

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
MINISTÈRE DE L' ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE
LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

جامعة الحاج لخضر باتنة
UNIVERSITÉ ELHADJ LAKHDAR
BATNA

كلية العلوم
Faculté des Sciences
.....

Thèse
Présentée par **CHOHRA Thouria**

Soumise au département des Sciences physiques en vue de l'obtention du
diplôme de **DOCTEUR** en **SCIENCE PHYSIQUE**

THÈME

**MODELE DE PROFILS DE RAIES DANS UN
PLASMA FROID**

Devant le Jury:

M. Zereg	M. C.	Université de Batna	Président de Jury
A. Bouldjedri	Prof.	Université de Batna	Examineur
F. Khelfaoui	Prof.	Université de Ouargla	Examineur
F. Benamira	M. C.	Université de Constantine	Examineur
M. T. Meftah	Prof.	Université de Ouargla	Rapporteur

Soutenue à l'université de Batna, le 28/06/2007

Dédicaces

*A ma mère, pour tout ce qu'elle fait pour moi, pour son suivi
et son soutien moral.*

A mon père

A mes sœurs

A mes frères.

Merci

Remerciements

J'exprime ma gratitude à Mr M^{ed}.T.Meftah, professeur de l'université de Ouargla pour avoir accepté de 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, professeur de l'université de Ouargla, pour les précieux conseils dans la rédaction de cette thèse et d'avoir accepté d'être membre du jury.

Je remercie Monsieur M. Zereg maître de conférence de l'université de Batna, pour m'avoir honoré d'accepter de présider le jury, Monsieur A. Bouldjedri professeur de l'université de Batna, Monsieur F. Benamira maître de conférence de l'université de Constantine, qui ont bien voulu consacrer une partie de leur précieux temps à l'examen de cette thèse.

Sommaire

Liste des Figures	i
Liste des Tables	ii
1 Introduction générale	1
2 Fonctions de corrélation du micro-champ électrique et de la vitesse (propriétés dynamiques)	5
2.1 Introduction	5
2.2 La fonction de mémoire $M(t)$	6
2.3 Le modèle	14
2.4 conclusion	17
3 Fonction de distribution du microchamp électrique (propriétés statiques)	19
3.1 Introduction	19
3.2 Les interactions dans un gaz ionisé (plasma froid)	21
3.2.1 Interaction entre deux particules chargées (ions)	21
3.2.2 Interaction entre un ion (particule chargée) et un neutre	22
3.2.3 Grandeurs caractéristiques	22
3.3 Les travaux théoriques pour un plasma ionique sans particules neutres	25
3.3.1 Approximation Holtsmark 1919	30
3.3.2 Approximation "Independent particle" 1958	30
3.3.3 Méthode approchée: Apex	31
3.3.4 La simulation numérique	33
3.4 Le modèle de mélange d'un plasma ionique avec des particules neutres	34
4 Propriétés spectrales	51
4.1 Introduction	51
4.2 Formule générale des profils de raies	52
4.2.1 Temps d'intérêt du processus d'élargissement	58
4.2.2 Temps de collisions	59

4.2.3	L'approximation d'impact	59
4.2.4	L'approximation quasi-statique	61
4.3	Modèle de profil de Ly α et Ly β	62
4.3.1	Ly α	62
4.3.2	Ly β	62
4.4	Résultats numériques	63
Bibliographie		72
5 Conclusion		75
A L'espace de Liouville		77
B La résolution de l'équation quartique		79

Liste des Figures

3.1	$\phi_1^b(a)$ pour le mélange ($Ar^{17} + H^+$) à $Z_0 = Ar^{+17}$ ($p = 1, p' = 1$).	45
3.2	$H(\beta)$ pour ($Ar^{17} + H^+$) à $Z_0 = Ar^{+17}$ ($p = 1, p' = 1$).	46
3.3	Comparaison entre le modèle de B-M et notre modèle IP.	47
3.4	$H(\beta)$ pour différentes valeurs de densité électronique n_e	48
3.5	$H(\beta)$ pour différentes valeurs v avec $n_e = 10^{26} m^{-3}$	49
3.6	$H(\beta)$ pour différentes valeurs de p'	50
4.1	Profil Ly α émis par $Z_0 = 17$ dans un mélange.	66
4.2	Profil Ly β émis par $Z_0 = 17$ dans un mélange.	67
4.3	Profil Ly α émis par $Z_0 = 17$ dans un mélange.	68
4.4	Profil Ly β émis par $Z_0 = 17$ dans un mélange.	69
4.5	Profil Ly α émis par $Z_0 = 17$ dans un mélange.	70
4.6	Profil Ly β émis par $Z_0 = 17$ dans un mélange.	71

Liste des Tables

4.1	Paramètres de l'équation (4.34) et (4.42) dans le cas de $Ly \alpha$ pour un mélange de $(Ar^{+17} - H^{+1} - Ar - H)$ sans correction (sans les effets de neutres), $p = 1$ et $p' = 1$ et avec correction $p = 1$ et $p' = 0.5$	65
4.2	Paramètres de l'équation (4.38) et (4.43) dans le cas de $Ly \beta$ pour un mélange de $(Ar^{+17} - H^{+1} - Ar - H)$ sans correction (sans les effets de neutres), $p = 1$ et $p' = 1$ et avec correction $p = 1$ et $p' = 0.5$	65

Chapitre 1

Introduction générale

Le terme de PLASMA fut introduit par Tonks et Langmuir en 1929 [1] pour décrire l'état d'un gaz ionisé produit par décharge électrique dans un tube. Il a été connu plutôt, et probablement pour la première description par Lord Rayleigh en 1906 [2], dans son analyse des oscillations de l'électron dans le modèle de l'atome de Thomson. L'état plasma est souvent considéré comme le quatrième état de la matière et fait suite, dans l'ordre croissant des températures aux états solide, liquide et gazeux . Le terme 'quatrième état de la matière' a été inventé par W. Crookes en 1879 pour décrire le milieu ionisé créé dans une décharge de gaz [2].

Bien que l'on admette actuellement que 99 % de l'univers est constitué de matière à l'état de plasma, cette discipline est encore trop peu enseignée. La raison en est sans doute la complexité de cette matière de synthèse qui fait pratiquement appel à tous les domaines de la physique (mécanique statistique, théorie cinétique, thermodynamique ...). L'intérêt présenté par cette science a suscité de nombreux travaux théoriques et expérimentaux qui

ont permis d'approfondir notre connaissance sur un plan à la fois fondamental et appliqué.

On distingue deux familles de plasmas [1]:

- Les plasmas chauds, correspondant à des températures supérieures à $10^6 K$, utilisés pour produire de l'énergie électrique à partir de la fusion contrôlée.

- Les plasmas froids, regroupant une large variété de plasmas tels que ceux créés par des décharges électriques dans un gaz, ceux obtenus dans les réacteurs à plasma où le plasma est confiné magnétiquement, ou ceux engendrés par couplage inductif avec un système radiofréquence. La plupart des plasmas froids jouent un rôle essentiel dans l'analyse des plasmas plus chauds.

La dynamique des particules dans le plasma est gouvernée par les champs appliqués et les champs internes aux plasmas dus aux particules chargées elles-mêmes. Les interactions fondamentales sont de type électromagnétique; on peut distinguer:

- Les interactions "charge-neutre": elles ont lieu lorsqu'une particule chargée passe près d'une particule neutre pour qu'elle y induise un moment dipolaire électrique, ou bien si la particule neutre possède un moment dipolaire permanent. Le champ Coulombien de la particule chargée agit alors sur le moment dipolaire électrique induit.

- Les interactions "charge-charge": qui sont des interaction de Coulomb.

Dans le cas des plasmas faiblement ionisés, l'interaction " charge-neutre" domine l'interaction "charge- charge"

L'information contenue dans le spectre dépend non seulement de la physique atomique de l'atome (neutre) ou de l'ion émetteur, mais aussi de la physique du plasma environnant. Cette dépendance est une conséquence directe de l'interaction entre l'émetteur et les

particules voisines.

L'étude du rayonnement émis par les plasmas est vraiment un élément majeur pour la compréhension des phénomènes physiques ayant lieu dans les plasmas. A cause du grand nombre de données nécessaire pour obtenir un profil de raies, peu de spectres théoriques existent jusqu'à nos jours.

Le calcul du profil de raies émis par un plasma composé de neutres et d'ions est basé sur la connaissance de la fonction de distribution du champ électrique. Celle ci est reliée directement à la connaissance de l'interaction entre l'impureté et toutes les composantes du plasma (neutres+ions). A ce titre, plusieurs théories des fonctions de distribution du champ électrique ont été formulées[3]-[12]. Dans ces théories le champ est considéré de deux types: l'un, à haute-fréquence (high-frequency) et l'autre à basse-fréquence (low-frequency).

La distribution du champ haute-fréquence est calculée en considérant un gaz d'ions interagissant avec un potentiel du Coulomb et immergé dans un fond uniforme et continu de charges négatives schématisant les électrons.

La distribution du champ basse-fréquence est déterminée en considérant les ions interagissant avec un potentiel écranté. Comme le champ électrique dû aux ions varie sur un temps de l'ordre du temps de relaxation de l'électron, le potentiel est habituellement celui de Debye-Hückel.

Les calculs théoriques et les études expérimentales des profils de raies, ont dès le départ progressé de pair, ainsi, les études expérimentales ont joué un rôle important dans le développement des théories, soit pour vérifier la théorie, soit pour fournir des données non calculées par la théorie.

Ainsi nous avons divisé ce travail en trois parties essentielles. Dans la première partie représentée par le deuxième chapitre, nous avons développé le modèle de calcul de la fonction d'autocorrélation de la vitesse et la fonction d'autocorrélation du champ électrique [13] pour un plasma à deux composantes ioniques. Nous avons remarqué que le cas d'un couplage fort implique un désaccord entre les modèles théoriques proposés et la simulation. Parmi ces modèles théoriques basés sur la forme de la fonction de mémoire, nous avons choisi la fonction de mémoire comme $M(t) = M(0)e^{-\lambda t}$ [13]. Pour remédier à ce désaccord nous avons proposé un autre modèle de la fonction de mémoire qui consiste à choisir une fonction de mémoire à trois paramètres [14].

Dans la deuxième partie représentée par le troisième chapitre, nous avons utilisé la technique de "cluster expansion" [15][16] pour faire une modèle de calcul de la fonction de distribution du microchamp. Dans ce modèle nous avons introduit l'effet d'interaction entre l'ion et les neutres de plasma.

Enfin, dans la dernière partie, c'est à dire, au quatrième chapitre, nous avons commencé par rappeler le formalisme semi-classique pour le calcul des profils de raies dans un plasma froid. On reste dans le cadre général d'un ion émetteur soumis aux champs électriques fluctuants créés par les autres particules du plasma. Comme application, nous avons calculé les profils de raie Ly α et Ly β [16][17], où nous avons utilisé notre fonction de distribution du microchamp calculée dans le deuxième chapitre.

Chapitre 2

Fonctions de corrélation du micro-champ électrique et de la vitesse (propriétés dynamiques)

2.1 Introduction

Les fonctions d'autocorrélation d'un système à l'équilibre thermodynamique sont de grande importance pour évaluer le temps de relaxation dans de nombreux problèmes de la physique [13] [14] [19] [21] . Ce temps exprime la durée de l'effet de mémoire sur le processus en question [22] [23] [24] [25]. En vue de prendre en considération l'effet d'une observable A sur une observable B , nous devons connaître le rapport du temps de relaxation de l'observable A avec celui de l'observable B . Ce rapport nous permet, d'une certaine manière, de qualifier un modèle de bon candidat pour représenter le processus.

Le calcul de la fonction d'autocorrélation est basé sur l'équation maîtresse. Cette dernière dépend directement de la fonction de mémoire $M(t)$ [24], qui joue un rôle important dans l'élaboration de notre modèle.

Nous présentons dans ce travail un modèle de calcul des fonctions d'auto corrélation à l'équilibre, relatives au micro-champ électrique $C(t)$ sur un ion et à la vitesse $D(t)$ par rapport à celui-ci. Le modèle basé sur la forme "the three-parameter Mori memory" de la fonction de mémoire $M(t)$, valable pour le cas d'un plasma fortement couplé.

2.2 La fonction de mémoire $M(t)$

Le calcul de la fonction d'autocorrélation temporelle est une tâche difficile pour un système de N-corps. C'est la raison pour laquelle plusieurs tentatives ont été menées pour élaborer des équations différentielles et intégrales dont la solution peut servir à trouver la fonction d'autocorrélation. Aucune équation simple et commode n'est disponible, mais une tentative, de originellement à Zwanzig, conduit à une fonction associée à la fonction de corrélation, qui s'avère très utile. Cette fonction associée s'appelle la fonction de mémoire $M(t)$. Nous allons suivre la démarche due à Berne, Boon et Rice [14] [18] pour calculer cette fonction.

Soit $\Psi(t)$ une fonction d'autocorrélation normalisée d'une fonction de l'espace des phases $u(p, q)$ [18]:

$$\Psi(t) = \langle u(0)u(t) \rangle \quad (2.1)$$

avec:

$$\Psi(0) = \langle u(0)u(0) \rangle = 1 \quad (2.2)$$

$\langle \dots \rangle$ dénotent une moyenne de l'ensemble statistique canonique dans notre cas.

Nous pouvons écrire $\Psi(t)$ plus explicitement comme suit:

$$\Psi(t) = \frac{1}{Q} \int dpdq u(p, q) u(p, q, t) \exp[-\beta H(p, q)] \quad (2.3)$$

où $Q = \int dpdq \exp[-\beta H(p, q)]$ est la fonction de partition et (p, q) représente toutes les coordonnées généralisées et leurs moments conjugués nécessaires pour décrire le système de N-corps.

L'équation de mouvement de la quantité dynamique, indépendante explicitement du temps, peut être réécrite en terme de l'opérateur de Liouville L (l'équation de Liouville) [18]:

$$\frac{du}{dt} = iLu \quad (2.4)$$

La solution de cette équation est:

$$u(t) = e^{itL} u(0) \quad (2.5)$$

Donc:

$$\Psi(t) = \frac{1}{Q} \int dpdq u(p, q) e^{itL} u(p, q) \exp[-\beta H(p, q)] \quad (2.6)$$

La dérivation de $\Psi(t)$ deux fois par rapport au temps t , donne:

$$\frac{d^2\Psi(t)}{dt^2} = \frac{1}{Q} \int dpdq u(p, q) [iL \exp(itL) iLu(p, q)] \exp[-\beta H(p, q)] \quad (2.7)$$

Propriété d'herméticité de L :

$$\frac{d^2\Psi(t)}{dt^2} = \frac{1}{Q} \int dpdq [iLu] \exp(itL) [iLu] \exp[-\beta H(p, q)] \quad (2.8)$$

$$= -\langle iLu(p, q) \exp(itL) iLu(p, q) \rangle \quad (2.9)$$

Puisque:

$$\frac{du(t)}{dt} = iLu(t) = e^{itL} iLu(0) = e^{itL} \dot{u}(0) \quad (2.10)$$

On peut écrire l'équation (2.9) comme suit:

$$\frac{d^2\Psi(t)}{dt^2} = -\langle \dot{u}(0) \dot{u}(t) \rangle \equiv -\phi(t) \quad (2.11)$$

où la dernière égalité définit $\phi(t)$, avec les conditions initiales:

$$\Psi(0) = 1$$

$$\dot{\Psi}(0) = \langle u(0) \dot{u}(0) \rangle = 0$$

La transformée de Laplace de l'équation (2.11) donne:

$$z^2 \widehat{\Psi}(z) - z = -\widehat{\phi}(z) \quad (2.12)$$

où z est la variable de la transformée de Laplace, pour $z \neq 0$, nous avons:

$$\left[z^2 \widehat{\Psi}(z) - z \right] \widehat{\Psi}(z) = \left\{ 1 + \left(\frac{1}{z} \right) \left[z^2 \widehat{\Psi}(z) - z \right] \right\} \left[z \widehat{\Psi}(z) - 1 \right] \quad (2.13)$$

donc:

$$-\widehat{\phi}(z) \widehat{\Psi}(z) = \left\{ 1 - \left(\frac{1}{z} \right) \widehat{\phi}(z) \right\} \left[z \widehat{\Psi}(z) - 1 \right] \quad (2.14)$$

Pour les valeurs de z tel que $1 - \left(\frac{1}{z} \right) \widehat{\phi}(z) \neq 0$, nous avons:

$$z \widehat{\Psi}(z) - 1 = \frac{-\widehat{\phi}(z) \widehat{\Psi}(z)}{\left[1 - \left(\frac{1}{z} \right) \widehat{\phi}(z) \right]} \quad (2.15)$$

En utilisant le théorème de la convolution de la transformée de Laplace, on peut écrire:

$$\frac{d\Psi}{dt} = - \int_0^t d\tau M(\tau) \Psi(t - \tau) \quad (2.16)$$

où:

$$\widehat{M}(z) = \left[1 - \left(\frac{1}{z} \right) \widehat{\phi}(z) \right]^{-1} \widehat{\phi}(z) \quad (2.17)$$

Notons que cette equation intégralo-différentielle gouvernant $\Psi(t)$ dont le noyau est la fonction mémoire $M(t)$ est malheureusement inconnue. Cependant, nous pouvons donner des formes approximatives pour $M(t)$ pouvant servir à calculer $\Psi(t)$ approximativement. A partir de l'équation (2.11), nous avons [18]:

$$\begin{aligned} \phi(t) &= \langle \dot{u}(0) \dot{u}(t) \rangle \\ &= \langle \dot{u}(0) \exp(itL) \dot{u}(0) \rangle \end{aligned} \quad (2.18)$$

Sa transformée de Laplace $\widehat{\phi}(z)$ peut être exprimée en terme de l'opérateur de résolvant $(s - iL)^{-1}$:

$$\widehat{\phi}(s) = \langle \dot{u}(0)(s - iL)^{-1}\dot{u}(0) \rangle \quad (2.19)$$

Par l'utilisation de l'opérateur identité:

$$A^{-1} = B^{-1} + A^{-1}(B - A)B^{-1} \quad (2.20)$$

avec $A = z - iL$ et $B = zi(1 - P)L$, on peut écrire l'équation (2.18) sous la forme:

$$\widehat{\phi}(s) = \langle \dot{u} [s - i(1 - p)L]^{-1} \dot{u} \rangle + \langle \dot{u} [s - iL]^{-1} iPL [s - i(1 - p)L]^{-1} \dot{u} \rangle \quad (2.21)$$

où P est l'opérateur de projection, qui projette la fonction de l'espace de phase $G(q, p)$ sur $u(q, p)$ tel que:

$$PG(q, p) = u(q, p) f_{eq} \int dq' dp' u(q', p') G(q', p') \quad (2.22)$$

$$f_{eq} = Q^{-1} \exp(-\beta H) \text{ et } P^2 G(q, p) = PG(q, p) \quad (2.23)$$

On peut écrire le second terme de cette équation comme suit:

$$\langle \dot{u} [s - iL]^{-1} iPL [s - i(1 - p)L]^{-1} \dot{u} \rangle = \int dq dp \dot{u}(s - iL)^{-1} iPG \quad (2.24)$$

où:

$$G = L [s - i(1 - p)L]^{-1} \dot{u} f_{eq} \quad (2.25)$$

par l'utilisation de l'équation (2.22), la dernière équation devient:

$$\begin{aligned} PG &= uf_{eq} \int dqdp L [s - i(1-p)L]^{-1} \dot{u} f_{eq} \\ &= iuf_{eq} \left\langle \dot{u} [s - i(1-p)L]^{-1} \dot{u} \right\rangle \end{aligned} \quad (2.26)$$

Finalement, nous avons utilisé la propriété de L hermetique¹.

Nous pouvons signaler à ce point, que ces manipulations sont très semblables à celles qu'on trouve dans la notation de Dirac. En fait Berne et Harpe(1970) [14] et Berne (1970) [18] exploitent cette analogie pour développer une notion élégante pour le formalisme de la fonction de corrélation temporelle et la fonction de mémoire.

En utilisant l'équation (2.26) et (2.21), on trouve:

$$\widehat{\phi}(s) = \left\langle \dot{u} [s - i(1-p)L]^{-1} \dot{u} \right\rangle - \left\langle \dot{u} [s - iL]^{-1} u \right\rangle \left\langle \dot{u} [s - i(1-p)L]^{-1} \dot{u} \right\rangle \quad (2.27)$$

Si nous utilisons l'opérateur identité donné par l'équation (2.20) avec $A = s - iL$ et $B = s$, nous voyons que:

$$\begin{aligned} \left\langle \dot{u} [s - iL]^{-1} u \right\rangle &= \frac{1}{s} \langle \dot{u} u \rangle + \frac{1}{s} \left\langle \dot{u} [s - iL]^{-1} iLu \right\rangle \\ &= \frac{1}{s} \left\langle \dot{u} [s - iL]^{-1} \dot{u} \right\rangle = \frac{\widehat{\phi}(s)}{s} \end{aligned} \quad (2.28)$$

Donc l'équation (2.27) devient:

$$\widehat{\phi}(s) = \left\langle \dot{u} [s - i(1-p)L]^{-1} \dot{u} \right\rangle - \frac{\widehat{\phi}(s)}{s} \left\langle \dot{u} [s - i(1-p)L]^{-1} \dot{u} \right\rangle \quad (2.29)$$

¹ $\langle \alpha^* L \beta \rangle = \langle (L\alpha)^* \beta \rangle = i \langle \dot{\alpha} \beta \rangle$

Si on substitue l'équation précédente dans l'équation (2.17) nous obtenons:

$$\widehat{M}(s) = \langle \dot{u} [s - i(1-p)L]^{-1} \dot{u} \rangle \quad (2.30)$$

et sa transformée inverse de Laplace donne la fonction de mémoire:

$$M(t) = \langle \dot{u} \exp [i(1-p)L] \dot{u} \rangle \quad (2.31)$$

Cependant une propriété importante de la fonction de mémoire, est qu'elle se prête à des approximations simples. Par exemple l'équation (2.16) montre que si nous supposons que $M(\tau)$ décroît rapidement, $M(\tau) \simeq \delta(\tau)$, alors la fonction de corrélation décroît exponentiellement. Bien que cette forme de la fonction de corrélation ne soit pas rigoureusement correct, une forme simple pour $M(\tau)$ mène à des expressions utiles pour la fonction de corrélation $\Psi(\tau)$, on pourrait espérer que des prétentions plus détaillées pour $M(\tau)$ mènerait à un $\Psi(t)$ encore meilleur. Notre travail concerne la fonction de mémoire associée à la fonction d'autocorrélation de la vitesse et du champ électrique.

La fonction de mémoire est proportionnelle à la fonction d'autocorrélation. Ceci permet de construire des modèles pour l'évolution de la fonction d'autocorrélation.

Pratiquement, toutes les fonctions de mémoire sont déjà utilisées par les chercheurs, pour trouver la fonction d'autocorrélation de la vitesse. Cependant, il est encore instructif d'examiner: (a) à quel point ces mémoires postulées concordent avec les résultats expérimentaux, (b) à quel point les fonctions d'autocorrélation approximatives produites de ces mémoires postulées reproduisent notre fonction d'autocorrélations de l'expérimental.

Les fonctions mémoires proposées sont [14]:

1-Mémoire exponentielle de Berne et al:

$$M(t) = \frac{\langle a^2 \rangle}{\langle v^2 \rangle} \exp \left[-t \left(\frac{\langle a^2 \rangle}{\langle v^2 \rangle} \int_0^\infty \Psi(t') dt' \right) \right] \quad (2.32)$$

2-Mémoire Gaussienne de Tosi et Singwi ²:

$$M(t) = \frac{\langle a^2 \rangle}{\langle v^2 \rangle} \exp \left[-\frac{\pi}{4} t^2 \left(\frac{\langle a^2 \rangle}{\langle v^2 \rangle} \int_0^\infty \Psi(t') dt' \right)^2 \right] \quad (2.33)$$

3-Mémoire Gaussienne de Berne et Martin et Yip³:

$$M(t) = \frac{\langle a^2 \rangle}{\langle v^2 \rangle} \exp \left[-\frac{1}{2} t^2 \left(\frac{\langle \dot{a}^2 \rangle}{\langle a^2 \rangle} - \frac{\langle a^2 \rangle}{\langle v^2 \rangle} \right) \right] \quad (2.34)$$

4- Mémoire des trois paramètres de Mori (the three-parameter Mori memory):

$$M(t) = \frac{\langle a^2 \rangle}{\langle v^2 \rangle} e^{-\alpha t} \left(\frac{\alpha \sin \Omega t + \Omega \cos \Omega t}{\Omega} \right) \quad (2.35)$$

où: \vec{a} est l'accélération.

et:

$$\alpha = \frac{1}{2} \frac{\langle v^2 \rangle}{\langle a^2 \rangle} \left(\frac{\langle \dot{a}^2 \rangle}{\langle a^2 \rangle} - \frac{\langle a^2 \rangle}{\langle v^2 \rangle} \right) \left[\int_0^\infty \Psi(t) dt \right]^{-1}$$

$$\Omega = \left(\frac{\langle \dot{a}^2 \rangle}{\langle a^2 \rangle} - \frac{\langle a^2 \rangle}{\langle v^2 \rangle} - \alpha^2 \right)^{1/2}$$

²Cette fonction de la mémoire ne satisfait pas la relation nécessaire $\int_0^\infty \Psi(t) dt = \left[\int_0^\infty M(t) dt \right]^{-1}$

³Cette fonction de la mémoire ne satisfait pas la relation nécessaire $\int_0^\infty \Psi(t) dt = \left[\int_0^\infty M(t) dt \right]^{-1}$

2.3 Le modèle

Le système considéré ici est une impureté de mass m_0 et de charge q_0 placée en $\vec{r}(0) \equiv \vec{r}_0$ dans un plasma ionique en équilibre thermodynamique. Les fonctions d'autocorrélation du micro-champ électrique et de la vitesse (les propriétés dynamiques) sont définies respectivement par [24]:

$$C(t) = \langle \vec{E}(t) \cdot \vec{E}(0) \rangle / \langle \vec{E}(0) \cdot \vec{E}(0) \rangle \equiv \langle \vec{E}(t) \vec{E} \rangle / \langle E^2 \rangle \quad (2.36)$$

$$D(t) = \langle \vec{V}_0(t) \cdot \vec{V}_0(0) \rangle / \langle \vec{V}_0(0) \cdot \vec{V}_0(0) \rangle \equiv \langle \vec{V}_0(t) \cdot \vec{V}_0 \rangle / \langle V_0^2 \rangle \quad (2.37)$$

où $\langle \dots \rangle$ est la valeur moyenne d'ensemble de Gibbs et \vec{V}_0 est la vitesse de l'ion impureté.

Les deux fonctions précédentes $C(t)$ et $D(t)$ sont reliées par la première loi de Newton:

$$\frac{d^2}{dt^2} D(t) = -\omega_0^2 C(t) \quad (2.38)$$

avec:

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

Et à partir de la technique de l'opérateur de projection Nakajima et Zawanzig [19] [20], la fonction $D(t)$ est donnée par la forme suivante:

$$\frac{d^2}{dt^2}D(t) + \omega_0^2 D(t) + \int_0^t d\tau M(t-\tau) \frac{dD(t)}{d\tau} = 0 \quad (2.39)$$

avec les conditions initiales:

$$D(t = 0) = 1, C(t = 0) = 1$$

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

et:

$$M(0) = M_0 = \omega_1^2 - \omega_0^2, \quad \omega_1^2 = \langle \dot{E}^2 \rangle / \langle E^2 \rangle$$

L'équation (2.39) décrit la dynamique des oscillations dans un milieu visco-élastique de fréquence caractéristique égale à ω_0 en présence d'un amortissement, qui est exprimé par la transformée de Fourier de $M(t)$. Nous supposons un modèle mathématique pour $M(t)$ lequel inclut deux échelles du temps, à savoir, une échelle de temps de décroissance λ^{-1} par et une échelle de temps d'oscillation donnée par Ω^{-1} . Toutes les fréquences utilisées sont dans l'unité de la fréquence de plasma ω_p , où $\omega_p^2 = (4\pi n_e e^2 / m_0)$ (n_e : la densité électronique, e : la charge d'électron).

Si nous utilisons le modèle de la mémoire à trois paramètres (2.35), nous avons [14]:

$$M(t) = M_0 e^{-\lambda t} \cos \Omega t \quad (2.40)$$

où $\Omega \gg \lambda$, pour le cas d'un plasma fortement couplé.

Le paramètre λ est fixé par l'expression de Green Kubo pour le coefficient de self-diffusion D en fonction de la fonction d'autocorrélation de la vitesse [24] [19]:

$$\beta m_0 D = \int_0^{\infty} dt D(t) \quad (2.41)$$

$$\lambda = \left(\frac{\omega_1^2}{\omega_0^2} - 1 \right) / \beta m_0 D \quad (2.42)$$

La transformée de Laplace de (2.39) est:

$$\int_0^{\infty} e^{-zt} \frac{d^2 D(t)}{dt^2} dt + \omega_0^2 \widehat{D}(z) + \widehat{M}(z) \int_0^{\infty} e^{-zt} \frac{dD(t)}{dt} dt = 0 \quad (2.43)$$

où $\widehat{M}(z)$ est la transformée de Laplace de $M(t)$:

$$\widehat{M}(z) = M_0 \int_0^{\infty} \exp(-zt - \lambda t) \cos(\omega_p t) dt = \frac{M_0(z + \lambda)}{(z + \lambda)^2 + \omega_p^2} \quad (2.44)$$

et le paramètre Ω :

$$\beta m_0 D = \lim_{z \rightarrow 0} \widehat{D}(z) = \frac{\lambda M_0}{\omega_0^2 (\Omega^2 + \lambda^2)} \Rightarrow \Omega^2 = \frac{\lambda M_0}{\beta m_0 D \omega_0^2} - \lambda^2 \quad (2.45)$$

Finalement la transformée de Laplace de la fonction d'autocorrélation $D(t)$ est:

$$\widehat{D}(z) = \frac{z(z + \lambda)^2 + z\Omega^2 + (z + \lambda)M_0}{z^4 + 2\lambda z^3 + z^2(\Omega^2 + \lambda^2 + \omega_0^2 + M_0) + z(M_0\lambda + 2\omega_0^2\lambda) + \omega_0^2(\Omega^2 + \lambda^2)} \quad (2.46)$$

En utilisant la transformée inverse de $\widehat{D}(z)$ et le théorème des résidus on peut écrire les fonctions $C(t)$ et $D(t)$ comme:

$$D(t) = \sum_{i=1}^4 D_i e^{z_i t} \quad (2.47)$$

$$C(t) = \sum_{i=1}^4 C_i e^{z_i t} \quad (2.48)$$

telles que les coefficients D_i et C_i sont définis par:

$$D_i = -(\omega_0/z_i)^2 C_i \quad (2.49)$$

$$C_1 = (z_1(z_1 + \lambda)^2 + z_1 \Omega^2)/(z_1 - z_2)(z_1 - z_3)(z_1 - z_4) \quad (2.50)$$

$$C_2 = (z_2(z_2 + \lambda)^2 + z_2 \Omega^2)/(z_2 - z_3)(z_2 - z_4)(z_2 - z_1) \quad (2.51)$$

$$C_3 = (z_3(z_3 + \lambda)^2 + z_3 \Omega^2)/(z_3 - z_4)(z_3 - z_2)(z_3 - z_1) \quad (2.52)$$

$$C_4 = (z_4(z_4 + \lambda)^2 + z_4 \Omega^2)/(z_4 - z_1)(z_4 - z_2)(z_4 - z_3) \quad (2.53)$$

Les $\{z_i\}$ sont les quatre racines de l'équation algébrique quartique (appendice B):

$$z^4 + 2\lambda z^3 + z^2(\Omega^2 + \lambda^2 + \omega_0^2 + M_0) + z(M_0\lambda + 2\omega_0^2\lambda) + \omega_0^2(\Omega^2 + \lambda^2) \quad (2.54)$$

Les solutions de cette équation dépendent des valeurs de λ , ω_0 et ω_1 , qui sont à valeurs complexes.

2.4 conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre un modèle théorique de calcul des fonctions d'autocorrélation du micro-champ électrique et de la vitesse (propriétés dynamiques), qui

est valable pour le cas d'un plasma fortement couplé basé sur la fonction de mémoire des trois paramètres de Mori avec $\Omega \gg \lambda$.

Les modes des oscillations $\{z_i\}$ sont déterminés à partir de la résolution de l'équation algébrique quartique. Les solutions sont complexes (conjuguées deux à deux) sauf dans la limite des hautes températures, où le modèle doit être remplacé par un autre modèle adéquat [13].

En principe, cette analyse théorique s'applique pour toute interaction arbitraire et toute composition du plasma.

Chapitre 3

Fonction de distribution du microchamp électrique (propriétés statiques)

3.1 Introduction

La connaissance de la fonction de distribution statique du microchamp électrique dans un mélange de gaz d'un plasma froid est vraiment un élément majeur pour la résolution des nombreux problèmes, en particulier celui relatif au calcul de l'élargissement des raies spectrales émises par les ions et les neutres dans un plasma [29] [30]. Ce problème a été étudié pour la première fois par Holtsmark en 1919 [3], qui l'a résolu en négligeant les corrélations entre les différentes particules chargées qui produisent le champ (des ions indépendants) et en négligeant aussi les interactions des particules neutres avec les particules

chargées. Depuis, plusieurs tentatives ont été faites pour inclure les effets de ces corrélations.

Plus tard, d'autres calculs ont été proposés par M. Baranger et B. Mozer (1959,1960) [6] [7] incluant ces effets en utilisant la méthode " cluster expansion " fréquemment utilisée en mécanique statistique. L'idée est fondée sur un calcul de telle manière qu'on puisse retrouver le résultat de Holtsmark dans la limite de la haute température quand les corrélations sont devenues insignifiantes. Les corrélations apparaissent comme un série de termes de différents ordres. La corrélation au premier ordre consiste à considérer uniquement les termes faisant intervenir les interactions à deux particules. La corrélation suivante fait intervenir évidemment les interaction à trois particules, etc.

C.A. Iglesias et al [32] a élargi la méthode de "cluster expansion" au cas du plasma à deux composantes ioniques.

On distingue deux parties de champ électrique, qu'on appelle les composantes de haute-fréquence et basse-fréquence. La composante de haute-fréquence est celle dont la variation du temps est gouvernée par le mouvement des électrons, tandis que la variation du temps de la composante basse-fréquence est gouvernée par le mouvement des ions.

Notre modèle est une extension du modèle qui a été utilisé par M. Baranger [6] [7] et Held [15] [16], qui considèrent un plasma à une seule composante ou bien à deux composantes totalement ionisé (sans des particules neutres) au cas d'un plasma à deux composantes d'ions mais avec des particules neutres (plasma froid). Dans ce travail nous avons utilisé seulement le premier terme de "cluster expansion" .

3.2 Les interactions dans un gaz ionisé (plasma froid)

La question se pose de savoir quelles sont en fait les formes de potentiel que l'on peut envisager entre les différentes particules dans un plasma froid.

3.2.1 Interaction entre deux particules chargées (ions)

L'énergie d'interaction à grande distance entre deux particules de charge Z_1e et Z_2e est sous la forme connue de Debye [1]:

$$V_{12} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_{12}} \exp(-r_{12}/\lambda_D) \quad \text{où } r_{12} = |r_1 - r_2| \quad (3.1)$$

λ_D est la longueur de Debye électronique:

$$\lambda_D^2 = \frac{k_B T}{4\pi e^2 n_e} \quad (3.2)$$

n_e : densité électronique

k_B : constante de Boltzmann.

e : valeur absolue de la charge élémentaire.

T : température du système à l'équilibre thermodynamique.

La longueur de Debye électronique en unités SI est:

$$\lambda_D = 69. \left(\frac{T}{n_e} \right)^{1/2} \quad (3.3)$$

où la température est exprimée en K et la densité en cm^{-3} .

3.2.2 Interaction entre un ion (particule chargée) et un neutre

Quand un ion Z_0e se trouve à une distance d'un neutre, le potentiel d'interaction est dû essentiellement au mécanisme dit du dipôle induit \vec{P} , où l'ion crée à une distance r un champ [35]:

$$\vec{E} = -\frac{1}{Z_0e} \vec{\nabla} V(r) = -\vec{\nabla} \left[\frac{Z_0e}{r} \exp(-r/\lambda_D) \right] \quad (3.4)$$

$$= \frac{Z_0e}{r^3} \left[1 + \frac{r}{\lambda_D} \right] \exp(-r/\lambda_D) \vec{r} \quad (3.5)$$

Ce champ polarise l'atome neutre en produisant un moment dipolaire:

$$\vec{P} = \alpha \vec{E} = \alpha \frac{Z_0e}{r^3} \left[1 + \frac{r}{\lambda_D} \right] \exp(-r/\lambda_D) \vec{r} \quad (3.6)$$

où α est la polarisabilité du neutre (pour le cas d'un atome $\alpha = R^3$, où R est le rayon de l'atome). L'énergie d'interaction entre l'ion de charge Z_0e et le dipôle induit \vec{P} est [28]:

$$V_{in} = -\vec{P} \cdot \vec{E} = -\alpha |E|^2 = -\alpha \frac{Z_0^2 e^2}{r^4} \left[1 + \frac{r}{\lambda_D} \right]^2 \exp(-2r/\lambda_D) \quad (3.7)$$

3.2.3 Grandeurs caractéristiques

La longueur de Debye du plasma λ_{Dp} peut encore s'écrire en fonction de la longueur de Debye électronique λ_D (3.2) [1]:

$$\lambda_{Dp}^2 = \frac{\lambda_D^2}{1 + \sum_{\sigma} \frac{n_{\sigma}}{n_e} Z_{\sigma}^2} \quad (3.8)$$

n_{σ} : la densité ionique de l'espèce σ .

Z_{σ} : la charge de l'espèce σ .

Le paramètre plasma Λ est une grandeur sans dimension définie par:

$$\Lambda = \frac{e^2}{K_B T \lambda_{Dp}} = \left(1 + \sum_{\sigma} \frac{n_{\sigma}}{n_e} Z_{\sigma}^2 \right)^{1/2} \Lambda_e$$

avec Λ_e le paramètre plasma électronique:

$$\Lambda_e = \frac{e^2}{K_B T \lambda_D} = 2.42 \times 10^{-7} \frac{n_e^{1/2} (cm^{-3})}{T^{3/2} (K)} \quad (3.9)$$

L'introduction du paramètre de corrélation électronique v ¹:

$$v = \frac{r_0}{\lambda_D} = 8.99 \times 10^{-3} \frac{n_e^{1/6}}{T^{1/2}} \quad (3.10)$$

permet également d'exprimer simplement Λ_e . La relation (3.9) s'écrit alors en fonction de v :

$$\Lambda_e = \frac{2\sqrt{2\pi}}{15} v^3 = \frac{v^3}{3} = 0.334.v^3 \quad (3.11)$$

Le paramètre plasma électronique Λ_e dépend d'une manière simple du nombre d'électrons contenus dans la sphère de Debye où:

$$N_{De} \simeq \frac{4}{3} \pi \lambda_D^3 n_e, \quad (3.12)$$

c'est-à-dire, un grand nombre d'électrons dans la sphère de Debye correspond bien à un petit paramètre plasma électronique (interaction faible):

¹Le paramètre de couplage $\Gamma = \frac{\text{énergie potentielle moyenne}}{\text{énergie cinétique moyenne}}$ est relié directement au paramètre de corrélation v

$$\Gamma = \frac{e^2}{K_B T \lambda_D} \frac{\lambda_D}{r_0} = \Lambda_e / v = v^2 / 3$$

$$\Lambda_e = \frac{1}{3N_{De}} \quad (3.13)$$

Donc:

$$v^3 = 1/N_{De} \quad (3.14)$$

La limite interaction faible-interaction forte peut alors être définie par la condition:

$$v = 1 \quad (3.15)$$

Pour un nombre d'électrons dans la sphère de Debye supérieur à l'unité, v est inférieur à un et Λ_e est petit, ce qui correspond à l'approximation des interactions faibles. Lorsqu'il y a en moyenne moins d'un électron dans la sphère de Debye, la notion d'écrantage perd son sens et v est supérieur à l'unité, ce qui est la condition des interaction fortes.

Le rayon de la sphère moyenne r_0 occupée par un électron en mouvement dans l'espace, est donné par:

$$\left(\frac{4}{15}\right) (2\pi)^{3/2} n_e r_0^3 = 1 \quad (3.16)$$

Le champ unité de Holtsmark est:

$$E_0 (KV/cm) = \frac{e}{r_0^2} = 3.75 \times 10^{-10} n_e^{2/3} \quad (3.17)$$

on a toujours n_e en cm^{-3} et T en K .

Dans l'approximation des interactions faibles, la fonction de corrélation de paire ion-ion s'écrit comme:

$$g_{ab}(X) = \exp \left[-Z_a Z_b \frac{\Lambda}{X} e^{-X} \right] \quad (3.18)$$

où:

$$X = \frac{r}{\lambda_D} \quad (3.19)$$

3.3 Les travaux théoriques pour un plasma ionique sans particules neutres

On calcule le champ \vec{E} sur une particule notée "1" de charge $Z_1 e$, placée en \vec{r}_1 . Ce champ est dû au mélange d'ions de différents types σ ($\sigma = a, b$), de charges $Z_\sigma e$ (Z_σ est positif), l'impureté ion est une particule $\sigma = a$. On décrit l'écrantage électronique par une formule de Debye-Hückel. Ceci n'est justifié que lorsque les couplages électron-électron et ion-électron sont tous deux faibles et que, de plus, on puisse employer la mécanique classique pour décrire le plasma. On considère que le système peut être décrit par la mécanique statistique à l'équilibre thermodynamique, à la température T et que Ω est le volume du système qui contient les particules avec les densités partielles n_σ telles que [16]:

$$n_\sigma = \frac{N_\sigma}{\Omega} \text{ et } N = \sum_{\sigma} N_\sigma = N_a + N_b \quad (3.20)$$

L'énergie potentielle totale des ions est:

$$V = V_0 + V_p \quad (3.21)$$

où V_0 décrit l'interaction entre les ions et la particule test placée en \vec{r}_1 :

$$V_0 = \sum_{\sigma=a,b} \sum_{j=1}^{N_\sigma} \frac{Z_1 Z_\sigma e^2}{r_{j1}} \exp\left(-\frac{r_{j1}}{\lambda_D}\right) \quad (3.22)$$

V_p décrit l'interaction entre les ions du mélange.

Le système total est neutre. On doit donc vérifier:

$$\Omega N_e = \sum_{\sigma=a,b} Z_\sigma N_\sigma = Z_a N_a + Z_b N_b \quad (3.23)$$

Le champ électrique en \vec{r}_1 , écranté par les électrons, est donné par:

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \sum_{j=1}^{N_a} \vec{E}_j^a + \sum_{k=1}^{N_b} \vec{E}_k^b = -\frac{1}{Z_1 e} \vec{\nabla} V_0 = \sum_{\sigma=a,b} \sum_{i=1}^{N_\sigma} Z_\sigma e f(r_{1i}) \frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_i)}{r_{1i}} \quad (3.24) \\ f(r) &= \frac{1}{r^2} \left(1 + \frac{r}{\lambda_D}\right) \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) \end{aligned}$$

On définit la distribution du microchamp électrique $W(\vec{E})$ comme étant la densité de probabilité de trouver un champ électrique $\vec{\varepsilon}$ égal à \vec{E} en \vec{r}_1 . Si on considère que le système peut être décrit par la mécanique statistique classique à l'équilibre, $W(\vec{E})$ s'écrit [33]:

$$W(\vec{E}) = \left\langle \delta(\vec{\varepsilon} - \vec{E}) \right\rangle \quad (3.25)$$

Les crochets $\langle \dots \rangle$ sont mis pour une moyenne d'ensemble à l'équilibre:

$$W(\vec{E}) = \int \dots \int \delta(\vec{\varepsilon} - \vec{E}) P(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \quad (3.26)$$

où $P(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)$ est la fonction de probabilité pour que l'une quelconque des particules se trouve au point $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N$ ²:

$$P(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) = \frac{\exp(-V/K_B T)}{Q_N(\{N_\sigma\}, \Omega, T)}$$

où $Q_N(\{N_\sigma\}, \Omega, T)$ est la fonction de partition:

$$Q_N(\{N_\sigma\}, \Omega, T) = \int \dots \int \prod_{j=1}^N d\vec{r}^j \exp\left(-\frac{V}{k_B T}\right) \quad (3.27)$$

Pour expliquer le modèle, on prend la transformée de Fourier $F(\vec{k})$ de $W(\vec{E})$, qui est définie de la façon suivante [33]:

$$\begin{aligned} F(\vec{k}) &= \int_{\text{tout l'espace}} d\vec{E} W(\vec{E}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{E}) \\ &= \int_{\text{tout l'espace}} d\vec{E} \langle \delta(\vec{\varepsilon} - \vec{E}) \rangle \exp(i\vec{k} \cdot \vec{E}) \\ &= \langle \exp(i\vec{k} \cdot \vec{E}) \rangle \\ &= \int \dots \int \exp(i\vec{k} \cdot \vec{E}) P(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \end{aligned} \quad (3.28)$$

L'inversement de celle-ci est:

$$W(\vec{E}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\text{tout l'espace}} d\vec{k} F(\vec{k}) \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{E}) \quad (3.29)$$

Si on intègre en coordonnées sphériques, on trouve aisément en considérant l'isotropie du problème:

²Nous rappelons que, $P(\vec{r}_i \dots \vec{r}_s) = \int \dots \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_i d\vec{r}_{i-1} d\vec{r}_{s+1} \dots d\vec{r}_N P(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)$

$$P(E) = 4\pi E^2 W(E) = \frac{2E}{\pi} \int_0^\infty dk k \sin(kE) F(k) \quad (3.30)$$

En remplaçant chaque exponentielle, $\exp(-i \vec{k} \cdot \vec{E}_i^{a,b})$, par la fonction φ [16]:

$$\exp(i \vec{k} \cdot \vec{E}_j^a) = 1 + \left[\exp(i \vec{k} \cdot \vec{E}_j^a) - 1 \right] = 1 + \varphi_j^a \quad (3.31)$$

$$\exp(i \vec{k} \cdot \vec{E}_k^b) = 1 + \left[\exp(i \vec{k} \cdot \vec{E}_k^b) - 1 \right] = 1 + \varphi_k^b \quad (3.32)$$

En introduisant l'équation (3.24) dans la définition (3.28), $F(k)$ devient:

$$\begin{aligned} F(k) = & 1 + \sum_1 \int P_1(\vec{r}_j) \varphi_j^a d\vec{r}_j + \sum_1' \int P_1(\vec{r}_k) \varphi_k^b d\vec{r}_k + \\ & \sum_2 \int P_2(\vec{r}_j, \vec{r}_{j'}) \varphi_j^a \varphi_{j'}^a d\vec{r}_j d\vec{r}_{j'} + \sum_2' \int P_2(\vec{r}_k, \vec{r}_{k'}) \varphi_k^b \varphi_{k'}^b d\vec{r}_k d\vec{r}_{k'} \\ & + \sum_1 \sum_1' \int P_2^{ab}(\vec{r}_j, \vec{r}_k) \varphi_j^a \varphi_k^b d\vec{r}_j d\vec{r}_k + \dots \end{aligned} \quad (3.33)$$

où \sum_1 (\sum_1') dénote une somme sur les particules a (b), et \sum_2 (\sum_2') est une somme sur les paires aa (bb), etc. Le second pas dans ce formalisme est l'introduction de la "cluster expansion":

$$\begin{aligned} \Omega^M P_M^a(\vec{r}_j, \dots, \vec{r}_j^M) &= \prod_j g_1^a(\vec{r}_j) + \sum_2 g_2^a(\vec{r}_j, \vec{r}_{j'}) \prod_{j''} g_1^a(\vec{r}_{j''}) + \dots \\ \Omega^M P_M^b(\vec{r}_j, \dots, \vec{r}_k^M) &= \prod_k g_1^b(\vec{r}_k) + \sum_2 g_2^b(\vec{r}_k, \vec{r}_{k'}) \prod_{k''} g_1^b(\vec{r}_{k''}) + \dots \\ \Omega^M P_M^{ab}(\vec{r}_j, \dots, \vec{r}_j^M, \vec{r}_k, \dots, \vec{r}_k^M) &= \prod_j g_1^a(\vec{r}_j) \prod_k g_1^b(\vec{r}_k) + \\ & \sum_2 g_2^{ab}(\vec{r}_j, \vec{r}_k) \prod_{j'} g_1^a(\vec{r}_{j'}) \prod_{k'} g_1^b(\vec{r}_{k'}) + \dots \end{aligned} \quad (3.34)$$

où M réfère aux particules localisées à $\vec{r}_j, \dots, \vec{r}_j^M$; l'utilisation des équations (3.34) et (3.33) donne:

$$F(\vec{k}) = G_1(\vec{k})G_2(\vec{k})G_3(\vec{k})\dots \quad (3.35)$$

avec:

$$G_p(\vec{k}) = \exp \left[\sum_{q=0}^p \frac{n_a^q n_b^{p-q}}{q! (p-q)!} h_{q,p-q}(\vec{k}) \right] \quad (3.36)$$

et:

$$h_{q,p-q}(\vec{k}) = \int \dots \int \varphi_1^a \dots \varphi_q^a \varphi_{q+1}^b \dots \varphi_p^b g_{p,p-q}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_p) d\vec{r}_1, \dots, d\vec{r}_p \quad (3.37)$$

où $g_{p,p-q}$ est une fonction de corrélation pour q particules d'espèce a et $p-q$ particules d'espèce b .

Finalement, on obtient:

$$F(\vec{k}) = \exp \left[\sum_{p=1}^{\infty} \sum_{q=0}^p \frac{n_a^q n_b^{p-q}}{q! (p-q)!} h_{q,p-q}(\vec{k}) \right] \quad (3.38)$$

En faisant le changement des variables sans dimension $u = kE_0$, et $\beta = E/E_0$, les équations (3.38) et (3.30) deviennent:

$$F(u) = \exp \left[n_a h_1^a(u) + n_b h_1^b(u) + n_a n_b h_2^{ab}(u) + \frac{1}{2} n_a^2 h_2^a(u) + \frac{1}{2} n_b^2 h_2^b(u) + \dots \right] \quad (3.39)$$

avec:

$$h_{q,p-q}(u) = \int \dots \int \varphi_1^a \dots \varphi_q^a \varphi_{q+1}^b \dots \varphi_p^b g_{p,p-q}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_p) d\vec{r}_1, \dots, d\vec{r}_p \quad (3.40)$$

et:

$$H(\beta) = E_0 P(\beta) = \frac{2\beta}{\pi} \int_0^{\infty} u \sin(\beta u) F(u) du \quad (3.41)$$

Dans le cas d'un plasma à une seule espèce, les équations (3.39) et (3.40) deviennent:

$$F(u) = \exp \left[\sum_{p=1}^{\infty} (n^p/p!) h_p(u) \right] = \exp \left[n h_1(u) + \frac{1}{2} n^2 h_2(u) + \dots \right] \quad (3.42)$$

avec:

$$h_p(u) = \int \dots \int \varphi_1 \varphi_2 \dots \varphi_p g_p(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_p) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_p \quad (3.43)$$

qui est la forme originale introduite par M. Baranger et B. Mozer [6] [7] et aussi la forme obtenue par B. Held [16] par extension.

3.3.1 Approximation Holtsmark 1919

Dans ce cas, on suppose qu'il n'y a aucune interaction interparticulaire, $V = 0$, ou bien, si $V \neq 0$, la température est très grande ($T \rightarrow \infty$)[3],

$$\begin{aligned} h_j^{a,b}(\text{Holts}) &= \int \varphi_1^{a,b} d\vec{r}_1, & j = 1 \\ &= 0, & j > 2 \end{aligned}$$

3.3.2 Approximation "Independent particle" 1958

Introduite par H. Margenau et M. Lewis [5] [30], cette approximation tient compte seulement des interactions centrales entre les N particules et la particule test, c'est à dire $h_j = 0$ pour tous les $j > 2$:

$$F(u) = \exp \left[n_a h_1^a(u) + n_b h_1^b(u) \right] \quad (3.44)$$

$$h_1^{a,b}(u) = 4\pi \int_0^\infty g_1^{a,b}(\vec{r}_1) \left[j_0 \left(k E_1^{a,b} \right) - 1 \right] r_1^2 dr_1$$

où j_0 est la fonction de Bessel sphérique d'ordre 0.

Cette approximation est seulement le premier terme du développement de Baranger-Mozer.

3.3.3 Méthode approchée: Apex

La méthode APEX a été développée par C. A. Iglesias et al en 1983 [34]. APEX (Adjustable Parameter EXponential) est une méthode de calcul des distributions de micro-champs basée sur l'expression de la transformée de Fourier de $W(\vec{E})$ en termes de fonctions de distribution de paires. On approche cette fonction par une forme contenant des paramètres que l'on fixe en calculant le second moment de la fonction de distribution du micro-champ.

Chaque particule du plasma est remplacée par une "quasi-particule" dont les propriétés sont les suivantes: elle n'interagit pas avec les autres particules mais produit un champ électrique paramétré $F_\sigma(r)$ (particule d'espèce σ) sur la particule "0" [26] [33]:

$$F_\sigma(r) = \frac{(1 + \alpha_\sigma)}{r^2} \exp(-\alpha_\sigma r) \quad (3.45)$$

Pour déterminer les paramètres α_σ ainsi que la distribution des quasi-particules en \vec{r}_0 , deux conditions doivent être vérifiées:

- on doit retrouver le second moment de la distribution du champ, espèce par espèce.

$$\langle E^2 \rangle = (Z_0 e)^{-2} \langle \vec{\nabla}_0 V \cdot \vec{\nabla}_0 V \rangle \quad (3.46)$$

$$= \left(\frac{K_B T}{Z_0^2 e^2} \right) \langle \nabla_0^2 V \rangle \quad (3.47)$$

où $\vec{\nabla}_0$ est le gradient en ce qui concerne \vec{r}_0 .

$$\langle E^2 \rangle = \left(\frac{K_B T}{Z_0^2 e^2} \right) \left\langle \frac{V_0}{\lambda_D^2} - 4\pi Z_0 e^2 \sum_{\sigma} \sum_{j=1}^{N_{\sigma}} Z_{\sigma,j} \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_j) \right\rangle \quad (3.48)$$

$$= \frac{4\pi K_B T}{Z_0} \sum_{\sigma} Z_{\sigma} N_{\sigma} \Psi_{\sigma} \left(\frac{1}{\lambda_D} \right) \quad (3.49)$$

avec,

$$\Psi_{\sigma} \left(\frac{1}{\lambda_D} \right) = \frac{1}{\lambda_D^2} \int_0^{\infty} dr \cdot r g_{\sigma}(r) \exp\left(\frac{-r}{\lambda_D}\right) \quad (3.50)$$

$g_{\sigma}(r)$ est la fonction de distribution des ions d'espèce σ , situés à la distance r de la particule "0".

- Le champ créé en \vec{r}_0 par les quasi-particules, à l'intérieur d'un élément de volume $d\vec{r}$ en \vec{r} , doit être égal à celui produit par l'ensemble des particules chargées dans le même élément $d\vec{r}$ et quel que soit \vec{r} , et ceci espèce par espèce: c'est la "contrainte du champ local".

On introduit $G_{\sigma}(r)$ et $Z_{\sigma} e F_{\sigma}(r)$ qui sont respectivement la distribution des quasi-particules d'espèce σ , situées à la distance r de la particule 0 et l'amplitude du champ

électrique en \vec{r} dû à une des quasi-particules. Alors, si la contrainte du champ local est valable, on a pour chaque espèce,

$$N_\sigma G_\sigma(r) Z_\sigma e F_\sigma(r) d\vec{r} = N_\sigma g_\sigma(r) Z_\sigma e f(r) d\vec{r} \quad (3.51)$$

ou, de façon équivalente,

$$G_\sigma(r) = \frac{g_\sigma(r) f(r)}{F_\sigma(r)} \quad (3.52)$$

et ce, quel que soit l'espèce σ .

En utilisant l'image des quasi-particules associées à $G_\sigma(r)$, on obtient l'expression suivante,

$$T(k) = \exp \left(4\pi \sum_\sigma N_\sigma \int_0^\infty dr . r^2 g_\sigma(r) \frac{f(r)}{F_\sigma(r)} [j_0(k Z_\sigma e F_\sigma(r)) - 1] \right) \quad (3.53)$$

Les valeurs des paramètres α_σ sont obtenues en comparant les expressions du second moment (3.49) et (3.53),

$$\frac{Z_0 Z_\sigma e^2}{K_B T} \int_0^\infty dr . r^2 g_\sigma(r) f(r) F_\sigma(r) = \Psi_\sigma \left(\frac{1}{\lambda_D} \right) \quad (3.54)$$

L'équation (3.54), associée à la connaissance de $g_\sigma(r)$ permet d'obtenir les paramètres α_σ et ainsi de connaître la fonction de distribution du micro-champ.

3.3.4 La simulation numérique

Le modèle de simulation numérique (la dynamique moléculaire, la simulation de Monte Carlo) représente une approche de la réalité physique qui est intermédiaire entre

la théorie et l'expérience, et qu'il a joué un rôle important pour la validation des autres approches [26].

Dans cette méthode, on se donne N particules placées dans une cellule de volume fixe, généralement de forme cubique. A un instant initial, on donne aux paricules des vitesses telles que la quantité de mouvement totale soit nulle. Les trajectoires de toutes les particules peuvent être suivies longtemps qu'on le souhaite par intégration numérique des équations du mouvement.

3.4 Le modèle de mélange d'un plasma ionique avec des particules neutres

Notre modèle est une extension du Modèle de B. Held (B-M) [16]. On calcule le champ \vec{E} sur une particule notée "1" de charge Z_1e , placée en \vec{r}_1 . Mais ici ce champ est dû à un mélange d'ions de différents types $\sigma (\sigma = a, b)$, de charges $Z_\sigma e$, et des neutres de différents types $\sigma (\sigma = c, d)$ avec la polarisabilité α_σ (les neutres ici sont de mêmes types que les ions). On décrit toujours l'écrantage électronique par une formule de Debye-Hückel. On considère que le système peut être décrit par la mécanique statistique à l'équilibre thermodynamique, à la température T et que Ω est le volume du système qui contient les particules avec les densités partielles n_σ telles que,

$$n_\sigma = \frac{N_\sigma}{\Omega}, \quad \text{et} \quad N = \sum_{\sigma} N_\sigma = N_a + N_b + N_c + N_d \quad (3.55)$$

$$N_e = \sum_{\sigma} Z_\sigma N_\sigma = Z_a N_a + Z_b N_b \quad (3.56)$$

Nous introduisons les paramètres de la composition:

$$P = \frac{N_b}{N_a + N_b} \quad (3.57)$$

$$p' = \frac{N_b}{N_a + N_b + N_c + N_d} \quad (3.58)$$

$$n_e = Z_a n_a + Z_b n_b \quad (3.59)$$

L'énergie potentielle totale due au mélange sur la particule test \vec{r}_1 est:

$$V = V_1^i + V_1^n + V_p \quad (3.60)$$

où V_1^i et V_1^n décrit l'interaction entre les ions et la particule test \vec{r}_1 et l'interaction entre les neutres et la particule test \vec{r}_1 respectivement:

$$V_1^i = \sum_{\sigma=a,b} \sum_{i=1}^{N_\sigma} \frac{Z_1 Z_\sigma e^2}{r_{i1}} \exp\left(-\frac{r_{i1}}{\lambda_D}\right) \quad (3.61)$$

$$V_1^n = - \sum_{\sigma=c,d} \sum_{j=1}^{N_\sigma} \frac{\alpha_\sigma Z_1^2 e^2}{r_{j1}^4} \left[1 + \frac{r_{j1}}{\lambda_D}\right]^2 \exp(-2r_{j1}/\lambda_D) \quad (3.62)$$

et V_p est le reste des interactions.

Le champ électrique ionique en \vec{r}_1 , écranté par les électrons, est donné comme:

$$\vec{E}^i = \vec{E}^a + \vec{E}^b = -\frac{1}{Z_1 e} \vec{\nabla} V_0^i = \sum_{\sigma=a,b} \sum_{j=1}^{N_\sigma} Z_\sigma e f(r_{1j}) \frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_j)}{r_{1j}^2} \quad (3.63)$$

$$f(r) = \frac{1}{r^2} \left(1 + \frac{r}{\lambda_D}\right) \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right)$$

Le champ électrique créé par les neutres en \vec{r}_1 :

$$\vec{E}^n = \vec{E}^c + \vec{E}^d = -\frac{1}{Z_0 e} \vec{\nabla} V_0^n = \sum_{\sigma=c,d} \sum_{j=1}^{N_\sigma} \alpha_\sigma Z_1 e f'(r_{1j}) \frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_j)}{r_{1j}} \quad (3.64)$$

$$f'(r) = \frac{2}{r^5} \left[1 + \frac{r}{\lambda_D} + \left(1 + \frac{r}{\lambda_D} \right)^2 \right] \exp\left(-\frac{2r}{\lambda_D}\right) \quad (3.65)$$

Le champ électrique total \vec{E} en \vec{r}_1 :

$$\vec{E} = \vec{E}^a + \vec{E}^b + \vec{E}^c + \vec{E}^d \quad (3.66)$$

$$= \sum_{j=1}^{N_a} \vec{E}_j^a + \sum_{k=1}^{N_b} \vec{E}_k^b + \sum_{i=1}^{N_c} \vec{E}_i^c + \sum_{l=1}^{N_d} \vec{E}_l^d \quad (3.67)$$

Utilisant les résultats du chapitre précédent, la distribution du microchamp électrique $W(\vec{E})$ s'écrit:

$$W(\vec{E}) = \langle \delta(\vec{\varepsilon} - \vec{E}) \rangle \quad (3.68)$$

$$= \int \cdots \int \delta(\vec{\varepsilon} - \vec{E}) P(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \quad (3.69)$$

On prend la transformée de Fourier $F(\vec{k})$ de $W(\vec{E})$:

$$F(\vec{k}) = \langle \exp(i \vec{k} \cdot \vec{E}) \rangle \quad (3.70)$$

telle que:

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{E}_i^a) = 1 + \left[\exp(i\vec{k} \cdot \vec{E}_i^a) - 1 \right] = 1 + \varphi_i^a \quad (3.71)$$

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{E}_j^b) = 1 + \left[\exp(i\vec{k} \cdot \vec{E}_j^b) - 1 \right] = 1 + \varphi_j^b \quad (3.72)$$

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{E}_k^c) = 1 + \left[\exp(i\vec{k} \cdot \vec{E}_k^c) - 1 \right] = 1 + \varphi_k^c \quad (3.73)$$

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{E}_l^d) = 1 + \left[\exp(i\vec{k} \cdot \vec{E}_l^d) - 1 \right] = 1 + \varphi_l^d \quad (3.74)$$

Donc $F(k)$ devient:

$$\begin{aligned} F(\vec{k}) &= 1 + \sum_1 \int P(\vec{r}_i) \varphi_i^a d\vec{r}_i + \sum_1' \int P(\vec{r}_j) \varphi_j^b d\vec{r}_j + \sum_1'' \int P(\vec{r}_k) \varphi_k^c d\vec{r}_k \\ &+ \sum_1''' \int P(\vec{r}_l) \varphi_l^d d\vec{r}_l + \sum_2 \int P(\vec{r}_i, \vec{r}_{i'}) \varphi_i^a \varphi_{i'}^a d\vec{r}_i d\vec{r}_{i'} \\ &+ \sum_2' \int P(\vec{r}_j, \vec{r}_{j'}) \varphi_j^b \varphi_{j'}^b d\vec{r}_j d\vec{r}_{j'} + \sum_2'' \int P(\vec{r}_k, \vec{r}_{k'}) \varphi_k^c \varphi_{k'}^c d\vec{r}_k d\vec{r}_{k'} \\ &+ \sum_2''' \int P(\vec{r}_l, \vec{r}_{l'}) \varphi_l^d \varphi_{l'}^d d\vec{r}_l d\vec{r}_{l'} + \sum_1 \sum_1' \int P(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \varphi_i^a \varphi_j^b d\vec{r}_i d\vec{r}_j \\ &+ \sum_1 \sum_1'' \int P(\vec{r}_i, \vec{r}_k) \varphi_i^a \varphi_k^c d\vec{r}_i d\vec{r}_k + \dots \end{aligned} \quad (3.75)$$

où \sum_1 (\sum_1' , \sum_1'' , \sum_1''') dénote une somme sur les particules a (b , c , d), alors que \sum_2 (\sum_2' , \sum_2'' , \sum_2''') est une somme sur aa (bb , cc , dd), etc. Par l'utilisation de la présentation de "cluster expansions":

$$\begin{aligned}
\Omega^M P_M^a(\vec{r}_j, \dots, \vec{r}_j^M) &= \prod_j g_1^a(\vec{r}_j) + \sum_2 g_2^a(\vec{r}_j, \vec{r}_{j'}) \prod_{j''} g_1^a(\vec{r}_{j''}) + \dots \\
\Omega^M P_M^b(\vec{r}_j, \dots, \vec{r}_k^M) &= \prod_k g_1^b(\vec{r}_k) + \sum_2 g_2^b(\vec{r}_k, \vec{r}_{k'}) \prod_{k''} g_1^b(\vec{r}_{k''}) + \dots \\
\Omega^M P_M^c(\vec{r}_i, \dots, \vec{r}_i^M) &= \prod_i g_1^c(\vec{r}_i) + \sum_2 g_2^c(\vec{r}_i, \vec{r}_{i'}) \prod_{ij''} g_1^c(\vec{r}_{i''}) + \dots \\
\Omega^M P_M^d(\vec{r}_l, \dots, \vec{r}_l^M) &= \prod_l g_1^d(\vec{r}_l) + \sum_2 g_2^d(\vec{r}_l, \vec{r}_{l'}) \prod_{l''} g_1^d(\vec{r}_{l''}) + \dots \\
\Omega^M P_M^{ab}(\vec{r}_j, \dots, \vec{r}_j^M, \vec{r}_k, \dots, \vec{r}_k^M) &= \prod_j g_1^a(\vec{r}_j) \prod_k g_1^b(\vec{r}_k) + \\
&\quad \sum_2 g_2^{ab}(\vec{r}_j, \vec{r}_k) \prod_{j'} g_1^a(\vec{r}_{j'}) \prod_{k'} g_1^b(\vec{r}_{k'}) + \dots
\end{aligned}$$

où M se réfère à des particules localisées à $\vec{r}_j, \dots, \vec{r}_j^M$, g_1^a (g_1^b, g_1^c, g_1^d) est la fonction de corrélation de a (b, c, d), et g_2^{aa} ($g_2^{bb}, g_2^{cc}, g_2^{dd}, g_2^{ab}, g_2^{ac}, g_2^{ad}, g_2^{bc}, g_2^{bd}, g_2^{cd}$) est la fonction de corrélation de paires aa ($bb, cc, dd, ab, ac, ad, bc, bd, cd$), on trouve:

$$\begin{aligned}
F(k) &= 1 + n_a \int g_1^a(\vec{r}_i) \varphi_i^a d\vec{r}_j + n_b \int g_1^b(\vec{r}_j) \varphi_j^b d\vec{r}_j + n_c \int g_1^c(\vec{r}_k) \varphi_k^c d\vec{r}_k \\
&\quad + n_d \int g_1^d(\vec{r}_l) \varphi_l^d d\vec{r}_l + \frac{n_a^2}{2} \int g_2^{aa}(\vec{r}_i, \vec{r}_{i'}) \varphi_i^a \varphi_{i'}^a d\vec{r}_i d\vec{r}_{i'} \\
&\quad + \frac{n_b^2}{2} \int g_2^{bb}(\vec{r}_j, \vec{r}_{j'}) \varphi_j^b \varphi_{j'}^b d\vec{r}_j d\vec{r}_{j'} + \frac{n_c^2}{2} \int g_2^{cc}(\vec{r}_k, \vec{r}_{k'}) \varphi_k^c \varphi_{k'}^c d\vec{r}_k d\vec{r}_{k'} \\
&\quad + \frac{n_d^2}{2} \int g_2^{dd}(\vec{r}_l, \vec{r}_{l'}) \varphi_l^d \varphi_{l'}^d d\vec{r}_l d\vec{r}_{l'} + n_a n_b \int g_2^{ab}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \varphi_i^a \varphi_j^b d\vec{r}_i d\vec{r}_j \\
&\quad + n_a n_c \int g_2^{ac}(\vec{r}_i, \vec{r}_k) \varphi_i^a \varphi_k^c d\vec{r}_i d\vec{r}_k + n_a n_d \int g_2^{ad}(\vec{r}_i, \vec{r}_l) \varphi_i^a \varphi_l^d d\vec{r}_i d\vec{r}_l \\
&\quad + n_b n_c \int g_2^{bc}(\vec{r}_j, \vec{r}_k) \varphi_j^b \varphi_k^c d\vec{r}_j d\vec{r}_k + n_b n_d \int g_2^{bd}(\vec{r}_j, \vec{r}_l) \varphi_j^b \varphi_l^d d\vec{r}_j d\vec{r}_l \\
&\quad + n_c n_d \int g_2^{cd}(\vec{r}_k, \vec{r}_l) \varphi_k^c \varphi_l^d d\vec{r}_k d\vec{r}_l + \dots
\end{aligned} \tag{3.76}$$

Donc:

$$\begin{aligned}
F(u) \simeq & \exp \left[n_a h_1^a(u) + n_b h_1^b(u) + n_c h_1^c(u) + n_d h_1^d(u) + n_a n_b h_2^{ab}(u) \right. \\
& + n_a n_c h_2^{ac}(u) + n_a n_d h_2^{ad}(u) + n_b n_c h_2^{bc}(u) + n_b n_d h_2^{bd}(u) \\
& \left. + n_c n_d h_2^{cd}(u) + \frac{1}{2} n_a^2 h_2^{aa}(u) + \frac{1}{2} n_b^2 h_2^{bb}(u) + \frac{1}{2} n_c^2 h_2^{cc}(u) + \frac{1}{2} n_d^2 h_2^{dd}(u) \right] \quad (3.77)
\end{aligned}$$

avec:

$$h_1^a(u) = \int g_1^a(\vec{r}_1) \varphi_1^a d\vec{r}_1 \quad (3.78)$$

$$h_1^b(u) = \int g_1^b(\vec{r}_1) \varphi_1^b d\vec{r}_1 \quad (3.79)$$

$$h_1^c(u) = \int g_1^c(\vec{r}_1) \varphi_1^c d\vec{r}_1 \quad (3.80)$$

$$h_1^d(u) = \int g_1^d(\vec{r}_1) \varphi_1^d d\vec{r}_1 \quad (3.81)$$

$$h_2^{aa}(u) = \int g_2^{aa}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi_1^a \varphi_2^a d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (3.82)$$

$$h_2^{bb}(u) = \int g_2^{bb}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi_1^b \varphi_2^b d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (3.83)$$

$$h_2^{cc}(u) = \int g_2^{cc}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi_1^c \varphi_2^c d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (3.84)$$

$$h_2^{dd}(u) = \int g_2^{dd}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi_1^d \varphi_2^d d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (3.85)$$

$$h_2^{ab}(u) = \int g_2^{ab}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi_1^a \varphi_2^b d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (3.86)$$

$$h_2^{ac}(u) = \int g_2^{ac}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi_1^a \varphi_2^c d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (3.87)$$

$$h_2^{ad}(u) = \int g_2^{ad}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi_1^a \varphi_2^d d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (3.88)$$

$$h_2^{bc}(u) = \int g_2^{bc}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi_1^b \varphi_2^c d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (3.89)$$

$$h_2^{bd}(u) = \int g_2^{bd}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi_1^b \varphi_2^d d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (3.90)$$

$$h_2^{cd}(u) = \int g_2^{cd}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi_1^c \varphi_2^d d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (3.91)$$

On peut dire que l'équation (3.77) de $F(u)$ est une extension de l'expression de Baranger-Mozer (B-M)(3.39) [15] [16] dans le cas d'un plasma à deux composantes ioniques et deux composantes neutres. Nous avons utilisé seulement les terme de $h_1^{a,b,c,d}(u)$ dans la formule (3.77): c'est le modèle de 'Independent Particule'[33]. L'équation (3.77) dans cette approximation devient alors,

$$F_{IP}(u) \simeq \exp \left[n_a h_1^a(u) + n_b h_1^b(u) + n_c h_1^c(u) + n_d h_1^d(u) \right] \quad (3.92)$$

Dans le calcul des $\varphi_i^a(\varphi_i^b, \varphi_i^c, \varphi_i^d)$, nous avons utilisé l'expression des harmoniques sphériques,

$$\varphi_i^{a,b,c,d} = \sum_l i^l \left[4\pi (2l+1)^{1/2} \left[j_l \left(Z_i^{a,b,c,d} \right) - \delta_{l0} \right] Y_{l0}(\theta_i, \omega_i) \right] \quad (3.93)$$

où $j_l(Z)$ est la fonction de Bessel sphérique.

Les $h_1^{a,b,c,d}(u)$ sont exprimés comme ($Z_i^{a,b,c,d} = kE_i^{a,b,c,d}$, $X_i = r_i/\lambda_D$),

$$n_a h_1^{a,b,c,d}(u) = -u^{3/2} \phi_1^{a,b,c,d}(a) \quad (3.94)$$

$$\phi_1^{a,b,c,d}(a) = \frac{15}{2(2\pi)^{1/2}} \frac{n_{a,b,c,d}}{n_e} \frac{1}{a^3} \int_0^\infty \left[1 - j_0 \left(Z_1^{a,b,c,d} \right) \right] g_1^{a,b,c,d}(X_1) X_1^2 dX_1 \quad (3.95)$$

où $a = u^{1/2} v = \sqrt{ke}/\lambda_D$

Finalement, la distribution du microchamp est obtenue comme:

$$H(\beta) = E_0 P(\beta) = \frac{2\beta}{\pi} \int_0^\infty u \sin(\beta u) F(u) du \quad (3.96)$$

Dans notre travail nous avons utilisé un plasma de paramètres ($a = Ar^{+17}$, $b = H^+$ avec $p \simeq 1$ ($N_a = 0$) et $c = Ar$, $d = H$ avec $N_c = 0$ c'est -à dire $p' = \frac{N_d}{N_b + N_d}$). Ici nous faisons allusion à la possibilité d'utiliser de petites traces d'un ion test de Ar^{+17} dans un mélange de (Ar^{+17} , Ar , H , H^+). Donc,

$$n_a h_1^a(u) + n_b h_1^b(u) + n_c h_1^c(u) + n_d h_1^d(u) = -u^{3/2} (\phi_1^b(a) + \phi_1^d(a)) \quad (3.97)$$

et les fonctions de corrélation de paire sont [6] [16],

$$g_1^b(X) = \exp \left[-Z_b Z_b \Lambda \frac{e^{-RX}}{X} \right] = \exp \left[-17. \Lambda \frac{e^{-\sqrt{2}X}}{X} \right] \quad (3.98)$$

$$\Lambda = R \Lambda_e = 0.334 \sqrt{2} v^3 \quad (3.99)$$

$$g_1^d(X) = 1 \quad (3.100)$$

et,

$$\phi_1^b(a) = \frac{15}{2(2\pi)^{1/2}} \left[\frac{n_b}{n_e} \right] \frac{1}{a^3} \int_0^\infty \left[1 - j_0 \left(Z_1^b \right) \right] g_1^b(X_1) X_1^2 dX_1 \quad (3.101)$$

$$\phi_1^d(a) = \frac{15}{2(2\pi)^{1/2}} \left[\frac{n_d}{n_e} \right] \frac{1}{a^3} \int_0^\infty \left[1 - j_0 \left(Z_1^d \right) \right] X_1^2 dX_1 \quad (3.102)$$

$$Z_1^b = \frac{Z_b a^2}{X_1^2} (1 + X_1) e^{-X_1} \quad (3.103)$$

$$Z_1^d = \frac{2\bar{\alpha}_d a^2 v^3 Z_b}{X_1^2} (1 + X_1 + (1 + X_1)^2) e^{-2X_1} \quad (3.104)$$

où, $Z_a = 17$ et $Z_b = 1$

$$\frac{n_d}{n_e} = \frac{(1 - p')}{Z_b p'}, \quad \frac{n_b}{n_e} = \frac{1}{Z_b} = 1 \quad (3.105)$$

$$\bar{\alpha}_d = \alpha_d / r_0^3 \quad (\text{sans dimension}) \quad (3.106)$$

La polarisabilité de H est $\alpha = 0.7(A^\circ)^3$.

Finalement, on trouve que,

$$F(u) = \exp \left\{ -u^{3/2} \left(\phi_1^b + \phi_1^d \right) \right\} \quad (3.107)$$

$$H(\beta) = \frac{2\beta}{\pi} \int u \sin(\beta u) F(u) du \quad (3.108)$$

Bien que les calculs précédents aient été conduits dans les conditions les plus simple (sans corrélation ou bien avec des interactions faibles), il n'est pas possible d'intégrer analytiquement l'expression (3.108) dans le cas général. En pratique, la distribution $H(\beta)$ dépend des conditions de densité et de température du plasma, ces grandeurs étant introduites par l'intermédiaire des termes de corrélation [1]. La fonction $H(\beta)$ est alors déterminée

numériquement en calculant la valeur du paramètre de corrélation électrique v (3.10) correspondant au plasma étudié. Celui-ci étant proportionnel à la densité électronique et inversement proportionnel à la température, on note que la distribution de Holtsmark correspond à la limite des hautes températures et faibles densités ($v = 0$).

L'équation (3.101) de $\phi_1^b(a)$ représentée en fonction de a dans la figure 3.1 pour Ar^{+17} dans un mélange de $(Ar^{+17} - H^+)$ pour différentes valeurs de v telles que $p = 1$ et $p' = 1$. Ce calcul a été fait par B. Held [16] mais par une méthode d'intégration simple (trapèze). Dans notre calcul, nous avons utilisé une méthode plus élaborée (Library libslatec.a) donnant des résultats calculés presque exacts.

La figure 3.2 représente notre calcul de la fonction de distribution du microchamp $H(\beta)$ pour un mélange de $(Ar^{+17} - H^+)$ sans l'interaction de neutres c'est-à-dire que $p = 1$ et $p' = 1$ pour différentes valeurs de v ; ici aussi nous avons utilisé la bibliothèque (libslatec.a) dans le calcul des intégrales.

On représente dans la figure 3.3 une comparaison entre notre calcul de $H(\beta)$ (où nous avons utilisé seulement le terme h_1) et le résultat de B. Held [16] où il a utilisé le modèle de B-M (avec les termes h_1 et h_2) dans le cas de $v = 0.2$.

Dans la figure 3.4 on montre la variation de la fonction de distribution du microchamp $H(\beta)$ en fonction de la densité électronique n_e , dans le cas d'un mélange de (Ar^{+17}, H^+, Ar, H) , l'impureté étant toujours $Z_0 = Z_a = 17$.

Dans la Figure 3.5, on trace la variation de la fonction de distribution du microchamp $H(\beta)$ en fonction de v pour une densité électronique fixée.

Sur la figure 3.6, la variation de la fonction de distribution du microchamp $H(\beta)$

en fonction de p' illustrée.

On constate que le maximum de la fonction de distribution du microchamp $H(\beta)$ est déplacé vers les faibles champs et que sa largeur à mi-hauteur diminue lorsque les corrélations entre les particules augmentent, la surface sous la courbe restant constante et égale à 1,

$$\int_0^{\infty} H(\beta) d\beta = 1 \quad (3.109)$$

On remarque aussi que le maximum de la fonction de distribution du microchamp $H(\beta)$ diminue avec l'augmentation de densité électronique (l'augmentation de densité électronique=l'augmentation de polarisabilité dans l'unité $\bar{\alpha}$).

On remarque que l'effet d'interaction des neutres avec l'impureté est très important (Figure 3.6), car le maximum de la fonction du microchamp $H(\beta)$ diminue avec l'augmentation de la concentration des neutres dans le plasma.

Le calcul exact de la fonction de distribution $H(\beta)$ au sein d'un plasma est très compliquée. La connaissance de la distribution du microchamp est d'un grand intérêt en raison des informations qu'elle contient. En particulier, l'étude de l'effet Stark résultant de son action sur les neutres et les ions du plasma nous renseigne sur la densité et la température du milieu [15][16][1].

Le modèle présenté ici nous donne une idée sur l'effet d'interaction des neutres dans un plasma froid dans le cadre de l'approximation de "Independent particle".

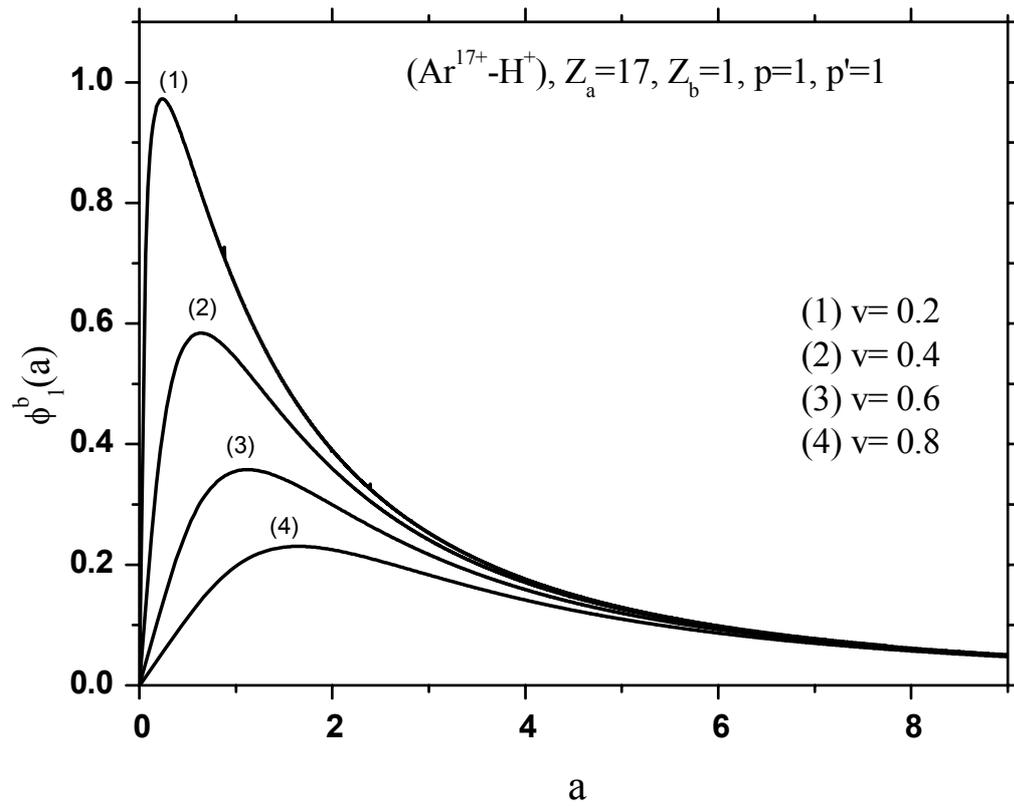


Figure 3.1: $\phi_1^b(a)$ pour le mélange $(\text{Ar}^{17+} + \text{H}^+)$ à $Z_0 = \text{Ar}^{+17}$ ($p = 1, p' = 1$).

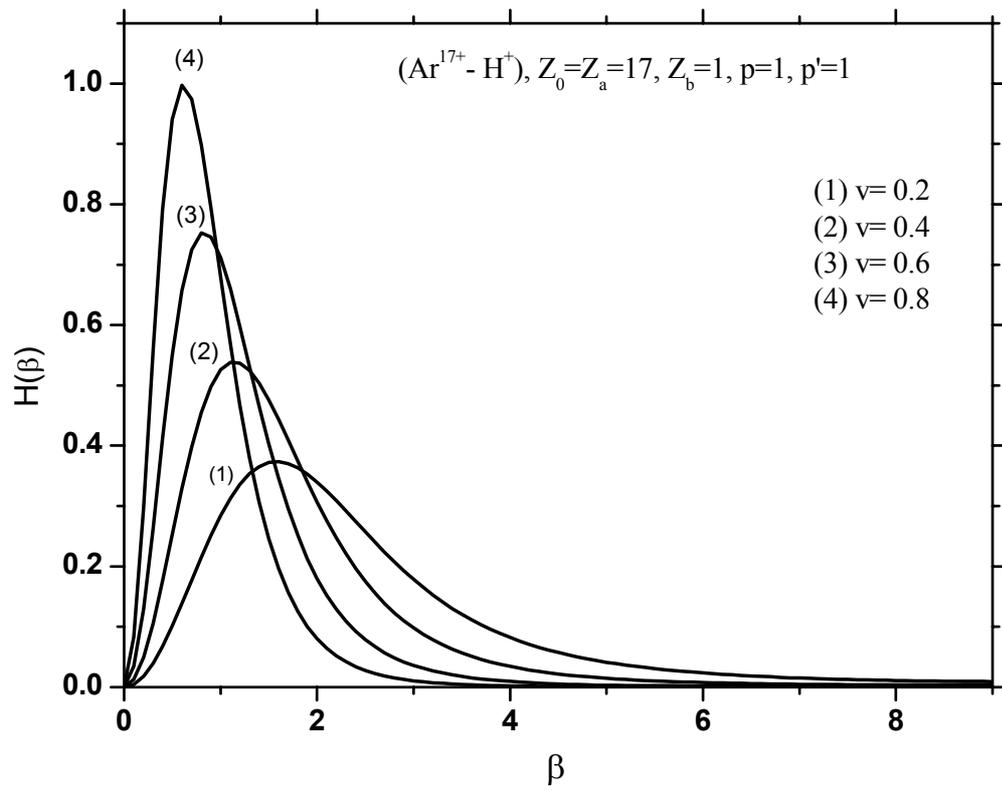


Figure 3.2: $H(\beta)$ pour $(\text{Ar}^{17+} + \text{H}^+)$ à $Z_0 = \text{Ar}^{+17}$ ($p = 1, p' = 1$).

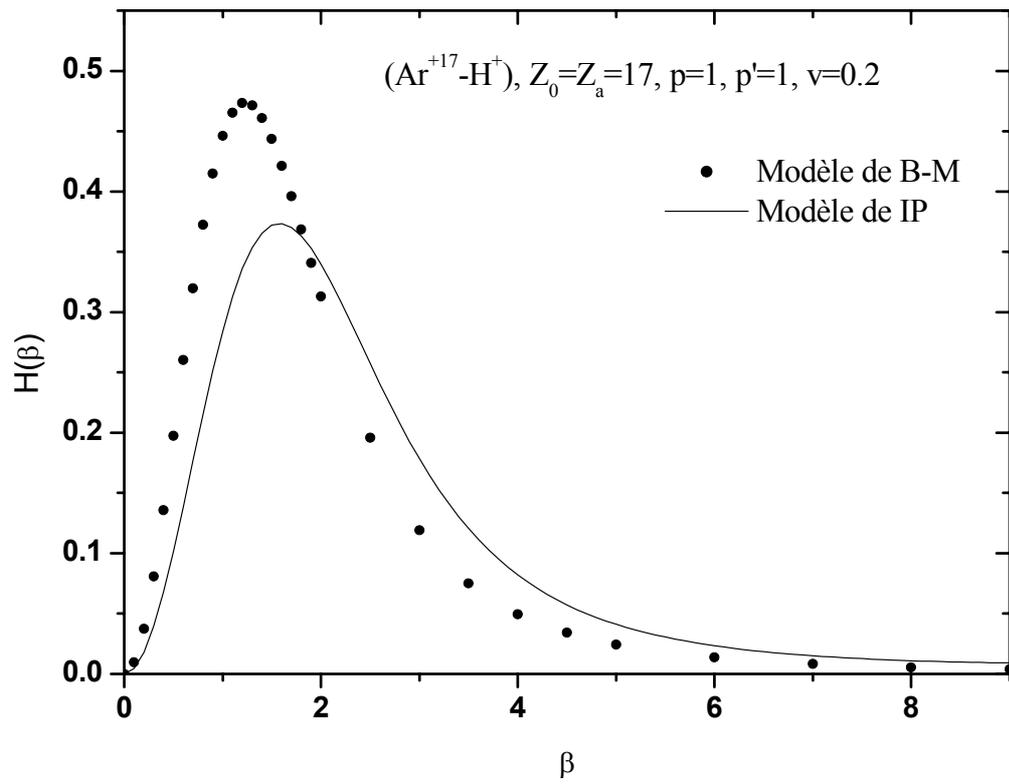


Figure 3.3: Comparaison entre le modèle de B-M et notre modèle IP.

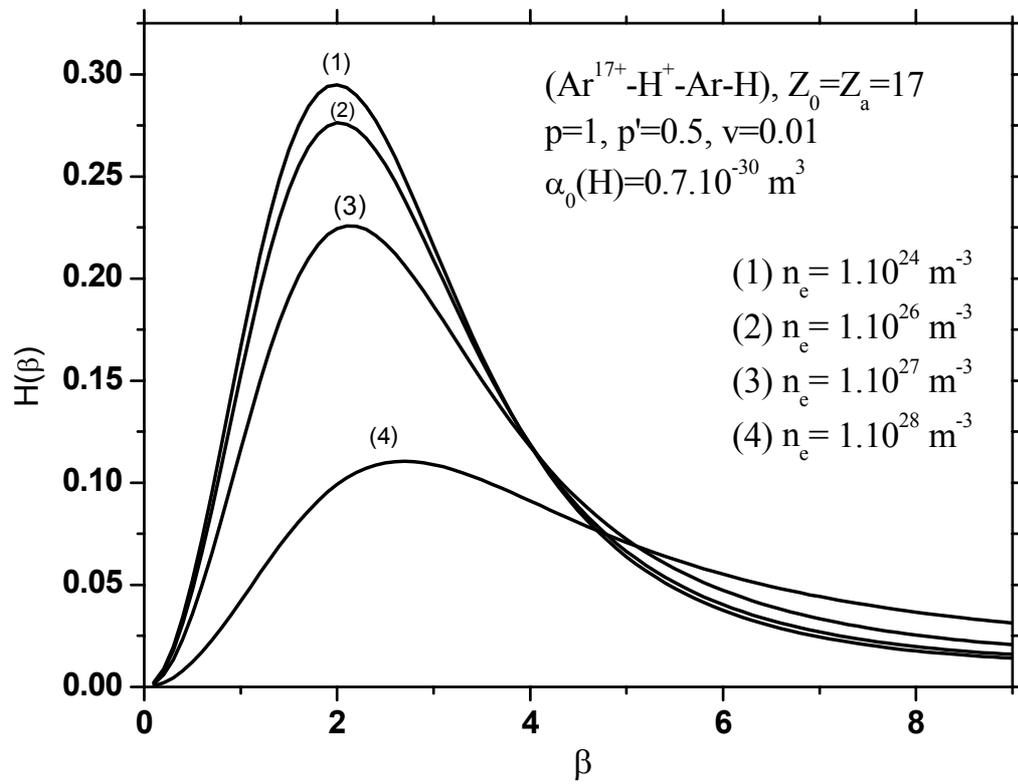


Figure 3.4: $H(\beta)$ pour différentes valeurs de densité électronique n_e .

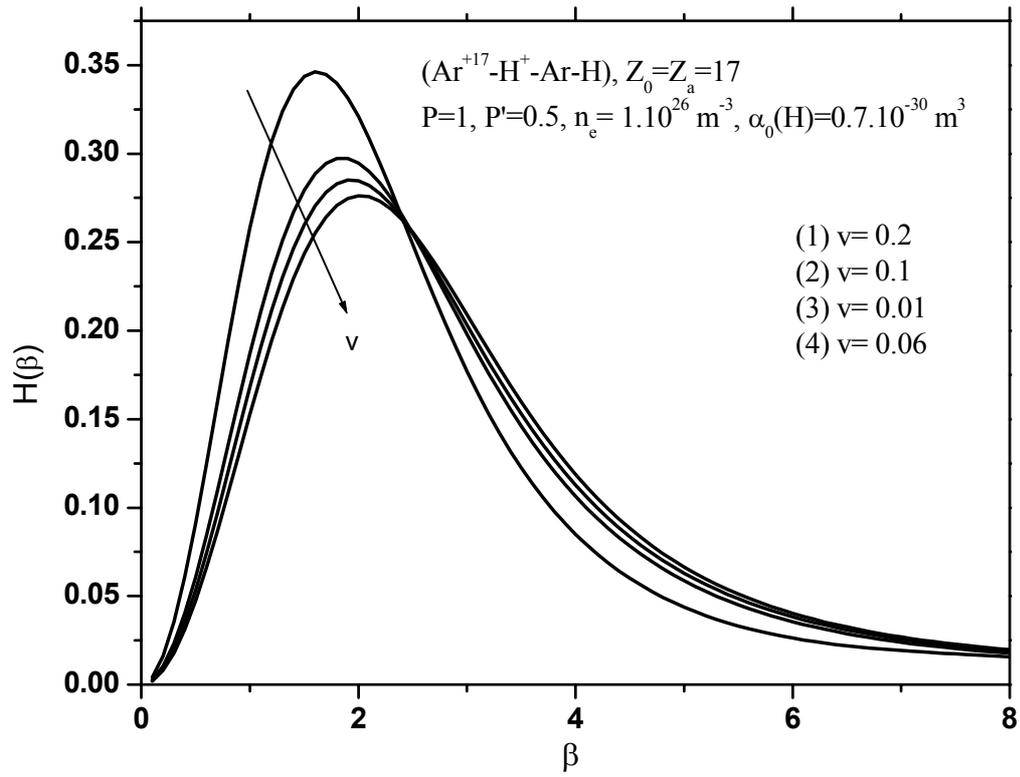


Figure 3.5: $H(\beta)$ pour différentes valeurs ν avec $n_e = 10^{26} \text{ m}^{-3}$.

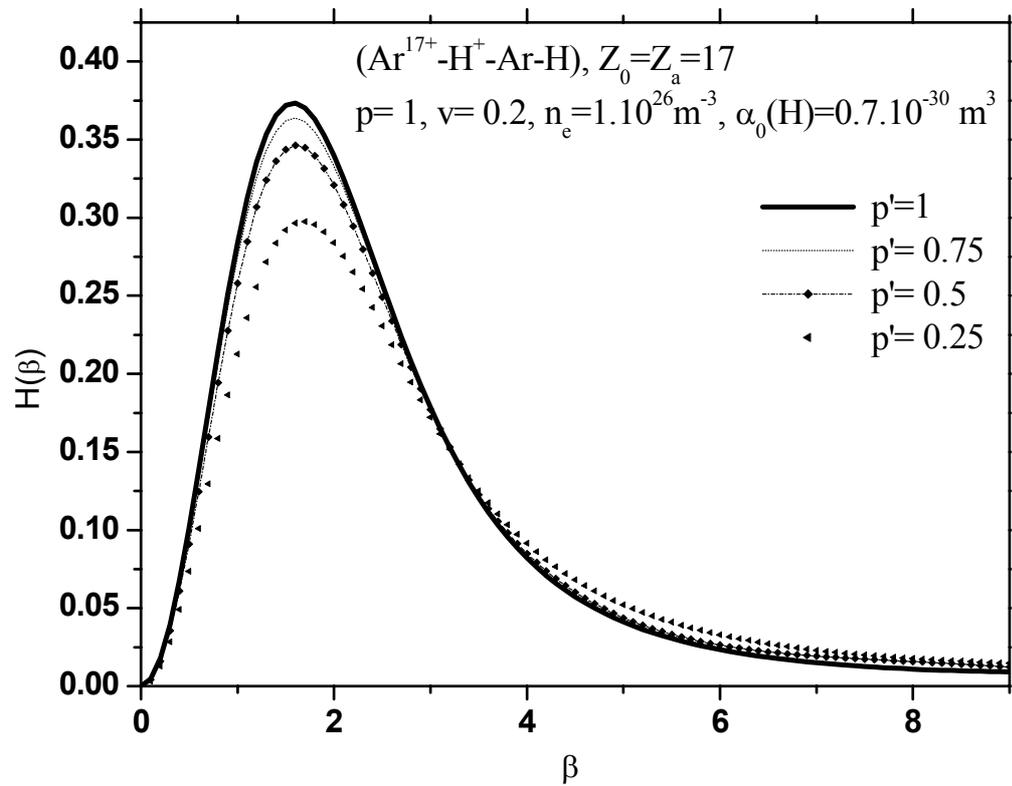


Figure 3.6: $H(\beta)$ pour différentes valeurs de p' .

Chapitre 4

Propriétés spectrales

4.1 Introduction

Le profil spectral d'une radiation émise par un ion porte la marque des diverses perturbations causées par les particules qui entourent l'émetteur. Ces perturbations se traduisent par un élargissement ou un déplacement des raies.

Les informations contenues dans le spectre des raies sont reliées d'une part à la physique de l'émetteur et d'autre part à la physique du plasma environnant. Ainsi, depuis des années, de nombreux travaux ont été effectués pour modéliser les processus physiques associés au rayonnement émis par différents types de plasmas. La comparaison de profils spectraux expérimentaux et théoriques représente un moyen approprié de diagnostic des plasmas [26].

Dans ce travail, nous nous limitons à l'étude de la forme de profil et de l'élargissement des raies et, plus précisément, à l'analyse des raies élargies par effet Stark. Celui-ci est dû au microchamp électrique créé par le milieu environnant. La moyenne de ces effets, traduisant

l'effet d'ensemble, est calculée selon la distribution de ce microchamp trouvée auparavant.

Cet élargissement s'ajoute à la largeur naturelle et à l'élargissement Doppler important à basse densité et haute température.

On trouve dans la littérature depuis la publication en 1958 et 1959 des articles de M. Baranger [36] [37], et de A. Kolb et H. Griem [38], différents formalismes qui traitent des raies élargies par effet Stark, reposant sur diverses approximations sur l'effet des microchamps.

Dans ce chapitre, nous présentons la formalisme général du calcul des profils de raies dans le cas d'un plasma (ions + neutres). On utilise pour le calcul la formule trouvée par [39], où nous avons tenu compte de l'interaction ion-neutre (notre travail: chapitre 3).

4.2 Formule générale des profils de raies

On s'intéresse au profil de raie émis par une particule (ion) perturbée par un ensemble de particules (ions et neutres), appelé "bain". La particule émettrice interagit avec ce bain.

On définit $P(\omega_{if})$ [40], la puissance totale rayonnée dans " l'approximation dipolaire électrique " par cette particule lors d'une transition d'un niveau i vers f :

$$P(\omega_{if}) = \frac{4\omega_{if}^4}{3c^3} \left| \langle f | \vec{d} | i \rangle \right|^2 \quad (4.1)$$

où c est la vitesse de la lumière, et ω_{fi} est la fréquence non perturbée de la transition radiative entre les états stationnaires i et f ,

$$\omega_{if} = (E_i - E_f)/\hbar \quad (4.2)$$

$E_{i,f}$ est l'énergie des états stationnaires initial et final du système quantique comprenant les émetteurs et les perturbateurs, \vec{d} est l'opérateur moment dipolaire du système complet (on pourra remplacer ce dernier par le moment dipolaire de l'émetteur).

La puissance totale rayonnée, sommée sur tous les états finaux contribuant à la raie et moyennée sur les états initiaux, est donnée par:

$$P(\omega) = \frac{4\omega^4}{3c^3} \sum_{i,f} \delta(\omega - \omega_{if}) \left| \langle f | \vec{d} | i \rangle \right|^2 \rho_i \quad (4.3)$$

où ρ_i est la probabilité de trouver le système dans l'état initial i .

On introduit le profil de raie normalisé $I(\omega)$:

$$I(\omega) = \sum_{i,f} \delta(\omega - \omega_{if}) \left| \langle f | \vec{d} | i \rangle \right|^2 \rho_i \quad (4.4)$$

tel que:

$$c \sum_{i,f} \left| \langle f | \vec{d} | i \rangle \right|^2 \rho_i = 1 \quad (4.5)$$

Pour une fréquence donnée, le profil de raie $I(\omega)$ est proportionnel à la puissance émise par l'ion:

$$P(\omega) = \frac{4\omega^4}{3c^3} I(\omega) \quad (4.6)$$

On introduit la transformée de Fourier $C(t)$ du profil $I(\omega)$ de la transition:

$$C(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} I(\omega) d\omega \quad (4.7)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} \sum_{i,f} \delta(\omega - \omega_{if}) \left| \langle f | \vec{d} | i \rangle \right|^2 \rho_i d\omega \quad (4.8)$$

$$= \sum_{i,f} e^{-i\omega_{if} t} \left| \langle f | \vec{d} | i \rangle \right|^2 \rho_i \quad (4.9)$$

On remarque que $C(-t) = C^*(t)$, ce qui signifie que seules les valeurs $t > 0$ sont requises pour le calcul.

On peut écrire le profil de raie $I(\omega)$ de la manière suivante:

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^{\infty} e^{i\omega t} C(t) dt \quad (4.10)$$

où Re est la partie réelle.

L'expression (4.9) de $C(t)$ peut s'écrire comme une trace. Cette écriture facilite le passage à l'espace de Liouville (voir Appendice A). A partir des expressions (4.2) et (4.9), on trouve que:

$$C(t) = \sum_{i,f} e^{\frac{-i(E_i - E_f)t}{\hbar}} \left| \langle f | \vec{d} | i \rangle \right|^2 \rho_i \quad (4.11)$$

$$= \sum_{i,f} \langle i | \vec{d} | f \rangle e^{\frac{iE_f t}{\hbar}} \langle f | \vec{d} | i \rangle e^{\frac{-iE_i t}{\hbar}} \rho_i \quad (4.12)$$

On introduit $T(t)$, l'opérateur d'évolution du système (émetteurs + perturbateurs) total, tel que $T^*(t)$ est l'opérateur hermitien conjugué de $T(t)$, et H est l'Hamiltonien du système:

$$T(t) = \exp \left[\frac{iHt}{\hbar} \right] \quad (4.13)$$

Donc l'équation (4.12) devient:

$$C(t) = Tr \left[\vec{d}(0) \cdot \vec{d}(t) \rho \right] \quad (4.14)$$

avec:

$$\vec{d}(t) = T^*(t) \vec{d} T(t) \quad (4.15)$$

où $\vec{d}(t)$ est l'opérateur moment dipolaire électrique en représentation de Heisenberg. $C(t)$ (4.14) apparaît ainsi comme la fonction d'autocorrélation de l'amplitude de la lumière [26].

Le système physique que nous étudions, formé par l'émetteur et l'ensemble des perturbateurs, est à l'équilibre à la température T et la matrice densité de ce système s'écrit dans le cas d'un ensemble canonique:

$$\rho \rightarrow \exp \left(-\frac{H}{K_B T} \right) \quad (4.16)$$

- Les particules perturbatrices sont traitées dans le cadre de la mécanique classique: chacune peut être localisée et suivie sur une trajectoire (approximation du chemin classique).
- L'émetteur, quant à lui, est traité quantiquement.

L'Hamiltonien total du système H est donné par:

$$H = H_E + H_B + V_{EB} \quad (4.17)$$

avec H_E et H_B les termes relatifs à l'émetteur et au bain de perturbateurs, et V_{EB} le potentiel d'interaction entre les deux. La matrice densité du système total peut être factorisée, si on suppose qu'il n'existe qu'un couplage faible entre l'émetteur et son environnement. On peut alors séparer le sous-système atomique du sous-système des perturbateurs en factorisant la matrice densité à l'instant initial:

$$\rho = \rho_E \rho_B \quad (4.18)$$

où ρ_E et ρ_B sont les matrices densités relatives à l'émetteur et au bain. Visiblement cette approximation de couplage faible est garantie quand le rapport $V_{EB}/K_B T$ est négligé devant $(H_E + H_B)/K_B T$. L'approximation suivante consiste à négliger la réaction de l'émetteur sur l'ensemble des perturbateurs. Ceci signifie que les perturbateurs évoluent librement, alors que les états de l'émetteur dépendent des états d'environnement. Notons que cette approximation cesse d'être valable sur l'aile lointaine de la raie.

La factorisation de la matrice densité permet de calculer la trace dans (4.14) en deux étapes:

$$C(t) = Tr_E \left[\rho_E Tr_B \left[\rho_B \vec{d}(0) \cdot \vec{d}(t) \right] \right] \quad (4.19)$$

où Tr_E et Tr_B sont respectivement les traces sur les états de l'émetteur et du bain de perturbateurs.

On peut remplacer la trace sur les états de bain par une moyenne statistique sur les états non-perturbés de celui-ci.

Ces hypothèses permettent de redéfinir $T(t)$ comme étant l'opérateur d'évolution

n'agissant plus que sur les fonctions d'onde de l'émetteur:

$$C(t) = Tr_E \left[\rho_E \left\{ \vec{d}(0) \cdot \vec{d}(t) \right\}_{moy} \right] \quad (4.20)$$

le symbole $\{\dots\}_{moy}$ signifie que l'on prend une moyenne d'ensemble classique dans l'espace des phases des perturbateurs (approximation du chemin classique) au lieu de la trace quantique pondérée par ρ_B .

On définit deux groupes de niveaux de l'émetteur, a et b , entre lesquels a lieu la transition radiative étudiée et dont les niveaux respectifs sont dénotés, α, α' et β, β' . Les perturbateurs ne provoquent pas de transitions entre les niveaux du haut et ceux du bas, mais seulement des transitions entre les niveaux du haut de même que pour ceux du bas; alors on peut écrire $C(t)$ de la manière suivante:

$$c(t) = \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \rho_\alpha \left\{ \vec{d}_{\alpha\beta} \langle \beta | T^+(t) | \beta' \rangle \vec{d}_{\beta'\alpha'} \langle \alpha | T(t) | \alpha' \rangle \right\} \quad (4.21)$$

où ρ_α est un élément diagonal de la matrice densité de l'émetteur seul.

On effectue un changement de base, l'expression (4.21) s'écrit dans l'espace de Liouville:

$$C(t) = \left\langle \left\langle \vec{d}^* \left| \{U_l(t)\}_{moy} \right| \vec{d} \cdot \rho \right\rangle \right\rangle \quad (4.22)$$

$\left| \vec{d} \right\rangle \rangle$ est l'opérateur moment dipolaire électrique défini comme étant un vecteur de l'espace de Liouville (voir appendice A).

$\{U_l(t)\}_{moy}$ est l'opérateur d'évolution moyenné dans l'espace de phase des perturbateurs opérant dans l'espace de Liouville, et satisfaisant à l'équation différentielle suivante:

$$\begin{aligned}\frac{dU_l(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar}L_l(t)U_l(t) \\ U_l(t) &= I\end{aligned}\tag{4.23}$$

$L_l(t)$ est l'opérateur de Liouville qui se décompose en une partie L_0 représentant l'émetteur isolé et une autre, $l(t)$, représentant l'interaction de l'émetteur avec le bain:

$$L_l(t) = L_0 + l(t)\tag{4.24}$$

Le microchamp électrique agissant sur l'émetteur, à l'origine de la partie interactive $l(t)$, se sépare à son tour en deux composantes:

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_e(t) + \vec{E}_b(t)\tag{4.25}$$

où $\vec{E}_e(t)$ est le champ dû aux électrons (composante haute fréquence) et $\vec{E}_b(t)$ aux particules du bain (composante basse-fréquence).

On peut alors faire la moyenne sur $U_l(t)$ en deux étapes: l'une portant sur les électrons, l'autre sur les ions. On définit deux types de temps. Comme les temps caractéristiques du mouvement de ces deux types de particules sont nettement différents, il est nécessaire d'appliquer deux approximations qui simplifient par la suite le calcul de profil de raies.

4.2.1 Temps d'intérêt du processus d'élargissement

On définit le temps t_i pendant lequel on prend en compte les phénomènes d'interaction qui ont lieu dans le plasma et qui sont à l'origine de l'élargissement de raie. Ce temps est

fonction de la région du profil que l'on examine. Si l'on veut étudier l'aile du profil, il faut regarder des intervalles de temps très courts, et réciproquement, le centre de raie correspond à de grands intervalles de temps [26].

$$t_i = \frac{1}{\Delta\omega}, \quad \Delta\omega = \omega - \omega_0 \quad (4.26)$$

où ω_0 est le centre de la raie. ainsi, tous les événements agissant sur le profil de raie ont des temps caractéristiques inférieurs ou égaux à t_i ; dans ce cas, on peut limiter le calcul de la transformée de Fourier à l'intervalle de 0 à t_i .

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^{t_i} e^{i\omega t} C(t) dt \quad (4.27)$$

4.2.2 Temps de collisions

C'est le rapport du paramètre d'impact de la collision sur la vitesse thermique la plus probable du perturbateur; il est noté t_c et est bien plus grand que le temps t_i . $C(t)$ tend vers zéro bien avant qu'une collision soit complète: cette quantité peut être alors calculée en négligeant le mouvement des perturbateurs. On suppose alors que tous les perturbateurs sont fixés dans l'espace, ce qui donne le spectre de raie pour un champ électrique au niveau de l'émetteur. On réalise ensuite une moyenne statistique sur toutes les positions. Ces conditions permettent effectivement de définir l'approximation quasi-statique.

4.2.3 L'approximation d'impact

L'importance de l'approximation d'impact est due au fait qu'elle est presque toujours valable pour traiter les perturbateurs électroniques.

Soit un électron de vitesse V , de paramètre d'impact ρ , entrant en collision avec un atome excité constitué d'un électron sur une orbite de nombre quantique n et d'un coeur de charge Ze . Un élément dipolaire caractéristique de la matrice de transition est de l'ordre de en^2a_0/Z et donc l'énergie d'interaction $-\vec{d} \cdot \vec{E}$ (\vec{d} est l'opérateur moment dipolaire) de l'ordre de $e^2n^2a_0/Z\rho^2$. Pour que l'approximation d'impact soit valable, le produit de l'énergie d'interaction par temps de collision doit être petit devant \hbar :

$$\frac{e^2n^2a_0}{Z\rho^2} \frac{\rho}{V} \ll \hbar, \quad (4.28)$$

ce qui peut s'écrire en élevant au cube:

$$\frac{Z^3\rho^3\hbar^3V^3}{e^6n^6a_0^3} \gg 1 \quad (4.29)$$

Une estimation pour ρ est de remplacer ρ par la distance moyenne définie par l'équation $(\frac{4}{15})(2\pi)^3 r_0^3 = n_e^{-1}$, et V est donné par $\sqrt{\frac{K_B T}{m}}$, ce qui donne en omettant quelques facteurs numériques:

$$A \frac{Z^3}{n^6} \gg 1 \quad (4.30)$$

avec:

$$A = \frac{2(2\pi m K_B T)^{3/2}}{n_e h^3} \quad (4.31)$$

A est le nombre d'états quantiques accessibles pour chaque électron. Les petites valeurs de A signifient que le gaz d'électrons est dégénéré; des valeurs de A grandes devant l'unité permettent d'utiliser une statistique classique de Maxwell-Boltzmann. Dans beaucoup de

cas, la condition (4.30) est satisfaite, y compris pour des valeurs du nombre quantique principal n pouvant être grandes.

4.2.4 L'approximation quasi-statique

Celle-ci est valable lorsque les particules se meuvent suffisamment lentement pour que la fréquence caractérisant la dépendance temporelle du champ électrique qu'elles produisent soit bien plus petite que l'élargissement Stark résultant:

$$\Delta\omega_{if}(E) = \omega_{if}(E) - \omega_{if}(0) \quad (4.32)$$

$$\left| \frac{\dot{E}(t)}{E(t)} \right| \ll |\Delta\omega_{if}(E)| \quad (4.33)$$

où $\dot{E}(t)$ est la dérivée de $E(t)$ par rapport au temps.

L'approximation quasi-statique est habituellement utilisée pour les ions et les neutres perturbateurs.

Dans l'approximation dipolaire électrique, l'énergie d'interaction émetteur-perturbateurs (neutres+ions) s'écrit: $-\vec{d} \cdot \vec{E}(t)$.

Cette approximation permet de calculer le profil spectral $I_l(\omega)$ perturbé par un champ constant \vec{E}_l , pour lequel correspond une configuration l des perturbateurs (ions+neutres).

Le profil spectral total est obtenu en moyennant $I_l(\omega)$ sur toutes les configurations " l " à l'aide de la distribution statique du champ calculée dans le chapitre précédent.

4.3 Modèle de profil de Ly α et Ly β

4.3.1 Ly α

A partir de l'équation (25) de l'article [39], on peut écrire le profil de raie comme suit, ($\omega = 2\pi\nu$) :

$$I_{Ly\alpha}(\nu) = \frac{4}{1+K^2} + \int_0^\infty \frac{H(\beta)}{1+K^2(1+D\beta/\Delta\nu)^2} d\beta + \int_0^\infty \frac{H(\beta)}{1+K^2(1-D\beta/\Delta\nu)^2} d\beta \quad (4.34)$$

avec:

$$K = \frac{\Delta\nu}{C} \quad (4.35)$$

$$C = 5.00 \times 10^{-21} \left\{ 19.28 - \ln \left[\frac{1}{Z_N} \left[\frac{n_e}{T} \right]^{1/2} \right] \right\} \cdot \frac{1}{Z_N^2} \frac{n_e}{T^{1/2}} \quad (4.36)$$

$$D = 4.37 \times 10^{-16} \left(\frac{n_e^{2/3}}{Z_N} \right) \quad (4.37)$$

où $[n_e] = \text{cm}^{-3}$, $[D] = [C] = [\Delta\nu] = \text{Ry}^1$ et $[T] = \text{K}$.

Z_N : est la charge de l'impureté (Z_1).

4.3.2 Ly β

A partir de l'équation (38) de l'article [39], on peut écrire le profil de raie comme suit:

¹ $1\text{Ry} = 2.17987 \times 10^{-18} \text{ J}$

$$I_{Ly\beta}(\nu) = \frac{32}{19} \left[\int_0^{\infty} \frac{H(\beta)}{1 + K^2(1 + D\beta/\Delta\nu)^2} d\beta + \int_0^{\infty} \frac{H(\beta)}{1 + K^2(1 - D\beta/\Delta\nu)^2} d\beta \right] \\ + \left[\int_0^{\infty} \frac{H(\beta)}{1 + K^2(1 + 2D\beta/\Delta\nu)^2} d\beta + \int_0^{\infty} \frac{H(\beta)}{1 + K^2(1 - 2D\beta/\Delta\nu)^2} d\beta \right] \quad (4.38)$$

avec:

$$K = \frac{\Delta\nu}{C} \quad (4.39)$$

$$C = 6.76 \times 10^{-20} \left\{ 18.93 - \ln \left[\frac{1}{Z_N} \left[\frac{n_e}{T} \right]^{1/2} \right] \right\} \cdot \frac{1}{Z_N^2} \frac{n_e}{T^{1/2}} \quad (4.40)$$

$$D = 6.56 \times 10^{-16} \left(\frac{n_e^{2/3}}{Z_N} \right) \quad (4.41)$$

et :

$$[n_e] = cm^{-3}, [D] = [C] = [\Delta\nu] = Ry, \text{ et } [T] = K.$$

où $H(\beta)$ est la fonction de distribution du microchamp électrique calculer précédemment (chapitre 3).

4.4 Résultats numériques

Les profils complets (4.34) et (4.38) sont normalisés respectivement par:

$$I_{Ly\alpha}(0) = 2 \int_0^{\infty} \left[2 + \frac{1}{1 + (D\beta/C)^2} \right] H(\beta) d\beta \quad (4.42)$$

pour $Ly \alpha$ et:

$$I_{Ly\beta}(0) = 2 \int_0^{\infty} \left[\frac{32}{19} \left[\frac{1}{1 + (D\beta/C)^2} \right] + \frac{1}{1 + (2D\beta/C)^2} \right] H(\beta) d\beta \quad (4.43)$$

pour $Ly \beta$,

où $H(\beta)$ est la fonction de distribution qui tient compte de l'interaction ion-neutre.

Nous nous intéressons à calculer le profil de raie de l'ion hydrogénéoïde Ar^{+17} dans le mélange ($Ar^{+17}, H^+, Ar, H \equiv a, b, c, d$).

Les valeurs de n_e et T dépendent directement du paramètre de corrélation, avec n_e en cm^{-3} :

$$v = \frac{r_0}{\lambda_D} = 8.98 \times 10^{-2} \frac{n_e^{1/6}}{T^{1/2}}$$

et la fonction de distribution du microchamp est donnée à partir du chapitre 3.

Les intensités émises sont calculées dans l'unité relative $\frac{I}{I_0}$, où I_0 est donnée par l'équation (4.42) et (4.43) pour $Ly \alpha$ et $Ly \beta$ respectivement et sont telles que:

$$p = \frac{n_b}{n_a + n_b}, \quad p' = \frac{n_b}{n_a + n_b + n_c + n_d}$$

Nous avons présenté dans les tables 4.1 et 4.2 les paramètres utilisés dans notre calcul, qui sont représentés par les équations (4.36), (4.37) et (4.42) pour $Ly \alpha$ et les équations (4.40), (4.41) et (4.43) pour $Ly \beta$.

Les intensités sont reportées dans les figures 4.1-4.6 pour différentes valeurs de v et n_e pour notre mélange, dans le cas $p = 1$ et $p' = 0.5$. On remarque que la raie $Ly \alpha$ (les figures 4.1, 4.3 et 4.5) commencent à s'atténuer à partir de $\Delta\nu \geq 0.05Ry$ et la raie $Ly \beta$ (les figures 4.2, 4.4 et 4.6) à partir de $\Delta\nu \geq 2Ry$, ceci en négligeant les interactions ion-neutre et à partir de $\Delta\nu \geq 6Ry$ en tenant compte de cette interaction.

Les différentes expériences faites dans les plasmas sur les profils Stark des raies $Ly \alpha$ et $Ly \beta$ montrent des divergences importantes entre les profils théoriques et les profils expérimentaux. Il apparaît que la prise en compte des effets des perturbateurs ioniques

est insuffisante, et qu'il faut prendre en considération les effets des neutres surtout dans le cas d'un plasma froid. Malheureusement, pour notre travail, nous n'avons pas trouvé des profils de raies expérimentaux pour faire la comparaison.

Table 4.1: Paramètres de l'équation (4.34) et (4.42) dans le cas de $Ly\ \alpha$ pour un mélange de $(Ar^{+17} - H^{+1} - Ar - H)$ sans correction (sans les effets de neutres), $p = 1$ et $p' = 1$ et avec correction $p = 1$ et $p' = 0.5$.

$n_e(cm^{-3})$	$T(K^\circ)$	v	$C(Ry)$	$D(Ry)$	sans correction		avec correction	
					$I_{Ly\alpha}(0)(Ry)$	$I_{Ly\alpha}(0)(Ry)$	$I_{Ly\alpha}(0)(Ry)$	$I_{Ly\alpha}(0)(Ry)$
1×10^{22}	1.09×10^6	0.4	6.2×10^{-4}	1.2×10^{-2}	4.008		4.0021	
2×10^{23}	2.95×10^6	0.4	5.5×10^{-3}	8.79×10^{-2}	4.84		4.013	
1×10^{28}	4.826×10^5	0.6	8.3×10^{-4}	1.2×10^{-2}	4.015		4.0037	

Table 4.2: Paramètres de l'équation (4.38) et (4.43) dans le cas de $Ly\ \beta$ pour un mélange de $(Ar^{+17} - H^{+1} - Ar - H)$ sans correction (sans les effets de neutres), $p = 1$ et $p' = 1$ et avec correction $p = 1$ et $p' = 0.5$.

$n_e(cm^{-3})$	$T(K^\circ)$	v	$C(Ry)$	$D(Ry)$	sans correction		avec correction	
					$I_{Ly\beta}(0)(Ry)$	$I_{Ly\beta}(0)(Ry)$	$I_{Ly\beta}(0)(Ry)$	$I_{Ly\beta}(0)(Ry)$
1×10^{22}	1.09×10^6	0.4	6.37×10^{-3}	1.80×10^{-2}	0.0155		0.0041	
2×10^{23}	2.95×10^6	0.4	5.03×10^{-2}	1.32×10^{-1}	1.795		0.0264	
1×10^{28}	4.826×10^5	0.6	8.21×10^{-3}	1.80×10^{-2}	0.03		4.0037	

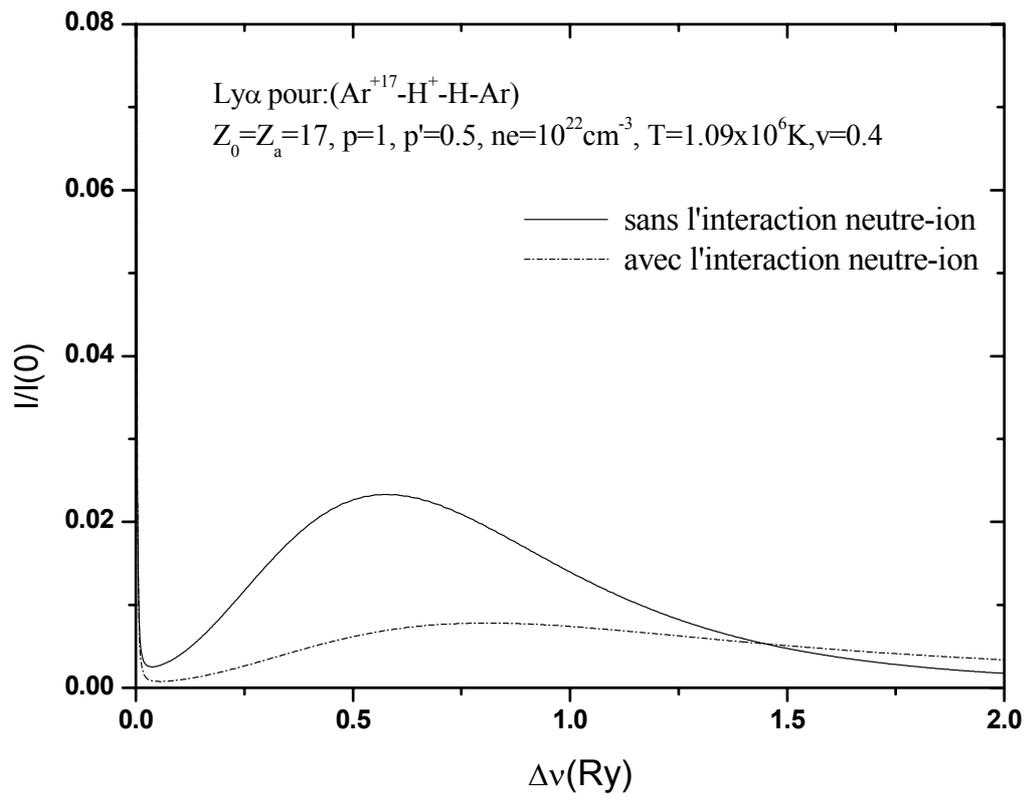


Figure 4.1: Profil Ly α émis par $Z_0 = 17$ dans un mélange.

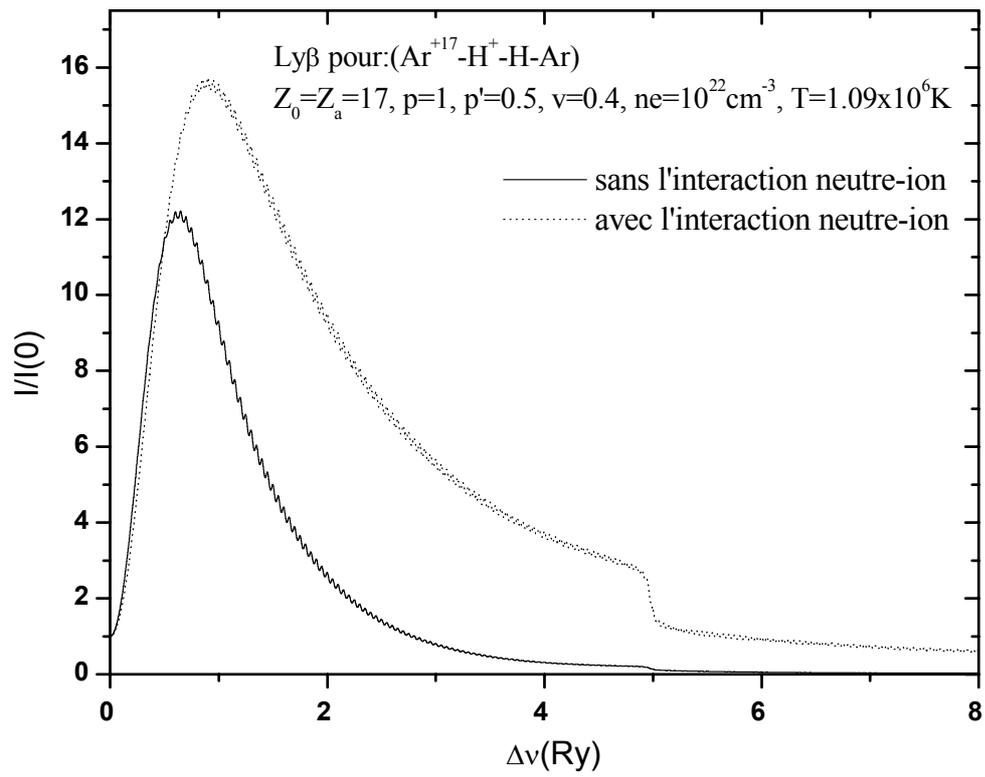


Figure 4.2: Profil Ly β émis par $Z_0 = 17$ dans un mélange.

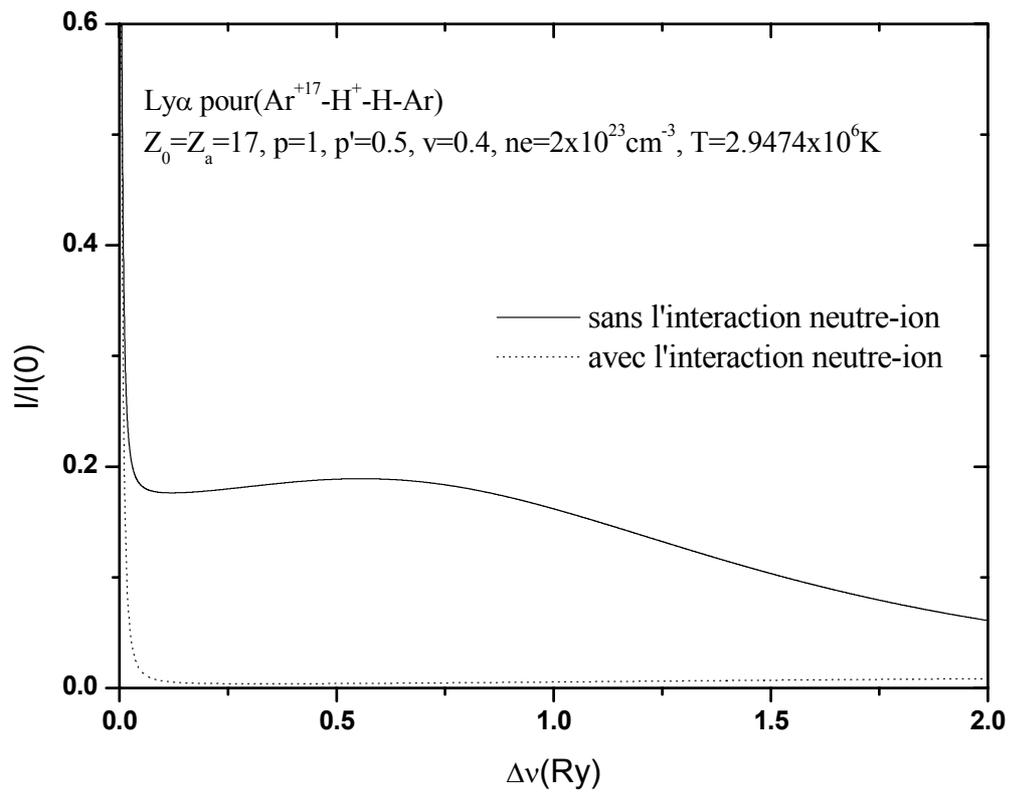


Figure 4.3: Profil Ly α émis par $Z_0 = 17$ dans un mélange.

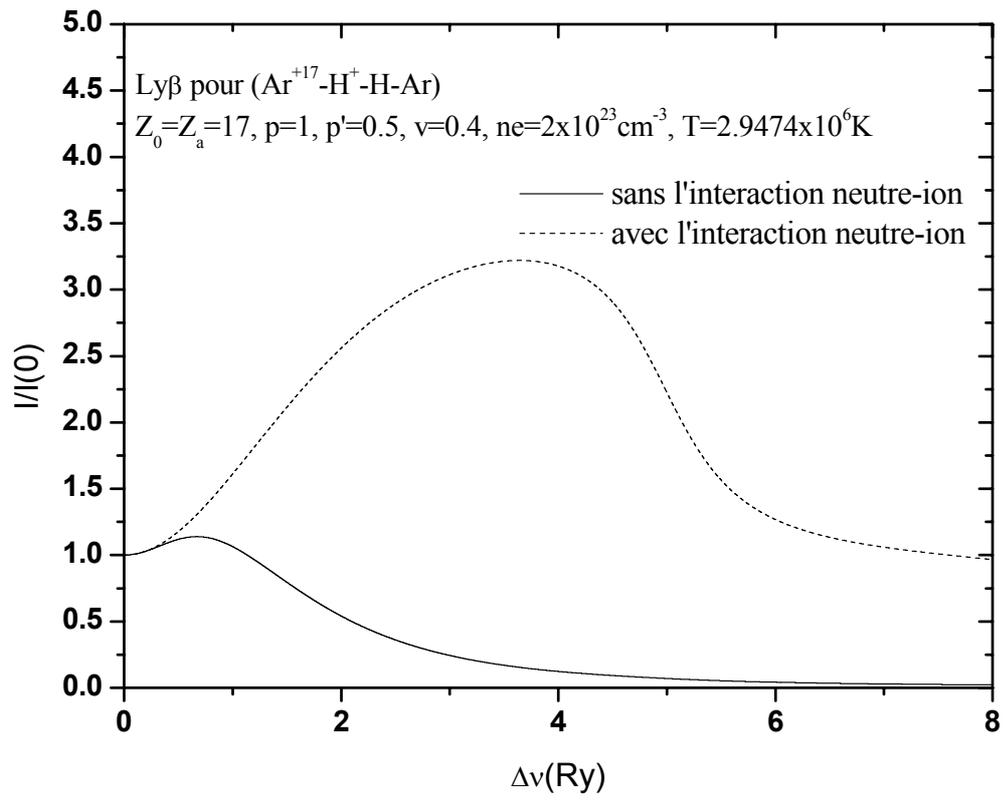


Figure 4.4: Profil Ly β émis par $Z_0 = 17$ dans un mélange.

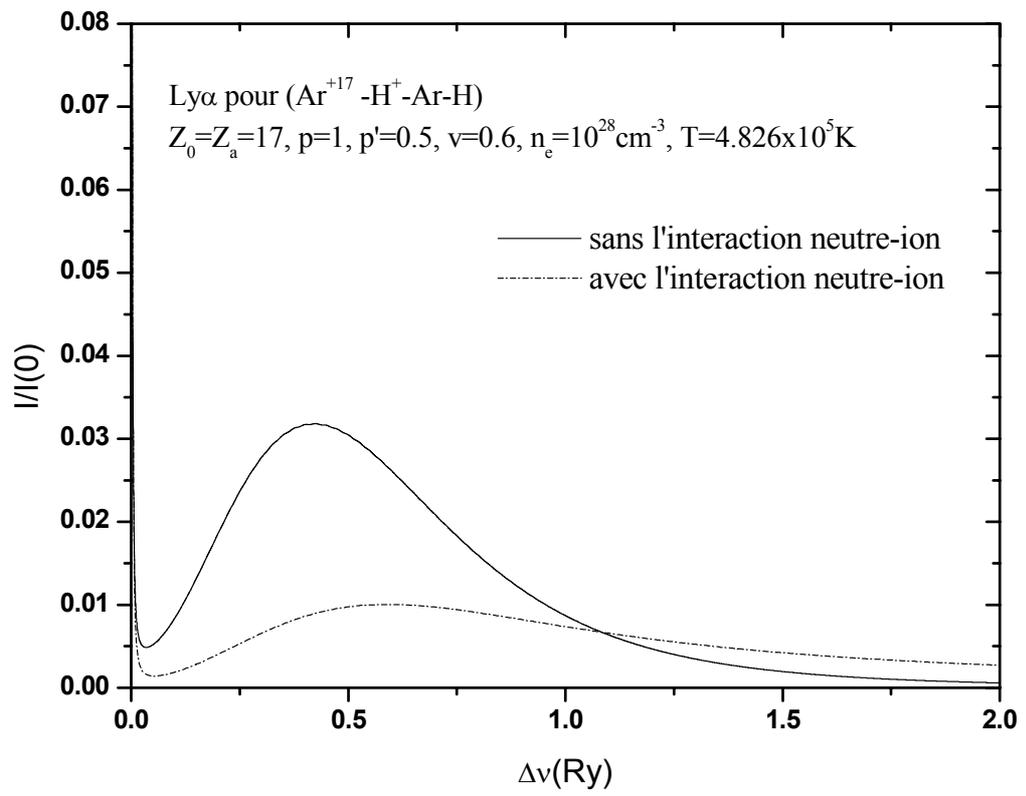


Figure 4.5: Profil Ly α émis par $Z_0 = 17$ dans un mélange.

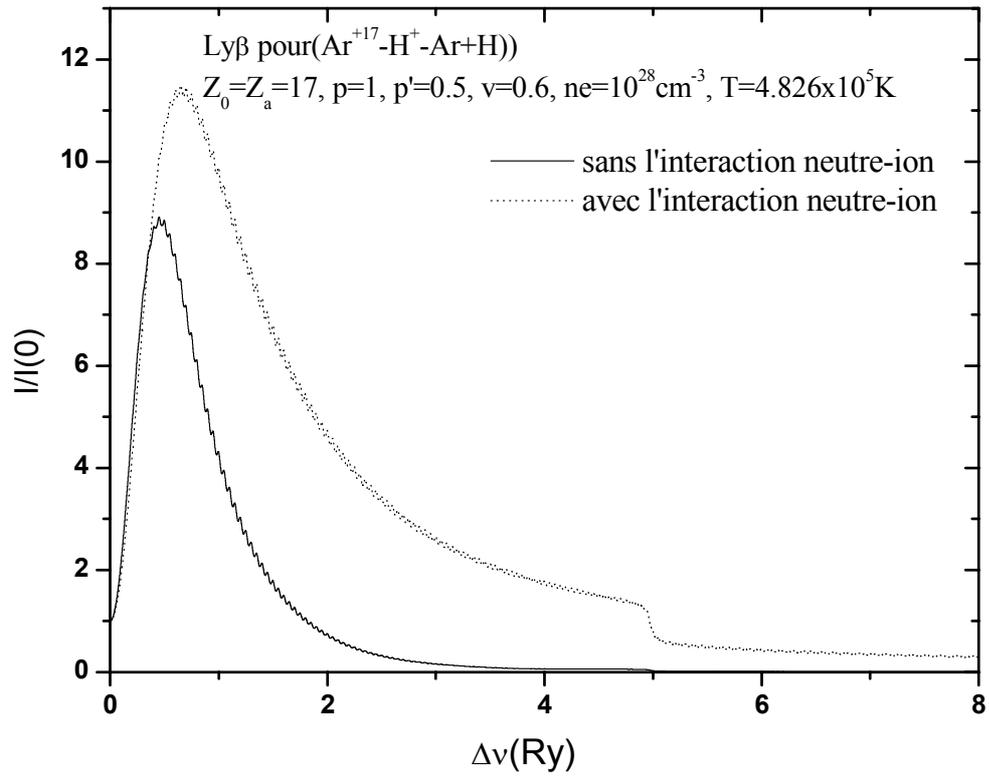


Figure 4.6: Profil Ly β émis par $Z_0 = 17$ dans un mélange.

Bibliographie

- [1] B. Held, '*Physique des plasmas froids*', Editions Masson (1994).
- [2] N. A. Krall, and A. W. Trivelpiece, '*Principles of plasma physics*', McGraw-Hill (1973).
- [3] J. Holtsmark, *Ann. Phys.* 58, 577 (1919).
- [4] A. A. Broyles, *Phys.Rev.* 100, 1181 (1955).
- [5] M. Lewis, and H. Margenau, *Phys. Rev.* 109, 842 (1958).
- [6] M. Baranger, and B. Mozer, *Phys. Rev.* 115, 521 (1969).
- [7] M. Baranger, and B. Mozer, *Phys. Rev.* 118, 626 (1960).
- [8] C. Hooper, *Phys. Rev.* 149, 77 (1966).
- [9] C. Hooper, *Phys. Rev.* 165, 215 (1968).
- [10] R. J. Tighe and C. F. Hooper, *Phys. Rev. A* 15, 1773 (1977).
- [11] C. A. Iglesias, and C. F. Hooper, *Phys. Rev. A* 25, 1049 (1982).
- [12] C. A. Iglesias, *Phys. Rev. A* 27, 2705 (1983).

- [13] M.T. Meftah, T. Chohra, H. Bouguettaia, F. Khelfaoui, B. Talin, A. Calisti, and J. W. Dufty, Eur-Phys. J. B 37, 39-46 (2004).
- [14] G. D. Harp, and B. J. Berne, Phys.Rev. A 3, 975 (1970).
- [15] B. Held, and C. Deutsch, Phys. Rev. A 24, 540 (1981).
- [16] B. Held, C. Deutsch, and M. M. Combert, Phys. Rev. A 29, 880 (1984).
- [17] C. Deutsch, and G. Bekefi, Phys. Rev. A 14, 854 (1976).
- [18] Donald A. McQuarrie, 'Statistical Mechanics', New Youk (1976), Chapitre 22.
- [19] T. Chohra; thèse de Magistere, Université de Ouargla (Algérie), Avril (2000).
- [20] R. Jancel, 'Functions of classical and quantum statistical mechanics', Pergamon Press (1969).
- [21] I. R. MacDonald, Vieillefosse, and J. P. hansen, Phys. Rev. Lett. 39. 271 (1977).
- [22] A. Alatsuey, J. Lebowitz, and D. Levesque, Phys.Rev. A 43, 2673 (1991).
- [23] J.W. Dufty, and L. Zoghaib, Phys. Rev. E. 47, 2958 (1993).
- [24] M. Berkovsky, J.W. dufty, A. Calisti, R. Stamm, and B. Talin, Phys. Rev. E. 51, 4917 (1995).
- [25] B. Held, and P. Pignolet, J. Phys 47, 437 (1986).
- [26] T. M. Meftah; thèse de Doctrat, Université de Provence Marseille (France), Mars 1996.
- [27] G. Ecker, and K. G. Muller, Phys 153, 317 (1958).

- [28] J. S. Hoye, and G. Stell, J. Chem. Phys. 102, 2841 (1995).
- [29] A. Alastuey, C. A. Iglesias, J. L. Lebowitz, and D. Levesque, Phys. Rev. A 30, 2537 (1984).
- [30] C. A. Iglesias, C. F. Hopper, Jr, and H. E. DeWitt, Phys. Rev. A 28, 361 (1983).
- [31] J. W. Dufty, D. B. Boerker and C. A. Iglesias, Phys Rev. A 31, 1681 (1985).
- [32] C. A. Iglesias, H. E. DeWitt, J. L. Lebowitz and D. MC Gowan, Phys Rev. A 31, 1698 (1985).
- [33] C. F. Hooper, Jr, " Spectral Line Shapes", Vol 4, 161 (1987).
- [34] C. A. Iglesias, J. L. Lebowitz, and D. MC Gowan, Phys. Rev. A 28, 1667 (1983).
- [35] J. L. Delcroix, " *Physique des plasmas*", CNRS Editions (1994).
- [36] M. Baranger, Phys. Rev. 111, 481 (1958).
- [37] M.Baranger, Phys. Rev. 111, 494 (1958).
- [38] H. R. Griem, A.Kolb, and Y.Shen, Phys. Rev. 116, 4 (1959).
- [39] B. Held, C.Deutsch and M. M. Gombert, Phys.Rev. A 29, 896 (1984).
- [40] A. Calisti, F. Khelifaoui, R. Stamm, B. Talin, and R.W. Lee, Phys. Rev. A 42, 5433 (1990).
- [41] A. C. Kolb and H. R. Griem, Phys. Rev. 111, 514 (1958).
- [42] H. R Griem, "Spectral line broadening by plasmas", Academic press, New-York (1974).

Chapitre 5

Conclusion

Nous avons présenté dans cette thèse trois travaux. Le premier travail concerne le calcul de la fonction d'autocorrélation du microchamp électrique et de la vitesse (propriétés dynamiques). Le deuxième travail concerne le calcul de la fonction de distribution du microchamp électrique (propriétés statiques), et le troisième travail le calcul du profil spectral (propriétés spectrales) en utilisant la fonction de distribution du microchamp que nous avons calculée au deuxième travail. Tous les calculs sont faits pour un plasma à deux composantes ioniques avec deux composantes neutres (plasma froid).

La dynamique des particules dans le plasma est gouvernée par les champs appliqués au plasma dus aux particules chargées et aussi aux particules neutres.

Nous avons développé dans le chapitre II, le modèle de calcul des fonctions d'autocorrélations, qui est basé sur l'équation maîtresse, par le développement de la fonction de mémoire $M(t)$. La fonction de mémoire joue un rôle important dans l'élaboration de notre modèle théorique, validé pour le cas d'un plasma fortement couplé.

La physique statistique des microchamps créés par les perturbateurs ioniques et neutres (plasma froid) a été présentée dans le chapitre III. Le modèle de fonction des distributions est basé sur le développement de Baranger et Mozer "cluster expansion".

Notre travail est une extension du modèle de Held, qui considère un plasma à deux composantes ioniques, au cas d'un plasma à deux composantes ioniques avec deux composantes neutres.

Dans le quatrième chapitre, nous avons été amenés à étudier et à comprendre d'abord les formalismes de bases pour l'élaboration d'un profil de raie, ainsi que les différents modèles qui y sont rattachés. Le calcul est basé sur le travail précédent de la fonction de distribution du microchamp électrique (chapitre II), où nous avons utilisé les formules de Held pour les profils de $Ly\alpha$ et $Ly\beta$.

Appendice A

L'espace de Liouville

L'espace de Liouville L est défini comme le produit tensoriel de l'espace de Hilbert H et son dual H^d ,

$$L = H \otimes H^d \quad (\text{A.1})$$

Les vecteurs de base de cet espace, notés $|if\rangle\rangle$, sont les dyades $|i\rangle\langle f|$ construites à partir d'une base complète de H . On définit sur L le produit scalaire:

$$\langle\langle if|i'f'\rangle\rangle = \langle i|i'\rangle\langle f|f'\rangle^* \quad (\text{A.2})$$

On définit le vecteur A dans L comme suit,

$$|A\rangle\rangle = \sum_{i,f} \langle i|A|f\rangle |if\rangle\rangle. \quad (\text{A.3})$$

On en déduit d'après la définition du produit scalaire,

$$\langle\langle A| = \sum_{i,f} \langle i|A|f\rangle^* \langle\langle if| \quad (\text{A.4})$$

La trace d'un opérateur Q est telle que,

$$tr \{Q\} = \sum_f \langle\langle ff|Q\rangle\rangle \quad (\text{A.5})$$

La trace d'un produit d'opérateurs Q par S est alors,

$$tr \{Q.S\} = \langle\langle S^+|Q\rangle\rangle \quad (\text{A.6})$$

Appliquée à notre cas, on passe de l'expression de la fonction d'autocorrélation du dipôle sous forme de trace à son expression dans l'espace de Liouville de la façon suivante,

$$C(t) = tr \left\{ \vec{d}(0) \vec{d}(t) \right\} \quad (\text{A.7})$$

$$= \left\langle\left\langle \vec{d}^+ | \{U(t)\} | \vec{d} \right\rangle\right\rangle \quad (\text{A.8})$$

où $U(t)$ est l'opérateur d'évolution dans l'espace de Liouville.

Un opérateur P de la base de Liouville est défini à partir de l'opérateur p de la base de Hilbert de la façon suivante,

$$P = p \otimes I^+ - I \otimes p^+ \quad (\text{A.9})$$

de sorte que le Liouville est défini à partir de l'Hamiltonien,

$$L = \frac{1}{\hbar} (H \otimes I^+ - I \otimes H^+) \quad (\text{A.10})$$

Appendice B

La résolution de l'équation quartique

On se propose de résoudre l'équation algébrique quartique de la forme:

$$z^4 + az^3 + bz^2 + cz + d = 0 \quad (\text{B.1})$$

On fait un changement de variable:

$$z = x - a/4 \quad (\text{B.2})$$

On obtient:

$$x^4 + px^2 + qx + r = 0 \quad (\text{B.3})$$

avec:

$$p = b - \frac{3a}{8}, q = c - \frac{ab}{2} + \frac{a^3}{8} \text{ et } r = d - \frac{ac}{4} + \frac{a^2b}{16} - 3\left(\frac{a}{4}\right)^4$$

On cherche une racine positive y_0 de l'équation cubique:

$$y^3 + \alpha y^2 + \beta y + \lambda = 0 \quad (\text{B.4})$$

avec:

$$\alpha = \frac{p}{2}, \quad \beta = \frac{1}{4} \left[\frac{p^2}{4} - r \right] \quad \text{et} \quad \lambda = - \left[\frac{a}{8} \right]^2$$

Après, on calcule les quantités suivantes:

$$\varphi = \sqrt{y_0}, \quad \omega_1 = \sqrt{-y_0 - \frac{p}{2} + \frac{9}{4\varphi}}, \quad \omega_2 = \sqrt{-y_0 - \frac{p}{2} - \frac{9}{4\varphi}}$$

on remarque que ω_1 et ω_2 peuvent être réelles où bien complexes. Finalement, on trouve que les racines de l'équation quartique (B.1) sont:

$$x_1 = -\varphi + \omega_1 - \frac{a}{4} \quad (\text{B.5})$$

$$x_2 = -\varphi - \omega_1 - \frac{a}{4} \quad (\text{B.6})$$

$$x_3 = \varphi + \omega_1 - \frac{a}{4} \quad (\text{B.7})$$

$$x_4 = \varphi - \omega_1 - \frac{a}{4} \quad (\text{B.8})$$

Pour la résolution de l'équation cubique (B.4):

$$y^3 + \alpha y^2 + \beta y + \lambda = 0 \quad (\text{B.9})$$

on calcule les quantités suivantes:

$$p' = \frac{\beta}{3} - \left[\frac{\alpha}{3}\right]^2, \quad q' = 2 \left[\frac{\alpha}{3}\right]^3 - \frac{\alpha\beta}{3} + d, \quad r = q'^2 + 4p'^3$$

$$s = \sqrt[3]{\frac{q' + \sqrt{r}}{2}} + \sqrt[3]{\frac{q' - \sqrt{r}}{2}}, \quad t = \sqrt[3]{\frac{q' + \sqrt{r}}{2}} - \sqrt[3]{\frac{q' - \sqrt{r}}{2}}$$

- si $r > 0$; l'équation admet une racine réelle (y_1) et deux racines imaginaires (y_2) et (y_3):

$$y_1 = -s - \frac{\alpha}{3}, \quad y_2 = \frac{s}{2} + i \left[\frac{t\sqrt{3}}{2} \right], \quad y_3 = \frac{s}{2} - i \left[\frac{t\sqrt{3}}{2} \right] \quad (\text{B.10})$$

- si $r = 0$ et $p = 0$; l'équation admet une racine réelle triple:

$$y = -s - \frac{\alpha}{3} \quad (\text{B.11})$$

- si $r = 0$ et $p \neq 0$; l'équation admet deux racine réelles:

$$y_1 = -s - \frac{\alpha}{3}, \quad y_2 = \frac{s}{2} - \frac{\alpha}{3} \quad (\text{B.12})$$

- si $r < 0$; l'équation admet trois racines réelles:

$$y_1 = -2\sqrt{-p'} \cos \theta \quad (\text{B.13})$$

$$y_2 = -2\sqrt{-p'} \cos(\theta + 120^\circ) \quad (\text{B.14})$$

$$y_3 = -2\sqrt{-p'} \cos(\theta + 240^\circ) \quad (\text{B.15})$$

avec:

$$\theta = \frac{1}{3} \arccos \left[\frac{q'}{2\sqrt{-p'^3}} \right] \quad (\text{B.16})$$

Electric field dynamics at charged point in two component plasma

M.T. Meftah^{1,a}, T. Chohra¹, H. Bouguettaia¹, F. Khelfaoui¹, B. Talin², A. Calisti², and J.W. Dufty³

¹ Laboratoire des Énergies Nouvelles et Renouvelables dans les Zones Arides et Sahariennes Lenreza, Université de Ouargla 30000, Algeria

² Laboratoire des Interactions Ioniques et Moléculaires PIIM, service 232 Centre Saint-Jérôme, 13397 Marseille, France

³ Department of Physics, University of Florida, Gainesville, Florida 32611, USA

Received 30 July 2002 / Received in final form 11 August 2003

Published online 19 February 2004 – © EDP Sciences, Società Italiana di Fisica, Springer-Verlag 2004

Abstract. The autocorrelation function for the velocity and for the electric microfield of an impurity ion in a Two Ionic Component Plasma (TICP) is considered. A simple model is constructed for this purpose that preserves the exact short time dynamics and the long time global constraint of a given self-diffusion coefficient. The memory function and then the collision effects associated with the correlation function for the self-diffusion are expressed in terms of an effective two body interaction via a screened effective potential. The basic approximation used in our approach is the “disconnected” one that refers to the collision operator. A comparison of the prediction of this model for the self-diffusion and for the autocorrelation functions with the results of the molecular dynamics simulation developed in our laboratory (PIIM) shows an acceptable agreement over a wide range of plasma coupling, impurity ion charge and concentration.

PACS. 52.20.Dq Particle orbits – 52.65.Cc Particle orbit and trajectory – 47.40.Nm Shock wave interactions and shock effects – 05.20.-y Classical statistical mechanics

1 Introduction

In the last decade very little progress, despite a certain number of unexpected features, has been made for the dynamics properties of the electric field at a neutral point in a plasma [2–7]. In contrast, the probability distribution for a given value of the microfield in an equilibrium plasma is a well-studied problem with an accurate precision.

Our aim in this work is to extend the earlier studies of the electric field dynamics to the case of charged impurity ions embedded in TICP itself in neutralizing a background of negative charges. The reason for this choice is that, in the general case, the plasma is constituted of many ionic species. The presence of the charged ion in the plasma changes the physics of the problem with respect to the neutral point because the presence of the ion significantly changes the charge distribution of the plasma in its vicinity.

Our model is based on the most important symmetries of the correlation function and the relationship with the structure and the transport properties. For example, the time integral of $C(t)$ must vanish exactly as a consequence of the field being proportional to the total force on the

ion impurity. For similar reasons, there is a simple and exact relationship between the ion velocity autocorrelation function, $D(t) = \langle \vec{V}(t)\vec{V} \rangle / \langle V^2 \rangle$ and the self diffusion coefficient D through an exact Green-Kubo formula.

The model is then constructed from an exact master equation for $D(t)$ describing the linear response of the impurity ion to an initial perturbation of its velocity, and it provides a clear interpretation of the dynamics as damped oscillatory motion in a viscoelastic medium. The complex many-body dynamics is represented in our model by a memory function which is approximated by a simple exponential time relaxation. The time scale for this relaxation is fixed by the above-mentioned Green-Kubo formula. The only input required in our model is the initial values of the autocorrelation function, its derivatives and the self-diffusion coefficient D . These are calculated using the “disconnected approximation” [9] for the self-diffusion coefficient and the HNC equation [8] for the pair correlation (static structure functions). As a result, the two dynamic properties $D(t)$ and $C(t)$ obeying linear equations may be expressed as functions of the self-coefficient D and the initial data. None of these approximations implies a priori any limitation with respect to the plasma coupling strength, ion charge, ion mass or time scale. Consequently,

^a e-mail: meftah@ouargla-univ.dz

the model could be considered as a good candidate for the description of electric field dynamics over a wide range of conditions.

The time dependence of this model can be expressed as a linear combination of three exponentials or modes, allowing a simple interpretation of the relevant plasma excitations responsible for the electric field dynamics. At a weak coupling, all three modes represent purely damped excitations, while at strong coupling there is one damped mode and a complex conjugate pair of damped propagating modes. The conditions of “weak” or “strong” coupling depend on the plasma coupling, charge, mass and the concentrations of the two components. To limit the parameters space, we consider the simplest case of the TICP with the same sign ions which differ in their charge number in the classical limit. The relevant parameters are then the TICP coupling constant $\Gamma = \beta q_0^2/a_s$, the charge ratio q_0/q , and the mass ratio m_0/m , where a_s is the ion sphere radius, $\beta = 1/k_\beta T$, and parameters with the subscript 0 refer to the impurity ion. We have considered here the TICP with the screened interaction.

The approximation described here for $C(t)$ is a special investigation of an earlier work which calculated the effects of ion motion on spectral line broadening in plasma [8,9]. The aim of the present work is then to isolate, via a Zwanzig projection formalism, the simplest features of the electric field dynamics from the complexities of the general context. This leads to a clear interpretation, analysis and a comparison with computer simulations.

2 The model

The system considered here is an embedded impurity ion of mass m_0 and charge q_0 in an equilibrium with a fully ionized plasma of structureless point ions. The plasma is composed of two ionic species. One of them has the same properties (m_0, q_0) as the embedded impurity whereas the other is different (mass m and charge q). We have to deal with this model because it is close to a realistic system since in the plasma, at least, one ionic component (species) is present. The electric field at the impurity ion due to the rest of plasma is given by:

$$\vec{E} = \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \vec{e}_{\alpha}(\vec{r}_i - \vec{r}_0) + \vec{E}_B \quad (1)$$

where N_{α} is the number of ions of species α , $\vec{e}_{\alpha}(\vec{r}_i - \vec{r}_0)$ is the field due to the plasma ion at a distance $|\vec{r}_i - \vec{r}_0|$ from the impurity ion and \vec{E}_B is the field due to the uniform neutralizing background charge. The equilibrium autocorrelation function of the electric field is defined by:

$$C(t) = \left\langle \vec{E}(t) \vec{E} \right\rangle / \langle E^2 \rangle \quad (2)$$

where the brackets $\langle \dots \rangle$ denote an equilibrium Gibbs ensemble average. As denoted in the introduction, this function plays a central role in many theories of radiative and

transport processes in plasmas. A closely related function for transport properties is the velocity autocorrelation:

$$D(t) = \left\langle \vec{V}_0(t) \cdot \vec{V}_0 \right\rangle / \langle V_0^2 \rangle \quad (3)$$

where \vec{V}_0 is the velocity of the impurity ion. The autocorrelation function $C(t)$ measures the fluctuations in a collective property of the TICP while $D(t)$ measures fluctuations in a property of the impurity ion. However, these are directly related by Newton’s first law

$$\frac{\partial^2 D(t)}{\partial t^2} = -\omega_0^2 C(t), \quad \omega_0^2 = (\beta q_0^2/3m_0) \langle E^2 \rangle. \quad (4)$$

The interpretation of our model is more direct in terms of $D(t)$. First, a formally exact equation is derived by using the Zwanzig projection operator (see Appendix A.1):

$$\frac{\partial^2 D(t)}{\partial t^2} + \omega_0^2 D(t) + \int_0^t d\tau M(t-\tau) \frac{\partial D(\tau)}{\partial \tau} = 0 \quad (5)$$

$$M(0) = \omega_1^2 - \omega_0^2, \quad \omega_1^2 = \left\langle \dot{E}^2 \right\rangle / \langle E^2 \rangle \quad (6)$$

where \dot{E} indicates the time derivative of the microfield $\vec{E}(t)$ at $t = 0$. Equation (5) describes the impurity ion dynamics as oscillations in a viscoelastic medium with the characteristic frequency ω_0 and shows a frequency dependent damping given by the Laplace transform of $M(t)$. All many-body effects of the medium on the impurity that are not explicit in (5) are contained in the detailed form of $M(t)$ [6]. Our fundamental assumption here, is that, it is sufficient to include only the magnitude of this function through its exact initial value $M(0)$ and a characteristic time scale of its decay [6]. Consequently, $M(t)$ is approximated by:

$$M(t) = M(0)e^{-\lambda t}. \quad (7)$$

The precise form of λ is fixed by the Green-Kubo expression for the self diffusion coefficient, D , in terms of the velocity autocorrelation function as [6]:

$$\beta m_0 D = \int_0^{\infty} dt D(t). \quad (8)$$

The use of (5) with (7) in order to determine the right hand side of (8), leads to the identification:

$$\lambda = (\omega_1^2/\omega_0^2 - 1) / (\beta m_0 D). \quad (9)$$

Equations (5–7) and (9) define the approximate model for $D(t)$ and through (4), the electric field autocorrelation function. Furthermore, the exact time integrals of $C(t)$ and $D(t)$ are assured through (4) and (8). The input data ω_0 , ω_1 , and D might be taken directly from a computer simulation. Alternatively, as will be discussed below, additional independent approximations may be introduced to allow a practical calculation of these parameters.

The choice of (q_0/q) , (m_0/m) , Γ and (n_1/n_2) will determine whether the solutions are a pair of oscillatory

functions (under-damped), or three real exponential functions (over-damped). More generally, if λ/ω_0 is not large, the medium exhibits “memory” and the damping is modified on time scales of the order of λ^{-1} . Thus, there are only four parameters that completely characterize the dynamics of the model ω_0 , ω_1 , λ and the ratio (n_1/n_2) . It is therefore, straightforward to solve (5) by Laplace transform, yielding $D(t)$ and $C(t)$ as the sum of three exponentials:

$$D(t) = \sum D_i e^{z_i t}, C(t) = \sum C_i e^{z_i t} \quad (10)$$

where the coefficients D_i and C_i are given by:

$$D_i = -(\omega_0/z_i)^2 C_i \quad (11)$$

$$C_1 = (\lambda + z_1) z_1 (z_3 - z_2) / \Delta \quad C_2 = (\lambda + z_2) z_2 (z_1 - z_3) / \Delta \quad (12)$$

$$C_3 = (\lambda + z_3) z_3 (z_2 - z_1) / \Delta \quad \Delta = (z_1 - z_2)(z_2 - z_3)(z_3 - z_1) \quad (13)$$

and the $\{z_i\}$ are solutions to the cubic equation:

$$z^3 + \lambda z^2 + \omega_1^2 z + \lambda \omega_0^2 = 0 \quad (14)$$

depending on the values of λ , ω_0 and ω_1 : the solutions may be either real or complex. This ends the theoretical model description, and to evaluate its predictions it must be compared to the corresponding molecular dynamics simulations (MDS). Such simulations have been used in many areas of physics to provide statistical information, static as well dynamic properties of many physical quantities. A standard MDS is devoted to solve numerically Newton’s Law in a many-body system. It consists of a few hundred particles (ions) interacting via a screened Coulomb potential moving in a cubic box with periodic boundary conditions, maintaining the system in a stationary state at a fixed temperature and density. To accomplish this, it is assumed in MDS that the forces between the ions are conservative, two-body forces, that is, energy is conserved and the total force acting on the ion (the impurity in our case) due to the other ions is the sum of the forces between the pairs of ions. Once the force on the impurity ion is known at the initial time (boundary conditions), the MDS enables us to follow the ion trajectory and to know, at any subsequent time, the impurity velocity $\vec{V}(t)$ and the microfield $\vec{E}(t)$ acting on this impurity. The acknowledgment of these time dependent quantities, $\vec{V}(t)$ and $\vec{E}(t)$, is sufficient to compute the autocorrelation microfield function $C(t) = \langle \vec{E}(t) \vec{E}(0) \rangle$ and the autocorrelation velocity function $D(t) = \langle \vec{V}(t) \vec{V}(0) \rangle$.

The analysis made up to this point applies for arbitrary interaction potentials and plasma composition. To illustrate the physical content of the model, we consider the special case of the TICP with an impurity ion of the same mass and the same charge (m_0, q_0) for one component of the plasma ions. In this case, there is only one dimensionless parameter characterizing the plasma state

Table 1. Diffusion coefficient of Ar^{+17} in $(\text{Ar}^{+17}, \text{He}^{+1})$ with different concentrations.

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

condition, $\Gamma = q_0^2 \beta / a_s$ with $a_s = (4/3n_i \pi)^{1/3}$ is the average interparticle distance (ion sphere radius) and $n_i = n_1 + n_2$ is an ionic plasma density. Table 1 shows the Γ dependence on ω_0 , ω_1 (in units of the electronic plasma frequency ω_p defined by $\omega_p^2 = 4\pi n_e e^2 / m_e$), and $D_* = D / (a_s^2 \omega_p)$ is evaluated for screened interactions treated in the present paper.

3 Determination of parameters λ , ω_0 , ω_1

We attempt now to determine all the parameters necessary in the description of the dynamics. These parameters allow us, first, to solve the algebraic equation (14) and then to describe the dynamics properties of the ionic mixture. We shall see, as mentioned in the introduction, that these parameters are at first sight directly related to the initial values of the autocorrelation function and its first derivative ($\omega_0^2 \sim C(0) \sim \langle E^2 \rangle$ and $\omega_1^2 \sim \dot{C}(0) \sim \langle \dot{E}^2 \rangle$) and secondly related to the static pair functions like $g_{0\alpha}(r)$.

Consider first ω_0 defined by (4),

$$\omega_0^2 = \left(\frac{\beta q_0^2}{3m_0} \right) \langle E^2 \rangle = - \left(\frac{\beta q_0}{3m_0} \right) \langle \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_0 U \rangle \quad (15)$$

where U is the potential energy of the interaction between the impurity ion and the surrounding plasma. This expression (15) can be rewritten, after making a part integral, as:

$$\omega_0^2 = - \left(\frac{q_0}{3m_0} \right) \langle \vec{\nabla}_0 \vec{E} \rangle. \quad (16)$$

It is noted here that the background does not contribute to ω_0^2 , so:

$$\vec{\nabla}_0 \vec{E}_B = 0 \quad (17)$$

and then

$$\omega_0^2 = - \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^2 \left(\frac{n_\alpha q_0}{m_0} \right) \int d\vec{r} (\vec{\nabla}_0 \vec{e}_\alpha(r)) g_{0\alpha}(r) \quad (18)$$

where $g_{0\alpha}(r)$ is the pair radial distribution function for the probability of finding a ion of species α at a distance r from the impurity ion of mass m_0 and charge q_0 , n_α is the density of species α , and:

$$\vec{\nabla}_0 \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{r}) = -\Delta U_\alpha(r) = - \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) U_\alpha(r) \quad (19)$$

$$U_\alpha(r) = \frac{q_\alpha}{r} \exp(-\bar{K}_D r) \quad (20)$$

where \bar{K}_D is the mean screening factor defined by:

$$\bar{K}_D = \left(\sum_{\alpha=1}^2 4\pi n_\alpha z_\alpha^2 \beta e^2 \right)^{1/2}. \quad (21)$$

After the substitution of these relations in (18), we obtain:

$$\omega_0^2 = -\frac{1}{3} \sum_{\alpha} \left(\frac{m_\alpha q_0}{m_0 q_\alpha} \right) \omega_{\alpha p}^2 I_{0\alpha} \quad (22)$$

where;

$$I_{0\alpha} = 1 + \int_0^\infty r \bar{K}_D^2 \exp(-\bar{K}_D r) [g_{0\alpha}(r) - 1] dr \quad (23)$$

m_α, q_α are the mass and the charge of the ion of species α .
Next, consider ω_1^2 defined by (6), (see Appendix A.2):

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \left(\frac{\beta q_0^2}{3m_0 \omega_0^2} \right) \left\langle \dot{E}^2 \right\rangle \\ &= \left(\frac{q_0^2}{3m_0 \omega_0^2} \right) \left(\left\langle \left[\frac{\partial E^k}{\partial r_{0j}} \right]^2 \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{i=1}^{N_\alpha} (m_0/m_\alpha) \left\langle \left[\frac{\partial e_\alpha^i(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial r_{0j}} \right]^2 \right\rangle \right). \quad (24) \end{aligned}$$

To evaluate the first term on the right side of (24), we write the field at the impurity as $\vec{E} = \vec{E}' + \vec{E}_B$ and note here that the uniform background is isotropic:

$$\frac{\partial E_B^k}{\partial r_{0j}} = \frac{1}{3} \delta_{jk} \vec{\nabla}_0 \cdot \vec{E}_B \quad (25)$$

and so,

$$\begin{aligned} \left\langle \left[\frac{\partial E^k}{\partial r_{0j}} \right]^2 \right\rangle &= \\ \left\langle \left[\frac{\partial E_k'}{\partial r_{0j}} \right]^2 \right\rangle &+ \frac{1}{3} (\nabla_0 \cdot E_B)^2 + 2(\nabla_0 \cdot E_B) \langle \nabla_0 \cdot E' \rangle \quad (26) \end{aligned}$$

and then,

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \left(\frac{q_0^2}{3m_0^2 \omega_0^2} \right) \sum_{\alpha=1}^2 \left(\frac{n_\alpha m_0}{\mu_\alpha} \right) \int d\vec{r} \left[\frac{\partial e_\alpha^k(\vec{r})}{\partial r_j} \right]^2 g_{0\alpha}(r) \\ &+ \frac{1}{9\omega_0^2} \left\{ \sum_{\alpha=1}^2 \left(\frac{n_\alpha q_0}{m_0} \right) \int d\vec{r} \nabla e_\alpha(r) g_{0\alpha}(r) \right\}^2 \\ &+ \left(\frac{q_0^2}{m_0^2 \omega_0^2} \right) \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\sigma=1}^2 n_\alpha n_\sigma \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \left[\frac{\partial e_\alpha^k(\vec{r})}{\partial r_j} \right] \\ &\times \left[\frac{\partial e_\sigma^k(\vec{r}')}{\partial r} \right] \left\{ g_{\alpha\sigma}^{(3)}(r, r') - g_{0\alpha}(r) g_{0\sigma}(r') \right\} \quad (27) \end{aligned}$$

where $\mu_\alpha = m_0 m_\alpha / (m_0 + m_\alpha)$ is the reduced mass of pair (ion of species α -impurity ion). Via equation (18), the second term of the last formula can be simplified to give the form,

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \omega_0^2 + \left(\frac{q_0^2}{3m_0^2 \omega_0^2} \right) \sum_{\alpha=1}^2 \left(\frac{n_\alpha m_0}{\mu_\alpha} \right) \int d\vec{r} \left[\frac{\partial e_{\alpha j}(r)}{\partial r_{0k}} \right]^2 g_{0\alpha}(r) \\ &+ \left(\frac{q_0^2}{3m_0^2 \omega_0^2} \right) \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\sigma=1}^2 n_\alpha n_\sigma \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \left[\frac{\partial e_{\alpha j}(r)}{\partial r_k} \right] \left[\frac{\partial e_{\sigma j}(r')}{\partial r} \right] \\ &\times \left\{ g_{\alpha\sigma}^{(3)}(r, r') - g_{0\alpha}(r) g_{0\sigma}(r') \right\}. \quad (28) \end{aligned}$$

Neglecting the last term, it allows us to express ω_1^2 as:

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \omega_0^2 \left(1 + \frac{q_0}{3m_0 \omega_0^4} \sum_{\alpha=1}^2 \left(\frac{n_\alpha m_0}{\mu_\alpha} \right) \right. \\ &\quad \left. \times \int d\vec{r} \left[\frac{d\vec{e}_{\alpha i}(r)}{dr_k} \right]^2 g_{0\alpha}(r) \right) \\ &= \omega_0^2 + \frac{q_0}{3m_0 \omega_0^2} \sum_{\alpha=1}^2 \left(\frac{n_\alpha m_0}{\mu_\alpha} \right) \times \int_0^\infty r^{-4} dr \exp(-2\bar{K}_D r) \\ &\quad \times \left[6 + 12\bar{K}_D r + 10(\bar{K}_D r)^2 \right. \\ &\quad \left. + 4(\bar{K}_D r)^3 + (\bar{K}_D r)^4 \right] g_{0\alpha}(r). \quad (29) \end{aligned}$$

It is understood here that the integration variable r and the screening factor \bar{K}_D^{-1} are expressed in units of the ion sphere radius a_s . The calculations proposed here are based on two approximations. The first is to neglect the last term in the expression (28). The second is the use of an empirical expression to evaluate the radial distribution function $g_{0\alpha}(r)$ [7]. The first approximation is justified and acceptable because the neglected term deals with a three body interaction for which the corresponding third function is small with respect to the pair function ($g^{(3)} \ll g^{(2)}$). The second approximation is well justified for strong coupling and it is simplest to work with the Coulomb radial function $g_{0\alpha}(r)$ given by [7] instead of the screened radial function for which we do not have an analytical expression.

Finally, thanks to the ‘‘disconnected approximation’’ for the collisional operator [11], we obtain the self-coefficient diffusion D as:

$$\begin{aligned} D^{-1} &= \\ \frac{1}{6\pi m_i} \sum_{\alpha, \beta} \int_0^\infty k^4 dk \tilde{V}_{0i\alpha}(k) \tilde{C}_{0\beta}(k) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega S_{\alpha\beta}(k, \omega) S_0^s(k, \omega) \quad (30) \end{aligned}$$

where $S_{\alpha\beta}(k, \omega)$ is the dynamic structure factor for density fluctuations in species α and β , $S_0^s(k, \omega)$ is the self-structure factor for the impurity ion that is taken as:

$$S_0^s(k, \omega) = (1/k)(\pi\beta m_0/2)^{1/2} \exp(-m\beta\omega^2/(2k^2)). \quad (31)$$

$$\begin{aligned}
S_{11} &= \frac{n_1 \left[1 + n_1 \widehat{h}_{11}(k) \right] I_1 \left[1 - n_2 \widehat{c}_{22}(k)(1 - ZI_2) \right] + n_2 n_1^2 \widehat{c}_{12}(k) \widehat{h}_{12}(k)(1 - ZI_1) I_2}{\left[1 - n_1 \widehat{c}_{11}(k)(1 - ZI_1) \right] \left[1 - n_2 \widehat{c}_{22}(k)(1 - ZI_2) \right] - n_1 n_2 \widehat{c}_{12}^2(k)(1 - ZI_2)(1 - ZI_1)} \\
S_{22} &= \frac{n_2 \left[1 + n_2 \widehat{h}_{22}(k) \right] I_2 \left[1 - n_1 \widehat{c}_{11}(k)(1 - ZI_1) \right] + n_1 n_2^2 \widehat{c}_{12}(k) \widehat{h}_{12}(k)(1 - ZI_2) I_1}{\left[1 - n_1 \widehat{c}_{11}(k)(1 - ZI_1) \right] \left[1 - n_2 \widehat{c}_{22}(k)(1 - ZI_2) \right] - n_1 n_2 \widehat{c}_{12}^2(k)(1 - ZI_2)(1 - ZI_1)} \\
S_{21} &= \frac{n_1 n_2 \widehat{h}_{12}(k) I_2 \left[1 - n_1 \widehat{c}_{11}(k)(1 - ZI_1) \right] + n_2 n_1 \widehat{c}_{12}(k)(1 - ZI_2) I_1 \left[1 + n_1 \widehat{h}_{11}(k) \right]}{\left[1 - n_1 \widehat{c}_{11}(k)(1 - ZI_1) \right] \left[1 - n_2 \widehat{c}_{22}(k)(1 - ZI_2) \right] - n_1 n_2 \widehat{c}_{12}^2(k)(1 - ZI_2)(1 - ZI_1)} \\
S_{12} &= \frac{n_1 n_2 \widehat{h}_{12}(k) I_1 \left[1 - n_2 \widehat{c}_{22}(k)(1 - ZI_2) \right] + n_2 n_1 \widehat{c}_{12}(k)(1 - ZI_1) I_2 \left[1 + n_2 \widehat{h}_{22}(k) \right]}{\left[1 - n_1 \widehat{c}_{11}(k)(1 - ZI_1) \right] \left[1 - n_2 \widehat{c}_{22}(k)(1 - ZI_2) \right] - n_1 n_2 \widehat{c}_{12}^2(k)(1 - ZI_2)(1 - ZI_1)}. \tag{37}
\end{aligned}$$

$\widetilde{V}_{0\alpha}(k)$ is the Fourier transform of the pair potential interaction of the impurity with an ion of species α , and $\widetilde{C}_{0\alpha}(k)$ is the corresponding Fourier transform of the direct correlation function for the interaction with species α ,

$$\widetilde{C}_{0\alpha}(k) = -\beta \widetilde{V}_{0\alpha}(k). \tag{32}$$

Now we need the expression of the dynamic structure factor $S_{\alpha\beta}(k, \omega)$ of the density fluctuation in species α and β . These factors can be derived from kinetic theory as follows.

All the transport phenomena can be obtained from kinetic equations of transport [10,11]:

$$\begin{aligned}
\left(z + i \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}}{m_\alpha} \right) S_{\alpha,\beta}(\vec{k}, z, \vec{p}, \vec{p}') &= \\
- i \sum_{\sigma=1}^2 \int d\vec{p}'' \Phi_{\alpha,\sigma}(\vec{k}, z, \vec{p}, \vec{p}'') S_{\sigma,\beta}(\vec{k}, z, \vec{p}', \vec{p}'') & \\
+ n_\alpha \phi_\alpha(\vec{p}) \left[\delta_{\alpha,\beta} \delta(\vec{p} - \vec{p}') + n_\beta h_{\alpha\beta}(\vec{k}) \phi_\beta(\vec{p}') \right] & \tag{33}
\end{aligned}$$

where $\phi_\alpha(p)$ is the Maxwell-Boltzmann distribution for species α and $h_{\alpha\beta}(k)$ is the Orstein-Zernike pair function defined by:

$$h_{\alpha\beta}(k) = \int d\vec{r} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) (g_{\alpha\beta}(r) - 1) \tag{34}$$

and the kernel $\Phi_{\alpha,\sigma}(k, z, p, p'')$ is the collision operator defined by:

$$\Phi_{\alpha,\sigma}(k, z, p, p'') = -n_\alpha \frac{kp}{m_\alpha} \phi_\alpha(p) C_{\alpha\sigma}(k) + M_{\alpha\sigma}(k, z, p, p''). \tag{35}$$

In our model we shall keep only the first term on the righthand side of the last equation. After inserting the expression for $\Phi_{\alpha,\sigma}(k, z, p, p'')$ in (33) and integrating out over the momentum p and p' , we obtain a closed system of four autonomous algebraic equations for $S_{\alpha\beta}$:

$$\begin{aligned}
n S_{\alpha\beta}(k, z) &= \\
i \int dp \frac{n_\alpha (kp/m_\alpha)}{z + i(kp/m_\alpha)} \phi_\alpha(p) \sum_{\sigma=1}^2 n S_{\sigma\beta}(k, z) C_{\alpha\sigma}(k) & \\
+ (in_\alpha \delta_{\alpha\beta} + n_\alpha n_\beta h_{\alpha\beta}(k)) \int dp \frac{\phi_\alpha(p)}{z + i(kp/m_\alpha)} & \tag{36}
\end{aligned}$$

for which the solutions are:

See equation (37) above.

In principle, these results enable us to calculate the diffusion coefficient D . By substituting (31), (34) and (37) in (39) we can also calculate the parameter λ :

$$\begin{aligned}
\lambda &= \frac{1}{m_0 \beta} (\omega_1^2 / \omega_0^2 - 1) D^{-1} \\
&= \left(\frac{\omega_1^2 / \omega_0^2 - 1}{6\pi\beta m_0^2} \right) \sum_{\alpha,\beta} \int_0^\infty k^4 dk \widetilde{V}_{0\alpha}(k) \widetilde{C}_{i\beta}(k) \\
&\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega S_{\alpha\beta}(k, \omega) S_0^s(k, \omega). \tag{38}
\end{aligned}$$

Once the three parameters ω_0 , ω_1 and λ are obtained we are able to find the cubic equation solutions of (14) and discuss their relationships with the dynamic properties.

4 Discussion and results

We have presented a model for the auto-correlation function $C(t)$ of the electric field at the impurity and $D(t)$ of the velocity of the impurity in TICP. This model is based on the exact master equation (5) and the second derivative equation (4). The self-diffusion coefficient is treated by the velocity autocorrelation function and the Green-Kubo relation (8). However, as seen in Figures 1 and 2, the function $D(t)$ is slowly decaying and its time integral requires a long simulation time.

In our model, we have started to compute the diffusion coefficient in two different ways. The first is related to the static and dynamical structure factors via formula (30). The second is related to the Molecular Dynamics Simulation (MDS). The result is found to be in good agreement for different coupling parameters and different concentrations see Tables 1, and 2.

At the second stage, we compute theoretically the autocorrelation functions through solving the algebraic cubic equation (14). We find in general three solutions. In the case of a strong coupling parameter Γ , two of these solutions (modes) are complex (z, z^*) and the microfield

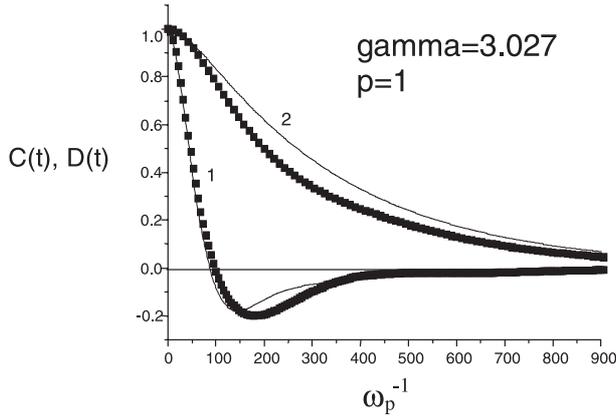


Fig. 1. Autocorrelation microfield function $C(t)$ (1) and autocorrelation velocity function $D(t)$ (2) of a pure Ar(17+) with $\Gamma = 3.027$. (.....) the simulation and (—) our model.

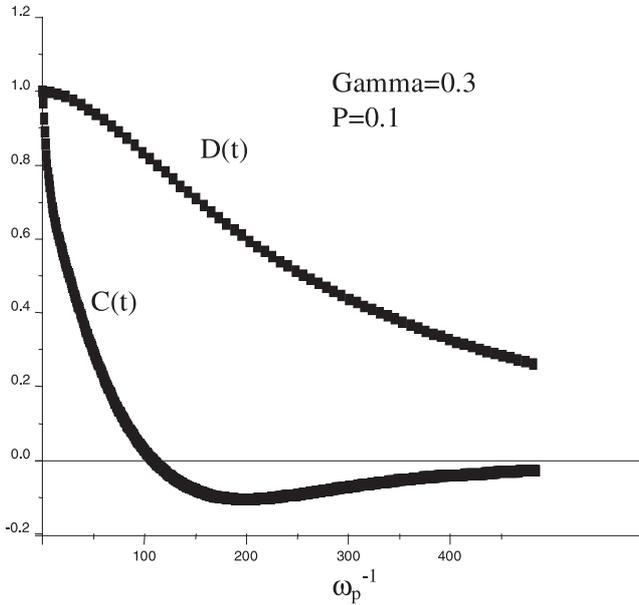


Fig. 2. Autocorrelation microfield function $C(t)$ and Autocorrelation velocity function $D(t)$ of a Ar(17+) at concentration $p = 0.1$ in He(+), with $\Gamma = 0.3$. (.....) the simulation and (—) our model.

autocorrelation function $C(t)$ exhibits an important time oscillation with a frequency equal to imaginary part of the complex solution. While the real part expresses the time decay (damping) of $C(t)$ or one can equally say, the time decay of the memory effect due to the interaction of the impurity with the medium. In the weak coupling parameter Γ , the three solutions are real, and the oscillations of $C(t)$ become very slow and disappear when the coupling Γ goes to zero and the damped regime takes place.

In Figures 1, 2 and 3, we have presented the autocorrelation functions both for the electric field at the impurity and the velocity of the impurity in TICP. We show a good agreement between those obtained by MDS developed in our laboratory PIIM and our theoretical model. The cal-

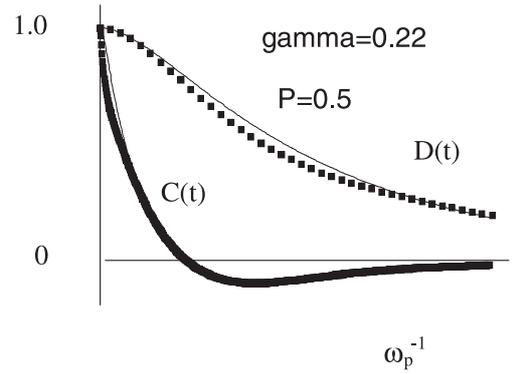


Fig. 3. Autocorrelation microfield function $C(t)$ and Autocorrelation velocity function $D(t)$ of a Ar(17+) at concentration $p = 0.5$ in He(+), with $\Gamma = 0.22$. (.....) the simulation and (—) our model.

Table 2. Diffusion coefficient of He⁺² in (50%He⁺², 50%H⁺¹) with different coupling.

Γ	$D^*(\text{model})$	D_{MD}
0.02	231.827	223.75
0.04	78.52	71.08
0.2	7.58	6.20
1.00	0.91	0.75

culaton and the comparison have also been made for different concentrations of the mixture (Ar17+/He+) and different coupling parameter Γ (gamma). Nevertheless, we mention that there is a bit of a difference between the theoretical model and the MDS in the case of weak coupling. This may be due to an inadequacy in the theoretical model regarding, as we know, the use of $g_{0\alpha}(r)$ which is suitable only for strong coupling.

In conclusion, we have presented a model which provides an exact autocorrelation function both for the electric field at the impurity and the velocity of the impurity. The comparison of the Dynamic Molecular Simulation (DMS) results with those obtained in the model shows a good agreement. The comparison was made and extended to many values of the physical parameters like the coupling gamma, concentration of the impurity $p = n_2/(n_1 + n_2)$ whereas the electronic density n was fixed. The agreement with the DMS should provide a very powerful tool to investigate many dynamic properties and transport phenomena in ionized media such as a plasma and electrolytic solutions.

Appendix A

A.1 Establishment of the master equation for $D(t)$

The velocity autocorrelation function obeys a general equation (5). This equation is derived using the Zwanzig projection operator. One is interested in a dynamic variable (position, velocity, field...) $y_\alpha(t)$ which obeys the

Liouville equation:

$$y_\alpha(t) = \exp(Lt)y_\alpha(0), Ly_\alpha = \{y_\alpha, H\}. \quad (39)$$

The time derivative of (39) is:

$$\frac{dy_\alpha(t)}{dt} = Ly_\alpha(t). \quad (40)$$

A projection operator P is defined as [6]

$$Px = y_\alpha g_{\alpha\beta}^{-1} \langle y_\beta x \rangle, \text{ with } g_{\alpha\beta} = \langle y_\alpha y_\beta \rangle. \quad (41)$$

Applying this projection operator to the equation (40), we find:

$$P\dot{y}_\alpha(t) = PL[Py_\alpha(t) + (1-P)y_\alpha(t)]. \quad (42)$$

Putting: $Z_\alpha(t) = Py_\alpha(t)$ and $W_\alpha(t) = (1-P)y_\alpha(t)$, then:

$$W_\alpha(t) = \exp(QLQt)W_\alpha(0) + \int_0^t \exp(QLQ(t-\tau))LPZ_\alpha(\tau)d\tau. \quad (43)$$

Since $Q = 1 - P$ is also a projection operator, one can write

$$\dot{Z}_\alpha(t) = PLZ_\alpha(t) + PL \int_0^t \exp(QLQ(t-\tau))LPZ_\alpha(\tau)d\tau. \quad (44)$$

As: $PZ_\alpha(\tau) = P^2y_\alpha(\tau) = Py_\alpha(\tau)$, then:

$$P\dot{y}_\alpha(t) = PLPy_\alpha(t) + PL \int_0^t \exp(QLQ(t-\tau))LPy_\alpha(\tau)d\tau \quad (45)$$

which is translated by

$$P \left\{ \dot{y}_\alpha(t) - LPy_\alpha(t) - L \int_0^t \exp(QLQ(t-\tau))LPy_\alpha(\tau)d\tau \right\} = 0 \quad (46)$$

or:

$$\dot{y}_\alpha(t) = LPy_\alpha(t) + L \int_0^t \exp(QLQ(t-\tau))LPy_\alpha(\tau)d\tau. \quad (47)$$

Let's multiply the equation (47) on the left by y_β and carry out the statistical Gibbs average:

$$\langle y_\beta \dot{y}_\alpha(t) \rangle = \langle y_\beta LPy_\alpha(t) \rangle + \left\langle y_\beta L \int_0^t \exp(QLQ(t-\tau))LPy_\alpha(\tau)d\tau \right\rangle. \quad (48)$$

If we put:

$$K_{\beta\alpha}(t) = \langle y_\beta y_\alpha(t) \rangle \quad (49)$$

and apply the definition (41) for the computation of the derivative of $K_{\beta\alpha}(t)$, we obtain a master equation:

$$\frac{dK_{\beta\alpha}(t)}{dt} = \Omega_{\beta\sigma} K_{\sigma\alpha}(t) + \int_0^t M_{\beta\sigma}(t-\tau)K_{\sigma\alpha}(\tau)d\tau \quad (50)$$

where:

$$\begin{aligned} \Omega_{\beta\sigma} &= \langle y_\beta Ly_\sigma \rangle g_{\sigma\alpha}^{-1} \text{ and } M_{\beta\sigma}(u) \\ &= \langle y_\beta L \exp(QLQ(u))Ly_\sigma \rangle g_{\sigma\alpha}^{-1}. \end{aligned} \quad (51)$$

When choosing the matrix $[g]$ as [6]:

$$g_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} g_{\alpha\alpha}, \text{ where } g_{11} = \langle V_0^2 \rangle \text{ and } g_{22} = \langle E^2 \rangle \quad (52)$$

one can show the following results:

$$\Omega_{11} = \Omega_{22} = 0, \quad \Omega_{12} = -\frac{Z_0 e}{m_0}, \quad \Omega_{21} = \frac{Z_0 e \langle E^2 \rangle}{m_0 \langle V_0^2 \rangle}$$

and

$$\begin{aligned} M_{11}(u) &= M_{22}(u) = M_{21}(u) = 0, \\ M_{22}(0) &= -(\omega_1^2 - \omega_0^2). \end{aligned}$$

Putting $\beta = 2$ in the equation (50) and using the results in (51), we obtain:

$$\frac{dK_{2\alpha}(t)}{dt} = \Omega_{21} K_{1\alpha}(t) + \int_0^t M_{22}(t-\tau)K_{2\alpha}(\tau)d\tau \quad (53)$$

and using:

$$\begin{aligned} \frac{dK_{1\alpha}(t)}{dt} &= \frac{d}{dt} \langle y_1 y_\alpha(t) \rangle = \frac{d}{dt} \langle y_1(-t) y_\alpha(0) \rangle \\ &= -\frac{Z_0 e}{m_0} \langle y_2 y_\alpha(t) \rangle = -\frac{Z_0 e}{m_0} K_{2\alpha}(t) \end{aligned} \quad (54)$$

and so after substituting the equation (54) in (53) and putting $\alpha = 1$, we find equation (5)

$$\left\{ \frac{d^2}{dt^2} + \frac{(Z_0 e)^2 \langle E^2 \rangle}{m_0^2 \langle V^2 \rangle} \right\} D(t) - \int_0^t M_{22}(t-\tau) \frac{dD(\tau)}{dt} d\tau = 0. \quad (55)$$

A.2 Evaluation of ω_1^2

The parameter ω_1^2 is defined by the equation (6):

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \left(\frac{\beta q_0}{3m_0 \omega_0^2} \right) \left\langle \dot{E}^2(0) \right\rangle \\ &= \left(\frac{\beta q_0^2}{3m_0 \omega_0^2} \right) \left\langle \frac{dE_k(0)}{dt} \frac{dE_k(0)}{dt} \right\rangle \end{aligned} \quad (56)$$

where the repeated indices stand for the sum on k .

$$\frac{dE_k(0)}{dt} = \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial r_{0j}} \frac{d(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{dt} + \frac{\partial E^k(\vec{r}_0)}{\partial r_{0j}} \frac{d\vec{r}_0}{dt}$$

or again after some arrangements:

$$\frac{dE_k(0)}{dt} = \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \vec{V}_i^j \frac{de_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{d\vec{r}_{0j}} + \vec{V}_0^j \frac{dE^k(\vec{r}_0)}{dr_{0j}}$$

which finally gives the expression:

$$\omega_1^2 = \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \frac{m_{\alpha}}{m_0} \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle + \frac{q_0^2}{3m_0^2\omega_0^2} \left\langle \left(\frac{\partial E^k(\vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle \quad (57)$$

we notice that the second term of the second member can be written otherwise:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E^k(\vec{r}_0)}{\partial r_{0j}} &= \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial r_{0j}} + \frac{\partial E_B^k(\vec{r}_0)}{\partial r_{01}} \\ &= \frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_0)}{\partial r_{01}} + \frac{1}{3} \delta_{k1} \nabla_0 E_B^k(\vec{r}_0) \end{aligned} \quad (58)$$

with

$$\vec{\nabla}_0 \vec{E}_B(\vec{r}_0) = 0, \quad (59)$$

then

$$\omega_1^2 = \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \frac{m_{\alpha}}{m_0} \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle + \frac{q_0^2}{3m_0^2\omega_0^2} \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle. \quad (60)$$

The last expression involves N identical terms in the sum, if we compute the average for one term:

$$\left\langle \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \right\rangle = \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \rho_{eq} \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\partial \vec{r}_{0j}} \right)^2 \quad (61)$$

and we change the integration variables:

$$\frac{\vec{r}_i - \vec{r}_0}{2} = \vec{r} \quad \text{and} \quad \frac{\vec{r}_i + \vec{r}_0}{2} = \vec{R} \quad (62)$$

we find:

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \frac{1}{9\omega_0^2} \left\{ \sum_{\alpha} \left(\frac{n_{\alpha} q_0}{m_0} \right) \int d\vec{r} \vec{\nabla}_0 \cdot \vec{e}_{\alpha}(\vec{r}) g_{0\alpha}(r) \right\}^2 \\ &+ \frac{q_0^2}{3m_0^2\omega_0^2} \sum_{\alpha} \left(\frac{n_{\alpha} m_0}{\mu_{0\alpha}} \right) \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \int d\vec{r} \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r})}{\partial r_j} \right)^2 g_{0\alpha}(r) \\ &+ \left(\frac{q_0}{3m\omega_0} \right)^2 \sum_{\alpha} \sum_{\sigma} n_{\alpha} n_{\sigma} \int d\vec{r} d\vec{r}' \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r})}{\partial r_j} \right) \\ &\times \left(\frac{\partial e_{\sigma}^k(\vec{r}')}{\partial r_j} \right) \left(g_{\alpha\sigma}^{(3)}(\vec{r}, \vec{r}') + g_{\alpha}(r) g_{\sigma}(r') \right) \end{aligned}$$

here $\mu_{0\alpha}$ is the reduced mass and $g_{0\alpha}(r)$ is the distribution function of the pair (impurity ion-ion of species α) and finally the parameter ω_1^2 is given by:

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \omega_0^2 + \frac{q_0^2}{3m_0^2\omega_0^2} \\ &\times \sum_{\alpha} \left(\frac{n_{\alpha} m_0}{\mu_{0\alpha}} \right) \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \int d\vec{r} \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r})}{\partial r_j} \right)^2 g_{0\alpha}(r) \\ &+ \left(\frac{q_0}{3m\omega_0} \right)^2 \sum_{\alpha} \sum_{\sigma} n_{\alpha} n_{\sigma} \int d\vec{r} d\vec{r}' \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r})}{\partial r_j} \right) \\ &\times \left(\frac{\partial e_{\sigma}^k(\vec{r}')}{\partial r_j} \right) \left(g_{\alpha\sigma}^{(3)}(\vec{r}, \vec{r}') + g_{\alpha}(r) g_{\sigma}(r') \right). \end{aligned} \quad (63)$$

Neglecting the third term in the last formula and performing the divergence calculus in the second term (using the screened potential), we obtain:

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \omega_0^2 + \frac{q_0^2}{3m_0^2\omega_0^2} \\ &\times \sum_{\alpha} \left(\frac{n_{\alpha} m_0}{\mu_{0\alpha}} \right) \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \int d\vec{r} \left(\frac{\partial e_{\alpha}^k(\vec{r})}{\partial r_j} \right)^2 g_{0\alpha}(r). \end{aligned}$$

References

1. J.W. Dufty, in *Strongly Coupled Plasmas*, edited by F. Rogers, H.E. DeWitt (Plenum, New York, 1987)
2. J.W. Dufty, L. Zoghaib, in *Strongly Coupled Plasmas*, edited by S. Ichimaru (Elsevier Science, New York, 1990)
3. J.W. Dufty, L. Zoghaib, Phys. Rev. A **44**, 2612 (1991)
4. A. Alatsuey, J. Lebowitz, D. Levesque, Phys. Rev. A **43**, 2673 (1991)
5. J.W. Dufty, L. Zoghaib, Phys. Rev. E **47**, 2958 (1993)
6. M. Berkovsky, J.W. Dufty, A. Calisti, R. Stamm, B. Talin, Phys. Rev. E **51**, 4917 (1995)
7. B. Held, P. Pignolet, J. Phys. France **47**, 437 (1986)
8. D. Boercker, C. Iglesias, J. Dufty, Phys. Rev. A **36**, 2254
9. D. Boercker, in *Spectral line shapes*, Vol. 7, edited by R. Stamm, B. Talin (Nova Science, New York, 1993)
10. G.F. Mazenko, Phys. Rev. A **7**, 202 (1973)
11. G.F. Mazenko, Phys. Rev. A **9**, 360 (1974)

Résumé

Dans cette thèse nous avons calculé pour la première fois la fonction de la distribution du microchamp électrique, dans un plasma à deux composantes (ions+neutres) par l'utilisation de la formule de Baranger-Mozer (cluster expansion). Pour cela nous avons tenu compte de l'interaction ion-neutre.

Un calcul des fonctions d'autocorrélation du champ électrique subit par un ion impureté et de la vitesse de la même impureté a été développé à partir d'un modèle théorique. Ce modèle basé sur la fonction de mémoire, est valable dans le cas d'un plasma fortement couplé.

Enfin, nous avons appliqué et testé nos résultats de la fonction de la distribution du microchamp électrique obtenus au cas de profile de la raie Ly- α et Ly- β . Les résultats obtenus encouragent les chercheurs à améliorer le modèle tenant compte des ordres supérieurs.

Abstract

In this thesis the electric microfield distribution in multicomponent plasmas (ions + neutrals) is treated completely for the first time, by using the methods Baranger-Mozer (cluster expansion). It is to be noted that it was necessary to include the interaction ion-neutral.

Computing of autocorrelation function of the electric field seen by impurity ion and of velocity of the same impurity has been developed using a theoretical model. This model based on the memory function, is valid for strongly coupled plasma

Finally, we applied and tested our results of the electric microfield distribution to treat the shape of Ly- α and Ly- β lines. These results stimulate us to improve the electric microfield distribution models for higher order corrections.

Baranger-Mozer (+)
(cluster expansion)

β - Ly α - Ly