

ORSAY  
n° d'ordre : 3447

UNIVERSITE DE PARIS-SUD  
CENTRE D'ORSAY

# THESE

présentée

Pour obtenir

Le TITRE de DOCTEUR 3ÈME CYCLE  
SPÉCIALITÉ : PHYSIQUE DES GAZ ET DES PLASMAS

PAR

GÉRARD NAOURI

**SUJET :** INCLUSIONS RÉITÉRÉES DE DIPOLES DANS UN PLASMA DENSE

soutenue le 15 JUIN 1983 devant la Commission d'examen

MM. DELCROIX J.L. Président

DEUTSCH C.

LUC E.

PERROT F.

PFEUTY P.



## A B S T R A C T

This thesis introduces a simple model made up for the calculation of pressure effects in dense and partially ionized 3 D two component plasma.

The technic used is the description of the overlapping of atomic orbitals by means of interacting dipoles incased in one another.

By iteration of this procedure we get an effective two-body potential which allows us to calculate line shifts of hydrogenic ions.

In conclusion we suggest a possible improvement of the method by substituting a self consistent potential to the Debye one for the calculation of the wave functions.

## KEY WORDS

- Hot, dense plasmas; atomic physic; pressure ionization
- Line shifts
- Renormalization



*Cette thèse a été préparée dans le Laboratoire de Physique des Gaz et des Plasmas dont le directeur, Monsieur le Professeur J.L. DELCROIX, a accepté de présider le jury, je l'en remercie.*

*J'exprime également toute ma reconnaissance à Madame E. LUC, Messieurs F. PERROT et P. PFEUTY qui m'ont fait l'honneur de participer à ce jury.*

*Je tiens à exprimer ma gratitude à Monsieur C. DEUTSCH qui, en m'accueillant dans son équipe, m'a permis de mener à terme ce travail qu'il a motivé, suivi et orienté. Je remercie également Monsieur O. ATABEK dont les conseils, sur le plan du calcul numérique, ont été déterminants ; ainsi que Monsieur H. MINOO pour sa précieuse collaboration.*

*Il me reste à remercier J.F. PALIERNE pour ses conseils avisés et C. LARCHER pour son aide efficace.*

*Que Madame C. VERGAND qui a réalisé le travail ingrat du tirage soit particulièrement remerciée.*

\* \*  
\*



# S O M M A I R E

<u>NOTATIONS</u> .....	1
<u>INTRODUCTION</u> .....	4
<u>CHAPITRE I : EQUILIBRE D'IONISATION ET EFFETS SPECIFIQUES DES PLASMAS DENSES</u> .....	7
1. GENERALITES.....	7
2. GENERALISATION DE LA NOTION D'EQUATION DE SAHA.....	8
2.1. Généralités sur l'équilibre d'ionisation d'un plasma.....	8
2.2. Loi de Saha pour un plasma idéal non-dégénéré..	9
2.3. Pseudo loi de Saha pour un plasma idéal avec composante électronique dégénérée.....	12
2.4. Pseudo loi de Saha pour un plasma non-idéal, non-dégénéré.....	17
2.5. Pseudo loi de Saha pour un plasma non-idéal avec composante électronique dégénérée.....	21
3. EFFETS SPECIFIQUES DES PLASMAS DENSES.....	23
3.1. Ionisation de pression.....	23
3.2. Déplacement des raies.....	24
4. REMARQUES ET PRINCIPAUX RESULTATS.....	25
<u>CHAPITRE II : MODIFICATION DE LA CONSTANTE DIELECTRIQUE PAR DES INCLUSIONS REITEREES DE DIPOLES</u> .....	26
1. GENERALITES.....	26
2. MODELE EN DIMENSION 2.....	27
2.1. Formalisme.....	27

2.2.	Evolution de la constante diélectrique.....	28
2.2.1.	Principe du calcul.....	28
2.2.2.	Calcul de la polarisabilité.....	29
2.2.3.	Variation de la susceptibilité.....	29
2.3.	Résultats.....	30
3.	MODELE EN DIMENSION 3.....	32
3.1.	Formalisme.....	32
3.2.	Evolution de la constante diélectrique.....	32
3.2.1.	Principe du calcul.....	32
3.2.2.	Calcul de polarisabilité.....	33
3.2.3.	Variation de la susceptibilité.....	35
3.3.	Résultats.....	36
4.	REMARQUES ET PRINCIPAUX RESULTATS.....	38
	 <u>CHAPITRE III : MODELE SEMI-CLASSIQUE.....</u>	 39
1.	GENERALITES.....	39
2.	MODELE SEMI-CLASSIQUE.....	40
2.1.	Remarques préliminaires.....	40
2.2.	Principe du calcul.....	40
2.3.	Calcul de la densité de dipôles.....	41
2.4.	Calcul des polarisabilités "instantanées".....	42
2.5.	Etablissement de l'équation différentielle donnant $\epsilon(r)$ .....	44
2.6.	Discussion du modèle semi-classique et limitation a priori.....	45
3.	APPLICATION ANALYTIQUE A L'HYDROGENE.....	47
3.1.	Organisation du calcul.....	47
3.2.	Energies et fonctions d'onde analytiques.....	48
3.3.	Calcul de la constante diélectrique.....	50
4.	REMARQUES ET PRINCIPAUX RESULTATS.....	52

<u>CHAPITRE IV : CALCULS NUMERIQUES POUR UN ION</u> <u>HYDROGENOIDE</u> .....	53
1. GENERALITES.....	53
2. RESOLUTION NUMERIQUE DE L'EQUATION DE SCHRODINGER RADIALE.....	54
2.1. Généralités.....	54
2.2. TRIDG.....	57
2.3. NUMEROV.....	60
3. APPLICATION AUX HYDROGENOIDES.....	64
3.1. Organisation des calculs.....	64
3.2. Calcul des constantes diélectriques.....	65
3.3. Position des niveaux et déplacement des raies..	67
4. REMARQUES ET PRINCIPAUX RESULTATS.....	69
<u>CONCLUSION</u> .....	70
<u>ANNEXE I : FONCTIONS D'ONDE ANALYTIQUE ET ENERGIES</u> <u>D'UN ATOME D'HYDROGENE DANS UN POTENTIEL</u> <u>DE DEBYE</u> .....	71
A. CALCUL DES ETATS AVEC $\ell = 0$ DU POTENTIEL DE HULTHEN....	71
B. CALCUL DES ETATS AVEC $\ell \neq 0$ DU POTENTIEL DE HULTHEN MODIFIE.....	76
C. NORMALISATION DES FONCTIONS D'ONDE DU POTENTIEL DE HULTHEN.....	80
D. NORMALISATION DES FONCTIONS D'ONDE DU POTENTIEL DE HULTHEN MODIFIE.....	85
E. PERTURBATION DU POTENTIEL DE HULTHEN MODIFIE.....	91
<u>ANNEXE II : ORGANIGRAMMES ET LISTINGS</u> .....	95
<u>REFERENCES</u> .....	107

## NOTATIONS

Le système d'unité utilisé tout au long de ce travail est le C.G.S.

$a_0$	$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$	rayon de Bohr
$A^{i+}$		ion de charge $i$ fois $e$
$D$		distance de Debye
$e$		charge de l'électron
$E_i(s)$		énergie du niveau $s$ d'un ion $A^{i+}$
$E$		champ électrique
$E_{n,\ell}$		énergie d'un niveau $(n,\ell)$
$g_n$		dégénérescence d'un niveau
$h$		constante de Planck
$i$		degré d'ionisation d'un ion
$j$		indice repérant les espèces : $j = \begin{cases} e & \text{pour les } e^- \\ i & \text{pour } A^{i+} \\ i+1 & \text{pour } A^{(i+1)+} \end{cases}$
$I$		potentiel d'ionisation
$k$		constante de Boltzmann
$\ell$		nombre quantique orbital
$m_j$		masse de l'espèce $j$
$N_j$		nombre de particules de l'espèce $j$
$n$		nombre quantique principal
$n_j$		densité de l'espèce $j$
$p_{n,\ell}$		polarisabilité d'un niveau
$q$		charge d'une particule

$r$	extension d'un dipôle ou distance d'un électron au noyau
$r_0$	extension minimum d'un dipôle en dimension 2
$R_{n,\ell}(r)$	partie radiale de la fonction d'onde d'un électron
$T$	température
$u(r)$	potentiel d'interaction
$u_j$	fonction de partition interne de l'espèce $j$ (énergies comptées à partir du fondamental)
$V$	volume occupé par le plasma
$V(r)$	potentiel d'interaction
$y_{n_0}(r)$	$y_{n_0}(r) = \frac{1}{\epsilon_{n_0}(r)}$ inverse de la constante diélectrique vue par le niveau $n_0$
$Y_\ell^m$	harmoniques sphériques
$z_j$	fugacité de l'espèce $j$
$Z$	fonction de partition canonique
$Z_G$	fonction de partition grand canonique.
$\alpha$	$\alpha = \beta\mu$
$\beta$	$\beta = kT$
$\delta$	$\delta = \frac{1}{D}$
$\epsilon(r)$	constante diélectrique "vue" par des dipôles d'extension $r$
$\varphi_j$	fonction de partition totale pour une particule de l'espèce $j$
$\lambda_j$	longueur d'onde thermique pour l'espèce $j$
$\sigma_j$	fonction de partition interne (origine des énergies quelconque)
$\mu_j$	potentiel chimique de l'espèce $j$

$\theta, \varphi$

angles en coordonnées sphériques

$\chi_{n_0}(r)$

susceptibilité électrique "vue" par  
des dipôles d'extension  $r$  de la  
couche  $n_0$

$\chi_{n,l}(r) \quad \chi_{n,l}(r) = rR_{n,l}(r)$

\* \*  
\*

## INTRODUCTION

La fusion inertielle, que ce soit par laser ou par faisceaux d'ions, a mis à l'ordre du jour un certain nombre de questions concernant la physique atomique dans les milieux très denses que l'on obtient par compression.

Parmi les problèmes les plus intéressants, signalons l'ionisation dans la cible et les spectres de raies émis en cours de compression.

L'étude de l'ionisation est fondamentale pour comprendre la propagation et le freinage d'un faisceau de particules chargées dans un plasma dense.

Les spectres de raies et leur modification par l'environnement de l'émetteur peuvent constituer un moyen très puissant de diagnostic des plasmas de fusion inertielle.

Il apparaît qu'aucun des modèles actuellement existants ne décrit de manière réellement satisfaisante les phénomènes "non-thermiques" (ou de pression) qui apparaissent à haute densité et basse température.

L'objectif de ce travail est de présenter un modèle simple décrivant ces effets "de pression" dans un plasma à deux composantes, partiellement ionisé et dense.

C'est une extension en dimension trois des travaux de Kosterlitz et Thouless basés sur les techniques du groupe de renormalisation. L'effet du plasma dense et de l'interpénétration des orbites atomiques va être décrit par des interactions de dipôles que l'on emboîte les uns dans les autres. En réitérant cette procédure on obtient un potentiel effectif d'interaction à 2 corps. Pour implémenter ce modèle il faut une idée a priori de l'équili-

bre d'ionisation et des effets "thermiques" du plasma : on utilisera une équation de Saha généralisée. On montrera que si on travaille à faible corrélation, le potentiel de Debye décrit correctement les effets thermiques du plasma. Ceci implique une limitation de la validité des résultats au domaine  $\Lambda \leq 1$ . Notons que cette restriction n'est pas liée à la physique "contenue" dans le modèle, mais plutôt à la nécessité de recourir à des approximations pour mener à bien les premiers calculs.

Dans ces conditions l'ionisation sera peu différente de ce qu'elle est dans un plasma idéal. Par contre le spectre de raies peut présenter des différences notables par rapport au spectre d'un atome isolé.

Dans une première étape, des calculs semi-analytiques du potentiel effectif ont été effectués pour l'hydrogène afin de déterminer les ordres de grandeur des effets obtenus.

Puis le calcul du spectre a été accompli numériquement pour des ions hydrogénoïdes. Il peut être facilement étendu au cas des alcalins.

Il faut bien voir que les résultats obtenus sont surtout qualitatifs, la physique atomique injectée dans le modèle étant insuffisante pour confronter avec précision nos chiffres à ceux de l'expérience. Et cela d'autant plus qu'il n'y a pas encore de consensus expérimental sur l'amplitude et le sens des décalages des spectres d'émission dans un plasma dense.

Nous allons maintenant rappeler les longueurs caractéristiques et les paramètres sans dimension qui vont permettre de préciser les termes tels que : plasma idéal, dégénéré, corrélé ou classique.

Longueurs caractéristiques :

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{i \cdot e^2}{kT} && \text{longueur de Landau} \\ d &= \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \cdot \frac{1}{n_i^{1/3}} && \text{distance moyenne entre les ions} \\ D &= \left[ \frac{kT}{4\pi e^2 \cdot (n_e + \sum_i i^2 \cdot n_i)} \right]^{1/2} && \text{longueur de Debye} \\ \lambda_e &= \frac{\hbar}{\sqrt{m_e kT}} && \text{longueur d'onde thermique des} \\ &&& \text{électrons} \end{aligned}$$

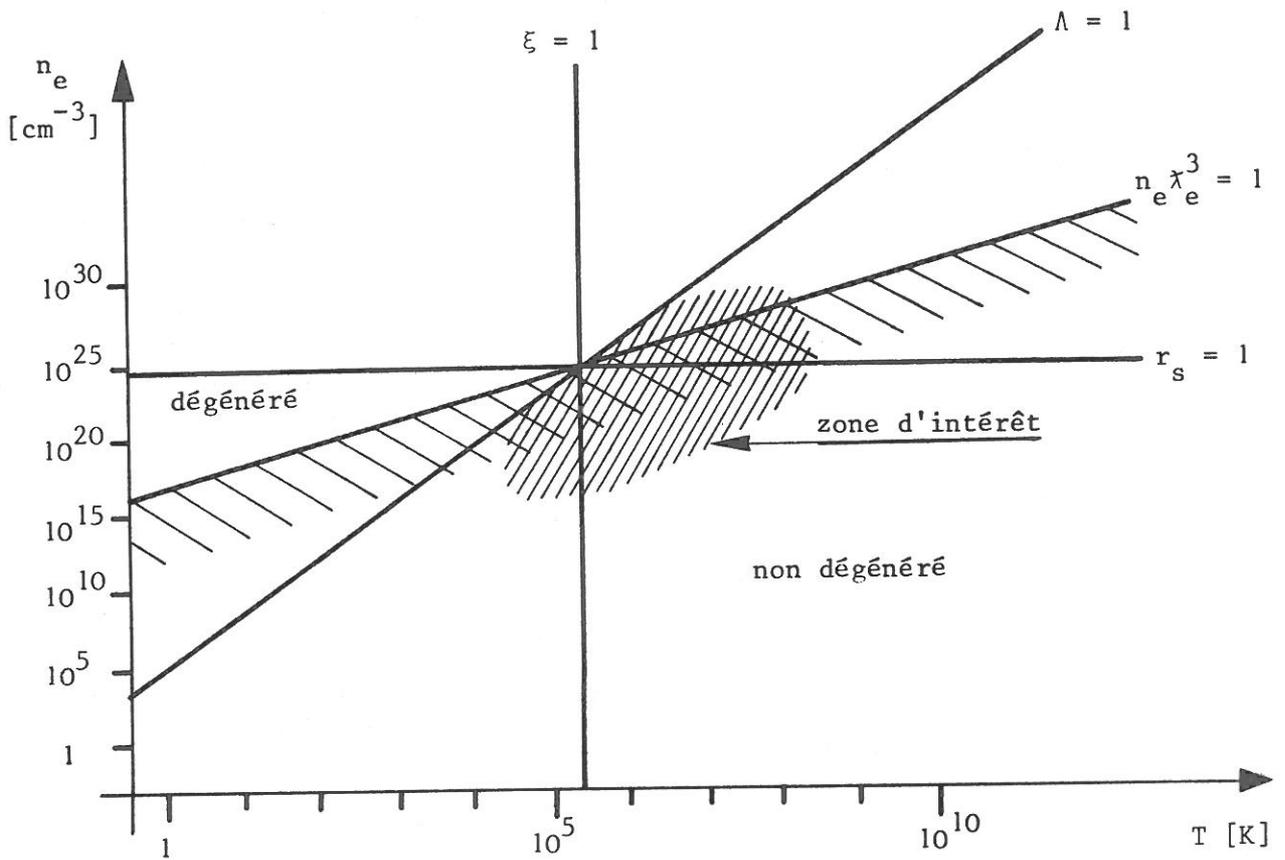
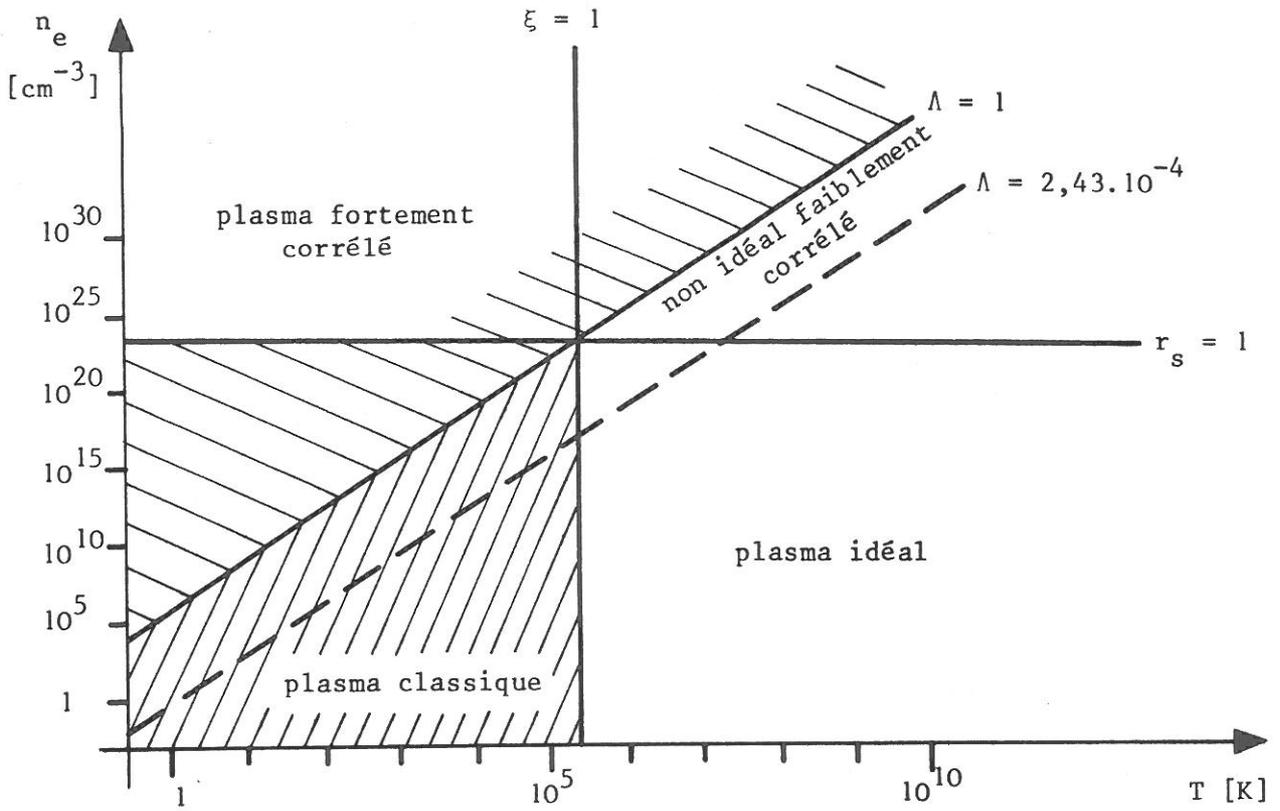
Paramètres sans dimension :

$$\begin{aligned} \Lambda &= \frac{\lambda}{D} && \text{paramètre de non-idéalité} \\ &&& \Lambda > 1 \Leftrightarrow \text{plasma fortement corrélé} \\ &&& \text{on utilise parfois} \\ \Gamma &= \frac{\lambda}{d} && \Lambda = 1 \Leftrightarrow \Gamma \approx 0,69 \\ \xi &= \frac{\lambda}{\lambda_e} && \xi \gg 1 \Leftrightarrow \text{plasma classique} \\ &&& \text{(pas d'effets quantiques)} \\ n_e \cdot \lambda_e^3 &&& \text{paramètre de dégénérescence} \\ &&& n_e \cdot \lambda_e^3 \gg 1 \Leftrightarrow \text{plasma à composante} \\ &&& \text{électronique dégénérée} \\ r_s &= \frac{d}{a_0} && \text{paramètre de Brückner} \\ &&& r_s \leq 1 \Leftrightarrow \text{interpénétration des} \\ &&& \text{orbites atomiques} \end{aligned}$$

A partir de ces paramètres on peut délimiter des frontières (plus ou moins arbitraires) entre les différents types de plasma.

Nous allons travailler avec un plasma non-idéal, faiblement corrélé, proche du point  $r_s = 1$ ,  $\xi = 1$ .

On aura donc interpénétration des orbites, éventuellement dégénérescence électronique, mais on a respecté la limite  $\Lambda \leq 1$ .



CLASSIFICATION DENSITE-TEMPERATURE D'UN PLASMA A 2 COMPOSANTES (e-p)

## CHAPITRE I

### EQUILIBRE D'IONISATION ET EFFETS SPECIFIQUES DES PLASMAS DENSES

#### 1. GENERALITES

Nous nous intéressons à l'équilibre d'ionisation et aux effets spécifiques des plasmas denses.

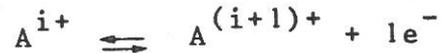
On va voir qu'il est possible de généraliser l'équation de Saha pour des plasmas faiblement "non-idéal" ( $\Lambda \leq 1$ ) avec ou sans dégénérescence électronique.

Les calculs qui vont être faits auront surtout pour objet de cerner les approximations que l'on va utiliser pour obtenir une pseudo-équation de Saha.

## 2. GENERALISATION DE LA NOTION D'EQUATION DE SAHA

### 2.1. GENERALITES SUR L'EQUILIBRE D'IONISATION D'UN PLASMA

On considère un plasma formé de plusieurs espèces de particules et on s'intéresse à l'équilibre de la réaction :



$i$  = degré d'ionisation de l'élément A  
 $N_i$  = nombre de particules de l'espèce  $A^{i+}$   
 $\mu_i$  = potentiel chimique de l'espèce  $A^{i+}$

soit  $F$  l'énergie libre,  $\mu_i = \frac{\partial F}{\partial N_i}$ .

L'équilibre de la réaction se traduit par un minimum de l'énergie

$$\mu_i \cdot dN_i + \mu_{i+1} dN_{i+1} + \mu_e dN_e = 0$$

or  $dN_i = -dN_{i+1} = -dN_e$

donc  $\mu_i = \mu_{i+1} + \mu_e$ .

Soit  $z_i = e^{\beta \cdot \mu_i}$  la fugacité de l'espèce  $A^{i+}$ , l'équation précédente peut alors s'écrire :

$$\frac{z_i}{z_{i+1} z_e} = 1 \quad (I.1)$$

Si on sait tirer une relation entre les  $z_i$  et les  $N_i$  on aura une information sur le rapport des populations des différents niveaux d'ionisation.

Pour un système de particules idéales et une statistique de Boltzmann

$$\mu_i = \mu_i^0(T) + kT \text{Log } n_i$$

dont on tire l'équation de Saha  $\frac{n_i}{n_{i+1} \cdot n_e} = K(T)$

avec 
$$K(T) = e^{\frac{1}{kT} [\mu_{i+1}^0 + \mu_e^0 - \mu_i^0]}$$

En redémontrant cette équation dans un formalisme grand canonique, on pourra dégager une méthode que l'on étendra à des plasmas non idéaux et à la statistique de Fermi pour les électrons.

## 2.2. LOI DE SAHA POUR UN PLASMA IDEAL NON DEGENERE

En formalisme grand canonique

$$Z_G = \text{Tr} \left[ e^{\beta \mu_e N_e + \beta \mu_i N_i + \beta \mu_{i+1} N_{i+1} - \beta H^0} \right]. \quad (I.2)$$

On considère que les 3 espèces  $A^{i+}$ ,  $A^{(i+1)+}$  et  $e^-$  n'interagissent pas (plasma idéal), alors

$$H^0 = H_i^0 + H_{i+1}^0 + H_e^0, \quad H_i^0 = \sum_{N_i=0}^{\infty} H_i^0(N_i).$$

Les 3 hamiltoniens agissent sur des espaces séparés, ils commutent, aussi :

$$Z_G = Z_G(i) \cdot Z_G(i+1) \cdot Z_G(e) \text{ avec } Z_G(i) = \text{Tr}_i e^{\beta \mu_i N_i - \beta H_i^0}$$

Calculons  $Z_G(j)$  en fonction de  $z_j$

où  $j = i, i+1$  ou  $e$  (car le calcul est le même pour toutes les espèces).

$$Z_G(j) = \sum_{N_j=0}^{\infty} e^{\beta \mu_j N_j} \cdot \text{Tr} e^{-\beta H_j^0(N_j)}$$

$$Z_G(j) = \sum_{N_j=0}^{\infty} z_j^{N_j} Z_j(N_j)$$

$Z_j(N_j)$  = fonction de partition canonique de  $N_j$  particules.

On applique alors la statistique de Maxwell-Boltzmann, ce qui nous ramène au résultat classique

$$Z_j(N_j) = \frac{\varphi_j^{N_j}}{N_j!}, \quad \varphi_j = \frac{V}{\lambda_j^3} \sigma_j \quad (\text{fonction de partition à 1 particule})$$

où  $\lambda_j = \left( \frac{h^2}{2\pi m_j kT} \right)^{1/2}$

et  $\sigma_j = \sum_s g_s e^{-\beta E_j(s)}$  (fonction de partition interne).

On en tire donc  $Z_G(j) = \sum_{N_j=0}^{\infty} \frac{1}{N_j!} (z_j \varphi_j)^{N_j}$

i.e.  $Z_G(j) = e^{z_j \cdot \varphi_j}$

Comme  $N_j = z_j \frac{\partial \text{Log } Z_G}{\partial z_j}$ ,

$\text{Log } Z_G = \sum_{j \in \{i, i+1, e\}} \text{Log } Z_G(j)$  où seul  $Z_G(j)$  dépend de  $z_j$ ,

$$\Rightarrow \boxed{N_j = z_j \frac{\partial \text{Log } Z_G(j)}{\partial z_j}}$$

donc  $N_j = z_j \frac{\partial (z_j \varphi_j)}{\partial z_j} = z_j \varphi_j$

$$\Rightarrow \boxed{z_j = \frac{N_j}{\varphi_j}}$$

soit, en remplaçant chaque  $z_j$  par son expression dans (I.1),

$$\frac{N_i}{N_{i+1} \cdot N_e} = \frac{1}{V} \frac{\sigma_i}{\sigma_{i+1} \cdot \sigma_e} \left( \frac{\lambda_{i+1} \cdot \lambda_e}{\lambda_i} \right)^3$$

$$\frac{N_i}{N_{i+1} \cdot N_e} = \frac{1}{V} \frac{\sigma_i}{2 \cdot \sigma_{i+1}} \left( \frac{m_i}{m_{i+1}} \right)^{3/2} \left( \frac{h^2}{2\pi m_e kT} \right)^{3/2}$$

Les énergies qui interviennent dans les fonctions de partition internes doivent être mesurées par rapport à la même origine. Si on prend le fondamental de l'ion  $A^{(i+1)+}$  comme origine

$$\text{alors } E_i(s) = E_i^0(s) - (E_{i+1}(0) - E_i(0))$$

$$E_{i+1}(s) = E_{i+1}^0(s),$$

$E_i^0(s)$  = énergie comptée par rapport au fondamental de l'ion  $A^{i+}$ .  
On utilise généralement pour chaque ion une fonction de partition avec les énergies comptées par rapport au fondamental de l'ion

$$\text{soit } u_i = \sum_s g_s e^{-\beta E_i^0(s)}$$

$$\text{Ici } \sigma_{i+1} = u_{i+1}$$

$$\sigma_i = u_i \cdot e^{\beta I}$$

avec  $I = E_{i+1}(0) - E_i(0)$  énergie d'ionisation de  $A^{i+}$

si on utilise  $n_i = \frac{N_i}{V}$  et  $\frac{m_i}{m_{i+1}} \approx 1$  on a :

$$\boxed{\frac{n_i}{n_{i+1} \cdot n_e} = \frac{u_i}{2 \cdot u_{i+1}} \left( \frac{h^2}{2\pi m_e kT} \right)^{3/2} e^{\beta I}}$$

c'est l'équation de Saha sous sa forme "classique".

On va maintenant essayer de trouver des équations ayant la même forme mais valable là où cette équation ne l'est plus.

2.3. PSEUDO LOI DE SAHA POUR UN PLASMA IDEAL AVEC  
COMPOSANTE ELECTRONIQUE DEGENEREE

La composante électronique est dégénérée mais le plasma est idéal, on peut donc factoriser  $Z_G$ .  $Z_G(e)$  est maintenant la fonction de partition grand canonique d'un gaz parfait de fermions.

On a

$$\text{Log } Z_G(e) = \varphi_e \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{2}{3} \cdot z_e \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2}}{e^{x+z_e}} dx$$

$$N_e = z_e \frac{\partial \text{Log } Z_G(e)}{\partial z_e} = \varphi_e \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} z_e \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2}}{e^{x+z_e}} dx$$

(cf. Balescu<sup>1</sup> p.162)

$F_{3/2}(z_e)$

On note aussi  $N_e = \varphi_e$ .

Le problème de l'inversion analytique de cette formule pour en tirer  $z_e$  en fonction de  $N_e$  a été résolu par Leonard<sup>2</sup>. Rappelons simplement son résultat :

$$z_e = \left[ \frac{\varphi_e}{N_e} - \left( 1 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{-1} \frac{\theta(t)}{t^2} dt \right) \right]^{-1}$$

avec

$$\theta(t) = \tan^{-1} \left[ \frac{2\sqrt{\pi} \frac{\varphi_e}{N_e} (\text{Log}(-t))^{1/2}}{\frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\varphi_e}{N_e} t \int_1^{\infty} \frac{(\text{Log } y)^{1/2}}{y(y+t)} dy - 1} \right]$$

La complexité du résultat rend préférable l'emploi d'approximations valables à faible ou forte dégénérescence.

- Dégénérescence faible

$$F_{3/2}(z_e) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} z_e \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2}}{e^x + z_e} dx$$

si  $|z_e| < 1$  on a  $F_{3/2}(z_e) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \frac{z_e^n}{n^{3/2}}$

$$\Rightarrow \frac{N_e}{\varphi_e} = z_e \left[ 1 - \frac{z_e}{2^{3/2}} + \frac{z_e^2}{3^{3/2}} - \frac{z_e^3}{4^{3/2}} + \dots \right]$$

Le théorème de Lagrange permet d'inverser une série

$$y = ax + bx^2 + cx^3 + \dots$$

pour obtenir  $x = Ay + By^2 + Cy^3 + \dots$  avec les relations suivantes

$$A = \frac{1}{a} \quad B = -\frac{b}{a^3} \quad C = \frac{1}{a^5}(2b^2 - ac) \quad (\text{cf. Dwight}^3 \text{ p.15})$$

On en tire :  $z_e = \frac{N_e}{\varphi_e} \left[ A + B \frac{N_e}{\varphi_e} + C \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right)^2 + \dots \right]$

$$A = 1 \quad B = 2^{-3/2} \approx 0,353 \quad C = \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{3^{3/2}} \right) = 0,0575$$

Remplaçons  $z_e$  dans (I.1), on trouve

$$\frac{n_i}{n_{i+1} \cdot n_e} = \frac{u_i}{2 \cdot u_{i+1}} \left( \frac{h^2}{2\pi m_e kT} \right)^{3/2} \cdot e^{\beta(I+\Delta I)} \quad (\text{I.3})$$

On a gardé la forme de la loi de Saha, et regroupé dans  $e^{\beta\Delta I}$  la déviation par rapport au cas non dégénéré.

$$\Delta I = kT \text{ Log} \left[ 1 + B \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right) + C \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right)^2 + \dots \right]$$

Les premiers termes du développement sont positifs, l'effet de la statistique de Fermi est donc d'augmenter le potentiel d'ionisation. En effet l'énergie nécessaire pour introduire un nouvel électron dans le milieu augmente avec  $n_e$ . Les formules trouvées ne sont valables que si  $\frac{N_e}{\varphi_e} < 1$ , or  $\frac{N_e}{\varphi_e} = n_e \lambda_e^3$  paramètre de dégénérescence  $n_e \lambda_e^3 < 1$  coïncide avec l'hypothèse de faible dégénérescence.

- Dégénérescence forte

$$|z_e| > 1$$

Une intégration par partie donne

$$\frac{N_e}{\varphi_e} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2} e^{x-\alpha}}{(e^{x-\alpha}+1)^2} dx \quad \text{avec } \alpha = \beta\mu_e \quad (z_e = e^\alpha)$$

$$t = x - \alpha \Rightarrow \frac{N_e}{\varphi_e} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_{-\alpha}^{\infty} (\alpha+t)^{3/2} \frac{e^t}{(e^t+1)^2} dt$$

$$(\alpha+t)^{3/2} = \alpha^{3/2} + \frac{3}{2}\alpha^{1/2} t + \frac{3}{8}\alpha^{-1/2} t^2 + \dots$$

$$\Rightarrow \frac{N_e}{\varphi_e} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left[ I_0 \alpha^{3/2} + \frac{3}{2} I_1 \alpha^{1/2} + \frac{3}{8} I_2 \alpha^{-1/2} + \dots \right]$$

avec  $I_n = \int_{-\alpha}^{+\infty} \frac{t^n \cdot e^t}{(e^t+1)^2} dt$  intégrales de Sommerfeld

On remplace  $\int_{-\alpha}^{+\infty}$  par  $\int_{-\infty}^{+\infty}$  car  $e^t \ll 1$  si  $t < -\alpha$   
 car  $e^{-\alpha} = \frac{1}{z_e} \ll 1$

on trouve (cf. Huang<sup>4</sup> p.225)

$$\frac{N_e}{\varphi_e} = \frac{3}{4\sqrt{\pi}} \left[ \left( \text{Log } z_e \right)^{3/2} + \frac{\pi^2}{8} \left( \text{Log } z_e \right)^{-1/2} + \frac{7\pi^4}{640} \left( \text{Log } z_e \right)^{-5/2} + \dots \right]$$

Si on ne conserve que le premier terme et si on pose  $z_e = e^{\beta\mu_0}$

on trouve 
$$\mu_0 = kT \left( \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \right)^{2/3} \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right)^{2/3}$$

$$\mu_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{6\pi^2}{3} n_e \right)^{2/3} \quad \text{énergie de Fermi}$$

La factorisation de  $\mu^{3/2} = (\text{Log } z_e)^{3/2}$  dans l'expression de  $\frac{N_e}{\varphi_e}$

donne 
$$1 = \left( \frac{\mu}{\mu_0} \right)^{3/2} \left[ 1 + \frac{\pi}{8} (\text{Log } z_e)^{-2} + \frac{7\pi^4}{640} (\text{Log } z_e)^{-4} + \dots \right]$$

On en tire (cf. Kubo<sup>5</sup> p.241) 
$$\mu_e = \mu_0 \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} (\beta\mu_0)^{-2} - \frac{\pi^4}{80} (\beta\mu_0)^{-4} + \dots \right]$$

$$\begin{aligned} \mu_e = kT & \left[ \left( \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \right)^{2/3} \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right)^{2/3} - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \right)^{2/3} \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right)^{-2/3} \right. \\ & \left. - \frac{\pi^4}{80} \left( \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \right)^2 \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right)^{-2} + \dots \right] \end{aligned}$$

$$z_e = e \left[ A \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right)^{2/3} - B \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right)^{-2/3} - C \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right)^{-2} + \dots \right]$$

or 
$$1 = \frac{N_e}{\varphi_e} e^{-\text{Log} \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right)}$$

Posons 
$$z_e = \frac{N_e}{\varphi_e} e^{\beta\Delta I}$$

On obtient 
$$\Delta I = kT \left[ -\text{Log} \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right) + A \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right)^{2/3} - B \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right)^{-2/3} - C \left( \frac{N_e}{\varphi_e} \right)^{-2} \right]$$

On retrouve une pseudo-équation de Saha similaire à (I.3) en injectant  $z_e$  dans (I.1).

On a  $A = 1,21$        $B = 0,680$        $C = 0,689$

ce qui correspond à une augmentation du potentiel d'ionisation, les équations trouvées sont valables si  $\frac{N_e}{\varphi_e} = n_e \lambda_e^3 \gg 1$  (dégénérescence forte), c'est-à-dire pour  $n_e > \tilde{n} =$  densité critique.

$$\tilde{n} = 2 \left( \frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{3/2} \approx 4,828 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2} \text{ cm}^{-3}$$

Exemple :  $T = 10^7 \text{ K} \Rightarrow \tilde{n} \approx 1,5 \cdot 10^{26} \text{ cm}^{-3}$

Remarque : On peut traiter les deux approximations dégénérescence faible et forte de la même manière en utilisant la transformée de Mellin de  $Z_G(e)$  (cf. Grandy<sup>6</sup>).

2.4. PSEUDO LOI DE SAHA POUR UN PLASMA NON-IDEAL,  
NON-DEGENERE

Nous nous intéressons maintenant à un plasma non-idéal, c'est-à-dire avec interactions coulombiennes entre particules chargées, défini par l'hamiltonien :

$$H = H^0 + \sum_{i < j} \frac{q_i \cdot q_j}{r_{ij}}$$

$Z_G$  ne se factorise plus car les opérateurs ne commutent pas.

Pour un plasma à une composante :

$$Z_G = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z_N$$

$$Z_N = \text{Tr} \left[ e^{-\beta (H^0 + \sum_{i < j} u(r_{ij}))} \right],$$

$u(r_{ij})$  = potentiel d'interaction entre 2 particules  $i$  et  $j$ .  
Le développement en amas de Mayer nous donne :

$$\text{Log } Z_G = V \sum_{\ell=1}^{\infty} b_{\ell} \tilde{z}^{\ell} \quad \text{avec} \quad \tilde{z} = (2s+1) \frac{z}{\lambda^3},$$

tronquée à l'ordre 1, cette expression devient :

$$\text{Log } Z_G = V \frac{z}{\lambda^3} (2s+1) \quad \text{car} \quad b_1 = 1.$$

On retrouve le résultat  $\text{Log } Z_G = \varphi \cdot z$  avec  $\varphi = \frac{V(2s+1)}{\lambda^3}$ .

A l'ordre 2 :

$$\text{Log } Z_G = V (\tilde{z} + b_2 \cdot \tilde{z}^2)$$

On peut séparer dans  $b_2$  la contribution des états liés ( $b_2^B$ ) et la contribution des états de diffusion ( $b_2^F$ ).

(cf. Dewitt & Rogers<sup>7</sup> (14)).

$$b_2 = \sqrt{2} \lambda^3 \sum_{\ell} (2\ell+1) \left[ \sum_n e^{-\beta E_{n,\ell}} + \pi^{-1} \int_0^{\infty} e^{-\frac{\beta P^2}{2m}} \frac{d\delta_{\ell}(P)}{dP} dP \right] \quad (I.4)$$

$$b_2 = b_2^B + b_2^F \quad \text{avec } \delta_{\ell}(P) = \text{déphasage des états de diffusion.}$$

Il est intéressant de constater qu'il est possible de trouver l'équation de Saha décrivant la formation des dimères en considérant les états liés comme des pseudo-particules.

Soit  $z_2$  la fugacité de la nouvelle espèce considérée.

Posons :

$$z_2 = z^2 \Rightarrow \tilde{z}_2 = \tilde{z}^2$$

alors  $\text{Log } Z_G = V(\tilde{z} + \tilde{z}_2^B b_2^B + \tilde{z}_2^F b_2^F)$

$$\left\{ \begin{array}{l} N = \tilde{z} \frac{\partial \text{Log } Z_G}{\partial \tilde{z}} = V(\tilde{z} + 2b_2^F \tilde{z}^2) \\ N_2 = \tilde{z}_2 \frac{\partial \text{Log } Z_G}{\partial \tilde{z}_2} = V \tilde{z}_2^B b_2^B \end{array} \right.$$

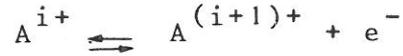
$$\left\{ \begin{array}{l} n = \tilde{z} + 2b_2^F \tilde{z}^2 \\ n_2 = \tilde{z}_2^B b_2^B \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \tilde{z} \approx n \\ \tilde{z}_2 = n_2 \cdot \frac{1}{b_2^B} \end{array} \right.$$

$$\tilde{z}_2 = \tilde{z}^2 \Rightarrow \frac{n_2}{n} \approx b_2^B$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{n_2}{n} = \frac{1}{2} \left( \frac{h^2}{2\pi m' kT} \right)^{3/2} \left( \sum_{\ell} (2\ell+1) \sum_n e^{-\beta E_{n,\ell}} \right) e^{\beta I}}$$

$I$  = énergie de dissociation,  $m'$  = masse réduite =  $\frac{m}{2}$ .  
On retrouve une loi similaire à l'équation de Saha.

On peut traiter l'équilibre d'ionisation



de la même manière en n'introduisant que 2 espèces : les ions  $A^{(i+1)+}$  et les électrons. Les ions  $A^{i+}$  seront introduits par la suite comme des états liés ( $A^{(i+1)+}, e^{-}$ ). La formule (I.2) se réécrit :

$$Z_G = \text{Tr} \left[ e^{\beta \mu_e N_e + \beta \mu_{i+1} N_{i+1} - \beta H} \right]$$

$$H = \sum_{N_e=0}^{\infty} \sum_{N_{i+1}=0}^{\infty} \left[ H_e^0(N_e) + H_{i+1}^0(N_{i+1}) + \sum_{i < j} \frac{q_i \cdot q_j}{r_{ij}} \right]$$

Le développement en amas nous donne :

$$\text{Log } Z_G = V \sum_{\ell, m} b_{\ell, m} \tilde{z}_e^{\ell} \tilde{z}_{i+1}^m \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \tilde{z}_e = (2s_e + 1) \frac{z_e}{\lambda_e^3} \\ \tilde{z}_{i+1} = \sigma_{i+1} \frac{z_{i+1}}{\lambda_{i+1}^3} \end{cases}$$

d'où, si on se limite à l'ordre 2

$$\text{Log } Z_G = V \left[ \tilde{z}_e + \tilde{z}_{i+1} + 2b_{e, i+1} \tilde{z}_e \cdot \tilde{z}_{i+1} + b_{e, e} \tilde{z}_e^2 + b_{i+1, i+1} \tilde{z}_{i+1}^2 \right].$$

Le développement de Mayer ne converge pas pour le potentiel de Coulomb. Montroll et Ward ont calculé un développement quantique en resommant la partie la plus divergente de chaque intégrale d'amas. Deux résultats apparaissent :

- On peut resommer les chaînes d'interactions de Coulomb pour obtenir une interaction effective à deux corps, à savoir

$$V_{\text{eff}}(r) = - \frac{(i+1)}{r} e^{-\frac{r}{D}} - \frac{i+1}{D} \text{ potentiel de Debye "shifté"}.$$

- On peut calculer  $b_{e, i+1}$  de la même manière que  $b_2$  (Eq. I.4) en prenant les  $E_{n, \ell}$  et  $\delta_{\ell}$  solutions du potentiel de Debye "shifté". On obtient :

$$b_{e,i+1} = b_{e,i+1}^B + b_{e,i+1}^F.$$

Par définition  $\tilde{z}_i = 2 \cdot \tilde{z}_e \cdot \tilde{z}_{i+1} \cdot b_{e,i+1}^B$

$$\text{donc } \text{Log } Z_G = V \left[ \tilde{z}_e + \tilde{z}_{i+1} + \tilde{z}_i + 2b_{e,i+1}^F \tilde{z}_e \cdot \tilde{z}_{i+1} + b_{e,e} \tilde{z}_e^2 + b_{i+1,i+1} \tilde{z}_{i+1}^2 \right]$$

$$\text{et } N_i = \frac{1}{\tilde{z}_i} \frac{\partial \text{Log } Z_G}{\partial \tilde{z}_i} = V \tilde{z}_i \Rightarrow n_i = \tilde{z}_i.$$

De même si on ne tient pas compte des termes au carré :

$$n_e = \tilde{z}_e \quad n_{i+1} = \tilde{z}_{i+1}$$

la pseudo-équation de Saha résulte alors de la définition de  $\tilde{z}_i$  que l'on peut réécrire :

$$\frac{n_i}{n_e \cdot n_{i+1}} = 2 \cdot b_{e,i+1}^B.$$

Ce qui nous redonne en prenant  $b_{e,i+1}^B$  dans (I.4) :

$$\frac{n_i}{n_e \cdot n_{i+1}} = \frac{1}{2} \left( \frac{h^2}{2\pi m_e kT} \right)^{3/2} \left( \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sum_n e^{-\beta \cdot E_{n,\ell}} \right) e^{\beta I}$$

Les  $E_{n,\ell}$  sont solutions de  $V_{\text{eff}}(r) = -\left(\frac{i+1}{r} e^{-\frac{r}{D}} + \frac{i+1}{D}\right)$

donc  $E_{n,\ell} = E'_{n,\ell} - \frac{i+1}{D}$  avec  $E'_{n,\ell}$  solution de  $V_D(r) = -\frac{i+1}{r} e^{-\frac{r}{D}}$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{n_i}{n_e \cdot n_{i+1}} = \frac{1}{2} \left( \frac{h^2}{2\pi m_e kT} \right)^{3/2} \left( \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sum_n e^{-\beta \cdot E'_{n,\ell}} \right) e^{\beta(I+\Delta I)}} \quad (\text{I.5})$$

où  $\boxed{\Delta I = \frac{i+1}{D}}$

(n.b. : on introduit souvent  $\Delta I = - \frac{i+1}{D}$  pour corriger l'équation de Saha, ceci est dû au fait que la fonction de partition est calculée avec le potentiel de Coulomb, ce qui n'est pas le cas ici. Notre  $\Delta I$  compense l'effet trop grand du potentiel de Debye sur I. cf. Jackson & Klein).

En décrivant le plasma par l'équation (I.5) on n'a pris en compte qu'une partie seulement des effets de plasma :

- On n'a pas tenu compte des états de diffusion
- On n'a pas non plus tenu compte des effets d'échange et de corrélation
- On a utilisé les résultats au premier ordre des développements des fonctions de corrélations par rapport au paramètre plasma (calcul de  $V_{\text{eff}}(r)$ ).

2.5. PSEUDO LOI DE SAHA POUR UN PLASMA NON-IDEAL AVEC COMPOSANTE ELECTRONIQUE DEGENEREE

On a calculé (2.3) des augmentations du potentiel d'ionisation valables à faible ou forte dégénérescence. Ces augmentations n'étaient dues qu'à la statistique de Thomas-Fermi pour un plasma idéal. Si le plasma est non-idéal on utilise le potentiel de Debye "shifté" pour obtenir l'équation (I.5). On peut cumuler les deux procédures en prenant comme distance d'écran des électrons dégénérés le rayon de Thomas-Fermi :

$$R_{TF}^{-1} = \left( \frac{3n_e}{\pi} \right)^{1/6} \cdot \sqrt{\frac{4m_e e^2}{\hbar^2}}$$

ce qui implique :

$$\frac{1}{D^2} = \frac{1}{R_{TF}^2} + \left( \frac{4\pi e^2 \cdot \sum_i n_i \cdot i^2}{kT} \right) \tag{I.6}$$

$$\frac{1}{D_e} = \sqrt{\frac{4\pi n_e e^2}{kT}} \text{ est remplacé par } \frac{1}{R_{TF}},$$

or la condition de dégénérescence  $n_e \cdot \lambda_e^3 > 1$  implique  $\frac{n_e \cdot \hbar^3}{(m_e \cdot kT)^{3/2}} > 1$ ,  
donc  $R_{TF} > D_e$ .

Seuls les électrons contribuent alors à l'écrantage qui devient moins important que si l'on avait traité les électrons comme un gaz classique de même densité et température.

### 3. EFFETS SPECIFIQUES DES PLASMAS DENSES

#### 3.1. IONISATION DE PRESSION

On sait décrire le plasma de manière satisfaisante dans deux cas extrêmes :

- pour  $\Lambda < 0,1$  (c'est-à-dire à basse densité et haute température) on a affaire à des plasmas faiblement non-idéaux qui sont bien décrits par une pseudo-équation de Saha de type (I.5).
- pour  $\Lambda > 100$  (haute densité et basse température) le système acquiert une structure de fluide dense ou de solide qui rend très appropriée une description par un modèle d'atome moyen (Thomas-Fermi). Le taux moyen d'ionisation peut alors être calculé en prenant la densité d'électrons libres à la frontière de la cellule atomique, ou en sommant les probabilités d'occupations des niveaux atomiques.

De fait, on observe, dans les plasmas non-idéaux, une ionisation plus élevée que ne le laissent prévoir les différents types de calcul possibles.

Au delà d'une certaine limite, la densité des ions devient assez grande pour qu'apparaisse une superposition des fonctions d'ondes des états excités (et même des fondamentaux à plus haute densité). Les ions sont modifiés par la pression exercée par leurs voisins : ce processus se traduit par une brusque augmentation de l'ionisation avec la densité ; on l'appelle ionisation de pression pour le distinguer de l'ionisation, dite thermique, qui a lieu dans les plasmas idéaux ou faiblement non-idéaux. Les modèles que nous avons vus (Thomas-Fermi et Debye-Huckel) imposent une cellule atomique finie ; ils ne peuvent pas, bien entendu, décrire l'interpénétration des atomes.

### 3.2. DEPLACEMENT DES RAIES

Rogers<sup>10</sup> a montré que l'équation de Saha généralisée (I.5) donne encore des résultats assez précis pour les plasmas faiblement couplés ( $\Lambda < 1$ ).

On a vu qu'il fallait utiliser un potentiel de Debye "shifté" pour calculer la fonction de partition.

Les conséquences en sont bien connues :

- abaissement du potentiel d'ionisation
- nombre fini d'états liés
- déplacement des niveaux d'énergies vers la limite d'ionisation et passage progressif dans le continuum.
- déplacement vers le rouge des raies d'émission.

Si le potentiel de Debye permet de décrire assez bien l'ionisation, il a pour inconvénient de prédire des déplacements de raies très importants et systématiquement vers le rouge. Or l'expérience ne met en évidence que de petites valeurs du déplacement, vers le rouge ou vers le bleu selon les éléments et les raies observées.

Le calcul classique du potentiel de Debye se fait en résolvant l'équation de Poisson linéarisée. On obtient des déplacements de raies plus petits mais toujours rouges en résolvant l'équation de Poisson non-linéarisée (cf. Skupsky<sup>11</sup>).

Davis et Blaha<sup>12</sup> calculent un potentiel auto-consistent complètement quantique. Ils obtiennent eux aussi des petits déplacements mais systématiquement vers le rouge.

Citons enfin Griem<sup>13</sup> dont la théorie du P.P.S. (déplacement de raie par polarisation du plasma) prédit des déplacements systématiques vers le bleu.

#### 4. REMARQUES ET PRINCIPAUX RESULTATS

Nous avons mis en évidence deux effets importants propres aux plasmas denses : l'ionisation de pression et le déplacement des raies.

L'équation de Saha "généralisée", moyennant un certain nombre d'approximations que nous avons passées en revue, permet de décrire l'ionisation des plasmas faiblement non-idéaux. On peut, de plus, tenir compte de la dégénérescence électronique en ajoutant des modifications au potentiel d'ionisation et en prenant le rayon de Thomas-Fermi comme contribution des électrons à la distance de Debye.

Les déplacements de raies ne sont pas calculés correctement par les modèles existant actuellement. L'ordre de grandeur des prévisions n'est pas toujours bon et surtout chaque modèle prévoit une direction (bleue ou rouge) systématique des déplacements.

Il est important de constater que ces déplacements de raies sont importants alors que l'ionisation est assez peu modifiée par la pression, c'est un indicateur des effets de pression qui est plus sensible que l'ionisation.



## CHAPITRE II

### MODIFICATION DE LA CONSTANTE DIELECTRIQUE PAR DES INCLUSIONS REITEREES DE DIPOLES

#### 1. GENERALITES

Au cours de ce chapitre nous allons exposer le modèle simple qui va nous servir à prendre en compte les effets "non-thermiques" (ou de pression) du plasma dense.

Le point de départ est un modèle proposé par "Kosterlitz et Thouless"<sup>14</sup> pour décrire des transitions de phase dans un gaz coulombien à 2 dimensions. Nous verrons qu'il est possible d'appliquer une technique similaire à un plasma considéré comme un gaz coulombien à 3 dimensions.

On en tirera une équation donnant la constante diélectrique en fonction de la distance au noyau.

## 2. MODELE EN DIMENSION 2

### 2.1. FORMALISME

On considère un gaz à 2 dimensions de particules portant des charges  $\pm q$ . Le potentiel d'interaction est logarithmique. Appelons extension ou séparation d'une paire la distance entre les charges  $+q$  et  $-q$  d'un dipôle. On introduit une coupure (distance minimum entre 2 charges)  $r_0$  pour éviter les divergences à l'origine.

L'hamiltonien du système est :

$$H(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} u(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

$$\text{avec } u(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = -2q_i q_j \cdot \text{Log} \left| \frac{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}{r_0} \right| + 2\mu \text{ si } r > r_0$$

$$= 0 \text{ si } r < r_0$$

$2\mu$  est l'énergie nécessaire à la création d'une paire de particules de charges opposées à la distance  $r_0$ .

On a  $\langle r^2 \rangle = r_0^2 \cdot \frac{\beta q^2 - 1}{\beta q^2 - 2}$  valeur moyenne du carré de la séparation,

la polarisabilité d'un dipôle est proportionnelle à  $\langle r^2 \rangle$ , on peut voir qu'elle diverge à  $T_c = \frac{q^2}{2k}$ .

D'autre part soit  $d$  = distance moyenne entre dipôle, alors :

$$\left\langle \left( \frac{r}{d} \right)^2 \right\rangle \approx \frac{\pi e^{-2\beta\mu}}{\beta q^2 - 2} \ll 1 \text{ pour } T > T_c.$$



### 2.2.2. Calcul de la polarisabilité d'un dipôle

Par définition  $p = \frac{\partial}{\partial E} \langle q \frac{\vec{r} \cdot \vec{E}}{\|\vec{E}\|} \rangle_{E=0}$  en théorie de la réponse linéaire.

Soit  $\theta$  l'angle du champ électrique  $\vec{E}$  avec l'axe du dipôle

$$p = q \cdot \frac{\partial}{\partial E} \langle r \cos \theta \rangle_{E=0}$$

énergie d'un dipôle dans un champ  $\vec{E} = -\vec{P} \cdot \vec{E}$

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta u(r)} \cdot e^{\beta q E r \cos \theta} \quad \text{facteur statistique}$$

$$\Rightarrow p = q \frac{\int_0^{2\pi} d\theta \int_r^{r+dr} \frac{\partial}{\partial E} \left( r' \cos \theta \cdot e^{-\beta u(r')} \cdot e^{\beta q E r' \cos \theta} \right) \Big|_{E=0} dr'}{\iiint e^{-\beta H} d^2 \vec{r}}$$

$$p = \beta q^2 \cdot \langle r^2 \cos^2 \theta \rangle = \frac{1}{2} \beta q^2 r^2$$

### 2.2.3. Variation de la susceptibilité

La probabilité de trouver une paire à l'intérieur d'une zone est

$$dn = \frac{1}{r_0^4} \int_0^{2\pi} d\theta \int_r^{r+dr} dr' r' e^{-\beta u_{\text{eff}}(r')}$$

$$u_{\text{eff}}(r') = 2\mu + 2q^2 \int_{r_0}^r \frac{dr'}{r' \epsilon(r')} \approx 2\mu + \frac{2q^2}{\epsilon(r')} \text{Log} \left( \frac{r'}{r_0} \right)$$

$$dn(r) = \frac{1}{r_0^4} 2\pi r \cdot \left( \frac{r}{r_0} \right)^{-\frac{2\beta q^2}{\epsilon(r)}} \cdot e^{-2\beta \mu} \cdot dr$$

$$dX(r) = dn(r)p(r) \Rightarrow dX(r) = \frac{1}{r_0^4} \pi \beta q^2 e^{-2\beta\mu r^3} \cdot \left(\frac{r}{r_0}\right)^{-\frac{2\beta q^2}{\epsilon(r)}} \cdot dr$$

$$dX(r) = \pi \beta q^2 e^{-2\beta\mu \left(\frac{r}{r_0}\right)^{-\frac{2\beta q^2}{\epsilon(r)}+4}} \cdot \frac{dr}{r}$$

Posons  $x = \text{Log}\left(\frac{r}{r_0}\right) \quad dx = \frac{dr}{r}$

$$y = \frac{2\beta q^2}{\epsilon(x)} - 4 \quad \text{or } \vec{D} = \vec{E} + 2\pi\vec{P}$$

$$\Rightarrow x = \frac{\epsilon - 1}{2\pi}$$

$$dX = \frac{d\epsilon}{2\pi} \Rightarrow dy = -\frac{2\beta q^2}{\epsilon^2} d\epsilon$$

$$dy = -\frac{(y+4)^2}{2\beta q^2} \cdot 2\pi dx$$

$$\frac{dy}{dx} = -\pi \beta q^2 e^{-2\beta\mu} \cdot e^{-xy} \cdot (y+4)^2 \cdot \frac{2\pi}{2\beta q^2}$$

$$\frac{dy}{dx} = -\pi^2 e^{-2\beta\mu} \cdot (y+4)^2 e^{-x \cdot y}$$

### 2.3. RESULTATS

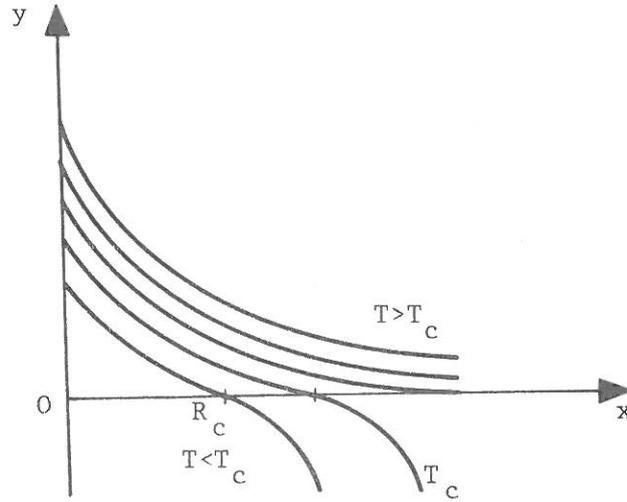
Posons  $y(0) = 2\beta q^2 - 4$  et  $y+4 \approx y(0)+4$

$$\left. \begin{aligned} x &= \left( \pi e^{-\beta\mu} \cdot (y(0)+4) \right)^{-1} \tilde{x} \\ y &= \left( \pi e^{-\beta\mu} \cdot (y(0)+4) \right) \tilde{y} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{d\tilde{y}}{d\tilde{x}} = -e^{-\tilde{x}\tilde{y}}$$

$y$  varie comme  $\frac{1}{\epsilon}$        $x$  comme  $\text{Log} \frac{r}{r_0}$

$$\tilde{y} = \frac{1}{c} y$$

$$\tilde{x} = cx$$



Solutions de  $\frac{dy}{dx} = -e^{-x.y}$

pour  $T > T_c$   $\frac{1}{\epsilon} \rightarrow 0$  quand  $r \rightarrow \infty$

un dipôle peut avoir une extension infinie

pour  $T < T_c$   $\frac{1}{\epsilon} = 0$  quand  $r = R_c$

pas d'état lié avec  $r > R_c$

L'augmentation du nombre de charges libres donne un état conducteur (complètement ionisé).

### 3. MODELE EN DIMENSION 3

#### 3.1. FORMALISME

On considère un gaz à 3 dimensions de particules portant des charges  $\pm q$ . On gardera toutes les notations définies en dimension 2. Le potentiel d'interaction est le potentiel de Debye + un terme évitant la divergence à  $r = 0$

$$H(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i \neq j} u(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

$$u(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = -q_i \cdot q_j \frac{1}{r} \cdot \left( e^{-\frac{r}{D}} - e^{-\frac{r}{\lambda}} \right)$$

$$D = \text{distance de Debye} \quad \lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{\pi m_e \cdot kT}}$$

Si on considère un plasma d'hydrogène, on peut le décrire avec les notations précédentes. Les protons étant les charges +, les électrons les charges -.

La neutralité électrique donne  $n_e = n_+$

$$D = \sqrt{\frac{kT}{4\pi e^2 (n_e + n_+)}}$$

Un état lié électron-proton sera considéré comme un dipôle instantané. L'extension du dipôle sera la distance  $r$  électron-proton à un instant  $t$  donné.

#### 3.2. EVOLUTION DE LA CONSTANTE DIELECTRIQUE

##### 3.2.1. Principe du calcul

Nous avons vu qu'il est possible de modéliser l'influence du plasma sur un atome en remplaçant le potentiel de Coulomb par

le potentiel de Debye. Ceci entraîne un abaissement du potentiel d'ionisation, un nombre fini d'états liés et un shift des raies vers le rouge. Si on trace les probabilités de présence de l'e<sup>-</sup> autour du noyau, on peut voir que les électrons considérés comme liés dans le potentiel de Debye ont une probabilité de présence importante à une distance  $r > d$  : distance interparticulaire moyenne.

Exemple : Hydrogène  $T = 10^5$  K       $D = 0,869 a_0$

$$D = 6,895 \sqrt{\frac{T}{2n_e}} \quad n_e \approx 2,24 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$$

$$d = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \cdot \frac{1}{n_e^{1/3}} \approx 1,01 \cdot 10^{-8} \approx 2,00$$

On peut voir (figures II.1.4) que l'électron a des probabilités de présence non négligeables à  $r > d$

Si le plasma est assez dense on a donc des atomes qui sont "inclus" dans d'autres atomes. On peut généraliser l'idée de Kosterlitz et Thouless en considérant un état lié comme un dipôle instantané. On a alors les paires liées qui s'emboîtent les unes dans les autres, chacune voyant une constante diélectrique modifiée par ce qui est à l'intérieur. Cet effet de plasma n'est pas pris en compte par le potentiel de Debye et on peut espérer obtenir une ionisation supplémentaire due à l'apparition d'un rayon critique pour l'extension des dipôles. On décrira ces interactions entre paires, par une constante diélectrique.

De la même manière qu'en dimension 2, on peut écrire :

$$\boxed{dX(r) = dn(r)p(r)}$$

### 3.2.2. Calcul de la polarisabilité

$$p = \frac{\partial}{\partial E} \langle q \frac{\vec{r} \cdot \vec{E}}{\|\vec{E}\|} \rangle_{E=0}$$

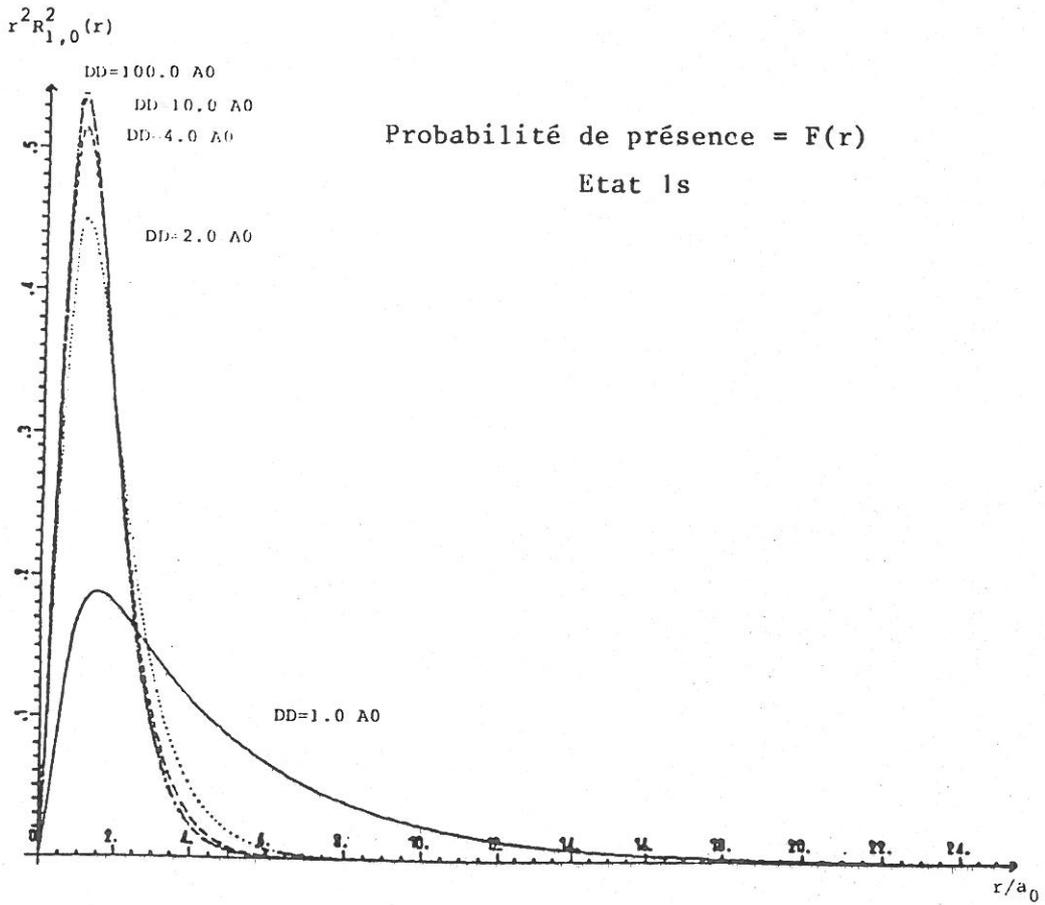


Figure II.1

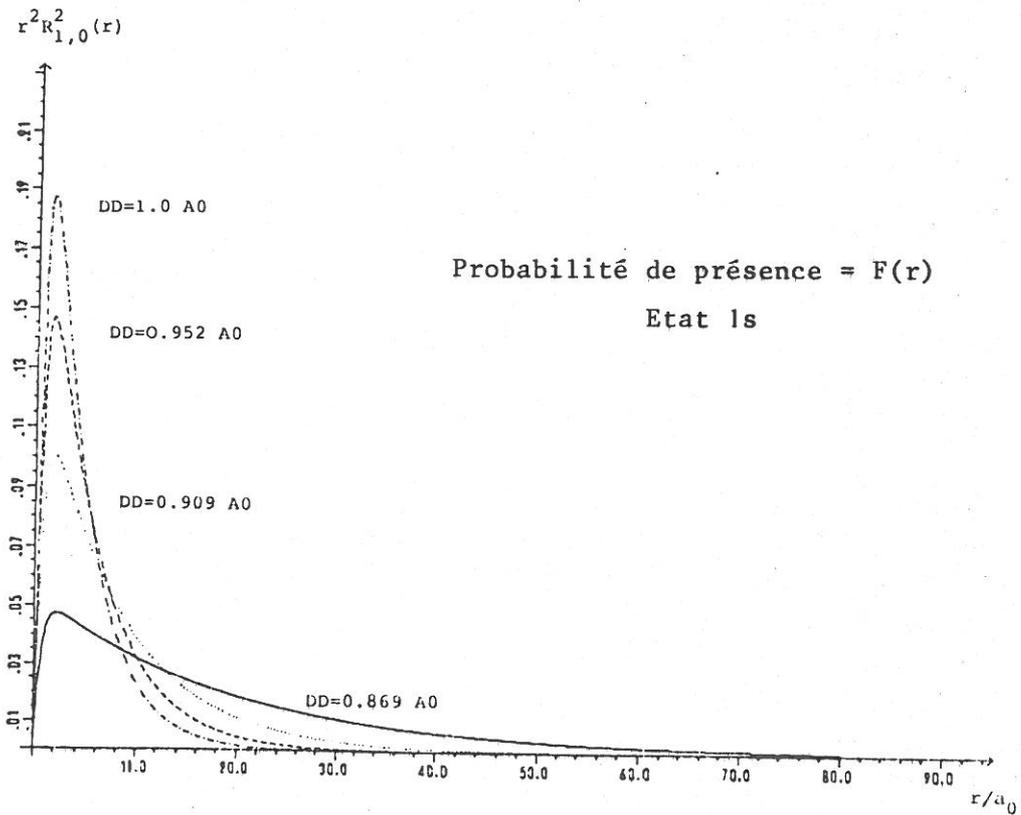


Figure II.2



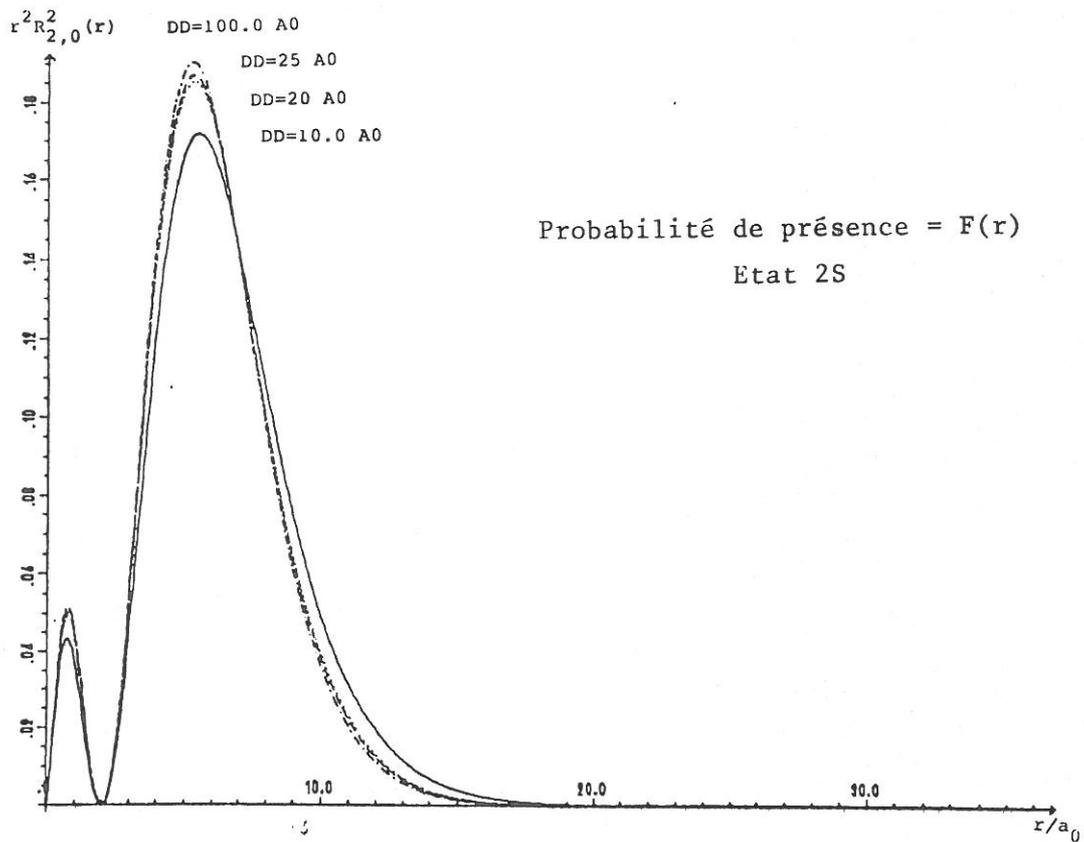


Figure II.3

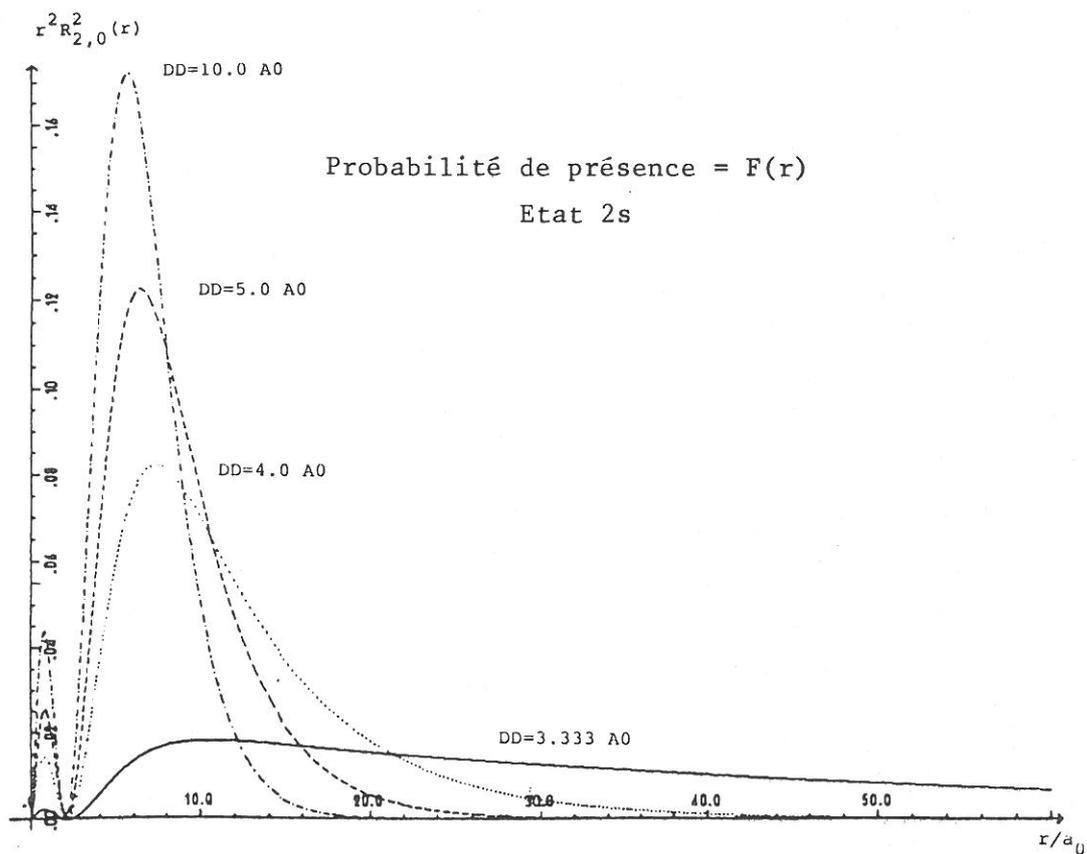


Figure II.4



Si on prend  $\vec{E}$  orienté selon Oz et  $\vec{r}$  : orienté +- repéré en coordonnées sphériques

$$\vec{r} \cdot \vec{E} = r \|\vec{E}\| \cos \theta$$

$$p = q \cdot \frac{\partial}{\partial E} \langle r \cos \theta \rangle$$

soit 
$$u(r) = - \frac{q^2}{\epsilon(r) \cdot r} \cdot \left[ e^{-\frac{r}{D}} - e^{-\frac{r}{\lambda}} \right] \quad (\text{cf. Thèse d'Etat } \substack{15 \\ \text{M.M. Gombert}})$$

pseudo-potentiel d'interaction à courte distance, tenant compte de l'écrantage et des effets quantiques à courte distance. Le facteur statistique pour prendre la valeur moyenne est :

$$e^{-\beta H} = e^{\beta E q r \cos \theta} \cdot e^{-\beta u(r)}$$

car l'énergie d'un dipôle de moment dipolaire  $\vec{M} = q\vec{r}$  dans un champ  $\vec{E}$  est  $-\vec{M} \cdot \vec{E}$

$$\rightarrow -\beta \cdot (-\vec{M} \cdot \vec{E}) = \beta E q r \cos \theta$$

On prend la valeur moyenne avec un facteur intégrant  $r^2 \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\varphi \cdot dr$  en coordonnées sphériques.

$$p = \frac{\partial}{\partial E} \left[ \frac{\int_0^\pi d\theta \sin \theta \cdot \cos \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_r^{r+dr} dr' r'^3 e^{\beta q E r' \cos \theta - \beta \cdot u(r')}}{\int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_r^{r+dr} dr' r'^2 e^{\beta q E r' \cos \theta} \cdot e^{-\beta u(r')}} \right]_{E=0}$$

Effectuons la dérivée avant d'intégrer et posons  $E = 0$ .

Soient  $u, v$  respectivement numérateur et dénominateur de l'expression ci-dessus, avec  $E = 0$ .

$$u' = \beta q^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cdot \cos^2\theta \cdot 2\pi \int_r^{r+dr} dr' r'^4 e^{-\beta u(r')}$$

$$v' = q \underbrace{\int_0^\pi d\theta \sin\theta \cdot \cos\theta \cdot 2\pi}_{= 0} \int_r^{r+dr} dr' r'^3 e^{-\beta u(r')} \Rightarrow v' = 0$$

il reste  $p = \frac{u'}{v}$

$$p = \frac{q^2 \cdot \left[ -\cos^3\theta/3 \right]_0^\pi \cdot 2\pi \cdot \int_r^{r+dr} dr' r'^4 e^{-\beta \cdot u(r')}}{\left[ -\cos\theta \right]_0^\pi \cdot 2\pi \cdot \int_r^{r+dr} dr' r'^2 e^{-\beta \cdot u(r')}}$$

Si on remplace  $\int_r^{r+dr} dr' f(r')$  par  $f(r)dr$  (Th. de la moyenne)

il reste

$p = \frac{\beta q^2 r^2}{3}$
-------------------------------

### 3.2.3. Variation de la susceptibilité électrique

Soit  $n_0$  la densité moyenne de dipôle, il y a  $dn$  dipôles d'extension entre  $r$  et  $r+dr$  :

$$dn = n_0 4\pi \int_r^{r+dr} dr' r'^2 e^{-\beta \cdot u(r')}$$

On a alors une variation  $dX = dn \cdot p$  de la susceptibilité

$$dX = n_0 \frac{1}{3} \beta q^2 4\pi r^4 dr e^{\frac{\beta q^2}{\epsilon(r)r}} \left[ e^{-\frac{r}{D}} - e^{-\frac{r}{\lambda}} \right]$$

$$x = \frac{\epsilon - 1}{4\pi} \Rightarrow dx = \frac{d\epsilon}{4\pi}$$

Posons  $y = \frac{\beta q^2}{\epsilon(r)}$  alors  $dy = - \frac{\beta q^2}{\epsilon(r)^2} d\epsilon$

$$\Rightarrow dy = - \frac{y^2}{\beta q^2} 4\pi dx \quad x = r$$

d'où

$$\frac{dy}{dx} = - \frac{n_0}{3} 16 \cdot \pi^2 y^2 x^4 e^{\frac{y}{x}} \left[ e^{-\frac{x}{D}} - e^{-\frac{x}{\lambda}} \right]$$

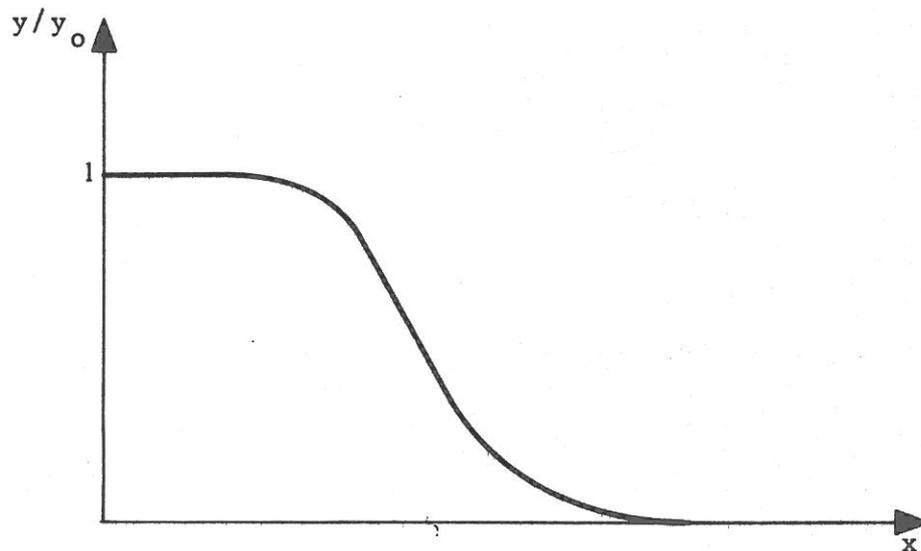
### 3.3. RESULTATS

Si  $x \rightarrow 0$   $y' \rightarrow 0$

$x \rightarrow \infty$  l'équation devient  $y' = -cy^2 x^4$

$$\left(\frac{1}{y}\right)' = cx^4 \Rightarrow \frac{1}{y} = c \cdot \frac{x^5}{5} + \text{cste}$$

$$y = \frac{1}{c \cdot \frac{x^5}{5} + \text{cste}} \Rightarrow \lim_{r \rightarrow \infty} y = 0$$



La courbe ne peut pas couper l'axe  $r$  comme en dimension 2. Il n'y a pas de transition de phase vers un état conducteur complètement ionisé (où toutes les paires liées se défont simultanément), mais une modification du potentiel d'interaction qui devient :

$$V_{\text{modifié}} = \left(\frac{y}{y_0}\right) \cdot \frac{q_i \cdot q_j}{r} \cdot (e^{-r/D} - e^{-r/\lambda})$$

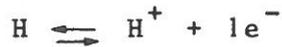
Il y a donc passage progressif dans le continuum d'un certain nombre d'états liés.

On a

$$\boxed{dX_{n_0}(r) = \sum_{n < n_0} \sum_{\ell} \sum_{m} dn_{n,\ell,m}(r) p_{\ell,m}(r)} \quad (\text{III.2})$$

### 2.3. CALCUL DE LA DENSITE DE DIPOLES

On considère l'équilibre d'ionisation de l'hydrogène atomique



La neutralité électrique donne  $n_e = n_p$ , la loi de Saha permet de calculer la densité totale d'atome d'hydrogène :

$$n_H = n_e^2 \frac{u_H}{4} \left( \frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} e^{\beta I} \quad (\text{cf. I.3})$$

où  $I$  = potentiel d'ionisation

et  $u_H$  = fonction de partition de l'atome d'hydrogène.

Boltzmann donne 
$$\frac{n_{H,m}}{n_{H,n}} = \frac{g_{H,m}}{g_{H,n}} \frac{e^{-\beta E_m^0}}{e^{-\beta E_n^0}}$$

or 
$$n_H = \sum_m n_{H,m} \quad \text{et} \quad u_H = \sum_m g_{H,m} e^{-\beta E_m^0}$$

donc 
$$\boxed{n_{H,n,\ell} = n_H \frac{g_{H,n,\ell}}{u_H} e^{-\beta E_{n\ell}^0}}$$

$$\boxed{n_{H,n,\ell} = \frac{n_e^2}{2} \cdot \left( \frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} e^{\beta I} e^{-\beta E_{n\ell}^0}} \quad (\text{III.3})$$

On a vu au chapitre I qu'il fallait prendre les  $E_{n,\ell}$  énergies propres du potentiel de Debye "shifté".

#### 2.4. CALCUL DES POLARISABILITES "INSTANTANÉES"

$$\text{On a vu que } p = q \frac{\partial}{\partial E} \langle r \cdot \cos \theta \rangle_{E=0}$$

$p$  désigne une polarisabilité instantanée, c'est-à-dire la polarisabilité du système noyau-électron lié quand l'électron est dans une orbitale  $(n, \ell, m)$  et forme, de manière instantanée, un dipôle d'écartement  $r$ .

La valeur moyenne est prise au sens de la statistique quantique sur les variables angulaires  $\theta$  et  $\varphi$  uniquement (pas sur  $r$ ). L'hamiltonien s'écrit :

$$H = \vec{\ell}^2 + V(\theta)$$

où  $V(\theta) = -qEr \cos \theta$  énergie de création du dipôle.

Considérons  $V(\theta)$  comme une perturbation ( $E \rightarrow 0$ ) au premier ordre, les vecteurs propres sont les  $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$ .

Si le système est dans l'état  $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$

$$\text{alors } \rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} \quad \text{et} \quad Z = e^{-\beta \ell(\ell+1)\hbar^2}$$

$$\langle r \cos \theta \rangle = \frac{1}{Z} \langle Y_{\ell}^m | e^{-\beta \vec{\ell}^2 - \beta V(\theta)} \cdot r \cos \theta | Y_{\ell}^m \rangle$$

$$\langle r \cos \theta \rangle = \frac{1}{Z} \langle Y_{\ell}^m | e^{-\beta \ell(\ell+1)\hbar^2 - \beta V(\theta)} \cdot r \cos \theta | Y_{\ell}^m \rangle$$

$$\langle r \cos \theta \rangle = \langle Y_{\ell}^m | e^{+\beta qEr \cos \theta} \cdot r \cos \theta | Y_{\ell}^m \rangle$$

Dérivons par rapport à  $E$  avant de prendre la valeur moyenne, on a :

$$p_{\ell, m} = q \langle Y_{\ell}^m | \frac{\partial}{\partial E} \left( e^{\beta qEr \cos \theta} \right)_{E=0} r \cos \theta | Y_{\ell}^m \rangle.$$

$$p_{\ell, m} = \beta q^2 r^2 \langle Y_{\ell}^m | \cos^2 \theta | Y_{\ell}^m \rangle$$

$$\text{or } \cos \theta Y_{\ell}^m = \sqrt{\frac{(\ell+m+1) \cdot (\ell-m+1)}{(2\ell+1) \cdot (2\ell+3)}} Y_{\ell+1}^m + \sqrt{\frac{(\ell+m) \cdot (\ell-m)}{(2\ell+1) \cdot (2\ell-1)}} Y_{\ell-1}^m$$

(Cf. Messiah<sup>16</sup> T 1, p.421 (90))

On a donc :

$$P_{\ell, m} = \beta q^2 r^2 \left( \frac{(\ell+m+1) \cdot (\ell-m+1)}{(2\ell+1) \cdot (2\ell+3)} + \frac{(\ell+m) \cdot (\ell-m)}{(2\ell+1) \cdot (2\ell-1)} \right)$$

Plus tard nous aurons besoin de  $P_{\ell} = \sum_{m=-\ell}^{+\ell} P_{\ell, m}$ , au lieu de sommer la formule ci-dessus il est plus facile de calculer directement

$$P_{\ell} = \beta q^2 r^2 \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \langle Y_{\ell}^m | \cos^2 \theta | Y_{\ell}^m \rangle$$

$$P_{\ell} = \beta q^2 r^2 \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \int Y_{\ell}^{m*} \cdot \cos^2 \theta \cdot Y_{\ell}^m d\Omega$$

$$P_{\ell} = \beta q^2 r^2 \int \cos^2 \theta \left( \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y_{\ell}^{m*} Y_{\ell}^m \right) d\Omega$$

$$\text{or } \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y_{\ell}^{m*} Y_{\ell}^m = \frac{2\ell+1}{4\pi} \quad (\text{Cf. Messiah}^{16}, \text{ p.422 (98)})$$

$$\cos^2 \theta = \frac{4\pi}{3} Y_1^{0*} Y_1^0$$

$$\Rightarrow P_{\ell} = \frac{\beta q^2 r^2}{3} (2\ell+1) \underbrace{\int Y_1^{0*} Y_1^0 d\Omega}_{=1}$$

$$P_{\ell} = \frac{\beta q^2 r^2}{3} (2\ell+1)$$

(III.4)

2.5. ETABLISSEMENT DE L'EQUATION DIFFERENTIELLE  
DONNANT  $\epsilon(r)$

En injectant les résultats de (III.1,3) dans (III.2) on obtient :

$$d\chi_{n_0}(r) = \sum_{n < n_0} \sum_{\ell} \sum_m \frac{n^2}{2} \left( \frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} e^{\beta I} \cdot e^{-\beta E_{n\ell}} \cdot r^2 \cdot R_n^2(r) \cdot P_{\ell,m}(r) \cdot dr$$

On peut resommer les  $p_{\ell,m}$  et utiliser (III.4):

$$d\chi_{n_0}(r) = C \sum_{n < n_0} \sum_{\ell} e^{-\beta E_{n\ell}} \cdot r^2 \cdot R_n^2(r) \cdot \frac{\beta q^2 r^2}{3} (2\ell+1)$$

$$C = \frac{n^2}{2} \left( \frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} e^{\beta I} .$$

On a  $\chi_{n_0}(r) = \frac{\epsilon_{n_0}(r) - 1}{4\pi} \Rightarrow d\chi_{n_0}(r) = \frac{d\epsilon_{n_0}(r)}{4\pi}$

On pose  $y_{n_0}(r) = \frac{1}{\epsilon_{n_0}(r)} \Rightarrow dy_{n_0}(r) = -y_{n_0}^2(r) d\epsilon_{n_0}(r)$

donc  $dy_{n_0}(r) = -4\pi y_{n_0}^2(r) d\chi(r)$

Pour chaque couche  $n_0$  on a :

$$dy_{n_0}(r) = -C \cdot 4\pi \cdot \frac{\beta q^2}{3} \cdot r^2 \cdot y_{n_0}^2(r) \sum_{n < n_0} \sum_{\ell} e^{-\beta E_{n,\ell}} \cdot (2\ell+1) \cdot \chi_n^2(r) dr \quad (III.5)$$

avec  $\chi_n^2(r) = r^2 \cdot R_n^2(r) .$

## 2.6. DISCUSSION DU MODELE SEMI-CLASSIQUE ET LIMITATIONS A PRIORI

Avant d'aller plus loin dans les calculs il convient de bien distinguer : (a) "l'esprit" de la méthode de renormalisation à la Kosterlitz & Thouless que nous avons employée, et (b) sa mise en oeuvre technique. La discussion des deux points doit être séparée.

L'objectif de ce modèle est de décrire les effets de "pression" du plasma dense. Pour calculer rigoureusement l'effet de l'interpénétration des orbites il faudrait savoir résoudre le problème à N corps posé par la délocalisation des électrons sur les ions ou atomes adjacents. L'idée de base de la méthode est la suivante :

au cours de la compression, et avant l'apparition d'un ordre à courte distance (liquide) ou d'une structure de bande, l'édifice atomique, bien que fortement perturbé, reste le constituant de base du plasma. Pour calculer cette perturbation on considère les états liés électron-noyau comme des dipôles ; on substitue l'emboîtement total des dipôles à l'interpénétration des orbites. Ceci amène l'objection suivante :

pour que cela soit rigoureux, il faudrait calculer  $\epsilon(r)$  en ne comptant que les dipôles d'extension  $r' \ll r$  (ultérieurement il pourra être intéressant de poser  $\epsilon(r) = \frac{1}{Y(r')}$  et d'évaluer les différences obtenues en prenant  $r' = \frac{r}{2}$  ou  $r' = \frac{r}{3}$  au lieu de  $r' = r$  comme c'est le cas actuellement).

L'approximation est importante au niveau de deux atomes mais c'est la réitération de la procédure qui va permettre de calculer un potentiel effectif d'interaction à 2 corps qui décrira correctement l'influence du plasma dense sur la structure atomique (la justification profonde de cet argument nécessiterait une application rigoureuse des techniques inspirées du groupe de renormalisation).

Une fois analysées les objections que l'on peut faire à cette approche, il reste à étudier les approximations utilisées pour mener à terme cette procédure :

- la densité de dipôles a été calculée grâce à l'emploi d'une équation de Saha généralisée. On a vu (chap. I) que ceci nous limite au domaine  $\Lambda < 1$ . De plus cette équation n'est valable qu'à l'équilibre thermodynamique.
- pour exploiter l'équation de Saha il faudra fixer  $n_e$  (et T). Bien que l'on ait travaillé en grand canonique au chapitre I les calculs seront donc effectués en canonique. On pourra par la suite utiliser un code numérique pour calculer les populations (hors équilibre) des niveaux pour un plasma multicomposante, en prenant en considération un nombre limité de niveaux.
- tous les calculs sont faits en symétrie sphérique pour se ramener à des équations radiales à une dimension. Le fait que les états  $l \neq 0$  n'ont pas de symétrie sphérique n'est pas gênant car on moyenne sur toutes les orientations  $\theta$  et  $\varphi$  possibles dans le calcul des polarisabilités.
- l'emploi du potentiel de Debye "shifté" induit, comme base de départ, un trop fort décalage vers le rouge du spectre.

Toutes ces raisons rendront difficile une comparaison avec l'expérience.

### 3. APPLICATION ANALYTIQUE A L'HYDROGENE

#### 3.1. ORGANISATION DU CALCUL

Etant donnée la non-linéarité de l'équation (III.5) il n'est pas possible de la résoudre analytiquement. On utilisera une méthode numérique Runge-Kutta d'ordre 8 (cf. J.H. Verner)<sup>17</sup>. Le sous-programme d'intégration numérique (RKV8 : Bibliothèque mathématique du centre de calcul de l'Université Paris-Sud) nécessite le calcul pour chaque valeur de r de  $\frac{dy_{no}(r)}{dr}$ .

La connaissance des énergies et fonctions d'ondes du potentiel de Debye est donc nécessaire. Pour cette première application de la méthode, on a préféré utiliser des formules analytiques au lieu de résoudre l'équation de Schrödinger. De plus on a associé une constante diélectrique à chaque niveau (n,ℓ) au lieu de chaque couche (n) comme ce sera fait par la suite. Il faut résoudre une équation différentielle par niveau (n,ℓ). Les équations sont couplées de proche en proche. En effet il faut connaître la constante diélectrique vue par un niveau pour calculer l'énergie et la fonction d'onde de ce niveau, lesquelles seront utilisées dans l'équation différentielle donnant la constante diélectrique du niveau suivant. Le premier niveau n'est pas modifié, on a donc comme point de départ :  $y_{1,0}(r) = 1$ ,  $\forall r \in [0, \infty[$

$$\text{Puis : } \frac{dy_{2,0}(r)}{dr} = -c.4\pi.\frac{\beta q^2}{3}.r^2.y_{2,0}^2(r).e^{-\beta E_{1s}^0}.x_{1s}^2(r)$$

$$\frac{dy_{2,1}(r)}{dr} = -c.4\pi.\frac{\beta q^2}{3}.r^2.y_{2,1}^2(r).\left[ e^{-\beta E_{1s}^0}.x_{1s}^2(r) + 3.e^{-\beta E_{2s}^0}.x_{2s}^2(r) \right]$$

.....

### 3.2. ENERGIES ET FONCTIONS D'ONDE ANALYTIQUES

L'équation de Schrödinger radiale n'est pas soluble analytiquement pour le potentiel de Debye :  $V(r) = -\frac{1}{r} e^{-\delta r}$ . Par contre elle se ramène à une équation hypergéométrique (cf. Annexe I) pour le potentiel de Hulthen :  $V_H(r) = -\frac{\delta e^{-\delta r}}{1 - e^{-\delta r}}$ . Lam & Varshni<sup>18</sup> ont calculé des énergies et fonctions d'onde approchées des états  $\ell = 0$  du potentiel de Debye en perturbant les solutions analytiques exactes du potentiel de Hulthen.

$V_H(r)$  approxime bien  $V(r)$  à petit et grand  $r$ , l'écart maximum se produit à  $r$  moyen (voir figure III.1). Pour obtenir une solution analytique dans le cas  $\ell \neq 0$ , Green & Aldrich<sup>19</sup> ont étendu l'approche de Lam & Varshni :

$V(r) = -\frac{1}{r} e^{-\delta r} + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2}$ , potentiel de Debye + terme centrifuge

peut être approximé par :

$$V_H(r) = -\frac{\delta e^{-\delta r}}{1 - e^{-\delta r}} + \frac{\ell(\ell+1)}{2} \left( \frac{\delta}{1 - e^{-\delta r}} \right)^2 e^{-\delta r} \quad \text{potentiel de Hulthen modifié}$$

Les figures III.2,3,4 montrent que, comme pour  $\ell = 0$ , l'approximation est maximum à  $r$  moyen.

Nous avons refait les calculs de Lam & Varshni et Greene & Aldrich en multipliant le potentiel de Hulthen par  $\frac{1}{\epsilon}$  (cf. Annexe I).

Pour que l'équation de Schrödinger possède une solution analytique il faut que  $\epsilon$  soit un paramètre et non pas une fonction de  $r$  comme c'est notre cas.

Nous cherchons les vecteurs propres de  $H \cdot \psi_{n,\ell}(r) = E \psi_{n,\ell}(r)$

avec 
$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - y(r) \frac{\delta e^{-r}}{1 - e^{-\delta r}} + \frac{\ell(\ell+1)}{2} \left( \frac{\delta}{1 - e^{-\delta r}} \right)^2 e^{-\delta r}$$

et 
$$y(r) = \frac{1}{\epsilon(r)}$$

or nous savons calculer analytiquement les vecteurs propres de

$$H_\epsilon \chi_{n,\ell,\epsilon}(r) = E_\epsilon \chi_{n,\ell,\epsilon}(r) \quad \forall \epsilon \in \mathbb{R}^*$$

avec  $H_\epsilon$  identique à  $H$  à ceci près que la fonction  $y(r)$  est devenue une constante  $1/\epsilon$ .

On utilise le fait que  $y(r)$  varie peu et que  $y(r) \in [0,1]$   
 $\forall r \in \mathbb{R}^+$

pour poser :

$$\psi_{n,\ell}(r) = \chi_{n,\ell,\epsilon}(r) \quad \text{avec} \quad \epsilon = \frac{1}{y(r)}$$

L'expression la plus pratique pour calculer  $\psi_{n,\ell}(r)$  est la suivante :

$$\chi_{n,\ell}(r) = c \cdot e^{-a_{n,\ell} \cdot \delta \cdot r} \sum_{i=0}^M c_i \cdot y^{i+\ell+1}$$

avec  $y = 1 - e^{-\delta r}$ ,  $M = n - \ell - 1$ , la relation I.B.1 entre les  $c_i$  et  $a_{n,\ell} = \frac{1}{n \cdot \delta \cdot \epsilon} - \frac{n}{2}$

l'énergie est donnée par (I.A.2) :  $E_{n,\ell} = \frac{1}{2} \frac{1}{n^2 \epsilon^2} + \frac{n^2 \delta^2}{8} - \frac{\delta}{2\epsilon}$ .

Notons au passage que le potentiel de Hulthen modifié est l'un des rares, avec le potentiel de Coulomb, à avoir un spectre dégénéré en  $\ell$ .

Nous levons cette dégénérescence en calculant la perturbation au premier ordre qui nous ramène à Debye (cf. annexe I.E). On obtient :

$$E = E_{n,\ell} + E_1 \quad \text{avec} \quad E_1 = C^2 [I_1 + I_2 + I_3 + I_4]$$

Le calcul de  $C$  (coefficient de normalisation) et des 4 intégrales  $I_1, I_2, I_3$  et  $I_4$  est faisable facilement si on remarque que (cf. Annexe I.D) les  $\chi_{n,\ell}(r)$  peuvent s'exprimer en fonction des polynômes de Jacobi (I.D.1). On aboutit finalement aux expressions

I.D.2, I.E.1,2,3,4. On obtient des expressions analogues à celles (3.3,4,5) de Lam & Varshni mais valables quels que soient  $n$  et  $\ell$ . La perturbation au deuxième ordre a été calculé analytiquement mais les expressions obtenues sont trop complexes pour être utiles.

### 3.3. CALCUL DE LA CONSTANTE DIELECTRIQUE

Les figures III.5 à III.8 donnent la comparaison entre les fonctions d'ondes analytiques que nous avons calculées et les solutions numériques exactes de l'équation de Schrödinger que nous allons développer au chapitre suivant.

Ces figures montrent que l'accord n'est acceptable que jusqu'à la fonction d'onde 3s, ce qui permet de calculer les constantes diélectriques jusqu'au niveau 3p.

Nous donnons ci-dessous une comparaison entre les énergies analytiques perturbées et les énergies propres calculées par Rogers<sup>23</sup> pour le potentiel de Debye. La perturbation n'a été calculée numériquement qu'avec les termes  $I_1$  et  $I_2$  correspondant à  $\ell = 0$ , la dégénérescence en  $\ell$  est donc conservée.

NIVEAUX	ROGERS	ANALYTIQUE PERTURBE
1s	.45180	.451815
2s	.08175	.081728
2p	.08075	.081728
3s	.01935	.01907
3p	.01856	.01907
3d	.01642	.01907
4s	.00309	.002233

Energies en Hartree

Si on n'utilise que les niveaux 1s à 3s on a donc des énergies précises à  $10^{-3}$  près.

La résolution simultanée des quatre équations différentielles donnant  $y_{2s}$ ,  $y_{2p}$ ,  $y_{3s}$ ,  $y_{3p}$  est effectuée en remplaçant dans (III.5) les expressions des  $E_{n,\ell}$  et  $\chi_{n,\ell}$  trouvées dans l'annexe I.

Les quatre fonctions  $y_{n,\ell}(r) = \frac{1}{\epsilon_{n,\ell}(r)}$  sont tracées sur la figure (III.12) pour  $D = 10 a_0$  et  $n_e = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ .

Pour l'hydrogène  $n_e = n_p$   $D^2 = \frac{kT}{8\pi e^2 n_e}$   
on en tire  $T = 117770 \text{ K}$ .

On peut constater que :

- à  $r = 0$  la densité de dipôles est nulle ( $\chi_{n,\ell}(0) = 0$  donc  $y_{n,\ell}(0) = 1$  et  $y'_{n,\ell}(0) = 0$ )
- $y'_{n,\ell}(r) \rightarrow 0$  quand  $r \rightarrow \infty$  car  $\chi_{n,\ell}(r) \rightarrow 0$  quand  $r \rightarrow \infty$  (chaque niveau possède une constante diélectrique maximum atteinte quand  $r \rightarrow \infty$ )
- $y_{n,\ell}$  varie assez lentement pour justifier notre approximation

$$\psi_{n,\ell}(r) = \chi_{n,\ell,\epsilon}(r) \quad \text{avec} \quad \epsilon = \frac{1}{y_{n,\ell}(r)}$$

Les valeurs limites atteintes par  $y_{n,\ell}$  sont assez différentes de 1 (.851 pour  $y_{3p}$ ) pour entraîner des modifications importantes du potentiel d'interaction et donc des déplacements de raies non négligeables.

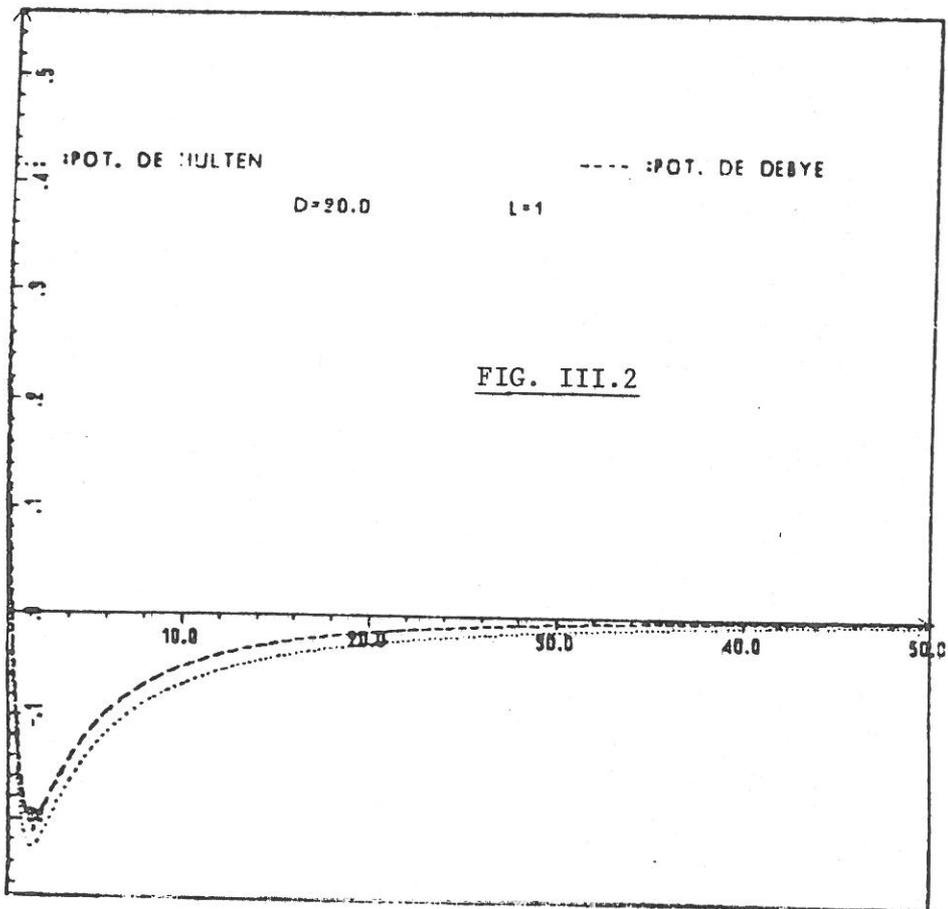
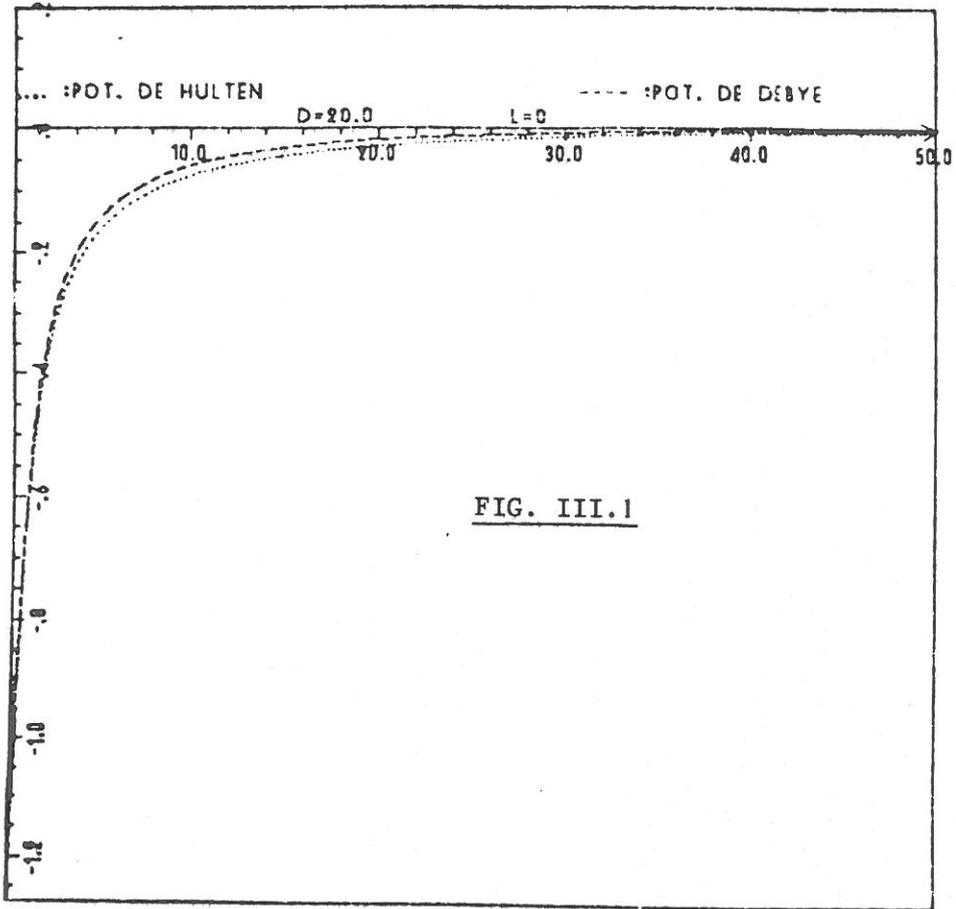
#### 4. REMARQUES ET PRINCIPAUX RESULTATS

Les calculs analytiques effectués montrent que les effets de pression, calculés par notre modèle, sont importants.

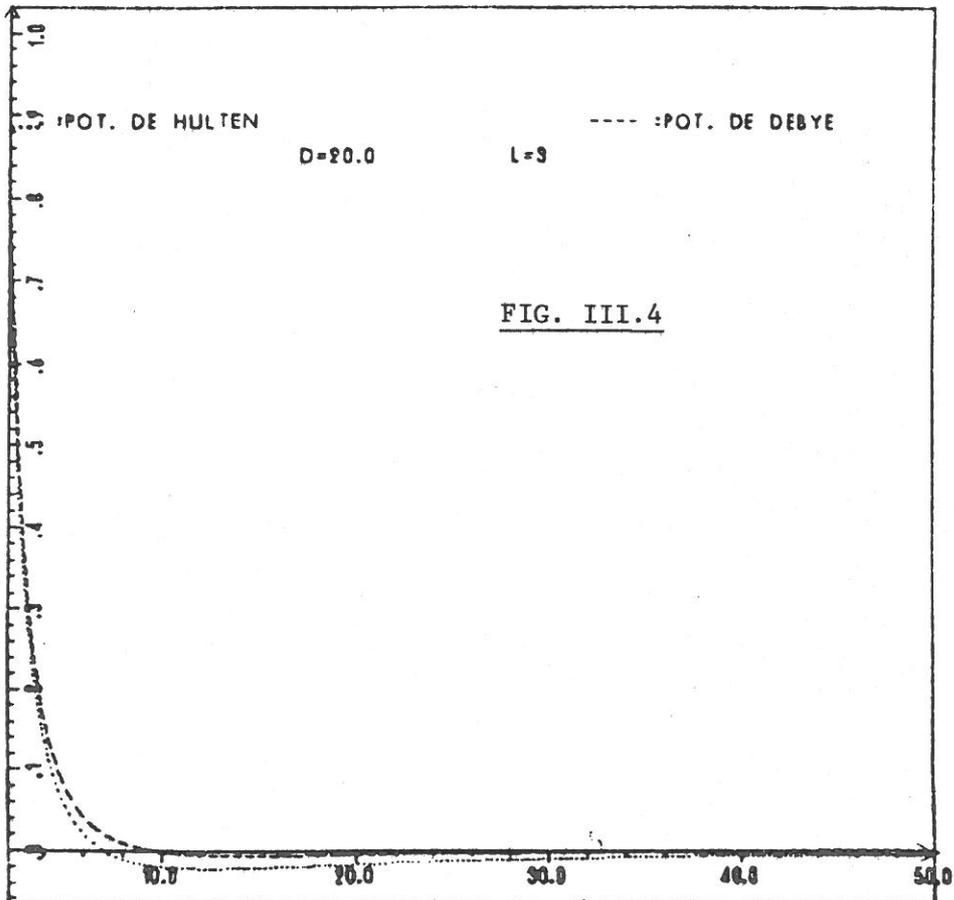
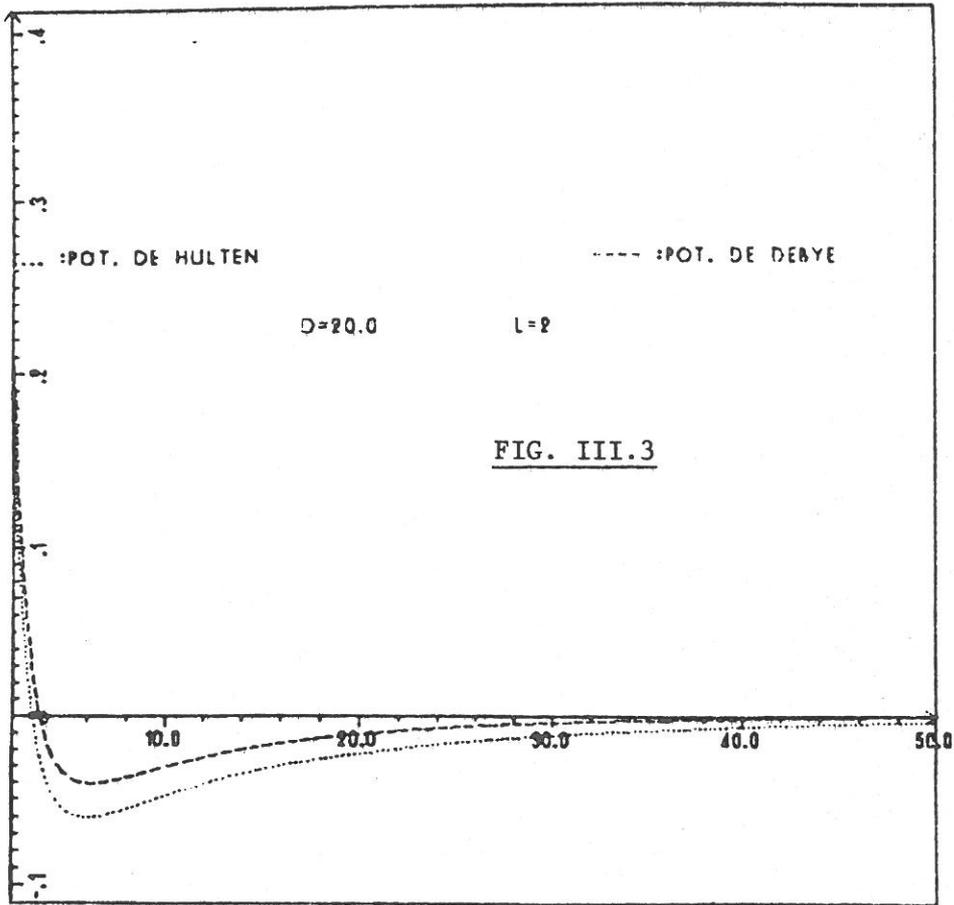
Cependant, le manque de précision des énergies analytiques des niveaux ( $10^{-3}$  seulement) rend illusoire à ce stade le calcul des déplacements de raies.

D'autre part les approximations faites pour obtenir des expressions analytiques et la restriction des calculs à un nombre fini (4) de niveaux rendent nécessaire un calcul entièrement numérique des énergies et fonctions d'onde.

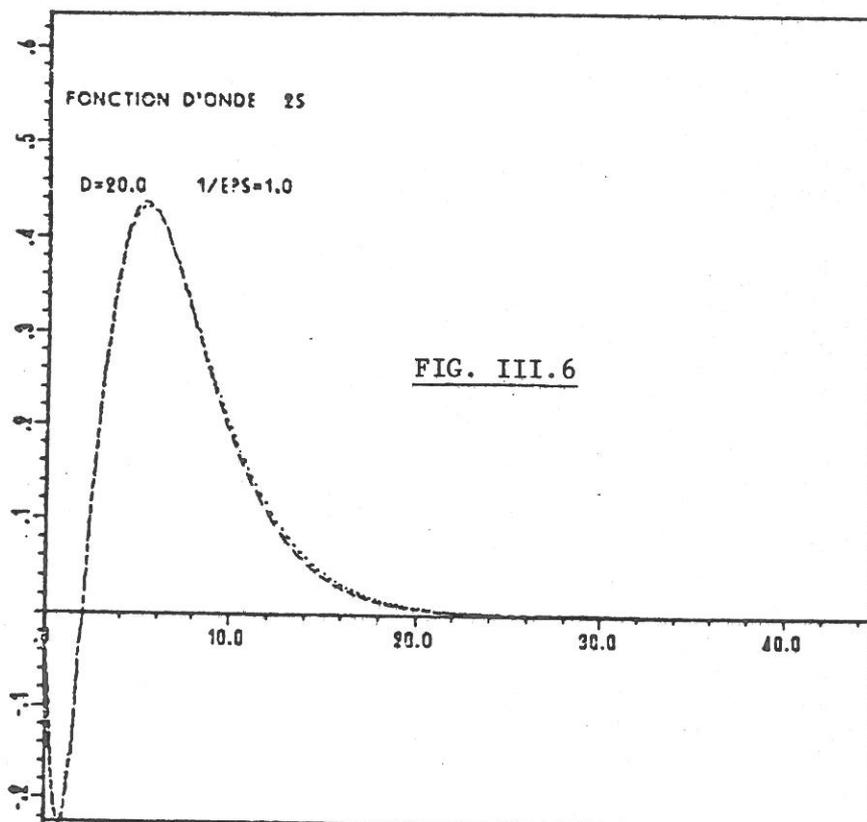
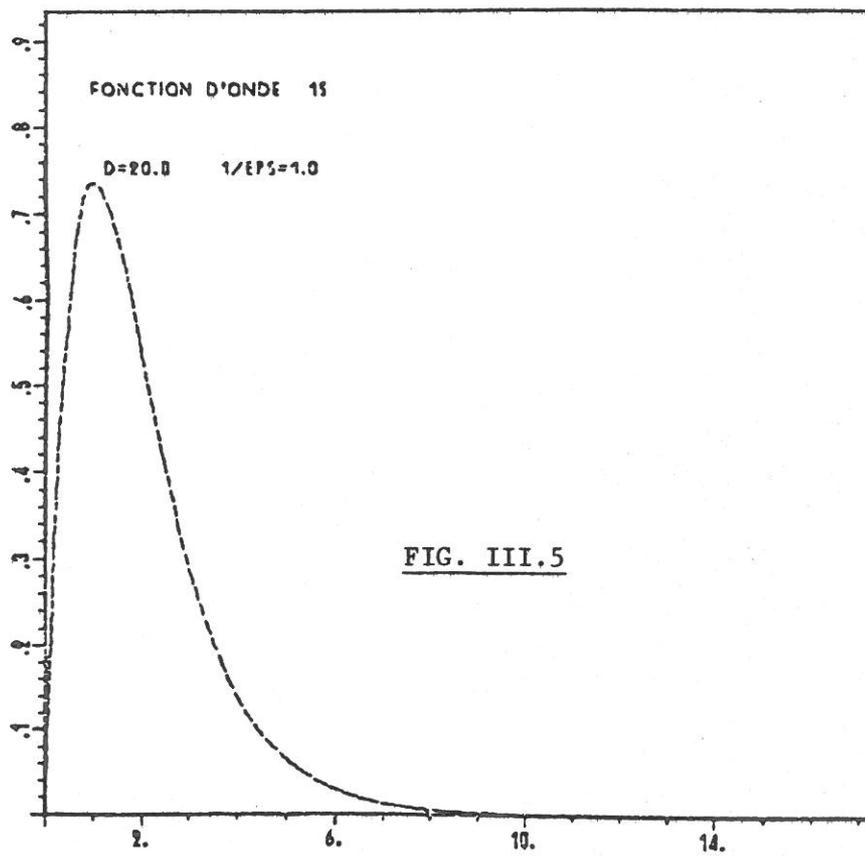
Les calculs de l'annexe I ne sont pourtant pas inutiles ; ils permettront de calculer les prévisions d'énergie des niveaux et les valeurs initiales et finales des fonctions d'onde qui sont nécessaires pour utiliser des méthodes numériques de type NUMEROV.



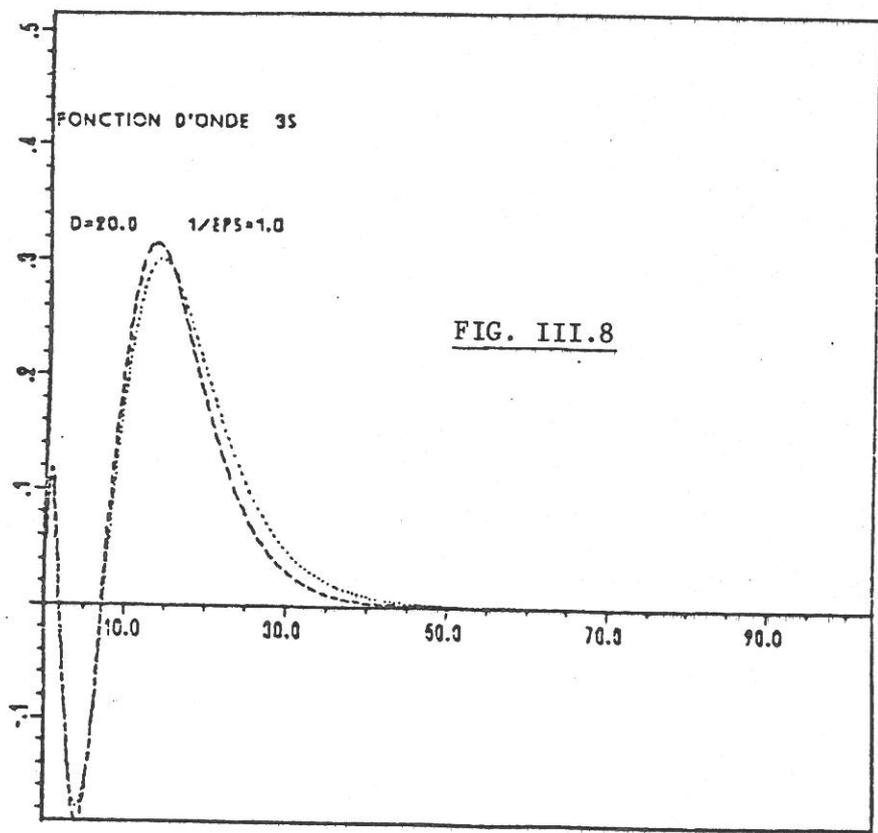
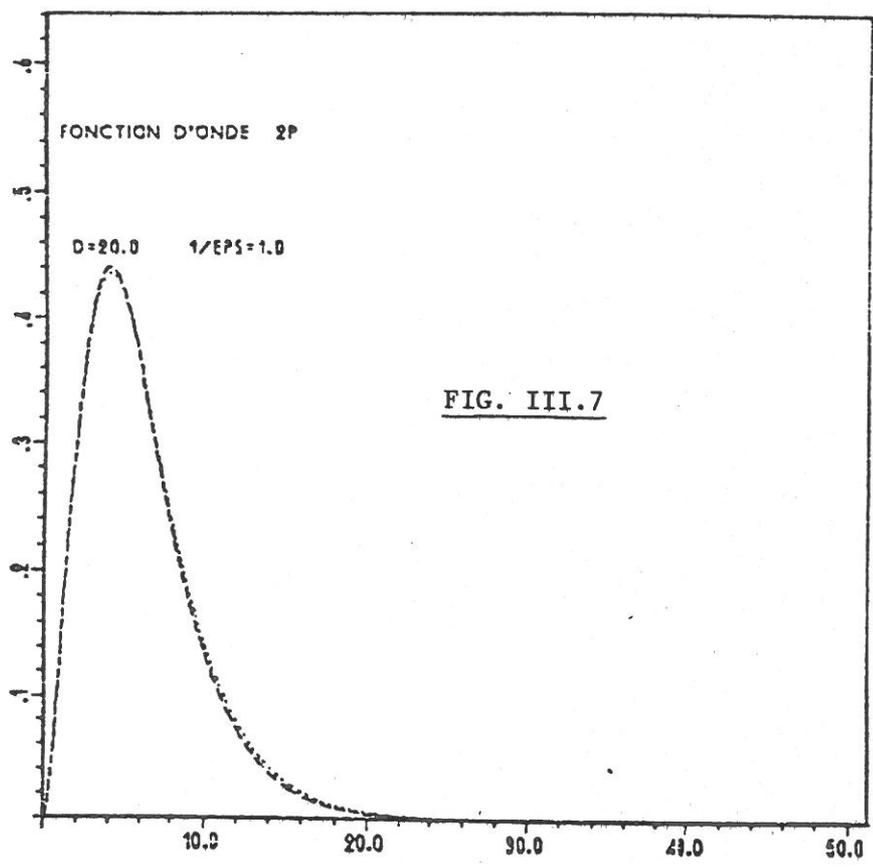




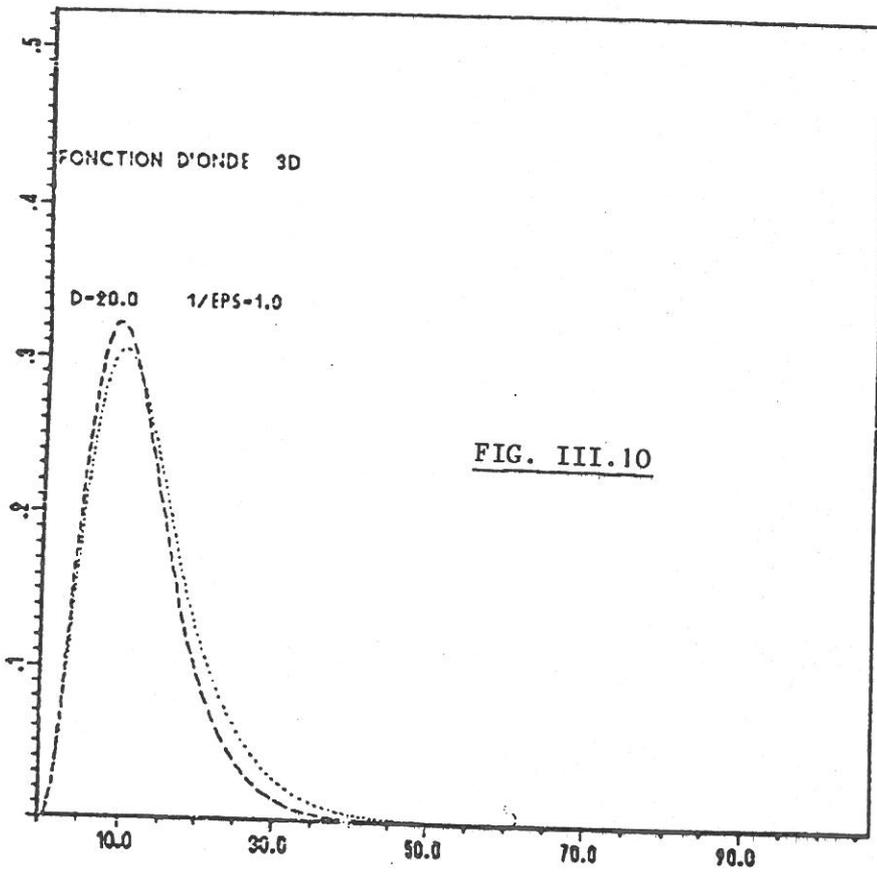
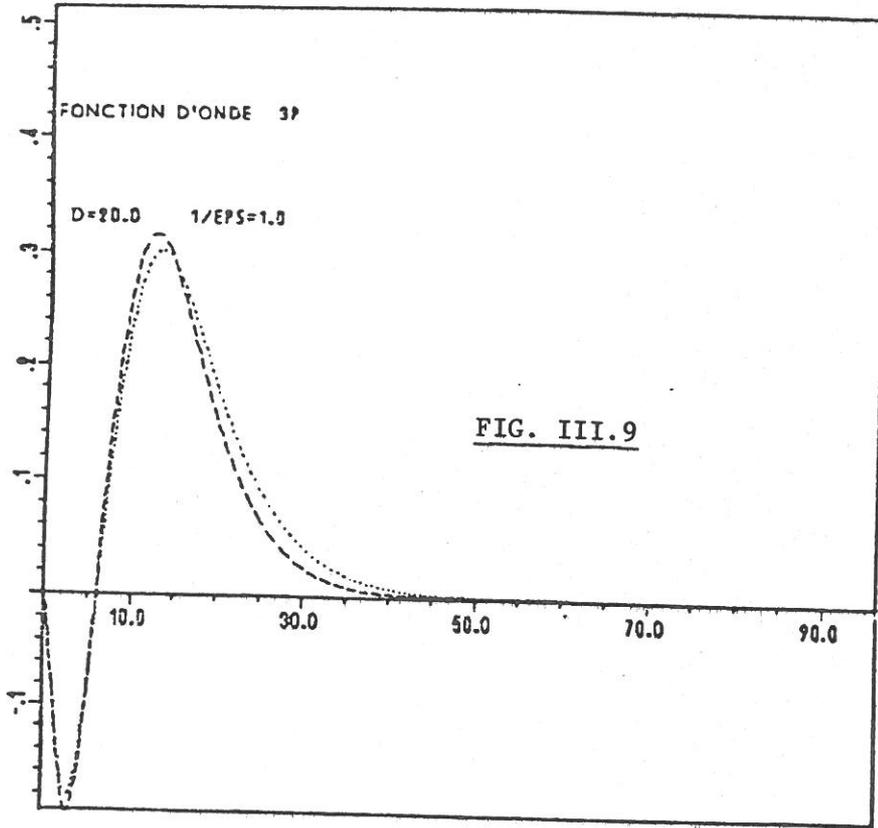




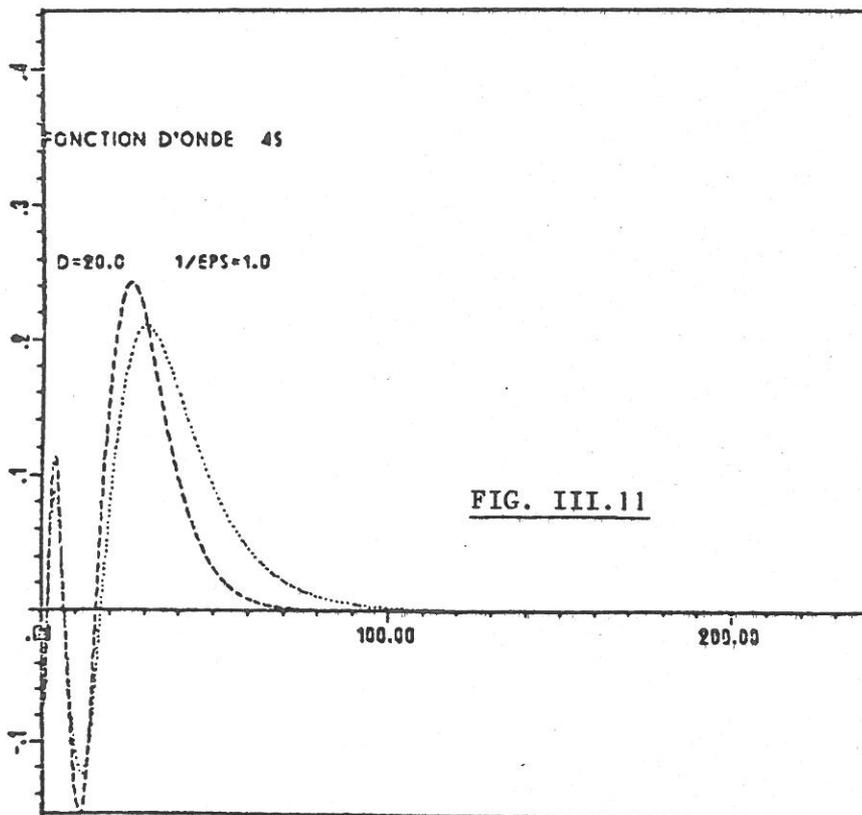














Y=F(X/A0) 4 NIVEAUX

T=117770.6 N= .1+022 D=10



FIG. III.12



## CHAPITRE IV

### CALCULS NUMERIQUES POUR UN ION HYDROGENOIDE

#### 1. GENERALITES

Le calcul du chapitre précédent a montré qu'on pouvait s'attendre à des déplacements non négligeables des niveaux du fait de la renormalisation de la constante diélectrique. Pour éviter les approximations sur les énergies et fonctions d'onde du potentiel de Debye il faut résoudre numériquement l'équation de Schrödinger.

Dans un premier temps nous avons utilisé un algorithme de tridiagonalisation travaillant sur des différences finies (communiqué par M. O. Atabek) qui nous a permis de mettre en place rapidement le code. Pour obtenir une meilleure précision sur les niveaux, on a remplacé cet algorithme par une méthode propagative-itérative faisant appel au propagateur NUMEROV-COOLEY.

## 2. RESOLUTION NUMERIQUE DE L'EQUATION DE SCHRODINGER RADIALE

### 2.1. GENERALITES

Après passage en unité atomique il reste à résoudre :

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + E - V(r) \right] P(r) = 0$$

avec  $V(r) = -\frac{1}{r} e^{-r/D} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ ;  $P(r) = \chi_{n,\ell}(r)$

Nous allons utiliser deux programmes différents pour calculer les énergies et les fonctions d'onde solutions de cette équation :

- TRIDG (cf. Truhlar)<sup>20</sup>
- NUMEROV (cf. Hartree)<sup>21</sup>

Ces deux méthodes ont des points communs que nous allons développer maintenant :

- On calcule la fonction en N+2 points de l'intervalle  $[R_0, R_{N+1}]$ . On repère les points par un indice i variant de 0 à N+1. Les points sont régulièrement espacés. Soit  $R_i$  l'abscisse du point i, on a  $R_i = R_0 + ih$

$R_0 = 0$  : abscisse de départ ;  $h = \frac{R_{N+1}}{N+1}$  : pas de la "grille"

On pose :

$$P_i = P(R_i) \quad P_i'' = \left. \frac{d^2 P(R)}{dR^2} \right|_{R_i}$$
$$V_i = V(R_i)$$

L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$\boxed{P_i'' = [V_i - E]P_i} \quad (\text{IV.1})$$

- On linéarise la dérivée seconde en la remplaçant par des différences finies.

On part de  $P(R_i + h) = P(R_i) + hP'_i + \frac{h^2}{2!} P''_i + \dots$

On en tire  $P(R_i + h) + P(R_i - h) = \sum_{k=0} \frac{2h^{2k}}{(2k)!} P^{(2k)}(R_i)$

Si on se limite à  $k = 0, 1$  on obtient :

$$h^2 P''_i = P_{i+1} + P_{i-1} - 2P_i \quad (\text{IV.2})$$

On a négligé  $\frac{h^4}{12} P_i^{(4)}$ , c'est une approximation du 4<sup>ième</sup> ordre en  $h$ , c'est ce qui est utilisé pour TRIDG.

Pour NUMEROV on fait une approximation en  $h^6$  :

$$\left\{ \begin{array}{l} P_{i+1} + P_{i-1} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2h^{2k}}{(2k)!} P_i^{(2k)} \quad (\text{a}) \\ P''_{i+1} + P''_{i-1} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2h^{2k}}{(2k)!} P_i^{(2k+2)} \quad (\text{b}) \end{array} \right.$$

$$(\text{a}) - \frac{h^2}{12} (\text{b}) \Leftrightarrow :$$

$$\underbrace{\left( P_{i+1} - \frac{h^2}{12} P''_{i+1} \right)}_{Y_{i+1}} + \underbrace{\left( P_{i-1} - \frac{h^2}{12} P''_{i-1} \right)}_{Y_{i-1}} = 2 \underbrace{\left( P_i - \frac{h^2}{12} P''_i \right)}_{Y_i} + h^2 P''_i - \frac{h^6}{240} P_i^{(6)}$$

avec une erreur de  $\frac{h^6}{240} P_i^{(6)}$  on obtient :

$$h^2 P''_i = Y_{i+1} + Y_{i-1} - 2Y_i \quad (\text{IV.3})$$

Remplaçons  $P''_i$  par l'expression (IV.1) :

$$(\text{IV.2}) \Leftrightarrow P_{i+1} + P_{i-1} - 2P_i = h^2 [V_i - E] P_i$$

$$(\text{IV.3}) \Leftrightarrow Y_{i+1} + Y_{i-1} - 2Y_i = h^2 [V_i - E] P_i$$

Les deux équations obtenues permettent de propager la solution :

$P_i$  et  $P_{i-1}$  permettent de calculer  $P_{i+1}$   
 de même  $Y_i$  et  $Y_{i-1}$  " "  $Y_{i+1}$  si on  
 remarque que  $Y_i = P_i [1 - \frac{h^2}{12}(V_i - E)]$

- Il est donc nécessaire de se fixer des conditions aux limites :

pour TRIDG on pose 
$$\begin{cases} P(R_0) = 0 \\ P(R_N) = 0 \end{cases}$$

pour NUMEROV on utilise des fonctions d'onde approximées valables pour :  $R$  petit et  $R \rightarrow +\infty$ .

- La solution va être propagée à partir des deux limites  $R = R_0$  et  $R = R_N$ . Le raccordement se fait en  $R = R_M$  et on pose  $P_M = 1$ . On normalisera par :

$$\left[ \left( \sum_{i=1}^N P_i^2 \right) + \frac{P_0^2}{2} + \frac{P_{N+1}^2}{2} \right] \cdot h = 1 \quad (\text{Trapèzes}).$$

Le choix du point  $R_M$  est important pour la précision des calculs. On prendra, pour les deux méthodes, le point tournant classique solution de :  $V(R_M) = E'$ .  $E'$  est une estimation a priori de l'énergie, on utilise les formules analytiques de l'annexe I.

Des arguments semi-classiques (W.K.B.) garantissent que la fonction n'oscille plus au delà de cette limite. En comptant les zéros de la fonction d'onde dans l'intervalle  $[R_0, R_M]$  on pourra vérifier qu'on s'est bien positionné sur le niveau cherché.

De plus le choix  $R_N = 10 \cdot R_M$  garantit que la fonction d'onde s'est bien amortie tout en donnant un intervalle d'intégration assez limité pour ne pas nécessiter un nombre trop important de points (à pas fixé).

2.2. TRIDG

Le principe du calcul des énergies propres est classique ; l'équation (IV.2) peut s'écrire :

$$[P_{i+1} - 2 + h^2 V_i] P_i + P_{i-1} = -h^2 \cdot E \cdot P_i$$

$P_0 = 0$  et  $P_{N+1} = 0$ , les  $N$  autres valeurs de  $P$  sont solutions de l'équation matricielle :

$$\underbrace{\begin{bmatrix} -[2+h^2 V_1] & & & & \\ & 1 & & & \\ & & -[2+h^2 V_2] & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & -[2+h^2 V_N] \\ & 0 & & & & 1 \end{bmatrix}}_A \underbrace{\begin{bmatrix} P_1 \\ \vdots \\ P_N \end{bmatrix}}_{\vec{P}} = -h^2 E \begin{bmatrix} P_1 \\ \vdots \\ P_N \end{bmatrix}$$

On écrit plus brièvement  $A\vec{P} = -h^2 E\vec{P}$   
 ( $-h^2 E$ ) est valeur propre de la matrice tridiagonale  $A$   
 les  $N$  valeurs de  $P_i$  sont les composantes du vecteur propre associé.

Pour le calcul des énergies la seule originalité réside dans l'emploi de la méthode de Rutishauser (cf. Durand<sup>24</sup> p. 281).

On utilise une version double-précision (72 bits sur UNIVAC - 1110  $\Leftrightarrow$  18 décimales) du programme type n° 1 décrit par Durand. L'avantage étant que les valeurs propres apparaissent dans l'ordre des modules croissants : cette constatation n'est pas prouvée mais souvent vérifiée et c'est le cas pour notre problème.

Cet ordre naturel est précieux car il permet de ne calculer qu'un nombre limité de valeurs propres. Il suffit de soustraire du potentiel l'énergie prévisionnelle du fondamental et d'arrêter la procédure après la  $n^{i\text{ème}}$  valeur propre positive si on considère  $n$  niveaux.

Le calcul du vecteur propre a été développé avec M. O. Atabek ; à notre connaissance c'est un calcul original. Il est valable pour toute matrice tridiagonale dont la diagonale inférieure est remplie de 1.

Soit  $\lambda$  une valeur propre et  $\vec{P}$  le vecteur propre associé, on a les N relations suivantes :

$$\begin{pmatrix} a-\lambda & b_1 & 0 & 0 \dots\dots \\ 1 & a_2-\lambda & b_2 & 0 \dots\dots \\ 0 & 1 & a_3-\lambda & b_3 \dots\dots \\ & & 0 & a_N-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_1 \\ \\ \\ P_N \end{pmatrix} = 0$$

dont on déduit facilement

$$P_i = \alpha_i \cdot P_{i+1} \quad \text{avec} \quad \alpha_i = \frac{-b_i}{(a_i-\lambda) + \alpha_{i-1}}$$

La première équation donne  $\alpha_1 = -\frac{b_1}{a_1 - \lambda}$ , par récurrence on calcule tous les  $\alpha_i$ ,  $i \in [1, M]$ . On peut alors propager les  $P_i$  vers l'intérieur :

$$P_i = \beta_i \cdot P_M \quad \text{avec} \quad \beta_i = \prod_{j=i}^{M-1} \alpha_j$$

Posons  $P_M = 1$  (on normalisera après) ; toutes les valeurs de  $P_i$ ,  $i \in [1, M]$  sont alors connues. On a directement le nombre de noeuds de la fonction d'onde en comptant les valeurs de  $\alpha_i < 0$ .

Calculons les valeurs de  $P_i$  quand  $i \in [M, N]$  en propageant vers l'extérieur. On utilise les relations

$$P_i = \gamma_i \cdot P_M \quad \text{avec} \quad \gamma_i = \frac{(a_{i-1} - \lambda) \cdot \gamma_{i-1} + \gamma_{i-2}}{-b_{i-1}}$$

On initialise la propagation avec :

$$\gamma_{M+1} = \frac{a_M - \lambda + \alpha_{M-1}}{-b_M} \quad \text{et} \quad \gamma_{M+2} = \frac{(a_{M+1} - \lambda) \cdot \gamma_{M+1} + 1}{-b_{M+1}}$$

Le fait de propager les  $P_i$  à partir de  $P_M$  (point tournant classique) évite l'erreur qu'on aurait en propageant à partir des points frontières ( $P_2$  ou  $P_{N-1}$ ) où la fonction d'onde est quasi-nulle.

Remarque : on peut observer, après le point tournant, une recroissance de la fonction d'onde. En effet l'équation  $HX = \epsilon \cdot X$  admet deux solutions pour la même énergie :

- une solution régulière  $\chi_1$  ;  $\chi_1(R) \rightarrow 0$  quand  $R \rightarrow \infty$
- une solution irrégulière  $\chi_2$  ;  $\chi_2(R) \rightarrow \infty$  quand  $R \rightarrow \infty$ .

La solution générale est une combinaison linéaire de  $\chi_1$  et  $\chi_2$  :  
 $\chi = C_1(\epsilon) \cdot \chi_1 + C_2(\epsilon) \cdot \chi_2$ .

Si on calculait exactement  $E$  à partir de  $(-h^2 E)$  valeur propre de  $A$  en imposant  $P(0) = 0$ ,  $P(R_N) = 0$ , on sélectionnerait alors la solution régulière, on aurait  $C_2(E) = 0$ ,  $C_1(E) = 1$ .

En fait on a obtenu une valeur très approchée de  $E$  que l'on notera  $\epsilon = E + dE$ .

En faisant un développement limité de  $C_1$  et  $C_2$  on obtient :

$$\chi = \chi_1 + C_2'(E) \cdot dE \cdot \chi_2$$

Plus l'énergie est connue avec précision ( $dE$  faible) moins  $\chi_2$  se manifeste.

On a couramment  $dE \approx 10^{-3}$ ,  $\chi_2$  qui est une fonction croissante de  $R$  se manifeste alors à grand  $R$ . On enlève de la normalisation tous les points, après le point tournant, correspondant à la croissance de  $\chi_2$ .

Il y a  $n-l$  oscillations de la fonction d'onde dans l'intervalle  $[0, R_M]$  pour un état  $(n, l)$ . On utilise les conventions suivantes :

- 40 points par oscillation ;  $M = 40 \cdot (n-l)$
- $R_N = 10 \cdot R_M$  ;  $N = 10 \cdot M$

Moyennant les précautions indiquées ci-dessus on obtient, point par point, une précision de  $10^{-3}$  pour les fonctions d'onde du potentiel de Hulthen. Cette précision est obtenue en comparant les résultats de TRIDG avec les calculs numériques effectués à partir des formules analytiques de l'annexe I. Nous pensons que cette précision restera valable pour le potentiel de Debye qui a la même forme que Hulthen.

2.3. NUMEROV (on utilise un algorithme Numerov-Cooley)<sup>22</sup>

L'équation (IV.3) peut s'écrire

$$-h^{-2} \cdot Y_{i-1} + \alpha_i \cdot Y_i - h^{-2} \cdot Y_{i+1} = 0$$

avec 
$$\alpha_i = 2h^{-2} + (V_i - E) \left[ 1 - \left( \frac{h^2}{12} \right) (V_i - E) \right]^{-1}$$

En posant  $Y_0 = 0$   $Y_N \approx Y_{N-1}$  et

en écrivant 
$$\alpha_N = h^{-2} + (V_i - E) \left[ 1 - \left( \frac{h^2}{12} \right) (V_i - E) \right]^{-1},$$

on obtient l'égalité matricielle suivante :

$$M \vec{Y} = 0 \quad \text{avec} \quad \vec{Y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_M \\ \vdots \\ Y_N \end{pmatrix}$$

$$M = \begin{pmatrix} \alpha_1 & -h^{-2} & 0 & \dots & 0 \\ -h^{-2} & \alpha_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -h^{-2} & \alpha_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -h^{-2} & \alpha_N \end{pmatrix}$$

On propage la solution à partir des extrémités vers le point  $R_M$  (cf. Hartree, pages 81,82 pour le démarrage des intégrations).

On obtient deux valeurs pour  $Y_M$  :  $Y_M^{IN}$  propagation depuis  $R$  infini  
 $Y_M^{OUT}$  propagation depuis  $R = 0$

On raccorde les deux branches en divisant les  $Y_i$  ( $i \in [1, M]$ ) par  $Y^{OUT}$  et les  $Y_\gamma$  ( $\gamma \in [M, N]$ ) par  $Y^{IN}$ , on a donc  $Y_M = 1$

On note  $F(E) = -h^{-2}Y_{M-1} + \alpha_M Y_M - h^{-2}Y_{N+1}$ ,

on obtient  $F(E) = 0$  si  $E$  valeur propre du problème.

Mais on a utilisé une énergie d'essai  $\epsilon = E - dE$  (qui provient des calculs sur Hulthen analytique)

On a  $F(\epsilon) = F(E) - dE \cdot F'(E)$  (développement limité)

$$\Rightarrow dE = - \frac{F(\epsilon)}{F'(E)}$$

Il faut calculer  $F'(E)$  pour avoir la correction de  $\epsilon$ .

La méthode NUMEROV-COOLEY permet d'avoir analytiquement  $F'(E)$ .

Le fait d'avoir  $F(\epsilon) \neq 0$  s'écrit

$$M \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_M \\ \vdots \\ Y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ F(\epsilon) \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (Y_M = 1)$$

Si on écrit en première position la  $M^{i\text{ème}}$  équation on a :

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{a1}^+ \\ M_{a1} & M_{aa} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ C_a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(\epsilon) \\ 0 \end{pmatrix}$$

avec

$$M_{11} = \alpha_M$$

$$M_{a1}^+ = (0 \dots -h^{-2} \quad -h^{-2} \quad 0 \quad 0)$$

$$M_{aa} = M \text{ moins la } M^{i\text{ème}} \text{ ligne et colonne}$$

$$C_a = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_{M-1} \\ Y_{M+1} \\ \vdots \\ Y_N \end{pmatrix}$$

On obtient le système d'équations matricielles :

$$\left\{ \begin{array}{l} M_{11} + M_{a1}^+ C_a = F(\epsilon) \\ M_{a1} + M_{aa} C_a = 0 \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (1) \\ (2) \end{array}$$

Dérivons (1) et (2) par rapport à :

$$\left\{ \begin{array}{l} M'_{11} + M_{a1}^{+'} C_a + M_{a1}^+ C'_a = F'(\epsilon) \\ M'_{a1} + M'_{aa} C_a + M_{aa} C'_a = 0 \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (3) \\ (4) \end{array}$$

La combinaison (3) +  $C_a^+ \cdot (4)$  nous donne :

$$F'(\epsilon) = M'_{11} + M_{a1}^{+'} C_a + C_a^+ M'_{a1} + M_{a1}^+ C'_a + C_a^+ M'_{aa} C_a + C_a^+ M_{aa} C'_a$$

$$\text{or } M_{a1}^+ C'_a + C_a^+ M_{aa} C'_a = (M_{a1}^+ + C_a^+ M_{aa}) C'_a$$

$$\text{et (2)} \Rightarrow (M_{a1} + M_{aa} C_a)^+ = 0, \text{ donc } M_a^+ + C_a^+ M_{aa}^+ = 0$$

$$M_{aa} \text{ symétrique réelle} \Rightarrow M_{aa}^+ = M_{aa}$$

$$\text{d'où } (M_{a1}^+ + C_a^+ M_{aa}) C'_a = 0.$$

Il reste alors :

$$F'(\epsilon) = M'_{11} + M_{a1}^{+'} C_a + C_a^+ M'_{a1} + C_a^+ M'_{aa} C_a$$

ce qui peut s'écrire

$$F'(\epsilon) = (1 \ C_a^+) \begin{pmatrix} M'_{11} & M'^+_{a1} \\ M'_{a1} & M'_{aa} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ C_a \end{pmatrix}$$

ou bien encore  $F'(\epsilon) = \sum_{i=1}^N Y_i^2 \cdot \frac{\partial \alpha_i}{\partial \epsilon}$

or  $\frac{\partial \alpha_i}{\partial \epsilon} = - \left[ 1 - \left( \frac{h^2}{12} \right) (V_i - \epsilon) \right]^{-2} \Rightarrow Y_i^2 \cdot \frac{\partial \alpha_i}{\partial \epsilon} = P_i^2$

finalement 
$$dE = \left[ h^{-2} \cdot -Y_{M-1} + 2Y_M - Y_{M+1} + (V_M - \epsilon)P_M \right] / \sum_{i=1}^N -P_i^2$$

Cette méthode permet d'atteindre la précision de  $10^{-6}$  sur les énergies, qui est nécessaire pour calculer des déplacements de raies.

Elle est plus longue que TRIDG et ne converge pas toujours sur le bon niveau quand ils sont serrés (niveaux excités).

### 3. APPLICATION AUX HYDROGENOIDES

#### 3.1. ORGANISATION DES CALCULS

On trouvera dans l'annexe II des organigrammes des calculs effectués avec TRIDG. La densité électronique et la charge du noyau (notée  $z$ ) de l'ion hydrogénéoïde considéré sont des données que l'on fournit au programme. La distance de Debye prend les valeurs 4,5,7,10 et 15 en unité  $a_0/z$ . Le choix de ces valeurs permet une comparaison aisée des énergies avec celles calculées par Rogers & Graboske. Pour chaque valeur de  $D$  on trace le réseau des courbes  $y_n = f(r)$  pour chacune des couches pour lesquelles il y a des états liés. La courbe de  $n$  le plus élevé correspond à la constante diélectrique vue par les électrons de diffusion.

Cette procédure permet d'apprécier l'importance des effets de pression, de calculer des déplacements de raies quand ils sont importants. Pour obtenir avec précision des déplacements de raies faibles il faut remplacer les appels à TRIDG et VECTP par un appel à NUMEROV.

Le calcul étant plus long on ne l'effectue que pour  $n_e$  et  $T$  fixés, on en déduit  $D$ .

Dans les deux processus on considère l'ion hydrogénéoïde en équilibre avec son noyau de charge  $z$



Il n'y a alors que 3 espèces en présence, la neutralité électrique donne :

$$(z-1)n_{z-1} + zn_z = n_e \quad (\text{IV.4})$$

L'équation de Saha peut s'écrire :

$$\frac{n_{z-1}}{n_z} = K$$

$$\text{avec } K = \left( \frac{h^2}{2 m_i k \cdot T} \right)^{3/2} \cdot \frac{n_e}{2} \cdot e^{\beta I}$$

$$I = -E_{is} + \frac{1}{D}$$

$$D = \left[ \frac{6,895 \cdot T}{n_e (1 + \bar{z})} \right]^{1/2}$$

$$\bar{z} = \frac{(z-1)^2 n_{z-1} + z^2 \cdot n_z}{n_e}$$

$$\text{donc } \boxed{\bar{z} = z - \frac{n_{z-1}}{n_e}} \quad (\text{IV.5})$$

Au départ on pose  $\bar{z} \approx z$ , on en déduit D puis I et enfin

$$K = \frac{n_{z-1}}{n_z}$$

$$(\text{IV.4}) \Rightarrow (z-1) \cdot K + z = \frac{n_e}{n_z}$$

ce qui permet de calculer  $n_{z-1}$  :

$$n_z = \frac{n_e}{z} \left( 1 + K \cdot \frac{z-1}{z} \right)^{-1}$$

$$\text{donc } \boxed{n_{z-1} = K \cdot \frac{n_e}{z} \left( 1 + K \frac{z-1}{z} \right)^{-1}} \quad (\text{IV.6})$$

Si on reporte  $n_{z-1}$  dans (IV.5) on obtient  $\bar{z}$  et en itérant quelques fois on obtient une valeur stabilisée de K. Une fois injectée dans (IV.6) on obtient  $n_{z-1}$  qui est la densité de dipôles.

### 3.2. CALCUL DES CONSTANTES DIELECTRIQUES

Les figures IV.1 à IV.23 donnent les courbes  $y_r = f(r)$  avec  $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$  et  $n_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$  pour l'hydrogène, et avec  $n_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$  pour l'hélium, le lithium, le béryllium, le bore et le carbone.

On remarque plusieurs points :

- (1) la forme générale des courbes est identique à celle prévue par nos premiers calculs analytiques.
- (2) plus  $n$  est grand plus l'effet est important et plus la constante diélectrique se stabilise à  $r$  grand. L'écart entre 2 courbes croît avec  $n$ .
- (3) l'effet est d'autant plus important que  $D$  est petit.
- (4) pour l'hydrogène l'effet est plus important quand  $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$  que si  $n_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ .

Le point (2) s'explique naturellement par le fait qu'une couche est renormalisée par toutes les couches inférieures. Plus  $n$  est élevé, plus les fonctions d'onde s'étendent loin, la polarisabilité étant en  $r^2$  les couches renormalisent plus quand  $n$  croît.

Le point (3) n'est pas surprenant car on a vu que quand  $D$  diminue, les fonctions d'ondes s'étalent. Il y a alors plus de dipôles d'extension élevée. Remarquons aussi que quand  $D$  diminue avec  $n_e$  constant  $T$  diminue en  $D^2$ .

$$\Lambda = \frac{e^2}{kTD} \equiv \frac{1}{D^3}$$

Donc le paramètre plasma augmente quand  $D$  diminue. Il est logique que les effets augmentent quand  $\Lambda$  augmente car ce sont des effets de pression que l'on cherche à calculer.

Le point (4) peut sembler étonnant. En fait quand  $n_e$  diminue à  $D$  constant,  $T$  diminue. Donc le paramètre plasma baisse :

$$\begin{aligned} \text{pour l'hydrogène} \quad \Lambda &= 0,293 \quad \text{quand} \quad n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3} \\ \Lambda &= 0,029 \quad \text{quand} \quad n_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3} \end{aligned}$$

Les courbes pour lesquelles l'effet obtenu est trop faible n'ont pas été tracées.

On trouvera, dans les tableaux I à VI les valeurs limites atteintes par  $y_n$  pour chaque couche et chaque valeur de D.

On a tracé (figures IV.1' à IV.4') l'évolution en fonction de z de  $y_n(\infty)$  quand n,  $n_e$  et D sont fixés. Il est clair que l'effet augmente non-linéairement quand z augmente.

Quand n = 4 ou 5 il n'y a des états liés sur ces couches que pour D = 10 et 15, ce qui implique un effet faible.

Il est difficile, avec cette procédure, d'effectuer des calculs quand  $y > 6$  et  $D \leq 15$  car alors  $\Lambda \gg 1$ . L'équilibre d'ionisation n'est plus décrit de manière satisfaisante par une pseudo-équation de Saha. On surestime alors le nombre d'états liés, ce qui conduit à un effet trop important :  $Y_n \rightarrow 0$  très rapidement.

### 3.3. POSITION DES NIVEAUX ET DEPLACEMENT DES RAIES

Les tableaux VIII à XIII donnent (en Hartree) pour chaque case l'énergie renormalisée d'un niveau, l'énergie trouvée par Rogers & Graboske pour le même niveau, le pourcentage de différence relative est au milieu.

On constate un accord à  $10^{-3}$  près pour les énergies 1S qui ne sont pas renormalisées. Les cases vides correspondent aux états qui ne sont plus liés (pour la valeur de D considérée) d'après Rogers, c'est l'effet du potentiel de Debye.

On peut constater que notre renormalisation fait passer dans le continuum un certain nombre d'états que Rogers considère comme liés. On note alors  $E = 0.0$  et différence relative = 100 %.

Dans tous les cas les modèles des énergies renormalisées sont plus petits. La constante diélectrique propre à chaque couche diminue la profondeur du puits de potentiel et donc l'énergie de liaison des états liés.

Il est difficile d'obtenir des déplacements de raies appréciables à petit  $z$ . En effet si on considère une raie Lyman- $\alpha$  il faut avoir  $D \geq 5$  pour que l'état  $2p$  existe encore. Quand  $D \geq 5$ ,  $E_{2p}$  a peu changé quand  $z$  est faible (3,5 % pour  $D = 5$   $z = 3$ ).

Si  $z$  est trop fort l'état  $2p$  n'existe plus. On obtient un déplacement optimum de 13,7 % pour  $D = 7$   $z = 5$ .

On trouve dans les tables une raie à 48.58 Å. Le potentiel de Debye donnerait une raie à 52.55 Å, soit un décalage de 4.03 Å vers le rouge qui surestime l'effet du plasma.

Notre calcul donne une raie à 52.10 Å, soit un décalage de 0,454 Å vers le bleu.

Bien sûr il ne compense pas l'effet trop grand du potentiel de Debye mais il est important de constater que c'est un effet vers le bleu et qui est spectroscopiquement observable.

#### 4. REMARQUES ET PRINCIPAUX RESULTATS

En multipliant le potentiel d'interaction entre deux particules par un facteur analogue à l'inverse d'une constante diélectrique, on représente les phénomènes non-thermiques par un écran supplémentaire. Cet écran est d'autant plus fort que le nombre quantique principal de la couche atomique est élevé. Plus un niveau est excité, plus il rapproche du continuum. La différence d'énergie entre 2 niveaux augmente. On obtient des décalages vers le bleu des raies d'émission. Ce décalage est d'autant plus fort que  $z$ , charge du noyau de l'ion, est élevé.



Y ( $\infty$ )	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5	T en K
D = 4	0,997	0,924			$0,188487 \cdot 10^6$
D = 5	0,999	0,957			$0,294512 \cdot 10^6$
D = 7	0,999	0,996			$0,577244 \cdot 10^6$
D = 10	0,999	0,999	0,993		$0,1178049 \cdot 10^7$
D = 15	0,999	0,999	0,999	0,992	$0,2650711 \cdot 10^7$

TABLEAU I : Z = 1, hydrogène,  $n_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$

Y ( $\infty$ )	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5	T en K
D = 4	0,999	0,983			$0,1884878 \cdot 10^7$
D = 5	0,999	0,988			$0,2945123 \cdot 10^7$
D = 7	0,999	0,998			$0,5772441 \cdot 10^7$
D = 10	0,999	0,999	0,998		$0,11780493 \cdot 10^8$
D = 15	0,999	0,999	0,999	0,997	$0,26506110 \cdot 10^8$

TABLEAU II : Z = 1, hydrogène,  $n_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$



Y ( $\infty$ )	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5
D = 4	0,997	0,927		
D = 5	0,999	0,960		
D = 7	0,999	0,996		
D = 10	0,999	0,999	0,994	
D = 15	0,999	0,999	0,999	0,993

TABLEAU III : Z = 2, hélium,  $n_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$

Y ( $\infty$ )	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5
D = 4	0,950	0,600		
D = 5	0,995	0,882		
D = 7	0,999	0,992		
D = 10	0,999	0,999	0,989	
D = 15	0,999	0,999	0,998	0,988

TABLEAU IV : Z = 3, lithium,  $n_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$



Y ( $\infty$ )	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5
D = 4	0,049			
D = 5	0,844			
D = 7	0,998	0,981		
D = 10	0,999	0,998	0,982	
D = 15	0,999	0,999	0,998	0,982

TABLEAU V : Z = 4, béryllium,  $n_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$

Y ( $\infty$ )	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5
D = 4	0,00			
D = 5	0,011			
D = 7	0,958	0,906		
D = 10	0,999	0,997	0,969	
D = 11	0,999	0,998	0,997	0,974

TABLEAU VI : Z = 4, bore,  $n_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$



Y ( $\infty$ )	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5
D = 4				
D = 5				
D = 7	0,168			
D = 10	0,996	0,990	0,907	
D = 15	0,999	0,999	0,996	0,953

TABLEAU VII : Z = 6, carbone,  $n_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$



$|E_{n,1}|$  (en Hartree) : {renormalisée écart relatif  
Rogers

DD	1S	2S	2P	3S	3P	3D	4S	4P	T en K
4	0,290606	0,003217							$0,18848789 \cdot 10^7$
	0,1	5,2							
5	0,290900	0,003395							$0,29451233 \cdot 10^7$
	0,326495	0,012024	0,004124						
7	0,1	0,2	0,6						$0,57724418 \cdot 10^7$
	0,326800	0,012050	0,004100						
10	0,370906	0,029890	0,024274						$0,11780493 \cdot 10^8$
	0,1	0,3	0,2						
15	0,371200	0,029970	0,024225						$0,26506110 \cdot 10^8$
	0,406746	0,049849	0,046597	0,003175	0,001619				
15	0,1	0,2	0,1	1,1	1,8				0,000079
	0,407050	0,049930	0,046530	0,003210	0,001590				
15	0,436218	0,069945	0,068374	0,012123	0,011017	0,008483	0,000477	0,000079	0,4
	0,1	0,1	0,1	0,2	0,4	0,1	0,1	0,4	
15	0,436500	0,070000	0,068300	0,012150	0,010970	0,008475	0,000477	0,000079	0,000079

TABLEAU VIII : Z = 1,0 - densité électronique = 0,10+024



$|E_{n,1}|$  (en Hartree) : { renormalisée écart relatif  
Rogers

DD	1S	2S	2P	3S	3P	3D	4S	4P	T en K
4	0,290606 0,1	0,003189 6,1							$0,70682960 \cdot 10^6$
5	0,326495 0,1	0,012012 0,2	0,004108 0,2						$0,11044213 \cdot 10^7$
7	0,370906 0,1	0,029887 0,3	0,024270 0,2						$0,21646657 \cdot 10^7$
10	0,406746 0,1	0,049849 0,2	0,046596 0,1	0,003173 1,2	0,001616 1,7				$0,44176850 \cdot 10^7$
15	0,436218 0,1	0,069945 0,1	0,068374 0,1	0,012122 0,2	0,011016 0,4	0,008482 0,1	0,000476 0,1	0,000078 1,3	$0,99297913 \cdot 10^7$
	0,436500	0,070000	0,068300	0,012150	0,010970	0,008475	0,000477	0,000079	

TABLEAU IX :  $Z = 2,0$  - densité électronique =  $0,10+024$



$|E_{n,1}|$  (en Hartree) : {renormalisée écart relatif  
Rogers

DD	1S	2S	2P	3S	3P	3D	4S	T en K
4	0,290606	0,002484						0,41886199 . 10 <sup>6</sup>
	0,1	26,8						
	0,290900	0,003395						
5	0,326495	0,011889	0,003957					0,65447186 . 10 <sup>6</sup>
	0,1	1,3	3,5					
	0,326800	0,012050	0,004100					
7	0,370906	0,029877	0,024257					0,12827648 . 10 <sup>7</sup>
	0,1	0,3	0,1					
	0,371200	0,029970	0,024255					
10	0,406747	0,049848	0,046595	0,003170	0,001613			0,26178874 . 10 <sup>7</sup>
	0,1	0,2	0,1	1,3	1,5			
	0,407050	0,049930	0,046530	0,003210	0,001590			
15	0,436218	0,069945	0,068373	0,012122	0,011015	0,008481	0,000476	0,58902467 . 10 <sup>7</sup>
	0,1	0,1	0,1	0,2	0,4	0,1	0,3	
	0,436500	0,070000	0,068300	0,012150	0,010970	0,008475	0,000477	

TABLEAU X : Z = 3,0 - densité électronique = 0,10+024



$|E_{n,1}|$  (en Hartree) : {renormalisée écart relatif  
Rogers

DD	1S	2S	2P	3S	3P	3D	4S	40	T en K
4	0,290606	0,000000							0,29451233.10 <sup>6</sup>
	0,1 0,290900	100,0 0,003395							
5	0,326495	0,007109	0,000000						0,46017552.10 <sup>6</sup>
	0,1 0,326800	41,0 0,012050	100,0 0,004100						
7	0,370906	0,029784	0,024135						0,90194403.10 <sup>6</sup>
	0,1 0,371200	0,6 0,029970	0,4 0,024225						
10	0,406746	0,049844	0,046590	0,003164	0,001608				0,18407021.10 <sup>7</sup>
	0,1 0,407050	0,2 0,049930	0,1 0,046530	1,4 0,003210	1,1 0,001590				
15	0,436218	0,069945	0,068373	0,012121	0,011014	0,008480	0,000474	0,000077	0,41415797.10 <sup>7</sup>
	0,1 0,436500	0,1 0,070000	0,1 0,068300	0,2 0,012150	0,4 0,010970	0,1 0,008475	0,5 0,000477	3,2 0,000079	

TABLEAU XI : Z = 4,0 - densité électronique = 0,10+024



$|E_{n,l}|$  (en Hartree) : {renormalisée écart relatif  
Rogers

DD	1S	2S	2P	3S	3P	3D	4S	4P	T en K
4	0,290606	0,000000							0,22618547.10 <sup>6</sup>
	0,1	100,0							
	0,290900	0,003395							
5	0,326495	0,000000	0,000000						0,35341480.10 <sup>6</sup>
	0,1	100,0	100,0						
	0,326800	0,012050	0,004100						
7	0,370906	0,027338	0,020908						0,69269301.10 <sup>6</sup>
	0,1	8,8	13,7						
	0,371200	0,029970	0,024225						
10	0,406746	0,059820	0,046560	0,003150	0,001593				0,14136592.10 <sup>7</sup>
	0,1	0,2	0,1	1,9	0,2				
	0,407050	0,049930	0,046530	0,003210	0,001590				
15	0,436218	0,069944	0,068372	0,012119	0,011013	0,008478	0,000473	0,000076	0,31807332.10 <sup>7</sup>
	0,1	0,1	0,1	0,3	0,4	0,0	0,8	4,5	
	0,436500	0,070000	0,068300	0,012150	0,010970	0,008475	0,000477	0,000079	

TABLEAU XII : Z = 5,0 - densité électronique = 0,10+024

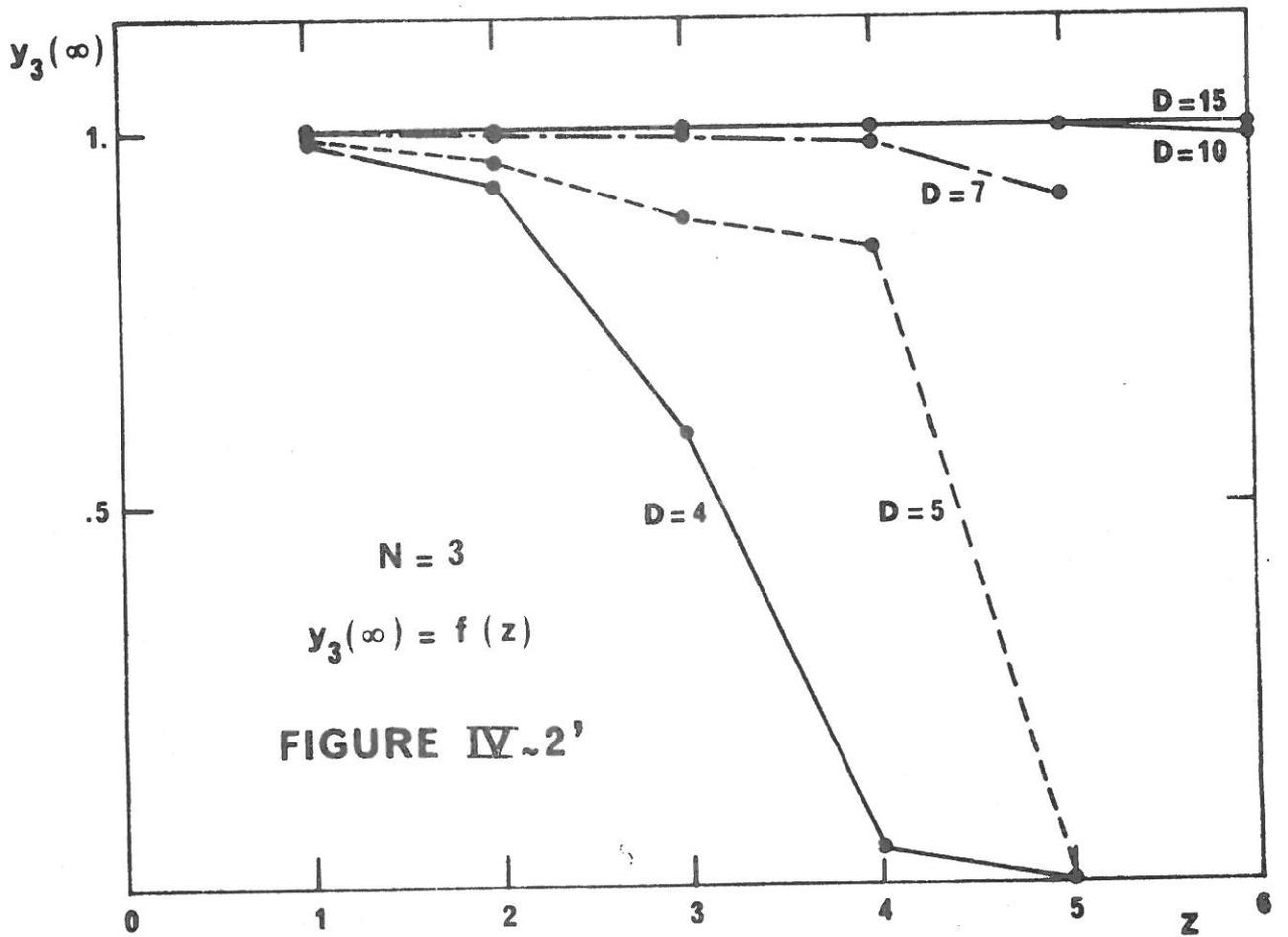
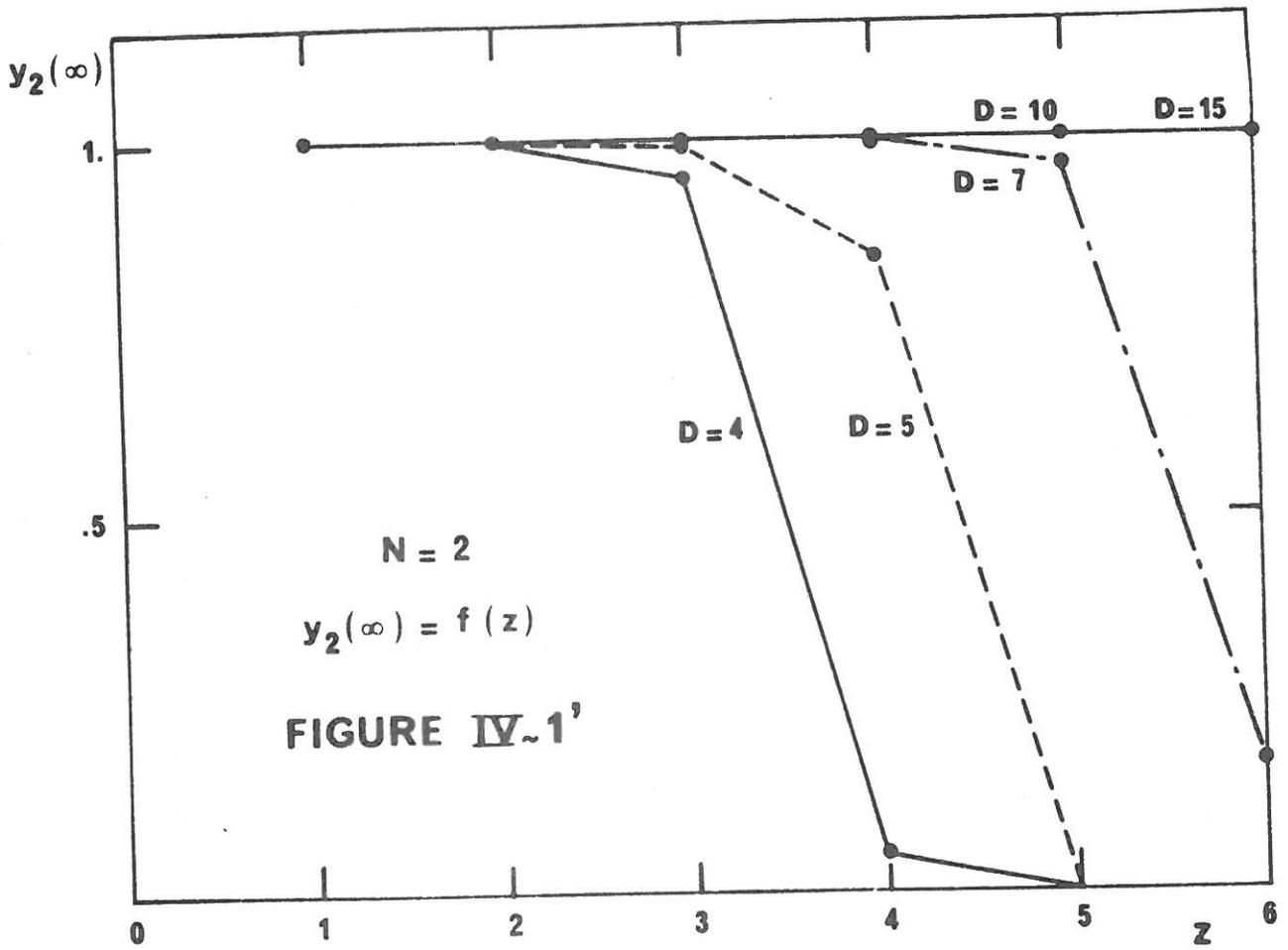


$|E_{n,1}|$  (en Hartree) : { renormalisée écart relatif  
Rogers

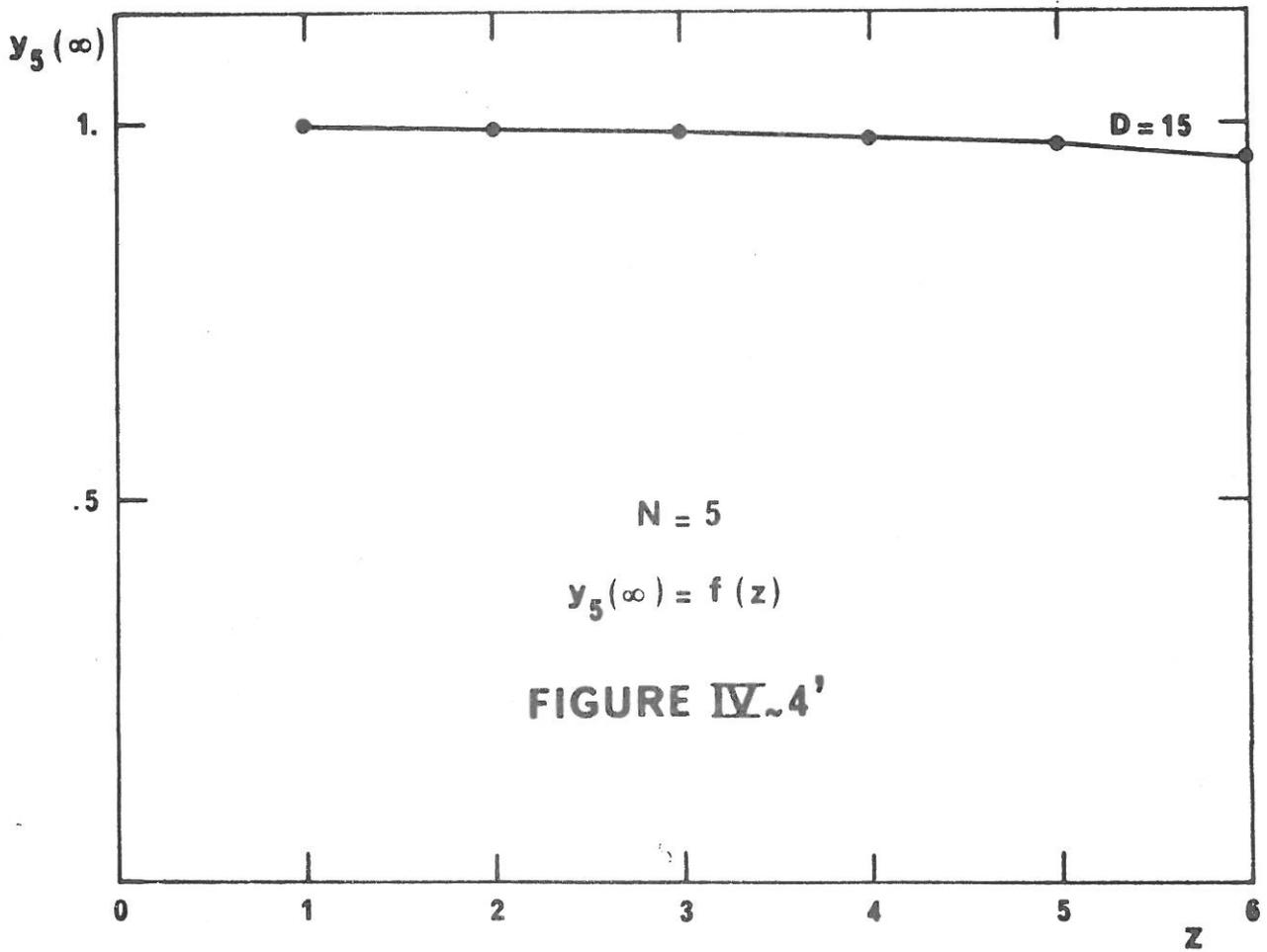
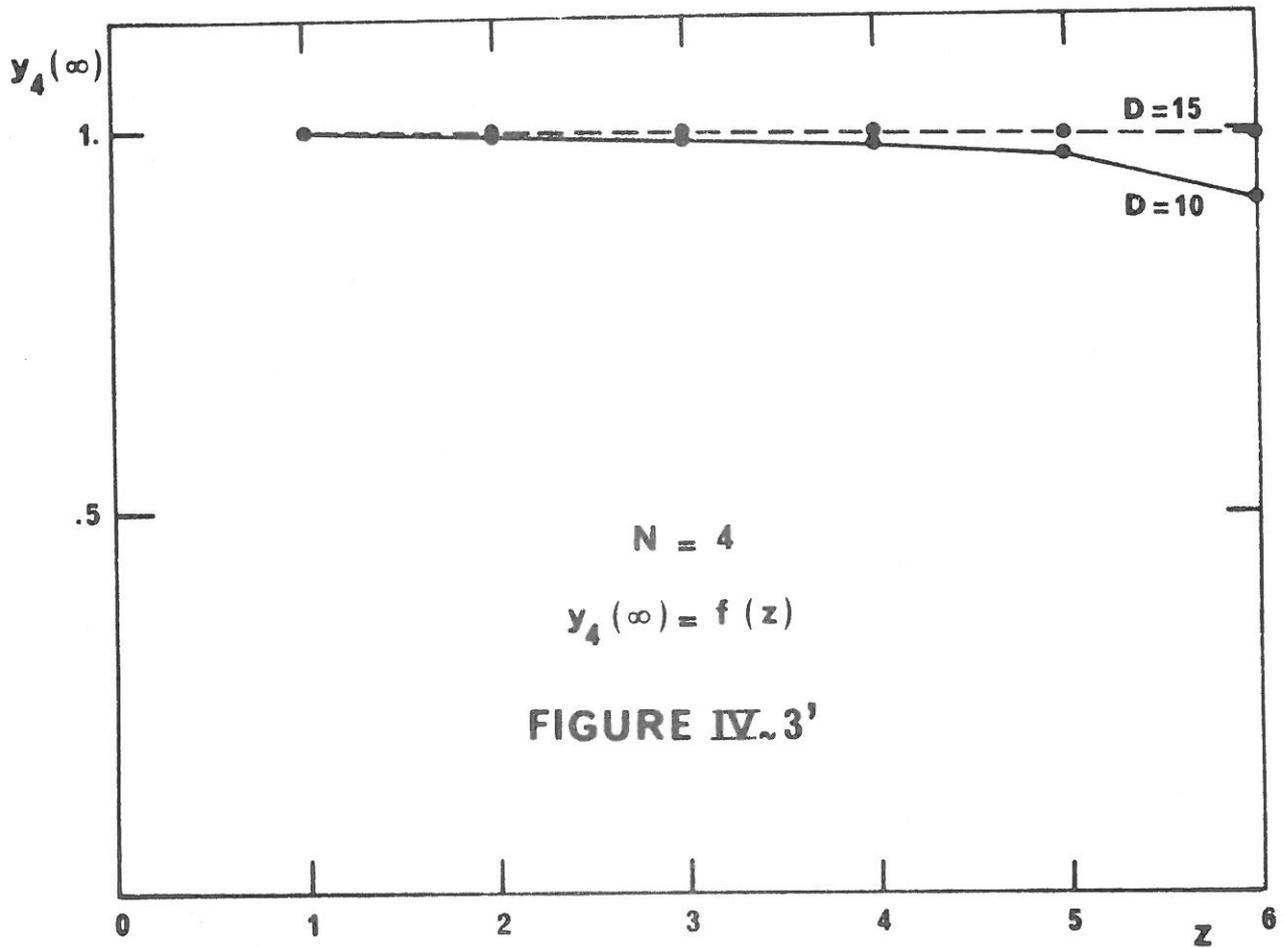
DD	1S	2S	2P	3S	3P	3D	4S	4P	T en K
7	0,370906	0,000000	0,000000						0,56120962.10 <sup>6</sup>
	0,1	100,0	100,0						
	0,371200	0,029970	0,024225						
10	0,406746	0,049537	0,046199	0,003074	0,001515				0,11453257.10 <sup>7</sup>
	0,1	0,8	0,7	4,2	4,7				
	0,407050	0,049930	0,046530	0,003210	0,001590				
15	0,436218	0,069942	0,068370	0,012117	0,011010	0,008474	0,000471	0,000074	0,25769829.10 <sup>7</sup>
	0,1	0,1	0,1	0,3	0,4	0,0	1,2	6,3	
	0,436500	0,070000	0,068300	0,012150	0,010970	0,008475	0,000477	0,000079	

TABLEAU XIII : Z = 6,0 - densité électronique = 0,10+024







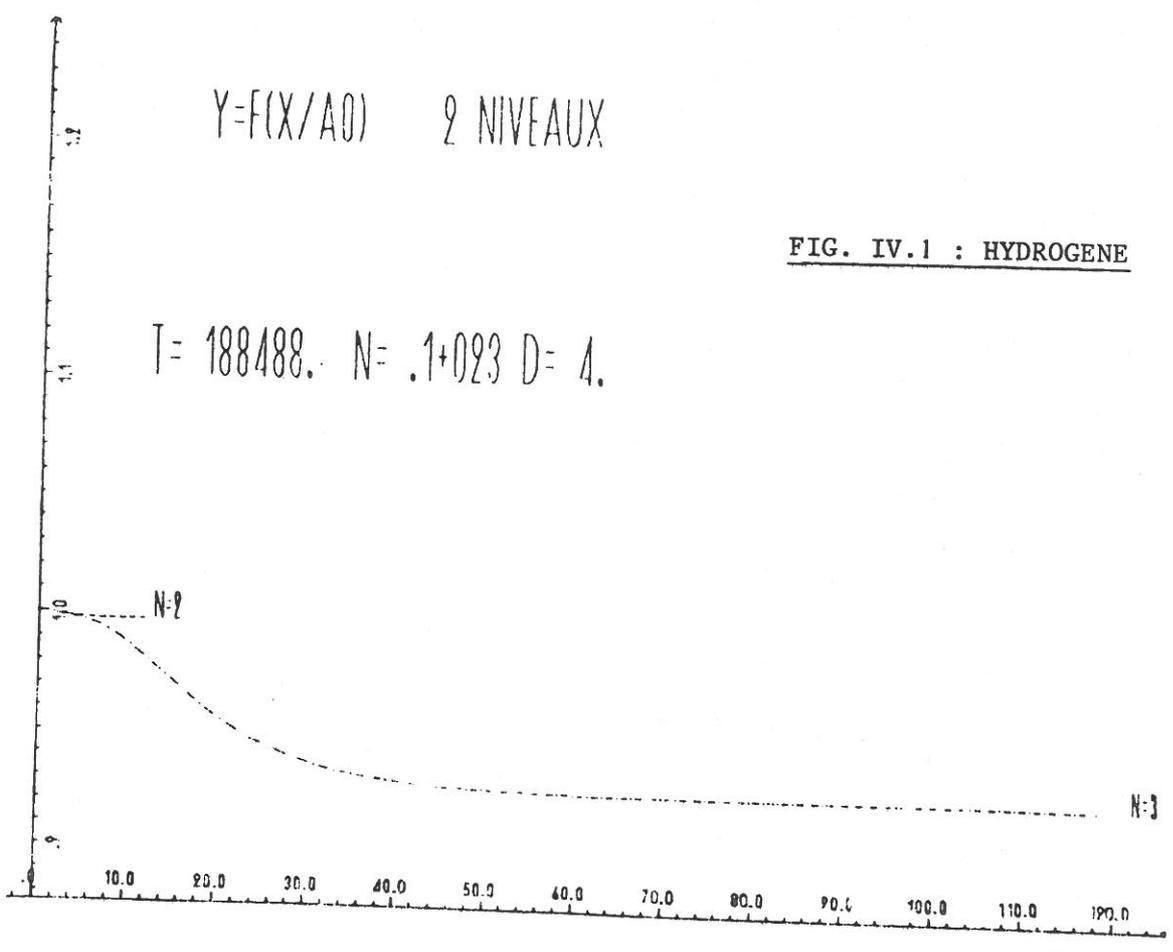




$Y=F(X/A0)$  2 NIVEAUX

FIG. IV.1 : HYDROGENE

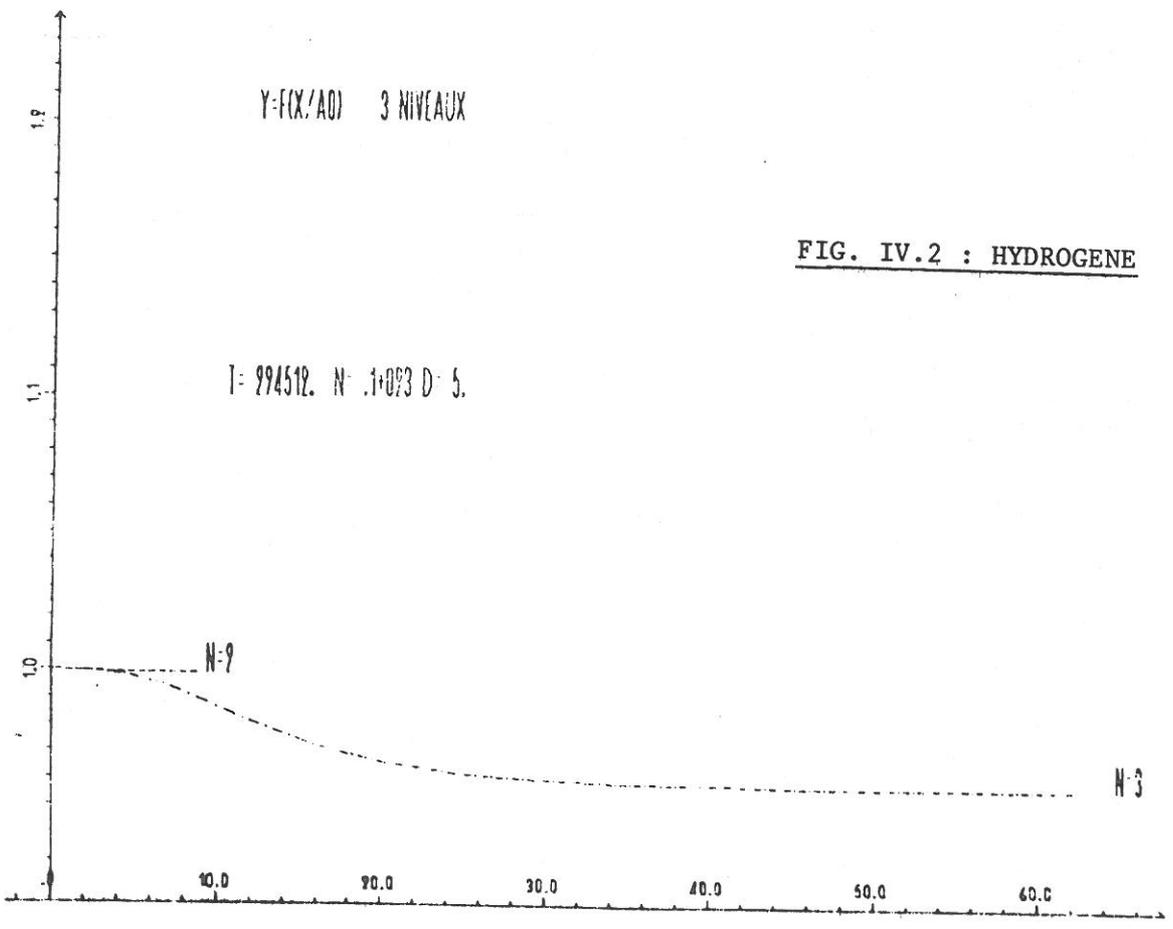
$T=188488. N=.1+093 D=4.$



$Y=F(X/A0)$  3 NIVEAUX

FIG. IV.2 : HYDROGENE

$T=994512. N=.1+093 D=5.$

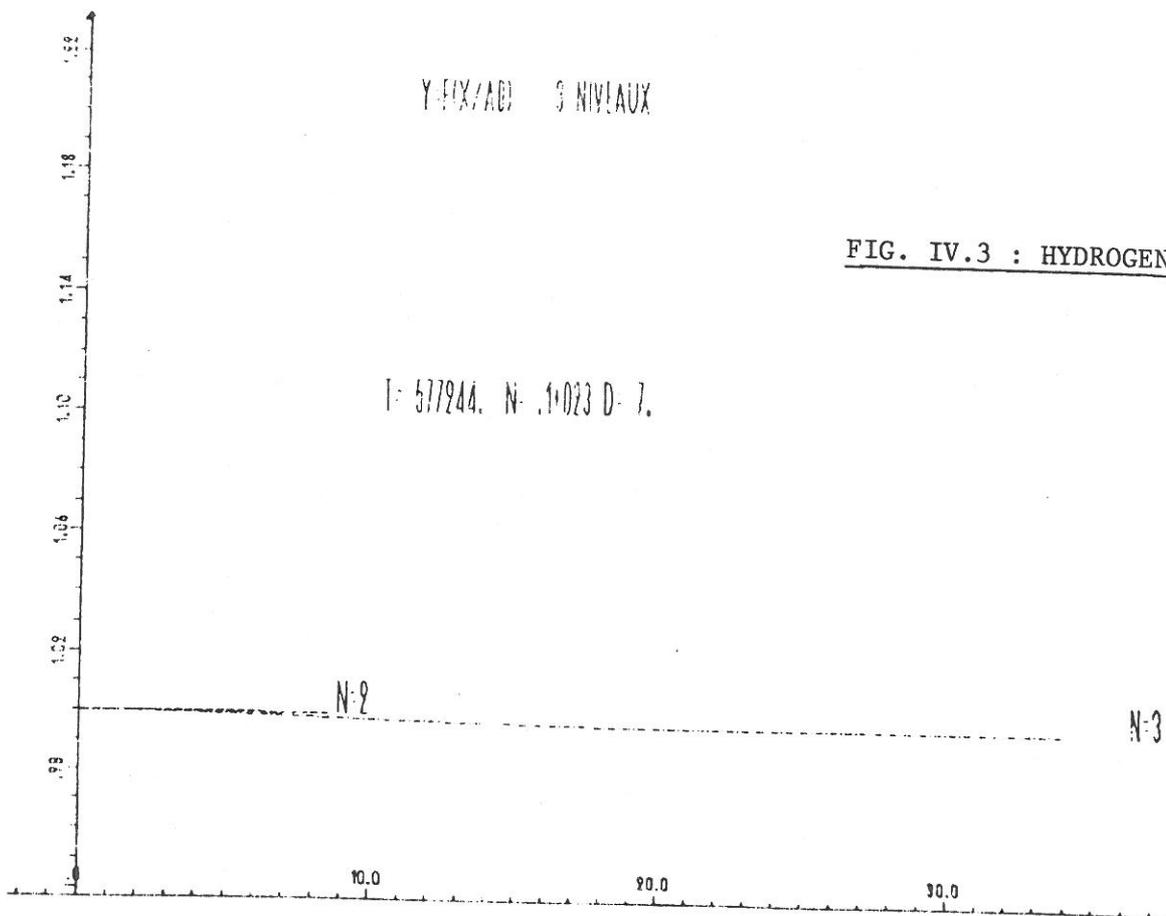




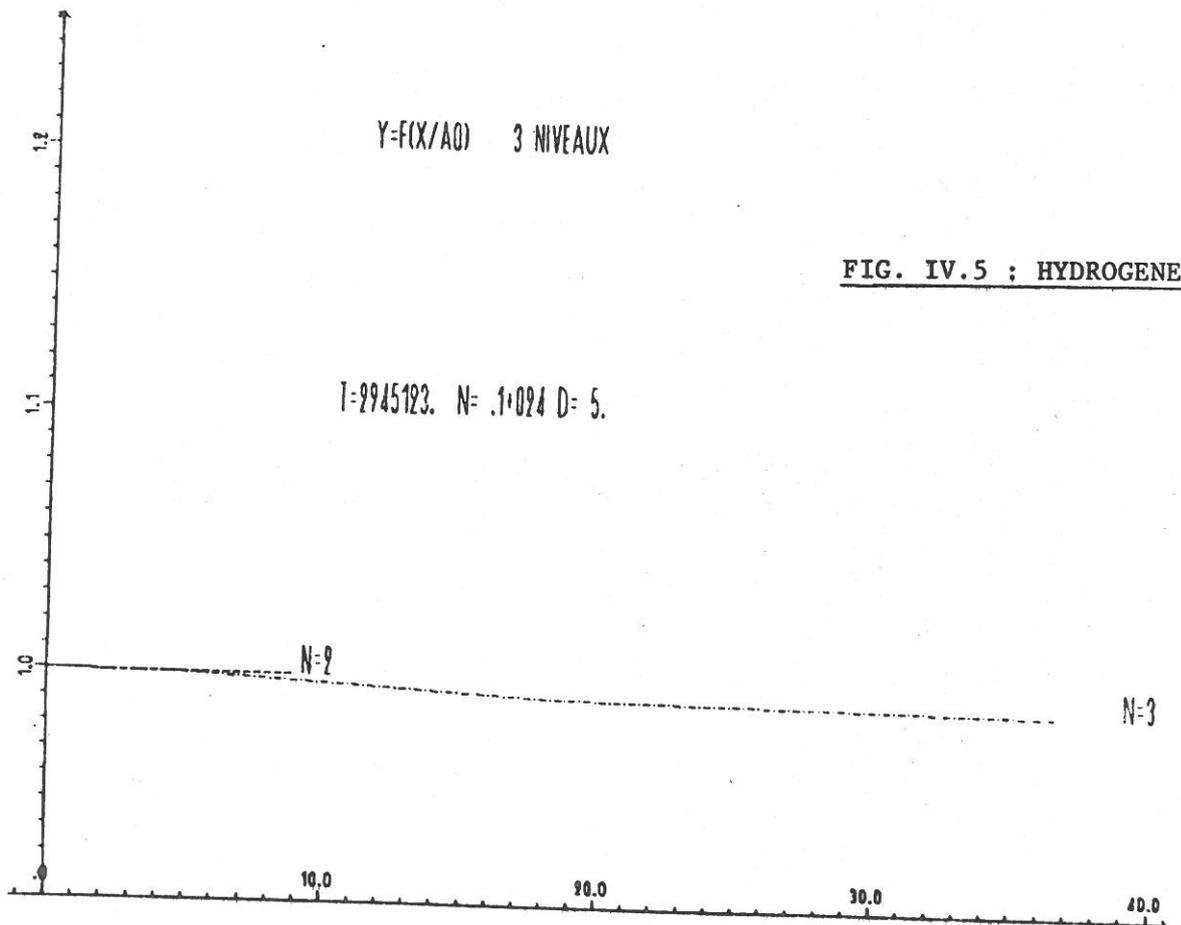
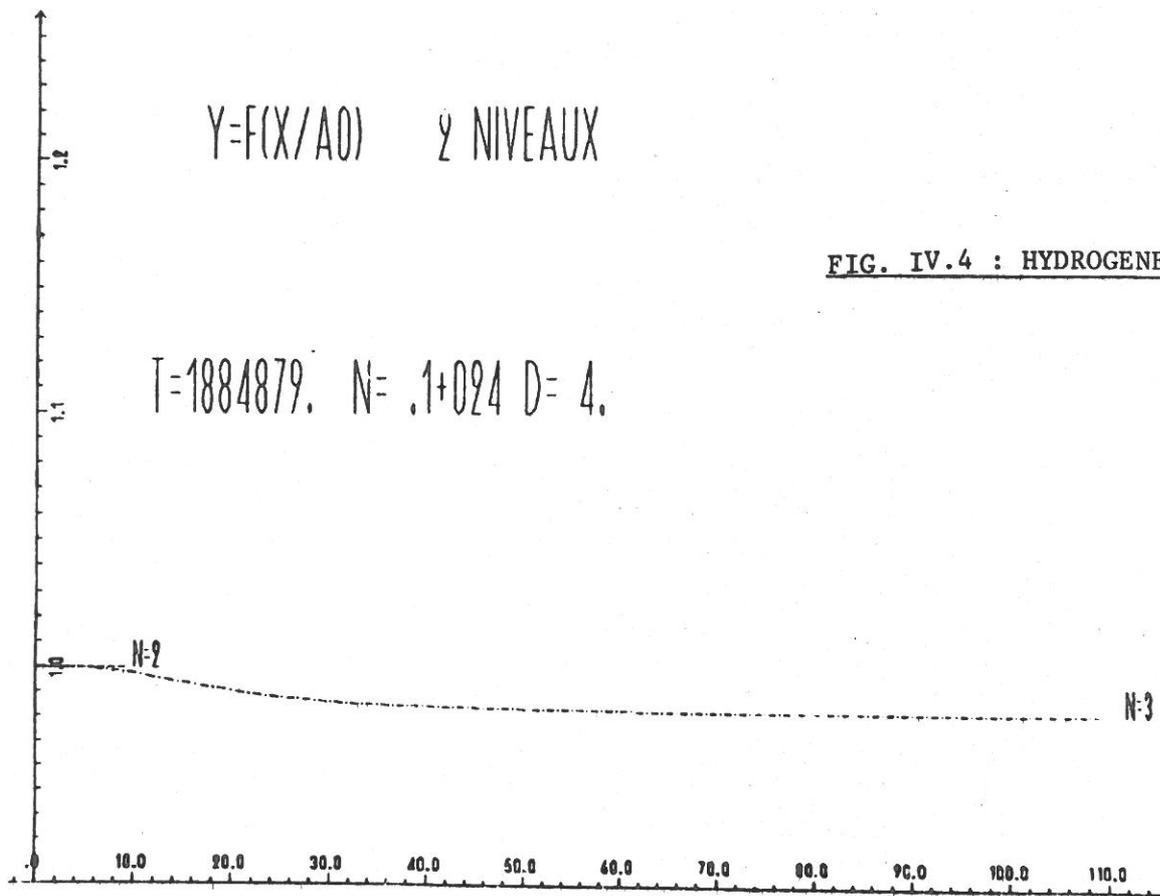
Y-FIX/ADJ 3 NIVEAUX

FIG. IV.3 : HYDROGENE

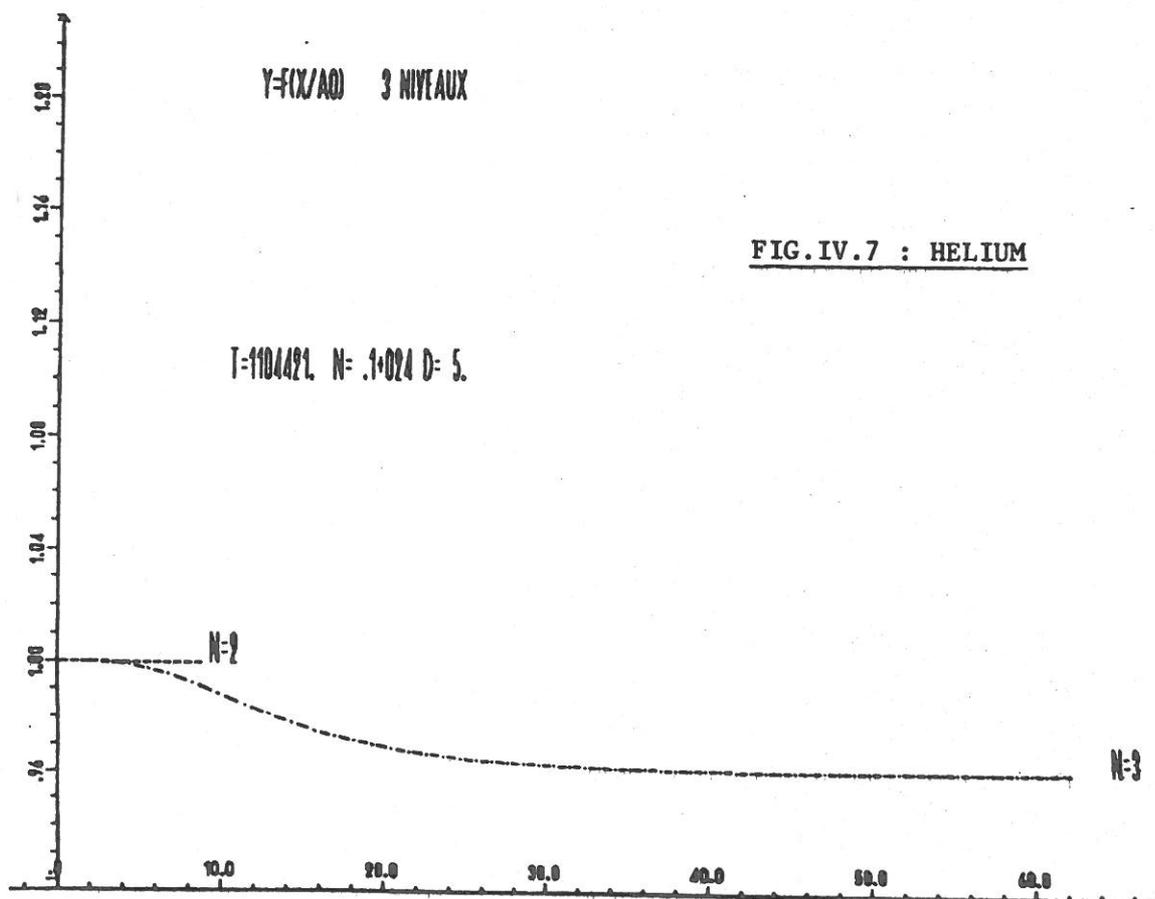
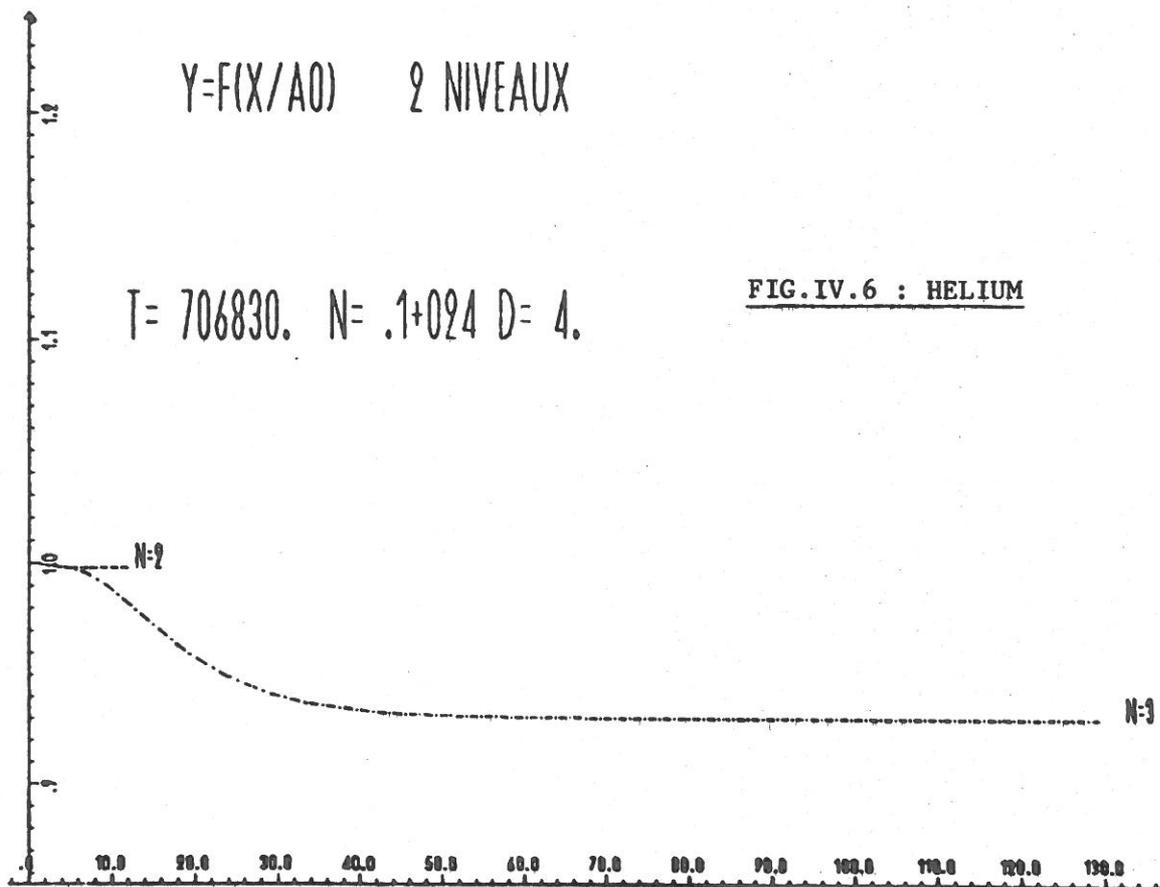
I: 577244. N: .1023 D: 7.









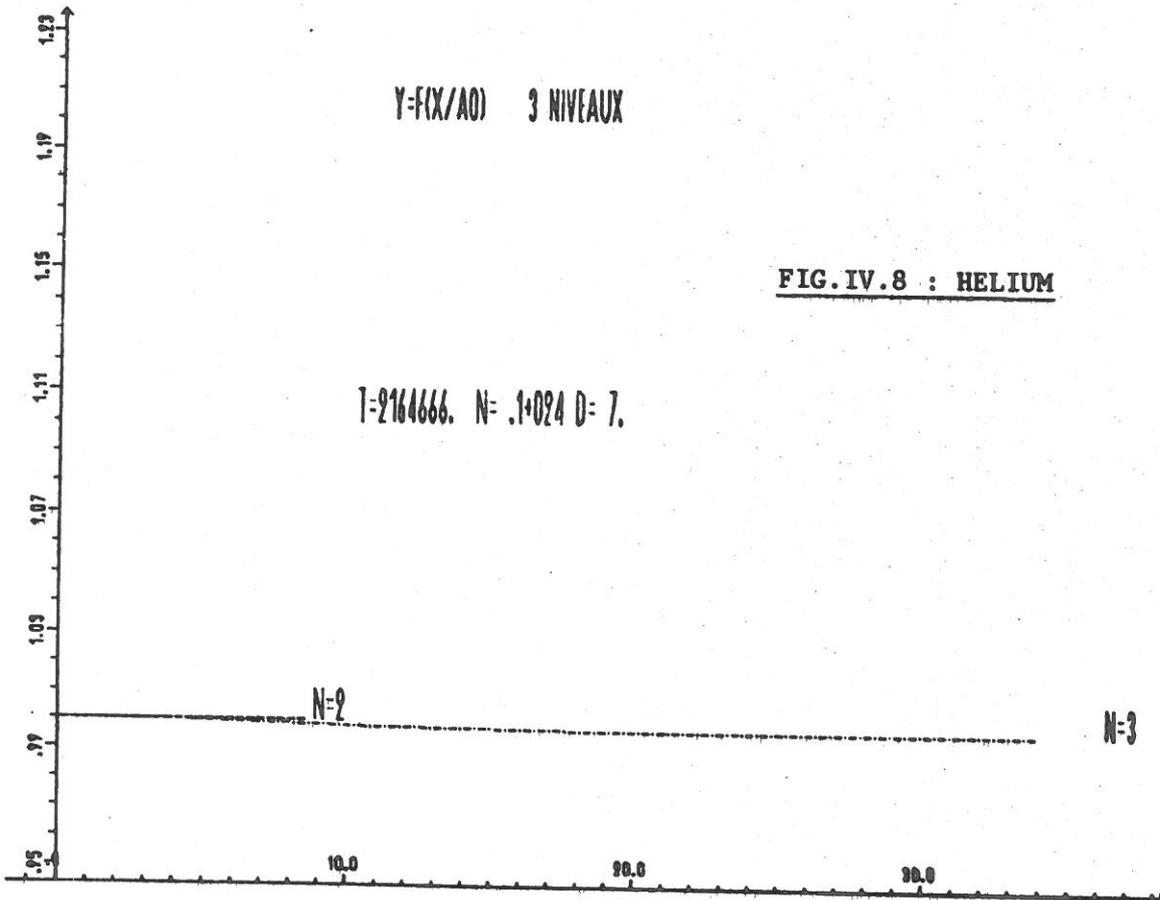




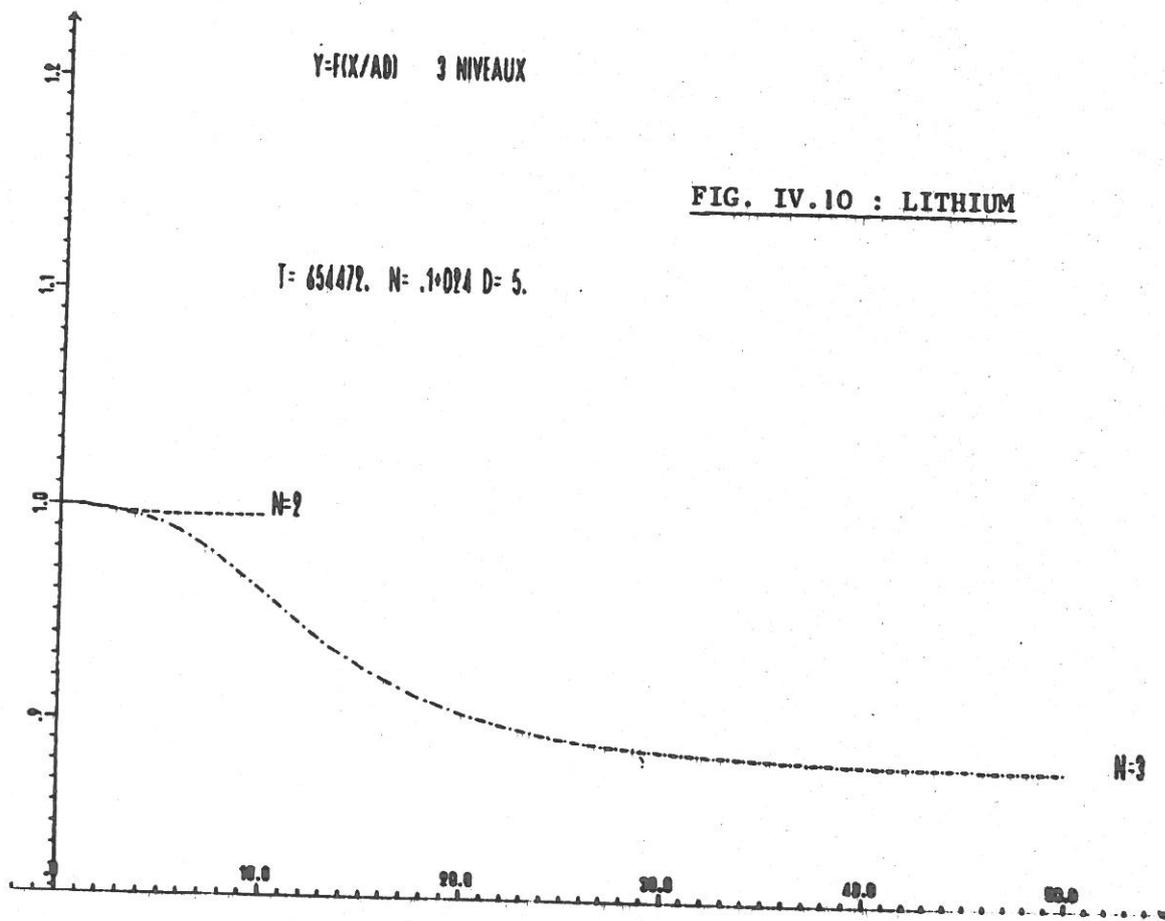
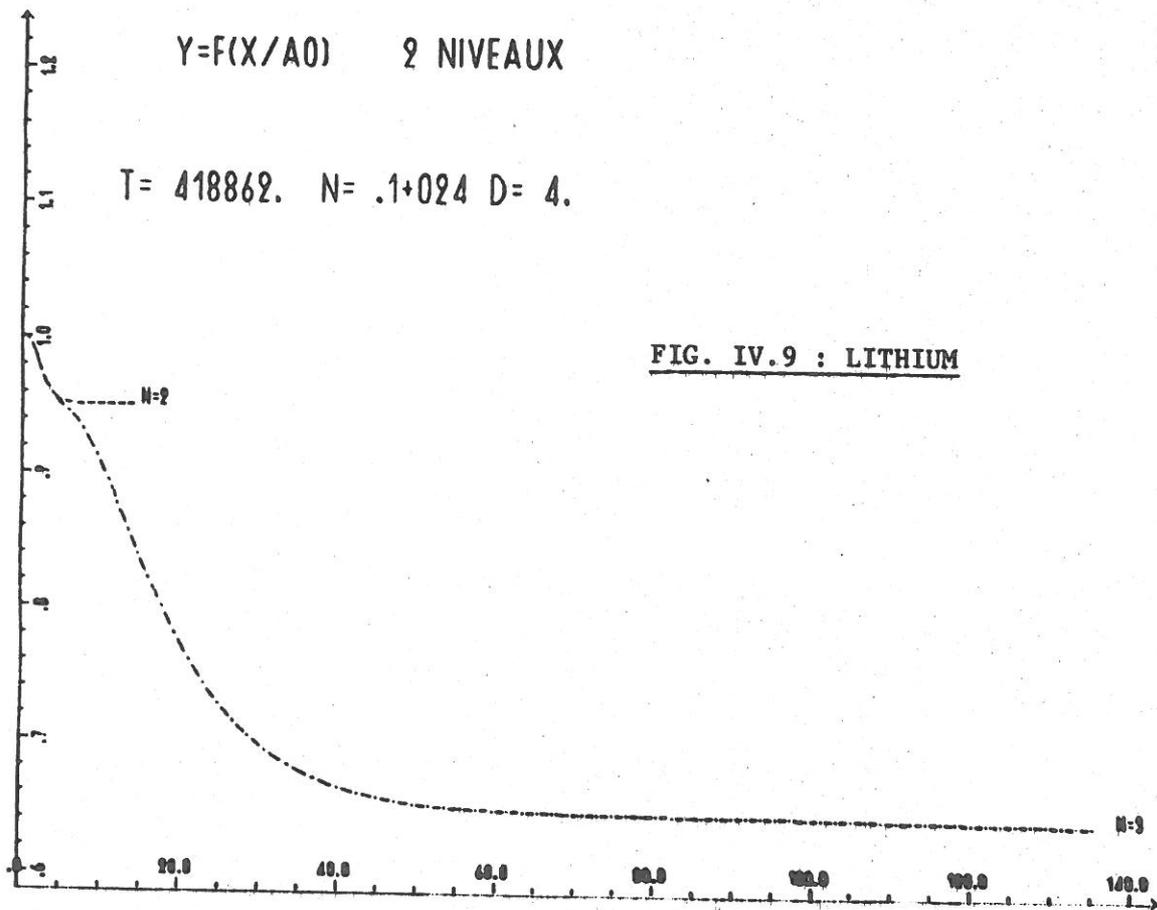
Y=F(X/A0) 3 NIVEAUX

FIG. IV.8 : HELIUM

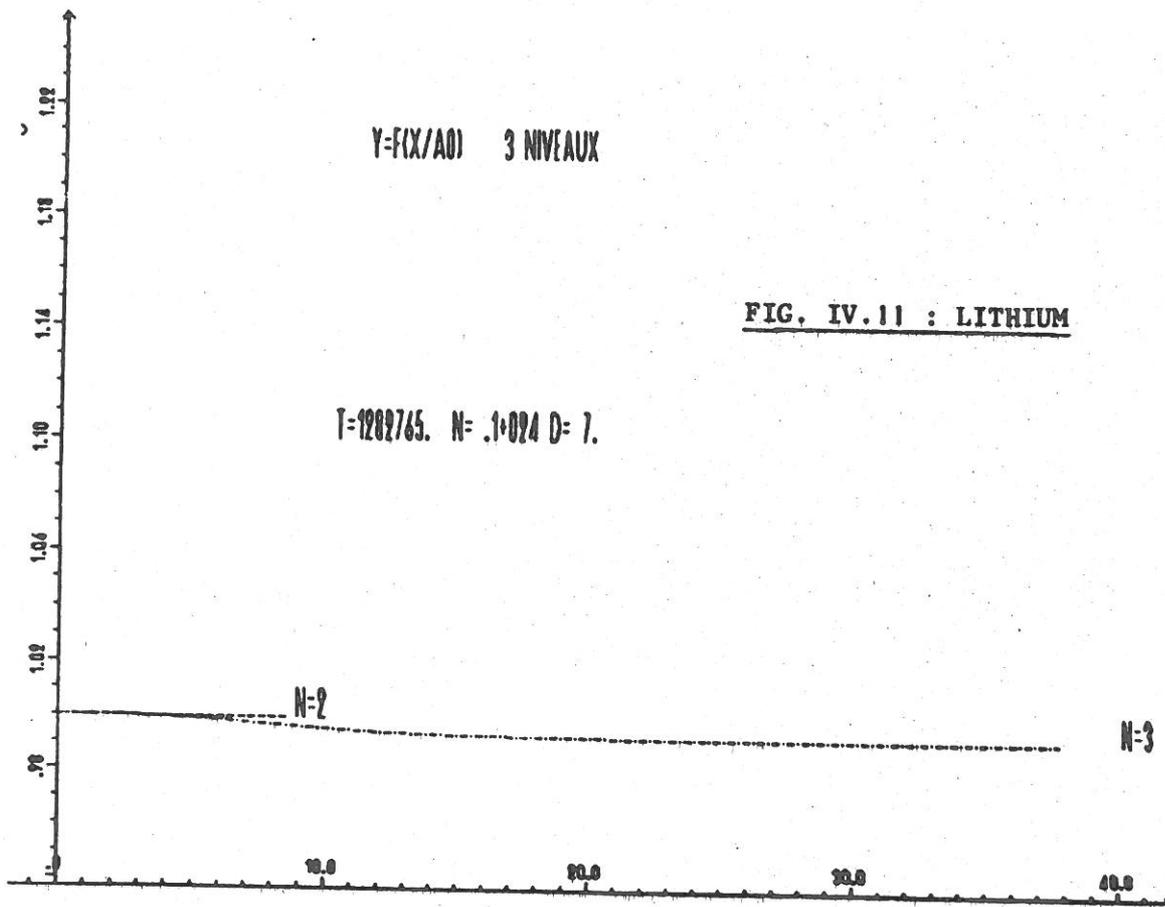
$T=2164666$ .  $N=.1024$   $D=7$ .



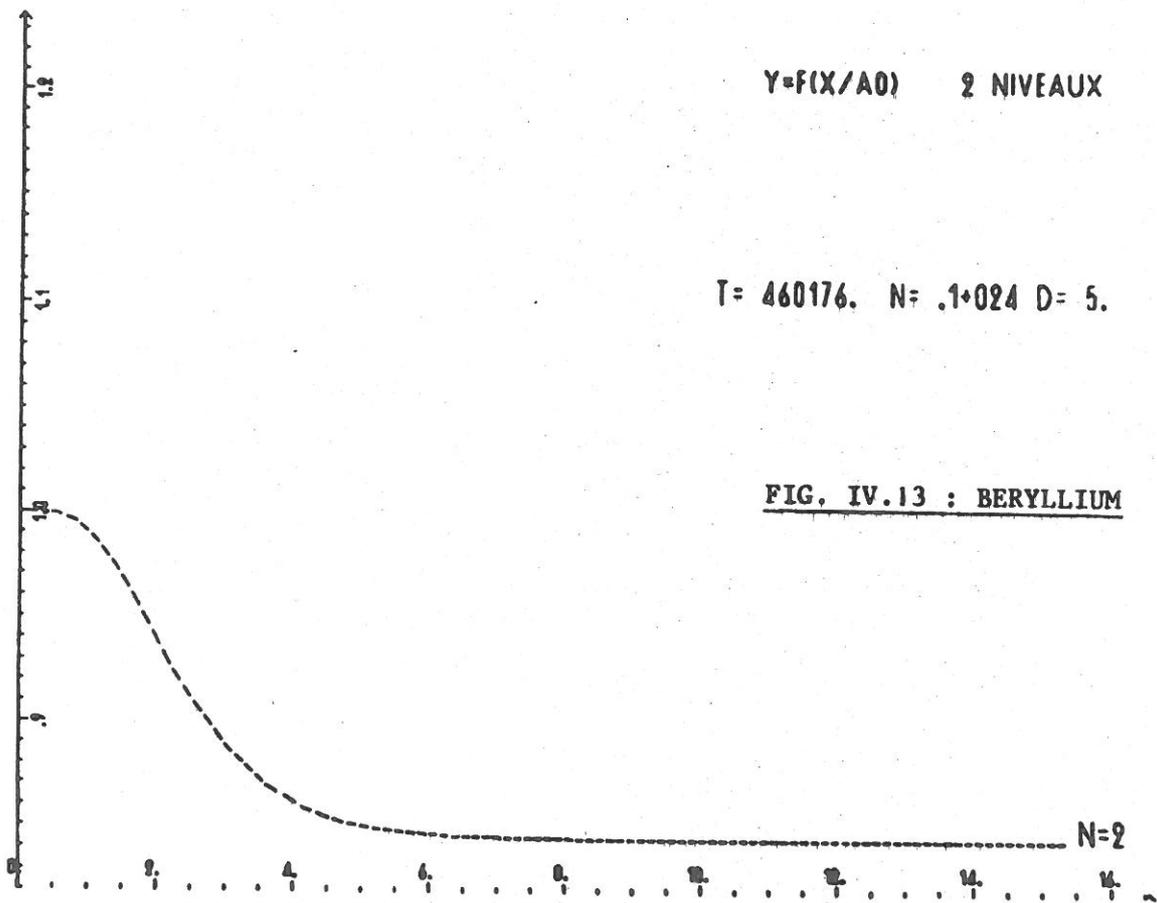
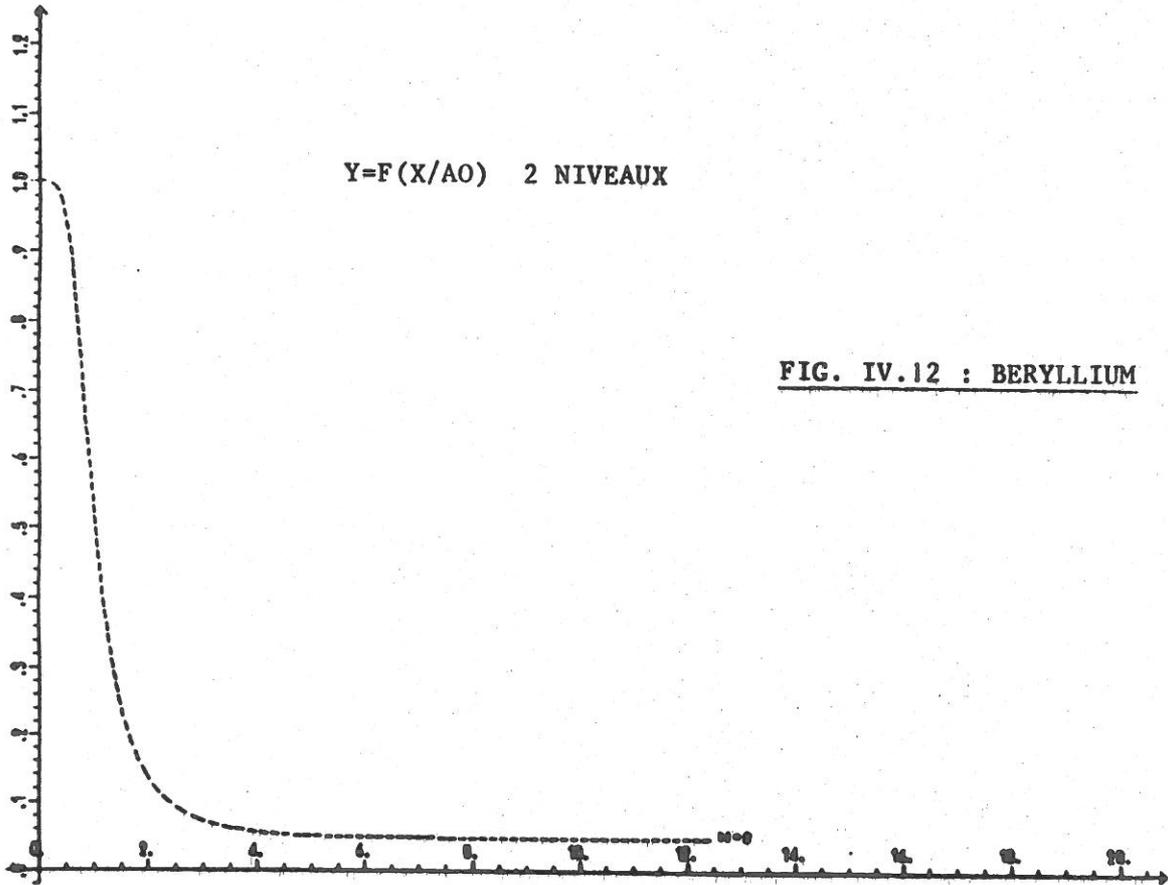




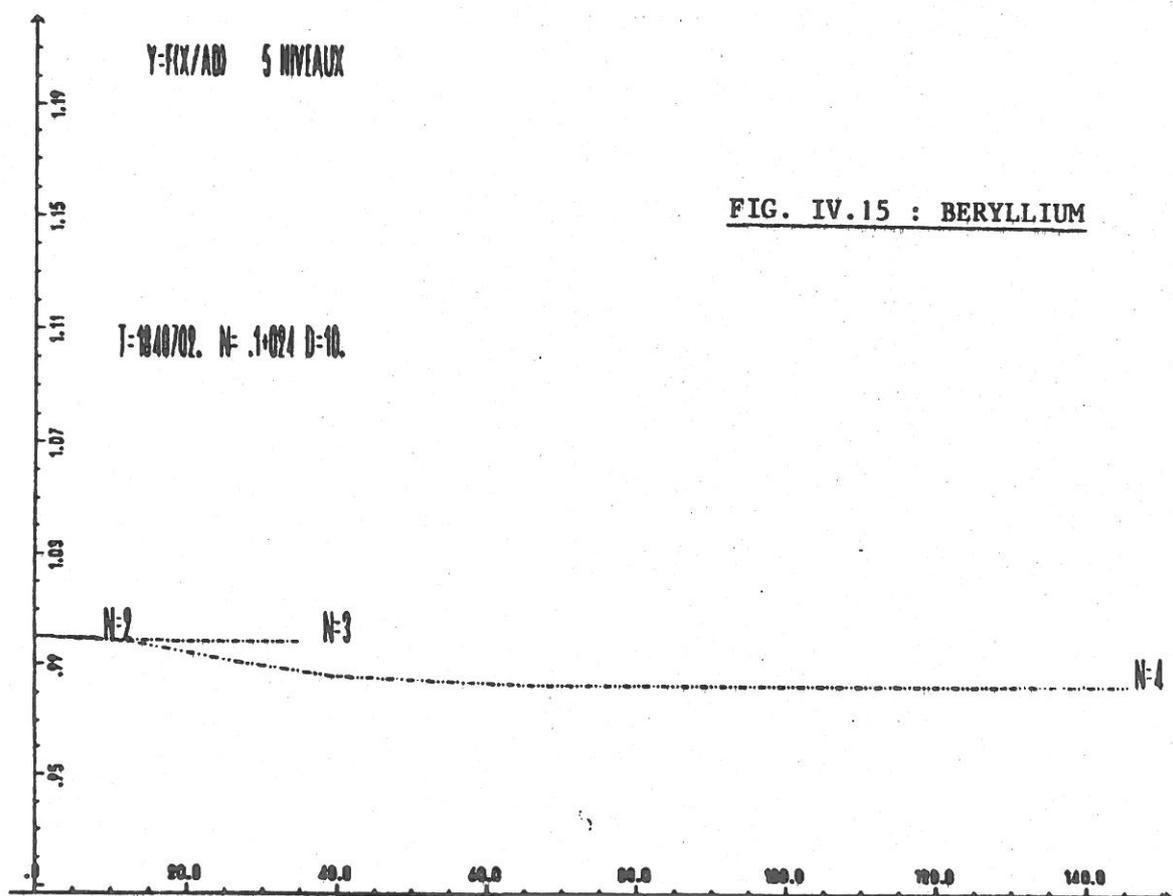
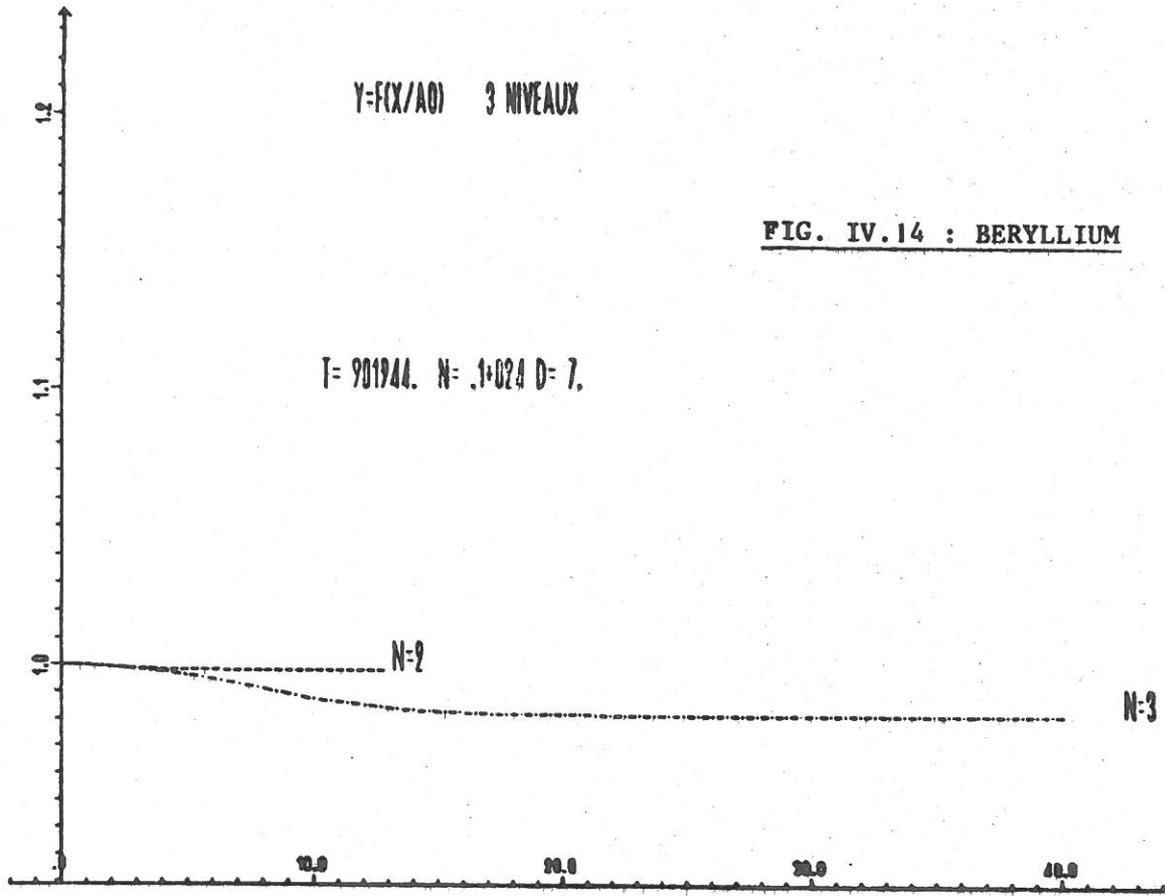














T = 226185. N = .1+024 D = 4.

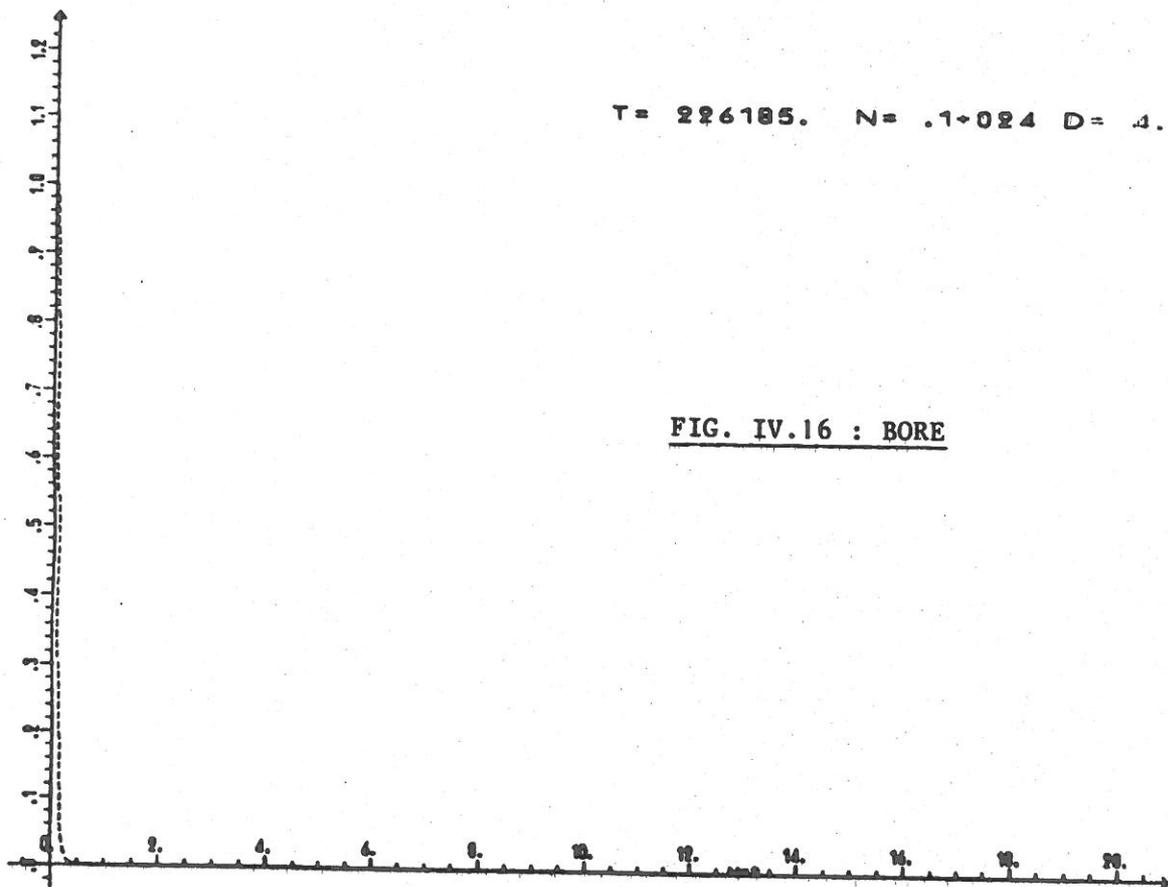


FIG. IV.16 : BORE

Y=PIK/AB) 1 NIVEAUX

T = 226418. N = .1+024 D = 8.

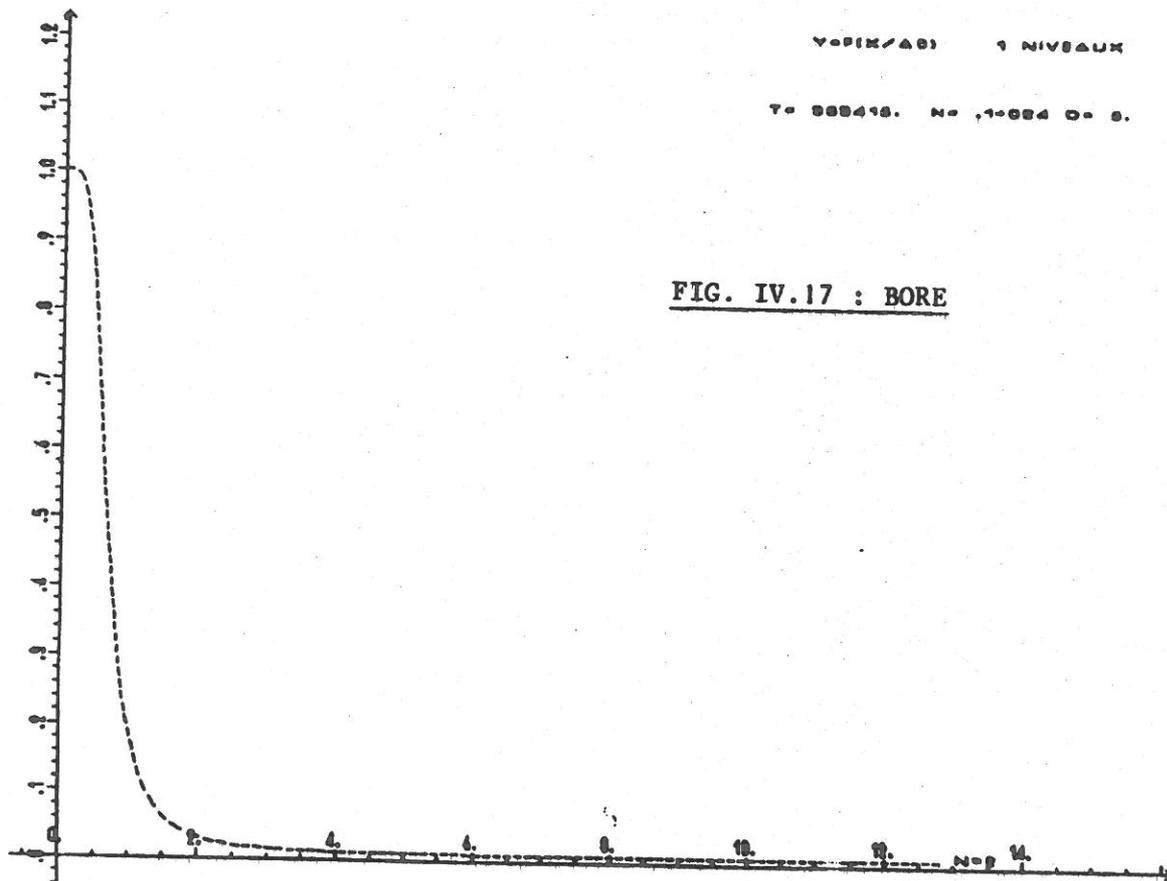
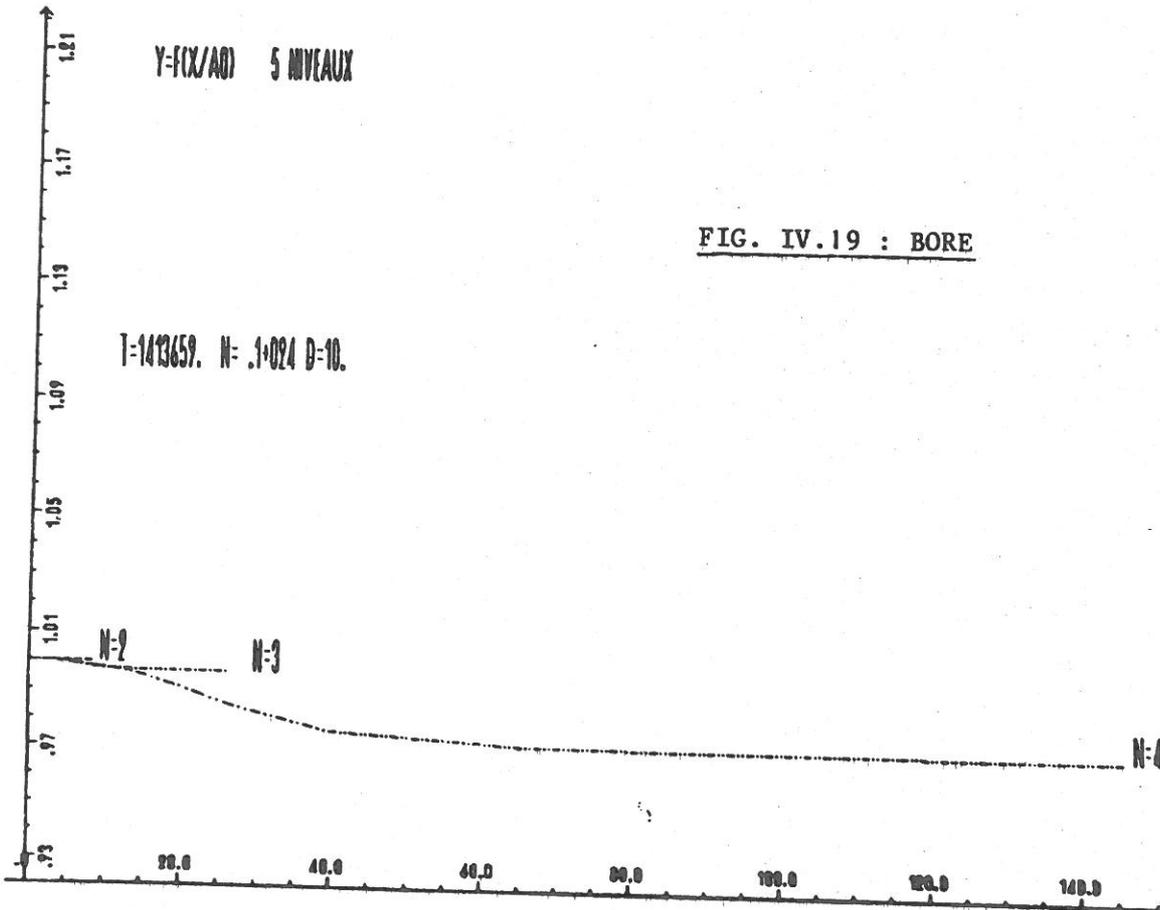
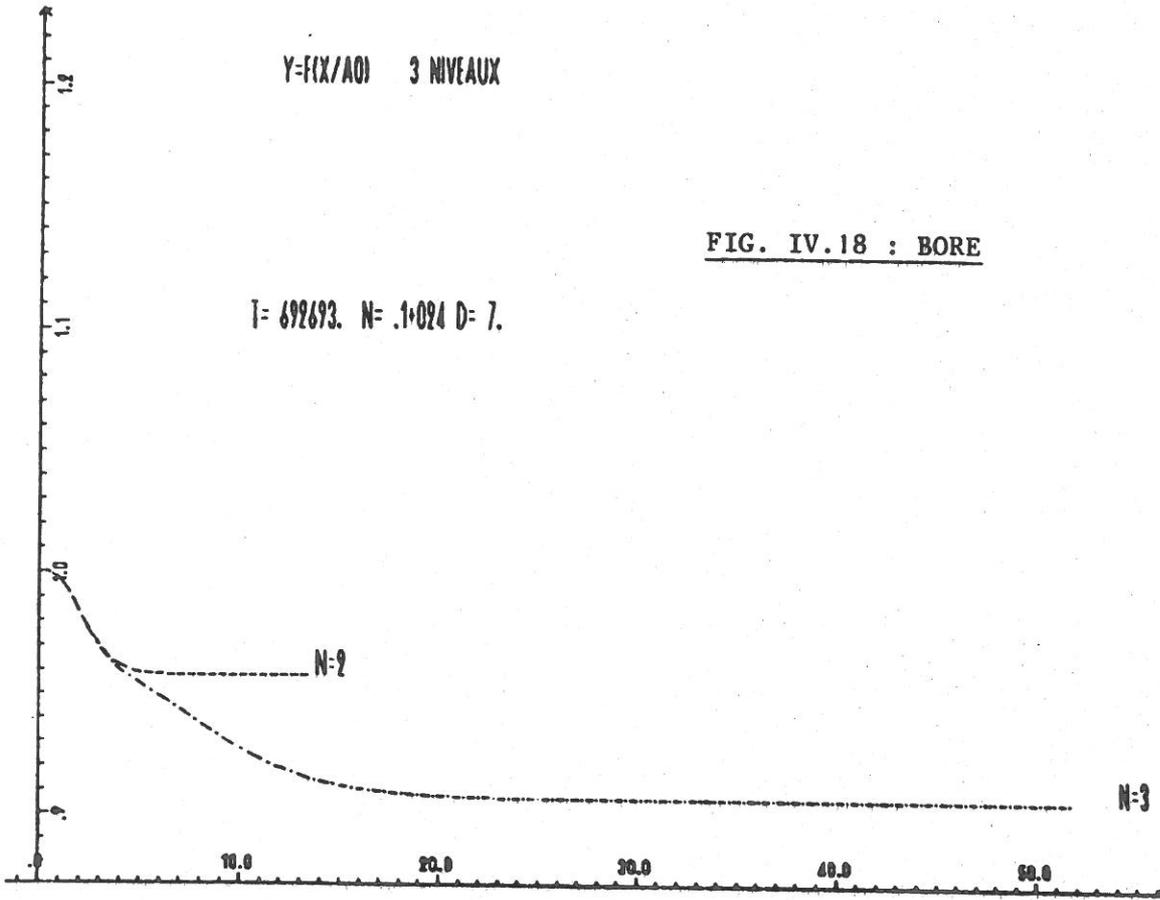


FIG. IV.17 : BORE







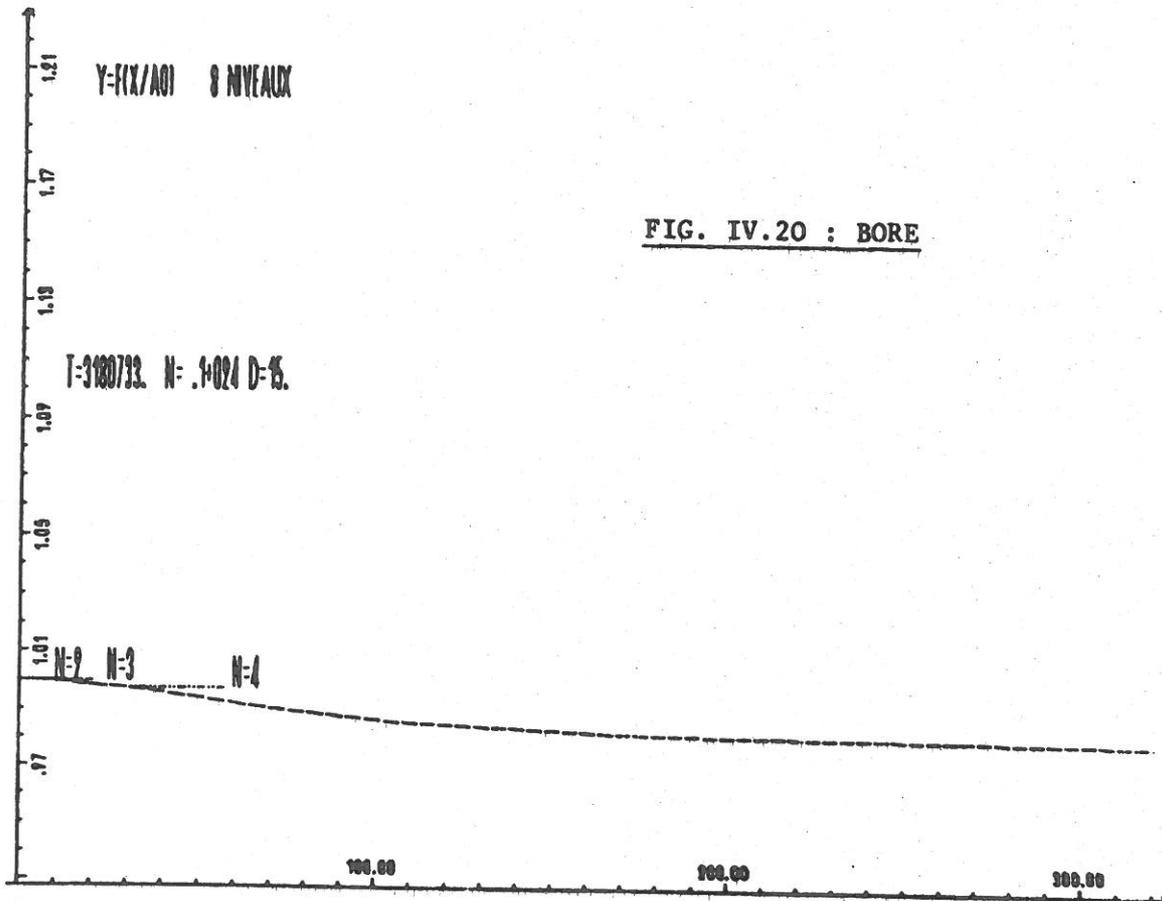
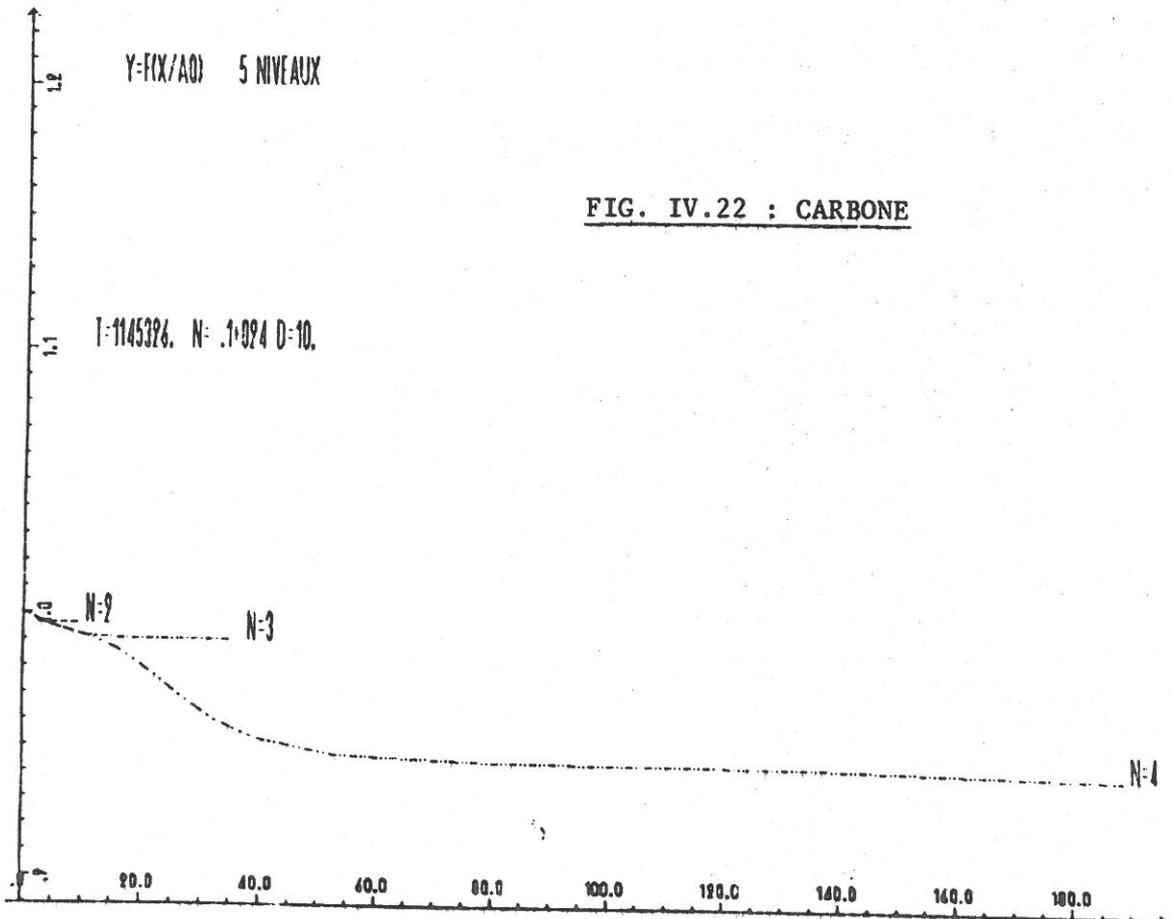
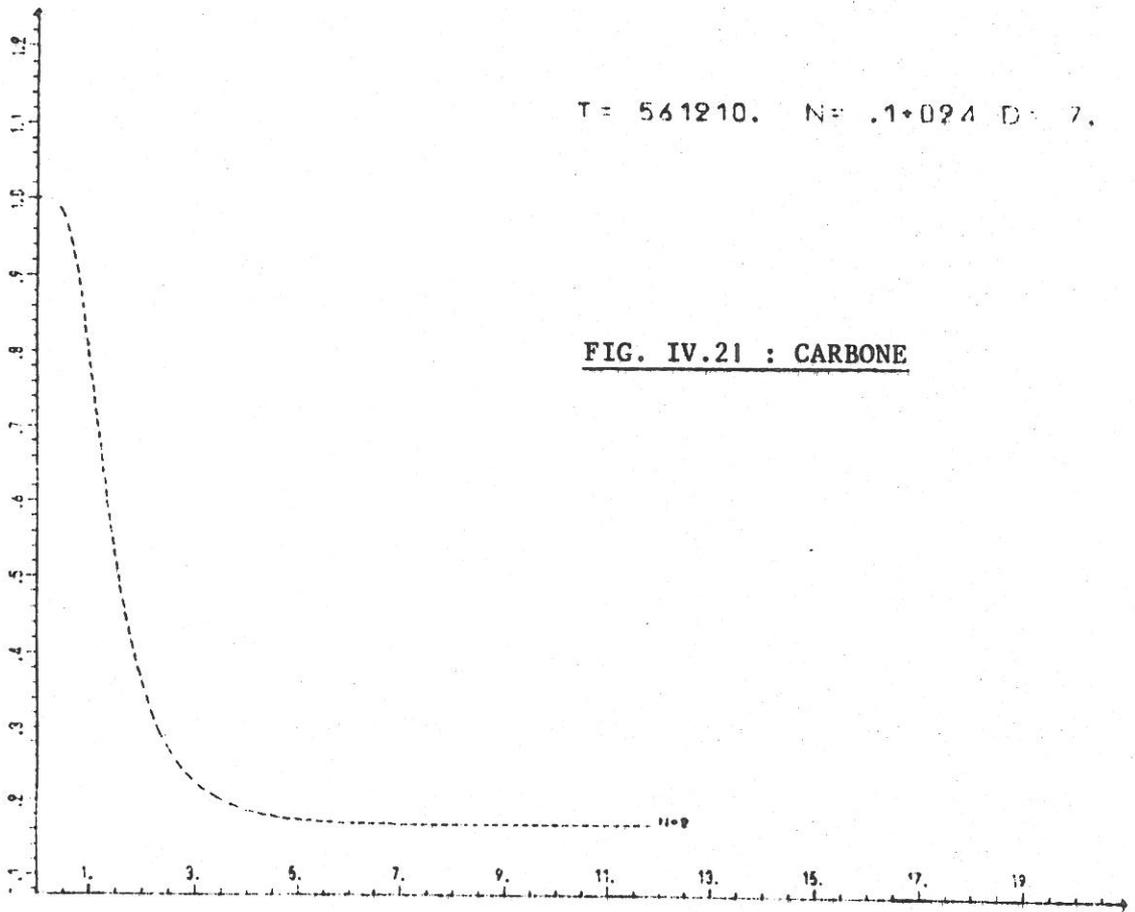


FIG. IV.20 : BORE







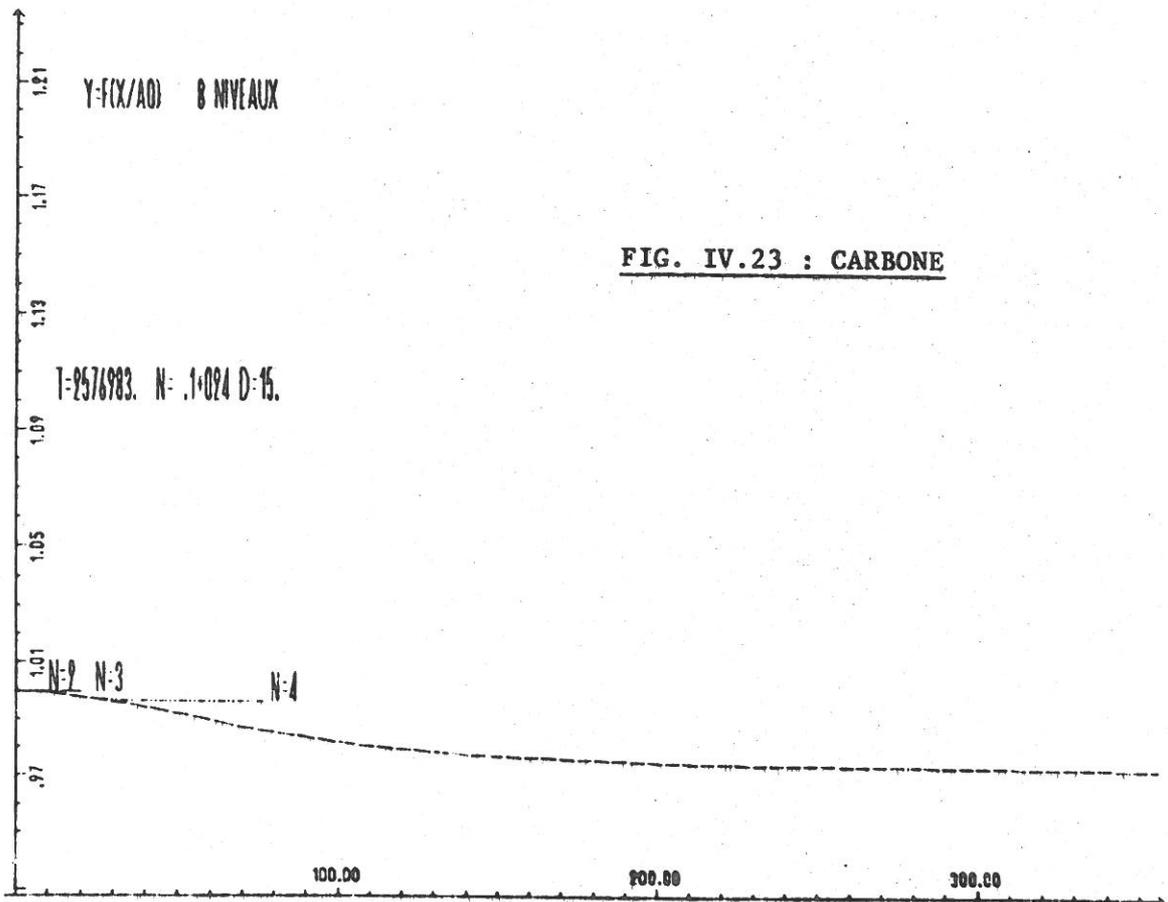


FIG. IV.23 : CARBONE



## CONCLUSION

Ce travail a permis de mettre en forme une idée, dont on ne savait pas au départ quelles seraient les conséquences. On a pu montrer qu'on obtient des effets qualitativement satisfaisant puisque des décalages du spectre vers le bleu apparaissent. Quantitativement l'ordre de grandeur des décalages du spectre est intéressant. Il ne faut pas oublier que l'emploi du potentiel de Debye a induit un fort décalage vers le rouge des raies, qui surcompense le décalage vers le bleu.

Une version plus évoluée du code numérique permettra une comparaison plus aisée avec l'expérience. Il s'agit de calculer un potentiel d'interaction à 2 corps auto-cohérent en résolvant l'équation de Poisson. Les densités d'électrons libres et liés seront obtenues en sommant les carrés des fonctions d'onde des états liés et du continuum. Les calculs de ce type effectués par Davis et Blaha montrent qu'on obtient alors des décalages vers le rouge, plus petits d'un ordre de grandeur que ceux du potentiel de Debye.

La compétition entre les deux types de décalage, par écrantage du plasma et par emboîtement de dipôles, permettra sans doute d'obtenir un décalage global rouge ou bleu selon la nature chimique, l'état d'ionisation et les paramètres du plasma.



ANNEXE I

FONCTIONS D'ONDE ANALYTIQUES ET ENERGIES D'UN ATOME D'HYDROGENE  
DANS UN POTENTIEL DE DEBYE

A. CALCUL DES ETATS AVEC  $\ell = 0$  DU POTENTIEL DE HULTHEN

On remplace le potentiel coulombien écranté

$$V(r) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot \epsilon} \frac{e^{-r/D}}{r}$$

$$V(r) = - \frac{e^2}{\epsilon} \frac{e^{-r/D}}{r} \quad \text{car} \quad \epsilon_0 = \frac{1}{4\pi} \quad \text{en C.G.S.}$$

D = rayon de Debye

par le potentiel de Hulthen  $V_H(r) = - \frac{e^2}{\epsilon} \frac{\alpha e^{-\alpha r}}{1 - e^{-\alpha r}}$

$$\alpha = \frac{1}{D}.$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{e^2}{\epsilon} \frac{\alpha e^{-\alpha r}}{1 - e^{-\alpha r}} + E_n \right) \chi_n(r) = 0$$

avec  $\chi_n(r) = r \cdot R_n(r)$  ( $R_n(r)$  = partie radiale de la fonction d'onde de l' $e^-$ ).

On utilise les unités atomiques  $a_0$  pour les distances et  $E_0$  pour les énergies (n.b =  $E_0 < 0 \Rightarrow$  les énergies des états liés seront positives)

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

$$E_0 = - \frac{me^4}{\hbar^2}$$

On pose  $\delta = \alpha a_0 = 1/D$  en unité  $a_0$

$$r \rightarrow r a_0 \quad E_n \rightarrow E_n \left( - \frac{me^4}{\hbar^2} \right)$$

$$\left( \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{e^2}{\epsilon} \alpha \frac{e^{-\delta r}}{1 - e^{-\delta r}} - E_n \frac{me^4}{\hbar^2} \right) \chi_n = 0$$

$$\left( \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{me^2}{\hbar^2} a_0 \frac{\delta}{\epsilon} \frac{e^{-\delta r}}{1 - e^{-\delta r}} - \frac{ma_0^2}{\hbar^2} \frac{me^4}{\hbar^2} E_n \right) \chi_n = 0$$

$$\left( \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\delta}{\epsilon} \frac{e^{-\delta r}}{1 - e^{-\delta r}} - E_n \right) \chi_n = 0$$

On pose  $E_n = + \frac{1}{2} a_n^2 \delta^2$

On cherche des solutions de la forme  $\chi_n(r) = e^{-a_n \cdot \delta \cdot r} \phi_n(r)$

On fait le changement de variable  $y = 1 - e^{-\delta r}$

$$\frac{d\chi}{dr} = e^{-a_n \cdot \delta \cdot r} \left( \frac{d\phi}{dr} - \delta a_n \cdot \phi \right)$$

$$\text{or } \frac{d\phi}{dr} = \frac{d\phi}{dy} \frac{dy}{dr} = \delta e^{-\delta r} \frac{d\phi}{dy}$$

$$\rightarrow \frac{d\chi}{dr} = \delta e^{-(1+a_n)\delta r} \frac{d\phi}{dy} - \delta a_n \cdot e^{-a_n \cdot \delta \cdot r} \cdot \phi$$

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} = \delta e^{-(1+a_n)\delta r} \left( \frac{d^2\phi}{dy^2} \delta e^{-\delta r} - (1+a_n)\delta \frac{d\phi}{dy} \right)$$

$$- \delta a_n e^{-a_n \cdot \delta \cdot r} \left( \frac{d\phi}{dy} \delta e^{-\delta r} - \delta a_n \phi \right)$$

$$\rightarrow \frac{d^2\chi}{dr^2} = \delta^2 e^{-a_n \cdot \delta \cdot r} \left[ e^{-2\delta r} \frac{d^2\phi}{dy^2} - (1+2a_n) \frac{d\phi}{dy} + a_n^2 \phi \right]$$

On pose  $\beta_n = 1 + 2a_n$ , on a aussi  $(1-y) = e^{-\delta r}$

$$\rightarrow \frac{d^2\chi}{dr^2} = \delta^2 e^{-a_n \cdot \delta \cdot r} \left[ (1-y)^2 \frac{d^2\phi}{dy^2} - \beta_n (1-y) \frac{d\phi}{dy} + a_n^2 \phi \right]$$

On injecte cela dans l'équation de Schrödinger qui s'écrit :

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + 2 \frac{\delta}{\epsilon} \frac{1-y}{y} e^{-a_n \delta r} \phi - \delta^2 a_n^2 e^{-a_n \delta r} \phi = 0$$

On élimine  $\delta^2 e^{-a_n \delta r}$ , il reste :

$$(1-y)^2 \frac{d^2 \phi}{dy^2} - \beta_n (1-y) \frac{d\phi}{dy} + a_n^2 \phi + \frac{2}{\delta \cdot \epsilon} \frac{1-y}{y} \phi - a_n^2 \phi = 0$$

On multiplie par  $\frac{y}{1-y} \Rightarrow$

$$y(1-y) \frac{d^2 \phi_n}{dy^2} - \beta_n y \frac{d\phi_n}{dy} + \frac{2}{\delta \cdot \epsilon} \phi_n = 0$$

On cherche des solutions analytiques de la forme :

$$\phi_n = \sum_{v=0}^{\infty} c_v y^{v+\rho}$$

On obtient la relation de récurrence suivante pour  $c_v$  :

$$c_{v+1} = \frac{v(v-1) + \beta_n \cdot v - 2/\delta \cdot \epsilon}{v(v+1)} c_v \quad \text{si } v > 1$$

On pose  $\phi_n$  polynôme d'ordre  $n \Rightarrow c_v = 0$  pour  $v > n$

$$c_{n+1} = 0 \Rightarrow n(n-1) + \beta_n \cdot n - 2/\delta \cdot \epsilon = 0$$

$$\Rightarrow \beta_n = \frac{2}{n \delta \epsilon} - n + 1$$

$$a_n = \frac{\beta_n - 1}{2} \Rightarrow a_n = \frac{1}{n \cdot \delta \cdot \epsilon} - \frac{n}{2}$$

or

$$E_n = \frac{1}{2} a_n^2 \cdot \delta^2$$

$$E_n = \frac{1}{2} \delta^2 \left( \frac{1}{n^2 \delta^2 \epsilon^2} + \frac{n^2}{4} - \frac{1}{\delta \epsilon} \right)$$

$E_n = \frac{1}{2} \frac{1}{n^2 \epsilon^2} + \frac{n^2 \delta^2}{8} - \frac{\delta}{2 \epsilon}$
$\chi_n = e^{-a_n \cdot \delta \cdot r} \sum_{v=0}^{\infty} c_v (1 - e^{-\delta r})^v$

$$\begin{aligned} \chi_n(0) &= 0 \\ \Rightarrow \underline{c_0} &= 0 \end{aligned}$$

Pour n = 1 on a :

$$\beta_1 = \frac{2}{\delta \cdot \epsilon} \quad a_1 = \frac{1}{\delta \cdot \epsilon} - \frac{1}{2}$$

$$\chi_1 = c_1 \left[ e^{-\left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{\delta}{2}\right)r} - e^{-\left(\frac{1}{\epsilon} + \frac{\delta}{2}\right)r} \right] \quad \delta < \frac{2}{\epsilon}$$

$$E_1 = \frac{1}{2\epsilon} + \frac{\delta^2}{8} - \frac{\delta}{2\epsilon} \quad \text{en unité } E_0$$

On calcule  $c_1$  en normalisant  $\chi_1$  :  $\int \chi_1^2 dr = 1$

$$c_1^2 \left[ \int_0^{\infty} \left( e^{-\left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{\delta}{2}\right)r} - e^{-\left(\frac{1}{\epsilon} + \frac{\delta}{2}\right)r} \right)^2 dr \right] = 1$$

$$c_1^2 \left[ \int_0^{\infty} e^{-2\left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{\delta}{2}\right)r} dr + \int_0^{\infty} e^{-2\left(\frac{1}{\epsilon} + \frac{\delta}{2}\right)r} dr - 2 \int_0^{\infty} e^{-\frac{2}{\epsilon}r} dr \right] = 1$$

$$c_1^2 \left[ \frac{1}{2\left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{\delta}{2}\right)} + \frac{1}{2\left(\frac{1}{\epsilon} + \frac{\delta}{2}\right)} - 2 \frac{1}{\frac{2}{\epsilon}} \right] = 1$$

$$c_1^2 \frac{2\left(\frac{1}{\epsilon} + \frac{\delta}{2}\right) + 2\left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{\delta}{2}\right) - 4\epsilon\left(\frac{1}{\epsilon} + \frac{\delta}{2}\right)\left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{\delta}{2}\right)}{4\left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{\delta}{2}\right)\left(\frac{1}{\epsilon} + \frac{\delta}{2}\right)} = 1$$

$$c_1^2 \cdot \frac{\frac{4}{\epsilon} - 4\epsilon \left( \frac{1}{\epsilon} - \frac{\delta^2}{4} \right)}{\delta^2 \epsilon} = 1$$

$$c_1^2 \cdot \frac{\delta^2 \epsilon}{\delta^2 \epsilon} = 1$$

→

$$c_1 = \sqrt{\frac{4 \left( \frac{1}{\epsilon} - \frac{\delta}{2} \right) \left( \frac{1}{\epsilon} + \frac{\delta}{2} \right)}{\delta^2 \epsilon}}$$

Pour n = 2 on a :

$$\beta_2 = \frac{1}{\delta \epsilon_2} - 1 \quad \Rightarrow \quad a_2 = \frac{1}{2 \delta \epsilon_2} - 1$$

$$x_2 = e^{-a_2 \cdot \delta \cdot r} \left[ c_1 (1 - e^{-\delta r}) + c_2 (1 - e^{-\delta r})^2 \right]$$

$$c_2 = \frac{\beta_2 - 2/\delta \cdot \epsilon_2}{2} c_1 \quad \Rightarrow \quad c_2 = -\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{1}{\delta \epsilon_2} \right) c_1$$

B. CALCUL DES ETATS AVEC  $\ell \neq 0$  DU POTENTIEL DE HULTHEN MODIFIE

Soit  $R_{n,\ell}(r)$  la partie radiale de la fonction d'onde d'un atome d'hydrogène ; l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left[ -\frac{1}{2r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{e^{-\delta r}}{r\epsilon} + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} \right] R_{n,\ell}(r) = E_{n,\ell} R_{n,\ell}(r)$$

On pose  $\chi_{n,\ell}(r) = rR_{n,\ell}(r)$ , on a :

$$\left( \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\delta}{\epsilon} \frac{e^{-\delta r}}{1 - e^{-\delta r}} - \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} + E_{n,\ell} \right) \chi_{n,\ell}(r) = 0$$

On a remplacé le potentiel de Debye par le potentiel de Hulthen, les rayons et énergies sont en unités atomiques.

On peut aussi remplacer  $\frac{\ell(\ell+1)}{2r^2}$  par  $\frac{\ell(\ell+1)}{2} \left( \frac{\delta}{1 - e^{-\delta r}} \right)^2 e^{-\delta r}$

quand  $r \rightarrow 0$   $e^{-\delta r} \rightarrow 1 - \delta r \Rightarrow \left( \frac{\delta}{1 - e^{-\delta r}} \right)^2 e^{-\delta r} \rightarrow \frac{1}{r^2}$

quand  $r \rightarrow \infty$   $\left( \frac{\delta}{1 - e^{-\delta r}} \right)^2 e^{-\delta r} \rightarrow 0$

On reprend la procédure utilisée pour  $\ell = 0$  :

On pose  $E_{n,\ell} = \frac{1}{2} a_{n,\ell}^2 \delta^2$   $\beta_{n,\ell} = 1 + 2a_{n,\ell}$

$$\chi_{n,\ell}(r) = e^{-a_{n,\ell} \cdot \delta \cdot r} \phi_{n,\ell}(r), \quad y = 1 - e^{-\delta r}$$

On trouve (cf. calcul pour  $\ell = 0$ )

$$\frac{d^2 \chi_{n,\ell}(r)}{dr^2} = \delta^2 e^{-a_{n,\ell} \cdot \delta \cdot r} \left[ (1-y)^2 \frac{d^2 \phi_{n,\ell}(r)}{dy^2} - \beta_{n,\ell} (1-y) \frac{d\phi}{dy} + a_{n,\ell}^2 \phi \right]$$

On injecte dans l'équation de Schrödinger, on a :

$$(1-y)^2 \frac{d^2 \phi_{n,\ell}(y)}{dy^2} - \beta_{n,\ell} (1-y) \frac{d\phi_{n,\ell}(y)}{dy} + \frac{2}{\delta\epsilon} \frac{(1-y)}{y} - \ell(\ell+1) \frac{(1-y)}{y^2} \phi_{n,\ell}(y) = 0$$

On multiplie par  $y^2/(1-y)$

$$y^2(1-y)\ddot{\phi}_{n,\ell}(y) - \beta_{n,\ell}y^2\dot{\phi}_{n,\ell}(y) + \frac{2}{\delta\epsilon}y\phi_{n,\ell}(y) - \ell(\ell+1)\phi_{n,\ell}(y) = 0$$

On cherche une solution de la forme :

$$\phi_{n,\ell}(y) = \sum_{i=0}^M c_i \cdot y^{i+\sigma}$$

On a :

$$\dot{\phi}_{n,\ell}(y) = \sum_{i=0}^M c_i \cdot (i+\sigma) \cdot y^{i+\sigma-1}$$

$$\ddot{\phi}_{n,\ell}(y) = \sum_{i=0}^M c_i \cdot (i+\sigma)(i+\sigma-1) \cdot y^{i+\sigma-2}$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\sum_{i=0}^M \left[ c_i (i+\sigma)(i+\sigma-1) (y^{i+\sigma} - y^{i+\sigma+1}) - \beta_{n,\ell} c_i (i+\sigma) y^{i+\sigma+1} + \frac{2}{\delta\epsilon} c_i \cdot y^{i+\sigma+1} - \ell(\ell+1) c_i \cdot y^{i+\sigma} \right] = 0$$

On annule les coefficients de chaque puissance, on obtient la même puissance de  $y$  en regroupant le terme en  $y^{i+\sigma+1}$  avec  $i = k$  et le terme en  $y^{i+\sigma}$  avec  $i = k+1$

terme  $i = k \Rightarrow \left( -c_i (i+\sigma)(i+\sigma-1) - \beta_{n,\ell} c_i (i+\sigma) + \frac{2}{\delta\epsilon} c_i \right) y^{i+\sigma+1}$

terme  $i = k+1 \Rightarrow \left( c_{i+1} (i+\sigma+1)(i+\sigma) - \ell(\ell+1) c_{i+1} \right) y^{i+\sigma+1}$

$$\Rightarrow \boxed{c_{i+1} \left[ (i+\sigma+1)(i+\sigma) - \ell(\ell+1) \right] - c_i \left[ (i+\sigma)(i+\sigma-1+\beta_{n,\ell}) - \frac{2}{\delta\epsilon} \right] = 0}$$

si  $i = -1$  on a  $c_i = 0$   $c_{i+1} = c_0$

$$c_0 \left[ \sigma(\sigma-1) - \ell(\ell+1) \right] = 0$$

$$c_0 \neq 0 \text{ (par def.)} \Rightarrow \boxed{\sigma = \ell + 1}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{c_{i+1}}{c_i} = \frac{(i+\ell+1)(i+\ell+\beta_{n,\ell}) - 2/\delta\epsilon}{(i+\ell+1)(i+\ell+2) - \ell(\ell+1)}} \quad \text{(I.B.1)}$$

On a  $\phi_{n,\ell}(y) = \sum_{i=0}^M c_i \cdot y^{i+\sigma}$   $\sigma = \ell+1$

$\Rightarrow \phi_{n,\ell}$  polynôme d'ordre  $M+\ell+1$  en  $y$ .

On rappelle que  $R_{n,\ell}(r) = \frac{1}{r} e^{-a_{n,\ell} \cdot \delta \cdot r} \phi_{n,\ell}(r)$

$$y = 1 - e^{-\delta r} \quad \text{quand } r \rightarrow 0 \quad y \rightarrow r$$

. On peut vérifier facilement que  $R_{n,\ell}(r) \rightarrow r^\ell$  quand  $r \rightarrow 0$

.  $R_{n,\ell}(r)$  a  $n-1$  surfaces nodales ou encore

$r R_{n,\ell}(r)$  s'annule  $n$  fois à distance finie (def. de  $n$ )

la relation  $y = 1 - e^{-\delta r}$  permet d'établir un isomorphisme entre l'intervalle  $[0, \infty[$  pour  $r$  et  $[0, 1[$  pour  $y$

$\Rightarrow \chi_{n,\ell}(y)$  a  $n$  racines en  $y$  sur  $[0, 1[$

$\Rightarrow \underline{Y_{n,\ell}(y)}$  est un polynôme en  $y$  de degré supérieur ou égal à  $n$  ; si  $\chi_{n,\ell}(y) = 0$  n'admet pas de racines complexes alors  $\underline{n = M+\ell+1}$

On a alors  $c_{M+1} = 0$

$$\Rightarrow n(n-1) + n \cdot \beta_{n,\ell} - 2/\delta\epsilon = 0$$

$$\Rightarrow \begin{array}{l} \beta_{n,\ell} = \frac{2}{n \cdot \delta \cdot \epsilon} - n + 1 \\ a_{n,\ell} = \frac{1}{n \cdot \delta \cdot \epsilon} - \frac{n}{2} \end{array} \quad \beta_n = 1 + 2a_n$$

On avait posé  $E_{n,\ell} = \frac{1}{2} a_{n,\ell}^2 \cdot \delta^2$

$$\Rightarrow E_{n,\ell} = \frac{1}{2} \frac{1}{n^2 \epsilon^2} + \frac{n^2 \delta^2}{8} - \frac{\delta}{2 \cdot \epsilon}$$

On retrouve la même formule que pour  $\ell = 0$ , c'est-à-dire que le potentiel utilisé

$$V(r) = - \frac{\delta e^{-\delta r}}{1 - e^{-\delta r}} + \frac{\ell(\ell+1)}{2} \left( \frac{\delta}{1 - e^{-\delta r}} \right)^2 e^{-\delta r}$$

admet un spectre dont les valeurs propres sont dégénérées en  $\ell$ ,  
comme le potentiel coulombien !!

C. NORMALISATION DES FONCTIONS D'ONDE DU POTENTIEL DE HULTHEN

$$\begin{aligned} \ell &= 0. \text{ On avait } \chi_n(r) = rR_n(r) \\ \chi_n(r) &= e^{-a_n \delta r} \cdot \phi_n(r) \quad y = 1 - e^{-\delta r} \\ y(1-y)\ddot{\phi}_n(y) - \beta_n \cdot y \cdot \dot{\phi}_n(y) + \frac{2}{\delta \epsilon} \phi_n(y) &= 0 \\ \beta_n &= 1 + 2a_n = \frac{2}{n\delta\epsilon} - n + 1 \end{aligned}$$

(a) On peut remarquer que l'équation à laquelle obéit  $\phi$  est un cas particulier de l'équation hypergéométrique qui s'écrit (cf. Bateman : "Higher transcendental functions" p.56)

$$y(1-y)\ddot{\phi} + [c - (a+b+1)y]\dot{\phi} - a \cdot b \cdot \phi = 0$$

On retrouve la même équation en posant  $\left\{ \begin{array}{l} c = 0 \\ a+b+1 = \beta_n \\ ab = -\frac{2}{\delta\epsilon} \end{array} \right.$

⇒

$$\begin{aligned} a &= \beta_n + n - 1 \\ b &= -n \\ c &= 0 \end{aligned}$$

On a la solution

$$\phi(y) = y {}_2F_1(\beta+n, -n+1, 2; y)$$

Notons que  $\beta \neq \beta_n$

(b) Si on fait la transformation  $\phi(y) = yu$

on a :

$$\begin{aligned}\dot{\phi} &= u + y\dot{u} \\ \ddot{\phi} &= y\ddot{u} + 2\dot{u}\end{aligned}$$

l'équation différentielle devient :

$$y(1-y)[y\ddot{u} + 2\dot{u}] - \beta_n \cdot y[u + y\dot{u}] + \frac{2}{\delta\varepsilon} yu = 0$$

Si on simplifie par  $y$  et regroupe les termes on a :

$$(1-y)y\ddot{u} + \dot{u}[2(1-y) - \beta_n y] + u\left[\frac{2}{\delta\varepsilon} - \beta_n\right] = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{(1-y)y\ddot{u} + \dot{u}[2 - (\beta_n + 2)y] + u\left[\frac{2}{\delta\varepsilon} - \beta_n\right] = 0}$$

On peut identifier avec l'équation à laquelle obéissent les polynômes de Jacobi :

$$(1-y)G_K''(y) + G_K'(y)[q - (p+1)y] + G_K(y)[k(p+k)] = 0$$

$$\boxed{q = 2} \qquad p+1 = \beta_n + 2 \qquad k(p+k) = \frac{2}{\delta \cdot \varepsilon} - \beta_n$$

$$\Rightarrow \boxed{p = \beta_n + 1 = \frac{2}{n\delta \cdot \varepsilon} - n + 2} \qquad \boxed{k = n - 1}$$

On a donc  $u = G_{n-1}(p, q, y)$

$$\Rightarrow \boxed{\phi = y G_{n-1}(p, q, y)}$$

On peut vérifier qu'on retrouve la solution obtenue directement à partir de l'équation hypergéométrique,

en effet  ${}_2F_1(\beta+n, -(n-1), 2; y) = G_{n-1}(\beta_n+1, 2, y)$

puisque l'on a  $F(a, b, c; y) = G_k(p, q, y)$

$$\begin{array}{l} \text{avec } a = p + k \\ b = -k \\ c = q \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} a = p + k \\ b = -k \\ c = q \end{array}} \right\} \text{cf. Courant-Hilbert, p.90}$$

On retrouve  $p = \beta_n+1 \quad q = 2 \quad k = n-1$

$$\text{On a finalement : } \chi_n(r) = C \cdot e^{-a_n \cdot \delta \cdot r} \cdot y \cdot G_{n-1}(\beta+1, 2, y)$$

C = coefficient de normalisation

On veut avoir :  $\int_0^1 \chi_n^2(r) dr = 1$

$$\Rightarrow C^2 \int_0^\infty dr e^{-2a_n \cdot \delta \cdot r} y^2 G_{n-1}^2(\beta+1, 2; y) = 1$$

$$y = 1 - e^{-\delta r} \Rightarrow dy = \delta e^{-\delta r} dr$$

$$\Rightarrow dr = \frac{1}{\delta} \frac{dy}{1-y} \quad e^{-2a_n \cdot \delta r} = (1-y)^{2a_n}$$

Il reste :

$$C^2 \int_0^1 dy \frac{1}{\delta} (1-y)^{2a_n-1} y^2 G_{n-1}^2(p, q; y) = 1$$

$$\Rightarrow \frac{C^2}{\delta} \int_0^1 dy (1-y)^{p-q-1} y^q G_M^2(p, q; y) = 1$$

$$\text{avec } M = n-1 \quad p = \beta_n+1 \quad q = 2$$

Voir solution générale pour  $\ell \neq 0$ .

On a trouvé :

$$X_{n,\ell}(r) = C \cdot e^{-a_n \cdot \delta \cdot r} y^{\ell+1} \cdot G_M(p, q; y)$$

$$C = \frac{\sqrt{\frac{\delta(\beta_n - 1)(\beta_n + 2n - 1)}{2n}}}{\sqrt{M!(\alpha + \beta + M)!(\alpha + M)!(\beta + M)!}} \frac{\Gamma(2M + \alpha + \beta + 1)}{\Gamma(2M + \alpha + \beta + 1)}$$

$$G_M(p, q; y) = \frac{\Gamma(\beta + M + 1)}{\Gamma(2M + \alpha + \beta + 1)} \sum_{i=0}^M (-1)^i \binom{M}{i} \frac{\Gamma(p + 2M - i)}{\Gamma(q + M - i)} y^{M-i}$$

Il reste :  $p = \alpha + \beta + 1$   $q = \beta + 1$

$$X_{n,\ell}(r) = e^{-a_n \cdot \delta \cdot r} \sqrt{\frac{\delta(\beta_n - 1)(\beta_n + 2n - 1)}{2}} \sqrt{\frac{(\beta + M)!}{n \cdot M!(\alpha + \beta + M)!(\alpha + M)!}} y^{\ell+1} \cdot S$$

$$S = \sum_{i=0}^M (-1)^i \binom{M}{i} \frac{(\alpha + \beta + 2M - i)!}{(\beta + M - i)!} y^{M-i}$$

Posons  $j = M - i$

$$S = \sum_{j=0}^M (-1)^{M-j} \binom{M}{j} \frac{(\alpha + \beta + M + j)!}{(\beta + j)!} y^j$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha = p - q = \beta_n - 1 \\ \beta = q - 1 = 2\ell + 1 \\ M = n - \ell - 1 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \beta + M = n + \ell \\ \alpha + M = \beta_n + n - \ell - 2 \\ \alpha + \beta + M = \beta_n + n + \ell - 1 \end{array} \right.$$

$$\sqrt{\frac{(\beta + M)!}{nM!(\alpha + \beta + M)!(\alpha + M)!}} = \sqrt{\frac{(n + \ell)!}{n \cdot (n - \ell - 1)! (\beta_n + n + \ell - 1)! (\beta_n + n - \ell - 2)!}}$$

$$// = \frac{1}{\sqrt{\beta_n + n - 1 \cdot (\beta_n + n - 2)!}}, \text{ pour } \ell = 0$$

$$\Rightarrow X_n(r) = e^{-a_n \cdot \delta r} \sqrt{\frac{\delta \cdot (\beta_n - 1)(\beta_n + 2n - 1)}{2(\beta_n + n - 1)}} \cdot \sum_{j=0}^{n-1} (-1)^{n-1-j} \binom{n-1}{j} \cdot \frac{(\beta_n + n - 1 + j)!}{(\beta_n + n - 2)! (1+y)!} y^{j+1}$$

Posons  $i = j+1$

$$\chi_n(r) = e^{-a_n \cdot \delta r} \sqrt{\frac{\delta(\beta_n - 1)(\beta_n + 2n - 1)}{2(\beta_n + n - 1)}} \sum_{i=1}^n (-1)^{n-i} \binom{n-1}{i-1} \binom{\beta_n + n - 2 + i}{i} y^i$$

conforme à l'expression de Hulthen et Lam & Varshni à un facteur  $(-1)$  près.

D. NORMALISATION DES FONCTIONS D'ONDE DU POTENTIEL DE HULTHEN MODIFIE

$\ell \neq 0$ . On a :

$$\chi_{n,\ell}(r) = r R_{n,\ell}(r)$$

$$\chi_{n,\ell}(r) = e^{-a_n \cdot \delta \cdot r} \cdot \phi_{n,\ell}(r)$$

$$y^2(1-y)\ddot{\phi}_{n,\ell}(y) - \beta_n \cdot y^2 \cdot \dot{\phi}_{n,\ell}(y) + \frac{2}{\delta \epsilon} y \phi_{n,\ell}(y) - \ell(\ell+1)\phi_{n,\ell}(y) = 0$$

$$y = 1 - e^{-\delta r} \quad \beta_n = 1 + 2a_n = \frac{2}{n\delta\epsilon} - n + 1$$

On notera  $\phi$  au lieu de  $\phi_{n,\ell}(y)$  dans la suite du calcul.

Posons :  $\phi = y^{\ell+1} \cdot u$

On a :  $\dot{\phi} = (\ell+1)y^\ell u + y^{\ell+1} \cdot \dot{u}$

et  $\ddot{\phi} = \ell(\ell+1)y^{\ell-1}u + 2(\ell+1)y^\ell \dot{u} + y^{\ell+1} \cdot \ddot{u}$

En reportant dans l'équation différentielle on a :

$$\left[ \ell(\ell+1)y^{\ell+1} \cdot u + 2(\ell+1)y^{\ell+2} \cdot \dot{u} + y^{\ell+3} \cdot \ddot{u} \right] (1-y) - \beta_n \left[ (\ell+1)y^{\ell+2} \cdot u + y^{\ell+3} \cdot \dot{u} \right] + \frac{2}{\delta \cdot \epsilon} y^{\ell+2} u - \ell(\ell+1)y^{\ell+1} \cdot u = 0$$

$$\Rightarrow (1-y)y^{\ell+3} \ddot{u} + \left[ 2(\ell+1)(1-y) - \beta_n y \right] y^{\ell+2} \dot{u} + \left[ -\ell(\ell+1) - \beta_n(\ell+1) + \frac{2}{\delta \epsilon} \right] y^{\ell+2} u = 0$$

On en tire en simplifiant par  $y^{\ell+2}$  :

$$y(1+y)\ddot{u} + \left[ 2(\ell+1) - (\beta_n + 2(\ell+1))y \right] \dot{u} + \left[ \frac{2}{\delta\varepsilon} - (\ell+1)(\beta_n + \ell) \right] u = 0$$

Soit  $G_k^{p,q}(y)$  = polynôme de Jacobi d'ordre  $k$ .

On a comme équation canonique (cf. Courant-Hilbert, p.90)

$$y(1-y)G_k'' + \left[ q - (p+1)y \right] G_k' + k(p+k)G_k = 0$$

$u$  satisfait au même type d'équation si on pose

$$\begin{cases} q & = 2(\ell+1) \\ p+1 & = \beta_n + 2\ell + 2 \\ k(p+k) & = \frac{2}{\delta\varepsilon} - (\ell+1)(\beta_n + \ell) \end{cases}$$

On en tire :

$$p = \beta_n + 2\ell + 1 \qquad k = n - \ell - 1 = M$$

En effet  $k(p+k) = n(p+k) - (\ell+1)(\beta_n + \ell) - (\ell+1)(\ell+1+k)$

Le terme  $-(\ell+1)(\beta_n + \ell)$  s'élimine. Il reste :

$$n(\beta_n + 2\ell + 1 + n - \ell - 1) - (\ell+1)(\ell+1+n-\ell-1) = \frac{2}{\delta\varepsilon}$$

$$\Rightarrow n(\beta_n + n + \ell) - n(\ell+1) = \frac{2}{\delta\varepsilon}$$

$$\beta_n = \frac{2}{n \cdot \delta\varepsilon} - n + 1 \Rightarrow n\beta_n = \frac{2}{\delta\varepsilon} - n^2 + n$$

On vérifie bien que  $n\beta_n + n^2 + n\ell - n\ell - n = \frac{2}{\delta\varepsilon}$

On a donc :

$$\phi_{n,\ell}(y) = y^{\ell+1} \cdot G_M^{p,q}(y) \qquad \text{(I.D.1)}$$

$$p = \beta_n + 2\ell + 1 \qquad q = 2(\ell+1)$$

On veut normaliser  $\chi_{n,\ell}(r) = Ce^{-a_n \cdot \delta r} \cdot \phi_{n,\ell}(y)$

C'est-à-dire on cherche C tel que  $\int_0^{\infty} dr \chi_{n,\ell}^2(r) = 1$

On remplace  $e^{-a_n \cdot \delta r}$  par  $(1-y)^{a_n}$

car  $y = 1 - e^{-\delta r}$ , on a :  $dr = \frac{1}{\delta} \frac{dy}{1-y}$

$$\Rightarrow \int_0^{\infty} dr \chi_{n,\ell}^2(r) = \int_0^1 \frac{1}{\delta} \frac{dy}{1-y} \chi_{n,\ell}^2(y)$$

$$\text{On a donc : } \frac{C^2}{\delta} \int_0^1 (1-y)^{2a_n-1} \phi_{n,\ell}^2(y) dy = 1$$

On remplace  $\phi_{n,\ell}$  par son expression, on a :

$$\frac{C^2}{\delta} \int_0^1 (1-y)^{2a_n-1} y^{2(\ell+1)} \left[ G_M^{p,q}(y) \right]^2 dy = 1$$

Il faut donc évaluer

$$I_1 = \int_0^1 (1-y)^{2a_n-1} y^{2(\ell+1)} \left[ G_M^{p,q}(y) \right]^2 dy \quad \text{car } \frac{C^2}{\delta} I_1 = 1$$

On peut remplacer  $2a_n-1$  par  $\beta_n-2$  car  $\beta_n = 2a_n+1$   
 $2(\ell+1)$  par  $q$

On remarque que  $\beta_n-2 = p - q - 1$

$$\text{En effet } \left. \begin{array}{l} p = \beta_n + 2\ell + 1 \\ q = 2\ell + 2 \end{array} \right\} \Rightarrow p - q - 1 = \beta_n - 2$$

$$I_1 = \int_0^1 (1-y)^{p-q-1} y^q \left[ G_M^{p,q}(y) \right]^2 dy$$

On a : $G_M^{p,q}(y) = \frac{M! \Gamma(M+p)}{\Gamma(2M+p)} P_M^{\alpha,\beta}(2y-1)$ si $\alpha = p-q$ et $\beta = q-1$
--

On pose  $x = 2y - 1 \Rightarrow y = \frac{x+1}{2} \Rightarrow dy = \frac{dx}{2}$   
 $1 - y = \frac{1-x}{2}$

$$I_1 = \int_{-1}^{+1} \frac{dx}{2} \left(\frac{1-x}{2}\right)^{p-q-1} \left(\frac{1+x}{2}\right)^q \left(\frac{M! \Gamma(M+p)}{\Gamma(2M+p)}\right)^2 \left[P_M^{\alpha, \beta}(x)\right]^2$$

$$\Rightarrow I_1 = \frac{1}{2^p} \left(\frac{M! \Gamma(M+p)}{\Gamma(2M+p)}\right)^2 I_2$$

$$I_2 = \int_{-1}^{+1} dx (1-x)^{\alpha-1} (1+x)^{\beta+1} \left[P_M^{\alpha, \beta}(x)\right]^2$$

$$p = \alpha + \beta + 1$$

$$q = \beta + 1$$

$$I_2 = \underbrace{\int_{-1}^{+1} dx (1-x)^{\alpha-1} (1+x)^{\beta} \left[P_M^{\alpha, \beta}(x)\right]^2}_A + \int_{-1}^{+1} dx (1-x)^{\alpha} (1+x)^{\beta} \frac{x}{1-x} \left[P_M^{\alpha, \beta}(x)\right]^2$$

$$\text{or } \frac{x}{1-x} = \frac{-(1-x)+1}{1-x} = -1 + \frac{1}{1-x}$$

$$\Rightarrow I_2 = A + \underbrace{\int_{-1}^{+1} dx (1-x)^{\alpha} (1+x)^{\beta} \frac{1}{1-x} \left[P_M^{\alpha, \beta}(x)\right]^2}_A - \underbrace{\int_{-1}^{+1} dx (1-x)^{\alpha} (1+x)^{\beta} \left[P_M^{\alpha, \beta}(x)\right]^2}_B$$

$I_2 = 2A - B$  avec (cf. table de transformées intégrales Bateman vol.2, p.285)

$$A = 2^{\alpha+\beta} \left( \frac{\Gamma(\alpha+M+1) \Gamma(\beta+M+1)}{M! \Gamma(\alpha+\beta+M+1)} \right) \cdot \frac{1}{\alpha}$$

$$B = 2^{\alpha+\beta+1} \left( \frac{\Gamma(\alpha+M+1) \Gamma(\beta+M+1)}{M! \Gamma(\alpha+\beta+M+1)} \right) \cdot \frac{1}{\alpha+\beta+2M+1}$$

$$I_2 = 2^{\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(\alpha+M+1)\Gamma(\beta+M+1)}{M! \Gamma(\alpha+\beta+M+1)} \frac{\beta+2M+1}{\alpha(\alpha+\beta+2M+1)}$$

$$\Rightarrow I_1 = \frac{1}{2^p} \frac{M! \Gamma^2(\alpha+\beta+M+1)}{\Gamma^2(2M+p\alpha+\beta+1)} \cdot I_2$$

$p = \alpha + \beta + 1 \Rightarrow 2^p$  se simplifie ainsi que  $M!$  et  $\Gamma(\alpha+\beta+M+1)$   
il reste :

$$I_1 = M! \frac{\Gamma(\alpha+\beta+M+1)}{\Gamma^2(2M+\alpha+\beta+1)} \Gamma(\alpha+M+1)\Gamma(\beta+M+1) \frac{\beta+2M+1}{\alpha(\alpha+\beta+2M+1)}$$

On avait  $\frac{C^2}{\delta} I_1 = 1 \Rightarrow C = \sqrt{\frac{\delta}{I_1}}$

$$C = \sqrt{\frac{\delta \cdot \alpha \cdot (\alpha+\beta+2M+1)}{\beta+2M+1}} \cdot \frac{\Gamma(2M+\alpha+\beta+1)}{\sqrt{M! \Gamma(\alpha+\beta+M+1) \Gamma(\alpha+M+1) \Gamma(\beta+M+1)}}$$

Or  $x_{n,\ell}(r) = C e^{-a_n \cdot \delta r} \cdot y^{\ell+1} \cdot G_M^{p,q}(y)$

(Cf. Abramowitz 22.3.3, p. 775)  $G_M^{p,q}(y) = \frac{\Gamma(q+M)}{\Gamma(p+2M)} \sum_{i=0}^M (-1)^i \binom{M}{i} \frac{\Gamma(p+2M-i)}{\Gamma(q+M-i)} y^{M-i}$

$$G_M^{p,q}(y) = \frac{\Gamma(\beta+M+1)}{\Gamma(\alpha+\beta+2M+1)} \sum_{i=0}^M \dots\dots\dots$$

On peut écrire :  $G_M^{p,q}(y) = \sum_{i=0}^M c_i \cdot y^i$

On a alors :  $c_M = 1$

On avait :  $\frac{c_{i+1}}{c_i} = \frac{(i+\ell+1)(i+\ell+\beta_n) - 2/\delta\epsilon}{(i+\ell+1)(i+\ell+2) - \ell(\ell+1)}$

$$\frac{c_{i-1}}{c_i} = \frac{(\ell+i)(\ell+i+1) - \ell(\ell+1)}{(\ell+i)(\ell+\beta_n+i-1) - 2/\delta\epsilon}$$

On a alors : 
$$X_{n,\ell}(r) = C \cdot e^{-a_n \cdot \delta r} \sum_{i=0}^M c_i \cdot y^{i+\ell+1}$$

avec : 
$$C = \sqrt{\frac{\delta \cdot \alpha (\alpha + \beta + 2M + 1)}{\beta + 2M + 1}} \cdot P$$

$$P = \left( \frac{(2M + \alpha + \beta)! (2M + \alpha + \beta)!}{M! (\alpha + \beta + M)! (\alpha + M)! (\beta + M)!} \right)^{1/2}$$

$$P = \left( C_{2M + \alpha + \beta}^M \cdot C_{2M + \alpha + \beta}^{\beta + M} \right)^{1/2}$$

$$\begin{cases} \alpha = p - q = \beta_n - 1 \\ \beta = q - 1 = 2\ell + 1 \\ M = n - \ell - 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \alpha + \beta + 2M + 1 = \beta_n + 2n - 1 \\ \beta + 2M + 1 = 2n \\ \beta + M = n + \ell \\ 2M + \alpha + \beta = \beta_n + 2n - 2 \end{cases}$$

$$C = \left( \frac{\delta \cdot (\beta_n - 1) (\beta_n + 2n - 1) C_{\beta_n + 2n - 2}^{n - \ell - 1} \cdot C_{\beta_n + 2n - 2}^{n + \ell}}{2n} \right)^{1/2}$$

(I.D.2)

E. PERTURBATION DU POTENTIEL DE HULTHEN MODIFIÉ

Définition de la perturbation

$$V(r) = + \frac{e^{-\delta r}}{\epsilon r} - \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} \quad \text{Debye}$$

$$W(r) = + \frac{\delta e^{-\delta r}}{\epsilon(1-e^{-\delta r})} - \frac{\ell(\ell+1)}{2} \left( \frac{\delta}{1-e^{-\delta r}} \right)^2 e^{-\delta r} \quad \text{Hulthen modifié}$$

$$V(r) = W(r) + u(r)$$

$$u(r) = \frac{1}{\epsilon} \left[ + \frac{e^{-\delta r}}{r} - \frac{\delta e^{-\delta r}}{(1-e^{-\delta r})} \right] - \frac{\ell(\ell+1)}{2} \left[ \frac{1}{r^2} - e^{-\delta r} \left( \frac{\delta}{1-e^{-\delta r}} \right)^2 \right]$$

Si on pose :  $y = 1 - e^{-\delta r}$ ,

on a :  $e^{-\delta r} = 1 - y$

et :  $r = -\frac{1}{\delta} \text{Log}(1-y)$

$$\Rightarrow u(y) = -\frac{\delta}{\epsilon}(1-y) \left[ \frac{1}{\text{Log}(1-y)} + \frac{1}{y} \right] - \frac{\ell(\ell+1)\delta^2}{2} \left[ \frac{1}{\text{Log}^2(1-y)} - \frac{1-y}{y^2} \right]$$

On a une base complète de kets solutions de l'équation de Schrödinger avec le potentiel  $W(r)$

$$\chi_{n,\ell}(r) = C e^{-a_n \cdot \delta r} \cdot y^{\ell+1} G_M(p,q;y) = C(1-y)^{a_n} y^{\ell+1} \cdot G_M(p,q;y)$$

$$\beta_n = 1 + 2a_n = 1 + \alpha_n \quad \Rightarrow \quad a_n = \frac{\alpha_n}{2}$$

$$\beta = 2\ell + 1 \quad dr = \frac{1}{1-y} \frac{dy}{\delta}$$

Calcul de  $E_1 = \langle X_{n,\ell} | u | X_{n,\ell} \rangle$

$$E_1 = C^2 [I_1 + I_2 + I_3 + I_4]$$

$I_1 = - \frac{1}{\varepsilon} \int_0^1 dy \frac{(1-y)^\alpha y^{\beta+1}}{\text{Log}(1-y)} G_M^2(p, q; y)$
$I_2 = - \frac{1}{\varepsilon} \int_0^1 dy (1-y)^\alpha y^\beta G_M^2(p, q; y)$
$I_3 = - \frac{\ell(\ell+1)}{2} \int_0^1 dy \frac{(1-y)^{\alpha-1} y^{\beta+1}}{\text{Log}^2(1-y)} G_M^2(p, q; y)$
$I_4 = + \frac{\ell(\ell+1)}{2} \int_0^1 dy (1-y)^\alpha y^{\beta-1} G_M^2(p, q; y)$

Calcul de  $I_2$  et  $I_4$

$$G_M(p, q; y) = \frac{\overbrace{M!(\alpha+\beta+M)!}^K}{\Gamma(2M+\alpha+\beta+1)} P_M^{\alpha, \beta}(x) \quad \text{avec } x = 2y-1$$

$$I_2 = - \frac{1}{\varepsilon} \frac{K^2}{2^{\alpha+\beta+1}} \int_{-1}^{+1} (1-x)^\alpha (1+x)^\beta \left( P_M^{\alpha, \beta}(x) \right)^2 dx$$

$$I_4 = \frac{+\ell(\ell+1)\delta K^2}{2^{\alpha+\beta+1}} \int_{-1}^{+1} (1-x)^\alpha (1+x)^{\beta-1} \left( P_M^{\alpha, \beta}(x) \right)^2 dx$$

or 
$$\int_{-1}^{+1} (1-x)^\alpha (1+x)^\beta \left( P_M^{\alpha, \beta}(x) \right)^2 dx = \frac{2^{\alpha+\beta+1} \Gamma(\alpha+M+1) \Gamma(\beta+M+1)}{M! (\alpha+\beta+2M+1) \Gamma(\alpha+\beta+M+1)}$$

cf. Bateman, p. 285(5)

$\alpha \in \mathbb{R}_+^*$      $\beta = 2\ell + 1 \in \mathbb{N}^*$      $\Rightarrow$  on a bien  $\operatorname{Re} \alpha > -1$      $\operatorname{Re} \beta > -1$

$$\Rightarrow \boxed{I_2 = - \frac{1}{\epsilon} \frac{M! \Gamma(\alpha + \beta + M + 1) \Gamma(\alpha + M + 1) \Gamma(\beta + M + 1)}{\Gamma^2(2M + \alpha + \beta + 1) (\alpha + \beta + 2M + 1)}} \quad (\text{I.E.1})$$

$$C^2 = \frac{\delta \alpha (\alpha + \beta + 2M + 1)}{\beta + 2M + 1} \frac{\Gamma^2(2M + \alpha + \beta + 1)}{M! \Gamma(\alpha + \beta + M + 1) \Gamma(\alpha + M + 1) \Gamma(\beta + M + 1)}$$

$$\Rightarrow \boxed{C^2 I_2 = - \frac{\delta \alpha}{\epsilon (\beta + 2M + 1)}}$$

de même  $\int_{-1}^{+1} (1-x)^\alpha (1+x)^{\beta-1} \left( P_M^{\alpha, \beta}(x) \right)^2 dx = \frac{2^{\alpha+\beta} \Gamma(\alpha+M+1) \Gamma(\beta+M+1)}{M! \beta \Gamma(\alpha+\beta+M+1)}$

cf. Bateman, p. 286 (15)

$\sigma = \beta$      $n = m = M$     on a bien  $\operatorname{Re} \alpha > 0$      $\operatorname{Re} \sigma > 0$

$$\Rightarrow \boxed{I_4 = + \frac{\ell(\ell+1) \delta}{2} \frac{M! \Gamma(\alpha + \beta + M + 1) \Gamma(\alpha + M + 1) \Gamma(\beta + M + 1)}{\beta \Gamma^2(2M + \alpha + \beta + 1)}} \quad (\text{I.E.2})$$

$$C^2 I_4 = + \frac{\ell(\ell+1) \delta^2 (\alpha + \beta + 2M + 1) \alpha}{(\beta + 2M + 1) 2\beta}$$

Calcul de  $I_1$  et  $I_3$

$$G_M(p, q; y) = \sum_{i=0}^M c_i \cdot y^i$$

$$\boxed{I_1 = - \frac{1}{\epsilon} \sum_{i=0}^M \sum_{j=0}^M c_i \cdot c_j \int_0^1 dy \frac{(1-y)^\alpha y^{\beta+i+j+1}}{\operatorname{Log}(1-y)}}$$

$$I_3 = - \frac{\ell(\ell+1) \delta}{2} \sum_{i=0}^M \sum_{j=0}^M c_i \cdot c_j \int_0^1 dy \frac{(1-y)^{\alpha-1} y^{\beta+i+j+1}}{\operatorname{Log}^2(1-y)}$$

Or 
$$\int_0^1 (x-1)^n x^{q-1} \frac{dx}{\text{Log } x} = \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n}{k} \text{Log}(q+n-k)$$
 Gradshteyn p. 546(41)

Posons  $x = 1-y$      $y = 1-x$      $(x-1)^n = (-1)^n y^n$      $dx = -dy$   
 $[0,1] \rightarrow [1,0]$

$$\Rightarrow \int_0^1 \frac{(1-y)^{q-1} y^n dy}{\text{Log}(1-y)} = (-1)^n \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n}{k} \text{Log}(q+n-k)$$

$$I_1 = -\frac{1}{\varepsilon} \sum_{i=0}^M \sum_{j=0}^M c_i \cdot c_j (-1)^{\beta+i+j+1} \sum_{k=0}^{\beta+i+j+1} (-1)^k \binom{\beta+i+j+1}{k} \text{Log} \binom{2+\alpha+\beta+i+j}{-k}$$

(I.E.3)

De même Gradshteyn, p.547(4)

$$\int_0^1 (1-x)^m x^{q-1} \frac{dx}{(\text{Log } x)^2} = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n}{k} (k+q)^2 \text{Log}(k+q)$$

$$\left. \begin{array}{l} x = 1-y \\ dx = -dy \\ [0,1] \rightarrow [1,0] \end{array} \right\} \Rightarrow \int_0^1 dy \frac{(1-y)^{q-1} y^n}{\text{Log}^2(1-y)} = \quad "$$

$$I_3 = -\frac{\ell(\ell+1)\delta}{4} \sum_{i=0}^M \sum_{j=0}^M c_i \cdot c_j \sum_{k=0}^{\beta+i+j+1} (-1)^k \binom{\beta+i+j+1}{k} (k+\alpha)^2 \text{Log}(k+\alpha)$$

(I.E.4)

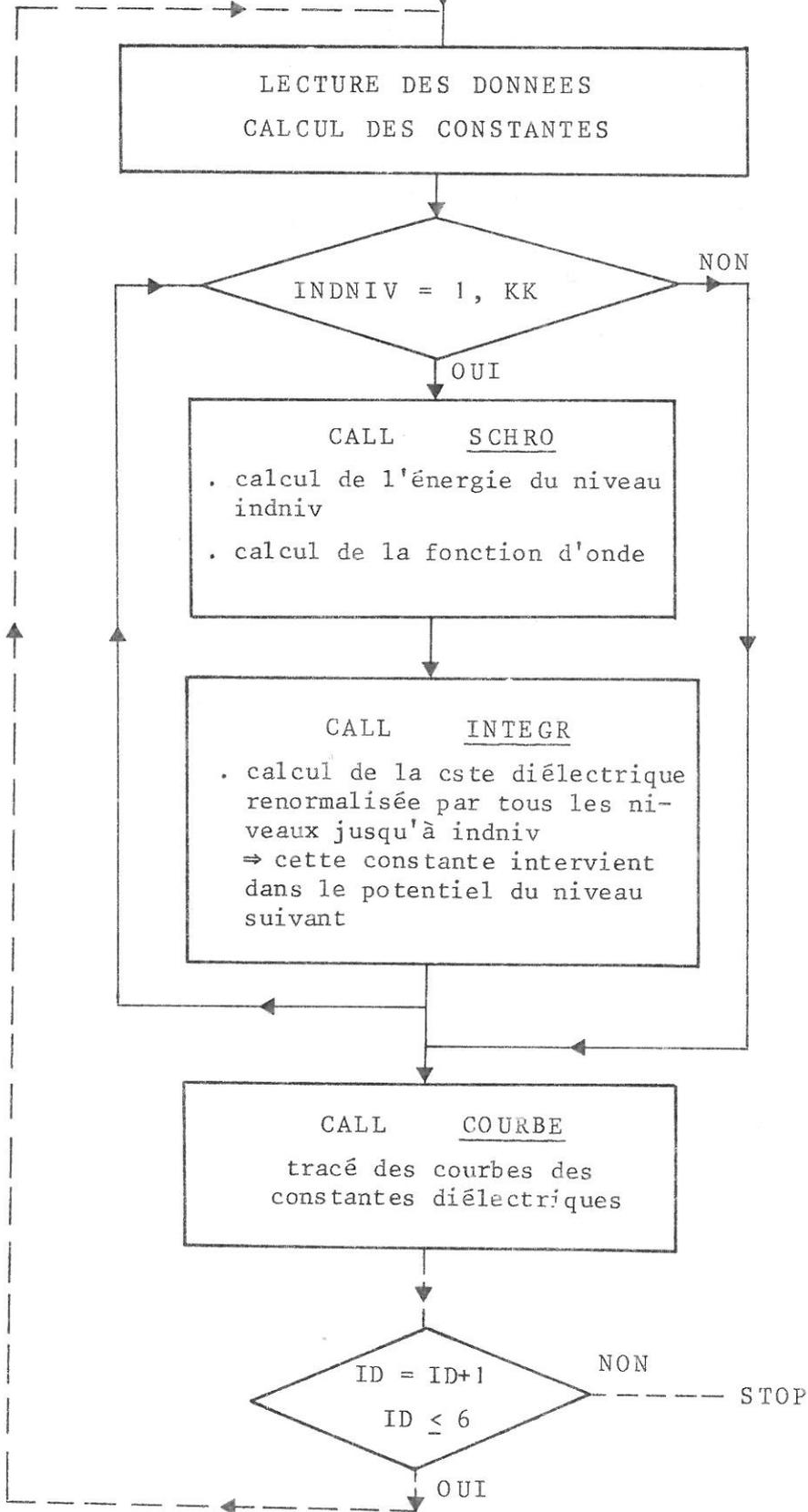
ANNEXE II

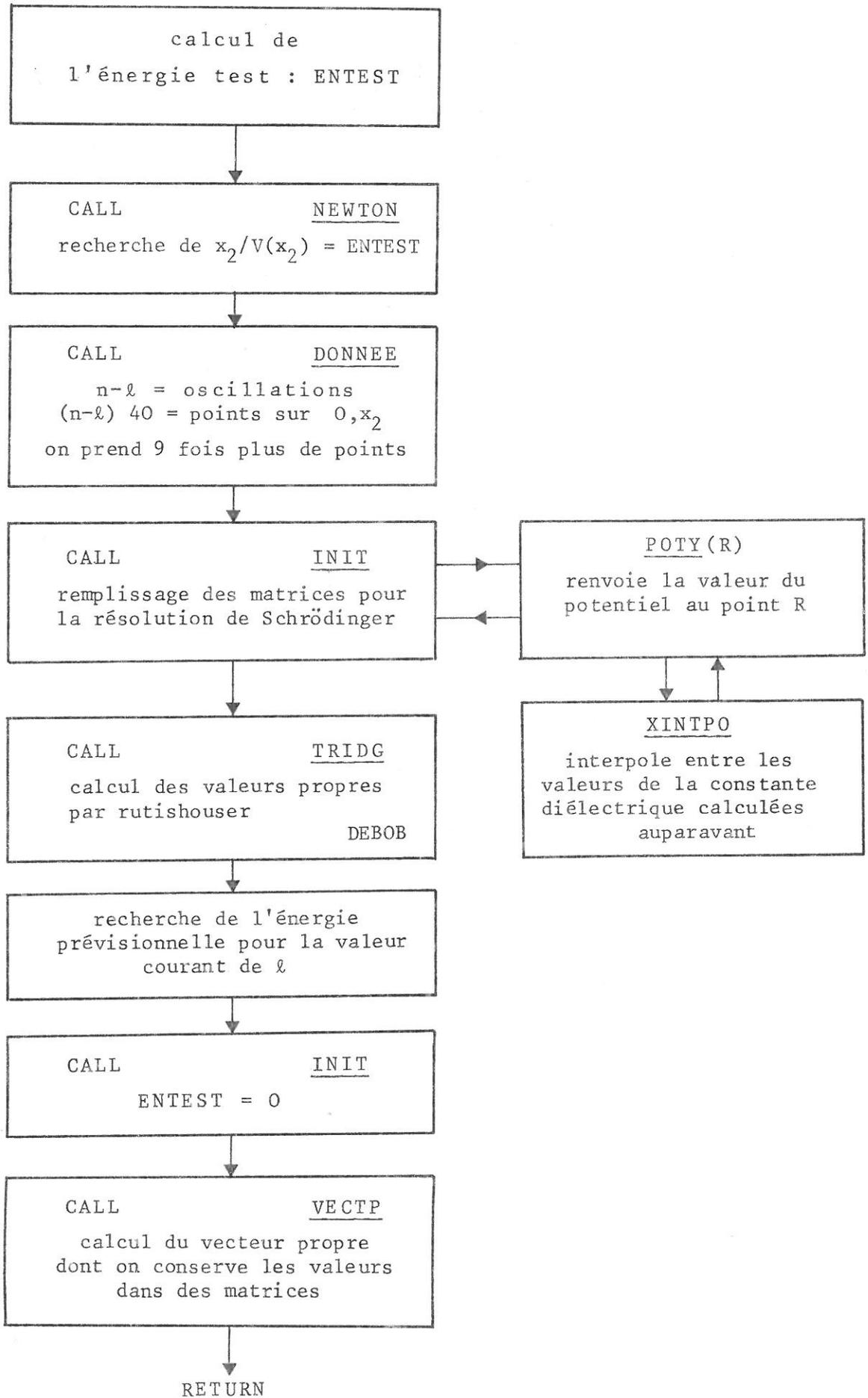
ORGANIGRAMMES ET LISTINGS

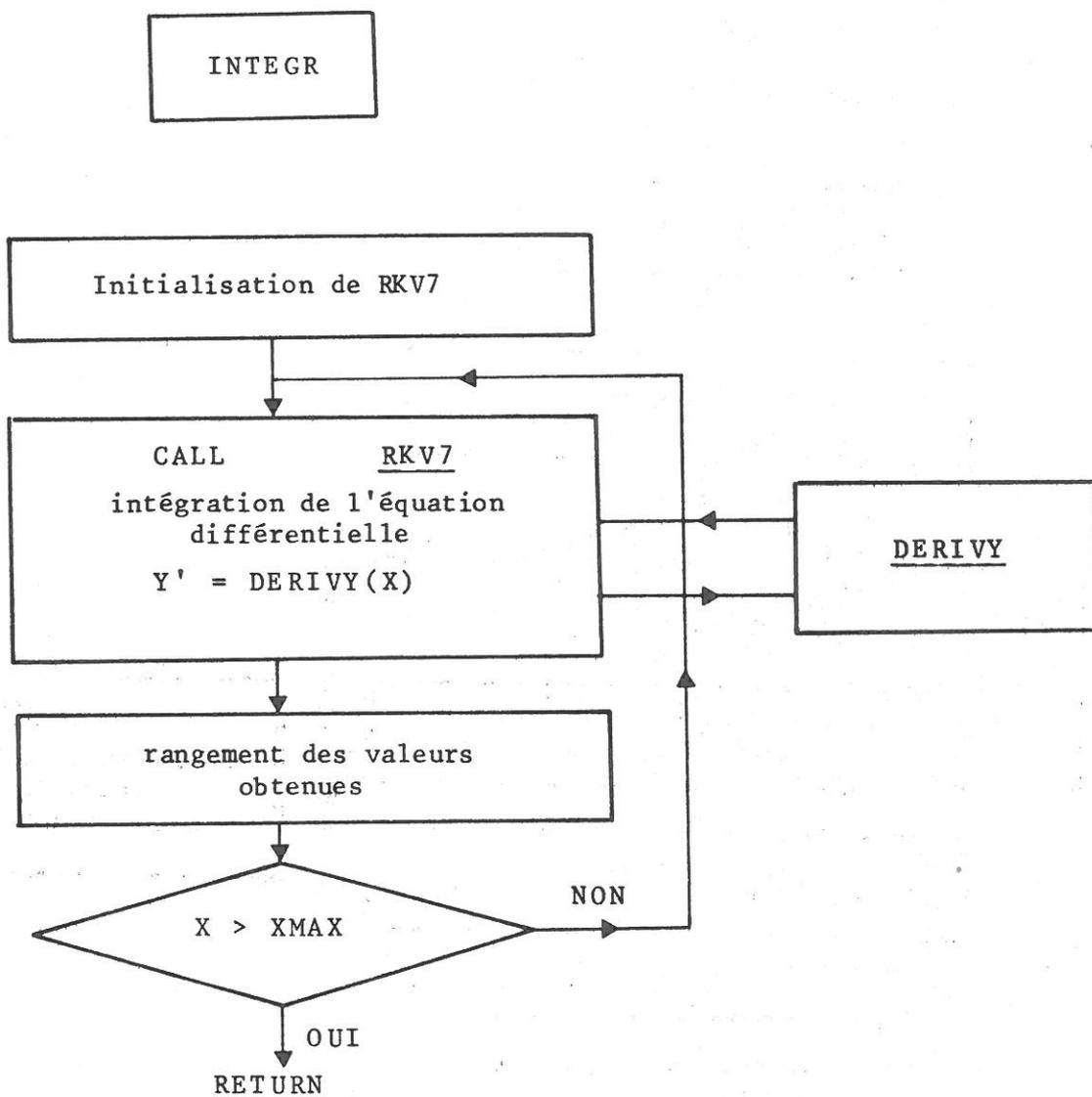


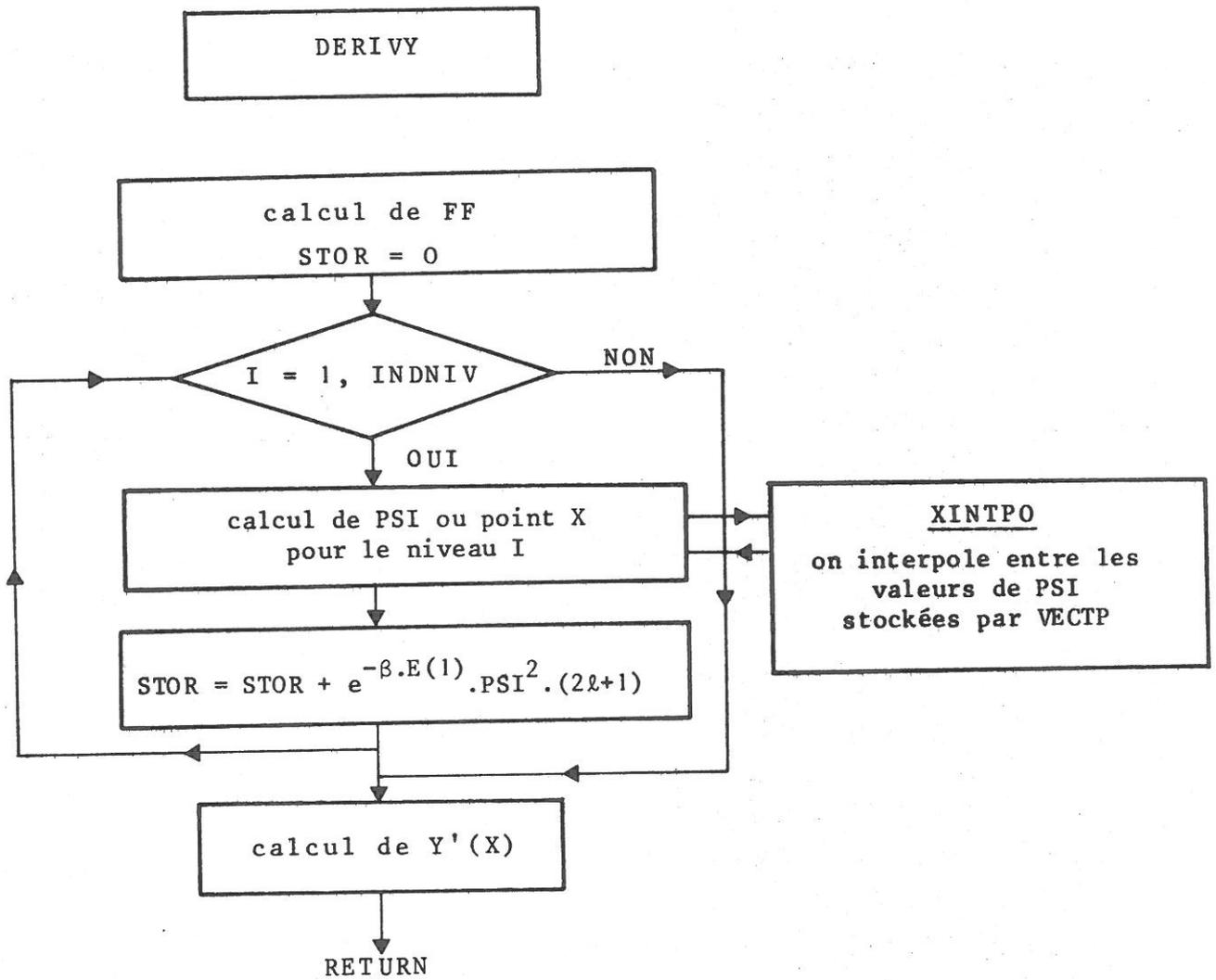
MAIN

KK = nombre de niveaux ID = 1  
distance de Debye = D(ID)









```
1          SUBROUTINE TRIDG(A,B,EIGVL,NVAL,N,P)
2          *****
3          *          CALCUL VALEURS PROPRES MATRICE TRIDIAGONALE
4          *          PAR METHODE RUTISHAUSER (DURAND, P 281 )
5          *          A(N)=DIAG PRINCIPALE
6          *          B(N)=DIAG SUPERIEURE (1 PARTOUT)
7          *          EIGVL(K)=VALEURS PROPRES APRES CALCUL
8          *          K=NBRE MAXIMUM DE VAL. PROPRES
9          *          NVAL=NO D'ORDRE DES VAL. PROPRES OU ON ARRETE
10         *          N=NBRE DE PTS
11         *****
12         IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
13         DIMENSION A(N),B(N),EIGVL(K)
14         COMMON/DONE/RDB,HMX,DEL,ENTEST
15         -----
16         NM=N
17         NEIGVL=0
18         200  CONTINUE
19         * RECHERCHE D'UNE VALEUR PROPRE
20         *****
21         AM=0.00
22         IAC=0          @ IAC=1 CD L'ACC. A COMMENCEE
23         NCO=0
24         2SL=0.00
25         ATQ=0.00
26         NDIC=0        @ NDIC=NBRE DE DEBOBINAGES
27         220  AM=A(NM)
28         NDIC=0
29         NCO=NCO+1    @ NCO=NBRE D'ITER POUR 1 RACINE DONNEE
30         IF(NCO.GT.200) PRINT 1290
31         1290  FORMAT(2X,'PAS DE CONVERGENCE APRES 200 TOURS')
32         IF(NCO.GT.1010) RETURN
33         * CALCUL DES ELTS DIAG. DE L ET SUPDIAG. DE S
34         *****
35         BT=.000
36         P(NM)=0.00
37         DO 406 I=1,NM-1
38         ALI=A(I)-BT
39         IF(DABS(ALI).LT.0.10-20) CALL DEBOE(A,B,AMEM,BMEM,AL,NDIC,N,I,1,
40         1          *220)
41         BTI=B(I)/ALI
42         AP=A(I+1)-BTI
43         AMEM=A(I)
44         BMEM=B(I)
45         A(I)=ALI+BTI
46         B(I)=BTI*AP
47         AL=ALI
48         BT=BTI
49         406  CONTINUE
50         A(NM)=A(NM)-BTI
51         ASL=A(NM)
52         IF(IAC.EQ.1) GOTO 726
53         RDAP=DABS((ASL-AM)/ASL)
54         C  DEMARRAGE EVENTUEL DE L ACCELERATION
55         C  -----
56         IF(RDAP.LE.1.E-2) IAC=1
```

```
57      IF( (IAC.EQ.1) .AND. (NCC.GT.1) ) PRINT 727, NCO
58      727  FORMAT(2X,'ACCELERATION AU',I3,' IEME TOUR',/)
59      726  CONTINUE
60      IF(IAC.EQ.1) BSL=BSL+ASL
61      IF(IAC.EQ.1) ATQ=ASL
62      ATQ=ATQ+NDIC
63      DO 766 I=1,NM
64      766  A(I)=A(I)-ATQ
65      9001  FORMAT(2X,'NBRE ITER ',I3,2X,'B ',D16.8,'BB ',D16.8)
66      IF(DABS(B(NM-1)).GE.C.1D-55) GO TO 220
67      IF(IAC.EQ.1) AM=BSL
68      AMR=-AM/HMX/HMX/2
69      AMR=AMR-ENTEST
70      C   ON IMPRIME UNE RACINE ET SA VALEUR ABSLOLUE
71      C   *****
72      IF(AMR.LE.D.D0) THEN
73      PRINT 6005,N-NM+1,AMR
74      NEIGVL=NEIGVL+1
75      EIGVL(NEIGVL)=AMR
76      IF (NEIGVL.EQ.K) RETURN
77      ELSE
78      ENDIF
79      6005  FORMAT(2X,'NO VAL PROPRE ',I4,1X,'V P ',D16.8)
80      C   NM DIMINUE DE 1 ET DEMARRE LE CALCUL DE LA RACINE SUIVANTE
81      C   *****
82      NM=NM-1
83      IF (N-NM.EQ.NVAL) RETURN DON NE CALCULE QUE NVAL RACINES
84      IF (NM.EQ.0) RETURN QUERNIERE RACINE
85      B(NM)=C.D0
86      DO 58 IP=1,NM
87      58   A(IP)=A(IP)+IAC*AM
88      GO TO 200
89      111  CONTINUE
90      RETURN
91      END
```

```
3500      SUBROUTINE VECTP(AM,N,A,B,C,MSAVE)
3510      *****
3520      *      CALCUL DES VECTEURS PROPRES
3530      *      AM=VALEUR PROPRE
3540      *      N=NBRE DE PTS
3550      *      A(N)=DIAG PRINCIPALE
3560      *      B(N)=DIAG SUPERIEURE (1 PARTOUT)
3570      *      C(N)=BETA SI I<MSAVE; GAMMA SI I>MSAVE
3580      *      MSAVE=NO DU PT OU PART LA PROPAGATION
3590      *****
3600      PARAMETER KK=9
3610      PARAMETER NN=1500
3620      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
3630      DIMENSION A(N),B(N),C(N)
3640      COMMON/DONE/RDB,HMX,DEL,ENTEST
3650      COMMON/B/INDMAX,INDNIV
3660      COMMON/C/L,M
3670      COMMON/CPSI/XPSI(NN,KK),YPSI(NN,KK),LIMPSI(KK)
3680      *-----*
3690      PRINT 106,AM
3700      NOEUD=0
3710 106   FORMAT(2X,'AM',D16.8)
3720 C     CALCUL DES ALPHA
3730 C     *****
3740 C     INWARD
3750 C     -----
3760      C(1)=-B(1)/(A(1)-AM)
3770      DO 1 I=2,MSAVE-1
3780      C(I)=-B(I)/(A(I)-AM+C(I-1))
3790      IF (C(I).LT.0.000) NOEUD=NOEUD+1
3800 1     CONTINUE
3810      PRINT*,'NOEUD=',NOEUD,'M=',M
3820      IF (NOEUD.NE.M) THEN
3830      PRINT*,'MAUVAIS NIVEAU'
3840      INDMAX=INDNIV-1
3850      CALL COURBE
3860      CALL BUG
3870      ENDIF
3880 C     CALCUL DES BETA
3890 C     *****
3900
3910 C     INWARD
3920 C     -----
3930      C(MSAVE)=1.00
3940      DO 4 I=MSAVE-1,1,-1
3950      C(I)=C(I)*C(I+1)
3960 4     CONTINUE
3970
3980 C     OUTWARD
3990 C     -----
4000      C(MSAVE+1)=((A(MSAVE)-AM)+C(MSAVE-1))/(-B(MSAVE))
4010      C(MSAVE+2)=((A(MSAVE+1)-AM)*C(MSAVE+1)+1.00)/(-B(MSAVE+1))
4020      DO 6 I=MSAVE+3,N
4030      C(I)=((A(I-1)-AM)*C(I-1)+C(I-2))/(-B(I-1))
4040      IF (DABS(C(I)).GT.DABS(C(I-1))) THEN
4050      LIM=I-1
4060      GOTO 10
```

```
4070      ELSE
4080      ENDIF
4090 6      CONTINUE
4100      LIM=N
4110 10     IF (MOD(LIM,2).NE.0) LIM=LIM-1
4120      PRINT*, 'LIM=', LIM
4130      LIMPSI(INDNIV)=LIM
4140 C      CALCUL DE LA NORME (SIMPSON)
4150 C      *****
4160      S=0.00
4170      DO 2 I=1, LIM-1
4180      IF (MOD(I,2).EQ.0) THEN
4190      S=S+2*C(I)**2
4200      ELSE
4210      S=S+4*C(I)**2
4220      ENDIF
4230      S=S+C(LIM)**2
4240 2      CONTINUE
4250      S=DSQRT(1.00/(S*HMX/3))
4260 C      CALCUL ET IMPRESSION DES SOLUTIONS
4270 C      *****
4280      XPSI(1,INDNIV)=.000
4290      YPSI(1,INDNIV)=.000
4300      DO 3 I=1, LIM
4310      R=R00+(I-1)*HMX
4320      PSI=S*C(I)
4330      XPSI(I+1,INDNIV)=R
4340      YPSI(I+1,INDNIV)=PSI
4350      IF ((I.GT.MSAVE).AND.(DABS(PSI).LE.1.0-5)) THEN
4360      LIMPSI(INDNIV)=I
4370 C      PRINT 100, I, R, PSI
4380      RETURN
4390      ENDIF
4400 C      IF ((MOD(I,50).EQ.0).OR.(I.LT.50)) THEN
4410 C      PRINT 100, I+1, R, PSI
4420 C      ENDIF
4430 3      CONTINUE
4440      RETURN
4450 100    FORMAT(2X, 'I= ', I4, ' R= ', D16.8, 2X, ' PSI= ', D16.8)
4460      END
```

```
1      SUBROUTINE SCHR(EQ,P,V,N,MSAVE,E2,ITRY)
2      *****
3      *      METHODE NUMEROV A 1 CANAL
4      *      ENERGIE ET FONCTION D'ONDE
5      *      MSAVE = 1 INTEGRATION INWARD SEULEMENT
6      *      MSAVE .GE. N INTEGRATION OUTWARD SEULEMENT
7      *****
8      INCLUDE COM,LIST
9      PARAMETER PI=3.14159265356979324DG,PIZ=PI/2.00
10     PARAMETER PI4=4.00*PI,FACT=DSQRT(2.00/PI)
11     PARAMETER MAXIT=30,EPS=1.0D-6
12     DIMENSION P(N),V(N)
13     -----
14     ITRY=0
15     HMX=(RFN-RDB)/DFLOAT(N-1)
16     H2=HMX**2
17     HV=H2/12.00
18     PNORM=1.00
19     E=EQ
20     TEST1=-1.
21     DE=0.00
22     *      INTEGRATION INWARD-OUTWARD
23     *      *****
24     DO 50 IT=1,MAXIT
25     PRINT*(80(1H*)//)'
26     C      PRINT*, 'PN=',P(N), 'PN-1=',P(N-1)
27     CALL LFNT(V,E,P,HMX,N)
28     CALL INWARD
29     *      L-INTEGRATION VERS L-INTERIEUR EST TERMINEE
30     *      *****
31     PM=P(MSAVE)
32     YIN=Y2/PM
33     DO 10 J=MSAVE,N
34     10 P(J)=P(J)/PM
35     C      PRINT*, 'P1=',P(1), 'P2=',P(2)
36     CALL FPNT(Y22,Y11,E,P,V)
37     CALL OUTWAR
38     *      L-INTEGRATION VERS L-EXTERIEUR EST TERMINEE
39     *      *****
40     C
41     PM=P(MSAVE)
42     *      RACCORDEMENT DES 2 BRANCHES
43     *      -----
44     YOUT=Y1/PM
45     Y11=Y11/PM
46     Y22=Y22/PM
47     YM=Y3/PM
48     DO 30 J=1,MSAVE
49     30 P(J)=P(J)/PM
50     C      LES DEUX BRANCHES SONT MAINTENANT RACCORDEES
51
52     *      CORRECTION DE L'ENERGIE
53     *      *****
54     DF=0.00
55     DO 40 J=1,N
56     40 DF=DF-P(J)**2
```

```
57      F=(-YOUT-YIN+2.DC*YM)/H2+(V(MSAVE)-E)
58      DOLD=DE
59      DE=-F/DF
60      PRINT*, 'E=',E/2, ' DE=',DE/2
61      EOLD=E
62      E=E+DE
63      PRINT*, 'E CORRIGEE =',E/2
64      IF (E.GE.2.DC) GOTO 55
65      TEST1=DMAX1((DABS(EOLD)-DABS(DE)),TEST1)
66      IF(TEST1.LT.C.) GO TO 50
67      IF(DABS((E-EOLD)/E).LT.EPS) GOTO 6C
68      50 CONTINUE
69      * SORTIE SANS CONVERGENCE
70      * *****
71      55 PRINT*, ' LA TECHNIQUE UTILISEE EST EN DEFAULT'
72      ITRY=1
73      RETURN
74      * SORTIE APRES STABILISATION DE L'ENERGIE
75      * *****
76      60 CONTINUE
77      E2=E
78      RETURN
```

80  
81 \*\*\*\*\*

```
82      SUBROUTINE INWARD
83      * INTEGRATION INWARD:PREMIERS PAS-LAST POINTS
84      * *****
85      GN=V(N)-E
86      GI=V(N-1)-E
87      Y1=(1.DC-HV*GN)*P(N)
88      Y2=(1.DC-HV*GI)*P(N-1)
```

```
89      C
90      C INTEGRATION INWARD
91      * *****
92      DO 8C I=N-2,MSAVE,-1
93      70 Y3=Y2+((Y2-Y1)+H2*GI)*P(I+1)
94      GI=V(I)-E
95      P(I)=Y3/(1.DC-HV*GI)
96      IF(I.NE.MSAVE) THEN
97      Y1=Y2
98      Y2=Y3
99      ENDIF
100     80 CONTINUE
101     RETURN
```

102 \*\*\*\*\*

103  
104  
105 \*\*\*\*\*

```
106      SUBROUTINE OUTWAR
107      C INTEGRATION OUTWARD:PREMIERS PAS-FIRST POINTS
108      * *****
109      Y1=-HV*Y11
110      GI=V(2)-E
111      Y2=(1.DC-HV*GI)*P(2)
112      Y2=P(2)-HV*Y22
113      C
```

```
114      *      INTEGRATION OUTWARD
115      *      *****
116      DO 130 I=3,MSAVE
117      110 Y3=Y2+((Y2-Y1)+H2*GI*P(I-1))
118      GI=V(I)-E
119      P(I)=Y3/(1.D0-HV*GI)
120      Y1=Y2
121      Y2=Y3
122      130 CONTINUE
123      RETURN
124      *****
125      END
```

REFERENCES

1. BALESCU, R. : *Equilibrium and nonequilibrium in statistical mechanics* (Wiley Interscience Publ.) 1975.
2. LEONARD, A. : *Phys. Rev.* 175(1968)221.
3. DWIGHT, H.B. : *Tables of Integrals* (McMillan, New York) 1961, p. 15.
4. HUANG, K. : *Statistical Mechanics* (Wiley & sons) 1963.
5. KUBO, R. : *Statistical Mechanics* (North Holland Publ.) 1965.
6. GRANDY, W.T. and GOULART ROSA Jr., S. : *Am. J. Phys.* 49(1981)570.
7. DEWITT, H.E. and ROGERS, F.J. : *Phys. Earth Planet. Interiors* 6(1972)51.
8. MONTROLL, E.W. and WARD, J.C. : *Phys. Fluids* 1(1958)55.
9. JACKSON, J.L. and KLEIN, L.S. : *Phys. Rev.* 177(1969)352.
10. ROGERS, F.J. : *Phys. Rev. A* 24(1981)1531.
11. SKUPSKY, S. : *Phys. Rev. A* 21(1980)1316.
12. DAVIS, J. and BLAHA, M. : *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 27(1982)307.
13. GRIEM, H.R. : *Phys. Rev. A* 27(1983)2566.
14. KOSTERLITZ, J.M. and THOULESS, D.J. : *J. Phys. C* 6(1973)181.
15. GOMBERT, M.M. : Thèse d'Etat, Univ. Paris-Sud Orsay, 1981.
16. MESSIAH, A. : *Mécanique Quantique* (Dunod, Paris) 1959.
17. VERNER, J.H. : *Siam J. Numer. Anal.* 15 (1978) 772.
18. LAM, C.S. and VARSHNI, Y.P. : *Phys. Rev. A* 4 (1971) 1875.
19. GREENE, R.L. and ALDRICH, C. : *Phys. Rev. A* 14 (1976) 2363.
20. TRUHLAR, D.G. : *Journal of comput. phys.* 10 (1972) 123.
21. HARTREE, D.R. : *The calculation of atomic structures* (Wiley and sons) 1957.
22. COOLEY, J.W. : *Math. Comm.* 15 (1961) 363.  
JARMAN, W.L. : *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 11 (1971) 421.
23. ROGERS, F.J. and GRABOSKE, H.C. and HARWOOD, D.J. : *J. Phys. A* 1 (1970) 1577.
24. DURAND, E. : *Solutions numériques des équations algébriques T.2* (MASSON) 1972.