

Modélisation thermo-statistique des plasmas corrélés

Ce travail concerne le calcul quantique de la structure atomique au-delà du modèle de l'ion moyen. Notre approche inclut les fluctuations dues aux configurations électroniques décrivant différents états d'ionisation et d'excitation. Nous disposons maintenant d'un modèle de plasma capable de produire des équations d'état, coefficients de transport et opacités à l'Équilibre thermodynamique local (ETL). Nous présentons son application au calcul de la résistivité électrique statique dans la formulation de Ziman-Evans.

J.-C Pain • G. Dejonghe CEA-DAM Île-de-France

La description des plasmas fortement couplés (interaction coulombienne > agitation thermique) et partiellement dégénérés (température de l'ordre de l'énergie de Fermi) est difficile. Pour de tels milieux, typiques des intérieurs planétaires (Jupiter, Saturne) et de la phase de compression en fusion inertielle, la densité est proche de celle du solide et la température peut atteindre quelques dizaines d'eV (matière dense et tiède). La dynamique moléculaire quantique est une technique décrivant l'effet des ions et des électrons dans le cadre de la Théorie de la fonctionnelle densité (TFD) qui s'avère performante à basse température autour de la densité du solide ρ_0 [1]. Son coût numérique devient prohibitif lorsque des électrons de cœur se délocalisent, par augmentation de la température ou si la densité s'écarte de ρ_0 . Notre approche repose sur une détermination *ab initio* de la structure électronique fondée sur la TFD par un calcul auto-cohérent « tous électrons » en champ central (symétrie sphérique). La méthode des super-configurations (groupes de configurations proches en énergie) nous permet d'aborder l'effet des fluctuations de populations des orbitales et la délocalisation des électrons, et de ce fait permet d'aller plus loin que les modèles d'atomes moyens conventionnels [2].

Théorie de la fonctionnelle densité, états d'ionisation et d'excitation du plasma

Dans les calculs quantiques usuels, les fonctions d'onde sont évaluées dans le potentiel auto-cohérent d'un atome fictif, d'ionisation Z^* (ion moyen). En réalité, un plasma d'ions multichargés contient un nombre considérable de configurations. Une solution consiste à les rassembler en Super-configurations (SC). Le potentiel électrostatique est calculé de manière auto-cohérente pour chaque SC dans le cadre de la TFD et nous avons amélioré (grâce

à l'approche variationnelle de Jensen-Feynman consistant à approcher la solution exacte par une forme plus simple dont les paramètres sont obtenus par minimisation) la prise en compte des interactions coulombiennes, point-clé de la théorie [3]. Les fonctions d'onde électroniques sont obtenues par résolution de l'équation de Schrödinger avec corrections relativistes (Pauli). Cette approche quantique procède à la détection des résonances (pics dans les densités d'état et les sections efficaces de transfert d'impulsion), accompagnant la disparition d'un état lié dans le continuum. La grandeur recherchée A (pression, énergie interne, résistivité...) du plasma s'écrit comme la moyenne sur les SC :

$$A \propto \sum_{\Xi} \exp\left[-\frac{G_{\Xi}}{k_B T_{\Xi}}\right] A_{\Xi} \quad (1)$$

où G_{Ξ} , T_{Ξ} sont l'enthalpie libre et la température (effets hors ETL) de la SC Ξ .

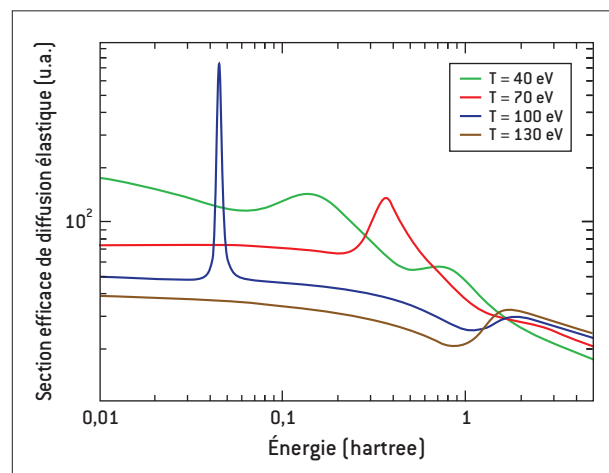


Figure 1. Section efficace de diffusion [unités atomiques] pour Al à $\rho = 2,7$ g/cm³ et différentes températures.

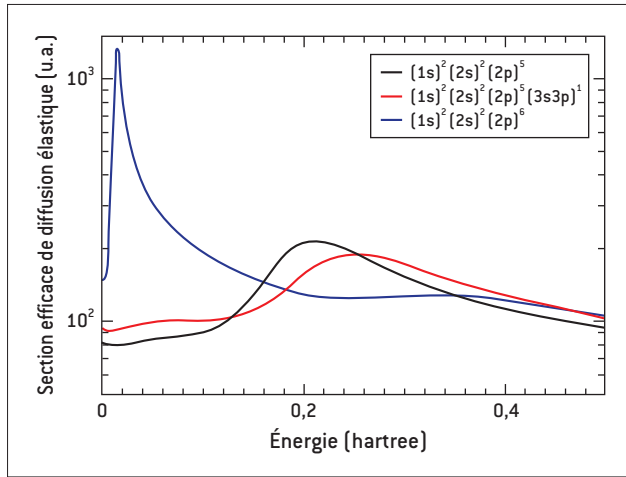


Figure 2. Sections efficaces de diffusion de trois SC pour Al à $\rho = 2,7 \text{ g/cm}^3$ et $T = 25 \text{ eV}$.

Équation d'état et résistivité

Les physiciens des plasmas connaissent bien la formule de Spitzer donnant la résistivité d'un plasma non dégénéré (à faible densité et haute température). Elle implique le logarithme coulombien $\ln \Lambda$ dont l'estimation est délicate. La formulation de Ziman du temps de collision électron-ion, étendue aux liquides et aux plasmas, découle de l'équation de Boltzmann et permet d'écrire la résistivité comme :

$$\eta = -\frac{\hbar}{3\pi e^2} \frac{1}{n_i Z^2} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{df}{d\varepsilon} \int_0^{2k} q^3 \sigma(q,k) S(q) dq ;$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} ; \quad q^2 = 2k^2(1 - \cos(\theta)) \quad (2)$$

où q est l'impulsion de l'électron diffusé dans la direction θ , $\sigma(q,k)$ la section efficace de collision élastique électron-ion, $S(q)$ le facteur de structure ionique, $f(\varepsilon)$ la distribution de Fermi-Dirac et n_i la densité de matière. Les diffusions multiples sont négligées. $\sigma(q,k)$ requiert les fonctions d'onde (déphasages) du continuum (les figures 1 et 2 représentent $\sigma(q,k)$ respectivement pour différentes températures et différentes SC). Nous avons

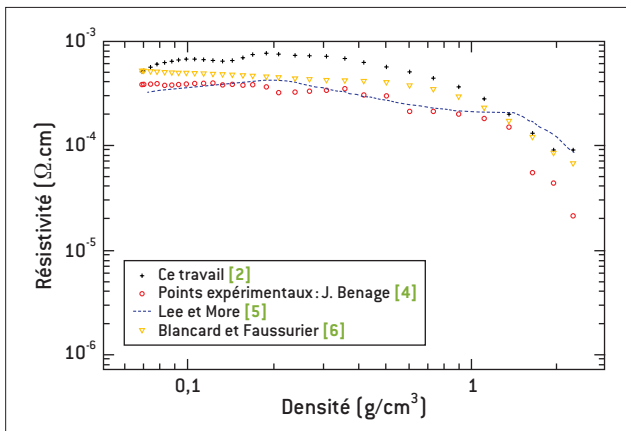


Figure 3. Comparaisons de valeurs de résistivité avec l'expérience de J. Benage et deux modèles théoriques.

étudié l'influence des conditions aux limites des fonctions d'onde, ainsi que du facteur de structure ionique. Nos calculs, incluant les contributions de toutes les configurations à la résistivité (figure 3), sont comparés avec les mesures de Benage *et al.* [4]. La température, non mesurée au cours de l'expérience (technique du fil explosé), est estimée à partir de tables d'équations d'état pour restituer le bilan d'énergie. Les écarts entre nos valeurs et les modèles existants (figure 3) sont du même ordre de grandeur que l'incertitude expérimentale.

Nous envisageons d'inclure l'effet des corrélations ioniques ainsi que les diffusions multiples, et d'étudier l'effet Ramsauer-Townsend (existence d'un minimum dans la section efficace de diffusion des électrons par les atomes dans les gaz rares). Ce travail constitue un premier pas vers l'extension de la théorie de Ziman-Evans aux plasmas de mélange. La description statistique des configurations, conjuguée à une bonne modélisation de l'écrantage, permet également de calculer des quantités optiques, comme l'opacité [7] ou l'émissivité [8], lorsque le nombre de transitions devient trop important.

RÉFÉRENCES

[1] V. RECOULES *et al.*, "Electrical conductivity of hot expanded aluminum: experimental results and ab initio calculations", *Phys. Rev. E*, **66**, 056412 (2002).

[2] J.-C. PAIN, G. DEJONGHE, "Electrical resistivity in warm dense plasmas beyond the average-atom model", *Contrib. Plasma Phys.*, **50**, p. 39-45 (2010).

[3] J.-C. PAIN, F. GILLERON, G. FAUSSURIER, "Jensen-Feynman approach to the statistics of interacting electrons", *Phys. Rev. E*, **80**, 026703 (2009).

[4] J. BENAGE, "Review of electrical resistivity measurements of dense aluminum and comparison to theory", *Phys. Plasmas*, **7**, p. 2040-2045 (2000).

[5] Y.T. LEE, R.M. MORE, "An electron conductivity model for dense plasmas", *Phys. Fluids*, **27**, p. 1273-1286 (1984).

[6] C. BLANCARD, G. FAUSSURIER, "Equation of state and transport coefficients for dense plasmas", *Phys. Rev. E*, **69**, 016409 (2004).

[7] S. TURCK-CHIEZE *et al.*, "Radiative properties of stellar plasmas and open challenges", *Astrophys. Space Sci.*, DOI 10.1007/s10509-010-0583-8 (2011).

[8] D. BENREDJEM, A. CALISTI, J.-C. PAIN, F. GILLERON, "Radiative power losses in fusion plasmas", *Can. J. Phys.*, sous presse (2011).