TEORÍA DE TRANSPORTE

· Vamos a estudiar problemas cinéticos, en los que interviene el tiempo.

· Históricamente se formuló antes que la mecánica estadística. Se formuló, de hecho, a la vez que la termodinámica.

· Trabajamos con el formalismo de Boltzman.

1- FORMULACIÓN

· Trabajamos a:

· Temperaturas altas (no dominado por os efectos cuánticos)

· Densidades bajas

para que la extensión del paquete de ondas sea mucho menor que la distancia intermolecular y poder emplear un planteamiento "clásico":

$$\Lambda << d$$

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2\pi m KT}} \cdot \left(\frac{N}{V}\right)^{3} << 1$$

La distancia entre partículas

HIPÓTESIS:

1). Esto se traduce en que cada partícula tiene posición y momento bien definidos.

2). Asimismo, como partículas clásicas son distinguibles

3). La interacción, sólo por colisión, se define a través de la sección eficaz $\sigma(R)$

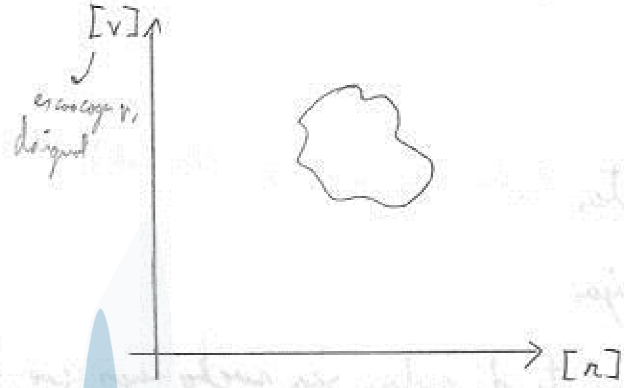
4). Choques elásticos (puedes identificarlos)

· Buscamos una función de distribución:

$$f = f(\vec{r}, \vec{v}, t)$$ (su equivalencia con la función de partición es inmediata)

no estamos interesados en cada partícula porque harían falta $\sim 10^{23}$ ecuaciones diferenciales acopladas

· Nuestro sistema estará en un espacio fásico $\vec{r}, \vec{v}$. Ahí, ocupará un volumen.



Dentro del volumen están todas las partículas cuyas coordenadas $(\vec{r}, \vec{v})$ están comprendidas dentro de los límites del volumen

debido a las variaciones de posición y velocidad, el volumen variará con el tiempo.

· Tras un tiempo δt:

$$\vec{r} \longrightarrow \vec{r}\,' = \vec{r} + \vec{v}\,\delta t$$

$$\vec{v} \longrightarrow \vec{v}\,' = \vec{v} + \frac{F}{m}\,\delta t$$

$$t \longrightarrow t' = t + \delta t$$

y la nueva función de distribución es diferente:

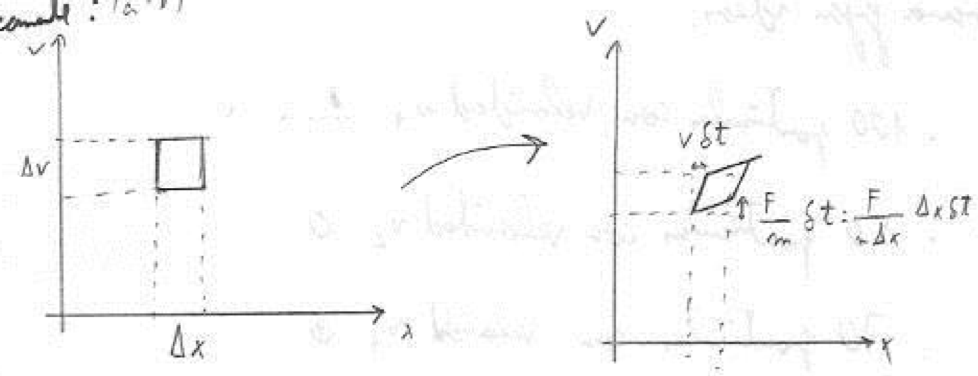
$$f(\vec{r}\,', \vec{v}\,', t+\delta t)\,\underbrace{d\vec{r}\,' d\vec{v}\,'}_{\text{Al mismo tiempo estoy incluyendo el volumen}}$$

· Como el número de partículas no varía:

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t)\,d^3r\,d^3v = f(\vec{r}\,', \vec{v}\,', t+\delta t)\,d^3r'\,d^3v'$$

· Ahora bien, $d^3r\,d^3v = d^3r'\,d^3v'$ (conectario pedante: el movimiento es una transformación canónica)

Veámoslo gráficamente: (a'')



y haciendo geométrico sería $d^3r\,d^3v = d^3r'\,d^3v'$

por tanto:
$$f(\vec{r}', \vec{v}', t+\delta t) = f(\vec{r}, \vec{v}, t)$$

pero
$$f(\vec{r}', \vec{v}', t+\delta t) = f(\vec{r}, \vec{v}, t) + \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial r}\vec{v} + \frac{\vec{F}}{m}\frac{\partial f}{\partial v}\right)\delta t$$

por tanto:
$$\boxed{\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}\,\nabla_r + \frac{\vec{F}}{m}\nabla_v\right) f = 0}$$ (ecuación de Vlasov)

· Donde $\vec{F}$ es una fuerza externa. Si quisiéramos tener en cuenta las colisiones, habría que introducirlo como $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col.}\delta t$ (la variación de la función de distribución por las colisiones).

$$\boxed{\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}\,\nabla_r + \frac{\vec{F}}{m}\nabla_v\right) f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col.}}$$

· Vamos a ver qué es el término integral:

2- ECUACIÓN DE BOLTZMAN

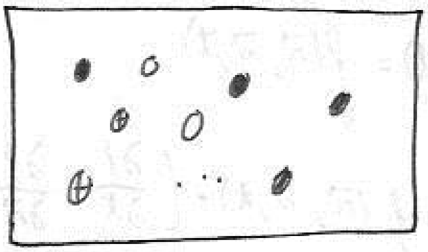
. Consideremos, para fijar ideas:

. 100 partículas con velocidad v_1 •

. 50 partículas con velocidad v_2 o

. 70 partículas con velocidad v_3 ⊕

...



al colisionar:

- Cualquier partícula con $v \neq v_1$, con otra con $v = v_1$, la segunda partícula deja de tener v_1

- Al colisionar, puede haber partículas con velocidad $\neq v_1$ que adquieran velocidad v_1

además

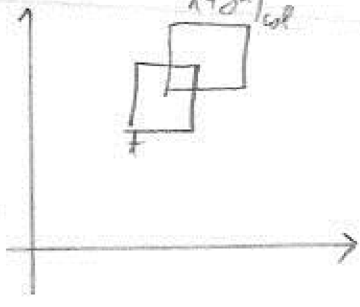
nº de partículas sin velocidad v_1 porque al colisionar adquiere velocidad v_1

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col.} \delta t = (\bar{R} - R)\, \delta t$$

nº de partículas con velocidad v_1 que tras colisionar adquieren otra velocidad

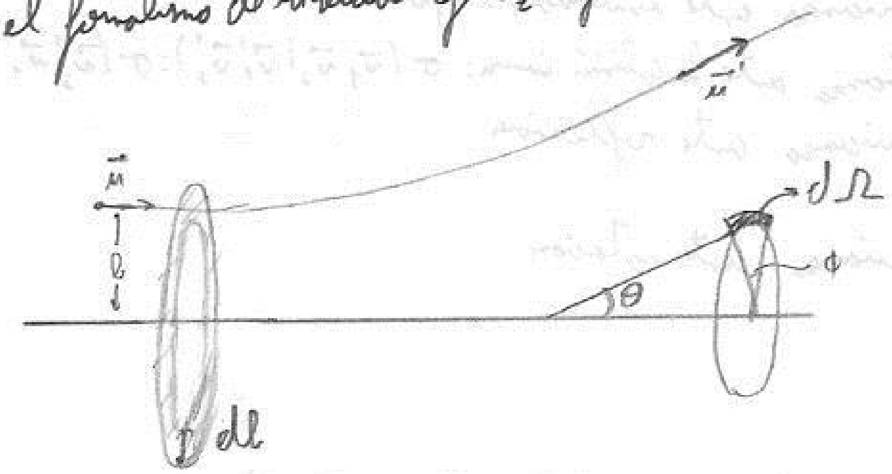
(esto sucede para todas las velocidades)

gráficamente:



· Hallamos $\bar{R} - R$ para colisiones binarias. Esto es válido para densidades no excesivamente altas

· Empleamos el formalismo de la sección eficaz diferencial (véase Goldstein):



(dibujo esto en velocidades relativas)

$$(\vec{v}_1, \vec{v}_2) \longrightarrow (\vec{v}_1{}', \vec{v}_2{}')$$

definido: $\vec{V} = \frac{1}{2}(\vec{v}_1 + \vec{v}_2)$

$$\vec{V}' = \frac{1}{2}(\vec{v}_1{}' + \vec{v}_2{}')$$

Se ve que:

$\vec{V} = \vec{V}'$ $\quad d\vec{V}\, d\vec{u} = d^3V'\, d^3u' = dv_1\, dv_2 = dv_1'\, dv_2'$

$|\vec{u}| = |\vec{u}'|$

- El flujo completo por ángulo sólido vale:

$$I \underbrace{\sigma(\Omega)}\, d\Omega$$

Sección eficaz ≡ superficie que debe atravesar una partícula incidente para deflectarse dentro de un ángulo sólido Ω

- Las secciones eficaces se obtienen por cálculos mecanocuánticos.

- Mirando el dibujo:

$$I\, \sigma(\Omega)\, d\Omega = I\, b\, db\, d\phi$$

Las secciones eficaces tienen 3 propiedades importantes de simetría:

· Invarianza ante inversiones temporales

· Invarianza ante la colisión inversa: $\sigma(\underbrace{\vec{v}_1\,\vec{v}_2}_{\text{Entra}}\,|\,\underbrace{\vec{v}_1'\,\vec{v}_2'}_{\text{Sale}}) = \sigma(\vec{v}_2'\,\vec{v}_1'\,|\,\vec{v}_2\,\vec{v}_1)$

· Invarianza ante reflexiones

· Invarianza ante rotaciones

. Si suponemos que:

· Las fuerzas externas no modifican la sección eficaz

· No hay correlación entre velocidades y posición (caos molecular)

Esto parece anular la posibilidad de fluidos que se mueven:

Sin embargo, este perfil es la velocidad de conjunto. Para cada franja de fluido, hay una distribución aleatoria de velocidades debido a la agitación.

podemos calcular $\bar{R}$ y R:

- El número de colisiones (entre $\vec{v}_1$ y $\vec{v}_2$) viene dado por:

$$\left(\int f(\vec{r},\vec{v}_1,t)\,d^3v_1\right)\left(\int f(\vec{r},\vec{v}_2,t)\,d^3v_2\right)$$ → No existe demostración, aunque coincide con el experimento

- Para calcular $\bar{R}$ y R:

· N° de partículas con velocidad cualquiera que colisionan con aquellas de $\vec{v}_1$:

$$I\sigma(\Omega)d\Omega = \int d^3v_2\, f(\vec{r},v_2,t)\,|\vec{v}_1-\vec{v}_2|\underbrace{\sigma(\Omega)\,d\Omega}_{\text{Área del blanco del choque}}\,\delta t$$

(Se ha aplicado el cálculo de [illegible] del cilindro de altura $|\vec{v}_1-\vec{v}_2|dt$ para flujo) así

$$R = \Big[\underbrace{\iint d^3v_2\, f(r,v_2,t)\,|\vec{v}_1-\vec{v}_2|\,\sigma(\Omega)\,d\Omega}_{\text{partículas que colisionan}}\Big]\underbrace{f(r,v_1,t)}_{\substack{\text{Densidad de partículas}\\ \text{con velocidad } v_1}}$$

. $\bar{R}$ sale con el mismo razonamiento: calculamos el número de partículas con velocidad $\vec{v}_2'$ que colisionan con aquellas con velocidad $\vec{v}_1'$ (aprovechamos la invariancia de σ ante colisión inversa):

$$\bar{R}\, d^3v_1' = \Big(\int d^3v_2'\, f(r,v_2',t)\underbrace{|\vec{v}_2'-\vec{v}_1'|}_{|\vec{u}'|=|\vec{u}|}\overbrace{\sigma'(\Omega)}^{=\sigma(\Omega)}d\Omega\Big)\, f(r,\vec{v}_1',t)\, d^3v_1'$$

. Para ahorrar bolígrafo, denotamos:

$$f(r,v_1,t) = f_1$$

$$f(r,v_1',t) = f_1'$$

$$\dots$$

y con $d^3v_2' d^3v_1' = d^3v_2 d^3v_1$; se sustituye y:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col.} = \int d^3v_2\, \sigma(\Omega)\, d\Omega\, |\vec{v}_1-\vec{v}_2|\,(f_1' f_2' - f_1 f_2)$$

así

Si hay correlación, esto se complica

$$\boxed{\mathcal{D}f = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}\,\nabla_r + \frac{\vec{F}}{m}\nabla_v\right) f_1 = \int d^3v_2\, \sigma(\Omega)\, d\Omega\, |\vec{v}_1-\vec{v}_2|\,(f_1' f_2' - f_1 f_2)}$$

(Ecuación de Boltzmann)

Una ecuación integro-diferencial no lineal

TEOREMA H DE BOLTZMANN

· Es una demostración rigurosa del aumento de la entropía con el tiempo.

· Trabajamos con una distribución de equilibrio:

$$\lim_{t\to\infty} f(\vec{r},\vec{v},t)$$

en sistemas aislados $\Rightarrow \vec{F}=0$

→ en equilibrio, hay homogeneidad

· En equilibrio, $\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{eq}=0$. Denotamos a f_{eq} como $f_0 = f_0(\vec{v})$

$$\Downarrow$$

$$0=\int d^3v_2\, \sigma(\Omega)\, d\Omega\, |\vec{v}_2-\vec{v}_1|\, \underbrace{(f_2' f_1' - f_2 f_1)}_{f_{02}' f_{01}' - f_{02} f_{01}}$$

es decir

$$f_{02}' f_{01}' - f_{02} f_{01} = 0$$ (condición necesaria. Para comprobar que es suficiente Boltzm. introdujo $H(t) \equiv \int d^3v\, f(v,t) \ln f(v,t)$)

y resulta que: · $\frac{dH}{dt} \le 0$

· $\Delta H \propto -\Delta S$

. Veámoslo:

$$\frac{dH}{dt} = \int d^3v \left(\frac{\partial f(v,t)}{\partial t} \ln f(v,t) + 1 \right)$$

sustituyendo $\frac{\partial f}{\partial t}$ de la ecuación de Boltzmann:

$$\frac{dH}{dt}=\int d^3v_1\int d^3v_2\int d\Omega\,\sigma(\Omega)\,|\vec{v}_1-\vec{v}_2|\,(f_1'f_2'-f_1f_2)\,[\ln f_1+1]$$

como las variables de integración son mudas: $(\vec{v}_1\leftrightarrow\vec{v}_2)$

$$\frac{dH}{dt}=\int d^3v_2\int d^3v_1\int d\Omega\,\sigma(v_2 v_1|\ldots)\,|\vec{v}_2-\vec{v}_1|\,(f_2'f_1'-f_2f_1)\,[\ln f_2+1]$$

es más, si hago $\vec{v}_1\vec{v}_2\leftrightarrow\vec{v}_1'\vec{v}_2'$:

$$\frac{dH}{dt}=\underbrace{\int d^3v_1'\int d^3v_2'}_{d^3v_1\,d^3v_2}\int d\Omega\,\underbrace{\sigma(\vec{v}_1'\vec{v}_2'|\vec{v}_1\vec{v}_2)}_{\sigma(\vec{v}_1\vec{v}_2|\vec{v}_1'\vec{v}_2')}\,\underbrace{|\vec{v}_1'-\vec{v}_2'|}_{|\vec{v}_1-\vec{v}_2|}\,(f_1f_2-f_1'f_2')(\ln f_1'+1)$$

haciendo $\vec{v}_1'\leftrightarrow\vec{v}_2'$, se obtiene una cuarta igualdad. Sumando y dividiendo por 4:

$$\frac{dH}{dt}=\frac{1}{4}\int d^3v_1\int d^3v_2\int d\Omega\,\sigma(\Omega)\,|\vec{v}_1-\vec{v}_2|\,\underbrace{(f_1'f_2'-f_1f_2)}_{a}\,\underbrace{(\ln f_1f_2-\ln f_1'f_2')}_{b}$$

Resulta que, si nos fijamos, a y b tienen signo opuesto $\Rightarrow \boxed{\frac{dH}{dt}\leq 0}$. Es más, en equilibrio

$$f_1'f_2'=f_1f_2 \quad \Updownarrow \quad \frac{dH}{dt}=0$$

, C.Q.D.

El hecho de que obtengamos una ley manifiestamente no invariante ante inversiones temporales a partir de leyes simétricas es debido a que se parte de unas condiciones singulares, por lo que el sistema sufre una transición de fase a lo largo de la cual $\frac{dH}{dt}\leq 0$

· Se puede demostrar:

$$H = -\frac{S}{kV} \Rightarrow S = -kVH \Rightarrow \boxed{\frac{dS}{dt} \geq 0}$$

(Las demostraciones que hay son parciales)

· Veamos en particular para una distribución de Maxwell-Boltzmann:

$$f_0 = n\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{m(v-v_0)^2}{2kT}}$$

$$\Downarrow$$

$$H_0 = \int d^3v\, f_0 \ln f_0 \underset{\substack{\downarrow \\ \text{se hace} \\ v=v_0=0}}{=} n\left[\ln\left(n\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2}\right) - \frac{3}{2}\right]$$

, que es justamente la entropía de un gas ideal:

$$-kVH_0 = \frac{3}{2} Nk \ln P V^{5/3} + cte. = S$$

· Análogamente, se podría, mediante una formulación cuántica, justificar el tercer principio.

RECORRIDO LIBRE MEDIO

· Es la distancia promedio que recorre una partícula sin colisionar:

$$\lambda = \underset{\substack{\downarrow \\ \text{Tiempo medio} \\ \text{entre colisiones}}}{\tau} \overset{\text{Velocidad media}}{\langle \vec{v} \rangle}$$

P. ej.:

He: en el punto crítico, $\lambda = 10^{-7}$ cm, $\tau = 10^{-11}$ s $\Rightarrow$ depende mucho del gas

H_2: en el espacio interestelar, $\lambda = 10^{15}$ cm

· La mayor parte de las propiedades físicas de casi todo depende de λ.

· τ se puede obtener a partir del efecto Hall experimentalmente.

· Teóricamente:

$$n^{\circ}\text{ de recorridos} = \overset{\text{p. colisión dos átomos}}{2} \cdot \text{núm de colisiones}$$

$$\Downarrow$$

$$A = \frac{n^{\circ}\text{ de recorridos}}{\text{partícula}\cdot\text{tiempo}} = 2\cdot\frac{n^{\circ}\text{ colisiones}/(\text{Volum}\cdot t)}{\text{partículas}/\text{Volum}}$$

↳ densidad numérica

así, $\lambda = \frac{1}{A}\langle \vec{v}\rangle$

· El núm de colisiones es $\xi = \int d^3v_1 \int d^3v_2 \int d\Omega\, \sigma(\Omega)|\vec{v}_1-\vec{v}_2|\, f(\vec{r},\vec{v}_1,t)\, f(\vec{r},v_2,t)$

$$\boxed{\lambda = \frac{n}{2\xi}\langle \vec{v}\rangle}$$

· Vamos a hallar λ para $f = f_0 = f_{M-B}$. Suponemos $\int \sigma(\Omega)d\Omega = \sigma_T$ (es decir, no hay dependencia en la velocidad)

$$f_0 = \overset{\text{f.s. fluido que fluye}}{n(\vec{r})}\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{(v-v_0)^2}{2kT}}$$

Sustituyendo:

$$\xi = \sigma_T\, n^2\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^3 \int d^3v_1 \int d^3v_2\, e^{-m\frac{(v_1^2+v_2^2)}{2kT}}\, |\vec{v}_1-\vec{v}_2| =$$

pasamos a variables de C.M. y relativa

$$= \sigma_T\, n^2\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^3 \int d^3V \int d^3u\, e^{-\frac{m}{2kT}\left(2V^2+\frac{1}{2}u^2\right)}\, u = 4n^2\sigma_T\sqrt{\frac{kT}{\pi m}}$$

Sustituyendo $\langle \vec{v} \rangle$ calculada con la estadística de Maxwell-Boltzmann:

$$\xi = 4 n^2 \sigma_T \frac{\langle \vec{v} \rangle}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\Downarrow$$

$$\lambda = \frac{\sqrt{2\pi}}{8 n \sigma_T} = \boxed{\frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\,\frac{1}{n\sigma_T} = \lambda}$$

(esto permite calcular secciones eficaces totales o tiempos de colisión)

$$\Downarrow$$

$$t = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\,\frac{1}{n\sigma_T \langle \vec{v} \rangle}$$

CONSERVACIÓN DE MAGNITUDES FÍSICAS

- Por el teorema H, en equilibrio: $f_1' f_2' = f_1 f_2 \Rightarrow \ln f_1 + \ln f_2 = \text{cte.}$

TODA MAGNITUD FÍSICA QUE SE CONSERVE EN LA INTERACCIÓN DEBE SER PROPORCIONAL A $\ln f$

- En un gas clásico, se conservan:
  - Energía cinética
  - Momento lineal

$$\Rightarrow \ln f \propto E_c + \vec{p}$$

$$\Downarrow$$

$$\ln f = -A(v - v_0)^2 + \ln C$$

La A incluye energía ($\propto v^2$) y momento lineal ($\propto v$)

$$\Downarrow$$

$$\boxed{f = C e^{-A(v - v_0)^2}}$$ → la fórmula de Maxwell-Boltzmann!!

· C se halla imponiendo $\int f\, d^3v = n \Rightarrow n = \left(\frac{\pi}{A}\right)^{3/2} \cdot C \Rightarrow \begin{cases} A > 0 \\ C = n\left(\frac{\pi}{A}\right)^{3/2} \end{cases}$

· Para relacionar C y A, se podría hallar la presión e igualarla a nKT.

$$\overset{\|}{\tfrac{2}{3} n \varepsilon}$$

· Veamos esto de forma más genérica. Si una magnitud física $\mathcal{X}$ se conserva:

$$\underbrace{\mathcal{X}_1 + \mathcal{X}_2}_{\text{Antes de la colisión}} = \underbrace{\mathcal{X}_1' + \mathcal{X}_2'}_{\text{Después de la colisión}}$$

Hay un precioso teorema:

> **Teorema:** si una magnitud física $\mathcal{X}$ se conserva en una colisión
>
> $$\boxed{\int d^3v\, \mathcal{X}\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col.} = 0}$$

· Veamos la demostración:

$$\int d^3 \underbrace{v_1}_{\text{Particularizamos para la partícula 1}} \mathcal{X}_1 \left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{col.} = \int d^3v_1 \int d^3v_2 \int d\Omega\, \sigma(\Omega)\, |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \left(f_1' f_2' - f_1 f_2\right) \mathcal{X}_1$$

Haciendo los cambios:

· $v_1 \to v_2 \Rightarrow \mathcal{X}_1 \to \mathcal{X}_2$ (el resto igual)

· $v_1 v_2 \to v_1' v_2' \Rightarrow \mathcal{X}_1 \to \mathcal{X}_1'$ (el resto igual salvo un cambio de signo)

· $v_1' \to v_2' \Rightarrow \mathcal{X}_1 \to \mathcal{X}_2'$ (el resto igual salvo un cambio de signo)

Sumando y dividiendo entre 4:

$$\int d^3v\,\chi\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col.} = \frac{1}{4}\int d^3v_1\int d^3v_2\int d\Omega\,\sigma(\Omega)\,|\vec{v}_1-\vec{v}_2|\,(f_1'f_2'-f_1f_2)(\chi_1+\chi_2-\chi_1'-\chi_2') = 0$$

χ se conserva $\Longrightarrow$ $\chi_1+\chi_2=\chi_1'+\chi_2'$

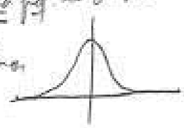
· Esto permite obtener las leyes de conservación. De la ecuación de Boltzmann: (se multiplica por χ y se integra en v)

$$\int d^3v\,\chi\left(\frac{\partial}{\partial t}+\vec{v}\nabla_r+\frac{F}{m}\nabla_v\right)f = \int d^3v\,\chi\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col} \underset{\chi \text{ se conserva}}{=} 0$$

En notación de Einstein:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int d^3v\, f\chi + \frac{\partial}{\partial x_i}\int v\chi f\, d^3v \underbrace{- \int \frac{\partial v}{\partial x_i}\chi f\, d^3v - \int\frac{\partial\chi}{\partial x_i} v f\, d^3v}_{\text{para poder expresar el integrando como derivada y sacar la derivada}} +$$

$$+\underbrace{\frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial v_i}\int(F\chi f)\,d^3v}_{\text{la integral de una deriv. total porque se anula pq la distrib. va a 0 a los extremos}} \underbrace{- \frac{1}{m}\int\left(\frac{\partial F}{\partial v_i}\chi f\right)d^3v - \frac{1}{m}\int\left(F\frac{\partial\chi}{\partial v_i}f\right)d^3v}_{\text{Ídem}} = 0$$



· Ahora bien, como aparece f tenemos una fórmula de valores medios:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\langle\chi\rangle + \frac{\partial}{\partial x_i}\langle v\chi\rangle - \left\langle\frac{\partial v}{\partial x_i}\chi\right\rangle - \left\langle\frac{\partial\chi}{\partial x_i}\vec{v}\right\rangle - \frac{1}{m}\left\langle\frac{\partial F}{\partial v_i}\chi\right\rangle - \frac{1}{m}\left\langle F\frac{\partial\chi}{\partial v_i}\right\rangle = 0}$$

· Las magnitudes conservadas aplican eso. Para llanuras en régimen no relativista: (considerando que la velocidad no depende de la posición y que la fuerza no depende de la velocidad)

$m\langle \vec{v} \rangle = m\vec{u}$

$$\frac{\partial \langle m \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \langle v\, m \rangle = 0$$

o en términos de densidades:

Velocidad media

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_r (\rho \vec{u}) = 0}$$

LA ECUACIÓN DE CONTINUIDAD!!!

· Con $\chi = m(\vec{v} - \vec{v}_0)$ sale la conservación del momento, y con $\chi = \frac{1}{2} m |v - v_0|^2$ la conservación de la energía.

Aplicamos la ecuación de Boltzmann porque los e^- no están en equilibrio

VI Apéndice I

En este apéndice vamos a hacer el cálculo de la conductividad en presencia del campo estático. $j_i = \sigma_{ij} E_j = -\frac{2}{h^3}\int e\vec{v} f\, d^3p$ (el promedio de la velocidad)

Partiendo de la ecuación de Boltzmann:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{F}\nabla_{\vec{k}} f + \vec{v}\nabla_{\vec{r}} f = -\frac{f - f_0}{\tau} \qquad (A1)$$

(aproximación de 1er orden de Boltzmann)

Se considera $f \sim f_0$ (sistema muy cerca del equilibrio): ecuación lineal para sistema en estado estacionario

Donde $\vec{F} = -e(\vec{E} + \vec{v}\, x\, \vec{B})$ es la fuerza de Lorentz sobre una partícula de carga $-e$ que surge de la aplicación electromagnético y $\vec{v}$ es la velocidad de dicha partícula (en nuestro caso un electrón). τ es el tiempo de relajación y f_0 la función de distribución de equilibrio en ausencia de campo exterior y gradientes.

Si suponemos que estamos en un régimen estacionario y que la función de distribución no depende de la posición se tiene que:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0 \qquad y \qquad \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = 0 \qquad (A2)$$

(no hay condición velocidad-posición)

Lo cual simplifica la ecuación inicial:

$$-e(\vec{E} + \vec{v}\, x\, \vec{B})\frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau} \qquad (A3)$$

Si se hace un desarrollo en serie hasta el primer orden de la función de distribución tenemos:

$$f = f_0 + e\tau\vec{E}\frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}} + e\tau\left[(\vec{v}\, x\, \vec{B})\frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}}\right] = f_0 + e\tau\vec{E}\frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}} = f_0 + e\tau\vec{E}\cdot\vec{v}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \qquad (A4)$$

(f_0 es la distribución de Fermi)

Donde el último término se anula ya que:

$$\frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}} \propto \vec{v}\,; \qquad (\vec{v}\, x\, \vec{B})\cdot\vec{v} = 0 \qquad (A5)$$

Y lo mismo ocurre para órdenes superiores, lo cual indica que en ausencia de $\vec{E}$ los electrones no ven el efecto del campo magnético sobre ellos.

La ecuación (A4) se puede generalizar escribiendo la solución general de la siguiente forma:

$$f = f_0 + e\tau\vec{c}\frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}} \qquad (A6)$$

En donde $\vec{c}$ es un vector que depende de $\vec{E}$ y $\vec{H}$, pero no de $\vec{v}$. Además $\vec{c} = \vec{E}$ si $\vec{H} = 0$ $\vec{c} = 0$ si $\vec{E} = 0$. Ahora buscamos la forma explícita de $\vec{c}$ y para ello escribimos la ecuación en función de la energía.

$$f = f_0 + \frac{e\tau}{m}\vec{c}\cdot\vec{p}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \tag{A7}$$

Ahora obteniendo $\frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}}$ de la ecuación anterior en la ecuación ~~A4~~ (A.3) logramos lo siguiente:

$$-e(\vec{E} + \vec{v}\,x\,\vec{B})\left[\frac{\vec{p}}{m}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{e\tau}{m}\left(\vec{c}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) + (\vec{c}\cdot\vec{p})\frac{\vec{p}}{m}\frac{\partial^2 f_0}{\partial \varepsilon^2}\right] = -\frac{e}{m}\vec{c}\cdot\vec{p}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \tag{A8}$$

En el primer miembro se anulan los términos $(\vec{v}\,x\,\vec{B})\cdot\vec{v}$ y los términos $\vec{c}\cdot\vec{E}$ se desprecian:

$$(\vec{E}\cdot\vec{v})\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{e\tau}{m}(\vec{v}\,x\,\vec{B})\cdot\vec{c}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = (\vec{c}\cdot\vec{v})\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \tag{A9}$$

De donde obtenemos:

$$(\vec{c}\cdot\vec{v}) = (\vec{E}\cdot\vec{v}) + \frac{e\tau}{m}(\vec{B}\,x\,\vec{c})\cdot\vec{v} \tag{A10}$$

O lo que es lo mismo:

$$\vec{c} = \vec{E} + \frac{e\tau}{m}(\vec{B}\,x\,\vec{c}) \tag{A11}$$

Como $\vec{c}$ es función de $\vec{E}$ y $\vec{B}$ se puede escribir de la siguiente forma:

$$\vec{c} = a\vec{E} + b\vec{B} + c(\vec{B}\,x\,\vec{E}) \tag{A12}$$

Sustituyendo $(A12)$ en $(A11)$ nos da:

$$\vec{c} = a\vec{E} + b\vec{B} + c(\vec{B}\,x\,\vec{E}) + \vec{E} + \frac{e\tau}{m}\left(\vec{B}\,x\left[a\vec{E} + b\vec{B} + c(\vec{B}\,x\,\vec{E})\right]\right) =$$

$$= \vec{E} + a\frac{e\tau}{m}(\vec{B}\,x\,\vec{E}) + c\frac{e\tau}{m}\left[(\vec{B}\cdot\vec{E})\vec{B} - B^2\vec{E}\right] \tag{A13}$$

Que identificando el primero con el segundo miembro y despejando se obtiene:

$$a = \frac{1}{1 + \left(\frac{e\tau}{m}\right)^2 B^2}\ ; \quad b = \frac{\left(\frac{e\tau}{m}\right)^2 \vec{B}\cdot\vec{E}}{1 + \left(\frac{e\tau}{m}\right)^2 B^2}\ ; \quad c = \frac{\frac{e\tau}{m}}{1 + \left(\frac{e\tau}{m}\right)^2 B^2} \tag{A14}$$

Valiéndonos de estos resultados sustituimos en la ecuación $(A7)$ para obtener:

$$f = f_0 + e\tau\alpha\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\vec{v}\left[\vec{E} + \left(\frac{e\tau}{m}\right)^2(\vec{B}\cdot\vec{E})\vec{B} + \frac{e\tau}{m}(\vec{B}\,x\,\vec{E})\right] \tag{A15}$$

Donde α es:

$$\alpha = \frac{1}{1 + \left(\frac{e\tau B}{m}\right)^2} \tag{A16}$$

Una vez conocida la función de distribución se calcula la densidad de corriente:

$$\vec{j} = -\frac{2}{h^3}\int e\vec{v}fd\vec{p} \tag{A17}$$

$$\vec{j} = -\frac{2}{h^3}e^2\tau\alpha\int\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\vec{v}\left[\vec{v}\cdot\vec{E} + \left(\frac{e\tau}{m}\right)^2(\vec{B}\cdot\vec{E})(\vec{B}\cdot\vec{v}) + \frac{e\tau}{m}\vec{E}(\vec{v}x\vec{B})\right]d\vec{p}$$

Reagrupamos de tal forma que:

$$\vec{j} = \left\{\frac{2}{h^3}e^2\tau\alpha\int\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\left[v_iv_j + \left(\frac{e\tau}{m}\right)^2(\vec{B}\cdot\vec{v})v_iB_j + \frac{e\tau}{m}v_i(\vec{v}x\vec{B})_j\right]d\vec{p}\right\}\vec{E} \tag{A18}$$

Donde:

$$(\vec{v}x\vec{B})_j = \varepsilon_{jkl}v_kB_l$$

Para así tener la conductividad:

$$J_i = \sigma_{ij}E_j \tag{A19}$$

Para resolver $(A18)$ hace falta tener en cuenta que $\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}$ es proporcional a v^2, por lo que las integrales del producto de la derivada por una potencia impar de v son impares y por lo tanto se anulan. Eso nos lleva a:

$$\int\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}v_iv_jd\vec{p} = \delta_{ij}\int\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}v_x^2d\vec{p} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\int\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}v^2d\vec{p}$$

Al introducirlo en $(A18)$ tenemos que:

$$\sigma_{ij} = \frac{2}{h^3}e^2\tau\alpha\int\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\frac{1}{3}\left[\delta_{ij} + \left(\frac{e\tau}{m}\right)^2B_iB_j + \frac{e\tau}{m}\varepsilon_{jik}B_k\right]v^2d\vec{p} \tag{A20}$$

Si se considera una situación clásica tenemos que:

$$f_0 \propto e^{-\beta\varepsilon}\,; \quad \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -\beta f_0$$

Por lo que sustituyendo en $(A20)$ tenemos:

$$\sigma_{ij} = \frac{2}{h^3} e^2 \tau \alpha \beta \int f_0 \frac{1}{3}\left[\delta_{ij} + \left(\frac{e\tau}{m}\right)^2 B_i B_j + \frac{e\tau}{m}\varepsilon_{jik} B_k\right] v^2 d\vec{p} \qquad (A21)$$

Pero:

$$\frac{2}{h^3}\int \frac{f_o v^2}{n} d\vec{p} = \overline{v^2} = \frac{3k_B T}{m} \qquad (A22)$$

Donde n es el número de electrones por unidad de volumen:

$$n = \frac{2}{h^3}\int f_0 d\vec{p} \qquad (A23)$$

Sustituyendo en la ecuación de la conductividad tenemos:

$$\sigma_{ij} = e^2 \tau \alpha \beta \frac{1}{3}\left[\delta_{ij} + \left(\frac{e\tau}{m}\right)^2 B_i B_j + \frac{e\tau}{m}\varepsilon_{jik} B_k\right] \frac{3k_B T}{m} n =$$
$$= \frac{e^2 \tau}{1 + \left(\frac{e\tau B}{m}\right)^2} \frac{n}{m}\left[\delta_{ij} + \left(\frac{e\tau}{m}\right)^2 B_i B_j + \frac{e\tau}{m}\varepsilon_{jik} B_k\right] \qquad (A24)$$

Si el campo magnético está en la dirección z nos deja:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{\frac{ne^2\tau}{m}}{1 + \left(\frac{e\tau B}{m}\right)^2}$$

(si $B=0$, $\sigma_{xx}=\sigma_{yy}=\sigma_{zz} \Rightarrow$ se recupera lo isótropo)

$$\sigma_{zz} = \frac{ne^2\tau}{m}$$

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = -\frac{ne^2\tau}{m}\frac{\frac{e\tau B}{m}}{1 + \left(\frac{e\tau B}{m}\right)^2}$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = \sigma_{yz} = \sigma_{zy} = 0 \qquad (A25)$$

Como $P_{ij} = P_{ji}$ tenemos que:

$$m\, P_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = P_{ij} \frac{m}{2}\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) = P_{ij} \Lambda_{ij} \qquad (25)$$

que sustituida en (24) permite escribir:

$$\boxed{\rho\left(\frac{\partial}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i}\right)\theta + \frac{2}{3}\frac{\partial q_i}{\partial x_i} = -\frac{2}{3} P_{ij} \Lambda_{ij}} \qquad (26)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{u}) = 0 \qquad \text{cons. masa.}$$

$$\rho\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{u}\,\nabla_r\right)\vec{u} = \frac{\rho}{m}\vec{F} - \nabla_r \overleftrightarrow{P} \qquad \text{cons. momento}$$

$$\rho\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{u}\,\nabla_r\right)\theta = -\frac{2}{3}\nabla_r \vec{q} - \frac{2}{3}\overleftrightarrow{P}\,\overleftrightarrow{\Lambda} \qquad \text{" energía.}$$

$$\rho(\vec{r},t) \equiv m \int d^3v\; f(\vec{r},\vec{v},t)$$

$$\vec{u}(\vec{r},t) = \langle \vec{v} \rangle$$

$$\theta(\vec{r},t) \equiv \frac{1}{3} m \langle |\vec{v}-\vec{u}|^2 \rangle \rightarrow \text{definición cinética de la temperatura}$$

$$\vec{q}(\vec{r},t) \equiv \frac{1}{2} m\rho \langle (\vec{v}-\vec{u})\, |\vec{v}-\vec{u}|^2 \rangle$$

↳ flujo energético

$|\vec{v}-\vec{u}| \ll$

$$P_{ij} \equiv \rho \langle (v_i - u_i)(v_j - u_j) \rangle$$

$$\Lambda_{ij} = \frac{1}{2} m \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right).$$