

UNIVERSITE CHEIKH ANTA DIOP DE DAKAR



FACULTE DES SCIENCES ET TECHNIQUES

ECOLE DOCTORALE: Physique, Chimie, Sciences de la Terre,

de l'Univers et de l'Ingénieur (ED-PCSTUI)

**LABORATOIRE DE PHYSIQUE DES PLASMAS
ET DE RECHERCHES INTERDISCIPLINAIRES**

Année : 2012 N° d'ordre : 2012015

THESE DE DOCTORAT UNIQUE

Spécialité : Physique Atomique et Nucléaire

Option : Physique des Plasmas

Présentée par :

Ibrahima Guèye FAYE

Titre:

**ETUDE DE L'INFLUENCE DU
MICROCHAMP ELECTRIQUE SUR LES
PARAMETRES SPECTROSCOPIQUES DES
PLASMAS**

soutenue le 26 Septembre 2012 devant le Jury composé de :

Président	Ahmadou WAGUE	Professeur Titulaire	Département de Physique FST, ITNA/UCAD
Rapporteurs	{ Papa NGOM	Maître de Conférences	Département de Math-Info FST/UCAD
	{ Ndèye Arame B. FAYE	Maître de Conférences	Département de Physique FST/UCAD
Examineurs	{ Bassirou BA	Professeur Titulaire	Département de Physique FST/UCAD
	{ Soussou SAMBOU	Maître de Conférences	Département de Physique FST/UCAD
Directeur de Thèse	Ismaïla DIEDHIOU	Chargé d'Enseignement	Département de Physique FST/UCAD

Remerciements

Ce travail a été réalisé dans le Laboratoire de Physique des Plasmas et de Recherches Interdisciplinaires de l'Ecole Doctorale ED-PCSTUI.

Je tiens à remercier le Directeur de la dite Ecole, le Pr Omar Guèye, ainsi que les Membres du Comité de Pilotage.

J'exprime ma profonde gratitude au Professeur Christian Sina Diatta qui a bien voulu m'accueillir dans le laboratoire et a guidé mes premiers pas dans la Recherche.

Je remercie particulièrement M. Ismaïla Diédhiou qui a sacrifié beaucoup de son temps et de lui-même pour que ce Mémoire se réalise ; le disciple ne saura jamais exprimer fidèlement sa reconnaissance vis-à-vis du Maître ; qu'il continue de nous guider encore longtemps.

Mes remerciements vont aussi :

- au Professeur Ahmadou Wagué pour avoir facilité mon inscription dans la Formation Doctorale Physique Atomique et Nucléaire et qui a généreusement accepté de présider le Jury,*
- aux Professeurs Arame Boye Faye, Pape Ngom et Bassirou Bâ ainsi qu'au Docteur Soussou Sambou pour avoir accepté de faire partie du Jury et de juger le présent travail,*
- à M. Moustapha Sadibou Tall pour ses précieux conseils et le suivi du présent travail,*
- à MM Saïdou Diallo et Louis Gomis pour leur collaboration et avec qui j'ai partagé tous les moments importants.*

Nous prions le Seigneur pour qu'Il accorde une longue vie, pleine de satisfaction, à chacune de ses personnes.

Dédicace

Ce Mémoire est dédié

- *à Khadimou Rassoul dont la lumière nous inspire ;*
- *à Cheikh Massamba ibn Modou Faty ibn Massamba qui veille sur nous ;*
- *à nos parents, notre famille; à tous ceux qui, patiemment et généreusement, se sont chargés de notre éducation, de notre formation, ceux qui ont tant œuvré pour notre réussite, en particulier Feu Mamadou Cissé, paix à son âme ;*
- *au Professeur Libasse Lahi Diop qui, un soir sur la route du Waalo, a ravivé une flamme presque éteinte par les exigences et sévérités de la vie*
- *à tous nos enfants pour qui nous devons nous évertuer de construire un monde meilleur.*

Nous espérons un jour faire leur fierté.

Table des matières

INTRODUCTION GENERALE.....	3
Chapitre 1 FONCTION DE DISTRIBUTION DU MICROCHAMP ELECTRIQUE	8
1.1 FDME dans un plasma isotrope comportant une seule espèce d'ions ..	8
1.2 Plasma idéal	11
1.3 Prise en compte de l'effet d'écran	15
1.4 FDME dans un plasma faiblement corrélé et à une seule composante ionique	19
1.4.1 Transformée de Fourier de la densité de probabilité du champ des électrons	20
1.4.2 Calcul approché de la transformée de Fourier	26
1.4.3 Expressions approchées de la FDME de Hooper	36
1.5 FDME dans les plasmas faiblement corrélés et contenant deux espèces ioniques	41
1.6 FDME dans les plasmas fortement corrélés et à plusieurs composantes	46
1.7 Méthode de simulation du microchamp électrique	50
1.7.1 Principe de la méthode de simulation	50
1.7.2 Application de la simulation Monte Carlo à la détermination de la FDME	53
Chapitre 2 PROFIL DE RAIE	60
2.1 Expression générale du profil de raie	62
2.2 Approximations du faible couplage et du Chemin Classique	64
2.3 Approximation des Impacts pour les électrons.....	67

2.4 Approximation quasi statique pour les ions	70
Chapitre 3 ETUDE DES PARAMETRES STARK DE LA RAIE 4471 Å DE L'HELIUM NEUTRE ET DE SA COMPOSANTE INTERDITE	74
.1 Profil de raie de l'Hélium neutre	75
3.1.1 Niveaux d'énergie perturbés par le microchamp des ions	75
3.1.2 Eléments matriciels du moment dipolaire.....	76
3.1.3 Eléments matriciels de l'opérateur d'élargissement d'impact des électrons	77
3.2 Profil de la raie 4471 Å de l'He I : composantes permise et interdite	81
3.2.1 Expression du profil de la raie.....	81
3.2.2 Résultats.....	82
3.2.3 Variations du profil de raie en fonction de la température et de la densité du plasma	85
3.2.3.1 <i>Variations du profil de raie en fonction de la température</i>	86
3.2.3.2 <i>Variations du profil de raie en fonction de la densité</i>	87
3.3 Influence du choix de la FDME sur les paramètres Stark	89
3.3.1 Commentaire de l'article	89
3.3.2 Article	91
CONCLUSION GENERALE.....	98

INTRODUCTION GENERALE

Le plasma, ensemble d'atomes ou de molécules, d'électrons et d'ions globalement neutre, est la forme la plus répandue de la matière dans l'Univers. Il constitue les étoiles, une partie de l'espace interstellaire, une partie de notre atmosphère (ionosphère), la source d'énergie dans les réacteurs nucléaires ... Il se forme par suite de l'ionisation totale ou partielle des atomes, du fait d'interactions avec un champ externe ou de collisions interatomiques résultant de l'agitation thermique causée par une élévation importante de la température. La grande diversité des sources de plasma explique la grande gamme des valeurs de ses paramètres, notamment la température, la densité de ses composants et la diversité de sa composition. La classification des plasmas de notre Univers permet de les répartir, d'une part, en plasmas froids et plasmas chauds et, d'autre part, en plasmas peu denses et plasmas denses (cf Tableau 1)

Catégorie	Température (K)	Densité électronique (cm^{-3})
Plasma interstellaire	10^4	10^{-2} à 10^1
Ionosphère	10^2	10^3
Chromosphère	6.10^3	10^{10} à 10^{11}
Couronne solaire	10^6	10^8
Plasma de fusion (conditions minimales)	10^8	10^{14} à 10^{15}
Intérieur d'une Naine Blanche	10^7 à 10^8	10^{25} à 10^{32}

Tableau 1: Caractéristiques de quelques plasmas (S. P. Sadykova, *PhD Thesis*, 2011)

Selon sa densité et sa température, le plasma peut être le siège de multiples processus physiques comme les chocs entre particules, les interactions électriques et magnétiques, les phénomènes d'oscillations et de turbulence accompagnant le mouvement des particules. Il est le siège d'ionisation et de recombinaison des atomes. Les propriétés physiques des plasmas sont essentiellement liées aux mécanismes d'interaction entre les différentes particules et toute tentative de leur description est faite en considérant nécessairement la densité et la température des différentes espèces. Du fait du

nombre élevé de particules on est souvent confronté au problème à N corps. La complexité de ce problème est accentuée par la diversité des espèces, chacune pouvant avoir ses propres propriétés spécifiques et un comportement qui s'écarte de celui des autres espèces. Par exemple, dans certains cas, il faut définir une température et une densité pour chacune ; les électrons et les ions ont des vitesses très différentes, leurs types d'interaction électrique avec un système donné sont différents, ce qui fait que leur description ou leur prise en charge dans les calculs n'est pas la même. Ainsi en est-il du champ électrique créé par des électrons et des ions en un point donné du plasma (microchamp électrique). Si on s'intéresse au microchamp électrique qui règne en un point, position d'un atome ou d'un ion, on doit rigoureusement tenir compte des spécificités de chaque voisin (ou perturbateur), des interactions entre particules voisines (l'effet de corrélation) en plus de la nature et des propriétés intrinsèques de cet atome. Son état est en effet déterminé par ses interactions avec ses voisins. Ce microchamp, du fait de la diversité des processus qui se produisent autour de la particule, a un caractère statistique, ce qui rend sa détermination par le calcul théorique très difficile. Ainsi certains calculs théoriques utilisent plutôt la fonction de distribution de ce microchamp pour tenir compte de ses variations. Or ce champ joue un rôle capital dans l'état de l'atome ; il est responsable de l'effet Stark qui produit une perturbation des états propres de l'atome et donc de son diagramme énergétique. Lorsque l'atome excité émet un rayonnement, la nature de ce dernier est modifiée par l'effet Stark. Par conséquent, en spectroscopie des plasmas, la connaissance de la fonction de distribution du microchamp électrique est nécessaire pour la détermination théorique du profil de raie. Ce profil est utilisé pour déterminer la largeur et le déplacement de la raie émise par les atomes neutres ou ionisés dans les plasmas. Ces deux paramètres, largeur et déplacement, permettent de déterminer certaines propriétés caractéristiques du milieu : température, densité, nature et abondance des éléments. Plusieurs fonctions de distribution ont été proposées suivant le

type de plasma. Dans ce travail, différentes fonctions de distributions sont étudiées, et la prise en compte des corrélations par ces théories est mise en exergue. Il s'agit d'indiquer, selon le type de plasma caractérisé par sa densité et sa température, la fonction de distribution du microchamp électrique la plus adaptée pour le calcul du profil de raie. Un bon choix de la fonction de distribution à introduire dans le calcul du profil de raie permet en effet d'avoir des informations plus précises sur les milieux ionisés (température, densité et nature de l'atome émetteur).

Le premier calcul de la fonction de distribution du champ électrique est dû à Holtsmark [1]. Son modèle est relativement simple car les particules y sont considérées comme indépendantes et aucune corrélation n'est prise en compte dans l'expression du champ électrique créé en un point. Les champs électriques sont supposés coulombiens dans cette théorie. Leur utilisation dans le calcul du profil de la raie Ly- α de l'atome d'hydrogène, conduit à des résultats satisfaisants dans le cas des plasmas très chauds et peu denses. Mais lorsqu'on considère des plasmas de densité plus élevée et moins chauds, des écarts assez importants sont notés. Ceci s'explique par le fait que les corrélations entre particules deviennent non négligeables. La prise en compte des corrélations entre particules dans le calcul de la fonction de distribution du champ électrique peut alors se justifier. D'autres approches sont dès lors proposées, qui tentent de tenir compte au mieux de la corrélation entre les particules.

L'une des premières corrections apportées, due à Ecker [2], consiste à tenir compte de l'effet d'écran créé par les particules environnantes de l'émetteur. Pour cela le potentiel électrique est modifié et est remplacé par celui de Debye. Les résultats obtenus sont appliqués par Griem, Kolb et Shen [3] pour calculer les profils des raie Ly- α et H β de l'atome d'Hydrogène pour différentes valeurs de la densité et de la température. Pour la raie H β , si la théorie d'Ecker donne des résultats nettement meilleurs que celle de Holtsmark, on note que l'écart

entre les courbes théoriques d'Ecker et les courbes expérimentales obtenues par Bogen [4] augmente notamment dans la région des ailes du profil.

Ainsi plusieurs tentatives sont menées pour améliorer voire généraliser la distribution du champ électrique à introduire dans le calcul du profil de raie.

Parmi toutes ces théories, celle qui a retenu notre plus grande attention est celle de Hooper [5] dont les résultats s'appliquent aussi bien aux plasmas chauds et peu denses qu'aux plasmas froids et denses. Le travail de Hooper demeure une référence dans la détermination de la fonction de distribution du champ électrique du fait du domaine assez vaste de son application et de la rigueur mathématique utilisée dans les calculs.

Mais des études menées ultérieurement ont montré que cette théorie atteint ses limites lorsque les plasmas considérés sont fortement corrélés, et lorsqu'ils contiennent plus d'une espèce d'ions perturbateurs. Ces cas ont été étudiés respectivement par Iglesias *et al* [6] et Halenka *et al* [7].

Ainsi, le problème du calcul de la fonction de distribution du champ électrique demeure un domaine assez complexe qui suscite beaucoup d'intérêt en spectroscopie des plasmas.

Nous avons fait une étude des fonctions de distribution du champ électrique dans le chapitre 1, en présentant différentes méthodes de sa détermination, selon le type de plasma. L'accent sera mis sur les approximations faites dans ces théories et leurs domaines de validité. Dans le chapitre 2, nous présentons les grandes lignes du calcul théorique du profil de la raie émise par l'atome d'Hélium neutre, utilisant l'approximation du chemin classique. Le résultat est utilisé dans le troisième chapitre et adapté à la raie 4471 Å dont le profil est utilisé pour déterminer les paramètres d'élargissement et de déplacement.

Bibliographie

- [1] J. Holtsmark, *Ann. Physik*, 58, 577 (1919)
- [2] G. Ecker, *Z. Phys.*, 148, 593 (1957)
- [3] Griem, Kolb, Shen *Phys. Rev.*, 116, 4 (1959)
- [4] P. Bogen, *Z. Phys.* 149, 62 (1957)
- [5] C. F. Hooper, Jr., *Phys. Rev.*, 149, 77 (1966); *Phys. Rev.*, 165, 215 (1968)
- [6] C. A. Iglesias, J. L. Lebowitz and D. MacGowan, *Phys. Rev. A*, 28, 1667 (1983)
- [7] J. Halenka, W. Olchava, B. Grabowski et F. Gajda, *J.Q.S.R.T.*, 74, 539 (2002)

Chapitre 1

FONCTION DE DISTRIBUTION DU MICROCHAMP ELECTRIQUE (FDME)

La diversité des processus physiques qui se produisent au sein du plasma fait que la fonction de distribution du microchamp électrique FDME n'est pas facile à déterminer. On doit, dans son calcul en un point donné, tenir compte de l'influence de chacun de ces phénomènes.

Le calcul théorique étant complexe, du fait du nombre important de variables et d'inconnues, des approximations sont nécessaires à différentes étapes. Souvent, les hypothèses d'équilibre thermodynamique et d'isotropie du milieu sont introduites. Ensuite, selon le type de plasma, les corrélations sont soit négligées soit prises en compte avec une certaine approximation. Plus on tient compte de ces corrélations plus les calculs théoriques de la FDME sont lourds et plus les outils mathématiques utilisés sont sophistiqués. L'utilisation de la simulation informatique des plasmas permet de contourner certaines difficultés.

Dans les sections qui suivent nous présentons différentes méthodes, théoriques et de simulation, de détermination de la FDME.

1.1 FDME dans un plasma isotrope comportant une seule espèce d'ions

Nous considérons un système constitué de N ions monochargés et N électrons. En l'absence d'un champ extérieur, le champ électrique qui règne en un point donné est la résultante des champs individuels créés par les particules chargées qui peuvent être en mouvement plus ou moins rapide. La distribution du champ dû au système de particules est liée à la distribution de ces particules. Pour déterminer le champ en un point neutre ou chargé, il faut raisonner en termes de probabilité.

Soit $w_0(\vec{E})$ la probabilité d'avoir un vecteur champ électrique compris entre \vec{E} et $\vec{E} + d\vec{E}$. $w_0(\vec{E})$ est calculée en introduisant la densité de probabilité $P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3 \dots, \vec{r}_N)$ d'avoir la répartition adéquate de ces particules :

$$w_0(\vec{E}) = \int \dots \int \delta(\vec{E} - \sum_{j=1}^N \vec{E}_j) P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3 \dots, \vec{r}_N) d^3\vec{r}_1 \cdot d^3\vec{r}_2 \dots d^3\vec{r}_N \quad (\text{I.1.1})$$

où δ est le delta de Dirac.

Cette relation constitue le point de départ de plusieurs approches du calcul théorique de la FDME [1-6]. Ces approches diffèrent par le choix de l'expression de la densité de probabilité $P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3 \dots, \vec{r}_N)$ et du type de champ considéré ; ce dernier pouvant être coulombien ou de Debye. La probabilité de configuration à considérer dépend du type de plasma.

Pour déterminer la densité de probabilité du module du champ électrique $w(E)$, on introduit la probabilité $w(E)dE$ d'avoir un champ dont le module est compris entre E et $E+dE$:

$$w(E)dE = 4\pi E^2 w_0(\vec{E})dE \quad (\text{I.1.2})$$

On en déduit la relation suivante entre les deux densités de probabilité.

$$w(E) = 4\pi E^2 w_0(\vec{E}) \quad (\text{I.1.3})$$

Pour calculer $w_0(\vec{E})$ et déduire $w(E)$, il est plus commode de calculer sa transformée de Fourier notée $T(\vec{k})$ qui s'exprime par :

$$T(\vec{k}) = \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{E}} w_0(\vec{E}) d\vec{E}. \quad (\text{I.1.4})$$

La transformation de Fourier inverse de $T(\vec{k})$ donnera $w_0(\vec{E})$:

$$w_0(\vec{E}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{E}} T(\vec{k}) d\vec{k} \quad (\text{I.1.5})$$

Passant en coordonnées sphériques, on peut mettre l'expression de $w_0(\vec{E})$ sous la forme :

$$w_0(\vec{E}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint e^{-ikE \cos\theta} T(\vec{k}) k^2 \sin\theta d\theta d\varphi dk \quad (\text{I.1.6.a})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty k^2 T(\vec{k}) \left[\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi e^{-ikE \cos\theta} \sin\theta d\theta \right] dk \quad (\text{I.1.6.b})$$

$$= \frac{1}{2\pi^2 E} \int_0^\infty k T(\vec{k}) \sin(kE) dk \quad (\text{I.1.6.c})$$

La combinaison des relations (I.1.3) et (I.1.6.c) donne la densité de probabilité du module du champ électrique sous la forme:

$$w(E) = \frac{2}{\pi} E \int_0^{\infty} k T(\vec{k}) \sin(kE) dk \quad (\text{I.1.7})$$

Le milieu étant supposé isotrope, $T(\vec{k})$ ne dépend que du module de \vec{k} . On obtient alors:

$$w(E) = \frac{2}{\pi} E \int_0^{\infty} k T(k) \sin(kE) dk \quad (\text{I.1.8})$$

La faiblesse des valeurs du microchamp suggère d'utiliser dans la pratique le champ réduit $\beta = \frac{E}{E_0}$ où E_0 est le champ dit normal de Holtsmark [3] donné par :

$$E_0 = 2\pi |Z_p e| n^{2/3} \left(\frac{4}{15}\right)^{2/3} \quad (\text{I.1.9})$$

Dans (I.1.9) n est la densité de particules et Z_p leur nombre de charge.

Le changement de variable : $x = kE_0$, conduit à une expression de la densité de probabilité de la forme:

$$w(E) = \frac{2}{\pi} \frac{\beta}{E_0} \int_0^{\infty} x T(x) \sin(\beta x) dx \quad (\text{I.1.10})$$

On déduit de l'expression précédente la fonction de distribution du microchamp en multipliant les deux membres de l'équation par le champ normal E_0 ; d'où :

$$H(\beta) = \frac{2}{\pi} \beta \int_0^{\infty} x T(x) \sin(\beta x) dx \quad (\text{I.1.11})$$

Puisqu'aucune hypothèse n'est faite sur les corrélations, cette expression de la fonction de distribution du champ électrique reste valable quelle que soit l'importance de ces corrélations dans le plasma.

Les modèles de calcul du microchamp diffèrent par l'expression du facteur $T(x)$ qui est la transformée de Fourier de la fonction de distribution. Dans la suite, nous nous intéressons à son calcul pour différents types de plasmas.

1.2 Plasma idéal

Dans un plasma peu dense et très chaud, les particules sont supposées statistiquement indépendantes. La probabilité de configuration globale $P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)$ peut être remplacée par un produit de probabilités $\prod_{j=1}^N P(\vec{r}_j)$ où $P(\vec{r}_1), P(\vec{r}_2), \dots$ sont les probabilités d'avoir respectivement la particule 1, la particule 2, ... avec les vecteurs positions $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots$. Toutes les probabilités $P(\vec{r}_i)$ sont égales à $\frac{1}{\vartheta}$ avec ϑ le volume de l'enceinte.

La densité de probabilité $w_0(\vec{E})$ peut s'écrire à l'aide du delta de Dirac sous la forme:

$$w_0(\vec{E}) = \frac{1}{\vartheta^N} \int \dots \int \delta(\vec{E} - \sum_{j=1}^N \vec{E}_j) d^3\vec{r}_1 \cdot d^3\vec{r}_2 \dots d^3\vec{r}_N \quad (\text{I.2.1})$$

On en déduit la transformée de Fourier :

$$A(k) = \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{E}} w_0(\vec{E}) d\vec{E}. \quad (\text{I.2.2.a})$$

$$= \vartheta^{-N} \int \dots \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{E}} \delta(\vec{E} - \sum_{j=1}^N \vec{E}_j) d^3\vec{r}_1 \cdot d^3\vec{r}_2 \dots d^3\vec{r}_N. \quad (\text{I.2.2.b})$$

L'utilisation du delta de Dirac permet de réécrire (I.2.2.b) sous la forme:

$$A(k) = \vartheta^{-N} \int \dots \int e^{i\vec{k} \cdot \sum_{j=1}^N \vec{E}_j} d^3\vec{r}_1 \cdot d^3\vec{r}_2 \dots d^3\vec{r}_N \quad (\text{I.2.3})$$

$$A(k) = \left(\vartheta^{-1} \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{E}_1} d\vec{r}_1^3 \right)^N \quad (\text{I.2.4})$$

Le passage en coordonnées sphériques donne après un calcul similaire à celui ayant conduit à la relation (I.1.7), l'expression suivante de la transformée de Fourier de la densité de probabilité:

$$A(k) = \left[\frac{2\pi}{\vartheta} \int_0^\infty r^2 \left(\frac{-1}{ikE} \right) (e^{-ikE} - e^{ikE}) dr \right]^N \quad (\text{I.2.5.a})$$

$$= \left[\frac{4\pi}{\vartheta} \int_0^\infty r^2 \frac{\sin(kE)}{kE} dr \right]^N \quad (\text{I.2.5.b})$$

Mais cette forme est difficilement utilisable dans le calcul de la densité de probabilité obtenue en (I.1.8). Il devient nécessaire de faire un calcul approché en introduisant l'identité:

$$r^2 \frac{\sin(kE)}{kE} = r^2 - r^2 \left(1 - \frac{\sin(kE)}{kE}\right) \quad (\text{I.2.6})$$

on peut alors, en posant $Y = kE$, mettre la relation (I.2.5.b) sous la forme :

$$A(k) = \left[\frac{4\pi}{g} \left\{ \int_0^{r_M} r^2 dr - \int_0^{r_M} r^2 \left(1 - \frac{\sin Y}{Y}\right) dr \right\} \right]^N \quad (\text{I.2.7})$$

Pour calculer le premier terme dans l'expression ci-dessus, on peut intégrer par rapport à r et on remarque :

$$\frac{4\pi}{g} \int_0^{r_M} r^2 dr = 1. \quad (\text{I.2.8})$$

Le calcul du second terme s'effectue en considérant le champ coulombien

$$E = \frac{Z_p e}{r^2}. \quad (\text{I.2.9})$$

On obtient alors:

$$\frac{4\pi}{g} \int_0^\infty r^2 \left(1 - \frac{\sin Y}{Y}\right) dr = -\frac{2\pi}{g} |kZ_p e|^{3/2} \int_0^\infty \left(1 - \frac{\sin Y}{Y}\right) \frac{dY}{Y^{5/2}}. \quad (\text{I.2.10})$$

$$= -\frac{2\pi}{g} |kZe|^{3/2} [f(Y)]_0^\infty + \frac{4}{15} \int_0^\infty \frac{\sin Y}{Y^{3/2}} dY, \quad (\text{I.2.11})$$

avec :

$$f(Y) = -\frac{2}{3Y^{3/2}} + \frac{2 \sin Y}{5 Y^{5/2}} + \frac{4 \cos Y}{15 Y^{3/2}}. \quad (\text{I.2.12})$$

Si on ne retient que les premiers termes des développements de $\sin Y$ et $\cos Y$ dans (I.2.12), on remarque alors que $f(Y)$ est nul. L'intégrale dans le second terme de (I.2.11) donne $\sqrt{2\pi}$. Ces résultats permettent d'écrire $A(k)$ sous la forme :

$$A(k) = \left[1 + \left(-\frac{2\pi}{g} \right) \times |kZ_p e|^{3/2} \times \frac{4}{15} \times \sqrt{2\pi} \right]^N \quad (\text{I.2.13.a})$$

L'expression ci-dessus peut être ramenée à :

$$A(k) = \left[1 - \left(\frac{8\pi |kZ_p e|^{3/2} \sqrt{2\pi}}{15g} \right) \right]^N. \quad (\text{I.2.13.b})$$

Le second terme dans le crochet est petit devant l'unité en vertu de la grande taille du système et de la petitesse du facteur e . On peut alors faire l'approximation suivante :

$$A(k) \approx 1 - N \left(\frac{8\pi |kZ_p e|^{3/2} \sqrt{2\pi}}{15g} \right) = 1 - (k \times 2\pi \times |Z_p e|)^{3/2} n \times \frac{4}{15} \quad (\text{I.2.14})$$

$$A(x) \approx 1 - x^{3/2}, \quad (\text{I.2.15})$$

$$\text{avec } x = k \times 2\pi \times |Z_p e| n^{2/3} \times \left(\frac{4}{15} \right)^{2/3} = kE_0 \quad (\text{I.2.16})$$

Dans l'expression (I.2.15), on retrouve les deux premiers termes du développement en série de la fonction $\exp(-x^{3/2})$. On peut donc écrire :

$$A(x) \approx e^{-x^{3/2}}. \quad (\text{I.2.17})$$

La relation (I.2.17) permet de déduire l'expression finale de la FDME dite de Holtmark en l'introduisant dans (I.1.11). Ce qui donne :

$$H(\beta) = \frac{2}{\pi} \beta \int_0^{\infty} x e^{-x^{3/2}} \cdot \sin(\beta x) \cdot dx. \quad (\text{I.2.18})$$

Dans la figure I.1, nous donnons à titre de comparaison la courbe que nous avons obtenue à partir d'une programmation de l'expression (I.2.18) et celle obtenue à partir des résultats publiés [7] de Holtmark. Cette comparaison permet de tester le programme informatique de travail.

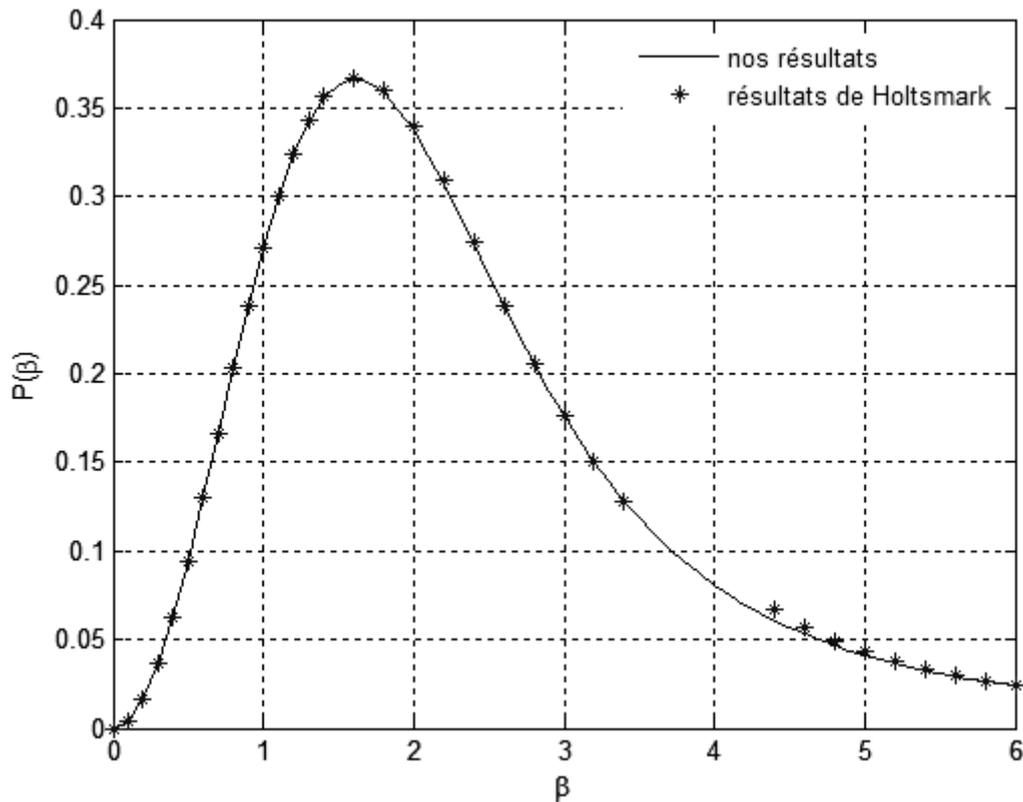


Fig.I.1 : Fonction de distribution de Holtmark

L'analyse de ces courbes montre que les champs les plus probables sont ceux dont le module est environ égal à 1,5 fois le champ normal et que les champs les plus intenses et les champs trop faibles sont moins probables.

La fonction de distribution de Holtmark est obtenue en négligeant l'effet des particules voisines sur le champ électrique créé par une particule donnée. Cette approximation se justifie lorsque l'énergie potentielle d'interaction entre deux ions est négligeable devant leur énergie d'agitation thermique. Ces conditions sont satisfaites dans certains types de plasmas, notamment dans les plasmas chauds et peu denses qu'on trouve dans les couches périphériques des étoiles. Mais elles ne sont pas réunies en général dans le cas des plasmas intra stellaires. Ce modèle doit être amélioré pour pouvoir s'appliquer à d'autres types de plasma.

1.3 Prise en compte de l'effet d'écran : Distribution d'Ecker

Dans un plasma, un ion est entouré d'un nuage d'électrons et d'autres ions. Le potentiel et le champ qu'il crée en un point donné du plasma n'est donc pas rigoureusement coulombien. Ainsi, la probabilité de trouver un ion dans l'unité de volume $d\vartheta$ n'est pas rigoureusement $nd\vartheta$ comme nous l'avons considéré dans la théorie de Holtsmark, où n est la densité des particules. Cette probabilité dépend du potentiel d'interaction électrostatique φ des particules. Pour tenir compte de ces interactions, on introduit le facteur de Boltzmann $\psi = \exp\left(\frac{e\varphi}{k_B T}\right)$. Dans la suite, nous calculons ce potentiel dans l'hypothèse des faibles interactions.

Les fonctions de distribution respectives des électrons et des ions s'écrivent :

$$\begin{cases} W_e = e^\psi \approx 1 + \psi \\ W_i = e^{-Z_i\psi} \approx 1 - Z_i\psi \end{cases} \quad (\text{I.3.1})$$

La densité de charge électrique du plasma étant définie par

$$q = -en_e W_e + e \sum_i Z_i n_i W_i, \quad (\text{I.3.2.a})$$

où n_e et n_i sont les densités respectives d'électrons et d'ions, on peut exprimer cette densité sous la forme:

$$q = -e\psi(n_e + \sum_i Z_i^2 n_i) \quad (\text{I.3.2.b})$$

Cette relation est obtenue en tenant compte de la neutralité électrique du plasma:

$$n_e = \sum_i Z_i n_i.$$

Toutes les particules contribuent dans la valeur de cette densité de charge. Le potentiel obéit à l'équation de Poisson :

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{4\pi}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} q \quad (\text{I.3.3})$$

En introduisant (I.3.2) dans (I.3.3), on obtient, l'équation de Debye-Hückel

$$\nabla^2 \varphi = \frac{\varphi}{\lambda_D^2} \quad (\text{I.3.4})$$

où λ_D est la longueur de Debye définie par :

$$\lambda_D = \left[\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r k_B T}{4\pi e^2 (n_e + \sum_i Z_i^2 n_i)} \right]^{1/2} \quad (\text{I.3.5})$$

On doit tenir compte des deux conditions aux limites suivantes : le potentiel est nul à l'infini, et on doit retrouver le potentiel coulombien d'un ion lorsque $r \rightarrow 0$. Dans ces conditions, la résolution de l'équation différentielle donne :

$$\varphi(r) = \frac{Z_i e}{r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) \quad (\text{I.3.6})$$

On en déduit le champ électrique créé par l'ion :

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi = -\frac{Z_i e}{r^3} \left(1 + \frac{r}{\lambda_D}\right) \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) \vec{r} \quad (\text{I.3.7})$$

Pour tenir compte de l'effet d'écran on introduit le facteur de Boltzmann dans la fonction de partition initialement définie dans le modèle de Holtsmark. Le calcul de la FDME se fait en considérant que le champ créé par l'ion est négligeable au-delà de la longueur de Debye et que pour $r \leq \lambda_D$, le champ est diffusé par les électrons qui se situent autour de l'ion et prend la forme (I.3.7). Ce calcul conduit à l'expression de la FDME dite d'Ecker [4]:

$$H_\delta(\beta) = \left(\frac{2\beta\delta^2}{\pi}\right) \cdot \int_0^\infty \exp(-\delta \cdot g(y)) \cdot y \cdot \sin(\beta \cdot \delta^2 \cdot y) dy \quad (\text{I.3.8})$$

où la fonction g est définie par :

$$g(y) = \frac{3}{2} \cdot y^{1/2} \cdot \int_y^\infty \left(1 - \frac{1}{z}\right) \sin(z) \cdot z^{1/2} dz \quad (\text{I.3.9})$$

Dans (I.3.8) le paramètre δ défini par : $\delta = \frac{4}{3} \pi \lambda_D^3 n_i$ représente le nombre d'ions dans la sphère de Debye. Il exprime l'importance de l'effet d'écran.

La différence entre le modèle de Holtsmark et celui d'Ecker peut s'exprimer à l'aide du paramètre δ . On remarque, en considérant la relation (I.3.5), que δ est proportionnel à $\frac{T^{3/2}}{n_i^{1/2}}$. Ainsi plus δ est grand, plus les résultats d'Ecker seront

proches de ceux de Holtsmark obtenus en supposant les températures très élevées et les densités très basses.

Inversement, plus δ est petit plus les effets d'écran se font ressentir et plus on s'éloigne du modèle de plasma de Holtsmark.

Dans la figure I.2, nous avons tracé la FDME d'Ecker donnée par (I.3.8) pour ces deux cas, c'est-à-dire pour une petite valeur (3) et pour une grande valeur (50) du paramètre δ .

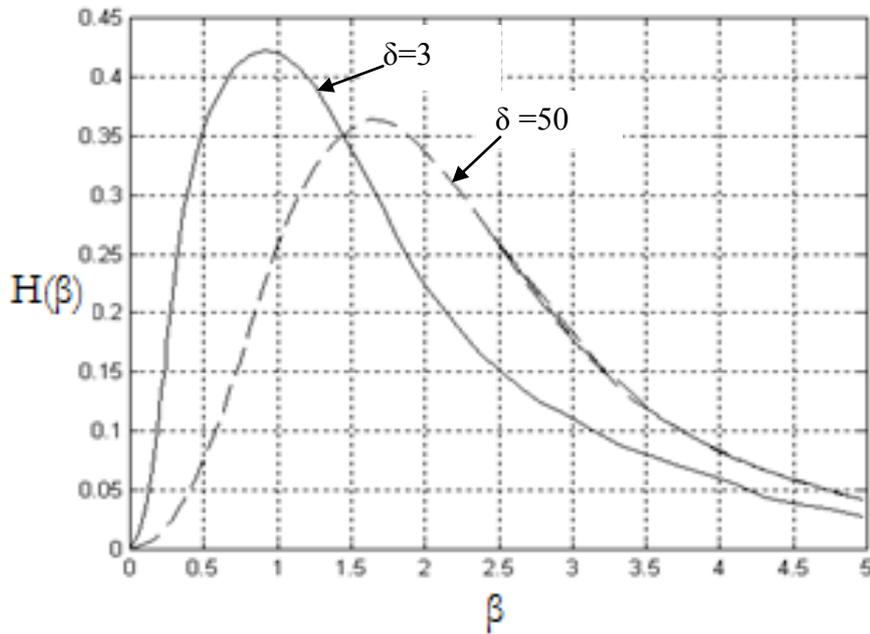


Fig.I.2 : Distribution d'Ecker pour deux valeurs de δ

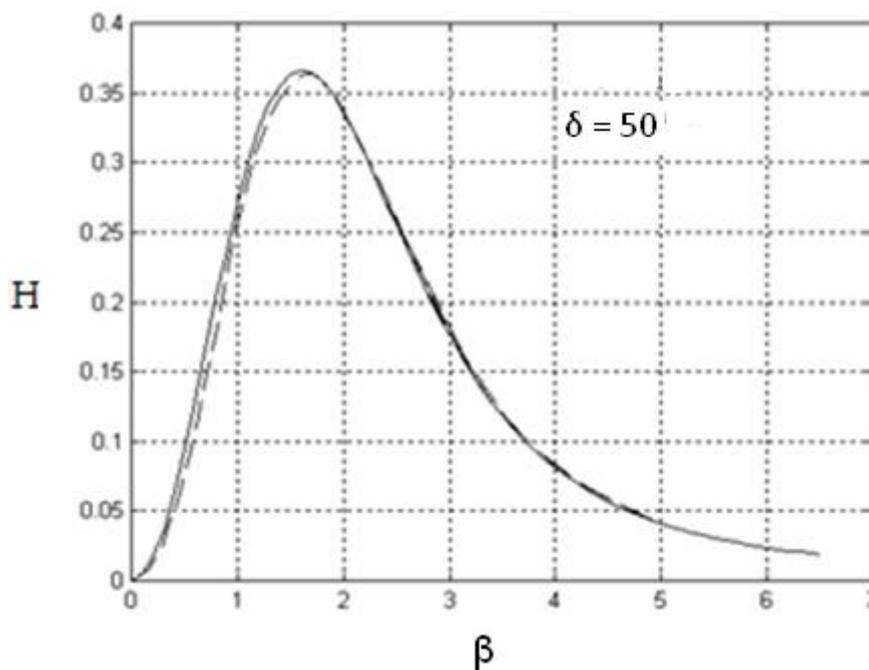


Fig.I.3 : Comparaison des fonctions de distribution de Holtmark (—) et d'Ecker (---) pour une grande valeur de δ

Dans la figure I.2, nous remarquons que les champs les plus proches du champ normal E_0 sont plus probables pour la plus petite valeur de δ . Inversement, les champs les plus intenses sont plus probables pour la plus grande valeur de δ , correspondant aux plasmas plus chauds et moins denses. Les écarts sont importants pour les deux valeurs de δ très différentes.

Dans la figure I.3, nous comparons pour δ grand la distribution d'Ecker à celle de Holtsmark. Nous remarquons que dans ce cas l'écart entre les résultats de Holtsmark et ceux d'Ecker est très faible. On peut donc obtenir la distribution de Holtsmark à partir de celle d'Ecker en prenant δ très grand.

L'analyse des deux courbes permet de conclure que la distribution de Holtsmark n'est pas applicable dans certains types de plasmas, notamment ceux pour lesquels l'énergie d'interaction entre ions n'est pas négligeable par rapport à leur énergie cinétique. Lorsqu'on considère l'interaction entre particules, le champ électrique créé par l'une quelconque est influencé par la présence des autres particules. Il faut donc tenir compte des corrélations pour avoir une expression plus précise de la FDME.

1.4 FDME dans un plasma faiblement corrélé et à une seule composante ionique

Pour aborder le calcul de la distribution du champ électrique en tenant compte des corrélations entre particules chargées, il est nécessaire de modifier l'expression de la probabilité de configuration $P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)$.

Dans la plupart des théories qui ont précédé celle de Hooper [6], on considère séparément les deux catégories de plasmas (plasmas très denses et plasmas peu denses) et on ne considère, au meilleur des cas, que les corrélations binaires. Le modèle de Hooper peut s'appliquer aux deux types de plasmas et tient compte des corrélations multiples. Pour cela, on introduit une fonction de partition dans l'expression de la probabilité de configuration. Pour les électrons, un champ électrique coulombien est utilisé, du fait de leur grande mobilité alors que pour les ions moins rapides, on utilise un champ du type de Debye modifié.

Les techniques mathématiques utilisées sont : la méthode des coordonnées collectives, le développement en série d'Ursell de la transformée de Fourier de la densité de probabilité du champ et le développement en amas ou « cluster expansion ».

Le champ électrique en un point du plasma peut être décomposée en deux parties : celle due aux électrons (constituants rapides du milieu) appelée composante haute fréquence et celle due aux ions, relativement lents, appelée composante basse fréquence. On calcule les fonctions de distribution du microchamp électrique dû aux électrons en un point neutre et en un point chargé, et celles du champ dû aux ions en ces points. Cette distinction de point chargé ou neutre est nécessaire dans certaines utilisations du microchamp, notamment en spectroscopie, pour calculer le profil de la raie émise par un atome (point neutre) ou un ion (point chargé). Dans la méthode d'Approximation du Chemin Classique et celle de la Théorie Unifiée, on introduit séparément la fonction de distribution du microchamp créé par les ions.

Nous distinguons dans le calcul trois principales étapes :

- l'établissement de l'expression générale de la fonction de distribution $P(\varepsilon)$;
- l'établissement de l'expression générale de la transformée de Fourier $T(l)$ de la densité de probabilité $Q(\vec{\varepsilon})$ du champ électrique et son développement en série d'Ursell pour un plasma corrélé.
- Le calcul approché de $T(l)$ qui nous permettra de déduire les expressions correspondantes de $P(\varepsilon)$ pour les différentes approximations.

L'expression générale de la FDME (I.1.11) a été établie sans hypothèses sur les corrélations. Elle demeure donc valable dans le cas présent ; ce sont les méthodes de calcul qui diffèrent [3 ; 5 ; 6 ; 8]. Nous nous limitons ainsi à présenter le calcul de la transformée de Fourier de la densité de probabilité du microchamp dans la présente théorie.

1.4.1 Transformée de Fourier de la densité de probabilité du champ des électrons

1.4.1.1 Forme générale de la transformée de Fourier

Dans le modèle de Hooper, le plasma considéré est constitué de N particules monochargées, en mouvement dans un bain uniforme neutralisant contenu dans un volume \mathcal{G} . Pour prendre en compte les corrélations, la probabilité de configuration introduite dans (I.1.1) s'écrit :

$$P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{Z} e^{-\beta_B V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)} \quad (\text{I.4.1})$$

où $e^{-\beta_B V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)}$ est le facteur de Boltzmann, introduit pour tenir compte des corrélations ; Z est la fonction de partition de configuration définie par :

$$Z = \int \dots \int e^{-\beta_B V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)} \prod_{j=1}^N d\vec{r}_j \quad (\text{I.4.2})$$

et

$$V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = V_0 + \sum_j V_{j0} \quad (\text{I.4.3})$$

l'énergie potentielle totale du système, qui se compose de la contribution du background (V_0) et de l'énergie d'interaction $\sum_j V_{j0}$ des N particules. Ces interactions étant considérées du type de Debye, on a :

$$V_{j0} = \frac{e^2}{r_{j0}} \exp\left(\frac{-\alpha r_{j0}}{\lambda_D}\right), \quad (\text{I.4.4})$$

où α est un paramètre arbitraire positif d'ajustement dont nous discuterons plus loin ; \vec{r}_{j0} le vecteur position de la $j^{\text{ième}}$ particule par rapport au point d'intérêt où nous cherchons le champ.

La transformée de Fourier de la densité de probabilité $P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)$ s'écrit:

$$T(l) = \frac{1}{Z} \int \dots \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N e^{-\beta_B V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) + \sum_j i\vec{l} \cdot \vec{E}_j} \quad (\text{I.4.5})$$

Le fait de considérer des champs de types différents pour les électrons et les ions conduit à deux FDME différentes. Dans ce qui suit nous présentons dans les détails le calcul de la FDME électrons ; celui de la FDME des ions est similaire.

Pour les électrons le champ \vec{E}_j est coulombien et la relation (I.4.5) devient :

$$T(l) = \frac{1}{Z} \int \dots \int e^{F(l)} \cdot \prod_{j=1}^N d\vec{r}_j \quad (\text{I.4.6})$$

avec

$$F(l) = -\beta_B V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) + \sum_j \frac{i\vec{l} \cdot \vec{r}_j}{r_j^3} \quad (\text{I.4.7})$$

L'introduction de l'opérateur $\vec{\nabla}_0$ défini à partir du gradient par : $\vec{\nabla} = \frac{i}{e} \vec{\nabla}_0$ et

l'utilisation de (I.4.3) permettent d'écrire (I.4.7) sous la forme:

$$F(l) = -\beta_B V_0 - \beta_B \sum_j V_{j0} + \frac{i}{e} \vec{l} \cdot \left(\vec{\nabla}_0 V_0 + \sum_j \vec{\nabla}_0 V_{j0} \right) \quad (\text{I.4.8.a})$$

$$= -\beta_B V_0 + \frac{i}{e} \vec{l} \cdot \vec{\nabla}_0 V_0 + \sum_j \left(-\beta_B V_{j0} + \frac{i}{e} \vec{l} \cdot \vec{\nabla}_0 V_{j0} \right) \quad (\text{I.4.8.b})$$

On peut donc écrire (I.4.6) sous la forme :

$$T(l) = \frac{1}{Z} \int \dots \int \exp \left[-\beta_B V_0 + \frac{i}{e} \vec{l} \cdot \vec{\nabla}_0 V_0 + \sum_j \left(-\beta_B V_{j0} + \frac{i}{e} \vec{l} \cdot \vec{\nabla}_0 V_{j0} \right) \right] \prod_{j=1}^N d\vec{r}_j \quad (\text{I.4.9.a})$$

qui peut encore s'écrire de la façon suivante :

$$T(l) = \frac{1}{Z} \int \dots \int e^{-\beta_B V_0 + \frac{i}{e} \vec{l} \cdot \vec{\nabla}_0 V_0} \prod_{j=1}^N \left(e^{-\beta_B V_{j0} + \frac{i}{e} \vec{l} \cdot \vec{\nabla}_0 V_{j0}} d\vec{r}_j \right) \quad (\text{I.4.9.b})$$

Sous cette forme, $T(l)$ est difficilement utilisable. Il faut faire des approximations.

1.4.1.2 Développement en série d'Ursell

Pour obtenir une expression plus abordable, on utilise la technique du développement en amas ou « cluster expansion » introduite par J. E. Mayer et M. G. Mayer [9] qui permet de traiter le produit dans l'intégrale. Pour cela on pose:

$$\chi(l, j) = \exp\left(-\beta_B V_{j0} + \frac{i}{e} \vec{l} \cdot \vec{\nabla}_0 V_{j0}\right) - 1 \quad (\text{I.4.10})$$

La relation (I.4.9.b) devient:

$$T(l) = \frac{1}{Z} \int \dots \int \exp\left(-\beta_B V_0 + \frac{i}{e} \vec{l} \cdot \vec{\nabla}_0 V_0\right) \times \prod_{j=1}^N [1 + \chi(l, j)] d\vec{r}_j \quad (\text{I.4.11.a})$$

$$= \frac{1}{Z} \int \dots \int \exp\left(-\beta_B V_0 + \frac{i}{e} \vec{l} \cdot \vec{\nabla}_0 V_0\right) \times \left[1 + \sum_i \chi(l, i) + \sum_{i \langle j} \chi(l, i) \chi(l, j) + \dots\right] \prod_j d\vec{r}_j \quad (\text{I.4.11.b})$$

$$= \frac{1}{Z} \int \dots \int \exp\left(-\beta_B V_0 + \frac{i}{e} \vec{l} \cdot \vec{\nabla}_0 V_0\right) \prod_j d\vec{r}_j + \frac{1}{Z} \int \dots \int \exp\left(-\beta_B V_0 + \frac{i}{e} \vec{l} \cdot \vec{\nabla}_0 V_0\right) \times \sum_i \chi(l, i) \prod_j d\vec{r}_j \\ + \frac{1}{Z} \int \dots \int \exp\left(-\beta_B V_0 + \frac{i}{e} \vec{l} \cdot \vec{\nabla}_0 V_0\right) \times \sum_{i \langle j} \chi(l, i) \chi(l, j) \prod_j d\vec{r}_j + \dots \quad (\text{I.4.11.c})$$

Posons

$$A_0 = -\beta_B V_0 + \frac{i}{e} \vec{l} \cdot \vec{\nabla}_0 V_0. \quad (\text{I.4.12})$$

L'intégrale du 2nd terme de la somme (I.4.11.c) devient :

$$\int \dots \int e^{A_0} \times \sum_i \chi(l, i) \prod_j d\vec{r}_j = \int \dots \int e^{A_0} \times [\chi(l, 1) + \chi(l, 2) + \dots] \prod_j d\vec{r}_j \quad (\text{I.4.13.a})$$

$$= \int \dots \int e^{A_0} \chi(l, 1) \prod_j d\vec{r}_j + \int \dots \int e^{A_0} \chi(l, 2) \prod_j d\vec{r}_j + \dots \quad (\text{I.4.13.b})$$

$$= \int e^{A_0} \chi(l, 1) d\vec{r}_1 \times \int d\vec{r}_2 \times \int d\vec{r}_3 \dots + \int e^{A_0} \chi(l, 2) d\vec{r}_2 \times \int d\vec{r}_1 \times \int d\vec{r}_3 \dots + \dots \quad (\text{I.4.13.c})$$

Les fonctions $\chi(l, j)$ ne dépendent que de \vec{r}_j . Donc les intégrales $\int e^{A_0} \chi(l, j) d\vec{r}_j$ dans le second membre de (I.4.13.c) sont toutes égales. D'où :

$$\int \dots \int e^{A_0} \times \sum_i \chi(l, i) \prod_j d\vec{r}_j = N \times \int \dots \int e^{A_0} \times \chi(l, 1) \prod_j d\vec{r}_j . \quad (\text{I.4.14})$$

Dans (I.4.11.c) les intégrales $\int \dots \int e^{A_0} \times \chi(l, i) \chi(l, j) \prod_j d\vec{r}_j$ sont toutes égales à

$$\int \dots \int e^{A_0} \times \chi(l, 1) \chi(l, 2) \prod_j d\vec{r}_j \text{ et on compte } \frac{N(N-1)}{2} \text{ combinaisons possibles des } N$$

fonctions $\chi(l, j)$ prises deux à deux. On en déduit:

$$\int \dots \int e^{A_0} \times \left[\sum_{i \neq j} \chi(l, i) \chi(l, j) \right] \prod_j d\vec{r}_j = \frac{N(N-1)}{2} \times \int \dots \int e^{A_0} \times \chi(l, 1) \chi(l, 2) \prod_j d\vec{r}_j . \quad (\text{I.4.15})$$

On effectue le même raisonnement pour les autres termes de la somme (I.4.11.c) ; on obtient $T(l)$ sous la forme :

$$T(l) = \frac{1}{Z} \int \dots \int e^{A_0} \prod_j d\vec{r}_j + \frac{N}{Z} \int \dots \int e^{A_0} \chi(l, 1) \prod_j d\vec{r}_j + \frac{1}{2} \frac{N(N-1)}{Z} \int \dots \int e^{A_0} \chi(l, 1) \chi(l, 2) \prod_j d\vec{r}_j + \dots \quad (\text{I.4.16})$$

A partir de la relation précédente, on peut définir des fonctions $T_j(l)$ comme suit :

$$T_j(l) = \int \dots \int e^{A_0} \prod_{m=j+1}^N d\vec{r}_m . \quad (\text{I.4.17})$$

L'introduction de nouvelles fonctions $Q_j(l)$ définies par

$$Q_j(l) = \frac{T_j(l)}{T_0(l)} , \quad (\text{I.4.18})$$

et la prise en compte de la relation (I.4.17) permettent d'obtenir :

$$\int \dots \int \chi(l, 1) e^{A_0} \prod_{j=1}^N d\vec{r}_j = Q_1(l) \times T_0(l) \times \int \chi(l, 1) d\vec{r}_1 = T_0(l) \times \int Q_1(l) \cdot \chi(l, 1) d\vec{r}_1 . \quad (\text{I.4.19})$$

De la même façon, on montre que :

$$\int \dots \int e^{A_0} \times \chi(l, 1) \chi(l, 2) \prod_j d\vec{r}_j = T_0(l) \times \int \int Q_2(l) \cdot \chi(l, 1) \chi(l, 2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 . \quad (\text{I.4.20})$$

$T(l)$ peut être exprimée à l'aide des fonctions $Q_j(l)$ sous la forme:

$$T(l) = \frac{1}{Z} T_0(l) + \frac{N}{Z} T_0(l) \int Q_1(l) \cdot \chi(l,1) \cdot d\vec{r}_1 + \frac{1}{2} \frac{N(N-1)}{Z} T_0(l) \iint Q_2(l) \cdot \chi(l,1) \cdot \chi(l,2) \cdot d\vec{r}_1 \cdot d\vec{r}_2 + \dots \quad (\text{I.4.21.a})$$

$$= \frac{T_0(l)}{Z} \left[1 + N \int Q_1 \chi(l,1) d\vec{r}_1 + \frac{N(N-1)}{2} \iint Q_2 \chi(l,1) \chi(l,2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + \dots \right]. \quad (\text{I.4.21.b})$$

Chaque fonction $Q_j(l)$ dans (I.4.21.b) peut être développée en série d'Ursell de la forme suivante:

$$\vartheta Q_1(l,1) = g_1(l,1); \quad (\text{I.4.22})$$

$$\vartheta^2 Q_2(l,1,2) = g_1(l,1) g_1(l,2) + g_2(l,1,2); \quad (\text{I.4.23})$$

$$\begin{aligned} \vartheta^3 Q_3(l,1,2,3) = & g_1(l,1) g_1(l,2) g_1(l,3) + g_1(l,1) g_2(l,2,3) + g_1(l,2) g_2(l,1,3) \\ & + g_1(l,3) g_2(l,1,2) + g_3(l,1,2,3) \dots \end{aligned} \quad (\text{I.4.24})$$

où les $g_j(l)$ représentent les fonctions de corrélations. Ces dernières équations conduisent aux relations:

$$\int Q_1(l) \chi(l,1) d\vec{r}_1 = \frac{1}{\vartheta} \int g_1(l,1) \chi(l,1) d\vec{r}_1 \quad (\text{I.4.25})$$

$$\begin{aligned} \int Q_2(l) \chi(l,1) \chi(l,2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = & \\ \frac{1}{\vartheta^2} \int \int [g_2(l,1,2) + g_1(l,1) \cdot g_1(l,2)] \chi(l,1) \chi(l,2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 & \quad (\text{I.4.26.a}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} = & \frac{1}{\vartheta^2} \int \int g_2(l,1,2) \chi(l,1) \chi(l,2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + \\ & \frac{1}{\vartheta^2} \int \int g_1(l,1) \cdot g_1(l,2) \chi(l,1) \chi(l,2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \end{aligned} \quad (\text{I.4.26.b})$$

$$\begin{aligned} = & \frac{1}{\vartheta^2} \left[\int \int g_2(l,1,2) \chi(l,1) \chi(l,2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + \left(\int g_1(l,1) \chi(l,1) d\vec{r}_1 \right)^2 \right] \\ & \quad (\text{I.4.26.c}) \end{aligned}$$

...

Le nombre N de particules contenues dans le volume ϑ étant très grand, on a

$N \cong N - 1$. En introduisant la densité $n = \frac{N}{\vartheta}$ et en utilisant (I.4.21.b), (I.4.25) et

(I.4.26.c), l'expression de $T(l)$ devient:

$$\begin{aligned} T(l) = & \frac{T_0(l)}{Z} \left\{ 1 + \frac{n}{2!} \int g_1(l,1) \chi(l,1) d\vec{r}_1 \right. \\ & \left. + \frac{n^2}{2!} \left[\int \int g_2(l,1,2) \chi(l,1) \chi(l,2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \right. \right. \end{aligned}$$

$$+(\int g_1(l, 1)\chi(l, 1)d\vec{r}_1)^2] + \dots \} \quad (\text{I.4.27})$$

L'introduction de nouvelles fonctions h_j définies par :

$$h_j(l) = \int \dots \int g_j(l)\chi(l, 1)\dots\chi(l, j)\prod_{i=1}^j d\vec{r}_i \quad (\text{I.4.28})$$

permet d'exprimer $T(l)$ sous la forme suivante :

$$T(l) = \frac{T_0(l)}{Z} \left\{ 1 + n[h_1(l)] + \frac{n^2}{2!}[h_2(l) + h_1^2(l)] + \frac{n^3}{3!}[\dots] + \dots \right\} \quad (\text{I.4.29})$$

Dans cette équation, chaque expression entre crochets peut être identifiée à un terme d'un développement en série d'Ursell. On a :

$$h_1(l) = \int g_1(l)\chi(l, 1)d\vec{r}_1; \quad h_2(l) = \iint g_2(l)\chi(l, 1)\chi(l, 2)d\vec{r}_1 d\vec{r}_2; \quad (\text{I.4.30})$$

ce qui donne :

$$T(l) = \frac{T_0(l)}{Z} \left\{ 1 + n[h_1(l)] + \frac{n^2}{2!}[h_2(l) + h_1^2(l)] + \frac{n^3}{3!}[\dots] + \dots \right\} \quad (\text{I.4.31.a})$$

$$= \frac{T_0(l)}{Z} \left[\prod_j \sum_m \frac{1}{m!} \left(\frac{n^j h_j(l)}{j!} \right)^m \right] \quad (\text{I.4.31.b})$$

$$= \frac{T_0(l)}{Z} e^{\sum_j \frac{n^j}{j!} h_j(l)} \quad (\text{I.4.31.c})$$

C'est la forme générale de $T(l)$ développée en série d'Ursell, sans avoir recours à une approximation. Pour pouvoir utiliser cette expression, la fonction de partition Z doit être explicitée en calculant $T(0)$:

$$T(0) = \frac{T_0(0)}{Z} e^{\sum_j \frac{n^j}{j!} h_j(0)} \quad (\text{I.4.32})$$

De la relation de définition de $T(l)$ donnée en (I.4.5) on tire :

$$T(0) = \frac{1}{Z} \int \dots \int e^{-\beta V} \prod_{j=1}^N d\vec{r}_j = \frac{1}{Z} \times Z = 1 \quad (\text{I.4.33})$$

En combinant (I.4.32) et (I.4.33), on aboutit à la relation:

$$Z = T(0) e^{\sum_j \frac{n^j}{j!} h_j(0)} \quad (\text{I.4.34})$$

Ce qui conduit à l'expression de $T(l)$ suivante:

$$T(l) = A e^{\sum_j l_j} \quad (\text{I.4.35})$$

avec $A = \frac{T_0(l)}{T_0(0)}$

et $I_j(l) = \frac{n^j}{j!} [h_j(l) - h_0(l)]$ (I.4.36)

1.4.2 Calcul approché de la transformée de Fourier

Pour utiliser la relation (I.4.35), nous devons expliciter le facteur $A = \frac{T_0(l)}{T_0(0)}$ et les

termes I_j dans l'exponentielle. L'approximation dont la justification sera donnée ultérieurement consiste à se limiter aux deux premiers termes de la somme en exponentielle. Dans ce cas $T(l)$ s'écrit sous la forme :

$$T(l) \cong A e^{I_1(l)+I_2(l)} . \tag{I.4.37}$$

C'est cette expression approchée qui sera utilisée pour calculer numériquement $P(\varepsilon)$.

Pour expliciter le facteur A , on utilise la technique des coordonnées collectives (T.C.C) développée par Broyles [2].

On tient compte de la contribution du background dans l'énergie potentielle, en développant le potentiel électrique en série de Fourier tout en excluant le terme d'indice zéro [2]. On a ainsi :

$$V = \frac{4\pi e^2}{g} \sum'_k \sum_{i<j} \frac{1}{k^2} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}} , \tag{I.4.38}$$

avec la convention de notation : $\sum'_k = \sum_{k \neq 0}$.

Pour l'exprimer dans le système de coordonnées collectives, on remarque d'abord que :

$$V = \frac{4\pi e^2}{g} \sum'_k \frac{1}{k^2} \sum_{0=i<j} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}} . \tag{I.4.39}$$

Sachant que :

$$\sum_{0=i,j} = \sum_{0=i<j} + \sum_{0=j<i} + \sum_{0=i=j} \tag{I.4.40.a}$$

$$= 2 \times \sum_{0=i \langle j} + \sum_{0=i=j} , \quad (\text{I.4.40.b})$$

La sommation sur i et j dans (I.4.39) peut alors s'écrire sous la forme :

$$\sum_{0=i \langle j} = \frac{1}{2} \left[\sum_{0=i,j} - \sum_{0=i=j} \right]. \quad (\text{I.4.41})$$

On obtient ainsi la relation :

$$\sum_{0=i \langle j} e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}} = \frac{1}{2} \left[\sum_{0=i,j} e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}} - \sum_{0=i=j} e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}} \right]. \quad (\text{I.4.42.a})$$

Une somme du type $\sum_{0=i,j} a_{ij}$ peut se décomposer de la manière suivante :

$$\sum_{0=i,j} a_{ij} = \sum_{1=i,j} a_{ij} + \sum_{j=0} a_{0j} + \sum_{i=0} a_{i0} = \sum_{1=i,j} a_{ij} + 2 \times \sum_{i=0} a_{0i}. \quad (\text{I.4.42.b})$$

On remarque de plus que $\sum_{0=i=j}^N e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}} = N$ puisque $\vec{r}_{ii} = \vec{r}_{jj} = \vec{0}$.

Ce qui donne :

$$\sum_{0=i \langle j} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}} = \frac{1}{2} \left[\sum_{1=i,j}^N e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}} + \sum_{0=i}^N e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{i0}} - N \right]. \quad (\text{I.4.43})$$

Soit la fonction S définie par :

$$S_i = S(\vec{k} \cdot \vec{r}_i) = \begin{cases} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}_i) & \text{si } k_z \geq 0 \\ \sin(\vec{k} \cdot \vec{r}_i) & \text{si } k_z < 0 \end{cases} \quad (\text{I.4.44})$$

En utilisant les fonctions S_i , l'expression de V donnée en (I.4.39) et la relation (I.4.43), on obtient :

$$V = \frac{2\pi N e^2}{g} \sum_k \left[\frac{1}{k^2} \left(\frac{2}{N} \sum_{i,j=1}^N S_i S_j + \frac{4}{N} \sum_{i=1}^N S_i S_0 - 2 \right) \right] \quad (\text{I.4.45.a})$$

$$V = \frac{2\pi N e^2}{g} \left[\sum_k \frac{1}{k^2} \left(\frac{2}{N} \sum_{i,j=1}^N S_i S_j \right) + \sum_k \frac{1}{k^2} \left(\frac{4}{N} \sum_{i=1}^N S_i S_0 \right) - 2 \sum_k \frac{1}{k^2} \right] \quad (\text{I.4.45.b})$$

On exprime V en coordonnées collectives en effectuant les changements de variable suivants :

$$A_k = (k\lambda_D)^{-2}; \quad X_k = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_i S_i ; \quad (\text{I.4.46})$$

où λ_D est la longueur de Debye.

Le potentiel V peut alors s'exprimer sous la forme :

$$V = \frac{2\pi N e^2 \lambda_D^2}{\vartheta} \left[\sum'_k A_k X_k^2 + 2 \sqrt{\frac{2}{N}} \sum'_k A_k X_k - 2 \sum'_k A_k \right] \quad (\text{I.4.47})$$

où nous avons tenu compte de la relation $S_0=1$. L'expression (I.3.5) de la longueur de Debye peut être adaptée au système considéré, constitué de N particules dans un fond neutralisant, en équilibre thermodynamique et avec une seule espèce d'ions monochargés, on a :

$$\lambda = \sqrt{\frac{k_B T}{4\pi n e^2}}. \quad (\text{I.4.48})$$

où n est la densité de particules définie par $n = \frac{N}{\vartheta}$. Pour simplifier la relation (I.4.47), on pose $\theta = k_B T$ et on utilise (I.4.46). Le premier facteur dans (I.4.47) s'identifie alors à $\frac{\theta}{2}$ et on obtient:

$$V = \frac{\theta}{2} \sum_k A_k X_k^2 + \theta \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k A_k X_k - \theta \sum_k A_k \quad (\text{I.4.49})$$

les primes des symboles de sommation sont omises par souci de simplification.

La même technique permet d'exprimer V_{j0} et V_0 donnés respectivement par (I.4.4) et (I.4.3) en fonction des coordonnées collectives:

$$\sum_i V_{i0} = \frac{\theta}{2} \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\vec{k}; k_z \geq 0} \left[\frac{X_k}{(k\lambda)^2 + \alpha^2} \right]. \quad (\text{I.4.50})$$

$$V_0 = \frac{\theta}{2} \sum_k A_k X_k^2 + \theta \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\vec{k}; k_z \geq 0} [f(k) A_k X_k] - \theta \sum_k A_k \quad (\text{I.4.51})$$

où

$$f(k) = \frac{\alpha^2}{(k\lambda)^2 + \alpha^2}. \quad (\text{I.4.52})$$

Remarquons que dans les expressions des fonctions $h_j(l)$, il apparaît, par l'intermédiaire des fonctions $\chi(l, j)$, les gradients des potentiels V , V_0 et $\sum_i V_{i0}$ qui doivent aussi être exprimés en fonction des coordonnées collectives X_K :

$$\vec{\nabla}_0 V = \theta \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k \vec{k} \frac{X_k}{(k\lambda)^2}, \quad (\text{I.4.53})$$

$$\bar{V}_0 V_0 = \theta \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k \bar{k} \frac{f(k) X_k}{(k\lambda)^2} \quad (\text{I.4.54})$$

et

$$\bar{V}_0 \left(\sum_i V_{i0} \right) = \theta \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\bar{k}; k_z < 0} \bar{k} \frac{X_k}{(k\lambda)^2 + \alpha^2} \quad (\text{I.4.55})$$

On en déduit :

$$A = \frac{T_0(l)}{T_0(0)} = \frac{\int \dots \int \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_k \left[A_k X_k^2 + 2b_k(l) X_k \right] \right) J \prod_k d\bar{x}_k}{\int \dots \int \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_k \left[A_k X_k^2 + 2b_k(0) X_k \right] \right) J \prod_k d\bar{x}_k} \quad (\text{I.4.56})$$

où J représente le jacobien induit par le passage du système de coordonnées $\{\vec{r}\}$ au système de coordonnées collectives $\{X_k\}$; et où nous avons:

$$b_k(0) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{N}} \frac{f(k)}{(k\lambda)^2} & \text{si } k_z \geq 0 \\ 0 & \text{si } k_z < 0 \end{cases} \quad \text{et} \quad b_k(l) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{N}} \frac{f(k)}{(k\lambda)^2} & \text{si } k_z \geq 0 \\ -i \sqrt{\frac{2}{N}} \frac{f(k) \vec{l} \cdot \vec{k}}{(k\lambda)^2} & \text{si } k_z < 0 \end{cases} \quad (\text{I.4.57})$$

Les intégrales multiples du type de celles qui sont au numérateur et au dénominateur de (I.4.52) sont calculées par la T.C.C. pour donner:

$$A = e^{\frac{1}{2} \sum_k \frac{b_k(l)^2 - b_k(0)^2}{1 + A_k}} = e^B. \quad (\text{I.4.58})$$

Les expressions de $b_k(l)$ et $b_k(0)$ permettent de simplifier cette dernière et d'écrire l'argument de l'exponentielle sous la forme:

$$B = -\frac{\theta^2}{N e^2} \sum_{\bar{k}; k_z < 0} \left(\frac{f(k)^2 \vec{l} \cdot \vec{k}}{(k\lambda)^2 [1 + (k\lambda)^{-2}]} \right) \quad (\text{I.4.59})$$

Le nombre de particules étant important, l'ensemble des vecteurs positions \vec{r} des particules peuvent être assimilées à une variable continue, et par conséquent la variable associée \vec{k} dans la transformation de Fourier est aussi

assimilée à une variable continue. On peut donc remplacer la somme suivant \vec{k} par une intégrale. Le calcul de cette intégrale donne:

$$B = - \frac{\alpha^3 l^2}{(\alpha+1)^2} \times \frac{\theta^2 g}{48\pi N \lambda^5 e^2}. \quad (I.4.60)$$

Pour simplifier cette expression, considérons le rayon r_0 de la sphère représentant un ion ou un atome défini à partir de la relation

$$\frac{4}{3} \pi r_0^3 n = 1 \quad (I.4.61)$$

On introduit généralement le paramètre suivant :

$$a = \frac{r_0}{\lambda} \quad (I.4.62)$$

A partir des relations (I.4.48) et (I.4.61), on déduit que le paramètre a est proportionnel à $\frac{n^{1/6}}{T^{1/2}}$. Il peut donc être utilisé pour exprimer l'importance des corrélations dans le plasma.

Pour simplifier l'expression de B donnée en (I.4.60), il faut remarquer que $\frac{3e^2}{\theta\lambda} = a^3$. En utilisant l'expression de la longueur de Debye donnée en (I.4.48) et en posant:

$$E_0 = \frac{e}{r_0^2} \quad ; \quad \gamma = \frac{a\alpha^3}{(1+\alpha)^2} \quad (I.4.63)$$

on obtient :

$$B = -\gamma (lE_0)^2 \quad (I.4.64)$$

Si on introduit $L = E_0 l$, on peut écrire alors le facteur A défini plus haut sous la forme plus simple :

$$A = e^{-\gamma L^2}. \quad (I.4.65)$$

Le calcul des termes $I_j(l)$ dans (I.4.36) fait intervenir, en considérant les relations (I.4.22-24) et (I.4.28), les intégrales du type $Q_m(l)$. Pour calculer les termes $I_j(l)$, il est donc nécessaire d'explicitier les fonctions $Q_j(l)$ définies ci-

dessus. D'après les définitions des fonctions T_j et Q_j données en (I.4.17) et (I.4.18) on peut réécrire $Q_j(l)$ sous la forme :

$$Q_m(l) = \frac{g^m}{T_0(l)} \times \int \dots \int e^{-\beta V_0 + \frac{i}{e} \vec{\ell} \cdot \vec{\nabla}_0 V_0} \prod_{j=m+1}^N d\vec{r}_j \quad (\text{I.4.66})$$

Ensuite on procède comme pour le calcul présenté ci-dessus du premier facteur

$A = \frac{T_0(l)}{T_0(0)}$ en utilisant la T.C.C, on obtient [6]:

$$Q_m(l) = e^{-\sum_k \left[\frac{a_{km} b_k}{1+A_k} \right]} \quad (\text{I.4.67})$$

où

$$a_{km} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{j=1}^m S(\vec{k}, \vec{r}_j) \quad (\text{I.4.68})$$

D'après l'expression générale (I.4.67) des $Q_m(l)$ on a :

$$Q_1(l) = e^{-\sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k \left(\frac{S(\vec{k}, \vec{r}_1) \cdot b_k}{1+A_k} \right)} \quad (\text{I.4.69})$$

Le calcul de l'argument de l'exponentielle dans (I.4.64) se fait en remplaçant la somme discrète par une intégrale ; ce qui donne :

$$-\sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k \left(\frac{S(\vec{k}, \vec{r}_1) \cdot b_k}{1+A_k} \right) = -\frac{\alpha^2}{2\pi^2 n} \times \left(\int_0^\infty \frac{k^2}{[\alpha^2 + (k\lambda)^2][1 + (k\lambda)^2]} dk \right) \times \left\{ \int_0^1 \cos(kr_1 \mu) d\mu + i\theta \int_0^1 \frac{\vec{l} \cdot \vec{k}}{e} \sin(kr_1 \mu) d\mu \right\} \quad (\text{I.4.70})$$

Lorsque r_1 est exprimé en unités de r_0 et lorsqu'on pose $x_1 = \frac{r_1}{r_0}$, on obtient :

$$-\sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k \left(\frac{S(\vec{k}, \vec{r}_1) \cdot b_k}{1+A_k} \right) = S(x_1) + iLq(x_1) \quad (\text{I.4.71})$$

où :

$$S(x_1) = \frac{\alpha^2}{1-\alpha^2} \times \frac{a^2}{3x_1} \left(e^{-ax_1} - e^{-\alpha ax_1} \right) \quad (\text{I.4.72})$$

$$q(x_1) = \frac{\alpha^2}{1-\alpha^2} \times \left[\frac{1}{x_1^2} \left(e^{-\alpha ax_1} - e^{-ax_1} \right) - \frac{a}{x_1} \left(e^{-ax_1} - \alpha e^{-\alpha ax_1} \right) \right] \quad (\text{I.4.73})$$

Des expressions générales des fonctions $\chi(l, j)$, $h_j(l)$, $I_j(l)$ données respectivement par les relations (I.4.10), (I.4.28) et (I.4.36) on déduit:

$$I_1(l) = n[h_1(l) - h_1(0)] = n \int \mathcal{G} \left[\mathcal{Q}_1(l, 1) \left(e^{-\beta V_{10} + \frac{1}{e} \bar{V}_0 V_{10}} - 1 \right) - \mathcal{Q}_1(l, 0) \left(e^{-\beta V_{10}} - 1 \right) \right] d\bar{r}_1 . \quad (\text{I.4.74})$$

En exprimant βV_{10} et $\bar{V}_0 V_{10}$ en fonction de x_1 , on peut calculer $I_1(l)$. On aboutit à la relation suivante:

$$I_1(l) = 3 \left[\int_0^\infty x_1^2 e^{F(x_1)} dx_1 \right] \times \left[\frac{\sin[L.G(x_1)]}{L.G(x_1)} - 1 \right] - 3 \left[\int_0^\infty x_1^2 e^{S(x_1)} dx_1 \right] \times \left[\frac{\sin[L.q(x_1)]}{L.q(x_1)} - 1 \right] \quad (\text{I.4.75})$$

avec :

$$F(x_1) = S(x_1) - \beta V_{10} , \quad (\text{I.4.76})$$

$$G(x_1) = q(x_1) + \frac{1}{e} V_{10}'(x_1) ; \quad (\text{I.4.77})$$

où

$$\beta V_{10}(x_1) = \frac{a^2}{3x_1} e^{-\alpha x_1} ; \quad (\text{I.4.78})$$

et

$$\frac{1}{e} V_{10}'(x_1) = \frac{1}{2} e^{-\alpha x_1} (1 + \alpha x_1) . \quad (\text{I.4.79})$$

L'expression (I.4.75) de $I_1(l)$ est valable en un *point chargé* du plasma. Pour avoir l'expression correspondante en un *point neutre*, on considère qu'il n'y a pas d'interactions avec la particule située en ce point. Ce qui se traduit par l'absence de termes d'interactions centrales dans l'expression de l'énergie potentielle du système. Dans ce cas, les modifications à apporter se traduisent par $F(x)=0$ et $h_1(0)=0$. On en déduit :

$$I_{1neut}(l) = n h_{1neut}(l) = 3 \int_0^\infty x^2 \left[\frac{\sin[L.G(x)]}{L.G(x)} - \frac{\sin[L.q(x)]}{L.q(x)} \right] dx \quad (\text{I.4.80})$$

En nous limitant au second ordre du développement de $T(l)$ donné en (I.4.35), on est conduit au calcul de $I_2(l)$. Les relations (I.4.22) et (I.4.23) conduisent à:

$$g_2(l, 1, 2) = \mathcal{G}^2 \left[\mathcal{Q}_2(l, 1, 2) - \mathcal{Q}_1(l, 1) \mathcal{Q}_2(l, 2) \right] . \quad (\text{I.4.81})$$

De l'expression générale des fonctions $Q_m(l)$ donnée par (I.4.63), on tire $Q_2(l)$:

$$Q_2(l) = \frac{1}{T_1(l)} \times \int \dots \int e^{A_0} \prod_{j=3}^N d\vec{r}_j \quad (\text{I.4.82.a})$$

A l'aide des coordonnées collectives, $Q_2(l)$ peut s'exprimer sous la forme:

$$Q_2(l,1,2) = e^{-\sum_k \left[\frac{a_k b_k}{1+A_k} \right] \frac{a^2}{3x_{12}} e^{-\alpha x_{12}}} \quad (\text{I.4.82.b})$$

Ce qui, avec (I.4.68), donne $Q_2(l)$ sous la forme:

$$Q_2(l) = \exp\left(-\sqrt{\frac{2}{N}} \left[\frac{S(\vec{k} \cdot \vec{r}_1) b_k}{1+A_k} \right]\right) \times \exp\left(-\sqrt{\frac{2}{N}} \left[\frac{S(\vec{k} \cdot \vec{r}_2) b_k}{1+A_k} \right]\right) \times \exp\left(-\frac{a^2}{3x_{12}} e^{-\alpha x_{12}}\right). \quad (\text{I.4.83})$$

La relation (I.4.83) peut être réécrite en tenant compte de (I.4.69) sous la forme :

$$Q_2(l) = Q_1(l,1) Q_1(l,2) e^{-\frac{a^2}{3x_{12}} e^{-\alpha x_{12}}}. \quad (\text{I.4.84})$$

On en déduit $g_2(l)$, donnée par en utilisant (I.4.81):

$$g_2(l) = \mathcal{G}^2 Q_1(l,1) Q_1(l,2) \left[\exp\left(-\frac{a^2}{3x_{12}} e^{-\alpha x_{12}}\right) - 1 \right]. \quad (\text{I.4.85})$$

Le facteur entre crochets qui représente la fonction de corrélation d'ordre deux de Debye-Hückel constitue une correction de l'expression de $g_2(l)$. On peut donc, dans l'approximation des faibles corrélations, linéariser ce facteur comme suit :

$$\exp\left(-\frac{a^2}{3x_{12}} e^{-\alpha x_{12}}\right) - 1 \approx -\frac{a^2}{3x_{12}} e^{-\alpha x_{12}} \quad (\text{I.4.86})$$

Sous cette forme approchée, on reconnaît l'expression d'un potentiel d'interaction. Il faut pour la suite résoudre le problème du couplage de x_1 et x_2 . Pour lever cette dépendance, on développe (I.4.86) en série d'harmoniques sphériques [11]:

$$V(r_{12}) = -\sum_{k=0}^{\infty} (2k+1) V_k(r_1, r_2) P_k(\cos\theta_k) \quad (\text{I.4.87})$$

avec

$$V_k = \frac{a^3}{3} \lambda \times \frac{K_{k+\frac{1}{2}}\left(\frac{r_1}{\lambda}\right) \times I_{k+\frac{1}{2}}\left(\frac{r_2}{\lambda}\right)}{\sqrt{r_1 r_2}} \quad (\text{I.4.88})$$

où I et K sont des fonctions modifiées de Bessel respectivement du 1^{er} et du 3^{ème} types. Ce qui donne pour $I_2(l)$:

$$I_2(l) = \sum_k (2k+1) (-1)^{k+1} \times 3a^2 \times \Psi \quad (\text{I.4.89})$$

où

$$\begin{aligned} \Psi = & \int_0^\infty \left\{ e^{S(x_2)} \cdot I_{k+1/2}(ax_2) \left[e^{-\beta V_{20}} j_k[L.G(x_2)] - j_k[L.q(x_2)] \right] x_2^{3/2} \right. \\ & \times \left. \left[\int_{x_2}^\infty e^{S(x_1)} \cdot K_{k+1/2}(ax_1) \left[e^{-\beta V_{10}} j_k[L.G(x_1)] - j_k[L.q(x_1)] \right] x_1^{3/2} dx_1 \right] dx_2 \right. \\ & \left. - \delta_{k0} \cdot \int_0^\infty e^{S(x_2)} \cdot I_{1/2}(ax_2) \left[e^{-\beta V_{20}} - 1 \right] x_2^{3/2} \times \left[\int_{x_2}^\infty e^{S(x_1)} \cdot K_{1/2}(ax_1) \left[e^{-\beta V_{10}} - 1 \right] x_1^{3/2} dx_1 \right] \right\} dx_2, \end{aligned} \quad (\text{I.4.90})$$

j_k étant la fonction sphérique de Bessel d'ordre k .

Cette expression de $I_2(l)$ est valable en un *point chargé* du plasma. Pour avoir l'expression correspondante en un *point neutre*, on fait les mêmes considérations que dans le calcul de $I_1(l)$ en un point neutre en posant : $F(x)=0$ et $h_1(0) = 0$.

On en déduit :

$$I_{2neut}(l) = \frac{n^2}{2} h_{2neut}(l) = \sum_k (2k+1) (-1)^{k+1} \times 3a^2 \times \Psi' \quad (\text{I.4.91})$$

avec:

$$\Psi' = \int_0^\infty \left\{ I_{k+1/2}(ax_2) \left[j_k[L.G(x_2)] - j_k[L.q(x_2)] \right] x_2^{3/2} \times \left[\int_{x_2}^\infty K_{k+1/2}(ax_1) \left[j_k[L.G(x_1)] - j_k[L.q(x_1)] \right] x_1^{3/2} dx_1 \right] \right\} dx_2 \quad (\text{I.4.92})$$

Le calcul des termes $I_j(l)$ donnés par (I.4.36) est arrêté au 2nd ordre parce que les termes entre crochets convergent rapidement comme on peut le constater dans les calculs numériques [6].

Nous résumons et classons les résultats obtenus pour leur utilisation dans le calcul de $P(\varepsilon)$.

On distingue deux approximations de $T(l)$ correspondant chacune à une approximation de $P(\varepsilon)$:

- celle d'ordre 1 : $T_1(l) = e^{-\gamma L^2} + I_1(l)$ (I.4.93)

- et celle d'ordre 2 : $T_2(l) = e^{-\gamma L^2} + I_1(l) + I_2(l)$, (I.4.94)

Il faut aussi distinguer les deux types de points considérés. En un point chargé, on considère les expressions du premier ordre et du second ordre suivantes :

$$I_{1ch}(l) = n[h_1(l) - h_1(0)] = 3 \left[\int_0^\infty x_1^2 e^{F(x_1)} dx_1 \right] \times \left[\frac{\sin[L.G(x_1)]}{L.G(x_1)} - 1 \right] - 3 \left[\int_0^\infty x_1^2 e^{S(x_1)} dx_1 \right] \times \left[\frac{\sin[L.q(x_1)]}{L.q(x_1)} - 1 \right]$$
(I.4.95)

$$I_{2ch}(l) = \frac{n^2}{2!} [h_2(l) - h_2(0)] = \sum_k (2k+1) (-1)^{k+1} \times 3a^2 \times \Psi ,$$
(I.4.96)

De même, en un point neutre, on a:

$$I_{1neut}(l) = n h_{1neut}(l) = 3 \int_0^\infty x^2 \left[\frac{\sin[L.G(x)]}{L.G(x)} - \frac{\sin[L.q(x)]}{L.q(x)} \right] dx$$
(I.4.97)

$$I_{2neut}(l) = (n^2/2) h_{2neut}(l) = \sum_k (2k+1) (-1)^{k+1} \times 3a^2 \times \Psi'$$
(I.4.98)

Ces résultats sont spécifiques à l'étude du champ des électrons.

Pour le champ créé par les ions, à cause de l'effet d'écran du nuage électronique, on considère qu'il est du type de Debye. Ce qui conduit à la fonction de distribution du champ des ions. Un calcul similaire à celui qui précède conduit à des résultats semblables. La différence se situe au niveau des expressions des fonctions de base $F(x)$, $G(x)$, $S(x)$, et $q(x)$ utilisées dans le calcul des termes $I_j(l)$. Elles seront remplacées respectivement par:

$$F'(x) = \frac{a^2}{3x(\alpha^2 - 2)} \left(e^{-\alpha ax} - (\alpha^2 - 1)e^{-\sqrt{2}ax} \right) \quad (\text{I.4.99})$$

$$G'(x) = \frac{1}{(\alpha^2 - 2)} \left(\frac{1}{x^2} \left((\alpha^2 - 1)e^{-\sqrt{2}ax} - e^{-\alpha ax} \right) + \frac{a}{x} \left(\sqrt{2}(\alpha^2 - 1)e^{-\sqrt{2}ax} - \alpha e^{-\alpha ax} \right) \right) \quad (\text{I.4.100})$$

$$S'(x) = \frac{a^2(\alpha^2 - 1)}{3x(\alpha^2 - 2)} \left(e^{-ax} - e^{-\sqrt{2}ax} \right) \quad (\text{I.4.101})$$

$$q'(x) = \frac{\alpha^2 - 1}{1 - \alpha^2} \left(\frac{1}{x^2} \left(e^{-\sqrt{2}ax} - e^{-\alpha ax} \right) - \frac{a}{x} \left(\alpha e^{-\alpha ax} - \sqrt{2}e^{-\sqrt{2}ax} \right) \right). \quad (\text{I.4.102})$$

1.4.3 Expressions approchées de la FDME de Hooper

Il en résulte pour la fonction de distribution du champ électrique, dont l'expression générale est donnée par la relation (I.4.11), les différents cas présentés dans le tableau 2 donné ci-dessous. On peut tracer à partir de ces expressions les courbes de la FDME $P(\varepsilon)$ pour les électrons et pour les ions en un point chargé d'une part et en un point neutre d'autre part.

Nature du point	chargé	neutre
1 ^{ère} approximation	$P_{1ch}(\varepsilon) = \frac{2\varepsilon}{\pi} \int_0^\infty l.T_{1ch}(l) \sin(\varepsilon l) dl$ <p>où $T_{1ch}(l) = e^{-\gamma L^2} + I_{1ch}(l)$</p>	$P_{1neut}(\varepsilon) = \frac{2\varepsilon}{\pi} \int_0^\infty l.T_{1neut}(l) \sin(\varepsilon l) dl$ <p>où $T_{1neut}(l) = e^{-\gamma L^2} + I_{1neut}(l)$</p>
2 ^{nde} approximation	$P_{2ch}(\varepsilon) = \frac{2\varepsilon}{\pi} \int_0^\infty l.T_{2ch}(l) \sin(\varepsilon l) dl$ <p>où</p> $T_{1ch}(l) = e^{-\gamma L^2} + I_{1ch}(l) + I_{2ch}(l)$	$P_{2neut}(\varepsilon) = \frac{2\varepsilon}{\pi} \int_0^\infty l.T_{2neut}(l) \sin(\varepsilon l) dl$ <p>où</p> $T_{1neut}(l) = e^{-\gamma L^2} + I_{1neut}(l) + I_{2neut}(l)$

Tableau 2 : Synthèse des résultats du calcul de la FDME (modèle de Hooper)

Mais, comme nous allons le montrer à travers un exemple, on peut se limiter à considérer la première approximation car les résultats sont peu différents de ceux de la 2^{nde} approximation, d'autant plus que les calculs numériques dans la seconde approximation sont fastidieux. L'ordinateur met de longues heures pour exécuter le programme qui permet de calculer la fonction de distribution du champ dans ce cas.

Pour la suite, il est nécessaire de préciser et de discuter les valeurs de certaines grandeurs physiques.

Le champ électrique est exprimé en unités de E_0 définie par les relations (I.4.63).

Puisqu'il a été établi que le paramètre a , défini par la relation (I.4.62), est proportionnel à $\frac{n^{1/6}}{T^{1/2}}$, on l'utilise pour caractériser le plasma. Plus sa valeur est importante, plus on est proche d'un cas de plasma haute densité-basse température ; plus sa valeur est faible, plus on est proche d'un cas de plasma faible densité-haute température. Le cas extrême $a = 0,0$ correspond à un plasma très dilué et très chaud, ce qui correspond à la distribution de Holtsmark.

Dans les relations (I.4.63), on remarque que γ est fonction de a qui est un réel positif arbitraire, appelé paramètre d'ajustement. Il est introduit dans l'expression du potentiel électrique d'interaction de Debye-Hückel et prend des valeurs convenablement choisies pour limiter les erreurs dues au développement en série par la méthode du « cluster expansion » et au jacobien introduit lors des transformations de systèmes de coordonnées. Il a été établi [6] par exemple que :

- pour $a = 0,8$, α varie entre 0,5 et 2
- pour $a = 0,2$, α est supérieur à 2.

Le programme que nous avons mis au point avec le logiciel Matlab nous a permis de calculer les fonctions de distribution des électrons en un point neutre (figure I.4) et en un point chargé (figure I.5).

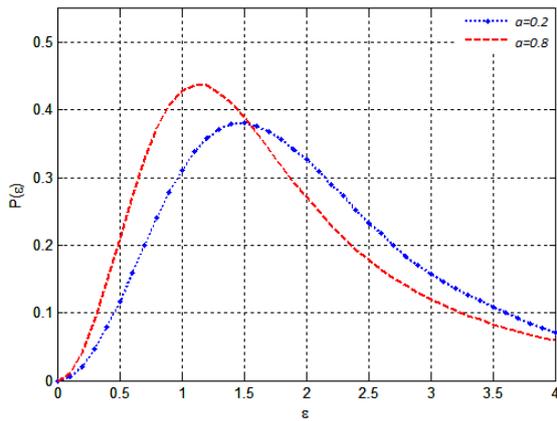


Fig. I.4 : FDME des électrons en un point neutre : comparaison des deux cas $a=0.2$ et $a=0.8$

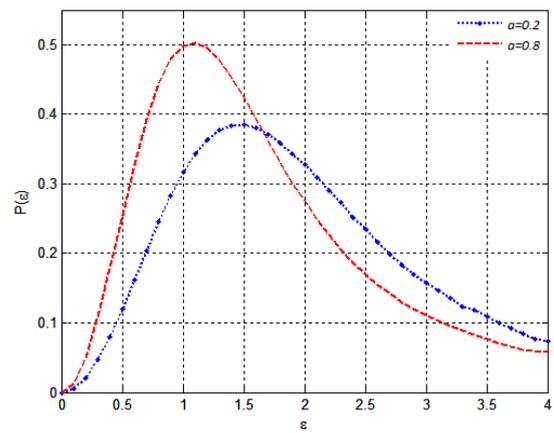


Fig. I.5 : FDME des électrons en un point chargé : comparaison des deux cas $a=0.2$ et $a=0.8$

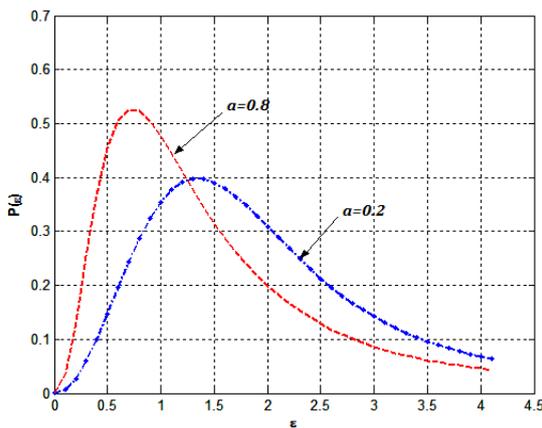


Fig. I.6 FDME des ions en un point neutre

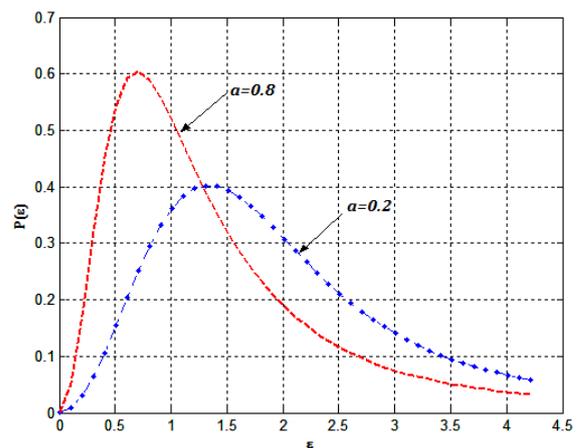
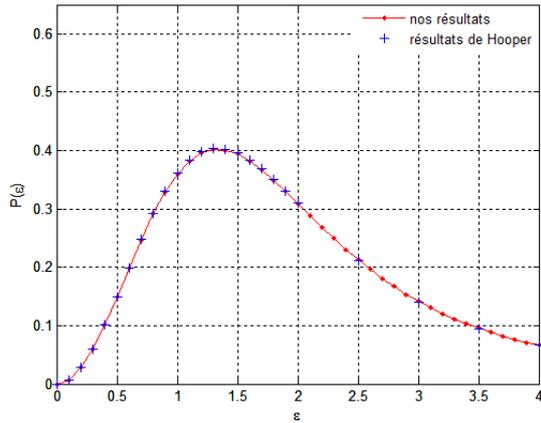


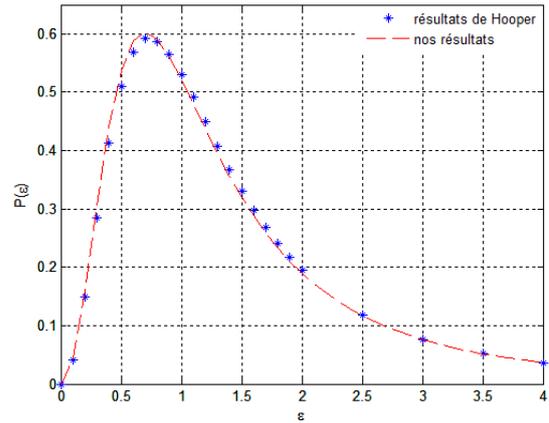
Fig. I.7 FDME des ions en un point chargé

Pour les fonctions de distribution du champ des ions en un point neutre et en un point chargé, nous donnons les figures I.6 et I.7.

Nous remarquons que lorsque le paramètre a croît, la valeur la plus probable du microchamp est déplacée vers les champs faibles. Ceci est dû au fait que les interactions de la particule d'intérêt avec les autres subissent un écrantage plus important, ce qui diminue la valeur des microchamps et fait disparaître les grands champs de la distribution. Dans la figure I.8 nous comparons nos résultats à ceux obtenus par Hooper.



1^{er} cas : $a=0.2$



2nd cas : $a=0.8$

Fig. I.8 : Comparaison de nos résultats à ceux obtenus par Hooper : Cas du champ des ions en un point chargé

A travers les deux courbes de la figure I.8, nous remarquons que nos résultats et ceux de Hooper sont pratiquement similaires. On a des résultats de comparaison similaires en un point neutre et pour le cas de la FDME des électrons.

Dans la figure I.9 ci-dessous nous comparons les fonctions de distribution en 1^{ère} et en 2^{nde} approximations.

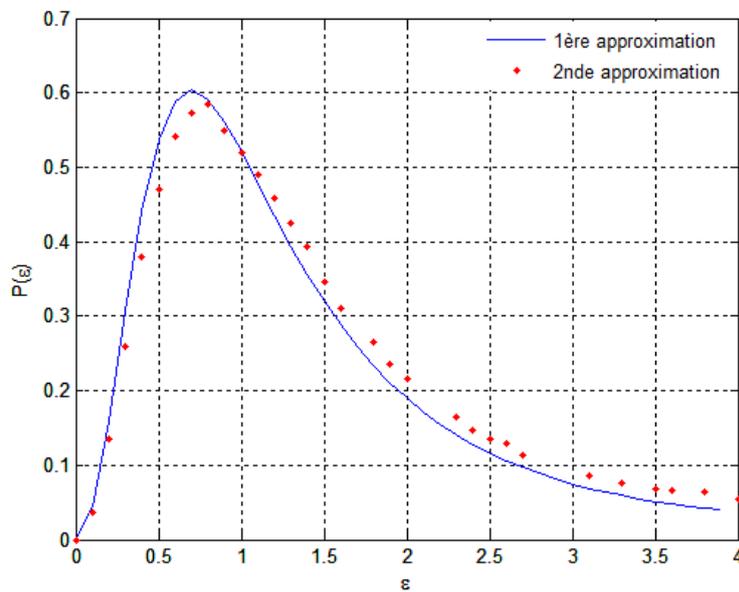


Fig.I.9 : FDME des ions en un point chargé 1^{ère} et 2^{nde} approximations ; cas : $a=0.8$

Nous remarquons que les écarts entre les deux courbes sont assez faibles, comparés aux écarts notés en comparant différentes FDME (figure I.13). Nous

pouvons donc, comme nous l'avons annoncé, nous limiter à l'approximation d'ordre 1 pour décrire la fonction de distribution du champ électrique dans les différents cas.

En résumé, nous pouvons dire que pour la distribution du champ des électrons ou des ions en un point neutre, plus a est grand, plus la distribution est déplacée vers les faibles valeurs du champ électrique. C'est-à-dire qu'il est plus probable de trouver, autour du point neutre, des champs forts dans un plasma Haute Densité-Basse Température (HD-BT) que dans un plasma dilué (faible densité)-Haute température (FD-HT). Ceci est dû à l'effet des interactions entre particules. Il est plus important aux faibles températures et avec une plus grande densité qu'aux températures élevées et en milieu dilué.

En un point chargé, les mêmes constats sont faits, pour le champ des électrons et celui des ions, en comparant les deux courbes $a=0,2$ et $a=0,8$. Mais nous notons en plus que les pics sont atteints ici pour des champs plus faibles que dans le cas précédent, aussi bien pour $a=0.2$ que pour $a=0.8$. Ce qui signifie qu'en un point chargé, les petits champs sont plus probables qu'en un point neutre. Ceci peut s'expliquer par le fait que la présence de la charge électrique au point chargé rend les particules voisines moins influentes par rapport à son propre champ.

Nous avons présenté en Annexe les programmes des calculs numériques effectués dans ce travail, en particulier ceux de la FDME. Nous remarquons que plus la théorie est complexe, c'est-à-dire, moins simplificatrice, moins le programme est simple.

1.5 FDME dans les plasmas faiblement corrélés et contenant deux espèces ioniques

Le plasma de volume total ϑ contient N particules chargées réparties en deux types de sources du champ : les électrons et les ions. Leurs effectifs et nombres de charge sont respectivement N_μ et N_σ d'une part, et Z_μ et Z_σ d'autre part. Leurs densités sont n_μ et n_σ respectivement. σ représente un groupe d'ions de types différents (monochargés, doublement chargés ...). Un tel plasma est aussi caractérisé par les températures et longueurs de Debye relatives à ses composantes.

En un point donné, le champ qui règne est la somme de deux types de champs :

$$\vec{E} = \sum_{i=1}^{N_\mu} \vec{E}_i^\mu + \sum_{i=1}^{N_\sigma} \vec{E}_i^\sigma \quad (\text{I.5.1})$$

La transformée de Fourier de la distribution du microchamp s'écrit alors :

$$T(\vec{l}) = \int e^{i\vec{l} \cdot (\sum_{i=1}^{N_\mu} \vec{E}_i^\mu + \sum_{i=1}^{N_\sigma} \vec{E}_i^\sigma)} P(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \prod_{s=1}^N d^3 r_s \quad (\text{I.5.2.a})$$

$$= \int \prod_{j=1}^{N_\mu} e^{i\vec{l} \cdot \vec{E}_j^\mu} \prod_{k=1}^{N_\sigma} e^{i\vec{l} \cdot \vec{E}_k^\sigma} P(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \prod_{s=1}^N d^3 r_s \quad (\text{I.5.2.b})$$

avec $N = N_\mu + N_\sigma$ et où $P(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ représente la probabilité de configuration des particules du plasma.

Cette expression est ensuite développée en série en utilisant la technique « Cluster expansion ». L'introduction des fonctions

$$\varphi_j = e^{i\vec{l} \cdot \vec{E}_j} - 1 \quad (\text{I.5.3})$$

conduit à la relation [8]:

$$T(\vec{l}) = \int \prod_j (1 + \varphi_j^\mu) \prod_k (1 + \varphi_k^\sigma) P(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \prod_{s=1}^N d^3 r_s \quad (\text{I.5.4.a})$$

$$\begin{aligned} &= 1 + \sum_1^\mu \int P(\vec{r}_j) \varphi_j^\mu d^3 r_j + \sum_1^\sigma \int P(\vec{r}_j) \varphi_j^\sigma d^3 r_j \\ &\quad + \sum_2^\mu \int P(\vec{r}_j; \vec{r}_{j'}) \varphi_j^\mu \varphi_{j'}^\mu d^3 r_j d^3 r_{j'} + \sum_2^\sigma \int P(\vec{r}_k; \vec{r}_{k'}) \varphi_k^\sigma \varphi_{k'}^\sigma d^3 r_k d^3 r_{k'} \\ &\quad + \sum_1^\mu \sum_1^\sigma \int P(\vec{r}_j; \vec{r}_k) \varphi_j^\mu \varphi_k^\sigma d^3 r_j d^3 r_k + \dots \end{aligned} \quad (\text{I.5.4.b})$$

où \sum_1 est une somme étendue à toutes les particules, \sum_2 la somme sur les paires de particules, etc.

En considérant \mathcal{N} particules parmi les N , les probabilités de configurations peuvent s'exprimer sous forme de séries à l'aide des probabilités à une particule (g_1), à deux particules (g_2) etc.

$$\vartheta^{\mathcal{N}} P_{\mathcal{N}}^{\mu}(\vec{r}_{j1}, \dots, \vec{r}_{j\mathcal{N}}) = \prod_j g_1^{\mu}(\vec{r}_j) + \sum_2^{\mu} g_2^{\mu}(\vec{r}_j, \vec{r}_{j'}) \prod_{j''} g_1^{\mu}(\vec{r}_{j''}) + \dots \quad (\text{I.5.5.a})$$

$$\vartheta^{\mathcal{N}} P_{\mathcal{N}}^{\sigma}(\vec{r}_{k1}, \dots, \vec{r}_{k\mathcal{N}}) = \prod_k g_1^{\sigma}(\vec{r}_k) + \sum_2^{\sigma} g_2^{\sigma}(\vec{r}_k, \vec{r}_{k'}) \prod_{k''} g_1^{\sigma}(\vec{r}_{k''}) + \dots \quad (\text{I.5.5.b})$$

$$\begin{aligned} \vartheta^{\mathcal{N}} P_{\mathcal{N}}^{\mu\sigma}(\vec{r}_j, \vec{r}_{j'} \dots \vec{r}_k, \vec{r}_{k'} \dots) &= \prod_j g_1^{\mu}(\vec{r}_j) \prod_k g_1^{\sigma}(\vec{r}_k) \\ &+ \sum_2^{\mu\sigma} g_2^{\mu\sigma}(\vec{r}_j, \vec{r}_k) \prod_{j'} g_1^{\mu}(\vec{r}_{j'}) \prod_{k'} g_1^{\sigma}(\vec{r}_{k'}) + \dots \end{aligned} \quad (\text{I.5.5.c})$$

L'expression de $T(\vec{l})$ donnée par (I.5.4.b) devient:

$$T(\vec{l}) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p!} [N_{\mu}^p h_{\mu}^{\mu}(\vec{l}) + N_{\sigma}^p h_{\sigma}^{\sigma}(\vec{l}) + N_{\mu}^p N_{\sigma}^p h_{2p}^{\mu\sigma}(\vec{l})] \quad (\text{I.5.6})$$

où :

$$h_p^s(\vec{l}) = \int \dots \int \varphi_1^s \dots \varphi_p^s \cdot g_p^s(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_p) \prod_{j=1}^p d^3 r_j \quad (\text{I.5.7.a})$$

$$h_{2p}^{\mu\sigma}(\vec{l}) = \int \dots \int \varphi_1^{\mu} \dots \varphi_p^{\mu} \varphi_1^{\sigma} \dots \varphi_p^{\sigma} \cdot g_{2p}^{\mu\sigma}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_p, \vec{r}_1', \dots, \vec{r}_p') \prod_{j=1}^p d^3 r_j \prod_{j=1}^p d^3 r_j' \quad (\text{I.5.7.b})$$

L'isotropie du plasma se traduit par la relation: $T(\vec{l}) = T(l)$. On introduit les fonctions de corrélations g_{xy} définies par :

$$g_{xy}(r) = \exp \left[-\frac{V_{xy}(r)}{k_B T} \right] \quad (\text{I.5.8})$$

où x et y peuvent être soit μ soit σ et V_{xy} défini par :

$$V_{xy} = -\frac{Z_x Z_y e^2}{r} \exp \left(-\frac{r}{\lambda_D} \right) \quad (\text{I.5.9})$$

Dans cette relation, λ_D est la longueur de Debye du plasma, T la température correspondante. Nous distinguons les corrélations entre particules identiques et entre particules de types différents. Ces fonctions de corrélations données par (I.5.8) sont aussi définies à partir des fonctions à n corps correspondantes g_i^x introduites dans les relations (I.5.5):

$$g_1^{\mu}(r) = g_{\mu\mu}(r) \quad (\text{I.5.10.a})$$

$$g_1^{\sigma}(r) = g_{\mu\sigma}(r) \quad (\text{I.5.10.b})$$

$$g_2^{\mu\sigma}(r) = g_{\mu\sigma}(r) - 1 \quad (\text{I.5.10.c})$$

En supposant que les corrélations ne causent que de légères corrections lorsqu'on fait l'hypothèse de particules indépendantes, c'est-à-dire que le plasma est faiblement corrélé, on peut ne considérer que les fonctions g_i du premier et du second ordres. Les fonctions $h(l)$ définies dans les relations (I.5.7) s'écrivent alors [12] :

$$h_1^x(l) = -\frac{15l^{\frac{3}{2}}}{2\sqrt{2\pi}n_e^2} \int_0^\infty dy y^2 [1 - j_0(\varepsilon_x(y))] \quad (\text{I.5.11.a})$$

$$h_2^{\mu\sigma}(l) = -\frac{Z_\mu Z_\sigma l^{\frac{3}{2}}}{N_e^2} R_D v^3 [I_{\mu\sigma}(l) + I_{\sigma\mu}(l)] \quad (\text{I.5.11.b})$$

avec $= al^{3/2}$, où a est le paramètre d'écrantage,

$$\varepsilon_x(y) = \frac{Z_x(1+vy)e^{-vy}}{y^2}, \quad (\text{I.5.13})$$

$$R_D = \left[1 + \frac{Z_\mu^2 + C(Z_\sigma^2 - Z_\mu^2)}{Z_\mu + C(Z_\sigma - Z_\mu)} \right]^{1/2} \quad \text{où } C = \frac{N_\sigma}{N_\sigma + N_\mu}, \quad (\text{I.5.14})$$

$$\text{et } I_{\alpha\beta}(l) = \sum_{k=1}^\infty (-1)^k (2k+1)$$

$$\times \int_0^\infty dy_1 y_1^2 \int_0^{y_1} dy_2 y_2^2 [j_k(\varepsilon_\alpha) - \delta_{k,0}] [j_k(\varepsilon_\beta) - \delta_{k,0}] f_k(u_1) t_k(u_2) \quad (\text{I.5.12})$$

Dans (I.5.14), j_k est la fonction sphérique de Bessel d'ordre k ; les autres grandeurs et fonctions figurant dans les expressions des (I.5.11.a), (I.5.11.b) et (I.5.12) sont :

$$f_k(u_i) = (-1)^k u_i^k \left(\frac{d}{u_i du_i} \right)^k \left(\frac{e^{-u_i}}{u_i} \right) \quad (\text{I.5.15})$$

$$t_k(u_i) = u_i^k \left(\frac{d}{u_i du_i} \right)^k \left(\frac{\sinh(u_i)}{u_i} \right) \quad (\text{I.5.16})$$

où $u_i = R_D v y_i$.

Les résultats numériques de ces calculs sont tabulés par Halenka et disponibles [12]. Dans les figures I.10.a et I.10.b nous les avons comparés aux résultats de Hooper lorsque:

- les ions mono chargés sont ultra majoritaires ; ce qui correspondrait à la distribution de Hooper dans laquelle le plasma est supposé ne contenir que cette espèce d'ions ;
- les ions doublement chargés sont majoritaires ; ce qui s'éloigne du modèle de Hooper. Ce qui laisse présager que la distribution de Hooper ne s'applique pas au plasma contenant majoritairement ce type d'ion.

Dans le cas des ions mono chargés, on remarque que pour $a=0.2$, les deux modèles sont pratiquement équivalents sur toute la gamme des valeurs du champ des ions ; que pour $a=0.8$, les distributions des grands champs s'écartent au fur et à mesure que le champ est plus intense. La figure I.10.b indique que les écarts sont nets dans le cas où les ions doublement chargés sont majoritaires, quelle que soit la valeur de a . Dans ce cas, le modèle de Hooper ne s'applique pas du tout.

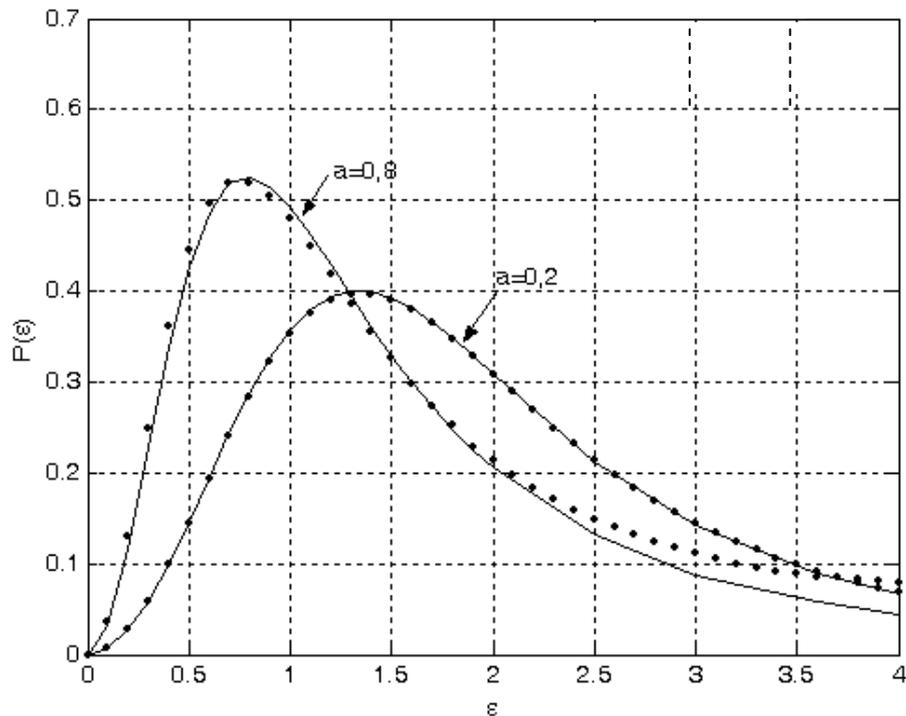


Fig. I.10.a: Comparaison des FDME de Hooper (-----) et de Halenka (.) : Cas d'un plasma ne contenant que des **ions monochargés**

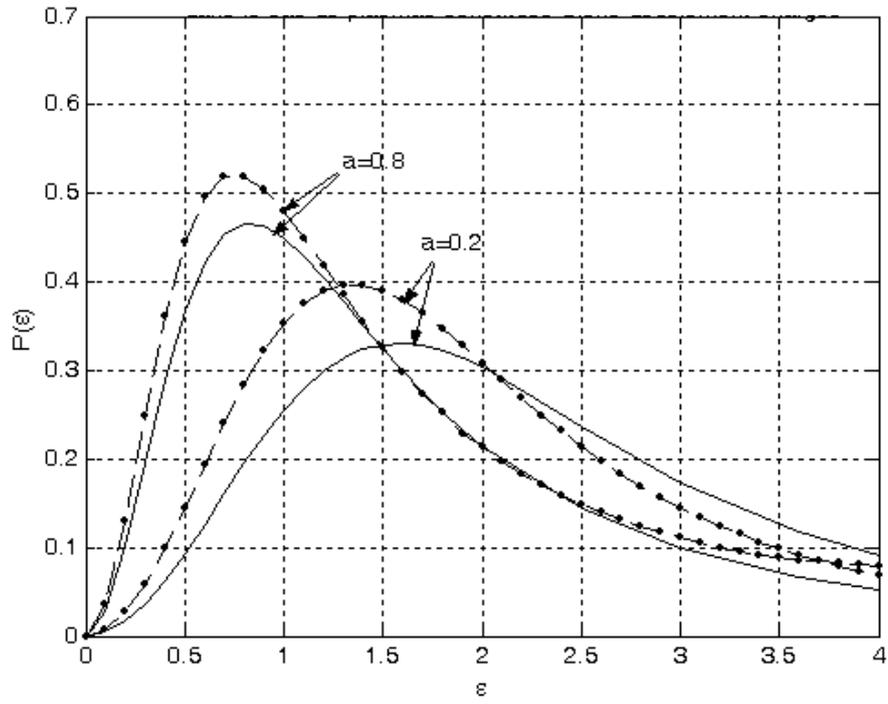


Fig. I.10.b FDME de Hooper (-----) et de Halenka (.....) : cas d'un plasma contenant majoritairement des **ions doublement chargés**

1.6 FDME dans les plasmas fortement corrélés et à plusieurs composantes

Les modèles de calcul de la FDME présentés ci-dessus traitent uniquement les plasmas faiblement corrélés. Lorsque les FDME sont calculées dans les cas de plasmas fortement corrélés, les résultats obtenus sont peu satisfaisants [13]. Pour traiter convenablement cette dernière catégorie de plasmas, il faut donc une théorie adéquate. La technique du « cluster expansion » a l'inconvénient de nécessiter une connaissance des fonctions de corrélation d'ordre supérieur à deux et de conduire à des calculs lourds pour traiter les plasmas fortement corrélés. Pour contourner ces obstacles une nouvelle technique s'impose.

Le modèle de plasma étudié est constitué de plusieurs espèces σ de particules de charge électrique Z_σ supposées en équilibre thermodynamique à la température T avec un fond uniforme neutralisant.

La densité de probabilité de trouver un champ \vec{E} égal à $\vec{\epsilon}$ en un point où se trouve la charge électrique $Z_0 e$ repérée par le vecteur position \vec{r}_0 est :

$$w(\vec{\epsilon}) = \langle \delta(\vec{\epsilon} - \vec{E}) \rangle = \lim_{\substack{\{N_\sigma\}, T \rightarrow \infty \\ \left\{ \frac{N_\sigma}{\Omega} = \rho_\sigma \right\}}} \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} d\vec{r}_0 \prod_{\sigma} \prod_{j=1}^{N_\sigma} d\vec{r}_{j\sigma} \frac{e^{-\beta V} \delta(\vec{\epsilon} - \vec{E})}{Z(\{\rho_\sigma\}, \Omega, T)} \quad (\text{I.6.1})$$

où Ω est le volume total du système, N_σ le nombre de particules d'espèce σ , ρ_σ leur densité, $Z(\{\rho_\sigma\}, \Omega, T)$ la fonction de partition de configuration, $\vec{r}_{j\sigma}$ la position de la particule j de l'espèce σ .

L'énergie potentielle V a trois origines : les interactions de la particule test avec les autres particules du système, les interactions de ces dernières entre elles et la contribution V_B du fond neutralisant :

$$V = e^2 \sum_{\sigma} \sum_{j=1}^{N_\sigma} \left(\frac{Z_0 Z_\sigma}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_{j\sigma}|} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma'} \sum_{\substack{i=1 \\ (i, \sigma' \neq j, \sigma)}}^{N_{\sigma'}} \frac{Z_\sigma Z_{\sigma'}}{|\vec{r}_{i\sigma'} - \vec{r}_{j\sigma}|} \right) + V_B \quad (\text{I.6.2})$$

Le champ électrique qui règne au point où se trouve la particule test est la somme des champs supposés coulombiens, créés individuellement par toutes ces particules et le champ dû au background \vec{E}_B :

$$\vec{E} = \sum_{\sigma} \sum_{j=1}^{N_{\sigma}} \frac{Z_{\sigma} e (\vec{r}_{j\sigma} - \vec{r}_0)}{|\vec{r}_{j\sigma} - \vec{r}_0|^3} + \vec{E}_B \quad (\text{I.6.3})$$

En utilisant la transformée de Fourier de la densité de probabilité, avec l'hypothèse d'isotropie pour le plasma, on montre comme dans les calculs précédents que la FDME peut encore s'écrire sous la même forme que (I.1.11).

Dans la présente théorie, $T(l)$ est calculée en utilisant la méthode statistique des moments de la densité de probabilité, notamment le moment d'ordre deux. On montre [13] que:

$$\langle E^2 \rangle = \frac{3d^4}{z_0 \Gamma e^2} \sum_{\sigma} Z_{\sigma} \chi_{\sigma} \quad (\text{I.6.4.a})$$

où $\chi_{\sigma} = \frac{\rho_{\sigma}}{\rho}$; Γ , le paramètre de couplage du plasma est défini par:

$$\Gamma = \frac{\beta e^2}{d} ; \quad (\text{I.6.4.b})$$

où d est la distance moyenne entre particules du système, définie par : $\frac{4\pi}{3} d^3 \rho = 1$ avec $\rho = \sum_{\sigma} \rho_{\sigma}$.

En utilisant la technique d'intégration par rapport à ce paramètre [13] on parvient à exprimer la transformée de Fourier à l'aide des fonctions de distribution g_{σ} des particules :

$$T(l) = \exp \left[3 \sum_{\sigma} \chi_{\sigma} \int_0^{\infty} dx x^2 g_{\sigma}(x) \frac{f(x)}{f_{\sigma}(x)} \{j_0[LZ_{\sigma} f_{\sigma}(x)] - 1\} \right] \quad (\text{I.6.5})$$

$$\text{où } f(x) = x^{-2} \quad \text{et} \quad f_{\sigma}(x) = \frac{\exp(-\alpha_{\sigma} x)}{x^2} (1 + \alpha_{\sigma} x) \quad (\text{I.6.6})$$

α_{σ} sont des paramètres d'ajustement dont les valeurs s'obtiennent en résolvant pour toutes les espèces de particules les équations :

$$Z_\sigma \int_0^\infty dx x^2 g_\sigma(x) f(x) f_\sigma(x) = \frac{\Sigma_\sigma Z_\sigma \chi_\sigma}{Z_0 \Gamma} \quad (\text{I.6.7})$$

obtenues en comparant la règle de sommation du moment d'ordre deux (I.6.4.a) et l'expression du moment d'ordre deux obtenue à partir de (I.6.5).

Dans (I.6.5), on a $L = \frac{el}{a^2}$ et j_0 est la fonction sphérique de Bessel d'ordre 0.

Connaissant les fonctions de distribution g_σ , on utilise les équations (I.1.11), (I.6.4.a) et (I.6.7) pour calculer la FDME dans un plasma comportant plusieurs types d'ions chargés positivement dans un fond neutralisant négatif, en un point chargé.

Comme dans les modèles précédents, on utilise le paramètre de couplage Γ pour caractériser le plasma ; plus il est grand plus le plasma est corrélé.

Le cas des plasmas comportant une seule espèce d'ion s'en déduit aisément.

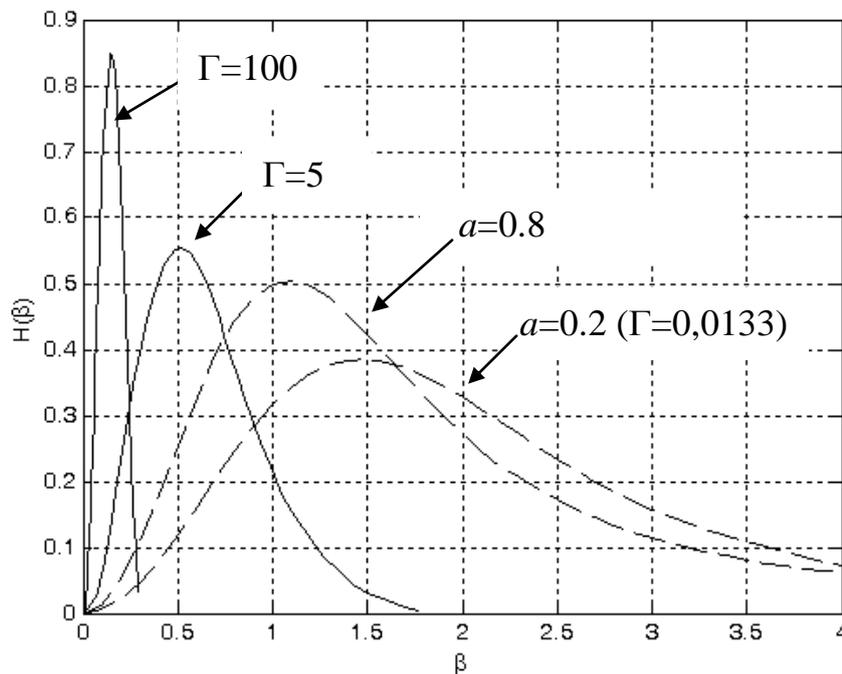


Fig. I.11 Comparaison des distributions de Hooper (---) et d'I.L.M(—)

Dans la figure I.11 ci-dessus, la FDME est tracée en fonction du champ réduit $\beta = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}$ pour différentes valeurs de Γ . Une comparaison est faite entre les

résultats obtenus par Iglesias *et al* (ILM) [13] qui ont initié le présent modèle et ceux que nous avons obtenus avec le modèle de Hooper.

Les résultats des deux types de distributions sont relativement très éloignés. Nous notons que lorsque les corrélations sont très fortes, les grands champs sont beaucoup moins probables que lorsqu'elles sont faibles. La distribution de Hooper n'est pas adéquate pour le traitement d'un plasma fortement corrélé. Néanmoins plus Γ est faible plus le modèle d'I.L.M se rapproche de celui de Hooper.

1.7 Méthode de simulation du microchamp électrique

1.7.1 Principe de la méthode de simulation

La simulation consiste à concevoir un modèle virtuel pour représenter un système physique réel donné. Pour écrire le programme informatique lié au modèle décrivant le système étudié, on a besoin, comme dans les méthodes théoriques, d'idées précises sur les processus physiques qui se produisent dans le système. On doit appréhender la nature de ces phénomènes et faire un choix judicieux sur la manière de les modéliser à travers les équations. Pour le champ électrique, par exemple, il s'agira de choisir parmi les modèles qui existent : coulombien, de Debye, ou de Debye modifié etc.

L'avantage dans la méthode de simulation est la possibilité de cibler les processus physiques à prendre en compte, et de voir leurs effets sur le phénomène étudié. Il est possible de supprimer certaines approximations selon la puissance de l'ordinateur. Le nombre d'opérations à effectuer dans un temps raisonnable détermine en général ces choix. Parmi les méthodes de simulation numérique, il y a celle de Monte Carlo.

La méthode dite de Monte Carlo est une technique de résolution de problèmes physiques au moyen d'un modèle stochastique dans lequel on utilise des valeurs aléatoires. C'est une méthode initialement conçue pour étudier le comportement d'ensemble des neutrons dans un modèle de réaction thermonucléaire à partir des distributions des positions et des vitesses des particules et en tenant compte des processus physiques tels que l'émission, l'absorption et la diffusion qui se déroulent dans le milieu [14]. Elle est ainsi une des premières méthodes de résolution numérique de problèmes statistiques. Mais très vite, elle a connu un développement important qui permet de diversifier ses domaines d'applications notamment dans le calcul d'intégrales multiples. Certaines intégrales sont impossibles à calculer par les méthodes numériques courantes ; la méthode Monte Carlo apporte des solutions dans ce cas. Actuellement c'est une des méthodes numériques utilisées dans l'étude des plasmas.

En physique, l'état d'une particule peut être complètement déterminé connaissant les propriétés du milieu. Dans un plasma, même si les propriétés sont connues, les particules, du fait de leur grand nombre et de la diversité des processus physiques qui se produisent, semblent obéir à des lois probabilistes. La méthode de simulation appliquée au plasma consiste à concevoir une distribution initiale de particules dans l'espace des positions et des vitesses (ou des impulsions) et de simuler l'évolution d'un grand nombre d'entre elles, soumises de manière aléatoire aux différents processus physiques au cours de l'évolution [15]. Elle utilise l'algorithme de la chaîne de Markov pour les configurations des particules du système. Le programme génère un ensemble de configurations successives où la première x_1 est arbitrairement choisie. Une fonction de probabilité adéquate W est utilisée pour construire la configuration suivante x_2 à partir de la première. De façon générale, $W(x_{i-1} \rightarrow x_i)$ qui représente la probabilité d'évolution du système de la configuration x_{i-1} à la nouvelle configuration x_i dépend du type d'ensemble de particules considéré. Pour un ensemble canonique, si la variation d'énergie totale du système est ΔE , W est de la forme $e^{-\Delta E/k_B T}$.

La technique de Monte Carlo transforme un ensemble de variables aléatoires d'entrée en un autre ensemble de variables aléatoires de sortie par le biais d'un modèle mathématique de traitement de données conçu selon le problème physique. La méthode requiert ainsi un programme générateur de nombres aléatoires distribués de manière uniforme. Plusieurs algorithmes, dont celui de von Neumann [16], permettent de créer ces nombres. Il faut aussi un modèle qui transforme ces nombres et un ensemble d'estimateurs associés. Ce modèle est l'ensemble des expressions analytiques choisies parmi celles qui peuvent exprimer les propriétés du système étudié. En principe, ce choix est fait sur la base de critères précis retenus pour représenter le plus fidèlement possible le comportement de ce système. Mais si les calculs sont volumineux, des soucis de gain de temps et la capacité des ordinateurs peuvent déterminer ce choix. Un

estimateur du paramètre inconnu Y d'un modèle est une fonction qui, à une suite d'observations issues du modèle ou échantillon, fait correspondre une valeur \hat{Y} nommé estimé ou estimation. L'estimateur permet d'évaluer le paramètre statistique à partir des données (y_1, y_2, \dots, y_N) obtenues sur l'échantillon. Il existe plusieurs méthodes de construction d'estimateurs dont celle du maximum de vraisemblance et celle des moments. L'estimateur peut en particulier être la moyenne empirique:

$$\bar{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i. \quad (\text{I.7.1})$$

Après N' répétitions de l'expérience, on dispose de N' réalisations de l'estimateur qui forment une distribution empirique de l'estimateur, construite statistiquement. Cette dernière étape est l'analyse des résultats de la simulation numérique.

On distingue les étapes suivantes dans l'algorithme de la simulation Monte Carlo:

- En première étape, une configuration spatiale initiale est choisie de manière aléatoire en spécifiant les coordonnées (x, y, z) des N particules contenues dans la cellule de base.
- L'énergie potentielle du système correspondant à cette configuration est calculée.
- Ensuite le programme choisit arbitrairement un nombre $i \in \{1; 2; \dots; N\}$ correspondant au numéro de la particule à déplacer. Son mouvement est simulé en faisant varier aléatoirement chacune de ses coordonnées spatiales d'une valeur comprise entre $-\Delta$ et $+\Delta$, Δ étant un paramètre dont la valeur peut être choisie sur la base d'expériences antérieures afin d'améliorer la qualité des résultats. Pour de longues chaînes de Markov, les résultats sont indépendants de la valeur de Δ [17].
- Le mouvement test est accepté si l'énergie du système diminue à la suite du mouvement. Dans le cas où l'énergie croît, il est accepté avec la probabilité

$e^{-\Delta E/k_B T}$. S'il est rejeté on considère que la configuration antérieure est réalisée à nouveau. Ce procédé permet de faire converger la chaîne de configurations vers une distribution canonique déterminée.

- On obtient la moyenne de n'importe quelle grandeur qui est fonction de la configuration des particules en moyennant sur tous les termes de la chaîne.

1.7.2 Application de la simulation Monte Carlo à la détermination de la FDME

Dans le cas de la simulation numérique de la FDME, la méthode de Monte Carlo est basée sur un échantillonnage statistique des probabilités de réalisation de différentes configurations spatiales des particules chargées ; chaque valeur du champ électrique en tout point correspond à une configuration déterminée. Les coordonnées des particules modélisées sont arbitrairement choisies dans un cube centré sur le point d'intérêt (point où on veut calculer le champ électrique) coïncidant avec l'origine du repère spatial. La taille de cette cellule dépend de la densité des particules et donc de l'importance des corrélations. Elle est plus petite pour un milieu fortement corrélé que pour un milieu faiblement corrélé. Dans le modèle de Potekhin [18], les coordonnées des $N_p + 1$ particules (les perturbateurs et la particule d'intérêt) sont choisies dans une boîte cubique d'arête $L = \left(\frac{N+1}{n_i}\right)^{1/3}$ où n_i est la densité des ions. Les potentiels d'interaction considérés sont soit du type de Debye, qui s'exprime en fonction du nombre d'onde effectif d'écrantage k_s sous la forme

$$V(r) = \frac{(Ze)^2 e^{-k_s r}}{r} \quad (\text{I.7.2})$$

soit du type coulombien, obtenu en faisant tendre k_s vers zéro.

L'énergie potentielle totale est égale à la somme des énergies potentielles effectives d'interaction entre paires de particules. Elle est calculée par la méthode de sommation d'Ewald [19] qui a été établie pour les systèmes périodiques tels que les réseaux cristallins dans lesquels la configuration des particules dans une région donnée se répète périodiquement et indéfiniment dans

l'espace quelle que soit la direction considérée. L'espace total est subdivisé en cellules identiques dont l'une d'elles est choisie comme *cellule centrale* en référence aux autres considérées comme ses *images*. Les énergies électrostatiques résultent de deux types d'interactions: celles de courte portée et celles de longue portée. L'idée dans la sommation d'Ewald est alors de distinguer pour le potentiel d'interaction deux composantes correspondant à ces deux types d'interaction. L'hypothèse est telle que la sommation dans le premier terme peut être aisément faite dans l'espace réel. La sommation dans la composante des interactions de longue portée est faite dans un espace de Fourier en raison du caractère périodique de la configuration des particules à l'extérieur de la cellule considérée. La composante de longue portée de l'énergie d'interaction est la somme des énergies d'interaction entre les charges de la cellule centrale et celles du réseau. Pour prendre en compte l'isotropie du milieu, il faut moyenner à travers l'angle solide complet. Ce procédé de calcul est équivalent à remplacer le potentiel de Debye précédent par un potentiel effectif dans la cellule cubique d'arrête L [20]. Ce potentiel s'écrit sous la forme :

$$V_L(r) = (Ze)^2 \left[\frac{e^{-k_s r}}{r} - \frac{C \sinh(k_s r)}{L k_s r} + \frac{4\pi}{L^3 k_s^2} \left\{ \frac{\sinh(k_s r)}{k_s r} - 1 \right\} \right] \quad (I.7.3)$$

où C est une constante numérique, correspondant à la constante de Madelung dans le cas de potentiels du type coulombien. La constante de Madelung permet le calcul du potentiel électrique V_i créé par tous les ions d'un réseau en un ion i situé à une position \vec{r}_i et donc aussi l'énergie potentielle électrostatique E_i de ce dernier:

$$V_i = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\rho_0} M_i = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\rho_0} \sum_{j \neq i} \frac{z_j \rho_0}{r_{ij}} \quad (I.7.4)$$

$$E_i = z_i e V_i \quad (I.7.5)$$

M_i est la constante de Madelung pour l'ion i ; ρ_0 est une distance caractéristique pouvant être la distance minimale d'approche ou l'arête de la cellule cubique selon le modèle de simulation. M_i dépend du réseau et des espèces

ioniques considérées ; ses valeurs ont été calculées pour différents réseaux cristallins [21] ; $z_{i,j}$ est le nombre de charge de l'ion i ou j .

L'énergie potentielle totale s'obtient en sommant V_L sur toutes les paires de particules. Pour prendre en compte les particules situées à l'extérieur, chaque particule qui sort de la cellule est remplacée par son image. La différence de l'énergie totale entre les configurations consécutives est calculée. Lorsque le système tend vers l'état d'équilibre cette différence tend vers zéro. On peut alors déterminer toutes les quantités caractéristiques de l'état d'équilibre dépendant des positions des particules, telles que les valeurs du champ électrique pour en tirer la FDME. On peut aussi déterminer numériquement la fonction de distribution de probabilité cumulée $Q(\beta) = \int_0^\beta P(\beta')d\beta'$ utilisée dans certains calculs théoriques et à partir de laquelle on peut retrouver la fonction de distribution du microchamp.

Dans le modèle de Potekhin, le plasma est caractérisé par le paramètre de couplage Γ défini en (I.6.4.b). Le potentiel électrique du type de Debye est utilisé. Les valeurs numériques obtenues dans les différentes chaînes de Markov ont permis d'établir par interpolation [18] une expression analytique approchée de la fonction de distribution de probabilité cumulée.

$$Q(\beta) = \frac{\mu_0\beta^3 - 2\beta^{9/2} + \beta^6}{\mu_1 + \mu_2\beta + \mu_3\beta^2 + \mu_4\beta^3 - \beta^{9/2} + \beta^6} \quad (\text{I.7.6})$$

Les coefficients μ_i sont à leur tour des fonctions des paramètres de couplage Γ et d'écrantage $s = k_s r_0$ où r_0 est le rayon moyen de la sphère d'un ion défini en (I.4.61). Le cas du potentiel coulombien s'obtient en posant $s = 0$ dans les expressions des μ_i [18]. Pour obtenir la fonction de distribution du microchamp $P(\beta)$, on dérive l'expression de $Q(\beta)$ donnée en (I.7.6) par rapport à β .

Dans la figure I.12 nous avons tracé des courbes de la FDME pour différentes valeurs du paramètre de couplage Γ .

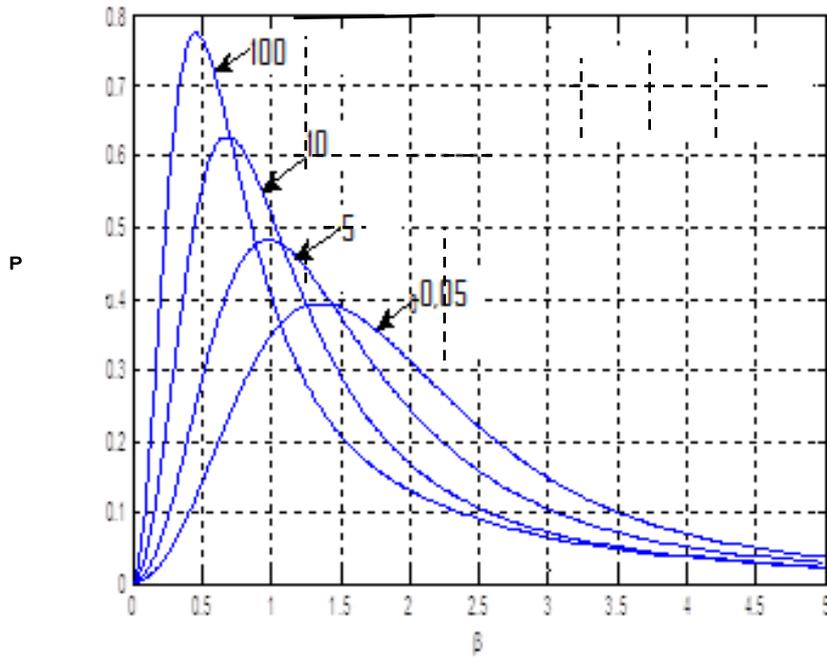


Fig. I.12 : FDME de Potekhin pour différentes valeurs du paramètre de couplage

La figure I.13 ci-dessous permet de comparer les FDME obtenues par les différents modèles présentés pour un plasma corrélé, pour une température et une densité données.

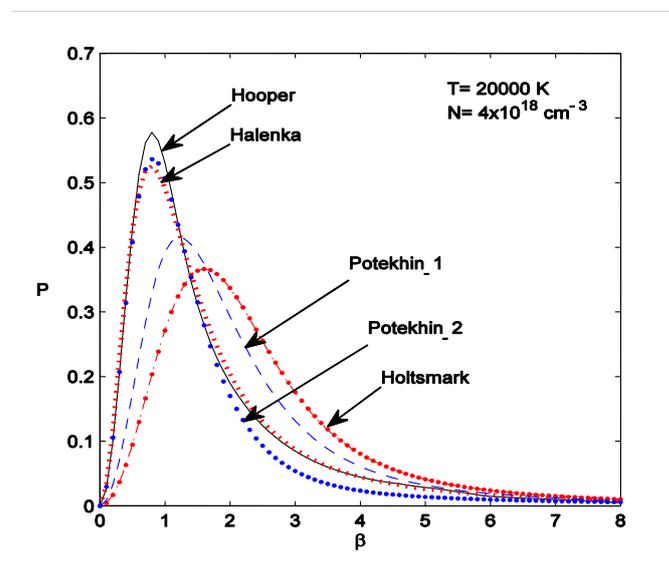


Fig. I.13 Comparaison de différentes FDME

Potekhin_1 fait référence à la FDME de Potekhin dans le cas où le potentiel électrique considéré est du type coulombien ; Potekhin_2 correspond au cas où le potentiel est du type de Debye.

Nous constatons que les écarts sont assez importants dans certains cas. Ce qui suggère qu'on ne peut pas choisir n'importe quel modèle dans l'utilisation de la FDME.

L'un des objets de ce travail est l'étude de l'influence de ce choix sur la détermination de certains paramètres du milieu plasma, notamment l'élargissement et le déplacement du profil des raies émises.

BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE I

- [1] J. Holtsmark, *Ann. Physik*, 58, 577 (1919)
- [2] A. A. Broyles, *Phys. Rev.*, 100, 1181 (1955) ; *Z. Physik* 151, 187 (1958)
- [3] H. R. Griem, *Spectral line broadening by plasmas* (Academic Press, N. Y., 1974)
- [4] G. Ecker, *Z. Phys.*, 148, 593 (1957)
- [5] M. Baranger et B. Mozer, *Phys. Rev.* 115, 521 (1959); *Phys. Rev.* 118, 626 (1960)
- [6] C. F. Hooper, Jr., *Phys. Rev.*, 149, 77 (1966); *Phys. Rev.*, 165, 215 (1968)
- [7] I. I. Sobel'man, *Introduction to the Theory of atomic spectra* (Pergamon Press, Oxford, UK, 1972)
- [8] D. Held, *Journal de Physique*, 45, 1731 (1984)
- [9] J. E. Mayer & M. G. Mayer, *Statistical Mechanics* (J. Wiley & Sons Inc., NY, 1940)
- [10] D. Mihalas, *Stellar Atmospheres* (W. H. Freeman & Co., San Francisco, USA, 1978)
- [11] W. J. Swiatecki, *Proc. Roy. Soc.*, A205, 238 (1951)
- [12] J. Helenka, W. Olchava, B. Grabowski et F. Gajda, *J.Q.S.R.T.*, 74, 539 (2002)
et <http://draco.uni.opole.pl/Halenka.html>
- [13] C. A. Iglesias, J. L. Lebowitz and D. MacGowan, *Phys. Rev. A*, 28, 1667 (1983)
- [14] N. Metropolis, *Los Alamos Science Special Issue* 1987
- [15] J. M. Hammersley and D. C. Handscomb, *Monte Carlo Methods* (Methuen & Co LTD, London, 1975)
- [16] S. Ulam, R. D. Richtmyer, and J. von Neumann, *Statistical methods in neutron diffusion*. Los Alamos Scientific Laboratory report LAMS-551, 1947.
- [17] S. G. Brush, H. L. Sahlin and E. Teller, *J. Chem. Phys.* 45, 2102 (1966)
- [18] A. Y. Potekhin, G. Chabrier et D. Gilles, *Phys. Rev. E*, 65, 036412 (2002)

- [19] P. P. Ewald, *Ann. Phys.* 64, 253 (1921)
- [20] D. Gilles and A. Angelié, *Annales de Physique*, Coll. 3, 11, 157 (1986)
- [21] H. E. DeWitt and W. L. Slattery, *International Conference on Strongly Coupled Coulomb Systems*, campus of Boston College, Newton, Massachusetts (1997)

Chapitre 2

CALCUL DU PROFIL DE RAIE DANS L'APPROXIMATION QUASI STATIQUE DES IONS

Pour certaines méthodes théoriques, le calcul de la FDME est une étape nécessaire dans la détermination des paramètres Stark d'un plasma. Pour montrer l'influence du microchamp électrique sur ces paramètres, nous l'étudions dans l'approximation quasi statique. La raie émise par un atome émetteur dans un plasma porte les empreintes de son interaction avec les particules environnantes. L'analyse de ces raies émises montre qu'elles peuvent plus ou moins subir des élargissements. Elles sont aussi déplacées par rapport aux longueurs d'ondes prévues. Plusieurs processus sont à l'origine de ces deux phénomènes d'élargissement et de déplacement : la durée de vie de l'émetteur dans un état quantique quelconque qui introduit un élargissement dit naturel ; le mouvement de l'émetteur qui, par effet Doppler, modifie la longueur d'onde des radiations émises et qui produit un élargissement dit de Doppler ; les interactions entre l'émetteur et les particules environnantes qui sont la cause de l'élargissement de la raie et du déplacement des perturbateurs. Ces interactions sont de natures diverses: interactions électriques de Van der Waals, de Lennard-Jones, de Stark ... auxquelles correspond l'élargissement par pression (pressure broadening). Les interactions avec le champ électromagnétique de l'onde émise par un atome voisin produisent l'élargissement par résonance.

Selon le type de plasma, l'un ou l'autre de ces élargissements peut être prédominant. Si le degré d'ionisation est important, ce qui est le cas pour les plasmas auxquels nous nous intéressons, l'élargissement par pression domine, du fait de l'importance des sources du champ électrique, en l'occurrence les ions voisins, qui produisent l'effet Stark. Ce champ provoque une perturbation de l'état de l'atome émetteur, soit en déplaçant certains de ses niveaux d'énergie soit en occasionnant des transitions supplémentaires (raies interdites) en plus de celles prévues (raies permises) par les règles de sélection. Les probabilités

d'occupation sont modifiées. Dans certains cas, l'état de dégénérescence des niveaux d'énergie est modifié.

Les profils des raies font ainsi l'objet d'études théoriques et expérimentales.

Des méthodes théoriques permettent de calculer le profil de la raie émise par un atome ou un ion placé au sein d'un ensemble d'autres particules neutres ou chargées. Une analyse des processus qui sont à la base de ces causes d'élargissement montre que l'importance des deux phénomènes, élargissement et déplacement des raies, dépend de la température du plasma et de la densité des particules. C'est ainsi que l'analyse du profil de la raie émise par un système donné peut permettre de déduire les paramètres physiques du milieu étudié.

Mais un calcul théorique rigoureux du profil de raie nécessite la prise en compte de toutes les interactions de l'émetteur avec ses voisins dans le milieu. Ce qui, en plus du nombre généralement grand de particules dans le plasma, fait que les relations obtenues sont difficiles à traiter. En tenant compte des conditions physiques qui règnent dans le plasma, certaines approximations peuvent être faites pour simplifier ces calculs.

Il existe plusieurs modèles de calcul du profil de raie, qui diffèrent par la méthode d'approche du système émetteur-perturbateurs. On peut adopter une approche quantique, classique, semi-classique... La plupart d'entre elles introduisent une fonction de distribution du microchamp électrique; c'est pourquoi nous avons choisi le calcul du profil de raie pour montrer l'intérêt de l'étude de la fonction de distribution du microchamp électrique.

Dans la méthode semi-classique, souvent utilisée et que nous présentons dans la suite, on combine deux approches : quantique pour traiter l'atome émetteur et classique pour traiter les perturbateurs.

2.1 Expression générale du profil de raie

Pour calculer le profil de raie on considère la puissance spectrale émise, déduite de la probabilité d'émission spontanée correspondant à la transition de l'état excité initial a comportant les sous-niveaux α, α', \dots vers l'état de niveau d'énergie inférieur b , de sous-niveaux β, β', \dots . Le système considéré est constitué de l'atome émetteur plongé dans un ensemble de perturbateurs. Dans son état excité, l'atome est assimilable à un dipôle électrique de moment dipolaire d . Si ρ_α est la probabilité d'occupation du niveau supérieur α , on obtient la puissance spectrale totale en sommant sur tous les sous-états pouvant contribuer à la raie. On obtient alors la puissance sous la forme [1 ; 2]:

$$\mathcal{P}(\omega) = \frac{4}{3c^3} \sum_{\alpha, \beta, k} \omega_{\alpha\beta}^4 L(\omega) \cong \frac{4\omega^4}{3c^3} \sum_{\alpha, \beta, k} L(\omega) \quad (\text{II.1.1})$$

où ω est la fréquence angulaire de la radiation émise, c la célérité de la lumière et

$$L(\omega) = \sum_{\alpha, \beta, k} \delta(\omega - \omega_{\alpha\beta}) |\langle \beta | d_k | \alpha \rangle|^2 \rho_\alpha \quad (\text{II.1.2})$$

est l'expression décrivant le profil de la raie. Dans (II.1.2), les $\omega_{\alpha\beta} = \frac{E_\alpha - E_\beta}{\hbar}$ sont les fréquences angulaires correspondant aux transitions entre les sous-niveaux d'énergies E_α et E_β des états a et b et les d_k représentent les composantes du moment dipolaire du système. Comme on ne s'intéresse qu'à la radiation émise par l'atome émetteur, le moment dipolaire à considérer est celui de l'émetteur. La distribution de Dirac est introduite pour sélectionner parmi toutes les transitions possibles celles qui contribuent à la raie d'intérêt.

Avec l'hypothèse des faibles déplacements, dus à la faiblesse des microchamps, on a considéré, dans (II.1.1), que $\omega_{\alpha\beta}^4 \cong \omega^4$. Sous la forme (II.1.2), le profil de raie est difficile à calculer. On calcule de préférence la transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation $C(s)$ de l'intensité lumineuse définie par:

$$C(s) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega s} L(\omega) d\omega = \sum_{\alpha, \beta, k} e^{-i\omega_{\alpha\beta} s} |\langle \beta | d_k | \alpha \rangle|^2 \rho_\alpha \quad (\text{II.1.3})$$

Nous remarquons que $[C(s)]^* = C(-s)$; donc sa transformée de Fourier inverse, $L(\omega)$, s'obtient essentiellement pour les valeurs positives de la variable s :

$$L(\omega) = \frac{1}{\pi} Re \int_0^{\infty} e^{i\omega s} C(s) ds \quad (\text{II.1.4})$$

La fonction d'autocorrélation exprimée dans (II.1.3) est le centre des calculs du profil de raie. La théorie des perturbations est une méthode pratique pour obtenir une expression approchée nécessaire à la détermination des fonctions d'onde des états de l'émetteur. Pour cela, on introduit l'opérateur d'évolution dans le temps, noté T , qui fait correspondre à tout état propre initial $|\alpha, 0\rangle$ du système l'état propre à une date ultérieure:

$$T(t, 0)|\alpha, 0\rangle = |\alpha, t\rangle \quad (\text{II.1.5})$$

T obéit à l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} T(t, 0) = HT(t, 0) \quad (\text{II.1.6})$$

où

$$H = H_e + H_p + V \quad (\text{II.1.7})$$

est l'Hamiltonien total du système, composé respectivement des Hamiltoniens de l'émetteur isolé H_e , de celui des perturbateurs H_p et du terme d'interaction entre perturbateurs et émetteur V . Les solutions de (II.1.6) sont de la forme :

$$T(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \quad (\text{II.1.8})$$

Si $|\alpha\rangle$ est indépendant du temps, on a :

$$T(t, 0)|\alpha\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\alpha\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_\alpha t}|\alpha\rangle \quad (\text{II.1.9})$$

L'opérateur moment dipolaire défini à partir de l'opérateur de position \hat{r} qui est hermitique par $\hat{d} = e\hat{r}$ est aussi hermitique, donc : $\hat{d}_k^* = \hat{d}_k^+ = \hat{d}_k$. Dans ce cas l'équation (II.1.3) devient, avec (II.1.9):

$$C(s) = \sum_{\alpha, \beta, k} \langle \alpha | d_k | \beta \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_\beta s} \langle \beta | d_k | \alpha \rangle e^{\frac{i}{\hbar}E_\alpha s} \rho_\alpha \quad (\text{II.1.10.a})$$

$$= \sum_{\alpha} \langle \alpha | dT(s, 0) dT^+(s, 0) \rho | \alpha \rangle \quad (\text{II.1.10.b})$$

$$C(s) = Tr[dT(s, 0) dT^+(s, 0) \rho] \quad (\text{II.1.10.c})$$

Nous avons simplifié la notation du moment dipolaire, en nous débarrassant du chapeau, pour alléger nos expressions.

Dans cette relation où nous avons posé $\rho_\alpha = \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle$ en admettant que la matrice densité est diagonale dans l'espace des états $|\alpha\rangle$, la trace est à calculer sur tous les états de l'émetteur et des perturbateurs. Mais ces états sont couplés du fait de l'interaction entre les différentes parties du système. Ce qui rend difficile l'utilisation de la relation (II.1.10.c). Afin de la rendre utilisable, un calcul approché de cette fonction d'autocorrélation s'avère nécessaire. On fait d'abord l'approximation du faible couplage entre les deux sous-systèmes, constitués respectivement de l'atome émetteur et de l'ensemble des perturbateurs, puis l'approximation du chemin classique pour les perturbateurs.

2.2 Approximation du faible couplage

Dans la relation (II.1.10.c), ρ est l'opérateur densité des états du système constitué de l'atome émetteur et des perturbateurs. L'hypothèse d'équilibre thermodynamique est faite et, en considérant ce système comme un ensemble canonique, on peut exprimer ρ sous la forme [3] :

$$\rho = B e^{-H/k_B T} \quad (\text{II.2.1})$$

où $B = \frac{1}{Z}$, avec $Z = \text{Tr} e^{-H/k_B T}$ est la fonction de partition canonique.

Nous admettons que le système est faiblement couplé. L'émetteur et les perturbateurs peuvent alors être considérés comme statistiquement indépendants, c'est-à-dire que l'état de l'un quelconque des constituants du système ne dépend pas explicitement des états des autres constituants. Dans ce cas, nous pouvons écrire ρ sous la forme :

$$\rho = \rho_e \rho_p \quad (\text{II.2.2})$$

où ρ_e et ρ_p sont les matrices densités dépendant respectivement de l'émetteur et des perturbateurs.

L'approximation de faible couplage se traduit aussi par le fait que l'énergie potentielle d'interaction est faible devant l'énergie cinétique des particules du système ; d'où :

$$\frac{H}{k_B T} \cong \frac{H_e + H_p}{k_B T} \quad (\text{II.2.3})$$

En combinant les relations (II.2.1), (II.2.2) et (II.2.3), nous pouvons décomposer la matrice densité comme suit :

$$\rho = B e^{-H_e/k_B T} e^{-H_p/k_B T} \quad (\text{II.2.4})$$

Cette approximation nous permet ainsi de découpler les deux parties du système et d'écrire la fonction de corrélation sous la forme :

$$C(s) = \text{Tr}_e [\text{Tr}_p [dT(s, 0) \rho_p dT^+(s, 0)] \rho_e] \quad (\text{II.2.5})$$

Nous considérons aussi les perturbateurs comme des particules classiques décrivant des trajectoires bien déterminées et négligeons le phénomène de « back reaction », c'est-à-dire l'effet sur les perturbateurs de la réaction de l'émetteur à la perturbation qu'il subit. Cette approximation est justifiée par le fait qu'on ne s'intéresse pas à la diffusion subie par les perturbateurs, mais seulement à l'effet de ces derniers sur la radiation émise. Dans ces conditions, le système complet est décrit par une fonction d'onde ψ satisfaisant à l'équation de Schrödinger dépendant du temps :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi = H\psi \quad (\text{II.2.6})$$

et qui, dans l'approximation du faible couplage, peut s'écrire sous la forme:

$$\psi = \psi_e \psi_p \quad (\text{II.2.7})$$

où ψ_e est la fonction décrivant l'état de l'émetteur perturbé et ψ_p une fonction dépendant des coordonnées des perturbateurs.

La fonction d'onde ψ_p représente des paquets d'onde pour les perturbateurs et obéit à une équation de Schrödinger indépendante de l'état de l'émetteur:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_p = H_p \psi_p \quad (\text{II.2.8})$$

Nous devons, pour déterminer ψ_e , écrire l'équation de Schrödinger décrivant son évolution. A cet effet, nous multiplions (II.2.7) par ψ_p^* et intégrons par rapport aux coordonnées x_p des perturbateurs:

$$\psi_e = \int \psi_p^* \psi dx_p \quad (\text{II.2.9})$$

Les fonctions d'onde ψ_p étant normalisées, on obtient par dérivation:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_e = H'_e \psi_e \quad (\text{II.2.10.a})$$

$$\text{avec } H'_e = H_e + V_e, \text{ où } V_e = \int \psi_e^* V \psi_e dx_p \quad (\text{II.2.10.b})$$

ψ_e obéit à l'équation de Schrödinger avec un potentiel dépendant du temps. Les solutions de l'équation de Schrödinger (II.2.10.a), sont donc dépendantes aussi du temps. Pour déterminer ces solutions, on introduit l'opérateur d'évolution $T_e(t, 0)$ grâce auquel elles peuvent s'exprimer, à l'aide de la fonction d'onde initiale, sous la forme:

$$\psi_e(t) = T_e(t, 0) \psi_e(0) \quad (\text{II.2.11})$$

L'opérateur d'évolution du système complet peut s'écrire, d'après (II.2.7) sous la forme:

$$T = T_e T_p \quad (\text{II.2.12})$$

où

$$T_p = e^{-\frac{i}{\hbar} H_p t} \quad (\text{II.2.13})$$

Sachant que T_p est diagonal et est indépendant des états de l'émetteur et que ρ est diagonal dans la représentation des paquets d'onde, on tire des équations (II.1.10.c), (II.2.12) et (II.2.13) l'expression suivante de la fonction d'autocorrélation :

$$C(s) = Tr\{dT_e dT_e^+ \rho\} \quad (\text{II.2.14})$$

Dans (II.2.14) la trace est à calculer sur les seuls états de l'émetteur. La trace sur les états des perturbateurs se ramène à une moyenne statistique sur les positions et les vitesses des perturbateurs ; ce qui est exprimé à travers les accolades. La relation ci-dessus nécessite des transformations pour être utilisable.

Des approximations supplémentaires sont introduites. Elles sont fondées sur le fait qu'on peut distinguer différents types d'interactions dont deux extrêmes : les collisions rapides et celles qui sont lentes. Si une interaction est assez rapide, la fonction d'autocorrélation qui dépend du temps ne varie pas de manière significative pendant toute la durée de l'interaction. Les électrons supposés très rapides produisent ce type d'interaction avec l'émetteur. Si une interaction dure assez longtemps, la fonction d'autocorrélation s'annule bien avant la fin de l'interaction. Les ions supposés beaucoup plus lents que les électrons produisent ce type d'interaction et leur mouvement est négligé. Ces deux cas correspondent respectivement à l'approximation d'impact et à l'approximation quasi statique. Le problème du calcul du profil de raie complet se réduit au calcul du profil partiel élargi par l'interaction de l'émetteur avec les électrons seuls (contribution des électrons perturbateurs). La prise en compte de l'interaction avec les ions statiques est faite en moyennant le profil dû aux électrons avec le champ électrique des ions. Les interactions intermédiaires, en particulier celles dues aux ions mobiles, sont plus difficiles à traiter.

2.3 Approximation des impacts pour les électrons

En général, l'énergie nécessaire pour provoquer des transitions entre deux niveaux de nombres quantiques principaux différents est grande par rapport à l'énergie d'interaction entre l'émetteur et ses voisins

Dans (II.2.14), on considère d'une part que l'opérateur T_e possède des éléments matriciels seulement entre les sous-états du niveau a (T_a) et ceux du niveau b (T_b), et d'autre part que les transitions entre sous-niveaux de groupes différents sont les seules qui concernent les raies qui nous intéressent. Cette dernière hypothèse se justifie dans le cas des radiations émises dans le domaine visible, ce qui est le cas de la raie que nous étudions dans le prochain chapitre. On peut alors dans la relation (II.2.14) tenir compte des sous-états et écrire:

$$C(s) = \{\sum \langle \alpha | d | \beta \rangle \langle \beta | T_b | \beta' \rangle \langle \beta' | d^+ | \alpha' \rangle \langle \alpha' | T_a^+ | \alpha \rangle\} \quad (\text{II.3.1.a})$$

$$= \{\sum \langle \alpha | d | \beta \rangle \langle \beta | T_b | \beta' \rangle \langle \alpha | T_a | \alpha' \rangle^* \langle \alpha' | d^+ | \beta' \rangle^*\} \quad (\text{II.3.1.b})$$

$$= \left\{ \sum d_{\alpha\beta} \langle \langle \alpha\beta | T_b T_a^* | \alpha'\beta' \rangle \rangle d_{\alpha'\beta'}^* \right\} \quad (\text{II.3.1.c})$$

Pour obtenir (II.3.1.a), on a considéré que les éléments de la matrice densité ρ sont constants et n'ont donc pas d'influence sur la forme du profil de raie, d'où son omission. Nous avons aussi considéré que l'opérateur conjugué T^* et l'opérateur adjoint T^+ de sont égaux. Dans ces dernières relations, nous avons adopté la notation matricielle pour exprimer la trace. Il est plus pratique d'utiliser l'opérateur d'évolution dans la représentation des interactions:

$$U(s, 0) = e^{\frac{i}{\hbar} H_e s} T_e(s, 0) \quad (\text{II.3.2})$$

A l'instar de la fonction d'onde de l'émetteur qui satisfait la relation (II.2.10.a), l'opérateur U obéit à l'équation de Schrödinger ; ce qui, avec (II.3.2), conduit à :

$$i\hbar \frac{d}{ds} U = V_e' U \quad (\text{II.3.3})$$

où

$$V_e' = e^{\frac{i}{\hbar} H_e s} V_e e^{-\frac{i}{\hbar} H_e s} \quad (\text{II.3.4})$$

L'équation (II.3.3) peut être résolue par itération pour donner :

$$U(s, 0) = 1 + (i\hbar)^{-1} \int_0^s ds_1 V'(s_1) + (i\hbar)^{-2} \int_0^s ds_1 V'(s_1) \int_0^{s_1} ds_2 V'(s_2) + \dots \quad (\text{II.3.5})$$

Ce qui permet de réécrire la fonction d'autocorrélation donnée en (II.3.1.c) sous la forme :

$$C(s) = \sum e^{\frac{i}{\hbar} (E_\alpha - E_\beta) s} d_{\alpha\beta} \langle \langle \alpha\beta | \{U_b(s, 0) U_a^*(s, 0)\} | \alpha'\beta' \rangle \rangle d_{\alpha'\beta'}^* \quad (\text{II.3.6})$$

Pour calculer la moyenne $\{U_b U_a^*\}$, on considère la variation $\Delta\{U_b U_a^*\}$ causée par une collision qui se produit dans l'intervalle de temps Δs :

$$\Delta\{U_b(s, 0) U_a^*(s, 0)\} = \{U_b(s + \Delta s, 0) U_a^*(s + \Delta s, 0) - U_b(s, 0) U_a^*(s, 0)\} \quad (\text{II.3.7.a})$$

$$= \{[U_b(s + \Delta s, s) U_a^*(s + \Delta s, s) - 1][U_b(s, 0) U_a^*(s, 0)]\} \quad (\text{II.3.7.b})$$

où on a fait l'hypothèse que la durée Δs est assez grande pour que les deux facteurs dans le second membre de (II.3.7.b) soient indépendants :

$$\Delta\{U_b(s, 0)U_a^*(s, 0)\} = \{U_b(s + \Delta s, s)U_a^*(s + \Delta s, s) - 1\}\{U_b(s, 0)U_a^*(s, 0)\} \quad (\text{II.3.8})$$

On considère néanmoins que la durée Δs est si petite que cette équation puisse être remplacée par une équation différentielle dont la résolution, en utilisant les relations (II.3.3) et (II.3.8), conduit à [2] :

$$\{U_b(s, 0)U_a^*(s, 0)\} = e^{\frac{i}{\hbar}(H_b - H_a)s} e\left[-\frac{i}{\hbar}(H_b - H_a) + \phi_{ab}\right]s \quad (\text{II.3.9})$$

où

$$\begin{aligned} \phi_{ab} = & \frac{1}{\Delta s} \left\{ (i\hbar)^{-1} \int_0^{\Delta s} ds_1 [V_b'(s_1) - V_a^{*'}(s_1)] \right. \\ & + (i\hbar)^{-2} \left[\int_0^{\Delta s} ds_1 V_b'(s_1) \int_0^{s_1} ds_2 V_b'(s_2) \right. \\ & \left. \left. + \int_0^{\Delta s} ds_1 V_a^{*'}(s_1) \int_0^{s_1} ds_2 V_a^{*'}(s_2) - \int_0^{\Delta s} ds_1 V_b'(s_1) \int_0^{s_1} ds_2 V_b'(s_2) \right] + \dots \right\} \end{aligned} \quad (\text{II.3.10})$$

ϕ_{ab} est l'opérateur d'élargissement par impact des électrons. Il permet d'exprimer quantitativement le déplacement et l'élargissement subie par une raie donnée. Ces deux dernières grandeurs correspondent respectivement à la partie imaginaire et à la partie réelle des éléments matriciels de ϕ_{ab} et font l'objet d'une étude plus détaillée dans le troisième chapitre de ce travail. La transformation requise, pour l'utilisation de ϕ_{ab} dans les calculs, dépend de l'élément considéré et des approximations supplémentaires à faire.

Pour obtenir l'expression finale de la fonction d'autocorrélation, on introduit l'expression de $\{U_b(s, 0)U_a^*(s, 0)\}$ donnée en (II.3.9) dans la relation (II.3.6) ; ce qui donne :

$$C(s, \varepsilon) = \sum_{\substack{\alpha, \alpha' \dots \\ \beta, \beta' \dots \\ k}} d_{\alpha\beta} \langle\langle \alpha\beta \left| \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(H_\beta(\varepsilon) - H_\alpha(\varepsilon))s + \phi_{ab}s\right] \right| \alpha'\beta' \rangle\rangle d_{\alpha'\beta'}^* \quad (\text{II.3.11})$$

Les éléments matriciels $d_{\alpha\beta}$ du moment dipolaire et $\langle\langle\alpha\beta|\phi_{ab}|\alpha'\beta'\rangle\rangle$ de l'opérateur d'impact dépendent aussi implicitement du champ ; c'est pour cette raison qu'ils doivent être calculés sur les états perturbés par le champ.

Dans cette théorie, on distingue les contributions des électrons et des ions dans le profil de raie. On calcule d'abord le profil de raie partiel $J(\omega, \varepsilon)$ dû à l'interaction de l'émetteur avec les électrons conformément à la relation (II.1.4) qu'on réécrit sous la forme suivante:

$$J(\omega, \varepsilon) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^\infty e^{i\omega s} C(s, \varepsilon) ds \quad (\text{II.3.12})$$

où $C(s, \varepsilon)$ est donnée par la relation (II.3.11). Nous devons ensuite inclure la contribution des ions.

2.4 Approximation quasi statique pour les ions

On néglige le mouvement des ions, mais leur contribution dans le profil de raie est nécessairement prise en compte du fait que l'état de l'émetteur est perturbé par le champ électrique $\vec{\varepsilon}$ qu'ils créent au point où se trouve l'émetteur. On moyenne le profil de raie partiel $J(\omega, \varepsilon)$ donné en (II.3.12) avec les valeurs du champ électrique statique créé par les ions en utilisant leur fonction de distribution du microchamp électrique $P(\varepsilon)$. On obtient alors le profil de raie complet sous la forme suivante :

$$L(\omega) = \int_0^\infty P(\varepsilon) J(\omega, \varepsilon) d\varepsilon \quad (\text{II.4.1})$$

Nous avons présenté dans le chapitre précédent plusieurs modèles de calcul de la fonction de distribution du microchamp électrique des ions. Les modèles théoriques présentés considèrent les ions quasi statiques. Cette hypothèse, faite aussi dans plusieurs modèles de calcul du profil de raie, est acceptable si les densités des particules sont assez élevées. Dans le cas contraire, on tient compte de la dynamique des ions ; ce qui rend les calculs plus difficiles. La comparaison des profils de raie calculés théoriquement avec ceux mesurés expérimentalement montre des écarts d'importance variable selon le plasma considéré. Ces écarts sont plus importants dans le cas des plasmas moins denses ($N \lesssim 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) [3]

et celui des raies semi-dégénérées c'est-à dire comportant une composante interdite ; cette dernière étant plus sensible que la composante permise [4]. Il devient nécessaire de reconsidérer l'approximation quasi statique des ions en tenant compte de leur mouvement qui, en toute rigueur, produit un champ variable. En reprenant les calculs en tenant compte de la dynamique des ions [5], on obtient des résultats plus proches de ceux obtenus par l'expérience. Les calculs théoriques deviennent plus compliqués lorsque les systèmes atomiques considérés sont complexes. De plus en plus on fait appel à la simulation informatique pour déterminer le profil de raie [6]. Mais plusieurs méthodes théoriques existent aussi pour la prise en compte du mouvement des ions, parmi lesquelles l'utilisation de fonctions de distribution généralisées du microchamp électrique des ions, où on considère un microchamp dépendant du temps [7]; la Méthode du Microchamp Modèle (MMM) où le champ est modélisé par un processus stochastique (du kangourou) [8 ;9 ;10]; et l'utilisation de fonctions d'onde adiabatiques dans la Théorie Unifiée [11; 12].

Dans le présent travail, les plasmas que nous considérons ont des densités relativement élevées ($N \geq 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) ; ce qui fait que l'approximation quasi statique des ions est suffisante. Nous l'appliquerons dans le chapitre 3 dans le calcul du profil de certaines raies émises par l'atome d'hélium dans un plasma.

En introduisant l'expression (II.3.11) dans la relation (II.3.12), on obtient, avec la relation (II.4.1), l'expression du profil de raie dans l'Approximation des Impacts pour les électrons et Quasi Statique pour les Ions.

$$L(\omega) = \frac{1}{\pi} Re \int_0^\infty d\varepsilon P(\varepsilon) \sum d_{k\alpha\beta} \langle\langle \alpha\beta \left| \left[i\omega - \frac{i}{\hbar} (H_\alpha(\varepsilon) - H_\beta(\varepsilon)) - \phi_{ab} \right]^{-1} \right| \alpha'\beta' \rangle\rangle d_{k\alpha'\beta'}^* \quad (\text{II.4.2})$$

Dans beaucoup de cas, la raie étudiée résulte essentiellement de la transition d'un seul électron, les autres électrons éventuels ne subissent pas d'influence significative de la part du microchamp. On considère approximativement que seul le niveau supérieur est perturbé. Avec l'approximation de non perturbation

du niveau inférieur, l'opérateur d'élargissement par impact ϕ_{ab} se réduit à ϕ_a et n'a d'éléments matriciels non nuls que dans le niveau supérieur a . De même, l'énergie mise en jeu lors de la transition $a \rightarrow b$, peut se définir à l'aide de la fréquence angulaire correspondante ω_{ab} par la relation $\hbar\omega_{ab}(\varepsilon) = E_a(\varepsilon) - E_b(0)$, où E_i est la valeur propre de l'Hamiltonien dans l'état $|i\rangle$. Dans ces conditions, la relation (II.4.2) se simplifie ainsi:

$$L(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^\infty d\varepsilon P(\varepsilon) \sum_{\substack{\alpha, \alpha' \\ \beta \\ k}} d_{k\alpha\beta} \langle \alpha | [\mathfrak{D}(\omega, \varepsilon)]^{-1} | \alpha' \rangle d_{k\alpha'\beta}^* \quad (\text{II.4.3})$$

avec

$$\mathfrak{D}(\omega, \varepsilon) = i \left(\omega - \omega_{\alpha\beta}(\varepsilon) \right) - \phi_a \quad (\text{II.4.4})$$

La forme définitive de ϕ_a dépend de l'atome considéré. Le calcul détaillé de ses éléments matriciels, pour l'Hélium neutre sera présenté ultérieurement.

L'expression du profil de raie donnée en (II.4.3) est générale et utilisée par beaucoup d'auteurs pour calculer théoriquement le profil de raie de plusieurs atomes dont l'Hélium auquel nous nous intéressons dans le chapitre suivant.

BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE 2

- [1] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd ed. (McGraw-Hill, New York, 1968),
- [2] H. Griem, *Plasma Spectroscopy*, (Mc Graw Hill Book Co., N. Y., 1964)
- [3] I. Diédhiou, Thèse d'Etat (F.S.T. de l'U.C.A.D de Dakar, 1997)
- [3] M. Baranger, *Spectral Line Broadening in Plasmas* (Atomic and Molecular Processes ed. Bates, Academic Press, New-York, London (1962)
- [4] D. D. Burgess and C. J. Cairns, *J. Phys. B* 3, L67 (1970)
- [5] a) R. W. Lee, *Journal of Physics B: Atom. and Molec. Phys.* 5, L23 (1972);
b) R. W. Lee, *Journal of Physics B: Atom. and Molec. Phys.*, 6, 1044 (1972)
- [6] M. A. Gigosos and M. A. Gonzalez, *Astronomy and Astrophysics* 503, 293 (2009)
- [7] R. Stamm and D. Voslamber, *J.Q. S.R.T.* 22, no.6, 599 (1979)
- [8] D. Gilles and C. Stehlé *Laser and Particle Beams*, 12, N°3 (1996)
- [9] Stehlé C., *Physica Scripta*, T65, 183-187, (1996) ;
- [10] A. V. Demura, N. Feautrier, I. N. Kosarev, V. S. Lisita and C. Stehlé, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 31 (1998)
- [11] A. J. Barnard, J. Cooper and E. W. Smithy, *J.Q.S.R.T.* 14, 1025 (1974)
- [12] C. R. Vidal, J. Cooper and E. W. Smith, *J.Q. S.R.T.* 10, 1011 (1970)

Chapitre 3

ETUDE DES PARAMETRES STARK DE LA RAIE 4471 Å DE L'HELIUM NEUTRE ET DE SA COMPOSANTE INTERDITE

L'analyse spectroscopique est l'un des moyens de diagnostic des plasmas qui sont des milieux souvent chauds et inaccessibles directement aux instruments de mesure. Le spectre des plasmas naturels et de laboratoire recèle plusieurs informations. Parmi celles-ci on peut citer : la connaissance des paramètres physiques tels que la température, la densité des électrons, des ions et l'abondance relative de certains éléments. Il permet aussi une meilleure compréhension de la structure des étoiles par l'analyse des radiations provenant des différentes couches de l'atmosphère stellaire : couches intérieures et surface des étoiles ; la compréhension des forces d'interaction entre espèces et le degré d'ionisation des atomes.

Avec l'Hydrogène, l'Hélium est l'un des éléments prépondérants dans l'Univers. La raie 4471 Å de l'He I est très souvent utilisée dans cette analyse du fait qu'elle est du domaine visible, domaine dans lequel sont faites la plupart des observations astronomiques.

L'analyse spectroscopique utilise en particulier les paramètres Stark exprimés en fonction de la densité et de la température des particules. On parvient aussi à distinguer les contributions séparées des différents constituants du plasma ; ce qui, combiné avec les résultats d'observation spectroscopique et de mesures expérimentales du profil de raie, procure un moyen efficace de diagnostic. L'un des objectifs des calculs théoriques est de dresser des tables de valeurs qui caractérisent les différentes raies selon les conditions physiques. La précision des calculs est donc d'une grande importance pour leur utilisation.

La longueur d'onde correspondant à la raie non perturbée dans la transition $2^3P - 4^3D$ de l'He I est 4471,48 Å et celle de sa composante interdite $2^3P - 4^3F$ est 4469,92 Å. Nous allons, dans ce chapitre étudier les variations subies

par son profil et ses paramètres Stark en fonction de la température et de la densité des particules du plasma, c'est-à-dire en fonction de l'importance des corrélations.

L'analyse de l'expression (II.4.3) révèle les principales étapes du calcul théorique du profil de raie : le calcul des fonctions d'onde, celui des valeurs propres $E_{\alpha,\beta}$ de l'Hamiltonien $H_{\alpha,\beta}$ de l'atome perturbé par le champ des ions, le calcul des éléments matriciels $d_{\kappa\alpha\beta}$ des composantes du moment dipolaire, ceux de l'opérateur d'élargissement par impact électronique ϕ_a et ceux de l'inverse de l'opérateur \mathfrak{D} défini en (II.4.4). Il faut enfin moyenner avec la fonction de distribution du microchamp électrique des ions $P(\varepsilon)$.

Le calcul des fonctions d'onde nécessite la résolution de l'équation de Schrödinger ; ce qui ne peut être fait de manière exacte. Cependant, cette résolution est faite avec une bonne précision pour l'atome d'hydrogène, le plus simple. Pour les hydrogénoïdes, des solutions approchées sont proposées. Leur utilisation donne des résultats satisfaisants dans beaucoup de cas. Si la raie émise par un atome provient de la transition d'un seul électron et que les autres électrons sont dans leur niveau fondamental, on peut traiter l'atome excité comme un hydrogénoïde avec une bonne précision. On utilise la fonction d'onde d'un hydrogénoïde pour calculer les éléments matriciels.

3.1 Calcul du profil de raie de l'Hélium I

3.1.1 Niveaux d'énergie perturbés par le microchamp des ions

La Théorie de la Perturbation peut être utilisée pour calculer les fonctions d'onde de l'émetteur et les valeurs propres de l'Hamiltonien car nous considérons que les interactions de l'émetteur avec ses perturbateurs ne produisent que des transitions de faible amplitude. Les transitions conduisant à une ionisation de l'émetteur ne sont pas envisagées, le microchamp étant supposé assez faible. Dans le cas de l'atome d'Hélium, on retient le développement à l'ordre un des valeurs propres de l'Hamiltonien ; cela est

suffisant du fait que la dégénérescence des niveaux d'énergie par rapport au nombre quantique orbital est levée. La perturbation subie par l'atome fait apparaître, dans la matrice représentative de l'opérateur Hamiltonien, des éléments non-diagonaux non nuls. Dans tous les cas, les éléments matriciels sont calculés en utilisant les fonctions d'onde d'hydrogéoïdes correspondant aux états impliqués dans les transitions.

Les éléments diagonaux sont constitués par les énergies non perturbées ; ils sont calculés et tabulés [1].

Les valeurs des éléments non-diagonaux dépendent de la valeur \mathcal{E} du microchamp. Pour les calculer, certaines simplifications sont nécessaires. Il a été démontré [2] que les niveaux 4F se mélangent ; mais ils ont la même énergie, ce qui n'affecte pas l'élargissement de la raie. Le problème est simplifié de manière très significative en considérant seulement les interactions entre niveaux de même nombre quantique principal ($n = 4$). La matrice de l'Hamiltonien se subdivise en plusieurs sous-matrices caractérisées chacune par son nombre quantique magnétique M_l et dont les éléments non-diagonaux s'écrivent [3]:

$$\langle lM_l | e z \mathcal{E} | l''M_l \rangle = e\mathcal{E}(-1)^{l-M_l} \mathbb{C}(l, l'', 1; M_l, -M_l, 0) \{l_{>} (4l_{>}^2 - 1)\}^{\frac{1}{2}} \sigma(l, l'') \quad (\text{III.1.3})$$

où $l_{>} = \sup(l, l'')$; \mathbb{C} est un coefficient de Wigner (ou Clebsh-Gordan) et σ est l'intégrale radiale définie par

$$\sigma(n, n', l, l') = (4l_{>}^2 - 1)^{-1/2} \int_0^\infty r P(n, l) P(n', l') dr \quad (\text{III.1.4})$$

Dans (III.1.4) les $P(n, l)$ sont les fonctions radiales. σ est calculée pour différentes transitions [3].

3.1.2 Eléments matriciels du moment dipolaire

Généralement, chaque état quantique considéré est caractérisé par la donnée des quatre nombres quantiques connus : S, l, J et M .

Le théorème de Wigner-Eckart montre que les éléments matriciels du moment dipolaire sont proportionnels aux coefficients de Clebsh-Gordan. Il est utilisé pour réduire les expressions des éléments matriciels du moment dipolaire [3]:

$$\begin{aligned} \langle S l J M_J | d_q | S' l' J' M_{J'} \rangle &= (-1)^{J-2J'-l-l'+S+l_1-l_2} \mathbb{C}(J 1 J'; M_J - q M_{J'}) (2J + 1)^{1/2} \\ &\times (2l + 1)^{1/2} (2l' + 1)^{1/2} \mathbb{W}(l J l' J'; S 1) \mathbb{W}(l_2 l l_2' l'; l_1) \langle l_2 | er | l_2' \rangle \delta_{l_1 l_1'} \delta_{S S'} \end{aligned} \quad (\text{III.1.5})$$

où les \mathbb{W} sont les coefficients de Racah. Le moment dipolaire d est identifié à er en considérant que l'un seul des électrons de l'hélium effectue une transition ; r est le tenseur représentant la position de cet électron par rapport au noyau de l'atome et q représente l'indice de la composante du moment dipolaire. Pour ce dernier, au lieu des composantes cartésiennes usuelles d_x, d_y et d_z on utilise les composantes notées d_q où q prend les valeurs $+1, -1$ et 0 correspondant respectivement à $x + jy, x - jy$ et z .

Les transitions sont régies par la règle de sélection : $\Delta l_2 = \pm 1$; les éléments matriciels réduits sont :

$$\langle l | er | l + 1 \rangle = -e[(l + 1)(2l + 1)(2l + 3)]^{1/2} \sigma(n, n', l, l') \quad (\text{III.1.6.a})$$

$$\langle l | er | l - 1 \rangle = e[l(2l - 1)(2l + 1)]^{1/2} \sigma(n, n', l, l') \quad (\text{III.1.6.b})$$

$$\langle l - 1 | er | l \rangle = -\langle l | er | l - 1 \rangle \quad (\text{III.1.6.c})$$

3.1.3 Éléments matriciels de l'opérateur d'élargissement d'impact des électrons

Dans la relation (II.3.10) le potentiel d'interaction doit être explicité. On considère le terme du second ordre dans son développement multipolaire :

$$V'_{a,b}(s) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \frac{\vec{r}_i \cdot \vec{r}_{a,b}}{|\vec{r}_i|^3} \quad (\text{III.1.7})$$

où \vec{r}_i et $\vec{r}_{a,b}$ représentent respectivement les vecteurs positions de l'électron perturbateur i et de l'électron atomique lorsque l'émetteur est dans l'état a ou b .

Si nous considérons l'approximation classique, la position instantanée de l'électron perturbateur s'exprime en fonction du paramètre d'impact $\vec{\rho}_i$, de la vitesse \vec{v}_i du perturbateur et de la date d'approche minimale s_i :

$$\vec{r}_i(s) = \vec{\rho}_i + \vec{v}_i(s - s_i) \quad (\text{III.1.8})$$

En introduisant le moment dipolaire $\vec{d} = e\vec{r}_i$, un terme quelconque du potentiel s'écrit sous la forme

$$V(s) = \frac{\vec{d} \cdot (\vec{\rho} + \vec{v}s)}{(\rho^2 + v^2 s^2)^{3/2}} \quad (\text{III.1.9})$$

Les indices sont omis provisoirement pour alléger l'écriture.

Les collisions sont soit complètes, soit n'apportent aucune contribution si la date s_i se situe en dehors de l'intervalle de temps Δs qui apparaît dans les intégrales de la relation (II.3.10). Dans ce cas l'intégration de 0 à Δs peut pratiquement être étendue de $-\infty$ à $+\infty$. De plus, on considère que le niveau inférieur de l'émetteur n'est pratiquement pas perturbé. Avec ses approximations, le calcul des éléments matriciels de ϕ_a au premier ordre de son développement en série dans (II.3.10) montre qu'ils sont nuls [4]. Si on passe au second ordre, on obtient:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \phi_a | \alpha' \rangle = & \\ - \left(\frac{N_e}{\hbar} \right)^2 \sum_{\alpha''} \int_{-\infty}^{\infty} ds_1 \int_{-\infty}^{s_1} ds_2 e^{i(\omega_{\alpha\alpha''} s_1 - \omega_{\alpha'\alpha''} s_2)} & \{ \langle \alpha | V(s_1) | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | V(s_1) | \alpha' \rangle \} \end{aligned} \quad (\text{III.1.10.a})$$

Les accolades représentent une moyenne sur les vitesses et les paramètres d'impact des électrons. Cette relation se ramène, en tenant compte de (III.1.9), à [4]:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \phi_a | \alpha' \rangle = & \\ - \frac{2\pi}{3} N_e \left(\frac{e}{\hbar} \right)^2 \sum_{\mu, \alpha''} \langle \alpha | d_\mu | \alpha'' \rangle \langle \alpha' | d_\mu | \alpha' \rangle \int_0^\infty dv f(v) v \int_{-\infty}^{s_1} d\rho \rho \int_{-\infty}^\infty ds_1 & \\ \times \int_{-\infty}^{s_1} ds_2 e^{i(\omega_{\alpha\alpha''} s_1 - \omega_{\alpha'\alpha''} s_2)} \frac{\rho^2 + v^2 s_1 s_2}{(\rho^2 + v^2 s_1^2)^{3/2} (\rho^2 + v^2 s_2^2)^{3/2}} & \end{aligned} \quad (\text{III.1.10.b})$$

où $f(v)$ est la fonction de distribution des vitesses et où on a utilisé (3.1.9).

Pour calculer l'intégrale par rapport au paramètre d'impact ρ on doit introduire des coupures aussi bien pour les petites valeurs de la variable que pour les grandes valeurs. Cela est dû au fait qu'elle diverge pour les petites valeurs de la variable et qu'on doit tenir compte de la diffusion de Debye pour les grandes valeurs. Ces valeurs limites (minimale : ρ^{min} et maximale : ρ^{max}), ont fait l'objet de divers choix selon les auteurs. Si on utilise un champ électrique diffusé de Debye, Griem *et al* [5] ont démontré qu'il suffit de prendre :

$$\rho^{max} = 1,123\lambda_D \quad (\text{III.1.11.a})$$

Pour la limite inférieure, il faut résoudre numériquement l'équation suivante :

$$(\rho^{min})^2 = \frac{2}{3} \left(\frac{\hbar}{mv} \right)^2 \sum_{\alpha'} |\langle \alpha | \vec{R}_a | \alpha' \rangle|^2 [A(z_{\alpha\alpha'}^{min}) + iB(z_{\alpha\alpha'}^{min})] \quad (\text{III.1.11.b})$$

\vec{R}_a est la position de l'électron atomique en unités atomiques ; z^{min} et les fonctions A et B sont définies par :

$$z_{\alpha\alpha'}^{min} = \frac{\rho^{min} \omega_{\alpha'\alpha}}{v} ; \quad A(z) = z^2 [K_0^2(|z|) + K_1^2(|z|)] ; \quad B(z) = \frac{2z}{\pi} I \int_0^\infty \frac{A(z')}{z^2 - z'^2} dz' . \quad (\text{III.1.12})$$

K_0 et K_1 sont des fonctions de Bessel et I désigne la partie principale. Les éléments matriciels de \vec{R}_a sont calculés avec l'hypothèse que la fonction d'onde des états est le produit d'une partie radiale et d'une partie angulaire ; dans ce cas [6]:

$$|\langle \alpha | \vec{R}_a | \alpha' \rangle|^2 = |\langle n, l | \vec{R}_a | n', l' \rangle|^2 = |\langle n, l | \vec{R}_a | n_{l\pm 1}, l \pm 1 \rangle|^2 \quad (\text{III.1.13.a})$$

$$= l_{>} (2l_{>} - 1) \sigma^2(n_{l_{<}}, l_{<}; n_{l_{>}}, l_{>}) \quad (\text{III.1.13.b})$$

où $l_{<} = \min(l, l')$.

Nous obtenons l'expression finale des éléments matriciels de l'opérateur d'élargissement d'impact, en prenant en compte les approximations indiquées ci-dessus:

$$\langle \alpha | \phi_a | \alpha' \rangle = -N_e \int_0^\infty dv f(v) \left\{ \pi v (\rho_{\alpha\alpha'}^{min})^2 + \frac{4\pi}{3v} \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \right.$$

$$\times \sum_{\mu, \alpha''} \langle \alpha | d_{\mu} | \alpha'' \rangle \langle \alpha' | d_{\mu} | \alpha' \rangle \left[A'(z_{min}) + iB' \left(\frac{3}{4} z_{min} \right) \right] \} \quad (\text{III.1.14})$$

où $z_{min} = \frac{\omega_{\alpha\alpha'} \rho_{\alpha\alpha'}^{min}}{\nu}$. Les nouvelles fonctions A' et B' sont définies respectivement à partir des fonctions A et B , introduites dans (III.1.11.b), par :

$$A'(z) = \int_z^{\infty} dy \frac{A(y)}{y} ; \quad B'(z) = \int_z^{\infty} dy \frac{B(y)}{y} \quad (\text{III.1.15})$$

Une autre étape importante dans le calcul numérique du profil de raie est le calcul des éléments matriciels de l'opérateur $\mathfrak{D}(\omega, \varepsilon)$ défini en (II.4.4) et inversé dans (II.4.3). Dans la suite nous proposons une méthode générale de calcul approximatif des éléments matriciels d'un tel opérateur.

Les éléments matriciels du premier terme de l'opérateur \mathfrak{D} sont diagonaux ; par contre, on considère qu'on peut écrire l'opérateur ϕ_a comme somme d'une partie diagonale ϕ_a^d et d'une partie non-diagonale ϕ_a^o . Nous pouvons alors réécrire \mathfrak{D} sous la forme :

$$\mathfrak{D} = i(\omega - \omega_{\alpha\beta}) - \phi_a^d - \phi_a^o = D(\omega) - \phi_a^o \quad (\text{III.1.16})$$

$$\text{avec } D(\omega, \varepsilon) = i(\omega - \omega_{\alpha\beta}(\varepsilon)) - \phi_a^d. \quad (\text{III.1.17})$$

Dans ce cas l'opérateur inversé s'écrit sous forme de développement en série [3]:

$$\frac{1}{D - \phi_a^o} = \frac{1}{D} + \frac{1}{D} \phi_a^o \frac{1}{D} + \frac{1}{D} \phi_a^o \frac{1}{D} \phi_a^o \frac{1}{D} + \dots \quad (\text{III.1.18})$$

Si on s'arrête au second ordre de ce développement, on obtient les éléments matriciels de \mathfrak{D}^{-1} en fonction de ceux de ϕ_a :

$$\langle \alpha\beta | \mathfrak{D}^{-1} | \alpha'\beta' \rangle = \frac{\delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'}}{i(\omega - \omega_{\alpha\beta}) - \langle \alpha | \phi_a | \alpha \rangle} + \frac{\delta_{\beta\beta'} \langle \alpha | \phi_a | \alpha' \rangle}{[i(\omega - \omega_{\alpha\beta}) - \langle \alpha | \phi_a | \alpha \rangle][i(\omega - \omega_{\alpha'\beta}) - \langle \alpha' | \phi_a | \alpha' \rangle]} \quad (\text{III.1.19})$$

Les résultats obtenus dans les différentes sections de ce paragraphe peuvent être utilisés pour calculer le profil d'une raie quelconque de l'atome neutre de l'Hélium, en particulier celui de la raie 4471 Å, dans l'approximation du chemin

classique pour les électrons perturbateurs et quasi statique pour les ions. C'est la raie étudiée dans le paragraphe suivant.

3.2. Calcul du profil de la raie 4471 A de l'hélium neutre : composantes permise et interdite

3.2.1 Expression du profil de raie

Pour le cas particulier de cette raie, du fait de l'effet Stark produit par les perturbateurs sur l'émetteur, les fonctions d'onde à considérer, notées sous la forme $|nlm(\varepsilon)\rangle$, sont $|43m(\varepsilon)\rangle$ et $|42m(\varepsilon)\rangle$ pour l'état initial et $|21m_\beta\rangle$ pour l'état final. Le calcul des éléments matriciels du moment dipolaire avec ces fonctions d'onde donne [7]:

$$\langle 42m|d_k|21m_\beta\rangle = C_{22}^m(\varepsilon) \quad (\text{III.2.1.a})$$

$$\langle 43m|d_k|21m_\beta\rangle = C_{32}^m(\varepsilon) \quad (\text{III.2.1.b})$$

Pour l'opérateur d'élargissement par impact des électrons, on a:

$$\langle 42m|\phi_a|42m\rangle = (C_{22}^m)^2\varphi_{22} + (C_{32}^m)^2\varphi_{33} \quad (\text{III.2.2.a})$$

$$\langle 42m|\phi_a|43m\rangle = C_{22}^m C_{32}^m (\varphi_{22} - \varphi_{33}) \quad (\text{III.2.2.b})$$

$$\langle 43m|\phi_a|43m\rangle = (C_{32}^m)^2\varphi_{22} + (C_{22}^m)^2\varphi_{33} \quad (\text{III.2.2.c})$$

où les coefficients C_{ij}^m et les éléments φ_{ij} sont:

$$C_{22}^m(\varepsilon) = C_{33}^m(\varepsilon) = \left[\frac{\frac{1}{2}\varepsilon_m^2}{\varepsilon_m^2 + 1 - (1 + \varepsilon_m^2)^{1/2}} \right]^{1/2} \quad (\text{III.2.3.a})$$

$$C_{23}^m(\varepsilon) = -C_{32}^m(\varepsilon) = - \left[\frac{\frac{1}{2}\varepsilon_m^2 + 1 - (1 + \varepsilon_m^2)^{1/2}}{\varepsilon_m^2 + 1 - (1 + \varepsilon_m^2)^{1/2}} \right]^{1/2} \quad (\text{III.2.3.b})$$

$$\varphi_{22} \approx \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2m_e}{\pi k_B T} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar}{m_e} \right)^2 N \left[151 \left(\frac{1}{2} + \ln \left(\frac{k_B T}{8\hbar\omega_{23}} \right) \right) + 173 \left(\frac{1}{2} + \ln \left(\frac{k_B T}{8\hbar\omega_{12}} \right) \right) \right] \quad (\text{III.2.4.a})$$

$$\varphi_{33} \approx \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2m_e}{\pi k_B T} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar}{m_e} \right)^2 N \left[108 \left(\frac{1}{2} + \ln \left(\frac{k_B T}{8\hbar\omega_{23}} \right) \right) \right] \quad (\text{III.2.4.b})$$

où k_B , m_e et T sont respectivement la constante de Boltzmann, la masse de l'électron et la température ; ω_{12} est l'écart de fréquence angulaire entre les

niveaux 4P et 4D [6]; ω_{23} la fréquence caractéristique définie par $\omega_{23} = \max(|\omega_2 - \omega_3|, \omega_p, \omega'_{23})$; ω_2 et ω_3 sont les fréquences non perturbées des composantes permises et interdites respectivement ; ω_p est la fréquence plasma

$$\text{et } \omega'_{23} = \left| \omega - \frac{1}{2}(\omega_2 + \omega_3) \right|$$

$$\epsilon_m = \frac{12(9-m^2)^{1/2} \hbar E}{m_e e (\omega_2 - \omega_3) \sqrt{5}} \quad (\text{III.2.5})$$

Le profil de raie total est la somme de plusieurs composantes:

$$L(\omega) = \sum_m I_m(\omega) \quad (\text{III.2.6})$$

avec:

$$I_m(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\varepsilon P(\varepsilon) \varphi_{22} \frac{[K_1(\omega) + K_2(\omega) + K_3(\omega)]}{[K_4(\omega) + K_5(\omega) + K_6(\omega)]} \quad (\text{III.2.7})$$

où

$$K_1(\omega) = (\Delta\omega_2^2 C_{32}^2 (C_{32}^2 + C_{22}^2 R')) \quad (\text{III.2.8.a})$$

$$K_2(\omega) = 2\Delta\omega_2 \Delta\omega_3 C_{22} C_{32} (1 - R') \quad (\text{III.2.8.b})$$

$$K_3(\omega) = \Delta\omega_3^2 C_{22}^2 (C_{22}^2 + C_{32}^2 R') + \varphi_{33}^2 \quad (\text{III.2.8.c})$$

$$K_4(\omega) = \Delta\omega_2^2 \Delta\omega_3^2 + \varphi_{22}^2 \varphi_{33}^2 + \Delta\omega_2^2 (C_{32}^2 \varphi_{22} + C_{22}^2 \varphi_{33})^2 \quad (\text{III.2.8.d})$$

$$K_5(\omega) = 2\Delta\omega_2 \Delta\omega_3 C_{22}^2 C_{33}^2 (\varphi_{22} - \varphi_{33})^2 \quad (\text{III.2.8.e})$$

$$K_6(\omega) = \Delta\omega_3^2 (C_{22}^2 \varphi_{22} + C_{32}^2 \varphi_{33})^2 \quad (\text{III.2.8.f})$$

$$\Delta\omega_2(\omega) = \omega - \omega_2^m(\varepsilon) \quad (\text{III.2.9.a})$$

$$\Delta\omega_3(\omega) = \omega - \omega_3^m(\varepsilon) \quad (\text{III.2.9.b})$$

$$R' = \frac{\varphi_{33}}{\varphi_{22}} \quad (\text{III.2.10})$$

Dans (III.2.9.a) et (III.2.9.b), ω_2^m et ω_3^m s'écrivent sous la forme:

$$\omega_2^m(\varepsilon) = \frac{1}{2}(\omega_2 + \omega_3) + \frac{1}{2}(\omega_2 - \omega_3)(1 + \epsilon_m^2)^{1/2} \quad (\text{III.2.11.a})$$

$$\omega_3^m(\varepsilon) = \frac{1}{2}(\omega_2 + \omega_3) - \frac{1}{2}(\omega_2 - \omega_3)(1 + \epsilon_m^2)^{1/2} \quad (\text{III.2.11.b})$$

3.2.2 Résultats

Les plasmas considérés sont caractérisés par les valeurs de leur densité et de la température. Pour différentes valeurs de ces deux paramètres, nous avons

calculé et tracé les profils de la raie 4471 Å avec sa composante interdite 4470 Å. Afin de tester notre programme informatique et vérifier la fiabilité des considérations théoriques qui sont faites tout le long de ce travail, nous avons, dans les figures III.1.a et III.1.b ci-dessous, comparé nos résultats théoriques à ceux obtenus expérimentalement par d'autres auteurs [8-9]. Nous avons utilisé différentes fonction de distribution du microchamp électrique étudiées dans le premier chapitre notamment celles de Hooper, de Halenka et de Potekhin pour moyenner le profil de raie avec le microchamp des ions.

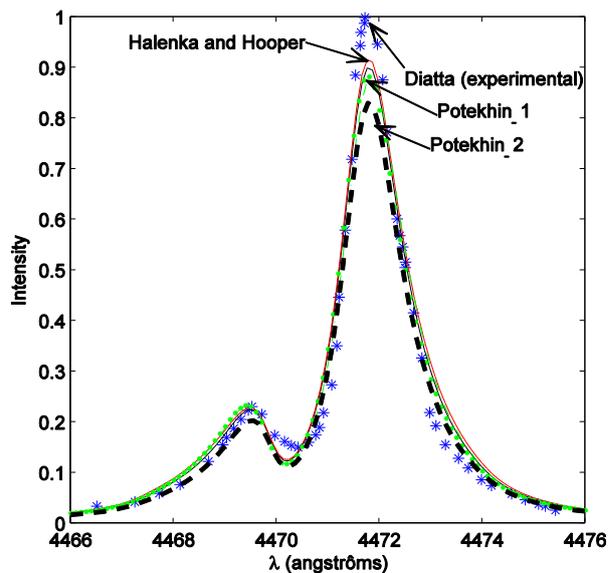


Fig. III.1.a Comparaison des profil de raie calculés théoriquement avec ceux mesurés expérimentalement par Diatta *et al.* [13] pour $T = 8500$ K et $n_e = 3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

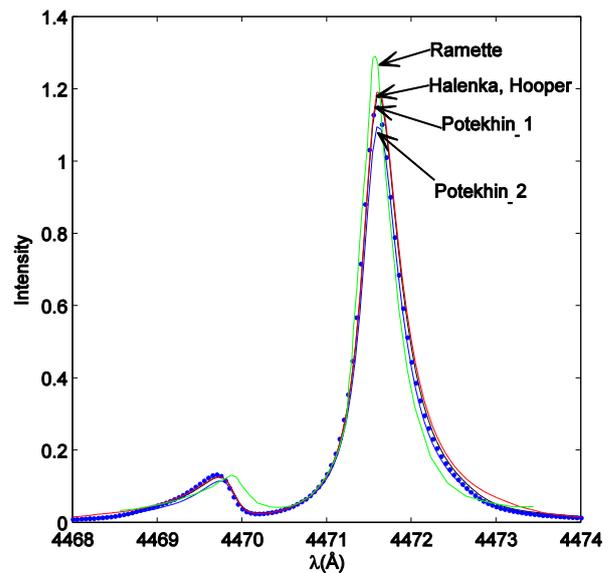


Fig. III.1.b Comparaison des profil de raie calculés théoriquement avec ceux mesurés expérimentalement par Ramette *et al.* [14] pour $T = 6300$ K et $n_e = 1.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

Dans ces figures, les inscriptions Potekhin_1 et Potekhin_2 font référence aux profil de raie calculés en utilisant la fonction de distribution du microchamp électrique de Potekhin où le potentiel d'interaction considéré est respectivement du type coulombien et du type de Debye (cf Chapitre 1).

Les écarts les plus importants entre les courbes expérimentales et théoriques se situent dans le creux entre les deux composantes de la raie et au niveau du maximum d'intensité de la composante permise. Mais ces écarts ne dépassent pas 8% et 15% pour le maximum de l'intensité de la composante permise, par rapport aux résultats des références [8] et [9] respectivement ; par contre au niveau du creux, ces écarts atteignent 15% et 37% par rapport aux mêmes résultats expérimentaux. Cela montre que la théorie utilisée prend moins bien en charge le creux de la raie que les ailes. Mais l'analyse globale de ces deux séries de courbes montre que les résultats théoriques et expérimentaux sont assez proches sur une grande gamme de longueur d'onde et atteste de la fiabilité de la théorie semi classique. Les courbes se superposent presque sur la plus grande partie du domaine étudié.

Cependant, nous remarquons que les deux résultats expérimentaux exploités concernent des plasmas de la même catégorie : leurs températures et leurs densités ne sont pas très éloignées. Nous avons alors jugé utile de faire une comparaison avec les résultats obtenus pour d'autres catégories de plasmas pour pouvoir nous assurer de la validité des hypothèses faites tout le long du calcul théorique et de la fiabilité de nos programmes informatiques. A défaut de résultats expérimentaux disponibles, nous avons comparé nos résultats à d'autres résultats théoriques obtenus par d'autres auteurs, pour d'autres gammes de température et de densité. Les résultats de cette comparaison sont représentés dans la figure 2.

En dehors de la présence d'une troisième composante de la raie que nous n'avons pas pris en compte dans notre théorie, nous notons que les résultats de Barnard *et al* sont assez proches des nôtres, surtout lorsque nous utilisons la même fonction de distribution du microchamp électrique que ces auteurs (Hooper). Cette fois la densité est assez élevée ainsi que la température.

Les résultats de ces deux études comparatives nous autorisent à utiliser notre programme sur une gamme de température et de densité assez vaste pour des études ultérieures.

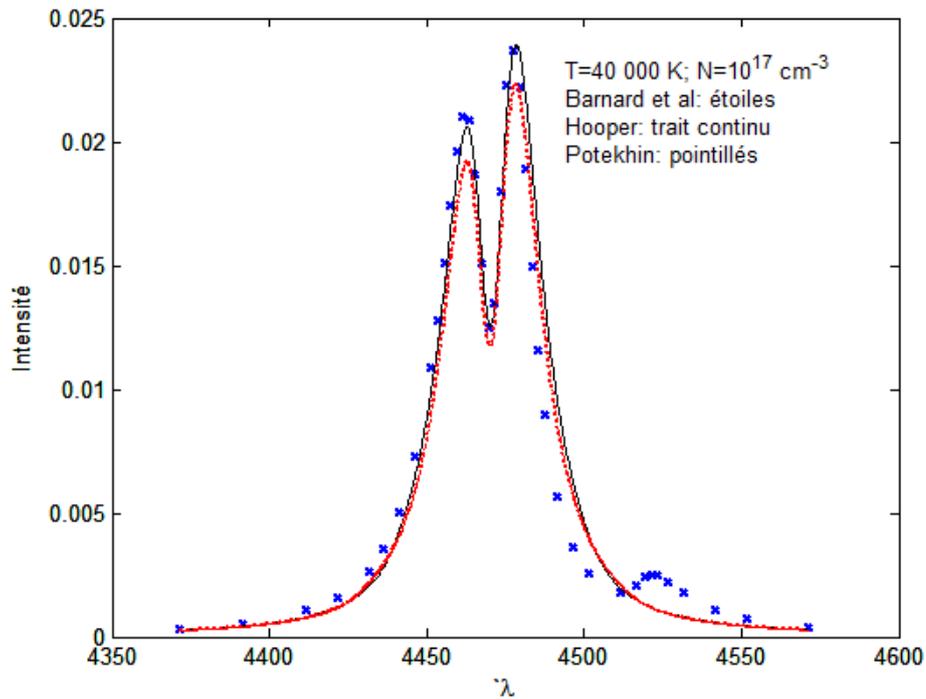


Fig. III.2 Comparaison de profils de raie théoriques calculés par Barnard *et al* avec les nôtres calculés avec deux fonctions de distribution différentes du microchamp électrique (Hooper et Potekhin)

3.2.3 Variations du profil de raie en fonction de la température et de la densité du plasma

Nous calculons et traçons les courbes du profil de la raie 4471 Å avec sa composante interdite en utilisant différentes fonctions de distribution du microchamp électrique notamment celles de Hooper [10], de Halenka [11], de Potekhin [12], d'Ecker [13] et de Holtmark [14]. Nous considérons différentes catégories de plasmas constitués d'électrons et d'ions monochargés. Ces plasmas sont caractérisés par leurs températures T et densités électroniques n_e .

Nous utilisons le paramètre a défini en (I.4.60.a) et qui est proportionnel à $\frac{n_e^{1/6}}{T^{1/2}}$. Il a été précédemment employé pour caractériser l'importance des corrélations dans l'étude des fonction de distribution du microchamp électrique. Rappelons que plus la valeur de ce paramètre est grande plus le plasma concerné est corrélé.

3.2.3.1 Variations du profil de raie en fonction de la température

Nous considérons deux valeurs différentes de la densité et pour chacune nous faisons varier la température. Dans les figures III.3 et III.4, la densité des électrons est relativement faible : $2.10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

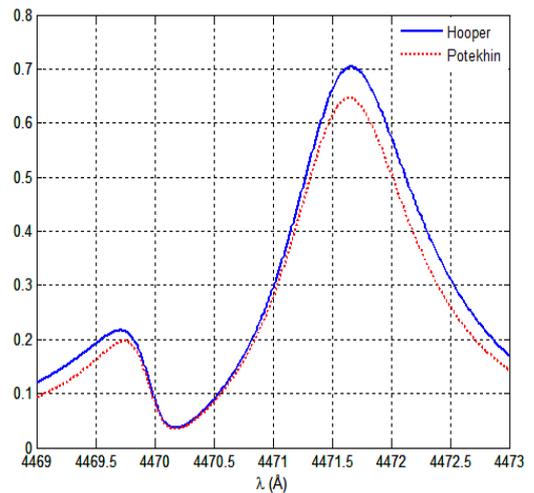
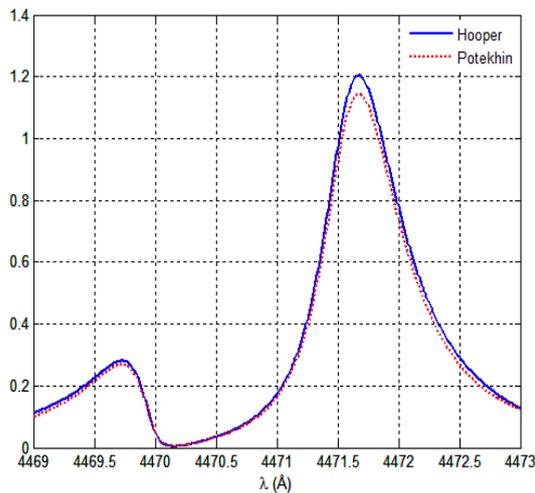


Fig. III.3 : $a=0,2$; $T= 25500 \text{ K}$; $n_e= 2.10^{15} \text{ cm}^{-3}$

Fig. III.4 : $a= 0,8$; $T= 1600 \text{ K}$; $n_e= 2.10^{15} \text{ cm}^{-3}$

Dans les figures III.5 et III.6 suivantes, la densité choisie est relativement élevée : $7.10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

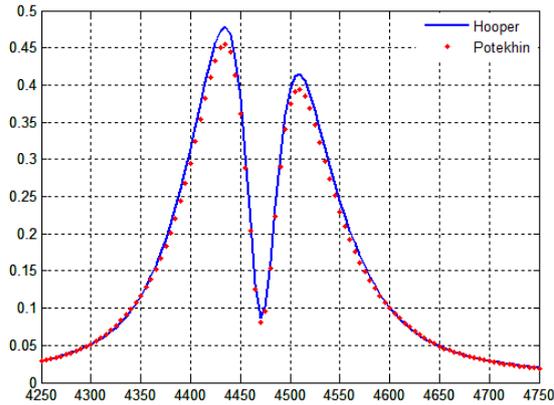


Fig. III.5 $a=0,2$: $T= 180000$ K ; $n_e= 7.10^{17}$ cm⁻³

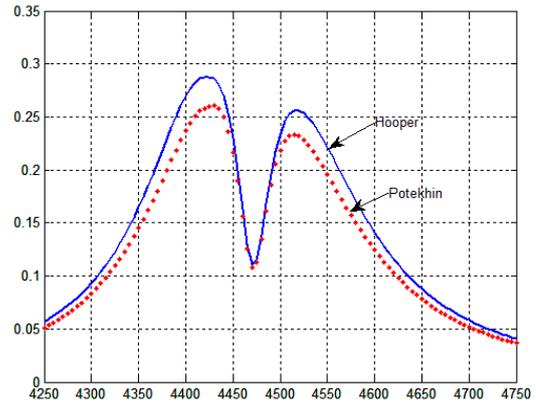


Fig. III.6 $a=0,8$: $T= 11\ 200$ K ; $n_e= 7.10^{17}$ cm⁻³

Pour une même valeur de la densité, la forme de la courbe varie peu. Nous avons choisi deux fonctions de distribution du microchamp électrique obtenues différemment : par un calcul théorique et par la méthode de simulation. La comparaison des courbes représentées dans ces quatre figures montre qu'à plus faible densité et plus faible température (fig. III.3) les écarts entre les deux séries de résultats (expérimentaux et théoriques) sont les plus faibles. En comparant les figures III.3 et III.4, d'une part et III.5 et III.6 d'autre part, on remarque une augmentation de ces écarts lorsque la température diminue, c'est-à-dire lorsque les corrélations deviennent plus importantes. Cette augmentation des écarts entre les profils de raie est plus importante pour la composante interdite.

Les différentes fonctions de distribution du microchamp électrique utilisées conduisent à des écarts d'importance variable.

3.2.3.2 Variations du profil de raie en fonction de la densité

Dans les figures III.7- III.10, nous avons fixé la température à 20 000 K et avons fait varier la densité.

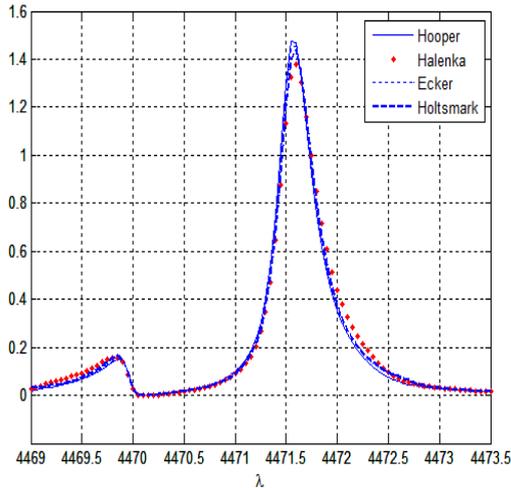


Fig. III.7 $a=0,2 : n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

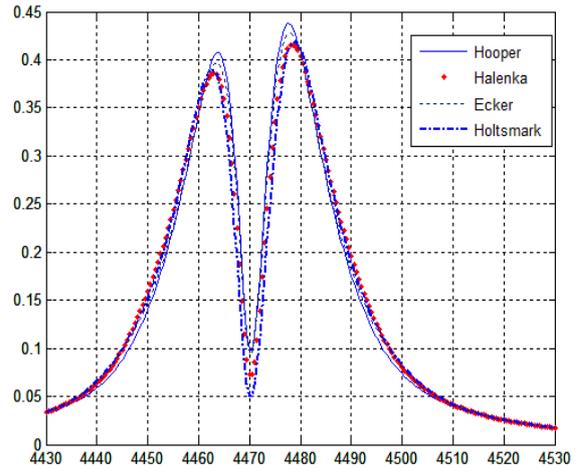


Fig. III.8 $a=0,4 : n = 6.10^{16} \text{ cm}^{-3}$

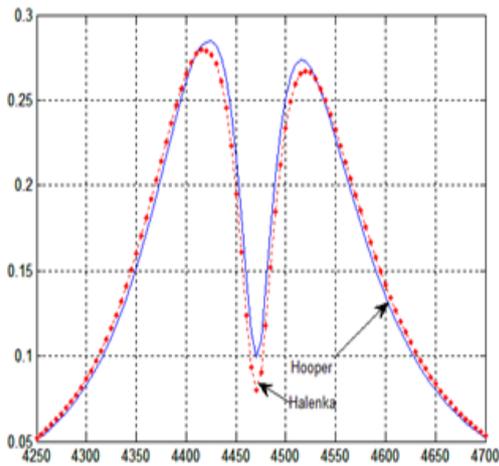


Fig. III.9 $a=0,6 : n = 7.10^{17} \text{ cm}^{-3}$

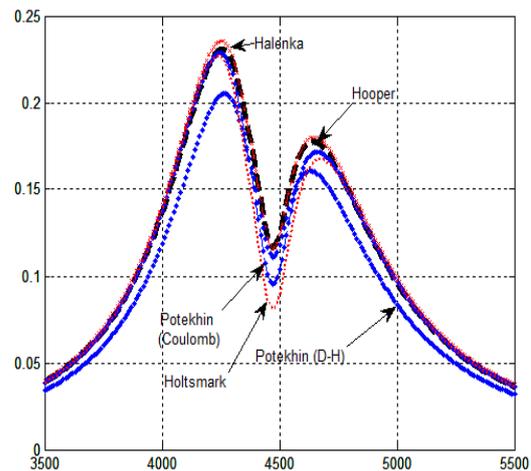


Fig. III.10 $a=0,8 : n = 4.10^{18} \text{ cm}^{-3}$

Le creux du profil entre les deux composantes remonte au fur et à mesure que la densité augmente. Aux faibles densités (fig. III.7), les deux composantes sont distinctes et la composante interdite est moins importante. Lorsque la densité augmente, elles se déplacent toutes deux vers les grandes longueurs d'onde, mais la composante interdite se déplaçant plus vite, elles se rapprochent et tendent vers un recouvrement (fig. III.10). Comme par rapport à la température, la composante interdite est encore plus sensible que la composante permise par rapport aux variations de la densité. Aux densités relativement élevées, son

intensité devient supérieure à celle de la composante permise. Nous remarquons aussi que selon la fonction de distribution du microchamp électrique utilisée, les variations du profil de raie avec la densité diffèrent.

Dans cette étude de variation du profil de raie en fonction de la température et de la densité, nous constatons la dépendance de ces paramètres vis-à-vis de la fonction de distribution du microchamp électrique utilisée. Il serait alors intéressant d'étudier de manière plus approfondie l'impact du choix de la fonction de distribution du microchamp électrique sur les paramètres Stark utilisés dans l'analyse spectroscopique.

3.3 Influence du choix de la fonction de distribution du microchamp électrique sur les paramètres d'élargissement de Stark

Cette étude a fait l'objet d'un article publié dans la revue *Physica Scripta* [15]. Dans la suite, nous commentons l'article concerné avant de le présenter.

3.3.1 Commentaire de l'article

Nous avons étudié l'influence des fonctions de distribution du microchamp électrique utilisées dans le calcul des paramètres d'élargissement et de déplacement du profil des raies spectrales. Nous nous sommes particulièrement intéressés à la raie 4471 \AA de l'hélium neutre et à sa composante interdite. Pour cela, nous avons utilisé les fonctions de distributions du microchamp électrique de Holtmark, d'Ecker, de Hooper, de Potekhin et de Halenka. Ces fonctions de distributions sont établies sur la base d'hypothèses admises selon le type de plasma caractérisé par sa densité et sa température. Ces grandeurs expriment l'importance des corrélations. Nous avons procédé à une étude comparative entre les fonctions de distribution. Ce qui nous a permis d'indiquer, pour cette raie, la fonction de distribution du microchamp électrique à utiliser selon le type de plasma.

Dans cet article, nous avons d'abord passé en revue les différentes fonctions de distribution du microchamp électrique utilisées, allant du premier modèle, le plus simple, à l'un des plus récents basé sur la simulation numérique.

Les approximations faites pour déterminer une expression littérale utilisable de la fonction de distribution du microchamp électrique sont analysées et les plasmas concernés précisés. Une étude comparative de ces différentes théories est ensuite effectuée. Nous avons en particulier étudié les variations de la fonction de distribution du microchamp électrique en fonction de la densité des particules pour une valeur fixée de la température et ses variations en fonction de la température, pour une valeur fixée de la densité. La fonction de distribution du microchamp électrique est beaucoup plus sensible à la densité qu'à la température. Ce qui suggère d'étudier l'effet des corrélations qui croissent avec la densité des particules.

Différentes fonctions de distribution du microchamp électrique ont été successivement introduites dans l'expression littérale du profil de la raie 4471 Å de l'hélium neutre pour son calcul numérique. Nous avons utilisé les résultats de l'Approximation du Chemin Classique (Classical Path Approximation) pour le calcul du profil de la raie émise par l'atome, avec sa composante interdite. L'influence du choix de la fonction de distribution du microchamp électrique a ainsi été mise en évidence. Nous en avons déduit les paramètres liés à l'élargissement et au déplacement pour montrer plus clairement l'impact de ce choix. Les paramètres étudiés sont :

- le maximum de l'intensité ;
- les déplacements de chacune des composantes (permise et interdite) ;
- le rapport des maxima d'intensité et la largeur à mi-hauteur de la composante interdite dans le cas des raies séparées ou de l'ensemble des deux composantes lorsqu'il y a recouvrement.

Ces paramètres ont été mesurés pour des plasmas de degrés de corrélation différents en utilisant les différentes fonctions de distribution du microchamp électrique. Nous avons montré que les fonctions de distribution du microchamp électrique à introduire dans les calculs dépendent des phénomènes physiques qui

ont lieu dans le plasma, notamment des corrélations. En effet, des écarts assez importants ont été notés dans certains cas entre différentes fonctions de distribution, tandis que des écarts faibles sont relevés dans d'autres cas, selon le type de plasma caractérisé par sa densité de particules et par sa température.

Vu que la fonction de distribution de Hooper est utilisée par beaucoup d'auteurs [4 ; 7 ; 16 ; 17] dans le calcul théorique du profil de raie, nous l'avons utilisée comme référence dans une étude comparative (cf Tableau 1).

3.3.2 L'article

Des soucis de préservation des droits d'auteur ne nous autorisent pas à exposer l'article intégralement. Nous n'en indiquons que la référence et le résumé:

Stark broadening parameters calculation of the allowed 4471Å line and forbidden 4470Å component of neutral helium with different electric microfield distribution functions

I G Faye, S Diallo, M S Tall, I Diédhiou, L Gomis and C S Diatta

Laboratoire de Physique des Plasmas et Recherches Interdisciplinaires, Département de Physique, Université Cheikh AntaDiop de Dakar, BP 5393 Dakar-Fann, Dakar, Senegal

E-mail: igfaye@hotmail.com

Received 31 May 2011

Accepted for publication 17 October 2011

Published 22 November 2011

Online at stacks.iop.org/PhysScr/84/065503

Abstract

The influence of an electric microfield distribution function (EMDF) on line shapes and on Stark broadening parameters is studied. For this purpose, we use different EMDFs obtained by theoretical calculations and computer simulation methods to calculate the allowed 4471Å neutral helium line and its forbidden 4470Å component. Correlation effects are shown by considering different categories of plasmas, weakly coupled plasmas and strongly coupled plasmas, with large gaps of temperature and density.

PACS numbers: 52.70.-m, 07.57.-c, 95.55.Qf, 95.75.Fg, 71.45.Gm

Conclusion du chapitre 3

Il ressort de cette étude que les fonctions de distribution du microchamp électrique de Hooper et de Halenka peuvent être utilisées indifféremment dans les calculs du profil de raie pour les plasmas contenant en majorité des ions mono chargés et dont la température est comprise entre 5000 K et 40000 K, avec une densité inférieure à $6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Elles prennent en compte les corrélations de la même manière et donnent des résultats plus proches des résultats expérimentaux que les autres fonctions de distribution du microchamp électrique étudiées. Le modèle de simulation informatique de Potekhin, basée sur la méthode statistique de Monte Carlo, donne des résultats très proches de ceux obtenus théoriquement, avec l'approximation coulombienne du potentiel d'interaction des ions dans les plasmas les moins corrélés ; tandis que pour les plasmas plus corrélés, l'approximation de Debye pour le potentiel électrique donne de meilleurs résultats. Mais pour le calcul des paramètres d'élargissement de la raie et de déplacement dû à l'effet Stark du microchamp électrique, on peut utiliser indifféremment ces trois modèles cités; les écarts notés sur les résultats sont assez faibles pour cette catégorie de plasma.

Le modèle de simulation de Potekhin conduit à des résultats plus précis avec un potentiel coulombien qu'avec un potentiel du type de Debye pour les plasmas basse-température et basse-densité. Pour les plasmas de haute densité, c'est le contraire au niveau des ailes de la raie ; tandis que le modèle de Debye-Hückel donne des résultats plus précis dans la vallée, entre les deux pics des composantes de la raie. Lorsque les corrélations deviennent assez importantes, les résultats obtenus avec ce modèle de fonction de distribution du microchamp électrique, qui est prévu aussi bien pour les plasmas faiblement corrélés que pour les plasmas fortement corrélés, s'éloignent de manière notoire des résultats obtenus avec les fonctions de distribution du microchamp électrique théoriques, prévues pour les plasmas faiblement corrélés. Cela suggère une limite d'applicabilité des modèles théoriques présentés et la nécessité d'utiliser

d'autres modèles théoriques de fonction de distribution du microchamp prévus à cet effet [18].

BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE 3

- [1] Martin W. C., *J. Res. N.B.S.* **A64** (1960)
- [2] C. C. Lin and R. G. Fowler, *Ann. Phys.* **15**, 461 (1961)
- [3] L. J. Shamey, Ph.D. thesis, Univ. Colorado (1969)
- [4] A. J. Barnard, J. Cooper and L. J. Shamey, *Astronomy and Astrophysics* **1**, 28 (1969)
- [5] Griem, H. R., Baranger, M., Kolb, A. C., and Oertel, G. *Phys. Rev.* **125**, 177 (1962)
- [6] Griem H. R., *Plasma Spectroscopy*, (Mc Graw Hill Book Co., N. Y., 1964)
- [7] H. R. Griem, *The Astrophysical Journal* **154**, 1111 (1968)
- [8] C. S. Diatta, Thèse de Doctorat d'Etat. *Etude des profils des raies spectrales de l'atome d'Hélium élargies et déplacées par effet Stark dans les plasmas d'arc*- Orléans (France). UER de Sciences Fondamentales et Appliquées (1977).
- [9] J. Ramette, Thèse de 3^{ème} cycle. *Etude expérimentale de l'élargissement par effet Stark des raies spectrales He I, $\lambda = 4471,48 \text{ \AA}$ et He I, $\lambda = 4470,04 \text{ \AA}$ émises par un plasma* (1973).
- [10] C. F. Hooper, Jr., *Phys. Rev.*, **149**, 77 (1966); *Phys. Rev.*, **165**, 215 (1968)
- [11] J. Halenka, W. Olchava, B. Grabowski et F. Gajda, *J.Q.S.R.T.*, **74**, 539 (2002)
- [12] A. Y. Potekhin, G. Chabrier et D. Gilles, *Phys. Rev. E* **65**, 036412 (2002)
- [13] G. Ecker, *Z. Phys.*, **148**, 593 (1957)
- [14] J. Holtzmark, *Ann. Physik*, **58**, 577 (1919)
- [15] I. G. Faye, S. Diallo, M. S. Tall, I. Diédhiou, L. Gomis and C. S. Diatta, *Physica Scripta* **84** (2011), [doi:10.1088/0031-8949/84/06/065503](https://doi.org/10.1088/0031-8949/84/06/065503).
- [16] C. R. Vidal, J. Cooper and E. W. Smith, *J.Q.S.R.T.* **10**, 1011 (1970)
- [17] A. J. Barnard, J. Cooper et E. W. Smith, *J.Q.S.R.T.* **14**, 1025 (1974)
- [18] C. A. Iglesias, J. L. Lebowitz and D. MacGowan, *Phys. Rev. A*, **28**, 1667 (1983)

CONCLUSION GENERALE

Dans cette Thèse nous avons étudié l'influence du choix de la FDME sur le profil de raie, et en particulier sur les paramètres Stark : élargissement, déplacement ... Nous avons montré l'importance de la prise en compte des corrélations dans ce choix. Le profil de la raie 4471 Å de l'Hélium neutre a été utilisé pour cette étude.

Il ressort de ce travail que, pour des plasmas dont la densité est inférieure à $6.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et la température comprise entre 5000 K et 40000 K, les FDME théoriques de Hooper et d'Halenka peuvent être utilisées presque indifféremment, si le plasma contient majoritairement des ions monochargés. Ces deux FDME prennent en compte les corrélations de la même manière. Par contre la FDME de Potekhin, obtenue par simulation peut conduire à des résultats qui s'écartent de ceux obtenus avec les modèles théoriques, selon le type de potentiel (coulombien ou de Debye) modélisé pour des plasmas faiblement corrélés. Si le plasma considéré est fortement corrélé, les écarts deviennent très importants. Cela permet de montrer les limites des modèles théoriques prévus pour traiter des plasmas où les corrélations ne sont pas importantes. Ce travail a permis de montrer aussi que la composante interdite de la raie étudiée est plus sensible à la densité et à la température que la composante permise. Cette composante interdite, contribue même de manière prépondérante dans l'élargissement de la raie, lorsque la densité du plasma est suffisamment élevée à une température donnée. Ce qui montre que les corrélations favorisent de manière non négligeable la violation des règles de sélection régissant les transitions radiatives.

Pour alléger les calculs du profil de raie, nous avons adopté plusieurs approximations dont la réalisation de l'Equilibre Thermodynamique, l'approximation des Impacts pour les électrons, Quasi statique pour les ions ainsi que celle du Chemin Classique pour tous les perturbateurs. Les résultats de calcul du profil de raie, et par conséquent celui des paramètres Stark, portent

certainement les marques de ces approximations. Un traitement plus complet prendrait en considération, entre autres exigences, le mouvement des ions, la théorie des Systèmes Hors d'Equilibre et considèrerait les corrélations d'ordre supérieur à deux au lieu des fonctions de corrélations binaires utilisées dans le calcul des FDME. L'utilisation de FDME prévues pour les plasmas fortement corrélés comme celle d'Iglesias *et al.* devrait apporter une plus grande satisfaction, notamment pour des plasmas fortement corrélés. Mais, vu le nombre important des paramètres qui entrent en jeu, les équations obtenues dans les différentes étapes du calcul nécessiteront toujours des approximations pour pouvoir être utilisées. La simulation informatique semble être une piste prometteuse pour le diagnostic des plasmas. Elle est favorisée en cela par le perfectionnement continu des ordinateurs dont les capacités croissantes permettent de plus en plus d'augmenter la taille des cellules de base définies dans la simulation, et donc de s'approcher de plus en plus des valeurs statistiques réelles des grandeurs physiques telles que le microchamp électrique.

ANNEXE: PROGRAMMES DES CALCULS NUMERIQUES EN MATLAB

A) CALCULS DES Fonctions de Distribution du Microchamp Electrique

A.1 FDME de Holtsmark

```
function hh=holtsm(x)
global E; e=E;
hh=(2./pi).*e.*x.*exp(-x.^(3/2)).*sin(e.*x);
function H=holtsmPn(e)
global E Xmin Xmax Pas; e=E;xmin=Xmin;xmax=Xmax;pas=Pas;
H=quad('holtsm',xmin,xmax,pas);
```

A.2 FDME d'Ecker

```
function W=Ecker_curve(bmax,xmax,ymax,d)
global B D Xmax Ymax;
D=d;Xmax=xmax;Ymax=ymax;
b=10^(-4):0.1:bmax;
[n m]=size(b);W=zeros(n,m);
for i=1:n,
    for j=1:m,
        B=b(i,j);
        W(i,j)=Ecker(b(i,j));
    end;
end;
plot(b,W);grid;
function W=Ecker(b)
global B D Ymax Xmax;
b=B;d=D;ymax=Ymax;xmax=Xmax;
H=quad('Eck_h',0,ymax);
W=(2/pi).*b.*(d.^2).*H;
function h=Eck_h(y)
global B D Xmax;
b=B;d=D;xmax=Xmax;
[n m]=size(y);gg=zeros(n,m);g=zeros(n,m);h=zeros(n,m);
for i=1:n,
    for j=1:m,
        gg(i,j)=quad('Eck_f',y(i,j),xmax);
        g(i,j)=(3/2).*(y(i,j).^2).*gg(i,j);
        h(i,j)=exp(-d.*g(i,j)).*y(i,j).*sin(b.*(d.^2).*y(i,j));
```

```

end;
end;
function f=Eck_f(x)
f=(1-(x.^(-1)).*sin(x)).*(x.^(-1/2));

```

A.3 Fonction de distribution de Hooper du microchamp des ions en un point neutre (1^{ère} Approximation)

```

function i1n=Hoop_i1n_Ions(x)
global LL aa Alf; l=LL;a=aa;alf=Alf;
A=1./(alf.^2-2); B=(alf.^2-1).*A;
e1=exp(-sqrt(2).*a.*x); e2=exp(-alf.*a.*x);
G=A.*((1./(x.^2)).*((alf.^2-1).*e1-e2)+(a./x).*(sqrt(2).*(alf.^2-1).*e1-alf.*e2));
q=B.*((1./(x.^2)).*(e1-e2)-(a./x).*(alf.*e2-sqrt(2).*e1));
i1n=3.*(x.^2).*((sin(l.*G)/(l.*G))-(sin(l.*q)/(l.*q)));
function I1n=Hoop_I1n_Ions(l)
global LL Xmin Xmax Pas; xmin=Xmin;xmax=Xmax;pas=Pas;
[n m]=size(l);I1n=zeros(n,m);
for i=1:n,
    for j=1:m,
        LL=l(i,j);
        I1n(i,j)=quad('Hoop_i1n_Ions',xmin,xmax,pas);
    end;
end;
function pp1n=Hoop_pp1n_Ions(l)
global aa;global Alf; global E; a=aa; alf=Alf; e=E;
gam=(a./(4.*(alf.^2-2).^2)).*(alf.^5+2.*(1-2.*sqrt(2)).*alf.^4+3.*alf.^3+8.*(sqrt(2)-1).*alf.^2-6.*alf+4.*(2-
sqrt(2)));
I1n=Hoop_I1n_Ions(l); T1n=exp(-gam.*l.^2+I1n); pp1n=l.*sin(e.*l).*T1n;
function P1n=Hoop_P1n_Ions(e)
global Lmin Lmax Pas E; lmin=Lmin;lmax=Lmax;pas=Pas;e=E;
p1=quadr('Hoop_pp1n_Ions',lmin,lmax,pas); P1n=((2.*e)/pi).*p1;
function y=Hoop_plot_P1n_Ions(emin,emax,a,alf,xmin,xmax,lmin,lmax,pas)
global aa Alf E; global Xmin Xmax; global Lmin Lmax; global Pas;
aa=a; Alf=alf; Xmin=xmin;Xmax=xmax; Lmin=lmin;Lmax=lmax; Pas=pas;
e=emin:0.1:emax;
[n m]=size(e);y=zeros(n,m);
for i=1:n,
    for j=1:m,
        E=e(i,j);
        y(i,j)=Hoop_P1n_Ions(e(i,j));
    end;
end;

```

```

end;
end;
plot(e,y);xlabel('\epsilon');ylabel('P(\epsilon)');grid;
function y=Hoop_DBplot_P1n_Ions(emin,emax,xmin,xmax,lmin,lmax,pas)
global aa Alf E; global Xmin Xmax; global Lmin Lmax; global Pas;
Xmin=xmin;Xmax=xmax; Lmin=lmin;Lmax=lmax; Pas=pas;
e=emin:0.1:emax;
[n m]=size(e);y=zeros(n,m);z=zeros(n,m);
for i=1:n,
for j=1:m,
E=e(i,j);
a=0.2;alf=2.5;
aa=a;Alf=alf;
y(i,j)=Hoop_P1n_Ions(e(i,j));
a=0.8;alf=1.7;
aa=a;Alf=alf;
z(i,j)=Hoop_P1n_Ions(e(i,j));
end;
end;
plot(e,y,'k');xlabel('\epsilon');ylabel('P(\epsilon)');grid;hold on;
plot(e,z,'r');

```

A.4 Fonction de distribution de Hooper du microchamp des ions en un point chargé (Approximation d'ordre 2)

```

function q=Hoop_qch_Ions(x)
global aa Alf;
a=aa;alf=Alf;
A=1./(alf.^2-2);
B=(alf.^2-1).*A;
e1=exp(-sqrt(2).*a.*x);
e2=exp(-alf.*a.*x);
q=B.*((1./(x.^2)).*(e1-e2)-(a./x).*(alf.*e2-sqrt(2).*e1));
function S=hoop_Sch_Ions(x)
global aa Alf;
a=aa;alf=Alf;
A=1./(alf.^2-2);
B=(alf.^2-1).*A;
e1=exp(-sqrt(2).*a.*x);
e2=exp(-alf.*a.*x);
S=((a.^2)/(3.*x)).*B.*(e2-e1);

```

function G=Hoop_Gch_Ions(x)

global aa Alf;

a=aa;alf=Alf;

A=1./(alf.^2-2);

e1=exp(-sqrt(2).*a.*x);

e2=exp(-alf.*a.*x);

G=A.*((1./(x.^2)).*((alf.^2-1).*e1-e2)+(a./x).*(sqrt(2).*(alf.^2-1).*e1-alf.*e2));

function F=Hoop_Fch_Ions(x)

global aa Alf;

a=aa;alf=Alf;

A=1./(alf.^2-2);

e1=exp(-sqrt(2).*a.*x);

e2=exp(-alf.*a.*x);

F=((a.^2)./(3.*x)).*A.*(e2-(alf.^2-1).*e1);

function b=hoop_b(x)

global aa Alf;

a=aa;alf=Alf;

b=((a.^2)./(3.*x)).*exp(-alf.*a.*x);

function h=hoop_h(x)

global aa LL;

a=aa;l=LL;

S=hoop_Sch_Ions(x);

G=Hoop_Gch_Ions(x);

q=hoop_qch_Ions(x);

I=besseli(1./2,a.*sqrt(2).*x);

jG=besselj(0,l.*G);

jq=besselj(0,l.*q);

b=hoop_b(x);

h=(x^(3./2)).*exp(S).*I.*(exp(-b).*jG-jq);

function gg=hoop_ggch_Ions(y)

global aa LL;

a=aa;l=LL;

S=hoop_Sch_Ions(y);

G=hoop_Gch_Ions(y);

q=hoop_qch_Ions(y);

K=besselk(1./2,a.*sqrt(2).*y);

jG=besselj(0,l.*G);

jq=besselj(0,l.*q);

b=hoop_b(y);

gg=(y^(3./2)).*exp(S).*K.*(exp(-b).*jG-jq);

```

function g=hoop_g(x)
global Xmax Pas;
xmax=Xmax;pas=Pas;
g=quad('hoop_ggch_Ions',x,xmax,pas);
function k=hoop_k(x)
global aa;
a=aa;
S=hoop_Sch_Ions(x);
I=besseli(1./2,a.*sqrt(2).*x);
b=hoop_b(x);
k=(x.^(3./2)).*exp(S).*I.*(exp(-b)-1);
function tt=hoop_tt(y)
global aa;
a=aa;
S=hoop_Sch_Ions(y);
K=besselk(1./2,a.*sqrt(2).*y);
b=hoop_b(y);
tt=(y.^(3./2)).*exp(S).*K.*(exp(-b)-1);
function t=hoop_t(x)
global Xmax Pas;
xmax=Xmax;pas=Pas;
t=quad('hoop_tt',x,xmax,pas);
function ff0=hoop_ff0(x)
h=hoop_h(x);
g=hoop_g(x);
k=hoop_k(x);
t=hoop_t(x);
ff0=h.*g-k.*t;
function ggpk=hoop_ggpk(y)
global aa LL KK;
a=aa;l=LL;k=KK;
S=hoop_Sch_Ions(y);
G=hoop_Gch_Ions(y);
q=hoop_qch_Ions(y);
K=besselk(k+1./2,a.*sqrt(2).*y);
jG=besselj(k,l.*G);
jq=besselj(k,l.*q);
b=hoop_b(y);
ggpk=(y.^(3./2)).*exp(S).*K.*(exp(-b).*jG-jq);
function gpk=hoop_gpk(x)

```

```

global Xmax Pas;
xmax=Xmax;pas=Pas;
gpk=quad('hoop_ggpk',x,xmax,pas);
function hpk=hoop_hpk(x)
global aa LL KK;
a=aa;l=LL;k=KK;
S=hoop_Sch_Ions(x);
G=hoop_Gch_Ions(x);
q=hoop_qch_Ions(x);
I=besseli(k+1./2,a.*sqrt(2).*x);
jG=besselj(k,l.*G);
jq=besselj(k,l.*q);
b=hoop_b(x);
hpk=(x.^(3./2)).*exp(S).*I.*(exp(-b).*jG-jq);
function ffk=hoop_ffk(x)
hpk=hoop_hpk(x);
gpk=hoop_gpk(x);
ffk=hpk.*gpk;
function fk=hoop_fk(l)
global Xmin Xmax LL Pas;
xmin=Xmin;xmax=Xmax;pas=Pas;
[n m]=size(l);fk=zeros(n,m);
for i=1:n,
    for j=1:m,
        LL=l(i,j);
        fk(i,j)=quad('hoop_ffk',xmin,xmax,pas);
    end;
end;
function f0=hoop_f0(l)
global Xmin Xmax LL Pas;
xmin=Xmin;xmax=Xmax;pas=Pas;
[n m]=size(l);f0=zeros(n,m);
for i=1:n,
    for j=1:m,
        LL=l(i,j);
        f0(i,j)=quad('hoop_ff0',xmin,xmax,pas);
    end;
end;
function ilch=Hoop_ilch_Ions(x)
global LL;

```

```

l=LL;
G=hoop_Gch_Ions(x);
q=hoop_qch_Ions(x);
F=hoop_Fch_Ions(x);
S=hoop_Sch_Ions(x);
i1ch=3.*(x.^2).*(exp(F).*(sin(l.*G)/(l.*G)-1)-exp(S).*(sin(l.*q)/(l.*q)-1));
function I1ch=Hoop_I1ch_Ions(l)
global LL Xmin Xmax Pas;
xmin=Xmin;xmax=Xmax;pas=Pas;
[n m]=size(l);I1ch=zeros(n,m);
for i=1:n,
    for j=1:m,
        LL=l(i,j);
        I1ch(i,j)=quad('Hoop_i1ch_Ions',xmin,xmax,pas);
    end;
end;
function I2=hoop_I2ch_Ions(l)
global aa KK Kmax;
a=aa; kmax=Kmax;
f0=hoop_f0(l);
J0=-3.*(a.^2).*f0;
jJk=0;
for k=1:kmax,
    KK=k;
    fk=hoop_fk(l);
    jJk=jJk+((-1).^(k+1)).*3.*(2.*k+1).*(a.^2).*fk;
end;
Jk=jJk;
I2=J0+Jk;
function pp2ch=Hoop_pp2ch_Ions(l)
global aa Alf E;% LL;
a=aa; alf=Alf; e=E;% l=LL;
gam=(a./(4.*(alf.^2-2).^2)).*(alf.^5+2.*(1-2.*sqrt(2)).*alf.^4+3.*alf.^3+8.*(sqrt(2)-1).*alf.^2-6.*alf+4.*(2-
sqrt(2)));
I1ch=Hoop_I1ch_Ions(l);
I2ch=Hoop_I2ch_Ions(l);
T2ch=exp(-gam.*l.^2+I1ch+I2ch);
pp2ch=l.*sin(e.*l).*T2ch;
function P2ch=Hoop_P2ch_Ions(e)
global Lmin Lmax Pas E;

```

```

lmin=Lmin;lmax=Lmax;pas=Pas;e=E;
p2=quad('Hoop_pp2ch_Ions',lmin,lmax,pas);
P2ch=((2.*e)/pi).*p2;
function y=Hoop_plot_P2ch_Ions(emin,emax,a,alf,kmax,xmin,xmax,lmin,lmax,pas)
global aa Alf E Xmin Xmax Lmin Lmax Pas Kmax;
aa=a; Alf=alf; Xmin=xmin;Xmax=xmax; Lmin=lmin;Lmax=lmax; Pas=pas; Kmax=kmax;
e=emin:0.2:emax;
[n m]=size(e);y=zeros(n,m);
for i=1:n,
    for j=1:m,
        E=e(i,j);
        y(i,j)=Hoop_P2ch_Ions(e(i,j));
    end;
end;
plot(e,y);xlabel('\epsilon');ylabel('P2(\epsilon)');grid;

```

A.5 FDME de Potekhin en un point neutre: cas du potentiel électrique coulombien non couplé ni diffusé

```

function y=Potekhin_dist_neut(bmax,Gam)

```

```

global GGam; GGam=Gam;
b=1e-5:0.1:bmax;
[n m]=size(b);y=zeros(n,m);
for i=1:n,
    for j=1:m,
        y(i,j)=Potekhin_P1n_Ions(b(i,j));
    end;
end;
plot(b,y);xlabel('\beta');ylabel('P1(\beta)');grid;

```

```

function P1n=Potekhin_P1n_Ions(b)

```

```

q0=Pot_q(0); q1=Pot_q(1); q2=Pot_q(2); q3=Pot_q(3);
N1=q0.*(b.^3)-1.33.*(b.^4.5))+b.^6; Np1=3.*q0.*(b.^2)-5.985.*(b.^3.5))+6.*(b.^5);
D1=q1+q2.*(b.^2)+q3.*(b.^3)-(1/3).*b.^4.5))+b.^6; Dp1=2.*q2.*b+3.*q3.*(b.^2)-1.5.*(b.^3.5))+6.*(b.^5);
P1n=(Np1.*D1-N1.*Dp1)/(D1.^2);

```

```

function qn=Pot_q(n)

```

```

global GGam; Gam=GGam;
a_n=Pot_a(n); b_n=Pot_b(n); g_n=Pot_g(n);
qn=a_n./((1+b_n.*sqrt(Gam)).^g_n);

```

```

function b_n=Pot_b(n)

```

```

if n==0,
    b_n=0.41;
elseif n==1,
    b_n=1.54;
elseif n==2,

```

```

        b_n=0.58;
    else
        b_n=0.6;
    end;

function a_n=Pot_a(n)
if n==0,
    a_n=14.6;
elseif n==1,
    a_n=103.2;
elseif n==2,
    a_n=11.127;
else
    a_n=16.178;
end;

function g_n=Pot_g(n)
if n==0,
    g_n=0.707;
elseif n==1,
    g_n=1.64;
elseif n==2,
    g_n=0.572;
else
    g_n=0.915;
end;

```

B) CALCULS DES PROFILS DE RAIE

Ci-dessous est présenté, à titre d'exemple, le programme conçu pour le calcul et la comparaison des profils de raie obtenus en utilisant différentes FDME : Hooper, Potekhin et Halenka

```

function CPA_Prof_Hooper_Potekhin_Halenka_2(a,ks1,ks2,ks3,ks4,h1,h2)
global ww cc EE0 NNe ee Kks1 Kks3 Kks2 Kks4 H1 H2 TT aa ss;
H1=h1;H2=h2;Kks2=ks2;Kks4=ks4;Kks1=ks1;Kks3=ks3;
e=4.8e-10; ee=e; Ne=2e15; NNe=Ne; E0=2.61*e*(Ne^(2/3)); EE0=E0;
Lp0=4471.5; L0=Lp0.*1e-8; c=3e10; cc=c; s=a;ss=s;
L_G=4468:0.05:4474;
L=L_G.*1e-8;
if a==0.2,
    T=25457;TT=T;aa=a;
    Gam=0.0399;
elseif a==0.4,
    T=6364;TT=T;aa=a;
    Gam=0.0798;
elseif a==0.6,
    T=2828.5;TT=T;aa=a;
    Gam=0.1197;
else

```

```

T=1591;TT=T;aa=a;
Gam=0.1596;
end;

L_m_H=0;L_m_P=0;
for m=-2:2,
[r q]=size(L);w=zeros(r,q);Im_h=zeros(r,q);Im_H=zeros(r,q);Im_P=zeros(r,q);L_m_h=zeros(r,q);
L_m_H=zeros(r,q);L_m_P=zeros(r,q);A=zeros(r,q);
for i=1:r,
for j=1:q,
w(i,j)=2*pi*c./(L(i,j));ww=w(i,j);
A(i,j)=(L(i,j)-L0)/E0;
Im_H(i,j)=CPA_Im_Hoop(m);% Hooper
Im_P(i,j)=CPA_Im_Pot(m,Gam);% Potekhin
Im_h(i,j)=CPA_Im_Hel(m);% Helenka
L_m_h(i,j)=L_m_h(i,j)+(2.*pi.*c.*E0./((12.*pi.*L(i,j).^2))).*Im_h(i,j).*1e-8;
L_m_H(i,j)=L_m_H(i,j)+(2.*pi.*c.*E0./((12.*pi.*L(i,j).^2))).*Im_H(i,j).*1e-8;
L_m_P(i,j)=L_m_P(i,j)+(2.*pi.*c.*E0./((12.*pi.*L(i,j).^2))).*Im_P(i,j).*1e-8;
end;
end;
end;
L_L_H=L_m_H; L_L_P=L_m_P; L_L_h=L_m_h;
S_H=pi.*L_L_H; S_P=pi.*L_L_P; S_h=pi.*L_L_h;
plot(l_G,S_H,'k');hold on;plot(l_G,S_P,'k');hold on;plot(l_G,S_h,'-r');grid;

```

function Im_H=CPA_Im_Hoop(m)

```

global mm aa; mm=m; a=aa; b_min=1e-5;
b=b_min:0.1:8;

```

W_H=Hooper_datas(a);

```

[r q]=size(b);Ipm=zeros(r,q);y=zeros(r,q);
for i=1:r,
for j=1:q,
Ipm(i,j)=CPA_Ipm(b(i,j));
y(i,j)=W_H(i,j).*Ipm(i,j);
end;
end;
Im_H=trapz(b,y);

```

function Im_P=CPA_Im_Pot(m,Gam)

```

global mm ss; mm=m;b_min=1e-5;s=ss;

```

```

b=b_min:0.1:10;
[r q]=size(b);Ipm=zeros(r,q);y=zeros(r,q);W_Pot=zeros(r,q);
for i=1:r,
    for j=1:q,
        Ipm(i,j)=CPA_Ipm(b(i,j));
        W_Pot(i,j)=Potekhin_P2n_Ions(b(i,j),s,Gam);
        y(i,j)=W_Pot(i,j).*Ipm(i,j);
    end;
end;
Im_P=trapz(b,y);
function Im_h=CPA_Im_Hel(m)
global mm aa; mm=m; a=aa; b_min=1e-5;
% case: N1>>N2
% case N1<<N2
b1=b_min:0.1:3;b2=[3.2 3.4 3.6 3.8 4 4.25 4.5 4.75 5 5.5 6 6.5 7 7.5 8]; b=[b1 b2];
W_h=Halenka_datas_p(a);
[r q]=size(b);Ipm=zeros(r,q);y=zeros(r,q);
for i=1:r,
    for j=1:q,
        Ipm(i,j)=CPA_Ipm(b(i,j));
        y(i,j)=W_h(i,j).*Ipm(i,j);
    end;
end;
Im_h=trapz(b,y);
function Ipm=CPA_Ipm(b)
global cc ww mm EE0 NNe ee Kks2 Kks4 Kks1 Kks3 H1 H2 TT;
h1=H1;h2=H2; m=mm;c=cc;E0=EE0;e=ee; ks2=Kks2;ks4=Kks4;ks1=Kks1;ks3=Kks3; T=TT;
NNe=NNe;
me=9.1093897*10.^(-28); h=1.05457266.*10.^(-27); k=1.380658.*10.^(-16);
L2=4471.5e-8; L3=4470e-8; f=(4*pi/3).*sqrt(2*me/(pi*k*T))*((h/me).^2)*NNe;
w2=2*pi*c/L2; w3=2*pi*c/L3; wp=sqrt((4*pi*NNe*(e^2))./me); w_12=1.523e12;
[r
q]=size(b);Em=zeros(r,q);C22=zeros(r,q);C23=zeros(r,q);C32=zeros(r,q);w2m=zeros(r,q);w3m=zeros(r,q);
Dw2=zeros(r,q);Dw3=zeros(r,q);N1=zeros(r,q);
N2=zeros(r,q);N3=zeros(r,q);D1=zeros(r,q);D2=zeros(r,q);D3=zeros(r,q);D4=zeros(r,q);w=zeros(r,q);
E=zeros(r,q);w_b=zeros(r,q);w_23=zeros(r,q);
N=zeros(r,q);D=zeros(r,q);Ipm=zeros(r,q);Ph22=zeros(r,q);Ph33=zeros(r,q);R=zeros(r,q);fp=zeros(r,q);
for i=1:r,
    for j=1:q,
        w(i,j)=ww;

```

```

E(i,j)=E0.*b(i,j);
Em(i,j)=12*sqrt(9-m^2)*h*E(i,j)/(me*e*(w2-w3)*sqrt(5));
C22(i,j)=ks2.*sqrt(0.5*(Em(i,j).^2)/(Em(i,j).^2+1-sqrt(1+Em(i,j).^2)));
C23(i,j)=-ks3.*sqrt((0.5*(Em(i,j).^2)+1-sqrt(1+Em(i,j).^2))/(Em(i,j).^2+1-sqrt(1+Em(i,j).^2)));
C32(i,j)=-C23(i,j);
w2m(i,j)=0.5*(w2+w3)+0.5*(w2-w3).*sqrt(1+Em(i,j).^2);
w3m(i,j)=0.5*(w2+w3)-0.5*(w2-w3).*sqrt(1+Em(i,j).^2);
w_b(i,j)=w(i,j)-0.5*(w2+w3);w_23(i,j)=max(max(w2-w3,wp),w_b(i,j));
Ph22(i,j)=h1.*f.*(151*(0.5+log(abs(k*T)/(8*h*w_23(i,j)))))+173*(0.5+log(abs(k*T)/(8*h*w_12)))));
Ph33(i,j)=h2.*f.*108*(0.5+log(abs(k*T)/(8*h*w_23(i,j)))));
R(i,j)=Ph33(i,j)/Ph22(i,j); fp(i,j)=(1/pi).*Ph22(i,j);
Dw2(i,j)=(w(i,j)-w2m(i,j)); Dw3(i,j)=(w(i,j)-w3m(i,j));
N1(i,j)=ks1.*(Dw2(i,j).^2)*(C32(i,j).^2)*(C32(i,j).^2+(C22(i,j).^2).*R(i,j));
N2(i,j)=2.*Dw2(i,j).*Dw3(i,j).*C22(i,j).*C32(i,j).(1-R(i,j));
N3(i,j)=ks3.*(Dw3(i,j).^2).(C22(i,j).^2).(C22(i,j).^2+(C32(i,j).^2).*R(i,j));
D1(i,j)=((Dw2(i,j).^2).(Dw3(i,j).^2)+(Ph22(i,j).^2).(Ph33(i,j).^2));
D2(i,j)=(Dw2(i,j).^2).*((C32(i,j).^2).*Ph22(i,j)+(C22(i,j).^2).*Ph33(i,j)).^2;
D3(i,j)=2*Dw2(i,j).*Dw3(i,j).(C22(i,j).^2).(C32(i,j).^2).(Ph22(i,j)-Ph33(i,j)).^2;
D4(i,j)=ks4.*(Dw3(i,j).^2).*((C22(i,j).^2).*Ph22(i,j)+(C32(i,j).^2).*Ph33(i,j)).^2;
N(i,j)=N1(i,j)+N2(i,j)+N3(i,j)+Ph33(i,j).^2;D(i,j)=D1(i,j)+D2(i,j)+D3(i,j)+D4(i,j);
Ipm(i,j)=fp(i,j).(N(i,j)/D(i,j));
end;
end;

```

Prénoms et NOM : Ibrahima Guèye FAYE

Titre de la Thèse: ETUDE DE L'INFLUENCE DU MICROCHAMP ELECTRIQUE SUR LES
PARAMETRES
SPECTROSCOPIQUES DES PLASMAS

Résumé :

Nous avons étudié l'influence du choix de la Fonction de Distribution du Microchamp Electrique (FDME) sur le calcul des paramètres d'élargissement et de déplacement des raies.

Plusieurs fonctions de distribution obtenues théoriquement ou par simulation par les auteurs, notamment celles de Hooper, de Halenka, de Potekhin, d'Ecker et de Holtmark sont étudiées et comparées. Ces fonctions de distribution prennent différemment en charge les corrélations. Elles ont ensuite été successivement utilisées pour calculer le profil de la raie 4471 Å de l'Hélium neutre et sa composante interdite, dans l'approximation du Chemin Classique. Nous en avons déduit une étude des variations du profil de raie en fonction de la température et de la densité, puis les variations des paramètres de Stark (d'élargissement et de déplacement) en fonction des FDME.

Nous avons montré que pour des plasmas dont la densité est inférieure à $6.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et la température comprise entre 5000 K et 40000 K, les FDME de Hooper et d'Halenka, obtenues théoriquement, peuvent être utilisées presque indifféremment, si le plasma contient majoritairement des ions monochargés. Par contre, pour des plasmas faiblement corrélés, la fonction de distribution de Potekhin, obtenue par simulation, peut conduire à des résultats qui s'écartent de ceux obtenus avec les modèles théoriques étudiés, selon le type de potentiel (coulombien ou de Debye) modélisé. Ces écarts deviennent plus importants si le plasma considéré est fortement corrélé. Cela a permis de montrer les limites des modèles théoriques prévus pour traiter des plasmas où les corrélations ne sont pas importantes. Ce travail a permis de montrer aussi que la composante interdite de la raie étudiée est plus sensible que la composante permise. Cette composante interdite, contribue même de manière prépondérante dans l'élargissement de la raie, lorsque la densité du plasma est suffisamment élevée à une température donnée. Ce qui montre que les corrélations favorisent de manière non négligeable la violation des règles de sélection régissant les transitions radiatives.

Mots-clés : Fonction de distribution ; microchamp ; plasma ; corrélation ; effet Stark ; Hélium.

Name and first name : Ibrahima Guèye FAYE

Thesis title: EFFECT OF ELECTRIC MICROFIELD ON STARK BROADENING PARAMETERS IN PLASMAS

Summary:

The influence of Electric Microfield Distribution Function (EMDF) on line shapes and on Stark-broadening parameters is studied. For this purpose, we use different EMDFs obtained by theoretical calculations and computer simulation methods to calculate the allowed 4471 Å neutral helium line and its forbidden 4470 Å component. Correlation effects are shown by considering different categories of plasmas, weakly coupled plasmas and strongly coupled plasmas, with large gaps of temperature and density.

It has been shown that one can use indifferently Halenka and Hooper EMDF in line profile calculation for plasma of temperature varying between 5 000 K and 40 000 K and density less than $6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Both EMDF take account of correlations in the same way. Potekhin's Computer simulation model gives accurate results with a Coulomb potential in weakly coupled plasmas, and with a Debye-Hückel potential in more correlated EMDF. But in the calculation of Stark broadening parameters, one can use indifferently Potekhin's model of EMDF and those of Halenka and Hooper without big difference in results for this category of plasmas. With this computer simulation distribution function, Coulomb potential model gives more accurate results than Debye-Hückel potential model in LT-LD plasmas; it is the contrary in HD plasmas in the wing of the line; while Debye-Hückel model is more precise in the valley between the two peaks.

Key words : Electric Microfield Distribution Function; plasma; correlation; Stark effect; Helium; line.