Physique statistique avancée II

Séance 6: Equation de Boltzmann dans les cas semi-classique et pour des collisions sur centres de diffusion

1. Expression généralisée du taux de collision et ses symétries
2. Equation de Boltzmann pour des fermions, régime stationnaire, théorème « H »
3. Equation de Boltzmann pour des bosons
4. Equation de Boltzmann pour collisions sur un centre de diffusion
5. Discussion

Références:

H. Haug, A.-P. Jauho, « Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors », (Springer, Berlin, 1998)

N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, « Solid State Physics », (HRW International Editions, Philadelphia, 1976)

Ryogo Kubo, « Statistical Mechanics », (North Holland, Amsterdam, 1978)

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

- Expression du terme de collision en fonction d'un taux de collision

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \int d^3p_2 d^3p'_1 d^3p'_2 \, w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2)\left[f(\mathbf{p}'_1) f(\mathbf{p}'_2) - f(\mathbf{p}_1) f(\mathbf{p}_2)\right]$$

où on omet d'indiquer la dépendance en t et en $\mathbf{r}$ pour alléger la notation

- Dans le cas de l'équation de Boltzmann classique le taux de collision s'écrit

$$w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) = \sigma\left(p, \cos^{-1}\left(\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{p}'}{pp'}\right)\right)\delta(\mathbf{P} - \mathbf{P}')\,\delta\left(p^2 - p'^2\right)$$

où nous avons utilisé le référentiel du centre de masse:

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \qquad \mathbf{p} = \frac{\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1}{2}$$

- w est le taux de collision. Ce formalisme est plus générale et peut être facilement étendu au cas quantique. Dans le cas de collision avec symétrie sphérique nous avons les propriétés de symétrie suivantes

$$w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) = w(\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_2, \mathbf{p}'_1) = w(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$$

Equation de Boltzmann semi-classique

$f\left(\mathbf{r},\mathbf{p},t\right)\Delta\mathbf{r}\Delta\mathbf{p}$: nombre de particules au temps t dans l'élément de volume $\Delta\mathbf{r}$, qui occupent un état $\left|\mathbf{k}\right\rangle$, avec $\mathbf{k}$ contenu dans un élément de volume $\Delta\mathbf{p}$ autour de $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$

- Problème: si une particule occupe un état à vecteur d'onde défini $\left|\mathbf{k}\right\rangle$, sa fonction d'onde est infiniment étendue en espace réel. Comment peut donc cette particule être localisé en un élément de volume $\Delta\mathbf{r}$?

- Ce paradoxe apparent est résolu si on considère des paquets d'onde. Pour un paquet d'onde, le principe d'indétermination de Heisenberg dit que

$$\delta^3 r\,\delta^3 p \geq \hbar^3$$

- Les éléments de volume dans l'espace de phase de l'équation de Boltzmann par contre sont défini au sens statistique et contiennent beaucoup de particules. On a donc

$$\Delta\mathbf{r}\Delta\mathbf{p} \gg \hbar^3$$

- Nous pouvons choisir la taille δr de nos paquets telle que $\delta^3 r \sim \Delta\mathbf{r}$

- L'éléments de volume $\Delta\mathbf{r}$ contient donc un grand nombre de paquets d'onde qui forment un quasi-continuum où chaque état a un élargissement en espace réciproque $\delta k \sim \delta r^{-1}$. Ces états peuvent donc être considérés comme ayant un vecteur d'onde $\mathbf{k}$ défini

- Le principe d'indétermination nous permet de choisir des paquets avec $\Delta\mathbf{p} \sim \hbar^3 / \Delta\mathbf{r}$

- Choisissons $\Delta\mathbf{p} = 8\pi^3\hbar^3 / \Delta\mathbf{r}$. Ce choix correspond à considérer le volume comme le volume de quantification pour les états de la particule. En d'autres mots, chaque état occupe un volume $\Delta\mathbf{p} = 8\pi^3\hbar^3 / \Delta\mathbf{r}$ dans l'espace des moments.

- La condition de normalisation pour un système uniforme implique

$$\sum_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r},\mathbf{p}) = n\Delta\mathbf{r}$$

avec n densité de particule. Nous pouvons écrire

$$n\Delta\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{p}} \frac{\Delta\mathbf{p}}{\Delta\mathbf{p}} f(\mathbf{r},\mathbf{p}) \rightarrow \frac{\Delta\mathbf{r}}{8\pi^3\hbar^3} \int d^3p\, f(\mathbf{r},\mathbf{p})$$

- Ceci définit la densité d'états. Pour moyenner une quantité $a(\mathbf{r},\mathbf{p})$ il faudra donc écrire

$$\langle a \rangle = \int \frac{d^3r d^3p}{8\pi^3\hbar^3} a(\mathbf{r},\mathbf{p})\, f(\mathbf{r},\mathbf{p})$$

Equation de Boltzmann pour des particules avec statistique de Fermi

- Le terme de dérive (de gauche) est identique au cas classique. Le terme de collision devient

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \int d^3p_2 d^3p_1' d^3p_2' \, w\left(\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_1',\mathbf{p}_2'\right)\times$$
$$\left[f\left(\mathbf{p}_1'\right) f\left(\mathbf{p}_2'\right)\left(1-f\left(\mathbf{p}_1\right)\right)\left(1-f\left(\mathbf{p}_2\right)\right) - f\left(\mathbf{p}_1\right) f\left(\mathbf{p}_2\right)\left(1-f\left(\mathbf{p}_1'\right)\right)\left(1-f\left(\mathbf{p}_2'\right)\right)\right]$$

- Le taux de collision s'obtient par la Règle d'or de Fermi, dite aussi « 1ère approximation de Born »

$$w\left(\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_1',\mathbf{p}_2'\right) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{2}\left|W_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\to\mathbf{p}_1'\mathbf{p}_2'} - W_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\to\mathbf{p}_2'\mathbf{p}_1'}\right|^2 \delta_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_1'+\mathbf{p}_2'}\,\delta\left(\varepsilon_{\mathbf{p}_1}+\varepsilon_{\mathbf{p}_2}-\varepsilon_{\mathbf{p}_1'}-\varepsilon_{\mathbf{p}_2'}\right)$$

où nous avons défini l'élément de matrice de l'Hamiltonien de collision

$$W_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\to\mathbf{p}_1'\mathbf{p}_2'} = \left\langle \mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2 \left| H_{coll} \right| \mathbf{p}_1',\mathbf{p}_2' \right\rangle$$

- Pour des particules de Fermi il faut satisfaire le principe de Pauli: pas plus qu'un électron par état, deux si on considère la dégénérescence de spin

- Intuitivement, si l'état final d'un processus de collision est déjà occupé, cette collision ne peut pas avoir lieu.

- Dans notre formalisme statistique, le facteur $(1-f)$ donne le nombre moyen d'états finaux qui sont encore disponibles pour la particule diffusée. Ce facteur est souvent appelé « facteur de blocage de Pauli » ou « terme de saturation ».

- Le flux « out » par exemple contient le terme

$$w(\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_1',\mathbf{p}_2')\,\underbrace{f(\mathbf{p}_1)\,f(\mathbf{p}_2)}\,\underbrace{(1-f(\mathbf{p}_1'))(1-f(\mathbf{p}_2'))}$$

Taux de collision

Nombre des paires de particules avec moments $\mathbf{p}_1$ et $\mathbf{p}_2$

Nombre des paires d'états finaux disponibles

- Dans la limite « non dégénéré » on a $f \ll 1$ et on retrouve le cas classique

- Notation abrégée: $f_j = f\left(\mathbf{r}, \mathbf{p}_j\right) \qquad f'_j = f\left(\mathbf{r}, \mathbf{p}'_j\right)$

- Cherchons la solution en régime stationnaire pour le cas uniforme en absence de forces extérieures. Comme pour le cas classique, une condition suffisante pour le régime stationnaire est l'annulation de l'intégrand dans le terme de collision

$$f'_1 f'_2 \left(1 - f_1\right)\left(1 - f_2\right) = f_1 f_2 \left(1 - f'_1\right)\left(1 - f'_2\right)$$

- On montrera que cette relation est aussi nécessaire à l'aide du théorème « H »

- Prenons le logarithme de cette relation

$$\ln f'_1 + \ln f'_2 + \ln\left(1 - f_1\right) + \ln\left(1 - f_2\right) = \ln f_1 + \ln f_2 + \ln\left(1 - f'_1\right) + \ln\left(1 - f'_2\right)$$

En regroupant les termes nous avons

$$\ln \frac{f'_1}{1 - f'_1} + \ln \frac{f'_2}{1 - f'_2} = \ln \frac{f_1}{1 - f_1} + \ln \frac{f_2}{1 - f_2}$$

- Etant donné les invariants pour le cas d'une collision élastique, la forme plus générale de la distribution est donnée par

$$\frac{f}{1-f} = A\exp\left(\mathbf{b}\cdot\mathbf{p} + C\varepsilon_p\right)$$

où ε_p est l'énergie d'un électron en fonction de son moment p. Pour des électrons libres $\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}$

- Nous introduisons les définitions suivantes pour le potentiel chimique μ et la température T

$$A = \frac{\mu}{k_B T} \qquad C = \frac{1}{k_B T}$$

- Nous obtenons comme résultat la distribution de Fermi-Dirac, qui caractérise les fermions

$$f\left(\mathbf{p}\right) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_p - \mathbf{b}\cdot\mathbf{p} - \mu}{k_B T}\right) + 1}$$

- Comme pour Maxwell-Boltzmann, nous pouvons choisir le référentiel de manière à avoir $\mathbf{b} = 0$

- Nous pouvons démontrer le théorème « H » comme dans le cas classique. Nous pouvons définir

$$H(t) = \int d^3p \left[f(\mathbf{p},t) \ln f(\mathbf{p},t) + \big(1 - f(\mathbf{p},t)\big) \ln\big(1 - f(\mathbf{p},t)\big) \right]$$

- On peut démontrer que, si f satisfait l'équation de Boltzmann pour des particules de Fermi,

$$\frac{dH(t)}{dt} \leq 0$$

- En utilisant l'équation de Boltzmann nous obtenons

$$\begin{aligned}
\frac{dH(t)}{dt} &= \int d^3p \frac{\partial f}{\partial t}\big(\ln f - \ln(1-f) + 2\big) \\
&= \int d^3p \frac{\partial f}{\partial t} \ln \frac{f}{1-f} \\
&= \int d^3p d^3p' d^3p_1 d^3p_1' w \left[f' f_1' (1-f)(1-f_1) - f f_1 (1-f')(1-f_1') \right] \ln \frac{f}{1-f}
\end{aligned}$$

- La symétrie du taux de collision nous permet de remplacer

$$\ln\frac{f}{1-f}\to\frac{1}{4}\left[\ln\frac{f}{1-f}+\ln\frac{f_1}{1-f_1}-\ln\frac{f'}{1-f'}-\ln\frac{f_1'}{1-f_1'}+\right]$$

$$=\frac{1}{4}\ln\left(\frac{f\,f_1\left(1-f'\right)\left(1-f_1'\right)}{f'\,f_1'\left(1-f\right)\left(1-f_1\right)}\right)$$

- Comme dans le cas classique nous obtenons un intégrand de la forme

$$\left(y-x\right)\ln\frac{x}{y}\le 0$$

ce qui démontre le théorème « H » dans le cas de particules de Fermi

- Ce théorème montre aussi que le terme de collision dans l'équation de Boltzmann s'annule seulement si l'intégrand est nul, comme dans le cas classique.

- Terme de collision pour les particules de Bose.

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \int d^3p_2 d^3p_1' d^3p_2'\, w\left(\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_1',\mathbf{p}_2'\right)\times$$
$$\left[f\left(\mathbf{p}_1'\right) f\left(\mathbf{p}_2'\right)\left(1+f\left(\mathbf{p}_1\right)\right)\left(1+f\left(\mathbf{p}_2\right)\right) - f\left(\mathbf{p}_1\right) f\left(\mathbf{p}_2\right)\left(1+f\left(\mathbf{p}_1'\right)\right)\left(1+f\left(\mathbf{p}_2'\right)\right)\right]$$

- Comme pour les fermions, si $f \ll 1$ on retrouve le résultat classique non dégénéré

- Le terme de collision contient des facteurs de « stimulation par l'état final ». Pour $f \gg 1$ nous avons une augmentation des processus de diffusion. Cette « stimulation » est typique des Bosons. Elle est à la base du phénomène de la condensation de Bose-Einstein. La découverte de la condensation de Bose-Einstein d'un gaz d'atomes dilué a donné lieu à un prix Nobel en 1999 (voir http://www.nobel.se)

- Le mêmes arguments que pour les fermions s'appliquent. La distribution à l'équilibre est la distribution de Bose-Einstein:

$$f\left(\mathbf{p}\right) = \frac{1}{\exp\left(\dfrac{\varepsilon_p - \mathbf{b}\cdot\mathbf{p} - \mu}{k_B T}\right) - 1}$$

Approximation de temps de relaxation dans le cas semi-classique

- La procédure de linéarisation de l'équation de Boltzmann peut être effectuée comme pour le cas classique. Le mêmes arguments montrent que pour des petites déviations de la distribution à l'équilibre local, l'approximation de temps de relaxation est valable.

$$\frac{\partial f\left(\mathbf{r},\mathbf{p},t\right)}{\partial t}+\frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}} f\left(\mathbf{r},\mathbf{p},t\right)+\mathbf{F}\left(\mathbf{r}\right)\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f\left(\mathbf{r},\mathbf{p},t\right)=-\frac{f\left(\mathbf{r},\mathbf{p},t\right)-f_0\left(\mathbf{r},\mathbf{p}\right)}{\tau}$$

- La différence par rapport au cas classique est contenue dans le modèle microscopique pour le temps de relaxation τ et surtout dans la forme de la distribution d'équilibre local $f_0\left(\mathbf{r},\mathbf{p}\right)$

- La distribution d'équilibre local sera donné par la distribution de Fermi-Dirac ou de Bose-Einstein pour les cas de particules de Fermi ou de Bose respectivement. L'équilibre local est exprimé par la dépendance des paramètres T et μ de la position $\mathbf{r}$ et de la quantité de mouvement $\mathbf{p}$

Terme de droite pour le cas de collision sur des centres de diffusion (impuretés, défauts)

- Peut-on écrire une équation de Boltzmann pour des collisions sur des centres de diffusion? Un exemple physique serait les électrons dans un métal qui sont intéressé principalement par des diffusions sur impuretés et défauts.

- Le terme de droite de l'équation de Boltzmann décrit des particules non interagissantes et reste le même. Le terme de collision est encore composé d'un terme « in » et un terme « out »:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = -n_D \int d^3 p' \left[w(\mathbf{p},\mathbf{p}') f(\mathbf{p}) - w(\mathbf{p}',\mathbf{p}) f(\mathbf{p}') \right]$$

- Le noyau $w(\mathbf{p},\mathbf{p}')$ représente le taux de diffusion pour le processus $\mathbf{p} \to \mathbf{p}'$

- En générale on n'a PAS $w(\mathbf{p},\mathbf{p}') = w(\mathbf{p}',\mathbf{p})$

- Dans les cas semi-classiques des particules de Fermi et de Bose nous pouvons écrire

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = -n_D \int d^3p' \left[w(\mathbf{p},\mathbf{p}')\, f(\mathbf{p})\left(1 \mp f(\mathbf{p}')\right) - w(\mathbf{p}',\mathbf{p})\, f(\mathbf{p}')\left(1 \mp f(\mathbf{p})\right) \right]$$

où le signe « - » vaut pour les particules de Fermi et le signe « + » pour les particules de Bose

- Pour une collision en approximation de Born (règle d'or de Fermi), nous avons

$$w(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \mathbf{p} | H_{coll} | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 \delta\left(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'}\right)$$

Dans ce cas nous avons la propriété de symétrie $w(\mathbf{p},\mathbf{p}') = w(\mathbf{p}',\mathbf{p})$ et

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = -n_D \int d^3p'\, w(\mathbf{p},\mathbf{p}')\left(f(\mathbf{p}) - f(\mathbf{p}')\right)$$

Les termes de saturation et de stimulation, dans les cas de Fermi et de Bose respectivement, s'annulent et la forme du terme de collision est la même que pour un système de particules classiques.