

Coefficients de transport et pression hors équilibre thermodynamique local

■ G. FAUSSURIER - C. BLANCARD - P. COSSE / CEA – DAM Île-de-France

Une méthode combinant les modèles d'atome moyen et d'équilibre collisionnel-radiatif est proposée pour calculer des coefficients de transport électronique ainsi que la pression de plasmas hors équilibre thermodynamique local.

La modélisation des propriétés microscopiques des milieux à haute densité d'énergie joue un rôle crucial dans de nombreux problèmes de physique des plasmas. Si des progrès ont été accomplis ces dernières années, des difficultés subsistent pour décrire les plasmas d'ions multichargés hors équilibre thermodynamique local (HETL). Ce constat prend tout son sens lorsqu'il s'agit de plasmas créés en laboratoire puisque les enjeux scientifiques, techniques voire industriels sont majeurs.

La description des plasmas HETL est complexe puisque l'occupation des états atomiques est intimement liée à la façon dont ils sont connectés les uns aux autres. Ces connexions sont assurées par des processus atomiques de différente nature faisant intervenir des particules – essentiellement des électrons – et/ou des photons. Les probabilités d'occupation de ces

états peuvent être évaluées à l'aide d'un modèle d'équilibre collisionnel-radiatif (ECR). Pour ce faire, on sélectionne un certain nombre d'états et on calcule les probabilités de transition les reliant. On définit une matrice dite de taux où apparaissent ces probabilités de transition entre états. La conservation de la probabilité de ces états permet de construire une nouvelle matrice qui définit le modèle ECR. Son inversion permet de déterminer la probabilité d'occupation de chaque état. Cette approche est bien adaptée pour calculer des moyennes thermodynamiques mais pas pour calculer des coefficients de transport ou une pression. À l'inverse, de telles grandeurs sont aisément calculables à l'équilibre thermodynamique local (ETL) en utilisant un modèle quantique d'atome moyen censé représenter l'état atomique moyen des ions du milieu considéré.

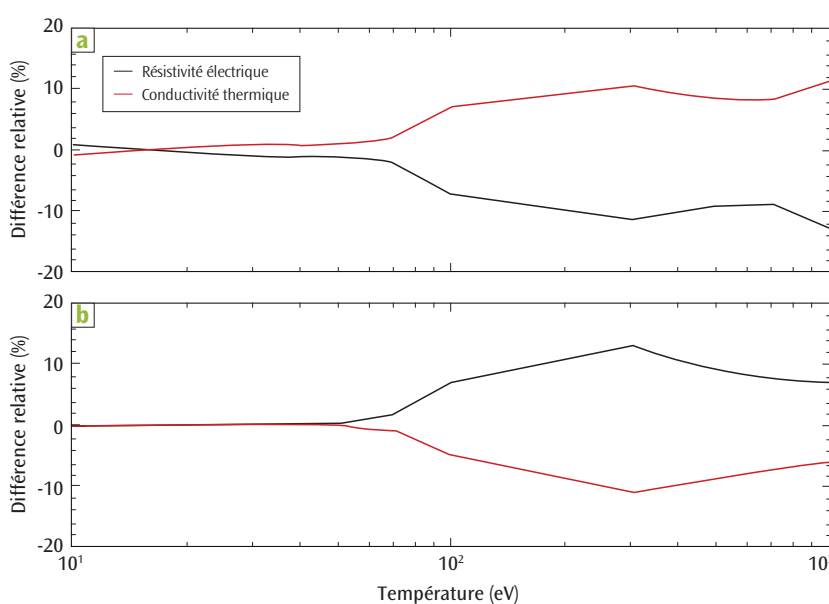


Figure 1. Différence relative (%) entre les valeurs calculées à l'ETL et HETL de la résistivité électrique et de la conductivité thermique pour un plasma de titane à 10^{-3} g/cm³ en utilisant un modèle d'atome moyen (a) ou l'approche de Spitzer (b).

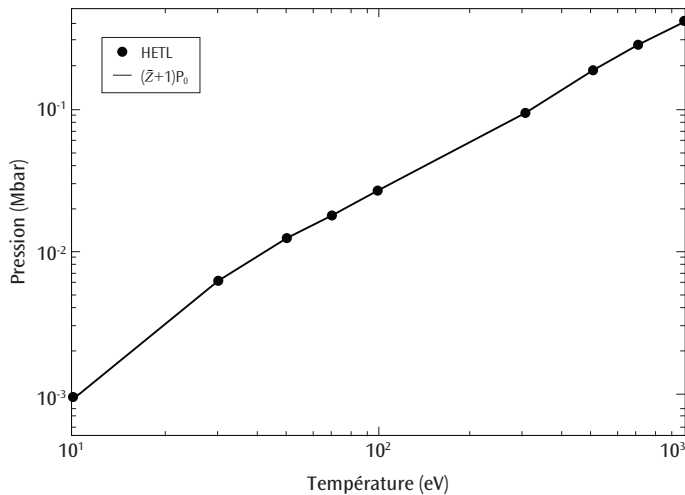


Figure 2. Pression en fonction de la température pour un plasma de titane à 10^{-3} g/cm³ calculée HETL en utilisant un modèle d'atome moyen ou la règle $(\bar{Z}+1)P_0$, où \bar{Z} est l'ionisation moyenne et P_0 la composante idéale.

Nous avons proposé [1] de coupler ces deux approches afin de calculer des coefficients de transport électronique ainsi que des pressions HETL. Basé sur la notion de configurations non-relativistes pour décrire les états, un calcul ECR permet d'évaluer, pour des conditions thermodynamiques données, les populations moyennes des orbitales liées. Ces populations sont ensuite introduites et maintenues figées dans un code quantique d'atome moyen dont les équations sont résolues en autorisant les électrons libres supposés à l'ETL à se polariser autour de cet ion moyen. On obtient ainsi des fonctions d'onde pour les orbitales liées et libres de l'atome moyen HETL. Ces dernières sont alors utilisées pour calculer la résistivité électrique, la conductivité thermique ainsi que la pression électronique du milieu considéré.

Sur la **figure 1** sont tracées les différences relatives entre les valeurs calculées à l'ETL et HETL de la résistivité électrique et de la conductivité thermique. On considère notre méthode (a) ou une approche de type Spitzer [2] étendue HETL (b) en remplaçant le numéro atomique par la valeur du degré d'ionisation HETL. Le milieu considéré est un plasma de titane à une densité de 10^{-3} g/cm³ dans lequel on fait varier la température et pour lequel on néglige les effets de rayonnement. Sur la **figure 1(a)**, on constate que la résistivité électrique à l'ETL est en général inférieure à la résistivité électrique HETL. Le milieu à l'ETL est donc plus conducteur que le milieu HETL. Cela se conçoit car à l'ETL, l'ionisation moyenne du milieu est supérieure à celle du milieu HETL. Le nombre de porteurs de charge libres est donc plus grand à l'ETL qu'HETL. On constate également que le milieu à l'ETL est meilleur conducteur de chaleur que le milieu HETL. L'utilisation d'une approche du type Spitzer étendue

HETL montre un résultat opposé. Elle prédit qu'un milieu HETL est meilleur conducteur d'électricité et de chaleur qu'un milieu à l'ETL. Contraire au bon sens, ce résultat suggère que l'extension HETL du modèle de Spitzer, initialement développé pour des milieux à l'ETL totalement ionisés, est sujette à caution. Dans notre exemple, la différence maximale entre un calcul ETL et HETL est de l'ordre de 10 %.

Sur la **figure 2**, on trace la pression HETL obtenue à l'aide de notre approche pour un plasma de titane dans des conditions thermodynamiques identiques à celles de la **figure 1**. Ces valeurs sont comparées à celles déduites de la règle utilisant l'ionisation moyenne \bar{Z} du plasma en supposant un gaz parfait. On s'aperçoit que les résultats sont en excellent accord. Cela signifie que l'on peut utiliser la formule simple s'appuyant sur l'ionisation moyenne du plasma dans les présentes conditions thermodynamiques.

Cette nouvelle approche consistant à coupler un modèle collisionnel-radiatif et un modèle d'atome moyen est source d'applications potentielles majeures. Elle a permis de mettre en évidence les limites d'une extension sans précaution de l'approche de Spitzer HETL. Elle sera utilisée afin de construire des tables de coefficients de transport HETL utiles aux simulations d'hydrodynamique radiative.

Références

- [1] G. FAUSSURIER, C. BLANCARD, P. COSSÉ, "Coupling of an average-atom model with a collisional-radiative equilibrium model", *Phys. Plasmas*, **21**, 112707 (2014).
- [2] L. SPITZER, R. HÄRM, "Coupling of an average-atom model with a collisional-radiative equilibrium model", *Phys. Rev.*, **89**, 977 (1953).