

# Équation d'état d'un plasma hydrogénoïde

Charlotte Roger, J. Salmon

### ▶ To cite this version:

Charlotte Roger, J. Salmon. Équation d'état d'un plasma hydrogénoïde. Journal de Physique, 1968, 29 (7), pp.587-596. 10.1051/jphys:01968002907058701. jpa-00206693

## HAL Id: jpa-00206693 https://hal.science/jpa-00206693

Submitted on 4 Feb 2008

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés. LE JOURNAL DE PHYSIQUE

TOME 29, JUILLET 1968, PAGE 587.

#### ÉQUATION D'ÉTAT D'UN PLASMA HYDROGÉNOÏDE

#### Par C. ROGER et J. SALMON,

Conservatoire National des Arts et Métiers, Paris.

(Reçu le 18 octobre 1967.)

**Résumé.** — Nous établissons l'équation d'état d'un plasma totalement ionisé en tenant compte des trois types d'interaction en jeu (électron-électron, électron-ion, ion-ion). Nous nous limitons au cas des plasmas hydrogénoïdes par suite des simplifications remarquables qui apparaissent avec ceux-ci. Nous adoptons comme hypothèse de fermeture de l'équation aux densités doubles soit l'hypothèse R-S, soit l'hypothèse de Kirkwood. Nous éliminons les divergences en introduisant une distance de moindre approche et obtenons diverses expressions avec lesquelles nous effectuons des applications numériques.

**Abstract.** — The equation of state of a fully ionised plasma, making allowance for the three kinds of possible interaction (electron-electron, electron-ion, ion-ion) has been established. Our study has been restricted to the case of hydrogen plasmas, because of the remarkable simplifications that come out with the latter.

Both R-S's and Kirkwood's hypotheses have been taken as a closure hypothesis of the equation governing double densities. Divergences have been removed thanks to the introduction of a notion of closest possible distance, and many expressions have been obtained with which numerical applications have been made.

1. Introduction. — Dans cet article, nous nous proposons d'établir l'expression de l'équation d'état et celle de l'énergie interne d'un plasma hydrogénoïde totalement ionisé à partir de diverses hypothèses de fermeture introduites dans les équations des densités doubles à l'équilibre, mais alors que la plupart des auteurs (Guernsey [1], O'Neil [2], Teller [3]) ne traitent qu'une espèce de particules, soit les électrons, soit les ions, en considérant que les particules délaissées forment un fond continu de neutralisation, nous traitons pour notre part les électrons et les ions en tenant compte des trois types d'interaction en jeu. Par contre, nous nous limitons au plasma hydrogénoïde par suite des simplifications introduites par l'égalité des charges et celle des densités particulaires.

Comme hypothèse de fermeture de l'équation des densités doubles à l'équilibre, nous utilisons successivement l'hypothèse R-S et l'hypothèse de superposition. Ce dernier cas se subdivise lui-même en deux, selon qu'une coupure est introduite dans les intégrales qui divergent ou que la loi d'interaction électron-ion est modifiée de manière à éviter systématiquement les divergences. Le lecteur sera donc en présence de trois méthodes : la première correspondant à l'utilisation de l'hypothèse R-S sera désignée « Méthode R-S »; la seconde correspondant à l'hypothèse de superposition de Kirkwood utilisée selon la méthode mise au point par J. Yvon [4] sera désignée « Méthode K-Y »; la troisième proche de la seconde, mais différant par la modification à courte distance de la loi force électron-ion et par la substitution d'une méthode d'analyse numérique à une méthode analytique pour la résolution des équations, sera désignée « Méthode K-Y modifiée ».

Le plasma est caractérisé par une température des électrons et des ions T et une densité commune  $n_e = n_i = n$  des électrons et des ions. P désigne la pression du plasma et E son énergie interne. K est la constante de Boltzmann, e la charge du proton et  $\varepsilon_0$  la permittivité du vide. La longueur de Landau  $r_0$ et celle de Debye h sont alors données en unités MKSA par les expressions :

r

$$_{0} = \frac{e^{2}}{4\pi\varepsilon_{0}KT} \tag{1}$$

$$h = \left(\frac{\varepsilon_0 KT}{2ne^2}\right)^{1/2}.$$
 (2)

Le rapport de ces deux longueurs sera désigné par  $\alpha$  :

$$\alpha = r_0/h. \tag{3}$$

Nous serons également amenés à introduire le rayon de l'atome d'hydrogène  $a_0$  et à poser :

$$x_0 = a_0 / r_0.$$
 (4)

L'écart par rapport à l'état de gaz parfait sera représenté par les fonctions R et S telles que :

$$R = \frac{P}{2nKTV} - 1 \tag{5}$$

$$S = \frac{E}{3nKTV} - 1 \tag{6}$$

V désignant le volume occupé par le plasma.

Nous montrerons que ces deux quantités sont fonctions des seules variables réduites  $\alpha$  et  $x_0$  et qu'elles sont liées très simplement entre elles. Nous les affecterons des indices supérieurs 1, 2, 3 correspondant respectivement aux expressions obtenues au moyen de la méthode R-S, de la méthode K-Y et de la méthode K-Y modifiée. Le point de départ de notre étude est l'équation des densités doubles à l'équilibre :

$$KT \nabla_{r_{u1}} n_{uv12} - \mathbf{X}_{uv12} n_{uv12} - \int [\mathbf{X}_{ua13} n_{uva123} + \mathbf{X}_{ub13} n_{uvb123}] \, \underline{\mathrm{d}} \mathbf{r}_{3} = 0. \quad (7)$$

Dans cette équation, a et b représentent des indices fixes caractérisant les particules, a, est affecté aux ions et b aux électrons; u et v représentent des indices variables se confondant soit avec a soit avec b. Les chiffres 1, 2, 3 se rapportent aux vecteurs position  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_2$  et  $\mathbf{r}_3$ . Il y a correspondance entre le chiffre et la lettre. Ainsi  $\mathbf{r}_{u1}$  est le vecteur position de la particule de type u dans la position 1,  $n_{uv12}$  la densité double relative à la particule u dans la position 1 et à la particule v dans la position 2. Les densités triples  $n_{uva123}$ et  $n_{uvb123}$  s'interprètent de la même manière. Enfin,  $\mathbf{X}_{uv12}$  est la force s'exerçant entre la particule u en  $\mathbf{r}_1$ et la particule v en  $\mathbf{r}_2$ . Cette force dérive de l'énergie potentielle d'interaction  $\varphi_{uv12}$  au moyen de la relation :

$$\mathbf{X}_{uv12} = \frac{\mathrm{d}\varphi_{uv12}}{\mathrm{d}r_{12}} \frac{\mathbf{r}_{12}}{r_{12}}.$$
 (8)

Ayant choisi une hypothèse de fermeture permettant d'exprimer les densités triples en fonction des densités simple et double, on obtient une relation (7) modifiée qui fournit, une fois explicitée, un système d'équations intégrales dont la résolution donne les expressions des densités doubles  $n_{aa12}$ ,  $n_{bb12}$ ,  $n_{ab12}$  et  $n_{ba12}$ . On en déduit la pression P et l'énergie interne Edu plasma au moyen des relations :

$$P = 2nKT - \frac{1}{6V} \int [n_{aa12}\varphi_{aa12} + n_{bb12}\varphi_{bb12} + 2n_{ab12}\varphi_{ab12}] \underline{\mathrm{d}}r_1 \underline{\mathrm{d}}r_2 \quad (9)$$

 $E = 3nKTV + \frac{1}{2} \int [n_{aa12} \varphi_{aa12} + n_{bb12} \varphi_{bb12} + 2n_{ab12} \varphi_{ab12}] \, dr_1 \, dr_2 \quad (10)$ 

et, de là, les expressions des quantités sans dimension R et S.

2. Hypothèse de fermeture. — On applique soit l'hypothèse de fermeture de R-S [5-6], soit celle de Kirkwood. Il n'est nullement besoin de s'attarder sur l'hypothèse de Kirkwood devenue classique :

$$n_{uva_{123}} = \frac{n_{uv_{12}} n_{va_{23}} n_{ua_{13}}}{n_{u1} n_{v2} n_{a_3}}.$$
 (11)

Rappelons par contre celle de R-S :

Désignons par  $\sigma_{aa}$ ,  $\sigma_{bb}$  et  $\sigma_{ab} = \sigma_{ba}$  les distances minima d'approche entre particules d'espèce *a*, particules d'espèce *b* et particules d'espèce différente; on pose en utilisant la notation condensée  $\sigma_{uv}$ :

$$|\mathbf{r}_{u1} - \mathbf{r}_{v2}| < \sigma_{uv} \quad \text{ou} \quad |\mathbf{r}_{v2} - \mathbf{r}_{a3}| < \sigma_{va}$$
  
ou 
$$|\mathbf{r}_{a3} - \mathbf{r}_{u1}| < \sigma_{au} \qquad (12)$$
  
$$n_{uva123} = 0$$

et :

$$|\mathbf{r}_{u1} - \mathbf{r}_{v2}| \ge \sigma_{uv}, \quad |\mathbf{r}_{v2} - \mathbf{r}_{a3}| \ge \sigma_{va}$$
$$|\mathbf{r}_{a3} - \mathbf{r}_{u1}| \ge \sigma_{au}$$

 $n_{uva123} = n_{u1}n_{va23} + n_{v2}n_{au31} + n_{a3}n_{uv12} - 2n_{u1}n_{v2}n_{a3}$ et des conditions identiques pour  $n_{uvb123}$ .

- - - -----

3. Application à un plasma hydrogénoïde. — Les méthodes que nous allons exposer sont valables pour n'importe quel plasma d'ions et d'électrons, mais, ainsi que nous le montrerons, leur mise en œuvre ne présente de difficultés modérées que dans le cas d'un plasma hydrogénoïde.

a) HYPOTHÈSE R-S. — Les expressions des distances de moindre approche  $\sigma_{uv}$  devraient résulter de considérations quantiques et différer pour les trois types de collision mais les calculs seraient très complexes. Les corrélations étant essentiellement gouvernées par les actions à grande distance, il semble que le choix d'une distance de moindre approche commune soit une approximation raisonnable. Nous la prendrons égale à  $r_0$ . En effet, la longueur de Landau  $r_0$  est la distance de moindre approche pour un électron se dirigeant avec une énergie cinétique égale à KT vers un autre électron au repos. L'équation (7) s'écrit alors, en utilisant l'hypothèse (12) :

$$KT \, \nabla_{r_{12}} n_{uv12} + \mathbf{X}_{uv12} n_{uv12} + \int_{e} \left[ \mathbf{X}_{ua13} n_{va23} + \mathbf{X}_{ub13} n_{vb23} \right] n_{u1} \underline{\mathrm{d}} \underline{r}_{3} = 0 \quad (13)$$

certaines intégrales s'annulant par suite du caractère homogène et isotrope du plasma.

D'autre part, l'indice *e* signifie que l'on intègre dans un domaine excluant les sphères de protection.

Posons :

$$n_{uv12} = n_u n_v \psi_{uv12}; \qquad \psi_{uv12} = 1 + \varepsilon_{uv12} \quad (14)$$

il vient :

$$KT \, \nabla r_{12} \varepsilon_{uv12} + \mathbf{X}_{uv12} (1 + \varepsilon_{uv12}) + \int \left[ n_a \mathbf{X}_{ua13} \varepsilon_{va23} + n_b \mathbf{X}_{ub13} \varepsilon_{vb23} \right] \underline{\mathrm{d}} r_3 = 0. \quad (15)$$

Nous allons résoudre cette équation par approximations successives en posant :

$$\varepsilon_{uv} = \varepsilon_{uv}^1 + \varepsilon_{uv}^2 + \ldots + \varepsilon_{uv}^p \ldots = \sum_{1}^{\infty} \varepsilon_{uv}^p.$$
 (16)

D'autre part, nous remarquons que, par suite du caractère coulombien des forces, on peut écrire :

$$\mathbf{X}_{uv12} = e_{uv} \mathbf{X}_{12}; \qquad \mathbf{X}_{12} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}^2} \frac{\mathbf{r}_{12}}{r_{12}}$$
 (17)

avec :

$$e_{aa} = e_{bb} = 1;$$
  $e_{ab} = e_{ba} = -1.$  (18)

Reportons le développement (16) dans l'équation (15) en convenant d'écrire :

$$\varepsilon_{uv}^0 = 1 \tag{19}$$

et en notant soigneusement que  $\varepsilon_{uv}^0$  n'appartient pas au développement de  $\varepsilon_{uv}$ .

Il vient, compte tenu de 
$$\int_{e} \mathbf{X}_{13} \underline{\mathrm{d}} \underline{r}_{3} = 0$$
 :  
 $KT \nabla_{12} \sum_{1}^{\infty} \varepsilon_{uv12}^{p} + e_{uv} \mathbf{X}_{12} \sum_{0}^{\infty} \varepsilon_{uv12}^{p}$   
 $+ \int_{e} \left[ n_{a} e_{ua} \sum_{1}^{\infty} \varepsilon_{va23}^{p} + n_{b} e_{ub} \sum_{1}^{\infty} \varepsilon_{vb23}^{p} \right] \mathbf{X}_{13} \underline{\mathrm{d}} \underline{r}_{3} = 0$  (20)

 $\nabla_{12}$  remplaçant le symbole  $\nabla_{r_{12}}$ .

Associons les uns aux autres les termes de plus bas indice provenant des trois expressions qui constituent l'équation ci-dessus. On obtient ainsi :

$$KT \nabla_{12} \varepsilon_{uv12}^p + e_{uv} \mathbf{X}_{12} \varepsilon_{uv12}^{p-1} + \int \left[ n_a e_{ua} \varepsilon_{va23}^p + n_b e_{ub} \varepsilon_{vb23}^p \right] \mathbf{X}_{13} \underline{\mathrm{d}} r_3 = 0. \quad (21)$$

Cette équation est en fait un système d'équations portant sur les fonctions inconnues  $\varepsilon_{aa}$ ,  $\varepsilon_{bb}$ ,  $\varepsilon_{ab}$  et  $\varepsilon_{ba}$ . Or, il se trouve que, dans le cas d'un plasma hydrogénoïde caractérisé par les équations (18), ce système est réductible à une seule équation obtenue en posant :

$$\mathbf{\varepsilon}_{uv}^p = C_{uv}^p \mathbf{\varepsilon}^p. \tag{22}$$

On le vérifie par substitution de (22) dans (21), et on trouve :

$$C_{aa}^{p} = C_{bb}^{p} = 1$$
  

$$\psi_{aa} = \psi_{bb} = 1 + \varepsilon^{1} + \varepsilon^{2} + \ldots + \varepsilon^{p} \ldots$$
  

$$C_{ab}^{p} = C_{ba}^{p} = (-1)^{p}$$
  

$$= \psi_{ba} = 1 - \varepsilon^{1} + \varepsilon^{2} + \ldots (-1)^{p} \varepsilon^{p}.$$
 (23)

Les fonctions  $\varepsilon^p$  sont solution de l'équation (21) par l'intermédiaire de la relation (22) où les  $C_{uv}^p$  sont désormais connus. On devrait en toute rigueur expliciter l'équation (21) en tenant compte des domaines d'interdiction provenant des inégalités :

$$|\mathbf{r}_{u1} - \mathbf{r}_{v2}| \ge \sigma_{uv} = r_0.$$

L'équation obtenue serait très complexe et nous allons la simplifier de la manière suivante :

Supposons les  $\sigma_{uv}$  nuls. Il vient alors (voir appendice I) :

p impair :

 $\psi_{ab}$ 

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon^p}{\mathrm{d}r} - \frac{r_0}{r^2} \varepsilon^{p-1} - \frac{1}{h^2 r^2} \int_0^r \varepsilon^p(a) \ a^2 \, \mathrm{d}a = 0$$

p pair :

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon^p}{\mathrm{d}r} - \frac{r_0}{r^2} \varepsilon^{p-1} = 0. \tag{24}$$

L'étude de ces équations montrerait que la borne inférieure de l'intégrale introduit une divergence. Nous allons lever cette difficulté en remplaçant celle-ci par  $r_0$ . Il vient alors :

*p* impair :

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon^p}{\mathrm{d}r} - \frac{r_0}{r^2} \varepsilon^{p-1} - \frac{1}{h^2 r^2} \int_{r_0}^r \varepsilon^p(a) \ a^2 \,\mathrm{d}a = 0$$

p pair :

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon^p}{\mathrm{d}r} - \frac{r_0}{r^2} \, \varepsilon^{p-1} = 0. \qquad (24 \ bis)$$

b) Hypothèse de Kirkwood. — Remplaçons dans l'équation (7)  $n_{uva123}$  et  $n_{uvb123}$  par les expressions obtenues en utilisant l'hypothèse (11). Il vient, en introduisant à nouveau les fonctions  $\psi_{uv12}$ :

$$KT \nabla_{12} \psi_{uv12} + \mathbf{X}_{uv12} \psi_{uv12} + \psi_{uv12} \int_{V} [n_a \mathbf{X}_{ua13} \psi_{va23} \psi_{ua13} + n_b \mathbf{X}_{ub13} \psi_{vb23} \psi_{ub13}] \underline{dr}_3 = 0. \quad (25)$$

Introduisons à nouveau les  $\varepsilon_{uv12}$ . Il vient, en projetant sur un axe joignant les points 1 et 2 :

$$KT \frac{d}{dx_{1}} \varepsilon_{uv12} - X_{uv12}(1 + \varepsilon_{uv12}) - (1 + \varepsilon_{uv12}) \int_{V} [n_{a} X_{ua13} \varepsilon_{va23}(1 + \varepsilon_{ua13}) + n_{b} X_{ub13} \varepsilon_{vb23}(1 + \varepsilon_{ub13})] \underline{dr}_{3} = 0 \quad (26)$$

V désignant le domaine d'intégration dont nous préciserons par la suite l'étendue. Dans le cas du plasma hydrogénoïde, on a les relations :

$$X_{aa12} = X_{bb12} = - X_{ab12}, \quad n_a = n_b$$

et le système (26) portant sur quatre fonctions inconnues est réductible au système suivant dans lequel on a posé :

soit :

$$KT \frac{d}{dx_{1}} \varepsilon_{12} - (1 + \varepsilon_{12}) \overline{X}_{12}$$
$$- (1 + \varepsilon_{12}) n \int_{V} [(1 + \varepsilon_{13}) (1 + \varepsilon_{23})$$
$$- (1 + \eta_{13}) (1 + \eta_{23})] X_{13} \underline{dr}_{3} = 0$$

$$KT \frac{d}{dx_{1}} \eta_{12} + (1 + \eta_{12}) \overline{X}_{12}$$

$$- (1 + \eta_{12}) n \int_{V} [(1 + \varepsilon_{13}) (1 + \eta_{23})$$

$$- (1 + \eta_{13}) (1 + \varepsilon_{23})] X_{13} \underline{dr_{3}} = 0. \quad (28)$$

4. Résolution du système d'équations R-S. — Nous avons à résoudre les équations :

*p* impair :

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon^p}{\mathrm{d}r} - \frac{r_0}{r^2} \varepsilon^{p-1} - \frac{1}{h^2 r^2} \int_{r_0}^r \varepsilon^p(a) \ a^2 \mathrm{d}a = 0$$

p pair :

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon^p}{\mathrm{d}r} - \frac{r_0}{r^2}\varepsilon^{p-1} = 0, \quad \varepsilon^0 = 1. \tag{29}$$

Effectuons le changement de variable et de constante :

$$x = r/r_0; \qquad \alpha = r_0/h \tag{30}$$

il vient :

p impair :

$$x^2 \frac{\mathrm{d}\varepsilon^p}{\mathrm{d}x} - \varepsilon^{p-1} - \alpha^2 \int_1^x \varepsilon^p(t) t^2 \,\mathrm{d}t = 0$$

p pair :

х

$$x^2 \frac{\mathrm{d}\varepsilon^p}{\mathrm{d}x} - \varepsilon^{p-1} = 0, \quad \varepsilon^0 = 1.$$
 (31)

Les solutions s'écrivent, pour p = 1, 2, 3:

$$\varepsilon^{1} = -\frac{e^{\alpha}}{1+\alpha} \frac{e^{-\alpha x}}{x}$$

$$\varepsilon^{2} = \frac{e^{\alpha}}{1+\alpha} \left[ e^{-\alpha x} \frac{(1-\alpha x)}{2x^{2}} + \frac{\alpha^{2}}{2} E_{i}(\alpha x) \right]$$

$$\varepsilon^{3} = \frac{\alpha^{2}}{3} \frac{e^{2\alpha}}{(1+\alpha)^{2}} \left[ e^{-\alpha} - \frac{3}{2} E_{i}(\alpha) + 2(1-\alpha) e^{\alpha} E_{i}(2\alpha) \right] \frac{e^{-\alpha x}}{x}$$

$$+ \frac{e^{\alpha}}{3(1+\alpha)} \left[ \alpha \frac{e^{-\alpha x}}{x^{2}} - \frac{e^{-\alpha x}}{2x^{3}} - 2\alpha^{2} \frac{e^{\alpha x}}{x} E_{i}(2\alpha x) \right] \quad (32)$$

 $E_i(X)$  désignant la fonction exponentielle intégrale définie par la relation :

$$E_i(X) = \int_1^\infty e^{-Xt} \frac{\mathrm{d}t}{t}.$$
 (33)

Les expressions des fonctions de corrélation sont :

$$\begin{array}{ll} x < 1 \hspace{0.1cm}: \hspace{0.1cm} \psi_{uv} = 0 \\ x > 1 \hspace{0.1cm}: \hspace{0.1cm} \psi_{aa} = \psi_{bb} = 1 + \varepsilon^{1} + \varepsilon^{2} + \varepsilon^{3} \\ \psi_{ab} = \psi_{ba} = 1 - \varepsilon^{1} + \varepsilon^{2} - \varepsilon^{3} \end{array}$$

d'où, en reprenant la formule de la pression (9) :

$$\frac{P}{2nKT} - 1 = R^{1}(\alpha) = -\frac{\alpha^{2}}{6} \int_{1}^{\infty} \left[\varepsilon^{1} + \varepsilon^{3}\right] x \, \mathrm{d}x$$

on peut effectuer complètement les intégrations et obtenir l'équation d'état sous la forme :

$$R^{1}(\alpha) = \frac{P}{2nKT} - 1 = \frac{\alpha}{6(1+\alpha)} \left[ 1 + \frac{\alpha}{6} \left( \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \right) + \frac{\alpha^{2}}{6} \frac{(4+\alpha)}{(1+\alpha)} e^{\alpha} E_{i}(\alpha) - \frac{4}{3} \frac{\alpha^{2}}{(1+\alpha)} e^{2\alpha} E_{i}(2\alpha) \right].$$
(34)

L'expression de l'énergie interne est :

$$\frac{E}{3nKTV} - 1 = S^{1}(\alpha) = -2R^{1}(\alpha) \qquad (35)$$

le paramètre  $\alpha$  étant lié à la densité particulaire n et à la température T par la relation :

$$\alpha = \frac{r_0}{h} = \frac{1}{4\pi} (2n)^{1/2} \left(\frac{e^2}{\varepsilon_0 KT}\right)^{3/2}.$$
 (36)

5. **Résolution du système d'équations K-Y.** — Pour résoudre le système d'équations intégrales K-Y, posons tout d'abord :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{12} &= \varepsilon_{12}^{0} + \varepsilon_{12}^{1} + \ldots + \varepsilon_{12}^{p}, \qquad \varepsilon_{12}^{0} = 1\\ \eta_{12} &= \eta_{12}^{0} + \eta_{12}^{1} + \ldots + \eta_{12}^{p}, \qquad \eta_{12}^{0} = 1. \end{aligned} (37)$$

Reportons ces développements dans le système d'équations K-Y. Il vient, en groupant les termes de matière convenable le système récurrent :

$$KT \frac{d}{dx_{1}} \varepsilon_{12}^{p} - \overline{X}_{12} \varepsilon_{12}^{p-1} - \frac{1}{2} \sum_{q+r+m=p} \int \varepsilon_{12}^{q} [\varepsilon_{13}^{r} \varepsilon_{23}^{m} - \eta_{13}^{r} \eta_{23}^{m}] \overline{X}_{13} \frac{dr_{3}}{dr_{3}} = 0$$
  
$$KT \frac{d}{dx_{1}} \eta_{12}^{p} + \overline{X}_{12} \eta_{12}^{p-1} - n \sum_{q+r+m=p} \int \eta_{12}^{q} [\varepsilon_{13}^{r} \eta_{23}^{m} - \eta_{13}^{r} \varepsilon_{23}^{m}] \overline{X}_{13} \frac{dr_{3}}{dr_{3}} = 0 \quad (38)$$

d'où les équations suivantes et leurs solutions :

$$KT \frac{d}{dx_{1}} \varepsilon_{12}^{1} - \overline{X}_{12} - n \int [\varepsilon_{23}^{1} - \eta_{23}^{1}] \overline{X}_{13} \underline{dr}_{3} = 0$$

$$p = 1 :$$

$$KT \frac{d}{dx_{1}} \eta_{12}^{1} + \overline{X}_{12} - n \int [\eta_{23}^{1} - \varepsilon_{23}^{1}] \overline{X}_{13} \underline{dr}_{3} = 0 \quad (39)$$

$$\varepsilon_{12}^{1} = -\eta_{12}^{1} = \frac{e^{-\alpha x}}{x}$$

$$p = 2 : \qquad \varepsilon_{12}^{2} = \eta_{12}^{2} = \frac{e^{-2\alpha x}}{2x^{2}}. \quad (40)$$

Pour p = 3, il convient d'additionner et de soustraire les équations (43), ce qui donne après un calcul détaillé :

$$KT \frac{d}{dx_{1}} (\varepsilon_{12}^{3} + \eta_{12}^{3}) = 4n \int \varepsilon_{13}^{1} \varepsilon_{23}^{2} \overline{X}_{13} \underline{dr}_{3}$$
$$KT \frac{d}{dx_{1}} (\varepsilon_{12}^{3} - \eta_{12}^{3}) - 2\overline{X}_{12} \varepsilon_{12}^{2} - 4n$$
$$\int [\varepsilon_{12}^{2} \varepsilon_{23}^{1} + \varepsilon_{13}^{2} \varepsilon_{23}^{1} + \frac{1}{2} (\varepsilon_{23}^{3} - \eta_{23}^{3})] \overline{X}_{13} \underline{dr}_{3} = 0. \quad (46)$$

Dans la première équation, nous négligerons le terme intégral. En effet, si les points 1 et 2 étaient confondus, l'intégrale serait nulle et s'ils sont éloignés, le produit  $\varepsilon_{13}^2 \varepsilon_{23}^2$  est petit puisque le point 3 ne peut

être simultanément au voisinage des deux. Il semble donc raisonnable de négliger ce terme :

Il vient ainsi :

$$\mathfrak{e}_{12}^3=-\eta_{12}^3$$

d'où, en reportant et en usant à nouveau de cette même approximation :

$$KT \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_1} \varepsilon_{12}^3 - \overline{X}_{12} \varepsilon_{12}^2 - 2n \int \left[\varepsilon_{23}^3 + \varepsilon_{12}^2 \varepsilon_{23}^1\right] \overline{X}_{13} \, \mathrm{d}r_3 = 0.$$

Malheureusement,  $\varepsilon^3$  se comporte à l'origine comme  $r^{-3}$  et l'intégrale est divergente. La méthode K-Y ne peut être utilisée sous cette forme. Nous introduirons pour lever cette difficulté une coupure en  $r_0$  sur l'intégrale portant sur  $\varepsilon^3$ . Il vient ainsi :

$$x^2 \frac{\mathrm{d}\varepsilon^3}{\mathrm{d}x} - \alpha^2 \int_1^x \varepsilon^3(a) \ a^2 \,\mathrm{d}a - \frac{\mathrm{e}^{-3\alpha x}}{2x^2} \ (1 + \alpha x) = 0.$$

La solution de cette équation est :

$$z^{3} = \left[\frac{\alpha^{2}}{3}\frac{(1-\alpha)}{(1+\alpha)}e^{2\alpha}E_{i}(4\alpha) + \frac{\alpha^{2}}{6}\frac{e^{-2\alpha}}{1+\alpha} - \frac{\alpha^{2}}{6}E_{i}(2\alpha)\right]\frac{e^{-\alpha\alpha}}{x}$$
$$-\frac{\alpha^{2}}{3}E_{i}(4\alpha x)\frac{e^{\alpha x}}{x} + \frac{\alpha^{2}}{6}E_{i}(2\alpha x)\frac{e^{-\alpha x}}{x} - \frac{e^{-3\alpha x}}{6x^{3}}$$

d'où :

$$R^{2}(\alpha) = \frac{P}{2nKT} - 1 = -\frac{\alpha^{2}}{6} \left[ \int_{0}^{\infty} \varepsilon^{1}(x) x \, dx + \int_{1}^{\infty} \varepsilon^{3}(x) x \, dx \right]$$
$$= \frac{\alpha}{6} \left[ 1 + \frac{\alpha}{6} \frac{e^{-3\alpha}}{(1+\alpha)} - \frac{2}{3} \frac{\alpha^{2}}{(1+\alpha)} e^{\alpha} E_{i}(4\alpha) \right]$$
$$S^{2}(\alpha) = -2R^{2}(\alpha) = \frac{E}{3nKTV} - 1 \qquad (47)$$

avec toujours :

$$\alpha = \frac{r_0}{h} = \frac{(2n)^{1/2}}{4\pi} \left(\frac{\mathrm{e}^2}{\varepsilon_0 KT}\right)^{3/2}.$$

6. Méthode K-Y modifiée. — Nous allons reprendre l'étude du système de Kirkwood-Yvon en introduisant un potentiel infini dans l'interaction ion-électron à la distance  $a_0$  égale au rayon de l'atome d'hydrogène. La méthode de résolution du système d'équations intégrales utilisée a été mise au point sur notre demande par la Société d'Économie et de Mathématiques Appliquées (S.E.M.A.). L'ingénieur responsable de l'étude était M. Canevet. Après utilisation des changements de variable déjà mentionnés, le système d'équations intégro-différentielles s'écrit :

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}x} - \frac{(1+\varepsilon(x))}{x^2} + \frac{\alpha^2}{8} (1+\varepsilon(x)) \int_{\Omega(x)} G(x, a, t) \left[ (1+\varepsilon(t)) \varepsilon(a) - (1+\eta(t)) \eta(a) \right] \mathrm{d}a \, \mathrm{d}t = 0 \quad (48)$$

$$\frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}x} + \frac{(1+\eta(x))}{x^2} \\ + \frac{\alpha^2}{8} (1+\eta(x)) \int_{\Omega(x)} G(x, a, t) \left[ (1+\varepsilon(t)) \eta(a) - (1+\eta(t)) \varepsilon(a) \right] \mathrm{d}a \, \mathrm{d}t = 0$$

avec :

$$G(x, a, t) = a(a^2 - t^2 - x^2)/t^2 x^2$$
 (49)

 $\Omega(x)$  représente le domaine d'intégration défini par la zone hachurée de la figure 1.





Posons :

$$\begin{aligned} \psi_{ee} &= \psi_{ii} = 1 + \varepsilon = F \\ \psi_{ei} &= \psi_{ie} = 1 + \eta = H \end{aligned} \tag{50}$$

les conditions aux limites sont  $\varepsilon$ ,  $\eta \rightarrow 0$  quand  $x \rightarrow \infty$ , les corrélations devenant négligeables quand les particules concernées s'éloignent l'une de l'autre. La fonction recherchée après la résolution du système (48) est  $R^{8}(\alpha)$  avec :

$$R^{3}(\alpha) = -\frac{\alpha^{2}}{12} \int_{0}^{\infty} [\varepsilon(x) - \eta(x)] x \, \mathrm{d}x = \frac{P}{2nKT} - 1.$$
(51)

Le système (48) peut s'écrire en tenant compte des propriétés du noyau G:

$$\frac{\mathrm{d}F(x)}{\mathrm{d}x} - \frac{F(x)}{x^2} + \frac{\alpha^2}{8}F(x)$$
$$\int_{\Omega(x)} G(x, a, t) \left[F(t)F(a) - H(t)H(a)\right] \mathrm{d}a \,\mathrm{d}t = 0$$

$$\frac{\mathrm{d}H(x)}{\mathrm{d}x} + \frac{H(x)}{x^2} + \frac{\alpha^2}{8} H(x)$$

$$\int_{\Omega(x)} G(x, a, t) \left[F(t) H(a) - F(a) H(t)\right] \mathrm{d}a \,\mathrm{d}t = 0. \quad (52)$$

Lorsque x tend vers zéro, les intégrales du système (52) tendent vers zéro et les équations deviennent :

$$x \rightarrow 0$$
:  
 $\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}x} - \frac{F}{x^2} = 0;$   $\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}x} + \frac{H}{x^2} = 0$  (53)

d'où l'on déduit :

х

$$\rightarrow 0$$
 : 
$$F \rightarrow \mathrm{e}^{-1/x}; \qquad H \rightarrow \mathrm{e}^{1/x}.$$

On constate que H tend vers l'infini, lorsque x tend vers zéro, ce qui est en contradiction totale avec le fait que physiquement un électron et un ion ne peuvent occuper le même emplacement. Il faudrait en toute rigueur introduire de manière détaillée des effets quantiques aux très courtes distances. Nous nous contenterons de modifier le potentiel électron-ion pour lever la divergence.

Aux potentiels :

nous allons substituer les potentiels suivants dans les quels C désigne une constante très grande :

a)

$$\varphi_{ee} = \varphi_{ii} = rac{\mathrm{e}^2}{4\pi arepsilon_0 r}$$

b)  $r > r_0$  :

Nous laissons inchangés le potentiel électron-électron et le potentiel ion-ion, et nous substituons pour l'interaction électron-ion un potentiel très répulsif au potentiel coulombien attractif aux distances inférieures au rayon de l'atome d'hydrogène.

Introduisons la fonction continue  $\varphi(x)$  et la fonction discontinue  $\Phi(x)$  telles que :

a)  

$$\varphi = 1/x$$
  
b)  $x > x_0$ :  
 $\Phi = -1/x$   
 $x < x_0$ :  
 $\Phi = \Delta^2/x$  (55)

 $\Delta$  désignant une constante assez grande pour que le potentiel  $\Phi$  soit très violemment répulsif pour  $x < x_0$ . Il vient :

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}x} + \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}F - \frac{\alpha^2}{8}F \int_{\Omega(x)} G_1(x, a, t) \left[F(t) \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}F(a) + H(t) \frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}t}H(a)\right] \mathrm{d}a \,\mathrm{d}t = 0 \quad (56)$$

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}x} + \frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}x}H - \frac{\alpha^2}{8}H \int_{\Omega(x)} G_1(x, a, t) \left[F(t) \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}H(a) + H(t) \frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}t}F(a)\right] \mathrm{d}a \,\mathrm{d}t = 0 \quad (57)$$

avec :

$$G_1(x, a, t) = a(a^2 - t^2 - x^2)/x^2.$$

On divise ces équations respectivement par F(x) et H(x). On fait la somme et la différence des expressions obtenues et on intègre de x à l'infini. On trouve en posant :

$$S_{1} = F + H - 2; \qquad D = F - H \qquad (58)$$
$$A(\lambda) = \int_{\lambda}^{\infty} (\lambda^{2} - t^{2}) \left( F \frac{d\varphi}{dt} + H \frac{d\Phi}{dt} \right) dt$$
$$B(\lambda) = \int_{\lambda}^{\infty} (\lambda^{2} - t^{2}) \left( F \frac{d\varphi}{dt} - H \frac{d\Phi}{dt} + \frac{2}{t^{2}} \right) dt \qquad (59)$$

et en effectuant un long calcul au cours duquel on permute l'ordre de certaines intégrations :

$$\log [FH] = - [\varphi + \Phi]$$

$$- \frac{\alpha^2}{8x} \int_0^\infty a S_1(a) [A(|x - a|) - A(|x + a|)] da \quad (60)$$

$$\log \left[\frac{F}{H}\right] = -\varphi + \Phi$$

$$- \frac{\alpha^2}{x} \int_0^x a^2 D(a) da - \alpha^2 \int_x^\infty a D(a) da$$

$$- \frac{\alpha^2}{8x} \int_0^\infty a D(a) [B(|x - a|) - B(|x + a|)] da. \quad (61)$$

On vérifie que le comportement des solutions pour  $x \rightarrow \infty$  est correct pourvu que la condition suivante soit satisfaite :

$$2 + \alpha^2 \int_0^\infty a^2 D(a) \, \mathrm{d}a = 0. \tag{62}$$

On peut montrer que cette condition traduit la relation qui existe entre la densité simple et la densité double. Revenant en effet aux quantités n et r, on constate que celle-ci s'écrit :

$$2 + 2n \int (F - H) \underline{\mathrm{d}} \underline{r} = 0. \tag{63}$$

Or :

$$n_{ee} = n_{ii} = n^2 F; \quad n_{ei} = n_{ie} = n^2 H \qquad (64)$$
$$\frac{1}{n} \int n_{ee} \, \underline{\mathrm{d}}r = \frac{1}{n} \int n^2 F \, \underline{\mathrm{d}}r = N - 1$$

LE JOURNAL DE PHYSIQUE. - T. 29. Nº 7. JUILLET 1968.

$$\frac{1}{n}\int n_{ei}\,\mathrm{d}\underline{r} = \frac{1}{n}\int n^2H\,\mathrm{d}\underline{r} = N \tag{65}$$

en soustrayant l'équation (63).

Procédons maintenant aux changements de variable :

$$z = \alpha x; \quad v = \alpha a$$
 (66)

le système que l'on va confier à l'ordinateur est le suivant :

a) 
$$z \ge z_0 = \alpha x_0$$
:  
Log  $[FH] = -\frac{1}{8z} \int_0^\infty v S_1(v) \left[A(|z-v|) - A(|z+v|)\right] dv$  (67)  
Log  $\left[\frac{F}{H}\right] = \int_z^\infty \frac{v(v-z)}{z} D(v) dv$ 

$$-\frac{1}{8z} \int_{0}^{\infty} v D(v) [B(|z - v|) - B(|z + v|)] dv. \quad (68)$$

b)  $z < z_0$  :

La seconde équation (56) montre que, par suite du caractère violemment répulsif de  $\Phi$ , on peut prendre H égal à zéro. Pour obtenir F, il suffit d'ajouter les deux équations (67) et (68) :

$$2 \operatorname{Log} F = \frac{1}{z} \int v(v - z) D(v) dv$$
  
-  $\frac{1}{8z} \int_{0}^{\infty} v [S_{1}(v) [A(|z - v|) - A(|z + v|)]$ 

$$+ D(v) [B(|z - v|) - B(|z + v|)] \rfloor dv \quad (69)$$
  
$$H = 0. \qquad (70)$$

$$2\alpha + \int_0^\infty v^2 D(v) \, \mathrm{d}v = 0 \tag{71}$$

$$R^{3}(\alpha) = -\frac{1}{12} \int_{0}^{\infty} v D(v) \, \mathrm{d}v.$$
 (72)

On voit que pour une valeur donnée de  $z_0 = \alpha x_0$ le système d'équations intégrales ne contient plus la variable  $\alpha$ . Il admet une infinité de solutions. Pour chacune de ces solutions, la formule (71) fournit la valeur de  $\alpha$  qui convient. On obtient donc une relation  $R^3(\alpha)$  à  $\alpha x_0$  constant par une méthode dans laquelle  $\alpha$  n'est pas fixé à l'avance mais résulte des calculs.

Le principe de la méthode numérique est le suivant : on définit une suite de couples  $(F_n, H_n)$  au moyen des relations de récurrence obtenues à partir des équations (67) à (70) et pour une valeur donnée de  $\alpha x_0$ :

$$\text{Log}(F_{n+1}, H_{n+1}) = f(F_n, H_n).$$

On part d'un couple  $F_0$ ,  $H_0$  arbitraire, et au moyen d'un processus itératif on constate que la suite  $(F_n, H_n)$ 

38

converge vers un couple  $(F_{\infty}, H_{\infty})$ . A ce couple correspondent la valeur de  $\alpha$  et la valeur de  $R^3(\alpha)$  telles que :

$$\begin{split} & 2\alpha + \int_0^\infty v^2 [F_\infty(v) - H_\infty(v)] \, \mathrm{d} v = 0 \\ & R^3(\alpha) = -\frac{1}{12} \int_0^\infty v [F_\infty(v) - H_\infty(v)] \, \mathrm{d} v. \end{split}$$

On obtient donc ainsi le réseau  $R^3(\alpha)$  à  $\alpha x_0$  constant d'où l'on extrait  $R^3(\alpha)$  à  $x_0$  constant.

Les fonctions de départ  $F_0$  et  $H_0$  sont de la forme :

$$\begin{split} F_0 &= {\rm e}^{-\beta\,{\rm e}^{-z/z}} \\ z &> z_0 : & H_0 &= {\rm e}^{\beta\,{\rm e}^{-z/z}} \\ z &< z_0 : & H_0 &= 0. \end{split}$$

7. **Résultats obtenus.** — Les paramètres physiques sont la température T exprimée en degrés absolus et la densité particulaire des ions n exprimée en m<sup>-3</sup>. Les paramètres  $\alpha$  et  $x_0$  sont liés à T et n par les relations :

$$lpha = 3,425 \times 10^{-7} n^{1/2} T^{-3/2};$$
  $x_0 = 3,167 \times 10^{-6} T$   
(unités MKSA).

On s'impose les contraintes suivantes :

a) La longueur de Landau  $r_0$  doit être plus petite que la longueur de Debye h afin que les développements en  $\alpha$  aient un sens :

$$r_0 < h$$
,  $\alpha < 1$ 

soit  $n < 10^{13} T^3$ .

b) Le rayon de l'atome d'hydrogène  $a_0$  doit être plus petit que la longueur de Debye afin que la notion d'écran ait un sens pour l'interaction électron-ion :

$$a_0 < h$$
,  $\alpha x_0 < 1$ 

soit  $n < 10^{24} T$ .

c) Le plasma ne doit pas être dégénéré, soit :

$$KT > rac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$$

 $\hbar$  désignant la constante de Planck h divisée par  $2\pi$ . Cette condition s'écrit encore :

 $\alpha^{4/3} x_0 < 1,78, \qquad n < 2,5 \times 10^{21} T^{3/2}.$ 

d) L'hydrogène doit rester ionisé, d'où  $T > 10^5$  °K. On vérifie que, pour  $T = 10^5$  °K, *n* doit rester inférieur à  $10^{28}$  particules par m<sup>3</sup> et que, pour  $T = 10^9$  °K, *n* doit rester inférieur à  $10^{33}$ .

Les tableaux suivants traduisent un ensemble de résultats. La quantité  $R_q^p$  représente l'écart par rapport à l'état parfait. L'indice supérieur précise la méthode en jeu et l'indice inférieur la valeur de  $x_0$ . Exemple :

$$R_1^3(lpha) = rac{P}{2nKT} - 1$$

L'indice 3 signifie qu'on est en présence de la méthode K-Y modifiée et l'indice 1 que  $x_0 = 1$ .

Sur la figure 2 sont tracées les courbes représentatives des fonctions  $R(\alpha)$ . On constate tout d'abord que, pour  $x_0 = 1$ , les fonctions  $R_1^1(\alpha)$  et  $R_1^3(\alpha)$  sont très proches, tandis que la fonction  $R_1^2(\alpha)$  se sépare nettement des deux autres. Les méthodes R-S et K-Y modi-

TABLEAU I
-----------

$$x_0 = 1,$$
  $T = 3,1566 \times 10^5 \, {}^{\circ}\text{K}$ 

α	m <sup>-3</sup>	cm <sup>-3</sup>	$R_1^1$	$R_1^2$	$R_1^3$
0,05	$10^{26} imes 6,7$	$10^{20} imes 6,7$	0,008	0,008	0,008
0,1	$10^{27} imes2,\!68$	$10^{21} imes2,\!68$	0,015	0,015	0,015
0,15	$10^{27} imes 6,04$	$10^{21} imes 6,04$	0,023	0,025	0,023
0,2	$10^{28} imes 1,07$	$10^{22} \times 1.07$	0,029	0,033	0,027
0,3	$10^{28} imes2,41$	$10^{22} imes2,41$	0,039	0,05	0,037
0,4	$10^{28} imes 4,29$	$10^{22}  imes 4,29$	0,048	0,066	0,044
0,5	$10^{28}  imes 6,7$	$10^{22} imes 6,7$	0,056	0,083	0,053
0,6	$10^{28}  imes 9,67$	$10^{23} imes 9,67$	0,063	0,1	0,06
0,7	$10^{29} imes1,32$	$10^{23} \times 1.32$	0,069	0,116	0,065
0,8	$10^{29} \times 1.71$	$10^{23} \times 1.71$	0,075	0,133	0,069
0,9	$10^{29} imes2.17$	$10^{23} imes2.17$	0.079	0.15	0.073

R<sup>1</sup> Méthode R-S, R<sup>2</sup> Méthode K-Y, R<sup>3</sup> Méthode K-Y modifiée.

n

	$x_0 = 0.5$		$x_0 = 2$		$x_0 = 5$	
	n	T=1,5783 °K	n	$T=6,3132 imes10^{5}$ oK	n	$T=$ 1,578 $3 imes 10^{6}$ °K
α	m <sup>-3</sup>	$R^{3}_{0,5}$	$m^{-3}$	$R_2^3$	$m^{-3}$	$R_{5}^{3}$
-				—		
0,05	$10^{25}$ $ imes$ 8,39	0,009	$10^{27} imes 5,37$	0,006	$10^{28} imes 8,39$	0,005
0,1	$10^{26} imes3,35$	0,017	$10^{28} imes 2,15$	0,012	$10^{29} imes 3,35$	0,006
0,15	$10^{26} imes$ 7,55	0,025	$10^{28} imes4$ ,83	0,017	$10^{29} imes$ 7,55	0,002
0,2	$10^{27} imes 1,34$	0,032	$10^{28} imes 8,59$	0,02	$10^{ m 30}$ $ imes$ 1,34	0,005
0,3	$10^{27} imes3,02$	0,045	$10^{29} imes$ 1,93	0,024		
0,4	$10^{27} imes 5,37$	0,059	$10^{29} imes3,43$	0,025		
0,5	$10^{27} imes$ 8,39	0,07	$10^{29} imes 5,37$	0,026		
0,6	$10^{28} imes$ 1,21	0,08				
0,7	$10^{28} imes$ 1,64	0,09				
0,8	$10^{28} imes 2.15$	0.097				

#### TABLEAU II

fiées conduisent à des résultats voisins entre eux mais différents de ceux de la méthode K-Y. Toutefois, pour les faibles valeurs de  $\alpha$ , toutes les courbes sont confondues tant que  $x_0$  reste inférieur à l'unité. Le choix de la distance de moindre approche importe alors peu.



Fig. 2.

En effet, pour  $\alpha$  faible et  $x_0$  inférieur à l'unité, la longueur de Debye est très grande devant les autres longueurs. Le rôle des collisions lointaines est prépondérant. Il n'en est plus de même lorsque  $\alpha$  croît. Enfin, lorsque  $x_0$  devient supérieur à l'unité, la forme des courbes se modifie sensiblement. Pour  $x_0 = 5$ , on a même un maximum et une décroissance jusqu'à des valeurs négatives. La grande valeur de  $a_0$  vis-à-vis de  $r_0$  donne de l'importance aux collisions proches électron-ions du type sphère dure.

8. **Conclusion.** — Cette étude a permis de montrer qu'il était possible de développer l'étude des corrélations dans un plasma en équilibre thermodynamique sans considérer comme un fond uniforme et neutralisant l'un ou l'autre des constituants mais en conservant aux charges leur caractère discontinu. Afin de juger de la validité des méthodes de manière plus fine, nous faisons effectuer sur ordinateur une expérience de simulation du comportement d'un plasma à l'équilibre. Un certain nombre d'ions et d'électrons étant placés dans une enceinte, on cherche au moyen d'une méthode de Monte-Carlo l'état d'énergie minimum pour une température donnée d'où l'on déduit la pression et l'énergie interparticulaire. Le travail est en cours.

#### **APPENDICE** 1

L'équation (21) s'écrit en projetant sur  $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}$ , en utilisant les quantités  $r_0$  et h en supposant les  $\sigma_{uv}$  nuls : p impair :

$$\frac{d\varepsilon^{p}}{dr} - \frac{r_{0}}{r^{2}} \varepsilon^{p-1} - \frac{1}{8\pi\hbar^{2}} \int \frac{\varepsilon^{p}(r_{23})}{r_{13}^{2}} \underline{d}r_{3} = 0 \qquad (1)$$

p pair :

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon^p}{\mathrm{d}r} - \frac{r_0}{r^2} \,\varepsilon^{p-1} = 0. \tag{2}$$

L'emploi de coordonnées bipolaires  $r_{13} = u$  et  $r_{23} = a$ , permet d'écrire pour l'équation (1) : de<sup>p</sup> r

$$\frac{\mathrm{d}e}{\mathrm{d}r} - \frac{r_0}{r^2} \varepsilon^{p-1} \\ - \frac{1}{4h^2 r^2} \int_0^\infty \left[ \int_{|r-a|}^{|r+a|} \frac{u^2 + r^2 - a^2}{u^2} \,\mathrm{d}u \right] \varepsilon^p(a) \ a \,\mathrm{d}a = 0.$$

L'intégrale est nulle pour a > r, tandis que pour a < r il vient :

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon^p}{\mathrm{d}r} - \frac{r_0}{r^2} \,\varepsilon^{p-1} - \frac{1}{h^2 r^2} \int_0^r \varepsilon^p(a) \,a^2 \,\mathrm{d}a = 0.$$

La borne inférieure de l'intégrale introduisant une divergence, on lève celle-ci en substituant  $r_0$  à zéro :

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon^p}{\mathrm{d}r} - \frac{r_0}{r^2} \varepsilon^{p-1} - \frac{1}{h^2 r^2} \int_{r_0}^r \varepsilon^p(a) \ a^2 \,\mathrm{d}a = 0.$$

Pour résoudre cette équation, on procède aux changements de variable et de constante :

$$x = r/r_0; \quad \alpha = r_0/h; \quad t = a/r_0$$
 (3)

d'où l'équation :

$$x^{2} \frac{\mathrm{d}\varepsilon^{p}}{\mathrm{d}x} - \varepsilon^{p-1} - \alpha^{2} \int_{1}^{x} \varepsilon^{p}(t) t^{2} \mathrm{d}t = 0.$$
 (4)

Pour résoudre celle-ci, dérivons-la puis divisons par  $x^2$ :

$$\frac{\mathrm{d}^2\varepsilon^p}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2}{x}\frac{\mathrm{d}\varepsilon^p}{\mathrm{d}x} - \alpha^2\varepsilon^p = \frac{1}{x^2}\frac{\mathrm{d}\varepsilon^{p-1}}{\mathrm{d}x}.$$

La solution générale de cette équation différentielle s'écrit :

$$y = A \frac{e^{x\alpha}}{x} + B \frac{e^{-\alpha x}}{x} + \frac{e^{\alpha x}}{x} \left[ \int \frac{d\varepsilon^{p-1}}{dx} \frac{e^{-\alpha x}}{2\alpha x} dx \right] - \frac{e^{-\alpha x}}{x} \left[ \int \frac{d\varepsilon^{p-1}}{dx} \frac{e^{\alpha x}}{2\alpha x} dx \right].$$
(5)

Pour obtenir à partir de cette expression une solution de l'équation (4) physiquement acceptable, il convient de faire A = 0 et de reporter. On obtient alors une expression de B en fonction de  $\alpha$  qui conduit à la solution désirée.

- [1] GUERNSEY (R.), Phys. of Fl., 1962, 5, 3.
- [2] O'NEIL (Th.), Phys. of Fl., 1965, 8, 6.
- [3] BRUSH (S. G.), SAHLIN (H. L.) et TELLER (E.), J. Chem. Phys., 1966, 45, 6, 2102.

#### **APPENDICE 2**

J. Canevet a proposé pour  $R^3(\alpha)$  une intéressante formule approchée. Une étude très détaillée du système d'équations intégrales lui a montré qu'une bonne approximation de la fonction D(x) était :

D = 1

$$x < x_0$$
 :

 $x > x_0$  :

 $-2e^{-\lambda x}/x$ 

les équations :

$$2 + \alpha^2 \int_0^\infty a^2 D(a) \, \mathrm{d}a = 0$$
$$R^3(\alpha) = -\frac{\alpha^2}{12} \int_0^\infty a D(a) \, \mathrm{d}a$$

deviennent alors :

$$2 + \alpha^2 \left[ \frac{x_0^3}{3} - 2 \frac{(1 + \lambda x_0) e^{-\lambda x_0}}{\lambda^2} \right] = 0 \qquad (1)$$

$$R^{\mathbf{3}'}(\boldsymbol{\alpha}) = -\frac{\boldsymbol{\alpha}^2}{12} \left[ \frac{x_0^2}{2} - 2 \frac{\mathrm{e}^{-\lambda x_0}}{\lambda} \right]. \tag{2}$$

L'élimination de  $e^{-\lambda x_0}$  entre ces deux formules donne :

$$R^{3'}(\alpha) = \frac{\lambda}{6(1+\lambda x_0)} - \frac{\alpha^2 x_0^2}{72} \frac{(3+\lambda x_0)}{(1+\lambda x_0)}.$$
 (3)

En toute rigueur, il conviendrait d'associer à chaque valeur de  $\alpha$  la racine  $\lambda$  de l'équation (1) puis de reporter dans (3).

J. Canevet propose de remplacer  $\lambda$  par  $\alpha$  dans (3) et obtient une formule approchée  $R^{3'}(\alpha)$ :

$$R^{3'}(\alpha) = \frac{\alpha}{6(1+\alpha x_0)} - \frac{\alpha^2 x_0^2}{72} \frac{(3+\alpha x_0)}{(1+\alpha x_0)}.$$
 (4)

Le tableau suivant rend compte de la valeur de l'approximation :

α	$R^3(lpha)$	$R^{3'}(\mathbf{lpha})$
0,1	0,015	0,015
0,2	0,027	0,026
0.5	0,053	0.047

#### BIBLIOGRAPHIE

- [4] YVON (J.), J. Physique Rad., 1958, 19, 10.
- [5] SALMON (J.), J. Physique, 1965, 26, 12.
- [6] ROGER (C.) et SALMON (J.), C. R. Acad. Sc., 1966, 262, 727-729, série A, et 262, 676-677, série A.