Physique statistique avancée II

Séance 2: Equation cinétique de Boltzmann

1. Considérations de base
2. Dérivation de l'équation de Boltzmann dans le cas sans interactions
3. Dérivation simple du terme de collision
4. Discussion

Références:

Kerson Huang, « *Statistical Mechanics* », 2nd ed. (Wiley & Sons, New York, 1987)

Gregory H. Wannier, « Statistical Physics », (Wiley & Sons, New York, 1966)

http://itp.epfl.ch/page21326.html

- Modèle statistique: nous ne sommes pas intéressés à la description des trajectoires $\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)$ pour chaque particule.

- Nous acceptons une description en termes de quantités moyennes.

- Espace de phase pour une particule: $\{\mathbf{r}, \mathbf{p}\}$

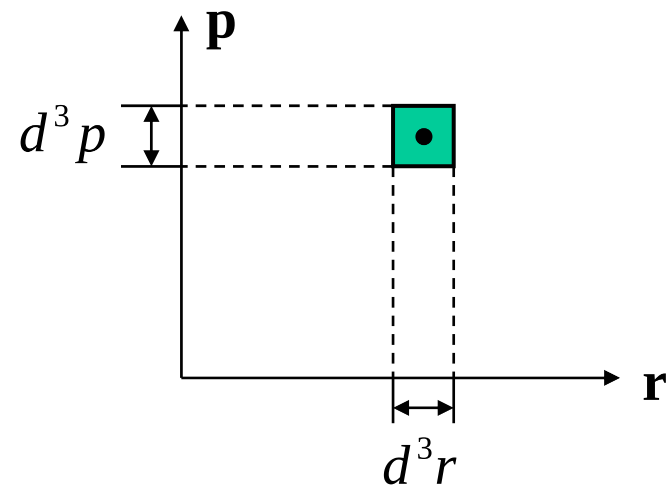
- Exemple de quantité moyenne: densité dans l'espace de phase: $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$

$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)\Delta\mathbf{r}\Delta\mathbf{p}$: nombre de particules au temps t dans l'élément de volume $\Delta\mathbf{r}\Delta\mathbf{p}$

- Nous pouvons décrire des quantités physiques à l'aide de $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$. Exemple, densité de courant pour un gaz d'électrons:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -e\sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)\Delta\mathbf{p}$$

- Limite continue: $\Delta\mathbf{r}\,\Delta\mathbf{p} \rightarrow d^3r\,d^3p$



- L'élément de volume $d^3r\,d^3p$ est entendu de taille finie. Il est suffisamment grand pour contenir un très grand nombre de particules tout en restant petit par rapport à l'échelle macroscopique qui nous intéresse.

- La somme sur les éléments de volume est remplacée par une intégrale

$$\sum f\left(\mathbf{r},\mathbf{p},t\right)\Delta\mathbf{r}\,\Delta\mathbf{p} \rightarrow \int f\left(\mathbf{r},\mathbf{p},t\right)d^3r\,d^3p$$

- Condition de normalisation:

$$\int f\left(\mathbf{r},\mathbf{p},t\right)d^3r\,d^3p = N$$

- Espace de phase à 6N coordonnées, ou espace Γ :

$$\{\mathbf{r}_1(t),\mathbf{r}_2(t),\ldots,\mathbf{r}_N(t),\mathbf{p}_1(t),\mathbf{p}_2(t),\ldots,\mathbf{p}_N(t)\}\equiv\{Q,P\}$$

- Densité de probabilité dans l'espace Γ : $\rho(Q,P,t)$

$\rho(Q,P,t)\,d^{3N}Q\,d^{3N}P$: probabilité que le système occupe un point dans l'élément de volume $d^{3N}Q\,d^{3N}P$

- Si Q et P sont des variables conjuguées au sens de la théorie de Hamilton, le théorème de Liouville s'applique:

$$\frac{d\rho(Q,P,t)}{dt}=0$$

La densité de probabilité reste constante le long du flot Hamiltonien

- Nous pouvons exprimer $f\left(\mathbf{r},\mathbf{p},t\right)$ à l'aide de la densité dans l'espace Γ :

$$f\left(\mathbf{r},\mathbf{p},t\right)=\int\rho\left(Q,P,t\right)\left[\sum_{j=1}^{N}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j\left(t\right)\right)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_j\left(t\right)\right)\right]d^{3N}Q\,d^{3N}P$$

Cette intégrale compte le nombre de particules ayant une position $\mathbf{r}$ et un moment $\mathbf{p}$ et moyenne ce nombre sur l'ensemble statistique.

- Pour calculer la dynamique de $f\left(\mathbf{r},\mathbf{p},t\right)$ il suffit de prendre la dérivée par rapport au temps:

$$\frac{\partial f\left(\mathbf{r},\mathbf{p},t\right)}{\partial t}=\int\frac{d\rho\left(Q,P,t\right)}{dt}\left[\sum_{j=1}^{N}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j\left(t\right)\right)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_j\left(t\right)\right)\right]d^{3N}Q\,d^{3N}P$$
$$+\int\rho\left(Q,P,t\right)\frac{d}{dt}\left[\sum_{j=1}^{N}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j\left(t\right)\right)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_j\left(t\right)\right)\right]d^{3N}Q\,d^{3N}P$$

- La première intégrale est zéro en vertu du théorème de Liouville

- La dérivée du produit des deltas de Dirac nous donne

$$\frac{d}{dt}\left[\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j(t)\right)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_j(t)\right)\right] = -\frac{d\mathbf{r}_j(t)}{dt}\cdot\nabla_{\mathbf{r}_j}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j(t)\right)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_j(t)\right)$$
$$-\frac{d\mathbf{p}_j(t)}{dt}\cdot\nabla_{\mathbf{p}_j}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j(t)\right)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_j(t)\right)$$

- Par définition nous avons: $\displaystyle \frac{d\mathbf{r}_j(t)}{dt} = \mathbf{v}_j(t) = \frac{\mathbf{p}_j(t)}{m}$

- Pour la dérivée temporelle de $\mathbf{p}_j(t)$ nous devons définir l'équation du mouvement d'une particule. Nous faisons pour l'instant l'hypothèse de particules indépendantes, sujets à un champ de force qui ne dépend que de la position $\mathbf{r}_j(t)$ de la particule

$$\frac{d\mathbf{p}_j(t)}{dt} = \mathbf{F}\left(\mathbf{r}_j(t)\right)$$

- On peut écrire la dérivée du produit de fonctions delta comme:

$$\frac{d}{dt}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j(t)\right)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_j(t)\right)=-\left(\frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}+\mathbf{F}(\mathbf{r})\cdot\nabla_{\mathbf{p}}\right)\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j(t)\right)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_j(t)\right)$$

où nous avons utilisé $\nabla_{\mathbf{r}_j}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j(t)\right)=\nabla_{\mathbf{r}}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j(t)\right)$ (même chose pour $\nabla_{\mathbf{p}_j}$)

- La dérivée temporelle de $f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)$ devient:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)}{\partial t}=$$

$$-\left(\frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}+\mathbf{F}(\mathbf{r})\cdot\nabla_{\mathbf{p}}\right)\int\rho(Q,P,t)\left[\sum_{j=1}^{N}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j(t)\right)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_j(t)\right)\right]d^{3N}Q\,d^{3N}P$$

- Nous reconnaissons l'intégrale comme étant la fonction $f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)$.

- L’équation de Boltzmann pour N corps indépendants s’écrit donc comme:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)}{\partial t}+\frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)+\mathbf{F}(\mathbf{r})\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)=0$$

- Pour un système à N corps en interaction, nous pouvons écrire en toute généralité

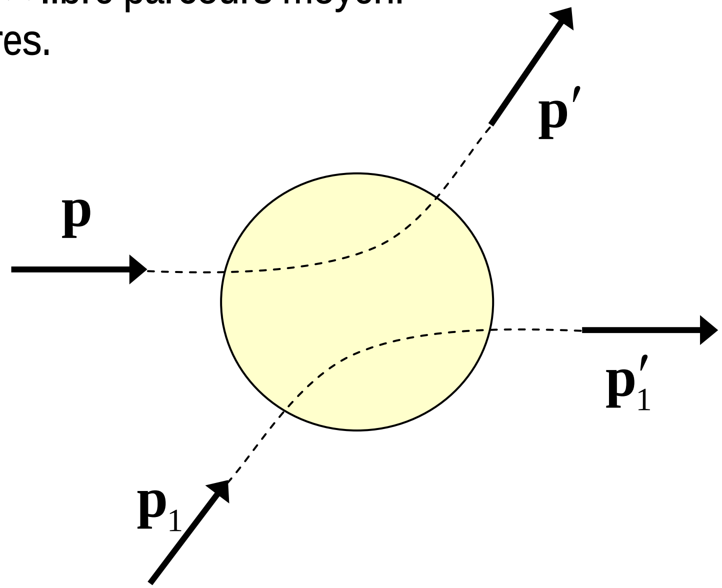
$$\boxed{\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)}{\partial t}+\frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)+\mathbf{F}(\mathbf{r})\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}}$$

- Le vrai but de la théorie de Boltzmann est de dériver un modèle explicite pour le terme de collision $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$

Collisions binaires

- Dérivation du terme de collision pour un système à N-corps très dilué. Trois hypothèses:

  i. Collisions à courte portée << libre parcours moyen.
  ii. Seulement collisions binaires.
  iii. Collisions élastiques.



- Conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement:

$$\left.\begin{array}{c}\mathbf{p}+\mathbf{p}_1=\mathbf{p}'+\mathbf{p}_1' \\ p^2+p_1^2=p'+p_1'^2\end{array}\right\}\Rightarrow\left|\mathbf{p}-\mathbf{p}_1\right|=\left|\mathbf{p}'-\mathbf{p}_1'\right|$$

- Référentiel associé au centre de masse. Les équations du mouvement pour le centre de masse et la coordonnée relative sont séparées.

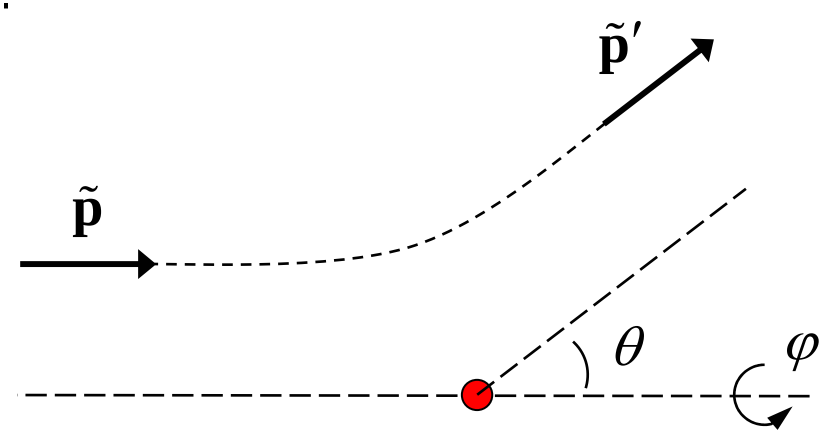
Vitesses: $\mathbf{V} = \dfrac{\mathbf{v} + \mathbf{v}_1}{2}$ $\qquad \tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$

Masses: $M = 2m$ $\qquad \mu = m/2$

Moments: $\mathbf{P} = \mathbf{p} + \mathbf{p}_1$ $\qquad \tilde{\mathbf{p}} = \dfrac{\mathbf{p} - \mathbf{p}_1}{2}$

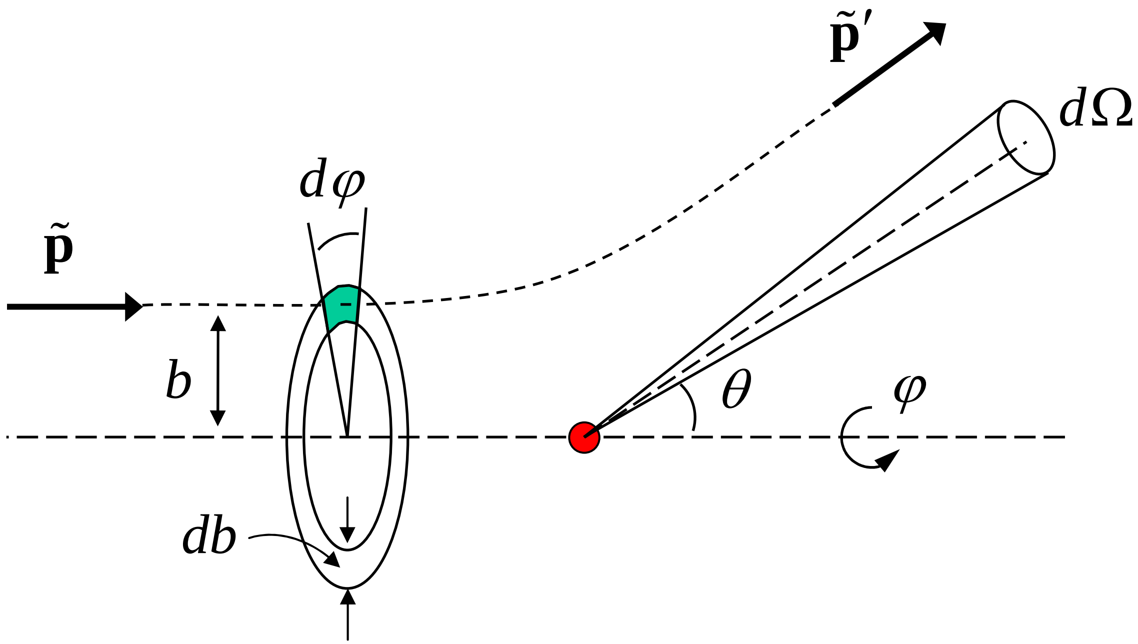
- Conservation de l'énergie et du moment: $\mathbf{P} = \mathbf{P}'$, $|\tilde{\mathbf{p}}| = |\tilde{\mathbf{p}}'|$

- Le processus de diffusion équivaut donc à celui d'une particule de masse μ diffusée par un centre de potentiel.



Section efficace différentielle: $\dfrac{d\sigma\left(\Omega, |\mathbf{p}-\mathbf{p}_1|\right)}{d\Omega}$

$I\dfrac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega$: N° de particules diffusées dans l'intervalle $d\Omega$ autour de Ω , par unité de temps, avec I flux des particules incidentes.



Angle solide:

$\{\theta, \varphi\} \equiv \Omega$

$d\sigma$ a les dimensions d'une surface. Elle est la surface infinitésimale (en vert dans le dessin) traversée par les particules qui sont après diffusées en $d\Omega$

$$I\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = I\,b\,db\,d\varphi$$

- $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} d^3r\, d^3p$: variation du N° de particules en $d^3r\, d^3p$ par unité de temps

- Il est la somme d'un terme de perte et d'un terme de gain

- Terme de perte: N° de particules qui sont diffusées hors de l'intervalle $d^3r\, d^3p$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{out} d^3r\, d^3p = -\sum \text{ collisions } \{\mathbf{p},\mathbf{p}_1 \to \mathbf{p}',\mathbf{p}_1'\}$$

- Terme de gain: N° de particules qui sont diffusées dans l'intervalle $d^3r\, d^3p$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{in} d^3r\, d^3p = \sum \text{ collisions } \{\mathbf{p}',\mathbf{p}_1' \to \mathbf{p},\mathbf{p}_1\}$$

Terme de perte

- Supposons qu'une collision ait lieu au point $\mathbf{r}$. Notation simplifiée: $f(\mathbf{r},\mathbf{p},t) \to f(\mathbf{p})$
- Flux incident sur la particule en $(\mathbf{r},\mathbf{p}_1)$:

$$f(\mathbf{p})\, d^3p \left|\mathbf{v}-\mathbf{v}_1\right|$$

- N° de collisions sur *une* particule en $(\mathbf{r},\mathbf{p}_1)$ avec moments finaux $(\mathbf{p}',\mathbf{p}_1')$:

$$f(\mathbf{p})\, d^3p \left|\mathbf{v}-\mathbf{v}_1\right| \frac{d\sigma\left(\Omega,\left|\mathbf{p}-\mathbf{p}_1\right|\right)}{d\Omega} d\Omega$$

- N° de collisions sur *toutes* les particule $f(\mathbf{p}_1)\, d^3r\, d^3p_1$ en $(\mathbf{r},\mathbf{p}_1)$:

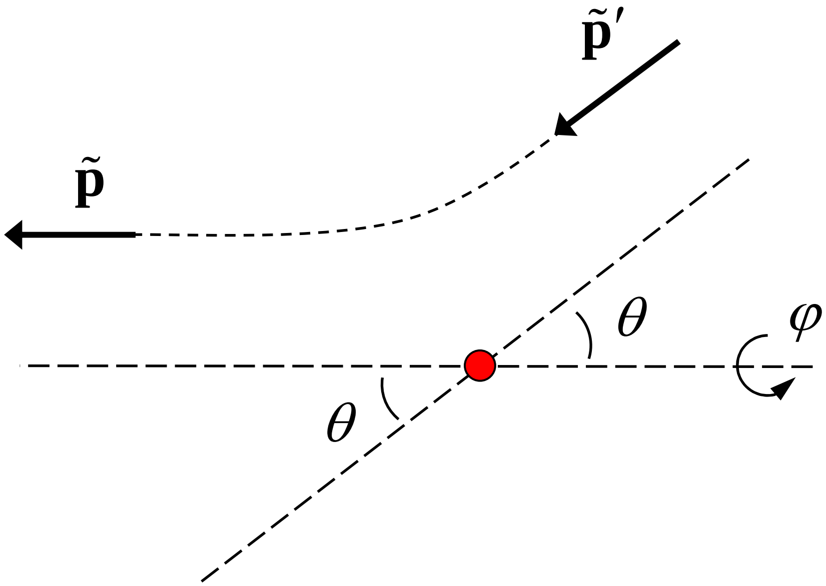
$$f(\mathbf{p})\, d^3p \left|\mathbf{v}-\mathbf{v}_1\right| \frac{d\sigma\left(\Omega,\left|\mathbf{p}-\mathbf{p}_1\right|\right)}{d\Omega} d\Omega\, f(\mathbf{p}_1)\, d^3r\, d^3p_1$$

- D'où le terme de perte dans l'équation de Boltzmann:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{out} d^3r\, d^3p = -\int d^3p_1 \int d\Omega \frac{d\sigma\left(\Omega,\left|\mathbf{p}-\mathbf{p}_1\right|\right)}{d\Omega} \left|\mathbf{v}-\mathbf{v}_1\right| f(\mathbf{p})\, f(\mathbf{p}_1)\, d^3r\, d^3p$$

Terme de gain

- Considérons le processus inverse: $\mathbf{p}', \mathbf{p}'_1 \rightarrow \mathbf{p}, \mathbf{p}_1$



- Les mêmes considérations nous mènent à:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{in} d^3r\, d^3p' = \int d^3p'_1 \int d\Omega' \frac{d\sigma\left(\Omega', \left|\mathbf{p}' - \mathbf{p}'_1\right|\right)}{d\Omega} \left|\mathbf{v}' - \mathbf{v}'_1\right| f\left(\mathbf{p}'\right) f\left(\mathbf{p}'_1\right) d^3r\, d^3p'$$

- Rappelons que: $\left|\mathbf{p}' - \mathbf{p}_1'\right| = \left|\mathbf{p} - \mathbf{p}_1\right|$ et $\left|\mathbf{v}' - \mathbf{v}_1'\right| = \left|\mathbf{v} - \mathbf{v}_1\right|$

- Nous avons le même angle solide (à un signe près) pour le processus inverse: $\Omega' = \Omega$
(voir le livre de K. Huang pour des détails concernant la symétrie entre processus direct et inverse)

- La transformation aux coordonnées du centre de masse est unitaire, ce qui implique:

$$d^3p\,d^3p_1 = d^3P\,d^3\tilde{p}$$

- Grâce aux lois de conservation $\mathbf{P} = \mathbf{P}'$, $\left|\tilde{\mathbf{p}}\right| = \left|\tilde{\mathbf{p}}'\right|$ nous avons:

$$d^3p\,d^3p_1 = d^3p'\,d^3p_1'$$

- Nous pouvons donc écrire:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{in} d^3r\,d^3p = \int d^3p_1 \int d\Omega \frac{d\sigma\left(\Omega, \left|\mathbf{p} - \mathbf{p}_1\right|\right)}{d\Omega} \left|\mathbf{v} - \mathbf{v}_1\right| f\left(\mathbf{p}'\right) f\left(\mathbf{p}_1'\right) d^3r\,d^3p$$

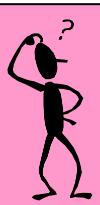
Equation de Boltzmann avec terme de collision

$$\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r},\mathbf{p},t) + \mathbf{F}(\mathbf{r})\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r},\mathbf{p},t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{in} - \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{out}$$

$$= \int d^3 p_1 \int d\Omega \left[f(\mathbf{r},\mathbf{p}',t)\, f(\mathbf{r},\mathbf{p}_1',t) - f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)\, f(\mathbf{r},\mathbf{p}_1,t)\right] \frac{d\sigma(\Omega,|\mathbf{p}-\mathbf{p}_1|)}{d\Omega}|\mathbf{v}-\mathbf{v}_1|$$

$\mathbf{p}', \mathbf{p}_1'$ sont de fonctions de $\mathbf{p}, \mathbf{p}_1$, obtenus à partir de l'équation du mouvement de la collision.



Cette équation est exacte sous les hypothèses d'un système à N-corps dilué: vrai ou faux?

Réfléchissez par exemple au cas d'un système de N sphères rigides