BEKKOUCHE A. et KHELFAOUI F. CALCUL PAR LA DYNAMIQUE MOLECULAIRE DES FONCTIONS DE DISTRIBUTIONS DES DERIVEES SPATIALES DU CHAMP ELECTRIQUE LOCAL DANS UN PLASMA

Abdallah BEKKOUCHE^{1*} et Fethi KHELFAOUI²

¹ Département de Physique, Institut des Sciences et de Technologie, Centre Universitaire de El-Oued, El-Oued (Algérie) ² Laboratoire LENREZA, Département de Sciences de la Matière, Faculté des Sciences et de la Technologie et des Sciences de la Matière, Université Kasdi Merbah Ouargla, Ouargla (Algérie) *E-mail : <u>bekkouchabdallah@yahoo.fr</u>

RÉSUMÉ :

La formule analytique de l'intensité du spectre de raies d'émission dans les plasmas en tenant compte de l'effet quadripolaire électriques des ions nécessite la connaissance des probabilités du champ électrique local et de ces dérivés spatiales. A cause de la difficulté du calcul analytique des chercheurs utilisent les calculs de simulation numérique (Monte Carlo, Dynamique Moléculaire, ...).

Dans ce travail, nous calculons les distributions des dérivés spatiales du champ électrique local des ions dans un plasma en utilisant la technique de simulation numérique de Dynamique Moléculaire. Il s'agit du calcul des distributions des dérivées normales et tangentielles pour un champ ionique conditionné. Nous décrivons le comportement de ces distributions suivant plusieurs paramètres du plasma (la température, la densité des ions, la charge ionique,...). Nous comparons nos résultats avec les résultats d'autres travaux.

MOTS-CLÉS : Simulation par la Dynamique Moléculaire - Simulation de Monte Carlo – Microchamp électrique ionique – Dérivées spatiales - Fonction de distribution.

1. Introduction

La Formule de l'intensité spectrale rayonnement du plasma en tenant compte de l'effet quadripolaire électrique nécessite la connaissance des fonctions de distributions du champ électrique $p(\mathcal{E})$ et les fonctions de distributions des dérivées champ électrique $p(\partial \mu_{I} \mathcal{E}_{\mu})$. A cause de la difficulté du calcul analytique de ces fonctions on utilise les méthodes simulation numérique. En fait plusieurs auteurs se sont intéressés à l'étude de ces distributions ; nous citerons, entre autres, les travaux de Kilcrease et al. [1, 2], de Chihi [3] et de Guerricha et al. [4-6]. Demura [7] a présenté récemment une synthèse montrant l'importance des différents travaux sur les champs électriques locaux dans les plasmas et leurs distributions. Kilkrease et al. [1] ont calculé ces distributions en utilisant plusieurs modèles du potentiel d'interaction de l'ion avec les particules des plasmas et il a comparé avec les résultats de simulation de dynamique moléculaire et de Monte Carlo. Pour le calcul de la distribution pour un champ conditionné, Kilkrease et al [2] ont considéré la valeur moyenne de la dérivée de la composante du champ conditionné considéré. En 2005, Chihi [3] a calculé les distributions des dérivées spatiales du champ électrique en utilisant la technique de simulation de Monte Carlo. Guerricha et al. ont calculé ces distribution par une la méthode de Monte Carlo [4-5] où les ions de la cellule interagissent entre elles avec le potentiel de Debye et par une méthode analytique [6] ou les ions de la cellule interagissent avec la particule au centre de la cellule avec le potentiel de Debye.

Dans ce travail nous calculons les fonctions de distributions des dérivées du champ électrique, en utilisant la dynamique moléculaire et nous comparons nos résultats avec les résultats de Kilcrease et al [2] et de Guerricha et al [5, 6] pour un plasma d'argon hydrogénoïde Ar^{+17} et pour un plasma de proton H⁺.

2. Expression du spectre de raies pour l'effet quadripolaire électrique [2]

La fonction de l'intensité des raies spectrales sous l'effet quadripolaire électrique est donnée par [2] :

$$I(\boldsymbol{\omega}) = \int d\boldsymbol{\varepsilon} \int (d(\partial \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{\nu}}) q(\boldsymbol{\varepsilon}) p(\partial \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{\nu}}) \boldsymbol{\varepsilon}) J(\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\varepsilon}, \partial \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{\nu}})$$
(1)

Où : $q(\mathcal{E})$: la probabilité du champ électrique pour la valeur \mathcal{E} du champ ;

 $p(\partial \mu, \mathcal{E}_{\nu}, \mathcal{E})$: la probabilité de la dérivée pour un champ conditionnel \mathcal{E} ;

 $J(\omega, \mathcal{E}, \partial \mu, \mathcal{E}_{\nu})$: la fonction de l'intensité du spectre de raies en présence du champ et de $\nu = x, \gamma, z$, ou: $\gamma, z = \mu$

En présence de l'effet quadripolaire électrique, l'hamiltonien de l'émetteur perturbé est donné par :

$$H_{r}(\vec{\varepsilon},\partial\mu\varepsilon_{v}) = H_{r}^{0} - \vec{d}\vec{\varepsilon} - \frac{1}{6}\sum_{ij}(Q_{ij}\partial\varepsilon_{i}/\partial xj) - \frac{1}{6}e_{0}r^{2}\vec{\nabla}\vec{\varepsilon}$$
(2)

 $H_{\rm r}^{0}$: l'hamiltonien en l'absence de perturbation de rayonnement

d : moment dipolaire par perturbation

Q_{ij} : tenseur quadripolaire électrique

r : Rayon- électron

 $\partial \mathcal{E}_i / \partial x_i$: dérivées du champ électrique

3. La dynamique moléculaire [8]

Dans cette méthode, on se donne un système de N particules dans une cellule de volume fixe généralement de forme cubique. A instant initial, on donne aux particules positions initiales aléatoires et des vitesses aléatoires selon des distributions données. On calcule la force effective sur chaque particule, à chaque pas de temps, pour trouver les positions et les vitesses. L'évolution du système permet de relever le champ électrique au niveau des ions à chaque pas de temps.

3. 1. Algorithme de Verlet

On se propose l'intégration de l équations de mouvement des N particules. Soient $\mathbf{r}_i(t)$ et $\mathbf{a}_i(t)$ respectivement la position et l'accélération de la particule i. Pour calculer la position à l'instant t+ Δt on utilise l algorithme de Verlet :

$$\mathbf{r}_{i}(t+\Delta t) = 2 \ \mathbf{r}_{i}(t) - \mathbf{r}_{i}(t-\Delta t) + (\Delta t)^{2} a_{i}(t)$$
(3)

 $\mathbf{m}_i \mathbf{a}_i$ (t+ Δ t): la somme des forces agissant sur la particule i à l'instant (t+ Δ t)

 Δt : pas de temps.

Les vitesses sont obtenues par la formule :

$$v_{i}(t) = (r_{i}(t+\Delta t)-r_{i}(t-\Delta t))/(2 \Delta t)$$
 (4)

3. 2. Traitement du premier pas de tempe

L'équations de r_i (t+ Δt) nécessite la connaissance de la position sur deux pas de temps t et t + Δt . Pour le premier pas de temps t= Δt on ne connait que les positions initiales $r_i(0)$ et les vitesses initiales $v_i(0)$, on utilise alors la formule :

$$\mathbf{r}_{i}(\Delta t) = \mathbf{r}_{i}(0) + \Delta t \, \mathbf{v}_{i}(0) + (\Delta t)^{2} \, \mathbf{a}_{i}(0)$$
(5)

CALCUL PAR LA DYNAMIQUE MOLECULAIRE DES FONCTIONS DE DISTRIBUTIONS DES DERIVEES SPATIALES DU CHAMP ELECTRIQUE LOCAL DANS UN PLASMA

3. 3. Positions initiales et vitesses initiales

Les positions $r_i(0)$ peuvent être distribuées, suivant les cas, aléatoirement suivant une loi uniforme ou avoir une symétrie donnée. Le choix des positions initiales aléatoires permet une grande liberté sur le choix du nombre de particules dans la cellule.

Si le système est en équilibre thermodynamique les vitesses sont choisies aléatoirement suivant une loi de maxwell-Boltzmann. Dans le cas général la distribution de vitesse est suivant le problème traité.

4. Comparaison avec les résultats de Kilcrease et al.

Nous calculons les distributions des dérivées spatiales du champ électrique $p(\partial E_Z / \partial z)$ et $p(\partial E_Z / \partial y)$ de plasma d'argon dans les mêmes conditions de Kilcrease et al., à une densité de $n_e=10^{+24}$ cm⁻³ et une température T = 800 eV, pour des champs conditionnels E₀ différents. Le système de coordonnées choisi est le système cartésien. Les figures de 1 à 6 présentent les différentes comparaisons.

Figure 1 : La distribution de la composante de la dérivée du champ $p(\partial E_z / \partial z)$

4. 2. Pour un champ conditionnel $E_0 = 1.2$



Figure 2 : La distribution de la composante de la dérivée du champ $p(\partial E_z / \partial y)$









4. 1. Pour un champ conditionnel $E_0 = 0.5$

4. 3. Pour un champ conditionnel $E_0 = 2.4$







5. Comparaison avec les résultats de Guerricha et al.

Guerricha et al ont calculé par la méthode de Monte Carlo des fonctions de distributions des dérivées du champ électrique. Nous comparons nos résultats avec les résultats de Guerricha et al pour une densité de $n_e=10^{+24}$ cm⁻³ et pour une température T = 800 eV et pour un champ conditionnel $E_0 = 1.2$. Les figures 7 et 8 présentent les différentes comparaisons.







6. Comparaison avec les résultats du calcul théorique de Guerricha et al. $E_0 = 1.6$

Les calculs sont faits, pour un plasma d'hydrogène, pour une densité $n_i=10^{+18}$ cm⁻³ et une température T=5. 10^{+5} eV et pour un champ conditionnel donné. Les figures 9 et 10 présentent les différentes comparaisons.





Figure 10 : La distribution de la composante de la dérivée du champ $p(\partial E_z / \partial y)$

7. Conclusions

L'intensité et l'élargissement des raies spectrales dans un plasma peuvent dépondre des distributions des dérivés spatiales du champ électrique local sur un émetteur. On note une asymétrie des profils de raies spectrales sous l'effet quadripolaire électrique [9]. Nous avons présenté dans ce travail le calcul de ces grandeurs par la dynamique moléculaire, et nous avons comparé nos résultats avec les résultats Kilcrease et al et Guerricha et al. Les principales remarques sont :

- ✓ La crête des distributions de notre calcul est plus élevée que celle du calcul de Kilcrease et de Guerricha sauf le cas du calcul théorique de Guerricha et al $p(\partial E_z / \partial y)$.
- ✓ Le déplacement de distributions $p(\partial E_z / \partial z)$ calculées par Kilcrease et al et Guerricha et al vers des valeurs négatives par rapport aux distributions de nos calculs ; $p(\partial E_z / \partial y)$ ne suivent pas le même comportement.
- ✓ Les distributions $p(\partial E_z / \partial y)$ de notre calcul, du calcul de Kilcrease et al et du calcul de Guerricha et al sont toutes qualitativement symétriques.

8. References

[1] D. P. Kilkrease, M. S. Murillo et L. A. Collins ; J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer Vol. **58**, n°4-6, pp 677-686 (1997).

[2] D. P. Kilcrease et M. S. Murillo ; J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer, 65, pp 343-352 (2000).

[3] S. Chihi ; Thèse de doctorat, Université de Constantine (2005).

[4] S. Guerricha; Mémoire de magister, Université de Ouargla (2008).

[5] S. Guerricha, S. Chihi et M.T. Meftah; "On the electric micro-field in plasmas: statistics of the spatial derivatives", in Spectral Line Shapes Vol. **15**, edited by M.A Gigosos and M.A Gonzalez, AIP conference Proceeding Vol.**1058**, AIP , N.Y., 2008, pp 72-73.

[6] S. Guerricha, S. Chihi et M.T. Meftah ; Annales de la Faculté des Sciences et Sciences de l'Ingénieur ; Vol. 1 n°3, pp 32-42 (2009).

[7] A. V. Demura ; 'Review article on: Physical Models of Plasma Microfield'; International Journal of Spectroscopy; Volume **2010**, pp 1-42 (2010).

[8] F. Khelfaoui ; Thèse de Doctorat ; Université de Provence, pp 33-43 (1991).

[9] K. Chenini, F. Khelfaoui, S. Guerricha, S. Chihi, A. Ouahab et M.T. Meftah ; 'Contribution to the calculation of ion microfield non uniformity effects on the asymmetry of Lyman- α lines in a dense plasma '; accepté pour publication au '*Contributions to Plasma Physics*', Vol. **51**, N°1, pp 1-10 (2011).