

Université de Montréal

Détermination d'une équation d'état moderne du noyau liquide/solide d'une étoile naine  
blanche

par

Agis Kitsikis

Département de physique

Faculté des arts et des sciences

Mémoire présenté à la Faculté des études supérieures  
en vue de l'obtention du grade de  
Maître ès sciences (M.Sc.)  
en physique

Avril, 2004

QC

3

U54

2004

v. 009

**Direction des bibliothèques**

**AVIS**

L'auteur a autorisé l'Université de Montréal à reproduire et diffuser, en totalité ou en partie, par quelque moyen que ce soit et sur quelque support que ce soit, et exclusivement à des fins non lucratives d'enseignement et de recherche, des copies de ce mémoire ou de cette thèse.

L'auteur et les coauteurs le cas échéant conservent la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent ce document. Ni la thèse ou le mémoire, ni des extraits substantiels de ce document, ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans l'autorisation de l'auteur.

Afin de se conformer à la Loi canadienne sur la protection des renseignements personnels, quelques formulaires secondaires, coordonnées ou signatures intégrées au texte ont pu être enlevés de ce document. Bien que cela ait pu affecter la pagination, il n'y a aucun contenu manquant.

**NOTICE**

The author of this thesis or dissertation has granted a nonexclusive license allowing Université de Montréal to reproduce and publish the document, in part or in whole, and in any format, solely for noncommercial educational and research purposes.

The author and co-authors if applicable retain copyright ownership and moral rights in this document. Neither the whole thesis or dissertation, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms, contact information or signatures may have been removed from the document. While this may affect the document page count, it does not represent any loss of content from the document.

Université de Montréal  
Faculté des études supérieures

Ce mémoire intitulé:

Détermination d'une équation d'état moderne du noyau liquide/solide d'une étoile naine  
blanche

présenté par:

Agis Kitsikis

a été évalué par un jury composé des personnes suivantes:

Pierre Bergeron, président-rapporteur  
Gilles Fontaine, directeur de recherche  
Pierre Brassard, membre du jury



Mémoire accepté le: \_\_\_\_\_

# Sommaire

Les naines blanches représentent la phase finale de l'évolution stellaire pour la majorité des étoiles. Une naine blanche typique consiste en un noyau de température presque constante qui contient plus de 99% de la masse totale, entouré d'une mince enveloppe opaque.

L'évolution d'une naine blanche est un problème de refroidissement qui peut être séparé en deux parties: l'étude de l'enveloppe stellaire nous permet de déterminer le taux de perte d'énergie, puis la compréhension des phénomènes présents dans le noyau, nous donne l'énergie thermique disponible. C'est l'*équation d'état* (en anglais *Equation Of State* ou EOS) du plasma complètement ionisé du noyau de l'étoile, composé d'ions et d'électrons, qui va décrire l'état thermodynamique et donc l'énergie disponible. Ce plasma peut être soit sous la forme liquide, soit sous la forme d'un solide cristallisé.

Pour déterminer l'état thermodynamique d'un système décrit par l'EOS, il faut calculer l'*énergie libre de Helmholtz*,  $F$ . Afin de bien caractériser les propriétés du noyau de l'étoile, les grandeurs physiques à déterminer sont l'énergie interne  $U$ , la pression  $P$ , les compressibilités à température et densité constantes  $\chi_\rho$  et  $\chi_T$ , ainsi que le gradient adiabatique  $\nabla_{ad}$ . Toutes ces grandeurs sont dérivables à partir de l'énergie libre. Ainsi, le calcul de l'EOS se résume à la détermination de l'énergie libre de Helmholtz et à ses dérivées.

$F$  est la somme de plusieurs termes qui tiennent compte de l'énergie cinétique (dans laquelle on inclut aussi l'énergie liée à la structure interne des particules s'il y a lieu) et de l'énergie potentielle du système. Dans le cas d'un plasma liquide, l'énergie potentielle est une énergie potentielle d'interaction entre les particules chargées, représentée par le modèle du *plasma à une composante* (en anglais *One Component Plasma* ou OCP), et l'énergie cinétique est celle des électrons et des ions, modélisés comme étant idéaux. Dans le cas du solide cristallisé,

l'énergie potentielle est donnée par l'énergie électrostatique du réseau cristallin cubique centré; quant à l'énergie cinétique, elle est toujours représentée par celle du gaz parfait pour les électrons à laquelle s'ajoute l'énergie cinétique des phonons du réseau cristallin pour les ions. A ces cinq termes on ajoute, un terme de radiation sous la forme d'un gaz parfait de photons, ainsi que quatre termes de correction pour tenir compte des déviations du comportement des gaz idéaux. Mon travail de recherche consiste à les déterminer tous.

Une EOS de Lamb (1974) est disponible, mais, à cause du fait que certains termes ont depuis été revus et corrigés dans les publications à ce jour pour tenir compte des progrès de la physique et des résolutions numériques, il n'existe pas de version moderne utilisable et prête à être incorporée dans les modèles évolutifs actuels. On s'attend à ce que ces modèles évolutifs de naines blanches, dans lesquels serait incluse l'EOS moderne du noyau, soient un outil cosmochronologique unique dans la communauté scientifique.

*Mots clés:*

naines blanches - équation d'état - plasma liquide/solide

# Abstract

White dwarf stars represent the endpoint of stellar evolution for the majority of stars. A typical white dwarf consists of a quasi-isothermal core containing more than 99% of the star's total mass and of a thin opaque envelope.

The evolution of a white dwarf is basically a cooling problem with two rather distinct parts: a good understanding of the envelope structure allows us to determine the rate at which thermal energy is transferred from the stellar core to the outside, and the detailed knowledge of the physical phenomena present in the core provides us with the available thermal energy. It is the *Equation Of State* (EOS) of the completely ionized plasma in the core of the star, composed of ions and electrons, that will characterize the thermodynamical state and therefore the available energy. This plasma can either be in a liquid or a solid crystallized form.

In order to define the thermodynamical state of a system described by the EOS, one needs to calculate *Helmholtz's free energy*,  $F$ . The physical quantities that need to be determined to further characterize the properties of the white dwarf's core are, the internal energy  $U$ , the pressure  $P$ , the compressibilities at constant temperature and constant density  $\chi_p$  et  $\chi_T$ , and the adiabatic gradient  $\nabla_{ad}$ . All these quantities can be derived from the free energy. Hence, the calculation of the EOS amounts to determining Helmholtz's free energy and its derivatives.

$F$  is the sum of many terms that account for the kinetic (in which we include the energy associated with the internal structure of the particles when appropriate) and potential energies of the system. In the case of a liquid plasma, the potential energy is that of the Coulomb interaction between charged particles as described by the *One Component Plasma* (OCP) model, and the kinetic energy is the kinetic energy of the electron and the ion ideal gases. In

the solid crystal phase, the potential energy is given by the electrostatic energy of the body centered cubic crystal lattice, while the kinetic energy is still given by that of the ideal gas for the electronic part to which is added the kinetic energy of the phonons of the crystal lattice for the ions. To these five terms, we add a term to account for the radiation, and four correction terms for a grand total of ten. My work consists in determining all these contributions.

An EOS by Lamb (1974) is available, but because some terms have since been corrected and improved in the recent literature in order to account for the progress in physics and in numerical resolutions, there is no modern version ready to be used and incorporated in current evolutionary models. It is believed that these evolutionary models of white dwarfs, in which the modern EOS of the core would be included, will be a unique cosmochronological tool in the scientific community.

*Subject headings:*

white dwarfs - equation of state - liquid/solid plasma



# *Table des matières*

Sommaire	i
Abstract	iii
Table des matières	v
Liste des figures	viii
Liste des tableaux	x
Remerciements	xi
<b>1 Introduction</b>	<b>1</b>
<b>2 L'équation d'état</b>	<b>6</b>
2.1 L'équation d'état en astrophysique . . . . .	6
2.1.1 Généralités sur les intérieurs stellaires . . . . .	7
2.1.2 Grandeurs thermodynamiques caractéristiques d'un système de particules	8
2.1.3 Les différents termes de l'énergie libre . . . . .	9
2.2 L'énergie libre d'un plasma coulombien typique du noyau d'une naine blanche .	12
2.2.1 Les différents termes . . . . .	12
2.2.2 Bilan: le travail qui est à faire . . . . .	15
<b>3 Les gaz parfaits</b>	<b>17</b>
3.1 Le gaz parfait d'électrons arbitrairement dégénérés et arbitrairement relativistes	18

3.1.1	L'énergie libre . . . . .	18
3.1.2	Les autres grandeurs thermodynamiques . . . . .	19
3.1.3	Calcul numérique des intégrales de Fermi-Dirac . . . . .	20
3.1.4	Le cas ultra-dégénéré . . . . .	23
3.2	Le gaz parfait d'ions classiques et non-relativistes . . . . .	26
3.2.1	L'énergie libre . . . . .	26
3.2.2	Les autres grandeurs thermodynamiques . . . . .	28
3.3	Gaz parfait de photons . . . . .	29
3.3.1	L'énergie libre . . . . .	29
3.3.2	Les autres grandeurs thermodynamiques . . . . .	30
3.4	Les énergies libres des trois gaz parfaits . . . . .	31
<b>4</b>	<b>Un plasma de Coulomb à très haute densité</b>	<b>32</b>
4.1	Caractéristiques de notre plasma de Coulomb . . . . .	33
4.1.1	Paramètre de corrélation . . . . .	33
4.1.2	Les naines blanches dans le plan $(T, \rho)$ . . . . .	34
4.1.3	Le modèle de l'OCP . . . . .	37
4.2	La phase liquide . . . . .	42
4.2.1	Première approche . . . . .	42
4.2.2	Contributions électroniques . . . . .	43
4.2.3	Contributions ioniques . . . . .	48
4.2.4	Les résultats numériques . . . . .	50
4.2.5	Ce que nous allons utiliser . . . . .	52
4.3	Le réseau cristallin . . . . .	54
4.3.1	Description analytique d'un solide . . . . .	55
4.3.2	Les méthodes numériques . . . . .	60
4.3.3	Les divers résultats . . . . .	62
4.3.4	Ce que nous allons utiliser . . . . .	67
4.4	Version finale des corrections aux gaz parfait . . . . .	69
4.4.1	Dérivation des autres grandeurs thermodynamiques . . . . .	69

4.4.2	Les termes non-idéaux de l'EOS . . . . .	73
<b>5</b>	<b>Le produit final</b>	<b>75</b>
5.1	Le program <i>eos</i> . . . . .	76
5.1.1	Considérations pratiques: création de tables dans le plan $(T, \rho)$ . . . . .	76
5.1.2	Rappel: les énergies libres . . . . .	79
5.2	Les résultats obtenus . . . . .	80
5.2.1	Pression et énergie interne pour le plasma liquide . . . . .	81
5.2.2	Pression et énergie interne pour le plasma solide . . . . .	94
5.2.3	Version 2004 et version 1974 . . . . .	102
5.3	Projets futurs . . . . .	113
<b>6</b>	<b>Conclusion</b>	<b>116</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>118</b>

## Liste des figures

5.1	Séparation dans le plan $(T, \rho)$ des phases liquide et solide pour $\Gamma = 175$ , et représentation de modèles évolutifs de naines blanches. . . . .	78
5.2	Représentation 3D de la pression des gaz parfaits d'électrons, de photons et d'ions dans un plasma liquide de carbone pur. . . . .	82
5.3	Représentation 3D de $P_{id}^e + P_{id}^i + P^{ph} + P_{ex}^i$ , pour un plasma liquide de carbone pur . . . . .	84
5.4	Comportement des deux termes ( $\propto \Gamma^2$ et $\propto \Gamma^4$ ) de la correction quantique en fonction de $\Gamma$ . . . . .	85
5.5	Représentation 3D de $P_{id}^e + P_{id}^i + P^{ph} + P_q^i$ , en incluant les deux termes ( $\propto \Gamma^2$ et $\propto \Gamma^4$ ) de la correction quantique, pour un plasma liquide de carbone pur. 86	86
5.6	Effet du terme quantique modifié sur les contributions $P_{id}^e + P_{id}^i + P^{ph} + P_q^i + P_{ex}^i$ à la pression totale pour un plasma liquide de carbone pur . . . . .	88
5.7	Réprésentation 3D de la pression d'un plasma liquide de carbone pur d'après la nouvelle version de l'EOS. . . . .	89
5.8	Réprésentation 3D de l'énergie interne d'un plasma liquide d'oxygène pur d'après la nouvelle version de l'EOS. . . . .	92
5.9	Représentation 3D des effets sur la pression idéale de $P_{Mad}^i$ et de $P_{an}^i$ pour un plasma solide de carbone pur . . . . .	95
5.10	Comportement de la pression provenant de la correction anharmonique du cristal en fonction de $\Gamma$ . . . . .	96
5.11	Réprésentation 3D de la pression d'un plasma solide de carbone pur d'après la nouvelle version de l'EOS. . . . .	97

5.12	Réprésentation 3D de l'énergie interne d'un plasma solide d'oxygène pur d'après la nouvelle version de l'EOS. . . . .	100
5.13	Chaleur spécifique du terme harmonique des phonons: Lamb (1974) et Chabrier (1993) . . . . .	105
5.14	Chaleur spécifique du terme harmonique des phonons: Lamb (1974), Chabrier (1993) et approximation de Debye . . . . .	106
5.15	Chaleur spécifique du terme harmonique des phonons - Lamb (1974) et Chabrier (1993) - et du gaz parfait d'électrons . . . . .	107
5.16	Couverture de l'EOS dans le plan $(T, \rho)$ pour un plasma de carbone pur - version de Lamb/version moderne. . . . .	110
5.17	Réprésentation 3D de la différence de pression pour un plasma liquide de carbone pur entre la nouvelle et l'ancienne version de l'EOS . . . . .	111
5.18	Réprésentation 3D de la différence de pression pour un plasma solide de carbone pur entre la nouvelle et l'ancienne version de l'EOS . . . . .	112

## *Liste des tableaux*

5.1	Contributions des divers termes de l'EOS à la pression totale d'un plasma liquide de carbone pur. . . . .	90
5.2	Contributions des divers termes de l'EOS à l'énergie interne totale d'un plasma liquide d'oxygène pur. . . . .	93
5.3	Contributions des divers termes de l'EOS à la pression d'un plasma solide de carbone pur. . . . .	98
5.4	Contributions des divers termes de l'EOS à l'énergie interne totale d'un plasma solide d'oxygène pur. . . . .	101

# Remerciements

Pour m'avoir enseigné trois excellents cours d'astrophysique, un domaine qui était alors nouveau pour moi, je souhaite remercier François Wesemael et Pierre Bergeron.

Je suis aussi reconnaissant envers Pierre Brassard pour son aide et son soutien technique, lorsque j'en avais le plus besoin, durant les derniers mois d'achèvement de mon projet.

Pour m'avoir *enduré* pendant deux années à Montréal, je désire également donner mes remerciements à tous mes compagnons étudiants du bureau, *Scooby-Doo*, *Elvis*, *Pâtresse*, *Dilbert*, *Bûcheron*, *l'autre Grec*, Steve et Caroline, avec qui j'ai passé de bons moments.

Enfin, je souhaite remercier Tarik et Alex pour la correction finale du mémoire.

Cependant, c'est à Gilles Fontaine, mon directeur de recherche, que je voudrais par dessus tout exprimer ma reconnaissance pour son inspiration, ses explications limpides, la patience dont il a fait preuve devant mes questions multiples, ses commentaires précieux ainsi que pour son financement qui m'ont permis, de me lancer dans ce projet, et de le mener à bien.

# Chapitre 1

## Introduction

Les naines blanches sont des étoiles vieilles, caractérisées par une masse comparable à celle du soleil et une taille de dimension planétaire. Leur nature compacte est à l'origine de densités moyennes ainsi que de gravités de surface de quelques ordres de grandeur plus élevés que pour les étoiles normales. Elles représentent la phase finale de l'évolution stellaire pour des étoiles dont la masse se situe environ entre  $0.08$  et  $8 M_{\odot}$ ; soit pour la grande majorité des étoiles. Il est très probable que 95% des astres de notre galaxie vont terminer leur vie sous la forme de naines blanches. Ainsi ces étoiles, non seulement au même titre que les étoiles à neutrons et que les trous noirs, représentent une phase finale de l'évolution stellaire, mais elles représentent la phase finale la plus commune.

La première naine blanche découverte a été *Sirius B*. Dès 1844, Friedrich Bessel, après une étude détaillée du mouvement propre de Sirius, prédit l'existence d'un compagnon autour de cette étoile. Mais ce n'est qu'en 1862, qu'Alvan Graham Clark observa pour la première fois ce compagnon, d'une luminosité dix mille fois plus faible que Sirius A, soit  $1/360 L_{\odot}$ , et d'une masse de l'ordre de  $0.75$  à  $0.95 M_{\odot}$ . Cependant Walter Adams, à la surprise générale, mesure en 1914 une température d'environ 8000 K pour Sirius B, valeur presque équivalente à celle de son compagnon plus brillant. En utilisant la loi de rayonnement du corps noir, un rayon d'environ 18 800 km, soit la taille d'une planète comme Uranus, en fut déduit. On se trouvait donc en présence d'un astre dont la densité moyenne, de valeur  $10^5 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$  était beaucoup plus élevée que celle des autres étoiles. Enfin, trois quart de siècle après la prédiction de son



existence, au milieu des années 1920, un autre physicien R. H. Fowler explique, en utilisant les principes de la toute nouvelle théorie quantique, formulée par Dirac, la raison d'être d'un tel astre.

Les étoiles existent grâce à l'équilibre stable entre la force de gravité et la pression interne. Dans le cas des étoiles ordinaires, c'est-à-dire celles qui se trouvent sur la séquence principale, la pression interne provient de l'énergie thermique des ions et des électrons. Une étoile de masse initiale inférieure à  $8 M_{\odot}$ , ayant quitté la séquence principale, qui épuise ses réserves centrales de carburant nucléaire, se trouve dans une situation où la pression interne ne peut contrer la force de gravité: le noyau se contracte alors et les couches externes sont expulsées sous forme de vent stellaire. Il en résulte une nébuleuse planétaire laissant en son centre, un rémanent de même dimension qu'une planète avec une masse d'environ  $0.6 M_{\odot}$ . Cette période dans la vie d'une étoile correspond au moment où celle-ci quitte la branche asymptotique des géantes. La contraction de ce rémanent, future naine blanche, se termine lorsque la pression interne est assez élevée pour contrecarrer la force de gravité. Cette nouvelle pression interne est d'une nature autre que thermique; il s'agit d'une pression d'origine *quantique* créée par les fermions dégénérés. Ce type de phénomène est présent dans les étoiles à neutrons, phase stellaire finale d'astres de masse initiale plus élevée que  $8 M_{\odot}$ , et les naines blanches. Dans le cas des naines blanches, les fermions qui contribuent à cette pression quantique sont les électrons. Une fois la contraction arrêtée, l'astre consiste en un noyau, composé majoritairement de carbone et d'oxygène (mais ayant aussi des traces d'éléments tels le néon et le fer) totalement ionisés, et d'une fine enveloppe d'hydrogène et d'hélium. Après avoir évolué pendant quelques millions d'années, le refroidissement progressif du coeur chaud de l'étoile est la seule source d'énergie disponible. Ainsi l'étoile va voir sa luminosité diminuer en se refroidissant progressivement jusqu'à l'équilibre avec le milieu extérieur.

Les conditions régnant à l'intérieur d'une naine blanche, en excluant celles présentes dans les étoiles à neutrons et les trous noirs, sont les conditions physiques des plus extrêmes que l'on puisse imaginer et sont inaccessibles dans un laboratoire terrestre.

Ainsi des astres que l'on retrouve abondamment dans l'univers en tant que phase finale stellaire la plus commune, nous ouvrent, au travers de l'étude de la lumière qu'ils émettent,

une fenêtre sur un laboratoire où existent des conditions physiques des plus exotiques qui soient.

L'intérieur d'une naine blanche, à peu de choses près, est un milieu complètement ionisé: les particules présentes sont les photons, les électrons, et les noyaux de carbone et d'oxygène. Les conditions de densité extrême et de température qui y règnent sont telles que les électrons peuvent être dégénérés; les ions par contre, à cause de leur masse beaucoup plus élevée, ne le sont pas. La pression interne de l'étoile étant de nature quantique, l'astre est alors essentiellement supporté par la pression des électrons. D'autre part, une contraction gravitationnelle négligeable et l'absence de réactions nucléaires font en sorte que la seule source d'énergie disponible est l'énergie thermique provenant des électrons et des ions. Cependant, les électrons étant fortement dégénérés, ils ne contribuent que très peu au réservoir thermique, et c'est donc les ions qui vont être responsables de fournir cette énergie qui ne représente que 1% de l'énergie libérée par l'étoile lorsqu'elle se trouvait sur la séquence principale; mais qui est suffisante pour entretenir une luminosité entre  $10^{-2}$  et  $10^{-4} L_{\odot}$  pendant plusieurs milliards d'années.

Les propriétés mécaniques et thermiques sont ainsi presque complètement séparées. Un modèle simple de naine blanche peut être exposé de la façon suivante: les électrons dégénérés supportent l'étoile et créent un noyau isotherme d'ions qui jouent le rôle d'un réservoir d'énergie thermique d'où provient la luminosité de l'étoile. Une mince couche enveloppe ce noyau. Le transport d'énergie s'y fait par les électrons, les ions et les photons mais de façon inefficace et ne laisse donc s'échapper l'énergie des ions du centre que très lentement. L'évolution d'une naine blanche est alors simplement un problème de refroidissement qui peut être séparé en deux parties distinctes:

- l'étude de l'enveloppe stellaire nous permet de déterminer le taux avec lequel l'énergie thermique est transportée du coeur vers le milieu extérieur
- puis la compréhension des phénomènes présents au centre, nous donne l'énergie thermique disponible.

Dans ce mémoire, l'intérêt va être porté sur le noyau de la naine blanche. L'étude de l'enveloppe, qui est d'ailleurs beaucoup plus complexe, ne sera pas traitée. Comprendre les divers

mécanismes présents au centre de l'étoile afin de bien caractériser l'état thermodynamique de la matière revient à calculer l'équation d'état (en anglais *Equation Of State* ou EOS) du noyau de l'étoile qui, elle, déterminera l'état thermodynamique de l'intérieur. C'est ce que je me propose de faire.

Dans un premier temps, le chapitre 2 va introduire les concepts nécessaires et la terminologie adéquate afin de pouvoir étudier l'EOS astrophysique, puis les chapitres 3 et 4 vont traiter des différents termes présents dans l'équation d'état. Concrètement, dans le chapitre 3 nous allons dériver les relations des termes d'énergie correspondant à un modèle de gaz parfait des particules. Les termes qui se rapportent à un modèle non-idéal, c'est à dire avec une énergie potentielle non nulle sont évalués au chapitre 4. Enfin, le chapitre 5 présente la motivation principale de ce travail de recherche, le programme *eos* écrit en FORTRAN, qui en se fondant sur les dérivations des deux chapitres précédents, va calculer de façon précise les fonctions thermodynamiques de pression et d'énergie interne.

Avant d'exposer la théorie et de présenter notre travail, quelques précisions sont nécessaires. La détermination de l'EOS du coeur d'une naine blanche, traitée dans ce mémoire, n'est en aucun cas un travail original. Elle a été déterminée à plusieurs reprises par divers scientifiques de façon complète ou partielle. Dans sa thèse de doctorat, Lamb (1974) donne une explication détaillée de cette EOS. D'autre part, plusieurs articles vont traiter séparément, soit des phénomènes physiques présents dans le noyau ainsi que des théories qui permettent de les comprendre et qui correspondent à des termes spécifiques de l'EOS, soit de résolutions numériques améliorées nécessaires dans le calcul de l'EOS. Enfin une équation, plus moderne, développée par Chabrier et Segretain (1994) est aussi disponible, bien qu'elle ne soit valide que pour des intervalles limités de température et de densité. Cependant il n'existe pas actuellement d'EOS complète et mise à jour qui pourrait être utilisée dans nos recherches en l'incorporant dans les modèles évolutifs du groupe des naines blanches de l'Université de Montréal.

En ce qui nous concerne, l'EOS présentée dans ce mémoire est moderne et complète dans le sens où il s'agit d'une synthèse globale du bon travail effectué à ce jour sur le sujet par divers scientifiques et dont nous avons également étendu le domaine de validité sur une grande portion du plan température-densité, caractéristique nécessaire pour l'utilisation comme base

de nos modèles évolutifs. Ceux-ci seront alors un outil cosmochronologique unique dans la communauté scientifique. Ainsi donc, outre ce travail de synthèse, qui en plus de son intérêt scientifique se révèle être aussi d'une grande utilité pédagogique pour l'auteur dans le but de mieux comprendre la physique présente au coeur d'une naine blanche, la création du programme *eos* issu de cette étude théorique constitue un élément important du travail qui a été fait. Cela étant dit, commençons.

## Chapitre 2

# L'équation d'état

### 2.1 L'équation d'état en astrophysique

Généralement, dans les intérieurs stellaires, la matière est sous la forme d'un plasma, c'est à dire un gaz fortement ionisé. En tenant compte du champ de radiation, les particules qui y sont présentes et qui sont importantes pour *déterminer l'état thermodynamique* de l'étoile, sont les ions, les électrons et les photons.

Souvent, lorsque l'on parle d'*équation d'état*, la première chose qui nous vient à l'esprit est l'équation des gaz parfaits, soit  $PV=NkT$ , ou l'équation de Van der Waals, c'est à dire  $(P + \frac{aN^2}{V^2})(V - Nb) = NkT$ , ou encore d'autres équations typiques. Ces équations que l'on retrouve fréquemment, sont représentatives des cas les plus simples qui relient au travers d'une équation, la pression  $P$  d'un système au volume  $V$ , au nombre de particules  $N$  et à la température  $T$ . Ainsi, lorsque l'on pense à EOS, on y associe souvent une relation de la forme  $P=P(a,b,c)$ , où  $a$ ,  $b$  et  $c$  sont des grandeurs thermodynamiques du système. Toutefois, une explication plus juste et plus fondamentale de l'EOS peut se résumer de la façon suivante: *c'est une relation liant entre elles les grandeurs thermodynamiques caractéristiques d'un système thermodynamique afin de définir son état macroscopique*. Ces grandeurs thermodynamiques peuvent varier. Typiquement parmi elles on retrouve, la pression  $P$ , la température  $T$ , la densité  $\rho$ , le volume  $V$ , l'énergie interne  $U$ , le nombre de particules  $N$  et bien d'autres. Cependant, elles sont toutes dérivables à partir du potentiel thermodynamique du système, qui lui dépend

de l'ensemble statistique de particules microscopiques considéré pour le décrire. Ainsi calculer l'EOS d'un système de particules revient à *déterminer son potentiel thermodynamique* à l'intérieur d'un ensemble statistique judicieusement choisi. Et ce potentiel va être fonction d'un certain nombre de grandeurs thermodynamiques caractéristiques. Une excellente explication de l'EOS astrophysique, dont ce qui suit dans ce chapitre n'est qu'un bref résumé, est donnée dans des notes de cours de mécanique statistique donnée à l'Université de Montréal par Fontaine (2003).

### 2.1.1 Généralités sur les intérieurs stellaires

A cause de la densité élevée du plasma stellaire, les collisions entre particules sont suffisamment fréquentes pour qu'un équilibre thermodynamique soit établi localement dans le gaz; le milieu est alors complètement thermalisé. Cela revient concrètement à dire que l'intervalle de temps entre deux collisions est beaucoup plus petit que la période sur laquelle on peut faire une mesure. De plus, les distances stellaires typiques, telles la hauteur caractéristique de pression, la hauteur caractéristique de densité et la hauteur caractéristique de température sont beaucoup plus grandes que les libres parcours moyens des particules. L'intérêt de ce qui précède est le suivant; sous de telles conditions, l'*équilibre thermodynamique local* (ETL) est valide et on peut se servir des outils de la physique statistique à l'équilibre.

L'état thermodynamique d'un intérieur stellaire se décrit en termes de deux composantes additives: le gaz de photons, et le gaz d'électrons et d'ions. Pour la composante radiative, l'EOS découle directement de l'étude quantique d'un gaz parfait de photons. Dans la majorité des cas, pour les étoiles de la séquence principale, l'EOS qui décrit l'état thermodynamique de la matière est aussi relativement simple à déterminer car le gaz de particules matérielles est considéré comme étant *parfait, classique et non-relativiste*.

En effet, on considère fréquemment la situation suivante. La densité du gaz de particules est assez élevée pour thermaliser le milieu, mais suffisamment faible pour que l'énergie potentielle du système (énergie électrostatique due à l'interaction de Coulomb) soit beaucoup plus petite que l'énergie cinétique moyenne des particules, ainsi le gaz est considéré comme étant *parfait*. La densité est également suffisamment faible pour que la longueur d'onde de de Broglie d'une



particule matérielle, c'est à dire sa dimension quantique, soit beaucoup plus petite que la distance moyenne entre les particules. On parle alors d'un gaz *classique* (ou *non-dégénéré*) qui obéit à la statistique de Maxwell-Boltzmann. Enfin l'énergie cinétique moyenne d'une particule matérielle est beaucoup plus petite que son énergie au repos, il s'agit donc d'une particule *non-relativiste*.

Cependant dans le cas spécifique de l'intérieur d'une naine blanche, les conditions de densité très élevée et de pression sont telles que, d'une part, l'énergie potentielle d'interaction va devoir être prise en compte et les gaz n'étant plus parfaits il va falloir modifier l'EOS, et d'autre part, bien que le gaz d'ions va toujours rester classique et non-relativiste, le gaz parfait d'électrons pourra être dégénéré et relativiste, et obéira donc à la statistique de Fermi-Dirac. Ainsi la détermination de l'EOS se complique considérablement.

### 2.1.2 Grandeurs thermodynamiques caractéristiques d'un système de particules

Comme on l'a vu précédemment, calculer l'EOS d'un système de particules revient à déterminer son potentiel thermodynamique en fonction de grandeurs thermodynamiques caractéristiques pour un ensemble statistique choisi. Etant donné que dans notre cas (plasmas stellaires), les variables naturelles de notre système de particules sont la température  $T$ , le nombre de particules  $N$  et le volume  $V$ , notre choix est immédiatement porté sur un ensemble privilégié, l'ensemble *canonique*. Dans cet ensemble le potentiel thermodynamique approprié est l'*énergie libre de Helmholtz*,  $F$ . Déterminer  $F$  est donc la façon la plus générale de caractériser l'état thermodynamique de notre système. Ce potentiel thermodynamique s'obtient par la relation fondamentale de la physique statistique qui relie la physique macroscopique ( $F$ ) à la physique microscopique ( $Z$ ):

$$F(N, V, T) = -kT \ln Z(N, V, T) \quad (2.1)$$

où  $Z$  est la *fonction de partition* qui est en fait une sommation sur tous les états quantiques du système et tient compte de la nature des particules, c'est à dire des bosons ou des fermions,

et où  $k$  est la constante de Boltzmann ( $k=1.3806 \cdot 10^{-16}$ erg·K<sup>-1</sup>).

Il est d'usage en astrophysique d'utiliser la densité de matière,  $\rho$  en g·cm<sup>-3</sup> à la place du volume  $V$ . Ainsi,  $F(N,V,T)$  devient  $F(N,\rho,T)$ .

Toutes les grandeurs physiques fondamentales, caractéristiques du système, peuvent être déterminées à partir de  $F$ . En effet l'entropie  $S$ , l'énergie interne par gramme de matière  $U$ , la pression  $P$ , les compressibilités à densité et température constantes  $\chi_\rho$  et  $\chi_T$ , la chaleur spécifique  $C_V$ , et le gradient adiabatique  $\nabla_{ad}$  sont donnés en ordre par les relations suivantes:

$$S = - \left. \frac{\partial F(N, V, T)}{\partial T} \right|_{N, V} \quad (2.2)$$

$$E = F + TS \Rightarrow U(N, \rho, T) = \frac{E}{\rho V} \quad (2.3)$$

$$P = - \left. \frac{\partial F(N, V, T)}{\partial V} \right|_{N, T} \Rightarrow P = P(N, \rho, T) \quad (2.4)$$

$$\chi_T = \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln T} \right|_\rho \quad (2.5)$$

$$\chi_\rho = \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho} \right|_T \quad (2.6)$$

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_\rho, Q = \frac{\chi_T}{\chi_\rho}, C_P = C_V + \frac{PQ\chi_T}{\rho T} \quad (2.7)$$

$$\nabla_{ad} = \frac{PQ}{\rho T C_P} \quad (2.8)$$

### 2.1.3 Les différents termes de l'énergie libre

Nous venons d'introduire l'énergie libre qu'il faut déterminer pour notre système de particules, sans cependant préciser de façon détaillée les contributions à  $F$  de chaque type de particule, ainsi que les contributions des divers degrés de liberté pour chaque particule. Nous allons le faire en spécifiant l'origine des différents termes.

Les particules du système, soient les électrons, les ions et les photons, possèdent toutes trois types de degrés de liberté différents:

- les degrés de liberté de translation associés à l'énergie cinétique des particules



- les degrés de liberté associés à la structure interne des particules
- les degrés de liberté associés à l'énergie potentielle d'interaction entre les particules.

De façon exacte, il y a généralement interaction entre ces différents degrés de liberté, et par conséquent notre problème (qui consiste à segmenter de façon rigoureuse l'énergie libre en termes bien précis) est en pratique impossible à résoudre. En effet, dans le formalisme de la mécanique quantique on peut toujours écrire l'hamiltonien total du système sous la forme d'une somme d'hamiltoniens qui correspondent aux divers degrés de liberté, mais ces hamiltoniens ne commutent pas. Ainsi, l'approche habituelle utilisée est la suivante: on fait l'approximation que pour un type de particule donné, la fonction de partition du système peut être séparée en un produit de facteurs qui sont reliés aux trois degrés de liberté des particules, puis on multiplie le tout par d'autres facteurs pour prendre en compte les corrections qui proviennent de l'interaction entre les divers degrés de liberté. Il y a principalement, les autres sont négligées, deux types de correction à apporter lors d'une description exacte, c'est à dire quantique du système:

- les *termes d'échange*, qui correspondent aux effets produits sur les termes d'énergie interne et potentielle par les propriétés de symétrie de la fonction d'onde totale d'un sous-système (bosons ou fermions) de particules identiques. En effet, dans le formalisme de la mécanique quantique, la fonction d'onde est symétrique pour les bosons, et anti-symétrique pour les fermions. (De façon similaire le phénomène de dégénérescence est dû à ces effets quantiques relativement au degrés de liberté de translation)
- les *effets quantiques*, nom globalement donné à une série d'effets qui provient de la non-commutativité des composantes de l'hamiltonien total. Ces effets deviennent importants à des densités relativement grandes.

Ainsi, en faisant cette approximation que la fonction de partition  $Z$  est séparable, on peut écrire  $Z$  pour un type de particule donnée de la façon suivante (les trois points de suspension représentent les corrections d'ordre supérieur qui sont négligés):

$$Z = Z_l Z_i Z_p Z_e Z_q \dots \quad (2.9)$$

où on a,  $t$  pour translation,  $i$  pour degrés de liberté interne,  $p$  pour l'énergie potentielle entre les particules,  $e$  pour les effets d'échange et enfin  $q$  pour les effets quantiques.

Au lieu d'écrire la fonction de partition on peut aussi écrire l'énergie libre:

$$F = F_t + F_i + F_p + F_e + F_q \dots \quad (2.10)$$

L'approche que nous allons utiliser pour déterminer  $F$  à partir de ces différents termes est la suivante. Si l'on considère, dans un premier temps, des particules isolées sans aucune interaction entre elles alors les termes  $F_t$  et  $F_i$  à eux seuls contribuent à l'énergie libre totale; il s'agit alors d'un gaz parfait pour lequel on peut facilement calculer l'énergie libre que ça soit pour des électrons, des ions ou des photons. Par la suite nous allons examiner les effets dus à l'interaction entre les particules qui correspondent au terme  $F_p$ . L'interaction dominante dans un plasma stellaire est l'interaction de Coulomb entre les particules chargées, et c'est celle-là que nous allons traiter comme déviation sur le comportement thermodynamique du système par rapport au gaz parfait. Enfin, les termes de corrections  $F_e$  et  $F_q$  seront ajoutés en temps que perturbations d'ordre supérieur. Nous sommes donc en présence de trois degrés d'approximation: a) le gaz parfait, b) l'énergie potentielle, c) le premier ordre des termes de corrections. Il faut préciser que les photons n'étant pas des particules chargées, n'interagissent pas entre eux et on peut toujours les considérer comme formant un gaz parfait. Ainsi, l'énergie libre correspondant à la radiation est simplement la somme des termes de l'énergie cinétique et de l'énergie correspondant à la structure interne des photons. On peut donc déterminer une énergie libre totale, scindée comme en 2.10, pour chaque type de particule, soit  $F_e$  pour les électrons,  $F_i$  pour les ions et  $F_{rad}$  pour les photons.

$$F_e = F_{e_t} + F_{e_i} + F_{e_p} + F_{e_e} + F_{e_q} \dots \quad (2.11)$$

$$F_i = F_{i_t} + F_{i_i} + F_{i_p} + F_{i_e} + F_{i_q} \dots \quad (2.12)$$

$$F_{rad} = F_{rad_t} + F_{rad_i} \quad (2.13)$$

Après cette exposition détaillée de l'approche que nous allons suivre en séparant le calcul de l'énergie libre en plusieurs sous-étapes, étudions concrètement le cas qui nous intéresse,

l'intérieur d'une naine blanche.

## 2.2 L'énergie libre d'un plasma coulombien typique du noyau d'une naine blanche

### 2.2.1 Les différents termes

Dans le cas des intérieurs des naines blanches le milieu est ionisé à un degré tellement élevé que l'on considère l'ionisation comme étant totale: on néglige donc d'autres interactions qui peuvent devenir importantes dans les gaz neutres et partiellement ionisés comme les interactions répulsives à courte portée dues aux dimensions finies des atomes et des ions, et les interactions attractives de type Van der Waals pour les particules neutres. Notre décision de prendre en compte simplement l'interaction de Coulomb en 2.1.3 est donc d'autant plus justifiée dans la situation qui nous intéresse. Ainsi, seules les interactions de Coulomb considérées comme des perturbations au gaz parfait vont être prises en considération lors du calcul de  $F_p$ .

Cependant, il est ici nécessaire d'apporter quelques précisions dans le but de clarifier davantage notre approche. En raison des conditions de température et de densité à l'intérieur d'une naine blanche, le plasma va se trouver, en fonction de la profondeur et en fonction de l'âge de l'astre (c'est à dire concrètement en fonction de son degré de refroidissement) dans un état différent, soit liquide soit solide. En effet, au fur et à mesure que la température va baisser, les noyaux dépouillés vont avoir tendance à former un réseau cristallin solide modélisé comme un réseau cubique. Les électrons eux, étant moins massifs et dégénérés, vont rester mobiles et libres de circuler à l'intérieur de ce réseau. Ainsi dans le liquide on sera en présence d'électrons et de noyaux libres tandis que dans le cas solide le plasma sera formé d'électrons libres qui se déplacent et d'un réseau cristallin de noyaux. De plus, pour la partie cristallisée qui sera pauvre en photons, plus nombreux dans la phase liquide de température élevée, nous n'incluerons pas de terme radiatif  $F_{rad}$ . Il va donc falloir tenir compte de ces deux aspects différents du plasma dans le calcul de l'énergie libre totale.

D'emblée, les équations ci-dessous nous permettent de visualiser de façon schématique la répartition des différents termes de l'énergie libre que nous allons expliciter. Pour le plasma

liquide on a:

$$\begin{aligned}
 F_e &= \overbrace{F_{e_t} + F_{e_i}}^{F_{id}^e} + \overbrace{\begin{pmatrix} F_{e_x} + F_{e_i} \\ F_{e_p} \simeq 0 \end{pmatrix}}^{F_{ex}^i + F_{ie}^i} + \overbrace{\begin{pmatrix} F_z^e \\ F_{e_e} \end{pmatrix}}^{F_z^e} + \overbrace{\begin{pmatrix} F_q^i \\ F_{e_q} \simeq 0 \end{pmatrix}}^{F_q^i} \\
 F_i &= \overbrace{F_{i_t} + F_{i_i}}^{F_{id}^i} + \overbrace{\begin{pmatrix} F_{e_x} + F_{e_i} \\ F_{i_p} \end{pmatrix}}^{F_{ex}^i + F_{ie}^i} + \overbrace{\begin{pmatrix} F_z^e \\ F_{i_e} \simeq 0 \end{pmatrix}}^{F_z^e} + \overbrace{\begin{pmatrix} F_q^i \\ F_{i_q} \end{pmatrix}}^{F_q^i}
 \end{aligned}$$

$$F_{rad} = \underbrace{F_{rad_t} + F_{rad_i}}_{F^{ph}}$$

Et de façon similaire pour un plasma cristallisé:

$$\begin{aligned}
 F_e &= \overbrace{F_{e_t} + F_{e_i}}^{F_{id}^e} + \overbrace{\begin{pmatrix} F_{Mad}^i + F_{ie}^s \\ F_{e_p} \simeq 0 \end{pmatrix}}^{F_{Mad}^i + F_{ie}^s} + \overbrace{\begin{pmatrix} F_z^e \\ F_{e_e} \end{pmatrix}}^{F_z^e} + \overbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ F_{e_q} \end{pmatrix}}^0 \\
 F_i &= \overbrace{F_{i_t} + F_{i_i}}^{F_{id}^i} + \overbrace{\begin{pmatrix} F_{Mad}^i + F_{ie}^s \\ F_{i_p} \end{pmatrix}}^{F_{Mad}^i + F_{ie}^s} + \overbrace{\begin{pmatrix} F_z^e \\ F_{i_e} \simeq 0 \end{pmatrix}}^{F_z^e} + \overbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ F_{i_q} \end{pmatrix}}^0 \\
 &\quad \quad \quad \underbrace{F_{har}^i + F_{an}^i}
 \end{aligned}$$

Commençons par les termes cinétiques  $F_t$ , dans lesquels nous incluerons aussi les termes correspondant à la structure interne  $F_i$ . Pour les électrons, nous allons calculer l'énergie libre  $F_{id}^e$  pour un gaz parfait (idéal) d'électrons. Ce terme englobera donc  $F_{e_t}$  et  $F_{e_i}$ . L'expression de  $F_{id}^e$  sera valable pour le cas liquide ainsi que pour le cas solide puisque les électrons vont être toujours libres. Pour les ions, nous allons aussi calculer l'énergie libre d'un gaz parfait  $F_{id}^i$  mais elle sera valable seulement dans le cas liquide. Pour le cas solide, les termes de l'énergie libre pour les ions qui vont rendre compte de la combinaison des termes de l'énergie cinétique  $F_{i_t}$  et de l'énergie liée à la structure interne  $F_{i_i}$ , vont être les termes  $F_{har}^i$  et  $F_{an}^i$  qui représentent l'énergie cinétique de translation présente dans le réseau cristallin solide sous forme d'énergie cinétique de phonons. En effet, un développement en série autour des points d'équilibre (noeuds du réseau) nous donne comme premier terme non nul un terme quadratique, donc harmonique,  $F_{har}^i$ , et une série de termes non nuls d'ordre supérieur donc anharmonique,  $F_{an}^i$ .

La deuxième contribution importante à l'énergie totale est l'énergie potentielle. Celle-ci est constituée des deux termes  $F_{e_p}$  et  $F_{i_p}$  qui tiennent compte de l'interaction des ions et des

électrons. Cependant, il y a trois types d'interaction de Coulomb possibles: une interaction ion-électron, une ion-ion et une électron-électron. Dans le contexte du modèle du plasma à une composante (en anglais *One Component Plasma* ou OCP), où en première approximation la répulsion entre les charges opposées est modélisée par des particules positives baignant dans un fond négatif uniforme, nous allons aussi, à la deuxième étape de précision, négliger la répulsion de Coulomb des électrons entre eux ( $F_{ep} = 0$ ) devant la répulsion dominante qui existe entre les ions. Ainsi pour le plasma liquide nous allons globalement remplacer les deux termes  $F_{cp}$  et  $F_{ip}$ , par l'ensemble constitué de  $F_{ex}^i$  et  $F_{ie}^l$ . De ces deux derniers termes, l'énergie d'excès du mélange  $F_{ex}^i$ , représente l'interaction ion-ion et l'énergie de Thomas-Fermi  $F_{ie}^l$ , l'interaction ion-électron. Pour ce qui est du cas solide,  $F_{ep}$  et  $F_{ip}$  sont globalement remplacés par  $F_{Mad}^i$ , énergie électrostatique de Madelung du réseau cubique ainsi que  $F_{ie}^s$  (analogue solide de  $F_{ie}^l$ ).

Par la suite on ajoute nos deux autres termes restants, c'est à dire le terme quantique d'échange  $F_x^e$  pour les électrons (pour les cas liquide et solide) et le terme quantique ionique  $F_q^i$  (pour le cas liquide seulement, le modèle du cristal d'ions étant déjà quantique comme nous le verrons, il est inutile d'ajouter un terme  $F_q^i$ ). Ici il faut encore préciser deux choses. D'une part la contribution électronique au terme d'échange est dominante par rapport à la contribution ionique: ainsi même si rigoureusement  $F_x^e = F_{ee} + F_{ie}$ , en réalité nous avons  $F_x^e = F_{ee}$  puisque  $F_{ie} \simeq 0$ . D'autre part le terme  $F_q^i$ , est en fait seulement ionique, car ce type de contribution quantique pour les électrons est inclus dans le terme  $F_x^e$ .

Enfin on va aussi ajouter dans la phase liquide  $F^{ph}$  pour rendre compte de la contribution radiative à l'énergie totale. Ce dernier terme englobera la contribution cinétique et de structure interne des photons.

Finalement il s'agit aussi de préciser dans quel état se trouvent les particules pour lesquelles nous allons calculer les termes précédents. Les conditions de température et de densité sont telles, que nos trois types de particules vont se trouver dans des états différents. Concrètement, les électrons vont être selon les valeurs de  $T$  et de  $\rho$  arbitrairement dégénérés et arbitrairement relativistes. Les ions eux vont être simplement non-dégénérés et non-relativistes. Les photons seront évidemment relativistes et arbitrairement dégénérés.



### 2.2.2 Bilan: le travail qui est à faire

Ainsi, le but de ce mémoire énoncé dans l'introduction, qui est de comprendre les divers mécanismes présents au centre de l'étoile afin de bien caractériser l'état thermodynamique de la matière et par la suite de calculer l'EOS de celle-ci, revient concrètement à la chose suivante: déterminer les onze termes d'énergie libre vus précédemment. Après avoir calculé l'énergie libre totale, il suffira à l'aide des équations 2.2-2.8 de calculer les grandeurs thermodynamiques qui caractérisent le milieu.

Afin de structurer la tâche qui est devant nous, voici la liste des termes à déterminer:

- le terme  $F_{id}^e$  d'énergie cinétique pour le gaz d'électrons arbitrairement dégénérés et arbitrairement relativistes (cas liquide et solide)
- le terme  $F_{id}^i$  d'énergie cinétique pour le gaz parfait d'ions classiques et non-relativistes (cas liquide)
- les termes  $F_{har}^i$  et  $F_{an}^i$  d'énergie cinétique des phonons du réseau cristallin pour les ions classiques et non-relativistes (cas solide)
- le terme  $F_{ex}^i$  d'énergie d'excès du mélange des ions non-dégénérés et non-relativistes dans le modèle de l'OCP (cas liquide)
- le terme  $F_{ie}$  de Thomas-Fermi, correction apportée aux contributions d'énergie potentielle (deux termes différents pour les cas liquide et solide,  $F_{ie}^l$  et  $F_{ie}^s$ )
- le terme  $F_{Mad}^i$ : énergie de Madelung, pour l'énergie électrostatique du réseau cubique (cas solide)
- le premier terme de correction pour la description quantique du plasma, le terme d'échange des électrons  $F_x^e$  (cas liquide et solide)
- le deuxième terme de correction pour la description quantique ionique du plasma,  $F_q^i$  (cas liquide)
- $F^{ph}$ , terme pour le gaz parfait de photon (cas liquide)

Chaque fois qu'un terme est calculé, il va falloir évaluer les grandeurs thermodynamiques correspondant à celui-ci à l'aide des équations 2.2-2.8. Une fois les onze termes traités, il ne nous restera qu'à déterminer l'énergie libre totale du système donnée par les deux relations suivantes:

$$F_{liq} = F_{id}^e + F_{id}^i + F_{ex}^i + F_{ie}^l + F_x^e + F_q^i + F^{ph} \quad (2.14)$$

$$F_{sol} = F_{id}^e + F_{har}^i + F_{an}^i + F_{Mad}^i + F_x^e + F_{ie}^s \quad (2.15)$$

La dernière étape est de calculer les grandeurs thermodynamiques totales, c'est à dire  $P_{liq}$  et  $P_{sol}$ ,  $U_{liq}$  et  $U_{sol}$ ,  $\chi_{\rho(liq)}$  et  $\chi_{\rho(sol)}$ ,  $\chi_{T(liq)}$  et  $\chi_{T(sol)}$ ,  $C_{V(liq)}$  et  $C_{V(sol)}$  et enfin  $\nabla_{ad(liq)}$  et  $\nabla_{ad(sol)}$ . Comme la pression  $P$ , l'énergie  $U$  et la chaleur spécifique  $C_V$  (equations 2.3, 2.4, 2.7) sont données par des relations linéaires par rapport à l'énergie libre on va pouvoir écrire de façon générale pour un plasma liquide ou solide:

$$P_{liq/sol} = P_1 + P_2 + P_3 + P_4 + P_5 \dots \quad (2.16)$$

$$U_{liq/sol} = U_1 + U_2 + U_3 + U_4 + U_5 \dots \quad (2.17)$$

$$C_{V(liq/sol)} = C_{V1} + C_{V2} + C_{V3} + C_{V4} + C_{V5} \dots \quad (2.18)$$

Pour les compressibilités et pour le gradient adiabatique cependant les relations vont être un peu plus compliquées, soient:

$$\chi_{\rho(liq/sol)} = \frac{1}{P_{liq/sol}} (\chi_{\rho1} P_1 + \chi_{\rho2} P_2 + \chi_{\rho3} P_3 + \chi_{\rho4} P_4 + \chi_{\rho5} P_5 \dots) \quad (2.19)$$

$$\chi_{T(liq/sol)} = \frac{1}{P_{liq/sol}} (\chi_{T1} P_1 + \chi_{T2} P_2 + \chi_{T3} P_3 + \chi_{T4} P_4 + \chi_{T5} P_5 \dots) \quad (2.20)$$

$$\nabla_{ad(liq/sol)} = \frac{P_{liq/sol} Q_{liq/sol}}{\rho T C_{V(liq/sol)} + P_{liq/sol} Q_{liq/sol} \chi_{T(liq/sol)}} \quad (2.21)$$

$$\text{avec} \quad Q_{liq/sol} = \frac{\chi_{T(liq/sol)}}{\chi_{\rho(liq/sol)}} \quad (2.22)$$

Les deux chapitres qui suivent sont consacrés au calcul des termes dans les équations 2.14 et 2.15, ainsi que des grandeurs thermodynamiques qui en découlent. Les équations 2.14 - 2.22 vont être incluses dans le programme FORTRAN présenté dans le chapitre 5.

## Chapitre 3

# Les gaz parfaits

<sup>1</sup> D'après les principes fondamentaux de la physique moderne, la fonction d'onde de tout système de particules identiques doit nécessairement être soit symétrique soit anti-symétrique par rapport à l'échange de deux particules quelconques. Les particules qui forment un système dont la fonction d'onde est symétrique, sont appelées bosons, ont un spin entier et obéissent à la statistique de Bose-Einstein. Les autres, pour lesquelles la fonction d'onde du système est anti-symétrique, sont appelées fermions, ont un spin demi-entier et obéissent à la statistique de Fermi-Dirac. La mécanique quantique nous donne sous forme paramétrique la fonction de partition  $Z$  pour ces deux types de particule:

$$\ln Z = -\eta N + \sum_k \ln(1 \pm e^{\eta - \beta e_k})^{\pm 1} \quad (3.1)$$

$$N = \sum_k \frac{1}{e^{-\eta + \beta e_k} \pm 1} \quad (3.2)$$

où, le *signe -* correspond aux bosons, le *signe +* aux fermions,  $\beta = 1/kT$ . la sommation  $\sum_k$  se fait sur tous les états d'énergie  $e_k$  d'une particule, incluant les états d'énergie interne, et où  $\eta$  est une variable sans dimension appelée le paramètre de dégénérescence. Ainsi, d'un point de vue rigoureux, il y a donc deux types de particules, les bosons et les fermions qui obéissent à des statistiques différentes. Cependant lorsque les effets quantiques ne sont pas importants (cas classique), bosons et fermions ne sont pas considérés différents et une seule statistique

---

<sup>1</sup> voir notes de cours de Fontaine (2003) à l'Université de Montréal.



commune permet d'étudier les deux types de particules. Nous allons dans les trois parties de ce chapitre étudier respectivement trois particules différentes qui nous intéressent: les électrons qui sont des fermions, les ions qui vont être considérés d'un point de vue classique, et les photons qui sont des bosons.

### 3.1 Le gaz parfait d'électrons arbitrairement dégénérés et arbitrairement relativistes

#### 3.1.1 L'énergie libre

Considérons le cas d'un gaz parfait de fermions (*signe +* dans les equations 3.1 et 3.2). Un tel gaz constitué de  $N$  particules identiques dans un volume  $V$  à une température  $T$  est décrit par une fonction de partition  $Z$ , qui, on l'a vu, est définie de la façon suivante:

$$\ln Z = -\eta N + \sum_k \ln(1 + e^{\eta - \beta e_k}) \quad (3.3)$$

$$N = \sum_k \frac{1}{e^{-\eta + \beta e_k} + 1} \quad (3.4)$$

Ces résultats, dérivés à partir de la physique statistique, sont vrais pour tous les fermions; et en particulier pour les électrons qui ont un spin de  $1/2$ .

On peut apporter quelques modifications pour simplifier le calcul de  $Z$ . Premièrement, les états quantiques des électrons reliés à la translation ont un spectre d'énergie tellement dense que l'on peut remplacer les sommations dans les équations précédentes par des intégrales. Cette approximation peut être faite lorsque la longueur d'onde de de Broglie des électrons est beaucoup plus petite que la dimension du contenant ( $\sim V^{1/3}$ ). En pratique c'est toujours le cas. Deuxièmement, pour une particule arbitrairement relativiste libre dans une boîte, le nombre d'états d'énergie de translation avec une impulsion entre  $p$  et  $p + dp$  est donné par,  $\frac{V}{h^3} 4\pi p^2 dp$ . Cependant les électrons ont deux états de spin possibles pour une même énergie de translation et alors le nombre d'états d'énergie pour un électron d'impulsion entre  $p$  et  $p + dp$  devient:  $\frac{V}{h^3} 8\pi p^2 dp$ .

Ainsi la fonction de partition des électrons est finalement donnée sous forme paramétrique

de la façon suivante:

$$\ln Z = -\eta N + \int_0^\infty \ln(1 + e^{\eta - \beta e(p)}) \frac{V}{h^3} 8\pi p^2 dp \quad (3.5)$$

$$N = \int_0^\infty \frac{1}{1 + e^{-\eta + \beta e(p)}} \frac{V}{h^3} 8\pi p^2 dp \quad (3.6)$$

où  $e(p)$  est une fonction continue de  $p$ , soit  $e(p) = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2$ . Mais, à l'aide d'un choix judicieux de changement de variable  $x = \frac{e(p)}{kT}$  et  $\gamma = \frac{kT}{mc^2}$  et après quelques transformations mathématiques on peut récrire l'énergie libre de Helmholtz d'après l'équation 2.1 pour les électrons de la manière suivante:

$$F_{id}^e = \eta \gamma m c^2 N_{id}^e - \frac{V 8\pi \sqrt{2}}{h^3} m^4 c^5 \gamma^{5/2} [2/3 F_{3/2}(\eta, \gamma) + \gamma/3 F_{5/2}(\eta, \gamma)] \quad (3.7)$$

$$N_{id}^e = \frac{V 8\pi \sqrt{2}}{h^3} m^3 c^3 \gamma^{3/2} [F_{1/2}(\eta, \gamma) + \gamma F_{3/2}(\eta, \gamma)] \quad (3.8)$$

où les  $F_{i/2}$  sont des fonctions, appelées *intégrales de Fermi-Dirac généralisées*, données par (pour  $k > -1$ ):

$$F_k(\eta, \gamma) = \int_0^\infty \frac{(1 + \gamma x/2)^{1/2} x^k}{1 + e^{-\eta + x}} dx \quad (3.9)$$

### 3.1.2 Les autres grandeurs thermodynamiques

À présent puisque l'on a déterminé  $F_{id}^e$  il est facile, à l'aide des formules 2.2 à 2.8 du chapitre 2, de déterminer les autres grandeurs thermodynamiques. On obtient successivement:

$$P_{id}^e = \frac{V 8\pi \sqrt{2}}{3h^3} m^4 c^5 \gamma^{5/2} [2F_{3/2}(\eta, \gamma) + \gamma F_{5/2}(\eta, \gamma)] \quad (3.10)$$

$$U_{id}^e = \frac{V 8\pi \sqrt{2}}{\rho h^3} m^4 c^5 \gamma^{5/2} [F_{3/2}(\eta, \gamma) + \gamma F_{5/2}(\eta, \gamma)] \quad (3.11)$$

$$\chi_{\rho_{id}^e} = \frac{6(F_{1/2})^2 + \gamma F_{3/2}}{(F_{3/2} + \gamma F_{5/2}) \left( F_{-1/2} + 2\gamma F_{1/2} + \gamma \frac{\partial F_{3/2}}{\partial \eta} \Big|_T \right)} \quad (3.12)$$

$$\chi T_{id}^e = \frac{5F_{3/2} + 4\gamma F_{5/2} + 3(F_{1/2} + \gamma F_{3/2}) T \frac{\partial \eta}{\partial T} \Big|_n}{2F_{3/2} + \gamma F_{5/2}} \quad (3.13)$$

$$C_{v_{id}}^e = \frac{4\pi\sqrt{2}m^4c^5\gamma^{5/2}}{\rho h^3 T} \dots \dots \dots \left[ 5F_{3/2} + 4\gamma F_{5/2} + \gamma \frac{\partial F_{7/2}}{\partial \eta} + 3 \left( F_{1/2} + \gamma F_{3/2} + \gamma/3 \frac{\partial F_{5/2}}{\partial \eta} \right) T \frac{\partial \eta}{\partial T} \Big|_\rho \right] \quad (3.14)$$

$$\nabla_{ad_{id}}^e = \frac{2(F_{3/2} + \gamma/2 F_{5/2}) \left[ 5F_{3/2} + 4\gamma F_{5/2} + 3(F_{1/2} + \gamma F_{3/2}) T \frac{\partial \eta}{\partial T} \Big|_n \right] \dots}{\left[ 5F_{3/2} + 4\gamma F_{5/2} + 3(F_{1/2} + \gamma F_{3/2}) T \frac{\partial \eta}{\partial T} \Big|_n \right]^2 \left[ F_{-1/2} + 2\gamma F_{1/2} + \gamma \frac{\partial F_{3/2}}{\partial \eta} \Big|_T \right] \dots \dots \dots \left[ F_{-1/2} + 2\gamma F_{1/2} + \gamma \frac{\partial F_{3/2}}{\partial \eta} \Big|_T \right]}{\dots + 9(F_{1/2} + \gamma F_{3/2})^2 \left[ 5F_{3/2} + 4\gamma F_{5/2} + \gamma \frac{\partial F_{7/2}}{\partial \eta} + 3 \left[ F_{1/2} + \gamma F_{3/2} + \frac{\gamma}{3} \frac{\partial F_{5/2}}{\partial \eta} \right] T \frac{\partial \eta}{\partial T} \Big|_\rho \right]} \quad (3.15)$$

### 3.1.3 Calcul numérique des intégrales de Fermi-Dirac

Nous venons d'expliciter les relations pour les grandeurs thermodynamiques d'un gaz parfait d'électrons arbitrairement dégénérés et arbitrairement relativistes de façon exacte en les exprimant en fonction des intégrales de Fermi-Dirac (F-D) généralisées. Ainsi, tout le problème du calcul de ces grandeurs revient maintenant au calcul des intégrales,  $F_k(\eta, \gamma) = \int_0^\infty \frac{(1+\gamma x/2)^{1/2} x^k}{1-e^{-\eta+x}} dx$ . Cependant ces intégrales impropres ne peuvent être déterminées analytiquement et doivent donc être évaluées numériquement.

D'un point de vue général, les fonctions de F-D ont toujours été utilisées lors de la description des propriétés électroniques de la matière, que l'on retrouve souvent en astrophysique et en physique de la matière condensée. Il ne s'agit donc pas d'un ennui scientifique récent. Durant plusieurs années, une approche courante pour le calcul de ces intégrales avait été l'utilisation de tables précalculées qui contenaient cependant deux désavantages. Une première limitation existait au niveau de la variable  $\gamma$  et de l'indice  $k$ . En effet les valeurs dans les tables étaient seulement calculées pour quelques valeurs de  $k$ , communément  $-\frac{1}{2}$ ,  $\frac{1}{2}$  et  $\frac{3}{2}$ . Or,

souvent, dans notre cas par exemple pour les équations 3.12 à 3.17, les indices  $\frac{5}{2}$  et  $\frac{7}{2}$  sont aussi requis. Pour ce qui est de la variable  $\gamma$ , fréquemment on ne traitait que le cas limite classique non-relativiste ( $\gamma=0$ ). Enfin la précision des calculs, limitée à quelques décimales, constituait le second obstacle. Plusieurs améliorations ont été apportées à ces tables entre autres par Thacher & Cody (1967), Eggleton et al. (1973), Pols et al. (1995).

Récemment, certains auteurs ont abordé la solution du problème de façon plus fondamentale en calculant les fonctions de F-D directement, par une intégration immédiate à chaque appel de la fonction et non à l'aide des tables précalculées. Cette démarche avait toujours été une possibilité mais elle impliquait des temps de calculs trop importants et était considérée comme fort coûteuse. Aujourd'hui l'estimation d'intégrales impropres peut, dans certains cas, se faire de manière rapide et précise à l'aide d'intégrations gaussiennes. Dans notre cas, l'intervalle considéré  $[0, \infty]$  ainsi que la présence d'un terme exponentiel décroissant, sont caractéristiques d'une intégration de Gauss-Laguerre. C'est donc en utilisant des intégrations de Laguerre que Pichon (1989) calcula avec assez de précision les fonctions de F-D. Cependant, bien que dans les cas de dégénérescence faible ( $\eta$  grand et négatif) une intégration précise peut être réalisée, au fur et à mesure que la dégénérescence augmente ( $\eta$  grand et positif) le calcul devient de moins en moins exact. En effet, cette méthode d'intégration numérique est excellente puisqu'elle permet de traiter de façon arbitraire toutes les valeurs de  $k$  et  $\gamma$  mais possède cependant une limitation importante qui provient du fait que le facteur d'occupation de Fermi-Dirac,  $n_{FD} = \frac{1}{e^{x-\eta}+1}$ , est approximativement exponentiel pour  $x \gg \eta$  tandis que pour  $x \ll \eta$  il en diffère largement et est en pratique proche de 1. D'autres approches comme celles de Sagar (1991a), Sagar (1991b) et Gantschi (1993) ont aussi été utilisées mais toujours avec une couverture incorrecte des régions de dégénérescence forte.

C'est Aparicio (1998) qui donne une méthode numérique simple et avec un temps de calcul rapide permettant facilement de calculer les fonctions de F-D généralisées. En effet, le comportement inégal du facteur d'occupation pour des valeurs positives et négatives de  $\eta$  élevées, suggère que le calcul des fonctions devrait se faire avec un minimum de deux intégrales, en scindant l'intervalle en deux régions où dans chacune d'elle le facteur d'occupation serait

plus homogène:

$$\begin{aligned} F_k(\eta, \gamma) &= \int_0^{\infty} \frac{(1 + \gamma x/2)^{1/2} x^k}{1 + e^{-\eta+x}} dx \\ &= \int_0^a \frac{(1 + \gamma x/2)^{1/2} x^k}{1 + e^{-\eta+x}} dx + \int_a^{\infty} \frac{(1 + \gamma x/2)^{1/2} x^k}{1 + e^{-\eta+x}} dx \end{aligned} \quad (3.16)$$

Cependant, un problème demeure encore. Si dans le premier intervalle, où  $x$  est proche de 0,  $k$  n'est pas entier (situation la plus courante puisque dans la majorité des cas l'indice  $k$  sera demi-entier), alors le comportement non-polynomial de la fonction à intégrer engendre des complications. Ainsi un changement de variable  $x = z^2$  est approprié et corrige l'erreur. Les deux intégrations reviennent alors à:

$$F_k(\eta, \gamma) = \int_0^{\sqrt{a}} \frac{(1 + \gamma z^2/2)^{1/2} z^{2k+1}}{1 + e^{-\eta+z^2}} dz + \int_a^{\infty} \frac{(1 + \gamma x/2)^{1/2} x^k}{1 + e^{-\eta+x}} dx \quad (3.17)$$

En principe maintenant, dans le cas plus général, l'intervalle d'intégration peut être subdivisé en  $n$  morceaux. Pour chaque intervalle le facteur d'occupation est remplacé par une relation appropriée et une variable différente. Le but est de trouver le bon nombre d'intervalles et les facteurs d'occupation adaptés à chaque domaine afin d'obtenir la meilleure précision possible tout en gardant le nombre d'intégrales à un minimum acceptable.

Aparicio (1998) présente une méthode avec quatre intervalles d'intégration sur lesquels il effectue 10-20 évaluations pour un total de 40-80 intégrations. La première version (40 intégrations) donne une précision de neuf décimales tandis que la deuxième (80 intégrations) produit un résultat avec quinze chiffres significatifs. Ainsi cet algorithme, en traitant des valeurs quelconques des variables  $\eta$  et  $\gamma$ , ainsi que tous les demi-entiers  $k$  nécessaires, évalue précisément les fonctions de F-D. C'est donc celui-ci que nous allons utiliser pour la détermination de l'énergie libre du gaz parfaits d'électrons .

Malgré tout, nous avons remarqué en utilisant l'algorithme d'Aparicio (1998) que pour des valeurs de  $\eta$  élevées, des problèmes surgissaient toujours lors du calcul de quelques unes des grandeurs thermodynamiques. En réalité il ne s'agit pas d'une complication liée directement à l'intégration numérique des fonctions de F-D généralisées, qui comme nous l'avons vu est très

satisfaisante, mais plutôt d'une difficulté au niveau de la dérivée numérique de ces fonctions. Dans la sous-partie qui suit nous traitons de ce problème.

### 3.1.4 Le cas ultra-dégénéré

Nous avons vu dans la section 3.1.3 comment en principe, à l'aide de l'algorithme développé par Aparicio (1998) qui résoud le problème des intégrales de F-D, nous pouvons déterminer, avec précision et avec un temps de calcul rapide, toutes les grandeurs thermodynamiques pour un gaz parfait d'électrons arbitrairement dégénérés, c'est-à-dire pour des valeurs quelconques du paramètre  $\eta$ . Cependant les relations 3.10 à 3.15 comportent non-seulement des intégrales de F-D notées  $F_{i/2}$ , mais aussi des dérivées de ces intégrales par rapport à  $\eta$ . Or les intégrales sont calculées numériquement. Les dérivées par rapport à  $\eta$  vont donc l'être aussi. Si maintenant on essaie de calculer une dérivée  $\frac{\partial F_{i/2}}{\partial \eta}$  numériquement mais pour  $\eta \gg 1$ , on va avoir un résultat qui tend de plus en plus vers zéro à fur et à mesure que  $\eta$  augmente. En effet, lors du calcul numérique de la dérivée, la différence du numérateur  $(\frac{\partial F_{i/2}}{\partial \eta} = \frac{F_{i/2}(\eta+\delta\eta, \gamma) - F_{i/2}(\eta-\delta\eta, \gamma)}{2\delta\eta})$  tend de plus en plus vers 0.

Nous ne pouvons donc plus utiliser le calcul numérique à cause des erreurs de "roundoff". Il va falloir, pour le cas ultra-dégénéré ( $\eta \gg 1$ ), adopter des relations approchées pour les grandeurs thermodynamiques et non les solutions exactes comportant les intégrales de F-D. Ces expressions simplifiées, totalement analytiques, vont être des approximations justifiées dans le cas d'une dégénérescence forte.

Chandrasekhar (1957) traite de façon générale le gaz parfait d'électrons dégénérés en faisant des approximations acceptables qui simplifient les calculs dans ce régime. Nous allons procéder de la même façon mais nous ne considérerons nos approximations valides que dans la zone de dégénérescence très forte, l'estimation étant d'autant meilleure dans le cas ultra-dégénéré.

Prenons comme point de départ l'équation 3.8, qui nous donne:

$$N = \int_0^{\infty} \frac{1}{1 + e^{-\eta + \beta e(p)}} \frac{V}{h^3} 8\pi p^2 dp \quad (3.18)$$



En posant:

$$\begin{cases} \frac{p}{mc} = \sinh(\theta) \\ E = mc^2(\cosh(\theta) - 1) \\ \frac{1}{\Lambda} = e^{-\eta - \beta mc^2} \end{cases}$$

on a directement:

$$N = \frac{8\pi V m^3 c^3}{h^3} \int_0^\infty \frac{\sin^2 \theta \cos \theta d\theta}{\frac{1}{\Lambda} e^{\beta mc^2 \cosh \theta} + 1} \quad (3.19)$$

Par un deuxième changement de variable  $u = \beta mc^2 \cosh \theta$  et  $\frac{d\phi(u)}{du} = \frac{1}{2} \sinh 2\theta$  on obtient:

$$N = \frac{8\pi V m^3 c^3}{h^3 \beta mc^2} \int_0^\infty \frac{du}{\frac{1}{\Lambda} e^u + 1} \frac{d\phi(u)}{du} \quad (3.20)$$

De façon similaire avec des changements de variable appropriés on peut arriver aux résultats suivants:

$$P = \frac{8\pi V m^4 c^5}{3h^3 \beta mc^2} \int_0^\infty \frac{du}{\frac{1}{\Lambda} e^u + 1} \frac{d\phi(u)}{du} \quad (3.21)$$

$$U = \frac{8\pi V m^4 c^5}{3h^3 \beta mc^2} \int_0^\infty \frac{du}{\frac{1}{\Lambda} e^u + 1} \frac{d\phi(u)}{du} \quad (3.22)$$

Ces relations sont équivalentes aux équations 3.8, 3.10 et 3.11, mais présentées différemment. Sous cette forme les relations se prêtent bien à l'utilisation directe du lemme de Sommerfeld afin d'approximer l'intégrale impropre.

**Lemme de Sommerfeld 1** Si  $\phi(u)$  est une fonction suffisamment régulière qui s'annule pour  $u=0$ , alors la formule asymptotique suivante est valable:

$$\int_0^\infty \frac{du}{\frac{1}{\Lambda} e^u + 1} \frac{d\phi(u)}{du} = \phi(u_0) + 2 \left[ c_2 \phi''(u_0) + c_4 \phi^{(4)}(u_0) + \dots \right] \quad (3.23)$$

où  $u_0 = \log \Lambda$  et les coefficients numériques  $c_\nu$  sont définis par  $c_\nu = 1 - \frac{1}{2^\nu} + \frac{1}{3^\nu} - \frac{1}{4^\nu} + \dots$  ( $c_2 = \frac{\pi^2}{12}$ ,  $c_4 = \frac{7\pi^4}{720}$ ,  $c_6 = \frac{31\pi^6}{30240}$ ).

D'après le lemme de Sommerfeld et après quelques calculs sans réelles difficultés, on peut récrire N, P et U de la manière suivante:

$$N = V A x^3 \left[ 1 + B T^2 \frac{2x^2 + 1}{2x^4} + \dots \right] \quad (3.24)$$

$$P = Cf(x) + 4BCT^2x\sqrt{x^2 + 1} + \dots \quad (3.25)$$

$$U = \frac{Cg(x)}{\rho} \left[ 1 + 4BT^2 \frac{(3x^2 + 1)\sqrt{x^2 + 1} - (2x^2 + 1)}{xg(x)} \right] \quad (3.26)$$

où

$$\left\{ \begin{array}{l} x = \left(\frac{n_e}{A}\right)^{1/3} \left[ 1 - \frac{BT^2}{3} \left( \frac{2\left(\frac{n_e}{A}\right)^{2/3} + 1}{2\left(\frac{n_e}{A}\right)^{4/3}} \right) \right] \\ f(x) = x(2x^2 - 3)\sqrt{x^2 + 1} + 3\ln(x + \sqrt{x^2 + 1}) \\ g(x) = 8x^3 \left[ \sqrt{x^2 + 1} - 1 \right] - f(x) \\ A = \frac{8\pi m^3 c^3}{3h^3} \\ B = \frac{\pi^2 k^2}{m^2 c^4} \\ C = \frac{A m c^2}{8} \end{array} \right.$$

Par la suite il n'est pas difficile d'obtenir des relations analytiques pour les autres grandeurs:

$$\chi_\rho = \frac{8Cx^5}{3P\sqrt{x^2 + 1}} + \frac{8BCT^2}{9P} \left[ \frac{4x^3 + 3x}{\sqrt{x^2 + 1}} \right] \quad (3.27)$$

$$\chi_T = \frac{8BCT^2}{P} \left[ \frac{x(x^2 + 2)}{3\sqrt{x^2 + 1}} \right] \quad (3.28)$$

$$C_V = \frac{8BCTx}{\rho} \sqrt{x^2 + 1} \quad (3.29)$$

$$\nabla_{ad} = \frac{1}{\chi_T + \frac{\rho T C_V \chi_\rho}{P \chi_T}} \quad (3.30)$$

Il ne reste qu'à déterminer précisément la valeur limite de  $\eta$  qui va trancher entre le calcul numérique de la section 3.1.3 et le calcul analytique que l'on vient de voir. En comparant les résultats numériques obtenus avec les deux méthodes, des essais multiples nous ont permis en pratique de fixer une valeur adéquate,  $\eta_{lim} = 1000$ . Les calculs numériques sont donc valides la majorité du temps et l'approximation analytique n'est utilisée que dans des cas de dégénérescence extrême.



### 3.2 Le gaz parfait d'ions classiques et non-relativistes

Nous avons vu au début du chapitre que la fonction de partition d'un système de particules peut s'écrire de deux façons différentes dépendant de la nature des particules (bosons ou fermions). Les équations de la fonction de partition sont données pour une dégénérescence arbitraire et donc sont valables autant pour un gaz de particules dégénérées que pour un gaz de particules non-dégénérées c'est-à-dire classique. Cependant dans le cas classique comme  $-\eta + \beta e_k \gg 1$ , des simplifications importantes nous permettent de récrire de manière abrégée, indépendamment du type de particules, l'équation de la fonction de partition:

$$\ln Z = N \left[ \ln \left( \frac{\zeta}{N} \right) + 1 \right] \quad (3.31)$$

$$\zeta = \sum_k e^{-\beta e_k} \quad (3.32)$$

où  $\zeta$  est la fonction de partition d'une particule individuelle et  $e_k$  est l'état d'énergie de la particule.

Ainsi les deux distributions quantiques (Bose-Einstein et Fermi-Dirac) se réduisent à une seule distribution, plus simple, appelée la distribution de Maxwell-Boltzmann. Dans le cas classique, déterminer la fonction de partition d'un système de particules quelconques (fermions ou bosons) revient à calculer la fonction de partition d'une seule particule individuelle.

Les ions présents dans l'intérieur d'une naine blanche, on l'a déjà vu sont non-dégénérés et obéissent donc à la statistique de Maxwell-Boltzmann. La fonction de partition du gaz parfait d'ions va donc être donnée par l'équation 3.31. Il reste à déterminer  $\zeta$  pour un seul ion.

#### 3.2.1 L'énergie libre

L'état d'énergie d'une particule est spécifié par un état d'énergie de translation, plus un état d'énergie d'excitation électronique, plus un état d'énergie d'excitation nucléaire. On écrit alors  $e_k = e_{kt} + e_{ke} + e_{kn}$ , d'où:

$$\zeta = \sum_k e^{-\beta(e_{kt} + e_{ke} + e_{kn})} = \underbrace{\left( \sum_k e^{-\beta e_{kt}} \right)}_{\zeta_t} \underbrace{\left( \sum_k e^{-\beta e_{ke}} \right)}_{\zeta_e} \underbrace{\left( \sum_k e^{-\beta e_{kn}} \right)}_{\zeta_n} \quad (3.33)$$

Respectivement,  $\zeta_t$ ,  $\zeta_e$  et  $\zeta_n$  sont les fonctions de partition de translation, électronique et nucléaire de l'atome. Déterminons les une par une:

- Commençons par la fonction de partition de translation  $\zeta_t$ . Comme dans le cas des électrons, les états de translation ont un spectre tellement dense qu'on peut remplacer la sommation discrète par une intégrale. De plus, pour évaluer  $\zeta_t$ , il va falloir sommer (intégrer) sur les différentes énergies en tenant compte des états de même énergie, c'est à dire de la dégénérescence  $g(e_{kt})$  des niveaux. Nous allons donc multiplier  $e^{-\beta e_{kt}}$  par  $g(e_{kt})$ . A la limite continue on écrit alors:

$$\zeta_t = \int_0^{\infty} e^{-\beta e_{kt}} g(e_{kt}) de_{kt} \quad (3.34)$$

D'après la mécanique statistique,  $g(e)de = \frac{V}{h^3} 4\pi p^2 dp$ , et comme les ions sont ici non-relativistes,  $e = \frac{p^2}{2m}$ . L'équation précédente devient ainsi:

$$\zeta_t = \frac{8\pi V}{\sqrt{2}h^3} m^{3/2} \underbrace{\int_0^{\infty} e^{-\beta e} e^{1/2} de}_{\frac{1}{2\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}} \implies \zeta_t = V \left( \frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (3.35)$$

- La fonction de partition d'excitation électronique est considérablement simplifiée dans notre cas, puisque l'on considère des particules qui sont complètement ionisées et donc avec une structure électronique interne inexistante. Ainsi:

$$\zeta_e = 1 \quad (3.36)$$

- Enfin, il reste la contribution d'excitation nucléaire. Il s'agit à nouveau d'un cas simple à cause des conditions régnant au centre d'une naine blanche. En effet, pour des températures qui ne dépassent pas les  $10^{10}$  K, on considère que les noyaux sont toujours dans leur état fondamental. Les énergies d'excitation nucléaire sont typiquement de l'ordre de plusieurs MeV; de telles énergies exigent des températures plus élevées que  $10^{10}$  K. Seul le niveau fondamental, que l'on identifie au zéro d'énergie, va être pris en considération. La dégénérescence du niveau fondamental est donnée par  $2S_n + 1$  (où  $S_n$  est le spin du

noyau). Nous avons donc:

$$\zeta_n = g_1 e^{-\beta \cdot 0} = (2S_n + 1)e^{-\beta \cdot 0} = 2S_n + 1 \quad (3.37)$$

A présent les trois contributions à la fonction de partition  $\zeta$ , donnée par l'équation 3.33, sont connues. En remplaçant les relations que nous venons de déterminer dans l'équation 3.31 on obtient:

$$\ln Z = N \left[ \ln \frac{V}{N} \left( \frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/2} (2S_n + 1) + 1 \right] \quad (3.38)$$

Enfin l'énergie libre de Helmholtz pour N particules totalement ionisées dans un volume V à une température T est donnée par:

$$F_{id}^i = -NkT \left[ \ln \frac{V}{N} \left( \frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/2} (2S_n + 1) + 1 \right] \quad (3.39)$$

### 3.2.2 Les autres grandeurs thermodynamiques

Comme nous l'avons fait pour les électrons, à l'aide des équations 2.2-2.8, nous allons à partir de l'énergie libre déterminer la pression, l'énergie interne, les compressibilités, la chaleur spécifique et le gradient adiabatique:

$$P_{id}^i = \frac{NkT}{V} \quad (3.40)$$

$$U_{id}^i = \frac{3NkT}{2V\rho} \quad (3.41)$$

$$\chi_{\rho_{id}}^i = 1 \quad (3.42)$$

$$\chi_{T_{id}}^i = 1 \quad (3.43)$$

$$C_{V_{id}}^i = \frac{3Nk}{2V\rho} \quad (3.44)$$

$$\nabla_{ad_{id}}^i = \frac{2}{5} \quad (3.45)$$

### 3.3 Gaz parfait de photons

#### 3.3.1 L'énergie libre

Les photons sont des particules ultra-relativistes et dégénérées. Ils n'interagissent pas directement entre eux et on peut donc les considérer comme formant un gaz parfait. Ce sont des particules avec un spin de 1, c'est à dire des bosons. Leur fonction de partition est donnée par:

$$\ln Z = -\eta N + \sum_k \ln(1 - e^{\eta - \beta e_k})^{-1} \quad (3.46)$$

$$N = \sum_k (e^{-\eta + \beta e_k} - 1)^{-1} \quad (3.47)$$

Cependant pour les photons qui obéissent à une statistique ne faisant pas appel à un nombre fini de particules, la contrainte sur le nombre de particules matérielles n'est plus nécessaire. Il n'y a donc pas de restrictions sur le nombre de particules dans le système, et  $\eta=0$ . La relation de la fonction de partition est alors considérablement simplifiée:

$$\ln Z = \sum_k \ln(1 - e^{-\beta e_k})^{-1} \quad (3.48)$$

Comme dans les cas des états de translation des électrons et des ions, on peut remplacer la sommation discrète par une intégrale. Dans une boîte de volume  $V$  on trouve que le nombre d'états d'énergie de translation avec impulsion entre  $p$  et  $p+dp$  est donné par:  $\frac{V 4\pi p^2 dp}{h^3}$ . Bien que les photons du champ électromagnétique aient un spin égal à 1, il n'y a que deux orientations possibles parce que ce sont des ondes transversales qui définissent deux états de polarisation indépendants. Il y a donc deux degrés de liberté interne et la dégénérescence est égale à deux. En tenant compte des deux polarisations possibles, le nombre total d'états d'énergie avec impulsion entre  $p$  et  $p+dp$  devient  $\frac{V 8\pi p^2 dp}{h^3}$ . En reprenant l'équation 3.48 on a:

$$\ln Z = - \int_0^\infty \ln(1 - e^{-\beta e}) \frac{V 8\pi p^2 dp}{h^3} \quad (3.49)$$

Or l'énergie et l'impulsion d'un photon sont données par  $e = h\nu$  et  $p = \frac{h\nu}{c}$  ( $\nu$  est la fréquence

du photon et  $c$  la vitesse de la lumière). On écrit alors:

$$\ln Z = - \int_0^\infty \ln(1 - e^{-\beta e}) \frac{V 8\pi h}{c} \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 d\nu \quad (3.50)$$

Puis en posant  $x = \beta h\nu = \frac{h\nu}{kT}$  on obtient:

$$\ln Z = - \frac{8V\pi}{h^3 c^3} (kT)^3 \underbrace{\int_0^\infty \ln(1 - e^{-x}) x^2 dx}_{\text{intégration par partie: } \frac{-\pi^4}{45}} \implies \ln Z = \frac{V\pi^5}{45} \left(\frac{2kT}{hc}\right)^3 \quad (3.51)$$

A l'aide de notre relation fondamentale habituelle 2.1, et en définissant aussi  $\sigma = \frac{2k^4\pi^5}{15h^3c^2}$  on écrit finalement:

$$F^{ph} = - \frac{4\sigma}{3c} VT^4 \quad (3.52)$$

### 3.3.2 Les autres grandeurs thermodynamiques

Nous déterminons comme d'habitude les fonctions thermodynamiques en utilisant les relations bien connues:

$$P^{ph} = \frac{4\sigma}{3c} T^4 \quad (3.53)$$

$$U^{ph} = \frac{4\sigma}{\rho c} T^4 \quad (3.54)$$

$$C_V^{ph} = \frac{16\sigma}{\rho c} T^3 \quad (3.55)$$

$$\chi_T^{ph} = 4 \quad (3.56)$$

$$\chi_p^{ph} = 0 \quad (3.57)$$

$$\nabla_{ad}^{ph} = \frac{1}{4} \quad (3.58)$$

### 3.4 Les énergies libres des trois gaz parfaits

Dans ce chapitre 3 nous avons déterminé les termes  $F_{id}^e$ ,  $F_{id}^i$  et  $F^{ph}$  qui sont les énergies libre de Helmholtz de trois gaz parfaits différents. Le premier est un gaz parfait d'électrons arbitrairement dégénérés et arbitrairement relativistes, le deuxième d'ions non-dégénérés et non-relativistes et le troisième de photons dégénérés et relativistes. Ces trois termes sont donnés par les relations 3.7, 3.39 et 3.52 que l'on répète ici:

$$\begin{cases} F_{id}^e = \eta\gamma mc^2 N - \frac{V 8\pi\sqrt{2}}{h^3} m^4 c^5 \gamma^{5/2} [2/3 F_{3/2}(\eta, \gamma) + \gamma/3 F_{5/2}(\eta, \gamma)] \\ F_{id}^i = -NkT \left[ \ln \frac{V}{N} \left( \frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} (2S_n + 1) + 1 \right] \\ F^{ph} = -\frac{4\sigma}{3c} VT^4 \end{cases}$$

Ainsi nous avons déjà des expressions complètes et rigoureuses pour trois des onze termes de notre EOS. Les huit termes restant vont être traités dans le prochain chapitre.

## *Chapitre 4*

# Un plasma de Coulomb à très haute densité

D'un point de vue pratique, on rencontre les plasmas complètement ionisés ion-électron dans les laboratoires expérimentaux, les intérieurs stellaires et planétaires, les explosions de supernova, etc. D'un point de vue théorique, l'énergie libre d'un tel plasma nous fournit un système de référence pour des modèles qui visent à décrire les propriétés thermodynamiques de plasmas partiellement ionisés qui sont des systèmes physiques naturels plus nombreux, et aussi plus complexes à analyser. Ainsi, l'étude de plasmas totalement ionisés a un intérêt à la fois théorique et pratique.

L'intérieur des naines blanches est caractérisé par des densités de l'ordre de  $10^{6-9} g \cdot cm^{-3}$  et des températures d'environ  $10^{6-8} K$ . Sous de telles conditions, l'ionisation est complète et c'est donc directement l'application pratique des plasmas entièrement ionisés que nous traiterons. Voyons comment, dans la première partie de ce chapitre inspirée des notes de cours de Chabrier (1991) à l'observatoire de Paris-Meudon, des notes de cours de Fontaine (2003) à l'Université de Montréal et de Ichimaru et al. (1987), nous allons aborder l'étude de ce plasma coulombien. Par la suite les sections 2 et 3 traiteront séparément des phases liquides et solides de notre plasma.



## 4.1 Caractéristiques de notre plasma de Coulomb

### 4.1.1 Paramètre de corrélation

Dès l'abord nous allons définir un *paramètre de corrélation*  $\Gamma$ , dans le cadre d'une étude générale d'un plasma de Coulomb. Egalement baptisé *nombre de Coulomb*,  $\Gamma$ , qui mesure l'importance des effets électrostatiques entre les particules de même espèce et les déviations du comportement thermodynamique du système par rapport à celui d'un gaz parfait, est le rapport entre les énergies potentielle et cinétique moyennes des particules. Alternativement, il est aussi obtenu en effectuant le rapport de la distance d'approche minimum ( $\lambda_a$ ) sur la distance interparticule moyenne. Puisque électrons et ions sont simultanément présents dans notre plasma, nous allons distinguer deux paramètres différents:  $\Gamma_i$  (ions) et  $\Gamma_e$  (électrons).

Pour le cas des ions, les particules peuvent être considérées classiquement et ne seront pas dégénérées. Ainsi,  $Z_e$  étant la charge nucléaire pour  $N_i$  noyaux d'espèce identique dans un volume  $V$  ( $n_i = N_i/V$  est la densité ionique),

$$\Gamma_i = \frac{Z^2 e^2}{kT} \frac{1}{a_i} \quad (4.1)$$

où  $a_i$  est la distance interionique moyenne ( $a_i = (4\pi n_i/3)^{-1/3}$ ), appelée aussi rayon de Wigner-Seitz lorsque l'on se trouve dans le cas d'un réseau rigide de particules.

En ce qui concerne les électrons, la situation est un peu plus délicate. En effet, à cause des conditions de densité et de pression, une approche quantique doit être utilisée pour leur étude. La distance interélectronique moyenne est directement donnée par  $a_e = (4\pi n_e/3)^{-1/3}$  ( $n_e$  est la densité électronique). Mais pour la distance minimum d'approche  $\lambda_a$  on a:

$$\lambda_a = \frac{Z^2 e^2}{kT} \quad \text{cas non - dégénéré} \quad (4.2)$$

$$\lambda_a = \frac{Z^2 e^2}{\epsilon_F} \quad \text{cas dégénéré} \quad (4.3)$$

où  $\epsilon_F$  est l'énergie de Fermi.

On conçoit volontiers que, dans le cas de particules classiques, lorsque la distance d'approche minimum est beaucoup plus petite que la distance moyenne entre les particules, les

interactions de Coulomb sont faibles,  $\Gamma < 1$  et il s'agit d'un gaz pratiquement parfait. En revanche, lorsque ces particules sont plus rapprochées, l'énergie potentielle domine le système,  $\Gamma > 1$  et des effets non-idéaux importants sont présents. Ainsi les électrons et les ions classiques vont se comporter en gaz imparfaits pour des densités élevées et donc des valeurs de  $\Gamma$  importantes. Cependant, le cas dégénéré présente des comportements intéressants pour les électrons que nous allons aborder dans la section qui suit.

Il est nécessaire ici, avant de continuer, de préciser la chose suivante: en ce qui concerne l'étude du plasma dans le noyau des naines blanches, les électrons étant dégénérés ainsi que plus légers que les ions, leurs interactions coulombiennes vont être négligeables par rapport à celles des ions classiques. C'est pourquoi, bien que la contribution des électrons à l'équation d'état soit dominante pour les considérations mécaniques, ce sont les ions classiques, plus massifs, moins mobiles et interagissant davantage entre eux qui vont déterminer l'état liquide ou solide du plasma ainsi que, comme nous le verrons par la suite, les caractéristiques thermiques de l'étoile. Par conséquent, lors de la caractérisation du plasma dans le cadre du modèle de l'OCP (voir sous-section 4.1.3), c'est le paramètre  $\Gamma_i$  qui va être utilisé. Souvent l'indice sera omis et nous parlerons d'un plasma de Coulomb avec un paramètre de corrélation  $\Gamma$  sans précision supplémentaire. Lorsqu'il sera nécessaire d'utiliser le paramètre  $\Gamma_e$  nous le spécifierons.

#### 4.1.2 Les naines blanches dans le plan $(T, \rho)$

Deux considérations importantes vont nous permettre de cibler la région de densité et de température qui nous intéresse.

D'emblée, le plan  $(T, \rho)$  peut être scindé en deux lorsque l'on considère le paramètre de corrélation  $\Gamma_e$ , pour le cas dégénéré,  $\Gamma_e = \frac{Z^2 e^2}{\epsilon_F} \left(\frac{4\pi n}{3}\right)^{1/3}$  et non-dégénéré,  $\Gamma_e = \frac{Z^2 e^2}{kT} \left(\frac{4\pi n}{3}\right)^{1/3} \frac{n^{1/3}}{T}$ . Une segmentation supplémentaire est aussi à envisager, puisque pour un milieu dégénéré, l'énergie de Fermi va dépendre de la nature relativiste ou non des particules. En effet, l'énergie de Fermi (on définit le paramètre de relativité  $x = \frac{\hbar}{mc} (3\pi^2 n)^{1/3}$ ) est donnée par  $\epsilon_F = mc^2 (\sqrt{1+x^2} - 1)$ . Lorsque  $x \ll 1$  (non-relativiste),  $\epsilon_F \simeq mc^2 \frac{x^2}{2}$  et par la suite  $\Gamma_e = \frac{Z^2 e^2}{(3\pi^2 n)^{2/3}} \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{4\pi n}{3}\right)^{1/3}$ . Quand  $x \gg 1$  (ultra-relativiste)  $\epsilon_F \simeq mc^2 x$  et  $\Gamma_e = \frac{Z^2 e^2}{\hbar c (3\pi^2 n)^{1/3}} \left(\frac{4\pi n}{3}\right)^{1/3}$ .

Ainsi, pour une température donnée, nous allons partager l'intervalle de densité ( $\rho \propto n$ ) en trois régions distinctes:

- une première dans laquelle les particules sont non dégénérées et où  $\Gamma_e$  va augmenter avec la densité ( $\propto \rho^{1/3}$ )
- une deuxième avec des particules dégénérées non relativistes et un  $\Gamma_e$  qui diminue lorsque la densité augmente ( $\propto \rho^{-1/3}$ )
- une troisième région de densité très élevée qui contient des particules dégénérées relativistes où  $\Gamma_e$  est une constante assez petite.

Suivons la variation du nombre de Coulomb  $\Gamma_e$ , pour une température donnée, à travers ces trois régions en fonction de la densité croissante. Pour un plasma non-dégénéré, les électrons ont un comportement classique: au fur et à mesure que la densité augmente, les charges ressentent de plus en plus les effets coulombiens et le gaz est de plus en plus imparfait. Mais lorsque la densité est assez grande pour que les particules soient dégénérées, il y a retournement de la situation: le gaz tend à devenir parfait avec la densité croissante. Pour expliquer ce phénomène on se rappelle que l'énergie potentielle d'interaction croît comme  $\propto \rho^{1/3}$ . Mais les particules dégénérées ont une énergie cinétique qui est l'énergie de Fermi et non plus l'énergie thermique. Puisque l'énergie de Fermi non-relativiste augmente comme  $\propto \rho^{2/3}$ , le rapport  $\Gamma_e$  diminue et l'interaction entre les particules aussi. L'énergie potentielle grandit mais l'énergie cinétique croît plus rapidement avec la densité. Enfin, lorsque la densité devient très grande l'énergie de Fermi ultra-relativiste augmente proportionnellement à  $\rho^{-3}$  et alors  $\Gamma_e$  est une constante.

Cette fluctuation du paramètre  $\Gamma_e$  en fonction de la densité est une propriété remarquable des électrons d'un plasma de Coulomb. Or, les électrons constituent la contribution dominante, au niveau mécanique, de l'équation d'état et il est nécessaire d'aborder leur étude avec attention et précision. Ainsi, pour une température donnée, l'importance des effets non-idéaux (plus  $\Gamma_e$  est élevé plus ces effets sont importants) passe par un maximum pour des densités intermédiaires. Dans ce cas, juger les effets imparfaits comme de simples perturbations sur le comportement du gaz parfait ne constitue pas une exploration précise et poussée du système. Dans une approche plus juste et réaliste, cette approximation ne peut être justifiée qu'aux

limites des basses densités ou des hautes densités.

Par ailleurs, une ionisation complète du plasma est observée dans deux situations physiques distinctes (il s'agit de la deuxième considération importante). L'ionisation peut être totale soit lorsque la température est élevée, soit lorsque la densité est importante. Qualitativement, ces deux régimes sont respectivement caractérisés par les relations suivantes (1 Ry=13,6056981 eV):

- $kT > Z^2 \text{Ry}$ .
- $\epsilon_F > Z^2 \text{Ry}$  (cette deuxième condition peut aussi se réécrire,  $\rho \gg 0,66 \frac{Z^3}{\mu_e} g \cdot \text{cm}^{-3}$ ).

Il suffit de jumeler les deux résultats précédents pour conclure que, le cas général d'un plasma complètement ionisé où les effets non-idéaux électroniques sont assez faibles afin d'être caractérisés, avec un degré d'approximation acceptable, comme des perturbations au gaz parfait, est valide à la limite des *basses densités et des hautes températures* ainsi qu'à la limite de *grandes densités et/ou de faibles températures*.

On retrouve le régime des basses densités et des hautes températures dans les étoiles de type solaire où  $\Gamma \ll 1$  (au centre du Soleil on a  $\Gamma \approx 0,1$ ) - attention il s'agit du paramètre de corrélation ionique. Par contre, l'*ionisation par pression* n'est présente que dans les milieux de densité élevée. Elle se produit lorsque  $\epsilon_F > Z^2 \text{Ry}$ ; soit des densités  $\rho \gtrsim 0,3 g \cdot \text{cm}^{-3}$  pour l'hydrogène par exemple. Afin d'éliminer les cas de densités vraiment extrêmes comme ceux du noyau des étoiles à neutrons dans lequel la structure nucléaire est détruite, on se donne aussi une borne supérieure, soit  $\rho < 10^{12-14} g \cdot \text{cm}^{-3}$ . Ainsi, parmi les objets astrophysiques typiques de densité comprise entre  $0,3 g \cdot \text{cm}^{-3}$  et  $10^{12-14} g \cdot \text{cm}^{-3}$ , on retrouve:

- la croûte externe des étoiles à neutrons, composée d'un plasma de  $Fe^{26+}$  de densité  $\rho \approx 10^7 - 10^8 g \cdot \text{cm}^{-3}$  à une température  $T \approx 10^7 - 10^8 K$ , correspondant à  $\Gamma \approx 10 - 10^3$
- l'intérieur des naines brunes ou des planètes joviennes, où les conditions sont telles que  $\rho \approx 1 - 10 g \cdot \text{cm}^{-3}$  et  $T \approx 10^4 K$ , soit  $\Gamma \approx 20 - 50$
- l'intérieur des naines blanches où les conditions thermodynamiques sont semblables à celles de la croûte des étoiles à neutrons ( $\Gamma \approx 10 - 10^3$ ) pour des naines blanches "standards". Pour les naines blanches de plus de  $1M_{\odot}$  et les supernovae de type I, la densité peut atteindre des valeurs plus élevées et donc des  $\Gamma$  plus importants aussi.

C'est évidemment le troisième exemple qui nous intéresse: l'intérieur des naines blanches.

*Récapitulons* - Dans le dessein d'isoler la section du plan  $(T, \rho)$  qui correspond au noyau d'une naine blanche, nous avons successivement restreint le domaine d'étude de notre plasma coulombien. Premièrement, en éliminant la région de densités intermédiaires et en considérant seulement une ionisation totale, puis en limitant notre étude aux densités élevées. Ainsi, nous allons étudier un plasma pour des valeurs de  $\Gamma$  entre 1 et  $10^3$ . Dans la sous-section qui suit, nous présentons, avant d'aborder l'étude des phases liquide et solide du plasma, le modèle de l'OCP qui sera utile.

#### 4.1.3 Le modèle de l'OCP

Le modèle théorique du *plasma à une composante* (*One Component Plasma* ou OCP en anglais)(Brush et al. (1966), Hansen (1973)) reste encore aujourd'hui le modèle de référence, du point de vue de la mécanique statistique, pour le traitement général des plasmas ion-électron, complètement ionisés, fortement corrélés et ayant une transition de phase, très utile lors de la description de divers systèmes d'importance astrophysique, tels la couche externe des étoiles à neutrons et le noyau des naines blanches. Conceptuellement, il s'agit par définition de charges ponctuelles immergées dans un fond rigide, uniforme et neutralisant. Ce modèle, extrême simplification de la réalité physique dans le cas général car les interactions entre les particules de différentes espèces sont négligées (le continu de charge opposée ne fait que fournir l'énergie de liaison), est toutefois une approximation excellente justement lorsqu'il s'agit de milieux dégénérés. Ainsi, nous ne considérerons la théorie du plasma à une composante que dans son contexte de validité optimale, soit un plasma totalement ionisé dans un milieu de densité élevée.

L'OCP, d'un point de vue général, peut s'appliquer à des systèmes de charges positives ou négatives. On parle par exemple de l'OCP d'électrons quantiques où ces derniers sont immergés dans un fond rigide de charges ioniques positives (on retrouve rarement un tel système dans la nature). Dans l'OCP d'ions classiques se sont les ions positifs qui baignent dans un fond d'électrons négatifs. Enfin on parle aussi de TCP (*Two Component Plasma*) lorsque l'on considère simultanément les particules ioniques et électroniques.



Dans les naines blanches, les densités centrales typiques couvrent un intervalle allant de  $\rho_c \simeq 10^6 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$  pour  $0,6 M_\odot$  à  $\rho_c \simeq 10^9 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$  pour  $1,4 M_\odot$ . Les températures centrales  $T_c$  des naines blanches sont typiquement de l'ordre de  $10^6\text{--}8$  K. Sous de telles conditions, les atomes de carbone et d'oxygène sont totalement ionisés et le gaz d'électrons dégénérés qui supporte l'astre est largement homogène. Par ailleurs les électrons moins massifs et plus nombreux ont une mobilité accrue par rapport aux ions. La situation est alors modélisée à juste titre par des "gros" noyaux positifs qui se déplacent sur un fond uniforme électriquement négatif: c'est exactement ce qui correspond à l'OCP d'ions classiques. Ainsi, les naines blanches sont considérées comme une des meilleures applications naturelles de ce modèle bien connu de l'OCP, les noyaux positifs étant les charges immergées dans un fond électriquement négatif d'électrons. Donc, pour l'étude de notre plasma, c'est l'OCP d'ions classiques que nous allons utiliser, et c'est  $\Gamma_i$  qui va le caractériser (on se rappelle que dorénavant on écrit simplement  $\Gamma$ ).

Une propriété essentielle du modèle, dont nous nous servons par la suite, est le fait que l'hamiltonien peut être exprimé en fonction de notre paramètre  $\Gamma$ , et de là la fonction de partition, l'énergie libre et toutes les fonctions thermodynamiques aussi.

Pour des valeurs de  $\Gamma \gtrsim 2$ , le système présente les caractéristiques d'un liquide, et à partir d'une certaine valeur critique  $\Gamma = \Gamma_{crit}$ , un changement de phase en un réseau cristallin se produit. Ainsi, au fur et à mesure que l'énergie potentielle s'impose graduellement sur l'énergie cinétique, on assiste à un phénomène de viscosité croissante du plasma jusqu'à sa solidification totale. Du point de vue du paramètre de corrélation, on peut imaginer un plasma "très liquide" pour des valeurs faibles de  $\Gamma$ , puis une cristallisation progressive avec la valeur de  $\Gamma$  qui dépasse  $\Gamma_{crit}$ . Les phases liquide et solide de l'OCP ont été considérablement étudiées par diverses méthodes analytiques et numériques. De plus, bien que l'OCP ionique initial soit un modèle classique la nécessité d'inclure les effets quantiques, essentiels pour la détermination précise du point de cristallisation a été comprise, et des études plus poussées à ce niveau ont été faites.

Le modèle de plasma à une composante a aussi été généralisé au cas des *mélanges ioniques binaires* (*Binary Ionic Mixtures* en anglais ou BIM) essentiellement par Hansen et ses colla-

borateurs (Hansen et al. (1977); Brami et al.(1979)). Dans cette extension de l'OCP, l'énergie potentielle dépend non pas d'une, mais de deux variables, à savoir le paramètre de couplage  $\Gamma$  et la concentration de chaque espèce ionique  $x_i = \frac{N_i}{N}$ . Cependant, le prolongement de l'OCP au BIM se fait directement. On peut utiliser la méthode de mélange linéaire (Iyetomi et al. (1989), Chabrier et al. (1993)) pour le cas liquide où l'énergie libre du BIM peut s'écrire en très bonne approximation (moins de 1% d'erreur), en fonction de l'énergie libre de chaque phase pure selon le modèle de l'OCP, par une simple interpolation linéaire. Pour le cas solide, le modèle de cristal virtuel utilisé en physique de l'état solide pour traiter des alliages avec des constituants similaires est adopté: par exemple on a recours à un réseau cristallin OCP équivalent, où les sites sont occupés par des ions de charge et de masse moyenne. Ce passage direct du BIM à l'OCP, rend suffisante l'étude de l'OCP pour la compréhension de plasmas à plusieurs composantes.

Ainsi, le but des sections 2 et 3 de ce chapitre sera d'étudier, dans le cadre du modèle de l'OCP ionique mais en ajoutant aussi quelques corrections, sous des conditions de densité extrême, un plasma complètement ionisé d'atomes d'une seule espèce pour les cas liquide et solide afin de déterminer les termes d'énergie libre additionnels à ceux des gaz parfaits du chapitre 3 lorsque l'on considère l'interaction de Coulomb entre les particules.

Concrètement, nous allons déterminer pour le cas liquide,  $F_{ex}^i$  - c'est là l'énergie de l'OCP - pour l'énergie électrostatique d'interaction entre les ions,  $F_{ie}^l$  pour rendre compte de l'approximation faite au niveau de la distribution du fond uniforme d'électrons qui n'est pas réellement valide, et  $F_x^e$  et  $F_q^i$  pour les corrections quantiques. Dans le cas solide, où les ions plus lourds forment un cristal, les électrons restant totalement libres, il faut remplacer par  $F_{har}^i$  et  $F_{an}^i$  le terme  $F_{id}^i$  de l'énergie cinétique des ions libres, ceux-ci étant maintenant emprisonnés dans le réseau et se déplaçant moins librement que dans le liquide. L'énergie électrostatique du réseau  $F_{Mad}^i$  dans le cas solide sera une autre substitution pour son analogue liquide,  $F_{ex}^i$ . Le terme  $F_q^i$  n'a pas d'analogue dans le cas cristallisé puisque le modèle du cristal comprend déjà la correction quantique qui lui correspond. L'approximation de l'uniformité du fond d'électrons sera également corrigée dans le cas solide par un terme similaire à  $F_{ie}^l$ ,  $F_{ie}^s$ . Enfin, pour ce qui est de  $F_x^e$  il va aussi faire partie des termes de la phase solide.



Par conséquent la continuation de ce chapitre va être séparée en deux parties. Dans la section 4.2 les fonctions thermodynamiques pour la phase liquide correspondant aux termes  $F_{ex}^i$ ,  $F_{ie}^l$ ,  $F_x^e$  et  $F_q^i$  seront déterminées alors que dans la section 4.3 nous traiterons des termes  $F_{har}^i$ ,  $F_{an}^i$ ,  $F_{Mad}^i$ ,  $F_{ie}^s$  et  $F_x^e$  pour la phase solide.

---

Une parenthèse est ici indispensable sur le rôle et l'importance joués par les différentes contributions ioniques et électroniques à l'EOS, ainsi que sur le poids même de l'EOS dans l'étude des naines blanches. En effet, à ce niveau, puisque nous allons attaquer l'étude d'un plasma en incluant les effets de Coulomb qui vont allourdir de façon considérable notre équation d'état relativement simple de gaz parfaits, il est essentiel de faire le commentaire suivant, presque inutile auparavant - on se rappelle que le terme du gaz parfait d'ions est simple et peut facilement être inclu dans l'EOS - pour justifier l'inclusion des ions et de leur interactions coulombiennes dans un milieu gouverné en grande partie par les électrons dégénérés. Ceux-ci, on le répète, contribuent de façon dominante à la pression du système dans le régime de hautes densités présent dans les naines blanches. On pourrait ainsi penser que l'étude complète du plasma en incluant la contribution ionique est futile.

Or, le lecteur se rappelle que dans l'introduction de ce mémoire il avait été précisé que les propriétés mécaniques et thermiques d'une naine blanche étaient presque complètement dissociées. Les électrons ne contribuent que très peu au réservoir thermique mais supportent l'étoile grâce à leur *pression*, tandis que les mouvements cinétiques des ions jouent le rôle de réservoir d'énergie thermique mesuré par le *chaleur spécifique* - sans entrer dans les détails, il est intéressant de noter que bien que l'énergie interne  $U$  (comme la pression) dépend fortement des électrons, sa dérivée par rapport à  $T$ , la chaleur spécifique  $\left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V$ , provient principalement des ions. Ainsi une approximation simple, directe, grossière mais largement valide et justifiée est la suivante: la pression du plasma est électronique et la chaleur spécifique est ionique. Nous sommes donc d'accord que l'inclusion de la contribution ionique est, non pas nécessaire, mais indispensable au moins pour la chaleur spécifique. Par ailleurs, les ions de notre plasma sont fortement corrélés ( $\Gamma > 1$ ) et sont donc loin du comportement idéal d'un gaz parfait (ils ne sont pas dégénérés): la contribution ionique aux caractéristiques thermiques du noyau provient

donc en grande partie du terme non-idéal dû aux effets de Coulomb. C'est justement ce terme que nous nous proposons de déterminer. Il faut en convenir; ce serait une erreur grave de se borner uniquement aux calculs des termes des deux gaz parfaits. Il est donc nécessaire d'incorporer les corrections ioniques non-idéales.

Pour le lecteur encore hésitant sur l'intérêt de cette digression, précisons que même dans le cas d'un système d'ions où la chaleur spécifique est à priori ionique, la contribution électronique peut devenir importante! En effet, le  $C_V$  du cristal ionique à un comportement  $\propto T^3$  à basses températures alors que le  $C_V$  électronique à un comportement  $\propto T$ ; or pour des densités élevées et des températures très faibles, la chaleur spécifique des électrons "reprend le dessus" et devient dominante!

Enfin, d'un point de vue général, l'EOS développée ici a principalement deux applications. En premier lieu, l'étude mécanique d'une étoile, dans le cadre de l'analyse de ses pulsations par exemple, doit dépendre d'une EOS juste et précise. Même si c'est le gaz parfait d'électrons qui domine la pression, les contributions électroniques non-idéales et les contributions ioniques, idéales ou non, peuvent jouer un rôle non-négligeable lors de la détermination des périodes de pulsation. D'autre part une analyse des propriétés thermiques est nécessaire lors de considérations évolutives: en effet bien que l'énergie emmagasinée disponible dans le noyau, c'est à dire  $C_V$ , détermine en partie le temps de refroidissement de l'astre et donc son évolution, est, comme on l'a vu, majoritairement ionique non-idéale, les contributions électroniques peuvent affecter de façon appréciable le temps de vie de la naine blanche. Par conséquent, étant donné que l'EOS, comme définie au début du chapitre 2, est concrètement l'énergie libre  $F$  de Helmholtz, de laquelle vont découler toutes les grandeurs thermodynamiques, dont la pression, l'énergie interne et la chaleur spécifique, il est totalement indispensable de déterminer avec le plus de précision possible l'énergie libre du plasma en considérant les contributions aussi bien électroniques que ioniques, ainsi que les interactions de Coulomb. Une telle EOS aura alors un champ d'application très vaste et constituera une base solide sur laquelle reposeront de nombreuses études.

---

## 4.2 La phase liquide

### 4.2.1 Première approche

Nous allons étudier un plasma de Coulomb liquide, formé d'atomes d'une seule espèce, à des densités très fortes où l'ionisation par pression est totale et les électrons sont ultra-dégénérés. Les conditions de température et de densité sont telles qu'aucun des électrons n'est lié aux noyaux et nous sommes en présence d'un nombre d'électrons libres, plus élevé sinon égal (cas de l'hydrogène pur) à celui des ions, qui se déplacent dans tous les sens. Par rapport au cas partiellement ionisé, il s'agit d'une situation beaucoup plus simple: nous n'avons pas de variations du nombre de particules en fonctions du degré d'ionisation du plasma, et il n'y a pas à faire de description physique des états liés puisqu'il n'en existe pas.

Revenons un peu en arrière afin de bien établir les bases de notre approche - Dans le cas limite où la densité est extrêmement élevée (on parle d'électrons dégénérés à température zéro), on rencontre les ions non dégénérés sous la forme d'un cristal et les électrons dégénérés relativistes sous la forme d'un gaz parfait. Les ions et les électrons sont alors modélisés comme les deux contributions du plasma qui sont, dominantes, simples à traiter et qui n'interagissent pas entre elles. Ensemble, ils vont former le système non perturbé initial de notre étude (auquel il faut ajouter le gaz parfait de photons). A ce système non perturbé nous ajoutons des corrections qui sont les déviations dues aux interactions de Coulomb jumelées à la dégénérescence partielle des électrons lorsque les effets à température finie sont considérés. En effet, en plus des interactions coulombiennes, des effets dits d'*échange* et de *corrélation*, totalement négligeables pour un gaz parfait d'électrons dégénérés très dense mais non pas pour des densité relativement faibles, vont être pris en compte dans l'étude. Puis les effets relativistes des électrons et des ions vont aussi être à considérer.

Ainsi notre système limite non perturbé est celui d'un réseau rigide parfait d'ions positifs de masse atomique  $A$  et de charge  $Z$  et d'un gaz parfait d'électrons dégénérés. Evidemment, il ne faut pas perdre de vue que nous étudions le cas liquide à des densités moins élevées où, les photons sont encore présents, le cristal qui sera étudié en détail dans la section 4.3 n'est pas encore réellement formé et les électrons sont dégénérés non relativistes - il ne forment donc

plus un gaz parfait. Mais c'est dans ce sens que nous allons parler de corrections au système non perturbé. De toute évidence, il est illusoire de vouloir calculer de manière parfaitement exacte et rigoureuse les effets de Coulomb d'un plasma à cause du nombre de particules élevé. Toutefois, une démarche avantageuse est de procéder par étapes en calculant en premier les termes dominants à l'aide d'approximations simplificatrices puis en ajoutant des corrections d'ordre supérieur. Ainsi on va faire l'hypothèse que dans un plasma de Coulomb seulement les interactions binaires particule(1)-particule(2) vont être importantes.

On peut alors scinder, en première approximation, les contributions à l'énergie potentielle du système en considérant cinq types d'interactions binaires différentes:

- l'interaction directe ion-ion ( $\alpha$ )
- l'interaction d'échange ion-ion ( $\beta$ )
- l'interaction directe électron-électron ( $\gamma$ )
- l'interaction d'échange électron-électron ( $\delta$ )
- l'interaction ion-électron ( $\epsilon$ )

Une hypothèse valide et justifiée qui va nous permettre de calculer par exemple les trois derniers termes électroniques, est de supposer que les électrons dégénérés sont uniformément distribués et que leurs fonctions d'onde sont planes. Le calcul peut être alors fait dans le cadre du modèle de la sphère ionique que nous verrons par la suite. Puis, une fois ces trois termes calculés, nous pouvons ajouter des corrections d'ordre supérieur pour tenir compte de la non-uniformité de la distribution et des fonctions d'onde non-planes: l'énergie de *corrélation* sera une correction pour l'interaction ( $\gamma$ ), l'énergie *d'échange* d'ordre supérieur pour l'interaction ( $\delta$ ) et l'énergie de *Thomas-Fermi* pour l'interaction ( $\epsilon$ ). En ce qui concerne les interactions ( $\alpha$ ) et ( $\beta$ ) pour les ions c'est le modèle de l'OCP qui va nous permettre de les déterminer.

#### 4.2.2 Contributions électroniques

Les premières interactions de Coulomb que nous abordons, sont celles relatives aux électrons. C'est le modèle de la *sphère ionique*, proposé par Salpeter en 1954 (pour plus de détails se référer à Salpeter (1961)) qui va nous servir de point de départ pour évaluer l'énergie potentielle de Coulomb des électrons dans un réseau cristallin parfait (nous faisons l'étude du

liquide mais il faut se rappeler que l'ensemble "cristal ionique+électrons" est le système limite non perturbé). En effet, en supposant que les ions forment un réseau parfait et que les électrons sont uniformément répartis, on suppose que chaque ion des noeuds du réseau est entouré d'une cellule contenant  $Z$  électrons. Alors, dans l'approximation de Wigner-Seitz, le champ de Coulomb dans la cellule d'un cristal ou d'un liquide très fortement corrélé, est celui de la *sphère ionique* autour de cet ion: à chaque ion du plasma d'espèce  $i$  et de charge  $Z_i$ , entouré d'un nuage d'électrons modélisé comme contenant exactement  $Z_i$  électrons libres, on associe une sphère de densité de charges neutralisante qui annule la charge ponctuelle de l'ion. Dans cette approximation, l'évaluation de cette énergie est un problème purement classique dans lequel la constante de Planck n'apparaît pas.

On note  $n_e, n_i$ , les densités électronique et ionique, et  $d_i = \left(\frac{3}{4\pi n_i}\right)^{1/3}$  le rayon de la sphère. La densité électronique et la charge ionique sont reliées par la relation suivante:

$$n_e \frac{4\pi}{3} d_i^3 = Z_i \quad (4.4)$$

Les électrons qui se trouvent dans la sphère vont avoir un effet très efficace de blindage sur la charge de l'ion et nous allons pouvoir considérer les sphères ioniques comme étant indépendantes. Cela revient à dire que l'on néglige les interactions ion-ion et que seule l'étude de l'énergie coulombienne pour les électrons à l'intérieur d'une sphère est importante. Par surcroît, les électrons en première approximation à température zéro, sont distribués uniformément dans la sphère. Le fait que les sphères ioniques peuvent être étudiées de façon indépendante ainsi que la distribution uniforme du nuage d'électrons vont nous permettre de calculer l'énergie électrostatique simplement en considérant deux contributions élémentaires: les énergies d'interaction électron-électron  $E_{ee}$  et ion-électron  $E_{ie}$ . En partant, nous allons définir la densité de charge électronique uniforme  $q = \frac{3Z_i e}{4\pi r_i^3}$  dans la sphère. La charge totale  $Q(r)$  des électrons à l'intérieur d'une sphère de rayon  $r$  est alors:

$$Q(r) = q \frac{4\pi}{3} r^3 = Z_{ie} \left(\frac{r}{r_i}\right)^3 \quad (4.5)$$

La charge totale de l'ion dans la sphère est évidemment  $Z_{ie}$ . Maintenant, les énergies d'inter-



action entre la charge totale dans la sphère ionique et la charge de l'élément de charge  $dQ$  de la coquille sphérique sont:

$$\begin{aligned}
 - dE_{ee} &= \frac{3(Z_i e)^2}{r_i^5} r^4 dr \text{ pour l'interaction électron-électron } \left( \frac{Q(r)}{r} dQ = \frac{Q(r)}{r} q 4\pi r^2 dr = \frac{Z_i e \left(\frac{r}{r_i}\right)^3}{r} \right. \\
 &\quad \left. \frac{3Z_i e}{4\pi r_i^3} 4\pi r^2 dr \right) \\
 - dE_{ie} &= -\frac{3(Z_i e)^2}{r_i^3} r dr \text{ pour l'interaction ion-électron } \left( \frac{Z_i e}{r} dQ = \frac{Z_i e}{r} q 4\pi r^2 dr = -\frac{Z_i e}{r} \frac{3Z_i e}{4\pi r_i^3} \right. \\
 &\quad \left. 4\pi r^2 dr \right)
 \end{aligned}$$

Nous pouvons alors déterminer l'énergie totale électrostatique correspondante d'une sphère ionique d'espèce  $i$ ,  $E_{SI} = E_{ee} + E_{ie}$ :

$$\begin{aligned}
 E_{SI} &= \int_0^\infty dE_{ee} + \int_0^\infty dE_{ie} \\
 E_{SI} &= \frac{3}{5} \frac{(Z_i e)^2}{r_i} - \frac{3}{2} (Z_i e)^2 r_i \\
 E_{SI} &= -\frac{9}{10} (Z_i e)^2 r_i
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

La sphère ionique étant liée, son énergie est négative. Enfin, l'énergie de Coulomb totale du système,  $E_c$ , est donnée en faisant la somme sur toute les espèces ioniques:

$$\begin{aligned}
 E_c &= \sum_i N_i E_{SI} \\
 E_c &= -\frac{9}{10} e^2 \sum_i \frac{N_i Z_i^2}{r_i}
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

Nous pouvons écrire pour la densité ionique  $n_i = \frac{\rho N_0 X_i}{A_i}$  ( $X_i$  est la fraction de masse de l'élément  $i$ ) et la densité électronique la relation d'électroneutralité  $n_e = \sum_i Z_i n_i$ . Puis, en définissant la moyenne d'une quantité  $x$  prise sur la fraction de masse par  $\langle x \rangle \equiv \sum_i X_i x_i$ , l'énergie  $E_c$  devient:

$$\frac{E_c}{V} = -\frac{9}{10} e^2 (N_0 \rho)^{4/3} \left( \frac{4\pi}{3} \right)^{1/3} \left\langle \frac{Z^{5/3}}{A} \right\rangle \left\langle \frac{Z}{A} \right\rangle^{1/3} \tag{4.8}$$

Or si nous retournons en arrière, l'équation 2.3 donne  $E_c = F_c + T S_c$ . Cependant, à cause de la dégénérescence forte nous sommes dans un régime de température nulle avec  $S_c = 0$  et

par suite  $E_c = F_c$ . L'énergie libre de Coulomb des électrons est alors donnée par:

$$F_c = -\frac{9}{10}e^2(N_0\rho)^{4/3} \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/3} \left\langle \frac{Z^{5/3}}{A} \right\rangle \left\langle \frac{Z}{A} \right\rangle^{1/3} \quad (4.9)$$

Ainsi l'énergie électrostatique de Coulomb relative aux électrons que nous venons de calculer, est considérée comme une perturbation importante et de premier ordre certes, mais néanmoins une perturbation à l'état du gaz parfait. Cependant, des corrections d'ordre supérieur doivent être traitées lors d'une étude plus rigoureuse comme celle que nous nous proposons de faire pour les naines blanches. Dans la sous-section précédente, nous avons défini trois termes de correction pour les interactions électroniques coulombiennes: regardons les de plus près.

- Pour des températures très élevées ou des densités relativement faibles (assez élevée quand même pour une ionisation par pression complète), nous ne pouvons plus faire l'approximation de la dégénérescence totale des électrons. Dans le régime dégénéré, le gaz d'électrons devient de plus en plus imparfait (puisque  $\Gamma$  augmente) et non relativiste pour des densités décroissantes et l'interaction entre les particules s'accroît. Conséquemment, nous ne pouvons plus utiliser l'approximation, de moins en moins valide, des électrons uniformément distribués: ils vont avoir tendance à se regrouper autour des ions. C'est le modèle de *Thomas-Fermi* qui va nous permettre d'étudier l'effet de ce comportement sur les interactions ion-électron. Il s'agit d'une première correction classique au modèle de la sphère ionique, qui va rendre compte d'une distribution plus réaliste des électrons: on parle de l'énergie de *Thomas-Fermi*. Dans une approche d'expansion en série de l'énergie du système (celui de la sphère ionique, on ne considère toujours pas l'interaction ion-ion) où le premier terme est celui du gaz parfait d'électrons et où le deuxième celui de l'énergie électrostatique des électrons pour une distribution uniforme, le troisième terme est justement celui de Thomas-Fermi,  $F_{TF}$ .
- Jusqu'à présent pour le gaz parfait d'électrons seulement l'énergie cinétique à l'aide de la statistique de Fermi-Dirac a été considérée. L'effet des fonctions d'onde antisymétriques électroniques sur l'énergie d'interaction électron-électron a été négligée ainsi que les interactions électroniques au travers du champ électromagnétique transverse pour les



électrons relativistes. Le terme d'*échange* prend en compte ces effets quantiques dus au principe d'exclusion de Pauli entre électrons de même spin et apporte une deuxième correction au modèle de la sphère ionique. Cette correction est le quatrième terme de l'expansion en série juste après l'énergie de Thomas-Fermi. Cependant précisons que pour déterminer cette nouvelle correction une répartition uniforme des électrons est supposée, c'est à dire que l'influence du champ électrique des ions sur la distribution des électrons a été négligée (on ne considère pas la correction de Thomas-Fermi précédente).

Les fonctions d'onde antisymétriques pour un gaz parfait de Fermi-Dirac d'électrons sont utilisées pour évaluer la moyenne de l'interaction électromagnétique entre paires d'électrons dans la théorie des perturbations de premier ordre. Dans cette moyenne on peut distinguer deux termes, "direct" et "d'échange". De plus l'interaction électromagnétique peut être séparée en interaction longitudinale (ou de "Coulomb") et interaction transverse (ou "spin-spin"). Les termes "directs" liés à ces deux interactions donnent une énergie qui est exactement l'énergie de Coulomb d'une distribution de charge classique de même densité que les électrons. Ils ont déjà été inclus dans l'évaluation de  $E_c$  et ne doivent plus être considérés. Ce sont les termes d'"échange" qu'il est nécessaire d'ajouter. On parle d'une correction quantique, l'énergie d'*échange* moyenne totale,  $F_{ex}$ .

- La troisième correction, classique comme la première, traite à nouveau de la répartition non uniforme des électrons comme dans le premier cas, mais cette fois pour les interactions électrons-électrons de spin opposé. Il s'agit de l'énergie de *corrélacion*,  $F_{corr}$ . Dans le même esprit que la correction d'échange précédente, si on continue à négliger l'influence des ions (c'est à dire en les remplaçant par un continu uniforme de charge positive: le modèle de la sphère ionique est étudié dans le cadre de l'OCP électronique), le traitement encore une fois de la théorie des perturbations nous donne le cinquième terme dans l'expansion de l'énergie d'interaction entre les électrons: l'énergie de corrélacion.

Ainsi la correction totale au gaz parfait relative seulement aux électrons est la somme de l'énergie de Coulomb obtenue par le modèle de la sphère ionique. des deux corrections classique de *Thomas-Fermi* et de *corrélacion* ainsi que d'une correction quantique d'*échange* pour les électrons.

### 4.2.3 Contributions ioniques

L'ajout des quatre termes de correction de la sous-section précédente, donne une description précise et détaillée des interactions impliquant uniquement les électrons du plasma. Nous n'avons cependant pas encore discuté des interactions ion-ion qui vont contribuer de façon dominante à l'énergie potentielle. C'est à ce niveau que le modèle de l'OCP, introduit précédemment, entre en jeu. L'énergie potentielle ionique est beaucoup plus difficile à traiter puisque les ions non dégénérés ne forment pas de système uniforme et vont, de par leur masse importante et leur mobilité réduite, interagir de façon plus significative par effets de Coulomb. Comme nous l'avons mentionné dans la première partie de ce chapitre, c'est à cause d'un nombre de Coulomb électronique ( $\Gamma_e$ ) faible pour des densités élevées, que le gaz d'électrons quantique peut, dans une approche juste est réaliste, être approximé par un gaz parfait; les corrections ( $E_c$ ,  $F_{TF}$ ,  $F_{ex}$  et  $F_{corr}$ ) ajoutées par la suite sont alors relativement petites. Mais dans le cas du gaz ionique, les particules restant non dégénérées même pour des densités considérables où l'interaction électromagnétique est importante ( $\Gamma_i$  élevé), l'approximation du gaz parfait est beaucoup moins valide et les corrections sur cette imprécision vont être d'autant plus importantes.

L'approche OCP, revient à considérer l'interaction, mise à l'écart précédemment, entre les différentes sphères ioniques. En incluant les interactions électroniques de premier ordre - celles de la sphère ionique - l'hamiltonien d'un système des charges ponctuelles positives immergées dans un fond uniforme négatif, s'écrit de la façon suivante:

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2M} + V_N \quad (4.10)$$

où  $V_N$  est donné par:

$$V_N = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{(Ze)^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - n_e \sum_j \int_V d\vec{r} \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} n_e^2 \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (4.11)$$

Dans cette équation, les deux derniers termes décrivent les interactions ion-électron et électron-électron déjà vues auparavant, et la première composante représente la nouvelle interaction

ion-ion. Comme le fond est uniforme,  $n_e(r) = n_e = \text{cte}$ . L'énergie libre électrostatique se calcule alors à l'aide de l'équation 2.1 et en se rappelant que  $Z = \text{Tr}[e^{-H/kT}]$ . Cette nouvelle énergie par opposition à celle des gaz parfaits d'électrons et d'ions sera appelée énergie d'excès du mélange et notée  $F_{ex}^i$  (l'indice  $i$  indique que l'énergie libre est en grande partie ionique). Etant donné que dans cette approche les interactions de la sphère ionique sont aussi incluses, il ne sera plus nécessaire d'ajouter le  $F_c$  de la section précédente.

A l'allure de l'hamiltonien précédent, on imagine facilement que la relation complexe de l'énergie libre qui en découlera, sera difficile à évaluer de façon analytique comme nous l'avons fait dans le cas de la sphère ionique pour  $F_c$ . Nous ne présentons donc pas de dérivation analytique de  $F_{ex}^i$ . Or, une caractéristique de l'OCP est que  $V_N$ , puis par la suite la fonction de partition et l'énergie libre peuvent être exprimées en fonction de  $\Gamma$  uniquement. Il en sera de même ici, même si les termes de la sphère ionique sont inclus puisque la composante ionique domine. Cette caractéristique permettra par la suite une détermination numérique de l'énergie libre de l'OCP,  $F_{ex}^i$ .

Enfin, une dernière correction apportée à l'énergie potentielle est celle des ions quantiques. En effet, toujours pour le cas limite à haute densité, la distance moyenne entre les particules peut se rapprocher et même devenir plus petite que la longueur d'onde de de Broglie. On ne parle plus alors d'ions classiques mais de paquets d'onde. En pratique, la longueur d'onde de de Broglie dans le cas qui nous intéresse reste quand même plus petite que la distance entre les particules et les effets quantiques du système peuvent être traités à l'aide d'une simple correction à l'énergie libre du système classique: il s'agit du terme  $F_q^i$ .

Ainsi, en rassemblant les diverses contributions obtenues, on peut ramener à quatre les corrections à apporter aux deux gaz parfaits: le terme  $F_{ex}^i$  d'excès de mélange principalement pour l'interaction ion-ion provenant du modèle de l'OCP, le terme  $F_{ie}^l$  (l'indice  $l$  a été ajouté en exposant pour préciser qu'il s'agit de la phase liquide) pour l'énergie de Thomas-Fermi,  $F_x^e$  qui va inclure simultanément les effets d'échange et de corrélation pour les électrons, et enfin le terme  $F_q^i$  pour la correction quantique des ions.

Nous n'entrons pas dans les détails théoriques complexes de la physique statistique des

plasmas denses (quelques bonnes références sont Hansen & McDonald (1976), Ichimaru et al. (1987), van Horn & Ichimaru (1993)) qui traite de ces interactions, mais nous nous bornerons à survoler les méthodes utilisées.

#### 4.2.4 Les résultats numériques

Pour la détermination de termes de corrections à l'EOS des gaz parfaits, soient des méthodes de calculs numériques directs, soit la création de "méga-tables" de données ont été proposées par plusieurs auteurs dans le cadre de la théorie des plasmas liquides extrêmement denses. Parmi celles-ci on retrouve, l'évaluation numérique des développements en série de la fonction de partition obtenus à l'aide de la théorie des perturbations, les études numériques de systèmes à N corps, les théories semi-analytiques à N corps telle la théorie HNC, les simulations Monte Carlo (MC) et les formules d'interpolation entre résultats provenant de divers procédés. Les deux méthodes sur lesquelles sont basées les études les plus récentes sont MC et HNC:

- La détermination des termes à l'aide de la méthode MC consiste à paramétriser directement l'énergie libre de notre plasma à l'aide de simulations en exploitant la propriété des fonctions thermodynamiques qui peuvent être exprimées en fonctions de  $\Gamma$ . Les simulations MC de l'OCP ont été considérablement utilisées depuis une trentaine d'années afin d'obtenir l'EOS de l'état liquide. Celles-ci sont souvent sensibles à toutes dépendances qui pourraient exister avec le nombre de particules N (Stringfellow et al. (1990)). Le procédé utilisé pour ces simulations est le suivant: on détermine d'abord par la méthode MC l'énergie interne par charge,  $\frac{U}{N}$ , pour plusieurs valeurs de  $\Gamma$ . Une formule d'interpolation est appliquée pour joindre ces points et donc obtenir  $U(\Gamma)$ , puis l'énergie libre  $F(\Gamma)$  (et par la suite toutes les autres fonctions thermodynamiques) est obtenue par une intégration numérique à travers l'équation suivante:

$$\frac{F(\Gamma)}{NkT} = \int_{\Gamma_0}^{\Gamma} d\Gamma' \frac{1}{\Gamma'} \frac{U(\Gamma')}{NkT} + \frac{F^0}{NkT} \quad (4.12)$$

- Un deuxième exemple de calcul numérique est l'utilisation de la théorie HNC (*Hypernetted-*

*chain* en anglais). La mécanique statistique appliquée à la théorie des liquides (Hansen & McDonald (1976) et Ichimaru et al. (1987)) à l'aide de fonctions de distribution permettant une description complète mais compacte de la structure microscopique de systèmes liquides ainsi qu'une mesure quantitative des corrélations entre les positions de différentes particules va nous permettre de calculer l'énergie interne et l'équation d'état du plasma lorsque les particules du système interagissent par l'intermédiaire de forces centrales additives par paires. Une des approches permet d'approximer la fonction de distribution par une équation intégrale appelée équation HNC. La validité de la théorie HNC et de ses schémas pour les systèmes coulombiens a été évaluée par plusieurs auteurs par comparaison à des simulations MC qui nécessitent un temps de calcul plus élevé.

Ainsi, les énergies  $F_{ex}^i$ ,  $F_x^e$ ,  $F_{ie}^l$  et  $F_q^i$  ont toutes été déterminées à maintes reprises avec plus ou moins de précisions par différents auteurs. Entre autres, à titre indicatif: 1) Nozières & Pines (1958) traitent des effets d'échange et de corrélation pour un gaz non parfait d'électrons à température nulle. 2) Kovetz et al. (1972) traitent des effets d'échange - et non de corrélation (ils deviennent négligeables à très haute densité) - pour un gaz d'électrons dégénérés relativistes à température finie, 3) Hansen (1973) paramétrise en fonction de  $\Gamma$  l'énergie libre de l'OCP,  $F_{ex}^i$ . 4) Hansen & Vieillefosse (1975) obtiennent une correction quantique  $F_i^q$  issue du développement de Wigner Kirkwood jusqu'à l'ordre  $h^4$ , 5) Ichimaru et al. (1987) déterminent le terme d'échange et de corrélation à température finie pour des électrons non-relativistes, 6) Yakovlev & Shalybkov (1989) développent des expressions pour l'énergie de polarisation  $F_{ie}$  et enfin 7) Chabrier & Potekhin (1998) et Potekhin & Chabrier (2000) présentent une paramétrisation moderne de l'OCP, du terme de polarisation  $F_{ie}^l$  ainsi que du terme d'échange et de corrélation.

Sans perdre plus de temps à énumérer les diverses études, nous présentons dans la section qui suit les expressions analytiques numériques les plus récentes et les plus détaillées à notre connaissance des termes de l'EOS exprimés de façon utile pour le cas astrophysique du noyau de naines blanches telles que présentées principalement par Chabrier & Potekhin (1998) et Potekhin & Chabrier (2000) dans deux articles de revues. Ils utilisent entre autres



pour  $F_{ex}^i$  une interpolation analytique entre les résultats provenant de calculs Monte Carlo et d'approximation HNC que nous avons brièvement mentionnés.

#### 4.2.5 Ce que nous allons utiliser

- L'énergie  $F_{ex}^i$  d'interaction entre les ions est donnée par la relation suivante:

$$\begin{aligned} \frac{F_{ex}^i}{NkT} = & A_1 \left[ \sqrt{A_2 + \Gamma} - A_2 \ln \left( \sqrt{\Gamma/A_2} + \sqrt{1 + \Gamma/A_2} \right) \right] + 2A_3 \left[ \sqrt{\Gamma} - \arctan \sqrt{\Gamma} \right] \dots \\ & \dots + B_1 \left[ \Gamma - B_2 \ln (1 + \Gamma/B_1) \right] + \frac{B_3}{2} \ln (1 + \Gamma^2/B_4) \end{aligned} \quad (4.13)$$

où les valeurs numériques des paramètres sont:  $A_1 = -0,9070$ ,  $A_2 = 0,62954$ ,  $B_1 = 4,56 \cdot 10^{-3}$ ,  $B_2 = 211,6$ ,  $B_3 = -1,0 \cdot 10^{-4}$ ,  $B_4 = 4,62 \cdot 10^{-3}$  et  $A_3 = -\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{A_1}{\sqrt{A_2}}$ .

Cette paramétrisation en fonction de  $\Gamma$  est un lissage analytique des résultats HNC et MC obtenus par DeWitt & Slattery (1999) (solutions numériques modernes les plus précises pour l'énergie interne de l'OCP liquide selon Potekhin & Chabrier (2000)), et les valeurs des paramètres  $A_i$  et  $B_i$  sont celles pour lesquelles la correspondance avec les résultats numériques est la meilleure.

- Nous ne présentons pas de relation pour l'énergie d'échange. En effet, il existe une détermination analytique donnée par Potekhin & Chabrier (2000) où une interpolation entre deux paramétrisations (Ichimaru et al. (1987) et Stolzmann & Bloecker (1996)) différentes est faite. Cependant, les expressions trop complexes de l'énergie libre ne permettent pas une détermination analytique des autres grandeurs dérivées. Or le calcul numérique complet et précis de ce terme d'échange est fait par Lamb (1974) et inclus dans son équation d'état original. Etant donné que nous sommes en possession du code FORTRAN de l'EOS de Lamb, nous allons tout simplement inclure ce terme directement dans nos calculs.
- Pour l'énergie de Thomas-Fermi, Potekhin & Chabrier (2000) nous donnent une relation

paramétrique lissée sur les résultats de calculs HNC, valide pour des valeurs  $0 < r_s \lesssim 1$ ,  $0 < \Gamma \lesssim 300$  et  $1 \leq Z \leq 26$ :

$$\frac{F_{ie}^l}{NkT} = -\Gamma_e \frac{c_{DH}\sqrt{\Gamma_e} + c_{TF}a\Gamma_e^\nu g_1 h_1}{1 + [b\sqrt{\Gamma_e} + ag_2\Gamma_e^\nu/r_s]h_2} \quad (4.14)$$

où  $r_s = \frac{1}{a_0} \left[ \frac{4\pi N}{3V} \right]^{-1/3}$  ( $a_0$  est le rayon de Bohr) et où  $c_{DH} = (z/\sqrt{3})[(1+Z)^{3/2} - 1 - Z^{3/2}]$  assure une transition exacte dans la limite de Debye-Hückel à  $\Gamma \rightarrow 0$ ,  $c_{TF} = (18/175)(12/\pi)^{2/3} Z^{7/3}(1 - Z^{-1/3} + 0,2Z^{-1/2})$  reproduit la limite de Thomas-Fermi pour  $Z \rightarrow \infty$ , les paramètres  $a = 1,11Z^{0,475}$ ,  $b = 0,2 + 0,078(\ln Z)^2$ , et  $\nu = 1,16 + 0,08\ln Z$  et enfin les fonctions

$$g_1 = 1 + 0,78[21 + \Gamma_e(Z/r_s)^3]^{-1}(\Gamma_e/Z)^{1/2} \quad (4.15)$$

$$g_2 = 1 + \frac{Z-1}{9} \left( 1 + \frac{1}{0,001Z^2 + 2\Gamma_e} \right) \frac{r_s^3}{1 + 6r_s^2} \quad (4.16)$$

Pour ce qui est des facteurs  $h_1$  et  $h_2$ , dans le cas non relativiste ( $1 < \Gamma < 100$  et  $x_r < 0,25$ ) ils sont égaux à 1 alors que dans le cas relativiste ( $\Gamma > 100$  et  $x_r > 0,1$ ) on a:

$$h_1 = \frac{1 + x_r^2/5}{1 + 0,18Z^{-1/4}x_r + 0,37Z^{-1/2}x_r^2 + x_r^2/5} \quad (4.17)$$

$$h_2 = (1 + x_r^2)^{-1/2} \quad (4.18)$$

où  $x_r = \frac{\hbar}{m_e c} \left( \frac{3\pi^2 Z N}{V} \right)^{1/3}$ .

- Enfin, pour la correction quantique  $F_i^q$  c'est Hansen & Vieillefosse (1975) qui donnent les meilleurs résultats. Pour les densités à l'intérieur des naines blanches les électrons sont dégénérés mais les températures sont aussi assez élevées pour que la mécanique statistique classique soit une bonne première approximation pour le traitement des ions beaucoup plus lourds. Cependant, le rapport entre la longueur d'onde thermique de de Broglie  $\lambda$  sur le rayon de la sphere ionique  $d_i$  est de l'ordre de 0,2 pour une naine blanche typique ( $T=10^7\text{K}$ ,  $\rho = 10^6\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$  avec une composition prédominante en hélium) de



sorte que des corrections quantique aux propriétés thermodynamiques des ions doivent être incluses. Wigner a déjà montré que l'énergie libre de Helmholtz d'un système quantique à plusieurs particules peut être écrit en expansion en série de puissance de  $h^2$ . Pourvu que le rapport  $\frac{\lambda}{a_i}$  soit assez petit, on s'attend à ce que la série converge rapidement. Le zeroième terme qui est l'énergie libre du système classique, ainsi que les termes en  $h^2$  et en  $h^4$ , sont donnés par:

$$\frac{F}{NkT} = \underbrace{\frac{F^{(0)}}{NkT}}_{\text{systeme classique}} + \underbrace{\frac{1}{8} \frac{\Gamma^2}{r_s}}_{\text{terme de Hansen(1973)}} - \frac{1}{960} \frac{\Gamma^4}{r_s^2} (12J + 9K^\infty + 1) \quad (4.19)$$

où  $K^\infty = -0,091964$  et  $J(\Gamma) = a_0 + \frac{a_1}{\Gamma^{1/2}} + \frac{a_2}{\Gamma} + \frac{a_3}{\Gamma^{3/2}} + \frac{a_4}{\Gamma^2} + \frac{a_5}{\Gamma^3}$  avec  $a_0 = 0,13573$ ,  $a_1 = 0,17362$ ,  $a_2 = 0,92707$ ,  $a_3 = -0,09740$ ,  $a_4 = 1,7824$  et  $a_5 = 1,9878$ . On va donc écrire pour le terme  $F_i^q$  la relation finale suivante:

$$\frac{F_q^i}{NkT} = \frac{1}{8} \frac{\Gamma^2}{r_s} - \frac{1}{960} \frac{\Gamma^4}{r_s^2} (12J + 9K^\infty + 1) \quad (4.20)$$

où  $r_s = \frac{1}{a_0} \left( \frac{4}{3} \frac{\pi N}{V} \right)^{-1/3}$  ( $a_0 = 0,529177249 \cdot 10^{-8} \text{cm}$  est le rayon de Bohr).

### 4.3 Le réseau cristallin

Tout au long de ce chapitre nous considérons l'interaction de Coulomb entre les particules. Il faut donc calculer l'énergie potentielle électrostatique. Pour le cas solide, qui est le sujet de cette partie, l'énergie électrostatique est celle du réseau cristallin appelée énergie de Madelung.  $F_{Mad}$ : nous allons la déterminer. Cependant, comme le plasma est solide les ions sont organisés en réseau et ne sont donc pas libres de se déplacer à leur guise. Ainsi, l'énergie cinétique des ions  $F_{id}^i$ , déterminée dans le chapitre 3, valide pour un plasma liquide, ne l'est plus ici. L'énergie cinétique des électrons, toujours libres, est la même que pour la phase liquide; il n'y a ainsi pas de changement à ce niveau. On reprend également le terme  $F_x^e$  d'échange et de corrélation des électrons dans le cas liquide. Mais nous allons déterminer les termes d'énergie cinétique qui

correspondent aux faibles mouvements des ions fixés dans le cristal, c'est à dire  $F_{har}^i$  et  $F_{an}^i$ . Enfin le terme  $F_{ie}^s$  va rendre compte de la distribution non-uniforme des électrons dégénérés ainsi que leur effet de blindage sur les ions des noeuds du réseau.

### 4.3.1 Description analytique d'un solide

<sup>1</sup> Dans un solide, l'énergie potentielle d'interaction entre les particules, c'est à dire l'énergie électrostatique de Coulomb, domine complètement l'énergie cinétique (les valeurs de  $\Gamma$  sont élevées). Conséquemment, une structure cristalline se crée et les particules qui y sont piégées n'ont pour seuls mouvements thermiques (c'est à dire cinétiques) que des oscillations de faibles amplitudes autour de leur position d'équilibre. Ainsi, d'un point de vue mécanique, on peut décrire un solide comme un ensemble d'oscillateurs qui sont couplés les uns aux autres.

Si l'on suppose pour un instant que la température est suffisamment basse pour que les oscillations des particules situées sur les noeuds du réseau soient faibles et donc puissent être assimilées à des oscillations harmoniques, on peut écrire l'hamiltonien totale du système en tant que simple somme d'hamiltoniens individuels ayant tous la même forme. Chaque hamiltonien de la somme représente alors un mode collectif de vibration des particules dans le cristal. D'un point de vue classique, de telles oscillations correspondent à des ondes sonores qui se propagent dans le solide. Cependant, on peut astucieusement dans le formalisme quantique, associer à de telles ondes qui ont des propriétés corpusculaires, des particules appelées, par analogie aux particules de lumières, phonons. Ainsi, notre cristal peut se décrire par un ensemble de particules qui n'interagissent pas entre elles, soit un gaz parfait de phonons.

Cependant, si dans un cas plus général, les oscillations des particules du solide ne peuvent être considérées comme harmoniques, la température étant relativement élevée, la description du système se complique considérablement et devient très difficile. En écrivant notre hamiltonien total sous la forme d'une somme, nous devons ajouter des termes de corrections pour rendre compte de l'interaction des différentes particules entre elles qui ne peut plus être négligée. Tout ces termes supplémentaires, en opposition aux termes d'oscillations har-

---

<sup>1</sup>Dans cette section, la partie théorique est en grande partie inspirée de Dubin (1990), des notes de cours de Chabrier (1991) à l'observatoire de Paris-Meudon et des notes de cours de Fontaine (2003) à l'Université de Montréal.

moniques, sont appelés anharmoniques. De façon analogue, pour une description quantique du système, il s'agira d'un gaz de phonons ayant des propriétés non idéales et non d'un gaz parfait. En ce qui nous concerne, nous allons étudier le cristal en incluant les termes anharmoniques. Pour ce faire, c'est le formalisme de la théorie des perturbations en thermodynamique (Landau & Lifshitz (1958)) qui va être utilisé afin d'obtenir une expansion en série de l'énergie libre de l'OCP cristallisé,  $F_{OCP/crist}$ . On commence par écrire la relation bien connue:

$$F_{OCP/crist} = -kT \ln Z_{OCP/crist} \quad (4.21)$$

où

$$Z_{OCP/crist} = Tr[e^{-H_{OCP/crist}/kT}] \text{ et } H_{OCP/crist} = K_{OCP/crist} + \Phi_{OCP/crist} \quad (4.22)$$

avec  $K$  et  $\Phi$  les énergies respectivement cinétique et potentielle du système de particules cristallisées.

Dans un solide constitué de  $N$  particules, chaque particule  $i$  de masse  $m_i$  oscille autour d'une position d'équilibre  $(x_{i1}^0, x_{i2}^0, x_{i3}^0)$  donnée en coordonnées cartésiennes. Pour décrire les ions de notre cristal, on définit une variable  $\xi$  par  $\xi_{i\alpha} = x_{i\alpha} - x_{i\alpha}^0$ , pour  $\alpha=1,2,3$ . Puis nous allons calculer séparément les deux types d'énergie dans le but d'obtenir l'hamiltonien total du système.

– La détermination de  $K$  est la plus facile. L'énergie cinétique de vibration du solide s'écrit,

$$K_{OCP/crist} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 m_i \dot{x}_{i\alpha}^2, \text{ ou alors en termes des variables } \xi:$$

$$K_{OCP/crist} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 m_i \dot{\xi}_{i\alpha}^2 \quad (4.23)$$

– Pour l'énergie potentielle  $\Phi$ , on va effectuer un développement en série de Taylor autour de  $\Phi_0$ , énergie du solide dans sa configuration d'équilibre.

$$\Phi_{OCP/crist} = \Phi_0 + \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \xi_{i\alpha}} \right)_0 \xi_{i\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \xi_{i\alpha} \partial \xi_{j\beta}} \right)_0 \xi_{i\alpha} \xi_{j\beta} + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} U_n \quad (4.24)$$

où

$$U_n = \sum_{i,j,k,\dots} \left( \frac{\partial \Phi \partial \Phi \partial \Phi \dots}{\partial \xi_i \partial \xi_j \partial \xi_k \dots} \right)_0 \xi_i \xi_j \xi_k \dots \quad (4.25)$$

Dans la deuxième équation, les dérivées partielles sont répétées  $n$  fois. Toutes les dérivées sont évaluées aux positions d'équilibre et sont simplement des constantes qui dépendent de la nature du solide en question. Cependant, les dérivées premières doivent être nulles parce que  $\Phi$  passe par un minimum à chaque position d'équilibre.  $\Phi$  peut être récrit alors de la façon suivante:

$$\Phi_{OCP/crist} = \Phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{j=1}^N \sum_{\beta=1}^3 \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \xi_{i\alpha} \partial \xi_{j\beta}} \right)_0 \xi_{i\alpha} \xi_{j\beta} + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} U_n \quad (4.26)$$

En combinant les équations pour  $\Phi$  et  $K$ , l'hamiltonien total se présente sous la forme:

$$H_{OCP/crist} = \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 m_i \dot{\xi}_{i\alpha}^2 + \Phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{j=1}^N \sum_{\beta=1}^3 \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \xi_{i\alpha} \partial \xi_{j\beta}} \right)_0 \xi_{i\alpha} \xi_{j\beta}}_{H_0} + \underbrace{\sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} U_n}_{\Delta V} \quad (4.27)$$

La relation précédente pour l'hamiltonien total est scindée en deux parties. Les trois premiers termes représentent l'hamiltonien du système de particules lorsque l'on ne considère, sous prétexte que la température est assez basse, que des petites oscillations approximées comme étant harmoniques. On peut aussi considérer ces trois premiers termes comme étant l'hamiltonien d'un gaz parfait de phonons. On les regroupe donc dans un terme  $H_0$ . C'est  $\Delta V$  qui contient les corrections anharmoniques. Ainsi nous écrivons succinctement:

$$H_{OCP/crist} = H_0 + \Delta V \quad (4.28)$$

Il suffit par la suite de remplacer  $H$  par  $H_0 + \Delta V$  dans la relation nous donnant l'énergie libre; c'est à dire en combinant les équations 4.21 et 4.22:

$$F = -kT \ln \left( \text{Tr} \left[ e^{(H_0 + \Delta V)/kT} \right] \right) = -kT \ln \left( \sum_n e^{(E_n^{(0)} + \Delta V_n)/kT} \right) \quad (4.29)$$

Une expansion en série de  $\Delta V$  et quelques transformations vont nous permettre d'écrire  $F$  sous une forme plus simple:

$$F = F_0 + \langle \Delta V \rangle - \frac{1}{2kT} (\langle \Delta V^2 \rangle - \langle \Delta V \rangle^2) + O(\Delta V^3) \quad (4.30)$$

où  $F_0$  est l'énergie libre du gaz parfait de phonons et  $\langle \Delta V \rangle$  la valeur moyenne de  $\Delta V$ :

$$F_0 = -kT \ln \left( \text{Tr} [e^{H_0/kT}] \right) = -kT \ln \left( \sum_n e^{E_n^{(0)}/kT} \right) \quad (4.31)$$

$$\langle \Delta V \rangle = \frac{\int \Delta V e^{-H^0/kT} d^3\xi_1 \dots d^3\xi_N}{\int e^{-H^0/kT} d^3\xi_1 \dots d^3\xi_N} \quad (4.32)$$

Il faut rappeler ici comme on l'a vu au début de cette partie, que lorsque l'on ne considère pas les termes anharmoniques de vibration, alors les calculs se simplifient considérablement. En effet lorsque  $\Delta V = 0$ , en utilisant de façon astucieuse les coordonnées normales pour écrire l'hamiltonien, et par la suite à l'aide d'un modèle simplifié du solide, celui de Debye par exemple, on peut arriver à une expression analytique simple pour l'énergie libre d'un gaz idéal de phonons.

$$F_0 = -N\eta + NkT[3\ln(1 - e^{-x}) - D(x)] \quad (4.33)$$

où  $x = \frac{\theta_D}{T}$  ( $\theta_D$  est la température de Debye) et  $D(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x \frac{y^3}{e^y - 1} dy$  (fonction de Debye). Le fait de garder les termes anharmoniques est ce qui complique les choses. Toute la difficulté se trouve dans la détermination de ces termes anharmoniques et c'est ceux-ci qui vont être principalement abordés dans les parties 4.2.2 et 4.2.3.

Une caractérisation complète du solide incluant les contributions anharmoniques à l'énergie libre de Helmholtz est nécessaire pour la détermination des propriétés du cristal ainsi que de la compréhension du phénomène de cristallisation. En effet, la localisation du changement de phase est une des raisons principales de la préoccupation qui pousse la communauté scientifique de plus en plus loin dans la précision des calculs en incluant les termes anharmoniques.



La cristallisation d'un liquide de Coulomb a lieu lorsque l'énergie libre du solide devient plus basse que celle du liquide. Ainsi, pour évaluer la valeur de  $\Gamma_{crit}$  qui identifie la transition de phase il suffit de localiser l'intersection des courbes d'énergie solide et liquide. Plus l'énergie de chaque phase est connue avec précision plus la détermination de  $\Gamma_{crit}$  sera exacte. La contribution anharmonique ne représente que 1% de l'énergie totale, mais une variation de cette dernière entraîne un changement dans la valeur de  $\Gamma_{crit}$  qui, même petite, est importante pour déterminer avec exactitude le point de cristallisation. La valeur de  $\Gamma_{crit}$  a une histoire intéressante. Sa détermination se fait par des simulations MC en supposant un nombre  $N$  de particules. Dans le travail de pionnier, Brush, Sahlin et Teller (1966), pour un système de  $N = 32$  observent une transition à  $\Gamma_{crit} \simeq 125$ . Par la suite Hansen (1973) et Pollock & Hansen (1973) trouvent  $155 \pm 10$ . Cependant, Dewitt (1976) doute de la précision de Hansen pour des  $\Gamma$  élevés, ce qui motiva Slattery et al. (1980) de faire de nouveaux calculs plus précis. Ils trouvent  $168 \pm 4$  pour  $N = 128$  et  $171 \pm 3$  pour des  $N$  plus élevés. Ogata & Ichimaru (1987) trouvent  $180 \pm 1$ . Dubin (1990) en incluant contrairement aux autres un terme anharmonique d'ordre supérieur donne 172. D'après Farouki & Hamaguchi (1993) on a  $\Gamma_{crit} \simeq 173$ . Puis Potekhin & Chabrier (2000), en réutilisant les calculs de Farouki & Hamaguchi (1993) mais en y apportant quelques améliorations, donnent  $175,0 \pm 0,4$ .

On a vu que dans l'expression 4.30,  $F_0$  représente l'énergie harmonique et le reste l'énergie anharmonique. Cependant, l'énergie harmonique totale peut en fait être séparée en énergie de Madelung qui est l'énergie purement statique calculée pour une configuration du réseau parfaite, et en énergie cinétique harmonique. Donc ce que nous cherchons à déterminer en tenant compte de la paramétrisation en  $\Gamma$  est:

$$F = \overbrace{F_{Mad}(\Gamma) + F_{har}(\Gamma)}^{F_0} + F_{an}(\Gamma) \quad (4.34)$$

L'énergie de Madelung  $F_{Mad}(\Gamma)$  représente une grande fraction de l'énergie totale dans la phase fluide pour des valeurs de  $\Gamma$  élevées. Cela est d'autant plus vrai dans la phase solide. Dans la phase solide, la déviation par rapport à l'énergie statique due aux mouvements des particules, c'est à dire  $F_{har}(\Gamma)$  et  $F_{an}(\Gamma)$ , ne représente qu'environ 1% de l'énergie totale, mais

il est cependant important de la calculer puisque les propriétés thermique en dépendant.

### 4.3.2 Les méthodes numériques

La majorité des approches théoriques qui visent à déterminer les termes cinétiques, sont basées sur la théorie des perturbations que nous venons de voir. Cependant l'application systématique de cette technique n'est pas bien établie. La difficulté avec cette approche est la suivante: la contribution anharmonique,  $\Delta V$ , à l'énergie libre est une série infinie du potentiel perturbé, mais la perturbation  $U_n$  est elle-même une expansion en série infinie de Taylor de l'énergie potentielle du cristal. Il n'est donc pas simple de calculer les termes d'ordre de plus en plus grand. Par exemple dans la relation 4.30 on a dû laisser de côté tout ce qui est du troisième ordre en  $\Delta V$ . On aurait aussi pu garder tout jusqu'au quatrième ordre pour être plus précis et négliger le cinquième ordre, cependant à chaque étape le nombre de combinaisons augmente rapidement et il faut être sûr de ne pas oublier des termes de même ordre. Il va falloir trouver une façon de bien recenser tous les termes à chaque pas d'approximation et faire appel à des calculs numériques pour les estimer.

Deux approches ont surtout été utilisées (Shukla & Cowley (1971)). L'approche plus traditionnelle, le schéma ordonné de van Hove (1961), consiste à introduire un paramètre  $\lambda$  de dimension égale à un déplacement atomique typique divisé par la distance interatomique moyenne, afin de déterminer l'ordre de chaque terme de la série anharmonique par rapport à ce paramètre. On identifie alors les terme en  $\lambda^2$  puis ceux en  $\lambda^3$ ,  $\lambda^4$  etc. La dérivation de ces diverses contributions ainsi que leur évaluation pour le cas d'un modèle simple ont été décrites par Maradudin et al. (1961). L'approche alternative est le formalisme auto-cohérent de Choquard (1967) et Kugler (1969). Dans cette seconde approche on peut écrire l'énergie libre totale sous la forme d'une énergie libre harmonique mais avec des fréquence renormalisées. Cette façon simplifiée de présenter l'énergie libre permet d'utiliser un procédé numérique itératif simple afin de faire les calculs. Dans cette deuxième approche, des versions différentes ont aussi été essayées par la suite, la théorie harmonique auto-cohérente, les théories auto-cohérentes de Einstein ou de Debye.

Alternativement, au lieu d'utiliser les diverses méthodes numériques avec les résultats ob-



tenus par la théorie des perturbations, on peut paramétriser directement l'énergie libre de notre plasma à l'aide de simulations MC en exploitant la propriété des grandeurs thermodynamiques qui peuvent être exprimées en fonction du paramètre  $\Gamma$ . Les simulations MC de l'OCP classique ont été utilisées considérablement depuis une trentaine d'année afin d'obtenir l'EOS de l'état liquide ainsi que l'emplacement de la transition de phase liquide/solide. Bien que de façon moins systématique, elles l'ont aussi été pour l'état solide. L'utilisation des résultats MC est difficile car l'énergie thermique ( $\frac{U_{th}}{kT} = \frac{U_{har}}{kT} + \frac{U_{an}}{kT}$ ) est moins de 2% de l'énergie totale ( $\frac{U}{kT}$ ) pour des valeurs de  $\Gamma$  élevées près de la phase de transition. Il faut que  $\frac{U_{th}}{kT}$  soit connue avec une précision d'environ un dixième de pourcent dans les deux phases pour que les résultats soit fiables. De plus, les résultats MC sont très sensibles à toute dépendance qui pourrait exister dans les simulations numériques avec le nombre de particules  $N$  (Stringfellow et al. (1990)). Le procédé MC utilisé a été présenté dans la section précédente 4.2 dans le cadre de la phase liquide.

La formule d'interpolation de l'énergie interne utilisée dans le cas solide est basée sur une expansion asymptotique de  $U$  pour le paramètre  $\frac{1}{\Gamma}$ :

$$\frac{U}{NkT} = A_{-1}\Gamma + A_0 + \frac{A_1}{\Gamma} + \frac{A_2}{\Gamma^2} + \frac{A_3}{\Gamma^3} + \dots \quad (4.35)$$

où les différents paramètres sont à déterminer.  $A_{-1}$  correspond à l'énergie électrostatique de Madelung et  $A_0$  à la contribution harmonique des vibrations du cristal. Les termes d'ordre plus élevé se rapportent aux corrections anharmoniques de l'énergie.

Souvent une combinaison de simulations Monte Carlo et de résolutions numériques est utilisée afin de calculer le plus précisément possible la valeur des coefficients. Nombreuses sont les études qui ont été faites, soit par méthode numérique, soit par simulation MC soit en combinant les deux. Certaines recherches considèrent plus de termes dans l'expansion que d'autres. Une des préoccupations est de savoir si le réseau cristallin considéré va être un réseau cubique centré (*body-centered cubic* ou bcc en anglais) ou un réseau cubique à faces centrées (*face-centered cubic* ou fcc en anglais). Cependant toutes concordent pour les coefficients les plus importants de 4.35. La valeur du terme en  $\Gamma$  est bien connu: il s'agit de l'énergie

électrostatique de Madelung du réseau et sa valeur numérique est établie. La constante  $A_0$  correspondant à la contribution harmonique est aussi plus ou moins similaire dans la plupart des études. Les variantes majeures entre les diverses publications sont les coefficients des termes en  $\frac{1}{\Gamma}$ ,  $\frac{1}{\Gamma^2}$  ou  $\frac{1}{\Gamma^3}$  représentatifs de l'apport anharmonique au mouvement des ions. Ceux-ci vont varier en fonction de la précision des calculs et en fonction de l'inclusion ou non des effets quantiques qui ont souvent été négligés dans les premières études généralement classiques.

### 4.3.3 Les divers résultats

Nous présentons ici en ordre chronologique quelques unes des recherches qui sont des plus importantes à notre connaissance.

1. L'étude de Pollock & Hansen (1973) se base, sur leurs propres simulations MC, et sur l'approche théorique de Zwanzig (1954) selon qui les termes anharmoniques importants sont aux nombres de deux - un proportionnel à  $\frac{1}{\Gamma}$  et un deuxième proportionnel à  $\frac{1}{\Gamma^2}$ . Leurs résultats de simulations (faites pour un nombre de particules  $N=250$ ) de l'OCP classique portent à croire que le terme proportionnel à  $\frac{1}{\Gamma}$  est très petit et peut être considéré équivalent à zéro. Ils présentent  $U$  par  $\frac{U}{NkT} = \frac{U_{Mgd}}{NkT} + \frac{\Delta U}{NkT}$ , où  $\frac{\Delta U}{NkT}$  peut être scindée en somme de la contribution harmonique qui vaut  $\frac{3}{2}$  ( $\frac{1}{2}$  par degré de liberté), et des contributions anharmoniques de la manière suivante:

$$\frac{\Delta U}{NkT} = \frac{3}{2} + \frac{a}{\Gamma} + \frac{b}{\Gamma^2} \text{ avec } a \simeq 0 \text{ et } b = 3500 \quad (4.36)$$

L'énergie interne totale est alors:

$$\frac{U}{NkT} = -0,895929\Gamma + \frac{3}{2} + \frac{3500}{\Gamma^2} \quad (4.37)$$

Puis, après intégration et réarrangements:

$$\frac{F}{NkT} = \underbrace{-0,895929\Gamma}_{\text{énergie électrostatique du réseau bcc}} + \underbrace{\frac{9}{2}\ln\Gamma - 1,8856 + \frac{3}{2}\ln(kT)_{Ry}}_{\text{termes harmoniques}} - \underbrace{\frac{1750}{\Gamma^2}}_{\text{terme anharmonique}} \quad (4.38)$$

2. Albers & Gubernatis (1986) combinent calculs numériques des termes de l'expansion en série de l'énergie et simulations MC. En effet, dans un premier temps, à l'aide d'une des deux approches analytiques vues précédemment, ils expriment les coefficients de la paramétrisation en  $\Gamma$  de  $F$  en fonction des  $U_n$  (voir équation 4.25) pour chaque étape. Pour le premier terme anharmonique en  $\frac{1}{\Gamma}$  on a (il ne faut pas confondre l'énergie interne  $U$ , et les fonctions  $U_n$ ):

$$\frac{U}{NkT} = -0.895929256\Gamma + 3 + \frac{U_3 - U_4}{\Gamma} \quad (4.39)$$

Par la suite, la comparaison est faite avec les valeurs des coefficients obtenues par simulation MC (en utilisant jusqu'à 5800 particules). Puis le deuxième coefficient anharmonique en  $\frac{1}{\Gamma^2}$  est déterminé de façon analogue. Le résultat final est:

$$\frac{U}{NkT} = -0.895929256\Gamma + 3 - \frac{3.647}{\Gamma} + \frac{3019}{\Gamma^2} \quad (4.40)$$

3. De la même façon que Albers et Gubernatis, Dubin (1990) va d'abord déterminer le coefficient  $A_1$  qu'il donne en fonction de  $U_3$  et  $U_4$  de la manière suivante:

$$A_1 = \Gamma \left( \frac{\langle U_3^2 \rangle}{72N(kT)^2} - \frac{\langle U_4 \rangle}{24NkT} \right) \quad (4.41)$$

Ce facteur est alors déterminé numériquement par la suite. Puis à l'aide de la méthode MC ( $N=686$ ) il détermine le coefficient  $A_2$  et va même pousser les calculs plus loin que Albers & Gubernatis (1986) en incluant un terme en  $\frac{1}{\Gamma^3}$ . Le résultat donné est:

$$\frac{F_{an}}{NkT} = -\left[ \frac{10,84}{\Gamma} + \frac{176,4}{\Gamma^2} + \frac{5,980 \cdot 10^4}{\Gamma^3} \right] \quad (4.42)$$

4. D'après Stringfellow et al. (1990) l'énergie thermique de la phase solide a bien été reproduite à l'aide de la forme fonctionnelle par Pollock & Hansen (1973):

$$\frac{U_{th}}{NkT} = \underbrace{\frac{3}{2}}_{\text{terme harmonique}} + \underbrace{\frac{f}{\Gamma} + \frac{h}{\Gamma^2}}_{\text{termes anharmoniques}} \quad (4.43)$$

Cependant, ils estiment que la preuve de Pollock & Hansen (1973), montrant que le coefficient  $f \simeq 0$ , n'est pas rigoureuse, et donnent des résultats anharmoniques avec un facteur  $f$  non nul comme l'avaient déjà fait Albers & Gubernatis (1986) et Dubin (1990) mais avec des valeurs différentes et en considérant les deux types de réseau possible.

$$\frac{F}{NkT} = \left\{ \begin{array}{l} \frac{U_{Mad_{bcc}}}{NkT} \\ \frac{U_{Mad_{fcc}}}{NkT} \end{array} \right\} + \frac{9}{2} \ln \Gamma - \frac{f}{\Gamma} - \frac{h}{2\Gamma^2} - \left\{ \begin{array}{l} 1,8856 \text{ pour } bcc \\ 1,8454 \text{ pour } fcc \end{array} \right.$$

Les meilleurs résultats sont obtenus pour un réseau bcc avec:  $f = 3,9437$  et  $h = 2490$ . Leurs simulations MC utilisent un nombre  $N = 686$  particules pour le réseau bcc et  $N = 500$  pour le réseau fcc. La justification de choix de  $N$  fixé, contrairement à des études précédentes où plusieurs simulations avec des nombres de particules différents étaient faites, résulte de la certitude que ces valeurs de  $N$  soient suffisamment élevées pour représenter la limite thermodynamique.

5. Selon Chabrier et al. (1992) la cristallisation a toujours été supposée classique puisque les effets quantiques étaient considérés petits, mais ils sont importants cependant et il est indispensable de considérer le processus de refroidissement comme une transformation d'un liquide *quantique* en un solide *quantique*. Ils évaluent la précision de l'approximation harmonique pour l'OCP par simulation MC et la représentation donnée par Albers & Gubernatis (1981, 1986) avec les modèles de Einstein et Debye leur est satisfaisante. La contribution harmonique des phonons (en excluant l'énergie électrostatique de Madelung ainsi que les termes anharmoniques) est obtenue par un modèle spectral simple qui est en accord avec les simulations MC et redonne les bonnes limites aussi bien dans la limite

classique ( $\xi \ll 1$ ) que la limite quantique ( $\xi \gg 1$ ):

$$\frac{F_{th}}{NkT} = \frac{3}{2}\xi\mu_1 + \left[-\frac{3}{2}D_3(\alpha\xi) + 2\ln(1 - e^{-\alpha\xi}) + \ln(1 - e^{-\gamma\xi})\right] \quad (4.44)$$

où  $\mu_1 = \frac{1}{3N} \sum_{\vec{q}, \lambda} \left[ \frac{\omega_\lambda(\vec{q})}{\omega_P} \right]^n = 0,511$ , est le premier moment du spectre de fréquence de l'OCP (Albers & Gubernatis (1981)) avec  $\omega_\lambda(\vec{q})$  la fréquence phonon associée au vecteur d'onde  $\vec{q}$  et à la polarisation  $\lambda$ , et  $\omega_P$  la fréquence plasma. Les paramètres  $\alpha$  et  $\gamma$  ont pour valeurs respectives 0,393 et 0,832. Enfin,  $D_3(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x \frac{t^3}{e^t - 1} dt$  est la fonction de Debye. La variable  $\xi$  est le paramètre ( $\xi = \frac{\hbar\omega_P}{kT} = \frac{\hbar}{kT} \left[ \frac{4\pi(Ze)^2 N}{mV} \right]^{1/2}$ ) qui mesure le degrés de quanticité du système.

Au niveau de la correction anharmonique, Chabrier (1993) considère que la meilleur est celle de Stringfellow et al. (1990).

6. Pour ce qui est du terme anharmonique, un dernier résultat est celui de Farouki & Hamaguchi (1993). D'après eux, jusqu'à Stringfellow et al. (1990), mises à part quelques exceptions, une approche était dominante. Celle qui adoptait un coefficient  $A_1$  identiquement nul et négligeait l'importance de  $A_3$ , ne gardant ainsi que le coefficient  $A_2$ . Cette paramétrisation donne des résultats satisfaisants pour  $\Gamma \leq 300$ , cependant elle est complètement non cohérente avec les lissages expérimentaux aux données de l'énergie libre pour des  $\Gamma \geq 300$  c'est à dire dans la région de cristallisation plus poussée. Ils présentent une énergie libre similaire à celle de Stringfellow et al. (1990), mais poussent leurs simulations MC encore plus loin, comme l'avait fait Dubin (1990), pour obtenir des termes anharmoniques jusqu'au coefficient d'ordre  $\Gamma^{-3}$  et même  $\Gamma^{-4}$ . Ils utilisent un nombre de particules plus élevé que Stringfellow et al. (1990), soit  $N = 1024$ . D'après les résultats obtenus, la paramétrisation à trois termes est privilégiée puisque l'incertitude est appréciablement plus faible que celle de la paramétrisation à quatre termes. Cependant il est à noter que la précision des termes n'est pas parfaite puisque l'absence de degrés plus élevés les obligent à essayer de "compenser". En fixant  $A_1$  par exemple à 10,84 comme l'avait déterminé Dubin (1990), les deux autres termes sont moins précis. Enfin, des mesures d'énergie interne ont été faites sur un grand intervalle pour la phase

solide afin d'estimer les coefficients anharmoniques par la méthode des moindres carrés. La paramétrisation à trois termes donne des meilleurs résultats pour l'intervalle  $170 \leq \Gamma \leq 2000$  qu'une paramétrisation avec deux coefficients mais avec une valeur de  $A_1$  de quelques 10% plus bas que la prédiction de la théorie des perturbations (Nagara et al. (1987) et Dubin (1990)). Les résultats sont présentés de la manière suivante pour un réseau bcc:

$$\frac{F}{NkT} = \underbrace{-0,895929256\Gamma}_{\text{énergie électrostatique de Madelung}} + \underbrace{\frac{9}{2}\ln\Gamma - 1,8856 + \dots}_{\text{termes harmoniques}} + \dots + \underbrace{-\frac{8,18}{\Gamma} - \frac{2396}{2\Gamma^2} + \frac{3,614 \cdot 10^5}{3\Gamma^3}}_{\text{termes anharmoniques}} \quad (4.45)$$

7. Enfin, une autre correction récente est celle qui considère les effets de polarisation pour lesquels nous avons déjà présenté les résultats de la phase liquide par Potekhin & Chabrier (2000) dans la section précédente. Les mêmes auteurs présentent une relation de paramétrisation lissée sur des résultats numériques pour l'énergie de Thomas-Fermi dans le cas solide:

$$\frac{F_{ie}}{NkT} = -f_{\infty}(x_r)\Gamma [1 + A(x_r)[Q(\xi)/\Gamma]^s] \quad (4.46)$$

où

$$f_{\infty}(x) = a_{TF}Z^{2/3}b_1\sqrt{1 + b_2/x^2}, \quad (4.47)$$

$$A(x) = \frac{b_3 + a_3x^2}{1 + b_4x^2}, \quad (4.48)$$

$$Q(\xi) = \sqrt{1 + (q\xi)^2} \quad (4.49)$$



et les paramètres  $s$  et  $b_1, b_2, b_3$  et  $b_4$  dépendent de  $Z$ :

$$s = [1 + 0,01(\ln Z)^{3/2} + 0,097Z^{-2}]^{-1}, \quad (4.50)$$

$$b_1 = 1 - a_1 Z^{-0,267} + 0,27Z^{-1}, \quad (4.51)$$

$$b_2 = 1 + \frac{2,25}{Z^{1/3}} \frac{1 + a_2 Z^5 + 0,222Z^6}{1 + 0,222Z^6}, \quad (4.52)$$

$$b_3 = \frac{a_4}{1 + \ln Z}, \quad (4.53)$$

$$b_4 = 0,395 \ln Z + 0,347Z^{-3/2} \quad (4.54)$$

Par la suite, le paramètre  $a_{TF}$ , relié au  $c_{TF}$  que l'on avait vu dans la section pour le plasma liquide, est choisi pour reproduire la limite de Thomas-Fermi à  $Z \rightarrow \infty$ :  $a_{TF} = 0,00352$ . Les paramètres numériques  $a_1, a_2, a_3, a_4$  et  $q$  sont donnés pour un réseau bcc:  $a_1 = 1,1866, a_2 = 0,684, a_3 = 17,9, a_4 = 41,5$  et  $q = 0,205$ . Le paramètre  $\xi$  est le même que celui du terme harmonique, vu précédemment, présenté par Chabrier (1993). Pour finir, le paramètre de relativité  $x_r$ , est donné par  $\hbar(3\pi^2 n_e)^{1/3} / (m_e c)$ .

Il est nécessaire de préciser que dans le cas quantique ( $\xi \neq 0$ ) la paramétrisation n'est valide que pour  $Z \geq 3$  (cela a peu d'importance pour notre cas puisque dans le noyau des naines blanches les espèces présentes sont majoritairement le carbone et l'oxygène).

#### 4.3.4 Ce que nous allons utiliser

Nous allons utiliser pour la contribution harmonique des phonons  $F_{har}^i$ , celle donnée par Chabrier et al. (1992) car elle est en accord avec des simulations MC et redonne les bonnes limites aussi bien dans la limite classique que dans la limite quantique:

$$\frac{F_{har}^i}{NkT} = \frac{3}{2}\eta\mu_1 + \left[-\frac{3}{2}D_3(\alpha\eta) + 2\ln(1 - e^{-\alpha\eta}) + \ln(1 - e^{-\gamma\eta})\right] \quad (4.55)$$

Pour la contribution anharmonique  $F_{an}^i$ , nous allons utiliser les résultats obtenus par Farouki & Hamaguchi (1993) par simulation MC dans le cas classique. En effet, il s'agit de

la détermination la plus récente (par rapport à celle de Stringfellow et al. (1990)), et celle qui est aussi utilisée par Potekhin & Chabrier (2000). Potekhin & Chabrier (2000) essaye de déterminer avec précision le point de cristallisation de l'OCP,  $\Gamma_{crit}$  en utilisant les meilleurs résultats analytiques et numériques disponibles pour les phases liquide et solide.

Or, pour la phase solide, ils utilisent la paramétrisation avec trois coefficients de Farouki & Hamaguchi (1993) dans l'intervalle  $170 \leq \Gamma \leq 400$ . Il est nécessaire de préciser pourtant une chose. On remarque que la relation pour le terme harmonique est donnée pour un régime quantique et dépend d'un paramètre de quantité  $\xi$ . Mais le terme anharmonique n'est considéré que de façon classique. En effet, la contribution anharmonique étant un d'ordre d'approximation supérieur à la contribution harmonique on considère que l'inclusion de phénomènes quantiques à ce niveau peut être négligée. En reprenant les termes anharmoniques de l'équation 4.45 on a:

$$\frac{F_{an}^i}{NkT} = -\frac{8,18}{\Gamma} - \frac{1198}{\Gamma^2} + \frac{1.204 \cdot 10^5}{\Gamma^3} \quad (4.56)$$

L'énergie de Madelung pour un réseau bcc est bien connue comme étant:

$$\frac{F_{Mad}^i}{NkT} = -0,895929256\Gamma \quad (4.57)$$

Enfin pour l'énergie de polarisation, c'est la seule version disponible à notre connaissance qui va être utilisée, soit celle de Potekhin & Chabrier (2000). Sans spécifier les différents paramètres qui l'ont déjà été dans la sous-section précédente nous donnons la relation de  $F_{ie}^s$  en fonction de  $\Gamma$  et  $\xi$ :

$$\frac{F_{ie}^s}{NkT} = -f_{\infty}(x_r)\Gamma [1 + A(x_r)[Q(\xi)/\Gamma]^s] \quad (4.58)$$

## 4.4 Version finale des corrections aux gaz parfait

### 4.4.1 Dérivation des autres grandeurs thermodynamiques

Dans les sections 4.2 et 4.3 de ce chapitre nous avons déterminé les huit termes d'énergie libre additionnels à ceux des gaz parfaits. Il ne reste qu'à calculer pour chacune de ces contributions, la pression  $P$ , l'énergie interne  $U$ , le gradient adiabatique  $\nabla_{ad}$ , les compressibilités à densité et température constantes,  $\chi_T$  et  $\chi_{\rho}$  et la chaleur spécifique  $C_V$ . Pour cela nous allons reprendre nos fameuses relations 2.2 - 2.8 et en y insérant les relations 4.13, 4.14, 4.20, 4.55, 4.56, 4.57 et 4.58.

Nous traitons d'abord les termes  $F_{Mad}^i$ ,  $F_{an}^i$ ,  $F_{har}^i$  et  $F_{ex}^i$  qui partagent une même propriété commune; ils dépendent d'un paramètre unique, soit  $\Gamma$ , soit  $\xi$ . Après quelques transformations mathématiques, on peut récrire les relations 2.2 - 2.8, en se rappelant que  $\Gamma = \frac{Z^2 e^2}{kT} \left[ \frac{4\pi N}{3V} \right]^{1/3}$ ,  $\xi = \frac{\hbar}{kT} \left[ 4\pi \frac{(Ze)^2 N}{mV} \right]^{1/2}$ , et en posant  $F' = \frac{F}{NkT}$  (on suppose que  $F'$  dépend uniquement d'une variable, soit de  $\Gamma$  soit de  $\xi$ ):

$$\frac{U}{NkT} = \frac{\Gamma}{\rho V} \frac{\partial F'}{\partial \Gamma} \quad \text{et} \quad \frac{U}{NkT} = \frac{\xi}{\rho V} \frac{\partial F'}{\partial \xi} \quad (4.59)$$

$$\frac{P}{NkT} = \frac{\Gamma}{3V} \frac{\partial F'}{\partial \Gamma} \quad \text{et} \quad \frac{P}{NkT} = \frac{\xi}{2V} \frac{\partial F'}{\partial \xi} \quad (4.60)$$

$$\chi_T = -\Gamma \left( \frac{\partial^2 F'}{\partial \Gamma^2} \right) \left( \frac{\partial F'}{\partial \Gamma} \right)^{-1} \quad \text{et} \quad \chi_T = -\xi \left( \frac{\partial^2 F'}{\partial \xi^2} \right) \left( \frac{\partial F'}{\partial \xi} \right)^{-1} \quad (4.61)$$

$$\chi_{\rho} = \frac{1}{3} \left[ 4 + \Gamma \left( \frac{\partial^2 F'}{\partial \Gamma^2} \right) \left( \frac{\partial F'}{\partial \Gamma} \right)^{-1} \right] \quad \text{et} \quad \chi_{\rho} = \frac{1}{3} \left[ 1 + \xi \left( \frac{\partial^2 F'}{\partial \xi^2} \right) \left( \frac{\partial F'}{\partial \xi} \right)^{-1} \right] \quad (4.62)$$

$$\frac{C_V}{Nk} = -\frac{\Gamma^2}{\rho V} \frac{\partial^2 F'}{\partial \Gamma^2} \quad \text{et} \quad \frac{C_V}{Nk} = -\frac{\eta^2}{\rho V} \frac{\partial^2 F'}{\partial \xi^2} \quad (4.63)$$

$$\nabla_{ad} = \frac{1}{4} \quad \text{et} \quad \nabla_{ad} = \frac{1}{3} \quad (4.64)$$

Dans chacune de ces expressions les dérivées premières et deuxièmes de  $F'$  par rapport à  $\xi$  ou  $\Gamma$  sont à déterminer. On obtient successivement les dérivées suivantes pour les termes

$F_{Mad}^i$ ,  $F_{an}^i$ ,  $F_{har}^i$  et  $F_{ex}^i$ :

$$\begin{cases} \frac{\partial F'}{\partial \Gamma} = -0.895929256 \\ \frac{\partial^2 F'}{\partial \Gamma^2} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial F'}{\partial \Gamma} = \frac{8,18}{\Gamma^2} + \frac{2396}{\Gamma^3} - \frac{3,614 \cdot 10^5}{\Gamma^4} \\ \frac{\partial^2 F'}{\partial \Gamma^2} = -\frac{16,36}{\Gamma^3} - \frac{7188 \pm 493}{\Gamma^4} + \frac{1,4456 \cdot 10^6}{\Gamma^5} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial F'}{\partial \xi} = \frac{3}{2} \mu_1 + \frac{\gamma}{e^{\gamma\xi} - 1} + 2 \frac{D_3(\alpha\xi)}{\xi} \\ \frac{\partial^2 F'}{\partial \xi^2} = -\left(\frac{\gamma}{e^{\gamma\xi} - 1}\right)^2 e^{\gamma\xi} + \frac{6}{\xi} \left(\frac{\alpha}{e^{\alpha\gamma} - 1}\right) - 8 \frac{D_3(\alpha\xi)}{\xi^2} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial F'}{\partial \Gamma} = \frac{A_1 \Gamma}{\sqrt{\Gamma^2 + A_2 \Gamma}} + A_3 \left[ \frac{\sqrt{\Gamma}}{1 + \Gamma} \right] + \frac{B_1 \Gamma}{\Gamma + B_2} + \frac{\Gamma B_3}{\Gamma^2 + B_4} \\ \frac{\partial^2 F'}{\partial \Gamma^2} = \frac{A_1 A_2 \Gamma^{-1/2}}{2(\Gamma + A_2)^{3/2}} - \frac{A_3(\Gamma - 1)}{2\sqrt{\Gamma}(\Gamma + 1)^2} + \frac{B_1 B_2}{(\Gamma + B_2)^2} - B_3 \frac{\Gamma^2 - B_4}{(\Gamma^2 + B_4)^2} \end{cases}$$

Par la suite, en remplaçant le tout dans les relations de définitions des grandeurs thermodynamiques on obtient quatres groupes de résultats.

Tout d'abord pour l'énergie électrostatique de Madelung:

$$F_{Mad}^i \Rightarrow \begin{cases} \frac{P_{Mad}^i}{NkT} = -0.895929256 \frac{\Gamma}{3V} \\ \frac{U_{Mad}^i}{NkT} = -0.895929256 \frac{\Gamma}{\rho V} \\ \chi_{T_{Mad}^i} = 0 \\ \chi_{\rho_{Mad}^i} = \frac{4}{3} \\ \frac{C_{v_{Mad}^i}}{Nk} = 0 \\ \nabla_{ad_{Mad}^i} = \frac{1}{4} \end{cases}$$

Puis l'énergie anharmonique du cristal:

$$F_{an}^i \Rightarrow \begin{cases} \frac{P_{an}^i}{NkT} = \frac{1}{3V} \left[ \frac{8,18}{\Gamma} + \frac{2396}{\Gamma^2} - \frac{3,614 \cdot 10^5}{\Gamma^3} \right] \\ \frac{U_{an}^i}{NkT} = \frac{1}{\rho V} \left[ \frac{8,18}{\Gamma} + \frac{2396}{\Gamma^2} - \frac{3,614 \cdot 10^5}{\Gamma^3} \right] \\ \chi T_{an}^i = \frac{8,18 + \frac{3594}{\Gamma} - \frac{7,228 \cdot 10^5}{\Gamma^2}}{4,09 + \frac{1198}{\Gamma} - \frac{1,807 \cdot 10^5}{\Gamma^2}} \\ \chi \rho_{an}^i = \frac{1}{3} \left[ 4 - \frac{8,18 + \frac{3594}{\Gamma} - \frac{7,228 \cdot 10^5}{\Gamma^2}}{4,09 + \frac{1198}{\Gamma} - \frac{1,807 \cdot 10^5}{\Gamma^2}} \right] \\ \frac{C_{v_{an}^i}}{Nk} = \frac{1}{\rho V} \left[ \frac{16,36}{\Gamma} + \frac{7188}{\Gamma^2} - \frac{1,4456 \cdot 10^6}{\Gamma^3} \right] \\ \nabla ad_{an}^i = \frac{1}{4} \end{cases}$$

L'énergie harmonique:

$$F_{har}^i \Rightarrow \begin{cases} \frac{P_{har}^i}{NkT} = \frac{1}{2V} \left[ \frac{3}{2} \xi \mu_1 + \left( \frac{\gamma \xi}{e^{\gamma \xi} - 1} \right) + 2D_3(\alpha \xi) \right] \\ \frac{U_{har}^i}{NkT} = \frac{1}{\rho V} \left[ \frac{3}{2} \xi \mu_1 + \left( \frac{\gamma \xi}{e^{\gamma \xi} - 1} \right) + 2D_3(\alpha \xi) \right] \\ \chi T_{har}^i = \frac{8D_3(\alpha \xi) + \left( \frac{\gamma \xi}{e^{\gamma \xi} - 1} \right)^2 e^{\gamma \xi} - 6 \left( \frac{\alpha \xi}{e^{\alpha \xi} - 1} \right)}{2D_3(\alpha \xi) + \left( \frac{\gamma \xi}{e^{\gamma \xi} - 1} \right) + \frac{3}{2} \xi \mu_1} \\ \chi \rho_{har}^i = \frac{-2D_3(\alpha \xi) - \left( \frac{\gamma \xi}{e^{\gamma \xi} - 1} \right)^2 e^{\gamma \xi} + 3 \left( \frac{\gamma \xi}{e^{\gamma \xi} - 1} \right) + 6 \left( \frac{\alpha \xi}{e^{\alpha \xi} - 1} \right) + 3 \frac{3}{2} \xi \mu_1}{4D_3(\alpha \xi) + 2 \left( \frac{\gamma \xi}{e^{\gamma \xi} - 1} \right) + 3 \xi \mu_1} \\ \frac{C_{v_{har}^i}}{Nk} = \frac{1}{\rho V} \left[ 8D_3(\alpha \xi) + \left( \frac{\gamma \xi}{e^{\gamma \xi} - 1} \right)^2 e^{\gamma \xi} - 6 \left( \frac{\alpha \xi}{e^{\alpha \xi} - 1} \right) \right] \\ \nabla ad_{har}^i = \frac{1}{3} \end{cases}$$

Et enfin l'énergie d'excès du mélange:

$$F_{ex}^i \Rightarrow \begin{cases} \frac{P_{ex}^i}{NkT} = \frac{1}{3V} \left\{ \Gamma^{3/2} \left[ \frac{A_1}{\sqrt{\Gamma+A_2}} + \frac{A_3}{\Gamma+1} \right] + \frac{\Gamma^2 B_3}{\Gamma^2+B_4} + \frac{\Gamma^2 B_1}{\Gamma+B_2} \right\} \\ \frac{U_{ex}^i}{NkT} = \frac{1}{\rho V} \left\{ \Gamma^{3/2} \left[ \frac{A_1}{\sqrt{\Gamma+A_2}} + \frac{A_3}{\Gamma+1} \right] + \frac{\Gamma^2 B_3}{\Gamma^2+B_4} + \frac{\Gamma^2 B_1}{\Gamma+B_2} \right\} \\ \chi T_{ex}^i = -\Gamma \frac{\frac{A_1 A_2 \Gamma^{-1/2}}{2(\Gamma+A_2)^{3/2}} - \frac{A_3(\Gamma-1)}{2\sqrt{\Gamma}(\Gamma+1)^2} + \frac{B_1 B_2}{(\Gamma+B_2)^2} - B_3 \frac{\Gamma^2 - B_4}{(\Gamma^2+B_4)^2}}{\frac{A_1 \Gamma}{\sqrt{\Gamma^2+A_2 \Gamma}} + A_3 \left[ \frac{\sqrt{\Gamma}}{1+\Gamma} \right] + \frac{B_1 \Gamma}{\Gamma+B_2} + \frac{\Gamma B_3}{\Gamma^2+B_4}} \\ \chi \rho_{ex}^i = \frac{1}{3} \left[ 4 + \Gamma \frac{\frac{A_1 A_2 \Gamma^{-1/2}}{2(\Gamma+A_2)^{3/2}} - \frac{A_3(\Gamma-1)}{2\sqrt{\Gamma}(\Gamma+1)^2} + \frac{B_1 B_2}{(\Gamma+B_2)^2} - B_3 \frac{\Gamma^2 - B_4}{(\Gamma^2+B_4)^2}}{\frac{A_1 \Gamma}{\sqrt{\Gamma^2+A_2 \Gamma}} + A_3 \left[ \frac{\sqrt{\Gamma}}{1+\Gamma} \right] + \frac{B_1 \Gamma}{\Gamma+B_2} + \frac{\Gamma B_3}{\Gamma^2+B_4}} \right] \\ \frac{C_{v_{ex}^i}}{Nk} = \frac{1}{\rho V} \left\{ \frac{\Gamma^{3/2}}{2} \left[ A_3 \frac{\Gamma-1}{(\Gamma+1)^2} - \frac{A_1 A_2}{(\Gamma+A_2)^{3/2}} \right] + \Gamma^2 \left[ B_3 \frac{\Gamma^2 - B_4}{(\Gamma^2+B_4)^2} - \frac{B_1 B_2}{(\Gamma+B_2)^2} \right] \right\} \\ \nabla ad_{ex}^i = \frac{1}{4} \end{cases}$$

Il reste encore quelques corrections à traiter. Celles-ci ne dépendent pas des deux pa-

ramètres  $\Gamma$  et  $\xi$  de façon simple. Sans entrer dans les détails (les calculs sont assez longs), nous présentons les relations pour les grandeurs thermodynamiques des termes  $F_{ie}^s$  et  $F_q^i$  obtenus par dérivation directe à l'aide des relations usuelles et des expressions de l'énergie libre.

Pour la correction quantique des ions:

$$F_q^i \Rightarrow \begin{cases} \frac{P_q^i}{NkT} = \frac{\Gamma^2}{8Vr_s} - \frac{\Gamma^4}{480Vr_s^2} \left[ 12J(\Gamma) + 9K_\infty + 1 + 2\Gamma \frac{dJ}{d\Gamma} \right] \\ \frac{U_q^i}{NkT} = \frac{\Gamma^2}{4\rho Vr_s} - \frac{\Gamma^4}{240\rho Vr_s^2} \left[ 12J(\Gamma) + 9K_\infty + 1 + 3\Gamma \frac{dJ}{d\Gamma} \right] \\ \chi T_q^i = - \frac{1 - \frac{\Gamma^2}{60r_s} \left\{ 3(12J(\Gamma) + 9K_\infty + 1) + 20\Gamma \frac{dJ}{d\Gamma} + 2\Gamma^2 \frac{d^2J}{d\Gamma^2} \right\}}{1 - \frac{\Gamma^2}{60r_s} \left\{ (12J(\Gamma) + 9K_\infty + 1) + 2\Gamma \frac{dJ}{d\Gamma} \right\}} \\ \chi \rho_q^i = 2 \frac{1 - \frac{\Gamma^2}{360r_s} \left\{ 9(12J(\Gamma) + 9K_\infty + 1) + 32\Gamma \frac{dJ}{d\Gamma} + 2\Gamma^2 \frac{d^2J}{d\Gamma^2} \right\}}{1 - \frac{\Gamma^2}{60r_s} \left\{ (12J(\Gamma) + 9K_\infty + 1) + 2\Gamma \frac{dJ}{d\Gamma} \right\}} \\ \frac{C_{v,q}^i}{Nk} = - \frac{\Gamma^2}{4\rho Vr_s} + \frac{\Gamma^4}{80\rho Vr_s^2} \left[ 12J(\Gamma) + 9K_\infty + 1 + 8\Gamma \frac{dJ}{d\Gamma} + \Gamma^2 \frac{d^2J}{d\Gamma^2} \right] \\ \nabla ad_q^i = \frac{1}{\chi T + \frac{\rho T C_{v,\lambda,\rho}}{P_{\chi T}}} \end{cases}$$

où

$$\begin{aligned} J(\Gamma) &= 0,13573 + \frac{0,17362}{\Gamma^{1/2}} + \frac{0,92707}{\Gamma} - \frac{0,09740}{\Gamma^{3/2}} + \frac{1,7824}{\Gamma^2} + \frac{1,9878}{\Gamma^3} \\ \frac{\partial J(\Gamma)}{\partial \Gamma} &= -\frac{0,08681}{\Gamma^{3/2}} - \frac{0,92707}{\Gamma^2} + \frac{0,1461}{\Gamma^{5/2}} - \frac{3,5648}{\Gamma^3} - \frac{5,9634}{\Gamma^4} \\ \frac{\partial^2 J(\Gamma)}{\partial \Gamma^2} &= \frac{0,130215}{\Gamma^{5/2}} + \frac{1,85414}{\Gamma^3} - \frac{0,36525}{\Gamma^{7/2}} + \frac{10,6944}{\Gamma^4} + \frac{23,8536}{\Gamma^5} \end{aligned}$$

Puis pour l'énergie de Thomas-Fermi dans le cas solide:

$$F_{ie}^s \Rightarrow \begin{cases} \frac{P_{ie}^s}{NkT} = \frac{f_\infty \Gamma}{3V} \left\{ - \left[ 1 + A \left( \frac{Q}{\Gamma} \right)^s \right] \frac{x_r^2}{b_2 + x_r^2} + \left( \frac{Q}{\Gamma} \right)^s \left[ \frac{-2x_r^2(a_3 - b_3 b_4)}{(1 + b_4 x_r^2)^2} + \frac{As(3 - Q^2)}{2Q^2} \right] \right\} \\ \frac{U_{ie}^s}{NkT} = - \frac{\Gamma f_\infty}{\rho V} \left[ 1 + A \left( 1 - \frac{s}{Q^2} \right) \left( \frac{Q}{\Gamma} \right)^s \right] \\ \chi T_{ie}^s = \frac{s}{Q^2} \left( \frac{Q}{\Gamma} \right)^s \frac{\left\{ 3A \frac{Q^2 - 1}{Q^2} - \frac{As}{2} \frac{Q^2 - 3}{Q^2} - \frac{2x_r^2(a_3 - b_3 b_4)}{(1 + b_4 x_r^2)^2} - \frac{Ax_r^2}{b_2 + x_r^2} \right\}}{\left\{ \left( \frac{Q}{\Gamma} \right)^s \left[ \frac{-2x_r^2(a_3 - b_3 b_4)}{(1 + b_4 x_r^2)^2} - \frac{As}{2} \frac{Q^2 - 3}{Q^2} \right] - \left[ 1 + A \left( \frac{Q}{\Gamma} \right)^s \right] \frac{x_r^2}{b_2 + x_r^2} \right\}} \\ \chi \rho_{ie}^s = \frac{4}{3} - \frac{b_3}{3(x_r^2 + b_2)} + \frac{[\dots] NkT f_\infty \Gamma}{3PV} \\ \frac{C_{v,ie}^s}{Nk} = \frac{As f_\infty}{\rho V} \left( \frac{Q}{\Gamma} \right)^{s-1} \left[ \frac{Q^2 - 2 + s}{Q^3} \right] \\ \nabla ad_{ie}^s = \frac{1}{\chi T - \frac{\rho T C_{v,\lambda,\rho}}{P_{\chi T}}} \end{cases}$$



où dans l'expression de  $\chi_{\rho_{ie}^s}$ ,  $[\dots]$  est donné par:

$$[\dots] = -\frac{2x_r^2 b_2}{3(x_r^2 + b_2)^2} \left[ 1 + A \left( \frac{Q}{\Gamma} \right)^s \right] - \left( \frac{Q}{\Gamma} \right)^s \frac{A_s}{2Q^2} \left[ \frac{s(Q^2-3)^2}{6Q^2} + \frac{3(Q^2-1)}{Q^2} + \frac{Q^2-3}{3} \frac{x_r^2}{x_r^2 + b_2} \right] \dots$$

$$\dots - \left( \frac{Q}{\Gamma} \right)^s \frac{2}{3} \frac{x_r^2 (a_3 - b_3 b_4)}{(1 + b_4 x_r^2)^2} \left[ \frac{x_r^2}{x_r^2 + b_2} + \frac{2(1 - b_4 x_r^2)}{1 + b_4 x_r^2} + \frac{s(Q^2-3)}{Q^2} \right]$$

Enfin, pour les énergies d'échange et de polarisation du liquide, des relations ne sont pas présentées ici.

En effet, pour la contribution de polarisation du liquide, la relation de l'énergie libre de Helmholtz est beaucoup plus complexe (equation 4.14) que dans les cas précédents. Ainsi, les dérivées vont donc être faites numériquement et nous ne présentons pas de relations générales ici. Le calcul des grandeurs  $P_{ie}^l$ ,  $U_{ie}^l$ ,  $\chi_{T_{ie}^l}$ ,  $\chi_{\rho_{ie}^l}$ ,  $C_{v_{ie}^l}$  et  $\nabla_{ad_{ie}^l}$  sera directement effectué à l'intérieur du programme FORTRAN, *eos*.

Pour ce qui est de l'énergie d'échange, nous avons simplement (sous-section 4.2.5) incorporé les calculs numériques de l'EOS de Lamb (1974).

#### 4.4.2 Les termes non-idéaux de l'EOS

Sans préciser les différentes variables, coefficients et fonctions qui y figurent, voici donc de façon concise les huit termes non-idéaux de l'EOS:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{F_{ex}^i}{NkT} = A_1 \left[ \sqrt{A_2 + \Gamma} - A_2 \ln \left( \sqrt{\Gamma/A_2} + \sqrt{1 + \Gamma/A_2} \right) \right] + 2A_3 \left[ \sqrt{\Gamma} - \arctan \sqrt{\Gamma} \right] \dots \\ \dots + B_1 \left[ \Gamma - B_2 \ln(1 + \Gamma/B_1) \right] + \frac{B_3}{2} \ln(1 + \Gamma^2/B_4) \\ \frac{F_{je}^i}{NkT} = -\Gamma e^{\frac{c_{DH}\sqrt{\Gamma_e} + c_{TF}a\Gamma_e^\nu g_1 h_1}{1 + [b\sqrt{\Gamma_e} + a g_2 \Gamma_e^\nu / r_s] h_2}} \\ \frac{F_{ie}^s}{NkT} = -f_\infty(x_r) \Gamma \left[ 1 + A(x_r) [Q(\xi)/\Gamma]^s \right] \\ \frac{F_r^s}{NkT} = \text{EOS de Lamb (1974)} \\ \frac{F_a^i}{NkT} = -\frac{1}{960} \frac{\Gamma^4}{r_s^2} (12J + 9K^\infty + 1) \\ \frac{F_{Mast}^i}{NkT} = -0,895929256\Gamma \\ \frac{F_{h_{ex}}^i}{NkT} = \frac{3}{2} \xi \mu_1 + \left[ -\frac{3}{2} D_3(\alpha\xi) + 2\ln(1 - e^{-\alpha\xi}) + \ln(1 - e^{-\gamma\xi}) \right] \\ \frac{F_{it}^i}{NkT} = -\frac{8.18}{\Gamma} - \frac{1198}{\Gamma^2} + \frac{1.204 \cdot 10^5}{\Gamma^3} \end{array} \right.$$

Ajoutés aux trois autres contributions des gaz parfaits du chapitre 3 ils constituent la totalité des énergies que nous devons déterminer. Tous les onze termes des équations 2.14 et

2.15 sont à présent connus et il ne reste qu'à les utiliser. C'est dans le dernier chapitre 5 que nous allons présenter le programme informatique issu de ce travail sur l'EOS, ainsi que des résultats concrets.

## *Chapitre 5*

# Le produit final

Les résultats de l'étude théorique du plasma central d'une naine blanche ont été présentés dans les chapitres 3 et 4. La synthèse de ce travail est une EOS moderne dont tous les termes sont explicitement connus et que l'on peut donc facilement coder dans un programme informatique. Le contexte pratique de la conception de ce nouveau programme, appelé *eos*, est la substitution, dans les codes évolutifs et les codes de pulsations stellaires utilisés par le groupe de recherche des naines blanches à l'Université de Montréal, de l'ancienne EOS par cette version moderne. L'ensemble des modèles est écrit en langage FORTRAN; le programme *eos* l'est aussi. En incluant dans un seul fichier l'intégralité du code, c'est à dire le programme principal et les sous-routines appelées, nous avons considérablement facilité son utilisation et son inclusion finale dans les programmes préexistants.

Il a été montré dans le chapitre 2 que, d'un point de vue théorique, le calcul de l'EOS d'un plasma quelconque se résumait à la détermination de l'expression de l'énergie libre de Helmholtz ( $F$ ) puisque toutes les autres grandeurs thermodynamiques en découlaient. D'autre part, dans la digression du chapitre 4 (sous-section 4.1.3), nous avons mentionné les deux utilisations concrètes de l'EOS, soit l'étude mécanique décrite par la pression des particules, et l'étude thermique de l'étoile qui provient des considérations sur son énergie thermique. En pratique, la présentation d'une EOS et de ses applications revient à l'analyse des différentes valeurs de pression ( $P$ ) et d'énergie ( $U$ ), quantités thermodynamiques par excellence, directement dérivées de  $F$ . Les autres grandeurs - qui ont d'ailleurs aussi été déterminées - découleront

naturellement de ces premières et il est inutile de s'y attarder dans une discussion à caractère général. Ainsi nous n'allons présenter les résultats de ce travail qu'en fonction du comportement des grandeurs de pression et d'énergie interne dans le plan température-densité.

## 5.1 Le program *eos*

### 5.1.1 Considérations pratiques: création de tables dans le plan $(T, \rho)$

Les propriétés d'un plasma à une densité et à une température données, sont décrites par l'EOS. Or, les conditions physiques de l'atmosphère, de l'enveloppe et du noyau de l'étoile n'étant pas les mêmes, le plasma stellaire dans son ensemble sera caractérisé par trois EOS, chacune spécifique à une des situations. Plus particulièrement, c'est le degré d'ionisation et la composition du milieu qui vont jouer un rôle prépondérant lors de la détermination des populations de particules dans l'équation d'état et vont forcer l'utilisation d'équations indépendantes. Le cas partiellement ionisé, présent dans les régions de l'enveloppe et de l'atmosphère, va être beaucoup plus difficile à traiter avec précision que le cas totalement ionisé du noyau que nous avons présenté.

Le code évolutif du groupe de naines blanches de l'Université de Montréal, tient compte de l'entière structure de l'étoile, de son centre au haut de l'atmosphère. L'équation d'état de l'atmosphère présentement utilisée est une version modifiée de l'EOS de Saumon et al. (1995). Pour ce qui est de l'enveloppe, la version originale a été développée par Fontaine et al. (1977), mais le code actuel est une mise à jour faite par Fontaine en 1994. Enfin, l'EOS du noyau encore utilisée aujourd'hui est celle développée par Lamb (1974). Le nouveau programme *eos*, présenté dans ce mémoire, vient remplacer le code de Lamb.

Puisque le programme *eos*, édifié indépendamment, va être inséré dans un code préexistant et remplacera une partie de celui-ci, il n'est pas nécessaire de se soucier des détails du modèle stellaire en particulier, mais simplement de considérer l'ensemble comme une boîte noire à laquelle il faudra fournir des données, les grandeurs thermodynamiques, pour des valeurs précises de température et de densité. La grille qui va couvrir le plan  $(T, \rho)$  va s'étendre sur un domaine très vaste afin d'inclure (et même dépasser pour des raisons de continuité) tous les

couples de points possibles, caractérisant des milieux variés, présents dans différentes régions de l'étoile, de sa surface jusqu'à son centre.

Pour le cas qui nous intéresse, ces couples température-densité vont provenir d'une région du plan  $(T, \rho)$  qui correspond, d'une façon réaliste, aux conditions physiques présentes dans le noyau et pour lesquelles notre EOS est valide. Par ailleurs, les domaines de validité des EOS de l'enveloppe et de l'atmosphère vont être différents mais complémentaires afin d'établir une continuité entre les trois équations lors du calcul des quantités d'intérêt à chaque point de l'étoile. Ainsi on peut imaginer, en s'enfonçant graduellement dans l'étoile du haut de l'atmosphère jusque dans le centre (Figure 5.1B), traverser une multitude de conditions physiques correspondant successivement à des plasmas de nature variée et décrits par trois EOS distinctes qui se superposent dans les zones de transition.

Pour des raisons pratiques, les codes des équations de l'enveloppe et de l'atmosphère ne calculent pas en temps réel les quantités thermodynamiques pour chaque couple du plan  $(T, \rho)$ . Ils effectuent plutôt, une fois pour toutes, les calculs qui sont alors sauvegardés dans un fichier sous forme de tables rectangulaires de dimension température-densité. Les régions couvertes sont très larges et sortent du domaine de validité des EOS correspondantes. Pour faire rouler le code évolutif, les grandeurs nécessaires aux calculs sont récupérées des régions appropriées dans ces mégatables et utilisées par la suite.

Le programme *eos* va être construit de façon à sauvegarder les données dans une table de même dimension que celle des deux autres EOS, même si une région importante, correspondant à des conditions physiques caractéristiques de l'enveloppe ou de l'atmosphère, ne sera pas utilisée, puisque non valide, d'après les expressions du milieu totalement ionisé.

Une considération supplémentaire est le choix des éléments chimiques pour lesquels les calculs vont être entrepris. D'un point de vue général, l'atmosphère des naines blanches est majoritairement constituée d'hydrogène (H) et d'hélium (He) alors que l'intérieur contient du carbone (C) et de l'oxygène (O). Pour le noyau, nous allons donc devoir principalement calculer la pression et l'énergie pour les deux éléments dominants (C et O). Cependant, pour des raisons de continuité dans les régions de transitions du plan  $(T, \rho)$  avec les autres équations d'état, les calculs pour l'hydrogène et l'hélium vont aussi être faits. Bien que la détermination de l'EOS,

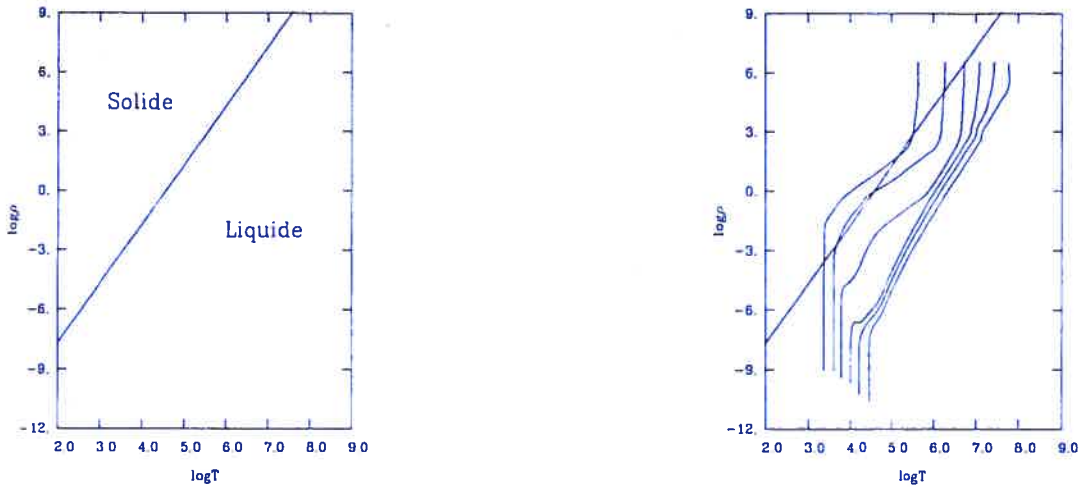


FIGURE 5.1 – A) Graphique de gauche: Séparation dans le plan  $(T, \rho)$  des phases liquide et solide pour  $\Gamma = 175$ . B) Graphique de droite: Modèles évolutifs (code du groupe de recherche des naines blanches de l’université de Montréal) d’une naine blanche DA de masse  $0,6 M_{\odot}$ . Chaque courbe correspond à la distribution en température-densité à partir de la surface (définie ici par une profondeur optique  $\tau_R = 10^{-8}$ ) - bas du graphique - jusque dans le centre de l’étoile - haut du graphique -, pour des températures effectives différentes; soient en commençant par la gauche: 3000K, 5000K, 7500K, 12500K, 20000K et 35000K. La droite représente comme dans le graphique A, la frontière de cristallisation du plasma.

pour plusieurs espèces chimiques différentes, ne pose pas de problèmes puisque les expressions présentées dans les chapitres précédents sont générales ( $Z$  peut être quelconque, sauf pour le terme de polarisation du solide où  $Z \geq 3$ ) seulement quatre tables seront construites dans un premier temps: une pour le carbone, une pour l’oxygène, une pour l’hélium et une pour l’hydrogène.

Enfin, nous rappelons que le calcul de l’EOS du noyau a été fait en deux parties, celle du plasma liquide et celle du plasma solide. Ces deux régimes vont être séparés dans le plan  $(T, \rho)$  par une courbe de cristallisation, qui va dépendre du paramètre  $\Gamma$  de Coulomb (chapitre 4), fonction de  $T$  et de  $\rho$ . La valeur la plus récente de ce  $\Gamma_{crit}$  qui scinde les deux régimes est celle déterminée par Potekhin & Chabrier (2000), soit  $\Gamma_{crit} = 175$  (Figure 5.1A). Or, cette valeur est une valeur moyenne et le changement de phase est plus précisément déterminé au moment, pour chaque couple  $(T, \rho)$ , où l’énergie libre du solide devient inférieure à l’énergie libre du liquide. De plus,  $\Gamma_{crit}$  est constamment sujet à changement puisque des nouveaux calculs toujours plus précis sont publiés et modifient légèrement sa valeur. Nous avons donc décidé de



ne pas fixer une valeur de  $\Gamma$  pour séparer les deux phases à l'intérieur des mégatables. Il est plus simple et judicieux de construire des tables liquide et solide qui s'étendent chacune sur la totalité du plan  $(T, \rho)$ . Comme dans le cas des fichiers de l'atmosphère, de l'enveloppe et du noyau, il est évident que, pour la table de l'EOS liquide, plus on s'aventurera dans la région solide, moins les calculs vont être valides et inversement pour l'EOS du solide. Encore une fois cela n'a pas d'importance puisque les régions considérées dans les différentes situations, seront les régions appropriées de chaque table.

Ainsi, dans le but ultime de calculer les valeurs de la pression, de l'énergie interne et des autres grandeurs thermodynamiques pour l'ensemble de la structure de l'étoile, c'est à dire pour tous les couples température-densité, et afin d'assurer une transition lisse sans discontinuités entre les divers régimes d'ionisation, de changement de phase et de composition chimique, il va être nécessaire de calculer, avec l'EOS moderne du noyau, huit mégatables de valeurs dans le plan  $(T, \rho)$ : deux tables pour C (une solide et une liquide), deux tables pour O, deux pour He et deux pour H. Pour chacune d'elles, seulement une section du plan, pour laquelle l'EOS est valide, sera utilisée.

### 5.1.2 Rappel: les énergies libres

Avant de présenter les résultats de nos calculs, nous rappelons les expressions de l'énergie libre des différents termes obtenus dans les deux chapitres précédents. Dans le chapitre 2, les équations de l'énergie libre totale pour les cas liquide et solide sont données en fonction des multiples contributions:

$$F_{liq} = F_{id}^e + F_{id}^i + F_{ex}^i + F_{ie}^i + F_x^e + F_q^i + F^{ph} \quad (5.1)$$

$$F_{sol} = F_{id}^e + F_{har}^i + F_{an}^i + F_{Mad}^i + F_x^e + F_{ie}^s \quad (5.2)$$

Tous ces termes ont été déterminés dans les chapitres 3 et 4, et les relations qui définissent

chacun d'entre eux sont les suivantes:

$$\left\{ \begin{array}{l} F_{id}^e = \eta \gamma m c^2 N - \frac{V 8 \pi \sqrt{2}}{h^3} m^4 c^5 \gamma^{5/2} [2/3 F_{3/2}(\eta, \gamma) + \gamma/3 F_{5/2}(\eta, \gamma)] \\ F_{id}^i = -N k T \left[ \ln \frac{V}{N} \left( \frac{2 \pi m k T}{h^2} \right)^{3/2} (2 S_n + 1) + 1 \right] \\ F^{ph} = -\frac{4 \sigma}{3 c} V T^4 \\ \frac{F_{ct}^i}{N k T} = A_1 \left[ \sqrt{A_2 + \Gamma} - A_2 \ln \left( \sqrt{\Gamma/A_2} + \sqrt{1 + \Gamma/A_2} \right) \right] + 2 A_3 \left[ \sqrt{\Gamma} - \arctan \sqrt{\Gamma} \right] \dots \\ \dots + B_1 \left[ \Gamma - B_2 \ln (1 + \Gamma/B_1) \right] + \frac{B_3}{2} \ln (1 + \Gamma^2/B_4) \\ \frac{F_{ie}^i}{N k T} = -\Gamma e^{\frac{c_{DH} \sqrt{\Gamma_e} + c_{TF} a \Gamma_e^2 g_1 h_1}{1 + [b \sqrt{\Gamma_e} + a g_2 \Gamma_e^2 / r_s] h_2}} \\ \frac{F_{ie}^s}{N k T} = -f_{\infty}(x_r) \Gamma [1 + A(x_r) [Q(\xi)/\Gamma]^s] \\ \frac{F_x^e}{N k T} = EOS \text{ de Lamb (1974)} \\ \frac{F_g^i}{N k T} = -\frac{1}{960} \frac{\Gamma^4}{r_s^2} (12 J + 9 K^{\infty} + 1) \\ \frac{F_{Mad}^i}{N k T} = -0,895929256 \Gamma \\ \frac{F_{har}^i}{N k T} = \frac{3}{2} \xi \mu_1 + \left[ -\frac{3}{2} D_3(\alpha \xi) + 2 \ln(1 - e^{-\alpha \xi}) + \ln(1 - e^{-\gamma \xi}) \right] \\ \frac{F_{an}^i}{N k T} = -\frac{8,18}{\Gamma} - \frac{1198}{\Gamma^2} + \frac{1.204 \cdot 10^5}{\Gamma^3} \end{array} \right.$$

## 5.2 Les résultats obtenus

La seule façon de bien comprendre, analyser et évaluer l'impact de cette nouvelle EOS, est évidemment d'en faire usage en l'intégrant dans les modèles stellaires de naines blanches dont nous avons parlé. Les résultats alors obtenus, ainsi que les interprétations qui s'en suivront, nous permettront d'estimer la portée des améliorations vis-à-vis de l'ancienne version et l'impact pratique de cette modernisation. Ce travail nécessite un certain temps et est remis à plus tard. Dans cette section, quelques résultats quantitatifs seront mis en avant, mais c'est surtout qualitativement que l'EOS va être présentée.

Afin de visualiser le plus clairement possible le comportement de la pression et de l'énergie interne par rapport à une température et une densité variables, il est commode, et c'est ce que nous allons faire, de présenter les résultats, à l'aide de deux types de graphique. Un premier type représentera, en trois dimensions (3D), les surfaces décrites par P et U (axe z) sur le plan température-densité (xy), puis un deuxième nous montrera (une vue de dessus du graphique 3D) en deux dimensions, la position de la surface étudiée, par rapport à la frontière

de cristallisation pour un  $\Gamma_{crit}=175$ . Le noyau liquide sera traité en premier lieu, la phase solide en second, puis une comparaison avec l'ancienne EOS de Lamb sera présentée.

La séparation de l'EOS totale en diverses contributions, qui se traduit par la somme de différents termes d'énergie libre lors du calcul de l'énergie de Helmholtz globale du système, est une approche très instructive puisqu'elle nous permet de suivre la construction de l'équation d'état, étape par étape. Une utilisation efficace, appropriée et cohérente de l'EOS à l'intérieur de nos modèles stellaires, ne sera possible que si une compréhension du poids relatif de chacun des termes est acquise, étant donné que chaque contribution ne va pas avoir la même importance dans le calcul de l'EOS finale. Nous allons mettre en pratique cette approche, en présentant graduellement dans les divers graphiques, le comportement de P et de U pour les termes dominants en premier, puis en ajoutant les effets des corrections d'ordres supérieurs.

Les intervalles de température et de densité utilisés, comme dans la Figure 5.1, sont les suivants:  $2 < \log T < 9$  et  $-12 < \log \rho < 9$ . Nous avons déjà vu qu'il s'agit d'un domaine qui excède largement les régions d'intérêt pour le noyau des naines blanches et nous avons expliqué pourquoi une si grande grille était utilisée. Il suffit, avant de présenter concrètement les graphiques, de rappeler les valeurs de température et de densité qui nous intéressent pour l'intérieur des naines blanches:  $10^6 g \cdot cm^{-3} < \rho < 10^9 g \cdot cm^{-3}$  et  $10^6 K < T < 10^8 K$ .

### 5.2.1 Pression et énergie interne pour le plasma liquide

La Figure 5.2 présente la pression d'un gaz parfait d'électrons. La surface très lisse se comporte *bien*, ne présentant aucune discontinuité. L'allure générale met en évidence une pression qui augmente avec la densité et la température. Sans entrer dans les détails, il suffit de mentionner que les comportements caractéristiques de la pression, pour différents régimes, sont tous inclus dans ce graphique. On retrouve les dépendances limites de  $\log P \propto \log \rho + \log T$  pour le cas classique et  $\log P \propto \frac{5}{3} \log \rho$  et  $\propto \frac{4}{3} \log \rho$  pour les deux cas dégénérés (non relativiste et ultra relativiste). Les trois axes représentent les grandeurs en unités logarithmiques.

A cette première contribution, nous ajoutons les pressions provenant des deux autres gaz parfaits: ions et photons. La même Figure 5.2 donne aussi l'allure de la pression totale de ces trois gaz ( $P_{id}^e, P_{id}^i, P^{ph}$ ) pour un plasma de carbone pur.

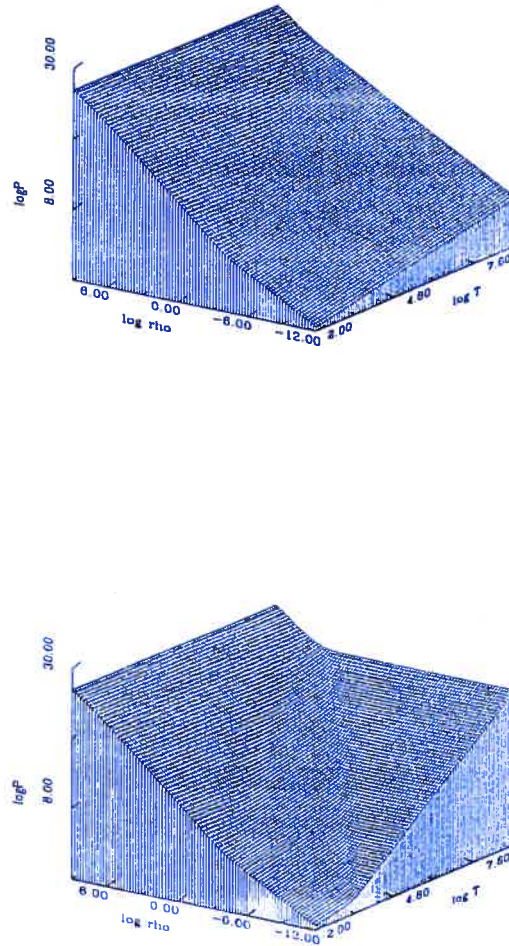


FIGURE 5.2 – Représentation 3D de la pression. A) Graphique du haut: pression d'un gaz parfait d'électrons  $P_{id}^e$  dans le plan  $(T, \rho)$ . B) Graphique du bas: pression des trois gaz parfaits  $P_{id}^e + P_{id}^i + P^{ph}$  pour un plasma liquide de carbone pur.

Les changements apportés par les ions et les photons ne sont pas très considérables. En effet, l'échelle logarithmique est la même que précédemment ainsi que le comportement global de la pression qui est presque identique à celui d'un gaz parfait d'électrons. La surface lisse se comporte toujours sans discontinuités et changements brusques. Cette caractéristique n'est pas surprenante puisque les conditions d'ionisation totale n'engendrent pas de variations subites

dans les divers termes de  $F$  et par suite de  $P$ . Les fluctuations de toutes les grandeurs comme nous le verrons aussi par la suite, se feront de manière très continue. La différence majeure par rapport au seul gaz parfait d'électrons se trouve pour les températures élevées et les basses densités, où l'on remarque un accroissement important de la pression. Cette remontée dans la partie droite du graphique provient de la pression de radiation qui varie proportionnellement à  $T^4$  (équation 3.53). Cependant il s'agit d'une région qui ne fait pas partie de notre zone d'intérêt puisque les conditions physiques ne correspondent pas à celles du noyau d'une naine blanche.

Il ne reste qu'à ajouter, à cette pression idéale positive, les diverses contributions correctives supplémentaires. Celles-ci sont globalement des corrections négatives puisqu'elles vont tenir compte de phénomènes physiques - l'interaction de Coulomb entre les particules ou la distribution non uniforme des électrons dans le plasma par exemple - qui vont baisser la pression cinétique totale.

Dans le cas du plasma de Coulomb liquide, c'est l'énergie d'excès du mélange, déterminée dans le cadre du modèle de l'OCP, qui est dominante. Elle tient compte de l'énergie potentielle en considérant les interactions électrostatiques entre les ions. Cette pression qui tend donc à diminuer l'effet "boules de billard" entre les particules des gaz parfaits va être négative et on s'attend à une diminution de la pression totale.

Dès le premier coup d'oeil (Figure 5.3), on remarque une partie importante de la surface qui manque. En effet, un morceau du côté gauche du graphique a été *arraché* par rapport à la Figure 5.2. Cette région correspond à une portion du plan où la pression négative  $P_{ex}^i$  est plus grande en valeur absolue que la pression totale des gaz parfaits. Sans signification physique, ces données de pression totale négative sont donc volontairement retirées de la table bidimensionnelle. Le problème posé n'est cependant pas inquiétant puisque la région d'intérêt du noyau n'en fait pas partie: cela est bien montré dans la figure de droite qui présente, une vue de haut de la surface tridimensionnelle ainsi que la frontière entre les phases liquide et solide. La majorité de la surface manquante correspond à la phase solide qui, de toute façon, ne sera pas utilisée. Mais même pour la petite région de la phase liquide qui fait défaut, il ne faut pas s'en faire puisqu'elle sera amplement recouverte par l'EOS de l'enveloppe. Quantitativement



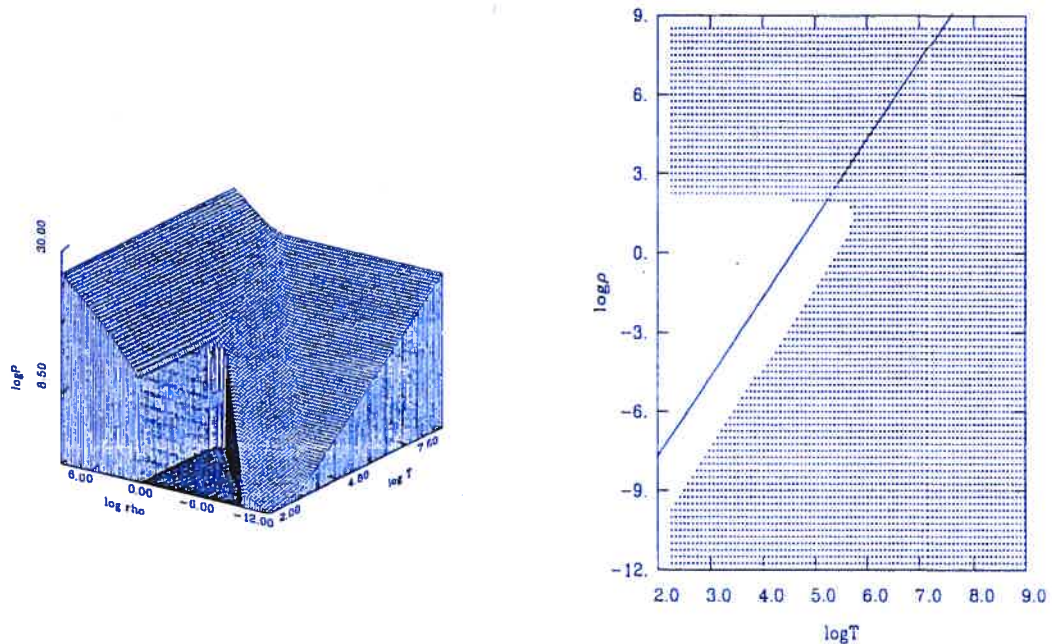


FIGURE 5.3 – A) Graphique de gauche: représentation 3D de  $P_{id}^e + P_{id}^i + P^{ph} + P_{ex}^i$  pour un plasma liquide de carbone pur dans le plan  $(T, \rho)$ . B) Graphique de droite: vue de dessus de la surface de pression. La droite délimite les phases solide et liquide du plan pour  $\Gamma=175$ . Les valeurs de pression qui manquent pour la phase liquide se trouvent hors de notre région d'intérêt.

- bien que non visible à cette échelle - les valeurs positives de la pression sont un peu plus basses que celles des gaz parfaits.

Nous n'allons pas passer, un à un, au travers de tous les autres termes de correction qui ont souvent des effets difficilement appréciables. Néanmoins avant de traiter la pression liquide totale, nous allons discuter encore d'un dernier terme, la correction quantique ionique.

Deux éléments contribuent à la correction quantique totale: l'un positif, l'autre négatif (voir sous-section 4.4.1). La première contribution est proportionnelle à  $\Gamma^2$  et la deuxième à  $\Gamma^4$ . Pour des valeurs de  $\Gamma$  différentes, la pression quantique totale va changer de signe en fonction du terme qui domine. La Figure 5.4 reproduit le comportement de chacun de ces deux termes, en fonction du paramètre de Coulomb. Le terme positif en  $\Gamma^2$  est une correction de premier ordre à l'énergie d'excès du mélange vue précédemment, et va donc avoir tendance à amortir l'effet négatif de celle-ci.

D'un autre côté, le terme en  $\Gamma^4$  va renforcer le caractère négatif de la correction de Coulomb



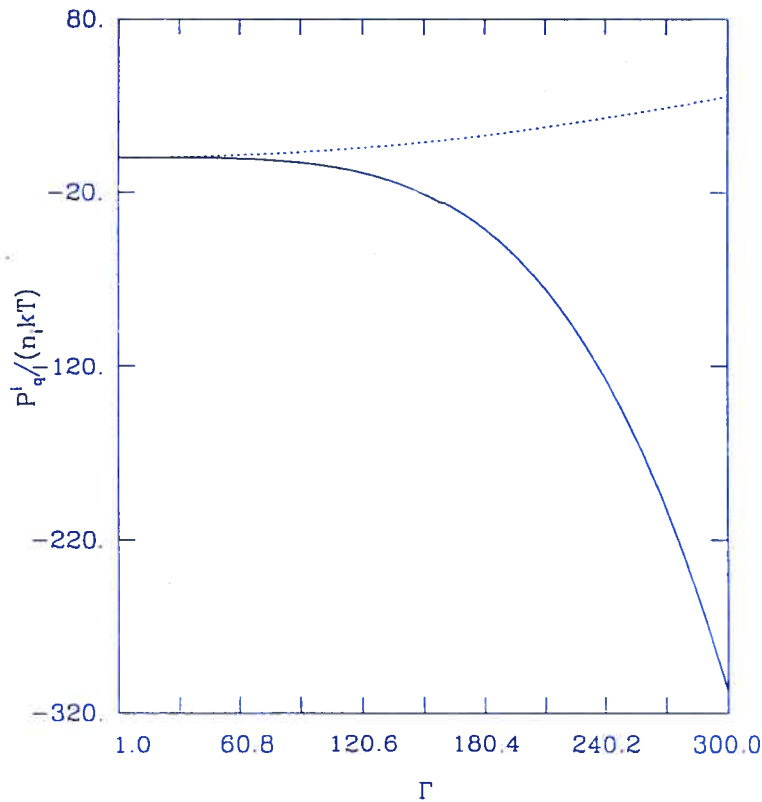


FIGURE 5.4 – Comportement des deux termes ( $\propto \Gamma^2$  et  $\propto \Gamma^4$ ) de la correction quantique en fonction du paramètre de Coulomb  $\Gamma$ . La courbe en trait pointillé représente le terme  $\frac{1}{8} \frac{\Gamma^2}{r_s}$ . La courbe en trait plein donne l'allure du terme  $\propto \frac{-1}{480} \frac{\Gamma^4}{r_s^2}$ .

( $P^i_{ex}$ ). Mais il est clair, qu'à partir d'une certaine valeur de  $\Gamma$ , c'est cette dernière contribution négative de la correction quantique qui prend le dessus et *explose* même pour des  $\Gamma$  élevés. La Figure 5.5 met en évidence l'effet drastique de cette correction sur la couverture du plan, par la pression du plasma liquide. Presque la moitié des couples température-densité ne sont plus accessibles. C'est encore la région solide qui est affectée en grande partie. Cependant, pour des densités supérieures à  $\log \rho = 9$  (hors du graphique), mais où le plasma est encore liquide, les données sont aussi non disponibles. Il s'agit évidemment de situations extrêmes mais, comme nous l'avons déjà mentionné, des modèles stellaires robustes et complets nécessitent de *bons* comportements limites de l'EOS, afin de maximiser l'étendue et la portée des calculs. Par un raisonnement similaire, il serait préférable que des données *liquides* soient disponibles, même dans la phase solide, pour effectuer un bon recoupement entre les régimes.

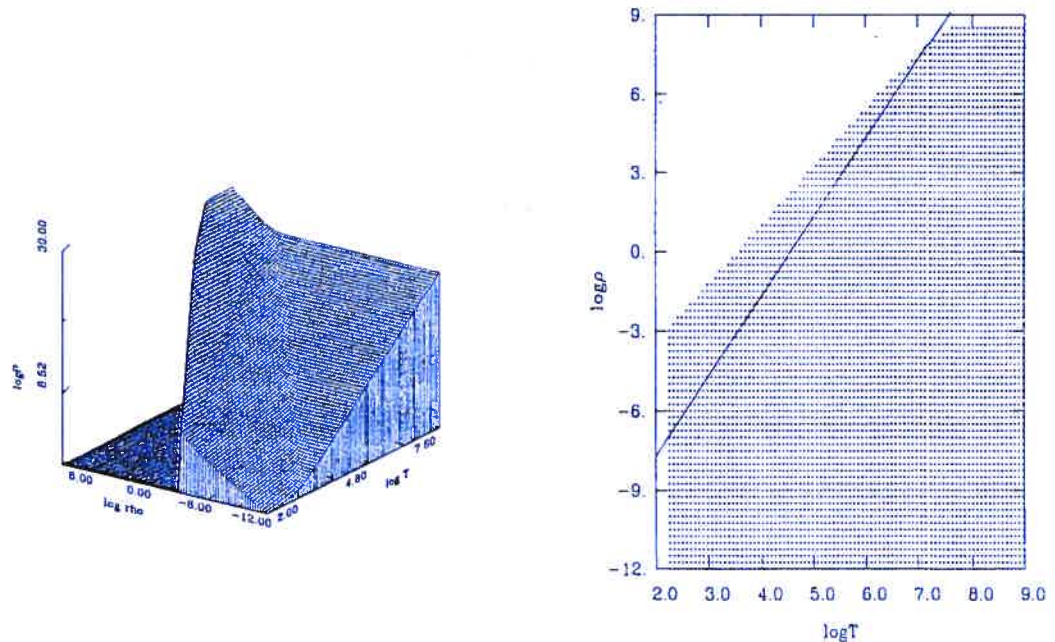


FIGURE 5.5 – A) Graphique de gauche: représentation 3D de  $P_{id}^e + P_{id}^i + P^{ph} + P_q^i$  pour un plasma liquide de carbone pur dans le plan  $(T, \rho)$ . B) Graphique de droite: vue de dessus de la surface de pression. La droite délimite les phases solide et liquide du plan pour  $\Gamma=175$ . Les deux termes ( $\propto \Gamma^2$  et  $\propto \Gamma^4$ ) de la correction quantique sont considérés sur l'ensemble du domaine.

Ces derniers propos sont d'autant plus justifiés que le comportement de cette correction quantique à  $\Gamma$  élevé n'est pas réel. En effet, la pression d'excès du mélange est une correction négative de premier ordre à la pression idéale positive. Le premier terme positif de la contribution quantique est une correction de deuxième ordre, puis le deuxième terme quantique une correction négative de troisième ordre. Il est normal que la correction coulombienne totale au gaz parfait soit négative, mais il est aussi évident qu'un terme positif de quatrième ordre amortirait l'effet négatif globalement observé. L'effet de correction coulombien ne peut être supérieur à la pression totale électronique qui devient très forte dans les régions de densité élevée. Etant donné, qu'encore aujourd'hui aucune recherche ne s'est trouvée capable de déterminer cette contribution en  $\Gamma^6$  avec précision, il est nécessaire de remédier à ce problème. Une façon de procéder serait de négliger tout simplement le terme en  $\Gamma^4$  - c'est d'ailleurs l'approche utilisée par Lamb (1974) dans sa thèse de doctorat (publiée avant la détermination du deuxième terme de correction quantique par Hansen & Vieillefosse (1975)). Mais alors, la

précision des calculs serait moindre dans les régions où le problème ne se pose pas: soit la phase liquide qui nous intéresse principalement. Pour éviter ce retour en arrière et par souci de présenter une EOS moderne et améliorée, nous avons choisi de procéder autrement.

La version finale de la correction quantique, d'une part utilise ses deux contributions dans les régions où le terme positif l'emporte sur le terme négatif, et d'autre part est complètement *éteinte* lorsque le terme négatif en  $\Gamma^4$  devient dominant. Le résultat de cette astuce est l'obtention d'une pression calculée de façon précise (d'après les calculs les plus récents présentement disponibles) dans les régions d'intérêt principal, puis une pression valide au premier ordre de correction coulombienne ( $P_{ex}^i$ ) dans les régions limites et de transition. Avec cette nouvelle approche, dépendant de la portion du plan étudiée, la contribution quantique amène, soit une correction positive, soit une correction nulle: aucun endroit de la surface n'est donc perdu.

Comme  $P_q^i$  est une correction au terme d'excès du mélange ( $P_{ex}^i$ ), il est instructif de comparer l'effet de cette correction quantique *modifiée* par rapport à la version initiale, en incluant en plus des gaz parfaits, le terme de l'OCP (Figure 5.6).

On remarque le gain important, en surface de pression, obtenu avec l'astuce utilisée. Nous retrouvons presque la couverture du plan taillée par l'énergie de l'OCP (Figure 5.3). Il faut insister sur le fait que pour les régions où la correction quantique a été éteinte, les valeurs de pression ne sont pas éronnées et donc peuvent être utilisées dans les zones de recoupement des EOS.

Nous présentons, sans plus tarder, la surface finale de pression qui inclut toutes les contributions. En plus des cinq termes que nous avons déjà vus, la Figure 5.7 inclut les termes  $P_{ie}^l$  et  $P_x^e$ .

L'ajout des termes supplémentaires n'affecte pas grandement l'allure de la pression par rapport aux graphiques de la Figure 5.6 avec la correction quantique modifiée. Les effets sur la pression des énergies libres de polarisation du liquide et d'échange des électrons, ne sont visibles, ni sur l'échelle logarithmique de pression présentée, ni sur la couverture du plan température-densité qui reste identique.

Il est à remarquer que la correction majeure à la pression totale provient bien finalement de l'énergie libre de l'OCP. Il suffit de comparer les Figures 5.3 et 5.7, pour s'en convaincre.



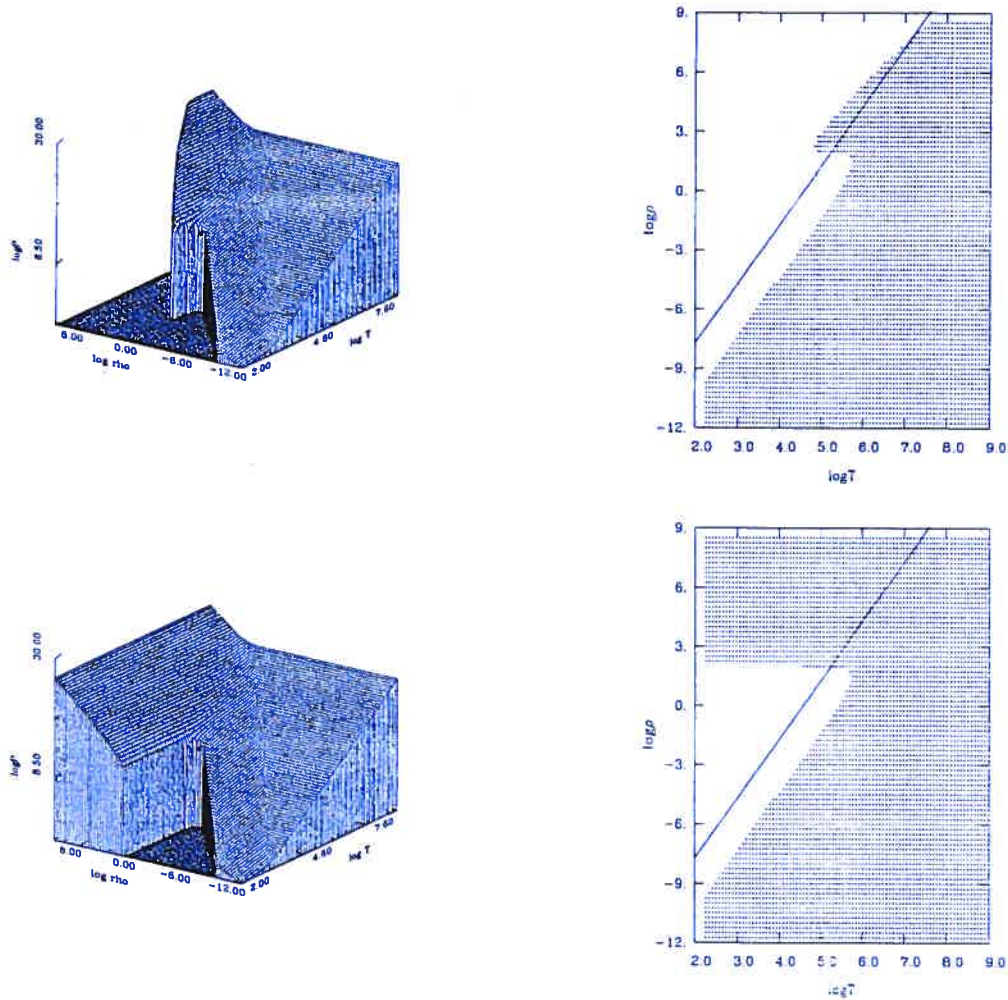


FIGURE 5.6 – Contributions  $P_{id}^e + P_{id}^i + P^{ph} + P_q^i + P_{ex}^i$  à la pression totale pour un plasma liquide de carbone pur. A) Graphique de gauche (haut): vue 3D de la pression avec un terme quantique comportant les deux corrections  $\propto \Gamma^2$  et  $\propto \Gamma^4$  sur l'ensemble du domaine. Les résultats observés sont la combinaison des Figures 5.3 et 5.5. B) Graphique de droite (haut): vue de dessus du graphique A. La droite représente la frontière ( $\Gamma=175$ ) entre les phases liquide et solide. C) Graphique de gauche (bas): vue 3D de la pression avec un terme quantique modifié. Les résultats présentés ici correspondent au graphique A mais avec la nouvelle correction quantique. Les deux termes ( $\propto \Gamma^2$  et  $\propto \Gamma^4$ ) sont inclus pour la région du plan où  $P_q^i > 0$ , mais celle-ci est totalement éteinte lorsque  $P_q^i < 0$ . D) Graphique de droite (bas): vue de haut du graphique C.

Evidemment, les valeurs numériques de la pression totale sur la Figure 5.7, sont différentes par rapport à celles de la Figure 5.3, à cause des corrections  $P_{ie}^l$  et  $P_{ex}^e$ , mais cet effet n'est pas observable ici. Pour cela, à titre indicatif, nous allons choisir quelques couples de points température-densité (les croix rouges dans la Figure 5.7) pour lesquels les valeurs numériques

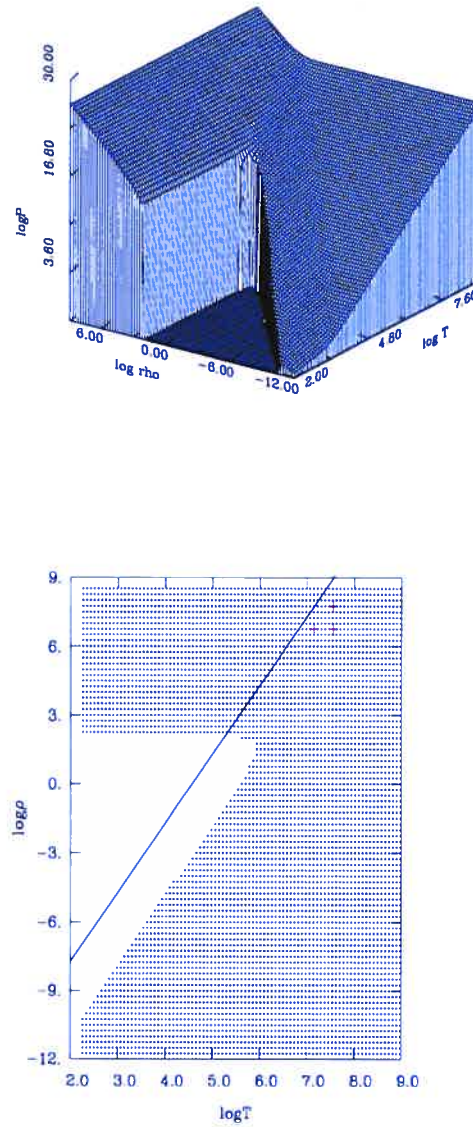


FIGURE 5.7 – Pression d'un plasma liquide de carbone pur d'après la nouvelle version de l'EOS. Toutes les contributions ( $P_{id}^e + P_{id}^i + P^{ph} + P_q^i + P_{ex}^i + P_{ie}^l + P_x^e$ ) sont incluses et la correction quantique est utilisée sous sa version modifiée. A) Graphique du haut: Représentation 3D de la surface de pression. Une partie du plan n'est pas accessible. B) Graphique du bas: vue de haut de la surface 3D. La partie du plan non accessible se trouve en grande majorité dans la phase solide et la région d'intérêt est totalement couverte. Les croix rouges indiquent trois couples  $(T, \rho)$  pour lesquels le Tableau 5.1 donne les valeurs de pression.

( logT , logρ )	( 7,54 ; 7,75 )	( 7,14 ; 6,75 )	( 7,54 ; 6,75 )
$P_{id}^e$	$9,73151 \cdot 10^{24}$ (98,7%)	$3,64306 \cdot 10^{23}$ (98,2%)	$3,64381 \cdot 10^{23}$ (98,7%)
$P_{id}^i$	$1,35094 \cdot 10^{22}$ (0,14%)	$5,37820 \cdot 10^{20}$ (0,15%)	$1,35094 \cdot 10^{21}$ (0,38%)
$P^{ph}$	$3,64475 \cdot 10^{15}$ ( $10^{-8}$ %)	$9,15519 \cdot 10^{13}$ ( $10^{-8}$ %)	$3,64475 \cdot 10^{15}$ ( $10^{-7}$ %)
$P_{ex}^i$	$-1,52376 \cdot 10^{23}$ (1,6%)	$-7,10527 \cdot 10^{21}$ (2%)	$-6,85572 \cdot 10^{21}$ (1,9%)
$P_{ie}^l$	$-5,43146 \cdot 10^{21}$ (0,057%)	$-3,27126 \cdot 10^{20}$ (0,091%)	$-4,03664 \cdot 10^{20}$ (0,11%)
$P_x^e$	$1,44498 \cdot 10^{22}$ (0,15%)	$3,28280 \cdot 10^{20}$ (0,091%)	$3,27322 \cdot 10^{20}$ (0,09%)
$P_q^i$	0 (0%)	0 (0%)	$9,07285 \cdot 10^{20}$ (0,25%)
$P_{liq}$	$9,60166 \cdot 10^{24}$	$3,57739 \cdot 10^{23}$	$3,59705 \cdot 10^{23}$

TABLEAU 5.1 – Contributions des divers termes de l'EOS à la pression totale d'un plasma liquide de carbone pur. Les valeurs numériques de la pression ( $\text{dyn} \cdot \text{cm}^{-2}$ ) correspondant à chaque terme sont données pour trois couples  $(T, \rho)$  en rouges dans la Figure 5.7. Pour chacune des valeurs, le poids du terme en pourcentage par rapport à la pression totale est donné.

de pressions sont données dans le Tableau 5.1. Les couples choisis correspondent à une région du plasma liquide représentative des conditions du noyau d'une naine blanche.

Les résultats du Tableau 5.1 mettent en valeur l'importance annoncée de la pression dégénérée des électrons par rapport à la pression totale. En effet 99% de la pression provient des électrons. La pression totale sous ces conditions est de l'ordre de  $10^{23 \sim 24} \text{ dyn} \cdot \text{cm}^{-2}$ , valeur énorme évidemment, mais qui représente une pression typique de l'intérieur d'une naine blanche. C'est l'énergie d'excès du mélange négative qui est responsable de la plus importante correction à la pression du gaz dégénéré puisqu'elle représente en valeur relative  $\sim 2\%$  de la pression totale. Les autres corrections, positives ou négatives, rendent compte chacune de leur côté, d'environ 0,1% de la pression totale. Seul les photons sont totalement négligeables à de telles densités.

Enfin on remarque une pression nulle provenant du terme de correction quantique pour



les deux premiers points mais non pour le troisième qui est alors assez considérable (0,25%). Ces résultats proviennent directement de l'utilisation de la pression quantique modifiée dans les calculs. En effet, le point de coordonnées (7,54 ; 6,75) dans le plan  $(T, \rho)$  est celui qui se trouve dans le coin, en bas à droite, du triangle formé par les croix rouges dans la Figure 5.7. A cet endroit en particulier, la contribution quantique est encore positive et est donc incluse dans la détermination de la pression. Pour les deux autres points, qui se trouvent plus proches de la phase solide - en tout cas qui ont un  $\Gamma$  plus élevé - la contribution quantique de la pression est mise à zéro, puisque la partie négative l'emporte sur le terme positif. Il est certain qu'étant toujours dans la phase liquide, le fait de ne pas inclure la correction quantique est un peu regrettable mais, pour les raisons que nous avons vues, la méthode choisie évite des discontinuités importantes entre les différentes régions de transition.

Pour être complet, nous présentons, sans entrer dans les détails, l'allure de la surface 3D de l'énergie interne totale  $U$  du liquide. Comme nous avons déjà montré des résultats pour un plasma de carbone et afin de ne pas noyer la présentation dans une multitude de graphiques à comportement similaire, c'est la surface décrite par l'énergie interne d'un plasma liquide d'oxygène pur que nous allons exposer. La Figure 5.8, analogue à celles qui ont déjà été présentées, reflète l'inclusion de toutes les contributions au calcul de  $U$ .

Encore une fois, on retient que la surface lisse a un comportement correct et que le morceau manquant correspond aux contributions des corrections négatives. On remarque cependant une forte hausse de l'énergie pour les basses densités et les températures élevées. C'est un comportement attendu puisque (équation 3.54)  $U^{ph}$  est proportionnel à  $\frac{T^4}{\rho}$ . La région de validité est identique à celle de la pression du carbone.

Encore une fois nous avons choisi les mêmes trois points caractéristiques pour lesquels l'énergie interne a été calculée. Les résultats sont présentés dans le Tableau 5.2. Le gaz parfait d'électrons est toujours le grand responsable de l'énergie interne du milieu, en contribuant à 97% de celle-ci. La correction la plus importante est celle du terme de l'OCP, qui soutire 3% à 4% d'énergie en moyenne; valeur dominante devant les 0,07% et 0,2% des autres corrections. Nous remarquons que le poids du terme d'excès du mélange est considérablement plus important dans le cas de l'énergie libre qu'il ne l'était pour la pression. En effet, la contribu-

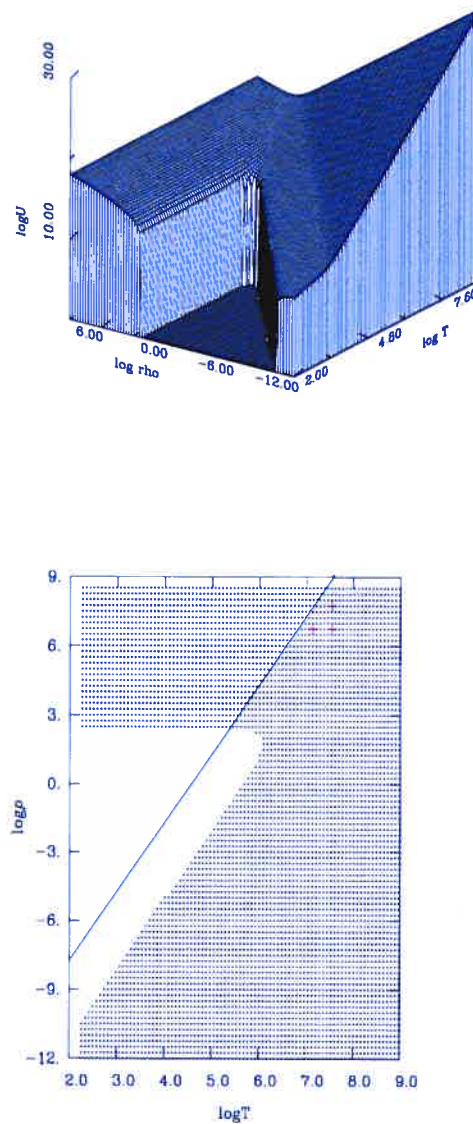


FIGURE 5.8 – Energie interne d'un plasma liquide d'oxygène pur d'après la nouvelle version de l'EOS. Toutes les contributions ( $P_{id}^e + P_{id}^i + P^{ph} + P_q^i + P_{ex}^i + P_{ie}^l + P_x^e$ ) sont incluses et la correction quantique est utilisée sous sa version modifiée. A) Graphique du haut: Représentation 3D de la surface d'énergie. B) Graphique du bas: vue de haut de la surface 3D. La région couverte par l'énergie interne est très similaire à celle de la pression du carbone. Les croix rouges indiquent les mêmes trois couples  $(T, \rho)$  que pour la pression, pour lesquels le Tableau 5.2 donne les valeurs d'énergie interne.

( logT , logρ )	( 7,54 ; 7,75 )	( 7,14 ; 6,75 )	( 7,54 ; 6,75 )
$U_{id}^e$	$3,75850 \cdot 10^{17}$ (97,5%)	$1,17640 \cdot 10^{17}$ (96%)	$1,17670 \cdot 10^{17}$ (96,2%)
$U_{id}^i$	$2,70265 \cdot 10^{14}$ (0,074%)	$1,07594 \cdot 10^{14}$ (0,095%)	$2,70265 \cdot 10^{14}$ (0,024%)
$U^{ph}$	$1,94441 \cdot 10^8$ ( $10^{-8}$ %)	$4,88415 \cdot 10^7$ ( $10^{-8}$ %)	$1,94441 \cdot 10^9$ ( $10^{-6}$ %)
$U_{ex}^i$	$-9,97647 \cdot 10^{15}$ (2,7%)	$-4,64642 \cdot 10^{15}$ (4,1%)	$-4,52580 \cdot 10^{15}$ (4%)
$U_{ie}^l$	$-8,22316 \cdot 10$ ( $10^{-14}$ %)	$-4,36331 \cdot 10$ ( $10^{-14}$ %)	$-7,75466 \cdot 10$ ( $10^{-14}$ %)
$U_x^e$	$1,31580 \cdot 10^{14}$ (0,036%)	$-2,19362 \cdot 10^{14}$ (0,194%)	$-2,19517 \cdot 10^{14}$ (0,194%)
$U_q^i$	0 (0%)	0 (0%)	$1,89996 \cdot 10^{13}$ (0,017%)
$U_{liq}$	$3,66284 \cdot 10^{17}$	$1,12882 \cdot 10^{17}$	$1,13214 \cdot 10^{17}$

TABLEAU 5.2 – Contributions des divers termes de l'EOS à l'énergie interne totale d'un plasma liquide d'oxygène pur. Les valeurs numériques de l'énergie (erg) correspondant à chaque terme sont données pour trois couples (T,ρ) en rouge dans la Figure 5.8. Pour chacune des valeurs, le poids du terme en pourcentage par rapport à l'énergie totale est donné.

tion de l'OCP passe de 2% (pression) à 4% (énergie interne) en moyenne, et conséquemment l'influence du gaz parfait d'électrons chute de 99% à 97%. Cette importance ionique accrue est encore plus significative - les contributions ioniques deviennent alors dominantes - pour des quantités comme la chaleur spécifique.

Enfin, on retrouve aussi l'effet de la correction quantique modifiée. Le point (7,54 ; 6,75) possède toujours une correction quantique non nulle qui contribue à 0,017% de l'énergie libre totale. Pour ce qui est des deux autres points, qui se trouvent dans une région de  $\Gamma$  plus élevé, la correction quantique a été éteinte puisqu'elle devenait négative.

Les résultats de pression et d'énergie libre provenant de la nouvelle version de l'EOS, ont été présentés dans cette section pour le cas du plasma liquide. Les caractéristiques majeures à retenir sont les suivantes:

- Ce sont les électrons qui contribuent à la majorité de la pression et de l'énergie interne. Cette dominance du gaz parfait d'électrons est d'autant plus importante dans la région du plan  $(T, \rho)$  qui nous intéresse comme le montrent les tableaux 5.1 et 5.2.
- Bien que petite, la correction principale aux effets cinétiques est l'énergie d'excès du mélange qui va contribuer négativement, à 2% de la pression et 4% de l'énergie interne totale en moyenne. Ce terme de l'OCP a été amélioré par rapport à l'EOS de Lamb (1974) puisque c'est la paramétrisation en fonction de  $\Gamma$  (équation 4.13) donnée par Potekhin & Chabrier (2000) qui a été adoptée dans les nouveaux calculs.
- Une deuxième amélioration importante, par rapport à l'EOS de Lamb, est l'inclusion du terme en  $\Gamma^4$  dans la correction quantique, pour une partie du plan. L'astuce utilisée consiste à éteindre ce terme lorsque la contribution quantique devient négative.
- Pour finir, la couverture du plan température-densité est très large puisque seule une petite partie de celui-ci n'est pas accessible. La région non disponible pour le liquide va être largement couverte par l'équation de l'enveloppe pour laquelle les conditions de température et de densité concordent. Enfin, dans la région d'intérêt ( $10^6 g \cdot cm^{-3} < \rho < 10^9 g \cdot cm^{-3}$  et  $10^6 K < T < 10^8 K$ ), même la partie solide est entièrement recouverte par l'EOS liquide ce qui permettra un bon recoupement avec le milieu solide que nous allons aborder dans la sous-section qui suit.

### 5.2.2 Pression et énergie interne pour le plasma solide

La contribution dominante pour la pression est de nouveau le gaz parfait d'électrons (Figure 5.2). A celle-ci, nous ajoutons l'énergie cinétique ionique du solide, modélisée par un gaz parfait de phonons: il s'agit de la contribution harmonique qui va remplacer le gaz parfait d'ions du plasma liquide. L'allure de cette surface de pression combinée, non reproduite ici, est très similaire à la pression des trois gaz parfaits de la sous-section précédente, mais avec la pression de radiation en moins, puisque celle-ci ne contribue que d'une manière insignifiante à la pression totale du cristal.

Le terme de correction principal à ces pressions idéales est l'énergie électrostatique ionique. Pour le plasma solide, elle est modélisée par la pression de Madelung du réseau bcc. Son im-



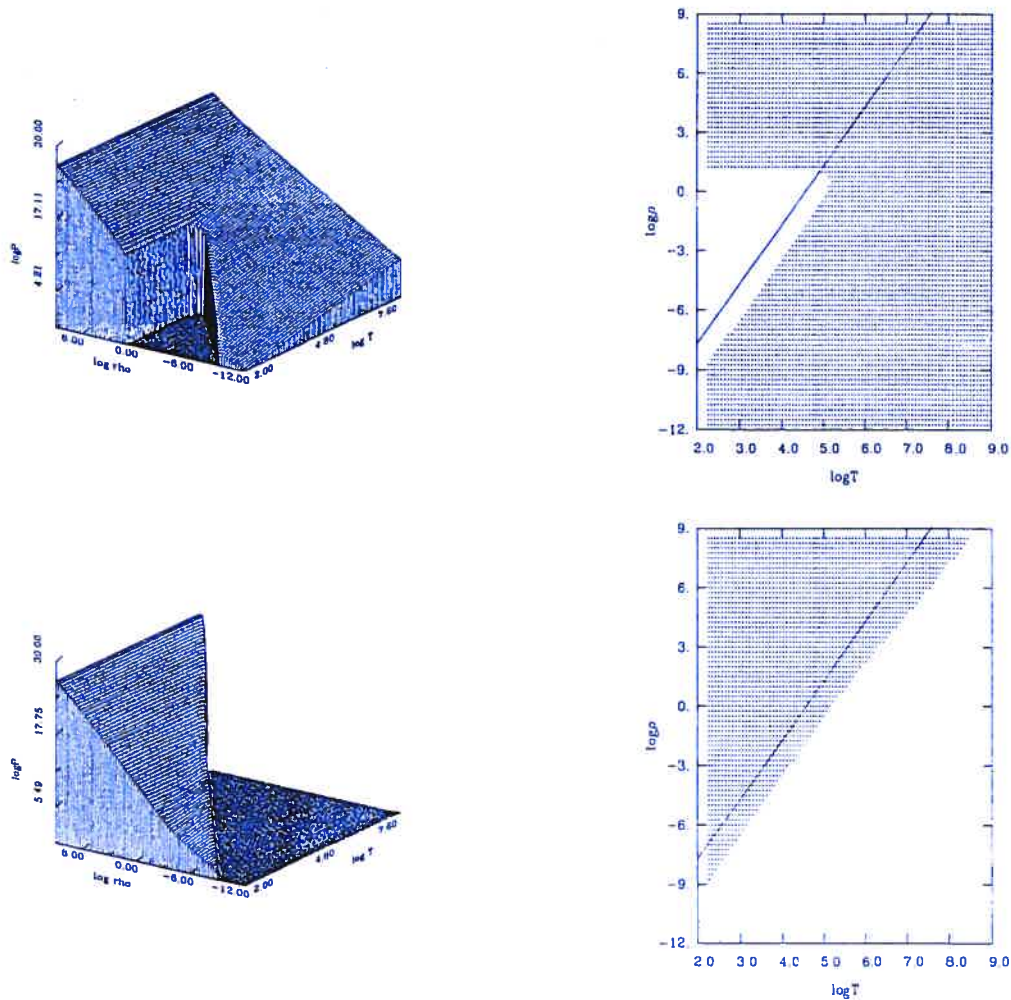


FIGURE 5.9 – Représentation 3D des effets sur la pression idéale de  $P_{Mad}^i$  et de  $P_{an}^i$  pour un plasma solide de carbone pur. A) Graphique de gauche (haut): pression  $P_{id}^e + P_{har}^i + P_{Mad}^i$ . Une partie du plan n'est pas accessible. B) Graphique de droite (haut): vue de haut du graphique A. Les contributions  $P_{id}^e$  et  $P_{har}^i$  étant positives la région manquante est due à la contribution négative du terme électrostatique de Madelung. C) Graphique de gauche (bas): vue 3D de la pression  $P_{id}^e + P_{har}^i + P_{an}^i$ . D) Graphique de droite (bas): vue de haut du graphique C. La région manquante est due à la contribution négative du terme anharmonique.

pact, très comparable à son homologue liquide, est présenté sur la Figure 5.9. On remarque que la partie manquante de pression négative diffère peu de celle de la Figure 5.3. Les valeurs numériques de la pression dans les régions valides sont inférieures à celles des contributions idéales combinées; mais cette différence n'est évidemment pas visible sur l'échelle logarithmique. Il est dommage de constater que la zone exclue par la pression de Madelung se trouve dans la phase solide. Même s'il ne s'agit pas de la région d'intérêt premier, toute la surface

solide, contrairement à la surface liquide dans la sous-section précédente, n'est pas accessible.

La contribution anharmonique constitue un deuxième terme de correction. Comme on l'observe à nouveau sur la Figure 5.9, cette dernière amène une coupure drastique qui supprime la moitié de la surface ( $P_{Mad}$  n'est pas inclus ici, seulement  $P_{id}^e$ ,  $P_{har}^i$  et  $P_{an}^i$ ). Cela ne devrait pas surprendre puisque la correction anharmonique n'est à priori valide que dans la phase solide, et c'est ultimement ce qui nous intéresse. En dessous d'une certaine valeur de  $\Gamma$  cette contribution *explose*, et la pression totale devient négative à cause de ce terme  $P_{an}^i$  qui est très grand en valeur absolue.

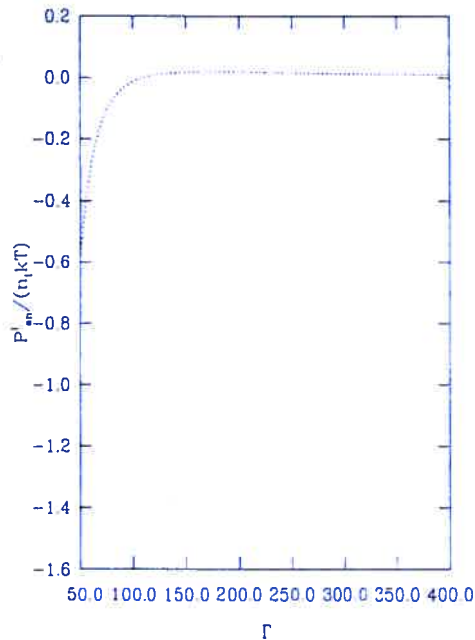


FIGURE 5.10 – Comportement de la pression provenant de la correction anharmonique du cristal en fonction du paramètre de Coulomb  $\Gamma$ . Pour des valeurs de  $\Gamma$  qui correspondent à la phase liquide, la contribution anharmonique est fortement négative: elle annule les contributions cinétiques principales dans cette région (voir Figure 5.9). Une fois positive, elle ne varie que très peu et contribue en tant que constante de faible valeur à la pression solide totale.

En effet, si nous retournons à l'expression de la pression anharmonique (sous-section 4.4.1) on s'aperçoit que les deux premiers termes positifs en  $1/\Gamma$  et  $1/\Gamma^2$  vont dominer sur le troisième terme négatif pour des valeurs du paramètre de Coulomb relativement élevées. Cependant, lorsque  $\Gamma$  devient de plus en plus petit c'est  $1/\Gamma^3$  qui prend le dessus. La Figure 5.10 illustre bien ce comportement où l'on voit à quel moment la correction anharmonique devient négative.



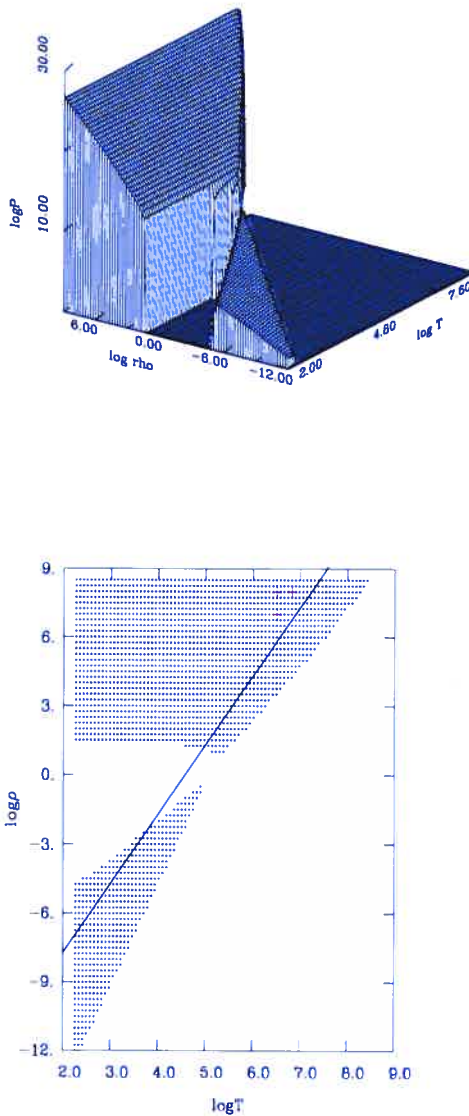


FIGURE 5.11 – Pression d'un plasma solide de carbone pur d'après la nouvelle version de l'EOS. Toutes les contributions ( $P_{id}^e + P_{har}^i + P_{an}^i + P_{Mad}^i + P_x^e + P_{ie}^s + P_x^e$ ) sont incluses. A) Graphique du haut: Représentation 3D de la surface de pression. Une partie du plan n'est pas accessible. B) Graphique du bas: vue de haut de la surface 3D. Les croix rouges indiquent trois couples  $(T, \rho)$ , pour lesquels le Tableau 5.3 donne les valeurs de pression.

Bien entendu, dans la phase solide cette correction est positive puisque, au même titre que la contribution harmonique, la correction anharmonique des phonons modélise la pression

( logT , logρ )	( 6,5 ; 8,0 )	( 6,5 ; 7,0 )	( 6,82 ; 8,0 )
$P_{id}^e$	2,15085·10 <sup>25</sup> (98,6%)	8,45995·10 <sup>23</sup> (99%)	2,15085·10 <sup>25</sup> (99%)
$P_{har}^i$	1,0667·10 <sup>22</sup> (0,050%)	4,60907·10 <sup>20</sup> (0,054%)	1,22249·10 <sup>22</sup> (0,058%)
$P_{an}^i$	1,59028·10 <sup>19</sup> (10 <sup>-5</sup> %)	3,57420·10 <sup>18</sup> (10 <sup>-4</sup> %)	7,28135·10 <sup>19</sup> (10 <sup>-4</sup> %)
$P_{Mad}^i$	-3,43536·10 <sup>23</sup> (1,62%)	-1,59455·10 <sup>22</sup> (1,9%)	-3,43536·10 <sup>23</sup> (1,6%)
$P_x^e$	3,16152·10 <sup>22</sup> (0,15%)	1,01645·10 <sup>21</sup> (0,12%)	3,16152·10 <sup>22</sup> (0,15%)
$P_{ie}^s$	-1,50795·10 <sup>21</sup> (0,007%)	-4,91618·10 <sup>19</sup> (0,006%)	-1,45759·10 <sup>21</sup> (0,007%)
$P_{sol}$	2,12058·10 <sup>25</sup>	8,31481·10 <sup>23</sup>	2,12075·10 <sup>25</sup>

TABLEAU 5.3 – Contributions des divers termes de l'EOS à la pression totale d'un plasma solide de carbone pur. Les valeurs numériques de la pression (dyn·cm<sup>-2</sup>) correspondant à chaque terme sont données pour trois couples (T,ρ) en rouge dans la Figure 5.11. Pour chacune des valeurs, le poids du terme en pourcentage par rapport à la pression totale est donné.

cinétique ionique qui est de nature positive.

Il faut retenir que - la Figure 5.9 en témoigne - la région valide couverte par la somme des trois termes  $P_{id}^e$ ,  $P_{har}^i$  et  $P_{an}^i$  s'étend sur la totalité de la phase solide et occupe même une région liquide au-delà de la limite de  $\Gamma_{crit} = 175$ . Ainsi, la région solide est adéquatement recouverte, contrairement au cas de la pression de Madelung, et il y a une bonne continuité pour des régions assez avancées dans la phase liquide.

En combinant les pressions, anharmonique et de Madelung, on peut s'imaginer que l'allure globale de la couverture du plan sera alors assez réduite. Au lieu d'exposer directement ces deux contributions, nous allons auparavant ajouter les termes restant de l'équation d'état,  $P_x^e$  et  $P_{ie}^s$  avant de présenter l'EOS solide totale. Ces dernières pressions correctives, d'échange des électrons - la même que dans le cas du liquide - et de polarisation, vont avoir des effets moins radicaux que ceux des deux premiers termes que nous venons de voir.

Ainsi, c'est la pression totale d'un plasma solide de carbone qui est représentée à la Fi-

Figure 5.11. Globalement, les termes  $P_x^e$  et  $P_{ie}^s$  n'apportent qu'une très petite correction sur la couverture de la surface qui reste essentiellement la même qu'une combinaison de celles de la Figure 5.9. Encore une fois, trois couples  $(T, \rho)$  représentatifs d'une région du plasma solide typique de l'intérieur d'une naine blanche sont notés en rouge sur la figure. Le Tableau 5.3 décompose les valeurs de  $P_{tot}$  en ces différentes contributions à chacun des trois points.

La pression provient majoritairement des électrons comme dans le cas du liquide. C'est toujours l'énergie potentielle de Madelung qui est la correction dominante avec un apport négatif d'environ 1,6%. Si on compare simultanément les tableaux 5.1 et 5.3, on remarque que les diverses contributions à la pression totale, caractéristiques d'un même phénomène physique, ont des valeurs numériques très semblables indépendamment de la phase choisie: la pression harmonique et la pression idéale du gaz d'ions sont de l'ordre de  $10^{21\sim 22} \text{ dyn} \cdot \text{cm}^{-2}$ , la pression de Madelung et la pression de l'OCP ont des valeurs aux alentours de  $10^{22\sim 23} \text{ dyn} \cdot \text{cm}^{-2}$ , le terme d'échange est le même dans les deux cas ... etc.

La pression électronique idéale, exprimée par une même relation  $P_{id}^e$  dans les deux phases, est la seule qui augmente de façon appréciable - en moyenne d'un ordre de grandeur - entre les régimes liquide et solide. Ce comportement est justifié puisque le passage du premier état au deuxième correspond à une cohésion du plasma plus significative ( $\Gamma$  augmente) dans un milieu de plus en plus dense et donc pour une dégénérescence croissante.

La transition de phase semble ainsi se faire de façon continue et sans variation. La réunion des deux EOS devrait se faire facilement, lors de l'incorporation dans les modèles stellaires, sans avoir recours à des rapiécages numériques trop compliqués.

Comme pour le liquide, la surface décrite par l'énergie interne d'un plasma d'oxygène pur est présentée dans la Figure 5.12. Par opposition à la surface de pression, une partie considérablement plus importante est manquante. Cette coupure sévère est due à la contribution de  $F_{Mad}^i$  dont l'effet négatif est plus notable sur  $U$  que sur  $P$ . Cependant, la région d'intérêt est totalement recouverte et le prolongement dans la partie liquide assure un bon recouvrement des régimes. Le Tableau 5.4 représente les énergies internes pour les mêmes trois points du plasma solide. Par rapport aux valeurs de pression, l'importance croissante de l'énergie potentielle (Madelung) et parallèlement la baisse du poids électronique relatif, lors

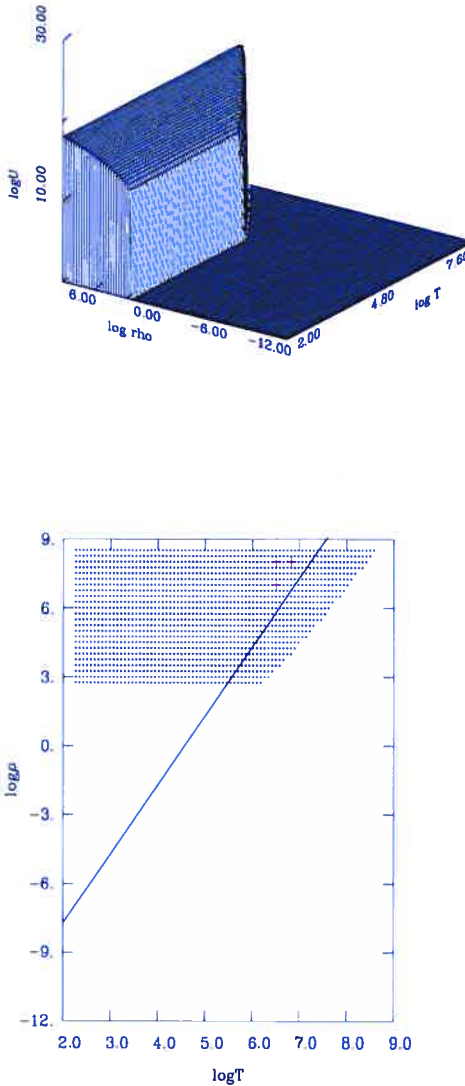


FIGURE 5.12 – Energie interne d'un plasma solide d'oxygène pur d'après la nouvelle version de l'EOS. Toutes les contributions ( $P_{id}^e + P_{har}^i + P_{an}^i + P_{Mad}^i + P_x^e + P_{ie}^s + P_x^e$ ) sont incluses. A) Graphique du haut: Représentation 3D de la surface d'énergie. Une partie du plan n'est pas accessible. B) Graphique du bas: vue de haut de la surface 3D. La région couverte par l'énergie interne est beaucoup plus restreinte que celle pour la pression, mais reste quand même amplement suffisante pour la région solide. Les croix rouges indiquent les mêmes trois couples  $(T, \rho)$  que pour la pression, pour lesquels le Tableau 5.4 donne les valeurs de l'énergie interne.

( logT , logρ )	( 6,5 ; 8,0 )	( 6,5 ; 7,0 )	( 6,82 ; 8,0 )
$U_{id}^e$	$4,87193 \cdot 10^{17}$ (97,5%)	$1,60435 \cdot 10^{17}$ (96,3%)	$4,87194 \cdot 10^{17}$ (97,5%)
$U_{har}^i$	$1,60083 \cdot 10^{14}$ (0,033%)	$6,91520 \cdot 10^{13}$ (0,043%)	$1,83434 \cdot 10^{14}$ (0,038%)
$U_{an}^i$	$2,03512 \cdot 10^{11}$ ( $10^{-5}$ %)	$4,98222 \cdot 10^{11}$ ( $10^{-4}$ %)	$1,00564 \cdot 10^{12}$ ( $10^{-4}$ %)
$U_{Mad}^i$	$-1,24849 \cdot 10^{16}$ (2,62%)	$-5,79498 \cdot 10^{15}$ (2,28%)	$-1,24849 \cdot 10^{16}$ (2,62%)
$U_x^e$	$2,96335 \cdot 10^{14}$ (0,061%)	$-1,73540 \cdot 10^{14}$ (0,011%)	$2,96335 \cdot 10^{14}$ (0,061%)
$U_{ie}^s$	$-8,05548 \cdot 10^{13}$ (0,017%)	$-4,51373 \cdot 10^{13}$ (0,028%)	$-7,97112 \cdot 10^{13}$ (0,016%)
$U_{sol}$	$4,75085 \cdot 10^{17}$	$1,54491 \cdot 10^{17}$	$4,7511 \cdot 10^{17}$

TABLEAU 5.4 – Contributions des divers termes de l'EOS à l'énergie interne totale d'un plasma solide d'oxygène pur. Les valeurs numériques de l'énergie (erg) correspondant à chaque terme sont données pour trois couples  $(T, \rho)$  en rouge dans la Figure 5.12. Pour chacune des valeurs, le poids du terme en pourcentage par rapport à l'énergie totale est donné.

du passage de P à U, sont évidentes. C'est ce qu'on avait aussi observé pour le plasma liquide. Une étude plus poussée de l'EOS qui analyserait le comportement de la chaleur spécifique, mettrait en évidence le caractère ionique - et non électronique - de celle-ci.

Après l'avoir fait pour la phase liquide, nous venons également de survoler les résultats de cette nouvelle EOS pour un plasma solide. Les points à retenir de cette présentation sommaire sont les suivants.

La couverture du plan  $(T, \rho)$  est de beaucoup réduite en comparaison à celle du liquide. En effet, presque 50% de la surface pour la pression et environ 25% pour l'énergie interne est non disponible. Cette inaccessibilité d'une grande majorité du plan provient principalement des deux termes,  $F_{Mad}^i$  et  $F_{an}^i$  (Farouki & Hamaguchi (1993)). Le dernier n'était pas inclus dans la version antérieure de Lamb (1974).

Cependant, des comportements identiques à ceux de la phase liquide sont globalement

retrouvés. Indépendamment des régimes liquides et solides considérés, les contributions de la pression et de l'énergie interne sont respectivement toutes du même ordre de grandeur et ne subissent pas de variations considérables. Les valeurs de  $P$  et  $U$  à proximité de la frontière de l'état solide rejoignent facilement les résultats numériques liquides de l'autre côté de la courbe  $\Gamma_{crit} = 175$ , et semblent assurer une transition sans discontinuité majeure. Il est donc rassurant de constater que la transition entre les deux régimes va pouvoir se faire aisément puisque l'effet le plus dominant - celui des électrons - est commun aux deux phases, tandis que les corrections beaucoup moins importantes qui diffèrent dans chacun des cas, ne varient pas de façon appréciable dans notre région d'intérêt.

La partie accessible de l'EOS solide, correspond largement à la région d'intérêt du centre des naines blanches. Le recoupement entre les équations des deux phases peut se faire aisément et alors la couverture totale du plan ne laisse inutilisable qu'une petite partie de celui-ci.

### 5.2.3 Version 2004 et version 1974

L'EOS développée dans ce mémoire se veut une modernisation de celle de Lamb (1974). Certains termes ne sont pas modifiés par rapport à l'équation originale, tandis que d'autres présentent des différences plus ou moins importantes. De ceux qui ont été transformés, la grande majorité provient de la revue sur l'EOS par Potekhin & Chabrier (2000).

Il est nécessaire de préciser que l'objectif de ce projet n'était pas d'obtenir des différences majeures par rapport à l'ancienne version. D'ailleurs une telle attente n'était pas justifiée puisque la contribution dominante des électrons était bien connue depuis longtemps. L'objectif était davantage une validation de l'EOS existante et une précision supplémentaire apportée aux termes de corrections mis à jour, selon les résultats de la physique actuellement disponible.

Nous avons déjà mentionné au cours des deux dernières sous-sections quelques unes de ces améliorations. Ici, nous énumérons rapidement les similitudes et différences pour chacun des onze termes de notre EOS par rapport à la version de 1974.

1.  $F_{id}^e$ : L'expression du terme dominant, l'énergie libre du gaz parfait d'électrons, reste fondamentalement la même mais son calcul a été amélioré. En effet, dans la sous-section 3.1.3 nous avons présenté le calcul numérique des intégrales de Fermi-Dirac généralisées,



d'après la méthode d'Aparicio (1998). La version de Lamb utilisait plusieurs approximations analytiques, correspondant à des régimes différents. Bien que les nouveaux résultats obtenus ne semblent pas apporter des modifications substantielles, il s'agit quand même d'une amélioration significative puisqu'elle touche le terme le plus important de l'EOS.

- 1<sup>ère</sup> *modification*

2.  $F_{id}^i$ : Le gaz parfait d'ions dans un plasma totalement ionisé constitué d'une seule espèce chimique ne pose aucun problème et son expression simple est identique à celle retrouvée dans l'équation de Lamb.
3.  $F_{ex}^i$ : Une transformation importante est apportée pour le terme de l'OCP. La paramétrisation la plus récente de l'énergie d'excès d'un plasma de Coulomb donnée par Potekhin & Chabrier (2000) est incluse dans la nouvelle version. - 2<sup>e</sup> *modification*
4.  $F_{ie}^l$ : L'ancien terme de Thomas-Fermi est remplacé par la dernière paramétrisation moderne de l'énergie de polarisation du liquide donnée par Potekhin & Chabrier (2000). - 3<sup>e</sup> *modification*
5.  $F_x^e$ : Sans aucune modernisation ni vérification des calculs, l'énergie d'échange des électrons traitée de façon précise par Lamb a été directement prise dans le code préexistant.
6.  $F_q^i$ : Nous avons déjà discuté de la correction quantique. Présente dans l'EOS de Lamb mais avec une précision poussée seulement jusqu'au premier ordre d'approximation (en  $\Gamma^2$ ), nous l'avons incluse dans notre code, en considérant également la contribution en  $\Gamma^4$  telle que présentée par Hansen & Vieillefosse (1975). Néanmoins, il ne faut pas oublier que l'utilisation de ce terme doit être faite avec attention puisqu'un comportement problématique surgit pour des valeurs du paramètre de Coulomb élevées. Pour remédier à cet ennui, une correction quantique *modifiée* a été utilisée (sous-section 5.2.2). Cette difficulté est peut-être une des raisons pour laquelle une telle amélioration qui date de 1975, n'est jamais mentionnée par Potekhin & Chabrier (2000) dans une revue générale des termes de l'EOS. - 4<sup>e</sup> *modification*
7.  $F^{ph}$ : L'énergie libre du gaz parfait de photons, au même titre que celui des ions ne présente aucun embarras et aucune amélioration par rapport aux versions antérieures n'a été apportée. D'autant plus que d'après les tableaux 5.1 et 5.3 sa contribution

est négligeable pour les conditions physiques qui nous intéressent. Nous l'avons inclus simplement pour être complet.

8.  $F_{har}^i$ : Un des termes dont nous n'avons pas discuté en détail, mais qui nécessite une certaine attention, est l'énergie harmonique des phonons du solide. Un peu comme l'énergie quantique des ions, il s'agit d'une des contributions qui a posé le plus de problèmes.

Dans la première version de Lamb, des calculs numériques très précis pour une structure cristalline bcc, sont inclus dans le code. Au contraire, Chabrier (1993) propose des calculs fondés sur une relation analytique, qui combine les modèles d'Einstein et de Debye.

Comme nous l'avons déjà mentionné, la contribution ionique du cristal est importante lors de considérations sur les propriétés thermiques de la naine blanche. Ainsi, la comparaison entre les deux versions proposées ici, va être faite par l'intermédiaire de la chaleur spécifique. C'est ce que présente d'ailleurs Chabrier (1993), qui compare sa nouvelle expression de  $F_{har}^i$  aux résultats numériques de Lamb (1974) mais aussi à des résultats MC récents de l'époque. Les valeurs de  $C_V$  présentées sur une échelle linéaire démontrent la supériorité en précision des calculs de Chabrier qui se rapprochent davantage des résultats MC comparativement à ceux de Lamb. Pourtant l'écart entre les deux courbes (Lamb et Chabrier) n'est pas énorme et le comportement global est identique.

Une analyse de ces mêmes données sur une échelle logarithmique révèle pourtant des différences intéressantes.

En effet, la Figure 5.13 pour une densité de  $\log \rho = 8$ , présente les différents comportements des chaleurs spécifiques telles que calculées par Lamb et par Chabrier. La divergence des deux courbes à partir d'une certaine valeur de température est incontestable. Il est clair que cet écart entre les deux chaleurs spécifiques ne serait pas visible sur une échelle linéaire. Bien que la région d'intérêt ne se trouve pas à de si faibles températures, la nécessité de retrouver des comportements identiques pour des situations même extrêmes pose un véritable problème lorsque des effets si distincts sont observés. Ces affirmations sont d'autant plus justifiées que les cas limites correspondent à des régimes où les comportements de la chaleur spécifique sont bien connus.

Par exemple, un modèle quantique simplifié du solide dans l'étude du gaz de phonons,

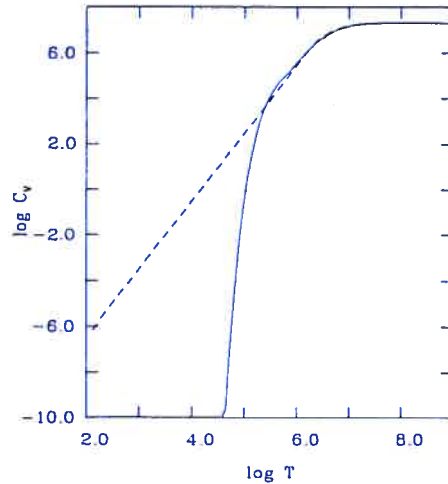


FIGURE 5.13 – Comparaison du comportement de la chaleur spécifique d'un gaz parfait de phonons d'après les résultats de Lamb (1974) et de Chabrier (1993). Pour une densité de  $\rho = 10^8 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-2}$ ,  $\log C_V$  est représenté en fonction de  $\log T$ . Le trait plein correspond aux calculs numériques de Lamb, et la ligne en tiret à l'expression analytique de Chabrier.

valide à de faibles fréquences d'oscillation, est l'approximation de Debye (equation 4.33). Celle-ci possède des comportements limites bien précis. Pour des températures élevées  $C_V \simeq 3Nk$ . Ce résultat classique de Dulong et Petit est bien retrouvé (le plateau observé à haute température) sur notre graphique aussi bien pour les calculs de Lamb que pour les calculs de Chabrier.

Cependant, pour des basses températures le modèle de Debye prévoit une dépendance  $C_V \propto T^3$ . C'est exactement le comportement limite que l'on retrouve pour la courbe de Chabrier (trait discontinu), basée sur une expression analytique, qui reprend en partie, en plus du modèle d'Einstein pour le solide, ce même modèle de Debye. Au contraire, le comportement de la chaleur spécifique de Lamb est complètement faux dans ce régime où les effets quantiques dominent totalement. Il s'agit d'un problème important. En effet, comment faire confiance à des données qui, quoique justes dans la région d'intérêt, ne rejoignent cependant pas les comportements limites exigés.

Il serait aisé d'oublier totalement les calculs de Lamb pour ce terme harmonique et ne considérer, en toute confiance, que les résultats de Chabrier. Cependant, l'effort entrepris

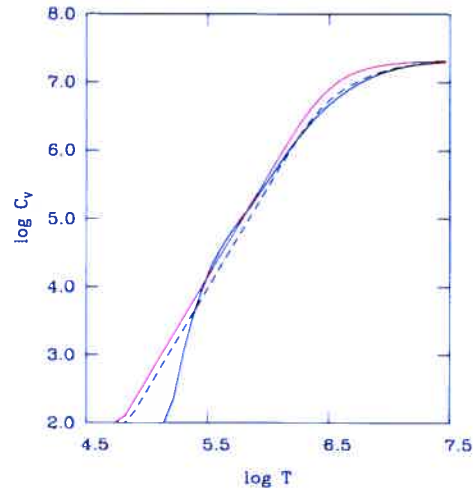


FIGURE 5.14 – Comparaison du comportement de la chaleur spécifique d'un gaz parfait de phonons d'après les résultats de Lamb (1974), de Chabrier (1993) et de l'approximation de Debye. Cette figure est un agrandissement de la Figure 5.13. Toujours pour une densité de  $\rho = 10^8 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-2}$ ,  $\log C_V$  est affiché en fonction de  $\log T$ . Le trait plein correspond aux calculs numérique de Lamb, la ligne en tiret à l'expression analytique de Chabrier et enfin la ligne rouge à l'approximation de Debye.

dans le cadre de ce projet vise à présenter une version moderne de l'EOS. Donc la mise à jour devrait contenir les résultats disponibles les plus précis qui soient. Or, au niveau de la conception, la relation de Chabrier pour  $F_{har}^i$  est moins rigoureuse que celle de Lamb, puisqu'il s'agit, comme on l'a vu, d'une expression analytique qui reprend deux modèles approximatifs du solide, celui de Debye et celui d'Einstein.

Les résultats présentés par Lamb sont des calculs numériques précis sur la structure bcc du cristal ionique et devraient à priori être supérieurs à toute approximation analytique. Afin de comparer les deux courbes, spécifiquement dans la région d'intérêt, nous présentons un agrandissement de celle-ci dans la Figure 5.14. La chaleur spécifique telle qu'obtenue avec le modèle de Debye a aussi été ajoutée.

La courbe rouge désigne le comportement de la chaleur spécifique d'après le modèle de Debye. Elle suit de très près le trait discontinu de Chabrier. En effet, l'allure des deux courbes est similaire, et un simple décalage constant - dû à l'incorporation du

modèle d'Einstein, en plus de l'approximation de Debye dans les calculs de Chabrier - différencie les deux modèles. Les résultats numériques de Lamb (trait plein) rejoignent tantôt le modèle combiné de Chabrier tantôt le modèle de Debye. Il est ainsi difficile de trancher sur la supériorité d'un des deux résultats à l'intérieur de cet intervalle de température. Ultimement, il faudrait effectuer une nouvelle comparaison avec des données de simulations MC sur cette échelle logarithmique, ce qui nous est impossible. La difficulté qui persiste toujours cependant est le comportement éronné de la chaleur spécifique de Lamb à basses températures. Une simple erreur de codage pourrait à notre avis être à la base du problème dans les calculs de Lamb, autrement très corrects. La correction du code, qui suppose une bonne compréhension de la physique du solide cristallin de structure bcc, nécessiterait un certain temps et est reportée à plus tard. Jusqu'à preuve du contraire, ce sont les résultats analytiques de Chabrier (1993) qui sont supérieurs et ils seront adoptés dans notre EOS.

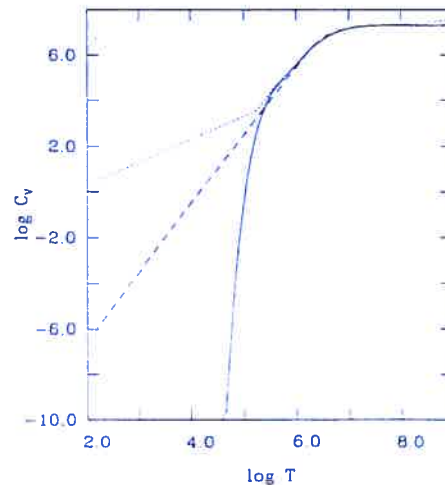


FIGURE 5.15 – Comparaison du comportement de la chaleur spécifique d'un gaz parfait d'électrons et d'un gaz parfait de phonons d'après les résultats de Lamb (1974) et de Chabrier (1993). Pour une densité de  $\rho = 10^8 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-2}$ ,  $\log C_V$  est représenté en fonction de  $\log T$ . Le trait plein correspond aux calculs numériques de Lamb, et la ligne en tiret à l'expression analytique de Chabrier. La courbe en pointillé trace l'allure de la chaleur spécifique provenant des électrons ainsi que des phonons - indépendamment de quelle relation, de Lamb ou de Chabrier, est utilisée pour ces derniers.

L'option d'utiliser l'ancien code de Lamb est néanmoins aussi prévue. Cette précaution de ne pas se débarrasser rapidement de calculs qui pourraient s'avérer meilleurs, est d'autant plus justifiée que, tout compte fait, la contribution thermique ionique, dominante dans la région d'intérêt, devient négligeable devant l'apport électronique à basses températures qui masque toutes différences entre les deux versions de la chaleur spécifique harmonique.

La Figure 5.15 reprend la Figure 5.13 mais en ajoutant la chaleur spécifique électronique. La courbe en pointillé, représente la chaleur spécifique combinée des phonons du solide et du gaz parfait d'électrons. Indépendamment des calculs utilisés pour l'apport ionique (Lamb ou Chabrier), le résultat à cette échelle pour des températures élevées est identique. Pour les faibles températures il est clair que la contribution électronique l'emporte à tous les coups. Ce comportement qui met en valeur une chaleur spécifique dominée par les ions à hautes températures mais par les électrons à basses températures avait déjà été mentionné dans la digression du chapitre 4 (sous-section 4.1.3), lors de la discussion sur l'importance des diverses corrections à l'EOS.

Enfin, il est justifié de dire que le terme harmonique des phonons du cristal - contribution de premier ordre pour les ions - tel qu'il vient d'être traité, est un apport considérable à cette EOS moderne. - 5<sup>e</sup> *modification*

9.  $F_{an}^i$ : La contribution anharmonique (Farouki & Hamaguchi (1993)) est une amélioration importante portée à l'EOS de Lamb, dans laquelle seulement le terme harmonique était considéré. Son influence est considérable (Figure 5.9) puisqu'elle coupe de moitié la surface valide dans le plan  $(T, \rho)$ , mais rend compte de  $10^{-4}\%$  de la pression ou de l'énergie interne totale dans les régions de validité. Bien qu'apparemment faible, cette correction est seulement 100 fois moins importante que la correction harmonique (Tableaux 5.2 et 5.4). - 6<sup>e</sup> *modification*
10.  $F_{Mad}^i$ : Aucune amélioration par rapport à l'EOS existante n'a été apportée pour ce qui est de l'énergie libre de Madelung qui ne dépend que d'une constante dont la valeur pour un réseau bcc est connue avec précision.
11.  $F_{ie}^s$ : L'énergie libre de polarisation du solide est totalement nouvelle. Lamb (1974) n'y



fait aucune référence. Alors que le terme de polarisation de Thomas-Fermi dans le liquide avait souvent été utilisé et amélioré dans diverses publications, la contribution de polarisation du solide n'avait jamais été mentionnée. A notre connaissance, la première référence y est faite dans Potekhin & Chabrier (2000).  $F_{ie}^s$  introduit une limitation au niveau de la couverture du plan mais amène une contribution de l'ordre de  $10^{-2\sim-3\%}$  - pour  $P_{sol}$  et  $U_{sol}$ . - 7<sup>e</sup> modification

Notre équation d'état est constituée de l'ensemble des ces onze termes. Certains sont donc retrouvés sous leur version de 1974 d'autres sous leur version moderne de 2004. Voyons comment globalement les modernisations apportées se traduisent en similitudes ou en différences des résultats vis à vis de l'ancienne EOS de Lamb.

La Figure 5.16 représente la couverture du plan  $(T, \rho)$ , par la pression et par l'énergie interne d'un plasma de carbone pur d'après les calculs, de Lamb ainsi que de la nouvelle version. Contrairement aux résultats que nous avons exposés dans les sous-sections précédentes, les surfaces correspondent ici simultanément à la réunion des EOS liquide et solide.

La couverture du plan par la nouvelle version, est plus importante, autant pour la pression que pour l'énergie interne, par rapport à celle de Lamb. En effet, si on joint les zones de validité des phases liquide et solide obtenues avec nos calculs modernes, en combinant les figures 5.7 et 5.11 pour la pression ainsi que 5.8 et 5.12 pour l'énergie interne, on retrouve le recouvrement du plan  $(T, \rho)$  qui est visible sur les deux graphiques du bas de la Figure 5.16. Cette couverture est supérieure à celle des graphiques du haut qui correspondent à la version 1974 de l'EOS. Cela est encourageant bien que la totalité du plan ne soit toujours pas utilisée.

Il reste à comparer, une à une, les valeurs numériques dans les régions valides des deux équations. On s'attend à des différences, soit très faibles, soit inexistantes.

La Figure 5.17 représente en trois dimensions, sur deux intervalles distincts  $[-2;2]$  et  $[-0.01;0,01]$ , la différence de pression d'un plasma liquide de carbone pur entre la version moderne et la version de Lamb (1974): soit  $\log P_{nouveau} - \log P_{ancien}$ . Le cas solide est aussi traité dans la Figure 5.18. Les régions qui sont non valides dans une des deux versions de l'EOS sont simplement retirées dans les graphiques.

Du graphique 5.17 de gauche, on remarque pour la phase liquide, que la grande majorité

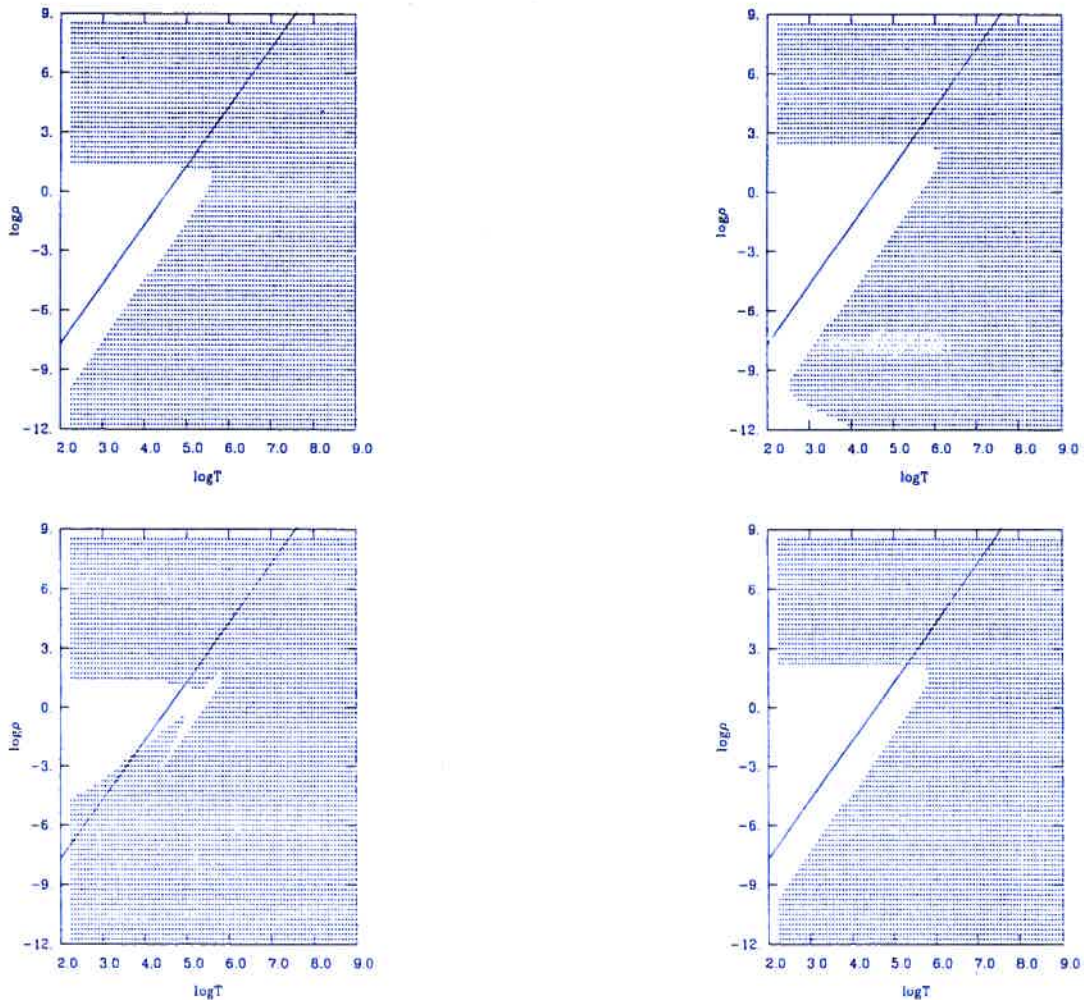


FIGURE 5.16 – Couverture de l'EOS dans le plan  $(T, \rho)$  pour un plasma de carbone pur - version de Lamb/version moderne. A) Graphique de gauche (haut): Région couverte par la pression totale de Lamb. B) Graphique de droite (haut): région couverte par l'énergie interne totale de Lamb. C) Graphique de gauche (bas): Région couverte par la pression totale de la nouvelle version - elle est obtenue par une combinaison des figures 5.7 et 5.11. D) Graphique de droite (bas): région couverte par l'énergie interne totale de la nouvelle version - elle est obtenue par une combinaison des figures 5.8 et 5.12. Dans les deux cas (pression et énergie), la couverture de la nouvelle version est plus importante.

de la surface est à zéro. Cela implique un écart infime entre les pressions provenant des deux EOS distinctes. La seule différence marquante est le plongeon observé à des densités élevées et de températures faibles. Ce rabaissement de la surface ne correspond cependant pas à une divergence réelle des résultats, puisque la comparaison qui est faite ici considère la nouvelle version sous la forme totalement liquide de l'EOS mais des calculs de Lamb qui réunissent



FIGURE 5.17 – Représentation 3D de la différence de pression pour un plasma liquide de carbone pur entre la nouvelle et l'ancienne version de l'EOS.  $\Delta \log P = \log P_{\text{nouveau}} - \log P_{\text{ancien}}$ . A) Graphique de gauche:  $\Delta \log P$  est représenté sur l'intervalle  $[-2; 2]$ . Mise à part le plongeon dans la région des hautes densités et des faibles températures, la surface concorde avec le plan  $\Delta \log P = 0$ . B) Graphique de droite: même graphique qu'en A, mais sur une échelle différente, soit  $[-0,01; 0,01]$ . Les régions qui correspondent à  $\Delta \log P < -0,01$ , sont égalées à  $-0,01$  afin de mieux visualiser la partie liquide importante sur cette échelle - la région non disponible est donc plus importante que celle du graphique A ou seul les régions de pressions négatives étaient supprimées.

les deux régimes simultanément. Ainsi, cette partie du graphique qui se trouve au premier plan de la figure, représente concrètement une comparaison entre la nouvelle pression liquide - non valide dans cette région - et l'ancienne pression solide dans une de ces zones de validité maximale.

Ainsi, sur cette échelle, pour l'ensemble de la phase liquide qui se trouve du côté droit de la droite  $\Gamma_{\text{crit}} = 175$  (comme représentée dans les graphiques 2D), les résultats de pression sont totalement identiques.

Néanmoins, une vue de la même surface sur une échelle plus restreinte (Figure 5.17 de droite) révèle des fluctuations qui étaient non visibles auparavant. En effet on remarque des variations de l'ordre de quelques pourcents aux alentours de la frontière de cristallisation et des régions liquides avoisinantes. Il faut préciser que, dans ce deuxième graphique, les valeurs de  $\Delta \log P < -0.01$  sont retirées afin de mieux mettre en évidence ces fluctuations de second ordre - c'est pour cela qu'une région plus importante du plan n'est pas disponible.

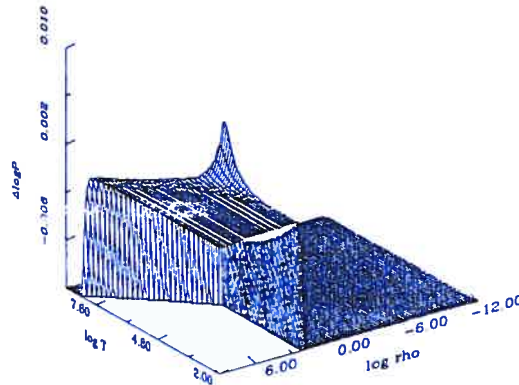


FIGURE 5.18 – Représentation 3D de la différence de pression pour un plasma solide de carbone pur entre la nouvelle et l'ancienne version de l'EOS.  $\Delta \log P = \log P_{\text{nouveau}} - \log P_{\text{ancien}}$ .

Bien qu'un certain agrandissement de la surface nous a donc permis d'observer de faibles différences, les valeurs de la pression liquide de la nouvelle EOS restent essentiellement inchangées par rapport à celle de Lamb.

Enfin, pour ce qui est du cas solide en reprenant l'échelle  $[-0.01; 0.01]$ , aucune différence observable n'est mise en évidence pour la majorité de la surface disponible et les deux versions semblent concorder. Seule une région bien visible sur la Figure 5.18, qui correspond à des densités  $\log \rho \simeq 4-5$  et des températures  $\simeq 10^6 \text{K}$ , présente des différences de pression positives. Ainsi ce pic observé démontre un accroissement de 2 % à 6 % de la nouvelle EOS par rapport à l'ancienne dans une région limite de la surface solide.

Finalement, ce que nous retenons d'un point de vue général, sont les sept modifications apportées par rapport à la version de Lamb (1974) et la couverture accrue sur le plan  $(T, \rho)$ , qui n'amènent pas pour autant de modifications majeures - elles sont de l'ordre de quelques pourcents. Des changements plus considérables devront sans doute être recherchés au niveau de la chaleur spécifique et à des échelles beaucoup plus petites. Ils ne seront alors appréciables



que par l'intermédiaire de résultats de modèles stellaires.

### 5.3 Projets futurs

Outre l'importante synthèse sur l'état actuel des connaissances des plasmas fortement ionisés fournie, indépendamment de son utilisation, par le travail de détermination de l'EOS moderne présentée dans ce mémoire de Maîtrise, c'est la réalisation du programme *eos*, outil performant, permettant de décrire thermodynamiquement de manière quantitative les plasmas présents dans le noyau des naines blanches, qui est l'ultime réalisation de cette étude.

Les sections précédentes ont montré que les améliorations apportées à cette EOS moderne ne sont pas considérables, du moins après une première analyse qualitative peu poussée, et que le produit final ne semble pas différer significativement de la version originale de Lamb. Néanmoins, le réel impact de cette nouvelle équation ne pourra être estimé que lors de son incorporation dans les modèles stellaires et de l'interprétation qui sera faite des résultats sur les propriétés mécaniques et thermiques de l'étoile. Seulement, à ce moment-là, un jugement définitif pourra-t-il être porté. Des indications préliminaires peuvent cependant anticiper certains comportements prévisibles dans les modèles.

Les propriétés mécaniques de l'étoile ne devraient pas être sujettes à d'importantes variations à cause de la forte dépendance aux électrons dégénérés qui reste essentiellement la même. Les améliorations majeures ayant été apportées au niveau des termes ioniques (discussion sur la chaleur spécifique harmonique, nouvelles corrections sur les termes ioniques de Coulomb, etc), ce sont les propriétés thermiques des naines blanches qui vont être susceptibles de changer.

Par exemple, nous avons vu que la chaleur spécifique dépend majoritairement des ions. Or, même une petite modification de la chaleur spécifique peut avoir des effets non négligeables sur l'évaluation du temps de vie de l'étoile. En effet le temps de vie  $\tau$  d'une naine blanche, pour laquelle les processus nucléaires sont totalement éteints, est donné par le rapport de l'énergie thermique disponible et de la luminosité, soit:

$$\tau = \frac{E_{th}}{L} = \frac{\int_0^M C_V T dM}{L} \quad (5.3)$$

Il va être intéressant d'étudier le poids des faibles variations de  $C_V$  sur le temps  $\tau$ . Ainsi, l'utilisation de cette EOS et de ces applications, la place à la base de modèles évolutifs modernes de naines blanches qui détermineront le temps de refroidissement de ces astres. De tels modèles évolutifs vont jouer le rôle d'outils cosmochronologiques utilisés pour calculer l'âge d'amas ouverts et globulaires de notre galaxie.

La cosmochronologie de naine blanche est encore à ses débuts. Cependant les récents progrès d'observation ainsi que théoriques, en font un domaine en pleine expansion. Une excellente revue sur le sujet est donnée par Fontaine et al. (2001). Effectivement, ces astres, représentants de la phase finale la plus commune de l'évolution stellaire, peuvent être utilisés comme un puissant outil pour estimer l'âge de diverses populations d'étoiles dans notre galaxie.

En fait, l'observation des naines blanches vieilles et froides a toujours été limitée par une faible luminosité intrinsèque, et la construction de modèles réalistes de ces astres s'est souvent heurtée aux problèmes d'incertitudes sur la physique constitutive dans un régime extrême de températures effectives très basses. Mais avec la multiplication des grands télescopes de 8-10 mètres, des populations de naines blanches de très faible luminosité devraient être découvertes et étudiées de façon routinière. Les naines blanches les plus vieilles du voisinage solaire peuvent donc être utilisées simultanément avec des calculs de refroidissement afin de déterminer l'âge du disque.

Le temps de refroidissement d'une naine blanche est une fonction importante de sa masse et de sa température effective. Ainsi, la meilleure façon pour estimer l'âge d'étoiles individuelles, est de comparer des isochrones théoriques avec des données d'observation dans un graphique masse-température effective. Ces isochrones sont justement obtenues à l'aide de calculs de refroidissement basés sur les codes évolutifs. De façon inverse, en connaissant l'âge d'une certaine population d'étoiles par un moyen autre, il est possible de fixer les isochrones théoriques sur les données expérimentales en précisant la composition chimique du noyau, un des paramètres du code évolutif. Cette méthode serait extrêmement utile puisque actuellement les abondances de carbone et d'oxygène dans le centre des naines blanches sont mal connues. Plusieurs équipes de recherche travaillent sur de tels modèles de refroidissement pour les étendre dans le régime des températures effectives très basses.



Notre groupe de recherche des naines blanches à l'Université de Montréal a développé récemment des modèles améliorés de dernière génération avec un code évolutif totalement nouveau fondé sur des techniques d'éléments finis très efficaces. Ce code a été conçu pour analyser de façon robuste et précise le phénomène de cristallisation, la diffusion des espèces atomiques, le mélange convectif et les processus nucléaires. Comme nous l'avons déjà vu, l'évolution d'une naine blanche est un problème de refroidissement séparable en deux parties distinctes: l'étude de l'enveloppe détermine le taux de refroidissement, puis la compréhension des phénomènes centraux donne l'énergie thermique disponible. Notre code tient compte de ces deux composantes et la structure entière du modèle, du centre de l'étoile au haut de l'atmosphère, est incluse dans les calculs évolutifs. La modernisation de l'EOS du centre d'une naine blanche, un des morceaux du code évolutif, rend ce modèle un des plus sophistiqués dans la communauté scientifique. L'étape suivante consiste à utiliser ce dernier, pour calculer l'âge de populations stellaires vieilles dans notre galaxie, puis de déterminer avec précision la composition du noyau d'une naine blanche.

## Chapitre 6

# Conclusion

Comme énoncé en introduction, l'objectif premier de ce mémoire était de comprendre les divers mécanismes présents dans le noyau d'une naine blanche, afin de bien caractériser l'état thermodynamique de la matière. Cela revenait à calculer l'équation d'état du plasma qui déterminait alors l'état thermodynamique de l'intérieur. Ainsi, nous avons présenté de façon complète, l'énergie libre de Helmholtz, en incluant toutes les contributions qui sont actuellement disponibles, des plus importantes aux moins importantes. Il s'agit d'un travail de synthèse sur l'état actuel des connaissances des plasmas fortement ionisés et de l'application de celles-ci au noyau d'une naine blanche.

La détermination de cette EOS moderne, a ultimement abouti au programme FORTRAN, *eos*, qui va remplacer l'ancienne équation d'état de Lamb (1974) dans les codes stellaires du groupe de naines blanches de l'Université de Montréal.

Tout d'abord, nous avons introduit (Chapitre 2), d'un point de vue général, l'équation d'état astrophysique et ses diverses contributions. Cette approche d'ensemble nous a non seulement imposé la démarche à suivre pour le calcul de l'EOS totale, mais nous a également permis d'acquérir une vision globale sur le rôle des différents termes cinétiques et potentiels.

La dérivation des énergies libres présentées au chapitre 3, a été axée sur les gaz parfaits. Parmi les trois contributions étudiées, nous avons abordé la plus importante, celle des électrons, de façon rigoureuse en présentant les calculs numériques d'Aparicio (1998) pour les intégrales de Fermi-Dirac généralisées qui ont permis un calcul précis sur une grande portion

du plan  $(T, \rho)$ .

Par la suite, les deux phases d'un plasma de Coulomb à très haute densité ont fait l'objet du chapitre 4. La correction majeure aux termes des gaz parfaits pour le plasma liquide a été l'énergie de Coulomb obtenue par le modèle de l'OCP. Puis, ce sont les termes d'énergie cinétique et les corrections dues à l'énergie potentielle, dans le cas du plasma cristallisé, qui ont été abordés. L'importance de l'inclusion des diverses contributions aux corrections électroniques et ioniques, pour tenir compte de la déviation du plasma par rapport aux comportements idéaux, a aussi été soulignée pour l'étude mécanique et thermique de l'étoile.

Enfin, dans le chapitre 5, une brève présentation du programme *eos* et de ses résultats, ainsi qu'une discussion sommaire, nous ont permis d'évaluer le travail réalisé. Les surfaces 3D de la pression et de l'énergie interne sont exposées pour une portion considérable du plan  $(T, \rho)$ . Le poids relatif par rapport à l'EOS totale des diverses contributions est bien mis en évidence et confirme la dominance des électrons. Sur les onze termes d'énergie libre, sept ont été modifiés par rapport à la version originale constituant ainsi une modernisation considérable qui justifie la nécessité de la tâche effectuée. Cependant, la comparaison avec l'ancienne EOS qui complète cette analyse, n'apporte pas de différences visibles pour ce qui est des surfaces thermodynamiques  $P$  et  $U$ . Toute affirmation sur les conséquences de cette modernisation de l'EOS devra attendre son utilisation dans des études sur l'âge de la galaxie à l'aide de modèles évolutifs. Au delà des exigences d'un mémoire de maîtrise, ce type de recherche pourrait très bien faire l'objet d'études doctorales.

De l'ensemble de ce projet nous retenons donc la conclusion suivante. L'intérêt recherché n'était pas une amélioration significative de l'équation d'état. Le travail effectué a plutôt abouti à une mise à jour essentielle du code de Lamb. Dotés de ce nouveau programme robuste, les modèles évolutifs peuvent être utilisés avec confiance.

# *Bibliographie*

- Albers, R. C. & Gubernatis, J. E. 1981, *Phys. Rev. B*, 23, 2782
- . 1986, *Phys. Rev. B*, 33, 5180
- Aparicio, J. M. 1998, *ApJS*, 117, 627
- Brush, S. G., Sahlin, H. L., & Teller, E. 1966, *Journal of Chemical Physics*, 45, 2102
- Chabrier, G. 1991, *L'équation d'état en astrophysique* (notes de cours sur la structure stellaire à l'observatoire de Paris-Meudon)
- . 1993, *ApJ*, 414, 695
- Chabrier, G., Ashcroft, N. W., & Dewitt, H. E. 1992, *Nature*, 360, 48
- Chabrier, G. & Potekhin, A. Y. 1998, *Phys. Rev. E*, 58, 4941
- Chabrier, G., Ségreain, L., Hernanz, M., Isern, J., & Mochkovitch, R. 1993, in *NATO ASIC Proc. 403: White Dwarfs: Advances in Observation and Theory*, 115–+
- Chandrasekhar, S. 1957, *An Introduction To The Study Of Stellar Structure*
- Choquard, P. F. 1967, *The Anharmonic Cristal* (Benjamin, New York)
- Dewitt, H. E. 1976, *Phys. Rev. A*, 14, 1290
- DeWitt, H. E. & Slattery, W. 1999, *Contrib. Plasma Phys.*, 39, 311
- Dubin, D. H. E. 1990, *Phys. Rev. A*, 42, 4972
- Eggleton, P. P., Faulkner, J., & Flannery, B. P. 1973, *A&A*, 23, 325
- Farouki, R. T. & Hamaguchi, S. 1993, *Phys. Rev. E*, 47, 4330
- Fontaine, G. 2003, *Elements de structure interne et d'évolution stellaire* (Université de Montréal, notes de cours)

- Fontaine, G., Brassard, P., & Bergeron, P. 2001, *PASP*, 113, 409
- Fontaine, G., Graboske, H. C., & van Horn, H. M. 1977, *ApJS*, 35, 293
- Gautschi, W. 1993, *Computer Physics Communications*, 74, 233
- Hansen, J. P. 1973, *Phys. Rev. A*, 8, 3096
- Hansen, J. P. & McDonald, I. R. 1976, *Theory of Simple Liquids* (Academic Press, New York)
- Hansen, J. P., Torrie, G. M., & Vieillefosse, P. 1977, *Phys. Rev. A*, 16, 2153
- Hansen, J. P. & Vieillefosse, P. 1975, *Physics Letters A*, 53, 187
- Ichimaru, S., Iyetomi, H., & Tanaka, S. 1987, *Phys. Rep.*, 149, 91
- Iyetomi, H., Ogata, S., & Ichimaru, S. 1989, *Phys. Rev. B*, 40, 309
- Kovetz, A., Lamb, D. Q., & van Horn, H. M. 1972, *ApJ*, 174, 109
- Lamb, D. Q. 1974, *Evolution of Pure  $^{12}\text{C}$  White Dwarfs*, (Thèse de Doctorat)
- Landau, L. D. & Lifshitz, E. M. 1958, *Statistical Physics*, 93
- Maradudin, A. A., Flinn, P. A., & Coldwell-Horsfall, R. A. 1961, *Ann. Phys.*, 15, 360
- Nagara, H., Nagata, Y., & Nakamura, T. 1987, *Phys. Rev. A*, 36, 1859
- Nozières, P. & Pines, D. 1958, *Physical Review*, 111, 442
- Ogata, S. & Ichimaru, S. 1987, *Phys. Rev. A*, 36, 5451
- Pichon, B. 1989, *Computer Physics Communications*, 55, 127
- Pollock, E. L. & Hansen, J. P. 1973, *Phys. Rev. A*, 8, 3110
- Pols, O. R., Tout, C. A., Eggleton, P. P., & Zhanwen, H. 1995, *MNRAS*, 274, 964
- Potekhin, A. Y. & Chabrier, G. 2000, *Phys. Rev. E*, 62, 8554
- Sagar, R. P. 1991a, *Computer Physics Communications*, 66, 271
- 1991b, *ApJ*, 376, 364
- Salpeter, E. E. 1961, *ApJ*, 134, 669
- Saumon, D., Chabrier, G., & van Horn, H. M. 1995, *ApJS*, 99, 713
- Segretain, L. 1994, *Cristallisation, fonction luminosité et coalescence des naines blanches*  
(Université Claude Bernard-Lyon I, Thèse de Doctorat)

- Shukla, R. C. & Cowley, E. R. 1971, *Phys. Rev. B*, 3, 4055
- Slattery, W. L., Doolen, G. D., & Dewitt, H. E. 1980, *Phys. Rev. A*, 21, 2087
- Stolzmann, W. & Bloecker, T. 1996, *A&A*, 314, 1024
- Stringfellow, G. S., Dewitt, H. E., & Slattery, W. L. 1990, *Phys. Rev. A*, 41, 1105
- Thacher, H. C. & Cody, W. J. 1967, *Math.Comput.*, 21, 30
- van Horn, H. M. & Ichimaru, S. 1993, *Strongly Coupled Plasma Physics* (University of Rochester Press)
- van Hove. 1961, *Quantum Theory of Many Particle Systems* (Benjamin, New York)
- Yakovlev, D. G. & Shalybkov, D. A. 1989, *Sov.Sci.Rev.Sect.E7*, 311