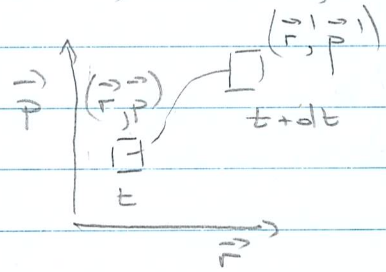
2.2) Modelo de Boltzmann-Lorentz

2.2.1) Evolução de $f(\vec r, \vec p, t)$



$$f(\vec r(t+dt), \vec p(t+dt), t+dt)\, d^3r'\, d^3p' = f(\vec r, \vec p, t)\, d^3r\, d^3p$$

Teorema de Liouville: $d^3r'\, d^3p' = d^3r\, d^3p$.

$$\Rightarrow \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{d\vec r}{dt}\cdot \vec\nabla_r f + \frac{d\vec p}{dt}\cdot\vec\nabla_p f =$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec v \cdot \vec\nabla_r f + \vec F \cdot \vec\nabla_p f = 0 \qquad (2.2.1)$$

$D \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \vec v \cdot \vec\nabla_r + \dot{\vec p}\cdot\vec\nabla_p$ é a derivada material (ou convectiva) no espaço de fase.

Na eq. (2.2.1) $\nexists$ interações entre as partículas. Caso $\exists$ colisões:

Termo de colisão

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec v \cdot \vec\nabla_r f + \vec F \cdot \vec\nabla_p f = \mathcal{C}[f]$$

onde $\mathcal{C}[f]$ é um funcional de $f(\vec r, \vec p, t)$ e descreve os efeitos de espalhamento $\vec p \to \vec p'$ e $\vec p' \to \vec p$.

Na aproximação que ora usamos: $\delta\tau \ll \Delta t \ll \tau^*$

Unidades de $\mathcal{C}[f]$: inverso de volume no espaço de fase / tempo $\Rightarrow [\mathcal{C}] = \frac{1}{L^3 p^3 t}$

2.2.2) Modelo de Boltzmann-Lorentz

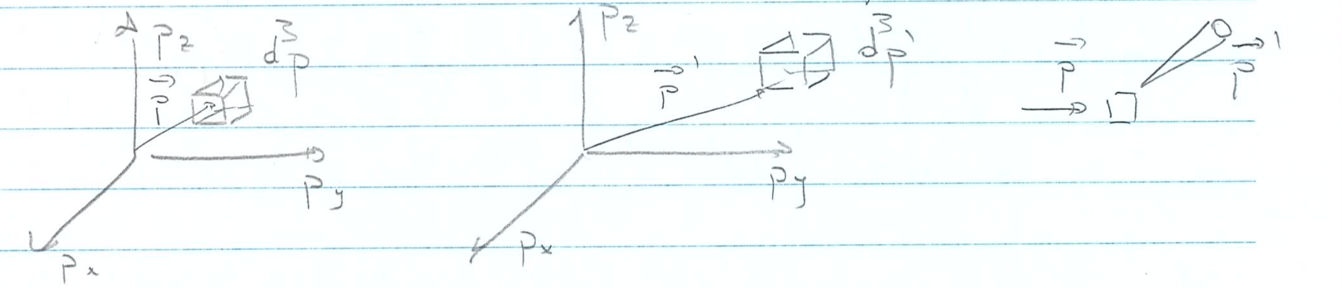
Centros espalhadores fixos.

- elétrons e buracos em semicondutores
- difusão de impurezas em sólidos
- " de neutrons num moderador.

Na ausência de forças externas, $\vec{F}=0$;

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}\cdot\vec{\nabla}_r f = \mathcal{C}[f] = -\mathcal{C}_-[f] + \mathcal{C}_+[f]$$

$$\mathcal{C}[f] = -\int f(\vec{r},\vec{p},t)\, W(\vec{p}\to\vec{p}\,')\, d^3p' + \int f(\vec{r},\vec{p}\,',t)\, W(\vec{p}\,'\to\vec{p})\, d^3p'$$



$W(\vec{p}\to\vec{p}\,')\, d^3p'$ = # de partículas espalhadas em d^3p' / tempo.vol $\quad W(\vec{p}\to\vec{p}\,') = W(p,\Omega')$

$$\Rightarrow \int W(\vec{p}\to\vec{p}\,')\, d^3p' = \int \underbrace{W(p,\Omega')\, p'^2 dp'}_{n_d v\, \sigma(v,\Omega')}\, d\Omega' = \frac{1}{\tau^*}$$

$$\Rightarrow \underbrace{\int W(p,\Omega')\, p'^2 dp'}_{} = n_d v\, \sigma(v,\Omega')$$

$$\int \tilde{w}(p,\Omega')\, \delta(\epsilon-\epsilon')\, p'^2 dp' = \int \tilde{w}(p,\Omega')\, \delta\left(\frac{p^2}{2m}-\frac{p'^2}{2m}\right) p'^2 dp'$$

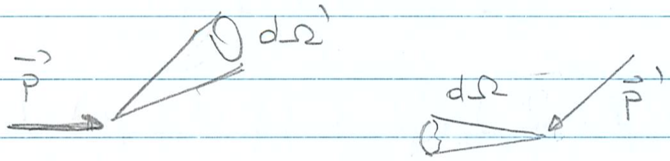
$$= \int \tilde{w}(p,\Omega')\, \delta\left(\frac{p}{m}(p-p')\right) p'^2 dp' = \int \tilde{w}(p,\Omega')\, \frac{m}{p}\, \delta(p-p')\, p'^2 dp'$$

$$\Rightarrow \tilde{w}(p,\Omega')\, m p = n_d\, \sigma(v,\Omega')\, v$$

$$\Rightarrow \tilde{w}(p,\Omega') = \frac{n_d}{m^2}\, \sigma(v,\Omega')$$

$$\Rightarrow w(p,\Omega')\, d^3p' = \frac{n_d}{m^2}\, \sigma(v,\Omega')\, \delta(\epsilon-\epsilon')\, d^3p' \to n_d\, v\, \sigma(v,\Omega')\, d\Omega'$$

Mas $w(p,\Omega') = w(p',\Omega)$



$$\Rightarrow \mathscr{C}[f] = \int d^3p' \left[f(\vec{r},\vec{p}\,',t) - f(\vec{r},\vec{p},t) \right] w(p,\Omega')$$

$$= v\, n_d \int d\Omega' \left[f' - f \right] \sigma(v,\Omega')$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}\cdot\vec{\nabla}_r f = v\, n_d \int d\Omega' \left[f(\vec{r},\vec{p}\,',t) - f(\vec{r},\vec{p},t) \right] \sigma(v,\Omega')$$

2.2.3) Leis de Conservação:

Vamos definir $I[\chi] = \int d^3p\, \chi(\vec{r},\vec{p})\, \mathscr{C}[f]$

Queremos mostrar que:

Se $\chi = \chi(\vec{r},p) \Rightarrow I[\chi] = 0$

$$I[\chi] = \iint d^3p\, d^3p'\, \chi(\vec{r},\vec{p})\, w(p,\Omega')\, [f' - f]$$

$\vec{p} \leftrightarrow \vec{p}\,'$

$$I[\chi] = -\iint d^3p\, d^3p'\, \chi(\vec{r},\vec{p}\,')\, w(p',\Omega)\, [f' - f]$$

Mas $w(p, \Omega') = w(p', \Omega)$

$$\Rightarrow I[\chi] = \frac{1}{2} \iint d^3p \, d^3p' \, [\chi(\vec{r}, \vec{p}) - \chi(\vec{r}, \vec{p}')] \, w(p, \Omega') \, [f' - f]$$

como $p = p'$, se $\chi = \chi(\vec{r}, p)$ Temos $I[\chi] = 0$

Em particular se $\chi = 1 \Rightarrow \int d^3p \, \mathcal{C}[f] = 0$

se $\chi = \epsilon(\vec{p}) = \frac{p^2}{2m}$; $\int d^3p \, \epsilon(p) \, \mathcal{C}[f] = 0$

Mas, $\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f = \mathcal{C}[f]$ $\left(\int d^3p \right)$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \int d^3p \, f + \int d^3p \, \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f = \int d^3p \, \mathcal{C}[f]$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla}_r \cdot \int d^3p \, \vec{v} f = 0 \quad \Rightarrow \vec{J}_N = \int d^3p \, \vec{v} f$$

Temos $\boxed{\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla}_r \cdot \vec{J}_N = 0}$

Temos Também

$$\epsilon(\vec{p}) \frac{\partial f}{\partial t} + \epsilon(\vec{p}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f = \epsilon(\vec{p}) \, \mathcal{C}[f] \quad \left(\int d^3p \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3p \, \epsilon(p) f + \vec{\nabla}_r \cdot \int d^3p \, \epsilon(\vec{p}) \vec{v} f = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \epsilon + \vec{\nabla}_r \cdot \int d^3p \, \epsilon(\vec{p}) \vec{v} f = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \vec{\nabla}_r \cdot \vec{J}_E = 0 \qquad \epsilon = \int \epsilon(\vec{p}) f \, d^3p$$

$$\vec{J}_E = \int d^3p \, \epsilon(\vec{p}) \vec{v} f$$

2.2.4) Linearização: Chapman-Enskog

se f é isotrópica em $\vec{p} \Rightarrow f' = f$ e $\mathcal{C} = 0$

Caso particular: $f_0(\vec{r}, \vec{p}, t) = \frac{1}{h^3} \exp\left\{ \alpha(\vec{r}, t) - \beta(\vec{r}, t) \frac{p^2}{2m} \right\}$

$\equiv f_0(\vec{r}, p, t)$

$\beta(\vec{r}, t) = \frac{1}{k_B T(\vec{r}, t)}$ e $\alpha(\vec{r}, t) = \frac{\mu(\vec{r}, t)}{k_B T(\vec{r}, t)}$

Se $f' - f$ não é pequeno $\Rightarrow \mathcal{C} \propto \frac{f}{\tau^*}$ $\tau^* \sim 10^{-10} - 10^{-14}\,s$

$\Rightarrow f$ relaxa segundo e^{-t/τ^*} para uma distribuição de quase equilíbrio se $t \gtrsim \tau^*$. Termo de colisão praticamente responsável por apenas esta evolução

Se $t \gtrsim \tau^*$; $\mathcal{C}$ é pequeno ($= 0$ p/ f_0), e evolução temporal é hidrodinâmica que pode-se analisar linearizando f; $f = f_0 + \bar{f}$ em $t = 0$

Equilíbrio local deve obedecer:

$$n(\vec{r}, t=0) = \int d^3p \; f_0(\vec{r}, \vec{p}, t=0)$$

$$\epsilon(\vec{r}, t=0) = \int d^3p \; \frac{p^2}{2m} f_0(\vec{r}, \vec{p}, t=0)$$

Densidades determinam $\alpha(\vec{r})$ e $\beta(\vec{r})$

$$\Rightarrow \; n(\vec{r}) = \frac{1}{h^3} e^{\alpha(\vec{r})} \left(\frac{2\pi m}{\beta(\vec{r})}\right)^{3/2} \quad \text{e} \quad \epsilon(\vec{r}) = \frac{3}{2\beta(\vec{r})} n(\vec{r})$$

Por construção $\int d^3p\, \bar{f} = \int d^3p \frac{p^2}{2m} \bar{f} = 0$ (condição inicial de $\bar{f}(\vec{r},\vec{p},t)$)

f_0 é isotrópica $\Rightarrow$ não contribui p/ correntes.

$$\Rightarrow \; \vec{J}_N = \int d^3p\, \vec{v}\, \bar{f} \quad \text{e} \quad \vec{J}_E = \int d^3p\, \vec{v} \frac{p^2}{2m} \bar{f}$$

Como $\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{J}_N = 0$ e $\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{J}_E = 0$

e em 1ª ordem em f_0 $\vec{J}_N = \vec{J}_E = 0$ assim o são

$\frac{\partial n}{\partial t}$ e $\frac{\partial \epsilon}{\partial t}$. Temos também $\mathcal{C}[f_0] = 0$ mas

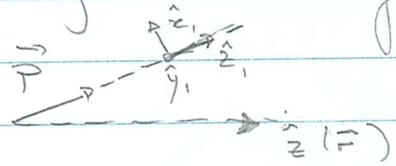
$(\vec{v}\cdot\vec{\nabla}) f_0 \neq 0 \;\Rightarrow\; (\vec{v}\cdot\vec{\nabla}) f_0 = \mathcal{C}[\bar{f}]$

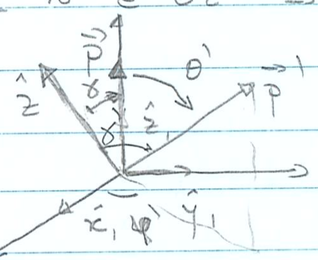
Como $\mathcal{C}[\bar{f}] \approx \bar{f}/\tau^*$ temos $\bar{f} \approx \tau^* (\vec{v}\cdot\vec{\nabla}) f_0$

Cálculo de $\mathcal{C}[\bar{f}]$

Em $\vec{r}$ $\vec{\nabla} f_0$ é tal que $\vec{\nabla} f_0 = \hat{z} \frac{\partial f_0}{\partial z}$

Seja γ o ângulo entre $\vec{v}$ e Oz $\Rightarrow (\vec{v}\cdot\vec{\nabla}) f_0 = v \cos\gamma \frac{\partial f_0}{\partial z}$





$\hat{p}' = \sin\theta' \cos\varphi' \hat{x}_1 + \sin\theta' \sin\varphi' \hat{y}_1 + \cos\theta' \hat{z}_1$, $\hat{z}\cdot\hat{p} = \cos\gamma_1$ e $\hat{z}\cdot\hat{p}'_1 = \cos\gamma'$

$$\mathcal{C}[\bar{f}] = v n_d \int d\Omega' \, \sigma(v,\Omega') \left[\bar{f}(\vec{r},\vec{p}\,') - \bar{f}(\vec{r},\vec{p}) \right]$$

$\bar{f}(\vec{r},\vec{p}\,') = g(z,p) \cos\gamma'$ (hipótese)

$\cos\gamma' = \cos\theta' \cos\gamma + \sin\theta' \sin\gamma \cos\varphi'$ $\quad d\Omega' = d(\cos\theta')\, d\varphi'$

$\sigma(v,\Omega') = \sigma(v,\theta')$ (só pode depender de φ p/ partículas polarizadas)

$$\mathcal{C}[\bar{f}] = v n_d \, g(z,p) \int d\varphi' \, d(\cos\theta') \left[\cos\theta' \cos\gamma + \sin\theta' \sin\gamma \cos\varphi' - \cos\gamma \right] \sigma(v,\Omega')$$

$$= - v n_d \, g(z,p) \cos\gamma \underbrace{\int d\Omega' \, (1-\cos\theta')\, \sigma(v,\Omega')}_{\equiv \sigma_{tr}(v)}$$

$$\mathcal{C}[\bar{f}] = - v n_d \, g(z,p) \cos\gamma \, \sigma_{tr} = v \cos\gamma \frac{\partial f_0}{\partial z}$$

$$\Rightarrow g(z,p) = -\frac{1}{n_d \sigma_{tr}(v)} \frac{\partial f_0}{\partial z}$$

$$\Rightarrow \bar{f} = -\frac{1}{n_d \sigma_{tr}(v)} \cos\gamma \frac{\partial f_0}{\partial z}$$

$$\bar{f} = -\frac{1}{n_d \sigma_{tr}(v)\, v} (\vec{v}\cdot\vec{\nabla}) f_0 = -\tau^*_{tr}(p) (\vec{v}\cdot\vec{\nabla}) f_0$$

$\tau^*_{tr}(p) = \dfrac{1}{n_d v \sigma_{tr}(v)}$; $\tau^*_{tr} \neq \tau^*$ porque $\sigma_{tr}(v) \neq \sigma_{tot}(v)$

se $\sigma(v,\theta') = \sigma(v)$ $\Rightarrow \tau^*_{tr} = \tau^*$

Vamos usar que $\vec{J}_N = \int d^3p\, \vec{v}\, f$ e $\vec{J}_E = \int d^3p\, \vec{v}\, \frac{p^2}{2m} f$

$$\Rightarrow \vec{J}_N = -\int d^3p\, \tau^*(p)\, \vec{v}\,(\vec{v}\cdot\vec{\nabla}) f_0$$

$$\vec{J}_E = -\int d^3p\, \tau^*(p)\, \epsilon(p)\, \vec{v}\,(\vec{v}\cdot\vec{\nabla}) f_0$$

Usando que $\int d^3p\, v_\alpha v_\beta\, g(p) = \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}\int d^3p\, v^2 g(p)$

$$\vec{J}_N = -\frac{1}{3}\int d^3p\, v^2 \tau^*(p)\, \vec{\nabla} f_0$$

$$\vec{J}_E = -\frac{1}{3}\int d^3p\, v^2 \tau^*(p)\, \epsilon(p)\, \vec{\nabla} f_0$$

$$\vec{J}_N = \frac{1}{3k_B}\int d^3p\, v^2 \tau^*(p)\left[\vec{\nabla}\left(-\frac{\mu}{T}\right) + \epsilon(p)\,\vec{\nabla}\left(\frac{1}{T}\right)\right] f_0$$

$$\vec{J}_E = \frac{1}{3k_B}\int d^3p\, v^2 \tau^*(p)\, \epsilon(p)\left[\vec{\nabla}\left(-\frac{\mu}{T}\right) + \epsilon(p)\,\vec{\nabla}\left(\frac{1}{T}\right)\right] f_0$$

$$\Rightarrow L_{NN} = \frac{1}{3k_B}\int d^3p\, v^2 \tau^*(p) f_0$$

$$L_{EN} = L_{NE} = \frac{1}{3k_B}\int d^3p\, v^2 \tau^*(p)\, \epsilon(p) f_0 \qquad \text{(Onsager)}$$

$$L_{EE} = \frac{1}{3k_B}\int d^3p\, v^2 \tau^*(p)\, \epsilon^2(p) f_0$$

Fazendo $\tau^*(p) = \frac{ml}{p} = \frac{l}{v}$ e definindo $\tau^* = \frac{8}{3\pi}\frac{l}{\langle v\rangle}$

Tem-se

$$L_{NN} = \frac{\tau^*}{m} n T \qquad L_{EN} = \frac{2\tau^*}{m} n k_B T^2 \qquad L_{EE} = \frac{6\tau^*}{m} n k_B^2 T^3$$

Combinando com $L_N^{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} D T k_T n^2$

$$k_T = \frac{1}{T^2 L_{NN}} \left(L_{EE} L_{NN} - L_{EN}^2 \right) \quad e \quad \sigma_{el} = \frac{q^2}{T} L_{NN}$$

Temos : $D = \frac{\tau^*}{m} k_B T$; $\sigma_{el} = \frac{n q^2 \tau^*}{m}$; $k_T = \frac{2\tau^*}{m} n k_B^2 T$

Lei de Franz-Wiedeman : $\frac{k_T}{\sigma_{el}} = 2 \frac{k_B^2}{q^2} T \sim 1.5 \times 10^{-8} T$

obedecida p/ semicondutores

Para metais $f_0 = \frac{2}{h^3} \frac{1}{\exp[-\alpha + \beta p^2/2m] + 1}$

$$\Rightarrow \frac{k_T}{\sigma_{el}} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{q^2} T \sim 2.5 \times 10^{-8} T$$

Problemas: $\begin{cases} 6.5.1 \text{ e } 6.5.3 \\ 8.6.5 \text{ e } 8.6.6 \end{cases}$