

CORRECTIONS DE DIFFRACTION AUX PONCTIONS THERMODYNAMIQUES D'UN GAZ D'ÉLECTRONS CLASSIQUE

M. Gombert, C. Deutsch

► To cite this version:

M. Gombert, C. Deutsch. CORRECTIONS DE DIFFRACTION AUX PONCTIONS THERMODY-NAMIQUES D'UN GAZ D'ÉLECTRONS CLASSIQUE. Journal de Physique Colloques, 1978, 39 (C1), pp.C1-184-C1-190. 10.1051/jphyscol:1978136 . jpa-00217333

HAL Id: jpa-00217333 https://hal.science/jpa-00217333

Submitted on 4 Feb 2008

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

CORRECTIONS DE DIFFRACTION AUX FONCTIONS THERMÓDYNAMIQUES D'UN GAZ D'ÉLECTRONS CLASSIQUE

M. M. GOMBERT et C. DEUTSCH

Laboratoire de Physique des Plasmas, Université Paris XI Centre d'Orsay, 91405 Orsay Cedex, France

Résumé. — Nous calculons les fonctions thermodynamiques dans un plasma à une composante en tenant compte des effets quantiques de diffraction. Nous considérons le cas où : $e^2 \beta$ (longueur de Landau) < $\hat{\lambda}$ (longueur de De Broglie) < λ_D (longueur de Debye). La méthode des graphes de Mayer-Salpeter est utilisée. Pour représenter les effets quantiques, nous remplaçons le potentiel de Coulomb par un pseudo-potentiel. Le traitement exact, au premier ordre à l'interaction, permet de retrouver pour le terme du premier ordre en Λ (paramètre plasma) la première correction quantique (premier terme du développement par rapport au paramètre quantique : $\hat{\lambda}/\lambda_D$).

Abstract. — We compute the thermodynamic functions for a one component plasma taking into account diffraction effects. We consider the case : $e^2 \beta$ (Landau length) $< \hat{\lambda}$ (De Broglie length) $< \lambda_D$ (Debye length). Mayer-Salpeter diagram's method is used. We replace the coulombic potential by a pseudo-potential. The derivation, exact to the first order in the interaction, allows to recover the first order correction in $\hbar \omega_p/k_B T$.

Dans cet article, sont évaluées les corrections quantiques de diffractions aux fonctions thermodynamiques pour un gaz d'électrons en présence d'un fond continu positif. On néglige les effets de symétrie. Le potentiel de Coulomb est remplacé par un pseudo-potentiel :

$$\frac{e^2}{r}+V(r)\,,$$

la correction étant uniquement due aux effets de diffraction.

Il y a eu plusieurs tentatives pour évaluer un tel pseudo-potentiel [1], [2] et [3]. Kelbg [4] fait un développement exact au premier ordre par rapport à l'hamiltonien d'interaction et obtient le potentiel effectif :

$$u_{k}^{*}(r) = \frac{e^{2}}{r} \left(1 - e^{-r^{2}/\lambda^{2}}\right) + \frac{e^{2} \sqrt{\pi}}{\lambda} \left(1 - \varphi(r/\lambda)\right)$$
(1)

avec :

$$\hat{\lambda} = \frac{\lambda}{2 \pi} = \frac{\hbar}{\sqrt{mk_{\rm B}T}}, \quad \text{et}: \quad \varphi(r/\hat{\lambda}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{r/\hat{\lambda}} e^{-t^2} dt$$

où r est la distance entre les deux électrons interagissant, e la charge de l'électron, m sa masse, λ la longueur de De Broglie, h la constante de Planck, $k_{\rm B}$ celle de Boltzman et T la température. Nous n'utilisons pas ce potentiel, mais un potentiel approché, analytiquement. plus simple :

$$u(r) = \frac{e^2}{r} (1 - e^{-\sqrt{\pi r/\lambda}}).$$

La figure 1 compare ces deux potentiels. Celui que nous utilisons permet l'étude qualitative des corrections de diffraction. Il traduit simplement le fait que, si l'on tient compte des effets de diffraction, il n'y a pas de divergence. Nous l'avons déjà utilisé pour le calcul de la fonction de corrélation de paire [5].



FIG. 1. - Comparaison du potentiel de Kelbg :

$$\left[\frac{1}{x}\left(1-\mathrm{e}^{-x^{2}}\right)+\sqrt{\pi}\left(1-\varphi(x)\right)\right]$$

avec : $\frac{1}{x} (1 - e^{-\sqrt{\pi x}})$. $x = r/\lambda$. Les énergies sont mesurées avec $\frac{e^2}{\lambda}$ comme unité.

Cette approximation peut se justifier dans le cas où la distance moyenne entre les particules, d, est grande

devant \hat{x} (c'est aussi la condition pour que les effets de symétrie soient négligeables). Nous supposons également petit le paramètre plasma $\Lambda = e^2 \beta / \lambda_D$, λ_D étant la longueur de Debye ($\beta = 1/k_B T$ et $\lambda_{\rm D} = (4 \pi e^2 \beta \rho)^{-1/2}$ où ρ est la densité) car nous utilisons la méthode des graphes de Mayer [6] et Salpeter [7], ce qui correspond à un développement par rapport à Λ . Dans nos calculs λ/λ_D apparaît comme un paramètre de développement qui mesure les effets de diffraction. Nous faisons un double développement par rapport à Λ et à $\hat{\lambda}/\lambda_{\rm D}$. Nos calculs concernent donc la région hachurée de la figure 2. Sur cette figure dans la région en dessous de la droite : $\hat{x} = e^2 \beta$, on a : $\Lambda > \lambda/\lambda_{\rm p}$, c'est-à-dire que les effets dus à la diffraction sont petits par rapport à ceux dus au plasma, alors que dans la région au-dessus de $\lambda = e^2 \beta$ c'est le contraire. A titre d'exemple : $T = 10^7 \text{ K}$ et $\rho = 10^{26}$ cm⁻³ (région intéressante pour la fusion par confinement inertiel) correspond à $\Lambda = 0.025$ et $\lambda/\lambda_{\rm D} = 0.14$, ce qui montre l'importance des effets de diffraction. De plus, pour cette température et cette densité, $\lambda/d = 0.70$; les effets de symétrie (dont nous ne tenons aucun compte dans cet article) ne sont donc pas négligeables; de plus, d est petit devant a_0 , rayon de Bohr. Une étude réaliste de cette région devrait donc être faite à l'aide d'un modèle à plusieurs composantes tenant compte à la fois des effets de diffraction et de symétrie. Il s'agit donc d'une première

approche qui donne une idée de l'importance des effets de diffraction.



FIG. 2. — Plan température (T) — densité (ρ) . T est en K et en cm⁻³.

On peut calculer les fonctions thermodynamiques à partir de la fonction de corrélation de paire. Ici nous les calculons directement. Abe [8] et [9] introduit l'énergie libre, F, comme une somme de graphes nodaux :

 $\beta(F-F_0)=-VS$

$$S = -\rho^{2} \frac{\beta}{2} \int d^{3}r \left(u(r) - \frac{e^{2}}{r} \right) + S_{ring} + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\rho^{k}}{k ! V} \int \cdots \int d^{3}r_{1} \cdots d^{3}r_{k} \sum_{1 \le i < j \le k}^{(k)} \frac{\left[-\beta V_{s}(r_{ij}) \right]^{n_{ij}}}{n_{ij} !}.$$
 (2)

 F_0 est l'énergie libre du gaz parfait. V est le volume. $\sum_{i=1}^{k}$ représente la somme de tous les graphes nodaux ayant k points nodaux, n_{ij} est le nombre de chaînes de Debye reliant les points *i* et *j* pour un graphe particulier V_s est le potentiel écranté (potentiel effectif au premier ordre en Λ , correspondant à une chaîne de Debye). Dans le cas du pseudo-potentiel que nous utilisons [5]:

$$V_{\rm s}(r) = \frac{e^2}{r \sqrt{1 - \frac{4 \, \hat{\lambda}^2}{\pi \lambda_{\rm D}^2}}} \left[e^{-\alpha_1 r} - e^{-\alpha_2 r} \right]$$
(3)

avec :

$$\alpha_{1} = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{\pi}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{4\lambda^{2}}{\pi\lambda_{D}^{2}}}\right)}, \qquad \alpha_{2} = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{\pi}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{4\lambda^{2}}{\pi\lambda_{D}^{2}}}\right)}.$$

Un graphe nodal ayant l chaînes de Debye et k points nodaux, à une contribution à l'énergie libre de l'ordre de Λ^n avec n = l - k + 1. La figure 3 représente tous ces graphes jusqu'au quatrième ordre. Dans l'équation (2) le terme S_{ring} est la contribution du graphe du premier ordre (graphe en anneau).

$$S_{\text{ring}} = \frac{1}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\rho \beta \tilde{u}(k) - \log\left(1 + \rho \beta \tilde{u}(k)\right) \right]$$
(4)

où $\tilde{u}(k)$ est la transformée de Fourier de u(r).

Au premier ordre en Λ , F s'écrit :

$$\beta F = \beta F_0 + V \rho^2 \frac{\beta}{2} \int d^3 r \left(u(r) - \frac{e^2}{r} \right) - \frac{V}{2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \times \left[\rho \beta \tilde{u}(k) - \log\left(1 + \rho \beta \tilde{u}(k)\right) \right].$$



FIG. 3. — Graphes pour le calcul de l'énergie libre. Premier ordre en Λ : graphe 1 (graphe en anneau). Deuxième ordre : graphe 2a. Troisième ordre : graphes 3a à 3d. Quatrième ordre : graphes 4a à 4q.

Nous avons calculé ces différentes contributions :

$$\beta F = \beta F_0 - \frac{N}{2\pi} \cdot \frac{\hat{\lambda}^2}{\lambda_D^2} - \frac{N\sqrt{\pi}}{2} \cdot \frac{\beta e^2}{\hat{\lambda}} + \frac{N\beta e^2}{3\sqrt{1 - \frac{4\hat{\lambda}^2}{\pi\lambda_D^2}}} \times \left[-2\alpha_1 + 2\alpha_2 + \frac{\alpha_1}{1 + \frac{\alpha_1\hat{\lambda}}{\sqrt{\pi}}} - \frac{\alpha_2}{1 + \frac{\alpha_2\hat{\lambda}}{\sqrt{\pi}}} \right]$$
(5)

où N est le nombre d'électrons. La limite classique ($\hbar \rightarrow 0$) correspond au cas où λ/λ_D tend vers zéro. On peut faire un développement par rapport à λ/λ_D .

$$\beta F = \beta F_0 - \frac{N}{2\pi} \cdot \frac{\dot{\lambda}^2}{\lambda_D^2} - \frac{N\Lambda}{3} \left[1 - \frac{9}{8\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\dot{\lambda}}{\lambda_D} - \frac{3}{2\pi} \left(\frac{\dot{\lambda}}{\lambda_D} \right)^2 + \cdots \right].$$
(6)

On retrouve le résultat connu dans le cas purement classique :

$$\lim_{\substack{\underline{x}\\\underline{\lambda}_{\mathrm{D}}}\to 0} (\beta F) = \beta F_0 - \frac{NA}{3}.$$

On peut, de même, calculer la contribution à l'énergie libre des différents graphes. Soit F_2 la contribution du graphe du deuxième ordre :

$$\beta F_2 = \frac{1}{2.3!} N \rho \beta^3 \int \mathrm{d}^3 r [V_{\mathrm{s}}(r)]^3$$

d'où :

$$\beta F_2 = \frac{N\Lambda^2}{12} \frac{1}{\left(1 - \frac{4\,\lambda^2}{\pi\lambda_D^2}\right)^{3/2}} \log \frac{\alpha_2(2\,\alpha_1 + \alpha_2)^3}{\alpha_1(\alpha_1 + 2\,\alpha_2)^3} \tag{7}$$

$$\beta F_2 = \frac{N\Lambda^2}{12} \left[-3 \log 2 + \frac{9}{2\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\hbar}{\lambda_D} - \frac{7}{\pi} \left(\frac{\hbar}{\lambda_D}\right)^2 + \dots + \log\left(\frac{\lambda_D\sqrt{\pi}}{\hbar}\right) \left[1 - \frac{6\hbar^2}{\pi\lambda_D^2} + \dots\right] \right]$$

$$\lim_{\substack{\frac{\pi}{\lambda_D} \to 0}} \beta F_2 = \frac{N\Lambda^2}{12} \log\left(\frac{\sqrt{\pi}\lambda_D}{8\hbar}\right).$$
(8)

Il y a un terme en Log $\frac{\Lambda_D}{\lambda}$ (c'est-à-dire en Log \hbar) qui n'a pas de limite classique. Le résultat est totalement différent de celui du cas classique. Il n'y a pas de terme en $\Lambda^2 \log \Lambda$. Dans le cas classique, le terme en $\Lambda^2 \log \Lambda$ ne correspond pas exactement au même graphe (qui diverge), mais à la somme de tous les graphes 2a, 3a, 4a, ... de la figure 3 qui est ensuite développée en puissance de Λ [8]. Du fait que nous utilisons un pseudo-potentiel fini à l'origine, tous les graphes convergent et ont chacun un ordre défini en Λ . Donc, dans le développement par rapport à Λ , il n'apparaît pas de terme non analytique. Ce résultat est également différent de ce que nous avons obtenu pour la fonction de corrélation de paire où, au deuxième ordre en Λ , nous retrouvions le résultat classique dans la limite λ/λ_D tendant vers zéro [5].

 $\Lambda^2 \operatorname{Log}(\lambda_D/\hat{\lambda})$ est plus petit que $\frac{(e^2 \beta^2)}{\lambda_D \hat{\lambda}}$. Pour que le développement perturbatif soit valable, il faudrait se restreindre au cas où : $e^2 \beta < \hat{\lambda}$ (dans ce cas, on a la relation : $e^2 \beta < \hat{\lambda} < \lambda_D$).

En ce qui concerne les ordres supérieurs, nous avons calculé la contribution des graphes 3a, 4a de la figure 3, ainsi que des graphes équivalents aux ordres suivants. Nous ignorons si ces graphes sont ceux qui ont la plus grande contribution à F, ce sont ceux que nous avons réussi à évaluer. Pour le troisième ordre :

$$\beta F_{3a} = -\frac{N\rho\beta^4}{2.4!} \int d^3r [V_s(r)]^4$$

$$\beta F_{3a} = -\frac{N\Lambda^3 \lambda_D}{48\left(1 - \frac{4\lambda^2}{\pi\lambda_D^2}\right)^2} [4\alpha_1 \log(4\alpha_1) - 4(3\alpha_1 + \alpha_2) \log(3\alpha_1 + \alpha_2) + 4\alpha_2 \log(4\alpha_2)] + 6(2\alpha_1 + 2\alpha_2) \log(2\alpha_1 + 2\alpha_2) - 4(\alpha_1 + 3\alpha_2) \log(\alpha_1 + 3\alpha_2) + 4\alpha_2 \log(4\alpha_2)] . \tag{9}$$

Par un raisonnement par récurrence nous montrons que :

$$\beta F_{na} = (-1)^{n} \frac{NA^{n} \lambda_{D}^{n-2}}{2(n-2)! (n+1)! \left(1 - \frac{4\lambda^{2}}{\pi\lambda_{D}^{2}}\right)^{\frac{n+1}{2}}} \times \\ \times \sum_{p=0}^{n+1} C_{p}^{n+1} (-1)^{p} \left(p\alpha_{1} + (n+1-p)\alpha_{2}\right)^{n-2} \operatorname{Log}\left(p\alpha_{1} + (n+1-p)\alpha_{2}\right) \quad (n \ge 2) \quad (10)$$

(résultat déjà obtenu pour n = 2 et n = 3).

En développant par rapport à λ/λ_p , on obtient un résultat de la forme :

$$\beta F_{na} = (-1)^n N \Lambda^n \left[\left(\frac{\lambda_D}{\hat{\lambda}} \right)^{n-2} \left(a_0 + \frac{a_1 \hat{\lambda}}{\lambda_D} + a_2 \left(\frac{\hat{\lambda}}{\lambda_D} \right)^2 + \dots + a_p \left(\frac{\hat{\lambda}}{\lambda_D} \right)^p + \dots \right) + \\ + \log \frac{\lambda_D}{\hat{\lambda}} \left(b_0 + b_1 \left(\frac{\hat{\lambda}}{\lambda_D} \right)^2 + b_2 \left(\frac{\hat{\lambda}}{\lambda_D} \right)^4 + \dots + b_q \left(\frac{\hat{\lambda}}{\lambda_D} \right)^{2q} + \dots \right) \right].$$

Ce qui confirme la forme prédite par DeWitt [10]. Donc à partir de l'ordre 2, tous les graphes que nous avons calculés n'ont pas de limite classique ; F_{na} est de l'ordre de

$$\Lambda^2 \left(\frac{e^2 \beta}{\lambda}\right)^{n-2} \qquad (\text{pour}: n > 2),$$

donc reste petit lorsque $e^2 \beta < \hat{\lambda} < \lambda_D$.

De même pour l'énergie, E, et la pression, P, nous avons fait le calcul exact jusqu'à l'ordre Λ^2 et pour les ordres supérieurs nous avons calculé les contributions E_{na} et P_{na} correspondant à F_{na} . On obtient des résultats tout à fait analogues.

En utilisant la relation :

$$E = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F) \, .$$

Au premier ordre en Λ :

$$E = \frac{3}{2} N k_{\rm B} T - N k_{\rm B} T \left(\frac{\dot{\chi}^2}{\pi \lambda_{\rm D}^2}\right) - \frac{N k_{\rm B} T A}{2 \lambda_{\rm D} \sqrt{1 - \frac{4 \dot{\chi}^2}{\pi \lambda_{\rm D}^2}}} \times \left[\frac{1}{\alpha_1} - \frac{1}{\alpha_2} - \frac{1}{\alpha_1 + \frac{\sqrt{\pi}}{\dot{\chi}}} + \frac{1}{\alpha_2 + \frac{\sqrt{\pi}}{\dot{\chi}}} - \frac{\sqrt{\pi}}{2 \dot{\chi} \left(\alpha_1 + \frac{\sqrt{\pi}}{\dot{\chi}}\right)^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{2 \dot{\chi} \left(\alpha_2 + \frac{\sqrt{\pi}}{\dot{\chi}}\right)^2}\right] (11)$$

et à la limite classique :

$$E = \frac{3}{2} N k_{\rm B} T - N k_{\rm B} T \left(\frac{\dot{\lambda}^2}{\pi \lambda_{\rm D}^2}\right) - \frac{N k_{\rm B} T A}{2} \left(1 - \frac{15 \,\dot{\lambda}}{8 \sqrt{\pi} \lambda_{\rm D}} - \frac{7 \,\dot{\lambda}^2}{2 \,\pi \lambda_{\rm D}^2} \cdots\right)$$

$$E_{na} = F_{na} \frac{(n+1)}{\left(1 - \frac{4 \,\dot{\lambda}^2}{\pi \lambda_{\rm D}^2}\right)} + \frac{(-1)^n A^n N \lambda_{\rm D}^{n-2} k_{\rm B} T}{4(n-2) ! (n+1) ! \left(1 - \frac{4 \,\dot{\lambda}^2}{\pi \lambda_{\rm D}^2}\right)^{\frac{n+2}{2}}} \times \frac{1}{4(n-2) ! (n+1) ! \left(1 - \frac{4 \,\dot{\lambda}^2}{\pi \lambda_{\rm D}^2}\right)^{\frac{n+2}{2}}}{\left(1 - \frac{4 \,\dot{\lambda}^2}{\pi \lambda_{\rm D}^2}\right)^{n-3} (p\alpha_1 - (n+1-p)\alpha_2)} \times \left[(n-2) \log (p\alpha_1 + (n+1-p)\alpha_2) + 1\right].$$
(12)

En particulier, au deuxième ordre :

$$E_{2} = \frac{Nk_{\rm B}T\Lambda^{2}}{4\left(1 - \frac{4\,\lambda^{2}}{\pi\lambda_{\rm D}^{2}}\right)^{5/2}} \log \frac{\alpha_{2}(2\,\alpha_{1} + \alpha_{2})^{3}}{\alpha_{1}(\alpha_{1} + 2\,\alpha_{2})^{3}} - \frac{Nk_{\rm B}T\Lambda^{2}}{6\left(1 - \frac{4\,\lambda^{2}}{\pi\lambda_{\rm D}^{2}}\right)^{2}} \left[\frac{(\alpha_{1} - \alpha_{2})^{2}}{(\alpha_{1} + 2\,\alpha_{2})(2\,\alpha_{1} + \alpha_{2})}\right].$$
 (13)

C1-188

La pression :

$$P = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} (\beta F) = \frac{\rho}{\beta V} \frac{\partial}{\partial \rho} (\beta F) ,$$

est donnée au premier ordre en Λ par :

$$P = \rho k_{\rm B} T - \frac{\rho k_{\rm B} T}{2} \left(\frac{\dot{\lambda}^2}{\pi \lambda_{\rm D}^2} \right) - \frac{\rho k_{\rm B} T \Lambda}{6 \lambda_{\rm D} \sqrt{1 - \frac{4 \dot{\lambda}^2}{\pi \lambda_{\rm D}^2}}} \times \left(\frac{1}{\alpha_1} - \frac{1}{\alpha_2} - \frac{1}{\alpha_1 + \frac{\sqrt{\pi}}{\lambda}} + \frac{1}{\alpha_2 + \frac{\sqrt{\pi}}{\lambda}} - \frac{\sqrt{\pi}}{\lambda \left(\alpha_1 + \frac{\sqrt{\pi}}{\lambda}\right)^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{\lambda \left(\alpha_2 + \frac{\sqrt{\pi}}{\lambda}\right)^2} \right).$$
(14)

A la limite classique :

$$P = \rho k_{\rm B} T - \frac{\rho k_{\rm B} T}{6} \left(1 - \frac{9 \,\hat{\lambda}}{4 \sqrt{\pi} \lambda_{\rm D}} + \cdots \right)$$

$$P_{na} = \frac{F_{na}}{V} + \left(\frac{n+1}{2} \right) \frac{\left(\frac{4 \,\hat{\lambda}^2}{\pi \lambda_{\rm D}^2} \right)}{\left(1 - \frac{4 \,\hat{\lambda}^2}{\pi \lambda_{\rm D}^2} \right)} \frac{F_{na}}{V} + (-1)^n \frac{\rho A^n \,\lambda_{\rm D}^{n-3} \,\hat{\lambda} k_{\rm B} T}{4 \sqrt{\pi} (n-2) \,! \,(n+1) \,! \,\left(1 - \frac{4 \,\hat{\lambda}^2}{\pi \lambda_{\rm D}^2} \right)^{\frac{n+2}{2}}} \times \\ \times \sum_{p=0}^{n+1} C_p^{n+1} (-1)^p \left(p \alpha_1 + (n+1-p) \,\alpha_2 \right)^{n-3} \left(+ p \alpha_2 - (n+1-p) \,\alpha_1 \right) \\ \times \left[(n-2) \, \log \left(p \alpha_1 + (n+1-p) \,\alpha_2 \right) + 1 \right].$$
(15)

En particulier au second ordre :

$$P_{2} = \frac{\rho k_{\rm B} T \Lambda^{2} \left(1 + \frac{2 \tilde{\lambda}^{2}}{\pi \lambda_{\rm D}^{2}}\right)}{12 \left(1 - \frac{4 \tilde{\lambda}^{2}}{\pi \lambda_{\rm D}^{2}}\right)^{5/2}} \log \frac{\alpha_{2} (2 \alpha_{1} + \alpha_{2})^{3}}{\alpha_{1} (2 \alpha_{2} + \alpha_{1})^{3}} - \frac{N k_{\rm B} T \Lambda^{2}}{12 \left(1 - \frac{4 \tilde{\lambda}^{2}}{\pi \lambda_{\rm D}^{2}}\right)^{2}} \left[\frac{(\alpha_{1} - \alpha_{2})^{2}}{(\alpha_{1} + 2 \alpha_{2}) (2 \alpha_{1} + \alpha_{2})}\right].$$
(16)

On retrouve exactement les mêmes comportements que pour F. En particulier, il n'y a pas de limite classique à partir de l'ordre de Λ^2 .

Le potentiel de Kelbg (équation (1)) permet de retrouver exactement les résultats de DeWitt [10], du moins au premier ordre par rapport à Λ et à $\frac{\lambda}{\lambda_D}$. On peut écrire l'énergie potentielle :

$$U_{\rm pot} = V \rho^2 \frac{1}{2} \int d^3 r \frac{e^2}{r} (g(r) - 1) ,$$

où g(r) est la fonction de corrélation de paire.

Au premier ordre en Λ :

$$U_{\text{pot}} = -Nk_{\text{B}} T \Lambda \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} \lambda_{\text{D}} dk \frac{{}_{1}F_{1}\left(1, \frac{3}{2}; -\frac{\lambda^{2} k^{2}}{4}\right)}{k^{2} \lambda_{\text{D}} + {}_{1}F_{1}\left(1, \frac{3}{2}; -\frac{\lambda^{2} k^{2}}{4}\right)}$$
$$\left(\text{où} \frac{e^{2} 4 \pi}{k^{2}} {}_{1}F_{1}\left(1, \frac{3}{2}; -\frac{\lambda^{2} k^{2}}{4}\right) \right)$$

est la transformée de Fourier du potentiel de Kelbg [4]).

$$U_{\text{pot}} = -\frac{Nk_{\text{B}}T\Lambda}{2} \left(1 - \frac{\sqrt{\pi}}{4} \frac{\dot{\lambda}}{\lambda_{\text{D}}} + \cdots\right)$$

C1-189

ce qui permet de calculer l'énergie libre :

$$(F-F_0)=-\frac{N\Lambda}{3}\left(1-\frac{3\sqrt{\pi}}{16}\frac{\dot{\lambda}}{\lambda_{\rm D}}+\cdots\right)\,.$$

Pour calculer exactement les termes d'ordre supérieur par rapport à λ/λ_D , il faudrait connaître le pseudo-potentiel exact aux ordres supérieurs par rapport à l'interaction.

Bibliographie

- [1] DUNN, T. and BROYLES, A. A., Phys. Rev. 157 (1967) 156.
- [2] BARKER, A. A., J. Chem. Phys. 55 (1971) 1751.
- [3] POKRANT, M. A., BROYLES, A. A. and DUNN, T., Phys. Rev. A 10 (1974) 379.
- [4] KELBG, G., Ann. Phys. 12 (1963) 219; 12 (1964) 314; 20 (1967) 68.
- [5] DEUTSCH, C. and GOMBERT, M. M., J. Math. Phys. 17 (1976) 1077.
- [6] MAYER, J. E., J. Chem. Phys. 18 (1950) 1426.
 [7] SALPETER, E. E., Ann. Phys. 5 (1958) 183.
- [7] SALFEIER, E. E., Ann. Phys. 5 (1956) 163.
 [8] ABE, R., Prog. Theor. Phys. (Kyoto) 22 (1959) 213.
 [9] DE WITT, H., Phys. Rev. A 140 (1965) 466.
 [10] DE WITT, H., J. Math. Phys. 7 (1966) 616.

C1-190