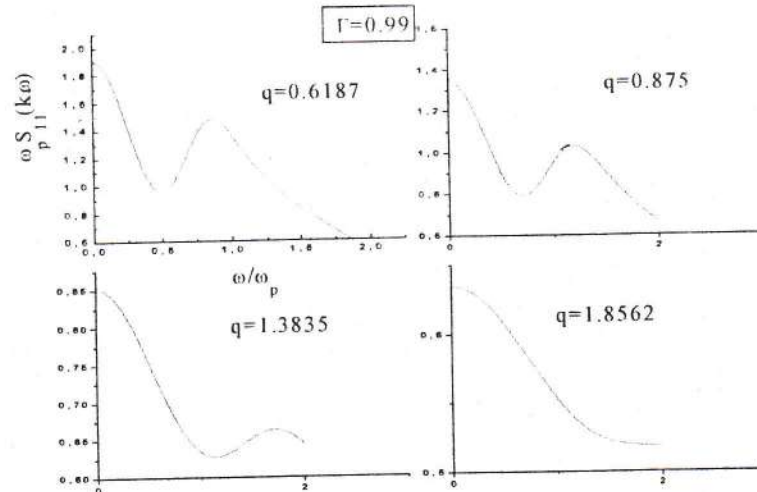


Figure 3.2: $\omega_p S_{11}(k, \omega)$ trouvé par l'approximation du champ moyen (3.25) en fonction de ω/ω_p pour $q=0.618$, $q=0.875$, $q=1.383$ et $q=1.856$ ($Ar^{+17} 50\%$, $He^{+2} 50\%$)

Γ	D^* (modèle théorique)	D (dynamique moléculaire)
0.02	231.827	223.75
0.04	78.52	71.08
0.2	7.58	6.2
0.4	4.55	..
1.00	0.91	0.75

Table 3.1: Comparaison entre les D^* de notre modèle et D_{dy} obtenus par la dynamique moléculaire pour un plasma à deux composantes ($H^{+1} 50\%$, $He^{+2} 50\%$) pour différentes valeurs de Γ

$Ar^{+17}\%$	He^{+1}	D_{Ar}^*
25	75	1.8
50	50	2.84
75	25	8.34
90	10	18.61

Table 3.2: Coefficient de diffusion pour un mélange (Ar^{+17} , He^{+1}) avec $n = 8.10^{16}$

3.3 Les grandeurs thermodynamiques d'un milieu chargé à deux composantes

Dans ce paragraphe, nous allons généraliser les équations données dans un plasma à une seule espèce à notre modèle qui consiste à un système de deux types d'ions. On néglige la structure interne des particules c'est à dire que notre système est traité classiquement.

Nous l'avons dit dans le premier chapitre, que pour décrire les propriétés et le comportement macroscopiques d'un système, on fait appel à des grandeurs telles que l'énergie interne, la pression, etc... . Ces propriétés macroscopiques sont directement reconnaissables dans leurs manifestations microscopiques [30][31] [32]. Nous avons dit aussi que, la connaissance de la fonction de partition ou de l'énergie libre F d'un système en équilibre permet de déterminer très simplement ses principales caractéristiques qui sont reliées, dans le cas d'un système à deux composantes, directement avec les fonctions de distribution radiales $g_{11}(r)$, $g_{12}(r)$ et $g_{22}(r)$.

La fonction de partition dans ce cas est définie par:

$$Z_N(V, T) = \int \cdots \int e^{-\beta H_t} d\Gamma_1 d\Gamma_2 \quad (3.39)$$

$Z_N(V, T)$ est la probabilité que le système ait son point représentatif à l'intérieur de l'élément de volume $dV = d\Gamma_1 d\Gamma_2$ où $d\Gamma_1$ et $d\Gamma_2$ sont les éléments de volume dans l'espace des phases du système pour l'espèce 1 et 2 respectivement.

L'hamiltonien H_t est donné par:

$$H_t = \sum_{i=1}^{N_1} \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_{j=1}^{N_1} \frac{p_j^2}{2m_j} + v(\vec{r}_1^1, \vec{r}_2^1 \dots \vec{r}_{N_1}^1, \vec{r}_1^2, \vec{r}_2^2 \dots \vec{r}_{N_2}^2) \quad (3.40)$$

L'énergie l'interaction entre les particules de deux espèces est donnée comme la somme de l'énergie d'interaction 1-1, 2-2 et 1-2 de la façon suivante :

$$v(\vec{r}_1^1, \dots, \vec{r}_{N_1}^1, \vec{r}_1^2, \dots, \vec{r}_{N_2}^2) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{N_1} v_{11}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{N_2} v_{22}(r_{ij}) + \sum_i^{N_1} \sum_j^{N_2} v_{12}(r_{ij}) \quad (3.41)$$

L'énergie interne dans notre cas est:

$$U = \frac{3}{2}(N_1 + N_2)K_B T + \int v_N(\vec{r}^{N_1}, \vec{r}^{N_2}) e^{-\beta v(\vec{r}^{N_1}, \vec{r}^{N_2})} d\vec{r}_1^1 \dots d\vec{r}_{N_1}^1 d\vec{r}_1^2 \dots d\vec{r}_{N_2}^2 \quad (3.42)$$

la valeur moyenne de l'énergie potentielle d'interaction est donnée par:

$$\begin{aligned} \bar{v}_N(\vec{r}^{N_1}, \vec{r}^{N_2}) &= \frac{1}{Z_N} \int v(\vec{r}^{N_1}, \vec{r}^{N_2}) e^{-\beta v(\vec{r}^{N_1}, \vec{r}^{N_2})} d\vec{r}_1^1 \dots d\vec{r}_{N_1}^1 d\vec{r}_1^2 \dots d\vec{r}_{N_2}^2 \\ &= \frac{1}{Z_N} \left[\int \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{N_1} v_{11}(r_{ij}) e^{-\beta v(\vec{r}^{N_1}, \vec{r}^{N_2})} d\vec{r}_1^1 \dots d\vec{r}_{N_1}^1 d\vec{r}_1^2 \dots d\vec{r}_{N_2}^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \int \sum_{i \neq j}^{N_2} v_{22}(r_{ij}) e^{-\beta v(\vec{r}^{N_1}, \vec{r}^{N_2})} d\vec{r}_1^1 \dots d\vec{r}_{N_1}^1 d\vec{r}_1^2 \dots d\vec{r}_{N_2}^2 \right. \\ &\quad \left. + \int \sum_i^{N_1} \sum_j^{N_2} v_{12}(r_{ij}) e^{-\beta v(\vec{r}^{N_1}, \vec{r}^{N_2})} d\vec{r}_1^1 \dots d\vec{r}_{N_1}^1 d\vec{r}_1^2 \dots d\vec{r}_{N_2}^2 \right] \end{aligned}$$

on peut poser la valeur moyenne de l'énergie potentielle comme:

$$\bar{v}_N(\vec{r}^{N_1}, \vec{r}^{N_2}) = \bar{v}_{11} + \bar{v}_{22} + \bar{v}_{12} \quad (3.43)$$

telle que

$$\begin{aligned}
\bar{v}_{11} &= \frac{N_1(N_1-1)}{2} \int v_{11}(r_{12}^1) \left[\int \frac{e^{-\beta v(\vec{r}^{N_1}, \vec{r}^{N_2})}}{Z_N} \dots d\vec{r}_{N_1}^1 d\vec{r}_1^2 \dots d\vec{r}_{N_2}^2 \right] d\vec{r}_1^1 d\vec{r}_2^1 \\
&= \frac{N_1(N_1-1)}{2V^2} \int v_{11}(r_{12}^1) g_{11}(r_{12}^1) d\vec{r}_1^1 d\vec{r}_2^1 \\
&= \frac{N_1 n_1}{2} \int v_{11}(r) g_{11}(r) 4\pi r^2 dr
\end{aligned} \tag{3.44}$$

On trouve aussi les formules des autres termes de la même façon:

$$\bar{v}_{22} = \frac{N_2 n_2}{2} \int v_{22}(r) g_{22}(r) 4\pi r^2 dr \tag{3.45}$$

$$\bar{v}_{12} = \frac{\sqrt{N_1 N_2} \sqrt{n_1 n_2}}{2} \int v_{12}(r) g_{12}(r) 4\pi r^2 dr \tag{3.46}$$

et finalement, l'énergie interne par l'unité du nombre de particules est donnée par la formule impliquant les fonctions de distribution radiales:

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{2} K_B T + \frac{1}{N} \int \left[\frac{N_1 n_1}{2} v_{11}(r) g_{11}(r) + \frac{N_2 n_2}{2} v_{22}(r) g_{22}(r) + \right. \tag{3.47}$$

$$\left. \frac{\sqrt{N_1 N_2} \sqrt{n_1 n_2}}{2} v_{12}(r) g_{12}(r) \right] 4\pi r^2 dr \tag{3.48}$$

En dérivant par rapport au volume l'équation de partition, on trouve l'équation d'état pour (TCP):

$$\begin{aligned}
\frac{PV}{NK_B T} &= 1 - \frac{1}{3N} \int \left\{ \frac{N_1 n_1}{K_B T} \frac{dv_{11}(r)}{dr_{11}} g_{11}(r) + \frac{N_2 n_2}{K_B T} \frac{dv_{22}(r)}{dr_{22}} g_{22}(r) + \right. \\
&\quad \left. \frac{\sqrt{N_1 N_2} \sqrt{n_1 n_2}}{K_B T} \frac{dv_{12}(r)}{dr_{12}} g_{12}(r) \right\} 2\pi r^2 dr
\end{aligned} \tag{3.49}$$

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons généralisé les équations et les approximations trouvées pour un plasma à une composante dans le deuxième chapitre au cas d'un plasma (TCP).

La résolution de l'équation cinétique générale, avec l'approximation du champ moyen $M(\vec{k}, Z, pp') = 0$, donne les formules des facteurs de structure. Le coefficient de diffusion est relié directement par un terme non local φ_s , qui est approximé par la fonction de mémoire approché $K_{33}(t)$, qui est associée à la fonction de corrélation des vitesses.

Le terme C_s approximé par sa partie "disconnected" permet d'obtenir une formule de D valable pour un (OCP) aussi bien que pour (TCP).

Les résultats que nous avons obtenus sont en bon accord avec la dynamique moléculaire. Donc l'approximation disconnected peut être utilisée pour calculer le coefficient de diffusion, et aussi d'autres coefficients comme la viscosité et la conductivité thermique avec les autres approximations et corrections d'ordre supérieurs.

Chapitre 4

Le calcul de la fonction de corrélation de la vitesse et du champ

4.1 Introduction

Le processus d'élargissement des raies par l'effet de la dynamique des ions est lié directement aux propriétés dynamiques du milieu chargé. La plus simple de ces propriétés est la fonction d'autocorrélation du microchamp et de la vitesse $C(t)$ et $D(t)$ respectivement.

L'étude de ces fonctions pour les particules neutres a connu un progrès significatif [10], [33], [34], et [35]. Dans le cas des particules chargées, un modèle a été élaboré par M.A.Berkovsky et Al [10] et ce pour un plasma à une composante. Sur la base des propriétés de symétrie spatio-temporelles de cette fonction et les propriétés de transport, nous

présentons un calcul analytique de la fonction de corrélation du microchamp électrique $C(t)$ qui va au delà du modèle binaire c'est à dire tenant compte des effets collectifs du milieu sur l'ion impureté. Ce calcul analytique relie la fonction de corrélation du champ électrique à celle des vitesses qui est, à son tour, calculée par le moyen de la technique des opérateurs de projection [9].

4.2 Développement du modèle théorique

Considérons un ion impureté, placé en $\vec{r}(0)$, de masse m_0 et de charge q_0 plongé dans un plasma à deux composantes en équilibre thermodynamique. Le champ électrique dû aux constituants du milieu sur l'ion impureté est :

$$\vec{E} = \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \vec{e}_{\alpha}(\vec{r}_i - \vec{r}(0)) + \vec{E}_b \quad (4.1)$$

où $\vec{e}_{\alpha}(\vec{r}_i - \vec{r}_0)$ est le champ dû à l'ion i distant de $|\vec{r}_i - \vec{r}(0)|$ de l'ion impureté, et $\vec{E}_b$ le champ des charges neutralisant du fond. N_{α} est le nombre d'ions de l'espèce α . Donc la fonction de corrélation du champ électrique et de la vitesse sont respectivement:

$$C(t) = \frac{\langle \vec{E}(t) \cdot \vec{E}(0) \rangle}{\langle \vec{E}(0) \cdot \vec{E}(0) \rangle} \quad (4.2)$$

$$D(t) = \frac{\langle \vec{V}(t) \cdot \vec{V}(0) \rangle}{\langle \vec{V}(0) \cdot \vec{V}(0) \rangle} \quad (4.3)$$

où $\vec{V}(0) \equiv \vec{V}_0$ la vitesse de l'ion impureté. Les deux équations précédentes sont reliées par la première loi de Newton (appendice B):

$$\frac{d^2}{dt^2} D(t) = -\omega_0^2 C(t) \quad (4.4)$$

$$\omega_0 = (\beta q_0^2 / 3m_0) \langle E^2 \rangle \quad \text{et} \quad \beta = \frac{1}{K_B T} \quad (4.5)$$

et à partir de la technique de l'opérateur de projection de Nakajima et Zwanzig [9], la fonction de $D(t)$ est donnée par la forme suivante (appendice C):

$$\frac{d^2}{dt^2} D(t) + \omega_0^2 D(t) + \int_0^t d\tau M(t-\tau) \frac{d}{d\tau} D(\tau) = 0 \quad (4.6)$$

avec les conditions initiales:

$$D(t=0) = 1, \quad C(t=0) = 1 \quad (4.7)$$

$$\dot{D}(t=0) = 0, \quad \dot{C}(t=0) = 0 \quad (4.8)$$

l'équation (4.6) décrit la dynamique des oscillations dans un milieu viscoélastique de fréquence caractéristique égale à ω_0 en présence d'un amortissement, qui est exprimée par la fonction $M(t)$ [36] choisie à pouvoir décrire la relaxation comme:

$$M(t) = M(0)e^{-\lambda t} \quad (4.9)$$

$$M(0) = \omega_1^2 - \omega_0^2 \quad \text{où} \quad \omega_1^2 = \langle \dot{E}^2 \rangle / \langle E^2 \rangle \quad (4.10)$$

le facteur λ est donné par (appendice D):

$$\lambda = (\omega_1^2 / \omega_0^2 - 1) / \beta m_0 D \quad (4.11)$$

où D est le coefficient de self diffusion donné par le relation de Green- Kubo[46]

$$\beta m_0 D = \int_0^{\infty} dt D(t) \quad (4.12)$$

Les fonctions de corrélation de vitesse et de champ sont déduites à partir de l'équation (C.17). En utilisant la transformée de Laplace et le théorème des résidus, nous avons pu calculer la fonction d'autocorrélation de la vitesse et aussi celle du champ. Soit $\hat{D}(Z)$ la transformée de Laplace de la fonction $D(t)$ donc:

$$\hat{D}(Z) = \int_0^{\infty} e^{-Zt} D(t) dt \quad (4.13)$$

l'équation (C.17) devient alors :

$$\int_0^{\infty} e^{-Zt} dt \frac{d^2}{dt^2} D(t) + \omega_0^2 \hat{D}(Z) + \widehat{M}(Z) \int_0^{\infty} e^{-Zt} dt \frac{d}{dt} D(t) = 0 \quad (4.14)$$

après une intégration par partie et sachant la condition $\dot{D}(0) = 0$, on aura :

$$Z \int_0^{\infty} e^{-Zt} dt \frac{d}{dt} D(t) + \omega_0^2 \hat{D}(Z) + \widehat{M}(Z) \int_0^{\infty} e^{-Zt} dt \frac{d}{dt} D(t) = 0 \quad (4.15)$$

Intégrons cette équation une autre fois par partie, on trouve:

$$\begin{aligned} Z(Z\hat{D}(Z) - 1) + \omega_0^2 \hat{D}(Z) + \widehat{M}(Z)(Z\hat{D}(Z) - 1) &= 0 \\ -Z + Z^2 \hat{D}(Z) + \omega_0^2 \hat{D}(Z) - \widehat{M}(Z) + Z\widehat{M}(Z)\hat{D}(Z) &= 0 \end{aligned}$$

$$\hat{D}(Z) [Z^2 + Z\widehat{M}(Z) + \omega_0^2] = Z + \widehat{M}(Z)$$

$$\widehat{D}(Z) = \frac{Z + \widehat{M}(Z)}{[Z^2 + Z\widehat{M}(Z) + \omega_0^2]} \quad (4.16)$$

telle que la transformée de Laplace de la fonction de mémoire $M(t)$ est donnée par:

$$\widehat{M}(Z) = M(0) \int_0^\infty \exp(-Zt - \lambda t) dt = \frac{M(0)}{Z - \lambda} \quad (4.17)$$

Finalement, on a:

$$\widehat{D}(Z) = \frac{Z(Z + \lambda) + M(0)}{Z^3 + \lambda Z^2 + \omega_1^2 Z + \lambda \omega_0^2} \quad (4.18)$$

et à partir de l'équation (4.4), on obtient la transformée de Laplace de la fonction de corrélation du champ $C(t)$, soit:

$$\widehat{C}(Z) = \widehat{D}(Z) - \frac{Z(Z + \lambda) + M(0)}{Z^3 + \lambda Z^2 + \omega_1^2 Z + \lambda \omega_0^2} \quad (4.19)$$

En utilisant la transformée inverse de $\widehat{D}(z)$ telle que:

$$D(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{(\gamma)} e^{Zt} \widehat{D}(Z) dZ \quad (4.20)$$

où (γ) est un contour convenablement choisi. Le théorème des résidus permet d'écrire la fonction $D(t)$ comme:

$$\begin{aligned} D(t) = & e^{-Z_1 t} \frac{Z_1(Z_1 + \lambda) + M(0)}{(Z_1 - Z_2)(Z_1 - Z_3)} + e^{-Z_2 t} \frac{Z_2(Z_2 + \lambda) + M(0)}{(Z_2 - Z_1)(Z_2 - Z_3)} \\ & + e^{-Z_3 t} \frac{Z_3(Z_3 + \lambda) + M(0)}{(Z_3 - Z_1)(Z_3 - Z_2)} \end{aligned} \quad (4.21)$$

soit encore comme:

$$D(t) = \sum_{i=1}^3 D_i \exp(Z_i t) \quad (4.22)$$

$$C(t) = \sum_{i=1}^3 C_i \exp(Z_i t) \quad (4.23)$$

tels que les coefficients sont définis par:

$$C_i = \frac{(\lambda + Z_i) Z_i (Z_{i+2} - Z_{i+1})}{\prod_{n=1}^3 (Z_n - Z_{n+1})} \quad (4.24)$$

$$D_i = - \left(\frac{\omega_0}{Z_i} \right)^2 C_i \quad (4.25)$$

Les coefficients Z_i sont les trois racines de l'équation algébrique cubique suivante:

$$Z^3 + \lambda Z^2 + \omega_1^2 Z + \lambda \omega_0^2 = 0 \quad (4.26)$$

Donc, pour calculer les fonctions de corrélation $D(t)$ et $C(t)$ nous avons besoin de connaître les trois racines Z_i qui sont reliées aux paramètres $\omega_0, \omega_1, \lambda$ qui à leur tour calculés numériquement.

Le premier paramètre : défini dans le cas d'un plasma à deux espèces de cette façon (appendice E):

$$\omega_0^2 = -\frac{1}{3} \sum_{\alpha} \left(\frac{n_{\alpha} q_0}{m_0} \right) \int d\vec{r} \vec{\nabla}_0 \cdot \vec{e}_{\alpha}(\vec{r}) g_{0\alpha}(r) \quad (4.27)$$

n_{α} = la densité de l'espèce α . En calculant la divergence du champ en coordonnées sphériques dans le cas écranté, on obtient:

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}_0 \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{r}) &= -\Delta U_\alpha(r) = -\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right) U_\alpha(r) \\
&= -\left(\frac{q_\alpha \bar{K}_D}{r}\right) \exp(-\bar{K}_D r)
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Si nous substituons l'équation (4.28) dans l'équation (4.27) on trouve que:

$$\omega_0^2 = \frac{1}{3} \sum_\alpha \left(\frac{m_\alpha q_0}{m_0 q_\alpha} \right) \omega_{p\alpha}^2 (I_0)_\alpha \tag{4.29}$$

où:

$$\omega_{p\alpha}^2 = \frac{4\pi n_\alpha q_\alpha^2}{m_\alpha} \quad \text{et} \quad (I_0)_\alpha = 1 + \int_0^\infty d\vec{r} r \bar{K}_D \exp(-\bar{K}_D r) [g_{0\alpha}(r) - 1] \tag{4.30}$$

m_α : masse de l'ion de l'espèce α de plasma.

q_α : charge de l'ion de l'espèce α de plasma.

$\lambda_D = \bar{K}_D^{-1}$: longueur de Debye.

Le deuxième paramètre :

Ce paramètre est défini comme:

$$\omega_1^2 = \omega_0^2 \left(1 + \frac{q_0}{3m_0\omega_0^4} \sum_\alpha \left(\frac{n_\alpha m_0}{\mu_{0\alpha}} \right) \int d\vec{r} \left[\frac{d\vec{e}_{\alpha i}(r)}{dr_i} \right]^2 g_{0\alpha}(r) \right) \tag{4.31}$$

$\frac{d\vec{e}_{\alpha i}(r)}{dr_i}$: c'est une ensemble sur l'indice i et j (appendice E)

$$\begin{aligned}
\frac{d\vec{e}_{\alpha i}(r)}{dr_i} \frac{d\vec{e}_{\alpha i}(r)}{dr_i} &= \sum_i^3 \sum_j^3 \frac{d\vec{e}_{\alpha j}(r)}{dr_i} \frac{d\vec{e}_{\alpha j}(r)}{dr_i} = \\
&= \sum_i^3 \left[\left(\frac{d\vec{e}_{\alpha 1}(r)}{dr_i} \right)^2 + \left(\frac{d\vec{e}_{\alpha 1}(r)}{dr_i} \right)^2 + \left(\frac{d\vec{e}_{\alpha 1}(r)}{dr_i} \right)^2 \right] \\
&= \vec{\nabla} e_{\alpha 1} + \vec{\nabla} e_{\alpha 1} + \vec{\nabla} e_{\alpha 1}
\end{aligned} \tag{4.32}$$

les formules précédantes sont données en coordonnées sphériques comme :

$$e_{\alpha 1} = e_{\alpha}(r) \cdot \sin \theta \cos \varphi$$

$$e_{\alpha 2} = e_{\alpha}(r) \cdot \sin \theta \sin \varphi$$

$$e_{\alpha 3} = e_{\alpha}(r) \cdot \cos \theta$$

donc:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \vec{e}_{\alpha 1}(r) &= \frac{de_{\alpha 1}}{dr} \vec{u}_r + \frac{1}{r} \frac{de_{\alpha 1}}{d\theta} \vec{u}_{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{de_{\alpha 1}}{d\varphi} \vec{u}_{\varphi} \\ &= \frac{de_r}{dr} \sin \theta \cos \varphi \vec{u}_r + \frac{1}{r} e_r \cos \theta \cos \varphi \vec{u}_{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} e_r \sin \theta \cos \varphi \vec{u}_{\varphi} \end{aligned}$$

Par la même manière on trouve les autres termes, finalement la somme (4.32) est égale à:

$$\left(\frac{d \vec{e}_{\alpha i}(r)}{d \vec{r}_i} \right)^2 = \left(\frac{d}{dr} (\vec{\nabla} U) \right)^2 + \frac{2}{r^2} (\vec{\nabla} U)^2 \quad (4.33)$$

après le calcul de ce terme, on l'injecte dans l'équation (4.31), donnant la relation simple du paramètre ω_1 :

$$\omega_1^2 = \omega_0^2 \left(1 + \frac{q_0^2}{3a^3 \omega_0^4} \sum_{\alpha} \left(\frac{m_{\alpha}}{m_0 \mu_{0\alpha}} \right) \omega_{p\alpha}^2 (I_1)_{\alpha} \right) \quad (4.34)$$

$$(I_1)_{\alpha} = \int_0^{\infty} r^{-4} e^{-2\bar{K}Dr} \left[6 + 12(\bar{K}Dr) + 10(\bar{K}Dr)^2 + 4(\bar{K}Dr)^3 + (\bar{K}Dr)^4 \right] g_{\alpha}(r) dr \quad (4.35)$$

et $\mu_{\alpha} = \frac{m_{\alpha} m_0}{m_{\alpha} + m_0}$ est la masse réduite.

Le troisième paramètre: est donné par l'équation (4.11), qui est relié directement au coefficient de transport D .

Les valeurs des paramètres précédents sont calculées numériquement. On constate dans le calcul que ω_1^2 est de même ordre que ω_0^2 . Pour cela dans le développement, on néglige les termes qui portent la double somme de deux espèces d'ions, ces termes sont faibles devant ω_0^2 (appendice E).

Dans le cas d'un plasma à une composante les équations précédentes deviennent:

$$\omega_0^2 = \frac{1}{3} \frac{mq_0}{m_0q} \omega_p^2 I_0 \quad (4.36)$$

où:

m : masse de l'ion du plasma

q : charge de l'ion du plasma.

ω_p : fréquence plasma.

$$I_0 = 1 + \int_0^\infty r K_D^2 \exp(-K_D r) [g(r) - 1] dr \quad (4.37)$$

K_D : l'inverse de la longueur de Debye λ_D .

$g(r)$: la fonction de distribution de paires.

$$\omega_1^2 = \omega_0^2 \left\{ 1 + \left(\frac{m_0}{\mu I_0^2} \right) I_1^2 \right\} \quad (4.38)$$

μ : la masse réduite du couple (m, m_0) .

$$I_1 = \int_0^\infty r^{-4} e^{-2K_D r} \left[6 + 12K_D r + 10(K_D r)^2 + 4(K_D r)^3 + (K_D r)^4 \right] g(r) dr \quad (4.39)$$

Les variables d'intégration et K_D^{-1} sont en unités de rayon de la sphere a .

4.2.1 Discussion et résultats numériques

Nous avons examiné les deux types de plasma, à une composante (*OCP*) composé d'ions (He^{+1}) et à deux composantes (*TCP*) composé de deux types d'ions (He^{2+}, H^{1+}). Dans le cas d'un (*OCP*), l'impureté est un ion de l'ensemble des ions du plasma, alors que dans le cas d'un (*TCP*) l'impureté est de même masse de même charge de l'un des deux espèces (nous avons dans notre travail choisi He^{2+}). L'utilisation de la fonction de distribution radiale des paires semi-empirique (appendice A), nous a permis d'obtenir les valeurs ω_0 , ω_1 et D numériquement. Ajoutons que nous avons utilisé l'approximation "disconnected" (deuxième et troisième chapitres), pour calculer D .

Le tableau (4.1) présente les valeurs des paramètres ω_0 et ω_1 trouvés dans notre calcul pour les deux types de plasma en fonction de Γ .

Les racines Z_i sont déterminées à partir de la résolution de l'équation cubique (4.26). Elles sont négatives pour le cas d'un couplage faible et complexe pour le cas d'un couplage fort et ensuite injectées dans les équations (4.24), (4.25) pour trouver les coefficients D_i et C_i . Finalement on a pu calculer les fonctions de corrélation du champ et de la vitesse à partir des équations (4.22)(4.23).

Nous avons ensuite et à titre comparatif calculé les fonctions d'autocorrélation $C(t)$ et $D(t)$ par la méthode de la dynamique moléculaire. Les figures (4.1) et (4.2) présentent les fonctions d'autocorrélation du champ et de la vitesse respectivement pour le cas d'un plasma à une seule composante ($Z=1$) pour $\Gamma = 0.5$. Aussi les figures (4.3) et (4.4) présentent les fonctions d'autocorrélation du champ et de la vitesse respectivement pour le cas d'un plasma à deux composantes ($H^{+1}50\%$ et $He^{+2}50\%$) pour $\Gamma = 0.02$. Les courbes de la dynamique

moléculaire et de la théorie de notre modèle sont qualitativement les mêmes. L'intégrale de la fonction d'autocorrélation, qui est trouvée par ce modèle donne le même coefficient D utilisé pour calculer le paramètre Λ . Ceci montre que notre modèle peut donner un appui pour représenter les effets dynamiques dans les problèmes d'élargissements spectrales.

Γ	$\omega_0(OCP)$	$\omega_1(OCP)$	$\omega_0(TCP)$	$\omega_1(TCP)$
0.2	0.55	28.19	0.43	11.33
0.5	0.51	10.88	0.34	4.007
1.	0.45	5.57	0.22	2.07
2.	0.36	2.59	0.15	1.27
5.	0.20	1.17	0.046	0.44

Table 4.1: Valeurs des paramètres ω_0 et ω_1 dans notre modèle obtenues avec un $g(r)$ semi-empirique dans le cas (*OCP*) et le cas (*TCP*) pour différents paramètres du couplage Γ

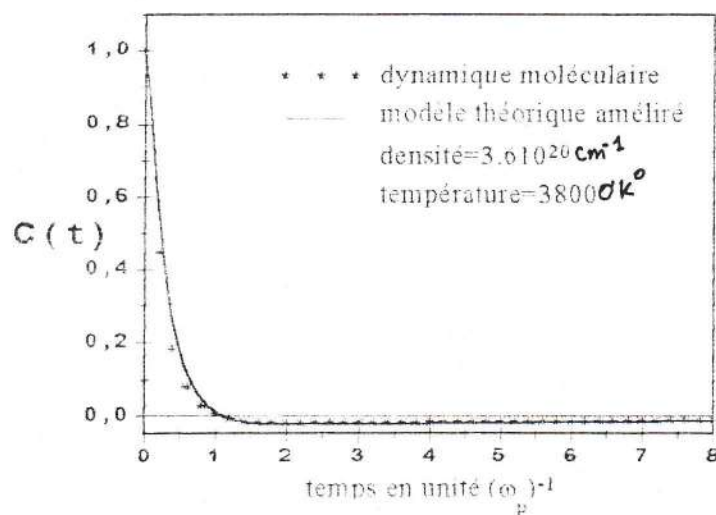


Figure 4.1: Fonction d'autocorrélation du champ électrique pour un plasma à une composante ($Z=1$) et $\Gamma = 0.5$

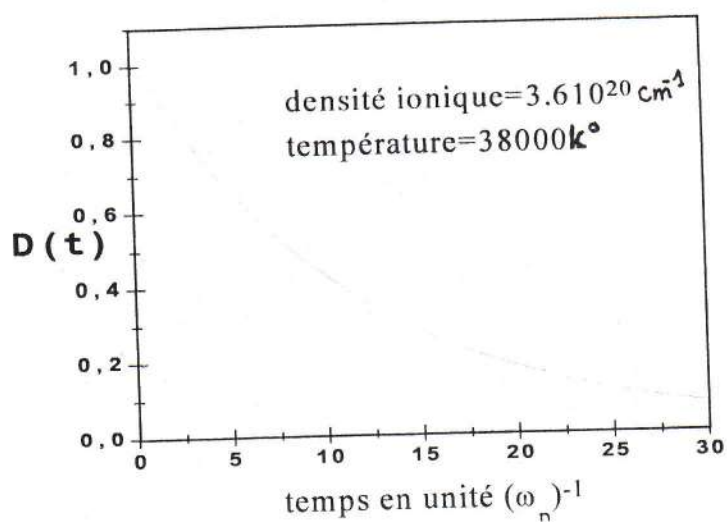


Figure 4.2: Fonction d'autocorrélation de la vitesse pour un plasma à une composante ($Z=1$) dans le cas de $\Gamma = 0.5$

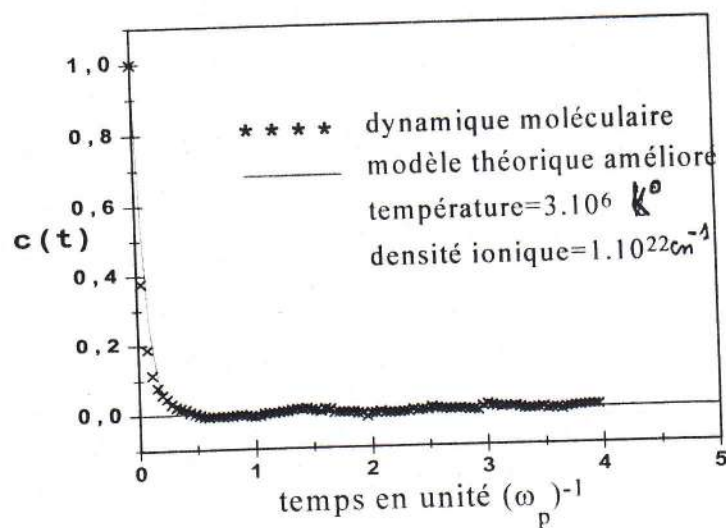


Figure 4.3: Fonction d'autocorrélation du champ pour un plasma à deux composantes ($\text{H}^+ 50\%, \text{He}^{+2} 50\%$) dans le cas de $\Gamma = 0.02$

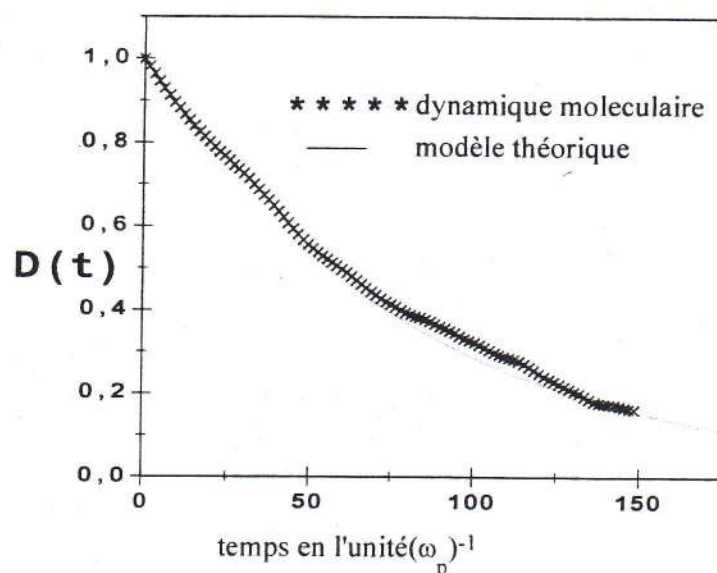


Figure 4.4: Fonction d'autocorrélation des vitesses pour un plasma à deux composantes ($H^{+1}50\%, He^{+2}50\%$) dans le cas de $\Gamma = 0.02$

4.3 Application au calcul des profils de raies spectrales dans les plasmas: cas de la Lyman α

4.3.1 Introduction

La spectroscopie est la technique de diagnostic la plus puissante utilisée couramment par les physiciens des plasma. Le principal but de la spectroscopie est l'étude du rayonnement émis par un milieu partiellement ou totalement ionisé. celui ci dépend alors non seulement des propriétés d'un émetteur (impureté), mais aussi des propriétés du plasma qui l'entoure. Elle est utilisée notamment dans les domaines suivants:

- Les lasers X: l'étude de ses problèmes exige donc à la fois des mesures spectrales de haute résolution et des profils théoriques avec toute leurs structure complexes.

· La fusion par confinement inertiel: la spectroscopie est le seul outil de diagnostic de densité, dans le cas d'une bille.

· L'astrophysique: l'étude des raies de l'hélium dans l'univers est notamment d'une grande importance dans l'étude de systèmes astrophysiques (les étoiles).

· Les plasmas froids de laboratoire: un plasma créée par des décharges électriques dans les gaz, qui joue un rôle essentiel dans l'analyse des plasmas chauds. Leur intérêt provient de ce qu'il permettent de valider les modèles théoriques dans des cas où les paramètres du plasma sont en général bien maîtrisés et connus.

Dans tous ces domaines on remarque que l'étude du rayonnement émis par les plasmas est vraiment majeur pour la compréhension des phénomènes physiques ayant lieu dans ces milieux. On va voir qu' à partir de la fonction de corrélation du microchamp, qui est calculée au début de ce chapitre, on peut obtenir le profil de raies tenant compte des effets dynamiques

4.3.2 Formule de profil de raies de la série de Lyman α sans structure fine:

Le profil de raie se calcule à partir de la transformé de Fourier de la fonction de corrélation du dipole $c(t)$ [37]. Celle ci est donnée dans l'approximation dipolaire par:

$$c(t) = \sum_{\alpha, \beta, \alpha', \beta'} \vec{d}_{\alpha\beta} \{ \langle \beta | T_b(t, 0) | \beta' \rangle \langle \alpha | T_a(t, 0) | \alpha' \rangle^* \}_{\text{moy}} \vec{d}_{\alpha'\beta'} \quad (4.40)$$

La somme est effectuée sur tous les états α, α' ...et β, β' ...des niveaux respectivement supérieurs et inférieurs T_a, T_b font évoluer respectivement ces états supérieurs et

inférieurs et le symbole $\{\dots\}_{\text{moy}}$ signifié une moyenne statistique, que nous pouvons aussi écrire comme [12]¹:

$$c(t) = \frac{1}{3} |\langle 21 | d^1 | 10 \rangle|^2 \exp((\phi_e + \frac{i}{\hbar} E_2)t) \{c_0(t) + 2c_1(t)\} \quad (4.41)$$

où ϕ_e représente l'opérateur de collision électronique et E_2 le facteur de phase, énergie du niveau 2.

$$\begin{aligned} c(t) = & \frac{1}{3} |\langle 21 | d^1 | 10 \rangle|^2 \exp((\phi_e + \frac{i}{\hbar} E_2)t) \cdot \\ & \left\{ 1 + \frac{2 \left(\int_0^t d\tau E_-(\tau) \right)^2 + \left(\int_0^t d\tau E_0(\tau) \right)^2}{\left(\int_0^t d\tau E_+(\tau) \right)^2 + \left(\int_0^t d\tau E_0(\tau) \right)^2 + \left(\int_0^t d\tau E_-(\tau) \right)^2} + \right. \\ & \left. \frac{2 \left(\int_0^t d\tau E_+(\tau) \right)^2 + \left(\int_0^t d\tau E_0(\tau) \right)^2}{\left(\int_0^t d\tau E_-(\tau) \right)^2 + \left(\int_0^t d\tau E_0(\tau) \right)^2 + \left(\int_0^t d\tau E_-(\tau) \right)^2} \right\} \times \\ & \cos \left[\frac{D}{\hbar} \sqrt{\left(\int_0^t d\tau E_+(\tau) \right)^2 + \left(\int_0^t d\tau E_0(\tau) \right)^2 + \left(\int_0^t d\tau E_-(\tau) \right)^2} \right]. \quad (4.42) \end{aligned}$$

Cette formule est une généralisation d'une formule connue pour des champs statiques [38] (l'approximation quasi-statique)². Puisqu'il n'y a pas de direction privilégiée dans l'espace pour le champ électrique, on peut écrire [29]:

$$\begin{aligned} \left\langle \left(\int_0^t d\tau \vec{E}_+(\tau) \right)^2 \right\rangle &= \left\langle \left(\int_0^t d\tau \vec{E}_-(\tau) \right)^2 \right\rangle = \left\langle \left(\int_0^t d\tau \vec{E}_0(\tau) \right)^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{3} \left\langle \int_0^t d\tau' \int_0^t d\tau \vec{E}(\tau) \cdot \vec{E}(\tau') \right\rangle = \frac{1}{3} C(t) \quad (4.43) \end{aligned}$$

¹Les formules sont données par la mécanique quantique.

²Quand les particules se déplacent suffisamment lentement.

$C(t)$ est la fonction d'autocorrélation du microchamp donc:

$$\begin{aligned}
 c(t) &= \frac{1}{3} |\langle 21 | d^1 | 10 \rangle| \exp \left(\left(\phi_e + \frac{i}{\hbar} E_2 \right) t \right) \left\{ 2 + \cos \left[\frac{DE(0)}{\hbar} \sqrt{C(t)} \right] \right\}_{\text{moy}} \\
 &= \frac{1}{3} |\langle 21 | d^1 | 10 \rangle| \exp \left(\left(\phi_e + \frac{i}{\hbar} E_2 \right) t \right) \left\{ 2 + \cos \left[\frac{DE(0)}{\hbar} \sqrt{\sum_{i=1}^3 C_i \exp(Z_i t)} \right] \right\}_{\text{moy}} \quad (4.44)
 \end{aligned}$$

Donc on obtient le profil de raies dans le cas dynamique de la raie Lyman α en prenant la transformée de Fourier de l'équation (4.44).

4.4 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre un modèle de calcul des fonctions de corrélation de la vitesse et du champ. Les courbes montrent qu'il y'a un bon accord entre notre modèle théorique et la dynamique moléculaire pour les deux types de plasma.

Les expressions (4.22) et (4.23) que nous avons obtenues pour les différentes fonctions d'autocorrélation de la vitesse et du champ, sont très importantes: la simplicité de la forme de ces expressions donne l'accès à un calcul très rapide de ces fonctions. Ceci est sans doute un important progrès dans le développement des modèles de calcul des profils de raies tenant compte des effets de la dynamique des ions.

Le coefficient de self diffusion utilisé comme un paramètre important dans notre calcul, est déterminé à partir de l'approximation "disconnected" pour les deux cas de couplage et pour les deux types de plasma.

Enfin nous avons présenté le calcul des profils de raies Lyman α dans le cas de la dynamique des ions. Ces profils sont affectés par la fonction d'autocorrélation du champ électrique [38]. Si nous prenons la transformée de Fourier de la fonction de corrélation du champ dans l'expression (4.44), nous obtenons le profil de raies en présence d'ions dynamiques.

Conclusion et Perspectives

Nous avons présenté dans cette thèse deux travaux, concernant le calcul du coefficient de transport self diffusion dans le cas d'un plasma à une composante[4] et le cas d'un plasma à deux composantes. Ensuite nous avons calculé la fonction d'autocorrélation des champs puis celle des vitesses dans les deux cas.

Dans le premier chapitre, nous avons rappelé les différentes propriétés dynamiques et statiques, en particulier nous avons mis le point sur:

- La fonction de corrélation temporelle [16], qui donne une idée sur la dynamique de la variable considérée (la vitesse, le champ, etc...) dont l'intégrale sur tout l'axe des temps ($t \geq 0$) est liée à des propriétés macroscopiques intéressantes tant pour la mécanique des fluides que pour le diagnostic des plasmas par l'intermédiaire du spectre de raies. Celui-ci, dans l'approximation dipolaire, dépend directement de la fonction de corrélation temporelle du micro-champ électrique subit par la charge test. Et nous avons vu comment au courant de cette thèse comment nous avons dérivé celle-ci à partir de la connaissance du coefficient de self diffusion.

- Les facteurs de structure dynamiques et statiques avec la fonction de distribution radiale, qui entrent dans notre modèle de calcul théorique, qui sont aussi très intéressants dans plusieurs calculs et développement, comme par exemple le calcul des propriétés thermodynamiques.

Dans le deuxième et troisième chapitre nous avons bâti un modèle théorique basé sur deux principales approximations pour les deux types de plasma à savoir:

- L'approximation disconnected

Elle consiste à supposer que durant le processus de diffusion, deux particules (impureté-ion de l'ensemble) sont indépendantes. Cette approximation conduit à une forme du coefficient de diffusion D en fonction des facteurs de structure qui se prête à un calcul non compliqué.

- L'approximation du champ moyen

Elle consiste à ne tenir compte que des interactions collectives, c'est à dire de l'action du champ moyen crée par les autres particules sur l'impureté. Grâce à cette approximation nous avons calculé les facteurs de structure.

L'approximation disconnected donne de bons résultats comparativement avec la dynamique moléculaire et dans la limite $\widehat{c}(k) \simeq -\beta\widehat{v}(k)$ ou $S(k) \rightarrow 1$, qui est valable seulement dans le cas d'un couplage faible, et aussi dans le couplage fort mais dans le cas de k petit. On peut utiliser dans l'avenir d'autres approximations pour le calcul de $\widehat{c}(k)$ valables pour toutes les valeurs de k . On peut aussi utiliser l'approximation disconnected dans l'avenir pour calculer les autres coefficients de transport comme la viscosité et la conductivité thermique qui sont reliées directement au coefficient de diffusion dans un milieu multicomposantes.

Nous avons formulé les propriétés thermodynamiques (l'équation d'état et l'énergie interne) qui peuvent être calculées à partir de l'expression semi empirique de $g(r)$ pour un plasma à deux composantes [11].

Dans le quatrième chapitre, nous avons développé le modèle théorique basé sur le formalisme des opérateurs de projection de Nakajima et Zwanzig [9], nous avons présenté notre contribution dans le calcul des coefficients D_i dans la forme exponentielle de la fonc-

tion d'autocorrélation de la vitesse $D(t)$. Ceci nous a permis d'extraire une forme analytique pour les fonctions d'autocorrélation du champ électrique et de la vitesse[10]. En utilisant une forme analytique ou semi-empirique pour les fonctions de distribution des paires, nos résultats de calcul par la dynamique moléculaire de ces deux fonctions sont comparées à ceux du modèle théorique amélioré. Nous avons constaté qu'il y a une bonne concordance entre les courbes théoriques et celles obtenues avec la dynamique moléculaire. La connaissance du coefficient de self diffusion par d'autres moyens indépendantes de la fonction de corrélation de la vitesse et indépendantes de la simulation numérique comme le modèle de l'approximation disconnected nous offre la possibilité à un accès rapide aux fonctions de corrélation temporelles. Celles ci sont utiles pour améliorer les modèles de calcul des profils des raies tenant compte des effets dynamiques.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] B. Held, Physique Des Plasmas froids, Masson Paris (1994)
- [2] M. Baus et J. P. Hansen, Physics reports 59, 1 (1980).
- [3] J.P. Hansen, G. M. Torrie et P. Viellefosse, Phys. Rev. A 16, 2153 (1977).
- [4] H. Gould, G. F. Mazenko, Phys. Rev. A 15, 15 (1976).
- [5] J. Wallenborn, M. Baus, Phys. Rev. A 18, 1737 (1978).
- [6] J. Hansen, L. Sjogren, Phys. Fluids 25, 617 (1982).
- [7] J. P. Hansen, I. R. Macdonald et E. L Pollock, phys, Rev. A 11, 1025 (1975).
- [8] D. B. Boeker et E. L. Pollock, Phys. Rev, A 36, 1779 (1987).
- [9] R. Jancel; Foundations of classical and quantum statistical mechanics; Pergamon Press
(1969)
- [10] M. A. Berkovsky, J. W. Dufty, A. Calisti, R. Stamm, et B. Talin; Phy. Rev. E 1996.
- [11] B. Held, P. Pignolet, J. Phys. 47,437 (1986).
- [12] T.Meftah thèse de Doctrat, université de Provence Marseille(France) Mars1996.

- [13] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, B. Rolet, 'Eléments de Physique Statistique', Hermann, Editeurs Des Sciences Et Des Arts (1985).
- [14] R.K. Pathria, 'Statistical Mechanics'. Pergamon Press, (1980)
- [15] E. Guyon, J. P. Hulin, L. petit, 'Hydrodynamique physique'. InterEditions CNRS (1994).
- [16] J.P. Hansen et I. R. Macdonald, Theory of simple liquides, Academic press (1976).
- [17] J.P. Hansen, Phys. Rev. A8, 3096 (1973).
- [18] E. L. pollock et J. C. Weisheit, spectral Line Shapes, Vol.3, Walter de Gruyter et Co. (Berlin New-york, 1985), p. 181.
- [19] C. A. Iglesias, J. A. Lebowitz et D. MacGowan, Phys. Rev. A 28, 1667 (1983).
- [20] N. K. Aliladi, physics Reports 57, (1980).
- [21] P. Debye et E. Huckel, Z. Phys, 24, 185 (1923).
- [22] M. Abramowitz et I. A. Stegun, 'Handbook Of Mathematical Functions', Dover Publications, INC, New York (1964).
- [23] R. Abe, Prog. Theor. phys. 22, 213 (1959).
- [24] C. W. Hirt, Phys. Fluids 8, 693 (1965).
- [25] S. G. Brush, H. L. Sahlin et E. Teller, Bull. Am. Phys. Soc. 10, 232 (1965).
- [26] W. L. Slattery, G. D. Doolen et H. E. De Witt, Phys. Rev. A 26, 2255 (1982).

- [27] C. A. Iglesias, *phys. Rev A* 27, 2705 (1983).
- [28] H. Gould et J. Tobochnik, *Theories of Classical Gases And Liquids*, (1998).
- [29] Donald A. Maquarrie, "statiscal Machanics", academie Harper and Row
Publishers, (1976).
- [30] S. Milake, S. Tanaka, X. Z. Yan et S. Ichimaru, *Phys. Rev. A* 32, 1768 (1985).(I)
- [31] S. Milake, S. Tanaka, X. Z. Yan et S. Ichimaru, *Phys. Rev. A* 32, 17675(1985).(II)
- [32] S. Milake, S. Tanaka, X. Z. Yan et S. Ichimaru, *Phys. Rev. A* 32, 1779(1985).(III)
- [33] J. w. Dufty et L. Zagaib, *phys. Rev. A* 44, 2612 (1991).
- [34] A. Alastucey, J. Lebowitz et D. Levesque, *Phys. Rev. A* 43,2673 (1991).
- [35] J. w. Dufty et L. Zagaib, *phys. Rev. E* 47, 2958 (1993).
- [36] G. D. Harp et B. J.Berne, *Phys. Rev. A* 2, 975 (1970).
- [37] D.Baranger, dans *atomic and molecular processes* (édité par D. R. Bates), Academic
press, New York(1962).
- [38] R. Stamm, B. Talin, E. L. pollock and C. A. Iglesias, *Phys. Rev, A* 34 4144(1986).
- [39] ya.P.Terletski, *Physique Statistique*, Les Presses de l'Université du Québec (1975).
- [40] K. Huang, *Statistical Mechanics*; Pergamon Press.(1963)
- [41] S. Ichimaru, *Basic Principles of plasma physics*, w. A. Benjamin INC, (1973)
- [42] J. F. Springer, M. A. Pokrant et F. A. Stevens, *J. Chem. Phys.* 58, 4863 (1973).

- [43] B. R. Bernu, J. P. Hansen et R. Hazighi, Phys. Lett. 100A, 28 (1984).
- [44] J. L. Delcroix, A. Bers 'Physique Des Plasmas', InterEditions CNRS Editions (1994).
- [45] G. Zwicknagel et al, Physics Reports 309 (1999).
- [46] R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume; Stat. Phys. II, Nonequilibrium Statistical Mechanics Spring verlag (1991)
- [47] G. El habib, ENS Kouba Thèse de Magister (1996).

Appendice A

Fonction de distribution de paires semi-empirique

Considérons un système à deux espèces d'ions de charges $Z_a e$ et $Z_b e$ et de densités n_a et n_b , en équilibre thermodynamique à la température T_i . Les fonctions de paires pour les couples (a-a) et (a-b) sont données par les formules semi-empiriques [11]

$$g_{aa}(y) = \exp \left[-\frac{\Gamma_{aa}}{y} + H_{aa}(y) \right] \quad (\text{A.1})$$

$$g_{ab}(y) = \exp \left[-\frac{\Gamma_{ab}}{y} + H_{ab}(y) \right] \quad (\text{A.2})$$

où le paramètre électronique Γ_e est défini en fonction du couplage Γ comme suit:

$$\Gamma = \frac{\bar{Z}^2}{\bar{Z}^{1/3}} \Gamma_e \quad (\text{A.3})$$

et les autres paramètres de couplage sont donnés de la même façon, c'est à dire comme:

$$\Gamma_{aa} = \frac{Z_a^2}{\bar{Z}^{1/3}} \Gamma_e \quad (\text{A.4})$$

$$\Gamma_{ab} = \frac{Z_a Z_b}{\bar{Z}^{1/3}} \Gamma_e \quad (\text{A.5})$$

et où la variable y représente la position de l'ion adimensionnée relativement au rayon sphérique a :

$$y = r/a \quad (\text{A.6})$$

et

$$\bar{Z} = Z_a + p(Z_b - Z_a) \quad (\text{A.7})$$

$$\bar{Z}^2 = Z_a^2 + p(Z_b^2 - Z_a^2) \quad (\text{A.8})$$

et p est la proportion d'ions de l'espèce b :

$$p = \frac{c_b}{c_a + c_b} \quad (\text{A.9})$$

c_a et c_b sont les concentrations. Les potentiels écrantés ont la forme empirique :

$$H_{aa}(y) = \frac{H_{aa}(0)}{\frac{H_{aa}(0)}{\Gamma_{aa}} y + F(y)} \quad (\text{A.10})$$

$$H_{ab}(y) = \frac{H_{ab}(0)}{\frac{H_{ab}(0)}{\Gamma_{ab}} y + F(y)} \quad (\text{A.11})$$

les potentiels écrantés à l'origine $H_{aa}(y)$ et $H_{ab}(y)$ sont donnés par les relation suivant:

$$H_{ij}(0) = \frac{b_1(i,j)K + b_2(i,j)\Gamma_e^{1/2}}{1 + b_3(i,j)\Gamma_e^{1/2} + b_4(i,j)\Gamma_e} \Gamma_e^{3/2}. \quad (\text{A.12})$$

les autres paramètres sont donnés de la même manière :

$$K = \left[\frac{15}{2(2\pi)^{1/2}} \right]^{1/2} \quad (\text{A.13})$$

$$K^e(i, j) = Z_i Z_j \tilde{Z} \quad (\text{A.14})$$

$$K_1^\infty(i, j) = \{0.9\bar{Z}^{1/3} [(Z_i + Z_j)^{2/3} - Z_i^{5/3} - Z_j^{5/3}] + 0.2843.\bar{Z}^{2/3} \quad (\text{A.15})$$

$$[(Z_i - Z_j)^{4/3} - Z_i^{4/3} - Z_j^{4/3}]\} \quad (\text{A.16})$$

$$K_2^\infty(i, j) = 0.4600.\bar{Z}^{-2/3} [(Z_i + Z_j)^{2/3} - Z_i^{2/3} - Z_j^{2/3}] \quad (\text{A.17})$$

Donc les fonctions $b_1(i, j)$, $b_2(i, j)$, $b_3(i, j)$ et $b_4(i, j)$ sont données en fonction des paramètres précédents de cette façon:

$$b_1(i, j) = K^e(i, j) \quad (\text{A.18})$$

$$b_2(i, j) = -[K_1^\infty(i, j)]^2 / K_2^\infty(i, j) \quad (\text{A.19})$$

$$b_3(i, j) = K.K_1^e(i, j)/K_1^\infty(i, j) \quad (\text{A.20})$$

$$b_4(i, j) = -K_1^\infty(i, j)/K_2^\infty(i, j) \quad (\text{A.21})$$

La fonction $F(y)$ attribue au potentiel une forme oscillatoire telle que :

$$F(y) = e^{-Ay} \left[\frac{\sin Bu}{Bu} - Cu \cos u \right] \quad (\text{A.22})$$

où $u = \frac{2\pi}{d} y$

$$d = \left[\frac{0.915 + 2.42\Gamma^{0.862}}{\Gamma^{0.862}} \right]^{0.58} \quad (\text{A.23})$$

$$A = \frac{1.69}{1 + 0.0012\Gamma} - 1.4e^{-0.19\Gamma} + 0.54e^{-0.32\Gamma} - 0.83e^{-1.84\Gamma} \quad (\text{A.24})$$

$$B = 0.4 + 0.5e^{-0.1062\Gamma} - 0.694e^{-0.2706\Gamma} - 0.206e^{-11.83\Gamma} \quad (\text{A.25})$$

$$C = 0.15559e^{-0.000605\Gamma} - \frac{7355.5449}{[(14.7455)^2 + \Gamma^2]} \quad (\text{A.26})$$

Les résultats numériques des fonctions de corrélation de paires par cette méthode sont en bon accord avec les résultats obtenus par la méthode de Monte carlo et HNC [11] pour tous les cas de Γ . Pour un plasma à une seule composante ionique où :

$$\Gamma = Z^{5/3}\Gamma_e, Z = Z_a = Z_b \text{ et } p = 0 \quad (\text{A.27})$$

les fonctions précédentes devient:

$$g(y) = \exp \left[-\frac{\Gamma_e}{y} + H(y) \right] \quad (\text{A.28})$$

$$H(y) = \frac{H(0)}{\frac{H(0)}{\Gamma_e} y + F(y)} \quad (\text{A.29})$$

$$H(0) = \frac{1.7298 + 7.6516\Gamma_e^{1/2}}{1 + 1.4354\Gamma_e^{1/2} + 6.3493\Gamma_e} \Gamma_e^{3/2} \quad (\text{A.30})$$

Appendice B

Relation entre $C(t)$ et $D(t)$

La fonction de corrélation de vitesse $D(t)$ est donnée par la relation suivant:

$$D(t) = \frac{\langle \vec{V}_0(t) \cdot \vec{V}_0(0) \rangle}{\langle \vec{V}_0(0) \cdot \vec{V}_0(0) \rangle} \quad (\text{B.1})$$

Dérivons l'équation précédente par rapport à la variable temps t :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} D(t) &= \frac{1}{\langle \vec{V}_0^2 \rangle} \left\langle \frac{d\vec{V}_0(t)}{dt} \cdot \vec{V}_0(0) \right\rangle \\ &= \frac{1}{\langle V_0^2 \rangle} \frac{q_0}{m_0} \langle \vec{E}(t) \cdot \vec{V}_0(0) \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

En utilisant la propriété de translation du temps, cette dernière relation devient:

$$\frac{d}{dt} D(t) = \frac{1}{\langle V_0^2 \rangle} \frac{q_0}{m_0} \langle \vec{E}(0) \cdot \vec{V}_0(-t) \rangle \quad (\text{B.3})$$

Dérivons l'équation une seconde fois l'équation (B.3)

$$\begin{aligned}
\frac{d^2}{dt^2} D(t) &= \frac{1}{\langle V_0^2 \rangle} \frac{q_0}{m_0} \left\langle \vec{E}(0) \cdot \frac{d}{dt} \vec{V}_0(-t) \right\rangle = -\frac{1}{\langle V_0^2 \rangle} \frac{q_0^2}{m_0^2} \left\langle \vec{E}(0) \cdot \vec{E}(-t) \right\rangle \\
&= -\frac{1}{\langle V_0^2 \rangle} \frac{q_0^2}{m_0^2} \left\langle \vec{E}(t) \cdot \vec{E}(0) \right\rangle = -\frac{\langle E^2 \rangle}{\langle V_0^2 \rangle} \frac{q_0^2}{m_0^2} \frac{\langle \vec{E}(t) \cdot \vec{E}(0) \rangle}{\langle \vec{E}(0) \cdot \vec{E}(0) \rangle}
\end{aligned} \tag{B.4}$$

Sachant que $\langle V_0^2 \rangle = \frac{3}{\beta m_0}$ on peut écrire l'équation (B.4) comme:

$$\frac{d^2}{dt^2} D(t) = \omega_0^2 C(t) \tag{B.5}$$

$$\omega_0^2 = \frac{\beta q_0^2}{3m_0^2} \langle E^2 \rangle \tag{B.6}$$

Appendice C

Etablissement de l'équation de D(t)

Nous avons vu dans le chapitre 4, que la fonction de corrélation de la vitesse obéit à une équation générale (4.6). Cette équation est établie à l'aide du formalisme de l'opérateur de projection de Zwanzig [9] dont nous allons rappeler les étapes essentielles. On s'intéresse à une variable dynamique (position, vitesse, champ...) $y_\alpha(t)$ obéissant à:

$$y_\alpha(t) = \exp(Lt)y_\alpha(0) \equiv \exp(Lt)y_\alpha \quad (\text{C.1})$$

avec:

$$Ly_\alpha = \{y_\alpha, H\} = \frac{\partial y_\alpha}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial y_\alpha}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (\text{C.2})$$

Dérivons l'équation (C.1) par rapport au temps:

$$\frac{dy_\alpha(t)}{dt} = Ly_\alpha(t) \quad (\text{C.3})$$

Soit maintenant l'opérateur de projection défini par [10]

$$Px = y_\alpha g_{\alpha\beta}^{-1} \langle y_\beta x \rangle, \text{ avec } g_{\alpha\beta} = \langle y_\alpha y_\beta \rangle \quad (\text{C.4})$$

En appliquant cet opérateur de projection à l'équation (C.3), nous trouvons:

$$P \dot{y}_\alpha(t) = PL [Py_\alpha(t) + (1-P)y_\alpha(t)] \quad (\text{C.5})$$

Posons: $Z_\alpha(t) = Py_\alpha(t)$ et $W_\alpha(t) = (1-P)y_\alpha(t)$ et il vient que l'équation (C.5) s'écrit sous la forme suivante:

$$\dot{Z}_\alpha(t) = PLZ_\alpha(t) + PLW_\alpha(t) \quad (\text{C.6})$$

Appliquons à nouveau $(1-P)$ à l'équation (C.3):

$$\dot{W}_\alpha(t) = (1-P)LZ_\alpha(t) + (1-P)LW_\alpha(t) \quad (\text{C.7})$$

La solution formelle de cette équation est donnée par:

$$W_\alpha(t) = \exp(QLQt)W_\alpha(0) + \int_0^t \exp(QLQ(t-\tau))LPZ_\alpha(\tau)d\tau \quad (\text{C.8})$$

où

$$Q = 1 - P \quad (\text{C.9})$$

En substituant l'équation (C.8) dans (C.6), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \dot{Z}_\alpha(t) = & PLZ_\alpha(t) + PL \exp(QLQt)W_\alpha(0) + \\ & PL \int_0^t \exp(QLQ(t-\tau))LPZ_\alpha(\tau)d\tau \end{aligned} \quad (C.10)$$

Puisque Q est aussi un projecteur, on peut écrire:

$$\exp(QLQt)W_\alpha(0) = Q \exp(Lt)QW_\alpha(0) \quad (C.11)$$

or

$$QW_\alpha(0) = (1-P)^2 y_\alpha = (1-P)y_\alpha = 0 \quad (C.12)$$

car:

$$Py_\alpha = y_\gamma g_{\gamma\sigma}^{-1} \langle y_\sigma y_\alpha \rangle = y_\gamma g_{\gamma\sigma}^{-1} g_{\sigma\alpha} = y_\alpha \quad (C.13)$$

Ce qui donne pour l'équation (C.6):

$$\dot{Z}_\alpha(t) = PLZ_\alpha(t) + PL \int_0^t \exp(QLQ(t-\tau))LPZ_\alpha(\tau)d\tau \quad (C.14)$$

Comme: $PZ_\alpha(\tau) = P^2 y_\alpha(\tau) = Py_\alpha(\tau)$, donc:

$$P \dot{y}_\alpha(t) = PLPy_\alpha(t) + PL \int_0^t \exp(QLQ(t-\tau))LPy_\alpha(\tau)d\tau \quad (C.15)$$

ce qui se traduit par

$$P \left\{ \dot{y}_\alpha(t) - LPy_\alpha(t) - L \int_0^t \exp(QLQ(t-\tau))LPy_\alpha(\tau)d\tau \right\} = 0 \quad (C.16)$$

ou encore:

$$\dot{y}_\alpha(t) = LPy_\alpha(t) + L \int_0^t \exp(QLQ(t-\tau))LPy_\alpha(\tau)d\tau \quad (C.17)$$

Multiplions à gauche l'équation (C.17) par y_β et effectuons la moyenne thermique :

$$\langle y_\beta \dot{y}_\alpha(t) \rangle = \langle y_\beta LPy_\alpha(t) \rangle + \left\langle y_\beta L \int_0^t \exp(QLQ(t-\tau))LPy_\alpha(\tau)d\tau \right\rangle \quad (C.18)$$

Si nous posons :

$$K_{\beta\alpha}(t) = \langle y_\beta y_\alpha(t) \rangle \quad (C.19)$$

et appliquons la définition (C.4) pour le calcul de la dérivée de $K_{\beta\alpha}(t)$, nous obtenons

l'équation:

$$\begin{aligned} \frac{dK_{\beta\alpha}(t)}{dt} &= \langle y_\beta Ly_\alpha(t) \rangle g_{\gamma\sigma}^{-1} \langle y_\sigma y_\alpha(t) \rangle + \\ &\quad \int_0^t \langle y_\beta L \exp(QLQ(t-\tau))Ly_\gamma \rangle g_{\gamma\sigma}^{-1} \langle y_\sigma y_\alpha(\tau) \rangle d\tau \\ &= \Omega_{\beta\sigma} K_{\sigma\alpha}(t) + \int_0^t M_{\beta\sigma}(t-\tau) K_{\sigma\alpha}(\tau) d\tau \end{aligned} \quad (C.20)$$

où:

$$\Omega_{\beta\sigma} = \langle y_\beta L y_\gamma \rangle g_{\gamma\sigma}^{-1} \text{ et } M_{\beta\sigma}(u) = \langle y_\beta L \exp(QLQ(u)) L y_\gamma \rangle g_{\gamma\sigma}^{-1} \quad (\text{C.21})$$

En choisissant la matrice $[g]$ comme [10]:

$$g_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} g_{\alpha\alpha}, \text{ avec } g_{11} = \langle V_0^2 \rangle \text{ et } g_{22} = \langle E^2 \rangle \quad (\text{C.22})$$

On peut montrer les résultats suivants:

$$\Omega_{11} = \Omega_{22} = 0, \quad \Omega_{12} = -\frac{Z_0 e}{m_0}, \quad \Omega_{21} = \frac{Z_0 e}{m_0} \frac{\langle E^2 \rangle}{\langle V_0^2 \rangle}$$

et

$$M_{11}(u) = M_{22}(u) = M_{21}(u) = 0, \quad M_{22}(0) = -(\omega_1^2 - \omega_0^2)$$

avec:

$$\omega_1^2 = \frac{\langle \dot{E}^2 \rangle}{\langle E^2 \rangle} \quad (\text{C.23})$$

En posant $\beta = 2$ dans l'équation (C.20) et utilisant les résultats (C.21), nous obtenons:

$$\frac{dK_{2\alpha}(t)}{dt} = \Omega_{21} K_{1\alpha}(t) + \int_0^t M_{22}(t-\tau) K_{2\alpha}(\tau) d\tau \quad (\text{C.24})$$

Sachant qu'on a :

$$\begin{aligned}\frac{dK_{1\alpha}(t)}{dt} &= \frac{d}{dt} \langle y_1 y_\alpha(t) \rangle = \frac{d}{dt} \langle y_1(-t) y_\alpha(0) \rangle \\ &= -\frac{Z_0 e}{m_0} \langle y_2 y_\alpha(t) \rangle = -\frac{Z_0 e}{m_0} K_{2\alpha}(t)\end{aligned}\quad (\text{C.25})$$

C'est à dire :

$$K_{2\alpha}(t) = -\frac{m_0}{Z_0 e} \frac{dK_{1\alpha}(t)}{dt} \quad (\text{C.26})$$

On obtient en substituant l'équation (C.26) dans (C.24) et posant enfin $\alpha = 1$, on trouve l'équation (4.6)

$$\left\{ \frac{d^2}{dt^2} + \frac{(Z_0 e)^2}{m_0^2} \frac{\langle E^2 \rangle}{\langle V^2 \rangle} \right\} D(t) - \int_0^t M_{22}(t-\tau) \frac{dD(\tau)}{d\tau} d\tau = 0 \quad (\text{C.27})$$

Appendice D

Forme de λ

La forme précise de λ est fixée par l'expression de Geen-Kubo

$$\beta m_0 D = \int_0^{\infty} dt D(t) \quad (\text{D.1})$$

soit

$$F(t) = \int_0^t dt' D(t') \quad (\text{D.2})$$

$$\hat{F}(Z) = \int_0^{\infty} dt e^{-Zt} F(t) = \frac{1}{Z} \hat{D}(Z) \quad (\text{D.3})$$

or

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F(t) = F(\infty) = \lim_{t \rightarrow 0} Z \hat{F}(Z) = \lim_{t \rightarrow 0} \hat{D}(Z)$$

avec

$$F(\infty) = \int_0^{\infty} dt D(t) \quad (\text{D.4})$$

alors, avec l'utilisation de la formule (4.9) on peut écrire que:

$$\beta m_0 D = \lim_{Z \rightarrow 0} \widehat{D}(Z) = \lim_{Z \rightarrow 0} \frac{\widehat{M}(z)}{\omega_0^2} = \frac{M(0)}{\lambda \omega_0^2} \quad (\text{D.5})$$

et la fonction de mémoire à $t=0$ et donnée par la relation suivante:

$$M(0) = \omega_1^2 - \omega_0^2 \quad (\text{D.6})$$

Si nous remplaçons l'équation (D.6) dans (D.5), on trouve

$$\lambda = (\omega_1^2 / \omega_0^2 - 1) / \beta m_0 D \quad (\text{D.7})$$

Appendice E

Calcul de ω_0 et ω_1

Dans le modèle ω_0 est défini par:

$$\omega_0^2 = \left(\frac{\beta q_0^2}{3m_0} \right) \langle E^2 \rangle = - \left(\frac{\beta q_0}{3m_0} \right) \langle \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_0 U \rangle \quad (\text{E.1})$$

où U est l'énergie potentielle d'interaction entre l'ion impureté et le plasma. Une intégration par partie de l'équation précédente donne:

$$\omega_0^2 = - \left(\frac{q_0}{3m_0} \right) \langle \nabla_0 \vec{E} \rangle \quad (\text{E.2})$$

où le potentiel crée par un ion de charge $Z_j e$ à une distance r , comme nous avons dit, est le potentiel de Debye:

$$V = (Z_j e / r) \exp(-\bar{K}_D r) \quad (\text{E.3})$$

où $\bar{K}_D^2 = \bar{\lambda}_D^{-2}$ est l'effet d'écran moyen entre la paire (ion impureté-autre ion).

La contribution en champ du fond continu dans le cas des interactions écrantées est nulle.

$$\vec{\nabla}_0 \cdot \vec{E}_e = 0 \quad (\text{E.4})$$

avec l'utilisation de la distribution de Gibbs et la définition de la fonction de corrélation de paire $g(r)$, on aura que:

$$\omega_0^2 = -\frac{1}{3} \sum_{\alpha} \left(\frac{n_{\alpha} q_0}{m_0} \right) \int d\vec{r} \vec{\nabla}_0 \cdot \vec{e}_{\alpha}(\vec{r}) g_{0\alpha}(r) \quad (\text{E.5})$$

où $g_{0\alpha}(r)$ est la fonction de distribution radiale pour la probabilité de trouver un ion du plasma d'espèce α à une distance r de l'ion impureté.

Le deuxième paramètre est ω_1^2 qui est défini par l'équation (4.10):

$$\omega_1^2 = \left(\frac{\beta q_0}{3m_0 \omega_0^2} \right) \langle \dot{E}^2(0) \rangle = \left(\frac{\beta q_0^2}{3m_0 \omega_0^2} \right) \left(\frac{dE_k(0)}{dt} \frac{dE_k(0)}{dt} \right) \quad (\text{E.6})$$

où l'indice répété, ici k , désigne une sommation sur k . En effet calculons $\frac{dE_k(0)}{dt}$,

$$\begin{aligned} \frac{dE_k(0)}{dt} &= \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N \frac{de_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{dt} + \frac{dE_b^k(\vec{r}_0)}{dt} \\ &= \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N \frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_i} \frac{d(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{dt} + \frac{\partial E_b^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_0} \frac{d\vec{r}_0}{dt} \\ &= \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N \frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_i} \frac{d(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{dt} + \frac{\partial E_b^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_0} \frac{d\vec{r}_0}{dt} \end{aligned}$$

ou encore après quelques arrangements:

$$\begin{aligned}
 \frac{dE_k(0)}{dt} &= \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N \frac{de_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{dt} \cdot (\vec{V}_i - \vec{V}_0) + \vec{v}_0 \cdot \frac{dE_b^k(\vec{r}_0)}{dt} \\
 &= - \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N (\vec{V}_i - \vec{V}_0) \vec{\nabla}_{\vec{r}_0} e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0) + \vec{V}_0 \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_0} E_b^k(\vec{r}_0) \\
 &= - \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N \vec{V}_i \vec{\nabla}_{\vec{r}_0} e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0) + \vec{V}_0 \cdot \left[\sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N \vec{\nabla}_{\vec{r}_0} e_{\alpha}^k(\vec{r}_{i0}) + \vec{\nabla}_{\vec{r}_0} E_b^k(\vec{r}_0) \right] \\
 &= - \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N \vec{V}_i \vec{\nabla}_{\vec{r}_0} e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0) + \vec{V}_0 \vec{\nabla}_{\vec{r}_0} \left[\sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N e_{\alpha}^k(\vec{r}_{i0}) + E_b^k(\vec{r}_0) \right] \\
 &= - \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N \vec{V}_i \vec{\nabla}_{\vec{r}_0} e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0) + \vec{V}_0 \cdot \sum_{i=1}^N \vec{\nabla}_{\vec{r}_0} E_k(\vec{r}_0)
 \end{aligned}$$

ou sous une écriture indicielle:

$$\frac{dE_k(0)}{dt} = \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N \vec{V}_i^j \frac{de_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{d\vec{r}_{0j}} + \vec{V}_0^1 \cdot \frac{dE^k(\vec{r}_0)}{dt}$$

Effectuons maintenant le produit

$$\begin{aligned}
 \left\langle \frac{dE_k(0)}{dt} \cdot \frac{dE_k(0)}{dt} \right\rangle &= \sum_{\alpha} \sum_{m=1}^N \sum_{i=1}^N \left\langle \vec{V}_i^j \vec{V}_m^h \frac{\partial E_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \cdot \frac{\partial E_{\alpha}^k(\vec{r}_m - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0h}} \right\rangle + \\
 &\quad \left\langle \vec{V}_0^1 \frac{\partial E^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \cdot \vec{V}_0^F \frac{\partial E^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0h}} \right\rangle + \text{un terme qui est nul} \quad (E.7)
 \end{aligned}$$

la première moyenne n'est différente de zéro que si $j = h$ et $i = m$, ceci se traduit

par:

$$\begin{aligned}
 \left\langle \left(\frac{dE_k(0)}{dt} \right)^2 \right\rangle &= \sum_{\alpha} \sum_{m=1}^N \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^N \sum_{h=1}^3 \delta_{jh} \delta_{im} \left\langle (\vec{V}_i^j)^2 \right\rangle \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle \\
 &\quad \sum_{F=1}^3 \sum_{l=1}^3 \delta_{Fl} \left\langle (\vec{V}_0^l)^2 \right\rangle \left\langle \left(\frac{\partial E^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0l}} \right)^2 \right\rangle \quad (E.8)
 \end{aligned}$$

les vitesses qui apparaissent au premier terme du second membre sont celles des électrons alors que celle du second terme est la vitesse de l'ion impureté.

$$\left\langle \left(\frac{dE_k(0)}{dt} \right)^2 \right\rangle = \sum_{\alpha} \frac{1}{\beta m_{\alpha}} \left[\sum_{i=1}^N \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle + \frac{m_{\alpha}}{m_0} \left\langle \left(\frac{\partial E^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{01}} \right)^2 \right\rangle \right] \quad (\text{E.9})$$

ce qui donne en définitive l'expression:

$$\omega_1^2 = \sum_{\alpha} \frac{\beta q_0^2}{3m_0\omega_0^2} \frac{1}{\beta m_{\alpha}} \left[\sum_{i=1}^N \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle + \frac{m_{\alpha}}{m_0} \left\langle \left(\frac{\partial E^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{01}} \right)^2 \right\rangle \right] \quad (\text{E.10})$$

ou encore:

$$\omega_1^2 = \sum_{\alpha} \frac{q_0^2}{3m_0^2\omega_0^2} \left[\frac{m_0}{m_{\alpha}} \sum_{i=1}^N \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle + \left\langle \left(\frac{\partial E^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{01}} \right)^2 \right\rangle \right] \quad (\text{E.11})$$

Remarquons que le seconde terme du second membre peut s'écrire autrement:

$$\frac{\partial E^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{01}} = \frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{01}} + \frac{\partial E_b^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{01}} = \frac{\partial E^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{01}} + \frac{1}{3} \delta_{k1} \vec{\nabla}_{\vec{r}} E_b^k(\vec{r}_0) \quad (\text{E.12})$$

et que $\vec{\nabla}_{\vec{r}_0} \vec{E}_B(\vec{r}_0) = 0$, l'expression précédente devient comme:

$$\left\langle \left(\frac{\partial E^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{01}} \right)^2 \right\rangle = \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{01}} \right)^2 \right\rangle \quad (\text{E.13})$$

$$\omega_1^2 = \sum_{\alpha} \frac{q_0^2}{3m_0^2\omega_0^2} \left[\frac{m_0}{m_{\alpha}} \sum_{i=1}^N \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle + \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{01}} \right)^2 \right\rangle \right] \quad (\text{E.14})$$

ou bien:

$$\omega_1^2 = \omega_0^2 + \sum_{\alpha} \frac{q_0^2}{3m_0^2\omega_0^2} \left[\frac{m_0}{m_{\alpha}} \sum_{i=1}^N \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle + \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{01}} \right)^2 \right\rangle - \frac{3m_0^2\omega_0^4}{q_0^2} \right] \quad (\text{E.15})$$

$$\begin{aligned} \omega_1^2 = \omega_0^2 + \sum_{\alpha} \frac{q_0^2}{3m_0^2\omega_0^2} \frac{m_0}{\mu_{0\alpha}} * \\ \left[\sum_{i=1}^N \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle + \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{01}} \right)^2 \right\rangle - \sum_{i=1}^N \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{01}} \right)^2 \right\rangle - \frac{3m_0^2\omega_0^4}{q_0^2} \right] \end{aligned}$$

En laissant tomber les trois derniers termes, nous obtenons:

$$\omega_1^2 = \omega_0^2 + \sum_{\alpha} \frac{q_0^2}{3\mu_{0\alpha}m_0^2\omega_0^2} \sum_{i=1}^N \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle \quad (\text{E.16})$$

ici $\mu_{0\alpha}$ est la masse réduite du couple (ion de l'espèce α - ion impureté). L'expression précédente contient N termes identiques dans la somme, si nous calculons la valeur moyenne pour un terme:

$$\left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle = \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \int d\vec{v}_0 d\vec{v}_1 \dots d\vec{v}_N \rho_{eq} \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \quad (\text{E.17})$$

et en faisant le changement de variable, où:

$$\frac{\vec{r}_i - \vec{r}_0}{2} = \vec{r} \text{ et } \frac{\vec{r}_i + \vec{r}_0}{2} = \vec{R}.$$

l'intégration sur les vitesses de l'expression (E.16), l'intégration sur $\vec{R}$ donne le volume du système V , donne:

$$\begin{aligned}
\omega_1^2 &= \omega_0^2 + \sum_{\alpha} \frac{q_0^2}{3\mu_{0\alpha}m_0^2\omega_0^2} N \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle \\
&= \omega_0^2 + \sum_{\alpha} \frac{q_0^2}{3\mu_{0\alpha}m_0^2\omega_0^2} n_{\alpha} \int d\vec{r} \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(r)}{\partial \vec{r}_j} \right)^2 \frac{V^2}{Z_{N+1}} \int d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N e^{-\beta U} \\
&= \omega_0^2 + \sum_{\alpha} \frac{q_0^2}{3\mu_{0\alpha}m_0^2\omega_0^2} n_{\alpha} \int d\vec{r} \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(r)}{\partial \vec{r}_j} \right)^2 g_{0\alpha}(r) \tag{E.18}
\end{aligned}$$

$g_{0\alpha}(r)$ la fonction de distribution de paire du couple (ion impureté-ion de l'espèce α) et finalement le paramètre ω_1^2 est donné par le relation (E.18).

Appendice F

Méthodes de calcul du coefficient de diffusion

F.1 La dynamique moléculaire:

Nous utilisons la dynamique moléculaire qui est considérée comme une technique de la simulation numérique. Elle joue le rôle de modèle de référence pour tester d'une part, les modèles théoriques et d'autre part, les résultats expérimentaux. Celle-ci consiste à résoudre les équations de Newton du mouvement afin de connaître les positions et les vitesses de chaque particule, à chaque instant.

Ces techniques de simulation numérique ont été introduites pour simuler le comportement des fluides ou des liquides. Elles ont été également utilisées pour étudier des systèmes dont le potentiel inclut des interactions à longue portée comme les plasmas, dans lesquels les interactions entre les particules chargées sont caractérisées par un potentiel de

coulomb écranté.

La simulation numérique génère des informations au niveau microscopique (positions, vitesse..) et relie ces dernières à des variables macroscopiques (pression, énergie, les coefficient de transports...). Elle nous permet aussi le calcul de certains paramètres statique (statique ou dynamique). La dynamique moléculaire permet le calcul de l'énergie potentielle de la configuration de particules et les forces s'exerçant entre elles, et particulièrement le calcul des fonctions d'autocorrélation (du champ et de la vitesse), où la méthode utilisée pour intégrer les équations du mouvement est l'algorithme de verlet. On peut calculer les positions des particules à l'instant $t + \Delta t$ à partir des positions à l'instant t et $t - \Delta t$:

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i(t) - r_i(t - \Delta t) + (\Delta t)^2 a_i(t) \quad (\text{F.1})$$

où $a_i(t)$ est donné par le relation suivante

$$a_i(t) = \ddot{r}_i(t) = \frac{1}{m} \sum_{j \neq i} F_{ji}(t) \quad (\text{F.2})$$

$F_{ji}(t)$ est la force exercée par la particule j sur la particule i

F.2 La réponse linéaire:

La théorie la plus couramment utilisée pour faire des mesures sur un système est de le soumettre à une force, et d'observer comment il y répond, pour que le résultat

de l'expérience reflète convenablement les propriétés intrinsèques du système. Le champ extérieur doit être suffisamment faible pour que l'effet de la perturbation n'altère pas la nature de celui-ci. On est alors dans le domaine de la réponse linéaire.

L'objet de la théorie de la réponse linéaire est le calcul explicite en régime linéaire des fonctions de réponse, des susceptibilités généralisées et des fonctions de relaxation. Ces différentes quantités, reliées les unes aux autres, s'expriment en termes de fonction de corrélation de variables dynamiques à l'équilibre thermodynamique. La connaissance de la réponse linéaire permettra ensuite de calculer les valeurs moyennes des diverses grandeurs physiques. Nous considérons ici un système physique initialement à l'équilibre thermodynamique, décrit par un hamiltonien H_0 et que l'on perturbe par un champ extérieur $a(t)$, la perturbation est décrite par l'hamiltonien:

$$H_1(t) = -a(t)A \quad (\text{F.3})$$

$a(t)$ est couplé à une grandeur thermodynamique A , et on cherche à connaître la réponse d'une grandeur B au champ $a(t)$ conjugué de la grandeur A . Dans le domaine linéaire, la moyenne hors d'équilibre de B peut alors s'écrire, en toute généralité;

$$\langle B(t) \rangle_a = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\chi}_{BA}(t-t') a(t') dt' \quad (\text{F.4})$$

$\tilde{\chi}_{BA}(t)$ la fonction de réponse linéaire classique

$$\tilde{\chi}_{BA}(t) = \theta(t) \langle \{B(t), A\} \rangle \quad (\text{F.5})$$

s'exprime à l'aide d'une valeur moyenne à l'équilibre d'un crochet de poisson de variable dynamique. Ici $\theta(t)$ désigne la fonction de Heaviside:

$$\theta(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ 1, & t \geq 0 \end{cases} \quad (\text{F.6})$$

Appendice G

Calcul de l'intégrale $I = I' + iI''$

$$\begin{aligned}
 I &= \int \frac{\varphi(\vec{V}) d\vec{V}}{i \vec{k} \cdot \vec{V} + Z} = \int_0^\infty d\lambda \int \varphi(\vec{V}) d\vec{V} \exp \left[-\lambda(i \vec{k} \cdot \vec{V} + Z) \right] = \\
 &= \left(\frac{m\beta}{2\pi} \right)^{3/2} \int_0^\infty d\lambda \int d\vec{V} \exp \left[-\lambda(i \vec{k} \cdot \vec{V} + Z) - \beta m V^2 / 2 \right] \\
 &= 2\pi \cdot \left(\frac{m\beta}{2\pi} \right)^{3/2} \int_0^\infty d\lambda \int V^2 \sin \theta \exp \left[-\lambda(ik \cdot V \cos \theta + Z) - \beta m V^2 / 2 \right] dV d\theta \\
 &= 2\pi \cdot \left(\frac{m\beta}{2\pi} \right)^{3/2} \int_0^\infty d\lambda \int V^2 e^{(-\lambda Z - \beta m V^2 / 2)} dV \int_0^\pi \sin \theta d\theta e^{(-ik \cdot V \cos \theta)} \\
 &= 2\pi \cdot \left(\frac{m\beta}{2\pi} \right)^{3/2} \int_0^\infty d\lambda \int V^2 e^{(-\lambda Z - \beta m V^2 / 2)} dV \frac{1}{\lambda i k \cdot V} \left(e^{\lambda i k \cdot V} - e^{-\lambda i k \cdot V} \right) \\
 &= \frac{4\pi}{k} \left(\frac{m\beta}{2\pi} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{d\lambda}{\lambda} e^{-\lambda Z} \int V \exp(-\beta m V^2 / 2) dV \sin(\lambda k \cdot V)
 \end{aligned}$$

En intégrant sur V par partie, nous obtenons pour la deuxième intégrale

$$\begin{aligned}
&= \left[-\frac{1}{\beta m} \exp(-\beta m V^2/2) \sin(\lambda k V) \right]_0^\infty + \frac{\lambda k}{\beta m} \int_0^\infty \exp(-\beta m V^2/2) \cos(\lambda k V) dV \\
&= \frac{\lambda k}{\beta m} \int_0^\infty \exp(-\beta m V^2/2) \cos(\lambda k V) dV = \frac{\lambda k}{2\beta m} \int_{-\infty}^\infty \exp(-\beta m V^2/2) \cos(\lambda k V) dV \\
&= \frac{\lambda k}{2\beta m} \int_{-\infty}^\infty \exp(-\beta m V^2/2 + i\lambda k V) dV = \frac{\lambda k}{2\beta m} \int_{-\infty}^\infty \exp[-\beta m(V^2 - 2i\lambda k V/\beta m)/2] dV \\
&= \frac{\lambda k}{2\beta m} \int_{-\infty}^\infty \exp \left[-\beta m \left((V - i\lambda k/\beta m)^2 + \left(\frac{\lambda k}{\beta m} \right)^2 \right) /2 \right] dV \\
&= \frac{\lambda k}{2\beta m} \exp \left(-\frac{\lambda^2 k^2}{2\beta m} \right) \int_{-\infty}^\infty \exp[-\beta m (V - i\lambda k/\beta m)/2] dV = \\
&= \frac{\lambda k}{2\beta m} \exp \left(-\frac{\lambda^2 k^2}{2\beta m} \right) \sqrt{\frac{2\pi}{\beta m}}
\end{aligned}$$

ce qui donne pour l'intégrale I :

$$\begin{aligned}
I &= \frac{4\pi}{k} \left(\frac{\beta m}{2\pi} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{d\lambda}{\lambda} \exp(-\lambda Z) \frac{\lambda k}{2\beta m} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta m}} \exp\left(-\frac{\lambda^2 k^2}{2\beta m}\right) \\
&= \int_0^\infty d\lambda \exp \left[i\lambda \omega - \frac{\lambda^2 k^2}{2\beta m} \right]
\end{aligned}$$

Le calcul de la dernière intégrale passe par l'intégration dans le plan complexe:

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty d\lambda \exp \left[i\lambda \omega - \frac{\lambda^2 k^2}{2\beta m} \right] &= \int_0^\infty d\lambda \exp \left\{ -\frac{k^2}{2\beta m} \left[\lambda^2 - \frac{i2\beta m \lambda \omega}{k^2} \right] \right\} = \\
&= \int_0^\infty d\lambda \exp \left\{ -\frac{k^2}{2\beta m} \left((\lambda - i\omega\beta m/k^2)^2 + \left(\frac{\omega\beta m}{k^2} \right)^2 \right) \right\} \\
&= \exp(-m\beta\omega^2/2k^2) \int_0^\infty d\lambda \exp \left\{ -\frac{k^2}{2\beta m} (\lambda - i\omega\beta m/k^2)^2 \right\}
\end{aligned}$$

on considère la fonction analytique: $e^{-k^2\eta^2/2\beta m}$ à intégrer suivant le contour suivant par rapport à la variable η



- entre A et B : $\int_0^L \exp(-k^2\eta^2/2\beta m) d\eta$
- entre B et C : $\int_0^{\omega\beta m/k^2} -idy \exp\{-k^2(L-iy)^2/2\beta m\}$
- entre C et D : $\int_L^0 \exp\{-k^2(L-iy)^2/2\beta m\} dx$
- entre D et A : $\int_0^{\omega\beta m/k^2} idy \exp\{-k^2(-iy)^2/2\beta m\}$

la fonction étant analytique dans ce domaine, donc l'intégrale sur ce contour est nulle (la somme des quatres termes et après avoir tendu L vers l'infini, le deuxième terme tend vers zéro), d'où la valeur de l'intégrale cherchée:

$$\int_0^\infty \exp\{-k^2(x - i\omega m\beta/k^2)^2/2\beta m\} dx = \int_0^\infty \exp\{k^2\eta^2/2\beta m\} d\eta + i \int_0^{\omega\beta m/k^2} dy \exp(k^2y^2/2\beta m)$$

d'où l'intégrale cherchée I :

$$i \int_0^{\omega\beta m/k^2} dy \exp(k^2 y^2/2\beta m)$$

d'où l'intégrale cherchée I :

$$\begin{aligned} I &= \exp(-m\beta\omega^2/2k^2) \int_0^\infty \exp\left\{-\frac{k^2}{2m\beta}(\lambda - i\omega\beta m/k^2)^2\right\} d\eta = \\ &= \exp(-m\beta\omega^2/2k^2) \left[\int_0^\infty \exp(-k^2\eta^2/2\beta m) d\eta + i \int_0^{\omega\beta m/k^2} dy \exp(k^2 y^2/2\beta m) \right] \\ &= \exp(-m\beta\omega^2/2k^2) \left[\sqrt{\frac{\pi\beta m}{2k^2}} + i \int_0^{\omega\beta m/k^2} dy \exp(k^2 y^2/2\beta m) \right] \\ &\equiv I' + iI'' \end{aligned}$$

Appendice H

Relation entre la fonction $K_{33}(t)$ et la fonction $\varphi_s(k, pp', t)$

Pour simplifier le calcul on utilise une variable sans dimension $\xi = p/mV_0$ et la fonction de poids sans dimension:

$$W_0(\xi) = (2\pi)^{3/2} e^{-\xi^2/2} \quad (\text{H.1})$$

On introduit une série des fonctions de bases $\Psi_\alpha(\xi)$, qui sont orthogonales et vérifient les conditions suivantes :

$$\int \vec{\xi} W_0(\xi) \Psi_\alpha(\xi) \Psi_\beta(\xi) = \delta_{\alpha,\beta} \quad (\text{H.2})$$

$$\sum_{\alpha=1}^{\infty} \Psi_\alpha(\xi) \Psi_\beta(\xi') W_0(\xi) = \delta(\xi - \xi') \quad (\text{H.3})$$

φ_s peut être développé comme:

$$\varphi_s(k, \xi\xi', Z) = \sum_{\alpha, \beta} \Psi_\alpha(\xi) \Psi_\beta(\xi') W_0(\xi) \varphi_{\alpha\beta}(k, Z) \quad (\text{H.4})$$

où les éléments de matrices $\varphi_{\alpha\beta}(k, Z)$ sont définis par :

$$\varphi_{\alpha\beta}(k, Z) = \int d\vec{\xi} d\vec{\xi}' \Psi_\alpha(\xi) \Psi_\beta(\xi') W_0(\xi) \varphi_s(k, \xi\xi', Z) \quad (\text{H.5})$$

avec

$$\int d\vec{\xi} \varphi_s(k, \xi\xi', Z) = 0 \quad (\text{H.6})$$

On suppose que les éléments non diagonaux sont négligables devant les éléments diagonaux de la matrice $\varphi_{\alpha\beta}(k, Z)$, et tous les éléments diagonaux pour $\alpha > 2$ sont approx-
imés à $\varphi_{22}(k, Z)$ avec

$$\Psi_1 = 1, \quad \text{et} \quad \Psi_1 = \xi \quad (\text{H.7})$$

Donc avec ces hypothèses et l'utilisation de (H.3), on peut écrire (H.4) comme

$$\varphi_s \varphi_s(k, \xi\xi', Z) = -\varphi_{22}(k, Z) W_0(\xi) + \varphi_{22}(k, Z) \delta(\xi - \xi') \quad (\text{H.8})$$

La substitution de (H.8) dans l'équation (2.62) conduit à une équation matricielle:

$$C_{\alpha\beta}(k, Z) = \int d\vec{\xi} d\vec{\xi}' \Psi_\alpha(\xi) \Psi_\beta(\xi') C_s(k, \xi\xi', Z) \quad (\text{H.9})$$

la solution de cette équation est donnée par:

$$\frac{1}{n}C_{\alpha\beta}(k, Z) = \frac{\Lambda_{22}(k, Z) + i\varphi_{22}(k, Z) [\Lambda_{12}^2(k, Z) - \Lambda_{11}(k, Z)\Lambda_{22}(k, Z)]}{1 - i\varphi_{22}(k, Z)\Lambda_{11}(k, Z)} \quad (\text{H.10})$$

où

$$\Lambda_{\alpha\beta}(k, Z) = \int d\vec{\xi} \frac{\Psi_{\alpha}(\xi)\Psi_{\beta}(\xi)W_0(\xi)}{Z + i \left[\vec{V}_0 \cdot \vec{\xi} + \varphi_{22}(k, Z) \right]} \quad (\text{H.11})$$

et à partir de l'équation (2.48), (2.65) et (H.9) on trouve que

$$\widehat{D}(Z) = \left[Z + \widehat{K}_{33}(Z) \right]^{-1} = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{n} C_{22}(k, Z) \quad (\text{H.12})$$

si nous remplaçons $C_{22}(k, Z)$ par (H.10) on trouve la relation entre la fonction de mémoire $K_{33}(t)$ et φ_s .