



Workshop PNPS Astrophysique de Laboratoire



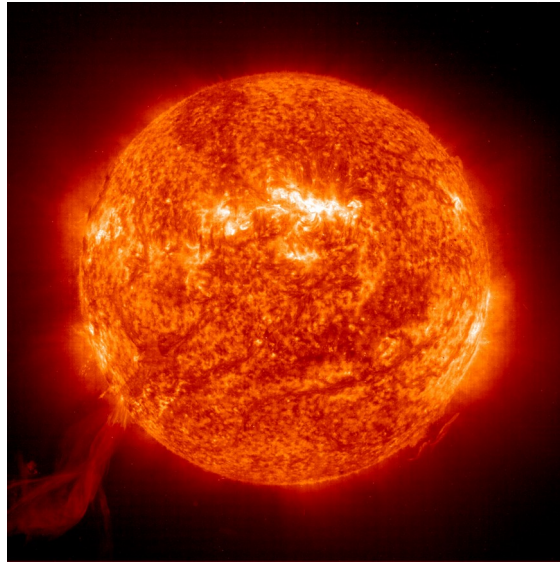
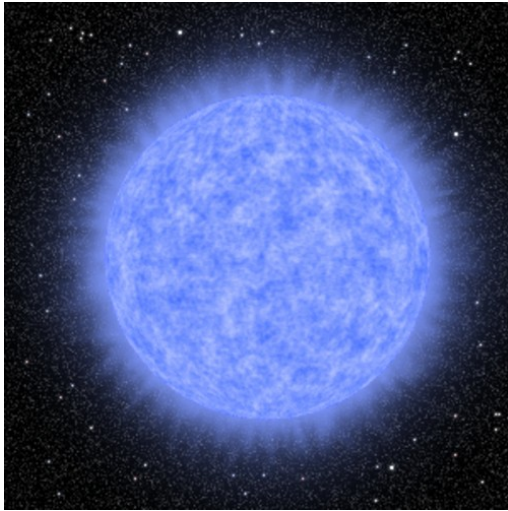
FOCUS ASTRO: **ÉQUATIONS D'ÉTAT**

François Soubiran

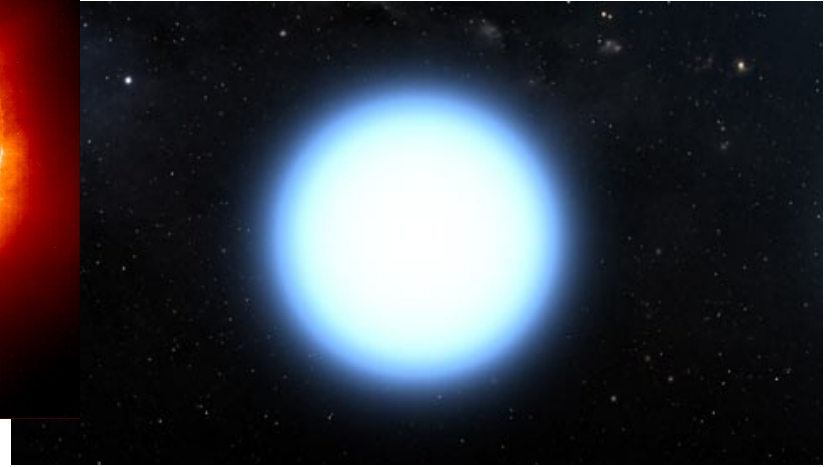
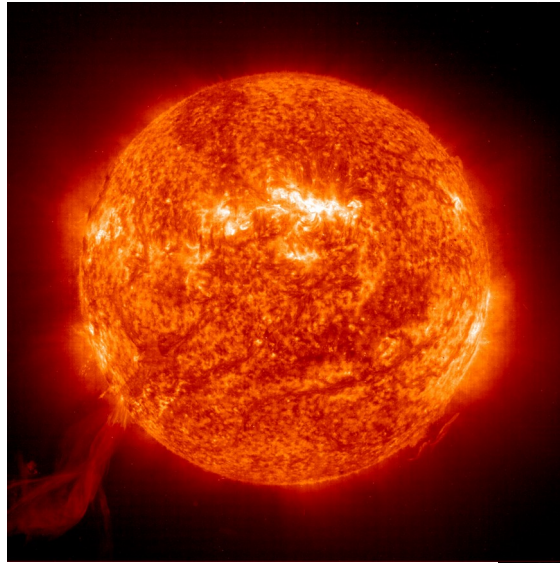
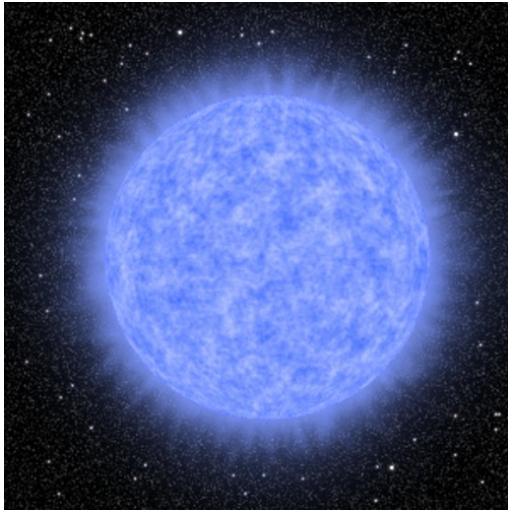
Earth and Planetary Science Department, UC Berkeley, U.S.A.

- 15 novembre 2016 -

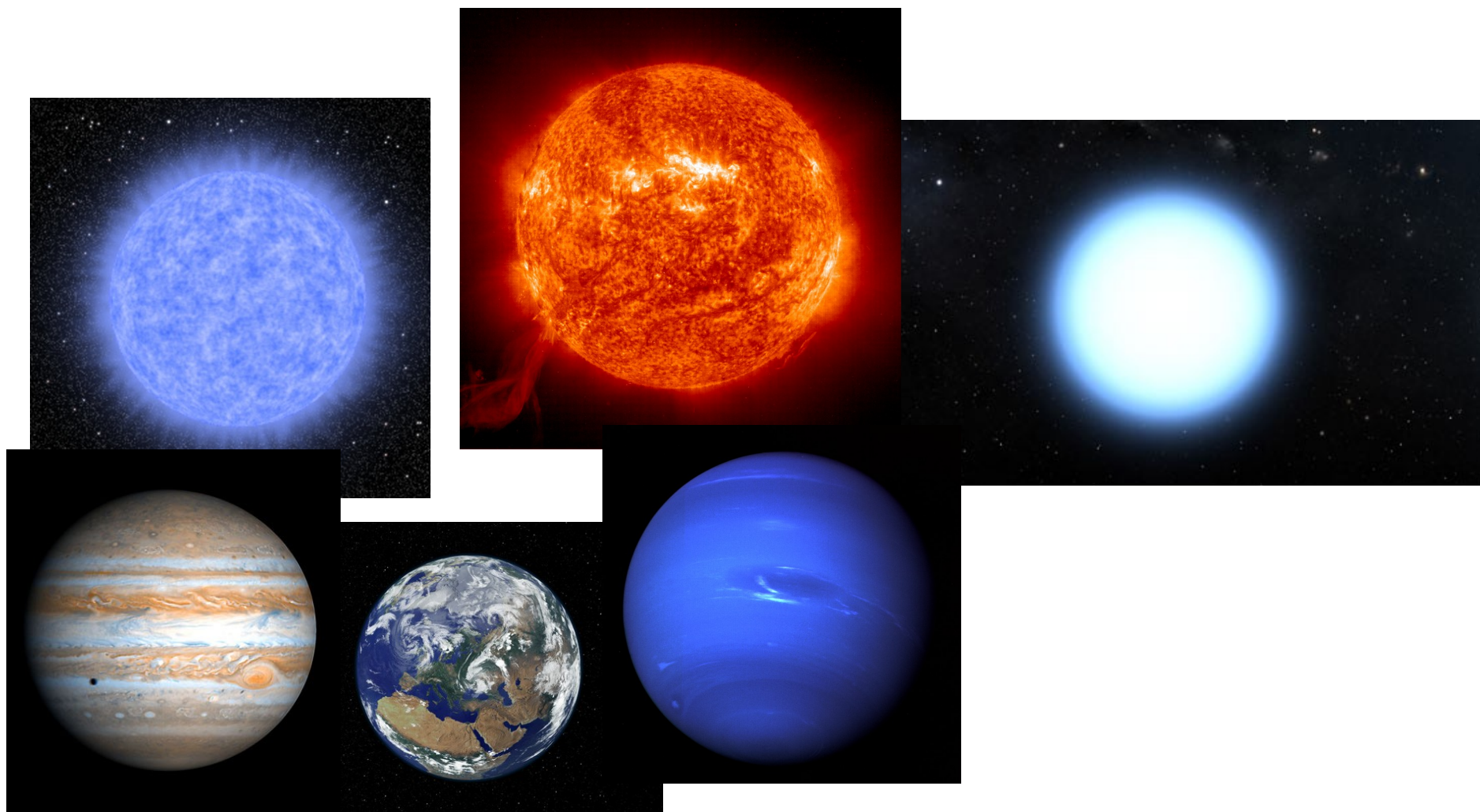
EOS EN ASTROPHYSIQUE



EOS EN ASTROPHYSIQUE



EOS EN ASTROPHYSIQUE



EOS EN ASTROPHYSIQUE



MODÈLES OBJETS COMPACTS

- Modèles 1-D:

$$\frac{dm}{dr} = 4\pi r^2 \rho$$

→ Equation de continuité

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{Gm\rho}{r^2}$$

→ Equilibre hydrostatique

MODÈLES OBJETS COMPACTS

- Modèles 1-D:

$$\frac{dm}{dr} = 4\pi r^2 \rho$$

→ Equation de continuité

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{Gm\rho}{r^2}$$

→ Equilibre hydrostatique

$$P(\rho, T) ?$$

→ Equation d'état

MODÈLES OBJETS COMPACTS

- Modèles 1-D:

$$\frac{dm}{dr} = 4\pi r^2 \rho$$

→ Equation de continuité

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{Gm\rho}{r^2}$$

→ Equilibre hydrostatique

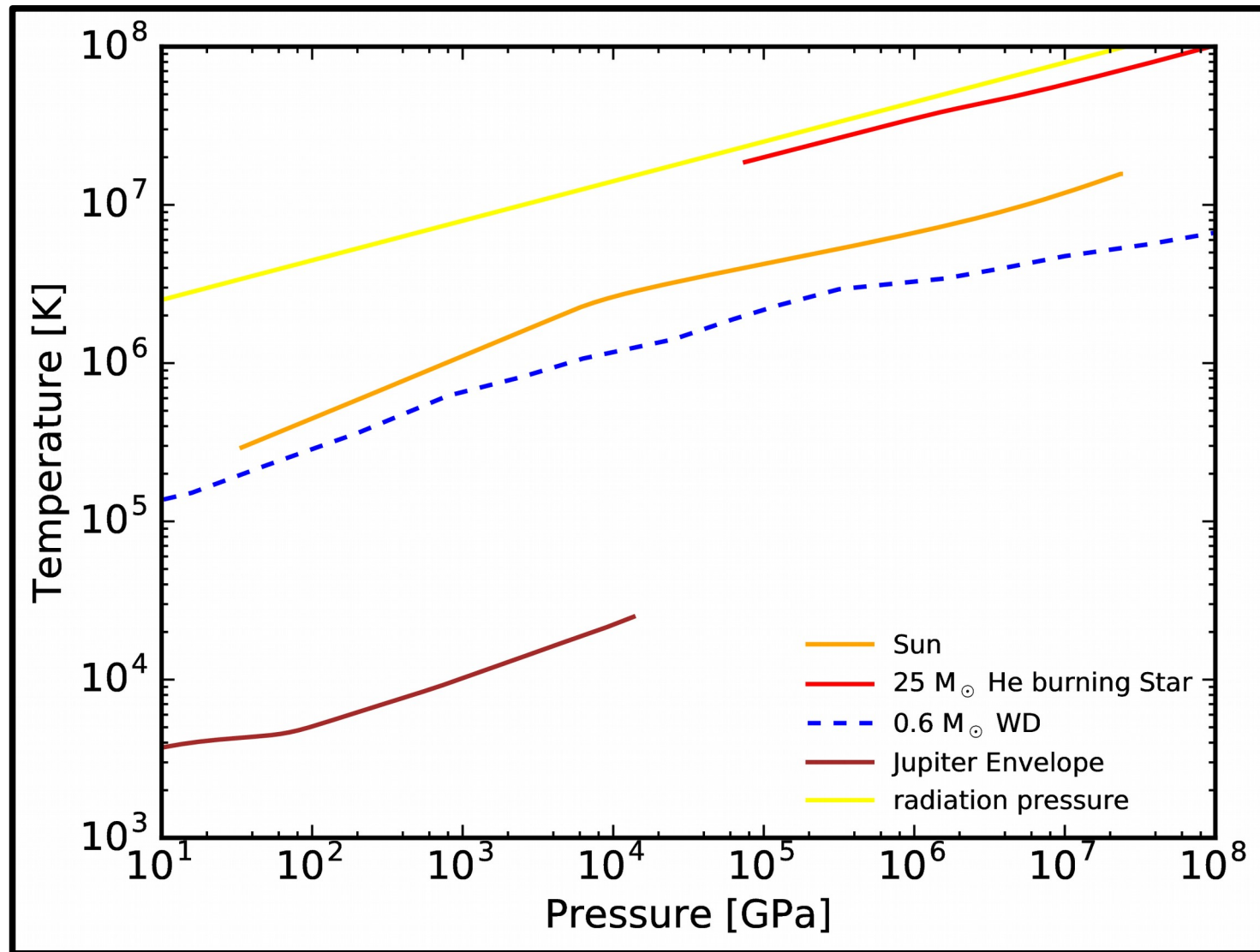
$$P(\rho, T) ?$$

→ Equation d'état

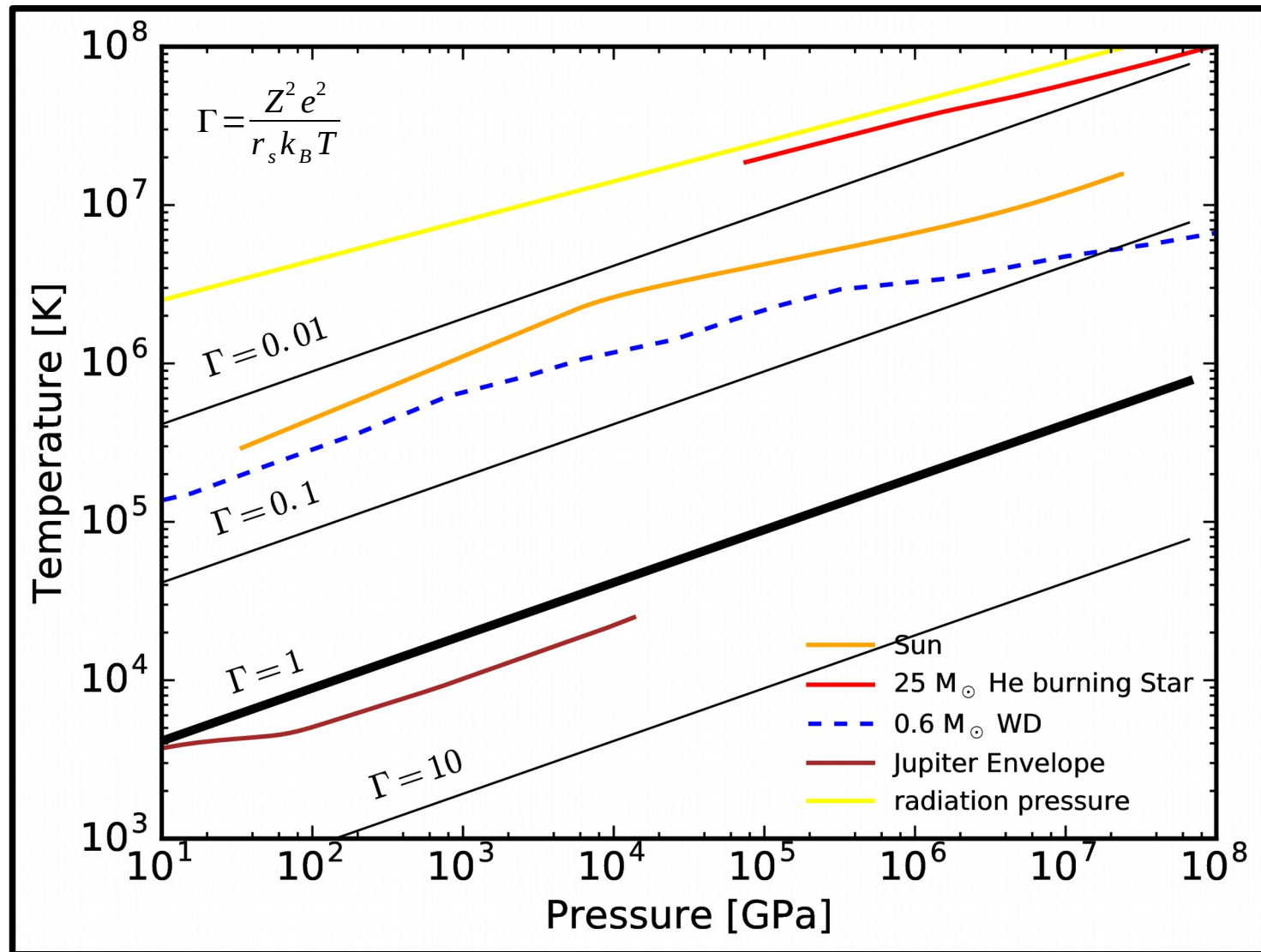
+ hypothèse sur la dynamique

→ *si convection : entropie = constante*

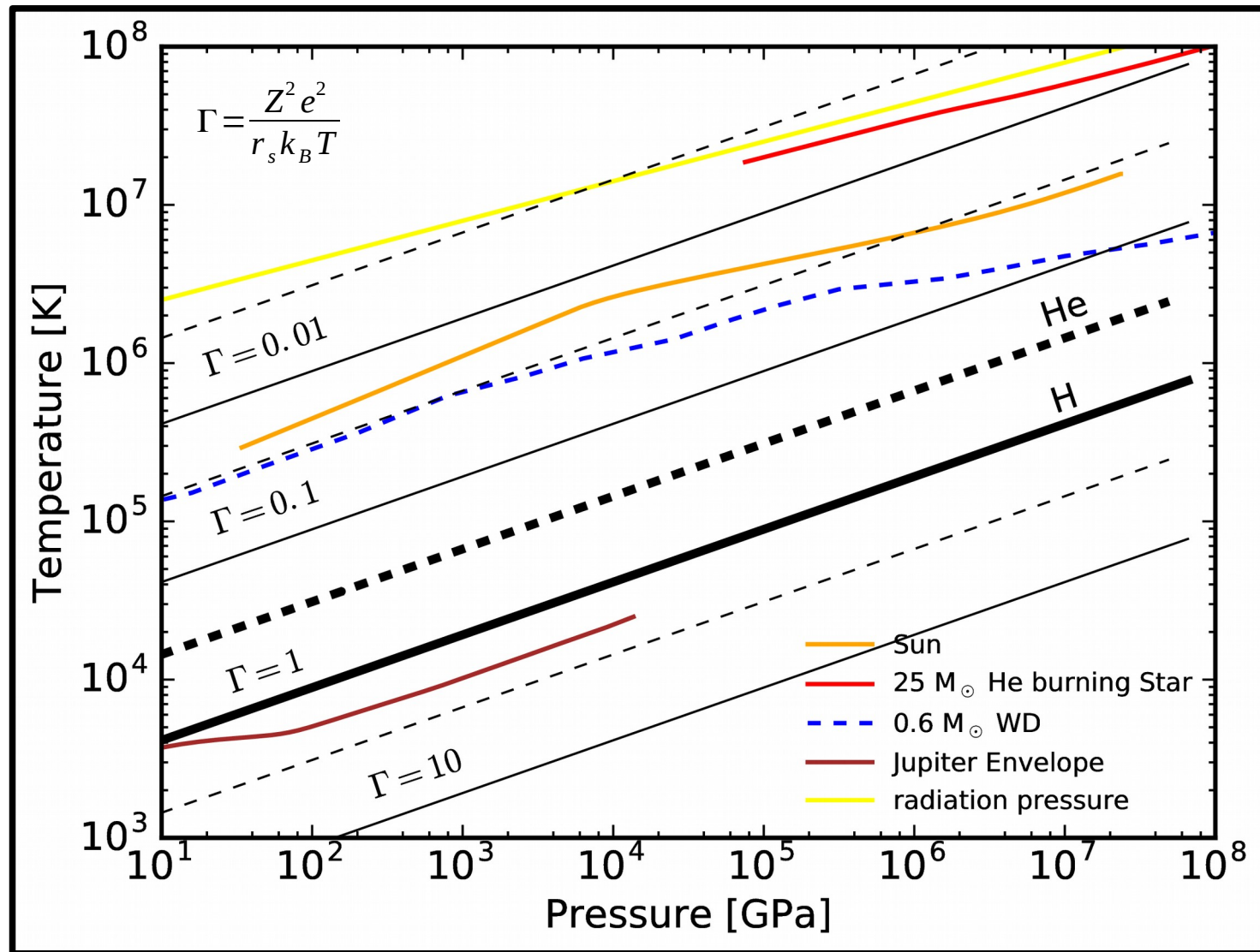
LES EOS DOIVENT COUVRIR UNE LARGE GAMME DE PARAMÈTRES



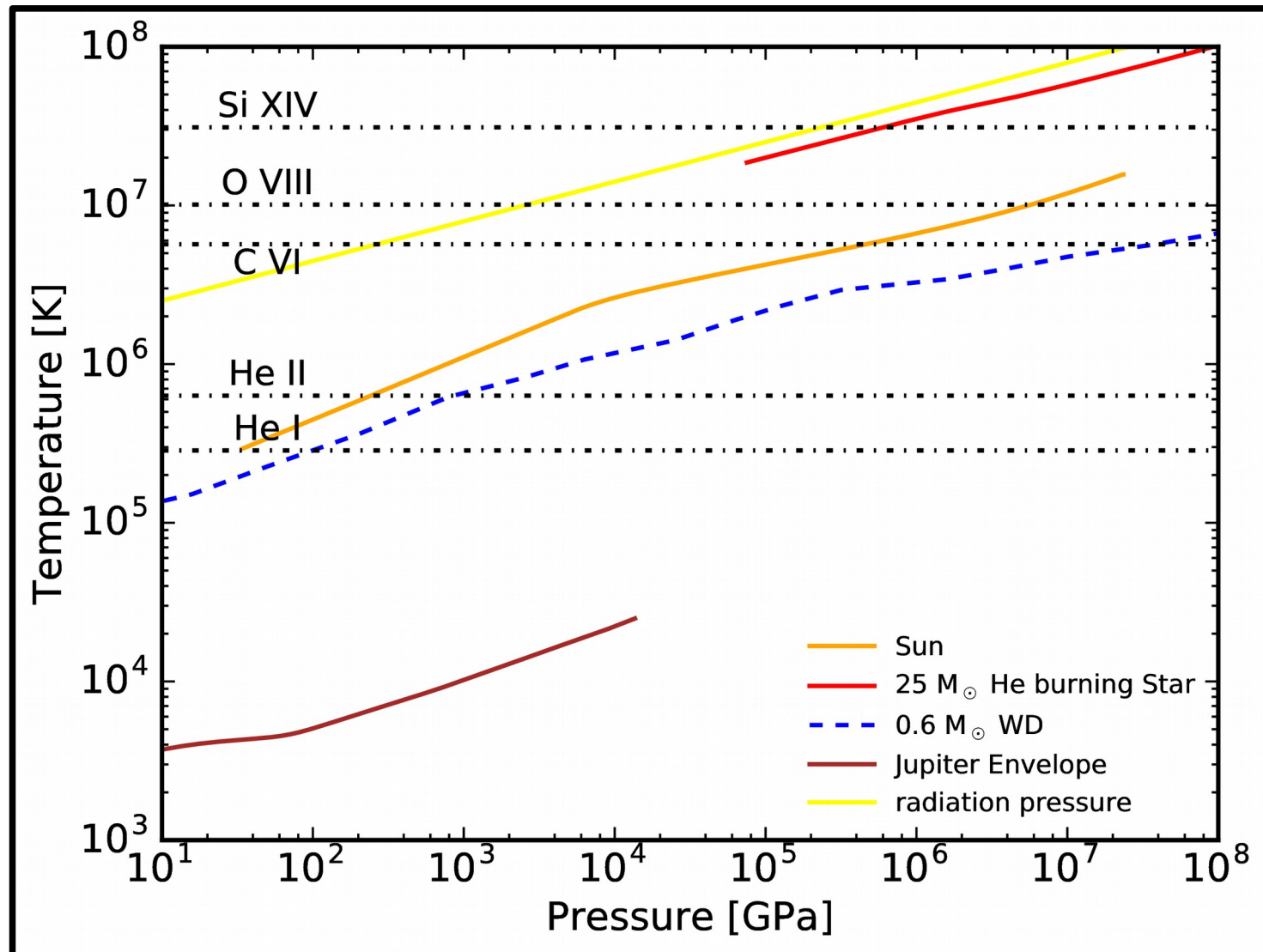
LES EOS DOIVENT COUVRIR UNE LARGE GAMME DE PARAMÈTRES



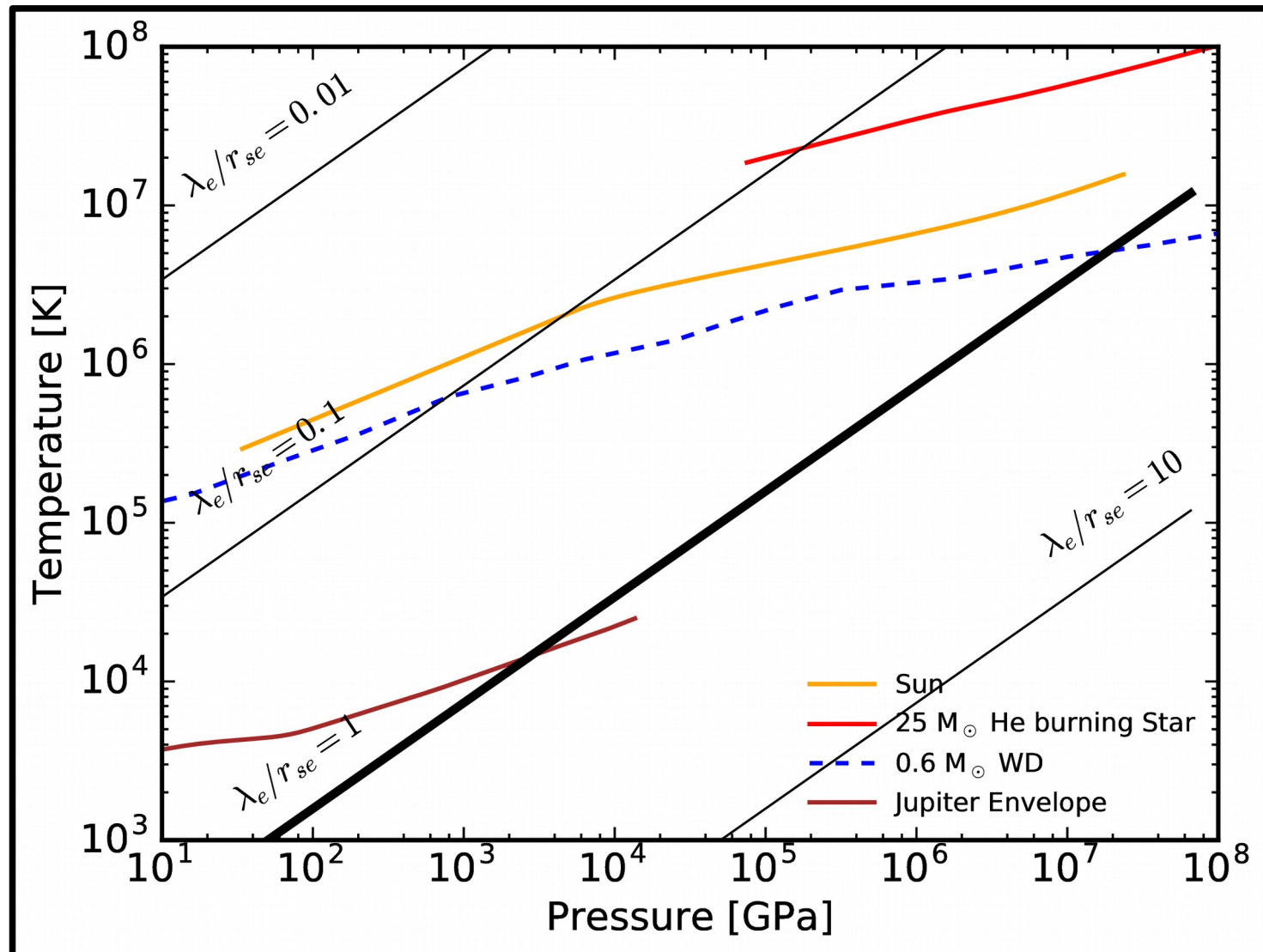
LES EOS DÉPENDENT DES ESPÈCES PRÉSENTES



LES EOS DÉPENDENT DES ESPÈCES PRÉSENTES



LES EOS DÉPENDENT DES EFFETS QUANTIQUES



MÉTHODES D'EXPLORATION

- Système macroscopique de particules + effets quantiques

⇒ **Problème à N corps quantique**

- Résolution d'un Hamiltonien du type:

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha}^{N_n} \frac{\mathbf{P}_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} + \sum_i^{N_e} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2} + \sum_{\alpha < \beta}^{N_n} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{|\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\beta}|} + \sum_{i < j}^{N_e} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{\alpha, i}^{N_n, N_e} \frac{Z_{\alpha}}{|\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{r}_i|}$$

+ moyennes statistiques sur l'espace des phases

→ **Méthodes numériques *ab initio***

MÉTHODES D'EXPLORATION

- Système macroscopique de particules + effets quantiques

⇒ **Problème à N corps quantique**

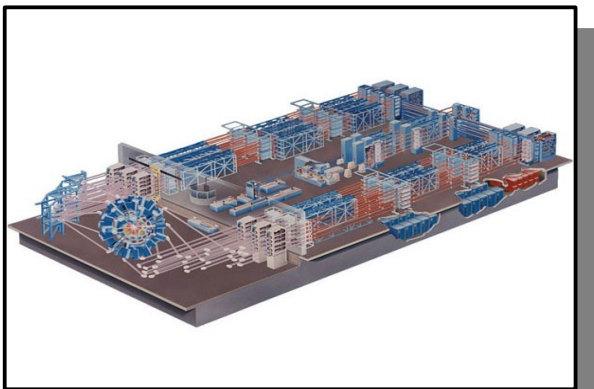
- Résolution d'un Hamiltonien du type:

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha}^{N_n} \frac{\mathbf{P}_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} + \sum_i^{N_e} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2} + \sum_{\alpha < \beta}^{N_n} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{|\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\beta}|} + \sum_{i < j}^{N_e} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{\alpha, i}^{N_n, N_e} \frac{Z_{\alpha}}{|\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{r}_i|}$$

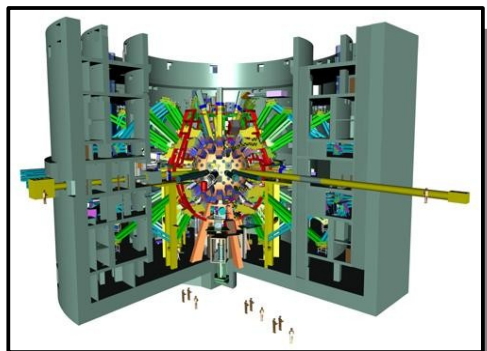
+ moyennes statistiques sur l'espace des phases

→ **Méthodes numériques *ab initio***

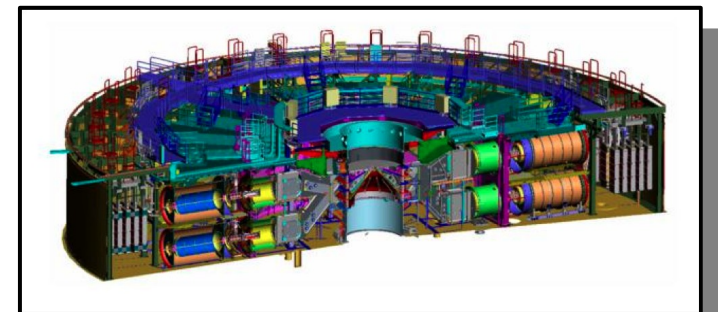
... et comparaison avec les **expériences** de choc hautes énergies



OMEGA laser Rochester



Mégajoule laser
Bordeaux



Z-machine
SANDIA

MÉTHODES NUMÉRIQUES

- Limites asymptotiques : Saha, Debye, OCP,...
- Développement de l'énergie libre : ACTEX,...
- Thomas-Fermi, Orbital free DFT,..
- Atomes moyens et ses extensions
- Ab initio complet (DFT, PIMC, QMC,...)

MÉTHODES NUMÉRIQUES

- Limites asymptotiques : Saha, Debye, OCP,...
- Développement de l'énergie libre : ACTEX,...
- Thomas-Fermi, Orbital free DFT,..
- Approche atomes moyens et ses extensions
- *Ab initio* complet (DFT, PIMC, QMC,...)

- Chaque méthode a son champ d'application et ses limites
- **Impossible de tout couvrir avec une seule approche**
- **Comment passer d'une gamme de paramètre à une autre ?**
 - *Développer des méthodes complémentaires et trouver des points de recouvrements*

PIMC ET DFT COMME MÉTHODES COMPLÉMENTAIRES

DFT :

- Noyaux classiques mais forces calculées en tenant compte des effets quantiques électroniques:

→ Résoudre le problème:

$$H\Psi = E\Psi$$

→ En utilisant la minimisation de Hohenberg et Kohn:

$$E_{TOT}[n] = T_s[n] + U_{e-e(cl)}[n] + V_{e-ion}[n] + E_{XC}[n]$$

$$E_{XC}[n] = (T - T_s) + (U - U_{e-e(cl)})$$

Système monoélectronique de Kohn-Sham:

$$H\psi_i = \left[\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{eff}(r) \right] \psi_i = \epsilon_i(r)$$

$$V_{eff} = V_{e-ion} + V_{e-e(cl)} + V_{XC}$$

PIMC ET DFT COMME MÉTHODES COMPLÉMENTAIRES

DFT :

- Noyaux classiques mais forces calculées en tenant compte des effets quantiques électroniques:

→ Résoudre le problème:

$$H \Psi = E \Psi$$

→ En utilisant la minimisation de Hohenberg et Kohn:

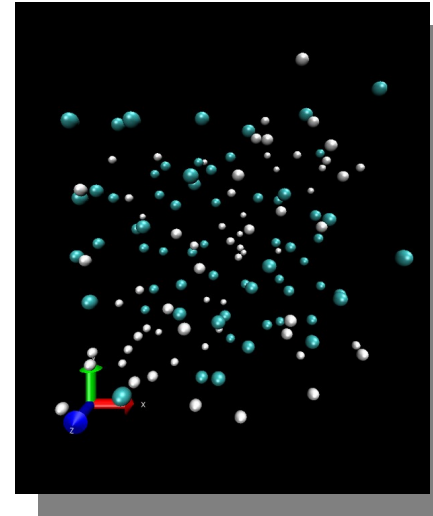
$$E_{TOT}[n] = T_s[n] + U_{e-e(cl)}[n] + V_{e-ion}[n] + E_{XC}[n]$$

$$E_{XC}[n] = (T - T_s) + (U - U_{e-e(cl)})$$

Système monoélectronique de Kohn-Sham:

$$H \psi_i = \left[\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{eff}(r) \right] \psi_i = \epsilon_i(r)$$

$$V_{eff} = V_{e-ion} + V_{e-e(cl)} + V_{XC}$$



PIMC ET DFT COMME MÉTHODES COMPLÉMENTAIRES

DFT :

- Noyaux classiques mais forces calculées en tenant compte des effets quantiques électroniques:

→ Résoudre le problème:

$$H\Psi = E\Psi$$

→ En utilisant la minimisation de Hohenberg et Kohn:

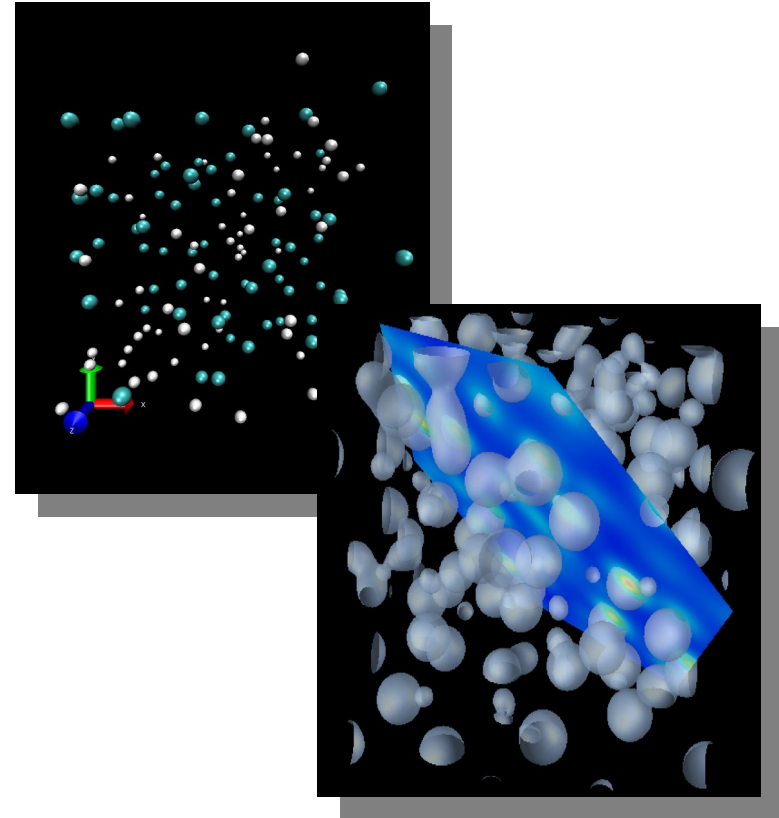
$$E_{TOT}[n] = T_s[n] + U_{e-e(cl)}[n] + V_{e-ion}[n] + E_{XC}[n]$$

$$E_{XC}[n] = (T - T_s) + (U - U_{e-e(cl)})$$

Système monoélectronique de Kohn-Sham:

$$H\psi_i = \left[\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{eff}(r) \right] \psi_i = \epsilon_i(r)$$

$$V_{eff} = V_{e-ion} + V_{e-e(cl)} + V_{XC}$$



PIMC ET DFT COMME MÉTHODES COMPLÉMENTAIRES

DFT :

- Noyaux classiques mais forces calculées en tenant compte des effets quantiques électroniques:

→ Résoudre le problème:

$$H\Psi = E\Psi$$

→ En utilisant la minimisation de Hohenberg et Kohn:

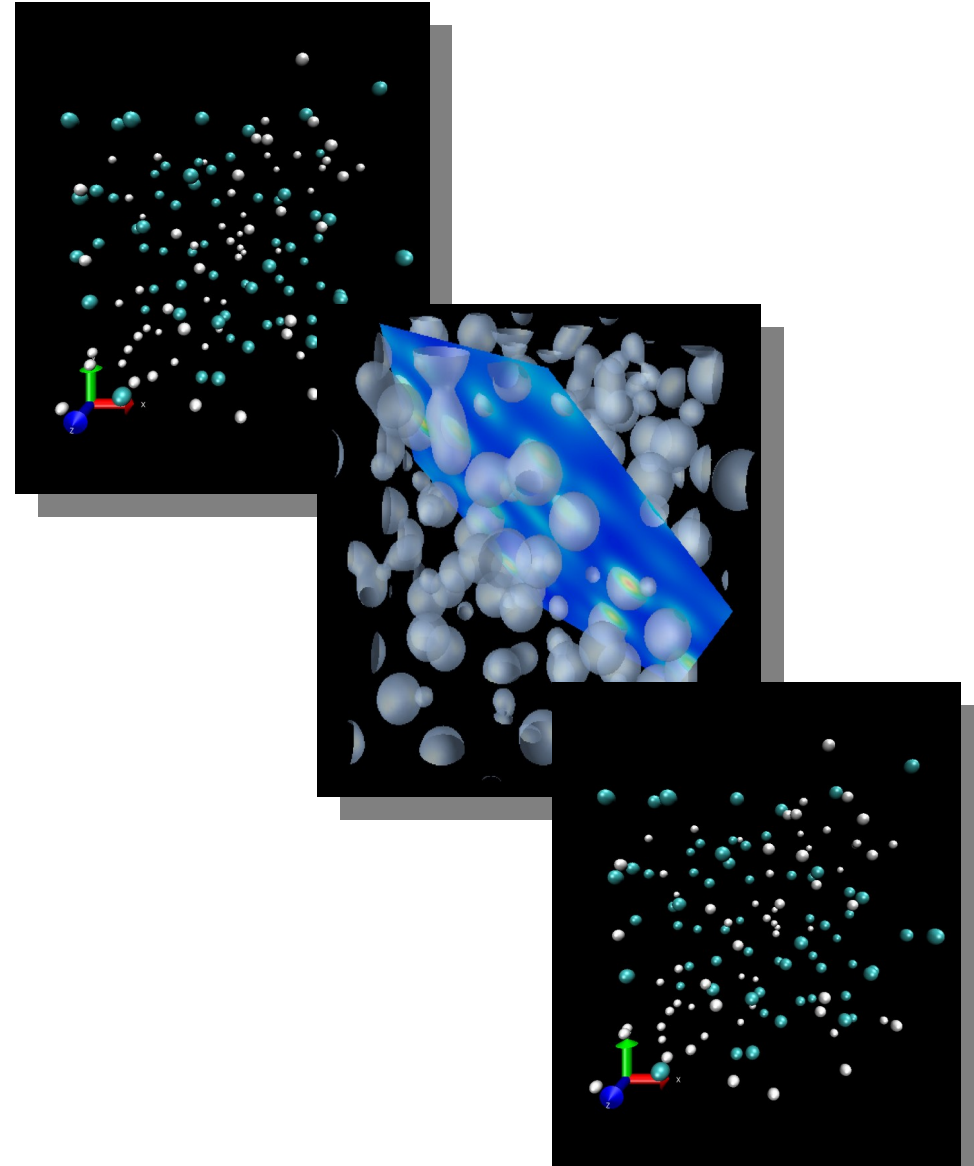
$$E_{TOT}[n] = T_s[n] + U_{e-e(cl)}[n] + V_{e-ion}[n] + E_{XC}[n]$$

$$E_{XC}[n] = (T - T_s) + (U - U_{e-e(cl)})$$

Système monoélectronique de Kohn-Sham:

$$H\psi_i = \left[\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{eff}(r) \right] \psi_i = \epsilon_i(r)$$

$$V_{eff} = V_{e-ion} + V_{e-e(cl)} + V_{XC}$$



PIMC ET DFT COMME MÉTHODES COMPLÉMENTAIRES

PIMC :

- Noyaux classiques détermination de la matrice de densité quantique par intégrale de chemin:

$$\rho_F(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \beta) = \frac{1}{N!} \sum_{\wp} (-1)^{\wp} \int_{\mathbf{R} \rightarrow \wp \mathbf{R}, \rho_T} e^{-S[\mathbf{R}_t]} d\mathbf{R}_t$$

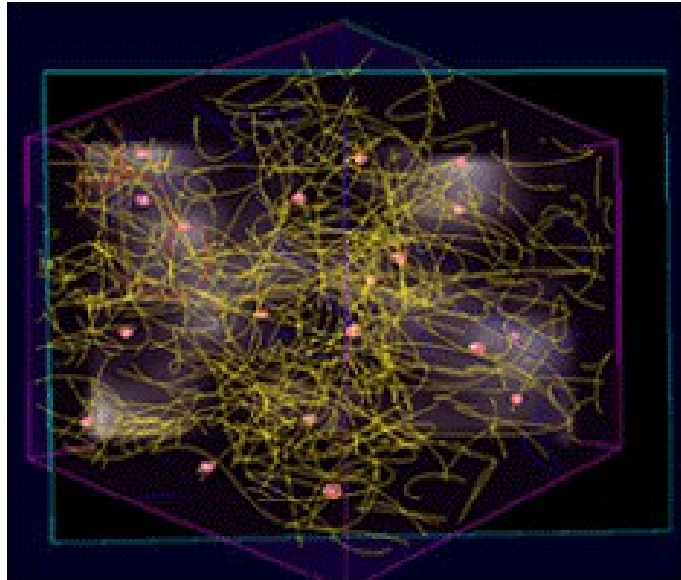
→ Fonction de partition :

$$Z = \text{Tr}(\rho)$$

→ Moyenne d'observable :

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}(\hat{O} \rho) / Z$$

PIMC ET DFT COMME MÉTHODES COMPLÉMENTAIRES



PIMC :

- Noyaux classiques détermination de la matrice de densité quantique par intégrale de chemin:

$$\rho_F(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \beta) = \frac{1}{N!} \sum_{\wp} (-1)^{\wp} \int_{\mathbf{R} \rightarrow \wp \mathbf{R}, \rho_T} e^{-S[\mathbf{R}_t]} d\mathbf{R}_t$$

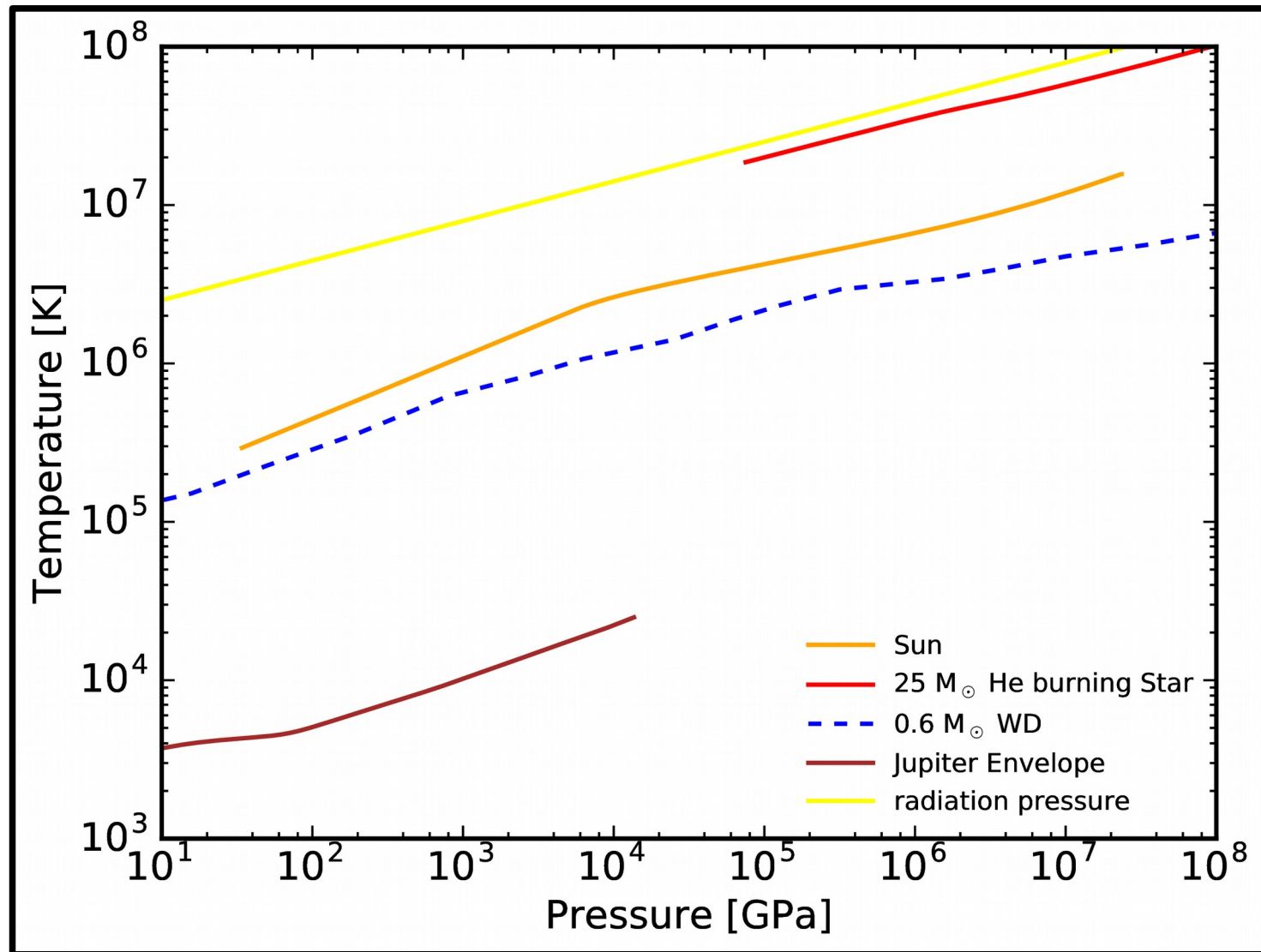
- Fonction de partition :

$$Z = \text{Tr}(\rho)$$

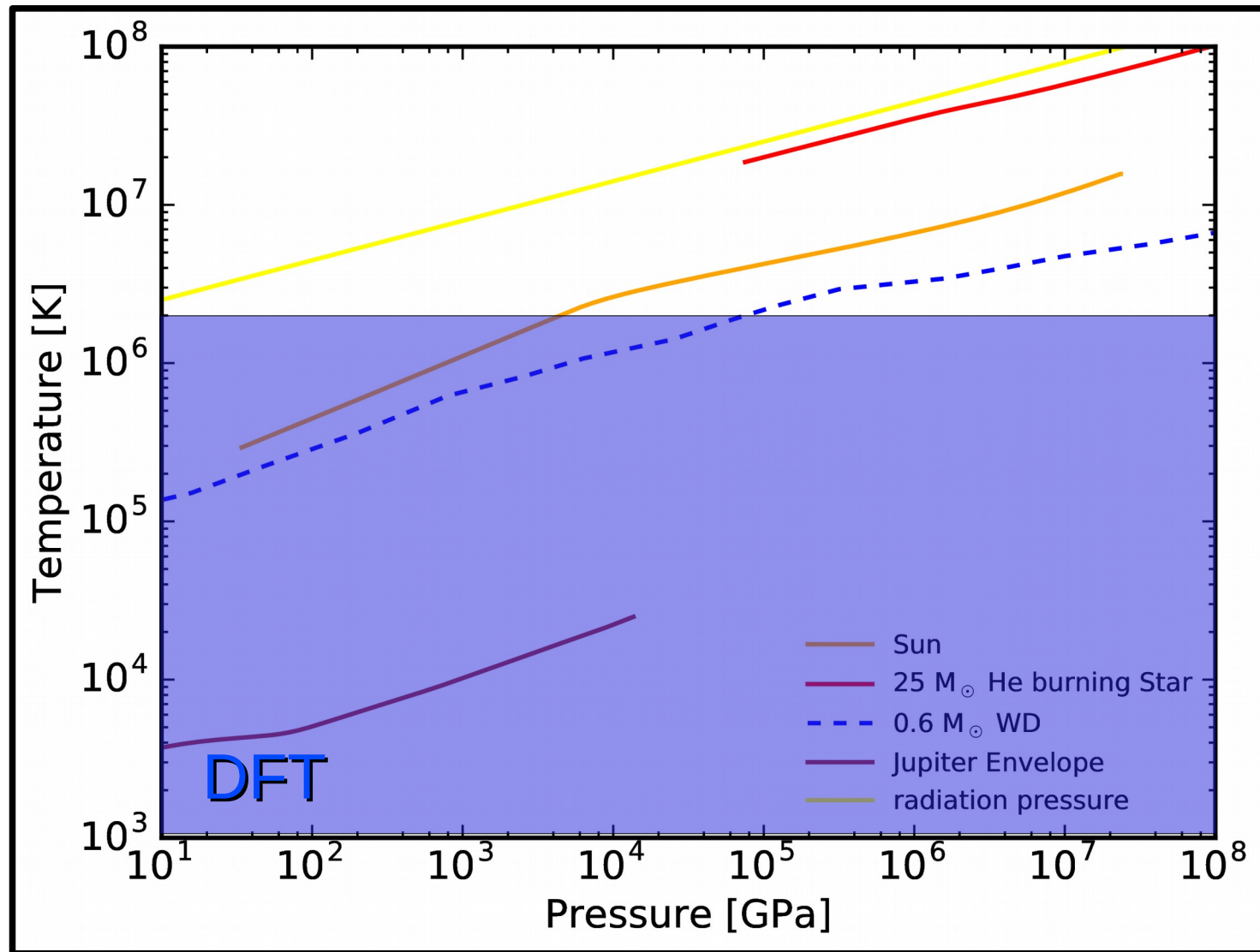
- Moyenne d'observable :

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}(\hat{O}\rho) / Z$$

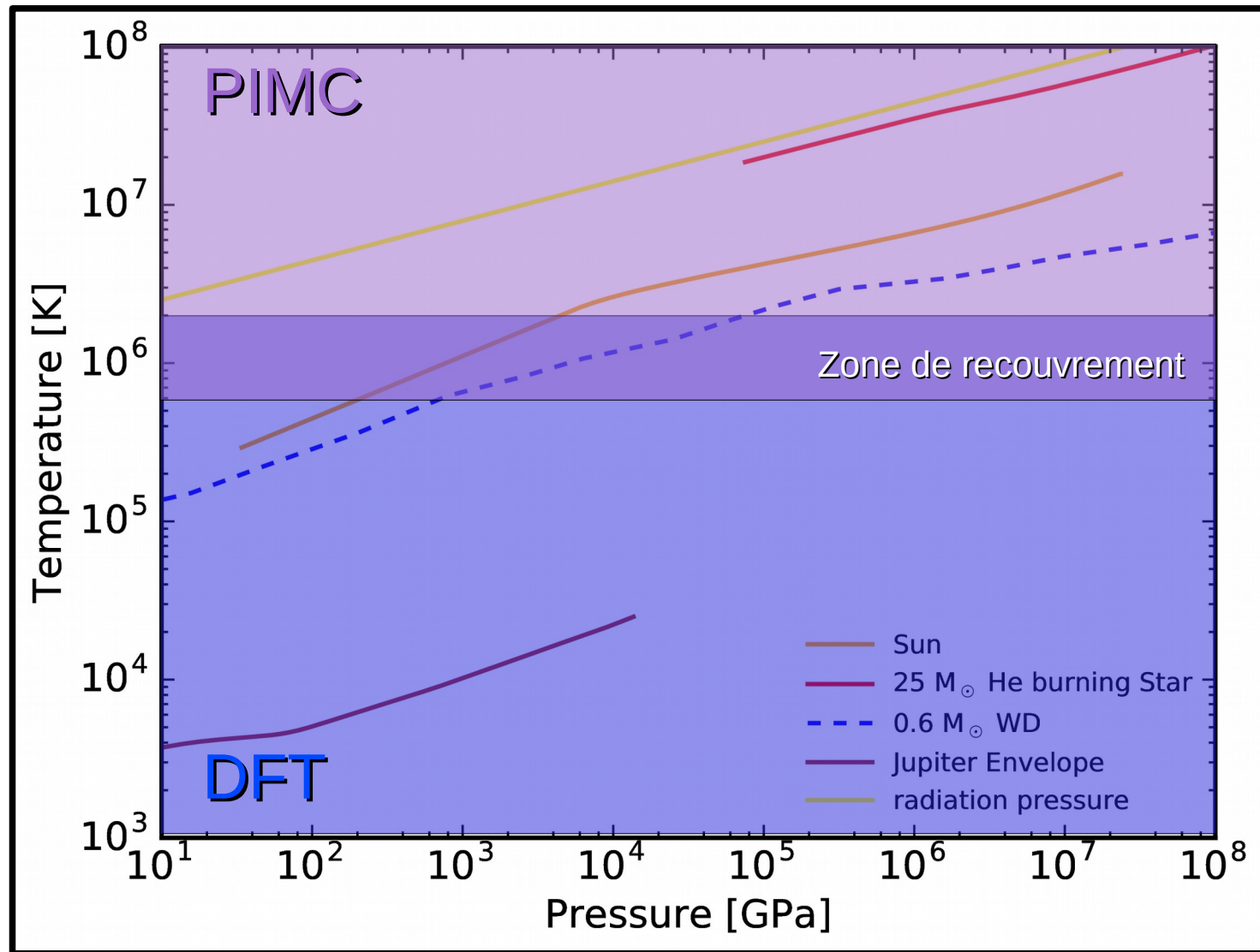
PIMC ET DFT COMME MÉTHODES COMPLÉMENTAIRES



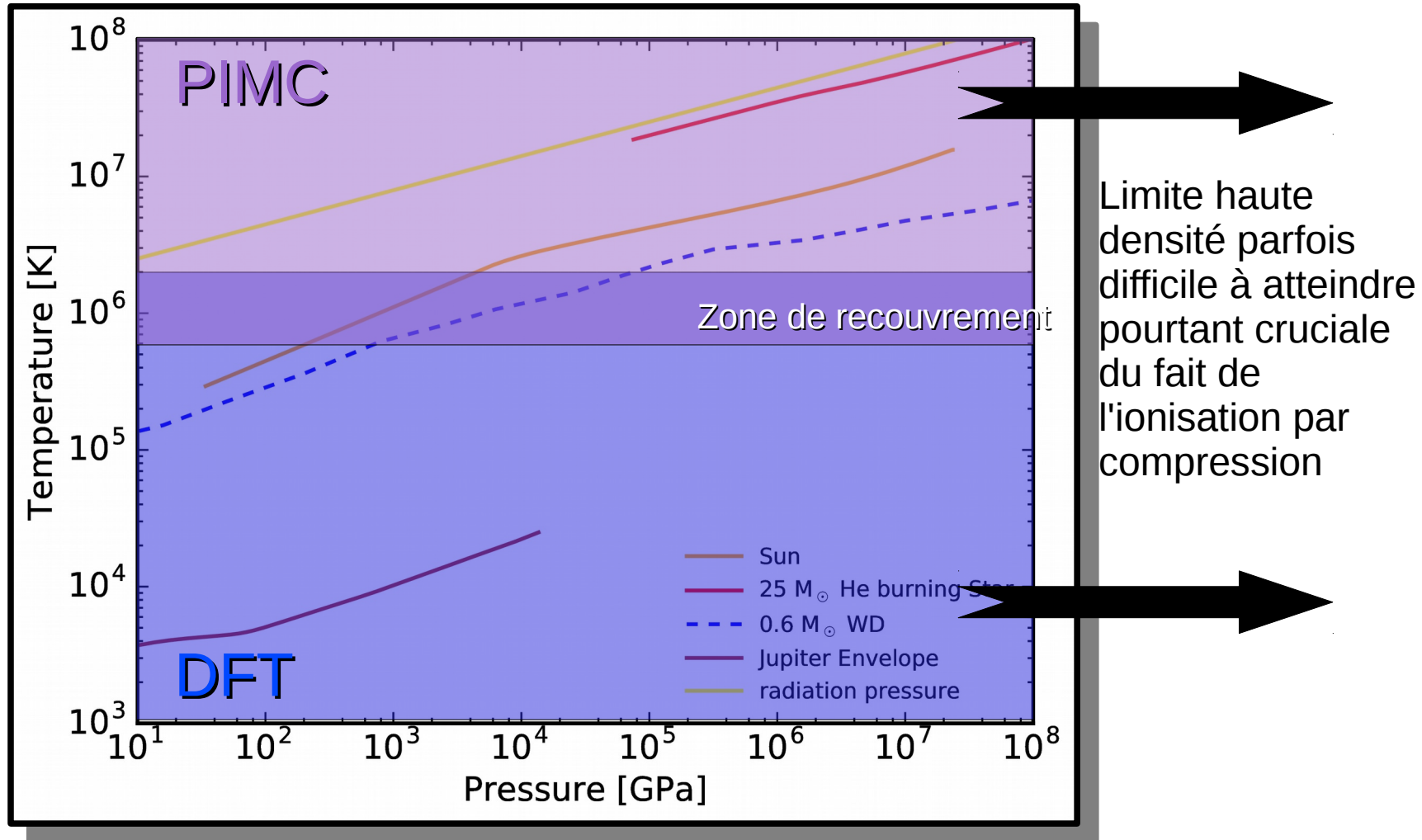
PIMC ET DFT COMME MÉTHODES COMPLÉMENTAIRES



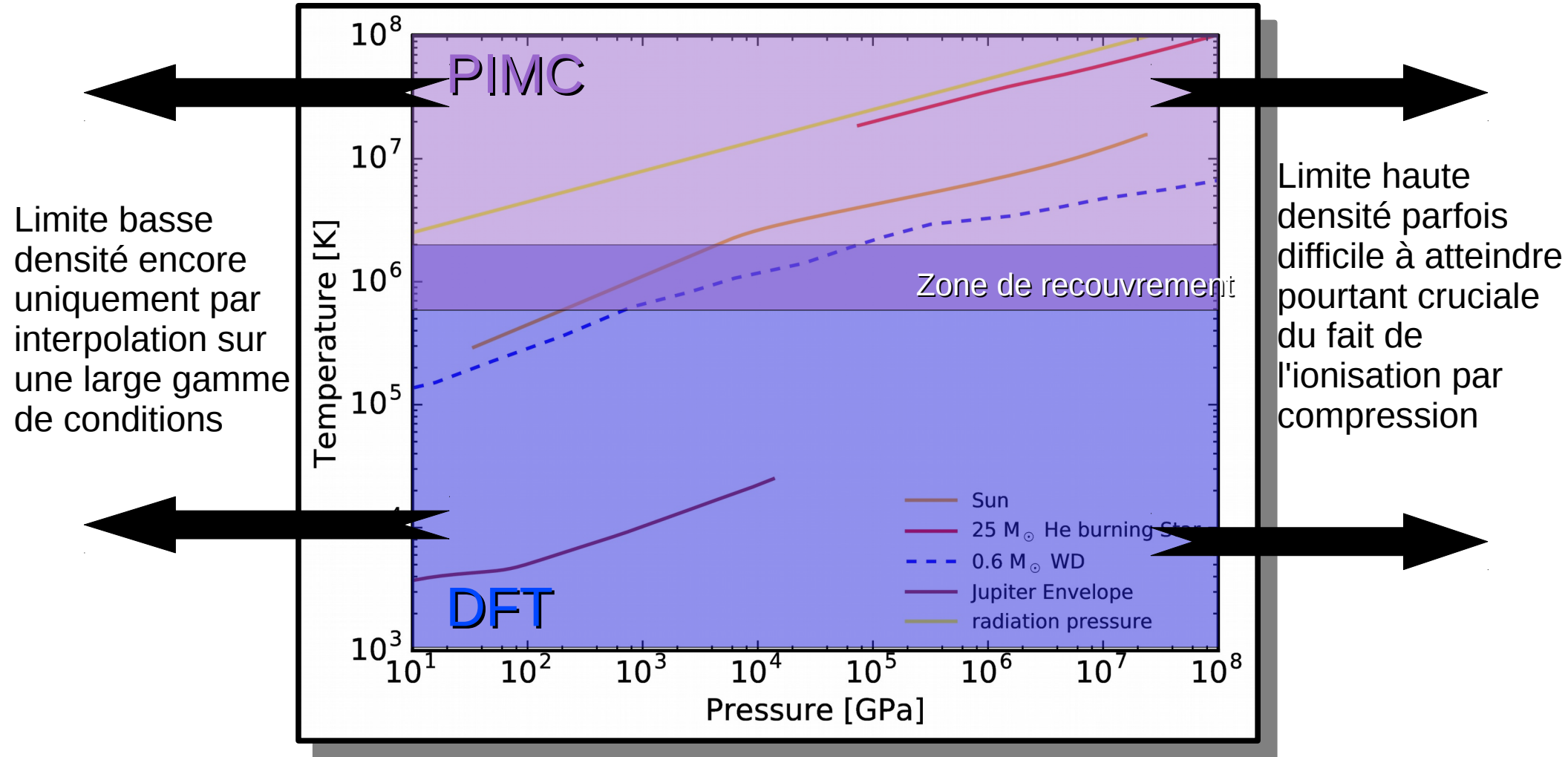
PIMC ET DFT COMME MÉTHODES COMPLÉMENTAIRES



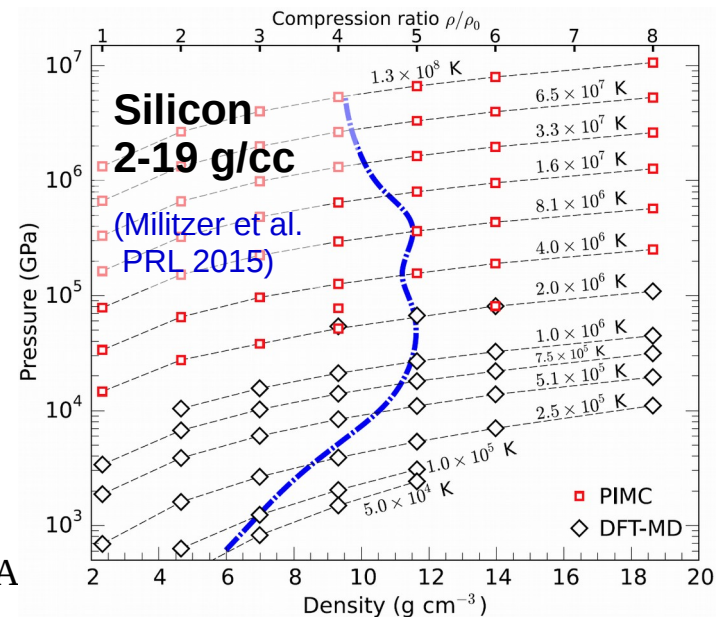
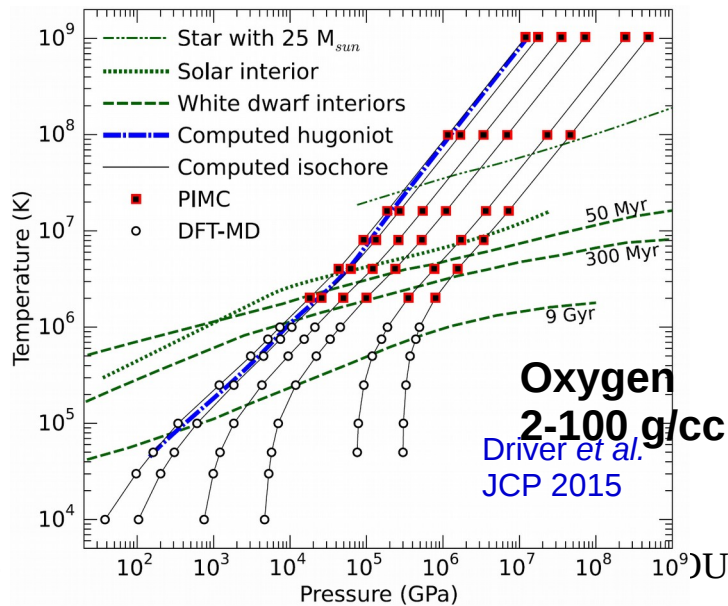
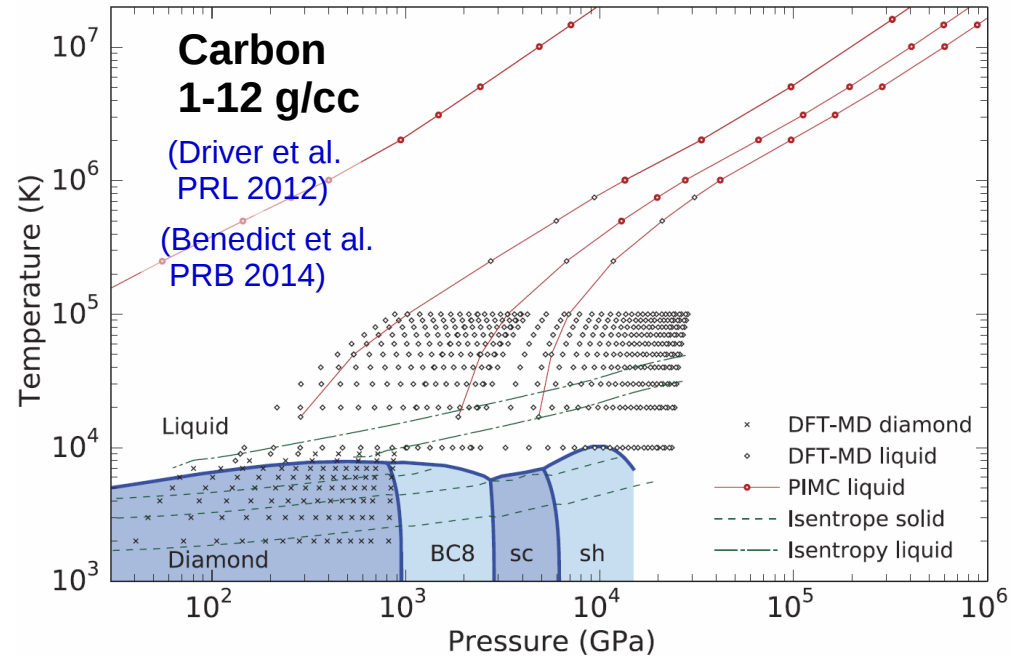
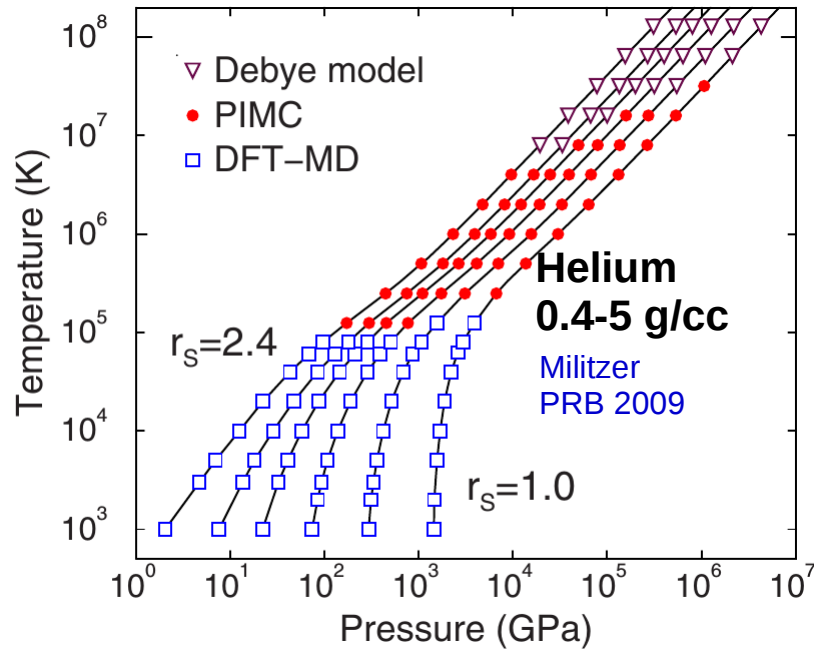
MAIS DES EXTENSIONS ENCORE DIFFICILES



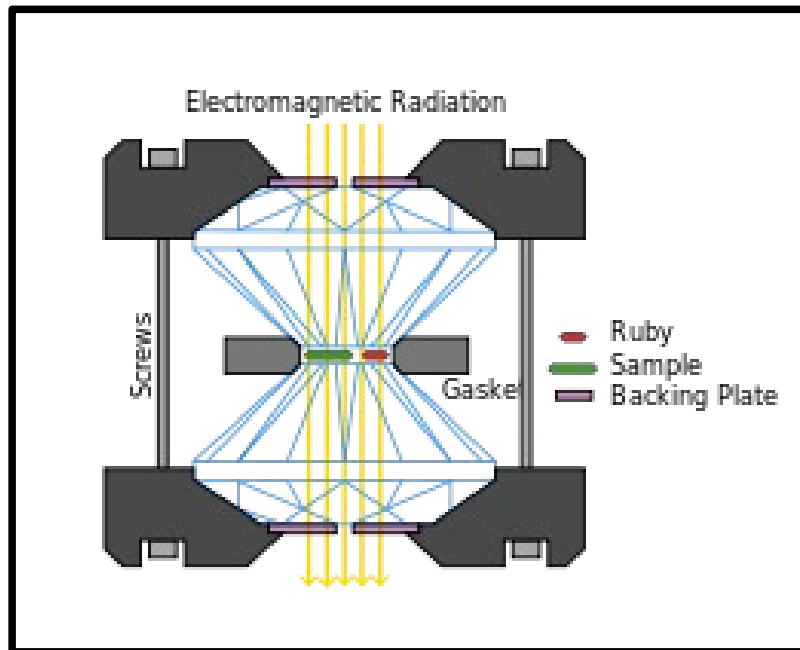
MAIS DES EXTENSIONS ENCORE DIFFICILES



QUELQUES RÉSULTATS SUR HE, C, O, SI...



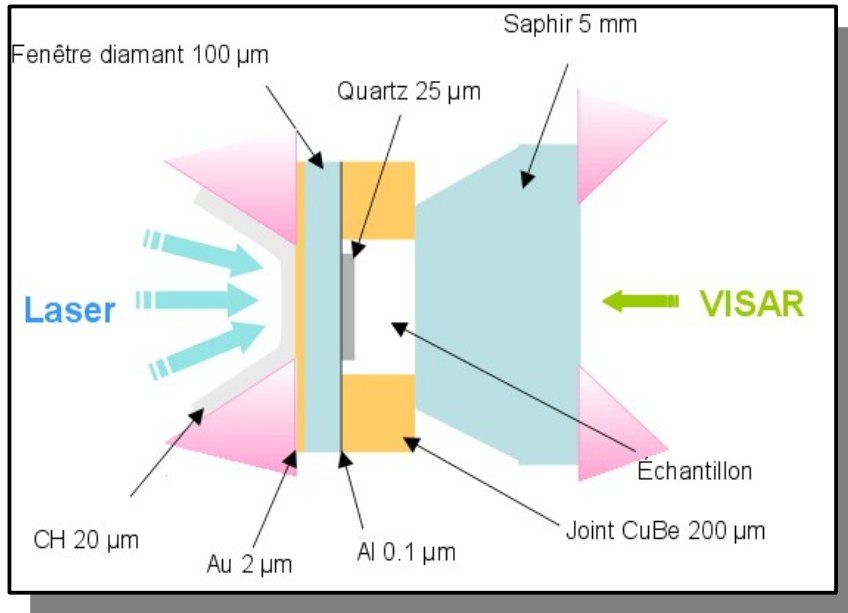
EXPÉRIENCES HAUTES PRESSIONS STATIQUES



- **Enclumes diamant:**

- Pressions relativement faibles
- Températures froides
- Expériences statiques

EXPÉRIENCES HAUTES PRESSIONS DYNAMIQUES

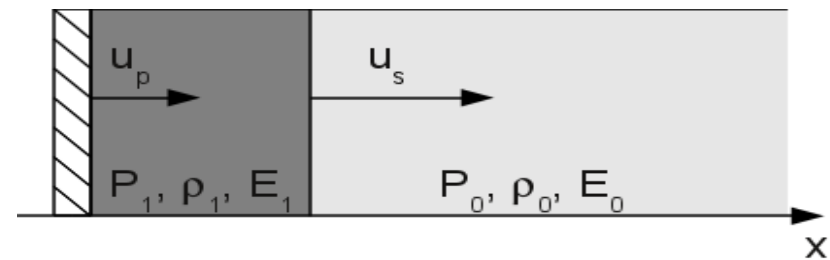


Cellule expérimentale à enclume-diamant

Eggert, PRL 100, 124503 (2008)

- Dépôt d'énergie sur une cellule expérimentale

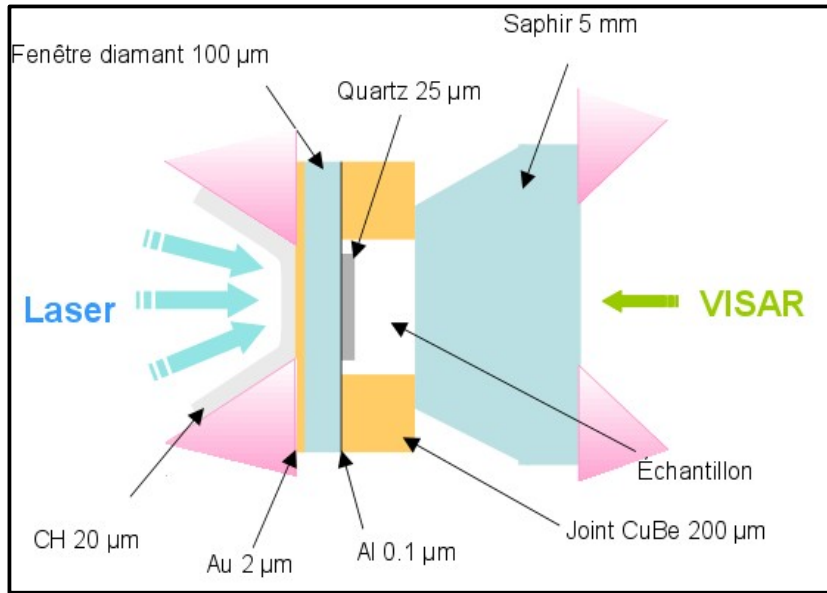
→ **Onde de choc**



- Relations de **Rankine-Hugoniot**

$$\begin{cases} 1 - \frac{\rho_0}{\rho_1} = \frac{u_p}{u_s}, \\ P_1 - P_0 = \rho_0 u_s u_p, \\ E_1 - E_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_1} \right) (P_0 + P_1) \end{cases}$$

EXPÉRIENCES HAUTES PRESSIONS DYNAMIQUES



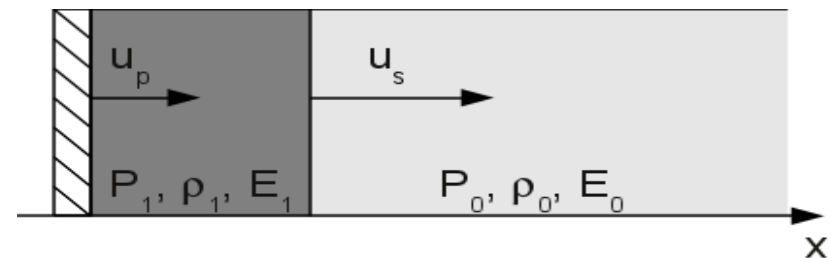
Cellule expérimentale à enclume-diamant

Eggert, PRL 100, 124503 (2008)

• Mesure de la **pression**, la **densité**, la **température** et la **réflectivité**

- Dépôt d'énergie sur une cellule expérimentale

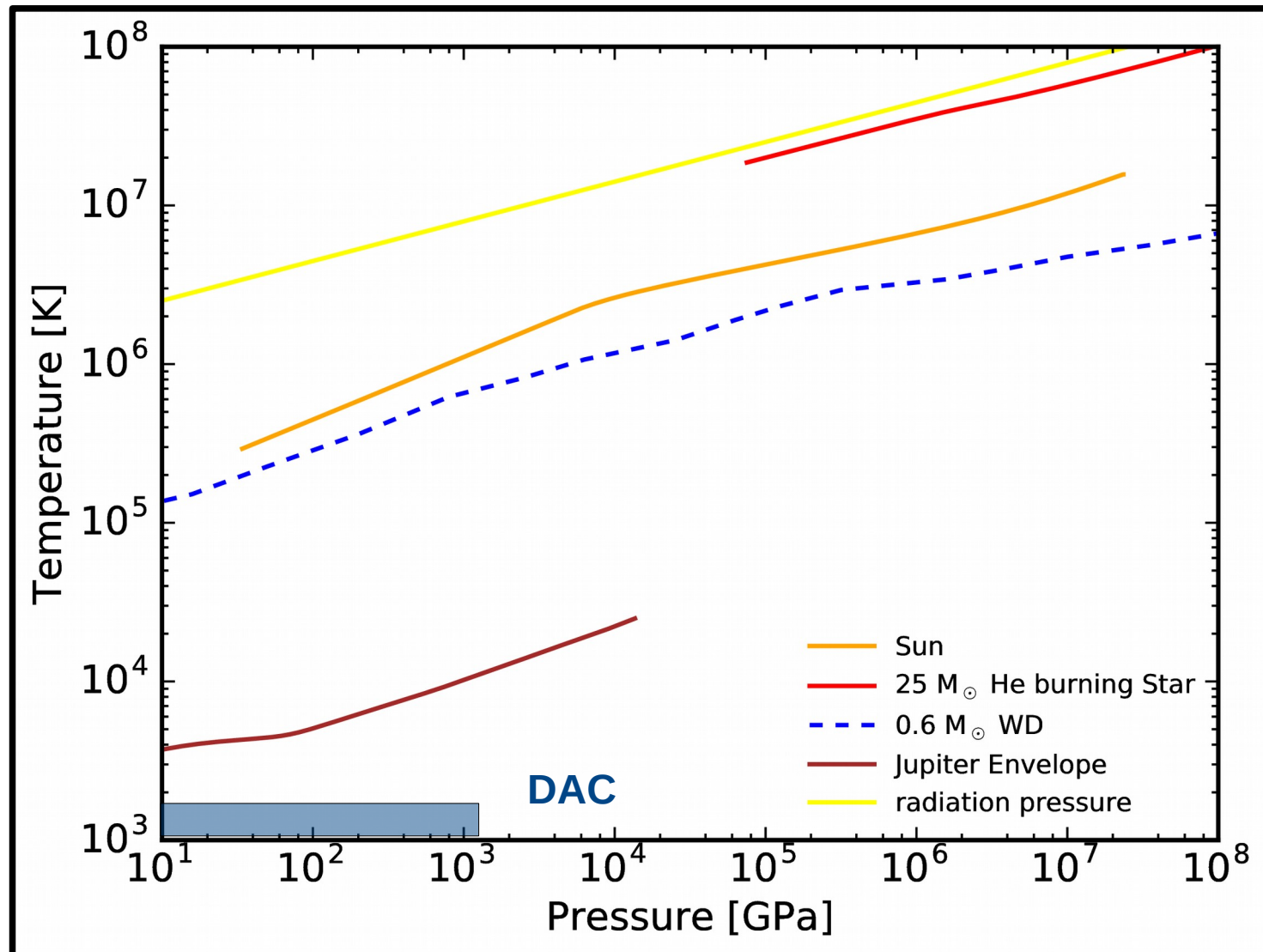
→ **Onde de choc**



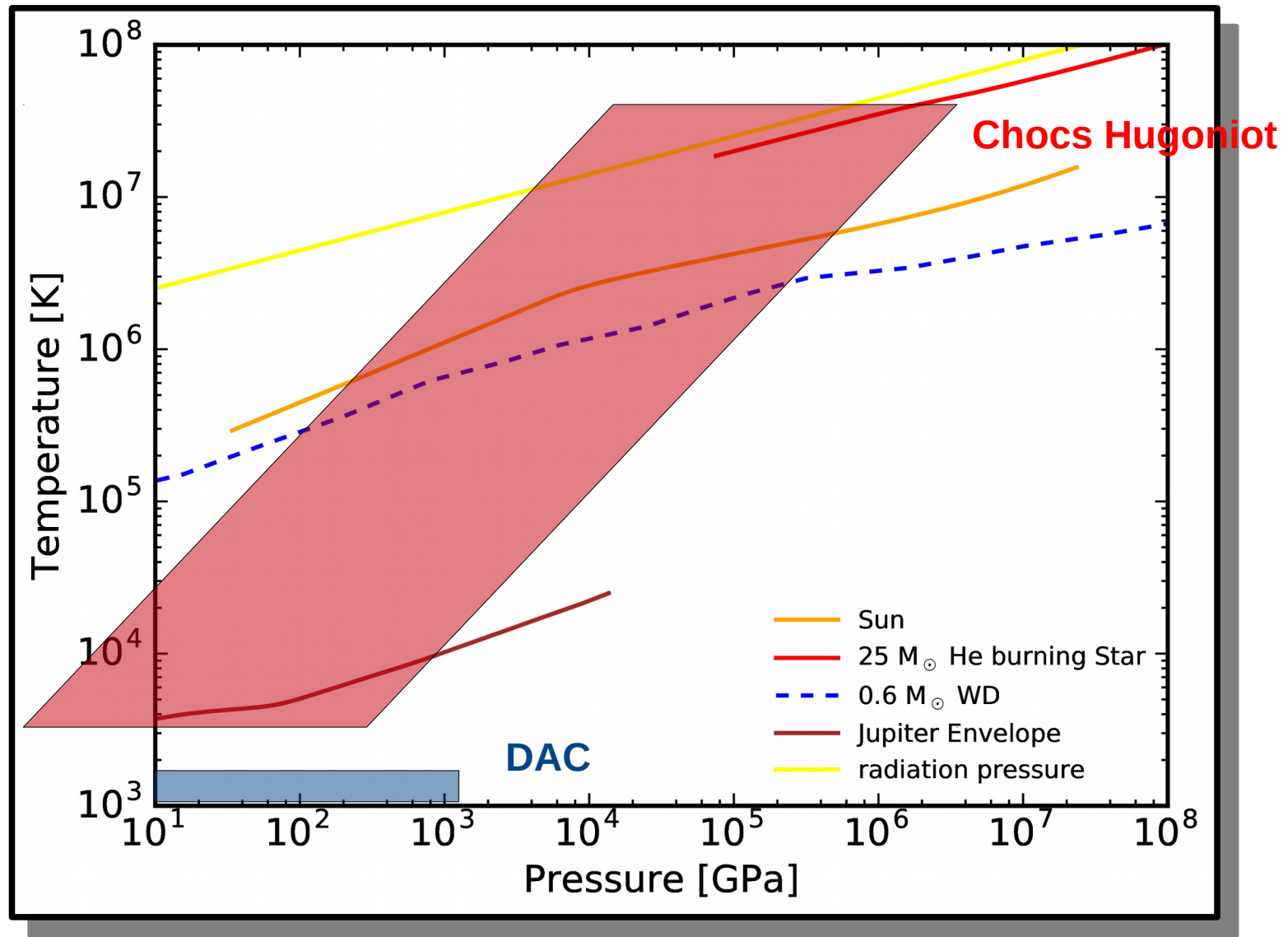
- Relations de **Rankine-Hugoniot**

$$\begin{cases} 1 - \frac{\rho_0}{\rho_1} = \frac{u_p}{u_s}, \\ P_1 - P_0 = \rho_0 u_s u_p, \\ E_1 - E_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_1} \right) (P_0 + P_1) \end{cases}$$

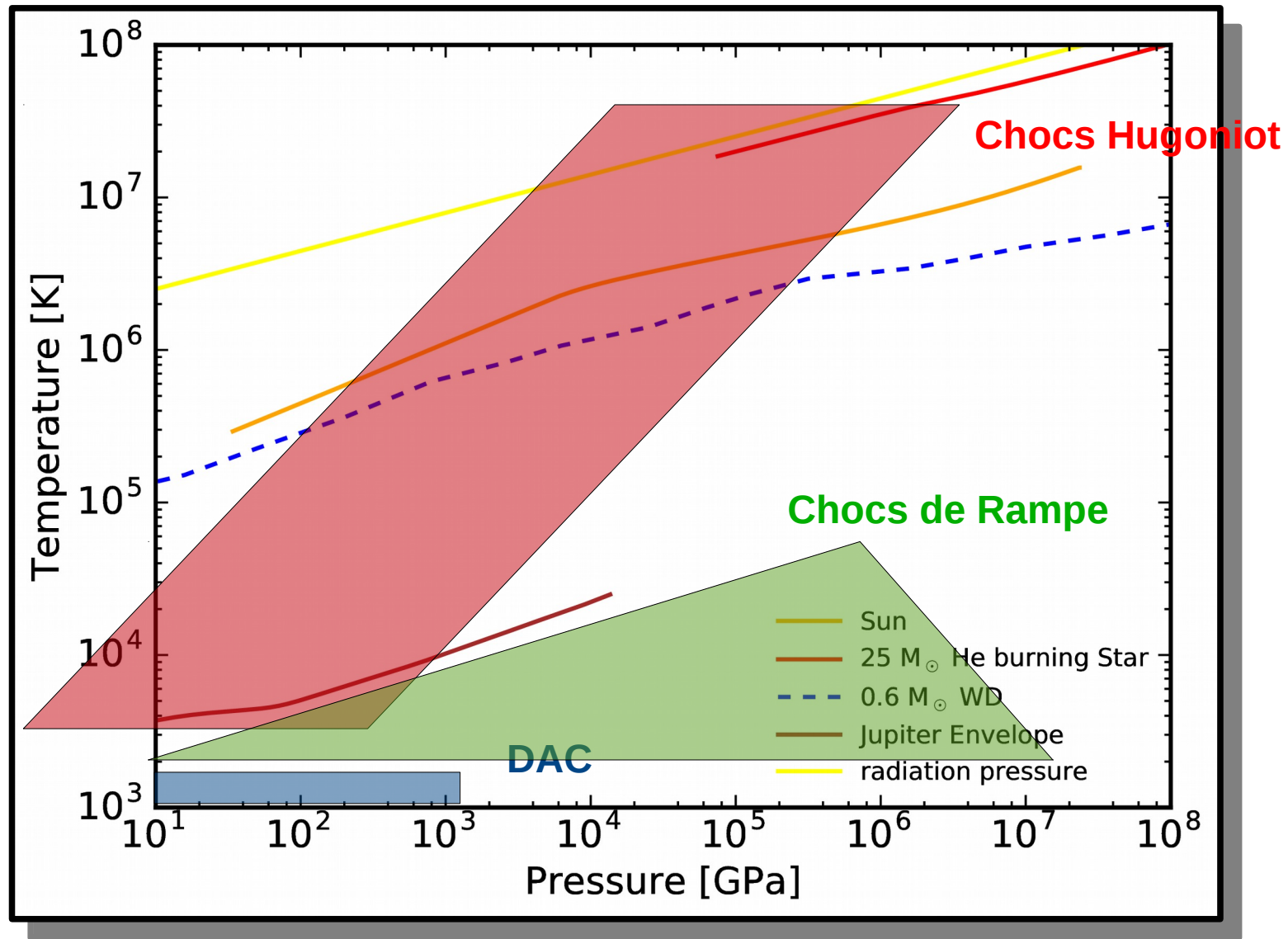
EXPÉRIENCES HAUTES PRESSIONS



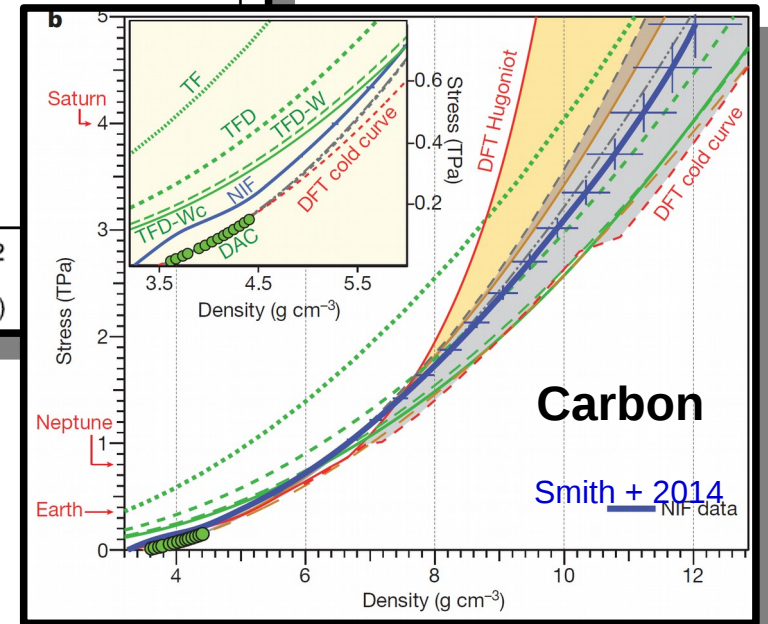
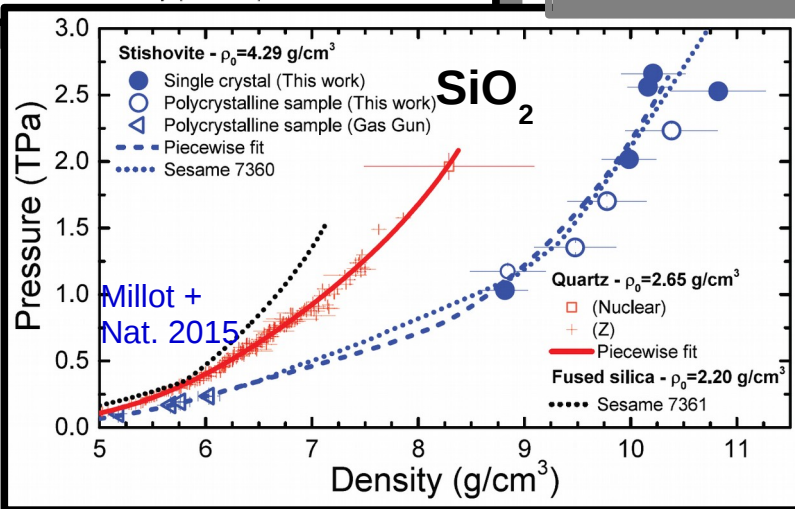
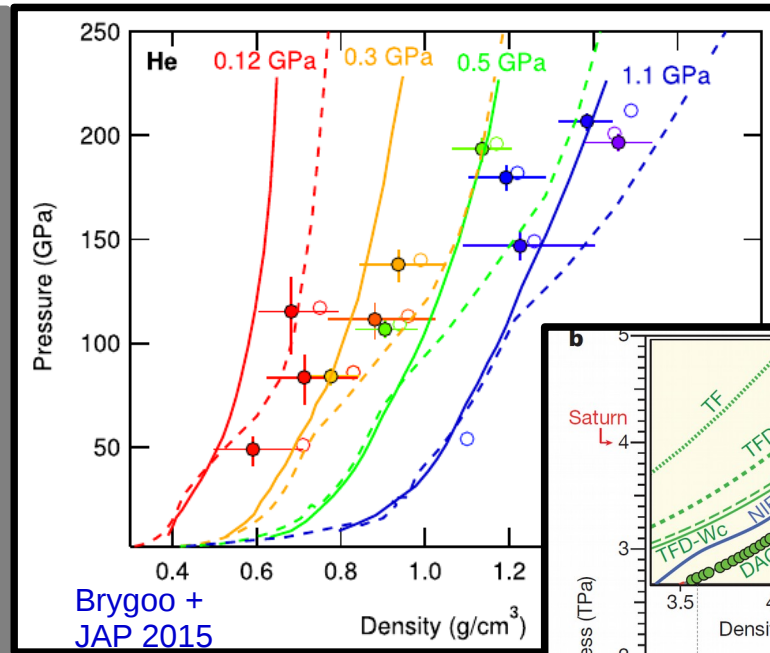
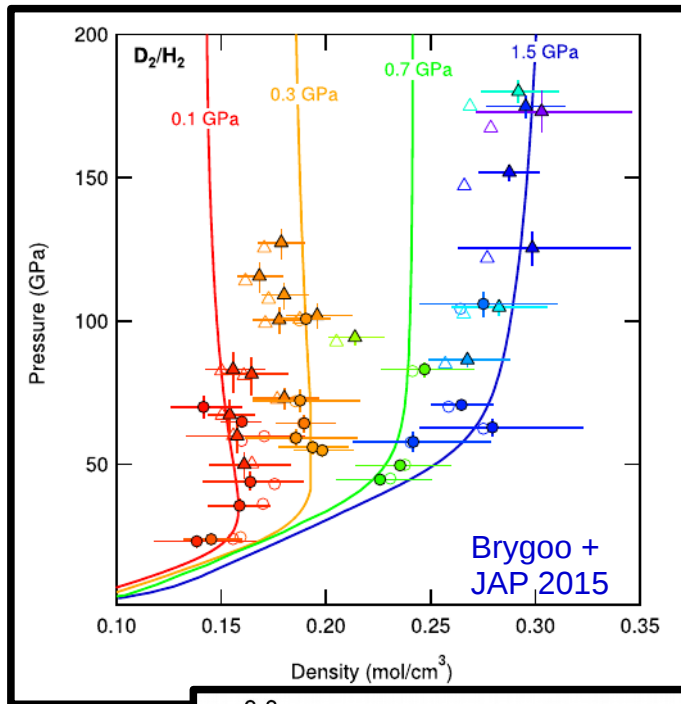
EXPÉRIENCES HAUTES PRESSIONS



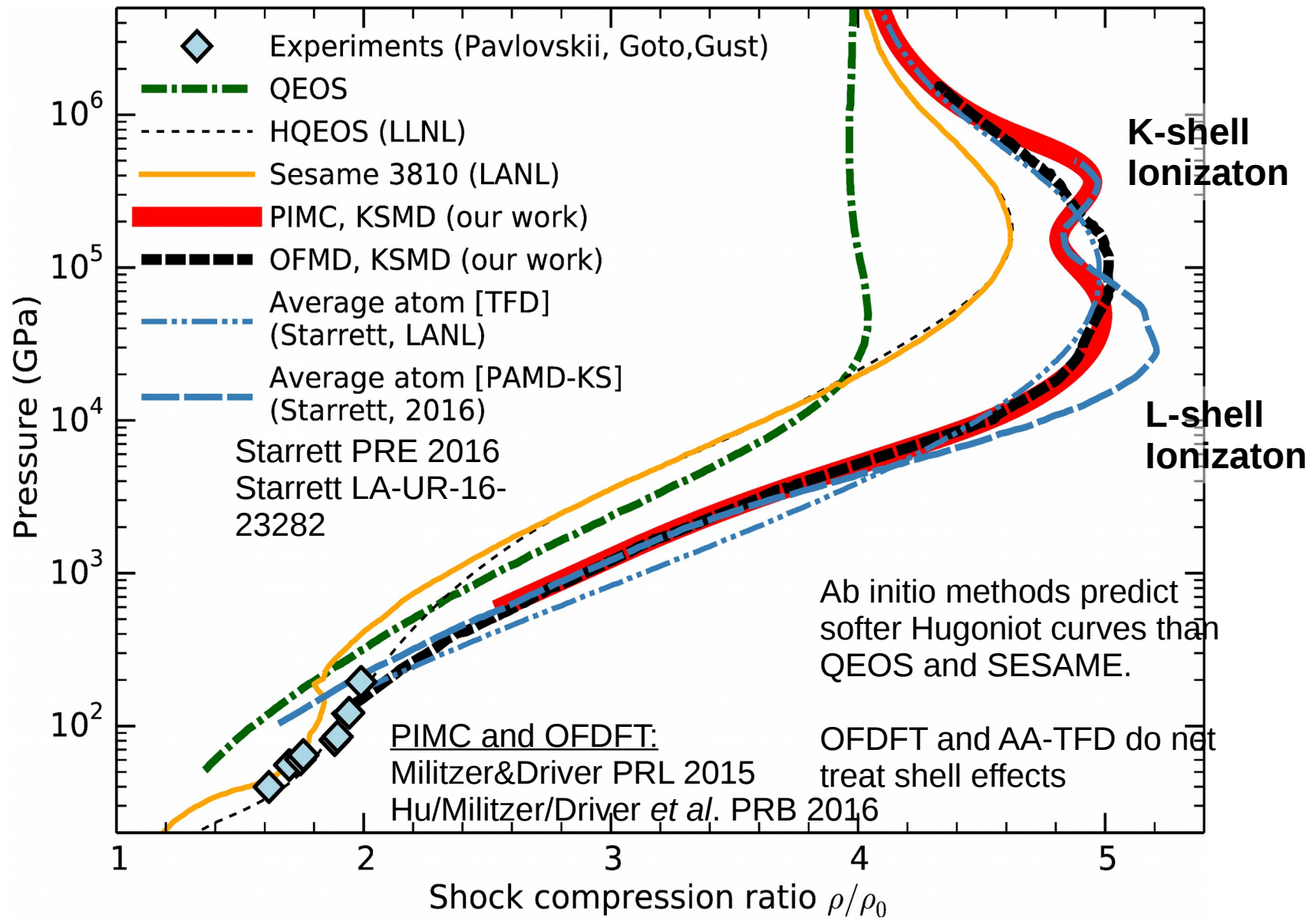
EXPÉRIENCES HAUTES PRESSIONS



EXEMPLES DE RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX



CHOCS HUGONIOT COMME DISCRIMINATEUR

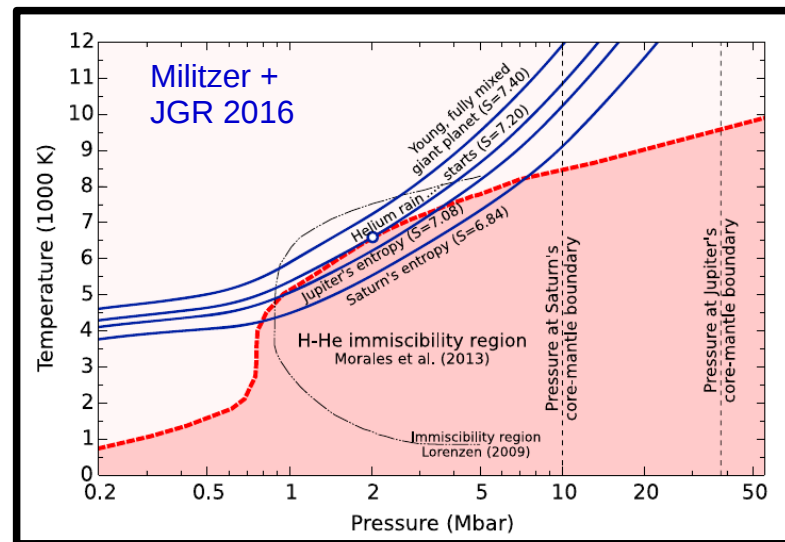


QU'EN EST-IL DES MÉLANGES ?

- Les mélanges ont des propriétés spécifiques **non** nécessairement **extrapolables** des espèces pures.
- La loi de mélange idéale de plusieurs espèces n'est pas toujours vraie

$$V_{tot}(P, T, x_i) \stackrel{?}{=} \sum_i x_i V_i(P, T)$$

- Exemple du mélange H-He et de la **démixtion**

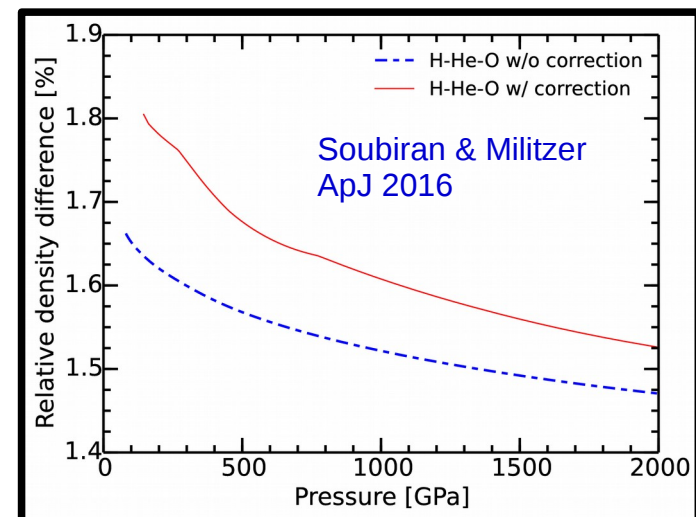
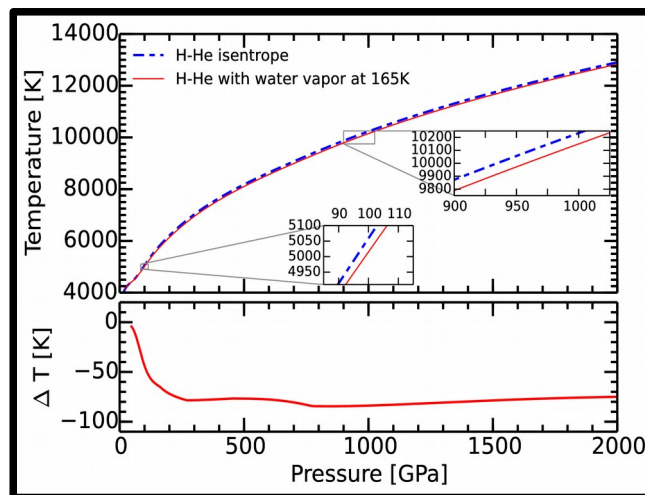
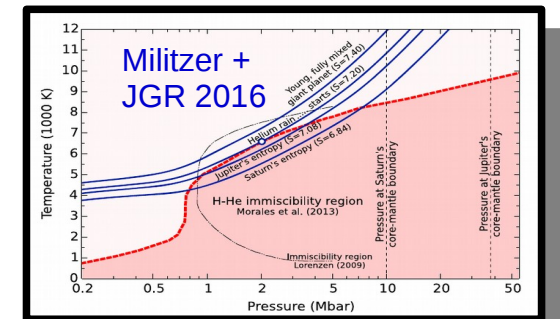


QU'EN EST-IL DES MÉLANGES ?

- Les mélanges ont des propriétés spécifiques **non** nécessairement **extrapolables** des espèces pures.
- La loi de mélange idéale de plusieurs espèces n'est pas toujours vraie

$$V_{tot}(P, T, x_i) \stackrel{?}{=} \sum_i x_i V_i(P, T)$$

- Exemple du mélange H-He et de la **démixtion**
- Influence des éléments lourds pour les intérieurs planétaires



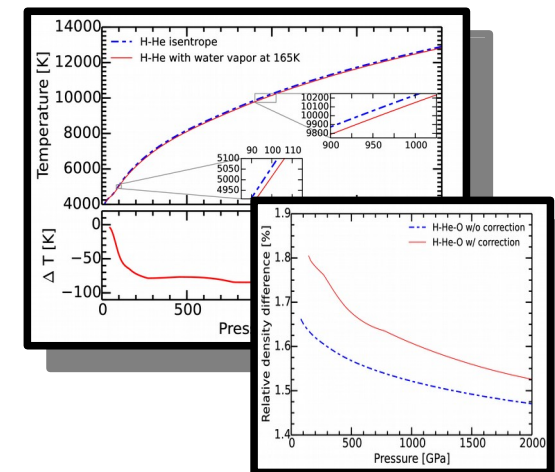
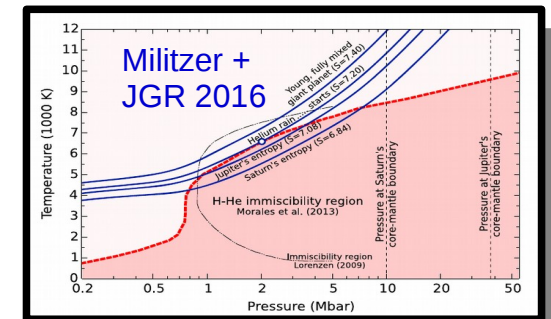
QU'EN EST-IL DES MÉLANGES ?

- Les mélanges ont des propriétés spécifiques **non** nécessairement **extrapolables** des espèces pures.
- La loi de mélange idéale de plusieurs espèces n'est pas toujours vraie

$$V_{tot}(P, T, x_i) \stackrel{?}{=} \sum_i x_i V_i(P, T)$$

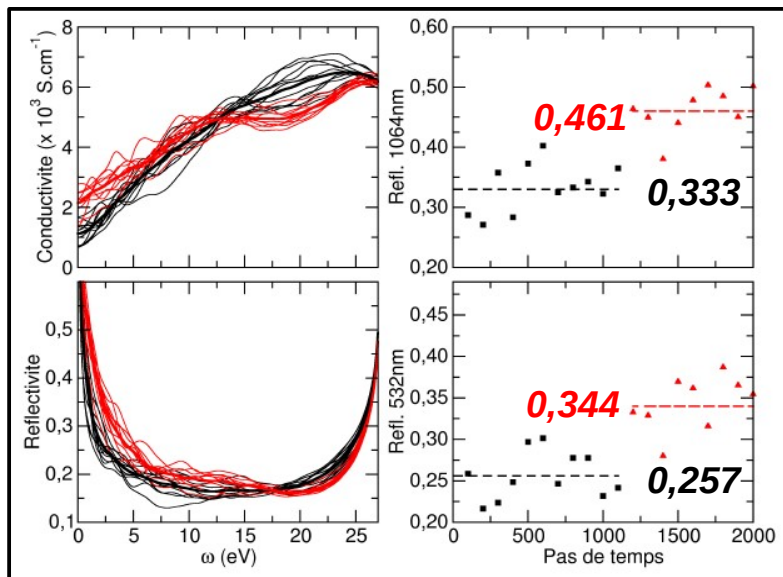
- Exemple du mélange H-He et de la **démixtion**
- Influence des éléments lourds pour les intérieurs planétaires

→ Données cruciales avec les observations de haute précision de Jupiter et Saturne par **JUNO** et **CASSINI**



PROPRIÉTÉS DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES

- La **DFT** permet de déterminer la **conductivité** des plasmas denses et les **propriétés optiques** associées
- Les **expériences de choc** ont accès à la **réflectivité**
- On peut utiliser la réflectivité pour détecter la **démixtion H-He** dans une expérience de choc



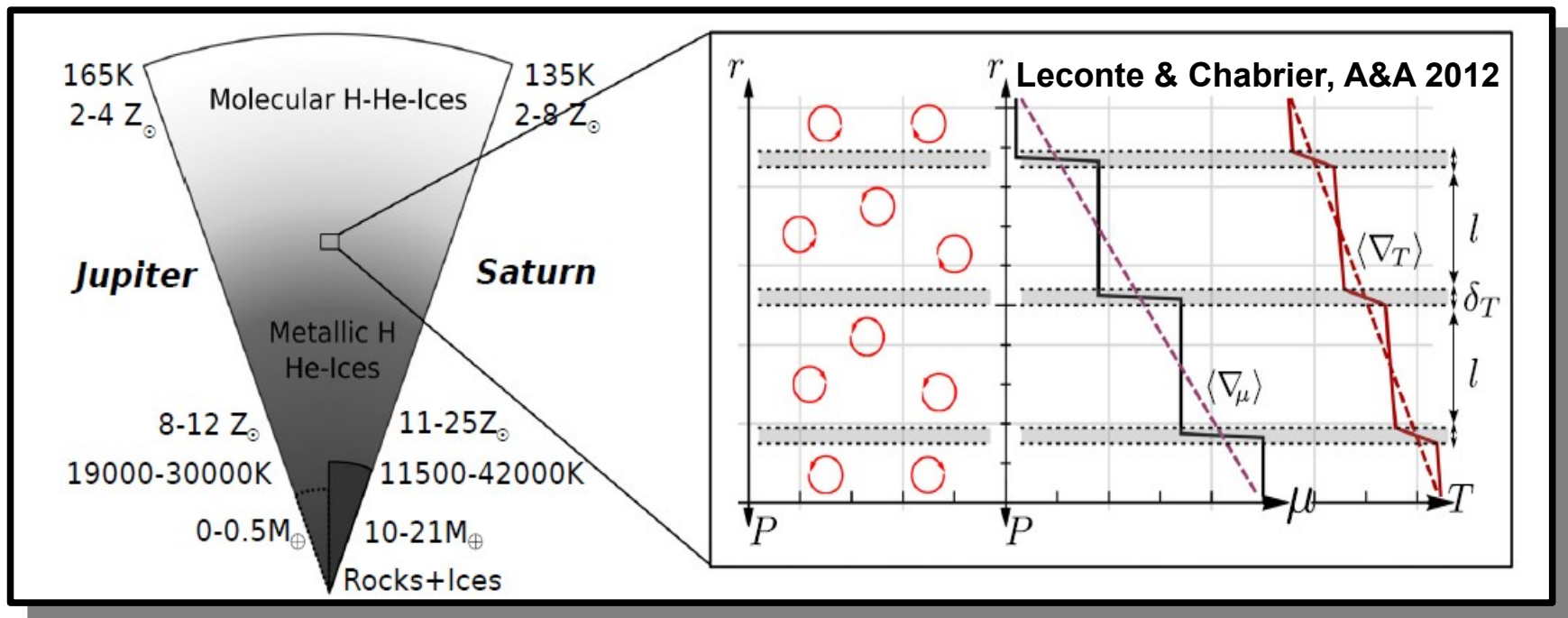
Conductivité électrique et réflectivité à différents instants et moyennes. Évolution temporelle de la réflectivité à 532 nm et 1064 nm. Simulation à $3,60 \text{ g/cm}^3 - 17405 \text{ K}$.

PROPRIÉTÉS DE TRANSPORT IONIQUES

- L'*ab initio* permet de déterminer les propriétés de transport ioniques telles que la **diffusion** et la **viscosité**
- Pour l'instant quasi-inaccessible expérimentalement... et pourtant cruciales

PROPRIÉTÉS DE TRANSPORT IONIQUES

- L'*ab initio* permet de déterminer les propriétés de transport ioniques telles que la **diffusion** et la **viscosité**
 - Pour l'instant quasi-inaccessible expérimentalement... et pourtant cruciales
- Un des **sujets prioritaires à NIF** : problème des capsules plastiques
- Conséquences pour les **intérieurs planétaires** avec la **semi-convection**



CONCLUSIONS

- Les **EOS ont un rôle fondamental** pour déterminer la structure et l'évolution de nombreux systèmes astrophysiques
- Elles doivent être déterminées sur une **large gamme de paramètres : il n'y a pas de méthode unique**
- Les **simulations ab initio sont un excellent outil** pour la partie numérique de la détermination des EOS mais encore des **améliorations possibles**
- Les **expériences de choc sont cruciales** pour la compréhension des systèmes denses froids à très chauds
- **Simulations et expériences sont hautement complémentaires**

PERSPECTIVES

- Assurer la **continuité des différentes méthodes de calculs des EOS** pour la création de tables toute condition
- Développer des méthodes pour les éléments plus lourds, les densités intermédiaires,...
- **Développer des expériences pour valider les EOS**
- **Explorer les propriétés des mélanges**
- Déterminer les propriétés de transport en parallèle des EOS
- **Développer des modèles astrophysiques plus fins** tenant compte des EOS les plus précises possibles

SOUTIEN DU PNPS

- **Permettre la synergie entre les équipes** de numériciens/théoriciens, d'expérimentateurs et d'astrophysiciens.
- Le PNPS ne peut probablement pas prendre en charge le coût des expériences mis à part quelques cas particuliers. Mais il peut assurer le soutien de base logistique.
- **Assurer l'accès à un environnement numérique performant et en quantité suffisante (10^6 à 10^7 heures par projet)**
- **Assurer le soutien aux équipes de recherche**
- Créer des **standards pour les équations d'état *ab initio*** et une méthode efficace de partage